Алгоритм итеративного уточнения для SVD, основанный на матричном умножении

Описание алгоритма

Данный алгоритм выполняет SVD разложение для матрицы $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, где $m \geq n$. В случае $m < n$ рассматривается A^T. Разложение имеет вид: $A = U\Sigma V^T$, где $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ и $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ – ортогональные матрицы, а $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ – диагональная матрица с элементами на диагонали λ_i, $0 < i \leq n$, такими что $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_n > 0$, λ_i – сингулярные числа матрицы, а столбцы матриц U и V – левые и правые сингулярные векторы соответственно.

Идея алгоритма строится на использовании известных равенств и свойств матриц (ортогональность U и V и диагональность Σ):

$$U^T U = I_m, \tag{1}$$

$$V^T V = I_n, \tag{2}$$

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

где I_m и I_n – единичные матрицы размеров m и n соответственно.

Пусть матрица $\widehat{U} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ и $\widehat{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ – приближение матриц U и V, такое, что $U = \widehat{U}(I_m + F)$ и $V = \widehat{V}(I_n + G)$, а $F \in \mathbb{R}^{m\times m}$ и $G \in \mathbb{R}^{n\times n}$ – корректирующие матрицы. Тогда свойство ортогональности (1) и (2) можно записать как:

$$(I_m + F^T)\widehat{U}^T\widehat{U}(I_m + F) = I_m,$$

$$(I_n + G^T)\widehat{V}^T\widehat{V}(I_n + G) = I_n,$$

откуда следует, что

$$\widehat{U}^T\widehat{U} = (I_m + F^T)^{-1}\,(I_m + F)^{-1}, \tag{4}$$

$$\widehat{V}^T\widehat{V} = (I_n + G^T)^{-1}(I_n + G)^{-1}. \tag{5}$$

Определим ε как $\varepsilon \coloneqq \max(\varepsilon_F, \varepsilon_G)$, где $\varepsilon_F = ||F||$, $\varepsilon_G = ||G||$. Под нормой матрицы в данном случае подразумевается спектральная норма матрицы, т.е. норма, которая соответствует наибольшему сингулярному значению матрицы.

Предположим, что $\varepsilon < 1$. Тогда для $I_m + F$ и для $I_n + G$ справедливо:

$$(I_m + F)^{-1} = I_m - F + \Delta_F, \Delta_F \coloneqq \sum_{k=2}^{\infty}(-F)^k, \left||\Delta_F|\right| \leq \frac{\varepsilon_F}{1-\varepsilon_F},$$

$$(I_n + G)^{-1} = I_n - G + \Delta_G, \Delta_G \coloneqq \sum_{k=2}^{\infty}(-G)^k, \left||\Delta_G|\right| \leq \frac{\varepsilon_G}{1-\varepsilon_G}.$$

Подставляя данные уравнения в формулы (4) и (5), получим:

$$F + F^T = I_m - \widehat{U}^T\widehat{U} + \Delta_1, \qquad \Delta_1 \coloneqq \Delta_F + \Delta_F^T + (F - \Delta_F)^T(F - \Delta_F), \tag{6}$$

$$G + G^T = I_n - \widehat{V}^T\widehat{V} + \Delta_2, \qquad \Delta_2 \coloneqq \Delta_G + \Delta_G^T + (G - \Delta_G)^T(G - \Delta_G), \tag{7}$$

Также, подставляя $U = \widehat{U}(I_m + F)$ и $V = \widehat{V}(I_n + G)$ в (3), получим:

$$\Sigma - F^T\Sigma - \Sigma G = \widehat{U}^T A \widehat{V} + \Delta_3, \Delta_3 := -\Sigma\Delta_G - \Delta_F^T\Sigma - (\mathrm{A} - \Delta_F)^T\Sigma(G - \Delta_G). \quad (8)$$

Здесь

$$||\Delta_1|| \le \frac{(3 - 2\varepsilon_F)\varepsilon_F^2}{(1-\varepsilon_F)^2} \le \chi(\varepsilon)\varepsilon^2,$$

$$||\Delta_2|| \le \frac{(3 - 2\varepsilon_G)\varepsilon_G^2}{(1-\varepsilon_G)^2} \le \chi(\varepsilon)\varepsilon^2,$$

$$||\Delta_3|| \le \frac{\varepsilon_F^2 + \varepsilon_G^2 + (1 - \varepsilon_F - \varepsilon_G)\varepsilon_F\varepsilon_G}{(1-\varepsilon_F)(1-\varepsilon_G)} ||\Sigma|| \le \chi(\varepsilon)\varepsilon^2 ||A||,$$

где

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

Пренебрегая членами второго порядка Δ_1, Δ_2 и Δ_3, можно составить систему матричных уравнений из (6), (7) и (8), где $\tilde{F} = (\tilde{f}_{ij}) \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $\tilde{G} = (\tilde{g}_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\tilde{\Sigma} = \mathrm{diag}(\tilde{\lambda}_i) \in \mathbb{R}^{n\times m}$:

$$\begin{cases} \tilde{F} + \tilde{F}^T = R, R := I_m - \widehat{U}^T\widehat{U} \\ \tilde{G} + \tilde{G}^T = S, S := I_n - \widehat{V}^T\widehat{V} \\ \tilde{\Sigma} - \tilde{F}^T\tilde{\Sigma} - \tilde{\Sigma}\tilde{G} = T, T := \widehat{U}^T A \widehat{V} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \tilde{f}_{ij} + \tilde{f}_{ji} = r_{ij}, & 1 \le i,j \le m \\ \tilde{g}_{ij} + \tilde{g}_{ji} = s_{ij}, & 1 \le i,j \le n \\ \tilde{\Sigma}_{ij} - \tilde{\lambda}_j\tilde{f}_{ji} - \tilde{\lambda}_i\tilde{g}_{ij} = t_{ij}, & 1 \le i \le m, 1 \le j \le n \end{cases}. \quad (9)$$

Для нахождения искомого разложения осталось лишь решить систему (9) для $\tilde{F}$, $\tilde{G}$ и $\tilde{\Sigma}$. Для более оптимального счета, разобьем матрицы $\tilde{F}$, R, $\tilde{\Sigma}$ и T следующим образом:

$$\tilde{F} = \begin{bmatrix} \tilde{F}_{11} & \tilde{F}_{12} \\ \tilde{F}_{21} & \tilde{F}_{22} \end{bmatrix}, \text{где } \tilde{F}_{11} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \tilde{F}_{12} \in \mathbb{R}^{n\times(m-n)}, \tilde{F}_{21} \in \mathbb{R}^{(m-n)\times n}, \tilde{F}_{22} \in \mathbb{R}^{(m-n)\times(m-n)},$$

$$R = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{bmatrix}, \text{где } R_{11} \in \mathbb{R}^{n\times n}, R_{12} \in \mathbb{R}^{n\times(m-n)}, R_{21} \in \mathbb{R}^{(m-n)\times n}, R_{22} \in \mathbb{R}^{(m-n)\times(m-n)},$$

$$\tilde{\Sigma} = \begin{bmatrix} \tilde{\Sigma}_n \\ O \end{bmatrix}, \text{где } \tilde{\Sigma}_n \in \mathbb{R}^{n\times n}, \text{а } O \in \mathbb{R}^{(m-n)\times n} - \text{нулевая матрица},$$

$$T = \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \end{bmatrix}, \quad \text{где } T_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad T_2 \in \mathbb{R}^{(m-n)\times n}.$$

Тогда

$$R_{11} = \tilde{F}_{11} + \tilde{F}_{11}^T, R_{21} = \tilde{F}_{21} + \tilde{F}_{12}^T, R_{22} = \tilde{F}_{22} + \tilde{F}_{22}^T,$$

и

$$\tilde{\Sigma}_n - \tilde{F}_{11}^T\tilde{\Sigma}_n - \tilde{\Sigma}_n\tilde{G} = T_1, \tilde{F}_{12}^T\tilde{\Sigma}_n = -T_2 \Leftrightarrow \tilde{\Sigma}_n\tilde{F}_{12} = -T_2^T.$$

Рассмотрим сначала диагональные элементы $\tilde{F}_{11}$ и $\tilde{G}$. Их можно найти из первого и второго уравнений системы (9):

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

Далее, рассмотрим третье уравнение из системы (9). Из него следует, что:

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

Тогда, если $r_{ii} + s_{ii} \neq 2, 1 \le i < n$ (возможно, что $r_{ii} + s_{ii} = 2$, однако обычно на практике значения r_{ii} и s_{ii} сильно меньше 1 [1]) мы имеем:

$$\tilde{\lambda}_i = \frac{t_{ii}}{1 - \frac{r_{ii} + s_{ii}}{2}}, 1 \le i \le n. \tag{10}$$

Далее найдем недиагональные элементы $\tilde{F}_{11}$ и $\tilde{G}$. Из (9) и (10) можно получить линейную систему 4×4:

$$\tilde{f}_{ij} + \tilde{f}_{ji} = r_{ij}, \tag{11}$$

$$\tilde{g}_{ij} + \tilde{g}_{ji} = s_{ij}, \tag{12}$$

$$\tilde{\lambda}_i\tilde{f}_{ij} + \tilde{\lambda}_j\tilde{g}_{ji} = -t_{ji}, \tag{13}$$

$$\tilde{\lambda}_j\tilde{f}_{ji} + \tilde{\lambda}_i\tilde{g}_{ij} = -t_{ij}, \tag{14}$$

для $1 \le i, j \le n, i \neq j$. Умножение (13) и (14) на $\tilde{\lambda}_i$ и $\tilde{\lambda}_j$ соответственно нам даст следующий результат:

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

сложим эти два равенства

$$\tilde{\lambda}_i^2\tilde{f}_{ij} + \tilde{\lambda}_j^2\tilde{f}_{ji} + \tilde{\lambda}_i\tilde{\lambda}_j\left(\tilde{g}_{ji} + \tilde{g}_{ij}\right) = -\tilde{\lambda}_i t_{ji} - \tilde{\lambda}_j t_{ij}.$$

Подставим в полученное выражение (12):

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

Соединим полученное выражение с (11):

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

Аналогично, используя (11)-(14) мы получаем:

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

Отсюда выражаем $\tilde{f}_{ij}$ и $\tilde{g}_{ij}$:

$$\tilde{f}_{ij} = \frac{\alpha\tilde{\lambda}_j + \beta\tilde{\lambda}_i}{\tilde{\lambda}_j^{\ 2} - \tilde{\lambda}_i^2}, \tilde{g}_{ij} = \frac{\alpha\tilde{\lambda}_i + \beta\tilde{\lambda}_j}{\tilde{\lambda}_j^{\ 2} - \tilde{\lambda}_i^{\ 2}}, \text{при } \tilde{\lambda}_i \neq \ \tilde{\lambda}_j, 1 \le i \le n, n+1 \le j \le m,$$

при $\alpha \coloneqq \ t_{ij} + \tilde{\lambda}_j r_{ij}, \beta \coloneqq t_{ji} + \ \tilde{\lambda}_j s\_ij$. Используя (10), можно выразить $\tilde{F}_{12}$:

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

С помощью этого равенства можно получить значения $\tilde{F}_{21} = R_{21} - \tilde{F}_{12}^T$:

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

И наконец, можно выразить $\tilde{F}_{22}$:

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

Из полученных равенств можно составить алгоритм, представленный в листинге 1. Это и есть алгоритм итеративного уточнения для SVD, основанный на матричном умножении.

При реализации данного алгоритма нужно учитывать, что он рассчитан на поиск разложения только в том случае, если собственные значения матрицы не совпадают друг с другом, т.е. $\tilde{\lambda}_i \neq \tilde{\lambda}_j, i \neq j$. В случае, если это не так, нужно обработать исключение, например, как в [2]. Также необходимо отметить, что для работы данного алгоритма необходима высокая арифметическая точность вычислений.

Входные данные: $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$, где $m \geq n$, $\widehat{U} \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $\widehat{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$

Выходные данные: $\widehat{U}' \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $\widehat{V}' \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\widehat{\Sigma}' = diag(\tilde{\lambda}_i) \in \mathbb{R}^{n\times m}$

1) Поиск R, S, T: $R \leftarrow I_m - \widehat{U}^T\widehat{U}$; $S \leftarrow I_n - \widehat{V}^T\widehat{V}$; $T \leftarrow \widehat{U}^T A \widehat{V}$
2) Расчет приближенных собственных значений: $\tilde{\lambda}_i \leftarrow t_{ii}/(1 - \frac{r_{ii}+s_{ii}}{2}))$ для $i = 1, \dots, n$
3) Расчет диагональных элементов $\tilde{F}_{11}$ и $\tilde{G}$: $\tilde{f}_{ii} \leftarrow r_{ii}/2$; $\tilde{g}_{ii} \leftarrow s_{ii}/2$ для $i = 1, \dots, n$
4) Расчет недиагональных элементов $\tilde{F}_{11}$ и $\tilde{G}$: $\{\alpha \leftarrow t_{ij} + \tilde{\lambda}_j r_{ij}$; $\beta \leftarrow t_{ji} + \tilde{\lambda}_j s_{ij}$; $\tilde{f}_{ij} \leftarrow \frac{\alpha\tilde{\lambda}_j + \beta\tilde{\lambda}_i}{\tilde{\lambda}_j^{\,2} - \tilde{\lambda}_i^2}$; $\tilde{g}_{ij} \leftarrow \frac{\alpha\tilde{\lambda}_i + \beta\tilde{\lambda}_j}{\tilde{\lambda}_j^{\,2} - \tilde{\lambda}_i^{\,2}}\}$ для $1 \leq i, j \leq n, i \neq j$
5) Расчет $\tilde{F}_{12}$: $\tilde{f}_{ij} \leftarrow -t_{ji}/\tilde{\lambda}_i$для $1 \leq i \leq n, n+1 \leq j \leq m$
6) Расчет $\tilde{F}_{21}$: $\tilde{f}_{ij} \leftarrow r_{ij} - \tilde{f}_{ij}$ для $n+1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n$
7) Расчет $\tilde{F}_{22}$: $\tilde{f}_{ij} \leftarrow r_{ij}/2$ для $n+1 \leq i, j \leq m$
8) Нахождение новых значений для $\widehat{U}$ и $\widehat{V}$: $\widehat{U}' \leftarrow \widehat{U} + \widehat{U}\tilde{F}$; $\widehat{V}' \leftarrow \widehat{V} + \widehat{V}\tilde{G}$

Листинг 1. Алгоритм $RefSVD$ уточнения для SVD, основанный на матричном умножении.

Алгоритм имеет квадратичную сходимость. Доказательство данного факта представлено в [1].

Список литературы

1. Ogita T., Aishima K. Iterative refinement for singular value decomposition based on matrix multiplication // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2019. DOI: https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.112512.
2. Ogita T., Aishima K. Iterative refinement for symmetric eigenvalue decomposition // Japan J. Indust. Appl. Math. — 2018. — DOI: https://doi.org/10.1007/s13160-018-0310-3.