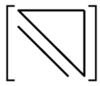
Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme
Dr. Patrick Kürschner, Janna Puderbach

Wintersemester 2017/18

Francis QR Algorithmus

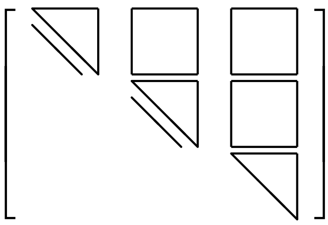
Input: $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, Toleranz *tol*.
Output: $H \in \mathbb{R}^{n\times n}$, die "reelle Schurform" von A; $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ orthogonal so, daß $H = Q^T AQ$.

Hessenbergreduktion: Berechne $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $Q^TQ = I$, so daß $H = Q^T AQ =$ .
$q := 0$.
while $q < n$ **do**
  Setze alle $h_{j+1,j} := 0$, $j \in \{1, \ldots, n\}$ mit

$$|h_{j+1,j}| \leq tol \cdot \mathbf{u}(|h_{jj}| + |h_{j+1,j+1}|).$$

  Deflation: Finde $p, q \in \{0, 1, \ldots, n\}$ mit p minimal und q maximal so daß

$$H = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ & H_{22} & H_{23} \\ & & H_{33} \end{bmatrix} =$$



,

  wobei $H_{11} \in \mathbb{R}^{p\times p}$ obere Hessenbergmatrix, $H_{22} \in \mathbb{R}^{n-p-q\times n-p-q}$ unreduzierte obere Hessenbergmatrix, $H_{33} \in \mathbb{R}^{q\times q}$ quasi-obere Dreiecksmatrix.
  if $q < n$ **then**
    Führe einen impliziten Francis QR Schritt für H_{22} aus und setze $H_{22} := Q_{22}^T H_{22} Q_{22}$, wobei Q_{22} die orthogonale Transformationsmatrix aus dem QR Schritt ist.
    $H_{12} := H_{12}Q_{22}$, $H_{23} := Q_{22}^T H_{23}$.
    $Q := Q \cdot \mathrm{diag}\,(I_p, Q_{22}, I_q)$.
  end if
end while
Bringe alle 2×2 Diagonalblöcke von H mit reellen EW in Schurform und akkumuliere die Transformationen.

Bemerkungen:

a) 2×2 Blöcke mit reellen Eigenwerten können durch single-shift-QR-Schritte in Schurform gebracht werden.

b) Soll nur das Spektrum $\Lambda(A)$ ausgerechnet werden, so müssen wir Q nicht mitführen (rote und blaue Teile entfallen). Man erhält dann aber *nicht* die Schurform von A in H.

c) Pro Eigenwert sind ca. 2 QR Schritte nötig $\Rightarrow$ Kosten $\approx 10n^3$ falls nur Eigenwerte ausgerechnet werden. Für komplette (reelle) Schurzerlegung (Quasi-Dreiecksmatrix mit Eigenwerten + Schurvektoren) $\approx 25n^3$.

d) In endlicher Arithmetik mit Maschinengenauigkeit $\mathbf{u}$ gilt:

Schurform $\tilde{H}$: $\tilde{H} = Q^T(A+E)Q$ mit $\|E\|_2 \equiv \mathbf{u}$

Schurvektor-Matrix $\tilde{Q}$: $Q^TQ = I + F$ mit $\|F\|_2 \equiv \mathbf{u}$

$\Rightarrow$ Der QR Algorithmus nach Francis ist numerisch rückwärtsstabil.

e) Stagnation des Francis QR-Algorithmus ist möglich; meist hilft hier ein Zufalls-Shift, d.h. ein single-Shift-QR-Schritt mit $\mu \in \mathbb{R}$ beliebig.

f) Alternativ werden zur Beschleunigung häufig anstelle des double-Shift Strategie multishift-QR-Schritte verwendet:

$$\begin{aligned} \text{Doppel-Schritt:} \quad & p(H) = (H - \mu_1 I)(H - \mu_2 I), \ \deg(p) = 2, \\ \text{Mehrfach-Schritt:} \quad & p(H) = \prod_{i=1}^{r}(H - \mu_i I), \ \deg(p) = r. \end{aligned}$$

Das führt auf "Buckel" der Größe r, die aber analog zum impliziten Francis Doppel-QR-Schritt "gejagt" werden müssen.

g) Deflation kann deutlich aggressiver als im obigen Algorithmus erzwungen werden

$\Rightarrow$ **aggressive early deflation**.

Grundidee: Betrachte Partitionierung einer unreduzierten Hessenbergmatrix:

$$H = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} \\ 0 & H_{32} & H_{33} \end{bmatrix}, \quad H_{11} \in \mathbb{R}^{n-k-1 \times n-k-1}, \ H_{22} \in \mathbb{R}, \ H_{33} \in \mathbb{R}^{k \times k}, \ H_{32} \in \mathbb{R}^k, \ldots$$

Sei $V^T H_{33} V$ eine reele Schurzerlegung von H_{33}. Damit ist

$$\begin{bmatrix} I_{n-k-1} & & \\ & 1 & \\ & & V^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} \\ 0 & H_{32} & H_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{n-k-1} & & \\ & 1 & \\ & & V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13}V \\ H_{21} & H_{22} & H_{23}V \\ 0 & s & T \end{bmatrix}$$

in Hessenberg-plus-spike Form. Die letzten Einträge des spikes $s := V^T H_{32} \in \mathbb{R}^k$ sind häufig sehr klein. Angenommen die letzten $m \leq k$ Einträge von s sind gleich Null:

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \tilde{H}_{13} & \tilde{H}_{14} \\ H_{21} & H_{22} & \tilde{H}_{23} & \tilde{H}_{24} \\ 0 & \tilde{s} & T_{11} & T_{12} \\ 0 & 0 & 0 & T_{22} \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow T_{22} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ bereits in Schurform

$\Rightarrow$ Deflation (Abspaltung) eines m-dimensionalen EWPs.