Courte introduction à l'optimisation pour modèles tensoriels

Jérémy E. Cohen

1 Le formalisme des décompositions tensorielles

Le produit tensoriel a été introduit en 1938 par Whitney. Une construction formelle dans le language moderne des mathématiques est ensuite développée par le collectif Bourbaki dans leur série sur l'Algèbre. Dans ce cours, nous n'aborderons que le cas particulier du produit tensoriel entre vecteurs de réels. De plus, il existe plusieurs produits tensoriel (une infinité en fait), nous choisissons donc un seul produit tensoriel, canonique, pour cet espace.

Définition 1. Soit $\{x_i\}_{i\leq M}$ des vecteurs respectivement dans $\mathbb{R}^{N_i}$, N_i entiers non nuls. Alors le produit tensoriel des x_i se note $x_1 \otimes x_2 \otimes \cdots \otimes x_M$, c'est un tableau de $\mathbb{R}^{N_1\times N_2\times\cdots\times N_M}$ tel que

$$[x_1 \otimes x_2 \otimes \cdots \otimes x_M]_{j_1,\ldots,j_M} = \prod_{k=1}^{M} [x_i]_{j_k}$$

Il est important de remarquer que le produit tensoriel vérifie la propriété suivante :

$$\forall i \leq M\ \forall \lambda \in \mathbb{R},\ x_1 \otimes \cdots \otimes (\lambda x_i + y_i) \otimes \cdots \otimes x_M = \lambda (x_1 \otimes \cdots \otimes x_i \otimes \cdots \otimes x_M) + x_1 \otimes \cdots \otimes y_i \otimes \cdots \otimes x_M$$

ce qui signifie que le produit tensoriel est linéaire par rapport à chacun des termes du produit. On dit que le produit tensoriel est un opérateur multilinéaire. L'objet résultant d'un produit tensoriel est appelé un tenseur.

Exemple 1.

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 3 & 0 & -3 \end{bmatrix}$$

Le produit tensoriel peut servir à définir un modèle reliant des paramètres d'intérêt à un tableau de données, lorsque le modèle physique sous-jacent aux données est multilinéaire. Un cas particulier très intéressant car rencontré en pratique dans beaucoup d'applications est le modèle appelé Décomposition Canonique Polyiadique (CPD).

Définition 2. Soit $\boldsymbol{\mathcal{T}}$ un tenseur réel de tailles $N_1 \times \cdots \times N_M$. $\boldsymbol{\mathcal{T}}$ admet une décomposition canonique polyadique de rang R si et seulement si il existe des vecteurs $\{a_r^i\}_{i \leq M; r \leq R}$ tels que

$$\boldsymbol{\mathcal{T}} = \sum_{r=1}^{R} a_r^1 \otimes \cdots \otimes a_r^M \tag{1}$$

R est appelé le rang de la décomposition. Le rang d'un tenseur $\boldsymbol{\mathcal{T}}$ est le rang minimal de toutes les décompositions possibles de $\boldsymbol{\mathcal{T}}$. Il coincide avec le rang usuel des matrices pour $M = 2$.

Exemple 2. $\boldsymbol{\mathcal{I}}_R = \sum_{r=1}^{R} \bigotimes_i \mathbb{1}_i$

L'intérêt principal de la CPD est qu'il existe en général une seule décomposition de rang minimal d'un tenseur, contrairement au cas des matrices. Cela permet d'assurer que les paramètres qui seront estimés par la suite en résolvant un problème d'optimisation sont ceux du modèle physique sous-jacent.

Proposition 1. La CPD d'une matrice de rang strictement supérieur à 1 n'est jamais unique. La CPD d'un tenseur d'ordre M supérieur ou égale à 3 et de rang R petit devant les dimensions N_i est unique (à permutations et échelle près) avec probabilité 1. (Admis)

Une autre propriété très intéressante en pratique est que la CPD d'un tenseur est linéaire par rapport à chacun des paramètres. En particulier, il est possible de réordonner les coefficients du tenseur pour obtenir trois matrices de rang faible :

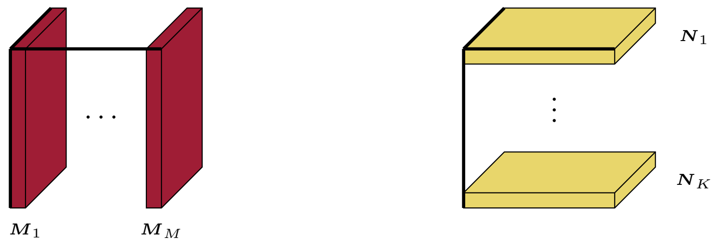
Définition 3. Soit $\boldsymbol{\mathcal{T}}$ un tenseur de $\mathbb{R}^{K \times L \times M}$ vérifiant (1) pour $M = 3$. Alors on peut réordonner les coefficients de $\boldsymbol{\mathcal{T}}$ en trois matrices $\boldsymbol{T}_1, \boldsymbol{T}_2, \boldsymbol{T}_3$ de tailles $I \times JK, J \times IK, K \times IJ$ telles que :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{T}_1 &= \boldsymbol{A}_1 \left(\boldsymbol{A}_2 \odot \boldsymbol{A}_3\right)^T \\ \boldsymbol{T}_2 &= \boldsymbol{A}_2 \left(\boldsymbol{A}_1 \odot \boldsymbol{A}_3\right)^T \\ \boldsymbol{T}_3 &= \boldsymbol{A}_3 \left(\boldsymbol{A}_1 \odot \boldsymbol{A}_2\right)^T \end{aligned} \tag{2}$$

où $\boldsymbol{A}_i = [a_1^i, \ldots, a_R^i]$, et $\odot$ est appelé le produit de Khatri Rao (définition de $\odot$ non nécessaire mais preuve faite au tableau).

2 Décomposer un tenseur suivant le modèle CPD

On suppose maintenant que l'on dispose d'un jeu de données regroupées dans un tableau $\boldsymbol{\mathcal{T}}$ à $M = 3$ entrées qui suit approximativement un modèle CPD de rang R. On souhaite ainsi obtenir la meilleure approximation des données par un modèle CPD de rang R. Le problème d'optimisation est donc le suivant :



$$\begin{aligned}\boldsymbol{T}_{(1)} &= \quad [\boldsymbol{M}_1|\dots|\boldsymbol{M}_K]\\ \boldsymbol{T}_{(2)} &= \quad [\boldsymbol{N}_1|\dots|\boldsymbol{N}_K]\\ \boldsymbol{T}_{(3)} &= \quad [\boldsymbol{N}_1^T|\dots|\boldsymbol{N}_K^T]\end{aligned}$$

where $\boldsymbol{M}_i \in \mathbb{R}^{K\times M}$ and $\boldsymbol{N}_i \in \mathbb{R}^{L\times M}$

FIGURE 1 – Matricisations d'un tenseur $\boldsymbol{\mathcal{T}}$ de taille $K \times L \times M$

$$\begin{aligned}&\text{minimiser } \|\boldsymbol{\mathcal{T}} - \sum_{r=1}^{R} a_r^1 \otimes a_r^2 \otimes a_r^3\|\\ &\text{par rapport à } a_r^i\end{aligned} \tag{3}$$

où $\|x\|$ est une norme quelconque. Ce problème est non convexe en général, mais il est convexe par rapport à chacune des variables. Mieux encore, il est convexe par rapport aux blocs $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}$ (vu en TD). Ce qui incite à utiliser une méthode de résolution **itérative alternée**. De plus, nous utiliserons une norme euclidienne car elle est facilement différentiable et traite de façon optimale le cas d'un bruit blanc Gaussien, fréquemment rencontré.

Proposition 2. La solution au problème d'optimisation

$$\begin{aligned}&\text{minimiser } \|\boldsymbol{\mathcal{T}} - \sum_{r=1}^{R} a_r^1 \otimes a_r^2 \otimes a_r^3\|_2^2\\ &\text{par rapport à } \boldsymbol{A}^1\end{aligned} \tag{4}$$

est donné par $\widehat{\boldsymbol{A}^1} = \boldsymbol{\mathcal{T}}_1 \left(\boldsymbol{A}^2 \odot \boldsymbol{A}^3\right)^\dagger$ ou $\boldsymbol{A}^\dagger$ est la pseudo-inverse de $\boldsymbol{A}$.

Preuve faite au tableau. On rappellera notamment que $\|\boldsymbol{\mathcal{T}}\|_F^2$ est la somme de tous les coefficients au carré, et que la solution optimale d'un système linéaire surdéterminé $\boldsymbol{A}x = b$ est obtenu en résolvant l'équation normale $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{A}^T b$.

Pour trouver la solution de (3) si elle existe, on peut donc utiliser la proposition 2 pour estimer à tour de rôle chacun des blocs $\boldsymbol{A}^i$ jusqu'à aboutir à la convergence de la fonction de coût, assurée par la décroissance à chaque itération.