Лекция 6

Основы матричных вычислений

Рахуба М.В.

22.02.21

① $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, плотная

np.linalg.svd : $O(n^3)$

randomized : $O(n^2 r)$ можно меньше

ALS : $O(n^2 r \cdot K(\varepsilon))$ ещё меньше для разр.

(позволяет добиться треб. точности и подходит для разных функционалов)

число итер. от ε-точности

ALS для тензоров: $\| A - [\![G; U, V, W]\!] \|_F^2 \to \min_{U, V, W, G}$ по очереди минимизир.

Псевдоскелет : $O(n r^{\alpha}), \alpha \geq 1$

$(C \hat{A}^{-1} R)$

Почти оптимальная сложность, но меньше теор гарантий. Вынужд. не смотреть на все элем A.

Как выбрать $\hat{A}$?

$\boxed{\text{Теор}}$ Пусть $\exists B$, $\operatorname{rank}(B) = r : \|A - B\|_2 \leq \varepsilon$

Пусть $\hat{A} \in \mathbb{C}^{r \times r}$ имеет макс. $|\det(\hat{A})|$ (объём)

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

Поиск $\hat{A}$ — макс. объема — NP-сложная задача.

Но можно пытаться находить $\hat{A}$ достаточно большого объёма

1) Случайные столбцы C и строки R (теор гарантии для спец. класса матриц (https://epubs.siam.org/doi/pdf/10.1137/110852310)

2) Жадные алгоритмы (cross approximation)

https://www.epfl.ch/labs/anchp/wp-content/uploads/2018/10/lecture4-slides.pdf

Вычисление QR разложение

$$[a_1 \dots a_n] = [q_1 \dots q_n]\begin{bmatrix} * & * \\ 0 & * \end{bmatrix}$$

$$A \in \mathbb{C}^{m\times n} \qquad Q \qquad R$$

$$Q^* Q = I$$

$$\Downarrow$$

$$\operatorname{span}(a_1, \dots, a_k) \subseteq \operatorname{span}(q_1, \dots, q_k) \ \forall k$$

$\boxed{\text{Идея}}$ Найти унитар. преобр. $V_1, V_2, \dots, V_N$

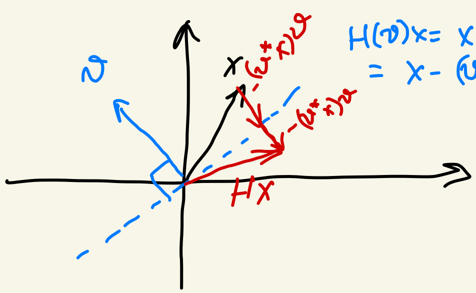
$$V_N \dots V_2 V_1 A = R$$

1 Отражение Хаусхолдера

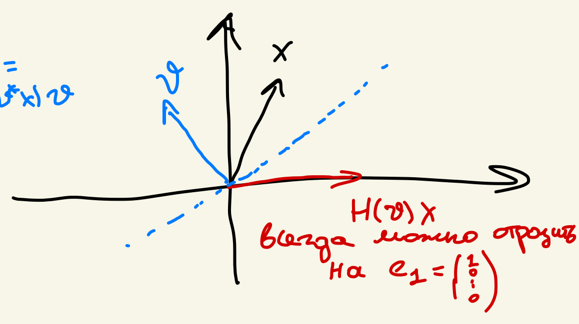
Хотим для x найти унитар H:

$$Hx = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$H(v) = \underbrace{I - 2vv^*}_{\text{унитар., эрмитова}}, \quad \|v\|_2 = 1 \text{ — матрица Хаусхолдера}$$



$$H(v)x = x - 2vv^*x =$$
$$= x - (v^*x)v - (v^*x)v$$



$\boxed{\text{Утв 1}}$ $\forall\ a, b \in \mathbb{C}^n : \|a\|_2 = \|b\|_2$

$\exists\ \gamma \in \mathbb{C} : |\gamma| = 1$ и $\exists\ v \in \mathbb{C}^n, \|v\|_2 = 1:$

$$H(v)\,a = \gamma b$$

$\square$ $H(v) = I - 2 v v^*$

$$H(v)\,a = a - 2(v^* a)\,v = \gamma b$$

Если $a \parallel b$, $v = \dfrac{a}{\|a\|_2}$

Иначе, положим

$v = \dfrac{a - \gamma b}{\|a - \gamma b\|_2}$, значит, что $2(v^* a)\,v = a - \gamma b$

$$2\,\frac{(a^* - \bar\gamma b^*)\,a}{\|a - \gamma b\|_2}\,\frac{(a - \gamma b)}{\|a - \gamma b\|_2} = a - \gamma b$$

$= 1$

$-\bar\gamma b^* a - \gamma a^* b$

$$2(\cancel{a^*}\,a - \bar\gamma b^* a) = \|a - \gamma b\|_2^2$$

$= (a^* - \bar\gamma b^*)(a - \gamma b)$

$= \cancel{a^* a} - 2\,\mathrm{Re}(\bar\gamma b^* a) + b^* b$

$b^* b = \cancel{a^* a}$

$$\bar{\gamma} b^* a = \mathrm{Re}(\bar{\gamma} b^* a)$$

$$\bar{\gamma} b^* a \in \mathbb{R}$$

$b \perp a \Rightarrow$ любое $\gamma : |\gamma| = 1$

$$\gamma = \pm \frac{b^* a}{|b^* a|} \qquad \blacksquare$$

Следствие $\forall a \in \mathbb{C}^n \ \exists v \in \mathbb{C}^n, \|v\|_2 = 1:$

$$H(v) a = \gamma \underbrace{\begin{pmatrix} \|a\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}}_{\|a\|_2 \cdot e_1}, \quad |\gamma| = 1,$$

$$v = \frac{a - \gamma \|a\|_2 e_1}{\|a - \gamma \|a\|_2 e_1\|_2}, \quad e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma = \pm \frac{a_1}{|a_1|}$$

Замечание

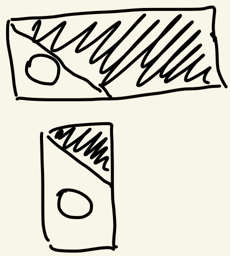
$$a - \gamma \|a\|_2 e_1 = \begin{pmatrix} a_1 - \gamma \|a\|_2 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ лучше выбирать $\gamma = -\frac{a_1}{|a_1|}$, т.к.

возможно $a_1 \approx \|a\|_2$

$\boxed{\text{Теор}}$ $\forall A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $\exists Q \in \mathbb{C}^{m\times m}$ - унитарная и $R \in \mathbb{C}^{m\times n}$ - верхнетреуг.

$\left(\begin{array}{l} m \le n \\ \\ m \geq n \end{array} \right)$:



$$A = QR$$

$\square$

тоже отраж.: $H_2 = H(\tilde{v}_2)$, $\tilde{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ v_2 \end{pmatrix}$

$$A = \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{bmatrix} \xrightarrow{H_1 = H(v_1)} \begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix} \xrightarrow{H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H(v_2) \end{bmatrix}} \begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix}$$

тоже отраж.

$$\xrightarrow{H_3 = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & H(v_3) \end{bmatrix}} \begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$H_3 H_2 H_1 A = R$$

$$A = (H_3 H_2 H_1)^{-1} R = (H_1 H_2 H_3) R = QR$$

[redacted]

Замечание

1) Док-во даёт алгоритм для 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 вычисл. Q_1 не надо считать $H_1 \ldots H_n$. Можно:

$$Q_1 = [Q_1\ Q_2] \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix} = \left(H_1 \left(H_2 \ldots \left(H_n \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix}\right)\right)\right)$$

В последовательности как скобки

Сложность: $2mn^2 - \frac{2}{3}n^3$ (вычисл. R_1)

(Д3) $2mn^2 - \frac{2}{3}n^3$ (вычисл Q_1)

3) Если потреб. $r_{kk} > 0$, то QR разлож. определ. единств. (Д3)

② Вращение Гивенса

$G_{ij}(\varphi) \in \mathbb{C}^{m \times m}$ — матрица вращ. Гивенса единичная кроме подматрицы $(i,j)\times(i,j)$

$$G_{ij}(\phi)\,[[i,j],[i,j]] = J(\phi) = \begin{bmatrix}\cos\phi & -\sin\phi\\ \sin\phi & \cos\phi\end{bmatrix}$$

$$J(\phi)\begin{bmatrix}a_1\\ a_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\alpha\\ 0\end{bmatrix},$$

$$\cos\phi = \frac{a_1}{\sqrt{|a_1|^2+|a_2|^2}}, \quad \sin\phi = -\frac{a_2}{\sqrt{|a_1|^2+|a_2|^2}}$$

$$A = \begin{bmatrix} * & * \\ * & * \\ * & * \end{bmatrix} \xrightarrow{G_{23}(\phi_1)} \begin{bmatrix} * & * \\ * & * \\ 0 & * \end{bmatrix} \xrightarrow{G_{12}(\phi_2)} \begin{bmatrix} * & * \\ 0 & * \\ 0 & * \end{bmatrix} \rightarrow$$

$$\xrightarrow{G_{23}(\phi_3)} \begin{bmatrix} * & * \\ 0 & * \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Сложность: $3mn^2 - n^3 >$ Хаусхолдера, но меняет элементы локально $\Rightarrow$ параллелизуется.

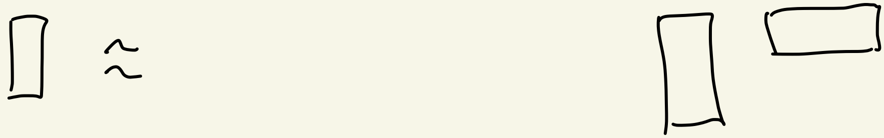
3 RRQR - rank revealing QR

матрица перестановки (сперестановл. строками единич. матр., например, $P=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$)

$$AP = QR, \quad R = \begin{array}{cc} \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} & \\ \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{pmatrix} & \begin{array}{c} r \\ n-r \end{array} \end{array}$$

столбцы A переставл. так, чтобы $\|R_{22}\|_2$ была минимал.

$$AP \approx [Q_1\ Q_2]\begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = Q_1 [R_{11}\ R_{12}] \text{ - скелетное}$$



Простейший алг. (k-й шаг):

$\in \mathbb{C}^{k\times k}$

$$(H_k \dots H_1) A (P_1 \dots P_k) = \begin{bmatrix} R_{11}^{(k)} & R_{12}^{(k)} \\ 0 & R_{22}^{(k)} \end{bmatrix}$$

Находим наибольший столбец в $R_{22}^{(k)}$ и поставим его на первое место в $R_{22}^{(k)}$ с помощью P_{k+1}, потом применим Хаусхолдера H_{k+1}

Businger and Golub

Сложность: $O(mnr)$