

Miroslav Fiedler; Vlastimil Pták

O jedné iterační metodě diagonalisace symetrických matic

*Časopis pro pěstování matematiky*, Vol. 85 (1960), No. 1, 18--36

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/108125>

## Terms of use:

© Institute of Mathematics AS CR, 1960

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

## O JEDNÉ ITERAČNÍ METODĚ DIAGONALISACE SYMETRICKÝCH MATIC

MIROSLAV FIEDLER, Praha a VLASTIMIL PTÁK, Praha

Došlo dne 4. ledna 1959

V článku se popisuje nový iterační proces ke stanovení spektra symetrické matice. Je-li  $A$  daná symetrická matice, je udána konstrukce posloupnosti unitárních matic  $U_1, U_2, \dots$  taková, že posloupnost matic  $U_k A U_k^*$  za určitých předpokladů kvadraticky konverguje k matici diagonální. Tím je zároveň podána iterační metoda k výpočtu spektra symetrické matice.

**Úvod.** Je-li  $A$  daná symetrická matice, existuje, jak známo, unitární matice  $U$  tak, že matice  $UAU^*$  je diagonální. Diagonální prvky této matice pak tvoří spektrum matice  $A$ . Pro numerický výpočet spektra symetrické matice nabízí se následující myšlenka: Nalézt k dané symetrické matici  $A$  jednoduchou unitární matici  $U$  tak, aby matice  $UAU^*$  byla diagonální jen přibližně — v tom smyslu, že všechny prvky mimo diagonálu matice  $UAU^*$  jsou v absolutní hodnotě malé. Podaří-li se udat matici  $U$  tak, aby se při přechodu od matice  $A$  k matici  $UAU^*$  dostatečně zmenšily nediagonální prvky, můžeme opakováním této úpravy dostati iterační proces, který v limitě vede k diagonální matici; tento proces je tedy zároveň iterační metodou k výpočtu spektra matice.

Úkolem nynější práce je popsatí takový konvergentní proces. Jako míra „diagonálnosti“ je volen součet čtverců absolutních hodnot nediagonálních prvků. Tato volba se ukazuje velmi výhodná, neboť uvidíme, že vhodným obratem lze tuto míru vyjádřit pomocí stop jistých matic, což umožňuje použití přehledného početního aparátu.

**0. Označení.** K porozumění článku je třeba znalosti základních pojmů a výsledků lineární algebry, jak jsou obsaženy např. v knize *I. M. Gelfand, Lineární algebra* [1]. Některé pojmy a výsledky, potřebné v numerických metodách (např. normy matic a některé nerovnosti) jsou shrnuty v knize *A. S. Householder, Principles of Numerical Analysis* [2]. Protože označení a názvy některých pojmů, kterých budeme v dalším užívat, nejsou v literatuře jednotná,

opakuje v tomto odstavci pro pohodlí čtenáře nejdůležitější definice a označení. U některých jednoduchých výsledků připojujeme odkaz na literaturu.

V celém článku (vyjma odst. 4) slovem matice rozumíme čtvercovou matici s komplexními prvky. V celém článku budiž  $n$  dané přirozené číslo; všechny uvažované matice budou řádu  $n$ . Je-li  $A$  daná matice s prvky  $a_{ik}$ , označme  $A^*$  matici, která na místě  $(i, k)$  má prvek  $\bar{a}_{ki}$ . Matici  $A$  nazýváme symetrickou, platí-li  $A^* = A$ ; nazýváme ji antisymetrickou, platí-li  $A^* = -A$ . (V literatuře se často užívá názvu hermitovská místo symetrická.)

Je-li  $B$  libovolná matice, potom lze psát  $B = P + Q$ , kde  $P$  je symetrická,  $Q$  antisymetrická. Snadno se zjistí, že to lze právě jedním způsobem, a to pro  $P = \frac{1}{2}(B + B^*)$ ,  $Q = \frac{1}{2}(B - B^*)$ . Matice  $P$  a  $Q$  nazýváme symetrickou a antisymetrickou částí matice  $B$ . Přímým výpočtem se snadno zjistí, že platí  $(AB)^* = B^*A^*$  pro libovolné dvě matice  $A, B$ .

Je-li  $A$  daná matice, nazýváme stopou matice  $A$  a značíme  $\tau(A)$  číslo  $a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}$ . Platí tedy  $\tau(A^*) = \overline{\tau(A)}$ ,  $\tau(A + B) = \tau(A) + \tau(B)$ ,  $\tau(\alpha A) = \alpha \tau(A)$  pro libovolné matice  $A, B$  a libovolné komplexní číslo  $\alpha$ . Snadno se zjistí přímým výpočtem, že  $\tau(AB) = \tau(BA)$  pro libovolné dvě matice  $A, B$ . Tohoto vztahu budeme často užívat; tak například plyne z něho rovnost  $\tau[(A + B)^2] = \tau(A^2) + 2\tau(AB) + \tau(B^2)$ , uvážíme-li jen, že  $(A + B)^2 = A^2 + AB + BA + B^2$ .

Dále odtud plyne, že platí  $\tau(TAT^{-1}) = \tau(A)$  pro každou regulární matici  $T$  a každou matici  $A$ . Jiný důsledek této rovnosti, který budeme potřebovat, je: jsou-li  $A, B$  dvě symetrické matice, je stopa součinu  $AB$  číslo reálné. Skutečně,  $\tau(\overline{AB}) = \tau((AB)^*) = \tau(B^*A^*) = \tau(BA) = \tau(AB)$ .

Je-li  $A$  libovolná matice, snadno se zjistí, že matice  $AA^*$  je symetrická nezáporně definitní a má tedy všechna vlastní čísla nezáporná (viz [1], str. 121). Nezáporné druhé odmocniny těchto čísel se nazývají singulárními hodnotami matice  $A$ . Největší singulární hodnotu matice  $A$  označíme  $h(A)$ . Lze dokázat, že  $h(A)$  je rovno maximu  $\|Ax\|$  pro  $\|x\| \leq 1$ , kde norma  $\|y\|$  vektoru  $y$  složkách  $y_1, \dots, y_n$  je definována jako  $\|y\| = (y_1^2 + \dots + y_n^2)^{\frac{1}{2}}$  (viz [2], str. 40 a 43). Platí potom

$$h(A + B) \leq h(A) + h(B), \quad h(AB) \leq h(A) h(B)$$

pro libovolné dvě matice  $A, B$  (viz [2], str. 41).

Označme dále  $Q(A) = \tau(AA^*)$ . Potom pro každou unitární matici  $U$  a každou matici  $A$  platí  $Q(UA) = Q(AU) = Q(A)$ . Snadno se zjistí, že  $Q(A) = \sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|^2$ , takže číslo  $Q(A)$  je nezáporné pro každou matici  $A$ . Nezápornou druhou odmocninou čísla  $Q(A)$  označme  $N(A)$ . Platí potom

$$h(A) \leq N(A), \quad N(A + B) \leq N(A) + N(B), \quad N(AB) \leq h(A) N(B)$$

pro libovolné dvě matice  $A, B$  (viz [2], str. 42).

1. **Pomocné věty.** V tomto odstavci dokážeme některé jednoduché věty, kterých budeme později užívat.

(1,1) *Pro libovolné dvě matice  $A, B$  platí*

$$Q(A + B) = Q(A) + Q(B) + 2\operatorname{Re} \tau(AB^*).$$

*Jsou-li matice  $A, B$  symetrické, platí*

$$Q(A + B) = Q(A) + Q(B) + 2\tau(AB).$$

**Důkaz.** Jest

$$\begin{aligned} Q(A + B) &= \tau((A + B)(A^* + B^*)) = \tau(AA^* + AB^* + BA^* + BB^*) = \\ &= Q(A) + Q(B) + \tau(AB^*) + \tau(BA^*). \end{aligned}$$

Stačí si nyní uvědomit, že  $BA^* = (AB^*)^*$ , takže  $\tau(BA^*) = \tau((AB^*)^*) = \tau(AB^*)$ . Jsou-li matice  $A, B$  symetrické, je  $\tau(AB^*) + \tau(BA^*) = 2\tau(AB)$ .

(1,2) *Budiž  $A$  libovolná matice. Potom*

$$|\tau(A^2)| \leq Q(A).$$

**Důkaz.** Jest  $\tau(A^2) = \sum_i \sum_k a_{ik}a_{ki}$ , takže

$$\begin{aligned} |\tau(A^2)| &\leq 2 \sum_{i < k} |a_{ik}a_{ki}| + \sum_i |a_{ii}^2| \leq \\ &\leq \sum_{i < k} (|a_{ik}|^2 + |a_{ki}|^2) + \sum_i |a_{ii}|^2 = Q(A). \end{aligned}$$

Jsou-li  $P, Q$  dvě matice, nazveme komutátorem matic  $P$  a  $Q$  a označíme  $[P, Q]$  matici  $PQ - QP$ . Snadno se zjistí, že pro libovolné dvě matice platí vztahy

$$[P, Q] = -[Q, P], \quad [P, Q]^* = [Q^*, P^*] = -[P^*, Q^*].$$

Budeme potřebovatí následující zajímavé vlastnosti komutátorů.

(1,3) *Budtež  $A_1, A_2, A_3, A_4$  libovolné matice téhož řádu. Potom matice*

$$[A_1, A_2][A_3, A_4] + [A_1, A_3][A_4, A_2] + [A_1, A_4][A_2, A_3]$$

*má nulovou stopu.*

(1,4) *Budtež  $A_1, A_2, A_3, A_4, T$  libovolné matice téhož řádu. Potom matice*

$$A_1A_2A_3[A_4, T] + A_2A_3A_4[A_1, T] + A_3A_4A_1[A_2, T] + A_4A_1A_2[A_3, T]$$

*má nulovou stopu.*

Důkaz obou tvrzení plyne odtud, že uvažované výrazy lze přímým výpočtem uvést na tvar součtu několika matic tvaru  $AB - BA$ .

(1,5) *Nechť  $W, D, S$  jsou matice řádu  $n$  a necht'  $W$  je záměnná s  $S$ ; potom matice  $WDW[D, S]$  má nulovou stopu.*

**Důkaz.** Plyne ihned z předešlé věty pro

$$A_1 = A_3 = W, \quad A_2 = A_4 = D, \quad T = S.$$

Pro pozdější použití dokážeme ještě některé vlastnosti součinů unitárních matic.

(1,6) *Nechť  $U_1, \dots, U_s$  jsou unitární matice,  $E$  buď jednotková matice. Potom platí*

$$N(U_1 U_2 \dots U_s - E) \leq \sum_{i=1}^s N(U_i - E).$$

*Důkaz.* Nechť  $s > 1$  a tvrzení je správné pro součiny o počtu faktorů menším než  $s$ . Je potom

$$\begin{aligned} N(U_1 \dots U_s - E) &= N(U_1 \dots U_{s-1}(U_s - E) + U_1 \dots U_{s-1} - E) \leq \\ &\leq N(U_s - E) + N(U_1 \dots U_{s-1} - E), \end{aligned}$$

odkud ihned plyne dokazovaná nerovnost pomocí indukčního předpokladu. Protože pro  $s = 1$  nerovnost je splněna bezprostředně, je důkaz dokončen.

(1,7) *Nechť  $U_1, U_2, \dots$  je posloupnost unitárních matic taková, že  $\sum_{i=1}^{\infty} N(U_i - E) < \infty$ . Potom existuje  $\lim_{s \rightarrow \infty} U_1 U_2 \dots U_s = U$ . Matice  $U$  je unitární a platí*

$$N(U_1 \dots U_m - U) \leq \sum_{j=m+1}^{\infty} N(U_j - E).$$

*Důkaz.* Označme  $V_s = U_1 U_2 \dots U_s$ . Je potom pro  $p \leq q$

$$N(V_p - V_q) = N(V_p(U_{p+1} \dots U_q - E)) \leq \sum_{p+1}^q N(U_i - E).$$

Odtud plyne, že posloupnost  $V_1, V_2, \dots$  je cauchyovská; prostor všech matic  $s$  normou  $N$  je zřejmě úplný, takže existuje  $\lim_{s \rightarrow \infty} V_s = U$ . Snadno se nahlédne, že  $U$  je unitární. Je dále

$$N(U - V_m) = \lim_{q \rightarrow \infty} N(V_q - V_m) \leq \lim_{q \rightarrow \infty} \sum_{m+1}^q N(U_i - E) = \sum_{m+1}^{\infty} N(U_i - E).$$

(1,8) *V nerovnosti  $h(A) \leq N(A)$  nastane rovnost, právě když hodnota matice  $A$  je nejvýše 1.*

*Důkaz.* Podle známých vět (viz např. [1], str. 59) jest hodnota libovolné matice  $M$  rovna hodnotě matice  $MM^*$ .

Má-li  $A$  hodnotu nula, je zřejmě  $h(A) = N(A) = 0$ . Je-li tato hodnota rovna jedné, má i matice  $AA^*$  hodnotu 1, a tedy jediné vlastní číslo matice  $AA^*$  je různé od nuly. Toto vlastní číslo je rovno  $h^2(A)$ . Poněvadž  $N^2(A) = \tau(AA^*)$  je součet všech vlastních čísel matice  $AA^*$ , je  $N^2(A) = h^2(A)$ .

Nechť obráceně  $h(A) = N(A)$ . Číslo  $h^2(A)$  je rovno maximálnímu číslu z vešměs nezáporných vlastních čísel matice  $AA^*$ , zatím co  $N^2(A)$  je rovno součtu těchto vlastních čísel. Odtud plyne, že  $AA^*$  má nejvýše jedno vlastní číslo různé od nuly. Má tedy  $AA^*$  hodnotu nejvýše jedna, a proto též  $A$  má hodnotu nejvýše jedna.

**2. Míra  $Q^*$  a její odhad.** Budiž  $n$  dané přirozené číslo. Necht dále  $M$  je daná množina dvojic  $(i, j)$  přirozených čísel,  $1 \leq i, j \leq n$  taková, že s každou dvojicí  $(i, j)$  obsahuje také dvojici  $(j, i)$ . Je-li  $A$  matice řádu  $n$  s prvky  $a_{ij}$ , označíme  $D(A)$  matici řádu  $n$  s prvky  $b_{ij}$  definovanými následujícím způsobem:

$$b_{ij} = a_{ij}, \text{ jestliže } (i, j) \in M, \quad b_{ij} = 0, \text{ jestliže } (i, j) \text{ non } \in M.$$

Je-li  $A$  libovolná matice řádu  $n$ , položme

$$Q^*(A) = Q(A) - \sum_{(i,j) \in M} |a_{ij}|^2 = Q(A) - \tau(D(A) A^*) = \tau((A - D(A)) A^*).$$

**(2,1)** Budiž  $A$  symetrická,  $U$  unitární. Označme  $\tilde{A} = UAU^*$ ,  $D = D(A)$ ,  $V = [D, U]$ . Potom platí

$$Q^*(\tilde{A}) - Q^*(A) \leq Q(V) - 2\tau(V(A - U) U^*).$$

**Důkaz.** Uvědomíme-li si, že pro symetrickou matici  $A$  obě matice  $\tilde{A}$  i  $D$  jsou opět symetrické, a že  $Q(\tilde{A}) = Q(A)$ , dostáváme snadným počtem

$$\begin{aligned} Q^*(\tilde{A}) &= Q^*(\tilde{A} - D) \leq Q(\tilde{A} - D) = Q(A) + Q(D) - 2\tau(\tilde{A}D) = \\ &= Q^*(A) + \tau(DA) + Q(D) - 2\tau(\tilde{A}D), \end{aligned}$$

odkud

$$Q^*(\tilde{A}) - Q^*(A) \leq 2Q(D) - 2\tau(\tilde{A}D).$$

Dále je  $\tau(\tilde{A}D) = \tau(UDU^*D) + \tau(U(A - D) U^*D)$ . Protože zřejmě  $\tau(DUDU^*)$  je reálná, dostaneme podle (1,1)

$$Q(V) = Q(DU - UD) = 2Q(D) - 2\tau(DUDU^*).$$

Dále je

$$\begin{aligned} \tau(U(A - D) U^*D) &= \tau(DU(A - D) U^*) = \tau((V + UD)(A - D) U^*) = \\ &= \tau(V(A - D) U^*), \end{aligned}$$

protože zřejmě

$$\tau(UD(A - D) U^*) = \tau(D(A - D)) = 0.$$

Je tedy

$$\begin{aligned} Q^*(\tilde{A}) - Q^*(A) &\leq 2Q(D) - 2\tau(\tilde{A}D) = \\ &= 2Q(D) - 2\tau(DUDU^*) - 2\tau(V(A - D) U^*) = Q(V) - 2\tau(V(A - D) U^*), \end{aligned}$$

čímž je důkaz dokončen.

**(2,2)** Necht matice  $A$  a  $D$  jsou symetrické, matice  $S$  antisymetrická. Označme  $B = A - D$ . Necht platí  $[D, S] = B$  a necht  $U$  je unitární matice záměnná s  $S$ . Označme  $U_0, U_1$  symetrickou a antisymetrickou část matice  $U$ ; potom matice  $V_0 = [D, U_1]$ ,  $V_1 = [D, U_0]$  jsou symetrickou a antisymetrickou částí matice  $V = [D, U]$  a platí

$$Q(V) - 2\tau(U^*VB) = \tau(V_0^2) - \tau(V_1^2) - 2\tau((U_0V_0 - U_1V_1) B).$$

Důkaz. Protože  $U$  je záměnná s  $S$  a  $S$  je antisymetrická, je také  $U^*$  záměnná s  $S$ . Odtud snadno plyne, že všechny čtyři matice  $S$ ,  $U$ ,  $U_0$ ,  $U_1$  jsou navzájem záměnné. Je potom zřejmé

$$\tau(VV^*) = \tau((V_0 + V_1)(V_0 - V_1)) = \tau(V_0^2) - \tau(V_1^2).$$

Dále dostáváme

$$\begin{aligned} \tau(U^*VB) &= \tau((U_0 - U_1)(V_0 + V_1)B) = \\ &= \tau((U_0V_0 - U_1V_1 + U_0V_1 - U_1V_0)B). \end{aligned}$$

Je však

$$\begin{aligned} U_0V_1 - U_1V_0 &= U_0[D, U_0] - U_1[D, U_1] = \\ &= U_0DU_0 - U_0^2D - U_1DU_1 + U_1^2D = U_0DU_0 - U_1DU_1 - D. \end{aligned}$$

Podle (1,5) je  $\tau((U_0DU_0 - U_1DU_1 - D)[D, S]) = 0$ , takže  $\tau(U^*VB) = \tau((U_0V_0 - U_1V_1)B)$ , čímž je důkaz dokončen.

Budeme potřebovat následující jednoduchou poznámku:

**(2,3)** *Nechť matice  $S$  je antisymetrická. K tomu, aby existovala symetrická matice  $H$ , záměnná s  $S$  tak, že matice  $S + H$  je unitární, je nutné a stačí, aby matice  $E + S^2$  byla nezáporně definitní.*

Důkaz. Nechť  $H$  je matice symetrická záměnná s  $S$  a nechť matice  $U = S + H$  je unitární. Potom

$$E + S^2 = UU^* + S^2 = (S + H)(-S + H) + S^2 = H^2,$$

takže  $E + S^2$  je nezáporně definitní. Je-li naopak  $E + S^2$  nezáporně definitní, existují symetrické matice  $H$  záměnné s  $S$  takové, že  $H^2 = E + S^2$ . Snadno se zjistí, že pro libovolnou z nich matice  $S + H$  je unitární.

**(2,4)** *Nechť matice  $A$ ,  $D$  jsou symetrické, matice  $S$  antisymetrická. Nechť platí  $[D, S] = B$ , kdež  $B = A - D$ . Nechť  $E + S^2$  je nezáporně definitní, nechť  $U = S + \sqrt{E + S^2}$ , takže  $U$  je unitární. Nechť  $P$  je matice, pro niž  $\sqrt{E + S^2} = E + \frac{1}{2}S^2 + P$ . Nechť  $V = [D, U]$ . Potom*

$$\begin{aligned} Q(V) - 2\tau(U^*VB) &= \\ &= -\tau(B^2) + \frac{1}{2}\tau(BSBS) - \frac{1}{2}\tau(B^2S^2) - \tau(R^2) - 2\tau(PB^2), \end{aligned}$$

kdež  $R = [D, P]$ .

Důkaz. Při označení z (2,2) bude  $U_0 = E + \frac{1}{2}S^2 + P$ ,  $U_1 = S$  dále

$$\begin{aligned} V_1 &= [D, U_0] = \frac{1}{2}[D, S^2] + R = \frac{1}{2}(BS + SB) + R, \\ V_0 &= [D, U_1] = [D, S] = B, \\ U_0V_0B &= (E + \frac{1}{2}S^2 + P)B^2, \\ U_1V_1B &= \frac{1}{2}(SBSB + S^2B^2) + SRB, \\ V_1^2 &= \frac{1}{4}(BSBS + BS^2B + SB^2S + SBSB) + \frac{1}{2}(BS + SB)R + \\ &\quad + \frac{1}{2}R(BS + SB) + R^2. \end{aligned}$$

Abychom mohli dosadit do vzorce ve větě (2,2), vypočteme nejprve příslušné stopy

$$\begin{aligned}\tau(V_0^2) &= \tau(B^2), \\ -\tau(V_1^2) &= -\tau\left(\frac{1}{4}(2BSBS + 2B^2S^2) + (BS + SB)R + R^2\right), \\ -2\tau(U_0V_0B) &= -2\tau(B^2) - \tau(S^2B^2) - 2\tau(PB^2), \\ 2\tau(U_1V_1B) &= \tau(BSBS) + \tau(S^2B^2) + 2\tau(SRB).\end{aligned}$$

Stačí nyní jen sečíst příslušné výrazy a všimnout si, že  $-\tau((BS + SB)R) + 2\tau(SRB) = 0$ , což ihned plyne z věty (1,3), vezmeme-li za  $A_1, A_2, A_3, A_4$  po řadě matice  $B, S, D, P$ .

**3.** V tomto odstavci odvodíme některé vztahy, které budeme potřebovat k důkazu konvergence v dalších odstavcích. Tyto vztahy jsou zde odvozeny za poněkud slabších předpokladů.

(3,1) *Nechť  $A$  a  $D$  jsou matice,  $B = A - D$ . Nechť  $S$  je matice, pro niž  $[D, S] = B$ . Potom platí pro každé přirozené  $k$*

$$(1) \quad [D, S^k] = \sum_{i=0}^{k-1} S^i B S^{k-1-i}.$$

Důkaz plyne ihned úplnou indukcí podle  $k$ .

(3,2) *Nechť  $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$  je mocninná řada, konvergující pro  $|z| < \rho$ ,  $\rho > 0$ , a necht  $D$  a  $S$  jsou matice. Je-li  $h(S) < \rho$ , konvergují řady matic  $\sum_{k=0}^{\infty} a_k S^k$ ,  $\sum_{k=0}^{\infty} a_k [D, S^k]$ , a přitom platí*

$$[D, \sum_{k=0}^{\infty} a_k S^k] = \sum_{k=0}^{\infty} a_k [D, S^k].$$

Důkaz plyne ihned odtud, že

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{\infty} h(a_k S^k) &\leq \sum_{k=0}^{\infty} |a_k| h^k(S) < \infty, \\ \sum_{k=0}^{\infty} h(a_k [D, S^k]) &\leq 2h(D) \sum_{k=0}^{\infty} |a_k| h^k(S) < \infty.\end{aligned}$$

(3,3) *Pro  $0 \leq x \leq 1$  platí*

$$(2) \quad \sum_{k=1}^{\infty} |c_k| x^{2k} = 1 - \sqrt{1 - x^2},$$

pro  $0 \leq x < 1$  platí

$$(3) \quad \sum_{k=1}^{\infty} k |c_k| x^{2k-1} = \frac{x}{2\sqrt{1 - x^2}},$$

kde  $c_k$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) jsou koeficienty rozvoje

$$(4) \quad \sqrt{1 + x^2} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} c_k x^{2k}.$$



Přitom je

$$(5) \quad c_1 = \frac{1}{2}, \quad c_2 = -\frac{1}{8},$$

$$(6) \quad \text{sign } c_k = (-1)^{k-1}, \quad (k = 1, 2, \dots),$$

$$(7) \quad |c_{k+1}| > \frac{1}{2}|c_k| \quad (k = 2, 3, \dots).$$

Důkaz. Binomický rozvoj (4) má zřejmě první koeficienty z (5), a přitom platí (6) a (7). Jest

$$\sqrt{1-x^2} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k c_k x^{2k} = 1 - \sum_{k=1}^{\infty} |c_k| x^{2k},$$

což dává (2). Derivováním (2) dostaneme v uvedených oborech (3).

(3,4) Pro  $0 \leq x \leq 1$  platí

$$(8) \quad 1 - \frac{1}{2}x - \sqrt{1-x} \leq \frac{1}{2}x^2,$$

$$(9) \quad 1 - \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 - \sqrt{1-x} \leq \frac{3}{8}x^3.$$

Důkaz. Označme  $f_1$  resp.  $f_2$  funkce na levých stranách nerovností (8) resp. (9). Podle (2) a (5) lze psát  $f_1(x) = x^2 g_1(x)$ ,  $f_2(x) = x^3 g_2(x)$ , kde  $g_1$  i  $g_2$  lze v  $\langle 0, 1 \rangle$  rozvinout v mocninné řady podle mocnin  $x$ , které mají podle (2) vesměs kladné koeficienty. Funkce  $g_1$  i  $g_2$  jsou tedy v  $\langle 0, 1 \rangle$  rostoucí funkce, tj.

$$g_1(x) \leq g_1(1) = f_1(1) = \frac{1}{2}, \quad g_2(x) \leq g_2(1) = f_2(1) = \frac{3}{8}.$$

Odtud ihned plynou uvedené odhady.

(3,5) Necht  $A$  a  $D$  jsou symetrické matice,  $B = A - D$ . Necht  $S$  je anti-symetrická matice, pro niž platí  $[D, S] = B$  a necht  $h(S) < 1$ . Potom matice  $E + S^2$  je pozitivně definitní, matice  $U = S + \sqrt{E + S^2}$ , kde  $\sqrt{E + S^2}$  je pozitivně definitní odmocnina z  $E + S^2$ , je unitární, a platí pro operaci  $Q^*$  z odst. 2

$$Q^*(UAU^*) - Q^*(A) \leq Q(B)(\alpha(h(S)) - 1),$$

kde

$$\alpha(x) = x^2 + \frac{(1 - \sqrt{1-x^2})^2}{1-x^2} \quad \text{pro } 0 \leq x < 1.$$

Důkaz. Matice  $S^2$  je zřejmě symetrická a platí  $S^2 = -SS^*$ . Jsou tedy vlastní čísla této matice vesměs nekladná. Nejmenší vlastní číslo matice  $E + S^2$  je číslo  $1 - h^2(S)$ . Poněvadž  $S$  je antisymetrická a  $h(S) < 1$ , je matice  $E + S^2$  pozitivně definitní. Matice  $S + \sqrt{E + S^2}$  je pak zřejmě unitární podle (2,3).

Podle (2,1) a (2,4) platí

$$Q^*(UAU^*) - Q^*(A) \leq -\tau(B^2) - \frac{1}{2}\tau(B^2S^2) + \frac{1}{2}\tau(BSBS) - \tau(R^2) - 2\tau(PB^2).$$

Je však  $Q(BS) = \tau(BS(BS)^*) = -\tau(B^2S^2)$  a dále podle (1,2)  $\tau(BSBS) \leq Q(BS)$ , takže  $-\frac{1}{2}\tau(B^2S^2) + \frac{1}{2}\tau(BSBS) \leq Q(BS)$ . Odtud

$$(11) \quad Q^*(UAU^*) - Q^*(A) \leq -Q(B) + Q(BS) + Q(R) - 2\tau(PB^2),$$

neboť  $\tau(B^2) = Q(B)$ ,  $\tau(R^2) = -Q(R)$ , jak ihned plyne z toho, že matice  $B$  je symetrická,  $R$  antisymetrická.

Platí dále podle (2,4), (3,2) a (4)

$$R = [D, P] = [D, \sum_{k=2}^{\infty} c_k S^{2k}] = \sum_{k=2}^{\infty} c_k [D, S^{2k}],$$

takže podle (1)

$$N(R) \leq \sum_{k=2}^{\infty} |c_k| N([D, S^{2k}]) \leq N(B) \sum_{k=2}^{\infty} |c_k| 2k(h(S))^{2k},$$

odkud vzhledem k (3)

$$(12) \quad N(R) \leq N(B) h(S) \frac{1 - \sqrt{1 - h^2(S)}}{\sqrt{1 - h^2(S)}}.$$

Abychom odhadli  $-2\tau(PB^2)$ , označme  $C = \sqrt{E + S^2} - E$ . Snadným výpočtem zjistíme, že  $C^2 = -2P$ , tedy

$$-2\tau(PB^2) = \tau(B^2C^2) = \tau(BC(BC)^*) = Q(BC).$$

Dále

$$h(C) = h\left(\sum_{k=1}^{\infty} c_k S^{2k}\right) \leq \sum_{k=1}^{\infty} |c_k| (h(S))^{2k},$$

tj. podle (2)  $h(C) \leq 1 - \sqrt{1 - h^2(S)}$ .

Odtud

$$(13) \quad -2\tau(PB^2) = Q(BC) \leq Q(B) h^2(C) \leq Q(B) (1 - \sqrt{1 - h^2(S)})^2.$$

Ze vztahů (11), (12) a (13) plyne už uvedený odhad.

**(3,6)** *Nechť  $A, D, B, S$  a  $U$  jsou matice definované v (3,5). Označme*

$$(14) \quad Z = UAU^* - (D - \frac{1}{2}[B, S]).$$

*Potom platí*

$$(15) \quad N(Z) \leq N(B)\beta(h(S)),$$

*kde*

$$(16) \quad \beta(x) = x^2 + \frac{1}{4}x^3 + \left(1 + \frac{x}{\sqrt{1-x^2}}\right) (1 - \sqrt{1-x^2}) \quad \text{pro } 0 \leq x < 1.$$

Důkaz. Označme na okamžik pozitivně definitní  $\sqrt{E + S^2} = W$ . Protože  $U$  je podle (3,5) unitární, je  $N(Z) = N(ZU)$ . Nyní je

$$\begin{aligned} ZU &= UA - (D - \frac{1}{2}BS + \frac{1}{2}SB)U = (S + W)(B + D) - \\ &- (D + \frac{1}{2}SB - \frac{1}{2}BS)(S + W) = -[D, W] + \frac{1}{2}(SB + BS) + \\ &+ (W - E)B - \frac{1}{2}(SB - BS)(S + W - E) = \\ &= -[D, W - E - \frac{1}{2}S^2] + (W - E)B - \frac{1}{2}(SB - BS)(S + W - E), \end{aligned}$$

tedy podle (4) a (3,2)

$$\begin{aligned} ZU &= - [D, \sum_{k=2}^{\infty} c_k S^{2k}] + (\sum_{k=1}^{\infty} c_k S^{2k}) B - \\ &- \frac{1}{2}(SB - BS)(S + \sum_{k=1}^{\infty} c_k S^{2k}) = - \sum_{k=2}^{\infty} c_k [D, S^{2k}] + \\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} c_k S^{2k} B - \frac{1}{2} SBS + \frac{1}{2} BS^2 - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} c_k SBS^{2k} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} c_k BS^{2k+1}. \end{aligned}$$

Avšak podle (1) platí

$$\sum_{k=2}^{\infty} c_k [D, S^{2k}] = \sum_{\alpha, \beta} c_{\frac{1}{2}(\alpha+\beta+1)} S^{\alpha} B S^{\beta}, \quad \alpha + \beta \geq 3, \alpha + \beta \text{ liché,}$$

takže lze psát

$$ZU = \sum_{\alpha, \beta=0}^{\infty} \varrho_{\alpha\beta} S^{\alpha} B S^{\beta}.$$

$$\text{Odtud } N(ZU) \leq (NB) \sum_{\alpha, \beta=0}^{\infty} |\varrho_{\alpha\beta}| [h(S)]^{\alpha+\beta} = N(B) \sum_{k=0}^{\infty} \mu_k h^k(S),$$

kde  $\mu_k = \sum_{\alpha+\beta=k} |\varrho_{\alpha\beta}|$ . Nyní je

$$\varrho_{00} = \varrho_{01} = \varrho_{10} = 0, \quad \varrho_{20} = c_1, \quad \varrho_{11} = -\frac{1}{2}, \quad \varrho_{02} = \frac{1}{2}, \quad \varrho_{12} = \frac{1}{8};$$

pro  $k \geq 2$  je  $\varrho_{1,2k} = -c_{k+1} - \frac{1}{2}c_k$ , takže podle (6) a (7) pro  $k \geq 2$  platí  $|\varrho_{1,2k}| = |c_{k+1} - \frac{1}{2}c_k|$ ; dále pro  $k \geq 1$  platí  $\varrho_{2k,0} = c_k$ ,  $\varrho_{0,2k+1} = -c_{k+1} + \frac{1}{2}c_k$ , takže je  $|\varrho_{0,2k+1}| = |c_{k+1} + \frac{1}{2}c_k|$ ; pro ostatní dvojice  $\alpha, \beta$  je  $\varrho_{\alpha\beta} = 0$  pro  $\alpha + \beta = 2k \geq 4$ ,  $\varrho_{\alpha\beta} = c_{k+1}$  pro  $\alpha + \beta = 2k + 1 \geq 3$ . Odtud plyne

$$\mu_0 = \mu_1 = 0, \quad \mu_2 = 1 + |c_1|, \quad \mu_3 = \frac{3}{4} = \frac{1}{4} + 4|c_2|;$$

pro  $k \geq 2$  platí  $\mu_{2k} = |c_k|$ ,  $\mu_{2k+1} = (2k + 2)|c_{k+1}|$ . Celkem platí tedy podle (2) a (3) pro  $\beta(x)$  ze vztahu (16)

$$\begin{aligned} N(Z) &= N(ZU) \leq \\ &\leq N(B) \{ h^2(S) + \frac{1}{4} h^3(S) + \sum_{k=2}^{\infty} 2k |c_k| (h(S))^{2k-1} + \sum_{k=1}^{\infty} |c_k| (h(S))^{2k} \} = \\ &= N(B) \beta(h(S)), \end{aligned}$$

jak jsme měli dokázat.

4. V tomto odstavci budeme specialisovat volbu matic, o nichž byla řeč v předešlých odstavcích. Budou se zde také vyskytovat matice jiného řádu než  $n$ -tého a matice obdélníkové.

Množina všech přirozených čísel  $1, 2, \dots, n$  buď rozdělena na neprázdné disjunktní sčítance  $N_1, N_2, \dots, N_p$ . Zvolíme  $M$  jako množinu všech dvojic  $(i, j)$  takových, že  $i \in N_r, j \in N_r$  pro vhodné  $r = 1, 2, \dots, p$ . Pro jednoduchost mů-

žeme předpokládati, že platí  $u < v$ , jakmile  $u \in N_a$ ,  $v \in N_b$  a  $a < b$ . Při tomto dělení se matice  $A$  rozpadne na bloky

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1p} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{p1} & A_{p2} & \dots & A_{pp} \end{pmatrix}$$

se čtvercovými maticemi  $A_{ii}$  na blokové diagonále.

Budiž  $S_i$  množina všech vlastních hodnot matice  $A_{ii}$ . Pro  $i \neq j$  označme

$$\varrho_{ij} = \min |x - y|, \quad x \in S_i, \quad y \in S_j$$

a položme

$$c(A) = \min_{i \neq j} \varrho_{ij}.$$

(4,1) *Nechť  $A$  je symetrická matice,  $c(A) > 0$ . Potom existuje jediná anti-symetrická matice  $S$  taková, že pro  $D = D(A)$  platí  $[D, S] = A - D$  a při rozdělení na bloky  $N_1, \dots, N_p$  je  $S_{ii} = 0$  pro  $i = 1, 2, \dots, p$ . Platí potom*

$$N(S_{ik}) \leq \frac{1}{\varrho_{ik}} N(A_{ik})$$

pro každé  $i, k = 1, 2, \dots, p$ ,  $i \neq k$ ,

$$(17) \quad N(S) \leq \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)},$$

Důkaz. Buďte dána čísla  $i, k$ , pro něž  $1 \leq i < k \leq p$ . Úloha naléztí matici  $S_{ik}$  tak, aby  $A_{ii}S_{ik} - S_{ik}A_{kk} = A_{ik}$ , je ekvivalentní s řešením rovnice

$$\mathbf{M}X = A_{ik},$$

kdež  $\mathbf{M} = A_{ii} \otimes E_k - E_i \otimes A_{kk}$  (viz [3], str. 89). Podle známých vět (viz. [3], str. 84) o tensorových součinech je  $\mathbf{M}$  matice symetrická, jejíž spektrum tvoří všechna čísla tvaru  $x - y$ , kde  $x \in S_i$ ,  $y \in S_k$ . Protože všechna tato čísla jsou různá od nuly, je  $\mathbf{M}$  regulární. Existuje tedy  $\mathbf{M}^{-1}$ . Norma  $h(\mathbf{M}^{-1})$  je rovna nej-

větší z absolutních hodnot vlastních čísel matice  $\mathbf{M}^{-1}$ , takže  $h(\mathbf{M}^{-1}) = \frac{1}{\varrho_{ik}}$ .

Odtud plyne ihned existence matice  $S_{ik}$  splňující rovnost  $A_{ii}S_{ik} - S_{ik}A_{kk} = A_{ik}$  a odhad

$$N(S_{ik}) \leq \frac{1}{\varrho_{ik}} N(A_{ik}) \leq \frac{N(A_{ik})}{c(A)}.$$

Položme nyní pro  $1 \leq k < i \leq p$ ,  $S_{ik} = -S_{ki}^*$ ,  $S_{ii} = 0$  a definujme matici  $S$  pomocí bloků  $S_{ik}$ . Snadno se zjistí, že platí  $[D, S] = A - D$ ; odhad  $N(S) \leq \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)}$  je snadným důsledkem předešlých nerovností.

Poznámka. Zmíňme se o jednom zvláště důležitém případě. Zvolíme-li  $M$  jako množinu všech dvojic  $(i, i)$ , kdež  $1 \leq i \leq n$ , bude zřejmě  $c(A) =$

$= \min_{i \neq j} |a_{ii} - a_{jj}|$ . Je-li potom  $c(A) > 0$  a  $D = D(A)$ , konstrukce antisymetrické matice  $S$  takové, že  $[D, S] = A - D$  je snadná: stačí voliti  $s_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{ii} - a_{jj}}$  pro  $i \neq j$  a  $s_{ij} = 0$  pro  $i = j$ . Odhad  $N(S) \leq \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)}$  je bezprostřední.

(4,2) Necht  $A$  je symetrická matice, necht

$$c(A) > 0, \quad \sigma = \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)} < 1.$$

Potom existuje antisymetrická matice  $S$  taková, že  $[D, S] = A - D$ , kde  $D = D(A)$ . Matice  $E + S^2$  je pozitivně definitní, matice  $U = S + \sqrt{E + S^2}$  unitární. Pro matici  $\varphi(A) = UAU^*$  potom platí.

$$(18) \quad Q^*(\varphi(A)) \leq Q^*(A) \alpha(\sigma),$$

$$(19) \quad c(\varphi(A)) \geq c(A) \gamma(\sigma),$$

kde pro  $0 \leq x < 1$  je

$$(20) \quad \alpha(x) = x^2 + \frac{(1 - \sqrt{1 - x^2})^2}{1 - x^2}, \quad \gamma(x) = 1 - x^2 - \sqrt{2}x \beta(x),$$

$$\beta(x) = x^2 + \frac{1}{4}x^3 + \left(1 + \frac{x}{\sqrt{1 - x^2}}\right) (1 - \sqrt{1 - x^2}).$$

Poznámka. Budeme v dalším potřebovat, že  $\frac{1}{x^2} \alpha(x)$  a  $\beta(x)$  jsou rostoucí funkce v  $(0, 1)$ ,  $\gamma(x)$  je klesající funkce v  $(0, 1)$ .

Důkaz. Z předešlého lemmatu (4,1) vyplývá z  $c(A) > 0$  existence antisymetrické matice  $S$ , pro niž  $[D, S] = A - D$  a zároveň odhad  $N(S) \leq \sigma$ . Protože  $\sigma < 1$ , bude podle (3,5) matice  $E + S^2$  pozitivně definitní a matice  $U = S + \sqrt{E + S^2}$  unitární. Z téže věty vyplývá odhad

$$(21) \quad Q^*(\varphi(A)) \leq Q^*(A) \alpha(h(S)),$$

neboť zřejmě  $Q(B) = Q^*(A)$ . Protože však  $\alpha(x)$  je rostoucí funkcí v  $(0, 1)$  a podle (17) platí  $h(S) \leq N(S) \leq \sigma$ , dostáváme ihned (18).

Abychom dokázali odhad pro  $c(\varphi(A))$ , pišme  $\varphi(A)$  podle (14) ve tvaru  $\varphi(A) = D - \frac{1}{2}[B, S] + Z$  a označme na okamžik  $F$  matici  $\varphi(A)$  a provedme v ní stejné dělení na bloky jako v matici  $A$ . Necht nyní  $i \neq j$  a  $\xi_i$  náleží spektru matice  $F_{ii}$  a  $\xi_j$  spektru matice  $F_{jj}$ . Mějme ještě body  $x_i$  a  $x_j$ , které náleží spektrům matic  $A_{ii}$  a  $A_{jj}$ . Je potom

$$|\xi_i - \xi_j| \geq c(A) - |\xi_i - x_i| - |\xi_j - x_j|.$$

Zřejmě

$$|\xi_i - x_i| \leq N(F_{ii} - A_{ii}), \quad |\xi_j - x_j| \leq N(F_{jj} - A_{jj});$$

je dále

$$\begin{aligned} N(F_{ii} - A_{ii}) &\leq N(Z_{ii}) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq i} N(B_{ik}) N(S_{ki}) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq i} N(S_{ik}) N(B_{ki}) = \\ &= N(Z_{ii}) + \sum_{k \neq i} N(B_{ik}) N(S_{ik}), \end{aligned}$$

odkud

$$\begin{aligned} N(F_{ii} - A_{ii}) + N(F_{jj} - A_{jj}) &\leq \\ &\leq N(Z_{ii}) + N(Z_{jj}) + \sum_{k \neq i} N(B_{ik}) N(S_{ki}) + \sum_{k \neq j} N(B_{jk}) N(S_{kj}). \end{aligned}$$

Uvažíme-li, že

$$N(Z_{ii}) + N(Z_{jj}) \leq \sqrt{2} \sqrt{N^2(Z_{ii}) + N^2(Z_{jj})} \leq \sqrt{2} N(Z)$$

a použijeme-li na zbývajícím součtu Schwarzovy nerovnosti, dostaneme odhad

$$\begin{aligned} N(F_{ii} - A_{ii}) + N(F_{jj} - A_{jj}) &\leq \\ &\leq \sqrt{2} N(Z) + \left( \sum_k Q(B_{ik}) + \sum_k Q(B_{jk}) \right)^{\frac{1}{2}} \left( \sum_k Q(S_{ki}) + \sum_k Q(S_{kj}) \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ &\leq \sqrt{2} N(Z) + N(B) N(S) \leq \sqrt{2} N(Z) + \frac{Q^*(A)}{c(A)}. \end{aligned}$$

Odtud

$$c(\varphi(A)) \geq c(A) - \sqrt{2} N(Z) - \frac{Q^*(A)}{c(A)} = c(A) \left( 1 - \sqrt{2} \frac{N(Z)}{c(A)} - \sigma^2 \right),$$

takže podle (15) je

$$c(\varphi(A)) \geq c(A) (1 - \sigma^2 - \sqrt{2} \sigma \beta(h(S))) \geq c(A) (1 - \sigma^2 - \sqrt{2} \sigma \beta(\sigma)),$$

protože  $\beta(x)$  je rostoucí v  $(0, 1)$  a platí  $h(S) \leq N(S) \leq \sigma$  podle (17).

Všimněme si nyní blíže funkcí  $\alpha$  a  $\gamma$ . Poněvadž funkce  $\alpha$  je rostoucí v  $\langle 0, 1 \rangle$  a funkce  $\gamma$  klesající v  $\langle 0, 1 \rangle$ , při čemž  $\gamma(0) = 1$ ,  $\lim_{x \rightarrow 1^-} \gamma(x) = -\infty$ , existuje v intervalu  $(0, 1)$  jediný nulový bod  $\omega$  funkce  $\gamma$  a přitom je  $\gamma(x) > 0$  pro  $x \in (0, \omega)$ .

(4,3) V intervalu  $(0, \omega)$  existuje právě jedno číslo  $\xi$  takové, že  $\frac{\alpha^2(\xi)}{\gamma^2(\xi)} = 1$ . Číslo  $\xi$  má tuto vlastnost:

Nechť  $A$  je symetrická matice, pro kterou  $c(A) > 0$  a  $0 < \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)} \leq \xi$ . Potom existuje  $\varphi(A)$  a platí  $c(\varphi(A)) > 0$  a

$$(22) \quad \frac{\sqrt{Q^*(\varphi(A))}}{c(\varphi(A))} < \frac{1}{\xi} \left( \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)} \right)^2 \leq \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)}.$$

Důkaz. Funkce  $g(x) = \frac{\alpha(x)}{\gamma^2(x)}$  je v intervalu  $\langle 0, \omega \rangle$  rostoucí, při čemž  $g(0) =$

$= 0$ ,  $\lim_{x \rightarrow \omega^-} g(x) = \infty$ . Odtud ihned plyne existence a jednoznačnost čísla  $\xi \in \epsilon(0, \omega)$ , pro něž  $g(\xi) = 1$ .

Protože  $c(A) > 0$  a  $\frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)} \leq \xi < 1$ , má podle (3,2) smysl matice  $\varphi(A)$ .

Podle (18) a (19) platí

$$Q^*(\varphi(A)) \leq Q^*(A) \alpha(\sigma), \quad c(\varphi(A)) \geq c(A) \gamma(\sigma).$$

Odtud plyne  $\frac{\sqrt{Q^*(\varphi(A))}}{c(\varphi(A))} \leq \sigma \frac{\sqrt{\alpha(\sigma)}}{\gamma(\sigma)}$ . Vzhledem k tomu, že  $\frac{\alpha(x)}{x^2}$  je rostoucí v  $(0, 1)$  a  $\gamma(x)$  kladná a klesající v  $(0, \omega)$ , plyne odtud

$$\frac{\sqrt{Q^*(\varphi(A))}}{c(\varphi(A))} \leq \sigma^2 \frac{\sqrt{\alpha(\sigma)}}{\sigma \gamma(\sigma)} \leq \sigma^2 \frac{\sqrt{\alpha(\xi)}}{\xi \gamma(\xi)} = \frac{1}{\xi} \sigma^2 \leq \sigma.$$

Dokázali jsme tedy nerovnost

$$\frac{\sqrt{Q^*(\varphi(A))}}{c(\varphi(A))} \leq \frac{1}{\xi} \left( \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)} \right)^2.$$

Předpokládejme, že zde nastane rovnost. Potom nastane rovnost také v (18); platí tedy podle (21)

$$Q^*(A) \alpha(\sigma) = Q^*(\varphi(A)) \leq Q^*(A) \alpha(h(S)).$$

Protože  $Q^*(A) > 0$ , plyne odtud  $\alpha(\sigma) \leq \alpha(h(S)) \leq \alpha(\sigma)$ , takže  $\sigma = h(S)$ . Je tedy  $N(S) = \sigma = h(S)$ , avšak podle poznámky (1,8) nastane v nerovnosti  $h(S) \leq N(S)$  rovnost, právě když matice  $S$  má hodnotu nejvýše 1. Je tedy  $S = 0$ , tedy  $B = [D, S] = 0$ , takže  $Q^*(A) = Q(B) = 0$ , což je spor.

(4,4) Pro číslo  $\xi$  platí nerovnosti

$$0,47172 < \xi < 0,47173, \quad 0,22252 < \xi^2 < 0,22253.$$

Důkaz se provede přímým výpočtem.

(4,5) **Věta.** Nechť  $A$  je symetrická matice, pro kterou (při určitém dělení na bloky) platí

$$c(A) > 0, \quad \sigma = \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)} \leq \xi.$$

Potom pro každé přirozené  $k$  má smysl matice  $\varphi^k(A)$ , posloupnost  $\varphi^k(A)$  konverguje k matici  $L$ , unitárně podobné matici  $A$ , a platí:

1°  $Q^*(L) = 0$ ;

2°  $Q^*(\varphi^k(A)) \leq Q^*(A) \varrho^k \mu^{2k-1}$ , kde  $\varrho = \alpha(\xi) (\doteq 0,24051)$ ,  $\mu = \frac{\sigma}{\xi}$ ;

3° je-li  $\varphi^k(A) = U_k \varphi^{k-1}(A) U_k^*$ , kde  $U_k$  jsou unitární matice z (4,2), potom matice  $U = V^*$ ,  $V = U_1^* U_2^* \dots U_m^* \dots$  existuje, je unitární a  $L = UAU^*$ ;

4° pro  $m \geq 1$  platí

$$N(U_1^* U_2^* \dots U_m^* - U^*) \leq \frac{\sigma_{m+1}(1 + \sigma_{m+1})}{\xi - \sigma_{m+1}} \xi,$$

kde

$$\sigma_{m+1} = \frac{\sqrt{Q^*(\varphi^{m+1}(A))}}{c(\varphi^{m+1}(A))} \leq \xi \left(\frac{\sigma_1}{\xi}\right)^{2m}.$$

Poznámka. Operace  $\varphi(A)$  přiřazuje matici  $A$  matici tvaru  $UAU^*$ , kde však matice  $U$  závisí na  $A$ . Je tedy např.  $\varphi^2(A) = \varphi(A_1)$ , kdež  $A_1 = \varphi(A)$ , takže  $\varphi^2(A) = \varphi(A_1) = U_1 A_1 U_1^* = U_1 U A U^* U_1^*$  atd.

Důkaz. Podle věty (4,3) existují matice  $\varphi^k(A)$ , tedy také antisymetrické matice  $S_k$ , pro něž  $[D(\varphi^k(A)), S_k] = \varphi^k(A) - D(\varphi^k(A))$ , a rovněž unitární matice  $U_k = S_k + \sqrt{E + S_k^2}$ . Podle (4,1) je

$$N(S_k) \leq \sigma_k = \frac{\sqrt{Q^*(\varphi^k(A))}}{c(\varphi^k(A))} < 1,$$

takže

$$(23) \quad N(U_k - E) = N(S_k + \sqrt{E + S_k^2} - E) \leq N(S_k) + N(\sqrt{E + S_k^2} - E) \leq \\ \leq N(S_k) + \sum_{i=1}^{\infty} |c_i| [N(S_k)]^{2i} \leq N(S_k) + [N(S_k)]^2 \leq \sigma_k + \sigma_k^2.$$

Indukcí se však z (22) snadno dokáže, že pro  $p \geq 0, q \geq 0$  platí

$$(24) \quad \sigma_{p+q} \leq \xi \left(\frac{\sigma_p}{\xi}\right)^{2^q}.$$

Odtud  $N(U_k - E) \leq 2\sigma_k \leq 2\xi \left(\frac{\sigma_1}{\xi}\right)^{2^{k-1}}$ . Protože podle (22) je  $\frac{\sigma_1}{\xi} < 1$ , konverguje řada  $\sum_{k=1}^{\infty} N(U_k - E)$ , tj. podle (1,7) konverguje nekonečný součin  $U_1^* U_2^* \dots$  k unitární matici  $V$ .

Nyní pro  $m \geq 1$  podle (1,6), (23) a (24) je

$$\begin{aligned} N(U_1^* U_2^* \dots U_m^* - V) &\leq \sum_{i=m+1}^{\infty} N(U_i - E) \leq \\ &\leq \sum_{i=m+1}^{\infty} \sigma_i (1 + \sigma_i) \leq \sigma_{m+1} (1 + \sigma_{m+1}) \sum_{i=m+1}^{\infty} \frac{\sigma_i}{\sigma_{m+1}} \leq \\ &\leq \sigma_{m+1} (1 + \sigma_{m+1}) \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{\sigma_{m+1}}{\xi}\right)^{2^j - 1} \leq \sigma_{m+1} (1 + \sigma_{m+1}) \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{\sigma_{m+1}}{\xi}\right)^j = \\ &= \frac{\sigma_{m+1} (1 + \sigma_{m+1})}{\xi - \sigma_{m+1}} \xi. \end{aligned}$$

Tím je dokázáno 4° a zbytek v 4° plyne z (24).



Nyní dokážeme indukci 2°. Pro  $k = 1$  platí 2° podle (18). Poněvadž  $\frac{\alpha(x)}{x^2}$  je rostoucí pro  $0 < x < 1$ , platí podle (18), (24) a indukčního předpokladu

$$\begin{aligned} Q^*(\varphi^k(A)) &\leq Q^*(\varphi^{k-1}(A)) \alpha(\sigma_{k-1}) \leq Q^*(A) \rho^{k-1} \mu^{2^{k-1}-1} \alpha(\sigma_{k-1}) \leq \\ &\leq Q^*(A) \rho^{k-1} \mu^{2^{k-1}-1} \left( \frac{\xi^2 \alpha(\sigma_{k-1})}{\sigma_{k-1}^2} \right) \left( \frac{\sigma_{k-1}}{\xi} \right)^2 \leq \\ &\leq Q^*(A) \rho^{k-1} \mu^{2^{k-1}-1} \left( \frac{\xi^2 \alpha(\xi)}{\xi^2} \right) \left( \frac{\sigma}{\xi} \right)^{2^{k-1}} = Q^*(A) \rho^k \mu^{2^k-1}. \end{aligned}$$

Tím je 2° dokázáno.

Označme nyní  $U = V^*$ ,  $L = UAU^*$ ,  $V_k = U_1^* U_2^* \dots U_k^*$  pro  $k = 1, 2, \dots$ . Protože  $\varphi^k(A) = V_k^* A V_k$  a  $V_k^* \rightarrow U$  pro  $k \rightarrow \infty$ , platí  $\varphi^k(A) \rightarrow L$ , tj.  $Q^*[\varphi^k(A)] \rightarrow Q^*(L)$ . Avšak podle 2°  $Q^*[\varphi^k(A)] \rightarrow 0$ , tj. platí i 1° a 3° a věta je dokázána.

**5. Závěr.** V tomto odstavci uvedeme několik poznámek k podané metodě a porovnáme ji se známými metodami.

Především je nutno říci, že naše metoda je v podstatě lokální, tj. umožňuje rychle zpřesnit výsledek, jakmile známe matici, která je už výsledku blízká (a známe ještě příslušné unitární matice, které původní matici v tuto matici transformují). Zde se nabízí srovnání se známou Newtonovou metodou řešení algebraických rovnic, a to tím spíše, že obě metody velmi rychle konvergují (pro naši metodu to plyne z (4,5)). Nezapýváme se zde metodami, jak se z obecné matice přejde v matici, hodící se již pro tuto metodu. Takových metod je známo několik, např. metoda rotací, při níž se matice transformuje unitárními maticemi vždy s jedinou dvojicí nediagonálních nenulových prvků (viz např. [2], str. 160—162).

Při aplikaci uvedené metody je nutné nejprve volit rozklad matice  $A$  na bloky. Nejdůležitější případ ovšem je, jsou-li diagonální bloky přímo rovny diagonálním prvkům matice  $A$ . V tomto případě je výpočet matice  $S$  velmi jednoduchý; výpočet matice  $\sqrt{E + S^2}$  provedeme buď pomocí rozvoje v mocninnou řadu nebo iterací. Jsou-li některé diagonální prvky matice  $A$  navzájem blízké (tj. číslo  $c(A)$  by bylo malé), shrneme příslušné řádky a sloupce do jediného bloku, čímž se číslo  $c(A)$  zvětší. Podanou metodou najdeme pak skupiny vlastních čísel, odpovídající diagonálním blokům, podrobněji řečeno, najdeme matice menšího řádu, jejichž vlastní čísla jsou zároveň vlastní čísla dané matice. Poněvadž řády těchto menších matic (řády bloků) již zpravidla nebudou velké, lze takto např. najít vlastní čísla matice, která se od diagonální matice příliš neliší a která nemá všechny diagonální prvky zhruba stejně velké.

Metody lze však použít i k výpočtu jednoho vlastního čísla a příslušného vlastního vektoru, jsou-li totiž v některém řádku nediagonální prvky dosti malé. Stačí totiž zvolit rozdělení, při kterém diagonální prvek tohoto řádku

tvoří jeden blok a hlavní minor z ostatních řádků a sloupců druhý blok. Matici  $S$  je pak možno vypočítat řešením soustavy  $n - 1$  lineárních rovnic (byla-li matice řádu  $n$ ).

Pokud se týká přesnosti výpočtu, nezabýváme se zde analysou vlivu nepřesnosti při výpočtu unitárních matic na výsledek. Vliv toho, že při metodě užijeme jen konečně mnoha kroků, je dán odhady ve větě (4,5).

#### LITERATURA

- [1] *I. M. Gelfand*: Lineární algebra, Praha 1953.
- [2] *A. S. Householder*: Principles of Numerical Analysis, New York 1953.
- [3] *C. C. MacDuffee*: The Theory of Matrices, Berlin 1933.

#### Резюме

### ОБ ОДНОМ ИТЕРАЦИОННОМ МЕТОДЕ ДИАГОНАЛИЗАЦИИ СИММЕТРИЧЕСКИХ МАТРИЦ

МИРОСЛАВ ФИДЛЕР (Miroslav Fiedler), Прага и  
ВЛАСТИМИЛ ПТАК (Vlastimil Pták), Прага

В работе описан итерационный метод диагонализации симметрической матрицы. Метод подходит в случае матриц, достаточно близких диагональным, и может быть сравнен с методом Ньютона для решения алгебраических уравнений.

Пусть  $A$  — заданная симметрическая матрица и пусть  $D$  — диагональная матрица, образованная из диагональных элементов матрицы  $A$ . Если диагональные элементы матрицы  $A$  сплошь взаимно различны, то существует в точности одна антисимметричная матрица  $S$  такая, что  $DS - SD = A - D$ . При определенных условиях (если все собственные числа матрицы  $S$  по абсолютной величине меньше единицы) матрица  $E + S^2$  является положительно определенной. Если через  $W$  обозначим положительно определенный корень второй степени матрицы  $E + S^2$ , то матрица  $U = S + W$  будет унитарной. Матрица  $\varphi(A) = UAU^*$  является дальнейшей аппроксимацией диагональной матрицы, унитарно подобной матрице  $A$ . Подобным образом найдем матрицы  $\varphi^2(A) = \varphi(\varphi(A))$ ,  $\varphi^3(A) = \varphi(\varphi^2(A))$  и т. д. и введем обозначения  $c(A) = \min_{i,j, i \neq j} |a_{ii} - a_{jj}|$ ,  $Q^*(A) = \sum_{i,j, i \neq j} |a_{ij}|^2$  для матрицы  $A = (a_{ij})$ ; тогда справедлива теорема:

*Существуют числа  $\xi \doteq 0,47172$  и  $\rho \doteq 0,24061$ , обладающие следующими свойствами:*

Пусть  $A$  — симметрическая матрица такая, что  $c(A) > 0$ ,  $\sigma = \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)} \leq \xi$ . Тогда существуют матрицы  $\varphi^k(A)$  для  $k = 1, 2, 3, \dots$  и справедливы утверждения:

1° последовательность матриц  $\varphi^k(A)$  сходится к диагональной матрице  $L$ ;

2°  $Q^*(\varphi^k(A)) \leq Q^*(A) \rho^k \mu^{2^k - 1}$  где  $\mu = \sigma/\xi$ ;

3° если  $\varphi^k(A) = U_k \varphi^{k-1}(A) U_k^*$ , существует (унитарная) матрица  $V = U_1^* U_2^* U_3^* \dots$  и  $L = V^* A V$ .

Также можно дать оценку сходимости бесконечного произведения  $U_1^* U_2^* U_3^* \dots$

Метод может быть применен и в более общем случае, когда некоторые из диагональных элементов матрицы  $A$  довольно близки друг другу. Матрицу  $A$  в таком случае разобьем подходящим способом на блоки, причем имеет место теорема, аналогичная выше приведенной.

## Summary

### AN ITERATIVE METHOD OF COMPUTING THE EIGENVALUES AND EIGENVECTORS OF A SYMMETRIC MATRIX

MIROSLAV FIEDLER and VLASTIMIL PTÁK, Praha

An iterative method is described for bringing a symmetric matrix to the diagonal form. The method is suitable for matrices sufficiently near the diagonal form and may be compared to the Newton method for finding roots of polynomials.

Let  $A$  be the given complex symmetric matrix and let  $D$  be the diagonal matrix consisting of the diagonal elements of  $A$ . Let us consider the case where the diagonal elements of  $A$  are all different from each other. Then there exists exactly one antisymmetric matrix  $S$  such that  $DS - SD = A - D$ . Under certain conditions (if all proper values of  $S$  are less than one in modulus) the matrix  $E + S^2$  is positive definite. If  $W$  is the positive definite square root of  $E + S^2$ , the matrix  $U = S + W$  is a unitary one. The matrix  $\varphi(A) = UAU^*$  is then the next approximation of the diagonal matrix similar to  $A$ . In a similar manner, the matrices  $\varphi^2(A) = \varphi(\varphi(A))$ ,  $\varphi^3(A) = \varphi(\varphi^2(A))$ , are constructed.

We introduce the following notation: if  $A$  is a matrix with elements  $a_{ik}$ , we put

$$c(A) = \min_{i,j, i \neq j} |a_{ii} - a_{jj}|, \quad Q^*(A) = \sum_{i,j, i \neq j} |a_{ij}|^2.$$

The following theorem is proved. *There exist two numbers  $\xi \doteq 0,47172$  and  $\varrho \doteq 0,24051$  with the following properties:*

*Let  $A$  be a symmetric matrix such that  $c(A) > 0$ ,  $\sigma = \frac{\sqrt{Q^*(A)}}{c(A)} \leq \xi$ . Under these conditions, the iterated matrix  $\varphi^k(A)$  has a meaning for each  $k$  and*

*1° the sequence  $\varphi^k(A)$  converges to a diagonal matrix  $L$ ;*

*2°  $Q^*(\varphi^k(A)) \leq Q^*(A) \varrho^k \mu^{2^k-1}$  where  $\mu = \frac{\sigma}{\xi}$ ;*

*3° if  $\varphi^k(A) = U_k \varphi^{k-1}(A) U_k^*$ , the (unitary) matrix  $V = U_1^* U_2^* U_3^* \dots$  exists and fulfills  $L = V^* A V$ .*

An estimate of the convergence of the infinite product  $U_1^* U_2^* U_3^* \dots$  may also be given.

The method may be applied even in the more general case when some of the diagonal elements are nearly equal; the matrix is then divided into blocks in a suitable manner and a theorem similar to the preceding result may be obtained.