Алгоритм 8

В работе [1] был представлен итеративный метод уточнения сингулярного разложения [1, алгоритм 8]. Основной подход метода заключается в преобразовании сингулярного разложения в спектральное.

Исходная задача формулируется следующим образом: дана матрица $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, для нее ищется полное сингулярное разложение, то есть разложение вида

$$A = U\Sigma V^{\mathrm{T}}, \text{где}$$

$U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ и $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ортогональные матрицы, $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ и $\Sigma_{ii} = \sigma_i, i = 1, \dots, n$ – сингулярные числа матрица A. Столбцы матрицы U являются левыми сингулярными векторами матрицы A, столбцы матрицы V – правыми сингулярными векторами матрицы A.

Введем некоторые обозначения. За $O^{m\times n}$ обозначим нулевую матрицу размером $m \times n$. За $I^{n\times n}$ обозначим единичную квадратную матрицу размером $n \times n$ Для обозначения приближенного значения некоторой величины x используется запись $\hat{x}$; уточнение аппроксимации $\hat{x}$ записывается как $\tilde{x}$. Запись $(\cdot)_h$ означает, что операции в скобках выполняются с высокой точностью, запись $(\cdot)_l$ – вычисления с низкой точностью. За Σ_n обозначается квадратная матрица $\Sigma_n = diag(\sigma_1, \dots, \sigma_n) \in \mathbb{R}^{n\times n}$. В тексте также используется разбиение матрицы $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ на две подматрицы $U = (U_1\ U_2)$ следующим образом: $U_1 \in \mathbb{R}^{m\times n}$- матрица, столбцами которой являются первые n столбцов матрицы U; $U_2 \in \mathbb{R}^{m\times(m-n)}$- матрица, столбцами которой являются оставшиеся $(m-n)$ столбцов матрицы U.

Из [2] известно, что собственными числами матрицы B, определенной как

$$B := \begin{pmatrix} O^{n\times n} & A^{\mathrm{T}} \\ A & O^{m\times m} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+n)\times(m+n)}$$

являются числа $\sigma_1, \dots, \sigma_n, -\sigma_1, \dots, -\sigma_n, 0 \dots, 0$. Также, для B справедливо разложение

$$B \ = \ X\mathrm{D}X^{\mathrm{T}}, \text{где}$$

$$X := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} V & V & O^{n\times(m-n)} \\ U_1 & -U_1 & \sqrt{2}U_2 \end{pmatrix}, \qquad D := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Sigma_n & O^{n\times n} & O^{n\times(m-n)} \\ O^{m\times n} & -\Sigma & O^{m\times(m-n)} \end{pmatrix}.$$

Тогда задачу поиска сингулярного разложения матрицы A можно свести к задаче поиска спектрального разложения B. Для уточнения последнего используется алгоритм [1, алгоритм 3]. Для уменьшения числа ненужных вычислений используется алгоритм [1, алгоритм 5]. Пусть были получены аппроксимация матрицы X - $\hat{X}$ и уточнение аппроксимации матрицы D - $\widetilde{D}$:

$$\hat{X} := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \hat{V} & \hat{V} & O^{n\times(m-n)} \\ \widehat{U_1} & -\widehat{U_1} & \sqrt{2}\widehat{U_2} \end{pmatrix}, \qquad \widetilde{D} := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \widetilde{\Sigma_n} & O^{n\times n} & O^{n\times(m-n)} \\ O^{m\times n} & -\tilde{\Sigma} & O^{m\times(m-n)} \end{pmatrix}.$$

Тогда можно получить следующие соотношения:

$$B\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} A^{\mathrm{T}}\widehat{U_1} & -A^{\mathrm{T}}\widehat{U_1} & \sqrt{2}A^{\mathrm{T}}\widehat{U_2} \\ A\hat{V} & A\hat{V} & O^{m\times(m-n)} \end{pmatrix}, \qquad \hat{X}\widetilde{D} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \hat{V}\widetilde{\Sigma_n} & -\hat{V}\widetilde{\Sigma_n} & O^{n\times(m-n)} \\ \widehat{U_1}\widetilde{\Sigma_n} & \widehat{U_1}\widetilde{\Sigma_n} & O^{m\times(m-n)} \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$B\hat{X} - \hat{X}\widetilde{D} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} P_1 & -P_1 & \sqrt{2}A^{\mathrm{T}}\widehat{U_2} \\ P_2 & P_2 & O^{m\times(m-n)} \end{pmatrix},$$

где

$$P_1 := A^{\mathrm{T}}\widehat{U_1} - \hat{V}\widetilde{\Sigma_n}, \qquad P_2 := A\hat{V} - \widehat{U_1}\widetilde{\Sigma_n}.$$

Введем матрицу $H = (h_{ij})$:

$$H = \hat{X}^{\mathrm{T}}\left(B\hat{X} - \hat{X}\widetilde{D}\right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} Q_1 & -Q_2 & \sqrt{2}\hat{V}^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}\widehat{U_2} \\ Q_2 & -Q_1 & \sqrt{2}\hat{V}^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}\widehat{U_2} \\ \sqrt{2}\widehat{U_2}^{\mathrm{T}}P_2 & \sqrt{2}\widehat{U_2}^{\mathrm{T}}P_2 & O^{(m-n)\times(m-n)} \end{pmatrix},$$

где

$$Q_1 := \hat{V}^{\mathrm{T}}P_1 + \widehat{U_1}^{\mathrm{T}}P_2, \qquad Q_2 := A\hat{V}^{\mathrm{T}}P_1 - \widehat{U_1}^{\mathrm{T}}P_2.$$

Теперь определим матрицу ошибок $\tilde{E} = (\tilde{e}_{ij})$ для матрицы аналогично $\hat{X}$ [1, алгоритм 3]:

$$\tilde{e}_{ij} = \begin{cases} \dfrac{r_{ij}}{2}, & \text{если } i = j \text{ или } i,j > 2n \\ \dfrac{h_{ij}}{\tilde{d}_{jj} - \tilde{d}_{ii}}, & \text{иначе} \end{cases},$$

где $R = \left(r_{ij}\right) = I^{(m+n)\times(m+n)} - \hat{X}^{\mathrm{T}}\hat{X}$. Введем разбиение матрицы $\tilde{E}$ на подматрицы следующим образом. Пусть матрицы $\widetilde{E_1}, \widetilde{E_2} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \widetilde{E_3} \in \mathbb{R}^{n\times(m-n)}$, $\widetilde{E_4} \in \mathbb{R}^{(m-n)\times n}$ и $\widetilde{E_5} \in \mathbb{R}^{(m-n)\times(m-n)}$ такие, что

$$\tilde{E} = \begin{pmatrix} \widetilde{E_1} & \widetilde{E_2} & -\widetilde{E_3} \\ \widetilde{E_2} & \widetilde{E_1} & \widetilde{E_3} \\ \widetilde{E_4} & -\widetilde{E_4} & \widetilde{E_5} \end{pmatrix}.$$

Тогда справедливо равенство

$$\hat{X}\tilde{E} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \tilde{G} & \tilde{G} & O^{n\times(m-n)} \\ \widetilde{F_1} & -\widetilde{F_1} & \sqrt{2}\widetilde{F_2} \end{pmatrix},$$

где

$$\tilde{G} = \hat{V}\left(\widetilde{E_1} + \widetilde{E_2}\right),$$

$$\widetilde{F_1} = \widehat{U_1}\left(\widetilde{E_1} - \widetilde{E_2}\right) + \sqrt{2}\widehat{U_2}\widetilde{E_4},$$

$$\widetilde{F_2} = \widehat{U_2}\widetilde{E_5} - \sqrt{2}\widehat{U_1}\widetilde{E_3}$$

- матрицы поправок. Теперь с помощью данных матриц можно обновить значения матриц $\hat{V}$ и $\hat{U}$:

$$\tilde{V} := \hat{V} + \tilde{G}, \qquad \widetilde{U_1} := \widehat{U_1} + \widetilde{F_1}, \qquad \widetilde{U_2} := \widehat{U_2} + \widetilde{F_2}\,.$$

Таким образом был получен алгоритм повышения точности аппроксимации сингулярных векторов A. Псевдокод алгоритма приведен на рисунке 1.

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

Выход: $\tilde{U} \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $\tilde{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\tilde{\Sigma} \in \mathbb{R}^{m\times n}$

$P \leftarrow (A\hat{V})_h$; $Q \leftarrow (A^{\mathrm{T}}\widehat{U}_1)_h$ # определяем матрицы невязок

for $1 \leq i < n$ do

  # матрица корректировки ортогональности матриц $\hat{U}$ и $\hat{V}$

  $R[i][i] \leftarrow (1 - (\hat{U}_{(i)}^T\hat{U}_{(i)} + \hat{V}_{(i)}^T\hat{V}_{(i)})/2)_h$

for $1 \leq i < n$ do

  $T[i][i] \leftarrow (\hat{U}_{(i)}^T P_{(i)})_h$ # вспомогательная матрица

for $1 \leq i < n$ do

  $\tilde{\sigma}_i \leftarrow (\frac{T[i][i]}{1-R[i][i]})_h$ # расчет приблизительных сингулярных значений

$\widetilde{\Sigma_n} \leftarrow diag(\tilde{\sigma}_1, \dots, \tilde{\sigma}_n)$; $\tilde{\Sigma} \leftarrow (\widetilde{\Sigma_n}\ O^{n\times(m-n)})^T$

$P_1 \leftarrow (Q - \hat{V}\widetilde{\Sigma_n})_h$; $P_2 \leftarrow (P - \widehat{U}_1\widetilde{\Sigma_n})_h$;

$P_3 \leftarrow (\hat{V}^{\mathrm{T}}P_1)_l$; $P_3 \leftarrow (\widehat{U}_1^T P_2)_l$

$Q_1 \leftarrow (\frac{1}{2}(P_3 + P_4))_h$; $Q_2 \leftarrow (\frac{1}{2}(P_3 - P_4))_h$;

$Q_3 \leftarrow (\frac{1}{\sqrt{2}}P^{\mathrm{T}}\widehat{U}_2)_h$; $Q_4 \leftarrow (\frac{1}{2}(\widehat{U}_2^T P_2)_l)_h$;

расчет матриц ошибок

for $1 \leq i, j < n$ do

  if $i \neq j$ do

    $\widetilde{E_1}[i][j] \leftarrow (\frac{Q_1[i][j]}{\tilde{\sigma}_j - \tilde{\sigma}_i})_h$

  else do

18: $\widetilde{\mathrm{E}_1}[i][j] \leftarrow (\frac{R[i][i]}{2})_h$

19: for $1 \leq i, j < n$ do

20: $\widetilde{\mathrm{E}_2}[i][j] \leftarrow (\frac{Q_2[i][j]}{\tilde{\sigma}_j + \tilde{\sigma}_i})_h$

21: $\widetilde{\mathrm{E}_3} \leftarrow (\tilde{\Sigma}_n^{-1} Q_3)_h$; $\widetilde{\mathrm{E}_4} \leftarrow (Q_4 \tilde{\Sigma}_n^{-1})_h$; $\widetilde{\mathrm{E}_5} \leftarrow (\frac{1}{2}(I^{(m-n)\times(m-n)} - \widehat{U}_2^T \widehat{U}_2))_h$

\# обновляем значения матриц $\tilde{U}$ и $\tilde{V}$

22: $\tilde{U}_1 \leftarrow (\widehat{U}_1 + \left(\widehat{U}_1(\widetilde{\mathrm{E}_1} - \widetilde{\mathrm{E}_2})_h\right)_l + (\sqrt{2}(\widehat{U}_2 \widetilde{\mathrm{E}_4}))_l)_h$

23: $\tilde{U}_2 \leftarrow (\widehat{U}_2 + \left(\widehat{U}_2 \widetilde{\mathrm{E}_5}\right)_l - (\sqrt{2}(\widehat{U}_1 \widetilde{\mathrm{E}_3}))_l)_h$

24: $\tilde{V} \leftarrow (\widehat{V} + \left(\widehat{V}(\widetilde{\mathrm{E}_1} + \widetilde{\mathrm{E}_2})_h\right)_l)_h$

Рисунок 1. Псевдокод алгоритма итеративного уточнения полного сингулярного разложения.

Строки 1-8 приведенного на рисунке 1 псевдокода взяты из реализации алгоритма уточнения сингулярного разложения [1, алгоритм 5]. Строки 9-24 адаптированы из алгоритма [1, алгоритм 3] уточнения спектрального разложения, но в терминах приведенных ранее выкладок связи сингулярных чисел матрицы A и собственных чисел матрицы B.

Сходимость описанного алгоритма совпадает со сходимостью базового алгоритма [1, алгоритм 4], то есть является квадратичной. Вычислительная стоимость данного алгоритма, то есть количество необходимых операций, для входных данных $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ варьируется от $3m^3 + 2m^2n + 3mn^2 + 4n^3$ до $4m^3 + 4mn^2 + 4n^3$. Это выражение больше, чем для базового алгоритма [1, алгоритм 4], но при требуемой большой точности операций необходимо меньше [1].

Тестирование

Для анализа работы полученного алгоритма был проведен ряд экспериментов по уточнению сингулярного разложения матриц различных размеров. Для матрицы фиксированного размера генерировалось некоторое точное сингулярное разложение, из которого строилась матрица $A = U\Sigma V^{\mathrm{T}}$, затем к матрицам U, Σ, V добавлялась некоторая ошибка: отклонение от начального значения на $10^{-5}, 10^{-10}$ или 10^{-15}. Также сингулярные числа варьировались в интервале $[1, 10]$ или $[1, 100]$. Для каждого эксперимента выводятся входные данные: размер матрицы A; интервал значений сингулярных чисел; добавляемая ошибка; число итераций для уточнения. После эксперимента выводятся следующие данные: норма разницы исходной и восстановленной матриц $\left\|A - \tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V}^{\mathrm{T}}\right\|$ в пространствах L_1и L_2, то есть нормы $\|X\|_1 = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\left|x_{ij}\right|$ и $\|X\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}x_{ij}^2}$ соответственно; нормы $\|\cdot\|_2$ разниц изначальных и уточненных матриц U, Σ, V; время на выполнение алгоритма.

Чтобы избежать накопления ошибки при большом числе итераций и таким образом сохранить необходимую ортогональность матриц U и V, на каждой итерации проводилась процедура реортогонализации этих матриц с помощью QR-разложения. Результаты экспериментов представлены в файле *alg8_test_results_reortogonalized.csv*.

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. Golub, G.H., Kahan, W.M.: Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix / Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics, Series B: Numerical Analysis. — 1965. — №2. — С. 205-224.