QR-method lecture 3

SF2524 - Matrix Computations for Large-scale Systems

< 3 > < 3 >

Agenda QR-method

Decompositions (previous lecture)

- Jordan form
- Schur decomposition
- QR-factorization
- Basic QR-method
- Improvement 1: Two-phase approach
 - Hessenberg reduction (previous lecture)
 - Hessenberg QR-method
- Improvement 2: Acceleration with shifts
- Onvergence theory

Agenda QR-method

Decompositions (previous lecture)

- Jordan form
- Schur decomposition
- QR-factorization
- Basic QR-method
- Improvement 1: Two-phase approach
 - Hessenberg reduction (previous lecture)
 - Hessenberg QR-method
- Improvement 2: Acceleration with shifts
- Onvergence theory

We will separate the computation into two phases:

▶ ★ 聖 ▶ ★ 更 ▶

We will separate the computation into two phases:

Phases

• Phase 1: Reduce the matrix to a Hessenberg with similarity transformations (Section 2.2.1 in lecture notes)

We will separate the computation into two phases:

Phases

- Phase 1: Reduce the matrix to a Hessenberg with similarity transformations (Section 2.2.1 in lecture notes)
- Phase 2: Specialize the QR-method to Hessenberg matrices (Section 2.2.2 in lecture notes)

We will separate the computation into two phases:

Phases

- Phase 1: Reduce the matrix to a Hessenberg with similarity transformations (Section 2.2.1 in lecture notes)
- Phase 2: Specialize the QR-method to Hessenberg matrices (Section 2.2.2 in lecture notes) ← NOW

A QR-step on a Hessenberg matrix is a Hessenberg matrix:

* Matlab demo showing QR-step: hessenberg_is_hessenberg.m *

A B F A B F

A QR-step on a Hessenberg matrix is a Hessenberg matrix:

* Matlab demo showing QR-step: hessenberg_is_hessenberg.m *

Theorem (Theorem 2.2.4)

If the basic QR-method is applied to a Hessenberg matrix, then all iterates A_k are Hessenberg matrices.

A QR-step on a Hessenberg matrix is a Hessenberg matrix:

* Matlab demo showing QR-step: hessenberg_is_hessenberg.m *

Theorem (Theorem 2.2.4)

If the basic QR-method is applied to a Hessenberg matrix, then all iterates A_k are Hessenberg matrices.

Recall: basic QR-step is $\mathcal{O}(m^3)$.

A QR-step on a Hessenberg matrix is a Hessenberg matrix:

* Matlab demo showing QR-step: hessenberg_is_hessenberg.m *

Theorem (Theorem 2.2.4)

If the basic QR-method is applied to a Hessenberg matrix, then all iterates A_k are Hessenberg matrices.

Recall: basic QR-step is $\mathcal{O}(m^3)$.

Hessenberg structure can be exploited such that we can carry out a QR-step with less operations.

The matrix $G(i,j,c,s) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ where $c^2 + s^2 = 1$ corresponding to a Givens rotation is defined by

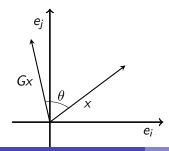
$$G(i,j,c,s) := egin{bmatrix} I & c & -s \ & I & \ s & c & \ & & I & \ & & & I \end{pmatrix},$$

which deviates from identity at row and column i and j.

通 ト イヨ ト イヨ ト

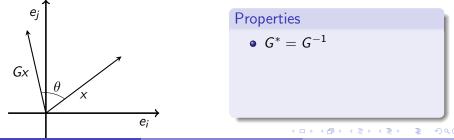
The matrix $G(i, j, c, s) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ where $c^2 + s^2 = 1$ corresponding to a Givens rotation is defined by

$$G(i,j,c,s) := egin{bmatrix} I & & & \ c & & -s & \ & I & & \ s & c & \ & & & I \end{pmatrix},$$



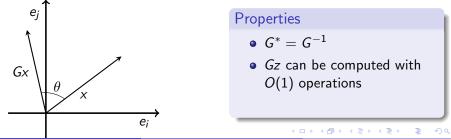
The matrix $G(i, j, c, s) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ where $c^2 + s^2 = 1$ corresponding to a Givens rotation is defined by

$$G(i,j,c,s) := egin{bmatrix} I & c & -s \ & I & \ & s & c \ & & & I \end{bmatrix},$$



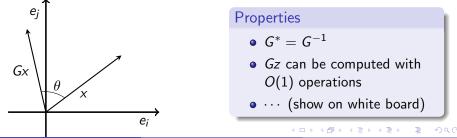
The matrix $G(i, j, c, s) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ where $c^2 + s^2 = 1$ corresponding to a Givens rotation is defined by

$$G(i,j,c,s) := egin{bmatrix} I & c & -s \ & I & \ & s & c \ & & & I \end{bmatrix},$$



The matrix $G(i, j, c, s) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ where $c^2 + s^2 = 1$ corresponding to a Givens rotation is defined by

$$G(i,j,c,s) := egin{bmatrix} I & & & \ c & & -s & \ & I & & \ s & c & \ & & & I \end{pmatrix},$$



The Q-matrix in the QR-factorization of a Hessenberg matrix can be factorized as a product of n - 1 Givens rotators.

3

< ロ > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ >

The Q-matrix in the QR-factorization of a Hessenberg matrix can be factorized as a product of n - 1 Givens rotators.

Theorem (Theorem 2.2.6)

Suppose $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ is a Hessenberg matrix. Let H_i be generated as follows $H_1 = A$

$$H_{i+1} = G_i^T H_i, \quad i = 1, \ldots, n-1$$

where

$$G_i = G(i, i+1, (H_i)_{i,i}/r_i, (H_i)_{i+1,i}/r_i)$$

and $r_i = \sqrt{(H_i)_{i,i}^2 + (H_i)_{i+1,i}^2}$ and we assume $r_i \neq 0$. Then, H_n is upper triangular and

$$A = (G_1 G_2 \cdots G_{n-1}) H_n = QR$$

is a QR-factorization of A.

・ 伺 ト ・ ヨ ト ・ ヨ ト …

The Q-matrix in the QR-factorization of a Hessenberg matrix can be factorized as a product of n - 1 Givens rotators.

Theorem (Theorem 2.2.6)

Suppose $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ is a Hessenberg matrix. Let H_i be generated as follows $H_1 = A$

$$H_{i+1} = G_i^T H_i, \quad i = 1, \ldots, n-1$$

where

$$G_i = G(i, i+1, (H_i)_{i,i}/r_i, (H_i)_{i+1,i}/r_i)$$

and $r_i = \sqrt{(H_i)_{i,i}^2 + (H_i)_{i+1,i}^2}$ and we assume $r_i \neq 0$. Then, H_n is upper triangular and

$$A = (G_1 G_2 \cdots G_{n-1}) H_n = QR$$

is a QR-factorization of A.

* Matlab: Explicit QR-factorization of Hessenberg qr_givens.m *

イロト 不得下 イヨト イヨト 二日

(日) (周) (三) (三)

$$A_{k-1} = (G_1 G_2 \cdots G_{n-1}) R_n$$

and

$$A_k = R_n(G_1G_2\cdots G_{n-1}) =$$

- 4 週 ト - 4 三 ト - 4 三 ト

$$A_{k-1} = (G_1 G_2 \cdots G_{n-1}) R_n$$

and

$$A_k = R_n(G_1G_2\cdots G_{n-1}) = (\cdots ((R_nG_1)G_2)\cdots)G_{n-1}$$

- 4 週 ト - 4 三 ト - 4 三 ト

$$A_{k-1} = (G_1 G_2 \cdots G_{n-1}) R_n$$

and

$$A_k = R_n(G_1G_2\cdots G_{n-1}) = (\cdots ((R_nG_1)G_2)\cdots)G_{n-1}$$

Complexity of one QR-step for a Hessenberg matrix

We need to apply 2(n-1) givens rotators to compute one QR-step.

< ロ > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ >

$$A_{k-1} = (G_1 G_2 \cdots G_{n-1}) R_n$$

and

$$A_k = R_n(G_1G_2\cdots G_{n-1}) = (\cdots ((R_nG_1)G_2)\cdots)G_{n-1}$$

Complexity of one QR-step for a Hessenberg matrix

We need to apply 2(n-1) givens rotators to compute one QR-step.

One givens rotator applied to a vector can be computed in O(1) operations.

< ロ > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ >

$$A_{k-1} = (G_1 G_2 \cdots G_{n-1}) R_n$$

and

$$A_k = R_n(G_1G_2\cdots G_{n-1}) = (\cdots ((R_nG_1)G_2)\cdots)G_{n-1}$$

Complexity of one QR-step for a Hessenberg matrix

We need to apply 2(n-1) givens rotators to compute one QR-step.

- One givens rotator applied to a vector can be computed in O(1) operations.
- One givens rotator applied to matrix can be computed in O(n) operations.

イロト イポト イヨト イヨト

$$A_{k-1} = (G_1 G_2 \cdots G_{n-1}) R_n$$

and

$$A_k = R_n(G_1G_2\cdots G_{n-1}) = (\cdots ((R_nG_1)G_2)\cdots)G_{n-1}$$

Complexity of one QR-step for a Hessenberg matrix

We need to apply 2(n-1) givens rotators to compute one QR-step.

- One givens rotator applied to a vector can be computed in O(1) operations.
- One givens rotator applied to matrix can be computed in O(n) operations.

the complexity of one Hessenberg QR step = $\mathcal{O}(n^2)$

・ロト ・ 日 ・ ・ ヨ ・ ・ ヨ ・ ・

Givens rotators only modify very few elements. Several optimizations possible. \Rightarrow

Algorithm 3 Hessenberg QR algorithm Input: A Hessenberg matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ Output: Upper triangular T such that $A = UTU^*$ for an orthogonal matrix U. Set $A_0 \coloneqq A$ for k = 1, ..., do// One Hessenberg QR step $H = A_{k-1}$ for i = 1, ..., n - 1 do $[c_i, s_i] = givens(h_{i,i}, h_{i+1,i})$ $H_{i:i+1,i:n} = \begin{bmatrix} c_i & s_i \\ -s_i & c_i \end{bmatrix} H_{i:i+1,i:n}$ end for for i = 1, ..., n - 1 do $H_{1:i+1,i:i+1} = H_{1:i+1,i:i+1} \begin{bmatrix} c_i & -s_i \\ s_i & c_i \end{bmatrix}$ end for $A_{k} = H$ end for Return $T = A_{\infty}$

3

- 4 週 ト - 4 三 ト - 4 三 ト -