Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Факультет Вычислительной Математики и Кибернетики

Кафедра Математических Методов Прогнозирования

«Сравнение скорости вычисления собственных значений положительно определённых матриц при помощи QR алгоритма»

Выполнил:

студент 1 курса магистратуры 517 группы

Королев Николай Сергеевич

Преподаватель:

канд. техн. наук, доцент

Русол Андрей Владимирович

Москва, 2021

1 Постановка задачи

Исследовать способы ускорения вычисления собственных значений положительно определённых матриц.

1.1 Постановка задачи о вычислении собственных значений положительно определённой матрицы

Дана положительно определённая матрица A размера $n \times n$. Необходимо вычислить все n её собственных значений $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$.

2 QR алгоритм

Для нахождения всех собственных значений положительно определённой матрицы A можно воспользоваться QR алгоритмом, который выглядит следующим образом:

1. Обозначим $A_0 := A,\ k := 0$.
2. Представить матрицу A_k в виде произведения унитарной матрицы Q_k и верхнетреугольной матрицы R_k. (Произвести QR разложение матрицы A) $Q_k R_k = A_k$
3. Вычислить $A_{k+1} := R_k Q_k$
4. Увеличить k на единицу. $k := k + 1$
5. Повторить шаги 2-4 до тех пор пока внедиагональные элементы матрицы A_k не станут близкими к нулю.
6. Значения на диагонали матрицы A_k будут являться приближением собственными значениями матрицы A.

2.1 Доказательство корректности алгоритма

Заметим, что все матрицы A_k для $k = 0, 1, \ldots$ являются подобными, т.к. $A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k$, а значит их собственные значения совпадают.

Также для положительно определённой матрицы A известно [1], что внедиагональные элементы матрицы A_k будут стремиться к нулю при $k \to \infty$.

3 Вычислительные эксперименты

QR алгоритм был реализован тремя различными способами на языке Python 3 при помощи библиотеки Numpy для использования векторизации вычислений, после чего лучшая из имплементаций была ускорена при помощи JIT-компидятора Numba. Результаты приведены в таблице 1.

Таблица 1: ROC-AUC для различных разбиений выборки и различных моделей в эксперименте 1

3.1 Анализ полученных результатов

Полученные результаты показывают, что ансамбль промежуточных решений, построенных с использованием функции потерь (**??**), способен достаточно серьёзно увеличивать обобщающую способность предсказания в сравнении с отдельными нейронными сетями. Также замечен эффект улучшения качества отдельных нейронных сетей, построенных данным методом. Попробуем объяснить данный эффект. Предполагается, что он вызван тем, что в случае нахождения недостаточно минимизирующего параметра θ_1 для нейронной сети $\hat{f}_1(x, \theta_1)$, последующие нейронные сети находят параметры θ_i на отдалении от θ_1. Следовательно, θ_i не находится в области θ_1, в которой функция потерь не достигает своего минимального значения.

4 Заключение

В процессе выполнения работы были получены следующие результаты:

- Был разработан метод повышения эффективности обучения, основанный на ансамбле промежуточных решений.

- Были проведены вычислительные эксперименты, которые показали возможную применимость данного метода для улучшения качества нейронных сетей, решающих задачу классификации на реальных данных.

- В ходе выполнения эксперимента было замечено улучшения качества работы отдельных нейронных сетей.

Список литературы

[1] *Olver Peter J.* Orthogonal bases and the QR algorithm. — 2010. — Pp. 25–26.