ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2019, том 59, № 8, с. 1314–1330

УДК 519.61

МЕТОДЫ НЕОТРИЦАТЕЛЬНОЙ МАТРИЧНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ КРЕСТОВЫХ МАЛОРАНГОВЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ[1)]

© 2019 г. Е. Е. Тыртышников[1,*], Е. М. Щербакова[2,]**

([1] 119333 Москва, ул. Губкина 8, ИВМ РАН, Россия;
[2] 119991 Москва, Ленинские горы 1, МГУ, Россия)
**e-mail: eugene.tyrtyshnikov@gmail.com*
***e-mail: lena19592@mail.ru*

Поступила в редакцию 13.03.2019 г.
Переработанный вариант 13.03.2019 г.
Принята к публикации 10.04.2019 г.

Известные на данный момент методы для решения задачи неотрицательной матричной факторизации предполагают использование всех элементов исходной матрицы размера $m \times n$ и сложность их не меньше $O(mn)$, что при больших объемах данных делает их слишком ресурсоемкими. Поэтому естественным образом возникает вопрос: можно ли построить неотрицательную факторизацию матрицы, зная ее неотрицательный ранг, используя лишь несколько ее строк и столбцов? В данной работе предлагаются методы решения этой задачи для определенных классов матриц: неотрицательных сепарабельных матриц – тех, для которых существует конус, натянутый на несколько столбцов исходной матрицы и содержащий все ее столбцы; неотрицательных сепарабельных матриц с возмущениями; неотрицательных матриц ранга 2. На практике предложенные алгоритмы используют число операций и объем памяти, линейно зависящие от $m + n$. Библ. 24. Фиг. 7. Табл. 2.

Ключевые слова: неотрицательная матричная факторизация, сепарабельные матрицы, быстрые алгоритмы, крестовые методы.

DOI: 10.1134/S0044466919080179

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача неотрицательной матричной факторизации (задача NMF) ранга $r \le \min(m, n)$ формулируется следующим образом: для заданной матрицы M с неотрицательными элементами требуется найти разложение $M = WH$, где W и H имеют r столбцов и r строк соответственно и все их элементы неотрицательны. Число r считается заданным.

Матрицу с неотрицательными элементами принято называть *неотрицательной*, сам факт неотрицательности матрицы M записывается в виде неравенства $M \ge 0$, а множество всех неотрицательных матриц размера $m \times n$ обозначается через $\mathbb{R}_+^{m\times n}$. Наименьшее число r в разложениях вида

$$M = WH, \quad W \in \mathbb{R}_+^{m\times r}, \quad H \in \mathbb{R}_+^{r\times n}$$

называется *неотрицательным рангом* матрицы M.

В общем случае задача неотрицательной матричной факторизации минимального ранга является NP-трудной даже при условии, что неотрицательный ранг матрицы известен (см. [1]). То же самое можно сказать о сложности поиска самого неотрицательного ранга матрицы. Заметим также, что если факторизация $M = WH$ ранга r существует, то она заведомо не единственная, так как $M = (WD)(D^{-1}H)$ для любой невырожденной матрицы D: $WD \ge 0$, $D^{-1}H \ge 0$.

Известные на данный момент методы неотрицательной матричной факторизации предполагают использование всех элементов исходной матрицы, и сложность их как минимум линейно зависит от общего числа элементов матрицы. Однако на практике матрица часто задается не как

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 19-11-00338).

массив всех ее элементов, а с помощью некоторой процедуры, вычисляющей любой элемент по требованию. В таких ситуациях при построении факторизаций хотелось бы избежать вычисления и хранения всех элементов матрицы. В случае скелетных разложений без ограничений неотрицательности такая возможность предоставляется *крестовыми методами* [2]–[5], в которых вычисляются лишь порядка $(m+n)r$ элементов исходной матрицы. Наша цель – исследовать аналогичную возможность при построении неотрицательных факторизаций. В данной статье дается решение этой задачи для определенных классов матриц. Прежде всего, это так называемые сепарабельные матрицы (разд. 2) и возмущенные сепарабельные матрицы (разд. 3). Кроме того, отдельно рассматривается класс неотрицательных матриц ранга 2 (разд. 5).

Впервые условие сепарабельности было исследовано в [6] в контексте единственности неотрицательного матричного разложения. Для решения задачи неотрицательной факторизации сепарабельных матриц в [7] авторы предложили метод, требующий решения n задач линейного программирования с $O(n)$ переменными (n – число столбцов исходной матрицы), что не очень подходит для больших матриц. В [8] рассматривается выпуклая модель с n^2 переменными, но вычислительная сложность является очень высокой. В [9] авторы описали метод, основанный на решении единственной выпуклой оптимизационной задачи с n^2 переменными. В 2014 г. Гиллис и Вавасис (Gillis, Vavasis) в [10] предложили алгоритм, сложность которого они оценили как $O(mnr)$. Это далеко не все методы для решения неотрицательной факторизации сепарабельных матриц, но одни из самых известных, сложность их не меньше $O(mn)$. В данной работе предлагается алгоритм, позволяющий решить данную задачу за время, линейно зависящее от суммы размеров матрицы. Основная идея – построить крестовое разложение исходной матрицы и преобразовать факторы так, чтобы метод из [10] был применим к одному из них, в итоге ведется работа над задачей меньшего размера. Дополнительно рассмотрен еще один вариант применения алгоритма. В ряде приложений (см. [11], [12]) возникают матрицы, допускающие симметричную неотрицательную факторизацию. Для подкласса таких матриц, а именно симметричных неотрицательных матриц ранга r, содержащих диагональную главную подматрицу того же ранга, в 2012 г. был предложен в [13] метод, строящий их неотрицательную симметричную факторизацию. В разд. 4 мы демонстрируем, как, используя наш алгоритм, можно решить эту задачу эффективнее.

Исследован случай возмущенных сепарабельных матриц. В частности, выведены теоретические оценки точности работы алгоритма в зависимости от возмущения. Проведены численные эксперименты (разд. 6), включая сравнение с результатами работы [10]. На практике предложенный алгоритм использует число операций и объем памяти, линейно зависящие от суммы размеров исходной матрицы.

Хотя уже было известно, что если ранг неотрицательной матрицы равен двум, то всегда можно построить неотрицательную факторизацию ранга 2 (см. [14]), ранее никто не приводил конкретного метода для решения данной задачи, используя на практике лишь $O(m+n)$ операций и элементов исходной матрицы (разд. 5).

2. СЕПАРАБЕЛЬНЫЕ МАТРИЦЫ

Определение 1. Матрица $M \in R^{m\times n}$ называется r-сепарабельной, если все ее столбцы принадлежат конусу, натянутому на некоторые r столбцов той же матрицы. Соответствующая система столбцов называется определяющей.

Очевидно, что с помощью перестановки определяющими можно сделать первые r столбцов. Тогда матрица M представляется в виде

$$M = WH = W[I_r H'],$$

где $W \in R^{m\times r}$, $H \in R_+^{r\times n}$, I_r – единичная матрица порядка r. Ранг r-сепарабельной матрицы в общем случае необязательно равен r.

Условие сепарабельности с первого взгляда может показаться несколько искусственным, однако существуют приложения, где оно является естественным и логичным. Например, это условие широко распространено при работе с гиперспектральными изображениями. В данном случае каждый столбец матрицы M интерпретируется как “спектральная подпись” смеси материалов, соответствующей одному элементу изображения, а условие сепарабельности означает, что для всякого материала существует элемент изображения, содержащий только его. При работе с текстами столбцы M могут описывать слова. Тогда условие сепарабельности означает, что для каждой темы найдется слово, относящееся исключительно к ней.

В дальнейшем нам нужны некоторые дополнительные предположения о матрицах W и H.

Во-первых, будем считать, что столбцы матрицы $W \in R^{m\times r}$ линейно независимы. Тогда W и H определены единственным образом с точностью до перестановки и масштабирования столбцов. Другими словами, пусть матрицы W и $\tilde{W}$ имеют по r линейно независимых столбцов и каждая из матриц H и $\tilde{H}$ содержит единичную подматрицу порядка r. Тогда, если невырожденная матрица Q обеспечивает равенства

$$\tilde{W} = WQ \geq 0, \quad \tilde{H} = Q^{-1}H \geq 0,$$

то она обязана быть *мономиальной* — так называются квадратные матрицы, которые в каждой строке и каждом столбце имеют ровно один ненулевой элемент. При сделанных предположениях матрицы Q и Q^{-1} обе должны быть неотрицательными и очевидным образом доказывается, что такие матрицы являются мономиальными. Более тонкие вопросы единственности неотрицательных разложений обсуждаются в [10], [15].

Во-вторых, предположим, что сумма элементов в каждом столбце матрицы $H \in R_+^{r\times n}$ не превышает 1. Такую матрицу будем называть *нормированной* r*-сепарабельной*. В случае неотрицательных сепарабельных матриц этого можно легко добиться с помощью нормировки, делающей сумму элементов каждого ненулевого столбца равной 1. В самом деле,

$$M = WH \Leftrightarrow MD_M^{-1} = WD_W^{-1}(D_W H D_M^{-1}),$$

где матрица D_X определяется как диагональная матрица, в которой i-й элемент диагонали равен сумме элементов i-го столбца матрицы X, если он ненулевой, а в противном случае этот элемент равен 1. Суммы элементов в ненулевых столбцах матриц MD_M^{-1} и WD_W^{-1} равны 1, а позиции нулевых столбцов соответствуют нулевым столбцам матрицы M. То же верно для матрицы $D_W H D_M^{-1}$, при этом все ее элементы будут неотрицательными. Заметим однако, что нормировка требует просмотра всех mn элементов матрицы M.

Предлагаемый нами алгоритм представляет собой модификацию алгоритма Гиллиса—Вавасиса (Gillis—Vavasis), которая работает с некоторой факторизацией исходной матрицы без предположения о неотрицательности факторов. Таким образом, полный массив элементов исходной матрицы не требуется и за счет этого наш алгоритм обладает существенно меньшей вычислительной сложностью. Прежде чем описывать новый алгоритм, поясним идеи, лежащие в основе метода Гиллиса—Вавасиса.

Задача алгоритма — найти определяющую систему столбцов неотрицательной r-сепарабельной матрицы M. Мы предполагаем, что матрица M нормирована так, как было указано выше. В этом случае столбец максимальной длины заведомо входит в определяющую систему столбцов.

Последнее вытекает из следующего общего наблюдения. Пусть имеются векторы $w_1, \ldots, w_r$, среди них есть хотя бы один ненулевой вектор и все ненулевые векторы попарно различны. Пусть числа $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$ неотрицательны, их сумма не больше 1 и ни одно из них не равно 1. Тогда

$$\left\| \sum_{1\leq i\leq r} \alpha_i w_i \right\| < \max_{1\leq i\leq r} \|w_i\|.$$

В самом деле, не ограничивая общности, можно считать, что все векторы ненулевые. Если $r = 2$, то неравенство имеет ясный геометрический смысл: в треугольнике ABC для любой точки на отрезке BC, отличной от вершин, длина отрезка AP строго меньше длины наибольшей из сторон AB и AC. В вырожденном случае, когда AB и AC коллинеарны, точка P будет лежать между точками B и C на отрезке BC, значит, длина AP строго меньше длины наибольшего из векторов AB и AC. При $r \geq 3$ очевидным образом применяется индукция.

Итак, столбец максимальной длины матрицы M входит в искомую определяющую систему. Чтобы получить остальные столбцы, вычтем из каждого столбца его ортогональную проекцию на линейную оболочку найденного вектора. Преобразованная таким образом матрица, обозна-

Алгоритм 1. Алгоритм Гиллиса—Вавасиса [10]

Дано: M — нормированная r-сепарабельная $m \times n$-матрица ранга r.

Найти: Множество J, содержащее номера столбцов определяющей системы матрицы M.

$R = M,\ J = \{\},\ j = 1;$

while $R \neq 0\ \&\ j \leq r$ **do**

  $j^* = \operatorname{argmax}_j \|R_{:j}\|_2^2;$

  $u_j = R_{:j^*};$

  $R \leftarrow \left(I - \dfrac{u_j u_j^{\mathrm{T}}}{\|u_j\|_2^2}\right) R;$

  $J = J \cup \{j^*\};$

  $j = j + 1;$

end

чим ее через M', в общем случае уже не будет неотрицательной. Но она останется r-сепарабельной матрицей с разложением вида $M' = W'H$, в котором один из столбцов матрицы W' нулевой, а остальные линейно независимы. Действительно, пусть j-й столбец матрицы M равен

$$m_j = \sum_{i=1}^{r} h_{ij} w_i$$

и для каждого столбца w_i записано разложение $w_i = u_i + v_i$ по одной и той же паре ортогональных подпространств. Тогда в аналогичном разложении вектора $m_j = z_j + p_j$ получаем

$$z_j = \sum_{i=1}^{r} h_{ij} u_i.$$

Заметим, что номера определяющих столбцов матрицы M' те же, что и для матрицы M. При этом уже найденный нами определяющий столбец матрицы M соответствует нулевому столбцу матрицы M'. Если $r \geq 2$, то столбец максимальной длины в матрице M' не может быть нулевым. Но мы знаем, что он входит в определяющую систему для M', а значит, и в определяющую систему для M. Таким образом, мы имеем уже два определяющих столбца матрицы M. Продолжая в том же духе, найдем все столбцы искомой определяющей системы.

Краткое формальное описание изложенных преобразований приводится ниже в виде псевдокода. Это и есть алгоритм Гиллиса—Вавасиса [10]. На его вход подается произвольная нормированная r-сепарабельная матрица ранга r, ее неотрицательность не требуется. Выше мы уже видели, что в случае неотрицательной матрицы необходимую нормировку можно выполнить достаточно просто. Это должно быть сделано перед применением алгоритма.

В алгоритме Гиллиса—Вавасиса выполняется $O(mnr)$ арифметических операций. В работах [2]—[5] было показано, что для матриц ранга r скелетные разложения могут быть построены с использованием специально выбранных r столбцов и r строк заданной матрицы. Соответствующие методы обычно называются *крестовыми*. В них для получения разложений достаточно памяти для хранения порядка $(m+n)r$ чисел, и в случае $m = n$ сложность зависит от n линейно, а не квадратично. Более точно вычислительные затраты составляют порядка $(m+n)r^2$ операций.

Будем считать, что у нас уже есть разложение вида $M = UV$, где матрицы U и V имеют r столбцов и r строк соответственно, но в этих матрицах допускается наличие отрицательных элементов. Получив U и V и далее используя только их, мы предлагаем *редуцированный алгоритм* вычисления неотрицательной факторизации матрицы M существенно меньшей сложности, чем алгоритм Гиллиса—Вавасиса.

Пусть мы знаем, что произведение $M = UV$ является неотрицательной r-сепарабельной матрицей ранга r. Тогда вектор-строка

$$d = (eU)V, \quad e = [1, \ldots, 1],$$

содержит n элементов и может быть найдена с затратой $2(m+n)r$ арифметических операций (сначала вычисляем строку eU, а затем умножаем результат на матрицу V). Очевидно, что d_j есть сумма элементов j-го столбца матрицы M. Составим из них диагональную матрицу порядка n и каждый нулевой элемент главной диагонали, если таковые есть, заменим на 1. Полученную диагональную матрицу обозначим через D. Очевидно, матрица $\tilde{M} = MD^{-1}$ будет нормированной r-сепарабельной.

Лемма 1. *Если M является неотрицательной r-сепарабельной матрицей ранга r, то $\tilde{V} = VD^{-1}$ также будет нормированной r-сепарабельной матрицей ранга r.*

Доказательство. Для матрицы $\tilde{M} = MD^{-1}$ имеет место разложение WH, где матрица W имеет r линейно независимых столбцов, а матрица H содержит единичную подматрицу порядка r, все ее элементы неотрицательны и сумма элементов в каждом столбце не больше 1. Из равенства $U\tilde{V} = WH$ получаем $\tilde{V} = \tilde{W}H$, где $\tilde{W} = (U^{\mathrm{T}}U)^{-1}U^{\mathrm{T}}W$.

Лемма 2. *Определяющие столбцы матрицы $\tilde{V}$ соответствуют определяющим столбцам матрицы M.*

Доказательство. Достаточно принять во внимание, что нормировка никак не влияет на порядок столбцов, поэтому у M и $\tilde{M} = MD^{-1}$ совпадают множества индексов определяющих столбцов. Остается заметить, что из равенств $\tilde{M} = U\tilde{V}$ и $\tilde{V} = \tilde{W}H$ сразу же следует, что $\tilde{M} = (U\tilde{W})H$.

Объединяя наши рассуждения, можно сформулировать следующую теорему.

Теорема 1. *Пусть матрица M является неотрицательной сепарабельной матрицей ранга r. Если известно некоторое разложение $M = UV$, $U \in R^{m\times r}$, $V \in R^{n\times r}$, то число действий для построения неотрицательной матричной факторизации будет линейно зависеть от размеров матрицы.*

Доказательство. Из лемм 1 и 2 следует, что матрица $\tilde{V} = VD^{-1}$ является нормированной r-сепарабельной матрицей ранга r, причем ее определяющие столбцы соответствуют определяющим столбцам матрицы M. Значит, чтобы найти определяющие столбцы матрицы M, достаточно применить алгоритм 1 не к исходной матрице размера $m\times n$, а к $\tilde{V} = VD^{-1}$, у которой $r\times n$ элементов. Число требуемых арифметических операций оценивается как $O(r^2 n)$.

Ранее обсуждалось, как найти матрицу D, а точнее вектор-строку d на ее диагонали, за $2(m+n)r$ операций. Чтобы вычислить $\tilde{V} = VD^{-1}$, нужно поделить каждый столбец V на соответствующий элемент d, что потребует еще rn арифметических операций. В итоге, просуммировав число действий на поиск определяющих столбцов M, мы получим линейную зависимость от суммы размеров матрицы.

Ниже представлен предлагаемый нами редуцированный алгоритм.

При работе с большими объемами данных имеет смысл использовать описанный метод в целях ускорения вычислений, его преимущество по сравнению с алгоритмом 1 наглядно продемонстрировано в разд. 6, посвященном численным экспериментам.

3. ВОЗМУЩЕННЫЕ СЕПАРАБЕЛЬНЫЕ МАТРИЦЫ

Пусть A — нормированная сепарабельная матрица ранга r, а предложенный нами редуцированный алгоритм применяется к факторизации возмущенной матрицы $\tilde{A} = A + E$, где евклидова длина каждого столбца матрицы E не выше $\varepsilon > 0$. Очевидно, что при достаточно малых возмущениях алгоритм Гиллиса—Вавасиса найдет возмущенные векторы определяющей системы исходной матрицы M. Существенно более трудный вопрос — выяснить, насколько малыми должны быть возмущения и как именно зависит от них точность приближений. В [10] получены некоторые конкретные, хотя и завышенные оценки в ситуации, когда максимизируется не длина, а произвольно взятая сильно выпуклая функция вектора. Практического смысла в таком обобщении, как признают сами авторы, им выявить не удалось. В этом разделе мы дадим более простой вывод оценок того же типа в случае максимизации именно длины и применим их для анализа нашего редуцированного алгоритма в условиях возмущений.

Прежде всего нам нужно исследовать ситуацию, когда при поиске вектора наибольшей длины в возмущенной матрице будет выбран столбец, соответствующий нетривиальной выпуклой ком-

Алгоритм 2. Редуцированный алгоритм

Дано: Вещественные матрицы U и V размеров $m \times r$ и $n \times r$ соответственно. Предполагается известным, что произведение $M = UV$ является неотрицательной r-сепарабельной матрицей ранга r.

Найти: Множество индексов J, соответствующих определяющей системе M.

```
d = eU, e = [1, …, 1]
d = dV
for (j = 1; j ≤ n; i = i + 1) {
  │ for (i = 1; i ≤ r; i = i + 1) {
  │   │ ṽ_ij = v_ij/d_j
  │ }
}
Алгоритм 1 применяется к матрице Ṽ.
```

бинации определяющих столбцов исходной (невозмущенной) сепарабельной матрицы. При некотором ограничении на возмущение мы покажем, что найденный столбец будет, тем не менее, близок к какому-то из столбцов определяющей системы исходной матрицы. Чтобы это сделать, мы будем опираться на следующую лемму.

Лемма 3. *Для произвольных векторов* $a_1, \ldots, a_k$ *и их выпуклой комбинации с коэффициентами* $\alpha_1, \ldots, \alpha_k$ *справедливо тождество*

$$\left\|\sum_{i=1}^{k}\alpha_i a_i\right\|^2 = \sum_{i=1}^{k}\alpha_i\|a_i\|^2 - \sum_{1\le i<j\le k}\alpha_i\alpha_j\|a_i - a_j\|^2.$$

Доказательство. При $k = 2$ получаем легко проверяемое равенство

$$\|\alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2\|^2 = \alpha_1\|a_1\|^2 + \alpha_2\|a_2\|^2 - \alpha_1\alpha_2\|a_1 - a_2\|^2.$$

При $k > 2$ применяем индукцию

$$\left\|\sum_{i=1}^{k}\alpha_i a_i\right\|^2 = \left\|\alpha_1 a_1 + (1-\alpha_1)\sum_{i=2}^{k}\frac{\alpha_i}{1-\alpha_1}a_i\right\|^2 = \alpha_1\|a_1\|^2 + (1-\alpha_1)\left\|\sum_{i=2}^{k}\frac{\alpha_i}{1-\alpha_1}a_i\right\|^2 -$$

$$-\alpha_1(1-\alpha_1)\left\|\sum_{i=2}^{k}\frac{\alpha_i}{1-\alpha_1}(a_i - a_1)\right\|^2 = \alpha_1\|a_1\|^2 + (1-\alpha_1)\left(\sum_{i=2}^{k}\frac{\alpha_i}{1-\alpha_1}\|a_i\|^2 - \sum_{2\le i<j\le k}\frac{\alpha_i\alpha_j}{(1-\alpha_1)^2}\|a_i - a_j\|^2\right) -$$

$$-\alpha_1(1-\alpha_1)\left(\sum_{i=2}^{k}\frac{\alpha_i}{1-\alpha_1}\|a_i - a_1\|^2 - \sum_{2\le i<j\le k}\frac{\alpha_i\alpha_j}{(1-\alpha_1)^2}\|a_i - a_j\|^2\right) = \sum_{i=1}^{k}\alpha_i\|a_i\|^2 - \sum_{j=2}^{k}\alpha_1\alpha_j\|a_1 - a_j\|^2 -$$

$$-\sum_{2\le i<j\le k}\alpha_i\alpha_j\|a_i - a_j\|^2 = \sum_{i=1}^{k}\alpha_i\|a_i\|^2 - \sum_{1\le i<j\le k}\alpha_i\alpha_j\|a_i - a_j\|^2.$$

Следствие 1. Для произвольной выпуклой комбинации заданных векторов имеет место неравенство

$$\left\|\sum_{i=1}^{k}\alpha_i a_i\right\|^2 \le \max_{1\le i\le k}\|a_i\|^2 - \left(\sum_{1\le i<j\le k}\alpha_i\alpha_j\right)\min_{1\le i<j\le k}\|a_i - a_j\|^2.$$

Отметим еще одно интересное следствие, которое в данной работе не используется, но может быть полезно при работе с сильно выпуклыми функциями. Так называются выпуклые функции f, для которых выполняется неравенство

$$f(tx + (1-t)y) \le tf(x) + (1-t)f(y) - \gamma t(1-t)\|x - y\|^2, \quad 0 \le t \le 1,$$

где γ — положительное число, называемое *параметром* сильной выпуклости, а x и y — произвольные векторы, принадлежащие выпуклой области определения функции f.

Следствие 2. Для произвольной сильно выпуклой функции f с параметром сильной выпуклости γ и произвольной выпуклой комбинации векторов $a_1, \ldots, a_k$ имеет место неравенство

$$f\left(\sum_{i=1}^{k}\alpha_i a_i\right) \le \sum_{i=1}^{k}\alpha_i f(a_i) - \gamma\sum_{1\le i<j\le k}\alpha_i\alpha_j\left\|a_i - a_j\right\|^2.$$

Доказательство проводится по индукции в полной аналогии с доказательством леммы 3 и с использованием установленного в ней тождества. В литературе нами было найдено эквивалентное данному неравенство только для случая, когда $a_1, \ldots, a_k$ — вещественные числа (см. [16]).

Для вывода оценок нам нужны некоторые величины, связанные с системой столбцов $a_1, \ldots, a_k$ или составленной из них матрицы A:

$$\mu = \mu(A) = \max_{1\le i\le k}\left\|a_i\right\|, \quad \gamma = \gamma(A) = \min_{1\le i\le k}\left\|a_i\right\|, \quad \omega = \omega(A) = \min_{1\le i<j\le k}\left\|a_i - a_j\right\|.$$

Полученную выше оценку длины выпуклой комбинации вида

$$b = \sum_{i=1}^{k}\alpha_i a_i$$

можно записать в виде неравенства

$$\left\|b\right\|^2 \le \mu^2 - \left(\sum_{1\le i<j\le k}\alpha_i\alpha_j\right)\omega^2.$$

Лемма 4. *Предположим, что в* ε*-окрестности вектора* b *имеется вектор, длина которого не меньше* μ*, и пусть* a_j *— вектор с наибольшим коэффициентом* α_j*. Тогда для всех достаточно малых* ε *справедливы оценки*

$$1 - \alpha_j = O\left(\frac{\mu}{\omega^2}\varepsilon\right), \tag{1}$$

$$\left\|b - a_j\right\| = O\left(\frac{\mu^2}{\omega^2}\varepsilon\right). \tag{2}$$

Доказательство. Если $\alpha_j = 1$, то утверждение очевидно. Полагаем далее, что $\alpha_j < 1$. Пусть вектор e имеет длину $\left\|e\right\| \le \varepsilon \le \mu$ и при этом $\left\|b + e\right\| \ge \mu$. Тогда, согласно следствию 1, имеем

$$\left(\sum_{1\le i<j\le k}\alpha_i\alpha_j\right)\omega^2 \le \mu - \left\|b\right\|^2 \le \left\|b + e\right\|^2 - \left\|b\right\|^2 \le (2\left\|b\right\| + \left\|e\right\|)\varepsilon \le 3\mu\varepsilon.$$

Принимая во внимание равенство

$$\sum_{1\le i<j\le k}\alpha_i\alpha_j = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}\alpha_i(1 - \alpha_i),$$

находим

$$\alpha_j(1 - \alpha_j) \le c\varepsilon, \quad c = \frac{6\mu}{\omega^2}.$$

Будем считать, что $4c\varepsilon \le 1/k$. Тогда заведомо $\sqrt{1 - 4c\varepsilon} \ge 1 - 4c\varepsilon$ и, следовательно, имеются две возможности:

$$\alpha_j \ge \frac{1 + \sqrt{1 - 4c\varepsilon}}{2} \ge 1 - 2c\varepsilon \tag{3}$$

или

$$\alpha_j \le \frac{1 - \sqrt{1 - 4c\varepsilon}}{2} \le 2c\varepsilon. \tag{4}$$

Случай (4) приводит к противоречию между условием $4c\varepsilon \le 1/k$ и максимальностью коэффициента α_j:

$$1 = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \le k \cdot \max_{1 \le i \le k} \alpha_i \le k \cdot 2c\varepsilon \Rightarrow 4c\varepsilon > 1/k.$$

Значит, справедливы неравенства $\alpha_j \ge 1 - 2c\varepsilon$, $1 - \alpha_j \le 2c\varepsilon$ и, далее,

$$\|b - a_j\| = \left\| \sum_{i \ne j} \alpha_i (a_i - a_j) \right\| \le 2(1 - \alpha_j)\mu \le 4c\mu\varepsilon.$$

Замечание. Условие малости ε можно записать в виде $\varepsilon \le \min\left\{c_1 \dfrac{\sigma_r^2}{r\mu}, \mu\right\}$, а его следствие – в виде неравенства $\|b - a_j\| \le c_2 \dfrac{\mu^2}{\omega^2}\varepsilon$, если взять, например, $c_1 = \dfrac{1}{12}$ и $c_2 = 12$.

Следующая теорема – это ключевой результат анализа возмущений. Его прототипом служит теорема из [10], полученная там для алгоритма, в котором на каждом шаге выбирается столбец, максимизирующий заданную сильно выпуклую функцию. В частности, такой функцией является квадрат длины вектора.

Теорема 2. *Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ – нормированная сепарабельная матрица ранга r, и предположим, что алгоритм Гиллиса–Вавасиса применяется к возмущенной матрице $\tilde{A} = A + E$, где длина каждого столбца матрицы E не превышает ε, и находит столбцы $\tilde{a}_{i_1}, \ldots, \tilde{a}_{i_r}$. Тогда определяющие столбцы матрицы A можно занумеровать таким образом, что при всех достаточно малых ε имеют место неравенства*

$$\|\tilde{a}_{i_k} - a_{j_k}\| \le \left(1 + c\frac{\mu^2}{\sigma_r^2}\right)\varepsilon, \quad k = 1, \ldots, r,$$

где μ – наибольшая длина столбцов матрицы A, σ_r – минимальное сингулярное число $m \times r$-матрицы, составленной из столбцов определяющей системы матрицы A, c – некоторая положительная константа.

Доказательство. Пусть $W = [w_1, \ldots, w_r]$ – матрица, составленная из определяющих столбцов матрицы A, и σ_r – ее минимальное сингулярное число. Тогда $\|Wx\| \ge \sigma_r \|x\|$ для любого $x \in \mathbb{R}^r$ и, следовательно,

$$\|w_i\| \ge \sigma_r, \quad \|w_i - w_j\| \ge \sqrt{2}\sigma_r.$$

Чтобы вывести первое неравенство, в качестве x надо взять i-й столбец единичной матрицы порядка r. Чтобы получить второе, в качестве x надо взять разность i-го и j-го столбцов единичной матрицы. Таким образом,

$$\mu = \mu(W) \ge \sigma_r, \quad \omega = \omega(W) \ge \sqrt{2}\sigma_r,$$

а оценку леммы 4 для первого шага алгоритма можно записать в виде

$$\|a_{i_1} - a_{j_1}\| = O\left(\frac{\mu^2}{\sigma_r^2}\varepsilon\right).$$

После выбора вектора $\tilde{a}_{i_1}$ из каждого столбца матрицы $\tilde{A}$ вычитается ортогональная проекция на выбранный столбец. В результате получается матрица

$$\tilde{A}_1 = Q_1\tilde{A}, \quad Q_1 = I - q_1 q_1^{\mathrm{T}}, \quad q_1 = \frac{\tilde{a}_{i_1}}{\|\tilde{a}_{i_1}\|},$$

близкая к нормированной сепарабельной матрице $A_1 = Q_1 A$. Пусть $A = WH$. Тогда $A_1 = W_1 H$, где $W_1 = Q_1 W$, и, следовательно, коэффициенты выпуклых комбинаций в разложении столбцов матрицы A_1 те же, что и для матрицы A. На втором шаге в матрице $\tilde{A}_1$ будет выбран столбец с номером $i_2 \neq i_1$. Если столбец a_{i_2} входит в определяющую систему матрицы A, то $j_2 = i_2$ и $\|\tilde{a}_{i_2} - a_{i_2}\| \le \varepsilon$. В противном случае пусть номер j_2 соответствует наибольшему элементу столбца i_2 матрицы H. Обозначим этот элемент через α_{j_2}. Тогда, согласно лемме 4, получим

$$1 - \alpha_{j_2} = O\left(\frac{\mu(W_1)}{\omega^2(W_1)}\varepsilon\right).$$

Очевидно, что $\mu(W_1) \le \mu = \mu(W)$. Для определенности будем считать, что $w_1 = a_{j_1}$, и рассмотрим подматрицу $\hat{W} = [w_2, \ldots, w_r]$ в W и соответствующую ей подматрицу $\hat{W}_1 = Q_1\hat{W}$ в матрице W_1. Первый столбец матрицы W_1 равен $Q_1 a_{j_1} \approx Q_1\tilde{a}_{i_1} = 0$ и, следовательно, его длина достаточно мала при малых ε. Значит, при достаточно малых ε находим

$$\omega(W_1) \ge \min\{\gamma(\hat{W}_1) - \|Q_1 w_1\|, \omega(\hat{W}_1)\} \ge c_1\sigma_{r-1}(\hat{W}_1),$$

где $\sigma_{r-1}(\hat{W}_1)$ – минимальное сингулярное число матрицы $\hat{W}_1$ и c_1 – некоторая положительная константа. Пусть V_1 получается из W_1 заменой первого столбца на нулевой столбец. Тогда

$$\sigma_{r-1}(\hat{W}_1) = \sigma_{r-1}(V_1) \ge \sigma_{r-1}(W_1) - \|Q_1 w_1\|.$$

Теперь заметим, что $\sigma_{r-1}(W_1) \ge \sigma_r(W)$. Это следует из соотношений разделения для собственных значений эрмитовой матрицы $W^{\mathrm{T}}W$ и матрицы $W_1^{\mathrm{T}}W_1$, которая получается из нее вычитанием эрмитовой положительно-определенной матрицы ранга 1. Действительно,

$$W_1^{\mathrm{T}}W_1 = W^{\mathrm{T}}(I - q_1q_1^{\mathrm{T}})^2W = W^{\mathrm{T}}(I - q_1q_1^{\mathrm{T}})W = W^{\mathrm{T}}W - (W^{\mathrm{T}}q_1)(W^{\mathrm{T}}q_1)^{\mathrm{T}}.$$

Нумеруя собственные значения в порядке невозрастания, получаем (см., например, теорему 5.9 из [17])

$$\lambda_{i-1}(W_1^{\mathrm{T}}W_1) \ge \lambda_i(W^{\mathrm{T}}W) \ge \lambda_i(W_1^{\mathrm{T}}W_1), \quad 2 \le i \le r.$$

Итак, имеем

$$\sigma_{r-1}(\hat{W}_1) \ge \sigma_r(W) - \|Q_1 w_1\|.$$

Следовательно, при малых ε получаем

$$1 - \alpha_{j_2} = O\left(\frac{\mu(W)}{\sigma_r^2(W)}\varepsilon\right) \Rightarrow \|a_{i_2} - a_{j_2}\| \le \varepsilon + O\left(\frac{\mu^2(W)}{\sigma_r^2(W)}\varepsilon\right).$$

Мы провели анализ первого и второго шага алгоритма Гиллиса–Вавасиса. Те же построения дают оценки для последующих шагов.

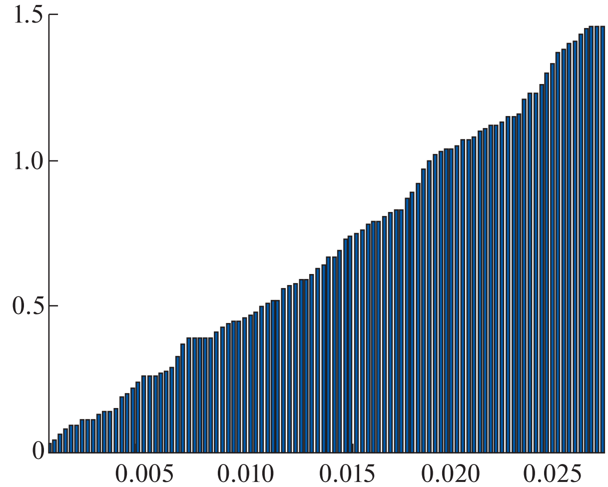
В следующей теореме исследуется применение редуцированного алгоритма к факторизации, полученной каким-либо вариантом крестового метода [3]. Ниже используется норма Фробениуса $\|E\|_F$, определяемая как корень квадратный из суммы квадратов всех элементов матрицы.

Теорема 3. *Пусть $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ – нормированная сепарабельная матрица ранга r и рассматривается возмущенная матрица $\tilde{A} = A + E$, где $\|E\|_F \le \varepsilon$. Тогда существуют такие r столбцов C и r строк R матрицы $\tilde{A}$, дающие в пересечении $r \times r$-матрицу G, что применение редуцированного алгоритма к факторизации $CG^{-1}R$ находит столбцы $\tilde{a}_{i_1}, \ldots, \tilde{a}_{i_r}$, которые при некоторой нумерации определяющих столбцов матрицы A при всех достаточно малых ε удовлетворяют неравенствам*

$$\|\tilde{a}_{i_k} - a_{j_k}\| \le O\left(r\frac{\mu^2}{\sigma_r^2}\varepsilon\right), \quad k = 1, \ldots, r,$$

где μ – наибольшая длина столбцов матрицы A, σ_r – минимальное сингулярное число $m \times r$-матрицы, составленной из столбцов определяющей системы матрицы A.

Доказательство. В работе [18] доказано существование r столбцов и r строк, гарантирующих неравенство $\|CG^{-1}R - \tilde{A}\|_F \le (r+1)\varepsilon$. Остается принять во внимание оценки теоремы 2.



Фиг. 1. Процент (из 10 тысяч) нетривиальных выпуклых комбинаций определяющих векторов, норма которых при возмущении больше $\mu(W)$, в зависимости от возмущения.

Заметим также, что аппроксимации ранга r могут строиться на основе большего, чем r, числа столбцов и строк (см. [19], [20]). Выбирая, например, $2r$ столбцов и строк, мы можем гарантировать поэлементную оценку погрешности, в которой уже нет зависимости от r.

Интересным представляется вопрос, насколько точны полученные теоретические оценки и какова вероятность, что алгоритм выберет на некотором шаге вектор не из определяющей системы. Мы провели следующий эксперимент. Были сгенерированы матрицы $W \in R^{10\times 2}$ и $H \in R^{2\times 10000}$, элементы которых – равномерно распределенные на отрезке $[0;1]$ числа. Затем столбцы матрицы H были нормированы, чтобы сумма каждого была равна 1. Далее было подсчитано, как указано в замечании к 4, максимальное значение ε. После этого были рассмотрены 100 значений $\tilde{\varepsilon}$ от 0 до ε, к каждому столбцу $M = WH$ прибавлялся вектор $\frac{\tilde{\varepsilon}}{\sqrt{n}}e$, норма которого равна $\tilde{\varepsilon}$. Мы считали, сколько векторов в возмущенной матрице $M = WH$ по норме превзошли $\mu(W)$. Результаты представлены на фиг. 1. Даже при максимальном возмущении доля нетривиальных выпуклых комбинаций определяющих векторов, норма которых при возмущении больше $\mu(W)$, меньше 1.5%.

4. РЕДУЦИРОВАННЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ СИММЕТРИЧНОЙ НЕОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ

В [13] предложен метод построения симметричной неотрицательной факторизации $M = WW^{\mathrm{T}}$ для симметричных неотрицательных матриц $M \in \mathbb{R}^{m\times m}$ ранга r, содержащих диагональную главную подматрицу ранга r. Напомним, что главная подматрица получается вычеркиванием строк и столбцов с общими номерами. Матрица W определяется однозначно с точностью до перестановки столбцов (см. [13]). Время работы алгоритма, названного авторами IREVA (Identification and Rotation of Extreme Vectors Algorithm), оценивается ими как $O(m^2r)$ для неразреженных матриц.

Однако эту задачу можно решить гораздо быстрее. Для этого нужно заметить, что симметричные неотрицательные матрицы ранга r с диагональной главной подматрицей того же ранга принадлежат классу сепарабельных матриц. Если главную диагональную подматрицу обозначить D, а содержащие ее столбцы S, то справедливо разложение $M = SD^{-1}S^{\mathrm{T}} = S(D^{-1}S^{\mathrm{T}})$. Очевидно, матрица $D^{-1}S^{\mathrm{T}}$ неотрицательна и содержит единичную подматрицу порядка r. Таким образом, M сепарабельна, а S состоит из ее определяющих столбцов. Чтобы их найти, можно применить алгоритм крестовой аппроксимации, а затем редуцированный алгоритм 2. Вместо $O(m^2r)$ потребуется всего $O(mr^2)$ операций.

5. МАТРИЦЫ РАНГА 2

Очевидно, что для произвольной неотрицательной $m \times n$-матрицы имеют место неравенства $\operatorname{rank}(A) \le \operatorname{rank}_+(A) \le \min(m, n)$. Как показано в [14], если $\operatorname{rank}(A) \le 2$, то $\operatorname{rank}_+(A) = \operatorname{rank}(A)$.

Теорема 4. *Любая неотрицательная матрица ранга не выше* 2 *является сепарабельной матрицей того же ранга.*

Доказательство. Если $\operatorname{rank}(A) = 1$, то $A = uv^{\mathrm{T}} = (\gamma|u|)(\gamma^{-1}|v|)^{\mathrm{T}}$, где $\gamma = \max\limits_{1 \le j \le n} |v_j|$, а $|u|$ и $|v|$ обозначают векторы, координаты которых равны абсолютным величинам координат векторов u и v. Если $\operatorname{rank}(A) = 2$, то, разделив каждый столбец матрицы A на сумму его элементов, получим стохастическую матрицу с тем же неотрицательным рангом. Поэтому без ограничения общности можно считать A стохастической матрицей. Если a и b – какие-то линейно независимые столбцы, то j-й столбец записывается в виде линейной комбинации $a_j = \alpha_j a + \beta_j b$, где в силу стохастичности $\alpha_j + \beta_j = 1$. Пусть β_k и β_l – минимальное и максимальное среди чисел $\beta_1, \ldots, \beta_n$. Тогда, поскольку $\beta_k \le \beta_j \le \beta_l$, можно найти числа δ_j такие, что

$$\beta_j = (1 - \delta_j)\beta_k + \delta_j\beta_l, \quad \alpha_j = (1 - \delta_j)\alpha_k + \delta_j\alpha_l, \quad 0 \le \delta_j \le 1.$$

Отсюда

$$\begin{aligned} a_j &= \alpha_j a + \beta_j b = ((1 - \delta_j)\alpha_k + \delta_j\alpha_l)a + ((1 - \delta_j)\beta_k + \delta_j\beta_l)b = \\ &= (1 - \delta_j)(\alpha_k a + \beta_k b) + \delta_j(\alpha_l a + \beta_l b) = (1 - \delta_j)a_k + \delta_j a_l. \end{aligned}$$

Значит, любой столбец матрицы A является выпуклой комбинацией ее столбцов a_k и a_l.

Следствие 3. Если $A \ge 0$ и $\operatorname{rank}_+(A) \le 3$, то $\operatorname{rank}_+(A) = \operatorname{rank}(A)$.

Доказательство. Пусть $\operatorname{rank}_+(A) = 3$. Как установлено выше, если $\operatorname{rank}(A) \le 2$, то $\operatorname{rank}_+(A) = \operatorname{rank}(A)$. Следовательно, $\operatorname{rank}(A) = 3$. Остальные случаи разбираются аналогично.

Теорема 5. *Если для неотрицательной $m \times n$-матрицы A ранга* 2 *известно скелетное разложение $A = UV$, где $U \in R^{m\times 2}$ и $V \in R^{2\times n}$, то для получения неотрицательной факторизации ранга* 2 *достаточно выполнить число операций, линейно зависящее от суммы размеров матрицы A.*

Доказательство. Линейного числа операций достаточно для того, чтобы получить разложение $A = UV$, в котором V содержит единичную матрицу порядка 2. Тогда $U = [a, b]$ состоит из двух линейно независимых столбцов матрицы A. Матрицы A, U, V можно считать стохастическими (чтобы провести соответствующую нормировку, достаточно линейного числа операций). Пусть $\beta_1, \ldots, \beta_n$ – элементы второй строки матрицы V. Согласно описанным выше построениям, найдем среди них минимальный β_{j_*} и максимальный β_{j^*}. Тогда пара столбцов матрицы A с номерами j_* и j^* составляют W, для определения H можно воспользоваться крестовым разложением, достаточно найти в W невырожденную подматрицу размера 2×2. Все эти действия требуют линейного числа операций.

Ниже приведен алгоритм для построения факторизации матриц ранга 2. Напомним, что D_X – диагональная матрица, в которой i-й элемент диагонали равен сумме элементов i-го столбца матрицы X, если он ненулевой, а в противном случае этот элемент равен 1.

6. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Проведем сравнение алгоритма Гиллиса–Вавасиса (1) и предложенного нами метода, когда сначала строится крестовое разложение матрицы, которое затем подается на вход редуцированному алгоритму 2. Такой двухэтапный метод будем называть алгоритмом 2+. Весь код для проведения численных экспериментов был написан в Matlab. При построении крестового разложения использовались функции из библиотеки ”TT-Toolbox” (см. [21]).

Алгоритм 3. Неотрицательная факторизация матриц ранга 2

Дано: $A \in R_{+}^{m\times n}$, $\operatorname{rank}(A) = 2$.

Найти: Матрицы $W \in R_{\geq 0}^{m\times 2}$, $H \in R_{\geq 0}^{2\times n}$: $A = WH$.

Строится крестовое разложение A: $A = UV$.

$\tilde{V} = D_U V$

$\tilde{V} = \tilde{V} D_{\tilde{V}}^{-1}$

$i_* = i : \tilde{v}_{2i} = \min_{1\leq i\leq n} \tilde{v}_{2i}$

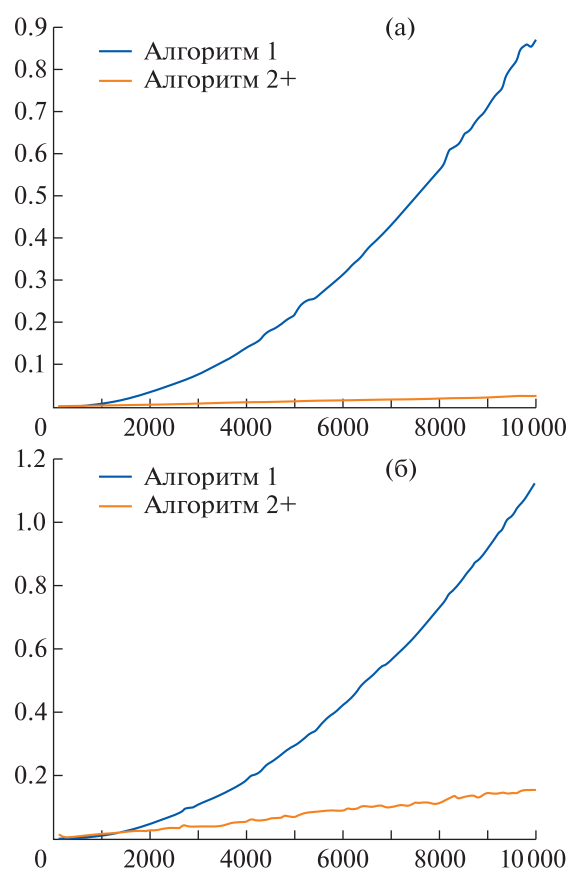
$i^* = i : \tilde{v}_{2i} = \max_{1\leq i\leq n} \tilde{v}_{2i}$

$W = [a_{i_*} a_{i^*}]$

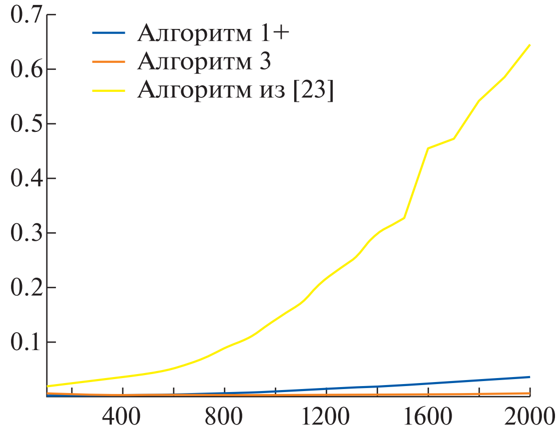
Найти в W строки p и s: подматрица $\begin{bmatrix} w_{p1} & w_{p2} \\ w_{s1} & w_{s2} \end{bmatrix}$ невырожденная.

$H = \begin{bmatrix} w_{p1} & w_{p2} \\ w_{s1} & w_{s2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} a_{p1} & \dots & a_{pn} \\ a_{s1} & \dots & a_{sn} \end{bmatrix}$

Для численных экспериментов сепарабельные матрицы $M \in R_{+}^{n\times n}$ ранга r генерировались следующим образом. Сначала матрицы $W \in R^{n\times r}$ и $H' \in R^{r\times(n-r)}$ заполняются модулями нормально распределенных чисел, $H = [I_r H']$, при этом столбцы H нормируются так, чтобы сумма элементов в каждом была равна 1, и случайным образом перемешиваются. Итоговая матрица M равна произведению W и H.



Фиг. 2. Зависимость времени работы алгоритмов 1 и 2+ от размера матрицы. (а) $r = 3$; (б) $r = 10$.



Фиг. 3. Сравнение времени работы алгоритмов 1+, 3 и метода из [23] в зависимости от размера матрицы ранга 2.

Рассматривались n от 100 до 10 000 с шагом 100, для каждого n строились 100 матриц M, которые подавались на вход алгоритмам 1 и 2+. На фиг. 2 приведены графики зависимости времени работы от n при фиксированных r. Программная реализация алгоритма 1 была взята из [22].

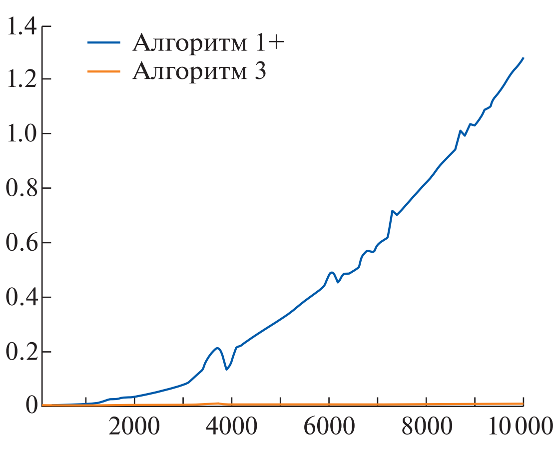
Во всех случаях оба алгоритма верно определили столбцы W. График времени работы нового метода демонстрирует линейную зависимость от размера, алгоритм 1 – квадратичную.

Для случая неотрицательной матричной факторизации ранга 2 было проведено сравнение работы трех алгоритмов: алгоритма 3; алгоритма 1 при $r = 2$, матрица H затем находилась так же, как в алгоритме 3 (назовем такой двухэтапный метод алгоритмом 1+); метода, описанного в [23] (исходный код взят из [24]).

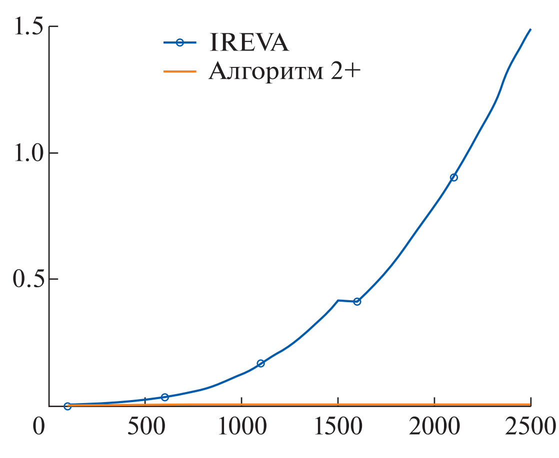
Матрицы для экспериментов строились так же, как было описано выше, $r = 2$. На графике 3 демонстрируется время работы каждого из заявленных трех алгоритмов при изменении n от 100 до 2000 с шагом, равным 100. При этом для каждого n было проведено 100 экспериментов, результаты затем усреднялись.

Было получено, что алгоритмы 1+ и 3 верно построили разложение исходной матрицы, в то время как метод из [23] дает ошибку, увеличивающуюся с ростом n. Таким образом, приходим к выводу, что метод из [23] проигрывает остальным двум и в точности, и в быстроте.

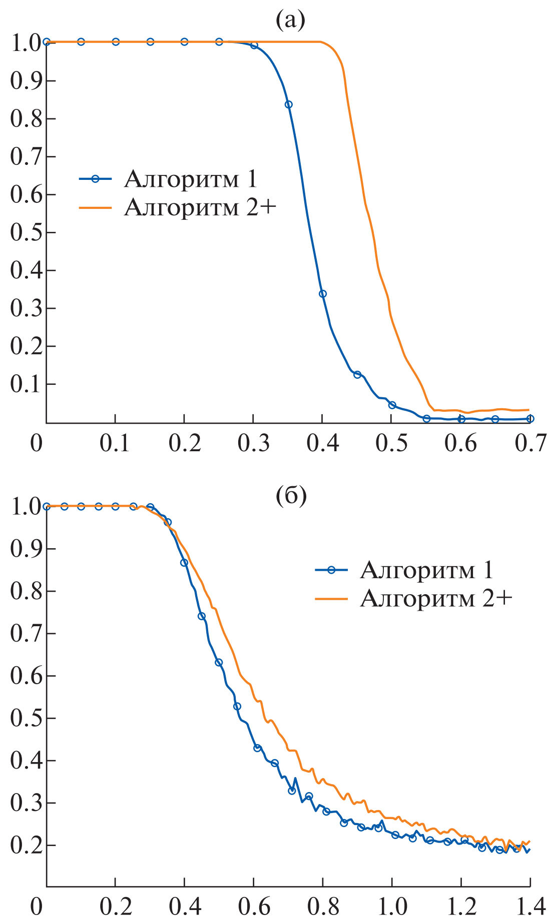
Сравним, как изменяется время работы алгоритмов 1+ и 3 с изменением n от 100 до 10 000 с шагом, равным 100. Результаты представлены на фиг. 4. Как видно, у алгоритма 1+ наблюдается



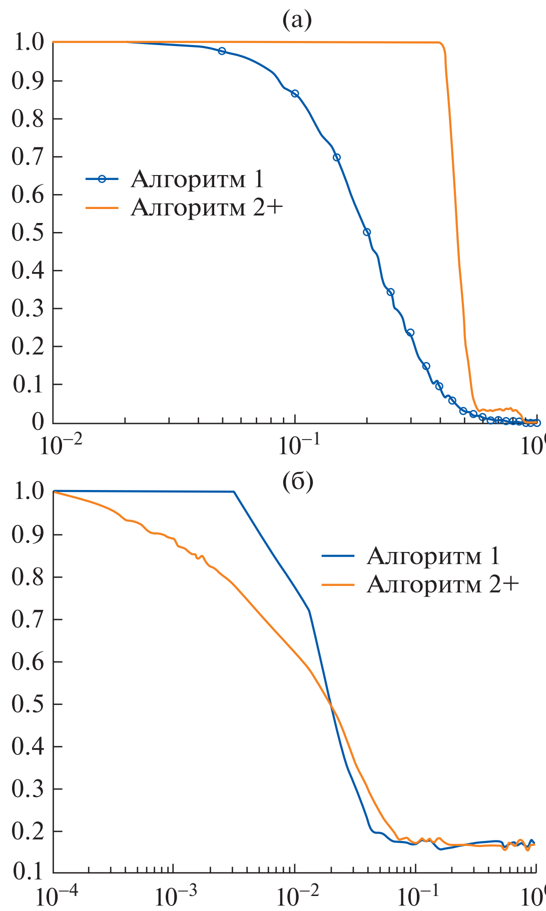
Фиг. 4. Сравнение времени работы алгоритмов 1+ и 3 в зависимости от размера матрицы ранга 2.



Фиг. 5. Сравнение времени работы алгоритмов 2+ и IREVA (см. [13]) в зависимости от размера матрицы, $r = 3$.



Фиг. 6. Сравнение алгоритмов 1 и 2+ для возмущенных сепарабельных матриц. Зависимость доли верно найденных столбцов определяющей системы от δ. (а) эксперимент 1; (б) эксперимент 2.



Фиг. 7. Сравнение алгоритмов 1 и 2+ для возмущенных сепарабельных матриц. Зависимость доли верно найденных столбцов определяющей системы от δ. (а) эксперимент 3; (б) эксперимент 4.

квадратичная зависимость времени работы от размера матрицы, а у алгоритма 3 — линейная, что полностью подтверждает теоретические выкладки.

Как обсуждалось в секции 4, алгоритм 2+ можно применять для построения симметричной неотрицательной факторизации симметричных неотрицательных матриц ранга r, содержащих диагональную главную подматрицу того же ранга. Сравним время его работы и метода IREVA (см. [13]).

Для тестирования генерировались неотрицательные симметричные матрицы $M \in R^{n\times n}_{\geq 0} = WW^{\mathrm{T}}$ ранга r с диагональной главной подматрицей того же ранга. Матрицы $W^{\mathrm{T}} \in R^{r\times n} = [I_r W']$, где $W' \in R^{r\times(n-r)}$ заполняются модулями нормально распределенных чисел, при этом столбцы W' нормируются так, чтобы сумма элементов в каждом была равна 1, и случайным образом перемешиваются.

Алгоритм IREVA можно условно поделить на 2 части. В первой вычисляется матрица $V \in \mathbb{R}^{n\times r}$: $M = VV^{\mathrm{T}}$, у которой первый столбец состоит только из положительных чисел. При реализации метода мы воспользовались предложением из [13] и для построения V использовали комбинацию формулы понижения ранга и разложения Холецкого. Во второй части алгоритма вычисляется ортогональная матрица $R \in \mathbb{R}^{r\times r}$, чтобы перевести столбцы V в $\mathbb{R}^r_+$.

Рассматривались n от 100 до 2500 с шагом 100, для каждого n строились 100 матриц M, которые подавались на вход доработанному алгоритму 2+ и методу IREVA (см. [13]). Ниже приведен график 5 зависимости времени работы от значения n при фиксированном $r = 3$. Как видно, у алгоритма IREVA наблюдается квадратичная зависимость времени работы от размера матрицы, а у алгоритма 2+ – линейная, что согласуется с нашими рассуждениями.

Далее проверим работу алгоритма 2+ для возмущенных сепарабельных матриц. Будем строить матрицы для экспериментов так же, как в [10].

1. Матрица W будет генерироваться двумя способами:

(а) *Равномерное распределение*. Элементы $W \in R^{200\times 20}$ – равномерно распределенные на отрезке [0;1] случайные числа (функция rand() в MATLAB).

(б) *Плохо обусловленная*. Сперва генерируем $W' \in R^{200\times 20}$, как описано в предыдущем пункте. Затем находится SVD представление: $W' = U\Sigma V^{\text{т}}$, $U \in R^{200\times 20}$, $\Sigma \in R^{20\times 20}$, $V \in R^{20\times 20}$. Тогда $W = USV^{\text{т}}$, где S – диагональная матрица, у которой элементы на диагонали равны α^{i-1}, $i = 1, 2, \ldots, 20$, а $\alpha^{19} = 10^{-3}$.

2. Матрицы H, N тоже будут генерироваться двумя способами:

(в) *Средние точки*. Пусть $H = [I_{20}, H'] \in R^{20\times 210}$, где столбцы H' содержат все возможные комбинации 2 ненулевых элементов, равных 0.5, в разных позициях. Поэтому у H' $C_{20}^2 = 190$ столбцов. Таким образом, первые 20 столбцов W совпадают со столбцами M, в то время как оставшиеся 190 являются средним каких-то двух столбцов M. Первые 20 столбцов M не изменяются, а к остальным добавляется шум – $n_i = \delta(m_i - \overline{w})$, $21 \le i \le 210$, $\delta \ge 0$, где $\overline{w}$ – среднее столбцов W.

(г) *Распределения Дирихле и Гаусса*. Пусть $H = [I_{20}, I_{20}, H'] \in R^{20\times 240}$, где столбцы H' получены из распределения Дирихле с r параметрами, выбранными равномерно на $[0,1]$, т.е. сумма элементов в каждом столбце H' равна 1. Значения матрицы шума N – нормально распределенные случайные числа: $n_{ki} \sim \delta N(0,1)$, $1 \le k \le 200$, $1 \le i \le 240$.

В итоге возмущенная сепарабельная матрица $M' = WH + N$ может быть получена четырьмя различными способами путем комбинации W, H и N, построенных как описано выше.

Ниже приведены две таблицы. В табл. 1 указаны измеренные значения параметров исходных матриц, усредненные для всех экспериментов. Они практически полностью совпали с теми, что

Таблица 1. Средние значения параметров для различных экспериментов при генерации зашумленных сепарабельных матриц

Параметр	Эксперимент			
	1	2	3	4
W	(а)	(а)	(б)	(б)
N и H	(в)	(г)	(в)	(г)
$\dfrac{\sigma_1(W)}{\sigma_r(W)}$	10.84	10.84	1000	1000
$\mu(W)$	8.64	8.64	0.41	0.41
$\sigma_r(W)$	2.95	2.95	10^{-3}	10^{-3}
Среднее $\max_i \lVert n_i \rVert \delta^{-1}$	3.06	16.15	0.30	16.15

Таблица 2. Максимальные значения δ для верного определения столбцов W алгоритмом

Алгоритм	Эксперимент			
	1	2	3	4
1	0.24	0.23	0.01	20×10^{-4}
2+	0.39	0.25	0.38	1×10^{-4}

были получены в [10]: максимальное абсолютное отклонение составляет 0.01. Далее проанализировано, при каком наибольшем δ алгоритмы 1 ([10]) и 2+ способны правильно идентифицировать столбцы, входящие в W. Результаты представлены в табл. 2. Заметим, что в экспериментах 1–3 максимальные значения δ для алгоритма 2+ больше. Единственный случай, когда алгоритм 2+ несколько уступил алгоритму 1 в случае возмущенной сепарабельной матрицы – эксперимент 4. Однако отметим, что при этом разница между максимальными δ очень мала, т.е. отличие представляется несущественным.

Итак, в случае возмущенных сепарабельных матриц алгоритм 2+ в большинстве случаев по качеству не уступает исходному алгоритму 1, имея при этом явное преимущество в скорости работы.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложен быстрый метод решения задачи неотрицательной матричной факторизации для неотрицательных сепарабельных матриц, у которых совпадают неотрицательный и обычный ранги. Изучена его работа с неотрицательными возмущенными матрицами и доказано, что он позволяет значительно сократить число операций и затраты памяти, поскольку все другие известные алгоритмы предполагают сложность не меньше $O(mn)$. Также рассмотрена применимость метода для симметричной неотрицательной факторизации симметричных неотрицательных матриц ранга r, содержащих диагональную главную подматрицу того же ранга. Алгоритм 2+ по теоретическим оценкам не сильно уступает исходному методу в случае возмущенных сепарабельных матриц, а численные эксперименты показали, что на практике отличие в точности является очень незначительным.

Также представлен отдельный метод для неотрицательных матриц ранга 2, решающий на практике задачу неотрицательной факторизации за время, линейно зависящее от m и n. Численные эксперименты полностью подтвердили наши теоретические оценки и продемонстрировали преимущество алгоритма 3 перед другими методами как в точности, так и по скорости работы.

В дальнейшем мы планируем продолжить работу над задачей неотрицательной матричной факторизации, когда известен неотрицательный ранг и разрешается использовать лишь несколько столбцов и строк исходной матрицы, чтобы предложить методы ее решения для более широких классов матриц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Vavasis S.A.* On the complexity of nonnegative matrix factorization // SIAM J. Optim. 2008. V. 20. № 3. P. 1364–1377.
2. *Goreinov S.A., Tyrtyshnikov E.E., Zamarashkin N.L.* A theory of pseudo-skeleton approximations // Linear Algebra Appl. 1997. V. 261. P. 1–21.
3. *Tyrtyshnikov E.E.* Incomplete cross approximation in the mosaic-skeleton method // Computing. 2000. V. 64. № 4. P. 367–380.
4. *Goreinov S.A., Tyrtyshnikov E.E.* The maximal-volume concept in approximation by low-rank matrices // Contemporary Mathematics. 2001. V. 208. P. 47–51.
5. *Goreinov S., Oseledets I., Savostyanov D., Tyrtyshnikov E., Zamarashkin N.* How to find a good submatrix // Matrix Methods: Theory, Algorithms and Applications. 2010. P. 247–256.
6. *Donoho D., Stodden V.* When does non-negative matrix factorization give a correct decomposition into parts? // INIPS. 2003.
7. *Arora S., Ge R., Kannan R., Moitra A.* Computing a nonnegative matrix factorization – provably // CoRR. 2011.
8. *Esser E., Moller M., Osher S., Sapiro G., Xin J.* A convex model for nonnegative matrix factorization and dimensionality reduction on physical space // IEEE Transactions on Image Proc. 2012. V. 21. № 7. P. 3239–3252.
9. *Bittorf V., Recht B., Ré C., Tropp J.* Factoring nonnegative matrices with linear programs // NIPS 2012. 2012. P. 1223–1231.
10. *Gillis N., Vavasis S.A.* Fast and robust recursive algorithms for separable nonnegative matrix factorization // IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2014. V. 36. P. 698–714.
11. *Ding C., He X., Simon H.D.* On the equivalence of nonnegative matrix factorization and spectral clustering // Proc. of the SIAM Internat. Conference on Data Mining (SDM'05). 2005. P. 606–610.
12. *Vandendorpe A., Ho H.N., Vanduffel S., Dooren, P.V.* On the parameterization of the creditrisk-plus model for estimating credit portfolio risk // Insurance: Mathematics and Economics. 2008. V. 42. № 2. P. 736–745.

13. *Kalofolias V., Gallopoulos E.* Computing symmetric nonnegative rank factorizations // Linear Algebra Appl. 2012. V. 436. № 2. P. 421–435.
14. *Cohen J., Rothblum U.* Nonnegative ranks, decompositions and factorizations of nonnegative matrices // Linear Algebra and its Applications. 1993. V. 190. P. 149–168.
15. *Gillis N.* Sparse and unique nonnegative matrix factorization through data preprocessing // J. Machine Learning Res. 2012. V. 13. P. 3349–3386.
16. *Bakula M.K.* Jensen–Steffensen inequality for strongly convex functions // M. J. Inequal Appl. 2018. V. 306. P. 1–12.
17. *Тыртышников Е.Е.* Методы численного анализа. М.: Издательский центр “Академия”, 2007.
18. *Замарашкин Н.Л., Осинский А.И.* О существовании близкой к оптимальной скелетной аппроксимации матрицы во фробениусовой норме // Докл. АН. 2018. Т. 479. № 5. С. 489–492.
19. *Zamarashkin N.L., Osinsky A.I.* New accuracy estimates for pseudoskeleton approximations of matrices // Dokl. Math. 2016. V. 94. № 3. P. 643–645.
20. *Osinsky A., Zamarashkin N.* Pseudo-skeleton approximations with better accuracy estimates // Linear Algebra and its Applicat. 2018. V. 537. P. 221–249.
21. *Oseledets I. et al.* TT-Toolbox 2.2, Institute of Numerical Mathematics, Moscow, Russia. 2009–2013. https://github.com/oseledets/TT-Toolbox.
22. *Gillis N.* Fast and robust recursive algorithm for separable NMF [Source code], https://sites.google.com/site/nicolasgillis/code.
23. *Kuang D., Park H.* Fast rank-2 nonnegative matrix factorization for hierarchical document clustering // The 19th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge, Discovery, and Data Mining (KDD’13). 2013. P. 739–747.
24. *Kuang D.* Hierarchical rank-2 NMF for document clustering and topic modeling with visualization [Source code], https://github.com/dakuang/hiernmf2.