

Décompositions tensorielles de tableaux de données multidimensionnels

Sebastian Miron, David Brie

CRAN - Université de Lorraine

Ecole d'été Peyresq - GRETSI
26 Juin 2017

Données multidimensionnelles

- Tableaux de données
- Décompositions tensorielles : algèbre multilinéaire
- Méthodes d'analyse, de représentation et de compression des données n-D

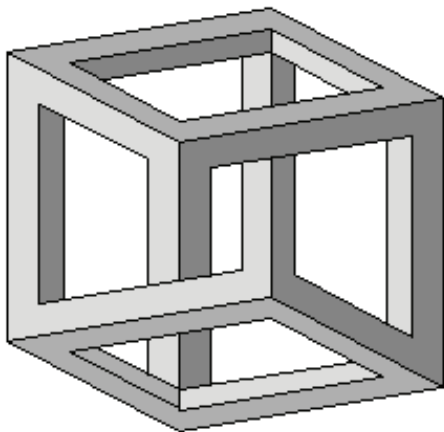
Applications

- Analyse de données : co-clustering, graphes
- Chimiométrie : MEEF, Microscopie Raman polarisée, RMN-ND
- Ingénierie biomédicale : EEG multivoie, ECG multivoie
- Biologie, environnement : gene array, bio-capteur, surveillance environnementale
- **Traitement d'antenne** : radar, astronomie, acoustique sous-marine, géophysique
- **Télécommunications** : MIMO, identification de canaux non-linéaires, ...

Sommaire

- Tenseurs
- Produits matriciels et tensoriels
- Décompositions tensorielles
- Décomposition de Tucker
- Décomposition Candecomp/Parafac
- Unicité de la décomposition CP

Tenseurs



Tableaux multidimensionnels

Fonction multivariable

$$\mathbf{v} = [v_1, \dots, v_N]$$

$$x : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$$

$$\mathbf{v} \mapsto x(\mathbf{v})$$

Cas discret : échantillonnage de $x(\mathbf{v}) \rightarrow$ tableau multidimensionnel

$$\mathcal{X}_{i_1 i_2 \dots i_N}$$

On assimile un tenseur $\mathcal{X}$ à un tableau multidimensionnel (!!!).

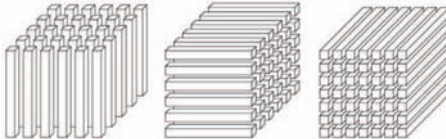
N : ordre d'un tenseur (= nombre de modes)

Notations

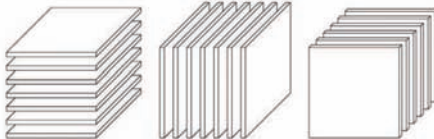
Scalaire s , vecteur $\mathbf{v} = [v_i]$, matrice $\mathbf{M} = [m_{ij}]$,

tenseur $\mathcal{T} = [t_{ijk}]$, $(\mathcal{T})_{ijk} = t_{ijk}$

Fibres, tranches (tenseur d'ordre 3)

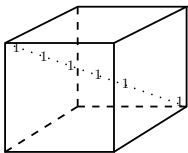


fibres : colonnes $\mathbf{x}_{:jk}$ lignes $\mathbf{x}_{i:k}$, tubes $\mathbf{x}_{ij:}$



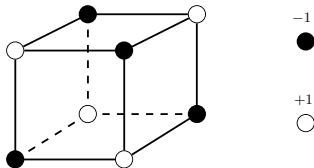
tranches : horizontales $\mathbf{X}_{i::}$, latérales $\mathbf{X}_{:j:}$, frontales $\mathbf{X}_{::k}$,

Tenseur diagonal, tenseur symétrique



Tenseur diagonal

$$(\mathcal{X})_{ijk} \neq 0 \text{ ssi } i = j = k$$



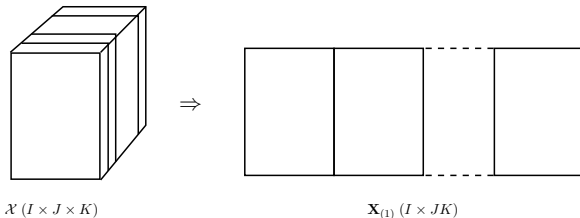
Tenseur (cubique) symétrique

$$(\mathcal{X})_{ijk} = \mathcal{X}_{\sigma(ijk)}, \sigma : \text{permutation}$$

Dépliants

Transformation d'un tenseur en une matrice

Un tenseur $\mathcal{X}$ peut se déplier de N façons différentes : $\mathbf{X}_{(n)}$



Transformation d'un tenseur en un vecteur

$$\mathbf{x} = \text{vec}(\mathcal{X}) (IJK \times 1)$$

Matlab (demo 1)

Produits matriciels et tensoriels



Produits matriciels et tensoriels (1)

Notations

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_R], (I \times R) \quad \mathbf{B} = [\mathbf{b}_1 \cdots \mathbf{b}_R], (J \times R)$$

Produit de Kronecker

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}\mathbf{B} & a_{12}\mathbf{B} & \cdots \\ a_{21}\mathbf{B} & a_{22}\mathbf{B} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Produit de Khatri-Rao

$$\mathbf{A} \odot \mathbf{B} = [\mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{b}_1 \cdots \mathbf{a}_R \otimes \mathbf{b}_R], (IJ \times R)$$

Produit de Hadamard (produit termes à termes)

$\mathbf{A}, \mathbf{B}$ matrices de même dimension $(I \times J)$

$$\mathbf{A} * \mathbf{B} = [a_{ij}b_{ij}], (I \times J)$$

Produits matriciels et tensoriels (2)

Propriétés

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})(\mathbf{C} \otimes \mathbf{D}) = \mathbf{AC} \otimes \mathbf{BD}$$

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})^\dagger = \mathbf{A}^\dagger \otimes \mathbf{B}^\dagger$$

$$(\mathbf{A} \odot \mathbf{B}) \odot \mathbf{C} = \mathbf{A} \odot (\mathbf{B} \odot \mathbf{C}) = \mathbf{A} \odot \mathbf{B} \odot \mathbf{C}$$

$$(\mathbf{A} \odot \mathbf{B})^\top (\mathbf{A} \odot \mathbf{B}) = \mathbf{A}^\top \mathbf{A} * \mathbf{B}^\top \mathbf{B}$$

$$(\mathbf{A} \odot \mathbf{B})^\dagger = (\mathbf{A}^\top \mathbf{A} * \mathbf{B}^\top \mathbf{B})^\dagger (\mathbf{A} \odot \mathbf{B})^\top$$

$^\top$: transposée

† : pseudoinverse

Produits matriciels et tensoriels (3)

Produit tensoriel

$\mathbf{a} \circ \mathbf{b}$, $(I \times J)$, $(\mathbf{a} \circ \mathbf{b})_{ij} = a_i b_j$ i.e. $\mathbf{a} \circ \mathbf{b} = \mathbf{a} \mathbf{b}^T$, matrice de rang 1.

$\mathbf{a} \circ \mathbf{b} \circ \mathbf{c}$, $(I \times J \times K)$, $(\mathbf{a} \circ \mathbf{b} \circ \mathbf{c})_{ijk} = a_i b_j c_k$ i.e. tenseur de rang 1.

Produit n-mode

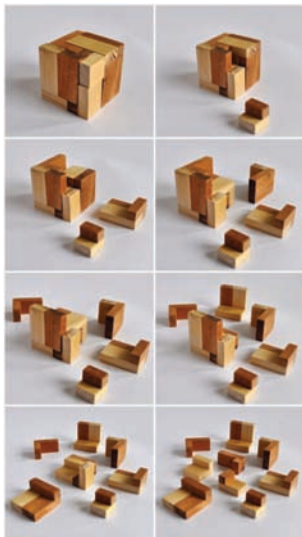
$$\mathbf{A} : (J \times I_n), \quad \mathcal{X} : (I_1 \times I_2 \cdots \times I_N)$$

$$\mathcal{X} \times_n \mathbf{A} : (I_1 \times \cdots \times I_{n-1} \times J \times I_{n+1} \cdots \times I_N)$$

$$(\mathcal{X} \times_n \mathbf{A})_{i_1 \cdots i_{n-1} j i_{n+1} \cdots i_N} = \sum_{i_n=1}^{I_1} x_{i_1 \cdots i_N} a_{j i_n}$$

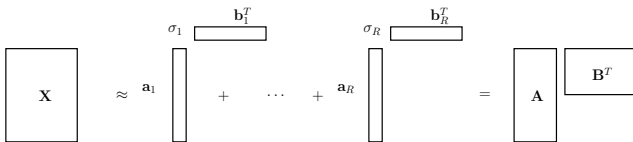
Matlab (demo 2)

Décompositions tensorielles



Factorisation d'une matrice

$$\mathbf{X} \approx \sum_{r=1}^R \mathbf{a}_r \mathbf{b}_r^T = \mathbf{A} \mathbf{B}^T$$



Rang d'une matrice : nombre minimal de matrices de rang 1 permettant de représenter $\mathbf{X} \Rightarrow$ **Approximation de rang faible**

Indéterminations : ordre, échelle, rotation

$$\mathbf{A} \mathbf{B}^T = (\mathbf{A} \mathbf{T})(\mathbf{T}^{-1} \mathbf{B}^T) = \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{B}}^T$$

$\Rightarrow$ **Contraintes** : orthogonalité (SVD), indépendance (ICA), non-négativité (NMF), parcimonie (Sparse-SVD), ...

$\Rightarrow$ **Augmenter la dimension des données** : tableaux multidimensionnels

De la SVD ... aux décompositions tensorielles

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T = (\mathbf{U}, \mathbf{V}) \cdot \mathbf{\Lambda}$$

$\mathbf{U}, \mathbf{V}$: matrices unitaires, $\mathbf{\Lambda}$: matrice diagonale

High Order SVD

$$\mathcal{X} = (\mathbf{U}, \mathbf{V}, \mathbf{W}) \cdot \mathcal{G}$$

- ▶ Préserve l'orthogonalité :
 $\mathbf{U}, \mathbf{V}, \mathbf{W}$ sont des matrices unitaires ... mais le tenseur coeur $\mathcal{G}$ n'est pas diagonal $\Rightarrow$ perte de la notion de rang

Décomposition CP

$$\mathcal{X} = (\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}) \cdot \mathcal{L}$$

- ▶ Le tenseur coeur $\mathcal{L}$ est diagonal $\Rightarrow$ préservation de la notion de rang ... mais $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ ne sont pas des matrices unitaires

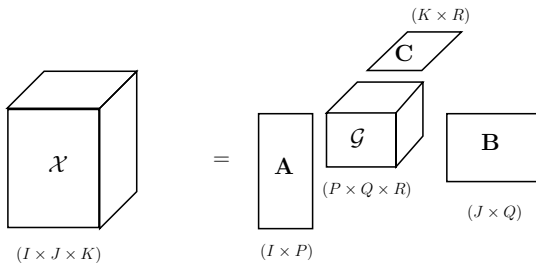
Décomposition de Tucker d'un tenseur d'ordre 3

[Tucker, 1966], [De Lathauwer 1997]

$$(\mathcal{X})_{ijk} = \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^Q \sum_{r=1}^R g_{pqr} a_{ip} b_{jq} c_{kr}$$

$$\mathcal{X} = \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^Q \sum_{r=1}^R g_{pqr} \mathbf{a}_p \circ \mathbf{b}_q \circ \mathbf{c}_r$$

$$\mathcal{X} = \mathcal{G} \times_1 \mathbf{A} \times_2 \mathbf{B} \times_3 \mathbf{C} = \llbracket \mathcal{G}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \rrbracket$$



Décomposition de Tucker d'un tenseur d'ordre N

$$\mathcal{X} = \mathcal{G} \times_1 \mathbf{A}^{(1)} \times_2 \mathbf{A}^{(N)} \cdots \times_N \mathbf{A}^{(N)} = \llbracket \mathcal{G}, \mathbf{A}^{(1)}, \dots, \mathbf{A}^{(N)} \rrbracket$$

Non unicité de la décomposition de Tucker

$$\mathcal{X} = \llbracket \mathcal{G} \times_1 \mathbf{T}_1 \times_2 \mathbf{T}_2 \times_3 \mathbf{T}_3, \mathbf{A}\mathbf{T}_1^{-1}, \mathbf{B}\mathbf{T}_2^{-1}, \mathbf{C}\mathbf{T}_3^{-1} \rrbracket$$

Contraintes : Orthogonalité des modes et du tenseur coeur $\Rightarrow$ HOSVD

$$\mathcal{X} = \llbracket \mathcal{G}, \mathbf{U}^{(1)}, \dots, \mathbf{U}^{(N)} \rrbracket$$

n-rank : rang colonne du tenseur déplié selon le mode n : $R_n = \text{rank}_n(\mathcal{X})$
 $\Rightarrow$ tenseur de rang- $(R_1, \dots, R_N)$

!! ne pas confondre avec le rang d'un tenseur

Meilleure approximation de rang- $(R_1, \dots, R_N)$ [De Lathauwer 1997]

Algorithme HOSVD

Data: Data $\mathcal{X}$, rank- $(R_1, \dots, R_N)$

for $n = 1, \dots, N$ **do**

 | $[\mathbf{U}_n, \mathbf{\Lambda}, \mathbf{V}_n] = \text{svd}(\mathbf{X}_{(n)}, R_n)$

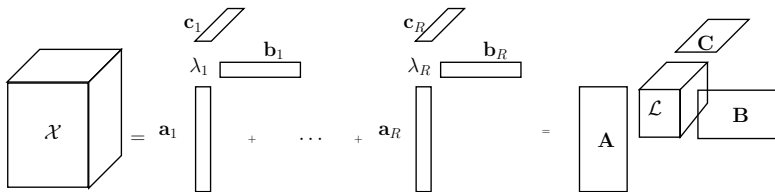
end

$$\mathcal{G} = \mathcal{X} \times_1 \mathbf{U}_1^\top \cdots \times_N \mathbf{U}_N^\top$$

Result: $\mathcal{G}$, $\mathbf{U}_1 \cdots \mathbf{U}_N$

Décomposition CP d'un tenseur d'ordre 3

CP : Candecom/Parafac [Hitchcock, 1927] [Harshman, 1970-1972], [Carroll - Chang, 1970]



Décomposition CP d'un tenseur d'ordre 3

$$\mathcal{X} \approx \sum_{r=1}^R \lambda_r \mathbf{a}_r \circ \mathbf{b}_r \circ \mathbf{c}_r = \llbracket \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \rrbracket$$
$$\mathbf{A}(I \times R), \mathbf{B}(J \times R), \mathbf{C}(K \times R)$$

Ecritures alternatives

$$\text{Tranche : } \mathbf{X}_{::k} = \mathbf{A} \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{D}_k(\mathbf{C}) \mathbf{B}^T, \quad k = 1, \dots, K$$

$$\text{Dépliage : } \mathbf{X}_{(1)} = \mathbf{A} \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{B} \odot \mathbf{C})^T, \quad (I \times KJ)$$

Décomposition CP d'un tenseur d'ordre N

$$\mathcal{X} = \sum_{r=1}^R \lambda_r \mathbf{a}_r^{(1)} \circ \dots \circ \mathbf{a}_r^{(N)} = \llbracket \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{A}^{(1)}, \dots, \mathbf{A}^{(N)} \rrbracket$$

$$\text{Dépliage : } \mathbf{X}_{(1)} = \mathbf{A}^{(1)} \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{A}^{(2)} \odot \dots \odot \mathbf{A}^{(N)})^T, \quad (I_1 \times I_2 \dots I_N)$$

Rang tensoriel

Rang du tenseur : nombre minimal de tenseur de rang 1 nécessaire pour représenter $\mathcal{X}$. Définition analogue au cas matriciel ... mais le rang tensoriel a des propriétés très différentes !

- Le rang d'un tenseur peut être différent si on considère une décomposition sur $\mathbb{R}$ ou $\mathbb{C}$
- Rang maximal

$$\text{rang}(\mathcal{X}) \leq \min(IJ, IK, JK)$$

- Rang typique : rang lorsque $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$ sont des matrices dont les valeurs sont des réalisations de v.a. à densité absolument continue

Tensor size	Typical rank with symmetry	Typical rank without symmetry
$I \times I \times 2$ (compact)	$\{I, I+1\}$	$\{I, I+1\}$
$2 \times 3 \times 3$ (compact)	$\{3, 4\}$	$\{3, 4\}$
$3 \times 2 \times 2$ (tall)	3	3
$I \times 2 \times 2$ with $I \geq 4$ (very tall)	3	4
$I \times 3 \times 3$ with $I = 6, 7, 8$ (tall)	6	I
$9 \times 3 \times 3$ (very tall)	6	9

[Kolda, Bader 2009]

- Approximation de rang faible : existence, impossibilité de calculer l'approximation de façon recursive

Algorithmes

- Survey : [Tomasi - Bro 2006]
- Moindres carrés alternés (ALS) [Harshman, 1970], [Bro, 1998]
- Méthode de descente de Gradient avec recherche de pas optimal [Rajih - Comon - Harshman, 2008], [Sorber - Van Barel - De Lathauwer, 2013].
- Diagonalisation conjointe, [De Lathauwer, 2006], [Luciani - Albera, 2014]
- Contrainte de non-négativité [Cichocki - Zdunek - Phan - Amari, 2009], [Royer - Thirion-Moreau - Comon, 2011].
- Parcimonie [Papalexakis - Sidiropoulos - Bro, 2013], [Sahnoun et *al.*, 2014]
- Boîte à outils : N-way (Matlab), tensor toolbox (Matlab), tensorlab (Matlab), three way (R)

Algorithme CP-ALS

Data: Data $\mathcal{X}$, rank R

Initialize $\mathbf{A}^{(n)} \in \mathbb{R}^{I_n \times R}$

repeat

for $n = 1, \dots, N$ **do**

$$\mathbf{V} = \mathbf{A}^{(1)\top} \mathbf{A}^{(1)} * \dots * \mathbf{A}^{(n-1)\top} \mathbf{A}^{(n-1)} * \mathbf{A}^{(n+1)\top} \mathbf{A}^{(n+1)} * \dots * \mathbf{A}^{(N)\top} \mathbf{A}^{(N)}$$

$$\mathbf{A}^{(n)} = \mathbf{X}_n(\mathbf{A}^{(1)} \odot \dots \odot \mathbf{A}^{(n-1)} \odot \dots \odot \mathbf{A}^{(n+1)} \odot \dots \odot \mathbf{A}^{(N)}) \mathbf{V}^\dagger$$

 Normalize columns of $\mathbf{A}^{(n)}$ (storing norms as λ)

end

until *fitting does not improve or max iteration reached*;

Result: $\lambda, \mathbf{A}^{(1)} \dots \mathbf{A}^{(N)}$

Unicité de la décomposition CP



Unicité

Unicité essentielle : unicité aux indéterminations d'ordre et d'échelle près.

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}] = [\mathbf{A}\mathbf{\Pi}\mathbf{\Delta}_A, \mathbf{B}\mathbf{\Pi}\mathbf{\Delta}_B, \mathbf{C}\mathbf{\Pi}\mathbf{\Delta}_C]$$

avec $\mathbf{\Pi}$: matrice de permutation et $\mathbf{\Delta}_A$, $\mathbf{\Delta}_B$, $\mathbf{\Delta}_C$: matrices diagonales telles que $\mathbf{\Delta}_A\mathbf{\Delta}_B\mathbf{\Delta}_C = \mathbf{I}$

Rang de Kruskal k_A : valeur maximale de k telle que toute sélection de k colonnes de $\mathbf{A}$ forme une famille libre ($k_A \leq r_A = \text{rang } \mathbf{A}$).

Remarque : $\text{spark}(\mathbf{A}) = k_A + 1$

Exemples :

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3 \quad \mathbf{a}_4]$$

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_3 \quad \mathbf{a}_4]$$

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_4]$$

Unicité

Condition de Kruskal : si $k_A, k_B, k_C \geq 2$ et $k_A + k_B + k_C \geq 2R + 2$, alors $[[A, B, C]]$ est essentiellement unique [Kruskal, 1977].

Si $k_A = 1$, modèle non identifiable

Cas d'une matrice de rang colonne plein : si C est de rang colonne plein et que les matrices A et B satisfont 1) $k_A, k_B \geq 2$ et 2) $r_A + k_B \geq R + 2$ ou $r_B + k_A \geq R + 2$ alors $[[A, B, C]]$ est essentiellement unique [Guo, 2011].

Identifiabilité générique : si A, B et C sont des matrices dont les valeurs sont des réalisations de v.a. à densité absolument continue et dont les dimensions sont telles que I, J, K alors $[[A, B, C]]$ est essentiellement unique si $R \leq K$ et $R(R-1) \leq \frac{I(I-1)J(J-1)}{2}$ [De Lathauwer, 2006].

Exemple : $I = 5, J = 6 \Rightarrow R \leq 15 \leq K$

Remarque : identifiabilité générique interdit les colinéarités !

Décomposition CP d'un tenseur d'ordre N

$$\mathcal{X} = \sum_{r=1}^R \mathbf{a}_r^{(1)} \circ \dots \circ \mathbf{a}_r^{(N)} = \llbracket \mathbf{A}^{(1)}, \dots, \mathbf{A}^{(N)} \rrbracket$$

Unicité essentielle : $\sum_{n=1}^N k_{\mathbf{A}^{(n)}} \geq 2R + (N - 1)$, [Sidiropoulos, Bro, 2000]

Plus l'ordre du tenseur augmente, moins les conditions d'unicité sont restrictives

Par exemple, l'unicité peut être obtenue dans des cas où la condition précédente n'est pas vérifiée. Par exemple, tenseur d'ordre 4 avec des colinéarités sur 3 modes.

Identifiabilité générique (ordre 4) : si $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$ et $\mathbf{D}$ sont des matrices dont les valeurs sont des réalisations de v.a. à densité absolument continue et dont les dimensions sont telles que I, J, K, L alors $\llbracket \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D} \rrbracket$ est essentiellement unique si $R \leq L$ et $R(R - 1) \leq \frac{IJK(3IJK - IJ - IK - JK - I - J - K + 3)}{4}$ [De Lathauwer, 2006].

Décomposition CP avec dépendances linéaires

Exemple : modèle Paralind

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{H}_A$$

$\mathbf{H}_A$: matrice de rang déficient

$\tilde{\mathbf{A}}$: matrice de rang colonne plein

Exemple

$$[\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2] = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2] \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Comment la dépendance linéaire affecte-t-elle l'unicité de la décomposition $[[\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{H}_A, \tilde{\mathbf{B}}\mathbf{H}_B, \tilde{\mathbf{C}}\mathbf{H}_C]]$?

Quelques principes gouvernant l'unicité du modèle CP avec dépendances linéaires [Bro, 2009]

CP d'ordre 3

"If a factor has loading vectors that are linearly independent of all other factors in at least three modes, that factor will be uniquely determined"

$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3 \quad \mathbf{a}_2]$, $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1 \quad \mathbf{b}_2 \quad \mathbf{b}_3 \quad \mathbf{b}_3]$, $\mathbf{C} = [\mathbf{c}_1 \quad \mathbf{c}_2 \quad \mathbf{c}_2 \quad \mathbf{c}_3]$,
alors le facteur $\mathbf{a}_1 \circ \mathbf{b}_1 \circ \mathbf{c}_1$ est déterminé de façon unique

"If two factors have colinear loadings in one mode of a three-mode array, they will not be uniquely determined ; their loadings will not be resolved in the two non-colinear modes"

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_3], \mathbf{B} = [\mathbf{b}_1 \quad \mathbf{b}_2 \quad \mathbf{b}_3] \text{ and } \mathbf{C} = [\mathbf{c}_1 \quad \mathbf{c}_2 \quad \mathbf{c}_3],$$

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \rrbracket &= \mathbf{a}_1 \circ \mathbf{b}_1 \circ \mathbf{c}_1 + \mathbf{a}_1 \circ \mathbf{b}_2 \circ \mathbf{c}_2 && + \mathbf{a}_3 \circ \mathbf{b}_3 \circ \mathbf{c}_3 \\ &= \mathbf{a}_1 \circ \left([\mathbf{b}_1 \quad \mathbf{b}_2] \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1^T \\ \mathbf{c}_2^T \end{bmatrix} \right) && + \mathbf{a}_3 \circ \mathbf{b}_3 \circ \mathbf{c}_3 \\ &= \mathbf{a}_1 \circ \left([\mathbf{b}_1 \quad \mathbf{b}_2]^T T^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1^T \\ \mathbf{c}_2^T \end{bmatrix} \right) && + \mathbf{a}_3 \circ \mathbf{b}_3 \circ \mathbf{c}_3 \end{aligned}$$

"If two factors have colinear loadings in two modes of a three modes array (or $N - 1$ modes of an N -way array), they will collapse into a single factor"

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_3], \mathbf{B} = [\mathbf{b}_1 \quad \mathbf{b}_1 \quad \mathbf{b}_3], \mathbf{C} = [\mathbf{c}_1 \quad \mathbf{c}_2 \quad \mathbf{c}_3],$$

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \rrbracket &= \mathbf{a}_1 \circ \mathbf{b}_1 \circ \mathbf{c}_1 + \mathbf{a}_1 \circ \mathbf{b}_1 \circ \mathbf{c}_2 && + \mathbf{a}_3 \circ \mathbf{b}_3 \circ \mathbf{c}_3 \\ &= \mathbf{a}_1 \circ \mathbf{b}_1 \circ (\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2) && + \mathbf{a}_3 \circ \mathbf{b}_3 \circ \mathbf{c}_3 \end{aligned}$$

Unicité partielle de la décomposition CP avec deux matrices de rang colonne plein

B and **C** : matrices de rang colonne plein

A : $r_{\mathbf{A}} \geq 2$ et $k_{\mathbf{A}} = 1$.

$$\mathbf{A} = [\mathbf{A}_1 \cdots \mathbf{A}_N \check{\mathbf{A}}]$$

avec $\mathbf{A}_i = [\mathbf{a}_i \cdots \mathbf{a}_i]$, $(K \times F_i)$ $\check{\mathbf{A}} = [\mathbf{a}_{\tilde{F}+1} \cdots \mathbf{a}_F]$, $(K \times \check{F})$

$$\tilde{F} = \sum_i F_i \text{ et } \check{F} = F - \tilde{F}$$

$$\mathbf{B} = [\mathbf{B}_1 \cdots \mathbf{B}_N \check{\mathbf{B}}] \quad \mathbf{C} = [\mathbf{C}_1 \cdots \mathbf{C}_N \check{\mathbf{C}}]$$

Modèle Block Parafac $(1 \times F_i \times F_i)$

$$\underline{\mathbf{X}} = \sum_{i=1}^N \mathbf{a}_i \circ (\mathbf{B}_i \mathbf{C}_i^T) + \llbracket \check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}} \rrbracket$$

Théorème : Unicité partielle avec deux matrices de rang colonne plein
 Soit $\mathcal{X}$ un tenseur d'ordre 3 admettant une décomposition CP de rang R . Si $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$ sont deux matrices de rang colonne plein, la décomposition est partiellement unique : $\forall i$, $\text{span}(\mathbf{B}_i)$ et $\text{span}(\mathbf{C}_i)$ sont uniques et $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}]$ est unique.

Les espaces $\text{span}(\mathbf{B})$ et $\text{span}(\mathbf{C})$ sont décomposés en N sous-espaces transformables (sur lesquels l'unicité partielle est garantie) et un sous-espace non transformable sur lequel l'unicité est garantie.

Unicité unimodale de la décomposition CP

Théorème : unicité unimodale [Guo et al, 2013]

Considérons la décomposition CP $\mathcal{X} = \llbracket \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \rrbracket$ de rang R . Si la condition

$$r_{\mathbf{A}} + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} \geq 2R + 2$$

est satisfaite, alors la matrice $\mathbf{A}$ peut être déterminée de façon unique à partir de $\mathcal{X}$.

Remarques

- L'unicité est acquise même si $\mathbf{A}$ présente des colonnes colinéaires, *i.e.* $k_{\mathbf{A}} = 1$. Si il n'y a que des colinéarités, on obtient une décomposition BTD (Block Tensor Decomposition) [De Lathauwer, 2008].
- Il n'y a pas de garantie quant à l'unicité de $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$.
- Si $k_{\mathbf{A}} = r_{\mathbf{A}}$, Théorème 1 $\iff$ condition de Kruskal.
- Deux autres conditions suffisantes sont données dans [Guo et al, 2013]

Unicité partielle de la décomposition CP

Partition de $\mathbf{A}$ en N sous-matrices Considérons la partition suivante de la matrice $\mathbf{A}$

$$\mathbf{A}\mathbf{\Pi}_A = [\mathbf{A}_1 | \dots | \mathbf{A}_N], \quad \text{avec} \quad \sum_{n=1}^N R_n = R$$

$$\text{span}(\mathbf{A}) = \text{span}(\mathbf{A}_1) \oplus \dots \oplus \text{span}(\mathbf{A}_N)$$

$$\mathbf{B}\mathbf{\Pi}_A = [\mathbf{B}_1 | \dots | \mathbf{B}_N]$$

$$\mathbf{C}\mathbf{\Pi}_A = [\mathbf{C}_1 | \dots | \mathbf{C}_N]$$

Théorème 2 : unicité partielle [Guo et al, 2013]

Si $\mathbf{A}$ est identifiable, alors $\mathcal{X}$ peut se décomposer de manière unique en somme de N sous-blocs de type CP, $[\mathbf{A}_n, \mathbf{B}_n, \mathbf{C}_n]$, avec R_n composantes. A l'intérieur de chaque sous-bloc, les colonnes de $\mathbf{A}_n$ sont déterminées de façon unique. Les sous-matrices $\mathbf{B}_n$ et $\mathbf{C}_n$ peuvent être déterminées de façon unique si le sous-modèle de mélange donné par $[\mathbf{A}_n, \mathbf{B}_n, \mathbf{C}_n]$ est identifiable.

Exemples

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3 \quad \mathbf{a}_4 \quad \mathbf{a}_5 \quad \mathbf{a}_5], \quad r_{\mathbf{A}} = 5, \quad k_{\mathbf{A}} = 1$$

$$\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1 \quad \mathbf{b}_2 \quad \mathbf{b}_3 \quad \mathbf{b}_4 \quad \mathbf{b}_5 \quad \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3 + \mathbf{b}_4 + \mathbf{b}_5], \quad r_{\mathbf{B}} = 5, \quad k_{\mathbf{B}} = 5$$

$$\mathbf{C} = [\mathbf{c}_1 \quad \mathbf{c}_2 \quad \mathbf{c}_3 \quad \mathbf{c}_4 \quad \mathbf{c}_5 \quad \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 + \mathbf{c}_3 + \mathbf{c}_4], \quad r_{\mathbf{C}} = 5, \quad k_{\mathbf{C}} = 4$$

$\mathbf{A}$ identifiable, modes 1 à 4 de $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$ identifiables, modes 5 et 6 de $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$ non-identifiables

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3 \quad \mathbf{a}_4 \quad \mathbf{a}_5 \quad \mathbf{a}_4 + \mathbf{a}_5], \quad r_{\mathbf{A}} = 5, \quad k_{\mathbf{A}} = 2$$

$$\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1 \quad \mathbf{b}_2 \quad \mathbf{b}_3 \quad \mathbf{b}_4 \quad \mathbf{b}_5 \quad \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3 + \mathbf{b}_4 + \mathbf{b}_5], \quad r_{\mathbf{B}} = 5, \quad k_{\mathbf{B}} = 5$$

$$\mathbf{C} = [\mathbf{c}_1 \quad \mathbf{c}_2 \quad \mathbf{c}_3 \quad \mathbf{c}_4 \quad \mathbf{c}_5 \quad \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 + \mathbf{c}_3 + \mathbf{c}_4], \quad r_{\mathbf{C}} = 5, \quad k_{\mathbf{C}} = 4$$

$\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$ identifiables

Matlab (demo 3)

Décomposition CP d'ordre 4 avec modes colinéaires

$$\mathcal{X} = \sum_{f=1}^3 \mathbf{a}_f \circ \mathbf{b}_f \circ \mathbf{c}_f \circ \mathbf{d}_f$$

where :

$\mathbf{D}$ is full column rank

$$r_{\mathbf{D}} = k_{\mathbf{D}} = 3;$$

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_1],$$

$$r_{\mathbf{A}} = 2, k_{\mathbf{A}} = 1;$$

$$\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1 \quad \mathbf{b}_1 \quad \mathbf{b}_2],$$

$$r_{\mathbf{B}} = 2, k_{\mathbf{B}} = 1;$$

$$\mathbf{C} = [\mathbf{c}_1 \quad \mathbf{c}_2 \quad \mathbf{c}_2],$$

$$r_{\mathbf{C}} = 2, k_{\mathbf{C}} = 1.$$

$$k_{\mathbf{A}} + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} + k_{\mathbf{D}} = 6 \leq 9 = 2F + 3$$

Mais les simulations semblent indiquer que la décomposition est unique !

Hypothèse CLO (Collinear Loadings Only) : une matrice satisfait l'hypothèse CLO si le seul type de dépendance est la colinéarité $\Rightarrow$ le k-rang vaut 1 ou R

Décomposition du modèle CP

$$[[\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}]] = \sum_{i=1}^N \mathbf{a}_i \circ [[\mathbf{B}_i, \mathbf{C}_i, \mathbf{D}_i]] + [[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}, \check{\mathbf{D}}]]$$

Theorème (Unicité de décomposition CP d'ordre 4 avec colinéarités) Soit un tenseur d'ordre 4 $\mathcal{X}$ admettant une décomposition CP de rang R . Si chacune des matrices satisfait l'hypothèse CLO, alors la décomposition est unique si :

- ▶ $\mathbf{D}$ est de rang colonne plein ;
- ▶ $\forall n \neq m, (\mathbf{a}_n \neq \alpha \mathbf{a}_m, \mathbf{b}_n \neq \beta \mathbf{b}_m)$ or $(\mathbf{a}_n \neq \alpha \mathbf{a}_m, \mathbf{c}_n \neq \gamma \mathbf{c}_m)$ or $(\mathbf{b}_n \neq \beta \mathbf{b}_m, \mathbf{c}_n \neq \gamma \mathbf{c}_m)$
- ▶ $\forall i, k_{\mathbf{B}_i} + k_{\mathbf{C}_i} \geq R_i + 2$

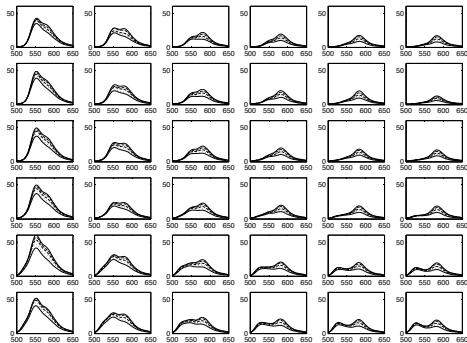
Example : analyse de spectres de fluorescence

3 colorants fluorescents :Oregon Green 514 (OG514), Rhodamine 6G (R6G), Rhodamine B(RB)

	Concentration	Acidité	Température
OG514	0	++	+
R6G	++	0	+
RB	0	0	++

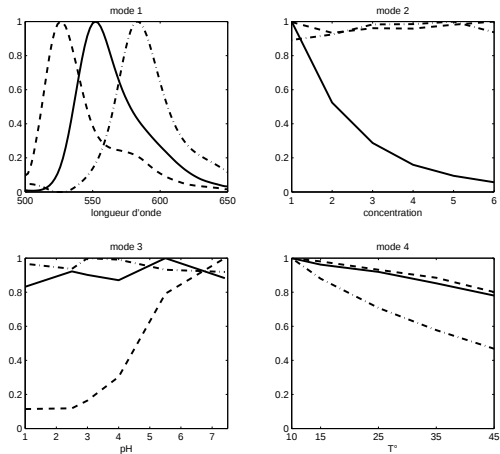
Données

6³ spectres organisées dans un tableau 4-D

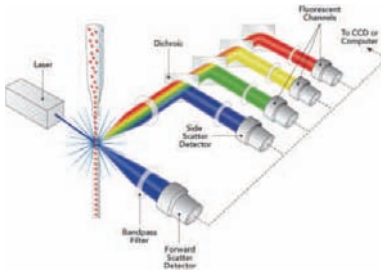


Résultat de la décomposition CP d'ordre 4

$R = 3$, CP-ALS avec contrainte de positivité



Analyse de séquences de densités

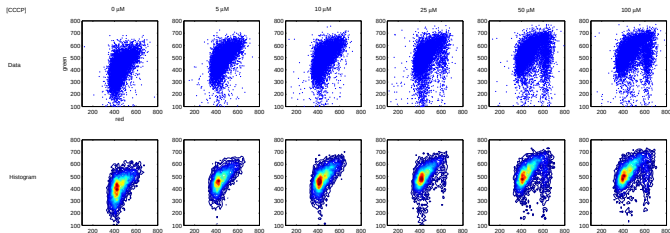


Cytométrie en flux

- Une technique d'analyse très utilisée en biologie et médecine
- Objectif : déterminer la réponse d'une population de cellules à un paramètre environnemental, chimique ou biologique

Etude du potentiel mitochondrial de cellules

Sonde JC-1, CCCP : agent découplant,

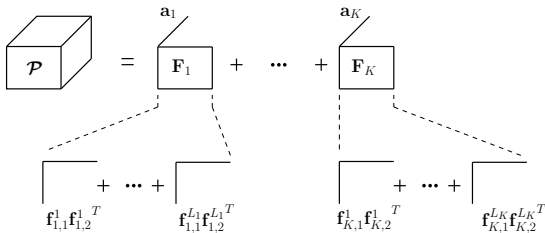


Réponse de cellules T47D en fonction de la concentration en CCCP
(ligne supérieure : données - ligne inférieure : histogrammes 2-D)

Décomposition BTD non-négative de séquences de densités

$$\mathcal{P} = \sum_{k=1}^K \mathbf{a}_k \circ \mathbf{F}_k, \quad \mathbf{F}_k = \sum_{l=1}^{L_k} \mathbf{f}_{k,1}^l \circ \mathbf{f}_{k,2}^l = \sum_{l=1}^{L_k} \mathbf{f}_{k,1}^l \mathbf{f}_{k,2}^{l^T}.$$

$$\mathcal{P} = \sum_{k=1}^K \mathbf{a}_k \circ (\mathbf{F}_{1,k} \mathbf{F}_{2,k}^T),$$



Identifiabilité

- Unicité partielle du model CP + unicité des NMF $\mathbf{F}_{1,k} \mathbf{F}_{2,k}^T \Rightarrow$ unicité du modèle BTD

Traitement des données

- Estimation des histogrammes 2-D
- Décomposition CP non-négative de rang suffisamment grand + clustering et moyennage des composantes les plus colinéaires du mode $\mathbf{A}$
- Décomposition BTD Non-negative : algorithme `btdLx1nn_nls` (tensorlab)
- Normalisation des densités

Résultats de la décomposition BTD non-négative

