

Введение

Алгоритм `svdlapack` представляет собой обёртку над подпрограммами библиотеки LAPACK для вычисления сингулярного разложения матрицы (SVD).

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.

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:

$$A = Q_L B Q_R^T,$$

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 двухдиагональной 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 :

$$\begin{aligned} U &= Q_L U_B, \\ V &= Q_R V_B. \end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned} A &= U \Sigma_A X^\top, \\ B &= V \Sigma_B X^\top, \end{aligned}$$

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:

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

при условии, что:

- Векторы U ортонормированы относительно метрики Ω :

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

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

- Векторы V ортонормированы в стандартном смысле:

$$V^T V = I_p.$$

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

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

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.

4. Имплементация

В этой секции рассмотрим, как алгоритм вычисления сингулярного разложения, описанный ранее, реализован в коде файла `svdlapack.c` из библиотеки SLEPc. Этот файл представляет собой обёртку над подпрограммами LAPACK для вычисления SVD, GSVD и HSVD.

Основные функции, реализующие алгоритм:

- `SVDSsetUp_LAPACK`
- `SVDSolve_LAPACK`
- `SVDSolve_LAPACK_GSVD`
- `SVDSolve_LAPACK_HSVD`
- `SVDSsetDSType_LAPACK`
- `SVDCreate_LAPACK`

4.1 Функция SVDSetup_LAPACK

Эта функция отвечает за инициализацию и настройку объекта SVD для использования методов LAPACK. Основные действия функции:

1. Получение размеров матриц:

- Получение размеров исходной матрицы A с помощью `MatGetSize`.
- Если вычисляется обобщённое SVD (GSVD), то также получаются размеры матрицы B .

2. Установка параметров:

- Установка параметра `ncv`, который определяет количество сингулярных значений для вычисления.
- Для стандартного SVD `ncv` устанавливается равным N (числу столбцов матрицы A).
- Для GSVD `ncv` устанавливается как минимальное из M , N и P , где P — число строк матрицы B .

3. Выделение памяти:

- Выделение памяти для хранения сингулярных векторов и значений с помощью `SVDAllocateSolution`.

4. Инициализация DS:

- Инициализация объекта DS (Direct Solver), который будет использоваться для решения задачи SVD с помощью LAPACK.

5. Проверка параметров:

- Проверка на неподдерживаемые функции и установка необходимых флагов.

Ниже приведён код функции `SVDSetup_LAPACK`:

```
1 static PetscErrorCode SVDSetup_LAPACK(SVD svd)
2 {
3     PetscInt      M,N,P=0;
4
5     PetscFunctionBegin;
6     PetscCall(MatGetSize(svd->A,&M,&N));
7     if (!svd->isgeneralized) svd->ncv = N;
8     else {
9         PetscCall(MatGetSize(svd->OPb,&P,NULL));
10        svd->ncv = PetscMin(M,PetscMin(N,P));
11    }
12    if (svd->mpd!=PETSC_DETERMINE) PetscCall(PetscInfo(svd,"Warning: parameter
    mpd ignored\n"));
13    SVDCheckUnsupported(svd,SVD_FEATURE_STOPPING);
14    if (svd->max_it==PETSC_DETERMINE) svd->max_it = 1;
15    svd->leftbasis = PETSC_TRUE;
16    PetscCall(SVDAllocateSolution(svd,0));
17    PetscCall(DSAllocate(svd->ds,PetscMax(N,PetscMax(M,P))));
18    PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);
19 }
```

Листинг 1: Функция `SVDSetup_LAPACK`

Для работы этой функции необходимо подключить следующие заголовочные файлы:

```
1 #include <slepc/private/svdimpl.h>
2 #include <slepcblaslapack.h>
```

Листинг 2: Подключаемые заголовочные файлы

4.2 Функция SVDSolve_LAPACK

Эта функция реализует основной алгоритм вычисления SVD для плотных матриц:

1. Сбор матрицы на одном процессе:

- Используется функция `MatCreateRedundantMatrix` для создания копии распределённой матрицы A на одном процессе.

2. Конвертация матрицы:

- Полученная матрица преобразуется в формат `MATSEQDENSE` с помощью `MatConvert`.

3. Настройка объекта DS:

- Матрица A копируется в объект `ds` с помощью `DSGetMat` и `MatCopy`.
- Устанавливается состояние объекта `ds` как `DS_STATE_RAW`.

4. Решение задачи SVD:

- Вызывается функция `DSSolve`, которая вычисляет сингулярные значения и векторы матрицы A .

5. Сортировка результатов:

- Функция `DSSort` сортирует полученные сингулярные значения и векторы.

6. Копирование результатов:

- Сингулярные значения и векторы извлекаются из объекта `ds` и копируются в соответствующие структуры объекта `svd`.

Код функции `SVDSolve_LAPACK` представлен ниже:

```
1 static PetscErrorCode SVDSolve_LAPACK(SVD svd)
2 {
3     PetscInt      M,N,n,i,j,k,ld,lowu,lowv,highu,highv;
4     Mat           A,Ar,mat;
5     Vec           u,v;
6     PetscScalar   *pU,*pV,*pu,*pv,*w;
7
8     PetscFunctionBegin;
9     PetscCall(DSGetLeadingDimension(svd->ds,&ld));
10    PetscCall(MatCreateRedundantMatrix(svd->OP,0,PETSC_COMM_SELF,
11        MAT_INITIAL_MATRIX,&Ar));
12    PetscCall(MatConvert(Ar,MATSEQDENSE,MAT_INITIAL_MATRIX,&mat));
13    PetscCall(MatDestroy(&Ar));
14    PetscCall(MatGetSize(mat,&M,&N));
15    PetscCall(DSSetDimensions(svd->ds,M,0,0));
16    PetscCall(DSSVDSetDimensions(svd->ds,N));
17    PetscCall(DSGetMat(svd->ds,DS_MAT_A,&A));
18    PetscCall(MatCopy(mat,A,SAME_NONZERO_PATTERN));
```

```

18 PetscCall(DSRestoreMat(svd->ds, DS_MAT_A, &A));
19 PetscCall(DSSetState(svd->ds, DS_STATE_RAW));
20
21 n = PetscMin(M, N);
22 PetscCall(PetscMalloc1(n, &w));
23 PetscCall(DSSolve(svd->ds, w, NULL));
24 PetscCall(DSSort(svd->ds, w, NULL, NULL, NULL, NULL));
25 PetscCall(DSSynchronize(svd->ds, w, NULL));
26
27 /* copy singular vectors */
28 PetscCall(DSGetArray(svd->ds, DS_MAT_U, &pU));
29 PetscCall(DSGetArray(svd->ds, DS_MAT_V, &pV));
30 for (i=0; i<n; i++) {
31     if (svd->which == SVD_SMALLEST) k = n - i - 1;
32     else k = i;
33     svd->sigma[k] = PetscRealPart(w[i]);
34     PetscCall(BVGetColumn(svd->U, k, &u));
35     PetscCall(BVGetColumn(svd->V, k, &v));
36     PetscCall(VecGetOwnershipRange(u, &lowu, &highu));
37     PetscCall(VecGetOwnershipRange(v, &lowv, &highv));
38     PetscCall(VecGetArray(u, &pu));
39     PetscCall(VecGetArray(v, &pv));
40     if (M>=N) {
41         for (j=lowu; j<highu; j++) pu[j-lowu] = pU[i*ld+j];
42         for (j=lowv; j<highv; j++) pv[j-lowv] = pV[i*ld+j];
43     } else {
44         for (j=lowu; j<highu; j++) pu[j-lowu] = pV[i*ld+j];
45         for (j=lowv; j<highv; j++) pv[j-lowv] = pU[i*ld+j];
46     }
47     PetscCall(VecRestoreArray(u, &pu));
48     PetscCall(VecRestoreArray(v, &pv));
49     PetscCall(BVRestoreColumn(svd->U, k, &u));
50     PetscCall(BVRestoreColumn(svd->V, k, &v));
51 }
52 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds, DS_MAT_U, &pU));
53 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds, DS_MAT_V, &pV));
54
55 svd->nconv = n;
56 svd->its = 1;
57 svd->reason = SVD_CONVERGED_TOL;
58
59 PetscCall(MatDestroy(&mat));
60 PetscCall(PetscFree(w));
61 PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);
62 }

```

Листинг 3: Функция SVDSolve_LAPACK

4.3 Функция SVDSolve_LAPACK_GSVD

Эта функция отвечает за вычисление обобщённого сингулярного разложения (GSVD):

1. Сбор матриц A и B :

- Матрицы A и B собираются на одном процессе и преобразуются в формат MATSEQDENSE.

2. Настройка объекта DS:

- Матрицы A и B устанавливаются в объект `ds` с помощью `DSGetMat`.

- Устанавливается состояние объекта `ds` как `DS_STATE_RAW`.

3. Решение задачи GSVD:

- Вызывается функция `DSSolve`, которая вычисляет обобщённые сингулярные значения и векторы.

4. Копирование результатов:

- Полученные сингулярные значения и векторы копируются в объект `svd`.

Код функции `SVDSolve_LAPACK_GSVD`:

```

1 static PetscErrorCode SVDSolve_LAPACK_GSVD(SVD svd)
2 {
3     PetscInt      nsv,m,n,p,i,j,mlocal,plocal,ld,lowx,lowu,lowv,highx;
4     Mat           Ar,A,Ads,Br,B,Bds;
5     Vec           uv,x;
6     PetscScalar   *U,*V,*X,*px,*puv,*w;
7
8     PetscFunctionBegin;
9     PetscCall(DSGetLeadingDimension(svd->ds,&ld));
10    PetscCall(MatCreateRedundantMatrix(svd->OP,0,PETSC_COMM_SELF,
11        MAT_INITIAL_MATRIX,&Ar));
12    PetscCall(MatConvert(Ar,MATSEQDENSE,MAT_INITIAL_MATRIX,&A));
13    PetscCall(MatDestroy(&Ar));
14    PetscCall(MatCreateRedundantMatrix(svd->OPb,0,PETSC_COMM_SELF,
15        MAT_INITIAL_MATRIX,&Br));
16    PetscCall(MatConvert(Br,MATSEQDENSE,MAT_INITIAL_MATRIX,&B));
17    PetscCall(MatDestroy(&Br));
18    PetscCall(MatGetSize(A,&m,&n));
19    PetscCall(MatGetLocalSize(svd->OP,&mlocal,NULL));
20    PetscCall(MatGetLocalSize(svd->OPb,&plocal,NULL));
21    PetscCall(MatGetSize(B,&p,NULL));
22    PetscCall(DSSetDimensions(svd->ds,m,0,0));
23    PetscCall(DSGSVDSetDimensions(svd->ds,n,p));
24    PetscCall(DSGetMat(svd->ds,DS_MAT_A,&Ads));
25    PetscCall(MatCopy(A,Ads,SAME_NONZERO_PATTERN));
26    PetscCall(DSRestoreMat(svd->ds,DS_MAT_A,&Ads));
27    PetscCall(DSGetMat(svd->ds,DS_MAT_B,&Bds));
28    PetscCall(MatCopy(B,Bds,SAME_NONZERO_PATTERN));
29    PetscCall(DSRestoreMat(svd->ds,DS_MAT_B,&Bds));
30    PetscCall(DSSetState(svd->ds,DS_STATE_RAW));
31
32    nsv = PetscMin(n,PetscMin(p,m));
33    PetscCall(PetscMalloc1(nsv,&w));
34    PetscCall(DSSolve(svd->ds,w,NULL));
35    PetscCall(DSSort(svd->ds,w,NULL,NULL,NULL));
36    PetscCall(DSSynchronize(svd->ds,w,NULL));
37    PetscCall(DSGetDimensions(svd->ds,NULL,NULL,NULL,&nsv));
38
39    /* copy singular vectors */
40    PetscCall(MatGetOwnershipRange(svd->OP,&lowu,NULL));
41    PetscCall(MatGetOwnershipRange(svd->OPb,&lowv,NULL));
42    PetscCall(DSGetArray(svd->ds,DS_MAT_X,&X));
43    PetscCall(DSGetArray(svd->ds,DS_MAT_U,&U));
44    PetscCall(DSGetArray(svd->ds,DS_MAT_V,&V));
45    for (j=0;j<nsv;j++) {
46        svd->sigma[j] = PetscRealPart(w[j]);
47        PetscCall(BVGetColumn(svd->V,j,&x));
48        PetscCall(VecGetOwnershipRange(x,&lowx,&highx));

```

```

47 PetscCall(VecGetArrayWrite(x,&px));
48 for (i=lowx;i<highx;i++) px[i-lowx] = X[i+j*ld];
49 PetscCall(VecRestoreArrayWrite(x,&px));
50 PetscCall(BVRestoreColumn(svd->V,j,&x));
51 PetscCall(BVGetColumn(svd->U,j,&uv));
52 PetscCall(VecGetArrayWrite(uv,&puv));
53 for (i=0;i<mlocal;i++) puv[i] = U[i+lowu+j*ld];
54 for (i=0;i<plocal;i++) puv[i+mlocal] = V[i+lowv+j*ld];
55 PetscCall(VecRestoreArrayWrite(uv,&puv));
56 PetscCall(BVRestoreColumn(svd->U,j,&uv));
57 }
58 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_X,&X));
59 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_U,&U));
60 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_V,&V));
61
62 svd->nconv = nsv;
63 svd->its = 1;
64 svd->reason = SVD_CONVERGED_TOL;
65
66 PetscCall(MatDestroy(&A));
67 PetscCall(MatDestroy(&B));
68 PetscCall(PetscFree(w));
69 PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);
70 }

```

Листинг 4: Функция SVDSolve_LAPACK_GSVD

4.4 Функция SVDSolve_LAPACK_HSVD

Эта функция реализует гармоническое сингулярное разложение (HSVD):

1. Сбор матрицы A :

- Матрица A собирается и конвертируется в последовательный формат.

2. Установка весов Ω :

- Вектор весов ω устанавливается в объекте ds с помощью `DSGetMatAndColumn`.

3. Решение задачи HSVD:

- Вызывается функция `DSSolve`, учитывающая метрику Ω .

4. Копирование результатов:

- Результаты копируются в объект `svd`, сохраняется информация о знаках сингулярных значений.

Код функции SVDSolve_LAPACK_HSVD:

```

1 static PetscErrorCode SVDSolve_LAPACK_HSVD(SVD svd)
2 {
3     PetscInt      M,N,n,i,j,k,ld,lowu,lowv,highu,highv;
4     Mat           A,Ar,mat,D;
5     Vec           u,v,vomega;
6     PetscScalar   *pU,*pV,*pu,*pv,*w;
7     PetscReal     *pD;
8
9     PetscFunctionBegin;

```



```

10 PetscCall(DSGetLeadingDimension(svd->ds,&ld));
11 PetscCall(MatCreateRedundantMatrix(svd->OP,0,PETSC_COMM_SELF,
    MAT_INITIAL_MATRIX,&Ar));
12 PetscCall(MatConvert(Ar,MATSEQDENSE,MAT_INITIAL_MATRIX,&mat));
13 PetscCall(MatDestroy(&Ar));
14 PetscCall(MatGetSize(mat,&M,&N));
15 PetscCall(DSSetDimensions(svd->ds,M,0,0));
16 PetscCall(DSHSVSetDimensions(svd->ds,N));
17 PetscCall(DSGetMat(svd->ds,DS_MAT_A,&A));
18 PetscCall(MatCopy(mat,A,SAME_NONZERO_PATTERN));
19 PetscCall(DSRestoreMat(svd->ds,DS_MAT_A,&A));
20 PetscCall(DSGetMatAndColumn(svd->ds,DS_MAT_D,0,&D,&vomega));
21 PetscCall(VecCopy(svd->omega,vomega));
22 PetscCall(DSRestoreMatAndColumn(svd->ds,DS_MAT_D,0,&D,&vomega));
23 PetscCall(DSSetState(svd->ds,DS_STATE_RAW));
24
25 n = PetscMin(M,N);
26 PetscCall(PetscMalloc1(n,&w));
27 PetscCall(DSSolve(svd->ds,w,NULL));
28 PetscCall(DSSort(svd->ds,w,NULL,NULL,NULL,NULL));
29 PetscCall(DSSynchronize(svd->ds,w,NULL));
30
31 /* copy singular vectors */
32 PetscCall(DSGetArrayReal(svd->ds,DS_MAT_D,&pD));
33 PetscCall(DSGetArray(svd->ds,DS_MAT_U,&pU));
34 PetscCall(DSGetArray(svd->ds,DS_MAT_V,&pV));
35 for (i=0;i<n;i++) {
36     if (svd->which == SVD_SMALLEST) k = n - i - 1;
37     else k = i;
38     svd->sigma[k] = PetscRealPart(w[i]);
39     svd->sign[k] = pD[i];
40     PetscCall(BVGetColumn(svd->U,k,&u));
41     PetscCall(BVGetColumn(svd->V,k,&v));
42     PetscCall(VecGetOwnershipRange(u,&lowu,&highu));
43     PetscCall(VecGetOwnershipRange(v,&lowv,&highv));
44     PetscCall(VecGetArray(u,&pu));
45     PetscCall(VecGetArray(v,&pv));
46     if (M>=N) {
47         for (j=lowu;j<highu;j++) pu[j-lowu] = pU[i*ld+j];
48         for (j=lowv;j<highv;j++) pv[j-lowv] = pV[i*ld+j];
49     } else {
50         for (j=lowu;j<highu;j++) pu[j-lowu] = pV[i*ld+j];
51         for (j=lowv;j<highv;j++) pv[j-lowv] = pU[i*ld+j];
52     }
53     PetscCall(VecRestoreArray(u,&pu));
54     PetscCall(VecRestoreArray(v,&pv));
55     PetscCall(BVRestoreColumn(svd->U,k,&u));
56     PetscCall(BVRestoreColumn(svd->V,k,&v));
57 }
58 PetscCall(DSRestoreArrayReal(svd->ds,DS_MAT_D,&pD));
59 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_U,&pU));
60 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_V,&pV));
61
62 svd->nconv = n;
63 svd->its = 1;
64 svd->reason = SVD_CONVERGED_TOL;
65
66 PetscCall(MatDestroy(&mat));
67 PetscCall(PetscFree(w));
68 PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);

```

Листинг 5: Функция `SVDSolve_LAPACK_HSVD`

4.5 Функция `SVDSetDSType_LAPACK`

Эта функция устанавливает тип объекта `DS` в зависимости от решаемой задачи (SVD, GSVD, HSVD). Код функции:

```

1 static PetscErrorCode SVDSetDSType_LAPACK(SVD svd)
2 {
3     PetscFunctionBegin;
4     if (svd->isgeneralized) PetscCall(DSSetType(svd->ds, DSGSVD));
5     else if (svd->ishyperbolic) PetscCall(DSSetType(svd->ds, DSHSVD));
6     else PetscCall(DSSetType(svd->ds, DSSVD));
7     PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);
8 }

```

Листинг 6: Функция `SVDSetDSType_LAPACK`

4.6 Функция `SVDCreate_LAPACK`

Эта функция создаёт контекст для использования метода LAPACK в SVD. Код функции:

```

1 SLEPC_EXTERN PetscErrorCode SVDCreate_LAPACK(SVD svd)
2 {
3     PetscFunctionBegin;
4     svd->ops->setup = SVDSetUp_LAPACK;
5     svd->ops->setfromoptions = SVDSetFromOptions_LAPACK;
6     svd->ops->solve = SVDSolve_LAPACK;
7     svd->ops->destroy = SVDDestroy_LAPACK;
8     svd->ops->reset = SVDReset_LAPACK;
9     svd->ops->view = SVDView_LAPACK;
10    svd->ops->setdstype = SVDSetDSType_LAPACK;
11    PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);
12 }

```

Листинг 7: Функция `SVDCreate_LAPACK`

4.7 Приведение матрицы к двухдиагональной форме в коде

Важным шагом алгоритма вычисления SVD является приведение исходной матрицы A к двухдиагональной форме B . В коде файла `svdlapack.c` этот процесс реализован через вызовы подпрограмм LAPACK внутри объекта `DS` (Direct Solver).

В функции `SVDSolve_LAPACK` происходит следующее:

1. Подготовка матрицы:

- Матрица A собирается на одном процессе с помощью `MatCreateRedundantMatrix`.
- Конвертация матрицы в формат `MATSEQDENSE` с помощью `MatConvert`.
- Полученная матрица устанавливается в объекте `DS` с помощью `DSGetMat`.

2. Инициализация объекта `DS`:

- Тип объекта устанавливается как `DSSVD` через функцию `DSSetType(svd->ds, DSSVD)`.

3. Вызов функции DSSolve:

- Функция `DSSolve` вызывает соответствующие подпрограммы LAPACK для вычисления SVD.

4. Выбор алгоритма LAPACK:

- В зависимости от размеров матрицы и настроек, `DSSolve` может вызвать следующие подпрограммы:
 - `?GESVD` (например, `DGESVD`): Стандартная подпрограмма для вычисления SVD, использующая последовательную редукцию к двухдиагональной форме.
 - `?GESDD` (например, `DGESDD`): Подпрограмма, реализующая метод разделения и завоевания (Divide and Conquer).
- Здесь символ `?` заменяется на соответствующий префикс типа данных: `s`, `d`, `c` или `z`.

5. Редукция к двухдиагональной форме:

- Подпрограммы `?GESVD` и `?GESDD` внутри себя приводят матрицу A к двухдиагональной форме B с помощью ортогональных преобразований.
- Редукция выполняется с использованием подпрограммы `?GEBRD` (например, `DGEBRD`), которая применяет отражения Хаусхолдера.
- Результат редукции представляется в виде:

$$A = Q_L B Q_R^T,$$

где Q_L и Q_R — ортогональные матрицы, а B — двухдиагональная матрица.

6. Вычисление SVD двухдиагональной матрицы:

- Для двухдиагональной матрицы B используются специализированные подпрограммы LAPACK, соответствующие трём основным методам:
 - **QR-алгоритм для двухдиагональных матриц:**
 - * Реализован в подпрограмме `?BDSQR`.
 - * Использует последовательность вращений Гивенса для диагонализации B .
 - **Алгоритм разделения и завоевания (Divide and Conquer):**
 - * Реализован в подпрограмме `?BDSDC`.
 - * Разбивает B на подматрицы меньшего размера, вычисляет SVD для них и объединяет результаты.
 - **Метод обобщённых квадратов (Golub–Kahan):**
 - * Хотя LAPACK не предоставляет прямой реализации метода Голуба–Кахана для SVD двухдиагональной матрицы, аналогичные идеи используются в алгоритмах, оптимизированных для вычисления сингулярных значений и векторов.
- Выбор конкретной подпрограммы может зависеть от настроек и оптимизации LAPACK на данной системе.

7. Обратное преобразование сингулярных векторов:

- После получения сингулярных векторов U_B и V_B для матрицы B , необходимо преобразовать их к сингулярным векторам исходной матрицы A :

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

- Это преобразование выполняется внутри подпрограмм LAPACK, используя накопленные ортогональные преобразования.

8. Копирование результатов:

- После завершения работы `DSSolve` сингулярные значения σ_i и векторы U , V извлекаются из объекта `DS` и копируются в соответствующие структуры объекта `svd`.

В коде функции `SVDSolve_LAPACK` (листинг 3) можно увидеть вызов `DSSolve`, который внутри себя выполняет описанные шаги по редукции матрицы и вычислению SVD.

4.8 Структуры данных и их значение

- **SVD**: Главная структура, представляющая объект сингулярного разложения. Хранит информацию о матрицах A , B , параметрах алгоритма и результатах вычислений.
- **DS**: Структура Direct Solver, используется для решения плотных матричных задач с помощью LAPACK.
- **Mat**: Структура для представления матриц в PETSc/SLEPc.
- **Vec**: Структура для представления векторов. Используется для хранения сингулярных векторов.
- **BV**: Блок векторов, представляет собой набор векторов для эффективных операций.

4.9 Важные функции и их ссылки на документацию

- `MatCreateRedundantMatrix`: Создаёт копию распределённой матрицы на одном процессе. [Документация]
- `MatConvert`: Конвертирует матрицу в другой формат. [Документация]
- `DSSolve`: Решает задачу собственных значений или SVD. [Документация]
- `DSSort`: Сортирует вычисленные значения. [Документация]
- `DSSynchronize`: Синхронизирует данные между процессами. [Документация]
- `BVGetColumn` и `BVRestoreColumn`: Доступ к столбцу блок-вектора. [Документация]
- `VecGetArray` и `VecRestoreArray`: Доступ к внутреннему массиву вектора. [Документация]

Реализация

```
1  /*
2      - - - - -
3      SLEPc - Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations
4      Copyright (c) 2002-, Universitat Politecnica de Valencia, Spain
5
6      Этот файл является частью SLEPc.
7      SLEPc распространяется по лицензии BSD с 2 пунктами (см. LICENSE).
8      - - - - -
9  */
10
11  /*
12      Этот файл реализует обертку над подпрограммами LAPACK для вычисления SVD
13  */
14
15  #include <slepc/private/svdimpl.h>
16  #include <slepcblaslapack.h>
17
18  /* Функция для настройки SVD с использованием LAPACK */
19  static PetscErrorCode SVDSetup_LAPACK(SVD svd)
20  {
21      PetscInt      M,N,P=0;
22
23      PetscFunctionBegin;
24      PetscCall(MatGetSize(svd->A,&M,&N)); /* Получаем размеры матрицы A */
25
26      if (!svd->isgeneralized)              /* Если это не обобщенное SVD */
27          svd->ncv = N;                    /* Устанавливаем ncv равным числу ст
28          олбцов N */
29      else {
30          PetscCall(MatGetSize(svd->OPb,&P,NULL)); /* Получаем число строк матриц
31          ы B для GSVD */
32          svd->ncv = PetscMin(M,PetscMin(N,P)); /* ncv = min(M, N, P) */
33      }
34
35      if (svd->mpd!=PETSC_DETERMINE)        /* Если параметр mpd задан */
36          PetscCall(PetscInfo(svd,"Warning: parameter mpd ignored\n")); /* Предуп
37          реждаем, что mpd игнорируется */
38
39      SVDCheckUnsupported(svd,SVD_FEATURE_STOPPING); /* Проверяем на неподдержи
40      ваемые функции */
41
42      if (svd->max_it==PETSC_DETERMINE)      /* Если max_it не задан */
43          svd->max_it = 1;                  /* Устанавливаем max_it = 1 */
44
45      svd->leftbasis = PETSC_TRUE;           /* Устанавливаем флаг использования
46      левых сингулярных векторов */
47
48      PetscCall(SVDAllocateSolution(svd,0)); /* Выделяем память для решения */
49
50      PetscCall(DSAllocate(svd->ds,PetscMax(N,PetscMax(M,P)))); /* Выделяем пам
51      ять для объекта DS */
52
53      PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);    /* Завершаем функцию успешно */
54  }
55
56  /* Функция для решения SVD с использованием LAPACK */
```

```

51 static PetscErrorCode SVDsolve_LAPACK(SVD svd)
52 {
53     PetscInt      M,N,n,i,j,k,ld,lowu,lowv,highu,highv;
54     Mat           A,Ar,mat;
55     Vec           u,v;
56     PetscScalar   *pU,*pV,*pu,*pv,*w;
57
58     PetscFunctionBegin;
59     PetscCall(DSGetLeadingDimension(svd->ds,&ld)); /* Получаем ведущую размер
60     ность для DS */
61
62     /* Создаем копию матрицы OP на одном процессе */
63     PetscCall(MatCreateRedundantMatrix(svd->OP,0,PETSC_COMM_SELF,
64     MAT_INITIAL_MATRIX,&Ar));
65     PetscCall(MatConvert(Ar,MATSEQDENSE,MAT_INITIAL_MATRIX,&mat)); /* Конверт
66     ируем в последовательный плотный формат */
67     PetscCall(MatDestroy(&Ar)); /* Уничтожаем промежуточную матрицу */
68
69     PetscCall(MatGetSize(mat,&M,&N)); /* Получаем размеры матрицы mat */
70
71     PetscCall(DSSetDimensions(svd->ds,M,0,0)); /* Устанавливаем размеры DS
72     */
73     PetscCall(DSSVDSetDimensions(svd->ds,N)); /* Устанавливаем размерность
74     для SVD в DS */
75
76     PetscCall(DSGetMat(svd->ds,DS_MAT_A,&A)); /* Получаем матрицу A из DS
77     */
78     PetscCall(MatCopy(mat,A,SAME_NONZERO_PATTERN)); /* Копируем содержимое
79     mat в A */
80     PetscCall(DSRestoreMat(svd->ds,DS_MAT_A,&A)); /* Возвращаем матрицу A в
81     DS */
82
83     PetscCall(DSSetState(svd->ds,DS_STATE_RAW)); /* Устанавливаем состояни
84     е DS как RAW */
85
86     n = PetscMin(M,N); /* n = min(M, N) */
87
88     PetscCall(PetscMalloc1(n,&w)); /* Выделяем память для мас
89     сива сингулярных значений w */
90
91     PetscCall(DSSolve(svd->ds,w,NULL)); /* Вычисляем сингулярные з
92     начения и векторы */
93     PetscCall(DSSort(svd->ds,w,NULL,NULL,NULL,NULL)); /* Сортируем сингулярны
94     е значения */
95     PetscCall(DSSynchronize(svd->ds,w,NULL)); /* Синхронизируем данные м
96     ежду процессами */
97
98     /* Копируем сингулярные векторы */
99     PetscCall(DSGetArray(svd->ds,DS_MAT_U,&pU)); /* Получаем массив с левым
100     и сингулярными векторами */
101     PetscCall(DSGetArray(svd->ds,DS_MAT_V,&pV)); /* Получаем массив с правы
102     ми сингулярными векторами */
103
104     for (i=0;i<n;i++) {
105         if (svd->which == SVD_SMALLEST) /* Определяем порядок сохр
106         анения сингулярных значений */
107             k = n - i - 1;
108         else
109             k = i;
110     }

```

```

95     svd->sigma[k] = PetscRealPart(w[i]);          /* Сохраняем сингулярное з
начение */
96
97     PetscCall(BVGetColumn(svd->U,k,&u));          /* Получаем k-й столбец из
блока векторов U */
98     PetscCall(BVGetColumn(svd->V,k,&v));          /* Получаем k-й столбец из
блока векторов V */
99
100    PetscCall(VecGetOwnershipRange(u,&lowu,&highu)); /* Получаем диапазон и
ндексов для вектора u */
101    PetscCall(VecGetOwnershipRange(v,&lowv,&highv)); /* Получаем диапазон и
ндексов для вектора v */
102
103    PetscCall(VecGetArray(u,&pu));                /* Получаем указатель на д
анные вектора u */
104    PetscCall(VecGetArray(v,&pv));                /* Получаем указатель на д
анные вектора v */
105
106    if (M>=N) {
107        /* Если число строк больше или равно числу столбцов */
108        for (j=lowu;j<highu;j++) pu[j-lowu] = pU[i*ld+j]; /* Копируем данные
из pU в pu */
109        for (j=lowv;j<highv;j++) pv[j-lowv] = pV[i*ld+j]; /* Копируем данные
из pV в pv */
110    } else {
111        /* Если число столбцов больше числа строк */
112        for (j=lowu;j<highu;j++) pu[j-lowu] = pV[i*ld+j]; /* Копируем данные
из pV в pu */
113        for (j=lowv;j<highv;j++) pv[j-lowv] = pU[i*ld+j]; /* Копируем данные
из pU в pv */
114    }
115
116    PetscCall(VecRestoreArray(u,&pu));             /* Возвращаем доступ к дан
ным вектора u */
117    PetscCall(VecRestoreArray(v,&pv));             /* Возвращаем доступ к дан
ным вектора v */
118
119    PetscCall(BVRestoreColumn(svd->U,k,&u));       /* Возвращаем столбец u в
блок векторов U */
120    PetscCall(BVRestoreColumn(svd->V,k,&v));       /* Возвращаем столбец v в
блок векторов V */
121 }
122
123 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_U,&pU)); /* Возвращаем массив pU
в DS */
124 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_V,&pV)); /* Возвращаем массив pV
в DS */
125
126 svd->nconv = n;                                  /* Устанавливаем число на
йденных сингулярных значений */
127 svd->its = 1;                                    /* Устанавливаем число ит
ераций (1, так как метод прямой) */
128 svd->reason = SVD_CONVERGED_TOL;                /* Устанавливаем причину
завершения */
129
130 PetscCall(MatDestroy(&mat));                    /* Уничтожаем матрицу mat
*/
131 PetscCall(PetscFree(w));                        /* Освобождаем память, вы
деленную под w */
132

```

```

133 PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);          /* Завершаем функцию успе
      шно */
134 }
135
136 /* Функция для решения обобщенного SVD с использованием LAPACK */
137 static PetscErrorCode SVDSolve_LAPACK_GSVD(SVD svd)
138 {
139     PetscInt      nsv,m,n,p,i,j,mlocal,plocal,ld,lowx,lowu,lowv,highx;
140     Mat           Ar,A,Ads,Br,B,Bds;
141     Vec           uv,x;
142     PetscScalar   *U,*V,*X,*px,*puv,*w;
143
144     PetscFunctionBegin;
145     PetscCall(DSGetLeadingDimension(svd->ds,&ld));          /* Получаем ведущую ра
      змерность DS */
146
147     /* Создаем копию матрицы OP на одном процессе */
148     PetscCall(MatCreateRedundantMatrix(svd->OP,0,PETSC_COMM_SELF,
      MAT_INITIAL_MATRIX,&Ar));
149     PetscCall(MatConvert(Ar,MATSEQDENSE,MAT_INITIAL_MATRIX,&A));          /* Конверт
      ируем в последовательный плотный формат */
150     PetscCall(MatDestroy(&Ar));          /* Уничтож
      аем промежуточную матрицу */
151
152     /* Создаем копию матрицы OPb на одном процессе */
153     PetscCall(MatCreateRedundantMatrix(svd->OPb,0,PETSC_COMM_SELF,
      MAT_INITIAL_MATRIX,&Br));
154     PetscCall(MatConvert(Br,MATSEQDENSE,MAT_INITIAL_MATRIX,&B));          /* Конверт
      ируем в последовательный плотный формат */
155     PetscCall(MatDestroy(&Br));          /* Уничтож
      аем промежуточную матрицу */
156
157     PetscCall(MatGetSize(A,&m,&n));          /* Получаем размеры матри
      цы A */
158     PetscCall(MatGetLocalSize(svd->OP,&mlocal,NULL));          /* Получаем локальный р
      азмер матрицы OP */
159     PetscCall(MatGetLocalSize(svd->OPb,&plocal,NULL));          /* Получаем локальный р
      азмер матрицы OPb */
160     PetscCall(MatGetSize(B,&p,NULL));          /* Получаем размер матриц
      ы B */
161
162     PetscCall(DSSetDimensions(svd->ds,m,0,0));          /* Устанавливаем размеры
      DS */
163     PetscCall(DSGSVDSSetDimensions(svd->ds,n,p));          /* Устанавливаем размеры
      для GSVD в DS */
164
165     PetscCall(DSGetMat(svd->ds,DS_MAT_A,&Ads));          /* Получаем матрицу A из
      DS */
166     PetscCall(MatCopy(A,Ads,SAME_NONZERO_PATTERN));          /* Копируем A в Ads */
167     PetscCall(DSRestoreMat(svd->ds,DS_MAT_A,&Ads));          /* Возвращаем Ads в DS */
168
169     PetscCall(DSGetMat(svd->ds,DS_MAT_B,&Bds));          /* Получаем матрицу B из
      DS */
170     PetscCall(MatCopy(B,Bds,SAME_NONZERO_PATTERN));          /* Копируем B в Bds */
171     PetscCall(DSRestoreMat(svd->ds,DS_MAT_B,&Bds));          /* Возвращаем Bds в DS */
172
173     PetscCall(DSSetState(svd->ds,DS_STATE_RAW));          /* Устанавливаем состояни
      е DS как RAW */
174
175     nsv = PetscMin(n,PetscMin(p,m));          /* nsv = min(n, p, m) */

```



```

176
177 PetscCall(PetscMalloc1(nsv,&w)); /* Выделяем память для ма
    ссива сингулярных значений w */
178
179 PetscCall(DSSolve(svd->ds,w,NULL)); /* Вычисляем сингулярные
    значения и векторы */
180 PetscCall(DSSort(svd->ds,w,NULL,NULL,NULL,NULL)); /* Сортируем сингулярные
    значения */
181 PetscCall(DSSynchronize(svd->ds,w,NULL)); /* Синхронизируем данные
    между процессами */
182 PetscCall(DSGetDimensions(svd->ds,NULL,NULL,NULL,&nsv)); /* Получаем обнов
    лѐнное значение nsv */
183
184 /* Копируем сингулярные векторы */
185 PetscCall(MatGetOwnershipRange(svd->OP,&lowu,NULL)); /* Получаем диапа
    зон индексов для матрицы OP */
186 PetscCall(MatGetOwnershipRange(svd->OPb,&lowv,NULL)); /* Получаем диапа
    зон индексов для матрицы OPb */
187
188 PetscCall(DSGetArray(svd->ds,DS_MAT_X,&X)); /* Получаем массив
    X из DS */
189 PetscCall(DSGetArray(svd->ds,DS_MAT_U,&U)); /* Получаем массив
    U из DS */
190 PetscCall(DSGetArray(svd->ds,DS_MAT_V,&V)); /* Получаем массив
    V из DS */
191
192 for (j=0;j<nsv;j++) {
193     svd->sigma[j] = PetscRealPart(w[j]); /* Сохраняем сингу
    лярное значение */
194
195     PetscCall(BVGetColumn(svd->V,j,&x)); /* Получаем j-й ст
    олбец из блока векторов V */
196     PetscCall(VecGetOwnershipRange(x,&lowx,&highx)); /* Получаем диапа
    зон индексов для вектора x */
197     PetscCall(VecGetArrayWrite(x,&px)); /* Получаем указат
    ель на данные вектора x */
198     for (i=lowx;i<highx;i++) px[i-lowx] = X[i+j*ld]; /* Копируем данные
    из X в px */
199     PetscCall(VecRestoreArrayWrite(x,&px)); /* Возвращаем дост
    уп к данным вектора x */
200     PetscCall(BVRestoreColumn(svd->V,j,&x)); /* Возвращаем стол
    бец x в блок векторов V */
201
202     PetscCall(BVGetColumn(svd->U,j,&uv)); /* Получаем j-й ст
    олбец из блока векторов U */
203     PetscCall(VecGetArrayWrite(uv,&puv)); /* Получаем указат
    ель на данные вектора uv */
204
205     for (i=0;i<mlocal;i++) puv[i] = U[i+lowu+j*ld]; /* Копируем данные
    из U в puv для матрицы A */
206     for (i=0;i<plocal;i++) puv[i+mlocal] = V[i+lowv+j*ld]; /* Копируем данные
    из V в puv для матрицы B */
207
208     PetscCall(VecRestoreArrayWrite(uv,&puv)); /* Возвращаем дост
    уп к данным вектора uv */
209     PetscCall(BVRestoreColumn(svd->U,j,&uv)); /* Возвращаем стол
    бец uv в блок векторов U */
210 }
211
212 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_X,&X)); /* Возвращаем масс

```

```

    ив X в DS */
213 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_U,&U));          /* Возвращаем масс
    ив U в DS */
214 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_V,&V));          /* Возвращаем масс
    ив V в DS */
215
216 svd->nconv = nsv;                                          /* Устанавливаем ч
    исло найденных сингулярных значений */
217 svd->its = 1;                                             /* Устанавливаем ч
    исло итераций (1, так как метод прямой) */
218 svd->reason = SVD_CONVERGED_TOL;                          /* Устанавливаем п
    причину завершения */
219
220 PetscCall(MatDestroy(&A));                                /* Уничтожаем matr
    ицу A */
221 PetscCall(MatDestroy(&B));                                /* Уничтожаем matr
    ицу B */
222 PetscCall(PetscFree(w));                                  /* Освобождаем пам
    ять, выделенную под w */
223
224 PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);                        /* Завершаем функц
    ию успешно */
225 }
226
227 /* Функция для решения гармонического SVD с использованием LAPACK */
228 static PetscErrorCode SVDSolve_LAPACK_HSVD(SVD svd)
229 {
230     PetscInt      M,N,n,i,j,k,ld,lowu,lowv,highu,highv;
231     Mat           A,Ar,mat,D;
232     Vec           u,v,vomega;
233     PetscScalar   *pU,*pV,*pu,*pv,*w;
234     PetscReal     *pD;
235
236     PetscFunctionBegin;
237     PetscCall(DSGetLeadingDimension(svd->ds,&ld));          /* Получаем ведущу
    ю размерность DS */
238
239     /* Создаем копию матрицы OP на одном процессе */
240     PetscCall(MatCreateRedundantMatrix(svd->OP,0,PETSC_COMM_SELF,
    MAT_INITIAL_MATRIX,&Ar));
241     PetscCall(MatConvert(Ar,MATSEQDENSE,MAT_INITIAL_MATRIX,&mat)); /* Конверт
    ируем в последовательный плотный формат */
242     PetscCall(MatDestroy(&Ar));                             /* Уни
    чтожаем промежуточную матрицу */
243
244     PetscCall(MatGetSize(mat,&M,&N));                        /* Получаем раз
    меры матрицы mat */
245
246     PetscCall(DSSetDimensions(svd->ds,M,0,0));              /* Устанавливаем
    м размеры DS */
247     PetscCall(DSHSVDSsetDimensions(svd->ds,N));             /* Устанавливаем
    м размеры для HSVD в DS */
248
249     PetscCall(DSGetMat(svd->ds,DS_MAT_A,&A));               /* Получаем matr
    ицу A из DS */
250     PetscCall(MatCopy(mat,A,SAME_NONZERO_PATTERN));         /* Копируем matr
    ицу A */
251     PetscCall(DSRestoreMat(svd->ds,DS_MAT_A,&A));           /* Возвращаем A
    в DS */
252

```

```

253 /* Устанавливаем вектор весов omega */
254 PetscCall(DSGetMatAndColumn(svd->ds, DS_MAT_D, 0, &D, &vomega)); /* Получаем м
   атрицу D и столбец vomega из DS */
255 PetscCall(VecCopy(svd->omega, vomega)); /* Копируем в
   ектор весов omega в vomega */
256 PetscCall(DSRestoreMatAndColumn(svd->ds, DS_MAT_D, 0, &D, &vomega)); /* Возвра
   щаем D и vomega в DS */
257
258 PetscCall(DSSetState(svd->ds, DS_STATE_RAW)); /* Устанавлива
   ем состояние DS как RAW */
259
260 n = PetscMin(M, N); /* n = min(M,
   N) */
261
262 PetscCall(PetscMalloc1(n, &w)); /* Выделяем па
   мять для массива сингулярных значений w */
263
264 PetscCall(DSSolve(svd->ds, w, NULL)); /* Вычисляем с
   ингулярные значения и векторы */
265 PetscCall(DSSort(svd->ds, w, NULL, NULL, NULL, NULL)); /* Сортируем с
   ингулярные значения */
266 PetscCall(DSSynchronize(svd->ds, w, NULL)); /* Синхронизир
   уем данные между процессами */
267
268 /* Копируем сингулярные векторы и знаки */
269 PetscCall(DSGetArrayReal(svd->ds, DS_MAT_D, &pD)); /* Получаем ма
   ссив знаков из DS */
270 PetscCall(DSGetArray(svd->ds, DS_MAT_U, &pU)); /* Получаем ма
   ссив U из DS */
271 PetscCall(DSGetArray(svd->ds, DS_MAT_V, &pV)); /* Получаем ма
   ссив V из DS */
272
273 for (i=0; i<n; i++) {
274     if (svd->which == SVD_SMALLEST) /* Определяем
   порядок сохранения сингулярных значений */
275         k = n - i - 1;
276     else
277         k = i;
278
279     svd->sigma[k] = PetscRealPart(w[i]); /* Сохраняем с
   ингулярное значение */
280     svd->sign[k] = pD[i]; /* Сохраняем з
   нак сингулярного значения */
281
282     PetscCall(BVGetColumn(svd->U, k, &u)); /* Получаем k-
   й столбец из блока векторов U */
283     PetscCall(BVGetColumn(svd->V, k, &v)); /* Получаем k-
   й столбец из блока векторов V */
284
285     PetscCall(VecGetOwnershipRange(u, &lowu, &highu)); /* Получаем ди
   апазон индексов для вектора u */
286     PetscCall(VecGetOwnershipRange(v, &lowv, &highv)); /* Получаем ди
   апазон индексов для вектора v */
287
288     PetscCall(VecGetArray(u, &pu)); /* Получаем ук
   азатель на данные вектора u */
289     PetscCall(VecGetArray(v, &pv)); /* Получаем ук
   азатель на данные вектора v */
290
291     if (M >= N) {

```

```

292     /* Если число строк больше или равно числу столбцов */
293     for (j=lowu;j<highu;j++) pu[j-lowu] = pU[i*ld+j];      /* Копируем да
нные из pU в pu */
294     for (j=lowv;j<highv;j++) pv[j-lowv] = pV[i*ld+j];      /* Копируем да
нные из pV в pv */
295 } else {
296     /* Если число столбцов больше числа строк */
297     for (j=lowu;j<highu;j++) pu[j-lowu] = pV[i*ld+j];      /* Копируем да
нные из pV в pu */
298     for (j=lowv;j<highv;j++) pv[j-lowv] = pU[i*ld+j];      /* Копируем да
нные из pU в pv */
299 }
300
301 PetscCall(VecRestoreArray(u,&pu));                          /* Возвращаем
доступ к данным вектора u */
302 PetscCall(VecRestoreArray(v,&pv));                          /* Возвращаем
доступ к данным вектора v */
303
304 PetscCall(BVRestoreColumn(svd->U,k,&u));                    /* Возвращаем
столбец u в блок векторов U */
305 PetscCall(BVRestoreColumn(svd->V,k,&v));                    /* Возвращаем
столбец v в блок векторов V */
306 }
307
308 PetscCall(DSRestoreArrayReal(svd->ds,DS_MAT_D,&pD));          /* Возвращаем
массив pD в DS */
309 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_U,&pU));            /* Возвращаем
массив pU в DS */
310 PetscCall(DSRestoreArray(svd->ds,DS_MAT_V,&pV));            /* Возвращаем
массив pV в DS */
311
312 svd->nconv = n;                                              /* Устанавлива
ем число найденных сингулярных значений */
313 svd->its = 1;                                              /* Устанавлива
ем число итераций (1, так как метод прямой) */
314 svd->reason = SVD_CONVERGED_TOL;                          /* Устанавлива
ем причину завершения */
315
316 PetscCall(MatDestroy(&mat));                               /* Уничтожаем
матрицу mat */
317 PetscCall(PetscFree(w));                                  /* Освобождаем
память, выделенную под w */
318
319 PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);                        /* Завершаем ф
ункцию успешно */
320 }
321
322 /* Функция для установки типа объекта DS в зависимости от задачи */
323 static PetscErrorCode SVDSetDSType_LAPACK(SVD svd)
324 {
325     PetscFunctionBegin;
326     PetscCall(DSSetType(svd->ds,svd->OPb?DSGSVD:svd->omega?DSHSVD:DSSVD)); /*
Устанавливаем тип DS */
327     PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);                    /*
Завершаем функцию успешно */
328 }
329
330 /* Функция для создания контекста SVD с использованием LAPACK */
331 SLEPC_EXTERN PetscErrorCode SVDCreate_LAPACK(SVD svd)
332 {

```

```

333 PetscFunctionBegin;
334 svd->ops->setup      = SVDSsetUp_LAPACK;          /* Устанавливаем функцию на
   стройки */
335 svd->ops->solve        = SVDSolve_LAPACK;          /* Устанавливаем функцию ре
   шения стандартного SVD */
336 svd->ops->solveg       = SVDSolve_LAPACK_GSVD;     /* Устанавливаем функцию ре
   шения обобщенного SVD */
337 svd->ops->solveh       = SVDSolve_LAPACK_HSVD;     /* Устанавливаем функцию ре
   шения гармонического SVD */
338 svd->ops->setdstype    = SVDSetDSType_LAPACK;     /* Устанавливаем функцию ус
   тановки типа DS */
339 PetscFunctionReturn(PETSC_SUCCESS);              /* Завершаем функцию успешн
   о */
340 }

```

Листинг 8: Реализация с пояснениями построчно

5. References

1. **LAPACK Users' Guide**, Third Edition, E. Anderson et al., SIAM, Philadelphia, PA, 1999. [Разделы, касающиеся вычисления SVD]
2. **SLEPc Documentation**: Официальная документация библиотеки SLEPc. Доступна по адресу: <https://slepc.upv.es/documentation/>
 - Раздел DS Module: Подробное описание модуля Direct Solver.
 - Раздел BV Module: Документация по блок-векторам.
3. **PETSc Documentation**: Документация по библиотеке PETSc. Доступна по адресу: <https://petsc.org/release/docs/>
 - Разделы по структурам Mat и Vec.
4. **Golub, G. H., Van Loan, C. F.**, *Matrix Computations*, 3rd ed., Johns Hopkins University Press, 1996. [Глава 8: Singular Value Decomposition]
5. **Исходный код файла svdlapack.c**: Доступен в репозитории SLEPc по адресу: <https://gitlab.com/slepc/slepc/-/blob/master/src/sgd/impls/lapack/svdlapack.c>