# Un algoritmo rank-revealing per la risoluzione nel senso dei minimi quadrati di sistemi lineari a rango non pieno

#### G. Rodriguez

Dipartimento di Matematica e Informatica, Università di Cagliari viale Merello 92, 09123 Cagliari, Italy

in collab. con A. Aricò (Dip. di Matematica e Informatica, Cagliari)

Giornate di Algebra Lineare Numerica ed Applicazioni Padova, 26–27 febbraio 2007

# Minimi quadrati mediante eliminazione Gaussiana

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \qquad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \qquad rank(A) = n \le m$$

• Metodo di Peters-Wilkinson [1970]

$$PAQ = \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \end{bmatrix} U, \qquad L_1, U \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

$$L^T L \mathbf{y} = L^T (P \mathbf{b}), \qquad U(Q^T \mathbf{x}) = \mathbf{y}$$

Applicato a matrici sparse in [Björck et al. 1988].

# Minimi quadrati mediante eliminazione Gaussiana

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \qquad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \qquad rank(A) = n \le m$$

- Metodo di Peters-Wilkinson [1970]
- Metodo della matrice aumentata
   [Siegel 1965, Bartel et al. 1970, Björck 1992]

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^* & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}$$

Applicato con successo in [Arioli et al. 1989] e esteso in [Duff et al. 1990] al caso di matrici sparse con pivoting di Bunch-Kaufman.

# Minimi quadrati e complemento di Schur

Metodo proposto per matrici di Toeplitz in [Kailath et al. 1994] e studiato e implementato in [GR 2006] per matrici con struttura di Toeplitz e Cauchy generalizzata.

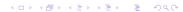
$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$
  $\longrightarrow$   $M_A = \begin{bmatrix} I_m & A & 0 \\ A^* & 0 & A^*\mathbf{b} \\ \hline 0 & I_n & 0 \end{bmatrix}$ 

$$S_{m+n}(M_A) = (A^*A)^{-1}A^*\mathbf{b} = \mathbf{x}_{LS}$$

Poiché  $M_A$  ha struttura di *displacement* è possibile applicare l'algoritmo di Schur generalizzato.

Inoltre la matrice pseudoinversa ha struttura di displacement

$$\mathbf{b} = I_m \qquad \Rightarrow \qquad \mathcal{S}_{m+n}(M_A) = A^{\dagger},$$



# Calcolo del complemento di Schur di $M_A$

#### Schema di calcolo

- la struttura viene convertita da Toeplitz a Cauchy generalizzata, mediante trasformate veloci
- viene applicato l'algoritmo di Schur generalizzato

# Calcolo del complemento di Schur di $M_A$

#### Schema di calcolo

- la struttura viene convertita da Toeplitz a Cauchy generalizzata, mediante trasformate veloci
- viene applicato l'algoritmo di Schur generalizzato

#### Vantaggi

- M<sub>A</sub>, pur avendo struttura di displacement, non è Toeplitz-like, mentre M<sub>C</sub> è Cauchy-like
- il passaggio alla struttura di Cauchy consente l'uso del pivoting parziale o totale
- algoritmo fast  $O(27\gamma(m+n)^2)$  e bassa occupazione di memoria  $O(3\gamma(m+n))$  ( $\gamma={\rm rank}_{\Delta}(M_A)$ )
- facilmente applicabile ad altre strutture di displacement

### Restrizione del pivoting

Nel calcolo del complemento di Schur  $S_r(M)$ , l'azione del pivoting parziale (o totale) deve essere ristretta alle prime r righe (e colonne) di M. Infatti se

$$M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} P_r & 0 \\ 0 & I_{m-r} \end{bmatrix} \quad \mathbf{e} \quad Q = \begin{bmatrix} Q_r & 0 \\ 0 & I_{n-r} \end{bmatrix}$$

allora

$$PMQ = \begin{bmatrix} P_r M_{11} Q_r & P_r M_{12} \\ M_{21} Q_r & M_{22} \end{bmatrix}$$

е

$$S_r(PMQ) = S_r(M).$$

# Blocchi parzialmente ricostruibili

$$C_{ij} = \frac{\phi_i^* \cdot \psi_j}{t_i - s_j}$$

$$D_{\mathbf{t}}C - CD_{\mathbf{s}} = G_C H_C^*$$

# Blocchi parzialmente ricostruibili

$$C_{ij} = \frac{\phi_i^* \cdot \psi_j}{t_i - s_j}$$

$$D_{\mathbf{t}}C - CD_{\mathbf{s}} = G_C H_C^* \qquad \Rightarrow \qquad \mathcal{D}_L M_C - M_C \mathcal{D}_R = G_{M_C} H_{M_C}^*$$

$$M_C = \begin{bmatrix} I_m & C & 0 \\ C^* & 0 & C^* \\ 0 & I_n & 0 \end{bmatrix}, \qquad \mathcal{D}_L = D_{\mathbf{t}} \oplus D_{\mathbf{s}} \oplus D_{\mathbf{s}},$$

$$\mathcal{D}_R = D_{\mathbf{t}} \oplus D_{\mathbf{s}} \oplus D_{\mathbf{t}},$$

### Blocchi parzialmente ricostruibili

$$C_{ij} = \frac{\phi_i^* \cdot \psi_j}{t_i - s_j}$$

$$D_t C - C D_s = G_C H_C^* \qquad \Rightarrow \qquad \mathcal{D}_L M_C - M_C \mathcal{D}_R = G_{M_C} H_{M_C}^*$$

$$M_C = \begin{bmatrix} I_m & C & 0 \\ C^* & 0 & C^* \\ 0 & I_n & 0 \end{bmatrix}, \qquad \mathcal{D}_L = D_t \oplus D_s \oplus D_s,$$

$$\mathcal{D}_R = D_t \oplus D_s \oplus D_t,$$

Alcuni blocchi sono parzialmente ricostruibili:

blocco 
$$(3,2) \longrightarrow D_{s}I_{n} - I_{n}D_{s} = 0$$

È necessario memorizzare a parte gli elementi non ricostruibili e tener conto del pivoting.



$$Z_{\xi,m}A - AZ_{\eta,n} = G_A H_A^*, \qquad \xi, \eta \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$$

$$Z_{\phi,k} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & \phi \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{k \times k}.$$

$$Z_{\xi,m}A - AZ_{\eta,n} = G_A H_A^*, \qquad \xi, \eta \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$$

$$D_{\mathbf{t}}C - CD_{\mathbf{s}} = G_C H_C^*$$

$$C_{ij} = \frac{\phi_i^* \cdot \psi_j}{t_i - s_j}, \qquad t_i^m = \xi, \ s_j^n = \eta$$

$$Z_{\xi,m}A - AZ_{\eta,n} = G_A H_A^*, \qquad \xi, \eta \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$$

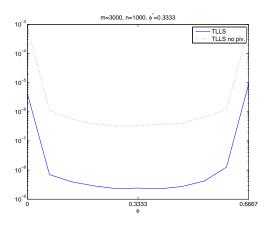
$$C_{ij} = \frac{\phi_i^* \cdot \psi_j}{t_i - s_j}, \qquad t_i^m = \xi, \ s_j^n = \eta$$

Posto  $\xi=1$  e  $\eta=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\varphi}$ , sia

$$\varphi^* = \arg\max_{\varphi} \min_{i,j} |t_i - s_j|.$$

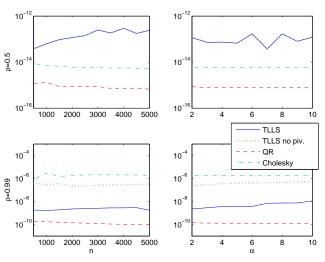
Allora

$$\varphi^* = \frac{\gcd(m,n)}{m} = \frac{g}{m}, \qquad \min_{i,j} |t_i - s_j| = 2\sin\frac{\pi g}{2mn}.$$



Matrice KMS (
$$a_{ij}=\rho^{|i-j|}$$
) con ( $m,n$ ) = (3000,1000),  $\rho=.99$ ,  $\kappa=3.7\cdot 10^4$ 

#### Risultati numerici



Matrice KMS, m=2n (sin.),  $\alpha=\frac{m}{n}$  e n=2000 (destra)



# Dipendenza dal condizionamento

Condizionamento di  $x_{LS}$  rispetto ad una perturbazione in A

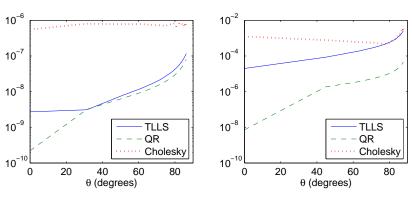
$$\kappa_{LS} = \kappa(A) + \frac{\kappa(A)^2 \tan \theta}{\eta}$$

con 
$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{\dagger}\|$$
,  $\eta = \frac{\|A\| \cdot \|\mathbf{x}\|}{\|A\mathbf{x}\|} \in [1, \kappa(A)]$ , and

$$heta = \arccos rac{\|A\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{b}\|} = \measuredangle(\mathbf{b}, A\mathbf{x}) \in \left[0, rac{\pi}{2}
ight]$$

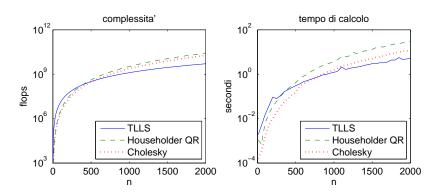
- Householder QR è influenzato da  $\kappa_{LS}$
- Eq. normali + Cholesky dipende da  $\kappa(A)^2$  e non da  $\eta, \theta$
- TLLS?

### Dipendenza dal condizionamento



Matrice KMS, (m, n) = (1500, 500),  $\rho = .99, .999$  $\kappa(A) = 3.7 \cdot 10^4, 1.1 \cdot 10^6$ ,  $\eta \simeq 1$ 

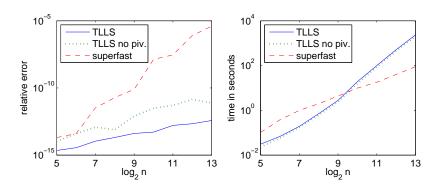
### Complessità computazionale - metodi non strutturati



Confronto tra qr e chol di Matlab e la versione MEX di TLLS AMD Athlon 64 3200+, GNU/Linux x86\_64, Matlab 64bit Matrice KMS ( $\rho=.99$ ), m=2n



# Complessità computazionale - metodo superfast



Confronto tra le versioni Matlab di TLLS e di un algoritmo superfast [Van Barel, Heinig, Kravanja 2003]

Matrice rand-Toeplitz, m = 2n

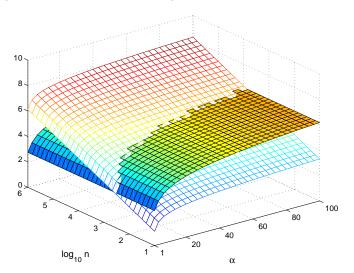
# Complessità: crossover risp. ai metodi non strutturati

La dipendenza da m è lineare per i metodi non strutturati e quadratica per TLLS.

Cholesky 
$$\longrightarrow$$
  $n^2(m+\frac{1}{3}n)$ 
Householder QR  $\longrightarrow$   $2n^2(m-\frac{1}{3}n)$ 
TLLS  $\longrightarrow$   $143m^2+284mn+133n^2$ 

Questo significa che per ogni n, all'aumentare di m, si arriva ad un punto in cui i metodi non strutturati risultano più efficienti.

# Complessità: crossover risp. ai metodi non strutturati



 $log(Complessita)/n^2)$  per Householder QR (grid) e TLLS (surf)

# Sistema lineare a rango non pieno

 Eliminiamo l'ipotesi che la matrice A sia sovradeterminata e a rango pieno

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \qquad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \qquad \begin{cases} m \leq n \\ rank(A) \leq \min(m, n) \end{cases}$$

Applichiamo l'algoritmo TLLS

$$M_A = \begin{bmatrix} I_m & A & 0 \\ A^* & 0 & A^*\mathbf{b} \\ \hline 0 & I_n & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow S_{m+n}(M_A) = ?$$

Nel caso a rango pieno si ha

$$\mathbf{x}_{LS} = \mathcal{S}_{m+n}(M_A) = (A^*A)^{-1}A^*\mathbf{b}$$



Applichiamo l'algoritmo di eliminazione di Gauss alle prime m colonne. Il pivoting non è indispensabile per il funzionamento dell'algoritmo (lo è per la sua stabilità).

$$\begin{bmatrix} I_m & A & 0 \\ \hline A^* & 0 & A^*\mathbf{b} \\ 0 & I_n & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} I_m & A & 0 \\ \hline 0 & -A^*A & A^*\mathbf{b} \\ 0 & I_n & 0 \end{bmatrix}$$

Questa fase è equivalente alla costruzione delle equazioni normali.

 $A^*A$  in generale è singolare



Supponiamo inizialmente che A\*A sia ben ordinata:

$$-A^*A = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{bmatrix}$$

con rank(A) = k e  $G_{11}$  quadrata  $k \times k$  non singolare.

Applichiamo k passi dell'algoritmo di Gauss alla sottomatrice

$$\begin{bmatrix} I_m & A & 0 \\ \hline 0 & -A^*A & A^*\mathbf{b} \\ 0 & I_n & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} -A^*A & A^*\mathbf{b} \\ I_n & 0 \end{bmatrix}$$

Supponiamo inizialmente che A\*A sia ben ordinata:

$$-A^*A = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{bmatrix}$$

con rank(A) = k e  $G_{11}$  quadrata  $k \times k$  non singolare.

Applichiamo k passi dell'algoritmo di Gauss alla sottomatrice

$$\begin{bmatrix} -A^*A & A^*\mathbf{b} \\ I_n & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} & \mathbf{c}_1 \\ G_{21} & G_{22} & \mathbf{c}_1 \\ I_k & 0 & 0 \\ 0 & I_{n-k} & 0 \end{bmatrix}$$

Supponiamo inizialmente che A\*A sia ben ordinata:

$$-A^*A = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{bmatrix}$$

con rank(A) = k e  $G_{11}$  quadrata  $k \times k$  non singolare.

Applichiamo k passi dell'algoritmo di Gauss alla sottomatrice

$$\begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} & \mathbf{c}_1 \\ G_{21} & G_{22} & \mathbf{c}_1 \\ I_k & 0 & 0 \\ 0 & I_{n-k} & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} U_k & Z & \widetilde{\mathbf{c}}_1 \\ 0 & O_{n-k} & \widetilde{\mathbf{c}}_2 \\ \hline 0 & Y_1 & \mathbf{x}_1 \\ 0 & Y_2 & \mathbf{x}_2 \end{bmatrix}$$

### Risultato dell'algoritmo

$$\begin{bmatrix} U_k & Z & \widetilde{\mathbf{c}}_1 \\ 0 & O_{n-k} & \widetilde{\mathbf{c}}_2 \\ \hline 0 & Y_1 & \mathbf{x}_1 \\ 0 & Y_2 & \mathbf{x}_2 \end{bmatrix}$$

• soluzione di base di  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 

$$\mathbf{x}_B = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{bmatrix}$$

### Risultato dell'algoritmo

$$\begin{bmatrix} U_k & Z & \widetilde{\mathbf{c}}_1 \\ 0 & O_{n-k} & \widetilde{\mathbf{c}}_2 \\ \hline 0 & Y_1 & \mathbf{x}_1 \\ 0 & Y_2 & \mathbf{x}_2 \end{bmatrix}$$

• soluzione di base di  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 

$$\mathbf{x}_B = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{bmatrix}$$

• base per il nucleo di A

$$Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 & \cdots & \mathbf{y}_{n-k} \end{bmatrix}$$

# Risultato dell'algoritmo

$$\begin{bmatrix} U_k & Z & \widetilde{\mathbf{c}}_1 \\ 0 & O_{n-k} & \widetilde{\mathbf{c}}_2 \\ \hline 0 & Y_1 & \mathbf{x}_1 \\ 0 & Y_2 & \mathbf{x}_2 \end{bmatrix}$$

• soluzione di base di Ax = b

$$\mathbf{x}_B = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -G_{11}^{-1} \mathbf{c}_1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

• base per il nucleo di A

$$Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 & \cdots & \mathbf{y}_{n-k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -G_{11}^{-1}G_{12} \\ I_{n-k} \end{bmatrix}$$

# Rank revealing?

#### Rango numerico

$$r_{\epsilon} = \min_{\|E\|_{2} \le \epsilon} \operatorname{rank}(A + E) \qquad \Leftrightarrow \qquad \sigma_{r_{\epsilon}} > \epsilon \ge \sigma_{r_{\epsilon} + 1}$$

L'algoritmo si arresta quando

$$|M_{rr}| < \tau$$

#### C'è relazione tra $\epsilon$ e $\tau$ ?

Rank revealing LU [Chan 1984], [Hwang et al. 1992]. Stime del condizionamento per matrici triangolari [Higham 1987].

#### Nella fase 2 il pivoting (su righe e colonne) è indispensabile

Supponiamo di applicare il pivoting totale

$$\begin{bmatrix} -A^*A & A^*\mathbf{b} \\ I_n & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} -PA^*AQ & PA^*\mathbf{b} \\ Q & 0 \end{bmatrix}$$

e poniamo

$$G = -PA^*AQ, \qquad Q = \begin{bmatrix} Q_1 & Q_2 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{c} = PA^*b.$$

Allora

$$\begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} & \mathbf{c}_1 \\ G_{21} & G_{22} & \mathbf{c}_1 \\ \hline Q_1 & Q_2 & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} U_k & L^{-1}G_{12} & L^{-1}\mathbf{c}_1 \\ 0 & O_{n-k} & \mathbf{c}_2 - G_{21}G_{11}^{-1}\mathbf{c}_1 \\ \hline 0 & Q_2 - Q_1G_{11}^{-1}G_{12} & -Q_1G_{11}^{-1}\mathbf{c}_1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} U_k & L^{-1}G_{12} & L^{-1}\mathbf{c}_1 \\ 0 & O_{n-k} & \mathbf{c}_2 - G_{21}G_{11}^{-1}\mathbf{c}_1 \\ \hline 0 & Q_2 - Q_1G_{11}^{-1}G_{12} & -Q_1G_{11}^{-1}\mathbf{c}_1 \end{bmatrix}$$

• soluzione di base di Ax = b

$$\mathbf{x}_B = -Q_1 G_{11}^{-1} \mathbf{c}_1 = Q \begin{bmatrix} -G_{11}^{-1} \mathbf{c}_1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} U_k & L^{-1}G_{12} & L^{-1}\mathbf{c}_1 \\ 0 & O_{n-k} & \mathbf{c}_2 - G_{21}G_{11}^{-1}\mathbf{c}_1 \\ 0 & Q_2 - Q_1G_{11}^{-1}G_{12} & -Q_1G_{11}^{-1}\mathbf{c}_1 \end{bmatrix}$$

• soluzione di base di Ax = b

$$\mathbf{x}_B = -Q_1 G_{11}^{-1} \mathbf{c}_1 = Q \begin{bmatrix} -G_{11}^{-1} \mathbf{c}_1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

• base per il nucleo di A

$$Y = Q_2 - Q_1 G_{11}^{-1} G_{12} = Q \begin{bmatrix} -G_{11}^{-1} G_{12} \\ I_{n-k} \end{bmatrix}$$

Nella fase 1 il pivoting non è indispensabile

$$M = \begin{bmatrix} I_m & A & 0 \\ A^* & 0 & A^*\mathbf{b} \\ 0 & I_n & 0 \end{bmatrix}$$

Nella fase 1 il pivoting non è indispensabile, ma è determinante per la stabilità dell'algoritmo.

$$M_{\gamma} = \begin{bmatrix} \frac{\gamma I_m}{A^*} & A & 0\\ A^* & 0 & \frac{1}{\gamma} A^* \mathbf{b} \\ 0 & I_n & 0 \end{bmatrix}$$

Il parametro di scala  $\gamma$  regola l'*entità* del pivoting.

Nella fase 1 il pivoting non è indispensabile, ma è determinante per la stabilità dell'algoritmo.

$$M_{\gamma} = \begin{bmatrix} \frac{\gamma I_m}{A^*} & A & 0\\ A^* & 0 & \frac{1}{\gamma} A^* \mathbf{b} \\ 0 & I_n & 0 \end{bmatrix}$$

Il parametro di scala  $\gamma$  regola l'entità del pivoting.

Per il metodo della matrice aumentata con equilibratura, è stato dimostrato [Björck 1992] che una buona scelta è

$$\gamma = 2^{-1/2} \sigma_n(A)$$

in quanto minimizza  $\kappa_2(M_\gamma)$ , e quindi la stima in avanti dell'errore sulla soluzione.

• pivoting totale (costoso)

- pivoting totale (costoso)
- pivoting parziale + "butta via le colonne piccole"

- pivoting totale (costoso)
- pivoting parziale + "butta via le colonne piccole"
- pivoting totale simmetrico (fattorizzazione LDL<sup>T</sup>)

- pivoting totale (costoso)
- pivoting parziale + "butta via le colonne piccole"
- pivoting totale simmetrico (fattorizzazione LDL<sup>T</sup>)
- pivoting di Bunch-Kaufman

### Fattorizzazione $LDL^T$

Preserva la simmetria ed è connessa a Cholesky e QR.

$$\begin{bmatrix} I_m & A & 0 \\ A^* & 0 & A^* \mathbf{b} \\ 0 & I_n & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{1} \begin{bmatrix} I_m & \mathbf{0} & 0 \\ \mathbf{0} & -A^* A & A^* \mathbf{b} \\ 0 & I_n & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{2} \begin{bmatrix} I_m & 0 & 0 \\ 0 & D & 0 \\ 0 & \mathbf{0} & \mathbf{x}_{LS} \end{bmatrix}$$

#### Pivoting totale simmetrico

• se al passo k il massimo è in posizione  $(\ell, \ell)$ 

$$pivot = M_{\ell\ell}$$

• se il massimo è in posizione (r, s)

$$pivot = \begin{pmatrix} M_{ss} & M_{sr} \\ M_{rs} & M_{rr} \end{pmatrix} \qquad (tile \ pivot)$$

### Da fare...

- implementazione nel caso strutturato
- test numerici (matrici con e senza struttura)
- indagare sulle varie strategie di pivoting
- confronto con RRQR, UTV, [Chan 1984]
- soluzione normale, *up/down-dating*, *subset selection*. . .
- matrici sparse?

# Fine