

ALORA: Affine Niedrigrang-Approximationen

(Paper von A. Ayala, X. Claeys, L. Grigori, J. Sc. Comp. 79, 2019)

Markus Neher

KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE (KIT)

- 1 Motivation, Grundlagen
- 2 NRA mit (abgeschnittener) QR-Zerlegung
- 3 NRA mit (randomisierter) Unterraum-Iteration
- 4 Affine NRA
- 5 Beispiele

Satz 1

Zu jeder Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit Rang r existiert eine SWZ

$$A = U \Sigma V^T = \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \sigma_i u_i v_i^T$$

mit unitären Matrizen $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sowie $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r, 0, \dots, 0), \quad \sigma_j \geq \sigma_{j+1}, \quad \sigma_r > 0,$$

σ_j^2 j -ter EW von $A^T A$.

Niedrigrang-Approximation

■ Gegeben: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Gesucht: Rang- k -Approximation A_k .

■ Satz 2

Bestapproximation durch abgeschnittene SWZ:

$$A_k = U_k \Sigma_k V_k^T = \sum_{i=1}^k u_i \sigma_i v_i^T, \quad \|A_k - A\| = \sigma_{k+1}.$$

Aufwand (für volle SWZ): $O(\min(m^2 n, mn^2))$.

■ Im Folgenden gilt:

■ $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$

■ Gleiches Vorgehen für $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$.

■ Bekannte Alternativen zur SWZ mit Aufwand $O(kmn)$:

- (1) (Abgeschnittene) QR -Zerlegungen, $AP = Q_k R_k$,
- (2) Unterraum-Iterationen, $A = QB_k$,
- (3) (Monte-Carlo-Methoden,)
- (4) (Zufallsbasierte Projektionen.)

■ Hier neu: Affine Approximation mit Aufwand $O(kmn)$:

$$A \approx \tilde{\zeta}_k := \left(\sum_{j=1}^{k-1} q_j q_j^T \right) A \left(I - \frac{1}{n} \mathbb{1} \mathbb{1}^T \right) + \frac{1}{n} A \mathbb{1} \mathbb{1}^T.$$

Ziel: Höhere Genauigkeit als (1), (2) mit geringem Zusatzaufwand.

NRA mit QR -Zerlegung

- $AP = (Q_1 \ Q_2) \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{pmatrix}, \quad P \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ Permutationsmatrix,}$
 $Q_1 \in \mathbb{R}^{m \times k}, Q_2 \in \mathbb{R}^{m \times (m-k)}, R_{11} \in \mathbb{R}^{k \times k}, R_{22} \in \mathbb{R}^{(m-k) \times (n-k)}.$
- Rang- k -QR-Approximation (für $\text{rang } A \geq k$ und R_{11} invertierbar):

$$\tilde{\zeta}_k = Q_1 \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \end{pmatrix} P^T.$$

$$\text{Fehler: } \|A - \tilde{\zeta}_k\| = \left\| Q_2 \begin{pmatrix} 0 & R_{22} \end{pmatrix} P^T \right\| = \|R_{22}\|.$$

Speziell QRCP (Householder-QR mit Spaltenpivotsuche)¹:

$$\text{Aufwand } O(kmn), \quad \|R_{22}\| \leq \underbrace{2^k \sqrt{n-k}}_{f(k,n)} \sigma_{k+1}.$$

¹ GvL 2013, Alg. 5.4.1.

■ $AP = (Q_1 \ Q_2) \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{pmatrix}, \quad P \text{ Permutationsmatrix,}$

$$\Rightarrow \begin{cases} Q_1 R_{11} = AP(:, 1:k), \\ \|R_{22}\| = \|(I_m - Q_1 Q_1^T)A\|. \end{cases}$$

■ Beweis:

$$\begin{aligned} \|(I_m - Q_1 Q_1^T)A\| &= \|\textcolor{red}{Q}^T (I_m - Q_1 Q_1^T) Q R \textcolor{blue}{P}^T\| \\ &= \|R - Q^T Q_1 Q_1^T Q R\| = \|R_{22}\|, \end{aligned}$$

$$\text{denn } Q^T Q_1 Q_1^T Q = \begin{pmatrix} I_k \\ Q_2^T Q_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_k & Q_1^T Q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Lemma 1

Sei $AP = \begin{pmatrix} Q_1 & Q_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{pmatrix}$ und

$$\begin{pmatrix} \Omega_1 \\ \Omega_2 \end{pmatrix} = V^T P(:, 1:k)$$

(mit V aus der SWZ von A).

Dann gilt: Ist Ω_1 invertierbar, gilt

$$\|R_{22}\| \leq \sqrt{1 + \|\Omega_2 \Omega_1^{-1}\|^2} \sigma_{k+1}(A).$$

(Beh. ist Spezialfall eines allgemeinen Satzes über Matrixzerlegungen.)

NRA mit Unterraum-Iteration

- Berechnung von Rang- k -Approximation mit Aufwand $O(mn\ell)$, siehe Golub & van Loan ($\Omega \sim N(0, 1)$ -verteilt, $q \in \{1, 2\}$).

Algorithmus 1: $[\xi_k] = \text{SSITER}(A, \Omega, k, q)$

Gegeben: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\Omega \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$, $\min(m, n) \geq \ell \geq k$.

$$Y = A\Omega$$

$$Q = qr_Q(Y) \in \mathbb{R}^{m \times \ell}$$

Für $j = 1, 2, \dots, q$: # QR-Zerlegung von $(AA^T)^q A\Omega$

$$Y = A^T Q, \quad Q = qr_Q(Y)$$

$$Y = AQ, \quad Q = qr_Q(Y);$$

$$B = Q^T A$$

Berechne die Rang- k ASWZ B_k von B .

$$\xi_k := QB_k$$

Bemerkung 1

- *Algorithmus 1 könnte mit $QB = QQ^T A$ statt QB_k beendet werden.*
- *Es gilt sogar*

$$\|A - QQ^T A\| \leq \|A - QB_k\| \quad \forall B_k \in \mathbb{R}^{\ell \times n},$$

und somit

$$\|A - QQ^T A\| \leq \|A - \xi_k\|.$$

- *Vorteil von ξ_k : Bessere Approximation der SWe.*

Dazu: Für $W_1, W_2 \in \mathbb{R}^{m \times k}$ unitär mit $\text{range}(W_i) = \mathcal{S}_i$, ist

$$\angle(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2) = \arcsin\left(\|W_1 W_1^T - W_2 W_2^T\|\right).$$

Satz 3 (Konvergenz der Näherungen aus Algorithmus 1 gegen die Singulärvektoren von A)

Sei $\Omega \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit SWZ $A = U \Sigma V^T$. Zur QR-Zerlegung $QR = (AA^T)^q A \Omega$ seien $Q_k := (q_1, \dots, q_k)$ und $U_k := (u_1, \dots, u_k)$ die aus den ersten k Spalten von Q und U gebildeten Matrizen und es sei

$$V^T \Omega := \begin{pmatrix} \Omega_\alpha & Z_1 \\ \Omega_\beta & Z_2 \end{pmatrix}, \quad \Omega_\alpha \in \mathbb{R}^{k \times k}, \quad Z_2 \in \mathbb{R}^{(n-k) \times (\ell-k)}.$$

Dann gilt: Ist Ω_α invertierbar, gilt mit $\varphi = \angle(\text{range}(Q_k), \text{range}(U_k))$

$$\sin \varphi \leq \left(\frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k} \right)^{2q+1} \left\| \Omega_\beta \Omega_\alpha^{-1} \right\|.$$

Bemerkung 2

- Für $\sigma_k > \sigma_{k+1}$: Exponentielle Konvergenz (in q) von $\text{range}(Q(:, 1:k))$ gegen $\text{range}(U(:, 1:k))$.
- Für Zufallsmatrizen ist bekannt: Haben Ω_α and Ω_β unabhängige $N(0, 1)$ -verteilte Einträge, gilt mit hoher W. $\|\Omega_\alpha^{-1}\| \leq c_1 \sqrt{k}$ und $\|\Omega_\beta\| \leq c_2 \max(\sqrt{m-k}, \sqrt{k})$. Für $m-k \geq k$ folgt

$$\sin \varphi \leq \left(\frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k} \right)^{2q+1} \left\| \Omega_\beta \Omega_\alpha^{-1} \right\| \leq C_\Omega \sqrt{k(m-k)} \left(\frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k} \right)^{2q+1},$$

mit $C_\Omega = c_1 c_2 > 0$, $c_1 = O(1)$, $c_2 = O(\frac{m-k}{k})$
($\varphi \rightarrow 0$ mit fast exponentieller Konvergenz).

Beweis von Satz 3.

0 VB: Für $H \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $q \in \mathbb{N}_0$ sei $H^{2q+1} := (HH^T)^q H$.

1 Zerlegungen:

$$\Sigma = \text{diag}(D_k, D_s), \quad D_k \in \mathbb{R}^{k \times k}, \quad D_s \in \mathbb{R}^{(m-k) \times (n-k)}$$

$$U = [U_k, U_s] \in \mathbb{R}^{m \times (k+(m-k))},$$

$$Q = [Q_k, Q_s] \in \mathbb{R}^{m \times (k+(\ell-k))}.$$

2 Es gilt (mit $R_{11} \in \mathbb{R}^{k \times k}$):

$$(AA^T)^q A\Omega = U\Sigma^{2q+1}V^T\Omega =: QR = \begin{pmatrix} Q_k & Q_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{pmatrix}.$$

Beweis.

3 Somit

$$\begin{pmatrix} U_k & U_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_k & 0 \\ 0 & D_s \end{pmatrix}^{2q+1} \begin{pmatrix} \Omega_\alpha & Z_1 \\ \Omega_\beta & Z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_k & Q_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{pmatrix}.$$

4 Erste k Spalten liefern eingebettete QR-Zerlegung

$$W := \begin{pmatrix} U_k & U_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_k & 0 \\ 0 & D_s \end{pmatrix}^{2q+1} \begin{pmatrix} \Omega_\alpha \\ \Omega_\beta \end{pmatrix} = Q_k R_{11}.$$

5 Gesucht ist

$$\sin \varphi = \left\| U_k U_k^T - Q_k Q_k^T \right\| \stackrel{[\text{GvL, Satz 2.5.1}]}{=} \left\| U_s^T Q_k \right\|.$$

Beweis.

6 Setze

$$X := \Omega_\alpha^{-1} D_k^{-(2q+1)} \in \mathbb{R}^{k \times k}. \quad (1)$$

X ist invertierbar nach Vor.

7 QR-Zerlegung:

$$WX := U \begin{pmatrix} D_k & 0 \\ 0 & D_s \end{pmatrix}^{2q+1} \begin{pmatrix} \Omega_\alpha \\ \Omega_\beta \end{pmatrix} X = \tilde{Q}_k \tilde{R}_{11}, \quad \tilde{R}_{11} \in \mathbb{R}^{k \times k}. \quad (2)$$

Beweis.

8 Mit (1) in (2) folgt:

$$\begin{pmatrix} I_k \\ D_s^{2q+1} \Omega_\beta \Omega_\alpha^{-1} D_k^{-(2q+1)} \end{pmatrix} = U^T \tilde{Q}_k \tilde{R}_{11} = \begin{pmatrix} U_k^T \tilde{Q}_k \\ U_s^T \tilde{Q}_k \end{pmatrix} \tilde{R}_{11},$$

$$\text{also } \tilde{R}_{11}^{-1} = U_k^T \tilde{Q}_k.$$

9 Setze

$$\left\| U_k U_k^T - \tilde{Q}_k \tilde{Q}_k^T \right\| = \left\| U_s^T \tilde{Q}_k \right\| = \left\| D_s^{2q+1} \Omega_\beta \Omega_\alpha^{-1} D_k^{-(2q+1)} \tilde{R}_{11}^{-1} \right\|. \quad (3)$$

Beweis.

10 Mit Lemma 4.1 aus [Gu2015] folgt

$$Q_k Q_k^T = \tilde{Q}_k \tilde{Q}_k^T. \quad (4)$$

11 Aus (3), (4) und $\|\tilde{R}_{11}^{-1}\| = \|U_k^T \tilde{Q}_k\| \leq 1$ folgt zuletzt

$$\begin{aligned} \sin \varphi &= \|U_k U_k^T - Q_k Q_k^T\| = \|U_k U_k^T - \tilde{Q}_k \tilde{Q}_k^T\| \\ &\leq \|D_s^{2q+1} \Omega_\beta \Omega_\alpha^{-1} D_k^{-(2q+1)}\|, \end{aligned}$$

$$\text{sodass } \sin \varphi \leq \left(\frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k} \right)^{2q+1} \|\Omega_\beta \Omega_\alpha^{-1}\|.$$



Affine NRA

Ziel: NRA der Bauart

$$\tilde{\zeta}_k := \left(\sum_{j=1}^{k-1} q_j q_j^T \right) A (I_n - z z^T) + (A z) z^T, \quad 1 \leq k \leq \text{rang } A,$$

mit $q_j \in \mathbb{R}^m$, $z \in \mathbb{R}^n$ unitär.

(Multiplikation von A mit Orthogonalprojektoren von links und rechts und Addition einer Translationsmatrix.)

Satz 4 (Horn & Johnson 1991)

Seien $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Dann gilt für $1 \leq i, j$ mit $i + j - 1 \leq \min(m, n)$:

$$\sigma_{i+j-1}(AB^T) \leq \sigma_i(A)\sigma_j(B),$$

$$\sigma_{i+j-1}(A+B) \leq \sigma_i(A) + \sigma_j(B).$$

Lemma 2

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ bel. und $Z \in \mathbb{R}^{n \times t}$, $t < \min(m, n)$, unitär. Dann gilt für die SWe von $Y := A(I_n - ZZ^T)$

$$\sigma_{k+t}(Y) \stackrel{(i)}{\leq} \sigma_{k+t}(A) \stackrel{(ii)}{\leq} \sigma_k(Y).$$

(Gilt analog für Zeilenprojektionen, d.h. für $Y^T = (I_n - ZZ^T)A^T$).

Beweis.

(i) folgt aus Satz 4 für $A(I_n - ZZ^T)$

$$(\text{„}j = k + t, j = 1\text{“, } \|(I_n - ZZ^T)\| = 1).$$

Zu (ii): Sei $F := AZ \in \mathbb{R}^{m \times t}$, d.h. $Y = A - FZ^T$, und sei Y_{k-1} die Rang- $(k-1)$ ASWZ von Y . Dann folgt

$$\sigma_k(Y) = \|Y - Y_{k-1}\| = \|A - (Y_{k-1} + FZ^T)\| \stackrel{(iii)}{\geq} \sigma_{k+t}(A).$$

(iii) gilt wegen $\text{rang}(Y_{k-1} + FZ^T) \leq k + t - 1$. □

Korollar 1

Für $t = 1$, d.h. $Y = A(I_n - zz^T)$, $\|z\| = 1$, gilt

$$\sigma_{k+1}(Y) \leq \sigma_{k+1}(A) \leq \sigma_k(Y), \quad \text{rang}(A) - 1 \leq \text{rang}(Y) \leq \text{rang}(A).$$

- Gravitationszentrum von $A = (a_1, \dots, a_n)$:

$$g := \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n a_j.$$

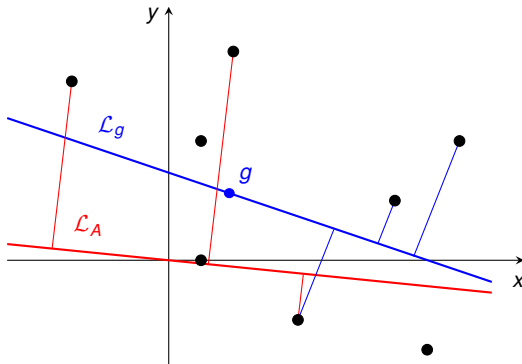
- Rang- $(n-1)$ Orthogonalprojektor $\mathcal{P}$:

$$Y := A - g\mathbb{1}^T = A \underbrace{\left(I_n - \frac{1}{n} \mathbb{1}\mathbb{1}^T \right)}_{=:\mathcal{P}}.$$

- ASWZen vom Rang k : A_k, Y_k .

Aus Korollar 1 folgt:

$$\left\| A - g\mathbb{1}^T - Y_k \right\| = \|Y - Y_k\| = \sigma_{k+1}(Y) \leq \sigma_{k+1}(A) = \|A - A_k\|.$$



$$\mathcal{L}_A(\tau) = \tau u_1, \quad \mathcal{L}_g(\tau) = g + \tau u_{Y1}$$

Algorithmus 2: $[\tilde{\zeta}_k] = \text{ALORA}(A, k)$

Gegeben: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

$$Y = A(I_n - \frac{1}{n}\mathbb{1}\mathbb{1}^T)$$

Berechne eine Rang- $(k-1)$ -Approximation $\tilde{\zeta}_{k-1}$ von Y .

$$\tilde{\zeta}_k := g\mathbb{1}^T + \tilde{\zeta}_{k-1}.$$

Approximationsfehler im Fall $\|Y - \tilde{\zeta}_{k-1}\| \leq f(k, n)\sigma_k(Y)$:

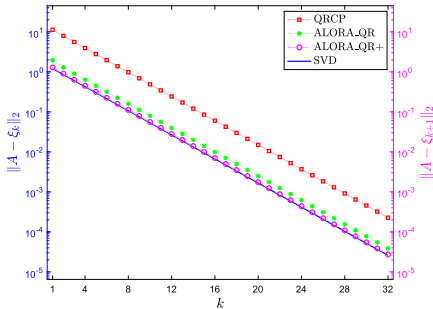
$$\|A - \tilde{\zeta}_k\| = \|Y - \tilde{\zeta}_{k-1}\| \stackrel{\text{Kor. 1}}{\leq} f(k, n)\sigma_k(A).$$

- Im Fall $g \approx 0$ folgt $\mathcal{L}_A \approx \mathcal{L}_g$, sodass die affine Approximation keine Verbesserung bringt.
- Im Fall $\|g\| \gg 0$ kann die affine Bestapproximation (erheblich) besser sein als die lineare Bestapproximation.
- Für „Matrizen mit hoher Korrelation“ (z.B. für Matrizen mit exponentiell abklingenden SWen) gilt

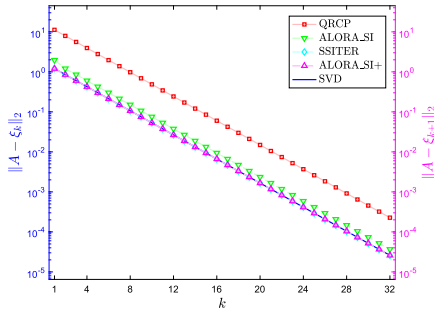
$$u_1 \approx \frac{g}{\|g\|}, \quad \sigma_1 \approx \sqrt{n} \|g\| .$$

Numerische Beispiele

Numerische Beispiele: Kahan-Matrix

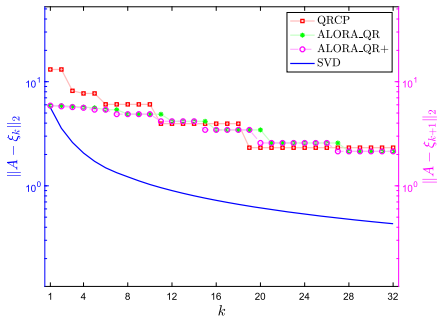


ALORA-QRCP

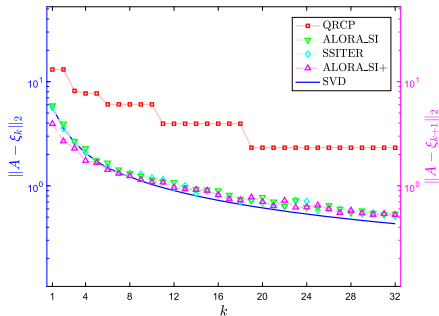


ALORA-SI

Numerische Beispiele: GKS-Matrix

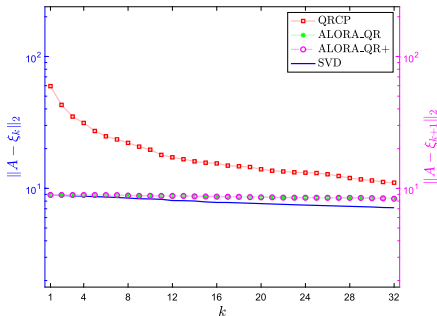


ALORA-QRCP

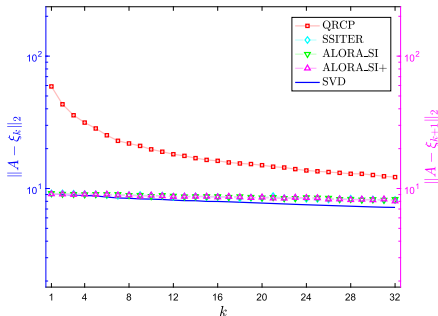


ALORA-SI

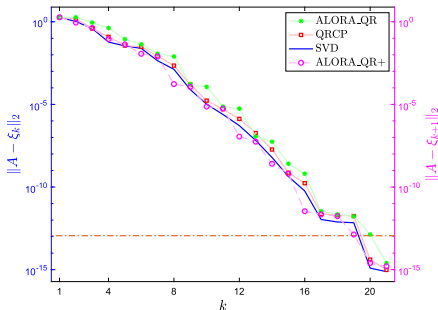
Numerische Beispiele: RAND-UNIF-Matrix



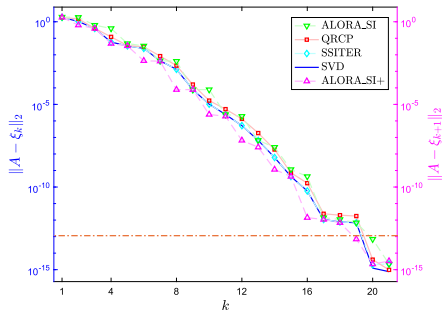
ALORA-QRCP



ALORA-SI



ALORA-QRCP



ALORA-SI

- Neues Konzept einer affinen Niedrigrang-Approximation für Matrizen (Approximation der Spaltenvektoren durch affinen Unterraum)
- Affine Approximation durch Orthogonalprojektion
- ALORA für beliebigen Algorithmus zur Niedrigrang-Approximation
- Fehlerschranken
- Gute Approximation der Norm und des ersten SWs für Matrizen mit hoher Korrelation
⇒ gute Rang-1-Approximation für solche Matrizen
- Numerische Tests zeigen manchmal Verbesserung der Approximation gegenüber QRCP und Unterraum-Iteration