

Матричные вычисления

По лекциям Максима Рахубы

Содержание

1	О курсе	4
2	Основы матричного анализа	4
2.1	Векторные нормы	4
2.1.1	Разреженность в L1-норме	4
2.1.2	Скалярное произведение	5
2.1.3	Унитарная инвариантность L2-нормы	5
2.2	Матричные нормы	5
2.3	Разложение Шура	6
2.4	Нормальные матрицы	7
3	Малоранговое приближение матриц	7
3.1	Разделение переменных и скелетное разложение	7
3.2	SVD	8
3.3	Ортопроектор	9
3.4	Простейший рандомизированный алгоритм	10
4	Малоранговое приближение матриц — 2	10
4.1	Скелетная аппроксимация матриц	10
4.2	ALS алгоритм	11
5	Малоранговая аппроксимация многомерных массивов (тензоров)	12
5.1	Кронекерово произведение	12
5.2	Внешнее (тензорное) произведение	14
5.3	Разложение Таккера	15
6	QR-разложение и метод наименьших квадратов	16
6.1	QR-разложение	16
6.1.1	Ортогонализация Грамма-Шмидта	16
6.1.2	Отражения Хаусхолдера	16
6.1.3	Вращения Гивенса	18
6.2	Метод наименьших квадратов	18
6.2.1	Полноранговый случай	18
6.2.2	$\text{rank } A \leq n$	19

7	Быстро умножаем векторы на матрицы	19
7.1	Быстрое преобразование Фурье	19
7.2	Циркулянты	20
7.3	Двухуровневый циркулянт	21
7.4	Матрицы Тёплица	21
8	Умножение матриц и вычислительная устойчивость	21
8.1	Сложность матричного умножения	21
8.2	Метод Штрассена	22
8.2.1	Вывод метода Штрассена	22
8.3	Иерархия памяти	22
8.4	Машинные числа	22
8.5	Машинные числа: обусловленность	22
9	Примеры решения линейных систем с плотными матрицами	23
9.1	LU-разложение	23
9.1.1	Связь LU-разложения и метода исключения Гаусса	25
9.2	Выбор ведущего элемента	25
9.3	Разложение Халецкого	26
10	Прямые методы решения линейных систем с большими разреженными матри-	26
	цами	
10.1	Формула Шермана-Моррисона	26
10.2	Форматы представления разреженных матриц	27
10.2.1	COO формат	27
10.2.2	lil (list of lists)	27
10.2.3	CSR (compressed sparse row)	27
10.3	Заполнение в L и U	28
10.4	Алгоритм поиска P	28
10.4.1	Алгоритм Катхилла-Макки	28
10.4.2	Minimal degree ordering	28
11	Итерационные методы решения линейных уравнений (?)	28
11.1	Метод простой итерации	28
11.2	Метод наискорейшего спуска	29
11.3	Итерационный метод Чебышева	30
11.3.1	Оценка ошибок	30
11.4	Оптимизация на подпространствах Крылова	31
11.5	Метод сопряжённых градиентов	32
11.5.1	Сходимость CG	33
11.6	Предобуславливание	34
11.7	Метод обобщённых минимальных невязок (gmres)	34
12	Методы решения частичной задачи на собственные значения	34
12.1	Степенной метод (power iteration)	35
12.1.1	Сходимость	35
12.1.2	Блочная версия	35
12.2	Обратная итерация	35
12.2.1	Итерация со сдвигом	35
12.2.2	Итерация Релея	36
12.3	Методы Ланцоша и Арнольди	36

12.4 Вектор Фидлера и спектральная бисекция графов	36
--	----

1 О курсе

Большую часть сказанного можно найти в [ВИКИ](#).

Правда, кроме указанных на вики источников, было упомянуто ещё два:

1. Gilbert (неразборчиво) — Matrix Methods in Data Science (скорее всего, Gilbert Strang — Matrix Methods in Data Analysis, Signal Processing, and Machine Learning)
2. [Ivan Oseledets @ github](#). Скорее всего, имеются в виду репозитории с названиями pla20XX.

2 Основы матричного анализа

2.1 Векторные нормы

Определение 2.1. Векторная норма — функция $f : \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{R}$ такая, что:

- $f(x) \geq 0$; $f(x) = 0 \Leftrightarrow x = 0$;
- $f(\alpha x) = |\alpha| f(x)$;
- $f(x + y) \leq f(x) + f(y)$.

Обозначается $\|x\|$.

Примеры:

- L_1 -норма (Единичная окружность — ромб, TODO: нарисовать):

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

- L_2 -норма (Единичная окружность — окружность):

$$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2} = \sqrt{x^* x}$$

- A -норма:

$$\|x\|_A = \sqrt{x^* A x}, \quad A = A^*, \quad \forall x \neq 0 : x^* A x > 0$$

- L_∞ -норма (Единичная окружность — квадрат):

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$$

- L_p -норма:

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}, \quad p \geq 1.$$

2.1.1 Разреженность в L_1 -норме

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad m < n$$

Минимизируем x по L_2 - и L_1 -норме, в случае L_1 получим **разреженное** решение (с большим кол-вом нулей) (TODO: нарисовать).

2.1.2 Скалярное произведение

Определение 2.2. Скалярное произведение $(x, y) = x^*y$.

Теорема 2.1. (Неравенство Коши-Буняковского-Шварца).

$$|(x, y)| \leq \|x\| \cdot \|y\|.$$

Теорема 2.2. (Неравенство Гёльдера).

$$|(x, y)| \leq \|x\|_p \cdot \|y\|_q \Leftrightarrow \begin{cases} p, q \geq 1; \\ \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1. \end{cases}$$

2.1.3 Унитарная инвариантность L2-нормы

Определение 2.3. Унитарная матрица U — $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$:

$$U^{-1} = U^* \quad (\Leftrightarrow I = U^*U = UU^*)$$

Утверждение 2.1. Если U — унитарная матрица, то $\|Ux\|_2 = \|x\|_2$.

Доказательство.

$$\|Ux\|_2 = \sqrt{(Ux)^*Ux} = \sqrt{x^*U^*Ux} = \sqrt{x^*x} = \|x\|_2.$$

□

2.2 Матричные нормы

Определение 2.4. Норма $\|\cdot\|$ называется матричной, если

1. $\|\cdot\|$ — векторная норма на пространстве матриц;
2. $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$ (субмультипликативность).

Примеры:

- Норма Фробениуса:

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2} = \sqrt{\text{trace}(A^*A)}.$$

- Операторные нормы. Если $\|\cdot\|_*$, $\|\cdot\|_{**}$ — векторные нормы, то соответствующей им операторной нормой будет

$$\|A\|_{*,**} = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_*}{\|x\|_{**}} = \sup_{\|y\|_{**}=1} \|Ay\|_*.$$

- Например, операторной нормой, соответствующей L_2 -норме, является

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^*A)} = \sigma_1(A).$$

Утверждение 2.2. Для любой матрицы A и для любых унитарных матриц U, V верно

$$\begin{aligned} \|UAV\|_F &= \|A\|_F \\ \|UAV\|_2 &= \|A\|_2 \end{aligned}$$

Доказательство. Для $\|\cdot\|_2$:

$$\|UAV\|_2 = \sup_{x \neq 0} \frac{\|UAVx\|_2}{\|x\|_2} = \sup_{x \neq 0} \frac{\|U^*(UAVx)\|_2}{\|Vx\|_2}$$

Заменим Vx на y . В силу обратимости V это будет равно

$$\sup_{y \neq 0} \frac{\|Ay\|_2}{\|y\|_2} = \|A\|_2.$$

□

2.3 Разложение Шура

Собственное разложение (существует не всегда):

$$A = S\Lambda S^{-1}, \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$

Жорданова форма (всегда существует, но неустойчива при вычислениях):

$$A = PJP^{-1}$$

Для вычислений используют разложение Шура.

Теорема 2.3. (О разложении Шура)

Для всякой $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ существуют такие унитарная U и верхнетреугольная T , что $A = UTU^*$.

Доказательство. Индукцией по размерности A .

База. $n = 1$: $U = I$, $T = A$.

Переход. $(n - 1) \rightarrow n$.

Т.к. \mathbb{C} алгебраически замкнуто, у характеристического многочлена A есть хотя бы один корень, т.е. у A есть хотя бы одно собственное значение λ_1 , т.е. всегда найдётся хотя бы один ненулевой собственный вектор v_1 единичной длины.

Дополним v_1 до ортонормированного базиса v_1, \dots, v_n и положим $U_1 = (v_1 | \dots | v_n)$.

v_1 — собственный вектор, так что $Av_1 = \lambda_1 v_1$. Тогда, в силу ортогональности v_i и v_j ,

$$v_i^* A v_1 = \begin{cases} \lambda, & i = 1; \\ 0, & i \neq 1. \end{cases}$$

Поумножаем пару матриц:

$$U_1^* A U_1 = \begin{pmatrix} v_1^* \\ \vdots \\ v_n^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A v_1 & \dots & A v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & v_1^* A v_2 & \dots \\ 0 & & \\ \vdots & A_1 & \\ 0 & & \end{pmatrix}$$

По индукции разложим A_1 как $V_1 T_1 V_1^*$. Запишем $U_1^* A U_1$ с помощью блочного умножения:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \lambda & \dots \\ 0 & T_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V_1^* \end{pmatrix}$$

В силу обратимости V_1^* мы можем так сделать (иначе вектора-строки для \dots над T_1 могло бы и не существовать).

Получаем, что

$$T = \begin{pmatrix} \lambda & \cdots \\ 0 & T_1 \end{pmatrix};$$

$$U = U_1 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V_1 \end{pmatrix}.$$

Действительно, T верхнетреугольная по построению, а U унитарна как произведение двух унитарных матриц. \square

2.4 Нормальные матрицы

Определение 2.5. Матрица A называется нормальной, если $A^*A = AA^*$.

Утверждение 2.3. Матрица диагонализуема в унитарном базисе тогда и только тогда, когда она является нормальной.

Доказательство. .

- (\Rightarrow) :

$$A^*A = U\Lambda^*U^*U\Lambda U^* = U\Lambda^*\Lambda U^* = U\Lambda\Lambda^*U^* = AA^*.$$

- (\Leftarrow) : Разложение Шура для A : UTU^* .

$$A^*A = AA^* \Rightarrow T^*T = TT^*.$$

Оставшаяся часть доказательства (\Leftarrow) будет в качестве упражнения в ДЗ.

\square

3 Малоранговое приближение матриц

3.1 Разделение переменных и скелетное разложение

Определение 3.1. Функция с разделенными переменными — такая функция $f : X \times Y \rightarrow Z$, что существуют u, v такие, что $f(x, y) = u(x)v(y)$.

Для приближения функций используют сумму функций с разделенными переменными:

$$f(x, y) \approx \sum_{i=1}^r u_i(x)v_i(y)$$

Например, разложения в ряд Тейлора и в ряд Фурье:

$$f(x, y) \approx \sum_{i,j=0}^p c_{ij}x^i y^j$$

$$f(x, y) \approx \sum_{i,j=1}^r c_{ij} \sin \pi i x \sin \pi j y \quad ((x, y) \in (0, 1)^2)$$

Как это относится к матричным вычислениям? Возьмём матрицу $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. a_{ij} — функция дискретных переменных i, j .

Если $a_{ij} = u_i v_j$, то $A = uv^T$ (обратное тоже верно).

Раз все строки (столбцы) матрицы коллинеарны, $rk A \leq 1$.

Примеры: $a_{ij} = \sin i \cos j$, $a_{ij} = i$.

Определение 3.2. Скелетное разложение, rank decomposition — разложение $A = UV^T$ такое, что новая размерность U, V минимальна.

Замечания:

1. Storage: mn Vs. $(m + n)r$
2. Разложение единственно с точностью до умножения на обратимую матрицу:

$$UV^T = (US)(S^{-1}V^T)$$

Утверждения:

1. $A = UV^T \Rightarrow rk(A) \leq r$;
2. $rk(A) = r \Rightarrow \exists U \in \mathbb{R}^{m \times r}, V \in \mathbb{R}^{r \times n} : A = UV^T$.

Доказательство. .

1. очев
2. очев

□

3.2 SVD

Теорема 3.1. Пусть $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, $rk(A) = r$, тогда найдутся унитарные $U \in \mathbb{C}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{C}^{n \times n}$ и $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$ — сингулярные числа, что

$$A = U\Sigma V^*,$$

где Σ — диагональная матрица с $\sigma_1, \dots, \sigma_r$ на диагонали.

Доказательство. Заметим, что $A^*A \geq 0$ и $(A^*A)^* = A^*A$. Из этого следует, что

$$\exists V : V^*A^*AV = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2), \quad \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0. \quad (1)$$

Рассмотрим $V_r = [v_1, \dots, v_r]$ и $\Sigma_r = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$, где $\sigma_{r+1} = 0$ (r пока неизвестно).

$$\begin{aligned} V_r^*A^*AV_r &= \Sigma_r^2; \\ (\Sigma_r^{-1}V_r^*A^*) (AV_r\Sigma_r^{-1}) &= I \end{aligned}$$

Получается, что $Av_i = \sigma_i u_i$ при $i \in [1, r]$.

А при $i \in [r + 1, n]$ — $Av_i = 0$.

Достраиваем U_r до унитарной U :

$$AV = U \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow U^*AV = \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Из этого, в частности, следует, что $r = rk(A)$.

□

Замечание:

1. u_i — левые сингулярные векторы;
 v_i — правые сингулярные векторы;
 $\sigma_{r+1} = \dots = \sigma_{\min(m,n)} = 0$ — нулевые сингулярные числа.
2. Сингулярные числа определены однозначно.
3. Сингулярные векторы определяются однозначно с точностью до множителя $C : |C| = 1$ при $\sigma_1 > \dots > \sigma_r > 0$.
- 4.

$$\begin{aligned} \text{Im}(A) &= \langle u_1, \dots, u_r \rangle; \\ \text{Ker}(A) &= \langle v_{r+1}, \dots, v_n \rangle. \end{aligned}$$

5. SVD \rightarrow скелетное разложение:

$$A = U\Sigma V^* = \hat{U}V^*.$$

Переход в другую сторону будет на семинаре.

Теорема 3.2. (Эккорта-Янга-Мирского).

Пусть $k < \text{rk}(A)$ и $A_k = U_k \Sigma_k V_k^*$, тогда

$$\min_{\text{rk}(B) \leq k} \|A - B\| = \|A - A_k\|$$

для любой унитарно инвариантной нормы $\|\cdot\|$, причем $\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$, $\|A - A_k\|_F = \sqrt{\sum_{i=k+1}^r \sigma_i^2}$.

Определение 3.3. Нормы Шаттена:

$$\|A\|_{p, \text{Shatten}} = \left(\sum_{i=1}^r \sigma_i^p \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p \leq \infty$$

Нормы Шаттена унитарно инвариантны!

Примеры:

1. $\|\cdot\|_{2, \text{Shatten}} = \|\cdot\|_F$;
2. $\|\cdot\|_{\infty, \text{Shatten}} = \|\cdot\|_2$;
3. $\|\cdot\|_{1, \text{Shatten}} = \|\cdot\|_*$ — ядерная (nuclear) норма.

3.3 Ортопроектор

Определение 3.4. P — ортопроектор на L , если

1. $\text{Im}(P) = L$
2. $P^2 = P$
3. $P^* = P$

Утверждение 3.1.

$$\forall x \in \mathbb{C}^n : Px \perp (I - P)x$$

Доказательство.

$$(Px, (I - P)x) = (x, P^*(I - P)x) = (x, P(I - P)x) = (x, 0) = 0.$$

□

Утверждение 3.2. Если $U \in \mathbb{C}^{n \times k}$, $U^*U = I_k$, то UU^* — ортопроектор на $\langle u_1, \dots, u_k \rangle$.

Ортопроекторы, связанные с SVD.

$$A = U\Sigma V^*, U = [U_r | \hat{U}_r], V = [V_r | \hat{V}_r]$$

$U_r U_r^*$ — ортопроектор на $Im(A)$.

$\hat{V}_r \hat{V}_r^*$ — ортопроектор на $Ker(A)$.

3.4 Простейший рандомизированный алгоритм

Хотим найти $Q \in \mathbb{R}^{m \times r}$ с ортогональными столбцами такую, что для $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$

$$A \approx QQ^T A \quad (\text{если } r = rk(A), Q = U_r, \text{ то точное равенство}).$$

Если мы нашли Q , то

$$Q(Q^T A) = Q(W\Sigma V^T) = U\Sigma V^T \quad \text{— SVD.}$$

Как выбрать Q ?

1. $\Omega = [\omega_1, \dots, \omega_r]$ — случайная матрица;
2. $Y = A \cdot \Omega$;
3. Ортогонализация столбцов Y . Например, с помощью Грамма-Шмидта. (= QR-разложение)

4 Малоранговое приближение матриц — 2

4.1 Скелетная аппроксимация матриц

Посмотрим, какие алгоритмы мы уже рассмотрели.

- `pr.linalg.svd` — $O(mn \min(n, m))$, при $m = n$ — $O(n^3)$. НО! Гарантированная точность для любой матрицы.
- Рандомизированные алгоритмы — $O(mnr)$ из-за умножения на матрицу. Для разреженных матриц сложность ещё меньше. НО! Выигрыш для $r \ll \min(m, n)$; не всегда точно.

Есть ли алгоритм со сложностью $O(\# \text{ эл-в разложения}) = O((m+n)r)$?

Значит, мы не должны использовать все элементы раскладываемой матрицы A .

Скелетное разложение:

$$A = CV^T, \quad C \text{ — базисные столбцы } A;$$

Или:

$A = UR$, R — базисные строки A .

Теорема 4.1. Любая $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ ранга r представляется в виде

$$A = C \hat{A}^{-1} R$$

(\hat{A} — любая невырожденная подматрица $r \times r$)

Доказательство. $A = [a_1 \dots a_n]$. Тогда $a_i = C \cdot x_i$. В свою очередь, $\hat{a}_i = \hat{A} x_i$.

$$R = [\hat{a}_1 \dots \hat{a}_n] = \hat{A}[x_1 \dots x_n] \Rightarrow [x_1 \dots x_n] = \hat{A}^{-1} R;$$

$$A = [Cx_1 \dots Cx_n] = C[x_1 \dots x_n] = C \hat{A}^{-1} R.$$

□

Теорема 4.2. Пусть для A существует B ранга r : $\|A - B\|_2 \leq \varepsilon$. Пусть $\hat{A} \in \mathbb{C}^{r \times r}$ — подматрица максимального по модулю определителя. Тогда

$$\|A - C \hat{A}^{-1} R\|_c \leq (r + 1) \varepsilon$$

Также называют CGR-разложением, CUR-разложением или псевдоскелетной аппроксимацией.

(Дальше по мотивам презы)

Пример — разложение матрицы Гильберта $a_{ij} = 1/(i + j - 1)$.

При $r \approx 15$ ошибка внезапно подскакивает. В чём дело? Матрица \hat{A} оказывается близка к вырожденной, а мы её обращаем.

Для устойчивости необходимо регуляризовать вычисление \hat{A}^{-1} , например, с помощью SVD. Для этого в numpy есть функция `np.linalg.pinv`.

Метод неполной крестовой аппроксимации...

(Преза закончилась)

4.2 ALS алгоритм

(Alternating least squares / Alternating linear scheme)

Рассмотрим $f : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$. Хотим $f(X) \rightarrow \min_{\text{rank}(X) \leq r}$.

Например, задача о наилучшем приближении ранга r :

$$f(X) = \|A - X\|_F^2;$$

Или задача matrix completion (пример использования — рекомендательная система):

$$f(X) = \|P_\Omega \circ (A - X)\|_F^2, \quad (P_\Omega)_{ij} = (i, j) \in \Omega$$

Можно также $f(X) = \|X\|_*$.

Вернёмся к алгоритму.

$$\min_{\text{rank } X \leq r} f(X) = \min_{U, V} f(UV^T)$$

Алгоритм 1: ALS vanilla

$$U_{k+1} = \arg \min_U f(UV_k^T);$$

$$V_{k+1} = \arg \min_V f(U_{k+1} V^T).$$

У этого алгоритма есть существенные недостатки: вектора одной матрицы начнут расти, а другой — уменьшаться; вектора внутри одной матрицы могут становиться почти линейно зависимыми.

Алгоритм 2: ALS с ортогонализацией

$$\begin{aligned} U &:= \arg \min_U f(U V_k^T); \\ U &= Q_1 R_1 \\ V &:= \arg \min_V f(Q_1 V^T); \\ V &= Q_2 R_2 \\ U_{k+1} &= Q_1 R_2^T; \quad V_{k+1} = Q_2 \end{aligned}$$

Как решать $f(UV^T) \rightarrow \min$, где $U^T V = I$ и $f(X) = \|A - UV^T\|_F^2$:

1. $(A, B)_F = \text{trace}(A^T B)$
2. $\frac{\partial}{\partial X} \text{trace}(XA) = A^T$

Доказательство.

$$\left[\frac{\partial f}{\partial x_{ij}} \right]_{i,j=1}^{m,n} = \frac{\partial f}{\partial X}$$

□

3. $f(UV^T) = \|A - UV^T\|_F^2 = (A - UV^T, A - UV^T)_F = (A, A) - 2(A, UV^T) + (UV^T, UV^T) = (A, A) + \dots$
4. Получаем, что оптимум $V_* = A^T U$, и аналогично $U_* = AV$.

5 Малоранговая аппроксимация многомерных массивов (тензоров)

5.1 Кронекерово произведение

Определение 5.1.

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{pmatrix}$$

— называется Кронекеровым произведением.

(Если $A \in \mathbb{F}^{m \times n}$, $B \in \mathbb{F}^{p \times q}$, то $A \otimes B \in \mathbb{F}^{mp \times nq}$.)

Утверждение 5.1. .

1. $(A + B) \otimes C = A \otimes C + B \otimes C; \quad A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C;$

2.

$$(A \otimes B)^* = A^* \otimes B^*;$$

3.

$$A \otimes B = (A \otimes I)(I \otimes B) = (I \otimes B)(A \otimes I)$$

4.

$$(AB) \otimes (CD) = (A \otimes C)(B \otimes D)$$

5.

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$$

Доказательство. .

1. очевидно

2. очевидно

3. доказывается пристальным взглядом:

$$(A \otimes I)(I \otimes B) = \begin{pmatrix} a_{11}I & \dots & a_{1n}I \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1}I & \dots & a_{mn}I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B & & \\ & B & \\ & & \ddots \\ & & & B \end{pmatrix}$$

4. Проверим, что

$$I \otimes CD = (I \otimes C)(I \otimes D); \quad AB \otimes I = (A \otimes I)(B \otimes I).$$

Тогда по 3)

$$AB \otimes CD = (AB \otimes I)(I \otimes CD) = (A \otimes I)(B \otimes I)(I \otimes C)(I \otimes D) = OOF.$$

Снова по 3)

$$OOF = (A \otimes I)(I \otimes C)(B \otimes I)(I \otimes D) = (A \otimes C)(B \otimes D).$$

5. следует из 4).

□

Определение 5.2. $\text{vec}(\cdot) : \mathbb{C}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{C}^{mn}$ действует следующим образом:

$$\text{vec} \left(\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & & \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{m1} \\ a_{12} \\ \vdots \\ a_{m2} \\ \vdots \\ a_{1n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{pmatrix}$$

В Python — `np.reshape(A, [m + n, 1], order='f')` либо `np.flatten(A, order='f')`.
Пример: $\text{vec}(uv^T) = v \otimes u$.

Утверждение 5.2.

$$\text{vec}(AXB) = B^T \otimes A \cdot \text{vec}(X)$$

Доказательство. Пусть $X = uv^T$.

$$\text{vec}(Auv^T B) = \text{vec}((Au)(B^T v)^T) = (B^T v) \otimes (Au) = (B^T \otimes A)(v \otimes u).$$

Но vec и матричное умножение линейны, а любую матрицу можно представить как сумму матриц ранга 1. \square

Утверждение 5.3.

$$\langle A, B \rangle_F = \text{trace}(A^T B) = \text{vec}(A)^T \text{vec}(B).$$

5.2 Внешнее (тензорное) произведение

Определение 5.3. Для $A \in \mathbb{R}^{n_1 \times \dots \times n_d}$, $B \in \mathbb{R}^{m_1 \times \dots \times m_D}$ тензор $(A \otimes_o B) \in \mathbb{R}^{n_1 \times \dots \times n_d \times m_1 \times \dots \times m_D}$ называется внешним (тензорным) произведением:

$$(A \otimes_o B)_{ij} = A_i B_j \quad (i \in \mathbb{N}^d, j \in \mathbb{N}^D)$$

Пример. $a_{ij} = u_i v_j$; $A = uv^T = u \otimes_o v$; $\text{vec}(u \otimes_o v) = v \otimes_K u$.

Замечание. Мы будем писать \otimes вместо \otimes_o , если из контекста понятно, о чем идёт речь. Иначе будем писать \otimes_o и \otimes_K .

Скелетное разложение:

$$A = UV^T = u_1 \otimes v_1 + \dots + u_r \otimes v_r$$

SVD:

$$A = \sum_{\alpha=1}^r \sigma_{\alpha} u_{\alpha} \otimes v_{\alpha};$$

$$\text{vec } A = V \otimes_K U \text{vec } \Sigma.$$

Обобщим скелетное разложение на большее количество размерностей:

$$a_{ijk} = \sum_{\alpha=1}^R u_{i\alpha} v_{j\alpha} w_{k\alpha};$$

$$A = \sum_{\alpha=1}^R u_{\alpha} \otimes v_{\alpha} \otimes w_{\alpha};$$

$$A = \sum_{\alpha=1}^R \bigotimes_{k=1}^d u_{\alpha}^{(k)} \quad \text{для } A \in \mathbb{R}^{n_1 \times \dots \times n_d}.$$

- Единственность (при некоторых условиях) в отличие от 2D;
- Проблемы при вычислениях.

5.3 Разложение Таккера

$$A = \sum_{\alpha=1}^{R_1} \sum_{\beta=1}^{R_2} \sum_{\gamma=1}^{R_3} g_{\alpha\beta\gamma} u_{\alpha} \otimes v_{\beta} \otimes v_{\gamma}.$$

$G = \{g_{\alpha\beta\gamma}\}_{\alpha,\beta,\gamma=1}^{R_1,R_2,R_3}$ — ядро Таккера;

$$\left. \begin{aligned} U &= [u_1 \dots u_{R_1}] \in \mathbb{C}^{m \times R_1} \\ V &= [v_1 \dots v_{R_2}] \in \mathbb{C}^{n \times R_2} \\ W &= [w_1 \dots w_{R_3}] \in \mathbb{C}^{l \times R_3} \end{aligned} \right\} \text{факторы}$$

Минимальные (R_1, R_2, R_3) — Таккеровский (мультилинейный) ранг.

Также пишут $A = [G; U, V, W]$.

Storage: $n^3 \gg R^3 + 3nR$ при $R \ll n$.

Утверждение 5.4.

$$\text{vec } A = W \otimes_K V \otimes_K U \cdot \text{vec } G.$$

Доказательство. Аналогично похожему док-ву через rank-1 члены. □

Определение 5.4.

$$A_{(1)} = [A[:, :, 0], A[:, :, 1], \dots, A[:, :, -1]]$$

$$A_{(2)} = \text{permute}(A, [1, 0, 2])_{(1)}$$

(В Питоне `permute` — `np.transpose`)

$$A_{(3)} = \text{permute}(A, [2, 0, 1])_{(1)}$$

— $A_{(p)}$ — матризация по моде p .

Заметим, что $\text{vec}(A) = \text{vec}(A_{(1)})$. Тогда

$$\text{vec}(A) = \text{vec}(A_{(1)}) = W \otimes V \otimes U \cdot \text{vec}(G) = (W \otimes V) \otimes U \cdot \text{vec}(G_{(1)}) = \text{vec}(UG_{(1)}(W \otimes V))$$

Получаем, что

$$\begin{aligned} A_{(1)} &= \dots \\ A_{(2)} &= \dots \\ A_{(3)} &= WG_{(3)}(V \otimes U)^T \end{aligned}$$

Теорема 5.1. $(R_1, R_2, R_3) = (\text{rank } A_{(1)}, \text{rank } A_{(2)}, \text{rank } A_{(3)})$.

Доказательство. .

1.

$$A_{(1)}$$

2. Пусть $A_{(1)} = U_1 \Sigma_1 V_1^T$ — compact SVD. $U_1 U_1^T A_{(1)} = A_{(1)}$;

$$\text{vec}(A_{(1)}) = \text{vec}(U_1 U_1^T U G_{(1)} (W^T \otimes V^T))$$

Чё так быстро-то (((

□

HOSVD алгоритм.

U_k — r_k левых сингулярных векторов $A_{(k)}$, где $r_k : \|A_{(k)} - U_k U_k^T A_{(k)}\|_F \leq \varepsilon$.

$G = [A, U_1^T, U_2^T, U_3^T]$.

Тогда $A_{HOSVD} = [G, U_1, U_2, U_3]$ и $\|A - A_{HOSVD}\|_F \leq \sqrt{3}\varepsilon$.

6 QR-разложение и метод наименьших квадратов

6.1 QR-разложение

6.1.1 Ортогонализация Грамма-Шмидта

$a_1, \dots, a_n \in \mathbb{C}^m$ — линейно независимы. $A := [a_1, \dots, a_n]$.

Рассмотрим процесс ортогонализации Грамма-Шмидта.

$$\begin{aligned} \tilde{q}_1 &= a_1, & q_1 &= \frac{\tilde{q}_1}{\|\tilde{q}_1\|_2}; \\ \tilde{q}_2 &= a_2 - q_1 q_1^* a_2, & q_2 &= \frac{\tilde{q}_2}{\|\tilde{q}_2\|_2}; \\ \tilde{q}_3 &= a_3 - [q_1 q_2] [q_1 q_2]^* a_3, \dots \\ &\vdots \\ [a_1 a_2 \dots a_n] &= [q_1 q_2 \dots q_n] \begin{bmatrix} \|a_1\|_2 & q_1^* a_2 & \dots & \dots \\ 0 & \|\tilde{q}_2\|_2 & \dots & \dots \\ \vdots & 0 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Т.е. $A = QR$, где Q — унитарная, а R — верхнетреугольная.

ГШ неустойчив (будет в дз).

6.1.2 Отражения Хаусхолдера

Хотим для любого x найти унитарную U такую, что

$$Ux = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Рассмотрим матрицу $H(v) = I - 2vv^*$, где $\|v\|_2 = 1$. Эта матрица называется матрицей Хаусхолдера. Она унитарна (было в ДЗ 1) и эрмитова (очев).

TODO: график

Утверждение 6.1. $\forall a, b \in \mathbb{C}^n : \|a\|_2 = \|b\|_2 \quad \exists \gamma \in \mathbb{C} : |\gamma| = 1 \wedge \exists v \in \mathbb{C}^n : H(v) \cdot a = \gamma b$.

Доказательство.

$$H(v) \cdot a = \gamma b \Rightarrow a - 2v^*av = \gamma b.$$

Если a коллинеарен b , то $v = \frac{a}{\|a\|_2}$.

Иначе положим

$$v = \frac{a - \gamma b}{\|a - \gamma b\|_2} \quad \text{и} \quad 2v^*av = a - \gamma b.$$

Подставим:

$$\begin{aligned} 2 \frac{(a^* - \bar{\gamma}b^*)a}{\|a - \gamma b\|_2} \cdot \frac{a - \gamma b}{\|a - \gamma b\|_2} &= a - \gamma b; \\ 2(a^*a - \bar{\gamma}b^*a) &= \|a - \gamma b\|_2^2 \quad \left(= \|a\|_2^2 + \|b\|_2^2 - 2\Re(\bar{\gamma}b^*a) \right) \\ -2\bar{\gamma}b^*a &= -2\Re(\bar{\gamma}b^*a); \\ \bar{\gamma}b^*a &\in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Если $b \perp a$, то подойдёт любое $\gamma : |\gamma| = 1$.

Иначе подойдёт $\gamma = \pm \frac{b^*a}{|b^*a|}$. □

Следствие. $\forall a \in \mathbb{C}^n \exists v \in \mathbb{C}^n :$

$$\begin{aligned} H(v)a &= \gamma \begin{bmatrix} \|a\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, |\gamma| = 1; \\ v &= \frac{a - \gamma \|a\|_2 e_1}{\|a - \gamma \|a\|_2 e_1\|_2}. \end{aligned}$$

Замечание. Т.к. $a - \gamma \|a\|_2 e_1 = (a_1 - \gamma \|a\|_2, a_2, \dots, a_n)^T$, лучше выбрать $\gamma < 0$, т.к. возможно $a_1 \approx \|a\|_2$ и будет вычитание двух близких чисел.

Теорема 6.1. Для любой $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ существуют $Q \in \mathbb{C}^{m \times m}$, $R \in \mathbb{C}^{m \times n}$ (Q — унитарная, R — верхнетреугольная), что $A = QR$.

Доказательство.

$$A = \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{bmatrix} \xrightarrow{H_1} \begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix} \xrightarrow{H_2 = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ \cdot & \tilde{H}_2 \end{bmatrix}} \begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix} \xrightarrow{H_3 = \dots} \begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Получаем $H_3 H_2 H_1 A = R$. Но H_i — унитарная и эрмитова, так что $A = (H_1 H_2 H_3) R$. $H_1 H_2 H_3$ — унитарная, что и требовалось. □

Замечания:

1. Доказательство даёт алгоритм построения QR .
2. Если $m \geq n$:

$$A = [Q_1 Q_2] \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix} = Q_1 R_1 \text{ — thin QR (будет по умолчанию)}$$

Для вычисления thin QR не надо явно считать $H_1 H_2 \dots H_n$. Можно

$$Q_1 = \left(H_1 \left(H_2 \dots \left(H_n \begin{bmatrix} I_n \\ 0 \end{bmatrix} \right) \right) \right)$$

Сложность алгоритма — $2mn^2 - \frac{2}{3}n^3$ (у Грамма-Шмидта — $2mn^2$).

6.1.3 Вращения Гивенса

$G_{ij} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ — матрица вращения. Единичная кроме подматрицы $(i, j)^2$, где имеет вид

$$J(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}.$$

Заметим, что $J(\varphi)[a_1, a_2]^T = [\alpha, 0]^T$ при правильном подборе $\varphi(a_1, a_2)$.

Тогда алгоритм на основе вращений работает так: в каждом столбце, снизу вверх вращаем значения.

Сложность $3mn - n^3$. Больше, чем у Хаусхолдера, но параллелизуется.

6.2 Метод наименьших квадратов

6.2.1 Полноранговый случай

Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, $\text{rank}(A) = n$.

$$\|Ax - b\|_2^2 \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}.$$

Решение: $\nabla J(x) = 2A^T Ax - 2A^T b = 0$; $A^T Ax = A^T b$. Получаем $x = (A^T A)^{-1} A^T b$. Как считать? Не хочется напрямую считать $A^T A$.

Способ вычисления:

1. Через QR.

$$A = QR, A^T A = R^T Q^T QR = R^T R.$$

Получаем $R^T Rx = R^T Q^T b$, сокращаем на R^T .

$$Rx = Q^T b \equiv f.$$

R — верхнетреугольная! Можно решать Гауссом снизу.

Сложность $O(n^2)$.

Итог: $2mn^2 - \frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$ flops.

2. Через compact SVD. Сложность будет $2mn^2 + 11n^3$ flops.

$$A = U \Sigma V^T$$

$$A^T A = V \Sigma^2 V^T$$

$$V \Sigma^2 V^T x = V \Sigma U^T b$$

$$x = V \Sigma^{-1} U^T b$$

Сложность через SVD > сложность через QR.

Но SVD может быть полезна, если сингулярные числа маленькие.

6.2.2 $\text{rank } A \leq n$

Теорема 6.2. Пусть $A = U\Sigma V^T$ — полное SVD от A . Тогда

$$x_* = V\Sigma^+ U^T b, \quad \text{где } \Sigma^+ = \begin{bmatrix} \Sigma_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Решает поставленную задачу минимизации и x_* имеет минимальную вторую норму среди всех решений.

Доказательство.

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|U\Sigma V^T x - b\|_2^2 = \|U^T U \Sigma V^T x - U^T b\|_2^2 = \|\Sigma \alpha - U^T b\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} \Sigma_r \alpha_r \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} U_r^T b \\ U_\perp^T b \end{bmatrix} \right\|_2^2 = \|\Sigma_r \alpha_r - U_r^T b\|_2^2$$

$\alpha_r = \Sigma_r^{-1} U_r^T b$, α_\perp — любое.

$\|\alpha\|_2^2 = \|x\|_2^2 \Rightarrow \min \text{ норма } x$, если $\alpha_\perp = 0$;

$\Rightarrow x^* = V_r \Sigma_r^{-1} U_r^T b = V \Sigma^+ U^T b$. □

Определение 6.1. $A^+ = V\Sigma^+ U^T$ — псевдообратная матрица.

7 Быстро умножаем векторы на матрицы

7.1 Быстрое преобразование Фурье

((TODO: пропустил начало)))

1.

$$\omega_{2n}^{2pq} = e^{-\frac{2\pi i}{2n} 2pq} = \omega_n^{pq}$$

2.

$$w_{2n}^{2p(n+q)} = w_n^{pq} w_n^{pq}$$

3. ...

$$P_{2n} F_{2n} = \begin{pmatrix} \dots \end{pmatrix}$$

$$F_{2n} X = P_n^{-1} \begin{pmatrix} F_n & 0 \\ 0 & F_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & W_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_n & I_n \\ I_n & -I_n \end{pmatrix} X$$

— если умножать справа налево по ассоциативности, получится быстро: $O(n)$ на шаг рекурсии, рекурсия от вдвое меньшего n . Сложность $O(n \log n)$.

7.2 Циркулянты

Определение 7.1. Матрица называется циркулянт, если её элементы записываются в следующем виде:

$$C = \begin{pmatrix} c_0 & c_{n-1} & c_{n-2} & \dots & c_1 \\ c_1 & c_0 & c_{n-1} & \dots & c_2 \\ c_2 & . & . & . & . \\ \vdots & . & . & . & . \\ c_{n-1} & c_{n-2} & . & \dots & c_0 \end{pmatrix}$$

$y = Cx$ — циклическая свёртка, т.е.

$$y_p = \sum_{q=0}^{n-1} c_{(p-q) \% n} \cdot x_q.$$

Цель: посчитать Cx за $o(n^2)$.

Пусть P — матрица циклического сдвига на 1 (влево? вправо?). Тогда

$$C = c_0 P^0 + c_1 P + c_2 P^2 + \dots + c_{n-1} P^{n-1}.$$

Теорема 7.1. Пусть $C \in \mathbb{C}^{n \times n}$ — циркулянт, тогда

$$C = F_n^{-1} \text{diag}(F_n C) F_n.$$

Доказательство. Покажем, что P_n диагоналізується преобразованием Фурье. Тогда теорема будет доказана.

$$P_n \begin{pmatrix} 1 \\ \bar{\omega}_n^q \\ \bar{\omega}_n^{2q} \\ \vdots \\ \bar{\omega}_n^{(n-1)q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\omega}_n^{(n-1)q} \\ 1 \\ \bar{\omega}_n^q \\ \vdots \end{pmatrix} = \bar{\omega}_n^{-q} \begin{pmatrix} \bar{\omega}_n^{nq} \\ \bar{\omega}_n^q \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$P_n = F_n^* \Lambda (F_n^*)^{-1}, \quad \Lambda = \text{diag}(1, \omega_n, \dots, \omega_n^{n-1}).$$

$$\Lambda = \text{diag}(F_n e_1); \quad \Lambda^k = \text{diag}(F_n e_k);$$

$$C = c_0 I + \dots = F_n \text{diag}(F_n C) F_n.$$

□

Из этого следует

Теорема 7.2. дискретная теорема свёртки:

$$Cx = F_n^{-1}((F_n C) \circ (F_n x)).$$

7.3 Двухуровневый циркулянт

Определение 7.2.

$$C = \begin{pmatrix} C_0 & C_{n-1} & \dots & C_1 \\ C_1 & C_0 & \cdot & \vdots \\ \vdots & C_1 & \cdot & \vdots \\ C_{n-1} & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, C_k \in \mathbb{C}^{m \times m}$$

(C_k — циркулянты)

Теорема 7.3. Пусть $F_n \otimes F_m = F$, тогда

$$Cx = F^{-1} \text{diag}(FC)F.$$

Доказательство.

$$C = I_n \otimes C_0 + P \otimes C_1 + P^2 \otimes C_2 + \dots$$

Далее пользуемся дискретной теоремой свёртки и свойствами Кронекерова произведения. \square

7.4 Матрицы Тёплица

Определение 7.3. Тёплицева матрица —

$$T = t_{i-j}, i, j=1, \dots, n, \quad t_k \in \mathbb{C}.$$

$y = Tx$ или $y_p = \sum_{q=1}^n t_{p-q} x_q$ — дискретная свёртка.

Любую Тёплицеву матрицу $n \times n$ можно вложить в циркулянт $(2n-1) \times (2n-1)$.

Например, для $n=3$:

$$T = \begin{pmatrix} t_0 & t_{-1} & t_{-2} \\ t_1 & t_0 & t_{-1} \\ t_2 & t_1 & t_0 \end{pmatrix};$$

$$C = \left(\begin{array}{ccc|cc} t_0 & t_{-1} & t_{-2} & t_2 & t_1 \\ t_1 & t_0 & t_{-1} & t_{-2} & t_2 \\ t_2 & t_1 & t_0 & t_{-1} & t_{-2} \\ - & - & - & - & - \\ t_{-2} & t_2 & t_1 & t_0 & t_{-1} \\ t_{-1} & t_{-2} & t_2 & t_1 & t_0 \end{array} \right).$$

Если дополнить x нулями до x^* , получим $Tx = Cx^*$.

Итого,

Fast matvec: `ifft(fft(c) * fft([x, 0].T))`

8 Умножение матриц и вычислительная устойчивость

8.1 Сложность матричного умножения

$O(n^3), O(n^{2.3\dots}), \dots$

8.2 Метод Штрассена

Позволяет уменьшить кол-во умножений за счёт сложений.

По мастер-теореме сложность $O(n^{\log_2 7})$. Более точно, константа где-то 7, так что выгоднее обычного умножения только при $n \geq 500$.

8.2.1 Вывод метода Штрассена

Вернёмся к блочному умножению.

$$\begin{aligned} C_1 &= A_1 B_1 + A_2 B_3; \\ C_2 &= A_1 B_2 + A_2 B_4; \\ C_3 &= A_3 B_1 + A_4 B_3; \\ C_4 &= A_3 B_2 + A_4 B_4. \end{aligned} \Rightarrow C_k = \sum_{i,j=1}^4 x_{ijk} A_i B_j.$$

Оказывается, что канонический ранг тензора x равен 7. Получив каноническое разложение, получаем метод Штрассена.

Точно так же (но увеличивая разбиение) получают асимптотически более эффективные алгоритмы, но константы там гигантские.

8.3 Иерархия памяти

1. Регистры;
2. Кеш;
3. RAM;
4. Жесткий диск.

(Отсортировано по убыванию быстродействия, но по возрастанию места.)

Оказывается, что большие матрицы эффективнее всего хранить не по столбцам и не по строкам, а по блокам, чтобы при выполнении алгоритмов память эффективно перемещалась по иерархии.

Обратно, стоит формулировать алгоритмы через операции с блоками, чтобы можно было воспользоваться особенностями иерархии.

((Обзор LAPACK и вариаций BLAS с оптимизациями под различные архитектуры)))

8.4 Машинные числа

(см. презу)

8.5 Машинные числа: обусловленность

Пусть $f : X \rightarrow Y$.

$$\begin{aligned} f(x + \Delta x) &\approx f(x) + f'(x)\Delta x; \\ \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\|f(x)\|} &= \frac{f'(x)}{\|f(x)\|} \cdot \|x\| \cdot \frac{\Delta x}{\|x\|}. \end{aligned}$$

Определим число обусловленности (меру обусловленности):

$$\text{Cond}(f, x) = \frac{\|f'(x)\|}{\|f(x)\|} \cdot \|x\|$$

Пример 8.1. $f(x) = Ax$, $f'(x) = A$.

$$Cond = \frac{\|A\|}{\|Ax\|} \|x\| = \frac{\|A\|}{\|y\|} \|A^{-1}y\| \leq \frac{\|A\|}{\dots}$$

Посчитаем обусловленность $f : (A, b) \rightarrow A^{-1}b$, то есть $Ax = b$.

Лемма 8.1. Пусть $\|\cdot\|$ — матричная норма. Пусть $\|A\| < 1$. Тогда $(I - A)^{-1}$ существует и

1. Ряд Неймана:

$$(I - A)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} A^k$$

2.

$$\|(I - A)^{-1}\| \leq \frac{\|I\|}{1 - \|A\|}$$

Доказательство. ...

□

Теперь посчитаем обусловленность.

$$(A + \triangle A)(x + \triangle x) = b + \triangle b;$$

...

9 Примеры решения линейных систем с плотными матрицами

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{C}^{n \times n}, \det(A) \neq 0, \quad b \in \mathbb{C}^n$$

$$A = QR, \quad QRx = b; Rx = Q^*b, \quad \frac{4}{3}n^3 + O(n^2)$$

$$A = U\Sigma V^*, \quad x = V\Sigma^{-1}U^*b$$

9.1 LU-разложение

Определение 9.1. $A = LU$ — LU-разложение матрицы A , где L — нижнетреугольная с 1 на диагонали, а U — верхнетреугольная.

$$LUx = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b; \\ Ux = y. \end{cases}$$

Сложность — $O(n^2)$ на решение системы, $O(n^3)$ на разложение (но константа меньше, чем в QR).

Теорема 9.1. Пусть $\det(A) \neq 0$. Тогда A имеет LU-разложение, что эквивалентно тому, что все ведущие подматрицы невырождены.

Доказательство. .

- $\Rightarrow A = LU$

$$0 \neq \det(A) = \det(LU) = \det(L)\det(U) = u_{11} \cdot \dots \cdot u_{nn}$$

Из чего следует, что $\forall k : u_{kk} \neq 0$.

$$A = \begin{pmatrix} L_k & 0 \\ * & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k & * \\ 0 & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_k U_k & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

$$\det(L_k U_k) = u_{11} \cdot \dots \cdot u_{kk} \neq 0.$$

- \Leftarrow — по индукции.

$$A = \begin{pmatrix} a & c^\top \\ b & D \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{b}{a} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c^\top \\ b & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c^\top \\ 0 & D - \frac{b}{a}c^\top \end{pmatrix}$$

У A_1 все ведущие нормы невырождены (ДЗ).

По индукции $A_1 = L_1 U_1$.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{a}b & L_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c^\top \\ 0 & U_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c^\top \\ \dots & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c^\top \\ b & D \end{pmatrix}$$

□

Утверждение 9.1. LU-разложение определяется единственным образом.

Доказательство.

$$A = L_1 U_1 = L_2 U_2 \Leftrightarrow L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1} = I \Leftrightarrow L_1 = L_2, U_1 = U_2.$$

□

Утверждение 9.2. (LDL-разложение) Пусть у A все ведущие подматрицы невырождены, $A = A^*$, $\exists L$ — нижняя унитреугольная и D — диагональная:

$$A = LDL^*.$$

Доказательство.

$$A = LU = LDD^{-1}U = A^* = U^* D^{-*} D^* L^*$$

Из единственности следует $L = U^* D^{-*}$, $U^* = LD^*$, $U = DL^*$.

□

9.1.1 Связь LU-разложения и метода исключения Гаусса

LU:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{a}b & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c^\top \\ b & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c^\top \\ 0 & D - \frac{1}{a}bc^\top \end{pmatrix}$$

Гаусс:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \dots 0 \\ 0 & 1 & 0 \dots 0 \\ 0 & v & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & \dots & * \\ 0 & * & . & \vdots \\ 0 & * & . & \vdots \\ \vdots & \vdots & . & \vdots \\ 0 & * & \dots & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & \dots & * \\ 0 & * & . & \vdots \\ 0 & 0 & . & \vdots \\ \vdots & \vdots & . & \vdots \\ 0 & 0 & * \dots & * \end{pmatrix}$$

Сложность LU-разложения — $\frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$.

На практике лучше использовать блочное разложение:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ CA^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ 0 & S \end{pmatrix}, \quad S = D - BA^{-1}C$$

(S — дополнение по Шуру блока D)

9.2 Выбор ведущего элемента

Теорема 9.2. Пусть \exists LU-разложение A и не возникает ????. Тогда

$$|A - \tilde{L}\tilde{U}| \leq 3n\varepsilon_{\text{machine}}(|A| + |L||U|) + O(\varepsilon_{\text{machine}}^2)$$

Пример 9.1.

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{\varepsilon} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon & 1 \\ 0 & 1 - \frac{1}{\varepsilon} \end{pmatrix}$$

- Выбор ведущего элемента (partial pivoting)

$$PA = LU$$

(TODO: матрица PA)

P (перестановка) выбирается так, чтобы a_k был максимальным по модулю в 1-м столбце A_k . Тогда $\|L\|_c \leq 1$. Но элементы в U ещё могут расти:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \dots 0 & 1 \\ -1 & \ddots & 0 \dots 0 & 1 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -1 & \dots & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{\|U\|_c}{\|A\|_c} = 2^{n-1}$$

- Полный выбор (full pivoting)

$$PAQ = LU$$

Выбираем перестановку такую, чтобы a_k был максимальным по модулю во всей A_k .

9.3 Разложение Халецкого

Определение 9.2. $A = LL^*$ — разложение Халецкого, где L — нижнетреугольная матрица.

Теорема 9.3. A имеет разложение Халецкого $\Leftrightarrow A = A^* > 0$.

Доказательство. .

- $(\Rightarrow) A = LL^* = A^*, (x, LL^*x) = (L^*x, L^*x) > 0$.
- $(\Leftarrow) A = LDL^* = LD^{1/2}D^{1/2}L^* = (LD^{1/2})(LD^{1/2})^*$.

□

Алгоритм вычисления:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} \\ a_{31} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{pmatrix}$$

Решаем матричное уравнение.

Пример разобрали, в целом алгоритм следующий:

```
for k = 1, n:
    e[k,k] = sqrt(a[k,k] - e[k,1]^2 - ... - e[k,k-1]^2)
    for i = k + 1, n:
        e[i,k] = (a[i,k] - e[i,1]e[k,1] - ... - e[i,k-1]e[k,k-1]) / e[k,k]
```

Теорема 9.4.

$$|A - \tilde{L}\tilde{L}^*| \leq \varepsilon_{\text{machine}}(n+1) \begin{pmatrix} \sqrt{a_{11}} \\ \vdots \\ \sqrt{a_{nn}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{a_{11}} & \dots & \sqrt{a_{nn}} \end{pmatrix} + O(\varepsilon_{\text{machine}}^2)$$

10 Прямые методы решения линейных систем с большими разреженными матрицами

10.1 Формула Шермана-Моррисона

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad b \in \mathbb{R}^n.$$

Пусть $b \rightarrow \tilde{b}$. Тогда решение пересчитывается за $O(n^2)$, ведь LU-разложение уже есть.

Что делать, если изменилась A ? На случай, если она изменилась каким-то управляемым способом, и существует формула Шермана-Моррисона.

Утверждение 10.1. Пусть $\det(A) \neq 0$ и $u, v \in \mathbb{R}^n$. Тогда

$$1. A + uv^T \text{ обратима} \Leftrightarrow 1 + v^T A^{-1}u \neq 0$$

$$2. (A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1}u}$$

Лемма 10.1.

$$\det(I + ab^T) = 1 + b^T a, \quad a, b \in \mathbb{R}^n$$

Доказательство.

$$(I + ab^\top)w = w, \quad w \perp b, \quad \lambda_1 = \dots = \lambda_{n-1} = 1.$$
$$(I + ab^\top)a = a(1 + b^\top a), \quad \lambda_n = 1 + b^\top a.$$

□

Доказательство. (Утверждение 1)

1.

$$\det(A + uv^\top) = \det(A)(1 + v^\top A^{-1}u)$$

2. Проверим, перемножив $A + uv^\top$ и предполагаемое обратное:

$$(A + uv^\top) \left(A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^\top A^{-1}}{1 + v^\top A^{-1}u} \right) = I - \frac{uv^\top A^{-1}}{1 + \gamma} + uv^\top A^{-1} - \frac{u\gamma v^\top A^{-1}}{1 + \gamma} =$$
$$= I - \left(\frac{1}{1 + \gamma} - 1 + \frac{\gamma}{1 + \gamma} \right) uv^\top A^{-1} = I.$$

□

Подставим формулу из утверждения 1 в решение уравнения $x = (A + uv^\top)^{-1}b$, чтобы на практике не обращать матрицу:

$$x = A^{-1}b - \frac{(A^{-1}u)v^\top(A^{-1}b)}{1 + v^\top(A^{-1}u)} = x_1 - \frac{x_2(v^\top x_1)}{1 + v^\top x_2}.$$

Замечание: Есть также формула для поправки ранга $r \geq 1$ (формула Шермана-Вудбери-Моррисона).

10.2 Форматы представления разреженных матриц

10.2.1 COO формат

3 массива: значения `val`, индексы столбцов `col`, индексы строк `row`.

Удобно добавлять элементы, но неэффективен для операций, например, `matvec` ($y = Ax$)

```
for i in range(nnz(A)):
    y[row[i]] += val[i] * x[col[i]]
```

10.2.2 lil (list of lists)

`col` нет, есть только `row`, который теперь список списков, и в нём для каждой строки хранятся индексы ненулевых элементов.

`val` тоже список списков, форма совпадает с формой `row`.

10.2.3 CSR (compressed sparse row)

`col` и `val` те же, что в COO, но в `row[i]` теперь находится самый первый индекс элемента из i -й строки в массивах `col`, `val`.

`Matvec`:

```
for i in range(n):
    p, q = row[i], row[i + 1]
    y[i] = dot(val[p : q], x[col[p : q]])
```

10.3 Заполнение в L и U

Матрице $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ можно поставить в соответствие ориентированный граф: $a_{ij} \neq 0$ задаёт наличие ребра из i в j .

Для симметричных матриц граф неориентированный.

Модель выше помогает заметить, что правильное сопряжение перестановкой может сделать L и U в LU-разложении разреженными (при условии разреженности исходной матрицы).

Для ленточных матриц это вообще неверно.

10.4 Алгоритм поиска P

10.4.1 Алгоритм Катхилла-Макки

Нужно для $G = (V, E)$ найти такую перестановку номеров вершин σ , что метрика b минимальна:

$$b = \max_{(x,y) \in E} |\sigma(x) - \sigma(y)|.$$

Идея состоит в том, чтобы выбрать какую-нибудь вершину первой, а дальше нумеровать вершины в порядке обхода bfs.

10.4.2 Minimal degree ordering

11 Итерационные методы решения линейных уравнений (?)

11.1 Метод простой итерации

$$x_{k+1} = x_k + P(b - Ax_k) \equiv Gx_k + C$$

Теорема 11.1. Пусть $\|\cdot\|$ — матричная и $\|G\| < 1$, тогда итерационная формула выше сходится к $x_* : Ax_* = b$ при $k \rightarrow \infty$ геометрически.

$$\|x_{k+1} - x_*\| = \|G(x_k - x_*)\| \leq \|G\| \|x_k - x_*\| \leq \dots \leq \|G\|^{k+1} \cdot \|x_0 - x_*\|.$$

Случай 1: $P = D^{-1}$, $D = \text{diag}(A)$ — метод Якоби.

Теорема 11.2. Пусть A обладает свойством диагонального преобладания, т.е.

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|.$$

Тогда метод Якоби сходится.

Доказательство.

$$G = I - PA = I - D^{-1}A = D^{-1}(D - A)$$

$$\|D^{-1}(D - A)\|_{\infty} = \max_i \sum_{j \neq i} \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} < 1$$

□

Случай 2: $P = (L + D)^{-1}$ — метод Гаусса-Зейделя. Сходимость для $A = A^\top > 0$ будет доказана на семинаре.

Случай 3: $P = \tau I, \tau > 0$ — итерация Рундсона.

Теорема 11.3. Пусть $A = A^\top > 0$. Тогда итерация Рундсона сходится при $0 < \tau < \frac{2}{\lambda_{\max}(A)}$. Более того, если

$$\tau = \tau_{\text{opt}} = \frac{2}{\lambda_{\min}(A) + \lambda_{\max}(A)},$$

тогда

$$\|x_{k+1} - x_*\|_2 \leq \frac{\text{cond}_2(A) - 1}{\text{cond}_2(A) + 1} \cdot \|x_k - x_*\|_2$$

Доказательство.

$$\|e_{k+1}\|_2 \leq \|G\|_2 \|e_k\|_2;$$

1.

$$\|G\|_2 = \|I - \tau A\|_2 = \max_i |\lambda_i(I - \tau A)| = \max_i |1 - \tau \lambda_i(A)| < 1.$$

Из того, что $1 - \tau \lambda_{\min}(A) < 1$, следует, что $\tau \lambda_{\min} > 0$. В силу положительной определённости матрицы получаем $\tau > 0$.

С другой стороны,

$$1 - \tau \lambda_{\max}(A) > -1;$$

$$2 > \tau \lambda_{\max}(A);$$

$$\tau < \frac{2}{\lambda_{\max}(A)}.$$

2.

$$\begin{aligned} \|I - \tau A\|_2 &= \max\{|1 - \tau \lambda_{\min}(A)|, |1 - \tau \lambda_{\max}(A)|\} = \\ &= \max\left\{\left|\frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}\right|, \left|\frac{\lambda_{\min} - \lambda_{\max}}{\lambda_{\min} + \lambda_{\max}}\right|\right\} = \frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}} = \frac{\text{cond}(A)_2 - 1}{\text{cond}(A)_2 + 1}. \end{aligned}$$

□

11.2 Метод наискорейшего спуска

Делаем градиентный спуск по функционалу $J(x)$.

1. $J(x) = \|x - x_*\|_2^2$ — вычисление равносильно решению уравнения.
2. $J(x) = \|Ax - b\|_2^2$ — для общего случая, но для $A = A^\top > 0$ можно лучше.
3. $J(x) = \|x - x_*\|_A^2$ — для $A = A^\top > 0$. На первый взгляд зависит от решения, но

$$\|x - x_*\|_A^2 = (x - x_*)^\top A(x - x_*) = (x - x^*)^\top (Ax - b) = x^\top Ax - 2x^\top b + \text{const}$$

$J(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - x^\top b$ — функционал энергии.

$$\nabla J(x) = Ax - b$$

$$x_{k+1} = x_k - \tau_k \nabla J = x_k - \tau_k (Ax_k - b).$$

$$\begin{aligned} J(x_k + \tau r_k) &= \frac{1}{2} (x_k + \tau r_k)^\top A (x_k + \tau r_k) - (x_k + \tau r_k)^\top b = \\ &= \tau r_k^\top A x_k + \frac{1}{2} \tau^2 r_k^\top A r_k - \tau r_k^\top b + \text{const}(\tau) \rightarrow \min_{\tau} \\ \tau_k r_k^\top A r_k - r_k^\top r_k &= 0; \\ \tau_k &= \frac{r_k^\top r_k}{r_k^\top A r_k}. \end{aligned}$$

Теорема 11.4. Пусть $A = A^\top > 0$. Тогда метод наискорейшего спуска сходится и

$$\|x_{k+1} - x_*\|_A \leq \frac{\text{cond}_2(A) - 1}{\text{cond}_2(A) + 1} \|x_k - x_*\|_A.$$

Доказательство. 1.

$$\tau_k = \arg \min_{\tau} \sqrt{x_k + \tau r_k} = \arg \min_{\tau} \|x_k + \tau r_k - x_*\|_A$$

2.

$$\begin{aligned} \|x_{k+1} - x_*\|_A &= \min_{\tau} \|x_k + \tau r_k - x_*\|_A = \min_{\tau} \|(I - \tau A)e_k\|_A \leq \\ &\leq \min_{\tau} \|(I - \tau A)\sqrt{A}e_k\|_2 \leq \min_{\tau} \|I - \tau A\|_2 \cdot \|e_k\|_A. \end{aligned}$$

□

11.3 Итерационный метод Чебышева

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + \tau_k (b - Ax_k); \\ e_{k+1} &= (I - \tau_k A)e_k = (I - \tau_k A) \dots (I - \tau_0 A)e_0 = \mathbb{P}_{k+1}(A) \cdot e_0 \\ \|e_{k+1}\|_2 &\leq \|p_{k+1}(A)\|_2 \|e_0\|_2, \quad p_{k+1}(0) = 1. \end{aligned}$$

11.3.1 Оценка ошибок

[...]

Многочлены Чебышёва — многочлены, наименее отклоняющиеся от нуля на отрезке $[-1; 1]$:

$$T_k(x) = \begin{cases} \cos(k \arccos(x)), & |x| \leq 1; \\ \cosh(k \text{arccosh}(x)), & |x| > 1. \end{cases}$$

Корни T_k легко считаются, через них получаем оценку на $\tau_i = 1/\eta_i$, где η_i — эти самые корни.

11.4 Оптимизация на подпространствах Крылова

В прошлый раз мы рассмотрели несколько функционалов J , для которых верно

$$x_* = \arg \min_x J(x) \Leftrightarrow Ax_* = b.$$

Расширим концепцию и рассмотрим последовательность $L_1 \subset L_2 \subset \dots \subset L_n$, где $\dim(L_k) = k$.

$$x_k = \arg \min_{x \in x_0 + L_k} J(x)$$

Как выбрать L_k ?

$$L_k = \mathcal{K}_k(A, f) = \{f, Af, A^2f, \dots, A^{k-1}f\},$$

(f — либо b , либо $b - Ax_0$)

Варианты для J :

1. $\|Ax - b\|_2$ — методы minres, qmres
2. $\|x - x_*\|_A$, т.е. то же самое, что $J(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x$ — метод CG
3. QMR, bicgstab

При больших k A^*f становятся почти линейно зависимыми, так что нужно будет их ортогонализировать. Если делать это с помощью Грамма-Шмидта, получающийся базис будет называться «векторы Арнольда».

Утверждение 11.1. (Соотношение Арнольда)

$$AQ_k = Q_{k+1}\hat{H}_k, \quad \hat{H}_k = \begin{bmatrix} H_k & & \\ 0 & \dots & 0 & h_{k+1,k}q_{k+1} \end{bmatrix},$$

где H_k — верхнехессенбергова матрица.

Доказательство.

$$\mathfrak{S}(AQ_{k-1}) \subset Q_k,$$

$$A\mathcal{K}_k = A[f, \dots, A^{k-1}f] = [Af, \dots, A^k f] \subset \mathcal{K}_{k+1}.$$

$$Aq_k \in \mathfrak{S}(Q_{k+1}).$$

$$q_{k+1} \cdot \text{const} = (I - Q_k Q_k^\top) Aq_k = Aq_k - (q_1^\top Aq_k)q_1 - \dots - (q_k^\top Aq_k)q_k.$$

□

Следствия: $Q_k^\top A Q_k$ — верхнехессенбергова, $Q_k^\top A Q_k$ — трёхдиагональная (???).

11.5 Метод сопряжённых градиентов

Обозначения:

$$(x, y)_A = x^\top A y = (x, A y);$$

$$x \perp_A y \Leftrightarrow (x, y)_A = 0.$$

Утверждение 11.2.

$$x_k = \arg \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0)} \|x_* - x\|_A \Leftrightarrow x_* - x_k \perp_A \mathcal{K}_k \Leftrightarrow r_k \perp \mathcal{K}_k$$

Доказательство.

$$\|x_* - x\|_A = \|x_* - x_0 - y\|_A \rightarrow \min_{y \in \mathcal{K}_k}$$

P^A — A -ортогональный проектор на \mathcal{K}_k : $(P^A)^2 = P^A$; $(P^A x, y)_A = (x, P^A y)_A$.

$$x_* - x_0 = P^A(x_* - x_0) + (I - P^A)(x_* - x_0)$$

$$\|x_* - x_0 - y\|_A^2 = \left\| P^A(x_* - x_0) - y + (I - P^A)(x_* - x_0) \right\|_A^2 = \left\| P^A(x_* - x_0) - y \right\|_A^2 + \text{const} \rightarrow \min_y$$

$$y = P^A(x_* - x_0).$$

□

Из утверждения 12.1 следует, что $Q_k^\top A Q_k$ — трёхдиагональная. Если A ещё и положительно определённая, то мы можем применить к $Q_k^\top A Q_k$ разложение Холецкого.

$$Q_k^\top A Q_k = R_k^\top R_k$$

$$(Q_k R_k^{-1} D_k)^\top A Q_k R_k^{-1} D_k = D_k^2$$

$$P_k^\top A P_k = D_k^2, \quad p_i \perp_A p_j.$$

$$x_k = x_0 + P_k a_k, \quad a_k = [\alpha_1, \dots, \alpha_k]^\top$$

$$r_k = r_0 - A P_k a_k, \quad r_k \perp \mathfrak{S}(P_k)$$

$$0 = P_k^\top r_k = P_k^\top r_0 - P_k^\top A P_k a_k$$

$$D_k^2 a_k = P_k^\top r_0$$

$$x_k = x_0 + P_k a_k = x_0 + P_{k-1} a_{k-1} + \alpha_k P_k$$

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k$$

$$r_k = r_{k-1} - \alpha_k A p_k$$

Как искать α_k и p_k ?

$$r_k \perp p_k, p_k^\top r_k = p_k^\top r_{k-1} - \alpha_k p_k^\top A p_k$$

$$\alpha_k = \frac{p_k^\top r_{k-1}}{p_k^\top A p_k}$$

$$r_k = r_0 - A p_k a_k \in \mathcal{K}_{k+1}$$

$$r_k \perp \mathfrak{S}(P_k) = \mathcal{K}_k$$

$$r_k \parallel q_{k+1}$$

$$\begin{aligned}
q_{k+1} &= \frac{r_k}{\|r_k\|_2} \\
P_k &= Q_k R_k^{-1} D_k \\
Q_k &= P_k D_k^{-1} R_k \\
q_k &= p_k \frac{\gamma_k}{d_k} + p_{k-1} \frac{\delta_{k-1}}{d_{k-1}} \\
q_{k+1} &= p_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{d_{k+1}} + p_k \frac{\delta_k}{d_k} \\
p_{k+1} &= \frac{d_{k+1}}{\gamma_{k+1}} q_{k+1} - \frac{d_{k+1}}{\gamma_{k+1}} \frac{\delta_k}{d_k} p_k = r_k + \beta_k p_k \\
p_{k+1} \perp_A p_k &\Rightarrow \beta_k = \dots
\end{aligned}$$

Итог:

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{(r_{k-1}, p_k)}{(Ap_k, p_k)} \\
x_k &= x_{k-1} + \alpha_k p_k \\
r_k &= r_{k-1} - \alpha_k Ap_k \\
\beta_k &= -\frac{(r_k, Ap_k)}{(p_k, Ap_k)} \\
p_{k+1} &= r_k + \beta_k p_k
\end{aligned}$$

11.5.1 Сходимость CG

$$x_k = x_0 + y, \quad y \in \mathcal{K}_k(A, r_0)$$

$$x_k = x_0 + \mathbb{P}_{k-1}(A)r_0$$

$$r_k = r_0 - Ay = r_0 - Ap_{k-1}(A)r_0 = (I - Ap_{k-1}(A))r_0 =: q_k(A)r_0$$

$$\|e_k\|_A^2 = (e_k, Ae_k) = (-A^{-1}r_k, -r_k) = (A^{-1}q_k(A)r_0, q_k(A)r_0)$$

Разложим r_0 по собственному базису A (A — унитарно диагонализуема). Получим

$$\|e_k\|_A^2 = \left(\sum c_i A^{-1} q_k(A) v_i, \sum c_i q_k(A) v_i \right) = \left(\sum \frac{c_i q_k(\lambda_i)}{\lambda_i} v_i, \sum c_i q_k(\lambda_i) v_i \right)$$

Вспомним про ортогональность v_i .

$$\|e_k\|_A^2 = \sum \frac{c_i^2 q_k^2(\lambda_i)}{\lambda_i} \leq \left(\max_i |q_k(\lambda_i)| \right)^2 \sum \frac{c_i^2}{\lambda_i} = (\dots)^2 (A^{-1}r_0, r_0)$$

Повторяем рассуждения из анализа ошибок метода Чебышева, получаем

$$\|e_k\|_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\lambda_n/\lambda_1} - 1}{\sqrt{\lambda_n/\lambda_1} + 1} \right)^k \|e_0\|_A$$

Однако нам нужно минимизировать значения q только в точках спектра; для этого возьмём многочлен

$$q(\lambda) = \frac{f(\lambda)}{f(0)} \left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_n} \right), \quad f(\lambda) = T_k \left(\frac{\lambda_1 + \lambda_{n-1} - 2\lambda}{\lambda_1 + \lambda_{n-1}} \right)$$

11.6 Предобуславливание

$$\begin{cases} P_L A P_R y = P_L b \\ x = P_R y \end{cases}$$

Варианты:

1. Якоби, Гаусс-Зейдель
2. Блочный Якоби
3. Неполное LU-разложение — например, по шаблону разреженности, и/или пренебрегать элементами $\leq \text{droptol}$.

11.7 Метод обобщённых минимальных невязок (gmres)

$$A = \mathbb{R}^{n \times n}, \quad \det(A) \neq 0$$

$$x_k = \arg \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0)} \|Ax - b\|_2$$

Вспомним соотношение Арнольди, с его помощью выведем метод.

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2 &= \|AQ_k c - r_0\|_2 = \|Q_{k+1} \hat{H}_k c - r_0\|_2 = \|Q_{k+1} \hat{H}_k c - Q_{k+1} e_1 \|r_0\|_2\|_2 = \\ &= \|Q_{k+1} (\hat{H}_k c - \|r_0\|_2 e_1)\|_2 = \|\hat{H}_k c - \|r_0\|_2 e_1\|_2 \end{aligned}$$

Разложим $\hat{H}_k = QR$ с помощью вращений Гивенса. Раз \hat{H}_k — верхнехессенбергова матрица, то сложность будет $O(k^2)$, а не $O(k^3)$.

Но нам необходимо хранить $O(nk)$ векторов. Для этого просто перезапускаем каждые restart итераций, а затем начинаем с x_{restart} .

Если $A = A^\top$, то получаются «короткие» формулы, называется minres.

12 Методы решения частичной задачи на собственные значения

$$Av^{(i)} = \lambda^{(i)} v^{(i)}, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad \lambda^{(i)} \in \mathbb{C}$$

Отношение Релея:

$$R(x) = \frac{(Ax, x)}{(x, x)}$$

$$\Rightarrow R(v^{(i)}) = \frac{(Av^{(i)}, v^{(i)})}{(v^{(i)}, v^{(i)})} = \lambda^{(i)}$$

$$\nabla R(x) = \frac{2}{(x, x)} (A - R(x))x \quad \Rightarrow \quad \min_{x \neq 0} \lambda^{(i)} = \min_{x \neq 0} R(x); \quad \max_{x \neq 0} \lambda^{(i)} = \max_{x \neq 0} R(x).$$

12.1 Степенной метод (power iteration)

$$x_{k+1} = \frac{Ax_k}{\|Ax_k\|_2}$$

12.1.1 Сходимость

$$x_{k+1} = \frac{Ax_k}{\|Ax_k\|_2} = \frac{A \frac{Ax_{k-1}}{\|Ax_{k-1}\|}}{\left\| A \frac{Ax_{k-1}}{\|Ax_{k-1}\|} \right\|} = \frac{A^2 x_{k-1}}{\|A^2 x_{k-1}\|} = \dots = \frac{A^k x_0}{\|A^k x_0\|}$$

Пусть A диагонализуема, и максимальное по модулю собственное значение — простое число. Тогда

$$x_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i v^{(i)};$$

$$x_k = \frac{\sum \alpha_i (\lambda^{(i)})^k v^{(i)}}{\|\dots\|} = \left(\frac{\lambda^{(1)}}{|\lambda^{(1)}|} \right)^k \frac{v^{(1)} + \sum \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda^{(i)}}{\lambda^{(1)}} \right)^k v^{(i)}}{\|\dots\|} = e^{i\varphi k} \left(v^{(1)} + \mathcal{O} \left(\left| \lambda^{(2)}/\lambda^{(1)} \right|^k \right) \right)$$

(степень $2k$, если $A = A^\top$)

Замечание. Анализ показывает, почему базисные вектора $\mathcal{K}_k(A, b)$ становятся линейно зависими.

12.1.2 Блочная версия

$$X_0 \in \mathbb{R}^{n \times p}, \quad p \ll n; \quad Y_k = AX_k; \quad Y_k = X_{k+1}R_{k+1}$$

(В последнем выражении выписано QR-разложение)

$L_k = \mathfrak{S}(X_k)$ сходится к инвариантному подпространству A . Ошибка порядка $\mathcal{O}(|\lambda^{(p+1)}/\lambda^{(p)}|^k)$.

12.2 Обратная итерация

$$x_{k+1} = \frac{A^{-1}x_k}{\|A^{-1}x_k\|_2}$$

Заметим, что $A^{-1}v^{(i)} = \frac{1}{\lambda^{(i)}}v^{(i)}$. Получаем, что итерация сходится к собственному вектору наименьшего собственного значения.

12.2.1 Итерация со сдвигом

$$y_{k+1} = (A - \sigma I)^{-1}x_k.$$

Ошибка — $\mathcal{O} \left(\left| \frac{\lambda^{(1)} - \sigma}{\lambda^{(2)} - \sigma} \right|^k \right)$.

12.2.2 Итерация Релея

$$\sigma = \sigma_k = R(x_k)$$

Оказывается, что итерация Релея обладает суперсходимостью: $|e_{k+1}| = \mathcal{O}(|e_k|^\gamma)$. При $A = A^\top$ гамма равна трём, иначе двум.

12.3 Методы Ланцоша и Арнольди

Вычисляем $A_k x_0$. Почему бы не попытаться найти приближение в пространстве Крылова $\mathcal{K}_k(A, x_0)$?

Алгоритм (метод Релея-Ритца)

Пусть $Q_k \in \mathbb{R}^{n \times k}$ — ортогональный базис в $V_k : \dim(V_k) = k$. Как найти собственные векторы и собственные значения наилучшим образом?

$A_k = Q_k^\top A Q_k$ — проекционное сужение A .

$A_k = S \Lambda S^{-1}$ — собственное разложение.

$\Lambda = \text{diag}(\theta_1, \dots, \theta_k)$ — числа Ритца.

$Z_k = Q_k S$ — векторы Ритца.

Теорема 12.1. Пусть $Q_k \in \mathbb{R}^{n \times k} : Q_k^\top Q_k = I_k$. Тогда

$$A_k = Q_k^\top A Q_k = \arg \min_{R \in \mathbb{R}^{k \times k}} \|A Q_k - Q_k R\|_2$$

Доказательство.

$$\|A Q_k - Q_k R\|_2^2 = \lambda_{\max} \left((A Q_k - Q_k R)^\top (A Q_k - Q_k R) \right)$$

В свою очередь,

$$\begin{aligned} (A Q_k - Q_k R)^\top (A Q_k - Q_k R) &= (A Q_k - Q_k A_k)^\top (A Q_k - Q_k A_k) - \\ &- (A Q_k - Q_k A_k)^\top Q_k Z - (Q_k Z)^\top (A Q_k - Q_k A_k) + (Q_k Z)^\top (Q_k Z) = \\ &= (A Q_k - Q_k A_k)^\top (A Q_k - Q_k A_k) + Z^\top Z \end{aligned}$$

Минимум максимального λ достигается при $Z = 0$. □

Следствие Пусть $A = A^\top$ и $A_k = S \Lambda S^\top$. Тогда

$$\min_{P_k, D} \|A P_k - P_k D\|_2$$

достигается на $D = \Lambda$, $P_k = Q_k S$. Условия на P_k , D : $P_k^\top P_k = I$; $\Im(P_k) = \Im(Q_k)$; D — диагональная.

12.4 Вектор Фидлера и спектральная бисекция графов

Дан граф из n вершин. Цель — ввести $x_k = \{-1, 1\}$ такие, что

$$J(x) = \sum_i \sum_{j \in N(i)} (x_i - x_j)^2 = x^\top L x \rightarrow \min.$$