

NLA: Een praktische implementatie van het QR algoritme

Nithin Govindarajan

KU Leuven

August 24, 2023

Wat wordt er behandeld?

- ▶ Lecture 29 in Trefethen&Boyd.
- ▶ Een selectie van oefeningen.

Probeer het eerst zelf te oplossen!

QR iteraties: nog meer interessante feiten

QR iteraties doet methoden van machten en inverse iteraties tegelijkertijd!

Let's see why...

QR iteraties: nog meer interessante feiten

Definieer $A^{(0)} = A$. Een aantal feiten op een rij:

- ▶ QR iteraties:

$$\begin{aligned}A^{(k-1)} &= Q^{(k)} R^{(k)} \\A^{(k)} &= R^{(k)} Q^{(k)}\end{aligned}$$

- ▶ Equivalent aan:

$$A^{(k)} = Q^{(k)T} A^{(k-1)} Q^{(k)}, \quad A^{(0)} = A.$$

- ▶ Definieer $\hat{Q}^{(k)} = Q^{(1)} Q^{(2)} \dots Q^{(k)}$:

$$\begin{aligned}A^{(k)} &= \left(Q^{(1)} Q^{(2)} \dots Q^{(k)} \right)^T A Q^{(1)} Q^{(2)} \dots Q^{(k)} \\&= \hat{Q}^{(k)T} A \hat{Q}^{(k)}\end{aligned}$$

QR iteraties: nog meer interessante feiten

Substitueer $A^{(k)} = \hat{Q}^{(k)T} A \hat{Q}^{(k)}$ in het QR iteraties formules:

$$\begin{aligned}\hat{Q}^{(k-1)T} A \hat{Q}^{(k-1)} &= Q^{(k)} R^{(k)} \\ \hat{Q}^{(k)T} A \hat{Q}^{(k)} &= R^{(k)} Q^{(k)}\end{aligned}$$

QR iteraties: nog meer interessante feiten

Doe de volgende algebraïsche manipulaties:

$$\begin{aligned}\hat{Q}^{(k-1)} \hat{Q}^{(k-1)T} A \hat{Q}^{(k-1)} &= \hat{Q}^{(k-1)} Q^{(k)} R^{(k)} \\ \hat{Q}^{(k)T} A \hat{Q}^{(k)} \hat{Q}^{(k)T} &= R^{(k)} Q^{(k)} \hat{Q}^{(k)T}\end{aligned}$$

QR iteraties: nog meer interessante feiten

Herken dat $\hat{Q}^{(k-1)} Q^{(k)} = \hat{Q}^{(k)}$ en $Q^{(k)} \hat{Q}^{(k)T} = \hat{Q}^{(k-1)T}$:

$$\begin{aligned} A \hat{Q}^{(k-1)} &= \hat{Q}^{(k)} R^{(k)} \\ \hat{Q}^{(k)T} A &= R^{(k)} \hat{Q}^{(k-1)T} \end{aligned}$$

QR iteraties: nog meer interessante feiten

Schrijf: $\hat{Q}^{(k)} = \begin{bmatrix} \hat{q}_1^{(k)} & \dots & \hat{q}_n^{(k)} \end{bmatrix}$ en $[R^{(k)}]_{ij} = r_{ij}^{(k)}$.

$$A\hat{Q}^{(k-1)} = \hat{Q}^{(k)}R^{(k)}$$

$$\hat{Q}^{(k)T}A = R^{(k)}\hat{Q}^{(k-1)T}$$

QR iteraties: nog meer interessante feiten

Let op dat $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch is, en observeer dat:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} r_{11}^{(k)} \hat{q}_1^{(k)} \end{pmatrix} &= A \hat{q}_1^{(k-1)} \\ A \begin{pmatrix} \frac{1}{r_{nn}^{(k)}} \hat{q}_n^{(k)} \end{pmatrix} &= \hat{q}_n^{(k-1)} \end{aligned}$$

Conclusies:

- ▶ De eerste vector $\hat{q}_1^{(k)}$ is de methoden van machten.
- ▶ De laatste vector $\hat{q}_n^{(k)}$ is inverse iteraties (met $\mu = 0$).

Hoe maken we het QR algoritme effectief?

QR iteraties:

$$A^{(k)} = R^{(k)} Q^{(k)}, \quad A^{(k-1)} = Q^{(k)} R^{(k)}$$

elementen:

- ▶ Reductie naar een Hessenberg matrix
- ▶ Het gebruik van “shifts”
- ▶ Het gebruik van deflatie (wordt niet besproken)

Reductie naar een Hessenberg matrix

Wat is een Hessenberg matrix?

- ▶ Alles onder de eerste subdiagonaal is nul, voorbeeld:

$$H = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}$$

- ▶ Symmetrische Hessenberg matrix = symmetrische tridiagonale matrix:

$$H = \begin{bmatrix} * & * & & & & \\ * & * & * & & & \\ & * & * & * & & \\ & & * & * & * & \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}$$

Reductie naar een Hessenberg matrix

QR algoritme:

$$A^{(k)} = R^{(k)} Q^{(k)}, \quad A^{(k-1)} = Q^{(k)} R^{(k)}$$

- ▶ Er bestaat een unitaire gelijkvormigheidstransformatie die elke matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ reduceert naar een Hessenberg matrix. Dus:

$$QAQ^* = H.$$

- ▶ In het geval van symmetrische matrices wordt H tri-diagonaal en symmetrisch.
- ▶ Als $A^{(k-1)}$ symmetrisch en tridiagonaal is, dat dan is ook $A^{(k)}$ symmetrisch en tridiagonaal. De rekenkost van één iteratie in het QR algoritme wordt ook aanzienlijk minder als $A^{(k-1)}$ een Hessenberg matrix is ¹.

¹Een vraag in het practicum!

Reductie naar een Hessenberg matrix

Hoe vinden we $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die A reduceert naar een Hessenberg matrix?

Householder reflecties!

Voor een symmetrische matrix:

$$\left[\begin{array}{c|c} 1 & \\ \hline & H(v) \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|cccccc} * & * & * & * & * & * \\ \hline * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} 1 & \\ \hline & H^*(v) \end{array} \right]$$

Reductie naar een Hessenberg matrix

Hoe vinden we $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die A reduceert naar een Hessenberg matrix?

Householder reflecties!

Voor een symmetrische matrix:

$$\left[\begin{array}{c|ccccc} * & * & & & & \\ \hline * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \end{array} \right]$$

Het gebruik van shifts

Stel dat $\mu^{(k)} \in \mathbb{R}$ een reeks van schattingen zijn van een eigenwaarde² van $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

QR iteraties met shift:

$$\begin{aligned} Q^{(k)} R^{(k)} &= A^{(k-1)} - \mu^{(k-1)} I_n \\ A^{(k)} &= R^{(k)} Q^{(k)} + \mu^{(k-1)} I_n \end{aligned}$$

²Hoe we die reeks kiezen, bepalen we later.

Bij gebruik van shifts, krijgen we:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} r_{11}^{(k)} \hat{q}_1^{(k)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} A - \mu^{(k-1)} I_n \end{pmatrix} \hat{q}_1^{(k-1)} \\ \begin{pmatrix} A - \mu^{(k-1)} I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{r_{nn}^{(k)}} \hat{q}_n^{(k)} \end{pmatrix} &= \hat{q}_n^{(k-1)} \end{aligned}$$

Toon dit aan.

Rayleigh quotiënt shift

- Gebruik Rayleigh quotient voor de keuze van $\mu^{(k-1)} \in \mathbb{R}$ in:

$$\left(A - \mu^{(k-1)} I_n\right) \left(\frac{1}{r_{nn}^{(k)}} \hat{q}_n^{(k)}\right) = \hat{q}_n^{(k-1)}.$$

- We krijgen dan:

$$\begin{aligned}\mu^{(k)} &= \hat{q}_n^{(k)T} A \hat{q}_n^{(k)} \\ &= e_n^T \hat{Q}^{(k)T} A \hat{Q}^{(k)} e_n \\ &= e_n^T A^{(k)} e_n \\ &= a_{nn}^{(k)}\end{aligned}$$

- $\mu^{(k)}$ krijgen we gratis mee in de QR iteraties!
- Orde van convergentie is 3.
- interessant om op te merken: het iteratief gedeelte is sneller dan de Hessenberg reductie.

Issues Rayleigh quotient shift

Neem het volgende voorbeeld:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$Q^{(1)}R^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$A^{(1)} = R^{(1)}Q^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = A$$

A heeft eigenwaarden 1 en -1. De schatting $\mu^{(k)} = 0$ zit er precies tussenin!

Oplossing: Wilkinson Shift

- ▶ Breek de symmetrie.
- ▶ Kies de dichtbijzijnde eigenwaarde van de 2 bij 2 submatrix:

$$B^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{(n-1)(n-1)}^{(k)} & a_{(n-1)n}^{(k)} \\ a_{n(n-1)}^{(k)} & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$