Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

Video na Youtube

QR algoritmus

Remark 1

Velkou nevýhodou LR algoritmu je jeho špatná numerická stabilita zejména při aplikování na velké matice. Proto byl v roce 1961 J.G.F. Francisem navržený QR algoritmus. Funguje stejně jako LR algoritmus, ale místo LU rozklad napočítává QR rozklad, tj. rozklad na unitární a horní trojúhelníkovou matici.

QR algoritmus

QR algoritmus

- pro zadanou matici $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$ konstruujeme tři posloupnosti
  - $\left\{\mathbb{T}^{(k)}\right\}_{k=1}^{\infty} \in \mathbb{R}^{n,n}$
  - $\left\{\mathbb{Q}^{(k)}\right\}_{k=1}^{\infty} \in \mathbb{R}^{n,n}$ ortogonální matice
  - $\left\{\mathbb{R}^{(k)}\right\}_{k=1}^{\infty} \in \mathbb{R}^{n,n}$ horní trojúhelníkové
- na počátku volíme

$$
\begin{aligned}
\mathbb{T}^{(1)} &= \mathbb{A}, \\
\mathbb{Q}^{(1)}\mathbb{R}^{(1)} &= \mathbb{T}^{(1)}, \\
\mathbb{T}^{(2)} &= \mathbb{R}^{(1)}\mathbb{Q}^{(1)}
\end{aligned}
$$

- obecně mají jednotlivé iterace tvar

$$
\begin{aligned}
\mathbb{Q}^{(k)}\mathbb{R}^{(k)} &= \mathbb{T}^{(k)}, \\
\mathbb{T}^{(k+1)} &= \mathbb{R}^{(k)}\mathbb{Q}^{(k)}.
\end{aligned}
$$

QR algoritmus

- platí tedy

$$\mathbb{R}^{(k)} = \left(\mathbb{Q}^{(k)}\right)^{-1} \mathbb{T}^{(k)}$$

a

$$\mathbb{T}^{(k+1)} = \mathbb{R}^{(k)}\mathbb{Q}^{(k)} = \left(\mathbb{Q}^{(k)}\right)^{*-1} \mathbb{T}^{(k)}\mathbb{Q}^{(k)},$$

resp.

$$\mathbb{T}^{(k)} = \left(\cancel{\mathbb{Q}^{(0)}}\mathbb{Q}^{(1)} \dots \mathbb{Q}^{(k)}\right)^{*} \overset{\mathbb{T}^{(1)}}{\mathbb{A}} \left(\cancel{\mathbb{Q}^{(0)}}\mathbb{Q}^{(1)} \dots \mathbb{Q}^{(k)}\right)$$

pro $k > 0$ a tedy matice $\mathbb{T}^{(k)}$ je ortogonálně podobná matici $\mathbb{A}$.

$\prod_{0}^{k} \mathbb{Q}^{(k)} \to \mathbb{U}$; $\mathbb{T}^{(k)} \to \mathbb{R}$; $\mathbb{R} = \mathbb{U}^{*}\mathbb{A}\mathbb{U}$

$\mathbb{A} = \mathbb{U}^{*}\mathbb{R}\mathbb{U} \equiv$ SCHUR

Konvergence QR algoritmu

Remark 2

QR rozklad je opět spojitou funkcí prvků matice $\mathbb{A}$, jak lze vidět např. z Grammova-Schmidtova algoritmu.

Lemma 3

Existuje-li QR rozklad matice $\mathbb{A}^k = \mathcal{Q}^{(k)}\mathcal{R}^{(k)}$, pak platí

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}^{(k)} &= \mathbb{Q}^{(1)}\mathbb{Q}^{(2)}\dots\mathbb{Q}^{(k)}, \\ \mathcal{R}^{(k)} &= \mathbb{R}^{(k)}\mathbb{R}^{(k-1)}\dots\mathbb{R}^{(1)}. \end{aligned}$$

$\mathbb{A}^k = \mathbb{Q}^{(k)}\mathbb{R}^{(k)}$; $\mathbb{Q}^{(k)} \to \mathbb{Q}$

$\Longleftrightarrow \mathbb{Q}^{(k)} \to \mathbb{I}$

Důkaz.

Stejný jako u LR algoritmu. □

Konvergence QR algoritmu

Theorem 4

Je-li matice $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$ taková, že její vlastní čísla λ_i splňují

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \ldots > |\lambda_n| \,,$$

pak posloupnost $\mathbb{T}^{(k)}$ konverguje k horní trojúhelníkové matici s vlastními čísly λ_i na diagonále seřazené podle velikosti. Je-li $\mathbb{A}$ symetrická, pak $\mathbb{T}^{(k)}$ konverguje k diagonální matici.

Důkaz.

Video na Youtube □

$$\mathbb{A} = \mathbb{X}\,\mathbb{D}\,\mathbb{X}^{-1} \;;\; \mathbb{D} = \mathrm{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$$

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \dots > |\lambda_n|$$

$$\mathbb{A}^k = \mathbb{X}\,\mathbb{D}^k\,\mathbb{X}^{-1} \;;\; \mathbb{X} = \mathbb{Q}_X \mathbb{R}_X$$

$$\mathbb{X}^{-1} = \mathbb{L}_Y \mathbb{R}_Y$$

$$\mathbb{A}^k = \mathbb{Q}_X \mathbb{R}_X \mathbb{D}^k \mathbb{L}_Y \mathbb{R}_Y = \mathbb{Q}_X \mathbb{R}_X \mathbb{D}^k \mathbb{L}_Y \mathbb{D}^{-k} \mathbb{D}^k \mathbb{R}_Y$$

$$\left(\mathbb{D}^k \mathbb{L}_Y \mathbb{D}^{-k}\right)_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{PRO } j > i \\ \lambda_i \cdot 1 \cdot \frac{1}{\lambda_i} = 1 & \text{PRO } i = j \\ l_{ij} \cdot \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^k & \text{PRO } j < i \end{cases}$$

$$j < i \Rightarrow |\lambda_j| > |\lambda_i| \Rightarrow \left|\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right| < 1 \Rightarrow \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^k \xrightarrow[k\to\infty]{} 0$$

$$\Rightarrow \mathbb{D}^k \mathbb{L}_Y \mathbb{D}^{-k} \xrightarrow[k\to\infty]{} \mathbb{I} \Rightarrow \mathbb{D}^k \mathbb{L}_Y \mathbb{D}^{-k} = \mathbb{I} + \mathbb{F}^{(k)},$$

KDE $\mathbb{F}^{(k)} \xrightarrow[k\to\infty]{} \Theta$

$$\mathbb{A}^k = \mathbb{Q}_X \mathbb{R}_X \left(\mathbb{I} + \mathbb{F}^{(k)}\right) \overbrace{\mathbb{D}^k}^{\mathbb{R}_X^{-1}\mathbb{R}_X} \mathbb{R}_Y =$$

$$\mathbb{Q}_X \underline{\mathbb{R}_X \left(\mathbb{I} + \mathbb{F}^{(k)}\right) \mathbb{R}_X^{-1}} \mathbb{R}_X \mathbb{D}^k \mathbb{R}_Y =$$

$$\mathbb{Q}_X \Big(\mathbb{I} + \underbrace{\mathbb{R}_X \mathbb{F}^{(k)} \mathbb{R}_X^{-1}}_{\mathbb{G}^{(k)} \xrightarrow[k\to\infty]{} \Theta}\Big) \mathbb{R}_X \mathbb{D}^k \mathbb{R}_Y =$$

$$= \mathbb{Q}_X \underbrace{\left(\mathbb{I} + \mathbb{G}^{(k)}\right)}_{\mathbb{Q}_G^{(k)} \mathbb{R}_G^{(k)}} \mathbb{R}_X \mathbb{D}^k \mathbb{R}_Y =$$

$$\mathbb{Q}_G^{(k)} \mathbb{R}_G^{(k)} \;;\; \underline{\mathbb{Q}_G^{(k)} \xrightarrow[k\to\infty]{} \mathbb{I} \;;\; \mathbb{R}_G^{(k)} \xrightarrow[k\to\infty]{} \mathbb{I}}$$

$$\mathbb{A}^k = \mathbb{Q}_x \mathbb{Q}_G^{(k)} \mathbb{R}_G^{(k)} \mathbb{R}_x \mathbb{D}^k \mathbb{R}_y$$

$$\underline{\mathbb{Q}_x \mathbb{Q}_G^{(k)}} \to \mathbb{Q}_x \Rightarrow \mathbb{Q}^{(1)} \mathbb{Q}^{(2)} \cdots \mathbb{Q}^{(k)} \to \mathbb{Q}_x$$

$$\mathbb{A}^k = \mathbb{Q}^{(1)} \mathbb{Q}^{(2)} \cdots \mathbb{Q}^{(k)} \mathbb{R}^{(k)} \cdots \mathbb{R}^{(1)}$$

$$\mathbb{T}^{(k)} = \left(\mathbb{Q}^{(1)} \cdots \mathbb{Q}^{(k)}\right)^* \mathbb{A} \left(\mathbb{Q}^{(1)} \cdots \mathbb{Q}^{(k)}\right) =$$

$$= \mathbb{Q}^{(k)*} \mathbb{A} \mathbb{Q}^{(k)} \to \mathbb{Q}_x^* \mathbb{A} \mathbb{Q}_x = \mathbb{T}$$

$$\mathbb{A} = \mathbb{Q}_x^T \mathbb{T} \mathbb{Q}_x \Rightarrow \mathbb{A}^T = \mathbb{Q}_x^T \mathbb{T}^T \mathbb{Q}_x \Rightarrow$$

$$\mathbb{T} = \mathbb{T}^T \Rightarrow \mathbb{T} \text{ JE DIAG.}$$

$$\mathbb{T}^{(k)} = \left(\mathbb{Q}^{(1)} \cdots \mathbb{Q}^{(k)}\right)^* \mathbb{A} \left(\mathbb{Q}^{(1)} \cdots \mathbb{Q}^{(k)}\right) =$$

$$= \mathbb{Q}^{(k)*} \mathbb{A} \mathbb{Q}^{(k)} = \left(\mathbb{Q}_x \mathbb{Q}_G^{(k)}\right)^* \mathbb{A} \mathbb{Q}_x \mathbb{Q}_G^{(k)}$$

$$= \mathbb{Q}_G^{(k)*} \mathbb{Q}_x^* \mathbb{X} \mathbb{D} \mathbb{X}^{-1} \mathbb{Q}_x \mathbb{Q}_G^{(k)} =$$

$$(\mathbb{X} = \mathbb{Q}_x \mathbb{R}_x)$$

$$= \mathbb{Q}_G^{(k)*} \underbrace{\mathbb{Q}_x^* \mathbb{Q}_x}_{\mathbb{I}} \mathbb{R}_x \mathbb{D} \mathbb{R}_x^{-1} \underbrace{\mathbb{Q}_x^* \mathbb{Q}_x}_{\mathbb{I}} \mathbb{Q}_G^{(k)} =$$

$$= \underline{\mathbb{Q}_G^{(k)*}} \mathbb{R}_x \mathbb{D} \mathbb{R}_x^{-1} \underline{\mathbb{Q}_G^{(k)}} \to \mathbb{R}_x \mathbb{D} \mathbb{R}_x^{-1} \text{ JE } \triangledown \quad \square$$

QR algoritmus

- klasický přístup ke QR rozkladu vyžaduje v každém kroku n^3 operací
- ukážeme si tzv. **Hessenbergovy QR iterace** se složitostí n^2

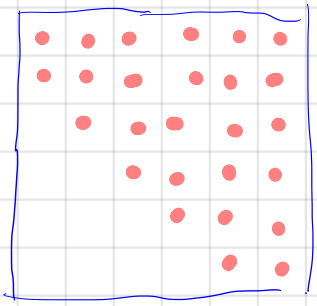
Hessenbergův tvar matice

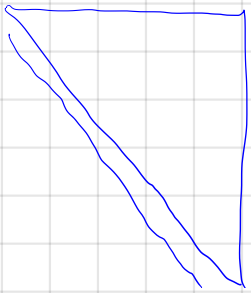
Definition 5

Matice v **Hessenbergově tvaru** je horní trojúhelníková matice, která může mít navíc nenulové prvky bezprostředně pod diagonálou.

Remark 6

Hessenbergův tvar je zřejmě **nejjednodušší tvar**, *na který dokážeme libovolnou regulární matici převést* **podobnostní transformací**, *kterou lze získat* **přímým algoritmem**.





Hessenbergovy QR iterace

$\mathbb{A} \to \mathbb{H}$

Hessenbergovy QR iterace

- metoda využívá **Hessenbergův tvar matice**
- na začátku metody převedeme matici $\mathbb{A}$ podobnostní transformací do Hessenbergova tvaru se složitost $O(n^3)$
- ukážeme, že následující iterace lze provádět se složitostí $O(n^2)$

$\mathbb{T}^{(k)}$ JSOU V HESSEN. TVARU

Hessenbergův tvar

- buď $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3,n-1} & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,,2} & a_{n-1,3} & \cdots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ a_{n1} & a_{n,2} & a_{n,3} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}$$

- odvodíme podobnostní transformaci na Hessenbergův tvar

Hessenbergův tvar

- v prvním kroku nulujeme prvky v prvním sloupci na řádcích 3 až n
- definujeme $\vec{x}^{(1)} := (a_{21}, \ldots, a_{n1})^T \in \mathbb{R}^{n-1}$
- $$\vec{w}^{(1)} := \frac{\vec{x}^{(1)} + \mathrm{sign} x_1^{(1)} \left\| \vec{x}^{(1)} \right\|_2 \vec{e}^{(1)}}{\left\| \vec{x}^{(1)} + \mathrm{sign} x_1^{(1)} \left\| \vec{x}^{(1)} \right\|_2 \vec{e}^{(1)} \right\|_2} \in \mathbb{R}^{n-1},$$

  kde $\vec{e}^{(1)}$ je první bazický vektor standardní báze prostoru $\mathbb{R}^{n-1}$
- $\tilde{\mathbb{Q}}^{(1)} := \mathbb{I} - 2\vec{w}^{(1)} \left(\vec{w}^{(1)}\right)^* \in \mathbb{R}^{n-1,n-1}$
- $$\overline{\mathbb{Q}}^{(1)} := \begin{pmatrix} 1 & \vec{0}^T \\ \vec{0} & \tilde{\mathbb{Q}}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & \tilde{\mathbb{Q}}^{(1)} \end{pmatrix}$$

Hessenbergův tvar

- transformaci aplikujeme na matici $\mathbb{A}$ zleva

$$\overline{\mathbb{A}}^{(1)} := \overline{\mathbb{Q}}^{(1)}\mathbb{A} =$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ \overline{a}_{21}^{(1)} & \overline{a}_{22}^{(1)} & \overline{a}_{23}^{(1)} & \dots & \overline{a}_{2n}^{(1)} \\ 0 & \overline{a}_{32}^{(1)} & \overline{a}_{33}^{(1)} & \dots & \overline{a}_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \overline{a}_{n,2}^{(1)} & \overline{a}_{n,3}^{(1)} & \dots & \overline{a}_{n,n}^{(1)} \end{pmatrix}$$

$\overline{Q}^{(1)}$

- dostaneme tak matici, jejíž první sloupec odpovídá Hessenbergovu tvaru, není ale podobná matici $\mathbb{A}$

Hessenbergův tvar

- nyní proto provedeme násobení matící

$$\left(\overline{\mathbb{Q}}^{(1)}\right)^{-1} = \left(\overline{\mathbb{Q}}^{(1)}\right)^{*} = \overline{\mathbb{Q}}^{(1)}$$

zprava

- $$\overline{\mathbb{A}}^{(1)}\overline{\mathbb{Q}}^{(1)} := \overline{\mathbb{Q}}^{(1)}\mathbb{A}\overline{\mathbb{Q}}^{(1)} =$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ \overline{a}_{21}^{(1)} & \overline{a}_{22}^{(1)} & \overline{a}_{23}^{(1)} & \dots & \overline{a}_{2n}^{(1)} \\ 0 & \overline{a}_{32}^{(1)} & \overline{a}_{33}^{(1)} & \dots & \overline{a}_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \overline{a}_{n,2}^{(1)} & \overline{a}_{n,3}^{(1)} & \dots & \overline{a}_{n,n}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \\ & \tilde{\mathbb{Q}}^{(1)} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ \overline{a}_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n,2}^{(1)} & a_{n,3}^{(1)} & \dots & a_{n,n}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & a_{13}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ h_{21} & h_{22} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n,2}^{(1)} & a_{n,3}^{(1)} & \dots & a_{n,n}^{(1)} \end{pmatrix} = \mathbb{H}^{(1)}$$

Hessenbergův tvar

- dále budeme eliminovat prvky $(a_{42}^{(1)} \dots a_{n,2}^{(1)})^T$
- definujeme $\vec{x}^{(2)} := (a_{32}^{(1)}, a_{42}^{(1)} \dots a_{n,2}^{(1)})^T$ $\in \mathbb{R}^{n-2}$
- $$\vec{w}^{(2)} := \frac{\vec{x}^{(2)} + \operatorname{sign} x_1^{(2)} \left\| \vec{x}^{(2)} \right\|_2 \vec{e}^{(2)}}{\left\| \vec{x}^{(2)} + \operatorname{sign} x_1^{(2)} \left\| \vec{x}^{(2)} \right\|_2 \vec{e}^{(2)} \right\|_2} \in \mathbb{R}^{n-2},$$

  kde $\vec{e}^{(2)}$ je první bazický vektor standardní báze prostoru $\mathbb{R}^{n-2}$
- $\tilde{\mathbb{Q}}^{(2)} := \mathbb{I} - 2\vec{w}^{(2)} \left(\vec{w}^{(2)}\right)^* \in \mathbb{R}^{n-2,n-2}$
- $$\overline{\mathbb{Q}}^{(2)} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & \vec{0}^T \\ 0 & 1 & \vec{0}^T \\ \vec{0} & \vec{0} & \tilde{\mathbb{Q}}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & \tilde{\mathbb{Q}}^{(2)} \end{pmatrix}$$

Hessenbergův tvar

- aplikací zleva na matici $\mathbb{H}^{(1)}$ dostáváme

$$\overline{\mathbb{Q}}^{(2)}\mathbb{H}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & \tilde{\mathbb{Q}}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & a_{13}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ h_{21} & h_{22} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n,2}^{(1)} & a_{n,3}^{(1)} & \dots & a_{n,n}^{(1)} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & a_{13}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ h_{21} & h_{22} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & \overline{a}_{32}^{(2)} & \overline{a}_{33}^{(2)} & \dots & \overline{a}_{3n}^{(2)} \\ 0 & 0 & \overline{a}_{43}^{(2)} & \dots & \overline{a}_{4n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \overline{a}_{n,3}^{(2)} & \dots & \overline{a}_{n,n}^{(2)} \end{pmatrix}$$

$\overline{\mathbb{Q}}^{(2)}$

- pro zachování podobnostní transformace opět provedeme vynásobení zprava

Hessenbergův tvar

- $$\overline{\mathbb{Q}}^{(2)}\mathbb{H}^{(1)}\overline{\mathbb{Q}}^{(2)} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & a_{13}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ h_{21} & h_{22} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & \overline{a}_{32}^{(2)} & \overline{a}_{33}^{(2)} & \dots & \overline{a}_{3n}^{(2)} \\ 0 & 0 & \overline{a}_{43}^{(2)} & \dots & \overline{a}_{4n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \overline{a}_{n,3}^{(2)} & \dots & \overline{a}_{n,n}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & \tilde{\mathbb{Q}}^{(2)} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & a_{13}^{(2)} & \dots & a_{1n}^{(2)} \\ h_{21} & h_{22} & a_{23}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & \overline{a}_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(2)} & \dots & a_{4n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n,3}^{(2)} & \dots & a_{n,n}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \dots & a_{1n}^{(2)} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & h_{32} & h_{33} & \dots & a_{3n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(2)} & \dots & a_{4n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n,3}^{(2)} & \dots & a_{n,n}^{(2)} \end{pmatrix} = \mathbb{H}^{(2)}$$

- takto postupujeme dále, až matici převedeme do Hessenbergova tvaru

$A = U^* H U \; ; \; H = H^{(n-1)}$

$\mathbb{T}^{(k)} \leftrightarrow \mathbb{H}^{(k)}$

Hessenbergovy QR iterace

- Hessenbergovy QR iterace generují posloupnost matic $\mathbb{H}^{(k)}$, které jsou v Hessenbergově tvaru
- pro QR rozklad matice $\mathbb{H}^{(k-1)}$ stačí eliminovat pouze $n-1$ nenulových prvků pod diagonálou
- k tomu stačí provést $n-1$ Givensových rotací
- definujme

$\mathbb{H}^{(k)} = \mathbb{Q}^{(k)} \mathbb{R}^{(k)}$

$$\left(\mathbb{Q}^{(k)}\right)^T = \mathbb{G}_{n-1}^{(k)} \dots \mathbb{G}_1^{(k)}$$

$\mathbb{H}^{(k+1)} = \mathbb{R}^{(k)} \mathbb{Q}^{(k)}$

- pak je

$$\left(\mathbb{Q}^{(k)}\right)^T \mathbb{H}^{(k-1)} = \mathbb{R}^{(k)}$$

$O(n^2)$

- a tudíž

$$\mathbb{H}^{(k-1)} = \mathbb{Q}^{(k)} \mathbb{R}^{(k)}$$

- a z definice QR iterací je

$O(n^2)$

$$\mathbb{H}^{(k)} = \mathbb{R}^{(k)} \mathbb{Q}^{(k)} = \mathbb{R}^{(k)} \left(\mathbb{G}_1^{(k)}\right)^T \dots \left(\mathbb{G}_{n-1}^{(k)}\right)^T$$

Hessenbergovy QR iterace

Lemma 7

Výsledkem násobení

$$\mathbb{R}^{(k)} \left(\mathbb{G}_1^{(k)}\right)^T \dots \left(\mathbb{G}_{n-1}^{(k)}\right)^T$$

je opět matice v Hessenbergovu tvaru.

- celou iteraci se nám podařilo provést s $O(n^2)$ operacemi
- na konci mámě opět matici v Hessenbergovu tvaru

Hessenbergovy QR iterace - příklad

Ukážeme si Hessebergovy iterace opět na příkladu. Mějme na matici $\mathbb{H}$ v Hessenbergově tvaru.

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \dots & h_{1,n-1} & h_{1,n} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \dots & h_{2,n-1} & h_{2,n} \\ 0 & h_{32} & h_{33} & \dots & h_{3,n-1} & h_{3,n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & h_{n-1,n-2} & h_{n-1,n-1} & h_{n-1,n} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & h_{n,n-1} & h_{n,n} \end{pmatrix}$$

Naším cílem je eliminovat prvky $h_{21}, h_{32}, \dots, h_{n,n-1}$ pomocí unitární transformace, čímž tuto matici převedeme na horní trojúhelníkový tvar. Použijeme k tomu Givensovy rotace pro eliminování jednotlivých prvků.

Hessenbergovy QR iterace - příklad

- k eliminaci prvku h_{21} použijeme Givensovu rotaci

$$G^{21} := G^{21}(h_{21}, h_{11}) = \begin{pmatrix} c^{21} & s^{21} & & & \\ -s^{21} & c^{21} & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

- ta eliminuje násobením matice $\mathbb{H}$ zleva prvek h_{21} pomocí prvního řádku

$$\mathbb{G}^{21}\mathbb{H} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1,n-1} & r_{1,n} \\ 0 & \overline{h}_{22} & \overline{h}_{23} & \dots & \overline{h}_{2,n-1} & \overline{h}_{2,n} \\ 0 & h_{32} & h_{33} & \dots & h_{3,n-1} & h_{3,n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & h_{n-1,n-2} & h_{n-1,n-1} & h_{n-1,n} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & h_{n,n-1} & h_{n,n} \end{pmatrix}$$

Hessenbergovy QR iterace - příklad

- dále budeme eliminovat prvek h_{32} pomocí druhého řádku matice, tj. Givensovou rotací

$$G^{32} := G^{32}(h_{32}, \overline{h}_{22}) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & c^{32} & s^{32} & & & \\ & -s^{32} & c^{32} & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

- násobením matice $\mathbb{G}^{21}\mathbb{H}$ zleva dostaneme

$$\mathbb{G}^{32}\mathbb{G}^{21}\mathbb{H} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1,n-1} & r_{1,n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & \dots & r_{2,n-1} & r_{2,n} \\ 0 & 0 & \overline{h}_{33} & \dots & \overline{h}_{3,n-1} & \overline{h}_{3,n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & h_{n-1,n-2} & h_{n-1,n-1} & h_{n-1,n} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & h_{n,n-1} & h_{n,n} \end{pmatrix}$$

Hessenbergovy QR iterace - příklad

- takto postupujeme dále, až nakonec eliminujeme prvek $h_{n,n-1}$ pomocí předposledního řádku matice Givensovou rotací

$$G^{n,n-1} := G^{n,n-1}(h_{n,n-1}, \overline{h}_{n-1,n-1}) = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & c^{32} & s^{32} \\ & & & -s^{32} & c^{32} \end{pmatrix}$$

- násobením matice $\mathbb{G}^{n-1,n-2} \dots \mathbb{G}^{32}\mathbb{G}^{21}\mathbb{H}$ zleva dostáváme

$$\mathbb{G}^{n,n-1} \dots \mathbb{G}^{32}\mathbb{G}^{21}\mathbb{H} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1,n-1} & r_{1,n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & \dots & r_{2,n-1} & r_{2,n} \\ 0 & 0 & r_{33} & \dots & r_{3,n-1} & r_{3,n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & r_{n-1,n-1} & r_{n-1,n} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & r_{n,n} \end{pmatrix} = \mathbb{R}$$

Hessenbergovy QR iterace - příklad

- všimneme si, že Givensovy rotace vždy měnily jen dva po sobě jdoucí řádky
- nyní je potřeba napočítat matici

$$\mathbb{R}\left(\mathbb{G}^{21}\right)^T\left(\mathbb{G}^{32}\right)^T\ldots\left(\mathbb{G}^{n,n-1}\right)^T$$

- transpozice Givensových rotací pouze mění znaménko mimodiagonálních členů, vzor matice ale zůstává stejný
- jelikož ale budeme nyní provádět násobení zprava, budou Givensovy rotace manipulovat se sloupci matice $\mathbb{R}$
- provedeme to opět postupně

Hessenbergovy QR iterace - příklad

- dostáváme

$$\mathbb{R}\left(\mathbb{G}^{21}\right)^T =$$

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1,n-1} & r_{1,n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & \dots & r_{2,n-1} & r_{2,n} \\ 0 & 0 & r_{33} & \dots & r_{3,n-1} & r_{3,n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & r_{n-1,n-1} & r_{n-1,n} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & r_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c^{21} & -s^{21} & & & \\ s^{21} & c^{21} & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} h^1_{11} & \bar{r}_{12} & r_{13} & \dots & r_{1,n-1} & r_{1,n} \\ h^1_{21} & \bar{r}_{22} & r_{23} & \dots & r_{2,n-1} & r_{2,n-1} \\ 0 & 0 & r_{33} & \dots & r_{3,n-1} & r_{3,n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & r_{n-1,n-1} & r_{n-1,n} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & r_{n,n} \end{pmatrix}$$

- Givensova rotace $\left(\mathbb{G}^{21}\right)^T$ pracuje pouze s prvním a druhým sloupcem matice $\mathbb{R}$
- důležité je, že jediný nový nenulový prvek může vzniknout na pozici prvku h^1_{21}

Hessenbergovy QR iterace - příklad

- dále provedme násobení maticí $\left(\mathbb{G}^{32}\right)^T$ zprava

$$\mathbb{R}\left(\mathbb{G}^{21}\right)^T\left(\mathbb{G}^{32}\right)^T =$$

$$\begin{pmatrix} h^1_{11} & \bar{r}_{12} & r_{13} & \dots & r_{1,n-1} & r_{1,n} \\ h^1_{21} & \bar{r}_{22} & r_{23} & \dots & r_{2,n-1} & r_{2,n} \\ 0 & 0 & r_{33} & \dots & r_{3,n-1} & r_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & r_{n-1,n-1} & r_{n-1,n} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & r_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & c^{32} & -s^{32} & & & \\ & s^{32} & c^{32} & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} h^1_{11} & h^1_{12} & \bar{r}_{13} & \dots & r_{1,n-1} & r_{1,n} \\ h^1_{21} & h^1_{22} & \bar{r}_{23} & \dots & r_{2,n-1} & r_{2,n} \\ 0 & h^1_{32} & \bar{r}_{33} & \dots & r_{3,n-1} & r_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & r_{n-1,n-1} & r_{n-1,n} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & r_{n,n} \end{pmatrix}$$

- tato Givensove rotace pracuje opět pouze s druhým a třetím sloupcem matice $\mathbb{R}\left(\mathbb{G}^{21}\right)^T$, nový nenulový prvek tak může vzniknout pouze na pozici prvku h^1_{32}

Hessenbergovy QR iterace - příklad

- jako poslední krok provádíme násobení matice $\mathbb{R}\left(\mathbb{G}^{21}\right)^T\left(\mathbb{G}^{32}\right)^T\ldots\left(\mathbb{G}^{n-1,n-2}\right)^T$ maticí $\left(\mathbb{G}^{n,n-1}\right)^T$
-

$$\mathbb{R}\left(\mathbb{G}^{21}\right)^T\left(\mathbb{G}^{32}\right)^T\ldots\left(\mathbb{G}^{n-1,n-2}\right)^T\left(\mathbb{G}^{n,n-1}\right)^T =$$

$$\begin{pmatrix} h^1_{11} & h^1_{12} & \bar{r}_{13} & \ldots & r_{1,n-1} & r_{1,n} \\ h^1_{21} & h^1_{22} & \bar{r}_{23} & \ldots & r_{2,n-1} & r_{2,n-1} \\ 0 & h^1_{32} & \bar{r}_{33} & \ldots & r_{3,n-1} & r_{3,n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & 0 & r_{n-1,n-1} & r_{n-1,n} \\ 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & r_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & c^{32} & -s^{32} \\ & & & s^{32} & c^{32} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} h^1_{11} & h^1_{12} & h^1_{13} & \ldots & h^1_{1,n-1} & h^1_{1,n} \\ h^1_{21} & h^1_{22} & h^1_{23} & \ldots & h^1_{2,n-1} & h^1_{2,n} \\ 0 & h^1_{32} & h^1_{33} & \ldots & h^1_{3,n-1} & h^1_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & 0 & h^1_{n-1,n-1} & h^1_{n-1,n} \\ 0 & \ldots & 0 & 0 & h^1_{n,n-1} & h^1_{n,n} \end{pmatrix}$$

- vidíme, že výsledná matice je opět v Hessenbergově tvaru

Výpočetní studie

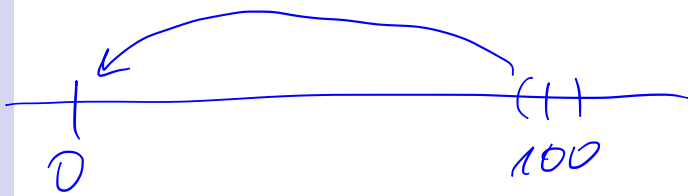
- metody pro výpočet kompletního spektra jsou implementovány v programu `eigenvalues`
  - `--input-file` – vstupní soubor s maticí
  - `--method` – použitá metod
    - `triangular`, `lr`, `qr`, `qr-hessenberg`
  - `--max-iterations n` – maximální možný počet provedených iterací
  - `--convergence-residue r` – hodnota kritéria pro zastavení výpočtu
  - `--verbose n`
    - nastavuje úroveň vypisovaných informací v průběhu výpočtu

Shrnutí a otázky

$$D^k L_y D^{-k} \xrightarrow{k \to \infty} I \qquad |\lambda_i| < |\lambda_j|$$

$$\underbrace{l_{ij} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^k}_{} \longrightarrow 0$$

- trojúhelníková metoda
- LR algoritmus
- **QR rozklad**
  - **Grammův-Schmidtův ortogonalizační proces**
  - **Householderovy transformace**
  - **Givensovy rotace**
- **QR algoritmus**
  - **Hessenbergovy iterace**
- **na čem závisí rychlost konvergence?**
- jak konvergenci urychlit?

$$\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right| \quad j < i$$

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \dots |\lambda_n|$$