Введение

Алгоритм `svdlapack` представляет собой обёртку над подпрограммами библиотеки LAPACK для вычисления сингулярного разложения матрицы (SVD). Сингулярное разложение является фундаментальным инструментом линейной алгебры и широко используется в различных областях, включая обработку сигналов, машинное обучение, сжатие данных и решение недоопределённых систем линейных уравнений.

Библиотека LAPACK предоставляет высокоэффективные реализации алгоритмов линейной алгебры, оптимизированные для современных вычислительных архитектур. В проекте SLEPc (Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations) реализован интерфейс к этим алгоритмам, позволяющий эффективно вычислять сингулярные разложения как плотных, так и разреженных матриц.

Описание алгоритма

Математическая постановка задачи

Для заданной прямоугольной матрицы A размера $m \times n$ сингулярное разложение представляет её в виде произведения трёх матриц:

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

где:

- U — ортогональная матрица размера $m \times m$, столбцы которой являются левыми сингулярными векторами матрицы A, то есть $U^\top U = I_m$.
- Σ — диагональная матрица размера $m \times n$ с неотрицательными сингулярными значениями σ_i на диагонали, упорядоченными по убыванию:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & & \\ & \sigma_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \sigma_p & \\ & & & & 0 \end{pmatrix},$$

  где $p = \min(m, n)$.
- V — ортогональная матрица размера $n \times n$, столбцы которой являются правыми сингулярными векторами матрицы A, то есть $V^\top V = I_n$.

Сингулярные значения σ_i связаны со спектральными свойствами матриц $A^\top A$ и $AA^\top$:

- Собственные значения матрицы $A^\top A$ равны σ_i^2, а соответствующие собственные векторы — правые сингулярные векторы v_i.
- Собственные значения матрицы $AA^\top$ также равны σ_i^2, а собственные векторы — левые сингулярные векторы u_i.

Таким образом, сингулярные векторы и значения удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} Av_i &= \sigma_i u_i, \quad i = 1, \ldots, p, \\ A^\top u_i &= \sigma_i v_i, \quad i = 1, \ldots, p. \end{aligned}$$

Алгоритм вычисления SVD

Алгоритм `svdlapack` использует подпрограммы LAPACK для вычисления SVD плотных матриц. Основные этапы алгоритма следующие:

1. Приведение матрицы к двухдиагональной форме

Первым шагом является приведение исходной матрицы A к двухдиагональной форме B с помощью ортогональных преобразований (отражений Хаусхолдера). Это записывается как:

$$A = Q_L B Q_R^\top,$$

где:

- Q_L — ортогональная матрица размера $m \times m$.
- Q_R — ортогональная матрица размера $n \times n$.
- B — двухдиагональная матрица размера $m \times n$, которая имеет ненулевые элементы только на главной диагонали и первой поддиагонали (для $m \geq n$) или наддиагонали (для $m < n$):

$$B = \begin{pmatrix} d_1 & e_1 & & & \\ & d_2 & e_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & d_{n-1} & e_{n-1} \\ & & & & d_n \end{pmatrix}.$$

Преобразование к двухдиагональная форме существенно сокращает вычислительную сложность последующих шагов, поскольку операции теперь выполняются над матрицей с простой структурой.

2. Вычисление SVD двухдиагональной матрицы

Для двухдиагональной матрицы B сингулярные значения и векторы вычисляются с использованием итеративных алгоритмов, специально адаптированных для такой структуры. Основные методы включают:

- **QR-алгоритм для двухдиагональных матриц**: Этот алгоритм применяет последовательность ортогональных преобразований для диагонализации двухдиагональной матрицы. Поскольку B имеет простую структуру, каждое итеративное преобразование может быть выполнено эффективно.
- **Алгоритм Кобылыша–Рейша (Divide and Conquer)**: Этот метод разбивает матрицу на подматрицы меньшего размера, решает задачу для них и затем объединяет решения.
- **Метод обобщённых квадратов (Golub–Kahan)**: Используется для вычисления сингулярных значений и векторов путём решения последовательности линейных систем.

В результате этого шага получаются диагональная матрица Σ с сингулярными значениями и ортогональные матрицы U_B и V_B, содержащие сингулярные векторы bidiagonal матрицы B:

$$B = U_B \Sigma V_B^\top.$$

Нужно обратить внимание, что код не содержит явной реализации конкретных алгоритмов, таких как QR-алгоритм для двухдиагональных матриц, Алгоритм Кобылыша–Рейша и метод Голуба–Кахана. Вместо этого, при вызове функции DSSolve через объект DS, LAPACK самостоятельно выбирает наиболее эффективный алгоритм для данной задачи.

3. Обратное преобразование сингулярных векторов

После вычисления SVD двухдиагональной матрицы B необходимо преобразовать полученные сингулярные векторы обратно к исходной матрице A:

$$U = Q_L U_B,$$
$$V = Q_R V_B.$$

Это достигается умножением сингулярных векторов U_B и V_B на ортогональные матрицы Q_L и Q_R, которые были получены на первом шаге. Поскольку Q_L и Q_R являются ортогональными, это преобразование не влияет на ортогональность сингулярных векторов.

Обобщённое сингулярное разложение (GSVD)

Обобщённое сингулярное разложение используется для пар матриц A и B размера $m \times n$ и $p \times n$ соответственно. Цель GSVD состоит в нахождении матриц U, V и X, удовлетворяющих:

$$A = U \Sigma_A X^\top,$$
$$B = V \Sigma_B X^\top,$$

где:

- U — ортогональная матрица размера $m \times m$.
- V — ортогональная матрица размера $p \times p$.
- X — обратимая матрица размера $n \times n$.
- Σ_A и Σ_B — диагональные матрицы размера $m \times n$ и $p \times n$ соответственно, удовлетворяющие условию:

$$\Sigma_A^\top \Sigma_A + \Sigma_B^\top \Sigma_B = I_n.$$

В GSVD сингулярные значения характеризуют относительные вклады матриц A и B в общее решение. Этот метод особенно полезен в задачах, где необходимо учитывать влияние двух различных систем или наборов данных.

Гармоническое сингулярное разложение (HSVD)

Гармоническое сингулярное разложение применяется в задачах, где матрица A связана с метрикой, заданной положительно определённой матрицей Ω. Цель HSVD — найти разложение:

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

при условии, что:

- Векторы U ортонормированы относительно метрики Ω:

  $$U^\top \Omega U = I_p,$$

  где I_p — единичная матрица размера $p \times p$.

- Векторы V ортонормированы в стандартном смысле:

  $$V^\top V = I_p.$$

При этом сингулярные значения σ_i и векторы u_i, v_i удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} Av_i &= \sigma_i \Omega u_i, \\ A^\top \Omega u_i &= \sigma_i v_i. \end{aligned}$$

HSVD находит применение в задачах, где необходимо учитывать весовые коэффициенты или корреляции между элементами данных, например, во взвешенном методе наименьших квадратов или в обработке сигналов.

Имплементация

References

1. **Anderson, E., et al.** *LAPACK Users' Guide*. SIAM, 1999.

   Подробное руководство по библиотеке LAPACK, включающее описание алгоритмов и их реализации. Доступно на netlib.org/lapack.

2. **Golub, G. H., Van Loan, C. F.** *Matrix Computations*. 4-е изд., Johns Hopkins University Press, 2013.

   Классический труд по численной линейной алгебре, в котором подробно рассматриваются алгоритмы сингулярного разложения и их математические основы.