Implicitni QR

Bor Plestenjak

NLA

24. marec 2013

QR algoritem za nesimetrične matrike

Dana je matrika $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$

Osnovna varianta

$A_0 = A$
$k = 0, 1, \ldots :$
$\quad A_k = Q_k R_k$ (izračunaj QR razcep)
$\quad A_{k+1} = R_k Q_k$

QR algoritem za nesimetrične matrike

Dana je matrika $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Osnovna varianta

$A_0 = A$
$k = 0, 1, \ldots :$
$\quad A_k = Q_k R_k$ (izračunaj QR razcep)
$\quad A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k$

QR algoritem za nesimetrične matrike

Dana je matrika $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Osnovna varianta

$$
\begin{aligned}
& A_0 = A \\
& k = 0, 1, \ldots : \\
& \quad A_k = Q_k R_k \ \text{(izračunaj QR razcep)} \\
& \quad A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k
\end{aligned}
$$

En korak osnovne QR iteracije porabi $\mathcal{O}(n^3)$ operacij

QR algoritem za nesimetrične matrike

Dana je matrika $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$

Osnovna varianta

$A_0 = A$
$k = 0, 1, \ldots :$
$\quad A_k = Q_k R_k$ (izračunaj QR razcep)
$\quad A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k$

En korak osnovne QR iteracije porabi $\mathcal{O}(n^3)$ operacij

Matrika A_k skonvergira proti realni Schurovi formi.

Redukcija na Hessenbergovo obliko

Matriko najprej z ortogonalno podobnostno transformacijo pretvorimo v zgornjo Hessenbergovo obliko, ki se ohranja med QR iteracijo.

Število operacij je $\frac{10}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ oziroma $\frac{14}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ če potrebujemo tudi Q.

Ko ima A Hessenbergovo obliko, porabimo za en korak QR iteracije le $\mathcal{O}(n^2)$ operacij.

Predpostavimo lahko, da je Hessenbergova matrika ireducibilna.

Redukcija na Hessenbergovo obliko

Matriko najprej z ortogonalno podobnostno transformacijo pretvorimo v zgornjo Hessenbergovo obliko, ki se ohranja med QR iteracijo.

Število operacij je $\frac{10}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ oziroma $\frac{14}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ če potrebujemo tudi Q.

Ko ima A Hessenbergovo obliko, porabimo za en korak QR iteracije le $\mathcal{O}(n^2)$ operacij.

Predpostavimo lahko, da je Hessenbergova matrika ireducibilna.

Eliminacija

Subdiagonalni element $a_{i+1,i}^{(k)}$ matrike A_k proglasimo za 0, ko zadošča kriteriju

$$|a_{i+1,i}^{(k)}| < \epsilon(|a_{ii}^{(k)}| + |a_{i+1,i+1}^{(k)}|),$$

kjer je $\epsilon = \mathcal{O}(u)$ izbrana toleranca.

QR iteracija s premiki

S premiki pospešimo konvergenco.

Varianta s premiki

$A_0 = A$
$k = 0, 1, \ldots :$
  izberi premik σ_k
  $A_k - \sigma_k I = Q_k R_k$ (izračunaj QR razcep)
  $A_{k+1} = R_k Q_k + \sigma_k I$

QR iteracija s premiki

S premiki pospešimo konvergenco.

Varianta s premiki

$A_0 = A$
$k = 0, 1, \ldots :$
  izberi premik σ_k
  $A_k - \sigma_k I = Q_k R_k$ (izračunaj QR razcep)
  $A_{k+1} = R_k Q_k + \sigma_k I = Q_k^T A_k Q_k$

QR iteracija s premiki

S premiki pospešimo konvergenco.

Varianta s premiki

$A_0 = A$
$k = 0, 1, \ldots :$
  izberi premik σ_k
  $A_k - \sigma_k I = Q_k R_k$ (izračunaj QR razcep)
  $A_{k+1} = R_k Q_k + \sigma_k I = Q_k^T A_k Q_k$

Pri enojnih premikih izberemo $\sigma_k = a_{nn}^{(k)}$.

QR iteracija s premiki

S premiki pospešimo konvergenco.

Varianta s premiki

$A_0 = A$
$k = 0, 1, \ldots :$
  izberi premik σ_k
  $A_k - \sigma_k I = Q_k R_k$ (izračunaj QR razcep)
  $A_{k+1} = R_k Q_k + \sigma_k I = Q_k^T A_k Q_k$

Pri enojnih premikih izberemo $\sigma_k = a_{nn}^{(k)}$.

Enojni premiki niso dobri za kompleksne lastne vrednosti. Tu so boljši dvojni premiki.

Dvojni oz. Francisov premik

Vzamemo lastni vrednosti $\sigma_1^{(k)}, \sigma_2^{(k)}$ (lahko sta tudi kompleksni) podmatrike

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

in naredimo dva premika v enem koraku:

$$\begin{aligned} &A_k - \sigma_1^{(k)} I = Q_k R_k \text{ (izračunaj QR razcep)} \\ &A_k' = R_k Q_k + \sigma_1^{(k)} I \\ &A_k' - \sigma_2^{(k)} I = Q_k' R_k' \text{ (izračunaj QR razcep)} \\ &A_{k+1} = R_k' Q_k' + \sigma_2^{(k)} I \end{aligned}$$

Dvojni oz. Francisov premik

Vzamemo lastni vrednosti $\sigma_1^{(k)}, \sigma_2^{(k)}$ (lahko sta tudi kompleksni) podmatrike

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

in naredimo dva premika v enem koraku:

$$\begin{aligned}
&A_k - \sigma_1^{(k)} I = Q_k R_k \text{ (izračunaj QR razcep)} \\
&A_k' = R_k Q_k + \sigma_1^{(k)} I \\
&A_k' - \sigma_2^{(k)} I = Q_k' R_k' \text{ (izračunaj QR razcep)} \\
&A_{k+1} = R_k' Q_k' + \sigma_2^{(k)} I = Q_k'^H A_k' Q_k' = Q_k'^H Q_k^H A_k Q_k Q_k'
\end{aligned}$$

Dvojni oz. Francisov premik

Vzamemo lastni vrednosti $\sigma_1^{(k)}, \sigma_2^{(k)}$ (lahko sta tudi kompleksni) podmatrike

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

in naredimo dva premika v enem koraku:

$$\begin{aligned}
&A_k - \sigma_1^{(k)} I = Q_k R_k \text{ (izračunaj QR razcep)} \\
&A_k' = R_k Q_k + \sigma_1^{(k)} I \\
&A_k' - \sigma_2^{(k)} I = Q_k' R_k' \text{ (izračunaj QR razcep)} \\
&A_{k+1} = R_k' Q_k' + \sigma_2^{(k)} I = Q_k'^H A_k' Q_k' = Q_k'^H Q_k^H A_k Q_k Q_k'
\end{aligned}$$

Izkaže se, da velja

$$Q_k Q_k' R_k' R_k = A_k^2 - (\sigma_1^{(k)} + \sigma_2^{(k)}) A_k + \sigma_1^{(k)} \sigma_2^{(k)} I =: N_k$$

in potrebujemo le QR razcep realne matrike N_k.

Izrek o implicitnem Q

Izrek (Implicitni Q)

Če je $Q = [q_1 \ \cdots \ q_n]$ *taka ortogonalna matrika, da je* $Q^T AQ = H$ *ireducibilna Hessenbergova matrika, potem so stolpci* $q_2, \ldots, q_n$ *do predznaka natančno določeni s* q_1*.*

Izrek o implicitnem Q

Izrek (Implicitni Q)

Če je $Q = [q_1 \ \cdots \ q_n]$ *taka ortogonalna matrika, da je* $Q^T AQ = H$ *ireducibilna Hessenbergova matrika, potem so stolpci* $q_2, \ldots, q_n$ *do predznaka natančno določeni s* q_1*.*

Posledica: v QR algoritmu velja $A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k$, matrika A_{k+1} pa je zgornja Hessenbergova. Če poznamo prvi stolpec Q_k, lahko A_{k+1} izračunamo brez tega, da bi računali celoten QR razcep matrike A_k.

Izrek o implicitnem Q

Izrek (Implicitni Q)

Če je $Q = [q_1 \ \cdots \ q_n]$ taka ortogonalna matrika, da je $Q^T A Q = H$ ireducibilna Hessenbergova matrika, potem so stolpci $q_2, \ldots, q_n$ do predznaka natančno določeni s q_1.

Posledica: v QR algoritmu velja $A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k$, matrika A_{k+1} pa je zgornja Hessenbergova. Če poznamo prvi stolpec Q_k, lahko A_{k+1} izračunamo brez tega, da bi računali celoten QR razcep matrike A_k.

Tako dobimo implicitno QR iteracijo.

- pri enojnem premiku potrebujemo le prvi stolpec matrike $A_k - \sigma_k I$,
- pri dvojnem premiku potrebujemo le prvi stolpec matrike

$$N_k = A_k^2 - (\sigma_1^{(k)} + \sigma_2^{(k)}) A_k + \sigma_1^{(k)} \sigma_2^{(k)} I.$$

Implicitna QR iteracija z enojnim premikom

Če je prvi stolpec ortogonalne matrike Q_k normiran prvi stolpec $A_k - \sigma_k I$ in je $Q_k^T A_k Q_k$ zgornja Hessenbergova, je po izreku $A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k$.

Matriko Q_k dobimo kot produkt Givensovih rotacij $Q_k = R_{12} R_{23} \cdots R_{n-1,n}$.

Implicitna QR iteracija z enojnim premikom

Če je prvi stolpec ortogonalne matrike Q_k normiran prvi stolpec $A_k - \sigma_k I$ in je $Q_k^T A_k Q_k$ zgornja Hessenbergova, je po izreku $A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k$.

Matriko Q_k dobimo kot produkt Givensovih rotacij $Q_k = R_{12} R_{23} \cdots R_{n-1,n}$. Prva rotacija R_{12} je določena s prvim stolpcem $A_k - \sigma_k I$, ostale pa določimo tako, da je $Q_k^T A_k Q_k$ zgornja Hessenbergova. Če je namreč

$$R_{12} = \begin{bmatrix} c_1 & s_1 & & & \\ -s_1 & c_1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{bmatrix},$$

potem je

$$Q_k = R_{12} R_{23} \cdots R_{n-1,n} = \begin{bmatrix} c_1 & \times & \cdots & \cdots & \times \\ -s_1 & \times & \cdots & \cdots & \times \\ & \times & & & \vdots \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}.$$

Premikanje grbe

Poglejmo algoritem t.i. premikanja grbe na primeru matrike 5×5.

$$A_k = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Premikanje grbe

Poglejmo algoritem t.i. premikanja grbe na primeru matrike 5×5.

$$R_{12}^T A_k \qquad = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Premikanje grbe

Poglejmo algoritem t.i. premikanja grbe na primeru matrike 5×5.

$$R_{12}^T A_k R_{12} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ + & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Neničelni element, označen s $+$, je grba, ki jo z rotacijami pomikamo navzdol.

$$R_{12} = \begin{bmatrix} c_1 & s_1 & & & \\ -s_1 & c_1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Premikanje grbe

Poglejmo algoritem t.i. premikanja grbe na primeru matrike 5×5.

$$R_{23}^T R_{12}^T A_k R_{12} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Neničelni element, označen s $+$, je grba, ki jo z rotacijami pomikamo navzdol.

$$R_{12} = \begin{bmatrix} c_1 & s_1 & & & \\ -s_1 & c_1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Premikanje grbe

Poglejmo algoritem t.i. premikanja grbe na primeru matrike 5×5.

$$R_{23}^T R_{12}^T A_k R_{12} R_{23} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & + & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Neničelni element, označen s $+$, je grba, ki jo z rotacijami pomikamo navzdol.

$$R_{12} R_{23} = \begin{bmatrix} c_1 & \times & \times & & \\ -s_1 & \times & \times & & \\ & \times & \times & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Premikanje grbe

Poglejmo algoritem t.i. premikanja grbe na primeru matrike 5×5.

$$R_{34}^T R_{23}^T R_{12}^T A_k R_{12} R_{23} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Neničelni element, označen s $+$, je grba, ki jo z rotacijami pomikamo navzdol.

$$R_{12} R_{23} = \begin{bmatrix} c_1 & \times & \times & & \\ -s_1 & \times & \times & & \\ & \times & \times & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Premikanje grbe

Poglejmo algoritem t.i. premikanja grbe na primeru matrike 5×5.

$$R_{34}^T R_{23}^T R_{12}^T A_k R_{12} R_{23} R_{34} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & + & \times & \times \end{bmatrix}$$

Neničelni element, označen s $+$, je grba, ki jo z rotacijami pomikamo navzdol.

$$R_{12} R_{23} R_{34} = \begin{bmatrix} c_1 & \times & \times & \times & \\ -s_1 & \times & \times & \times & \\ & \times & \times & \times & \\ & & \times & \times & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Premikanje grbe

Poglejmo algoritem t.i. premikanja grbe na primeru matrike 5×5.

$$R_{45}^T R_{34}^T R_{23}^T R_{12}^T A_k R_{12} R_{23} R_{34} \quad = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Neničelni element, označen s $+$, je grba, ki jo z rotacijami pomikamo navzdol.

$$R_{12} R_{23} R_{34} \quad = \begin{bmatrix} c_1 & \times & \times & \times & \\ -s_1 & \times & \times & \times & \\ & \times & \times & \times & \\ & & \times & \times & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Premikanje grbe

Poglejmo algoritem t.i. premikanja grbe na primeru matrike 5×5.

$$R_{45}^T R_{34}^T R_{23}^T R_{12}^T A_k R_{12} R_{23} R_{34} R_{45} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Neničelni element, označen s $+$, je grba, ki jo z rotacijami pomikamo navzdol.

$$R_{12} R_{23} R_{34} R_{45} = \begin{bmatrix} c_1 & \times & \times & \times & \times \\ -s_1 & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Premikanje grbe

Poglejmo algoritem t.i. premikanja grbe na primeru matrike 5×5.

$$R_{45}^T R_{34}^T R_{23}^T R_{12}^T A_k R_{12} R_{23} R_{34} R_{45} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix} = A_{k+1}.$$

Neničelni element, označen s $+$, je grba, ki jo z rotacijami pomikamo navzdol.

Dobljena zgornja Hessenbergova matrika je po izreku o implicitnem Q enaka A_{k+1}.

$$R_{12} R_{23} R_{34} R_{45} = \begin{bmatrix} c_1 & \times & \times & \times & \times \\ -s_1 & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix} = Q_k.$$

Implicitna QR iteracija z dvojnim premikom

Če je prvi stolpec ortogonalne matrike Q_k normiran prvi stolpec

$$N_k = A_k^2 - (\sigma_1^{(k)} + \sigma_2^{(k)})A_k + \sigma_1^{(k)}\sigma_2^{(k)} I$$

in je $Q_k^T A_k Q_k$ zgornja Hessenbergova, je po izreku $A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k$.

Q_k dobimo kot produkt Householderjevih 3×3 zrcaljenj $Q_k = P_1 P_2 \cdots P_{n-1}$, kjer je zrcaljenje P_1 določeno s prvim stolpcem N_k, ostala pa določimo tako, da je $Q_k^T A_k Q_k$ zgornja Hessenbergova.

P_1 ima obliko

$$P_1 = \begin{bmatrix} \color{red}{\times} & \times & \times & & & \\ \color{red}{\times} & \times & \times & & & \\ \color{red}{\times} & \times & \times & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$A_k = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$
\color{red}{P_1} A_k = \begin{bmatrix}
\color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\
\color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\
\color{red}{+} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\
 & & \times & \times & \times & \times \\
 & & & \times & \times & \times \\
 & & & & \times & \times
\end{bmatrix}
$$

$$
P_1 = \begin{bmatrix}
\times & \times & \times & & & \\
\times & \times & \times & & & \\
\times & \times & \times & & & \\
 & & & 1 & & \\
 & & & & 1 & \\
 & & & & & 1
\end{bmatrix}
$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$P_1 A_k \color{red}{P_1} = \begin{bmatrix} \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \times & \times & \times \\ \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \times & \times & \times \\ \color{red}{+} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \times & \times & \times \\ \color{red}{+} & \color{red}{+} & \color{red}{\times} & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

$$P_1 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & & & \\ \times & \times & \times & & & \\ \times & \times & \times & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$\color{red}{P_2}\color{black}{P_1 A_k P_1} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\ & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\ & \color{red}{+} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

$$P_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \times & \times & \times & & \\ & \times & \times & \times & & \\ & \times & \times & \times & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$P_2 P_1 A_k P_1 {\color{red}P_2} = \begin{bmatrix} \times & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & \times & \times \\ \times & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & \times & \times \\ & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & \times & \times \\ & {\color{red}+} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & \times & \times \\ & {\color{red}+} & {\color{red}+} & {\color{red}\times} & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

$$P_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \times & \times & \times & & \\ & \times & \times & \times & & \\ & \times & \times & \times & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$
{\color{red}P_3}P_2P_1A_kP_1P_2 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} \\ & & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} \\ & & {\color{red}+} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix}
$$

$$
P_3 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & \times & \times & \times & \\ & & \times & \times & \times & \\ & & \times & \times & \times & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}
$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$P_3 P_2 P_1 A_k P_1 P_2 {\color{red}P_3} = \begin{bmatrix} \times & \times & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & \times \\ \times & \times & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & \times \\ & \times & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & \times \\ & & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & \times \\ & & {\color{red}+} & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} & \times \\ & & {\color{red}+} & {\color{red}+} & {\color{red}\times} & \times \end{bmatrix}$$

$$P_3 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & \times & \times & \times & \\ & & \times & \times & \times & \\ & & \times & \times & \times & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$\color{red}{P_4}\color{black} P_3 P_2 P_1 A_k P_1 P_2 P_3 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\ & & & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\ & & & \color{red}{+} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \end{bmatrix}$$

$$P_4 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \end{bmatrix}$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$P_4 P_3 P_2 P_1 A_k P_1 P_2 P_3 \color{red}{P_4} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\ \times & \times & \times & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\ & \times & \times & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\ & & \times & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\ & & & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \\ & & & \color{red}{+} & \color{red}{\times} & \color{red}{\times} \end{bmatrix}$$

$$P_4 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \end{bmatrix}$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$P_5 P_4 P_3 P_2 P_1 A_k P_1 P_2 P_3 P_4 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

$$P_5 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$P_5 P_4 P_3 P_2 P_1 A_k P_1 P_2 P_3 P_4 {\color{red}P_5} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} \\ \times & \times & \times & \times & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} \\ & \times & \times & \times & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} \\ & & \times & \times & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} \\ & & & \times & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} \\ & & & & {\color{red}\times} & {\color{red}\times} \end{bmatrix}$$

$$P_5 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Premikanje 2×2 grbe

Poglejmo korak implicitnega QR z dvojnim premikom na primeru matrike 6×6.

$$P_5P_4P_3P_2P_1A_kP_1P_2P_3P_4P_5 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix} = A_{k+1}.$$

Dobljena zgornja Hessenbergova matrika je po izreku o implicitnem Q enaka A_{k+1}.

$$P_5 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

Podrobnosti

Prvi stolpec matrike N_k ima obliko

$$\begin{bmatrix} a_{11}^2 + a_{12}a_{21} - sa_{11} + t \\ a_{21}(a_{11} + a_{22} - s) \\ a_{21}a_{32} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix},$$

kjer sta

$$\begin{aligned} s &= a_{n-1,n-1} + a_{nn} \\ t &= a_{n-1,n-1}a_{nn} - a_{n-1,n}a_{n,n-1}. \end{aligned}$$

Če delamo QR algoritem na implicitni način, lahko en korak z dvojnim premikom izvedemo v $\mathcal{O}(n^2)$ operacijah.

Podrobnosti

Prvi stolpec matrike N_k ima obliko

$$\begin{bmatrix} a_{11}^2 + a_{12}a_{21} - sa_{11} + t \\ a_{21}(a_{11} + a_{22} - s) \\ a_{21}a_{32} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix},$$

kjer sta

$$\begin{aligned} s &= a_{n-1,n-1} + a_{nn} \\ t &= a_{n-1,n-1}a_{nn} - a_{n-1,n}a_{n,n-1}. \end{aligned}$$

Če delamo QR algoritem na implicitni način, lahko en korak z dvojnim premikom izvedemo v $\mathcal{O}(n^2)$ operacijah. Bolj podrobno, en korak stane $10n^2$ operacij, če računamo le A_{k+1} in še dodatnih $10n^2$ operacij, če posodobimo še matriko Q.

Konvergenca

QR algoritem je obratno stabilen.

Za izračunano realno Schurovo formo $\widehat{T}$ obstaja taka ortogonalna matrika Q, da je

$$Q^T(A+E)Q = \widehat{T},$$

kjer je $\|E\|_2 \approx \|A\|_2 u$.

Konvergenca

QR algoritem je obratno stabilen.

Za izračunano realno Schurovo formo $\widehat{T}$ obstaja taka ortogonalna matrika Q, da je

$$Q^T(A+E)Q = \widehat{T},$$

kjer je $\|E\|_2 \approx \|A\|_2 u$.

Celoten algoritem (z redukcijo na Hessenbergovo obliko vred) v povprečju potrebuje $10n^3$ operacij, če računamo le realno Schurovo formo T, oziroma $25n^3$ operacij, če potrebujemo še prehodno ortogonalno matriko Q.

V povprečju potrebujemo dve Francisovi iteraciji, da pridobimo nov 1×1 ali 2×2 diagonalni blok. Konvergenca v bližini lastne vrednosti je kvadratična.

Kaj še manjka do popolnosti?

QR algoritem z dvojnimi premiki je trenutno najboljši algoritem za nesimetrične matrike in se trenutno uporablja v Matlabu in Lapacku. Sodobne verzije pa vsebujejo še nekaj izboljšav:

- Sledimo hkrati več sosednjih grb 2×2. Prednost je, da potem lahko več operacij izvedemo z bloki matrik in tako pridobimo na učinkovitosti.
- Agresivna deflacija. Z boljšimi ocenami lahko subdiagonalne elemente že prej proglasimo za 0 in izločimo manjše diagonalne bloke.

Kaj še manjka do popolnosti?

QR algoritem z dvojnimi premiki je trenutno najboljši algoritem za nesimetrične matrike in se trenutno uporablja v Matlabu in Lapacku. Sodobne verzije pa vsebujejo še nekaj izboljšav:

- Sledimo hkrati več sosednjih grb 2×2. Prednost je, da potem lahko več operacij izvedemo z bloki matrik in tako pridobimo na učinkovitosti.
- Agresivna deflacija. Z boljšimi ocenami lahko subdiagonalne elemente že prej proglasimo za 0 in izločimo manjše diagonalne bloke.

Dodatne informacije npr. na

`http://www2.cs.cas.cz/harrachov/slides/Kressner.pdf`