Лекция 4. Малоранговая аппроксимация матриц 1

Максим Рахуба

ФКН ВШЭ
Основы матричных вычислений 24/25

Февраль 4, 2024

Факты из лекции 3

Ортопроектора

P на $S \subseteq \mathbb{C}^n$

1) $S = \operatorname{Im}(P)$

2) $P^2 = P$

3) $P^* = P$

$\operatorname{Im}(Q) = S$, $Q^* Q = I$

$P = QQ^*$ – ортопроектор на S

План

Наилучшее приближение матрицей с заданным рангом

Наилучшее приближение матрицей с заданным образом

Оптимизационные задачи, связанные с SVD

Унитарно-инвариантные нормы

Определение

Норма $\|\cdot\|$ — унитарно-инвариантная, если $\forall\ A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ и $\forall$ унитарных $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$, $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$:

$$\|UAV\| = \|A\|.$$

Теорема (Эккарта-Янга-Мирского)

Пусть $k < \operatorname{rank}(A)$ *и*

$$A_k = U_k \Sigma_k V_k^* \quad (\text{усеченное SVD}).$$

тогда

$$\min_{B:\ \operatorname{rank}(B)\leq k} \|A - B\| = \|A - A_k\|$$

для любой унитарно-инвариантной $\|\cdot\|$.

Доказательство для $\|\cdot\|_2$

$$\|A\|_2 = \sup_{\|y\|_2=1} \|Ay\|_2$$

$\dim(\mathrm{Ker}(B)) \geq n-k$

$$\exists\, z \neq 0,\ \|z\|_2=1:\quad z \in \mathrm{Ker}(B) \cap \overbrace{\mathrm{span}\{v_1, \dots, v_{k+1}\}}^{\dim(\cdot) = k+1}$$

$\mathrm{rank}(B) \leq k$

$$\|A-B\|_2 \geq \|(A-B)z\|_2 = \|Az\|_2 = \|\cancel{U}\Sigma V^* z\|_2 =$$

$$= \|\Sigma \underbrace{(V^* z)}_{}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{k+1} \sigma_i^2 |v_i^* z|^2} \geq \sigma_{k+1} \sqrt{\underbrace{\sum_{i=1}^{k+1} |v_i^* z|^2}_{\|V^* z\|_2 \,=\, 1}}$$

$$\begin{pmatrix} * \\ \vdots \\ * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1^* z \\ v_2^* z \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\geq \sigma_{k+1}, \qquad \|A - A_k\|_2 = \|\cancel{U}\left(\Sigma - \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \sigma_k & & \\ & & & 0 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}\right)\cancel{V^*}\|_2$$

$$= \left\| \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_{k+1} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \right\|_2 = \sigma_{k+1}$$

Альтернативные формулировки с помощью ортопроекторов

$$U\,(U^*A) \Rightarrow \operatorname{rank}(UU^*A) \le k$$

$$\|A - A_k\| = \min_{\substack{U\in\mathbb{C}^{m\times k}\\ U^*U=I}} \|A - UU^*A\| = \min_{\substack{V\in\mathbb{C}^{n\times k}\\ V^*V=I}} \|A - AVV^*\| =$$

$$= \min_{\substack{U^*U=I\\ V^*V=I}} \|A - UU^*AVV^*\|$$

$$\square \quad A_k = U_kU_k^*A = AV_kV_k^* = U_kU_k^*AV_kV_k^*$$

(см. лекцию 3)

первые k столбцов U из SVD A

$\blacksquare$

План

Наилучшее приближение матрицей с заданным рангом

Наилучшее приближение матрицей с заданным образом

Оптимизационные задачи, связанные с SVD

Наилучшее приближение матрицей с заданным образом

$$\mathrm{Im}(QC) \subseteq \mathrm{Im}(Q)$$

Утверждение

Пусть $Q \in \mathbb{C}^{m \times k}$, $Q^* Q = I$. Тогда:

$$\min_{C \in \mathbb{C}^{k \times n}} \|A - QC\|_F = \|A - QQ^* A\|_F$$

$$\square \quad \|A - QC\|_F^2 = \|\underbrace{[Q \; Q^{\perp}]^*}_{\text{унитарное (дополнили } Q \text{ до орт. базиса)}} (A - QC)\|_F^2 =$$

$$= \left\| \begin{bmatrix} Q^* \\ Q^{\perp *} \end{bmatrix} (A - QC) \right\|_F^2 = \left\| \begin{bmatrix} Q^*(A - QC) \\ Q^{\perp *}(A - QC) \end{bmatrix} \right\|_F^2$$

$$= \|\underbrace{Q^*(A - QC)}_{Q^*A - C}\|_F^2 + \|\underbrace{Q^{\perp *}(A - QC)}_{Q^{\perp *}A - 0 = \text{const}}\|_F^2$$

$$\Rightarrow C = Q^* A \quad \blacksquare$$

Простейший рандомизированный алгоритм

oversampling

1. Сгенерируем матрицу $\Omega \in \mathbb{R}^{n\times(k+p)}$ с элементами $\sim \mathcal{N}(0,1)$

$O(mnk)$ 2. $Y := A\Omega$ $\quad \left(y^{(i)} = A\omega^{(i)} = a_1\omega_1^{(i)} + \ldots + a_n\omega_n^{(i)} \in \mathrm{Im}(A) \right)$

$\hat{U}\Sigma\hat{V}^* \quad O(nk^2)$

$O(mk^2)$ 3. $Q, R := \mathtt{QR}(Y)$

4. $A \approx QQ^*A = Q\overbrace{(Q^*A)}^{} = \underbrace{(Q\hat{U})}_{U}\Sigma\hat{V}^*$

$k{+}p \quad n$

$O(mnk)$

Итог: $O(mnk)$ (для плотных матриц)
можно лучше для структурир.

Простейший рандомизированный алгоритм

Для матожидания:

$k+p$

$\|A-A_k\|_F$

$$\mathbb{E}\|A - QQ^*A\|_F \leq \sqrt{1 + \frac{r}{p-1}} \sqrt{\sum_{i \geq k+1} \sigma_i(A)^2}$$

и для уклонений:

$\|A-A_k\|_F$

$$\mathbb{P}\left(\|A - QQ^*A\|_F > \left(1 + p\sqrt{\frac{3k}{p+1}} + e\sqrt{2p(r+p)\log p}\right)\sqrt{\sum_{i \geq k+1} \sigma_i(A)^2}\right) \leq 3p^{-p}$$

- Halko, N., Martinsson, P. G., & Tropp, J. A. (2011). Finding structure with randomness: Probabilistic algorithms for constructing approximate matrix decompositions. SIAM review, 53(2), 217-288.
- Bucci, A., & Robol, L. (2023). A multilinear Nyströ m algorithm for low-rank approximation of tensors in Tucker format. arXiv preprint arXiv:2309.02877.

План

Наилучшее приближение матрицей с заданным рангом

Наилучшее приближение матрицей с заданным образом

Оптимизационные задачи, связанные с SVD

Задача Прокруста (семинар)

Теорема

Пусть $A, B \in \mathbb{F}^{m \times p}$*, тогда*

UV

$$\min_{Q:\ Q^* Q = I} \|A - BQ\|_F = \|A - BW\|_F,$$

где $W \in \mathbb{F}^{p \times p}$ *– фактор полярного разложения* $B^* A = WH$*.*

Задача Прокруста (семинар)

Теорема

Пусть $A, B \in \mathbb{F}^{m\times p}$, *тогда*

$$\min_{Q:\ Q^* Q = I} \|A - BQ\|_F = \|A - BW\|_F,$$

где $W \in \mathbb{F}^{p\times p}$ *– фактор полярного разложения* $B^* A = WH$.

Теорема

Пусть $A \in \mathbb{F}^{m\times p}$ *и* $\|\cdot\|$ *– унитарно-инвариантна, тогда*

$$\min_{Q:\ Q^* Q = I} \|A - Q\| = \|A - W\|,$$

где $W \in \mathbb{F}^{m\times p}$ *– фактор полярного разложения* $A = WH$.

Ядерная норма дает малоранговые решения

Теорема

Решение задачи

$$\min_X \|A - X\|_F^2 + \lambda \|X\|_*,$$

имеет вид

$$X = U[\Sigma - \lambda I]_+ V^*,$$

где $A = U\Sigma V^*$ *– SVD матрицы A, а* $[\cdot] = \max(\cdot, 0)$*.*

- Ссылка на доказательство без субдифференциалов: https://angms.science/doc/LA/SVT_operator2.pdf. Основано на неравенстве фон Неймана для следа:

$$|\mathrm{Tr}(XY)| \le \sum_i \sigma_i(X)\sigma_i(Y).$$

Литература

1. Е. Е. Тыртышников. *Методы численного анализа*. Академия, 2007.
2. Е. Е. Тыртышников. *Матричный анализ и линейная алгебра*. Физматлит, 2007.
3. G.H. Golub and C.F. Van Loan. *Matrix Computations*, 4th Edition. The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 2013.