

Алгоритм 4

Обозначения

В данной работе рассматривается и имплементируется предложенный Огита и Аишима итеративный метод уточнения сингулярных значений для полного сингулярного разложения [2].

Рассмотрим данный итеративный метод уточнения сингулярных значений для матрицы с действительными коэффициентами $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$. В случае $m < n$ будет решаться задача для транспонированной матрицы A^T , поскольку сингулярное разложение A^T и A совпадает [7].

Пусть $\sigma_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2, \dots, n$ – сингулярные числа. Полным сингулярным разложением матрицы A будем считать такое разложение

$$A = U \Sigma V^T, \quad U \in \mathbb{R}^{m \times m}, \quad V \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad \Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}, \text{ где}$$

матрицы U и V ортогональные, матрица Σ диагональная и $\Sigma_{ii} = \sigma_i$.

Далее будем считать, что $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_n > 0$, то есть все сингулярные значения различные. Также $\|\cdot\|$ обозначает спектральную норму, т. е. $\sigma_{\max}(A)$. E – единичная матрица. В тексте различаются приближительные значения и посчитанные значения соответственно \tilde{a} и \hat{a} .

Ускорение алгоритма

Известно, что вычисление сингулярного разложения преимущественно ограничено матричным умножением, что и является основной вычислительной сложностью алгоритма. Есть несколько подходов к матричному умножению с высокой точностью: XBLAS [3], быстрые и точные вычисления скалярного произведения [4] и произведений матриц [5], основанные на error-free transformations.

Рассматриваемый алгоритм использует такие соотношения:

1. В силу ортогональности U :

$$U^T U = E \tag{1}$$

2. В силу ортогональности V :

$$V^T V = E \tag{2}$$

3. В силу диагонализированности A :

$$U^T A V = \Sigma \tag{3}$$

Пусть $\hat{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ и $\hat{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ приближенные значения матриц U и V .
Корректирующими матрицами $F \in \mathbb{R}^{m \times m}$ и $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ будем называть такие матрицы, которые удовлетворяют равенствам $U = \hat{U}(E + F)$ и $V = \hat{V}(E + G)$.
Пусть ϵ определяется как

$$\epsilon := \max(\epsilon_F, \epsilon_G), \quad \epsilon_F := \|F\|, \quad \epsilon_G := \|G\|.$$

Полагаем, что ϵ мало и $\epsilon < 1$, тогда обе матрицы $(E + F)$ и $(E + G)$ невырожденные и можно разложить в ряд Тейлора обратные матрицы

$$(E + F)^{-1} = E - F + \Delta_F, \quad \Delta_F := \sum_{k=2}^{\infty} (-F)^k, \quad \|\Delta_F\| \leq \frac{\epsilon_F}{1 - \epsilon_F},$$

$$(E + G)^{-1} = E - G + \Delta_G, \quad \Delta_G := \sum_{k=2}^{\infty} (-G)^k, \quad \|\Delta_G\| \leq \frac{\epsilon_G}{1 - \epsilon_G}.$$

Подставив $U = \hat{U}(E + F)$ в (1), получим

$$(E + F^T) \hat{U}^T \hat{U} (E + F) = E \Rightarrow \hat{U}^T \hat{U} = (E + F^T)^{-1} (E + F)^{-1}$$

$$\hat{U}^T \hat{U} = (E - F^T + \Delta_F^T) (E - F + \Delta_F),$$

из последнего следует

$$F + F^T = E - \hat{U}^T \hat{U} + \Delta_1, \quad \Delta_1 = \Delta_F + \Delta_F^T + (F - \Delta_F)^T (F - \Delta_F). \quad (4)$$

Аналогичное выражение можно получить, подставив $V = \hat{V}(E + G)$ в (2)

$$G + G^T = E - \hat{V}^T \hat{V} + \Delta_2, \quad \Delta_2 = \Delta_G + \Delta_G^T + (G - \Delta_G)^T (G - \Delta_G). \quad (5)$$

Прделаем те же операции и подставим $U = \hat{U}(E + F)$ и $V = \hat{V}(E + G)$ в уравнение (3)

$$\Sigma - F^T \Sigma - \Sigma G = \hat{U}^T A \hat{V} + \Delta_3, \quad \Delta_3 = -\Sigma \Delta_3 - \Delta_F^T \Sigma - (F - \Delta_F)^T \Sigma (G - \Delta_G). \quad (6)$$

Проведем оценку остаточных членов:

$$\|\Delta_1\| \leq \frac{(3 - 2\epsilon_F)\epsilon_F^2}{(1 - \epsilon_F)^2} \leq \chi(\epsilon)\epsilon^2,$$

$$\|\Delta_2\| \leq \frac{(3 - 2\epsilon_G)\epsilon_G^2}{(1 - \epsilon_G)^2} \leq \chi(\epsilon)\epsilon^2,$$

$$\|\Delta_3\| \leq \frac{\epsilon_F^2 + \epsilon_G^2 + (1 - \epsilon_F - \epsilon_G)\epsilon_F\epsilon_G}{(1 - \epsilon_F)(1 - \epsilon_G)} \|\Sigma\| \leq \chi(\epsilon)\epsilon^2 \|A\|, \text{ где}$$

$$\chi(\epsilon) = \frac{3 - 2\epsilon}{(1 - \epsilon)^2}.$$

Опустим слагаемые второго порядка у $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$ в (4), (5), (6) и получим систему матричных уравнений для $\tilde{F} = (\tilde{f}_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\tilde{G} = (\tilde{g}_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ и $\tilde{\Sigma} = \text{diag}(\tilde{\sigma}_i) \in \mathbb{R}^{m \times n}$

$$\begin{cases} \tilde{F} + \tilde{F}^T = R, & R = E - \hat{U}^T \hat{U} \\ \tilde{G} + \tilde{G}^T = S, & S = E - V^T \hat{V} \\ \tilde{\Sigma} - \tilde{F}^T \tilde{\Sigma} - \tilde{\Sigma} \tilde{G} = T, & T = \hat{U}^T A \hat{V} \end{cases}. \quad (7)$$

Таким образом, остается решить систему уравнений и найти $\tilde{F}, \tilde{G}, \tilde{\Sigma}$. Эффективнее всего это сделать, представив матрицы $\tilde{F}, \tilde{\Sigma}, R, T$ как блочные:

$$\tilde{F} = \begin{bmatrix} \tilde{F}_{11} & \tilde{F}_{12} \\ \underbrace{\tilde{F}_{21}}_n & \underbrace{\tilde{F}_{22}}_{m-n} \end{bmatrix} \begin{matrix} \}n \\ \}m-n \end{matrix}, \quad \tilde{\Sigma} = \begin{bmatrix} \tilde{\Sigma}_n \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \}n \\ \}m-n \end{matrix}$$

$$R = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ \underbrace{R_{21}}_n & \underbrace{R_{22}}_{m-n} \end{bmatrix} \begin{matrix} \}n \\ \}m-n \end{matrix}, \quad T = \begin{bmatrix} \tilde{T}_1 \\ T_2 \end{bmatrix} \begin{matrix} \}n \\ \}m-n \end{matrix}$$

Тогда первое уравнение системы можно переписать:

$$\tilde{F}_{11} + \tilde{F}_{11}^T = R_{11}, \quad (7a)$$

$$\tilde{F}_{21} + \tilde{F}_{12}^T = R_{21}, \quad (7b)$$

$$\tilde{F}_{22} + \tilde{F}_{22}^T = R_{22}, \quad (7c)$$

третье уравнение системы переписывается так

$$\tilde{\Sigma}_n - \tilde{F}_{11}^T \tilde{\Sigma}_n - \tilde{\Sigma}_n \tilde{G} = T_1, \quad (7d)$$

$$\tilde{F}_{12}^T \tilde{\Sigma}_n = -T_2 \Leftrightarrow \tilde{\Sigma}_n \tilde{F}_{12} = -T_2^T. \quad (7e)$$

Очевидно, что диагональные элементы матриц \tilde{F} и \tilde{G} достаточно просто выражаются

$$\tilde{f}_{ii} = \frac{r_{ii}}{2}, \quad \tilde{g}_{ii} = \frac{s_{ii}}{2}, \quad 1 \leq i \leq n.$$

Третье уравнение системы для диагональных элементов выглядит так

$$(1 - \tilde{f}_{ii} - \tilde{g}_{ii})\tilde{\sigma}_i = \left(1 - \frac{r_{ii} + s_{ii}}{2}\right)\tilde{\sigma}_i = t_{ii}, \quad 1 \leq i \leq n.$$

$$\tilde{\sigma}_i = \frac{t_{ii}}{1 - (r_{ii} + s_{ii})/2}, \text{ если } r_{ii} + s_{ii} \neq 2. \quad (8)$$

Замечание. В общем случае возможно равенство $r_{ii} + s_{ii} = 2$, однако на самом деле R и S это невязки с точки зрения ортогональности U и V , поэтому зачастую на практике $|r_{ii}| \ll 1$, $|s_{ii}| \ll 1$ и $|r_{ii} + s_{ii}| \ll 1$.

Остается найти недиагональные значения матриц \tilde{F}_{11} и \tilde{G} . Рассмотрим систему уравнений (7) и (8):

$$\begin{cases} \tilde{f}_{ij} + \tilde{f}_{ji} = r_{ij} \\ \tilde{g}_{ij} + \tilde{g}_{ji} = s_{ij} \\ \tilde{\sigma}_i \tilde{f}_{ij} + \tilde{\sigma}_j \tilde{g}_{ji} = -t_{ji} \\ \tilde{\sigma}_j \tilde{f}_{ji} + \tilde{\sigma}_i \tilde{g}_{ij} = -t_{ij} \end{cases}, \quad 1 \leq i, j \leq n, i \neq j.$$

Умножим третье и четвертое уравнения системы на $\tilde{\sigma}_i$ и $\tilde{\sigma}_j$ соответственно,

$$\tilde{\sigma}_i^2 \tilde{f}_{ij} + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j \tilde{g}_{ji} = -\tilde{\sigma}_i t_{ji},$$

$$\tilde{\sigma}_j^2 \tilde{f}_{ji} + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j \tilde{g}_{ij} = -\tilde{\sigma}_j t_{ij}.$$

Сложив полученные уравнения и подставив второе уравнение, получим

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_i^2 \tilde{f}_{ij} + \tilde{\sigma}_j^2 \tilde{f}_{ji} + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j (\tilde{g}_{ji} + \tilde{g}_{ij}) &= -\tilde{\sigma}_i t_{ji} - \tilde{\sigma}_j t_{ij} \Rightarrow \\ \Rightarrow \tilde{\sigma}_i^2 \tilde{f}_{ij} + \tilde{\sigma}_j^2 \tilde{f}_{ji} &= -\tilde{\sigma}_i t_{ji} - \tilde{\sigma}_j t_{ij} - \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j s_{ij}. \end{aligned}$$

В найденное выражение подставим первое уравнение системы

$$(\tilde{\sigma}_j^2 - \tilde{\sigma}_i^2) \tilde{f}_{ij} = \tilde{\sigma}_j^2 r_{ij} + \tilde{\sigma}_i t_{ji} + \tilde{\sigma}_j t_{ij} + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j s_{ij} = \tilde{\sigma}_j (t_{ij} + \tilde{\sigma}_j r_{ij}) + \tilde{\sigma}_i (t_{ji} + \tilde{\sigma}_j s_{ij}).$$

Аналогичное выражение можно получить и для \tilde{G}

$$(\tilde{\sigma}_j^2 - \tilde{\sigma}_i^2) \tilde{g}_{ij} = \tilde{\sigma}_i (t_{ij} + \tilde{\sigma}_j r_{ij}) + \tilde{\sigma}_j (t_{ji} + \tilde{\sigma}_j s_{ij}).$$

Таким образом, получаем выражения для недиагональных элементов

$$\tilde{f}_{ij} = \frac{\alpha_{ij} \tilde{\sigma}_j + \beta_{ij} \tilde{\sigma}_i}{\tilde{\sigma}_j^2 - \tilde{\sigma}_i^2}, \quad \tilde{g}_{ij} = \frac{\alpha_{ij} \tilde{\sigma}_i + \beta_{ij} \tilde{\sigma}_j}{\tilde{\sigma}_j^2 - \tilde{\sigma}_i^2}, \quad \tilde{\sigma}_i \neq \tilde{\sigma}_j \text{ для } 1 \leq i, j \leq n, i \neq j, \quad (9)$$

$$\text{где } \alpha_{ij} = t_{ij} + \tilde{\sigma}_j r_{ij} \text{ и } \beta_{ij} = t_{ji} + \tilde{\sigma}_j s_{ij}.$$

Все эти рассуждения применимы для нахождения элементов остальных матриц $\tilde{F}_{12}, \tilde{F}_{21}, \tilde{F}_{22}$. Например, совместив уравнения (7e) и (8), значения матрицы \tilde{F}_{12} получаются

$$\tilde{f}_{ij} = -\frac{t_{ji}}{\tilde{\sigma}_i}, \quad \tilde{\sigma}_i \neq 0, \quad 1 \leq i \leq n, n+1 \leq j \leq m.$$

Из (7b) уравнения выражается \tilde{F}_{21} : $\tilde{F}_{21} = R_{21} - \tilde{F}_{12}^T$.

И значения элементов соответственно

$$\tilde{f}_{ij} = r_{ij} - \tilde{f}_{ji} = r_{ij} + \frac{t_{ij}}{\tilde{\sigma}_j}, \tilde{\sigma}_j \neq 0, n+1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n.$$

Благодаря условию (7с) определяется \tilde{F}_{22} .

$$\tilde{f}_{ij} = \frac{r_{ij}}{2}, \quad n+1 \leq i, j \leq m, i \neq j.$$

Замечание. В этом алгоритме мы полагаем, что $\tilde{\sigma}_i \neq \tilde{\sigma}_j$ для всех пар (i, j) .

Если же это условие не выполняется, то существует подход для решения этой проблемы, описанный в [6].

В имплементируемом алгоритме наиболее значащую роль играют быстрые и точные матричные умножения, поэтому часть вычислений переведена в матричный вариант. Заменяем вычисление коэффициентов α_{ij} и β_{ij} в формуле (9) на аналогичное вычисление коэффициентов в матричном виде. Тогда получится

$$C\alpha = T_1 + R_{11} * \tilde{\Sigma}_n \text{ и } C\beta = T_1^T + S * \tilde{\Sigma}_n.$$

Введем матрицы D и E

$$D = \tilde{\Sigma}_n * C\alpha + C\beta * \tilde{\Sigma}_n,$$

$$E = C\alpha * \tilde{\Sigma}_n + \tilde{\Sigma}_n * C\beta.$$

Тогда значение недиагональных элементов матриц \tilde{F}_{11} и \tilde{G} примет вид

$$\tilde{f}_{ij} = \frac{e_{ij}}{\tilde{\sigma}_j^2 - \tilde{\sigma}_i^2} \text{ и } \tilde{g}_{ij} = \frac{d_{ij}}{\tilde{\sigma}_j^2 - \tilde{\sigma}_i^2}.$$

Вход: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, $\hat{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\hat{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Выход: $\hat{U}' \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\hat{V}' \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\tilde{\Sigma}' = \text{diag}(\tilde{\sigma}_i) \in \mathbb{R}^{m \times n}$

$R \leftarrow E - \hat{U}^T \hat{U}$; $S \leftarrow E - \hat{V}^T \hat{V}$; $T \leftarrow \hat{U}^T A \hat{V}$

счет приближительных сингулярных значений

for $i \leftarrow 1$ to n do
 $\text{sigma}[i] \leftarrow t[i][i]/(1 - (r[i][i] + s[i][i])/2)$

$\text{sigma_arr} \leftarrow \text{diag}(\text{sigma})$

счет диагональных элементов матриц \tilde{F}_{11} и \tilde{G}

for $i \leftarrow 1$ to n do
 $f[i][i] \leftarrow r[i][i]/2$
 $g[i][i] \leftarrow s[i][i]/2$

Выделение квадратных матриц $n \times n$ из T и R

$T1 = T.\text{topRows}(n)$
 $R11 = R.\text{topLeftCorner}(n, n)$

Вычисление матриц коэффициентов

$Ca \leftarrow (T1 + R11 * \text{sigma_arr})$
 $Cb \leftarrow (T1.\text{transpose}() + S * \text{sigma_arr})$

$D \leftarrow (\text{sigma_arr} * Ca + Cb * \text{sigma_arr})$
 $E \leftarrow (Ca * \text{sigma_arr} + \text{sigma_arr} * Cb)$

for $i \leftarrow 1$ to n do
 # Вычисление недиагональных элементов \tilde{F}_{11} и \tilde{G}
 for $j \leftarrow 1$ to n do
 if $i \neq j$ then
 $f[i][j] \leftarrow (E[i][j]) / (\text{sigma}[j] - \text{sigma}[i])$
 $g[i][j] \leftarrow (D[i][j]) / (\text{sigma}[j] - \text{sigma}[i])$
 endif
 # Вычисление \tilde{F}_{12}
 for $j \leftarrow n + 1$ to m do
 $f[i][j] \leftarrow -t[j][i] / \text{sigma}[i]$

for $i \leftarrow n + 1$ to m do
 # Вычисление \tilde{F}_{21}
 for $j \leftarrow 1$ to n do
 $f[i][j] \leftarrow r[i][j] - f[j][i]$
 # Вычисление \tilde{F}_{22}
 for $j \leftarrow n + 1$ to m do
 $f[i][j] \leftarrow r[i][j]/2$

Обновление значений \hat{U}' , \hat{V}'

$U_new \leftarrow U + U * F$
 $V_new \leftarrow V + V * G$

Листинг 1. Полный алгоритм итеративного уточнения сингулярных значений.

В представленном алгоритме есть функции, которые ранее не упоминались: $\text{diag}(\text{sigma})$ создает диагональную матрицу с переданными

значениями σ , $\text{topRows}(n)$ возвращает первые n строк в матрице, $\text{topLeftCorner}(n)$ возвращает верхнюю левую квадратную матрицу размера $n \times n$ из исходной, $\text{transpose}()$ транспонирует матрицу.

Данный алгоритм обладает квадратичной сходимостью, это следует из следующей теоремы.

Теорема. Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\hat{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\hat{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ при $m \geq n$. $\sigma_{n+1} := 0$, $U = \hat{U}(E + F)$ и $V = \hat{V}(E + G)$, ϵ определяется как $\epsilon := \max(\|F\|, \|G\|)$. Аналогично определим $U' = \hat{U}'(E + F')$ и $V' = \hat{V}'(E + G')$, $\epsilon' := \max(\|F'\|, \|G'\|)$, где U' и V' это результат работы описанного алгоритма уточнения сингулярных значений. Если выполняется условие

$$\epsilon < \frac{\min_{1 \leq i \leq n} (\sigma_i - \sigma_{i+1})}{30m\|A\|},$$

тогда

$$\epsilon' < \frac{7}{10}\epsilon, \quad \limsup_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon'}{\epsilon^2} \leq \frac{18m\|A\|}{\min_{1 \leq i \leq n} (\sigma_i - \sigma_{i+1})}.$$

Доказательство: [2].

Воспользуемся этой теоремой. Пусть $d := \lceil -\log_{10} \tilde{\epsilon} \rceil$, где $\tilde{\epsilon} := \max(\|\tilde{F}\|, \|\tilde{G}\|)$. Тогда учитывая, что $F \approx \tilde{F}$ и $G \approx \tilde{G}$, получаем

$$\max\left(\frac{\|U - \hat{U}\|}{\|\hat{U}\|}, \frac{\|V - \hat{V}\|}{\|\hat{V}\|}\right) \leq \epsilon \approx \tilde{\epsilon} \approx O(10^{-d}).$$

Применяя теорему, найдем, что

$$\begin{aligned} \max\left(\frac{\|U - \hat{U}\|}{\|\hat{U}\|}, \frac{\|V - \hat{V}\|}{\|\hat{V}\|}\right) &\leq \tilde{\epsilon} \leq \frac{18m\|A\|}{\min_{1 \leq i \leq n} (\sigma_i - \sigma_{i+1})} \epsilon^2 \approx \frac{18m\|A\|}{\min_{1 \leq i \leq n} (\sigma_i - \sigma_{i+1})} \tilde{\epsilon}^2 \approx \\ &\approx O(10^{-2d}), \text{ при } \epsilon \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Таким, образом требуемая арифметическая точность алгоритма составляет около $2d$ десятичных цифр. Хотя арифметическая точность в двух последних строках алгоритма составляет d десятичных цифр. Это происходит ввиду того, что только первые d десятичных цифр \hat{U} и \hat{V} точны, и только первые d десятичных цифр $\hat{U}\tilde{F}$ и $\hat{V}\tilde{G}$ могут повлиять на результат [1]. В итоге, вычислительная сложность алгоритма (количество требуемых операций) с точностью $2d$ и d десятичных цифр соответственно $m^3 + 2m^2n + 2mn^2 + n^3$ до $2m^3 + 2m^2n + 2mn^2 + 2n^3$ и $2m^3 + 2n^3$ [1].

Тестирование алгоритма

Тестирование алгоритма проводилось на прямоугольных и квадратных матрицах разного размера. Сначала генерировались сингулярные значения в некотором интервале, по которым восстанавливались матрицы A, U, V . После в матрицы U, V добавлялся псевдослучайный шум, применялся алгоритм Огиты – Аишимы и оценивалась точность полученных ошибок для матриц U, Σ, V . Полученные результаты представлены в файле *results.csv*.

Также было проведено следующее тестирование. Аналогично прошлому варианту генерировались сингулярные значения в некотором интервале, по которым восстанавливались матрицы A, U, V . Далее применялся алгоритм сингулярного разложения *Jacobi* [8] с последующим уточнением результатов алгоритмом Огиты-Аишимы. Полученные результаты представлены в файле *results2.csv*.

При проведении тестов, представленных ниже, помимо уточнения сингулярных чисел, оценивалась невязка по фробениусовой норме исходной матрицы и восстановленной матрицы после 1-й итерации алгоритма.

Случай действительной матрицы

Приведем примеры работы алгоритма для 5 итераций на действительной матрице со следующим тестированием: сгенерируем сингулярные значения на интервале $[0, 10]$ и восстановим матрицы A, U, V . В матрицы U, V добавим псевдослучайный шум с уровнем 10^{-15} .

Исходные матрицы.

A :

$$\begin{pmatrix} 4.10336775836158208428 & 3.29563031926548808499 & 2.98311937547734791184 \\ -1.83714064901915822723 & 4.81146718285331530772 & -0.87937211634792041172 \\ -0.413078857471356775686 & -1.60458059115785352266 & -6.20393499587064470259 \\ -3.69810676996781650429 & -3.80611558124069507682 & 0.0584196681479766436699 \end{pmatrix},$$

U :

$$\begin{pmatrix} -0.661193247515689906798 & -0.00581964040032574632407 & -0.315945468585783538571 & 0.680417579215422818541 \\ -0.19512644118361285494 & -0.625048023017053313904 & 0.740952971895699201443 & 0.149095051267379271345 \\ 0.543644913118715171127 & -0.633279208211400235239 & -0.453856886273380980999 & 0.31212430163240725237 \\ 0.478747710000599719911 & 0.456331617527457849545 & 0.381026352239936521508 & 0.646050310666811316478 \end{pmatrix},$$

S :

$$\begin{pmatrix} 8.89835108803662434059 & 0 & 0 \\ 0 & 5.85432592672243339417 & 0 \\ 0 & 0 & 4.45451069918437993515 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

V :

$$\begin{pmatrix} -0.488817833901195703764 & -0.0515085409020628741562 & -0.870863936257716188174 \\ -0.653197892368087485956 & -0.640087489851553540019 & 0.404500332189512224964 \\ -0.578264332866926389874 & 0.766573463896108172396 & 0.279240909940307091889 \end{pmatrix}.$$

Матрицы после применения алгоритма.

\hat{A} :

$$\begin{pmatrix} 4.10336775836158208384 & 3.29563031926548808499 & 2.98311937547734791184 \\ -1.83714064901915822702 & 4.81146718285331530772 & -0.879372116347920411775 \\ -0.413078857471356775143 & -1.60458059115785352266 & -6.20393499587064470259 \\ -3.69810676996781650429 & -1.60458059115785352266 & 0.0584196681479766437512 \end{pmatrix},$$

\hat{U} :

$$\begin{pmatrix} -0.661193247515689906852 & -0.00581964040032574642868 & -0.315945468585783538517 & 0.680417579215422818595 \\ -0.19512644118361285494 & -0.625048023017053313688 & 0.740952971895699201606 & 0.149095051267379271332 \\ 0.543644913118715171181 & -0.633279208211400235348 & -0.453856886273380980782 & 0.312124301632407252343 \\ 0.478747710000599719965 & 0.456331617527457849653 & 0.3810263522399365214 & 0.646050310666811316424 \end{pmatrix},$$

\hat{S} :

$$\begin{pmatrix} 8.89835108803662433972 & 0 & 0 \\ 0 & 5.85432592672243339374 & 0 \\ 0 & 0 & 4.45451069918437993515 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

\hat{V} :

$$\begin{pmatrix} -0.48881783390119570371 & -0.0515085409020628744036 & -0.870863936257716188174 \\ -0.653197892368087485956 & -0.640087489851553539965 & 0.404500332189512225181 \\ -0.578264332866926389874 & 0.766573463896108172504 & 0.279240909940307091645 \end{pmatrix}.$$

Посчитаем невязки матриц.

$$\|A - \hat{A}\|_1 = 1.54499 * 10^{-18}; \quad \|A - \hat{A}\|_2 = 7.65208 * 10^{-19}.$$

$$\|U - \hat{U}\|_2 = 4.30403 * 10^{-19}; \quad \|S - \hat{S}\|_2 = 9.6974 * 10^{-19};$$

$$\|V - \hat{V}\|_2 = 4.30506 * 10^{-19}.$$

Случай комплексной матрицы.

Для вычисления сингулярного разложения комплексной матрицы 6×5 используется *Jacobi* [8] с последующим уточнением алгоритмом Огиты - Аишимы.

Оригинальная матрица:

$$\begin{pmatrix} 0.127171 - 0.997497i & 0.617481 - 0.613392i & -0.0402539 + 0.170019i & 0.791925 - 0.299417i & 0.49321 + 0.64568i \\ 0.717887 - 0.651784i & 0.0270699 + 0.421003i & -0.970031 - 0.39201i & -0.271096 - 0.817194i & -0.668203 - 0.705374i \\ -0.108615 + 0.97705i & -0.990661 - 0.761834i & -0.24424 - 0.982177i & 0.142369 + 0.0633259i & 0.214331 + 0.203528i \\ 0.32609 - 0.667531i & -0.295755 - 0.0984222i & 0.215369 - 0.885922i & 0.605213 + 0.566637i & -0.3961 + 0.0397656i \\ 0.453352 + 0.751946i & 0.851436 + 0.911802i & -0.715323 + 0.0787072i & -0.529344 - 0.0758385i & -0.580798 + 0.724479i \\ 0.687307 + 0.559313i & 0.99939 + 0.993591i & -0.215125 + 0.222999i & -0.405438 - 0.467574i & -0.952513 + 0.680288i \end{pmatrix}$$

Восстановленная матрица после *Jacobi*:

$$\begin{pmatrix} 0.127171 - 0.997498i & 0.617482 - 0.613392i & -0.0402537 + 0.170019i & 0.791925 - 0.299417i & 0.49321 + 0.64568i \\ 0.717888 - 0.651784i & 0.02707 + 0.421004i & -0.970032 - 0.39201i & -0.271096 - 0.817195i & -0.668203 - 0.705374i \\ -0.108615 + 0.97705i & -0.990662 - 0.761834i & -0.244239 - 0.982177i & 0.142369 + 0.0633259i & 0.214332 + 0.203528i \\ 0.326091 - 0.667532i & -0.295755 - 0.0984224i & 0.215369 - 0.885922i & 0.605213 + 0.566638i & -0.396099 + 0.0397656i \\ 0.453353 + 0.751946i & 0.851436 + 0.911802i & -0.715324 + 0.0787074i & -0.529344 - 0.0758386i & -0.580798 + 0.724479i \\ 0.687308 + 0.559313i & 0.99939 + 0.993592i & -0.215125 + 0.222999i & -0.405439 - 0.467574i & -0.952514 + 0.680289i \end{pmatrix}$$

Восстановленная матрица после алгоритма Ogita-Aishima:

$$\begin{pmatrix} 0.127171 - 0.997497i & 0.617481 - 0.613391i & -0.040254 + 0.170019i & 0.791925 - 0.299417i & 0.49321 + 0.64568i \\ 0.717887 - 0.651784i & 0.0270699 + 0.421003i & -0.970031 - 0.39201i & -0.271096 - 0.817194i & -0.668203 - 0.705374i \\ -0.108615 + 0.97705i & -0.990661 - 0.761834i & -0.24424 - 0.982177i & 0.142369 + 0.0633259i & 0.214332 + 0.203528i \\ 0.32609 - 0.667531i & -0.295755 - 0.0984222i & 0.215369 - 0.885922i & 0.605213 + 0.566637i & -0.3961 + 0.0397657i \\ 0.453353 + 0.751946i & 0.851436 + 0.911802i & -0.715323 + 0.0787073i & -0.529344 - 0.0758386i & -0.580798 + 0.724479i \\ 0.687307 + 0.559313i & 0.99939 + 0.993591i & -0.215125 + 0.222999i & -0.405438 - 0.467574i & -0.952513 + 0.680288i \end{pmatrix}$$

Таким образом, тест на комплексных матрицах показал, что имплементированный алгоритм работает не только на действительных матрицах, но и на комплексных матрицах. Однако это подлежит дальнейшему изучению.

Дополнительные тесты

Таблица 1. Значение характеристик для псевдослучайных действительных матриц.

Matrix Size	Relative Error ($\ A - U*S*V^T\ / \ A\ $)	$\max(\ F\ , \ G\)$	$\max(\ R\ , \ S\)$	Elapsed Time (s)
10×10	7.12345e-08	8.74816e-08	1.74963e-07	0.0032547
30×30	1.14187e-07	2.67087e-07	5.34173e-07	0.0243358
50×50	1.33093e-07	3.75116e-07	7.50232e-07	0.110236
60×45	6.47478e-07	3.02241e-06	6.04481e-06	0.182544

Применение безошибочного преобразования матричного умножения в алгоритме Огиты – Аишимы

Одним из существенных недостатков алгоритма (рисунок 1) является частое применение матричного умножения, что влияет на сложность алгоритма и его точность. Попробуем применить один из методов безошибочного матричного умножения [5], чтобы повысить точность алгоритма. В статье [5] применяются быстрые рутины в *BLAS*, в настоящей имплементации мы воспользуемся инструментами *eigen* [8].

При тестировании алгоритма для уточнения сингулярных значений с применением точного матричного умножения были получены те же результаты, что и при использовании встроенной функции *eigen* для умножения. Это может говорить о том, что *eigen* уже использует точный и быстрый алгоритм умножения матриц, и применение алгоритма [5] излишне.

Таблица 2. Сравнение результатов работы алгоритма Огиты-Аишимы с применением встроенного матричного умножения и безошибочного матричного умножения [5] для действительных матриц.

Размер матрицы	$\ A - A_{\text{вост}}\ $	Время выполнения <i>eigen</i> (с)	Время выполнения алгоритм [5] (с)
60×60	$4,96859 * 10^{-6}$	0,1763215	0,56799
300×300	$1,04665 * 10^{-12}$	1,37428	5,29042
1000×1000	$8,04908 * 10^{-12}$	47,7727	204,059

Список литературы

- [1] Uchino Y., Terao T., Ozaki K.: Acceleration of iterative refinement for singular value decomposition / Numerical Algorithms. — 2024. — № 95. — С. 979–1009.
- [2] Ogita, T., Aishima, K.: Iterative refinement for singular value decomposition based on matrix multiplication / J. Comput. Appl. — 2020. — №369. — 112512.
- [3] Li X. S., Demmel J. W., Bailey D. H., Henry G., Hida Y., Iskandar J., Kahan W., Kang S. Y., Kapur A., Martin M. C., Thompson B. J., Tung T., Yoo D.: Design, implementation and testing of extended and mixed precision BLAS, ACM Trans. / Math. Software. —2002. — № 28. — С. 152–205.
- [4] Ogita T., Rump S. M., Oishi S.: Accurate sum and dot product / SIAM J. Sci. Comput. —2005. — № 26:6. — С. 1955–1988.
- [5] Ozaki K., Ogita T., Oishi S., Rump S. M.: Error-free transformations of matrix multiplication by using fast routines of matrix multiplication and its applications / Numerical Algorithms. — 2012. — 59:1. — С. 95-118.
- [6] Ogita T., Aishima K.: Iterative refinement for symmetric eigenvalue decomposition / Japan J. Indust. Appl. Math. — 2018, № 35:3. — С. 1007–1035.
- [7] Golub G. Matrix Computations / Gene H. Golub, Charles F. Van Loan. — 4th ed. — Baltimore : Johns Hopkins University Press, 2013. — С. 756.
- [8] Eigen [Электронный ресурс] : библиотека для линейной алгебры на C++ / разработчики G. Guennebaud, B. Jacob и др. — URL: <https://eigen.tuxfamily.org>.