Limites théoriques de l'estimation bayésienne de matrices non symétriques de petit rang en grande dimension : le cas de lois a priori uniformes sur le Grassmannien.

Mohammed-Younes GUEDDARI   Philippe LOUBATON

Laboratoire d'Informatique Gaspard Monge, Université Gustave Eiffel, CNRS, 5 Bd. Descartes, Cité Descartes, Champs sur Marne, 77454 Marne la Vallée Cedex 2, France

Résumé – Les limites théoriques de l'estimation bayésienne d'une matrice de petit rang $\mathbf{Y}_r$ sont évaluées dans le régime des grandes dimensions dans le cas où les espaces engendrés par les lignes et les colonnes de $\mathbf{Y}_r$ sont tirés uniformément. Pour cela, un problème variationnel est résolu explicitement, et une expression de l'erreur quadratique moyenne de l'estimateur bayésien optimal de $\mathbf{Y}_r$ en est déduite. Il est également établi qu'un estimateur basé sur une analyse en composantes principales de l'observation est asymptotiquement optimal.

Abstract – The theoretical limits of the Bayesian estimation of a low rank matrix $\mathbf{Y}_r$ are evaluated in the high-dimensional regime when the column and row spaces of $\mathbf{Y}_r$ are uniformly distributed. For this, a variational problem is solved in closed form, from which the expression of the mean-square error of the optimal Bayesian estimator is deduced. It is also proved that an estimate based on a principal component analysis of the observation is asymptotically optimal.

1 Introduction

Les problèmes d'inférence statistique visant à extraire de l'information sur une matrice $\mathbf{Y}_r$ de petit rang r lorsqu'elle est observée bruitée par une perturbation additive sont évidemment de première importance, et se retrouvent dans de nombreux contextes applicatifs. Ils ont donc fait l'objet d'un nombre colossal de travaux dans des communautés diverses. Lorsque les dimensions n_1 et n_2 de la matrice observée $\mathbf{Y}$ sont grandes et du même ordre de grandeur, le modèle observé est qualifié de modèle Spike additif. Lorsque la matrice de petit rang $\mathbf{Y}_r$ est déterministe et que le bruit additif est une matrice aléatoire à éléments indépendants identiquement distribués, il a été possible de caractériser le comportement des r plus grandes valeurs singulières et vecteurs singuliers associés de $\mathbf{Y}$ dans le régime asymptotique des grandes dimensions dans lequel n_1 et n_2 tendent vers $+\infty$ de telle sorte que $\frac{n_1}{n_2}$ converge vers une constante non nulle (voir par exemple [3],[11]). Ces travaux ont en particulier montré que seules les valeurs singulières de $\mathbf{Y}_r$ qui dépassent un certain seuil génèrent dans $\mathbf{Y}$ des valeurs singulières qui se détachent de celles dues au bruit, et que les vecteurs singuliers qui leur sont associés présentent des alignements positifs avec ceux de $\mathbf{Y}_r$. Toujours dans le contexte des grandes dimensions, une toute autre problématique a émergé depuis un peu plus d'une dizaine d'années. La matrice $\mathbf{Y}_r = \mathbf{Y}_r(\mathbf{X})$ est supposée être une fonction d'un paramètre multivariable $\mathbf{X}$ sur lequel on affecte une loi a priori connue, et l'on cherche à étudier le comportement de l'information mutuelle $I(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ entre $\mathbf{X}$ et $\mathbf{Y}$, les performances de l'estimateur bayésien optimal $\mathbb{E}(\mathbf{X}|\mathbf{Y})$ via, notamment, son erreur quadratique moyenne qui est liée à $I(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ par la relation I-MMSE ([10]), mais aussi de mettre en évidence des algorithmes de type "Approximate Message Passing" permettant d'approcher $\mathbb{E}(\mathbf{X}|\mathbf{Y})$ (voir par exemple [6] qui présente un ensemble de problèmes tels que l'analyse en composantes parcimonieuses, la détection de communautés ou le clustering dans le cas gaussien qui rentrent dans cette problématique). Le point de départ des nombreux travaux qui ont été publiés dans cette direction a été de remarquer que la distribution conditionnelle $dP(\mathbf{x}|\mathbf{Y})$ de $\mathbf{X}$ sachant $\mathbf{Y}$ a la forme d'une distribution de Gibbs, et qu'un certain nombre d'outils empiriques développés dans le contexte de la physique statistique pouvaient être utilisés avec profit (voir par exemple [8]). Ainsi, l'information mutuelle $I(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ est directement reliée à ce que l'on appelle l'énergie libre associée à $dP(\mathbf{x}|\mathbf{Y})$ qui est un objet très étudié par les physiciens grâce à la méthode non rigoureuse des répliques dans le contexte d'autres modèles. Grâce aux travaux de Talagrand et Panchenko (voir [9] et les références qui y sont citées), les prédictions fournies par la méthode des répliques dans le cadre du modèle dit de Sherrington-Kirkpatrick ont été établies mathématiquement dans les années 2000. [5] a adapté les approches de Talagrand et Panchenko pour établir rigoureusement la forme de l'énergie libre dans le cas du modèle symétrique

$$\mathbf{Y} = \sqrt{\frac{\lambda}{n}}\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \mathbf{W} \tag{1.1}$$

où $\mathbf{W}$ est une matrice $n \times n$ à éléments i.i.d. gaussiens standards, et où $\mathbf{X}$ est une matrice $n \times r$ à éléments i.i.d. de loi presque quelconque. L'énergie libre converge alors vers la solution d'un problème variationnel dans l'ensemble des matrices positives $r \times r$, et [5] en déduit la forme de la limite de $\frac{1}{n}I(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ et de l'erreur quadratique moyenne bien normalisée de l'estimateur $\mathbb{E}(\mathbf{X}\mathbf{X}^T|\mathbf{Y})$. Parallèlement, Barbier et Macris ont proposé une autre approche, appelée interpolation adaptative, pour établir rigoureusement la forme de l'énergie libre dans un bon nombre de modèles (modèle symétrique de rang 1 et extension dans le cas des tenseurs de rang 1 dans [1], modèle non symétrique de rang 1 avec a priori sphérique dans [7], etc...) tandis que [12] a adapté l'approche de Barbier-Macris pour traiter des modèles de matrices symétriques plus généraux dans le cas où r est autorisé à converger vers $+\infty$. Nous pouvons également mentionner l'approche de [4] basée sur une équation d'Hamilton Jacobi, et qui permet de considérer le cas où les matrices sont remplacées par des tenseurs de rang fini.

Dans ces travaux, la forme limite de l'énergie libre (et donc celle de l'information mutuelle) est la solution d'un problème de minimax dont la solution est rarement caractérisée finement sauf dans le cas de matrices $\mathbf{Y}_r(\mathbf{X})$ de rang 1. Nous pouvons néanmoins mentionner le récent article [2] qui montre que le problème variationnel dans l'ensemble des matrices positives $r \times r$ mis en évidence dans [5] a pour solution une matrice qui est un multiple scalaire de l'identité, et qu'il en résulte que l'erreur quadratique moyenne peut être vue comme la somme sur k des erreurs associées aux modèles $\sqrt{\frac{\lambda}{n}}\mathbf{X}_k\mathbf{X}_k^T + \mathbf{W}$ où $\mathbf{X}_k$ représente la colonne k de la matrice $\mathbf{X}$ apparaissant dans (1.1). Ceci suggère que lorsque $n \to +\infty$, les colonnes de $\mathbf{X}$ tendent à devenir conditionnellement indépendantes sachant l'observation $\mathbf{Y}$. Le but de cet article est de considérer un modèle non symétrique doté de lois a priori naturelles, et de résoudre de façon explicite le problème variationnel permettant d'évaluer le comportement asymptotique de son énergie libre. Il en résulte une expression explicite de l'information mutuelle et de l'erreur quadratique moyenne asymptotiques. Nous en déduisons également qu'un estimateur de la matrice de petit rang basée sur une analyse en composantes principales de $\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T$ et de $\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}$ est asymptotiquement optimal comme dans le cadre du modèle symétrique (1.1) de [5] dans le cas où la matrice $\mathbf{X}$ est gaussienne i.i.d.

2 Position du problème

Nous considérons le modèle non symétrique défini par la matrice $\mathbf{Y}$, de taille $n_1 \times n_2$, donnée par

$$\mathbf{Y} = \frac{\mathbf{U}_1\mathbf{\Delta}\mathbf{U}_2^T}{\sqrt{n}} + \mathbf{W} \tag{2.1}$$

où $\mathbf{\Delta}$ est une matrice déterministe $r \times r$, où $\mathbf{U}_1$ et $\mathbf{U}_2$ sont deux matrices aléatoires $n_1 \times r$ et $n_2 \times r$ indépendantes entre elles vérifiant $\mathbf{U}_i^T\mathbf{U}_i = n_i\mathbf{I}_r$ $i = 1, 2$, et suivant la loi uniforme sur les variétés considérées, c'est-à-dire que $\mathbf{U}_i$ peut-être obtenue comme $\mathbf{U}_i = \mathbf{X}_i\left(\frac{\mathbf{X}_i^T\mathbf{X}_i}{n_i}\right)^{-1/2}$ où les $(\mathbf{X}_i)_{i=1,2}$ sont des matrices $n_i \times r$ à éléments i.i.d. $\mathcal{N}(0,1)$ qui sont de surcroît indépendantes entre elles. La matrice $n_1 \times n_2$ $\mathbf{W}$ est elle gaussienne à éléments i.i.d. $\mathcal{N}(0,1)$. (2.1) généralise au cas $r > 1$ le modèle d'a priori sphérique étudié dans [7]. La loi a priori de (2.1) paraît tout à fait naturelle. En effet, si on considère une matrice déterministe $\mathbf{Y}_r$ de rang r et la matrice bruitée $\tilde{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y}_r + \mathbf{W}$, alors, si $\mathbf{\Theta}_1$ et $\mathbf{\Theta}_2$ sont deux matrices orthogonales $n_1 \times n_1$ et $n_2 \times n_2$ tirées indépendamment selon la loi uniforme sur le groupe des matrices orthogonales, alors $\mathbf{\Theta}_1\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{\Theta}_2^T$ a une forme similaire à (2.1) : $\mathbf{W}$ est transformée en une matrice possédant la même distribution, tandis qu'en écrivant la décomposition en valeurs singulières de $\mathbf{Y}_r = \frac{\tilde{\mathbf{U}}_1\mathbf{\Lambda}^{1/2}\tilde{\mathbf{U}}_2^\top}{\sqrt{n}}$, on aboutit à une représentation du terme de rang r possédant la même structure que dans (2.1), si ce n'est que la matrice $\mathbf{\Delta}$ sera réduite à la matrice diagonale $\mathbf{\Lambda}^{1/2}$ des valeurs singulières de $\mathbf{Y}_r$. En d'autres termes, le modèle $\tilde{\mathbf{Y}}$ peut être très simplement ramené au modèle bayésien (2.1), et nos résultats permettent donc d'éclairer d'un œil neuf ceux de [3] et [11]. Il convient enfin de noter que nous pourrions d'emblée demander à la matrice $\mathbf{\Delta}$ de (2.1) d'être diagonale à éléments positifs du fait de l'invariance par multiplication à droite par des matrices orthogonales de $\mathbf{U}_1$ et $\mathbf{U}_2$. Nous préférons toutefois différer cette simplification pour le dernier paragraphe de cet article consacré à l'analyse de l'erreur quadratique moyenne de l'estimateur $\mathbb{E}\left(\frac{\mathbf{U}_1\mathbf{\Delta}\mathbf{U}_2^T}{\sqrt{n}}|\mathbf{Y}\right)$.

Il est facile de vérifier que la loi conditionnelle $dP(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2|\mathbf{Y})$ de $(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2)$ sachant $\mathbf{Y}$ se met sous la forme $dP(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2|\mathbf{Y}) = \frac{1}{Z(\mathbf{Y})}e^{-\mathcal{H}(u_1,u_2,\mathbf{Y})}dP_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1)dP_{\mathbf{U}_2}(\mathbf{u}_2)$ où $dP_{\mathbf{U}_i}(\mathbf{u}_i)$ représente la loi de probabilité de $\mathbf{U}_i$ pour $i = 1, 2$, où $\mathcal{H}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{Y})$ est le terme, qualifié de Hamiltonien, défini par $\mathcal{H}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{Y}) = \frac{n_1 n_2}{2n}\mathrm{Tr}\,\mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^T - \frac{1}{\sqrt{n}}\mathrm{Tr}\,\mathbf{u}_1\mathbf{\Delta}\mathbf{u}_2^T\mathbf{Y}^T$ et où $\mathbf{Z}(\mathbf{Y})$ est le terme de normalisation, appelé fonction de partition, donné par

$$\mathbf{Z}(\mathbf{Y}) = \int e^{-\mathcal{H}(u_1,u_2,\mathbf{Y})}dP_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1)dP_{\mathbf{U}_2}(\mathbf{u}_2)\,.$$

L'information mutuelle $I(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \mathbf{Y})$, définie par

$$I(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \mathbf{Y}) = \mathbb{E}\log\left(\frac{dP(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2|\mathbf{Y})}{dP_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1)dP_{\mathbf{U}_2}(\mathbf{u}_2)}\right)_{\mathbf{U}_1,\mathbf{U}_2}$$

se met sous la forme

$$\begin{aligned} I(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \mathbf{Y}) &= -\mathbb{E}\left(\mathcal{H}(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \mathbf{Y})\right) - \mathbb{E}\left(\log Z(\mathbf{Y})\right) \\ &= \frac{n_1 n_2}{2n}\mathrm{Tr}\,\mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^T - \mathbb{E}\left(\log Z(\mathbf{Y})\right)\,. \end{aligned}$$

La quantité $\mathbb{E}\left(\log Z(\mathbf{Y})\right)$ est appelée énergie libre, et sa caractérisation est équivalente à celle de $I(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \mathbf{Y})$. Dans la suite, nous nous intéressons au comportement de $\frac{1}{n}I(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \mathbf{Y})$ lorsque n_1, n_2, n convergent vers $+\infty$ au même rythme, i.e. lorsque $\frac{n_i}{n} \to \alpha_i$ avec $\alpha_i > 0$. Par souci de simplification, nous supposons que la matrice $\mathbf{\Delta}$ de taille $r \times r$ ne dépend pas de n, mais cette hypothèse n'est nullement nécessaire. Il est clair que le comportement asymptotique de $\frac{1}{n}I(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \mathbf{Y})$ est équivalent à celui de l'énergie libre normalisée $f_n = \frac{1}{n}\mathbb{E}\left(\log Z(\mathbf{Y})\right)$ puisque

$$\frac{1}{n}I(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \mathbf{Y}) = \frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\mathrm{Tr}\,\mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^T - f_n\,. \tag{2.2}$$

L'étude de f_n lorsque $n \to +\infty$ peut être déduite des résultats de [12] (il suffit d'adapter l'exemple 5 de [12]), ce qui permet d'aboutir au fait que

$$\begin{aligned} f_n - \max_{0\leq\mathbf{M}_1\leq I_r}\min_{0\leq\mathbf{M}_2\leq I_r}(\alpha_1 f_n^{(1)}(\alpha_2\mathbf{\Delta}\mathbf{M}_2\mathbf{\Delta}^T) + \\ \alpha_2 f_n^{(2)}(\alpha_1\mathbf{\Delta}^T\mathbf{M}_1\mathbf{\Delta}) - \frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\mathrm{Tr}\,\mathbf{M}_1\mathbf{\Delta}\mathbf{M}_2\mathbf{\Delta}^T) \to 0 \end{aligned} \tag{2.3}$$

où pour chaque $i = 1, 2$, $f_n^{(i)}(\mathbf{R})$ représente l'énergie libre normalisée par $\frac{1}{n_i}$ du modèle de matrice aléatoire $n_i \times r$ $\mathbf{Y}^{(i)}$ défini par

$$\mathbf{Y}^{(i)} = \mathbf{U}_i\mathbf{R}^{1/2} + \mathbf{W}^{(i)}$$

où $\mathbf{R}$ est une matrice $r \times r$ déterministe positive et où $\mathbf{W}^{(i)}$ est une matrice aléatoire $n_i \times r$ à éléments i.i.d. $\mathcal{N}(0,1)$. En généralisant la technique utilisée dans [7], on peut montrer que l'énergie libre normalisée associée au modèle $\mathbf{Y}^{(i)}$ se comporte lorsque $n_i \to +\infty$ comme celle d'un modèle du même type, mais dans lequel la matrice orthogonale $\mathbf{U}_i$ de taille $n_i \times r$ est remplacée par une matrice $n_i \times r$ à éléments i.i.d. gaussiens standards. Dès lors, on obtient que

$$\lim_{n\to+\infty} f_n^{(i)}(\mathbf{R}) = \mathbf{\Phi}(\mathbf{R}) := \frac{1}{2}\left(\mathrm{Tr}\,\mathbf{R} - \log\det\left(\mathbf{I}+\mathbf{R}\right)\right)$$

et que

$$\lim_{n\to+\infty} f_n = \max_{0\leq \mathbf{M}_1\leq I_r} \min_{0\leq \mathbf{M}_2 \leq I_r} (\alpha_1 \mathbf{\Phi}(\alpha_2 \mathbf{\Delta}\mathbf{M}_2\mathbf{\Delta}^T) + \tag{2.4}$$
$$\alpha_2\mathbf{\Phi}(\alpha_1\mathbf{\Delta}^T\mathbf{M}_1\mathbf{\Delta}) - \frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\mathrm{Tr}\,\mathbf{M}_1\mathbf{\Delta}\mathbf{M}_2\mathbf{\Delta}^T).$$

Ceci montre en particulier que la forme asymptotique de l'énergie libre serait la même si les matrices orthogonales $\mathbf{U}_1$ et $\mathbf{U}_2$ étaient remplacées par deux matrices gaussiennes indépendantes entre elles à éléments i.i.d. $\mathcal{N}(0,1)$. Il est important de mentionner que l'on peut se contenter dans la formule (2.4) de prendre le maximum sur l'ensemble des matrices $\mathbf{M}_1$ vérifiant $0 \leq \mathbf{M}_1 \leq \mathbf{M}_1(\mathbf{\Delta}) < \mathbf{I}_r$ où

$$\mathbf{M}_1(\mathbf{\Delta}) = \mathbf{I}_r - \left(\mathbf{I}_r + \alpha_2\mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^T\right)^{-1}. \tag{2.5}$$

Pour justifier ce comportement, l'utilisation des résultats de [12] ne suffit pas, et il est nécessaire de rentrer finement dans la mécanique de la preuve de [7] consacré au cas où $r = 1$, et de l'adapter au cas où $r > 1$.

On déduit alors de (2.2) que si $\mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2)$ est la fonction définie par

$$\mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1,\mathbf{M}_2) = \frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\mathrm{Tr}\,(\mathbf{I}-\mathbf{M}_1)\mathbf{\Delta}(\mathbf{I}-\mathbf{M}_2)\mathbf{\Delta}^T + \frac{\alpha_1}{2}\log\det\left(\mathbf{I}+\alpha_2\mathbf{\Delta}\mathbf{M}_2\mathbf{\Delta}^T\right) + \frac{\alpha_1}{2}\log\det\left(\mathbf{I}+\alpha_1\mathbf{\Delta}^T\mathbf{M}_1\mathbf{\Delta}\right)$$

alors $\frac{1}{n}I(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \mathbf{Y}) \to i_\star$ où $i_\star$ est donnée par

$$i_\star = \min_{0\leq \mathbf{M}_1\leq \mathbf{M}_1(\mathbf{\Delta})} \max_{0\leq \mathbf{M}_2\leq I_r} \mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1,\mathbf{M}_2). \tag{2.6}$$

Dans la suite de l'article, nous évaluons explicitement $i_\star$ en résolvant explicitement le problème de minimax défini par le membre de droite de (2.6), déduisons de cela et de la relation I-MMSE ([10]) l'expression asymptotique de l'erreur quadratique moyenne bien normalisée de l'estimateur bayésien du terme de rang r de (2.1), et montrons qu'un estimateur de $\frac{\mathbf{U}_1\mathbf{\Delta}\mathbf{U}_2^T}{\sqrt{n}}$ basé sur une analyse en composantes principales de $\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T$ et $\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}$ est asymptotiquement optimal.

3 Solution du problème variationnel et expression de $i_\star$

Dans la suite, nous désignons par $\mathbf{\Delta} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}^{1/2}\tilde{\mathbf{V}}^T$ la décomposition en valeurs singulières de $\mathbf{\Delta}$, où les éléments $(\lambda_i)_{i=1,\ldots,r}$ de $\mathbf{\Lambda}$ sont rangés dans l'ordre décroissant. Alors, l'expression de $i_\star$ est donnée par le Théorème suivant.

Théorème 3.1 *Notons $\lambda_c := 1/\sqrt{\alpha_1\alpha_2}$ et définissons $r_c \in \{1,\cdots,r\}$ comme le plus grand entier tel que $\lambda_{r_c} > \lambda_c$. La fonction $\mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1,\mathbf{M}_2)$ atteint son minimax en le couple $(\mathbf{M}_{1,\star},\mathbf{M}_{2,\star})$ défini par :*

$$\mathbf{M}_{1,\star} := \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}_{1,\star}\mathbf{V}^\top \quad \textit{et} \quad \mathbf{M}_{2,\star} := \tilde{\mathbf{V}}\mathbf{\Sigma}_{2,\star}\tilde{\mathbf{V}}^\top,$$

où $\mathbf{\Sigma}_{1,\star}$ et $\mathbf{\Sigma}_{2,\star}$ sont deux matrices diagonales dont les éléments diagonaux $\sigma_{1,\star}(\lambda_i)$ et $\sigma_{2,\star}(\lambda_i)$ pour $i = 1,\cdots,r$ sont définis par

$$\sigma_{1,\star}(\lambda) := \frac{\alpha_2(\lambda^2-\lambda_c^2)_+}{\lambda(1+\alpha_2\lambda)} \quad \textit{et} \quad \sigma_{2,\star}(\lambda) := \frac{\alpha_1(\lambda^2-\lambda_c^2)_+}{\lambda(1+\alpha_1\lambda)}. \tag{3.1}$$

où x_+ représente $\max(x,0)$. De plus, $i_\star$, i.e. la valeur de $\mathbf{\Psi}$ au minimax, est égale à :

$$i_\star = \mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_{1,\star},\mathbf{M}_{2,\star}) = \frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\mathrm{Tr}\mathbf{\Lambda} + \frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\sum_{i=1}^{r_c} g(\lambda_i) - g(\lambda_c), \tag{3.2}$$

où g est la fonction définie par : $g(\lambda) = \frac{1}{\alpha_1\alpha_2\lambda} - \lambda + \frac{\alpha_1+\alpha_2}{\alpha_1\alpha_2}\log(\lambda) + \frac{\alpha_2-\alpha_1}{\alpha_1\alpha_2}\log\left(\frac{1+\alpha_1\lambda}{1+\alpha_2\lambda}\right)$.

On constate ainsi que $i_\star = i_\star(\mathbf{\Lambda})$ ne dépend que des valeurs propres de $\mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^T$. Faute de place, nous n'allons donner que quelques éléments de preuve.

Maximisation par rapport à $\mathbf{M}_2$. Fixons dans un premier temps une matrice $\mathbf{M}_1$ vérifiant $0 \leq \mathbf{M}_1 \leq \mathbf{M}_1(\mathbf{\Delta})$. Il est alors facile de vérifier que la fonction $\mathbf{M}_2 \to \mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1,\mathbf{M}_2)$ est strictement concave, et que sa différentielle s'annule en l'unique point $\hat{\mathbf{M}}_2(\mathbf{M}_1)$ solution de l'équation $\mathbf{I}_r - \mathbf{M}_1 = (\mathbf{I}_r + \alpha_2\mathbf{\Delta}\hat{\mathbf{M}}_2(\mathbf{M}_1)\mathbf{\Delta}^T)^{-1}$. On vérifie immédiatement que la condition $0 \leq \mathbf{M}_1 \leq \mathbf{M}_1(\mathbf{\Delta})$ implique que $0 \leq \hat{\mathbf{M}}_2(\mathbf{M}_1) \leq \mathbf{I}_r$. Dès lors, $\hat{\mathbf{M}}_2(\mathbf{M}_1)$ est l'unique maximiseur de $\mathbf{M}_2 \to \mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1,\mathbf{M}_2)$ satisfaisant la contrainte $0 \leq \hat{\mathbf{M}}_2(\mathbf{M}_1) \leq \mathbf{I}_r$. Notons que si $\mathbf{M}_1$ n'est pas inférieure à $\mathbf{M}_1(\mathbf{\Delta})$, la maximisation par rapport à $\mathbf{M}_2$ apparaît beaucoup plus compliquée. Ceci justifie l'importance de se restreindre aux matrices $\mathbf{M}_1 \leq \mathbf{M}_1(\mathbf{\Delta})$. En utilisant l'équation vérifiée par $\hat{\mathbf{M}}_2(\mathbf{M}_1)$, la quantité $\mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1) := \max_{0\leq\mathbf{M}_2\leq\mathbf{I}_r}\mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1,\mathbf{M}_2)$ s'écrit

$$\mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1) = \frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\mathrm{Tr}\mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^\top + \frac{\alpha_2}{2}\log\det\left(\mathbf{I}_r+\alpha_1\mathbf{\Delta}^\top\mathbf{M}_1\mathbf{\Delta}\right) - \frac{\alpha_1}{2}\log\det\left(\mathbf{I}_r-\mathbf{M}_1\right) - \frac{\alpha_1}{2}\mathrm{Tr}\mathbf{M}_1(\mathbf{I}_r+\alpha_2\mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^\top).$$

Minimisation par rapport à $\mathbf{M}_1$. Le point crucial consiste à remarquer que pour minimiser $\mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1)$, on peut se restreindre aux matrices $\tilde{\mathbf{M}}_1$ qui se diagonalisent dans la base des vecteurs singuliers à gauche de $\mathbf{\Delta}$, i.e. aux matrices $\tilde{\mathbf{M}}_1 = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}_1\mathbf{V}^\top$ où les valeurs propres $(\sigma_{1,i})_{i=1,\ldots,r}$ sont ordonnées dans l'ordre décroissant, et vérifient $0 \leq \sigma_{1,i} \leq \frac{\alpha_2\lambda_i}{1+\alpha_2\lambda_i}$ du fait de la contrainte $0 \leq \tilde{\mathbf{M}}_1 \leq \mathbf{M}_1(\mathbf{\Delta})$. Le point de départ de cette simplification provient du fait que si $\mathbf{M}_1 = \mathbf{V}_1\mathbf{\Sigma}_1\mathbf{V}_1^T$ est une matrice possédant les mêmes valeurs propres que $\tilde{\mathbf{M}}_1$, alors $\log\det\left(\mathbf{I}_r - \mathbf{M}_1\right) = \log\det\left(\mathbf{I}_r - \tilde{\mathbf{M}}_1\right)$, et qu'en conséquence, $\mathbf{\Psi}(\mathbf{M}_1) - \mathbf{\Psi}(\tilde{\mathbf{M}}_1)$ est égal à $\frac{\alpha_2}{2}\mathbf{\Theta}(\alpha_1\mathbf{M}_1) - \frac{\alpha_2}{2}\mathbf{\Theta}(\alpha_1\tilde{\mathbf{M}}_1)$ où $\mathbf{\Theta}(\mathbf{M}) := \log\det\left(\mathbf{I}_r + \mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^\top\mathbf{M}\right) - \mathrm{Tr}(\mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^\top\mathbf{M})$. On applique alors l'inégalité suivante à $\mathbf{A} = \mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^\top$ et $\mathbf{B} = \alpha_1\mathbf{M}_1$: Soient $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ deux matrices $r\times r$ positives et soient $(a_i)_{i=1,\ldots,r}$ et $(b_i)_{i=1,\ldots,r}$ les valeurs propres de $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ rangées dans l'ordre décroissant. Alors,

$$\log\det\left(\mathbf{I}_r + \mathbf{A}\mathbf{B}\right) - \mathrm{Tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}) \geq \sum_{i=1}^r \log(1+a_ib_i) - a_ib_i.$$

La preuve de ce résultat est omise faute de place. On en déduit que $\mathbf{\Theta}(\alpha_1\mathbf{M}_1) \geq \sum_{i=1}^r \left(\log(1+\alpha_1\lambda_i\sigma_{1,i}) - \alpha_1\lambda_i\sigma_{1,i}\right) =$

$\boldsymbol{\Theta}(\alpha_1 \tilde{\mathbf{M}}_1)$. Il suffit alors d'optimiser $\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{V}\boldsymbol{\Sigma}_1\mathbf{V}^\top)$ par rapport à $\boldsymbol{\Sigma}_1$. Dans ce cas, on a $\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{V}\boldsymbol{\Sigma}_1\mathbf{V}^\top) = \frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\mathrm{Tr}\boldsymbol{\Lambda} + \sum_{i=1}^r h(\sigma_{1,i}, \lambda_i)$ où $h(\sigma, \lambda) := \frac{\alpha_2}{2}\log(1 + \alpha_1\lambda\sigma) - \frac{\alpha_1}{2}\log(1-\sigma) - \frac{\alpha_1}{2}(1+\alpha_2\lambda)\sigma$. On peut donc optimiser cette fonction séparable par rapport à chacune des variables $\sigma_{1,i}$, et se référer aux résultats de [7] obtenus dans le cas $r = 1$ pour achever la démonstration du Théorème 3.1.

4 Evaluation du MMSE de l'estimateur bayésien

Dans ce paragraphe, nous évaluons le comportement de l'erreur quadratique moyenne normalisée $\mathrm{mmse}(\mathbf{Y}_r) := \frac{1}{n}\mathbb{E}\left(\|\mathbf{Y}_r - \mathbb{E}(\mathbf{Y}_r|\mathbf{Y})\|^2\right)$ où l'on désigne par $\mathbf{Y}_r$ la matrice de rang r, $\mathbf{Y}_r = \frac{\mathbf{U}_1\boldsymbol{\Delta}\mathbf{U}_2^T}{\sqrt{n}}$.

Théorème 4.1 *Le comportement asymptotique de* $\mathrm{mmse}(\mathbf{Y}_r)$ *est donné par*

$$\lim_{n\to+\infty} \mathrm{mmse}(\mathbf{Y}_r) = \alpha_1\alpha_2 \sum_{i=1}^r \lambda_i \left(1 - \sigma_{1,\star}(\lambda_i)\sigma_{2,\star}(\lambda_i)\right) \tag{4.1}$$

où $\sigma_{i,\star}(\lambda)$, $i = 1, 2$, *est défini par (3.1).*

(4.1) implique que $\mathrm{mmse}(\mathbf{Y}_r)$ peut être vu comme la somme sur i des erreurs quadratiques moyennes sur les matrices de rang 1 $n^{-1/2}\lambda_i^{1/2}\mathbf{U}_{1,i}\mathbf{U}_{2,i}^T$ lorsqu'elles sont observées bruitées séparément. En un sens, ceci suggère que les vecteurs $(\mathbf{U}_{1,i}, \mathbf{U}_{2,i})_{i=1,\dots,r}$ tendent à devenir conditionnellement indépendants sachant $\mathbf{Y}$ lorsque $n \to +\infty$. On retrouve donc le comportement mentionné dans [2] dans le contexte du modèle (1.1).

Nous donnons uniquement quelques éléments de preuve du Théorème 4.1. Nous posons $\mathbf{U}_1^{'} = \mathbf{U}_1\mathbf{V}$ et $\mathbf{U}_2^{'} = \mathbf{U}_2\tilde{\mathbf{V}}$, et remarquons que $\mathbf{Y}_r = \frac{\mathbf{U}_1^{'}\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\mathbf{U}_2^{'T}}{\sqrt{n}}$ où $\mathbf{U}_1^{'}$ et $\mathbf{U}_2^{'}$ suivent la même loi que $\mathbf{U}_1$ et $\mathbf{U}_2$. Dans ces conditions, il est clair que $I(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2; \mathbf{Y}) = I(\mathbf{U}_1^{'}, \mathbf{U}_2^{'}; \mathbf{Y})$. Nous tirons parti de la relation I-MMSE ([10]) appliquée au canal vectoriel $\mathrm{vec}(\mathbf{Y}) = \mathbf{H}(\boldsymbol{\Lambda})\frac{\mathbf{U}_2^{'}\otimes\mathbf{U}_1^{'}}{\sqrt{n}} + \mathrm{vec}(\mathbf{W})$ issu de la vectorisation de (2.1) où $\mathbf{H}(\boldsymbol{\Lambda}) = (\lambda_1^{1/2}, \dots, \lambda_r^{1/2}) \otimes \mathbf{I}_{n_1 n_2}$. La différentielle $\delta_{\mathbf{H}}(I)$ de $I(\mathbf{U}_1^{'}, \mathbf{U}_2^{'}; \mathbf{Y})$ par rapport à $\mathbf{H}$ est donnée par $\delta_{\mathbf{H}}(I) = \mathrm{Tr}\,\delta\mathbf{H}\mathbf{E}\mathbf{H}^\top$ où $\mathbf{E}$ représente la matrice $rn_1n_2 \times rn_1n_2$ dont chaque bloc $n_1n_2 \times n_1n_2$ $\mathbf{E}_{i,j}$, $1 \le i, j \le r$, est défini comme la matrice de covariance entre les erreurs d'estimation sur les vecteurs $\frac{\mathbf{U}_{2,i}^{'}\otimes\mathbf{U}_{1,i}^{'}}{\sqrt{n}}$ et $\frac{\mathbf{U}_{2,j}^{'}\otimes\mathbf{U}_{1,j}^{'}}{\sqrt{n}}$. On vérifie alors que $\frac{1}{n}\sum_{j=1}^r \lambda_j \frac{\partial I}{\partial \lambda_j} = \frac{1}{2}\mathrm{mmse}(\mathbf{Y}_r)$, et, en intervertissant limite sur n et dérivation par rapport aux $(\lambda_j)_{j=1,\dots,r}$, nous obtenons (4.1) à partir de l'équation (3.2).

Nous terminons en tirant parti de l'expression (4.1) pour établir que l'erreur quadratique moyenne de l'estimateur $\hat{\mathbf{Y}}_r$ de la matrice $\mathbf{Y}_r$ défini par

$$\hat{\mathbf{Y}}_r = \sum_{j=1}^r (\lambda_j\sigma_{1,*}(\lambda_j)\sigma_{2,*}(\lambda_j))^{1/2}\,\frac{\hat{\mathbf{U}}_{1,j}^{'}\hat{\mathbf{U}}_{2,j}^{'\top}}{\sqrt{n}} \tag{4.2}$$

converge quand $n \to +\infty$ vers $\mathrm{mmse}(\mathbf{Y}_r)$. $(\hat{\mathbf{U}}_{1,j}^{'}, \hat{\mathbf{U}}_{2,j}^{'})_{j=1,\dots,r}$ sont les vecteurs singuliers à gauche et à droite de $\mathbf{Y}$, normalisés pour que $\|\hat{\mathbf{U}}_{i,j}\| = n_i^{1/2}$. En d'autres termes, $\hat{\mathbf{Y}}_r$ est un estimateur asymptotiquement optimal. Cette propriété provient immédiatement, après un simple calcul, de la remarque que pour $i = 1, 2$, pour tous $j, k = 1, \dots, r$, conditionnellement à la donnée de $\mathbf{U}_1^{'}$ et $\mathbf{U}_2^{'}$, alors $\frac{1}{n_i}\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{'\top}\mathbf{U}_{i,k}^{'} \to \delta_{j,k}(\sigma_{i,*}(\lambda_j))^{1/2}$ presque sûrement [1], résultat bien connu relatif aux modèles Spike ([3], [11]).

5 Conclusion

Dans cet article, nous avons évalué explicitement les limites théoriques de l'estimation bayésienne d'une matrice de petit rang $\mathbf{Y}_r$ dans le cas où les espaces engendrés par les vecteurs singuliers à gauche et à droite de $\mathbf{Y}_r$ sont tirés uniformément. Si les résultats obtenus ne sont pas surprenants, ils constituent un premier pas qui devrait permettre leur généralisation, d'une part à des a priori plus généraux, et d'autre part au cas tensoriel.

Références

[1] J. Barbier, N. Macris, "The adaptive interpolation method : a simple scheme to prove the replica formulas in Bayesian interference", Probab. Theory Relat. Fields 174, 1133–1185 (2019).

[2] J. Barbier, J. Ko, A. A. Rahman "A multiscale cavity method for sublinear-rank symmetric matrix factorization", arXiv :2403.07189.

[3] F. Benaych-Georges, R.R. Nadakuditi,"The singular values and vectors of low rank perturbations of large rectangular random matrices", J. Multivariate Anal., vol. 111 (2012), pp. 120-135.

[4] H. Chen, J.C. Mourrat, J. Xia, "Statistical inference of finite-rank tensors", Annales Henri Lebesgue 5 (2022), 1161-1189.

[5] M. Lelarge, L. Miolane, "Fundamental limits of symmetric low-rank matrix estimation", Probab. Theory Relat. Fields (2029), 173 :859-929.

[6] T. Lesieur, F. Krzakala, L. Zdeborová, "Constrained Low-rank Matrix Estimation : Phase Transitions, Approximate Message Passing and Applications", J. Stat. Mech. 7 (2017) 073403.

[7] C. Luneau, N. Macris, J. Barbier, "High-dimensional rank-one nonsymmetric matrix decomposition : the spherical case", in Proc. ISIT 2020, Los Angeles, June 2016, voir aussi arXiv :2004.06975 pour une version longue.

[8] A. Montanari, S. Sen, "A friendly futorial on mean-field spin glass techniques for non-physicists", arXiv :2204.02909

[9] D. Panchenko, "The Sherrington-Kirkpatrick Model", Springer Monographs in Mathematics, New York, 2013.

[10] D. P. Palomar, S. Verdu, "Gradient of mutual information in linear vector Gaussian channels," IEEE Transactions on Information Theory, vol. 52, no. 1, pp. 141-154, Jan. 2006.

[11] D. Paul, “Asymptotics of sample eigenstruture for a large dimensional spiked covariance model”, Statistica Sinica, Vol. 17, No. 4, 1617-1642, 2007.

[12] G. Reeves, "Information theoretic limits for the matrix tensor product", IEEE J. on Selected Areas in Information Theory, vol. 1, no. 3, November 2020.

[1] ceci nécessite que $\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{'}$ et $\mathbf{U}_{i,j}^{'}$, a priori définis à un signe près, soient choisis de telle sorte que $\hat{\mathbf{U}}_{i,j}^{'\top}\mathbf{U}_{i,j}^{'} \ge 0$