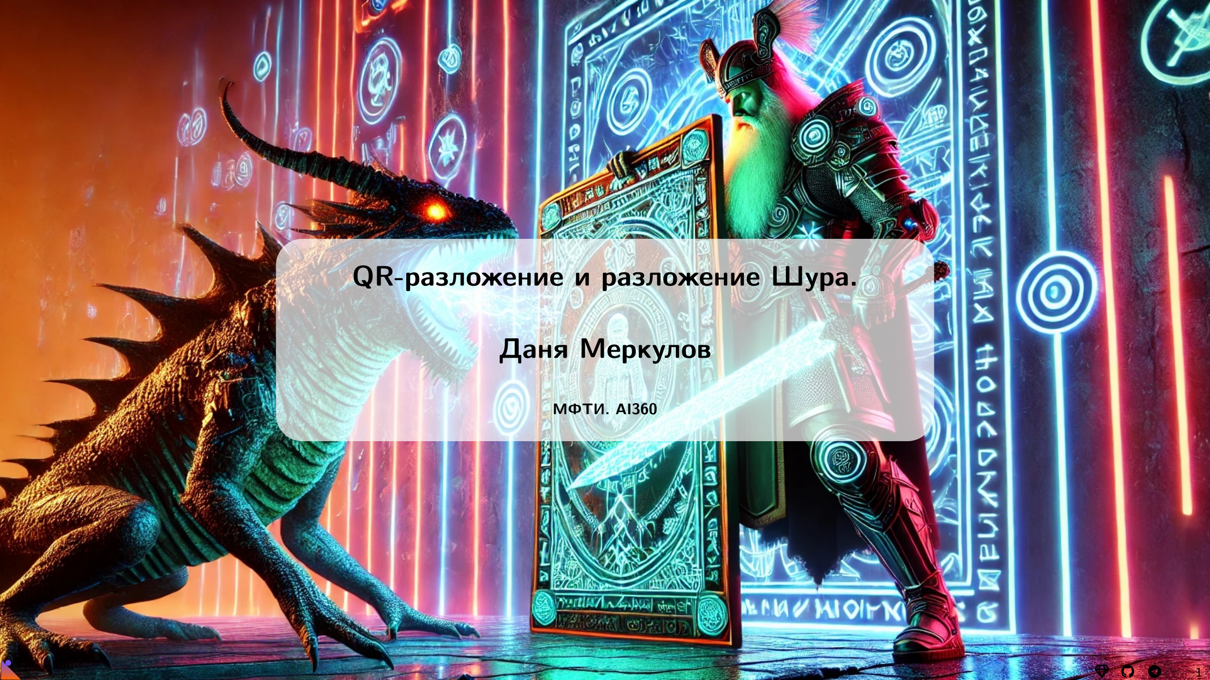


QR-разложение и разложение Шура.

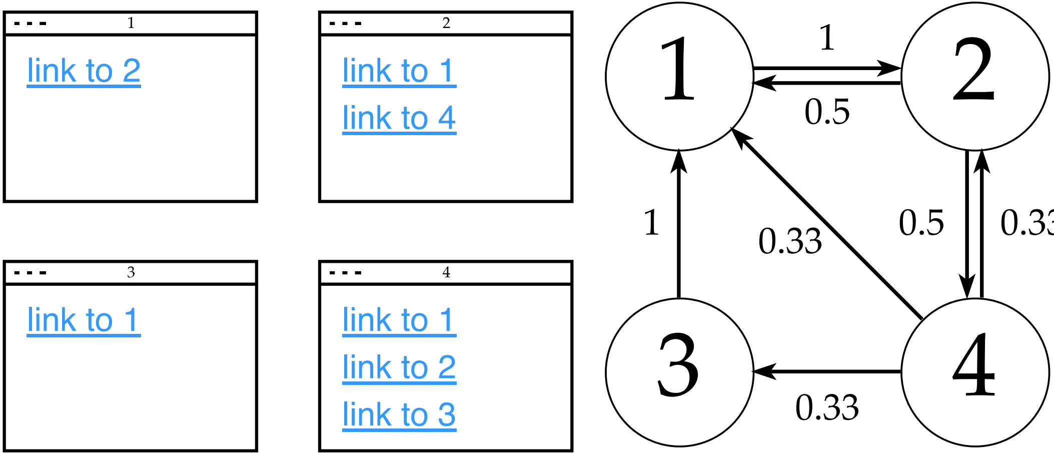
Даня Меркулов

МФТИ. AI360

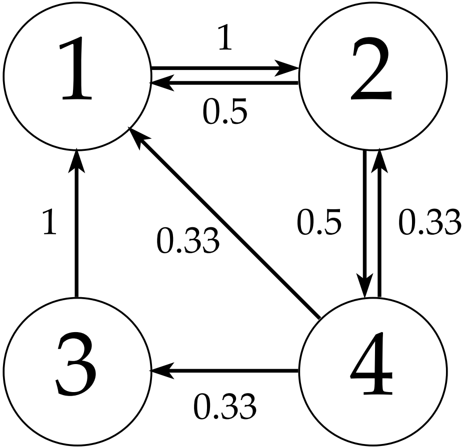
PageRank

PageRank

Рассмотрим простой пример. Предположим, что у нас есть 4 веб-сайта с некоторыми ссылками. Наша цель --- понять, насколько важен каждый из этих сайтов. Очевидно, что мы можем переформулировать эту проблему в терминах ориентированных графов. Здесь каждый узел представляет веб-сайт, а каждое ребро описывает ссылку с одного сайта на другой.



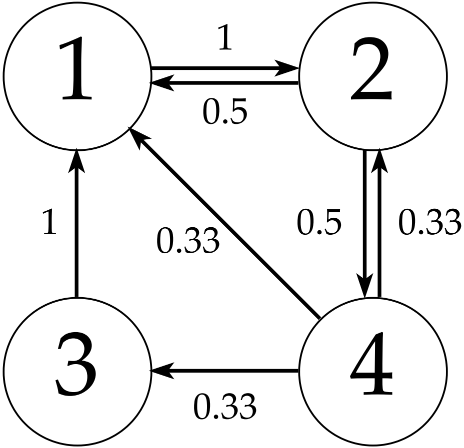
PageRank



Таким образом, мы можем ввести матрицу переходов A:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{3} \\ 1 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

PageRank



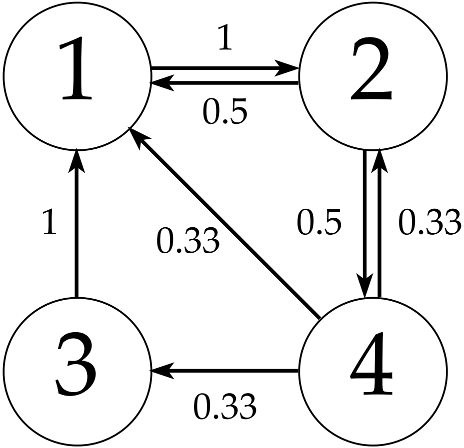
Таким образом, мы можем ввести матрицу переходов A:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{3} \\ 1 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Давайте введём вектор PageRank $\mathbf{x}$, который описывает важность каждого веб-сайта.

$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^\top$, где x_i - важность i-го веб-сайта

PageRank



Таким образом, мы можем ввести матрицу переходов A:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{3} \\ 1 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Давайте введём вектор PageRank $\mathbf{x}$, который описывает важность каждого веб-сайта.

$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^\top$, где x_i - важность i-го веб-сайта

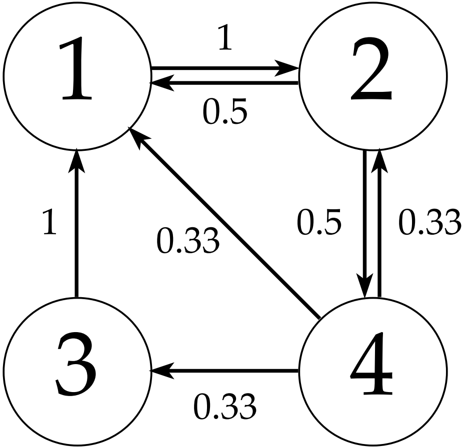
Предположим, что начальная важность равномерно распределена между всеми узлами. Тогда:

$$\mathbf{x}^0 = (0.25, 0.25, 0.25, 0.25)^\top$$

Каждая входящая ссылка увеличивает важность узла. Таким образом, этот обновление может быть записано как умножение матрицы на вектор:

$$\mathbf{x}^1 = A \cdot \mathbf{x}^0 = (0.46, 0.33, 0.08, 0.125)^\top$$

PageRank



Повторяя те же операции, мы можем легко увидеть сходимость:

$$\mathbf{x}^2 = A \cdot \mathbf{x}^1 = (0.29, 0.50, 0.04, 0.17)^\mathsf{T}$$

$$\mathbf{x}^3 = A \cdot \mathbf{x}^2 = (0.35, 0.35, 0.06, 0.25)^\mathsf{T}$$

$$\ldots$$

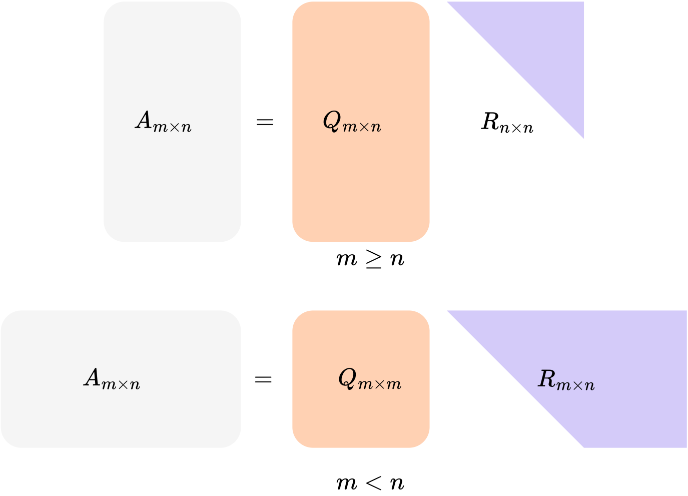
$$\mathbf{x}^{14} = A \cdot \mathbf{x}^{13} = (0.33, 0.40, 0.07, 0.20)^\mathsf{T}$$

$$\mathbf{x}^{15} = A \cdot \mathbf{x}^{14} = (0.33, 0.40, 0.07, 0.20)^\mathsf{T}$$

Выполните упражнение PageRank.

QR-разложение

QR-разложение матрицы



Для произвольной матрицы $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ существует разложение вида:

$$A = QR,$$

где $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ - ортогональная матрица ($Q^TQ = QQ^T = I$), а $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$ - верхнетреугольная матрица. В случае, когда $m > n$, матрица Q может быть усечена до размера $m \times n$ с сохранением ортогональности столбцов. Если зафиксировать все диагональные элементы матрицы R, то разложение становится единственным.

Процесс Грама-Шмидта

Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.

Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \ldots, d_{n-1}$.

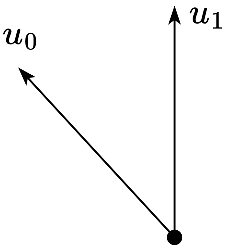


Рис. 1: Иллюстрация процесса Грама-Шмидта

Процесс Грама-Шмидта

Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.

Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \ldots, d_{n-1}$.

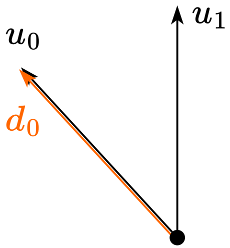


Рис. 2: Иллюстрация процесса Грама-Шмидта

Процесс Грама-Шмидта

Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.

Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \ldots, d_{n-1}$.

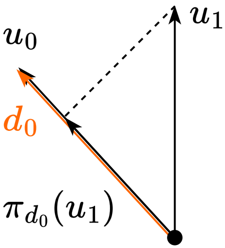


Рис. 3: Иллюстрация процесса Грама-Шмидта

Процесс Грама-Шмидта

Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \dots, u_{n-1}$.

Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \dots, d_{n-1}$.

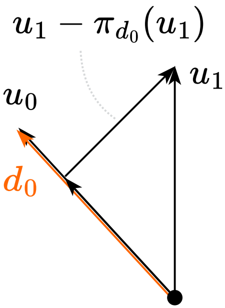


Рис. 4: Иллюстрация процесса Грама-Шмидта

Процесс Грама-Шмидта

Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.

Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \ldots, d_{n-1}$.

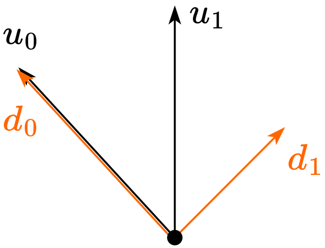
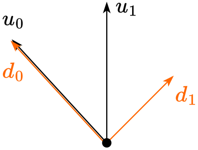
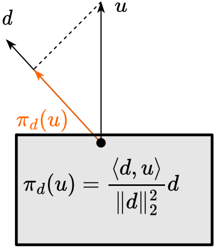


Рис. 5: Иллюстрация процесса Грама-Шмидта

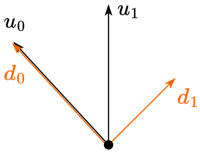
Процесс Грама-Шмидта

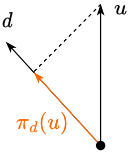
Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.





Процесс Грама-Шмидта



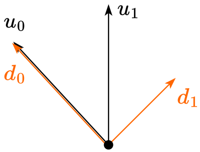


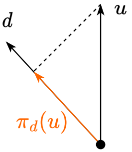
$$\pi_d(u) = \frac{\langle d, u \rangle}{\|d\|_2^2} d$$

Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.
Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \ldots, d_{n-1}$.

$$d_0 = u_0$$

Процесс Грама-Шмидта





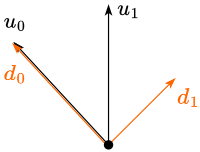
$$\pi_d(u) = \frac{\langle d, u \rangle}{\|d\|_2^2} d$$

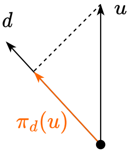
Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.

Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \ldots, d_{n-1}$.

$$d_0 = u_0$$
$$d_1 = u_1 - \pi_{d_0}(u_1)$$

Процесс Грама-Шмидта



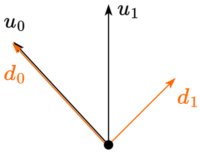


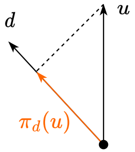
$$\pi_d(u) = \frac{\langle d, u \rangle}{\|d\|_2^2} d$$

Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.
Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \ldots, d_{n-1}$.

$$d_0 = u_0$$
$$d_1 = u_1 - \pi_{d_0}(u_1)$$
$$d_2 = u_2 - \pi_{d_0}(u_2) - \pi_{d_1}(u_2)$$

Процесс Грама-Шмидта



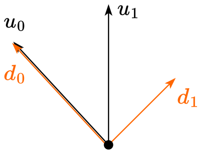


$$\pi_d(u) = \frac{\langle d, u \rangle}{\|d\|_2^2} d$$

Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.
Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \ldots, d_{n-1}$.

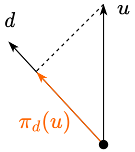
$$\begin{aligned}
d_0 &= u_0 \\
d_1 &= u_1 - \pi_{d_0}(u_1) \\
d_2 &= u_2 - \pi_{d_0}(u_2) - \pi_{d_1}(u_2) \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Процесс Грама-Шмидта



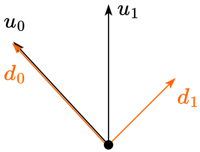
Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.
Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \ldots, d_{n-1}$.

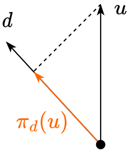
$$
\begin{aligned}
d_0 &= u_0 \\
d_1 &= u_1 - \pi_{d_0}(u_1) \\
d_2 &= u_2 - \pi_{d_0}(u_2) - \pi_{d_1}(u_2) \\
&\vdots \\
d_k &= u_k - \sum_{i=0}^{k-1} \pi_{d_i}(u_k)
\end{aligned}
$$



$$\pi_d(u) = \frac{\langle d, u \rangle}{\|d\|_2^2} d$$

Процесс Грама-Шмидта





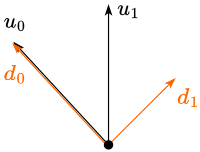
$$\pi_d(u) = \frac{\langle d, u\rangle}{\|d\|_2^2} d$$

Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \ldots, u_{n-1}$.
Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \ldots, d_{n-1}$.

$$\begin{aligned}
d_0 &= u_0 \\
d_1 &= u_1 - \pi_{d_0}(u_1) \\
d_2 &= u_2 - \pi_{d_0}(u_2) - \pi_{d_1}(u_2) \\
&\vdots \\
d_k &= u_k - \sum_{i=0}^{k-1} \pi_{d_i}(u_k)
\end{aligned}$$

Процесс Грама-Шмидта

Вход: n линейно независимых векторов $u_0, \dots, u_{n-1}$.
Выход: n линейно независимых попарно ортогональных векторов $d_0, \dots, d_{n-1}$.

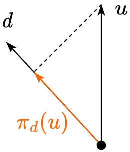


$$\begin{pmatrix} | & | & | & | & | \\ | & | & | & | & | \\ u_0 & \cdots & & \cdots & u_{n-1} \end{pmatrix}$$

$$d_0 = u_0$$
$$d_1 = u_1 - \pi_{d_0}(u_1)$$
$$d_2 = u_2 - \pi_{d_0}(u_2) - \pi_{d_1}(u_2)$$
$$\vdots$$
$$d_k = u_k - \sum_{i=0}^{k-1} \pi_{d_i}(u_k)$$

q_k

$$d_k := \frac{d_k}{\|d_k\|}$$



$$\boxed{d_k = u_k + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_{ik} d_i \qquad \beta_{ik} = -\frac{\langle d_i, u_k \rangle}{\langle d_i, d_i \rangle}} \tag{1}$$

$$\pi_d(u) = \frac{\langle d, u \rangle}{\|d\|_2^2} d$$

$$Q = \begin{pmatrix} | & | & | & | & | \\ | & | & | & | & | \\ q_0 & \cdots & & \cdots & q_{n-1} \end{pmatrix}$$

$$Q^T Q = I$$

QR-разложение с помощью процесса Грама-Шмидта

Пусть дана матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, у которой столбцы - это векторы

$$A = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \dots & u_n \end{bmatrix}.$$

Если мы последовательно применим процесс Грамма-Шмидта к этим столбцам:

1. На шаге k мы удаляем из столбца u_k проекции на все ранее полученные ортогональные векторы $d_1, \dots, d_{k-1}$.

QR-разложение с помощью процесса Грама-Шмидта

Пусть дана матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, у которой столбцы - это векторы

$$
A = [\, u_1 \;\; u_2 \;\; \dots \;\; u_n \,].
$$

Если мы последовательно применим процесс Грамма-Шмидта к этим столбцам:

1. На шаге k мы удаляем из столбца u_k проекции на все ранее полученные ортогональные векторы $d_1, \dots, d_{k-1}$.
2. Нормируем результат и получаем ортонормированный вектор $q_k = \dfrac{d_k}{\|d_k\|}$.

QR-разложение с помощью процесса Грама-Шмидта

Пусть дана матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, у которой столбцы - это векторы

$$A = [\, u_1 \;\; u_2 \;\; \dots \;\; u_n \,].$$

Если мы последовательно применим процесс Грамма-Шмидта к этим столбцам:

1. На шаге k мы удаляем из столбца u_k проекции на все ранее полученные ортогональные векторы $d_1, \dots, d_{k-1}$.
2. Нормируем результат и получаем ортонормированный вектор $q_k = \dfrac{d_k}{\|d_k\|}$.

QR-разложение с помощью процесса Грама-Шмидта

Пусть дана матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, у которой столбцы - это векторы

$$A = [\, u_1 \;\; u_2 \;\; \dots \;\; u_n \,].$$

Если мы последовательно применим процесс Грамма-Шмидта к этим столбцам:

1. На шаге k мы удаляем из столбца u_k проекции на все ранее полученные ортогональные векторы $d_1, \dots, d_{k-1}$.
2. Нормируем результат и получаем ортонормированный вектор $q_k = \dfrac{d_k}{\|d_k\|}$.

Таким образом образуется ортонормированный набор столбцов

$$Q = [\, q_1 \;\; q_2 \;\; \dots \;\; q_n \,].$$

А коэффициенты, которые появляются при разложении каждого u_k по векторам $q_1, \dots, q_k$, образуют верхнетреугольную матрицу R:

$$\boxed{u_k = \underbrace{\langle q_1, u_k \rangle}_{r_{1k}} q_1 + \underbrace{\langle q_2, u_k \rangle}_{r_{2k}} q_2 + \dots + \underbrace{\langle q_k, u_k \rangle}_{r_{k\,k}} q_k.}$$

Все элементы $r_{ij} = 0$ при $j < i$, и в итоге получаем **QR-разложение**:

$$\boxed{A = QR,}$$

где Q - ортонормированная (ортогональная) матрица, а R - верхняя треугольная.

матричный вид
GS

Модификация процесса Грама-Шмидта

- Процесс Грама-Шмидта может быть **численно неустойчив**, то есть векторы могут перестать быть ортогональными в машинной арифметике, особенно если норма q_k мала. Это явление называется **потерей ортогональности**.

Модификация процесса Грама-Шмидта

- Процесс Грама-Шмидта может быть **численно неустойчив**, то есть векторы могут перестать быть ортогональными в машинной арифметике, особенно если норма q_k мала. Это явление называется **потерей ортогональности**.
- Существует метод **modified Gram-Schmidt** (MGS). Вместо того, чтобы сразу вычитать все проекции:

$$q_k := a_k \; - \; (a_k, q_1)q_1 \; - \; \ldots \; - \; (a_k, q_{k-1})q_{k-1},$$

мы делаем это **поэтапно**:

$$\begin{aligned} q_k &:= a_k, \\ q_k &:= q_k - (q_k,\, q_1)\, q_1, \\ q_k &:= q_k - (q_k,\, q_2)\, q_2, \\ &\;\;\vdots \end{aligned}$$

Модификация процесса Грама-Шмидта

- Процесс Грама-Шмидта может быть **численно неустойчив**, то есть векторы могут перестать быть ортогональными в машинной арифметике, особенно если норма q_k мала. Это явление называется **потерей ортогональности**.
- Существует метод **modified Gram-Schmidt** (MGS). Вместо того, чтобы сразу вычитать все проекции:

$$q_k := a_k - (a_k, q_1)q_1 - \ldots - (a_k, q_{k-1})q_{k-1}, \quad \leftarrow \text{GS}$$

  мы делаем это **поэтапно**:

$$\begin{aligned} q_k &:= a_k, \\ q_k &:= q_k - (q_k,\, q_1)\, q_1, \\ q_k &:= q_k - (q_k,\, q_2)\, q_2, \\ &\vdots \end{aligned} \quad \leftarrow \text{MGS}$$

- В точной арифметике результат совпадает со стандартной процедурой Грама-Шмидта, но в машинной арифметике это даёт **совершенно другой** (намного более устойчивый) результат.

Модификация процесса Грама-Шмидта

- Процесс Грама-Шмидта может быть **численно неустойчив**, то есть векторы могут перестать быть ортогональными в машинной арифметике, особенно если норма q_k мала. Это явление называется **потерей ортогональности**.
- Существует метод **modified Gram-Schmidt** (MGS). Вместо того, чтобы сразу вычитать все проекции:

$$q_k := a_k \; - \; (a_k, q_1)q_1 \; - \; \ldots \; - \; (a_k, q_{k-1})q_{k-1},$$

мы делаем это **поэтапно**:

$$\begin{aligned} q_k &:= a_k, \\ q_k &:= q_k - (q_k,\, q_1)\, q_1, \\ q_k &:= q_k - (q_k,\, q_2)\, q_2, \\ &\;\vdots \end{aligned}$$

- В точной арифметике результат совпадает со стандартной процедурой Грама-Шмидта, но в машинной арифметике это даёт **совершенно другой** (намного более устойчивый) результат.
- Сложность модифицированного процесса Грама-Шмидта составляет $\mathcal{O}(n^2 m)$ операций.

Упражнение

Выполните упражнение Модифицированный процесс Грама-Шмидта.

Алгоритм Хаусхолдера для построения QR-разложения

- Используя полученное свойство мы можем сделать произвольную матрицу A нижней треугольной:

$$H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix}$$

Алгоритм Хаусхолдера для построения QR-разложения

- Используя полученное свойство мы можем сделать произвольную матрицу A нижней треугольной:

$$
H_2H_1A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix}
$$

- Затем находим $H_3 = \begin{bmatrix} I_2 & \\ & \widetilde{H}_3 \end{bmatrix}$ такую, что

$$
\widetilde{H}_3 \begin{bmatrix} \times \\ \times \\ \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.
$$

Алгоритм Хаусхолдера для построения QR-разложения

- Используя полученное свойство мы можем сделать произвольную матрицу A нижней треугольной:

$$
H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix}
$$

- Затем находим $H_3 = \begin{bmatrix} I_2 & \\ & \widetilde{H}_3 \end{bmatrix}$ такую, что

$$
\widetilde{H}_3 \begin{bmatrix} \times \\ \times \\ \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.
$$

- Получаем

$$
H_3 H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix}
$$

Алгоритм Хаусхолдера для построения QR-разложения

- Используя полученное свойство мы можем сделать произвольную матрицу A нижней треугольной:

$$H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix}$$

- Затем находим $H_3 = \begin{bmatrix} I_2 & \\ & \widetilde{H}_3 \end{bmatrix}$ такую, что

$$\widetilde{H}_3 \begin{bmatrix} \times \\ \times \\ \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- Получаем

$$H_3 H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix}$$

- Аналогично находим H_4 и получаем верхнюю треугольную матрицу.

Алгоритм Хаусхолдера для построения QR-разложения

- Используя полученное свойство мы можем сделать произвольную матрицу A нижней треугольной:

$$
H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix}
$$

- Затем находим $H_3 = \begin{bmatrix} I_2 & \\ & \widetilde{H}_3 \end{bmatrix}$ такую, что

$$
\widetilde{H}_3 \begin{bmatrix} \times \\ \times \\ \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.
$$

- Получаем

$$
H_3 H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix}
$$

- Аналогично находим H_4 и получаем верхнюю треугольную матрицу.
- Так как произведение ортогональных и обратная к ортогональной матрицы являются ортогональными матрицами, мы получаем **следствие:** (QR-разложение) Любая $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ может быть представлена как

$$
A = QR,
$$

где Q - ортогональная и R - верхняя треугольная. См. постер, каковы размеры Q и R для $n > m$ и $n < m$.

Матрица вращения Гивенса (Якоби)

- Матрица вращения Гивенса (Якоби) - это ортогональная матрица, которая используется для вращения вектора в плоскости на угол α. Она имеет следующий вид:

$$G = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}$$

Легко проверить, что $G^T G = GG^T = I$, то есть матрица является ортогональной.

Матрица вращения Гивенса (Якоби)

- Матрица вращения Гивенса (Якоби) - это ортогональная матрица, которая используется для вращения вектора в плоскости на угол α. Она имеет следующий вид:

$$G = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}$$

  Легко проверить, что $G^TG = GG^T = I$, то есть матрица является ортогональной.

- Для общего случая размерности n мы выбираем две координаты (i, j) и выполняем вращение вектора x только в этой плоскости:

$$x' = Gx,$$

  где изменяются только i-я и j-я координаты:

$$x'_i = x_i\cos\alpha - x_j\sin\alpha, \quad x'_j = x_i\sin\alpha + x_j\cos\alpha,$$

  при этом остальные x_k остаются неизменными.

Матрица вращения Гивенса (Якоби)

- Матрица вращения Гивенса (Якоби) - это ортогональная матрица, которая используется для вращения вектора в плоскости на угол α. Она имеет следующий вид:

$$G = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}$$

  Легко проверить, что $G^T G = GG^T = I$, то есть матрица является ортогональной.

- Для общего случая размерности n мы выбираем две координаты (i, j) и выполняем вращение вектора x только в этой плоскости:

$$x' = Gx,$$

  где изменяются только i-я и j-я координаты:

$$x'_i = x_i \cos\alpha - x_j \sin\alpha, \quad x'_j = x_i \sin\alpha + x_j \cos\alpha,$$

  при этом остальные x_k остаются неизменными.

- Чтобы обнулить j-ю координату вектора, выбираем угол α так, что:

$$\cos\alpha = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, \quad \sin\alpha = -\frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}$$

Матрица вращения Гивенса (Якоби)

- Матрица вращения Гивенса (Якоби) - это ортогональная матрица, которая используется для вращения вектора в плоскости на угол α. Она имеет следующий вид:

$$G = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}$$

  Легко проверить, что $G^T G = G G^T = I$, то есть матрица является ортогональной.

- Для общего случая размерности n мы выбираем две координаты (i, j) и выполняем вращение вектора x только в этой плоскости:

$$x' = Gx,$$

  где изменяются только i-я и j-я координаты:

$$x'_i = x_i \cos\alpha - x_j \sin\alpha, \quad x'_j = x_i \sin\alpha + x_j \cos\alpha,$$

  при этом остальные x_k остаются неизменными.

- Чтобы обнулить j-ю координату вектора, выбираем угол α так, что:

$$\cos\alpha = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, \quad \sin\alpha = -\frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}$$

- Применяя последовательно матрицы Гивенса, можно привести матрицу к верхнетреугольному виду: для этого нужно $n - 1$ вращений, чтобы обнулить элементы под главной диагональю в каждом столбце.

QR через вращения Гивенса

Также мы можем сделать матрицу верхнетреугольной с помощью вращений Гивенса:

$$
\begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ * & \times & \times \\ * & \times & \times \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} * & \times & \times \\ * & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & * & \times \\ 0 & * & \times \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \end{bmatrix}
$$

Вращения Гивенса vs. отражения Хаусхолдера

- Отражения Хаусхолдера полезны для плотных матриц (сложность приблизительно в два раза меньше, чем для Якоби) и мы должны обнулить большое количество элементов.

Вращения Гивенса vs. отражения Хаусхолдера

- Отражения Хаусхолдера полезны для плотных матриц (сложность приблизительно в два раза меньше, чем для Якоби) и мы должны обнулить большое количество элементов.
- Вращения Гивенса более подходят для разреженных матриц или параллельных вычислений, так как они действуют локально на элементах.

Упражнение: QR-разложение вектора $(1,2)$

Рассмотрим вектор

$$a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

$$a = \frac{a}{\|a\|} \cdot \|a\|$$

$$\underset{Q}{\frac{a}{\|a\|}} \quad \underset{R}{\|a\|}$$

$$A = a = \underset{2\times 1}{} = \underset{2\times 1}{Q} \; \underset{1\times 1}{R}$$

$$\boxed{q_1}$$

можно так

$$q_2 = ?$$

$$\|q_2\| = 1 \qquad q_2 \perp q_1$$

Упражнение: QR-разложение вектора $(1, 2)$

Рассмотрим вектор

$$a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{5} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Решение:

1. Вычисляем норму вектора:

$$\|a\| = \sqrt{1^2 + 2^2} = \sqrt{5}.$$

$$a = Q_{2\times 2} R_{2\times 1}$$

$$R = \begin{pmatrix} \|a\| \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & ? \; -\frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \cdot \; \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}$$

Упражнение: QR-разложение вектора $(1, 2)$

Рассмотрим вектор

$$a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Решение:

1. Вычисляем норму вектора:

$$\|a\| = \sqrt{1^2 + 2^2} = \sqrt{5}.$$

2. Получаем ортонормированный вектор:

$$q_1 = \frac{a}{\|a\|} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Упражнение: QR-разложение вектора $(1, 2)$

Рассмотрим вектор

$$a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Решение:

1. Вычисляем норму вектора:

$$\|a\| = \sqrt{1^2 + 2^2} = \sqrt{5}.$$

2. Получаем ортонормированный вектор:

$$q_1 = \frac{a}{\|a\|} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

3. Поскольку вектор один, то QR-разложение имеет вид:

$$a = Q \cdot R,$$

где

$$Q = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad R = \sqrt{5}.$$

Упражнение: QR-разложение вектора $(1, 2, 3)$

Рассмотрим вектор

$$a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Упражнение: QR-разложение вектора $(1, 2, 3)$

Рассмотрим вектор

$$a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Решение:

1. Вычисляем норму вектора:

$$\|a\| = \sqrt{1^2 + 2^2 + 3^2} = \sqrt{14}.$$

$$Q = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} \frac{a}{\|a\|} & \begin{matrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{matrix} \end{pmatrix} \\ \quad u_1 \quad\; u_2 \quad\; u_3 \end{array}$$

$$R = \begin{pmatrix} \sqrt{14} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$d_0 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{14} \\ 2/\sqrt{14} \\ 3/\sqrt{14} \end{pmatrix}$$

Упражнение: QR-разложение вектора $(1, 2, 3)$

Рассмотрим вектор

$$a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Решение:

1. Вычисляем норму вектора:

$$\|a\| = \sqrt{1^2 + 2^2 + 3^2} = \sqrt{14}.$$

$$d_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \left(\frac{1}{\sqrt{14}}\right) \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} \\ 2/\sqrt{14} \\ 3/\sqrt{14} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 13/14 \\ -2/14 \\ -3/14 \end{pmatrix} \Big/ \|d_1\|$$

Упражнение: QR-разложение вектора $(1, 2, 3)$

Рассмотрим вектор

$$a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Решение:

1. Вычисляем норму вектора:

$$\|a\| = \sqrt{1^2 + 2^2 + 3^2} = \sqrt{14}.$$

2. Получаем ортонормированный вектор:

$$q_1 = \frac{a}{\|a\|} = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Упражнение: QR-разложение вектора $(1, 2, 3)$

Рассмотрим вектор

$$a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Решение:

1. Вычисляем норму вектора:
$$\|a\| = \sqrt{1^2 + 2^2 + 3^2} = \sqrt{14}.$$
2. Получаем ортонормированный вектор:
$$q_1 = \frac{a}{\|a\|} = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$
3. Так как вектор один, то имеем:
$$a = Q \cdot R,$$
где
$$Q = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad R = \sqrt{14}.$$

Разложение Шура

Разложение Шура

Для произвольной квадратной матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ существует разложение:

$$
A = UTU^*,
$$

где U - унитарная матрица, T - верхняя треугольная матрица с собственными числами матрицы A на главной диагонали.

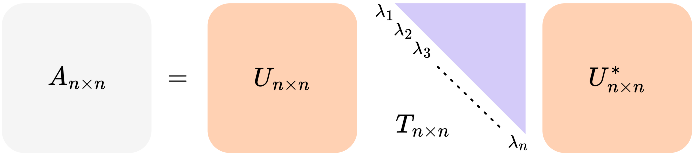


Рис. 6: Разложение Шура матрицы A

QR-алгоритм

QR-алгоритм выглядит следующим образом:

1. Начинаем с матрицы $A_0 = A$

QR-алгоритм

QR-алгоритм выглядит следующим образом:

1. Начинаем с матрицы $A_0 = A$
2. Для $k = 0, 1, 2, \ldots$:

QR-алгоритм

QR-алгоритм выглядит следующим образом:

1. Начинаем с матрицы $A_0 = A$
2. Для $k = 0, 1, 2, \ldots$:
    - Вычисляем QR-разложение: $A_k = Q_k R_k$

QR-алгоритм

QR-алгоритм выглядит следующим образом:

1. Начинаем с матрицы $A_0 = A$
2. Для $k = 0, 1, 2, \dots$:
   - Вычисляем QR-разложение: $A_k = Q_k R_k$
   - Формируем следующую итерацию: $A_{k+1} = R_k Q_k$

QR-алгоритм

QR-алгоритм выглядит следующим образом:

1. Начинаем с матрицы $A_0 = A$
2. Для $k = 0, 1, 2, \ldots$:
   - Вычисляем QR-разложение: $A_k = Q_k R_k$
   - Формируем следующую итерацию: $A_{k+1} = R_k Q_k$

QR-алгоритм

QR-алгоритм выглядит следующим образом:

1. Начинаем с матрицы $A_0 = A$
2. Для $k = 0, 1, 2, \ldots$:
   - Вычисляем QR-разложение: $A_k = Q_k R_k$
   - Формируем следующую итерацию: $A_{k+1} = R_k Q_k$

Для симметричных матриц этот процесс сходится к диагональной матрице, содержащей собственные числа. Для произвольных матриц он сходится к верхнетреугольной матрице, где диагональные элементы являются собственными числами исходной матрицы.

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k = Q_k^{\top} A_k Q_k,$$

- Алгоритм сходится последовательно от старших собственных чисел к младшим, 2-3 итерации на одно собственное число.

QR-алгоритм

QR-алгоритм выглядит следующим образом:

1. Начинаем с матрицы $A_0 = A$
2. Для $k = 0, 1, 2, \dots$:
   - Вычисляем QR-разложение: $A_k = Q_k R_k$
   - Формируем следующую итерацию: $A_{k+1} = R_k Q_k$

Для симметричных матриц этот процесс сходится к диагональной матрице, содержащей собственные числа. Для произвольных матриц он сходится к верхнетреугольной матрице, где диагональные элементы являются собственными числами исходной матрицы.

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k = Q_k^\top A_k Q_k,$$

- Алгоритм сходится последовательно от старших собственных чисел к младшим, 2-3 итерации на одно собственное число.
- 1 итерация = подсчёт QR-разложения $\mathcal{O}(n^3)$ + умножение матриц $\mathcal{O}(n^3)$. Наивная сложность QR-алгоритма составляет $\mathcal{O}(n^4)$.

QR-алгоритм

QR-алгоритм выглядит следующим образом:

1. Начинаем с матрицы $A_0 = A$
2. Для $k = 0, 1, 2, \ldots$:
   - Вычисляем QR-разложение: $A_k = Q_k R_k$
   - Формируем следующую итерацию: $A_{k+1} = R_k Q_k$

Для симметричных матриц этот процесс сходится к диагональной матрице, содержащей собственные числа. Для произвольных матриц он сходится к верхнетреугольной матрице, где диагональные элементы являются собственными числами исходной матрицы.

$$
A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k = Q_k^{\top} A_k Q_k,
$$

- Алгоритм сходится последовательно от старших собственных чисел к младшим, 2-3 итерации на одно собственное число.
- 1 итерация = подсчёт QR-разложения $\mathcal{O}(n^3)$ + умножение матриц $\mathcal{O}(n^3)$. Наивная сложность QR-алгоритма составляет $\mathcal{O}(n^4)$.
- На практике используются различные стратегии ускорения сходимости до $\mathcal{O}(n^3)$. Например, приведение матрицы к форме Гессенберга ($\mathcal{O}(n^3)$), QR разложение которой строится за $\mathcal{O}(n^2)$ итераций. Кроме того, используются сдвиги, которые позволяют ускорить сходимость.

QR-алгоритм