

Влияние распределения спектра матрицы на точность сингулярного разложения

И. Ю. Дроздов¹ Д. В. Парфенов²

С помощью численных экспериментов подтверждена гипотеза о зависимости точности нахождения индивидуальных сингулярных значений с помощью численных алгоритмов от особенностей распределения сингулярных значений матрицы при фиксированном числе обусловленности. Продемонстрирована недостаточность применения относительной погрешности по Евклидовой норме вектора результатов и предложена альтернативная метрика в виде средне-квадратичной относительной погрешности.

Ключевые слова: сингулярное разложение, число обусловленности, спектр матрицы, численная устойчивость

1. Введение

Сингулярное разложение (SVD) является одним из наиболее часто применяемых представлений матриц общего вида для решения множества практических задач. Немало и реализаций алгоритмов сингулярного разложения в различных программных библиотеках. Как и для многих других численных методов, здесь важна численная устойчивость. Некоторые аспекты этого вопроса достаточно исследованы [1], обычно в качестве метрики точности разложения используется L_2 -норма относительной погрешности вектора сингулярных значений $\|\sigma - \hat{\sigma}\|/\|\sigma\|$. Общепринятым показателем “качества” матрицы при решении задач является число обусловленности, определяемое как отношение максимального и минимального сингулярных значений $\sigma_{\max}/\sigma_{\min}$. Считается, что устойчивость сингулярного разложения зависит от числа обусловленности матрицы $\sigma_{\max}/\sigma_{\min}$ [2]. Целью данного исследования является проверка гипотезы о зависимости устойчивости сингулярного разложения не только от числа обусловленности, но и от особенностей распределения сингулярных значений в спектре матрицы. Также мы предлагаем и

¹ Дроздов Игорь Юрьевич — аспирант каф. высшей математики Института искусственного интеллекта РТУ МИРЭА, e-mail: drozdov_i@mirea.ru.

Drozdov Igor Yurievich — Ph.D. student, Russian Technological University (MIREA), Institute of Artificial Intelligence, Department of Higher Mathematics.

² Парфенов Денис Васильевич — к.т.н., доцент каф. высшей математики Института искусственного интеллекта РТУ МИРЭА, e-mail: parfenov@mirea.ru.

Parfenov Denis Vasilevich, Ph.D. — associate professor, Russian Technological University (MIREA), Institute of Artificial Intelligence, Department of Higher Mathematics.

обосновываем использование альтернативной метрики для оценки точности нахождения сингулярных значений.

2. Применения сингулярного разложения

Сингулярное разложение определяется как

$$A = U\Sigma V^T, \quad (1)$$

где A – исходная матрица размером $m \times n$, U и V – унитарные матрицы размерами $m \times m$ и $n \times n$ соответственно, Σ – диагональная матрица размером $\min(m, n) \times \min(m, n)$ с сингулярными значениями на главной диагонали. У матрицы A размером $m \times n$ существует $\min(m, n)$ сингулярных значений. Это разложение широко применяется в численной математике, статистике и инженерных дисциплинах. Далее кратко рассмотрим типичные применения с целью подчеркнуть важность точности отыскания сингулярных значений.

Сингулярное разложение – стандартный способ вычисления псевдообратной матрицы Мура-Пенроуза [3]. Псевдообратная матрица A^+ – обобщение обратной матрицы, определенное и для прямоугольных и вырожденных матриц и позволяющее решать пере- или недоопределенные системы линейных уравнений. Имея систему уравнений $Ax = b$, ее решение с помощью псевдообратной матрицы $x = A^+b$ идейно аналогично случаю с обратной матрицей. Если система несовместна, такое решение является наилучшим в смысле наименьшей квадратической ошибки (проекция вектора b на пространство столбцов A), т.е. $\forall x \in \text{im}A \quad \|Ax - b\|_2 \geq \|A\hat{x} - b\|_2$, где $\hat{x} = A^+b$, $\text{im}A$ – образ матрицы A (линейная оболочка ее столбцов). Если у системы бесконечное множество решений, псевдообратная матрица позволяет найти решение с наименьшей евклидовой нормой, т.е. $\forall x : Ax = b \quad \|\hat{x}\|_2 \leq \|x\|_2$. Зная сингулярное разложение $A = U\Sigma V^T$, очень просто получить псевдообратную матрицу как $A^+ = U\Sigma^+V^T$, где псевдообращение диагональной матрицы Σ^+ получается заменой всех ненулевых элементов в Σ на обратные к ним и транспонированием получившейся матрицы.

Целое семейство вычислительных методов, в основе которых лежит сингулярное разложение, может быть охарактеризовано как “приближения меньшего ранга” [5]. В общем случае задача приближения меньшего ранга заключается в нахождении матрицы, максимально “близкой” к исходной, но имеющей при этом заданный меньший ранг r . Иными словами, это задача минимизации нормы Фробениуса:

$$\min_{\hat{A}} \|\hat{A} - A\|_F \quad \text{s.t.} \quad \text{rank}(A) < r, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}. \quad (2)$$

У этой задачи есть аналитическое решение с использованием сингулярного разложения (теорема Экарта-Юнга-Мирского, [6, 7]). Если $A = U\Sigma V^T \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, то его можно представить в блочном виде:

$$U = [U_1 \ U_2], \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & \Sigma_2 \end{bmatrix}, \quad V = [V_1 \ V_2],$$

где $U_1 - m \times r$, $\Sigma_1 - r \times r$ и $V_1 - n \times r$. Тогда матрица \hat{A} , удовлетворяющая (2), находится как $\hat{A} = U_1 \Sigma V_1^T$, при этом

$$\|\hat{A} - A\|_F = \sqrt{\sigma_{r+1}^2 + \sigma_{r+2}^2 + \dots + \sigma_m^2}.$$

Один из важных практических методов, использующих приближение меньшего ранга, – это метод главных компонент (МГК), современный обзор которого приведен в [8]. Формально, МГК является техникой уменьшения размерности данных путем линейного преобразования в новую ортогональную систему координат, где данные могут быть описаны в меньшей размерности при минимальной потере информации. Применение сингулярного разложения к матрице данных позволяет выделить “главные компоненты”: сингулярные пары вектор-значение, где сингулярное значение ассоциируется со значением дисперсии данных в направлении соответствующего сингулярного вектора. МГК может быть использован в разведочном анализе данных, с целью визуализации многомерных данных [9] или уменьшения размерности для упрощения модели [10]. Также приближение меньшего ранга используется для идентификации систем (построения математической модели динамической системы на основе статистических наблюдений) [11] и лежит в основе латентного семантического анализа (метода обработки естественных языков, позволяющего анализировать зависимости между документами с содержащимися в них терминами) [12]. Подробный обзор техник и приложений аппроксимации меньшего ранга приведен в [13].

3. Цели и методы исследования

Целью исследования является выявление зависимости точности нахождения сингулярных значений от их распределения при фиксированном числе обусловленности. Чаще всего в численной линейной алгебре используются следующие виды погрешностей [4], позволяющие оценить точность нахождения векторной величины \hat{x} , зная истинное значение x :

- Абсолютная погрешность $E_{\text{абс}}(\hat{x}) = \|\hat{x} - x\|$;
- Относительная погрешность $E_{\text{отн}}(\hat{x}) = \|\hat{x} - x\|/\|x\|$;

- Поэлементная относительная погрешность $\max_i \|\hat{x}_i - x_i\|/\|x_i\|$.

Однако, как видно из наших экспериментов, данные метрики не всегда дают корректное представление о точности алгоритма сингулярного разложения. Для матриц значительного размера, у которых $\sigma_{\min} \ll \sigma_{\max}$, абсолютная и относительная погрешности могут скрывать ошибки в нахождении большого количества малых сингулярных значений при достаточно точном отыскании нескольких больших. Наоборот, поэлементная относительная погрешность дает повышенную надежность, подчеркивая наихудший случай определения отдельного сингулярного значения, в то время как большая часть сингулярных значений может быть вычислена вполне корректно. В связи с этим, для оценки точности нахождения сингулярных значений введем следующий показатель:

$$\text{RMSRE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\sigma_i - \hat{\sigma}_i}{\sigma_i} \right)^2},$$

где N – количество сингулярных значений матрицы, σ_i – “истинное” i -е сингулярное значение, $\hat{\sigma}_i$ – i -е сингулярное значение, полученное с помощью численного алгоритма сингулярного разложения. Этот показатель является, по сути, среднеквадратичной относительной погрешностью нахождения сингулярных значений и позволяет оценивать точность нахождения как малых, так и больших сингулярных значений при значительном числе обусловленности матрицы, ослабляя описанные проблемы.

3.1. Конструирование матрицы с заданным спектром

Для исследования точности нахождения сингулярных значений, очевидно, необходимо знать “истинные” их значения для исходной матрицы. Для этого исходная тестовая матрица синтетически создается согласно уравнению (1) по следующему алгоритму [3]:

- 1) Задаются размерности матрицы m и n ;
- 2) Генерируются матрицы $T_L(m \times m)$ и $T_R(n \times n)$, в них каждый элемент t_{ij} – псевдослучайное число от -1 до 1, полученное из равномерного распределения генератора псевдослучайных чисел. Задание начального состояния генератора обеспечивает воспроизводимость экспериментов;
- 3) Матрицы T_L и T_R ортогонализируются с помощью преобразования Хаусхолдера [3], которое превращает их в ортогональные матрицы Q_L и Q_R соответственно;

- 4) Заданный спектр σ присваивается главной диагонали нулевой матрицы Σ , превращая ее в диагональную;
- 5) Тестовая матрица с заданным спектром получается как $A = Q_L \Sigma Q_R$.

3.2. Задание распределения сингулярных значений

Для задания распределения сингулярных значений в спектре используется плотность распределения $f_\sigma(x)$. Понятие плотности распределения здесь схоже с аналогичным из теории вероятности. Установим следующие требования для $f_\sigma(x)$ на интервале $[0, 1]$: $f_\sigma : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^+$ и $\int_0^1 f_\sigma(x) dx = 1$. Спектр матрицы, соответствующий заданной плотности распределения, определяется следующим образом:

- 1) Из плотности распределения $f_\sigma(x)$ получаем функцию распределения: $F_\sigma(x) = \int_0^x f_\sigma(t) dt$;
- 2) Генерируем N равноотстоящих точек u_i на интервале $[0, 1]$, где N – требуемое количество сингулярных значений;
- 3) Получаем сингулярные значения с требуемым распределением с помощью метода обратного преобразования [14]:

$$\sigma_i = F_\sigma^{-1}(u_i).$$

Следует отметить, что, несмотря на использование аналогий из области теории вероятности, описанный процесс полностью детерминирован: при одинаковых исходных плотностях распределения $f_\sigma(x)$ всегда будет получен один и тот же набор сингулярных значений σ .

В качестве модели плотности распределения мы используем нормализованную бета-функцию [15]:

$$f_\sigma(x; \alpha, \beta) = \frac{1}{B(\alpha, \beta)} x^{\alpha-1} (1-x)^{\beta-1}, \quad B(\alpha, \beta) = \int_0^1 t^{\alpha-1} (1-t)^{\beta-1} dt. \quad (3)$$

Этот выбор связан с простотой параметризации и возможностью задавать различные интересующие нас распределения сингулярных значений, сгруппированные с разной плотностью в различных частях интервала $[0, 1]$. Полученные сингулярные значения на этом интервале проецируются на логарифмическую шкалу с заданными границами $[\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$, для получения выбранного числа обусловленности.

3.3. Библиотеки и алгоритмы сингулярного разложения

Вследствие широкой востребованности, реализации алгоритмов сингулярного разложения встречаются во многих пакетах численных методов. В классическом пакете LAPACK [16] имеются две процедуры для вычисления сингулярного разложения. По проведенному авторами анализу, многие другие широко используемые библиотеки численных методов (например, numru [17], стандартные библиотеки языков Julia [18], R [19], Octave [20]) используют в своих имплементациях сингулярного разложения обращения к соответствующим функциям LAPACK. Одной из немногих широко распространенных библиотек с независимой от LAPACK реализацией SVD является Eigen для C++ [21]. Таким образом, для дальнейших экспериментов мы выделили три по нашему мнению наиболее часто используемых варианта метода сингулярного разложения: BDCSVD из Eigen, dgesvd и dgesdd из LAPACK.

4. Эксперименты

Пользуясь удобством параметризации бета-функции (3), задаем сетку параметров (α, β) в виде декартового произведения множеств выбранных значений для каждого из параметров: $\{0.5, 1, 2, 5\} \times \{0.5, 1, 2, 5\}$. Далее, используя эти функции, по методу, описанному в разделе 3.2, генерируются наборы сингулярных значений, распределение которых соответствуют заданным бета-функциям. Рассматриваются матрицы размером 3000×2000 с числом обусловленности 10^{20} , такие, что $\sigma_{\min} = 10^{-10}$, $\sigma_{\max} = 10^{10}$. Используемые бета-функции и соответствующие им гистограммы распределений сгенерированных наборов сингулярных значений приведены на рисунке 1. Для каждого из этих наборов создаются матрицы с заданным спектром, согласно методу из раздела 3.1. Далее к этим матрицам применяем три алгоритма сингулярного разложения, перечисленные в разделе 3.3, и вычисляем метрики: RMSRE и $E_{\text{отн}}$. Результаты, представленные в виде шести тепловых карт, приведены на рисунке 2. Каждая тепловая карта соответствует комбинации метрики погрешности и алгоритма сингулярного разложения. Каждая ячейка на тепловой карте отражает значение метрики погрешности, при этом положение ячейки соответствует положению спектра на рисунке 1.

5. Выводы

Во-первых, очевидна недостаточная информативность относительной погрешности $E_{\text{отн}}$: во всех случаях $E_{\text{отн}}$ пренебрежимо мала, исходя из чего можно было бы сделать вывод о точном нахождении сингулярных

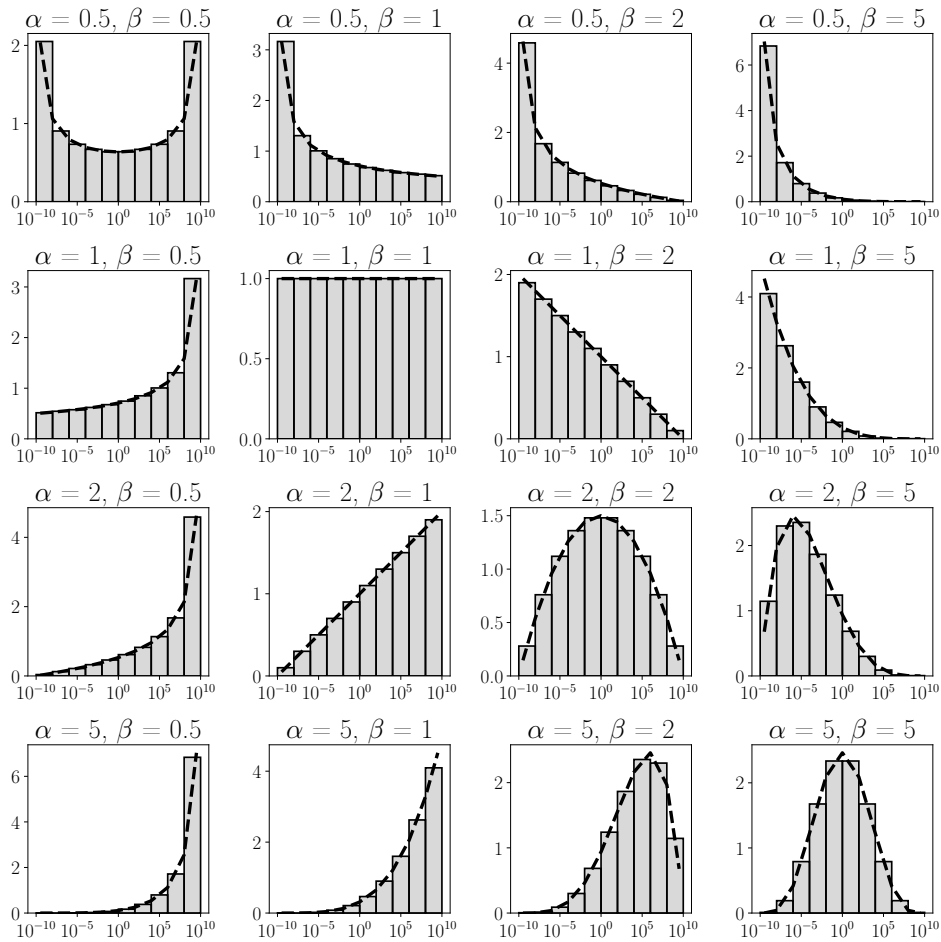


Рисунок 1. Распределение сингулярных значений для каждого из исследуемых случаев

значений. Однако, в метрике RMSRE видно, что точность нахождения сингулярных значений значительно различается. Во-вторых, имеется зависимость точности вычисления сингулярных значений от их распределения при фиксированных σ_{\min} и σ_{\max} . Метод BDCSVD, основанный на подходе “разделяй и властвуй” (который рекурсивно диагонализует матрицу и применяет метод Якоби для достаточно маленьких блоков), лучше всего показывает себя, если большинство сингулярных значений близки к σ_{\max} . Схожие результаты дает и dgesdd, также использующий принцип “разделяй и властвуй”. Методу dgesvd в метрике RMSRE соответствуют лучшие результаты при множестве сингулярных значений,

близких к σ_{\min} . Отличающиеся на порядок результаты в алгоритмах Eigen и LAPACK объясняются тем, что реализация Eigen принимает достаточно маленькие собственные значения за 0, что дает в итоге лучшую RMSRE. В целом, среди рассмотренных алгоритмов отметим следующую закономерность: собственные значения, близкие к σ_{\max} , находятся лучше, чем близкие к σ_{\min} . Также видно, что введенная нами метрика погрешности, хотя и дает более точное представление в сравнении с $E_{\text{отн}}$, несовершенна: например, при $(\alpha = 5, \beta = 0.5)$ и использовании метода dgesdd она сравнима по порядку с случаем $(\alpha = 0.5, \beta = 5)$. Однако, большинство значений для $(\alpha = 5, \beta = 0.5)$ находятся верно; лишь несколько малых сингулярных значений имеют очень большую относительную погрешность. Тем не менее, вклад ошибок нахождения этих малых значений в метрику RMSRE достаточен, чтобы сделать ее сопоставимой со случаем $(\alpha = 0.5, \beta = 5)$, в котором большая часть собственных значений находится неверно, но с меньшей относительной погрешностью.

Список литературы

- [1] Demmel J. et al., “Computing the Singular Value Decomposition with High Relative Accuracy”, *Linear Algebra and its Applications*, 1997, № 299, 21–80.
- [2] Cheney E.W., Kincaid D.R., *Numerical Mathematics and Computing*, Cengage Learning, 2012.
- [3] Golub G.H., Van Loan C.F., *Matrix Computations*, Johns Hopkins University Press, 2013.
- [4] Higham N.J., *Matrix Computations*, SIAM, 2002.
- [5] Markovsky I., *Low Rank Approximation: Algorithms, Implementation, Applications*, Springer-Verlag London Limited, 2012.
- [6] Eckart C., Young J.M., “The approximation of one matrix by another of lower rank”, *Psychometrika*, **1**, 211–218.
- [7] Mirsky L., “Symmetric gauge functions and unitarily invariant norms”, *Quarterly Journal of Mathematics*, **11** (1960), 50–59.
- [8] Jolliffe I. T., Cadima J., “Principal component analysis: a review and recent developments”, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **374**:2065 (2016), 20150202.

- [9] Alakkari S., Dingliana J., “Principal Component Analysis Techniques for Visualization of Volumetric Data”, *Advances in Principal Component Analysis: Research and Development*, Springer Singapore, 2018, 99–120.
- [10] Navarrete P., Javier R., “Analysis and Comparison of Eigenspace-Based Face Recognition Approaches”, *Int. J. Pattern Recognit. Artif. Intell.*, **16** (2002), 817–830.
- [11] Markovsky I., Willems J.C., Huffel S., De Moor B., Pintelon R., “Application of structured total least squares for system identification and model reduction”, *IEEE Transactions on Automatic Control*, **50** (2005), 1490-1500.
- [12] Landauer T. K., Dumais S.T., “Latent semantic analysis”, *Scholarpedia*, **3** (2004), = 4356.
- [13] Kumar N.K., Shneider J., “Literature survey on low rank approximation of matrices”, 2016, arXiv: <https://arxiv.org/abs/1606.06511>.
- [14] Бусленко Н.П., Голенко Д.И., Соболев И.М., Срагович В.Г., Шрейдер Ю.А., *Метод статистических испытаний (Метод Монте-Карло)*, Физматгиз, М., 1962.
- [15] Abramowitz, M. and Stegun, I.A., *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover Publications, 1965.
- [16] Anderson E. et al., *LAPACK Users' Guide*, SIAM, 1999.
- [17] Harris C.R., Millman K.J. et al., “Array programming with NumPy”, **585**:7825 (2020), 357–362.
- [18] Bezanson J., Edelman A., Karpinski S., Shah V.B., “Julia: A fresh approach to numerical computing”, **59**:1 (2020), 65–98.
- [19] R Core Team, *R: A Language and Environment for Statistical Computing*, <https://www.R-project.org/>, 2020.
- [20] Eaton J.W., Bateman D., Hauberg S., Wehbring R., *GNU Octave version 5.2.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations*, <https://www.gnu.org/software/octave/doc/v5.2.0/>, 2020.
- [21] Guennebaud G., Jacob B. et al., *Eigen v3*, <http://eigen.tuxfamily.org>, 2010.

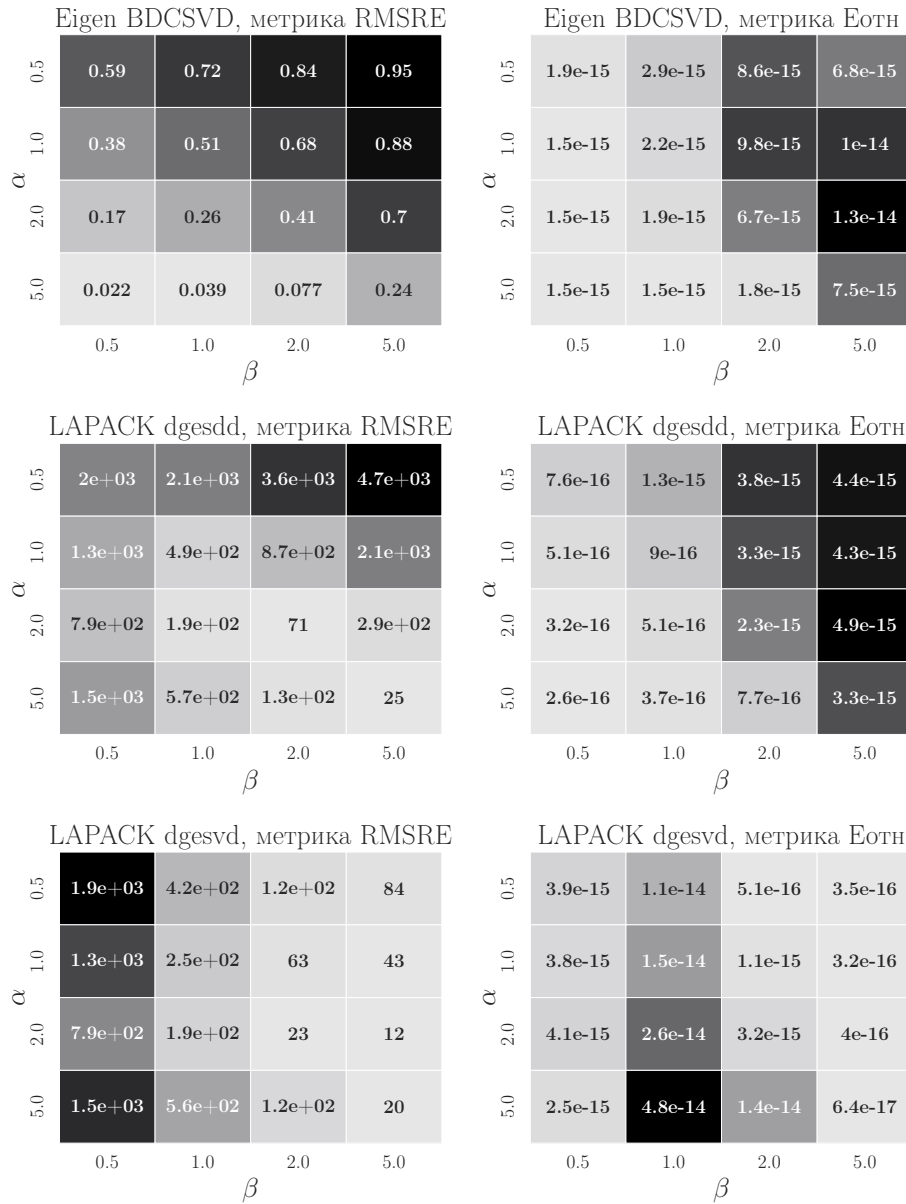


Рисунок 2. Распределение сингулярных значений для каждого из исследуемых случаев

Relationship between accuracy of singular value decomposition and distribution of singular values

Drozdov I.Yu., Parfenov D.V.

Using numerical experiments we demonstrated that accuracy of numerical singular value decomposition (SVD) is affected not only by condition number of the matrix, but also by distribution of singular values in the matrix spectrum. We note that widely used relative norm error of SVD result might be insufficient and propose an alternative metric based on root-mean-squared relative error.

Keywords: singular value decomposition, SVD, condition number, matrix spectrum, numerical stability

Список литературы

- [1] Demmel J. et al., “Computing the Singular Value Decomposition with High Relative Accuracy”, *Linear Algebra and its Applications*, 1997, № 299, 21–80.
- [2] Cheney E.W., Kincaid D.R., *Numerical Mathematics and Computing*, Cengage Learning, 2012.
- [3] Golub G.H., Van Loan C.F., *Matrix Computations*, Johns Hopkins University Press, 2013.
- [4] Higham N.J., *Matrix Computations*, SIAM, 2002.
- [5] Markovsky I., *Low Rank Approximation: Algorithms, Implementation, Applications*, Springer-Verlag London Limited, 2012.
- [6] Eckart C., Young J.M., “The approximation of one matrix by another of lower rank”, *Psychometrika*, **1**, 211–218.
- [7] Mirsky L., “Symmetric gauge functions and unitarily invariant norms”, *Quarterly Journal of Mathematics*, **11** (1960), 50–59.
- [8] Jolliffe I. T., Cadima J., “Principal component analysis: a review and recent developments”, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **374**:2065 (2016), 20150202.
- [9] Alakkari S., Dingliana J., “Principal Component Analysis Techniques for Visualization of Volumetric Data”, *Advances in Principal Component Analysis: Research and Development*, Springer Singapore, 2018, 99–120.

- [10] Navarrete P., Javier R., “Analysis and Comparison of Eigenspace-Based Face Recognition Approaches”, *Int. J. Pattern Recognit. Artif. Intell.*, **16** (2002), 817–830.
- [11] Markovsky I., Willems J.C., Huffel S., De Moor B., Pintelon R., “Application of structured total least squares for system identification and model reduction”, *IEEE Transactions on Automatic Control*, **50** (2005), 1490-1500.
- [12] Landauer T. K., Dumais S.T., “Latent semantic analysis”, *Scholarpedia*, **3** (2004), = 4356.
- [13] Kumar N.K., Shneider J., “Literature survey on low rank approximation of matrices”, 2016, arXiv: <https://arxiv.org/abs/1606.06511>.
- [14] Buslenko N.P, Golenko D.I., Sobol I.M, Sragovich V.G., Shreider Yu.A., *Method of statistical trials (Monte-Carlo method)*, Fizmatgiz, Moscow, 1962 (In Russian).
- [15] Abramowitz, M. and Stegun, I.A., *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover Publications, 1965.
- [16] Anderson E. et al., *LAPACK Users’ Guide*, SIAM, 1999.
- [17] Harris C.R., Millman K.J. et al., “Array programming with NumPy”, **585:7825** (2020), 357–362.
- [18] Bezanson J., Edelman A., Karpinski S., Shah V.B., “Julia: A fresh approach to numerical computing”, **59:1** (2020), 65–98.
- [19] R Core Team, *R: A Language and Environment for Statistical Computing*, <https://www.R-project.org/>, 2020.
- [20] Eaton J.W., Bateman D., Hauberg S., Wehbring R., *GNU Octave version 5.2.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations*, <https://www.gnu.org/software/octave/doc/v5.2.0/>, 2020.
- [21] Guennebaud G., Jacob B. et al., *Eigen v3*, <http://eigen.tuxfamily.org>, 2010.