«Вычисления сингулярных значений и сингулярных векторов бидиагональной матрицы с высокой относительной точностью»

Искенеева Камиля КМБО-01-20

kamila.iskeneeva@yandex.ru

tg:Iskam17

Краткие сведения

Матрицы

Бидиагональная матрица – матрица с ненулевыми элементами вдоль главной диагонали и диагональю выше (ниже).

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_{22} & a_{23} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & a_{33} & a_{34} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$ – верхняя бидиагональной матрица

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_{32} & a_{33} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$ - нижняя бидиагональной матрица

Супердиагональ квадратной матрицы – это диагональ, состоящая из элементов, которые лежат непосредственно над элементами, составляющую главную диагональ. Индексы супердиагональных элементов: $i,\ j = i + 1$.

Блочная матрица – представление матрицы, при котором она рассекается вертикальными и горизонтальными линиями на прямоугольные части – блоки:

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1t} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2t} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{s1} & A_{s1} & \cdots & A_{st} \end{bmatrix},$$

где блок $A_{\alpha\beta}$ имеет размер $m_\alpha \times\ n_\beta$ для $\alpha = 1, 2, \dots, s$ и $\beta = 1, 2, \dots., t$.

Сингулярное разложение (SVD)

Неотрицательное вещественное число σ называется ***сингулярным числом*** матрицы A, когда существуют два вектора единичной длины $u \in \mathbb{R}^m$ и $v \in \mathbb{R}^n$ такие, что:

$$Av\ = \sigma \mathrm{u}\ , \text{и } A^* u = \ \sigma v$$

Векторы u и v называются, соответственно, **левым сингулярным вектором** и **правым сингулярным вектором**, соответствующим сингулярному числу σ.

***Сингулярное разложение* (Singular Value Decomposition - SVD)** *матрицы A размера* $m \times n$ – разложение вида:

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

где $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, где $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$. $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$; $U, V -$ матрицы, чьи столбцы представляют собой векторы, образующие ортонормированные базисы в пространствах $\mathbb{R}^m$ и $\mathbb{R}^n$ соответственно.

Алгоритм “Разложение по сингулярным значениям бидиагональной матрицы с высокой относительной точностью»

На вход алгоритма поступает верхняя бидиагональной матрица B размером $n \times n$.

На выходе ожидаются диагональная матрица Σ размером $n \times n$ с сингулярными значениями, а также ортогональные матрицы U и V размером $n \times n$ такие, что $B = U\Sigma V^T$.

Опишем пошагово алгоритм:

1. Вычислим $\underline{\sigma}$, где $\underline{\sigma} = \underline{\sigma}(B) := \min_{||x||=1} ||Bx||$.
2. Вычислим $\bar{\sigma} = max_i(b_{i,i}, b_{i.i+1})$.
3. Повторяем следующие действия:
   a. Для всех $i = 1, \ldots, n-1$ положим $b_{i.i+1} = 0$, если выполнен критерий сходимости.
   b. Определим наименьшее значение p и наибольшее значение q так, чтобы матрица B стала блочной.

$$B = \begin{pmatrix} B_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & B_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & B_{3,3} \end{pmatrix},$$

где $B_{1,1}$ – матрица размера $p \times p$; $B_{2,2}$ – матрица размера $(n - p - q) \times (n - p - q)$, у которой элементы, лежащие на супердиагонали, ненулевые; $B_{3,3}$ – диагональная матрица размера $q \times q$.

   c. Если $q = n$, то диагональ матрицы Σ – это диагональ матрицы B. Останавливаемся.
   d. Если для $i = p + 1, \ldots, n - q - 1$, $b_{i,i} = 0$, то

      Применим вращения Гивенса так, чтобы $b_{i,i+1} = 0$ и матрица $B_{2,2}$ оставалась верхней бидиагональной.

      В противном случае

      Необходимо применить следующий алгоритм.

Алгоритм «Шаг Деммеля–Кахана»

На вход поступают числа n, p $и$ q, матрицы B, Q, P, где B – верхняя бидиагональная матрица размера $n \times n$; Q и P состоят из ортогональных векторов таких, что $A = QBP^T$; значения $\overline{\sigma}$ и $\underline{\sigma}$.

На выходе ожидаются матрицы B, Q, P такие, что $A = QBP^T$; Q и P состоят из ортогональных векторов; матрица B имеет меньшие недиагональные элементы, чем на входе. В памяти матрицы B, Q, P перезаписываются.

Опишем пошагово алгоритм:

1. Пусть $B_{2,2}$ – блок матрицы B, состоящий только из элементов главной диагонали матрицы B, с индексами строк и столбцов вида $p+1, \dots, n-q$.
2. Если $tol^* \underline{\sigma} \ \le \varepsilon_0 \overline{\sigma}$, тогда:
   a. Определяем значение c', как $c' = c = 1$;
   b. Для $k = p+1,\ n-q-1$
      - Введем значения $\alpha = cb_{k,k},\ \beta = b_{k,k+1}$;
      - Определим c и s:
        $$[\alpha \quad \beta]\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} = [r \quad 0], \text{где } r = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}.$$
      - Если $k \ \neq p+1$, то $b_{k-1,k} = s'r$.
      - Переопределим матрицу P
        $P \leftarrow PR_{k,k+1}(c,s)$, где $R_{k,k+1}(c,s)$ – матрица вращений.
      - Переопределим значения α и β так, что $\alpha = c'r,\ \beta = sb_{k+1,k+1}$.
      - Определим c' и s':
        $$\begin{bmatrix} c' & -s' \\ s' & c' \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \\ 0 \end{bmatrix}.$$
      - Переопределим матрицу Q
        $Q \ \leftarrow QR_{k,k+1}(c,-s)$, где $R_{k,k+1}(c,-s)$ – матрица вращений.
      - $b_{k,k} = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$.

   c. $b_{n-q-1,n-q} = \left(b_{n-q,n-q}c\right)s'$;
      $b_{n-q,n-q} = (b_{n-q,n-q}c)c'$.

   В противном случае

   d. Применяем алгоритм «Шаг Голуб–Кахана» к n, p, q, B, Q, P.

Список литературы

1. Alan Kaylor Cline and Inderjit S. Dhillon. Handook of Linear Algebra. Computation of the Singular Value Decomposition, 45:1-13, 2006
2. G.H. Golub and W.Kahan. Calculating the Singular Values and Pseudoinverse of a Matrix, SIAM J.Number., Ser. B 2:205-224, 1965
3. J.W.Demmel and W.Kahan. Accurate singular values of bidiagonal matrices, SIAM J.Stat.Comp.: 873-912, 1990