Décomposition de tableaux d'ordre trois semi-nonnégatifs et semi-symétriques

Julie COLOIGNER[1,2], Laurent ALBERA[1,2], Ahmad KARFOUL[3], Pierre COMON[4]

[1]LTSI Laboratory, University of Rennes 1, Rennes, F-35000, France

[2]Inserm, UMR 642, Rennes, F-35000, France

[3]Université AL-Baath , Faculté de Mech. et Elec. Eng., PB. 2244, Homs, Syria

[4]I3S, Université de Nice, 2000 route des Lucioles, BP 121, 06903 Sophia-Antipolis, France

Résumé – Sont proposées dans ce papier deux méthodes numériques de décomposition canonique de tableaux d'ordre 3 semi-nonnégatifs et semi-symétriques, c'est-à-dire possédant deux facteurs matriciels identiques à composantes positives. De tels tableaux d'ordre 3 apparaissent en séparation aveugle de sources lorsque l'on souhaite diagonaliser conjointement par congruence un ensemble de matrices de covariance d'un mélange nonnégatif de sources temporellement corrélées (ou bien non-stationnaires) et spatialement décorrélées. Les deux méthodes décrites sont de type Levenberg-Marquardt (LM) et descente de gradient à pas optimal. Elles prennent en compte non seulement l'égalité mais aussi la nonnégativité de deux des trois facteurs matriciels par un changement de variable carré permettant ainsi de se ramener à un problème d'optimisation sans contraintes. Le calcul du gradient et du jacobien est effectué matriciellement permettant une implémentation efficace des deux méthodes dans un langage de programmation matricielle. Nos simulations montrent un gain en performance de nos méthodes en comparaison de l'algorithme LM n'exploitant aucun a priori notamment pour de faibles valeurs de rapport signal à bruit et des valeurs de rang excédant la plus grande des dimensions.

Abstract – Two numerical methods are proposed in this paper in order to solve the CANDECOMP/PARAFAC (CP) problem in the context of semi-nonnegative and semi-symmetric three-way arrays, say with two identical nonnegative loading matrices. Such multi-way arrays are encountered in Blind Source Separation (BBS) when a set of data covariance matrices have to be jointly diagonalized in order to identify a nonnegative mixture. Both presented algorithms, namely a Levenberg-Marquardt (LM) approach and a gradient descent technique based on a global plane search, take into account the semi-symmetry but also the semi-nonnegativity. The latter constraint is imposed by means of changes of variable into squares, leading to an unconstrained problem. A matrix computation of derivatives is performed allowing for a straightforward implementation in matrix programming environments. Eventually, computer results show a better behaviour of both proposed methods in comparison with the classical CP LM technique, which uses no a priori about the considered array. More particularly, a joint use of semi-symmetry and semi-nonnegativity improves the performance for low signal to noise ratios but also for rank values greater than dimensions.

1 Introduction et présentation du problème

Le modèle CANDECOMP/PARAFAC (CP), revisité entre autres par Harshman dans les années 70 [2], consiste à écrire un tableau d'ordre q sous forme d'une combinaison linéaire minimale de tableaux d'ordre q et de rang 1. L'utilisation de ce modèle ne cesse de se répandre dans de nombreux domaines comme l'ingénierie biomédicale ou le traitement d'antennes. Nous nous intéressons ici à une décomposition CP particulière des tableaux d'ordre 3, celle imposant que deux matrices de facteurs du tableau à décomposer soient identiques et nonnégatives. En d'autres termes, nous souhaitons résoudre le problème suivant :

Problem 1 *Déterminer la décomposition CP semi-symétrique et semi-nonnégative de $\boldsymbol{\mathcal{T}} \in \mathbb{R}^{N\times N\times M}$, qui est la combinaison linéaire de P tableaux d'ordre 3 et de rang 1, impliquant un nombre minimal P de termes de rang 1 :*

$$\boldsymbol{\mathcal{T}} = \sum_{p=1}^{P} \boldsymbol{a}_p \circ \boldsymbol{a}_p \circ \boldsymbol{c}_p \tag{1}$$

où $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_P]$ et $\boldsymbol{C} = [\boldsymbol{c}_1, \cdots, \boldsymbol{c}_P]$ sont les facteurs matriciels de $\boldsymbol{\mathcal{T}}$, où les composantes de $\boldsymbol{A}$ sont nonnegatives et où $\circ$ est produit extérieur (i.e. produit tensoriel).

Ce problème apparaît en séparation aveugle de sources lorsque l'on souhaite diagonaliser conjointement plusieurs matrices de covariance retardées, à l'aide d'une matrice de passage nonnégative. Plus particulièrement en spectroscopie, les spectres observés sont une combinaison linéaire des spectres de différents métabolites, dont les pondérations (concentrations des métabolites) sont positives. Sous l'hypothèse de décorrélation des métabolites, une diagonalisation conjointe par congruence de matrices de covariance retardées des spectres observés conduit

à l'identification du mélange. Dans un tel contexte, les matrices $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{C}$ du problème 1 contiennent, respectivement, les concentrations des métabolites et les covariances retardées des spectres des métabolites. De nombreux algorithmes permettent d'obtenir la décomposition CP de tableaux d'ordre 3 avec contraintes. Certaines méthodes imposent l'égalité de deux matrices de facteurs [3, 6]. D'autres techniques exploitent la nonnégativité des matrices de facteurs [5, 7]. Mais le problème 1, prenant simultanément en compte ces deux contraintes, a été peu traité jusqu'à maintenant. Nous proposons ici deux approches, l'une de type Descente de Gradient (DG) et l'autre type Levenberg-Marquardt (LM), offrant une optimisation matricielle d'un problème non linéaire des moindres carrés, après avoir effectué un changement de variable carré afin de se ramener à un problème sans contrainte. Autrement dit, nous réécrivons le problème 1 sous la forme suivante :

Problem 2 *Soit $\boldsymbol{\mathcal{T}} \in \mathbb{R}^{N\times N\times M}$, déterminer le couple de matrices $(\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}) \in \mathbb{R}^{N\times P}\times\mathbb{R}^{M\times P}$ tel que :*

$$\boldsymbol{\mathcal{T}} = \sum_{p=1}^{P} (\boldsymbol{b}_p \boxdot \boldsymbol{b}_p)\circ(\boldsymbol{b}_p \boxdot \boldsymbol{b}_p)\circ \boldsymbol{c}_p \tag{2}$$

où $\boxdot$ désigne produit de Hadamard (i.e. produit terme à terme).

Une fois la matrice $\boldsymbol{B}$ calculée, la matrice $\boldsymbol{A}$ se déduit de l'expression $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} \boxdot \boldsymbol{B}$.

2 L'algorithme $\mathrm{LM}^{+}_{\mathrm{sym}}$

On montre brièvement dans cette section comment résoudre le problème 2 en optimisant itérativement la fonction de coût suivante :

$$\Psi(\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}) = \|\boldsymbol{T} - \boldsymbol{C}(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{A})^{\intercal}\|_F^2 = ||\mathrm{vec}(\boldsymbol{T} - \boldsymbol{C}(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{A})^{\intercal})||^2 \tag{3}$$

où $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}) = \mathrm{vec}\Big(\boldsymbol{T}^{(3)} - \boldsymbol{C}(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{A})^{\intercal}\Big)$ avec $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}\boxdot\boldsymbol{B}$, sachant que vec correspond à l'opérateur de vectorisation d'une matrice, $\odot$ à celui du produit de Khatri-Rao et $\boldsymbol{T}$ à une version matricielle du tableau $\boldsymbol{\mathcal{T}}$, obtenue en concaténant les tranches latérales de $\boldsymbol{\mathcal{T}}$.

L'approche d'optimisation retenue est de type LM, connue pour son efficacité, sa robustesse et ses propriétés de convergence. Elle consiste à faire un développement de Taylor d'ordre 2 de la fonction vectorielle $\boldsymbol{f}$, et ainsi à obtenir une approximation de la matrice hessienne $\boldsymbol{H}$ de Ψ, de la forme $\boldsymbol{H} \approx \boldsymbol{J}^{\intercal}\boldsymbol{J}$, avec $\boldsymbol{J}$ la matrice jacobienne de $\boldsymbol{f}$. Cette approximation est valable au voisinage de l'estimée courante des paramètres. Pour garantir cette région de confiance centrée sur l'estimée courante, on se donne un paramètre de régulation λ, caractérisant le rayon de cette région. On obtient la règle suivante de mise à jour du vecteur $\boldsymbol{h} = \mathrm{vec}([\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}])$ de paramètres :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{h}_{it+1} &= \boldsymbol{h}_{it} - (\boldsymbol{J}^{\intercal}\boldsymbol{J} + \lambda\mathbf{I})^{-1}\boldsymbol{g} \\ &= \boldsymbol{h}_{it} - \begin{pmatrix} \boldsymbol{J}_B{}^{\intercal}\boldsymbol{J}_B + \lambda\mathbf{I} & \boldsymbol{J}_B{}^{\intercal}\boldsymbol{J}_C \\ \boldsymbol{J}_C{}^{\intercal}\boldsymbol{J}_B & \boldsymbol{J}_C{}^{\intercal}\boldsymbol{J}_C + \lambda\mathbf{I}\end{pmatrix}^{-1}\boldsymbol{g} \end{aligned} \tag{4}$$

avec :

$$\begin{aligned} J_{\boldsymbol{B}} &= -2(\mathbf{I}_{N^2}\otimes\boldsymbol{C})\boldsymbol{U}_{N^2P}[\mathrm{diag}\{\mathrm{vec}(\mathbf{1}_N\otimes\boldsymbol{A})\}(\mathbf{I}_{NP}\otimes\mathbf{1}_N) + \\ &\quad \mathrm{diag}\{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})\otimes\mathbf{1}_{N^2}\}(\boldsymbol{U}_{PN}\otimes\mathbf{I}_N)]\mathrm{diag}\{\mathrm{vec}(\boldsymbol{B})\} \\ J_{\boldsymbol{C}} &= -(\boldsymbol{Y}\odot\boldsymbol{Y})\otimes\mathbf{I}_M \end{aligned} \tag{5}$$

où le gradient $\boldsymbol{g} = [\boldsymbol{g}_B{}^{\intercal}, \boldsymbol{g}_C{}^{\intercal}]$ est donné par :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{g}_B =& -4\mathrm{vec}(\boldsymbol{C}^{\intercal}\boldsymbol{T}^{(3)})^{\intercal}\boldsymbol{U}_{N^2P}[\mathrm{diag}\{\mathrm{vec}(\mathbf{1}_N\otimes\boldsymbol{A})\}\times \\ &(\mathbf{I}_{NP}\otimes\mathbf{1}_N) + \mathrm{diag}\{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})\otimes\mathbf{1}_N\}(\boldsymbol{U}_{PN}\otimes\mathbf{I}_N)\times \\ &(\mathbf{1}_N\otimes\mathbf{I}_{NP})]\mathrm{diag}\{\mathrm{vec}(\boldsymbol{B})\} + 4\mathrm{vec}(\boldsymbol{Y})^{\intercal}(\boldsymbol{\xi}\otimes\mathbf{I}_{N^2})\times \\ &[\mathrm{diag}\{\mathrm{vec}(\mathbf{1}_N\otimes\boldsymbol{A})\}(\mathbf{I}_{NP}\otimes\mathbf{1}_N) + \mathrm{diag}\{(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})\otimes\mathbf{1}_N)\} \\ &\times(\boldsymbol{U}_{PN}\otimes\mathbf{I}_N)(\mathbf{1}_N\otimes\mathbf{I}_{NP})]\mathrm{diag}\{\mathrm{vec}(\boldsymbol{B})\} \\ \boldsymbol{g}_C =& -2\mathrm{vec}\Big(\boldsymbol{T}^{(3)}(\boldsymbol{Y})\Big)^{\intercal} + 2\mathrm{vec}(\boldsymbol{C})^{\intercal}(\boldsymbol{Y}^{\intercal}\boldsymbol{Y}\otimes\mathbf{I}_K) \end{aligned}$$

avec $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{A}$, $\xi = \boldsymbol{C}^{\intercal}\boldsymbol{C}$. Ajoutons que $\boldsymbol{U}_{NP}$ est une matrice de permutation de taille $(NP\times NP)$, définie par :

$$\boldsymbol{U}_{PN} = \sum_{p=1}^{P}\sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{E}_{pn}^{(P\times N)}\otimes\boldsymbol{E}_{np}^{(N\times P)}$$

avec $\boldsymbol{E}_{pn}^{(P\times N)}$ une matrice élémentaire de taille $(P\times N)$ contenant des zéros sauf pour la (p,n)-ième position, qui est égale à 1 et $\otimes$ le produit de Kronecker.

La mise à jour (4) a deux avantages : tout d'abord elle ne nécessite pas le calcul fastidieux de la matrice hessienne et de plus, elle permet, avec l'ajout du terme de régulation λ, de régler le problème de convergence existant dans l'algorithme de Gauss-Newton. Ce problème est causé par le caractère déficient en rang du jacobien, dû au problème d'indétermination scalaire de la décomposition CP des tableaux d'ordre 3 semi-symétriques. Il existe plusieurs techniques pour déterminer λ, ici nous avons utilisé celle de Masden [1], qui est basée sur le rapport entre la décroissance prédite et courante de la fonction de coût. Pour réduire le coût de calcul, l'inversion directe de $\boldsymbol{J}^{\intercal}\boldsymbol{J} + \lambda\mathbf{I}$, intervenant dans la règle de mise à jour (4), est remplacée par la résolution d'un système linéaire. Par l'utilisation d'une décomposition $\boldsymbol{QR}$ de $\boldsymbol{S} = [\boldsymbol{J}^{\intercal}, \lambda^{1/2}\mathbf{I}]^{\intercal}$, une solution équivalente à ce dernier consiste à résoudre successivement deux systèmes triangulaires.

La méthode numérique décrite par la règle (4) sera nommée $\mathrm{LM}^{+}_{\mathrm{sym}}$ dans la section simulations.

3 La méthode $\mathrm{DG}_{1\mathrm{pas}}$

Une méthode d'optimisation moins coûteuse que la méthode proposée ci-dessus consiste à combiner une descente de gradient avec la recherche d'un pas le long de cette direction. La règle de mise à jour est la suivante :

$$\boldsymbol{h}_{it+1} = \boldsymbol{h}_{it+1} - \mu_{it}\boldsymbol{g} \tag{6}$$

où μ_{it} est le pas scalaire. Plus concrètement, le pas μ_{it} est obtenu en minimisant la fonction suivante :

$$\varphi(\mu) = \Psi(\boldsymbol{B}_{it} - \mu\boldsymbol{g}_B, \boldsymbol{C}_{it} - \mu\boldsymbol{g}_C) \tag{7}$$

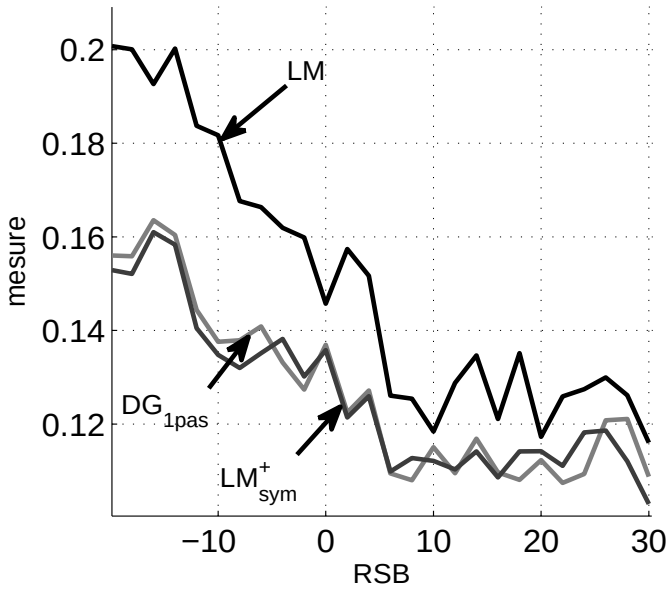


FIGURE 1 – La moyenne du critère de performance α en fonction du RSB

par rapport à μ. Il peut être calculé de manière approximative ou exacte (pas optimal). Notre choix a été de calculer un pas optimal, bien qu'il soit plus coûteux d'un point de vue numérique, mais il permet d'éviter certains minima locaux et de converger plus rapidement. Cette méthode a été developpée par Rajih et al., pour une procédure d'ALS lors d'une décomposition CP. Du fait de la complexité numérique du calcul de pas différents pour chaque facteur matriciel, ils ont proposé une méthode avec un pas unique. Au regard des bons résultats de cette méthode, nous avons appliqué la même technique pour notre problème, calculant un unique pas optimal pour les deux facteurs matriciels. Pour cela, retenir alors la racine du polynôme $\partial\varphi/\partial\mu$, qui minimise la fonction (7), permet d'obtenir μ_{it}.

La technique définie par la règle (6) sera appelée $\mathrm{DG}_{1\mathrm{pas}}$ dans la section simulation.

4 Simulations

Dans cette section, nous étudions les comportements de trois algorithmes : le LM n'imposant aucune contrainte [4] et nos méthodes $\mathrm{LM}^{+}_{\mathrm{sym}}$ et $\mathrm{DG}_{1\mathrm{pas}}$, exploitant la semi-symétrie et la semi-nonnégativité du tableau d'ordre 3. Cette étude comparative est faite en termes de qualité de l'estimation des facteurs matriciels $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{C}$. Le critère de performance retenu se doit d'être invariant aux indeterminations scalaires et de permutations propres à la décomposition CP. Nous proposons le critère suivant :

$$\alpha = \frac{1}{2P}\sum_{p=1}^{P}\Big(\min_{1\leq p'\leq P} d(\boldsymbol{a}_p, \widehat{\boldsymbol{a}_{p'}}) + \min_{1\leq p'\leq P} d(\boldsymbol{c}_p, \widehat{\boldsymbol{c}_{p'}})\Big) \quad (8)$$

où $\boldsymbol{a}_p$, $\widehat{\boldsymbol{a}_p}$, $\boldsymbol{c}_p$ et $\widehat{\boldsymbol{c}_p}$ sont, respectivement, les p-ième colonnes de $\boldsymbol{A}$, $\widehat{\boldsymbol{A}}$, $\boldsymbol{C}$ et $\widehat{\boldsymbol{C}}$, sachant que $\widehat{\boldsymbol{Z}}$ correpond à l'estimée de $\boldsymbol{Z}$ et où d est la pseudo-distance entre vecteurs definie par [8] :

$$d(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = 1 - \frac{\|\boldsymbol{u}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{v}\|^2}{\|\boldsymbol{u}\|^2\,\|\boldsymbol{v}\|^2} \quad (9)$$

Pour chacune de nos 200 réalisations de Monte Carlo, deux matrices $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{C}$ ont été aléatoirement choisies, pour construire un tableau d'ordre 3 semi-nonnégatif et semi-symétrique, auquel on a ajouté un bruit aléatoire de loi centrée reduite. Les algorithms sont stoppés si soit l'erreur relative de la fonction Ψ entre l'itération courante et l'itération précédente est plus petite que 10^{-12} ou soit si le nombre d'itérations excède 200. La première étude consiste à évaluer le comportement des méthodes en fonction du Rapport Signal à Bruit (RSB), pour des tableaux de taille $(2\times2\times2)$ et de rang 3 . La figure 1 montre la moyenne du critère de performance α en fonction du RSB. On remarque, que les résultats des méthodes semi-nonnegative et semi-symétrique sont meilleurs que ceux de l'algorithme LM, plus particulièrement pour un faible RSB. Sur la figure 2, la critère de performance est representé en fonction du nombre d'itérations, pour un RSB égal à 4dB. On remarque que l'algorithme LM converge plus vite que les méthodes $\mathrm{LM}^{+}_{\mathrm{sym}}$ et $\mathrm{DG}_{1\mathrm{pas}}$, mais vers un minimum local, alors que nos méthodes semblent converger vers le minimum global. La seconde étude consiste à faire varier le rang, pour des tabeaux de taille $(6\times6\times6)$ avec un RSB constant fixé à -20dB. La figure 3 montre la moyenne du critère de performance α en fonction du rang. La methode $\mathrm{LM}^{+}_{\mathrm{sym}}$ commence à avoir des résultats meilleurs pour un rang supérieur aux dimensions, tandis que $\mathrm{DG}_{1\mathrm{pas}}$ en termes de qualité d'estimation des facteurs matriciels surpasse les deux autres approches pour tous les rangs. Les simulations permettent ainsi de montrer que la prise en compte d'a priori tels que ceux considéré dans ce papier améliore les résultats pour dans des contextes difficiles (faible RSB, rang élevé).

5 Conclusion et perspectives

Deux méthodes numériques de décomposition canonique de tableaux d'ordre 3 semi-nonnégatifs et semi-symétriques ont été proposées. L'une repose sur une descente de gradient à pas optimal : le pas, scalaire et identique pour tous les facteurs matriciels, est calculé optimalement à chaque itération par minimisation d'une fonction polynomiale de degré 10. L'autre méthode utilise une approximation du hessien de la fonction de coût à la manière de l'algorithme LM. A noter qu'un changement de variable carré nous a permis d'intégrer la contrainte de nonnégativité et de nous rammener à un problème d'optimisation sans contrainte. Au vu de nos simulations, les deux techniques proposées offrent un gain en performance dans les cas difficiles (faible rapport signal à bruit, rang élevé). Se pose alors la question de savoir quelle information a priori est la plus pertinente : la semi-nonnégativité ou la semi-symétrie ? Pour répondre à cela, il serait intéressant de comparer notre méthode

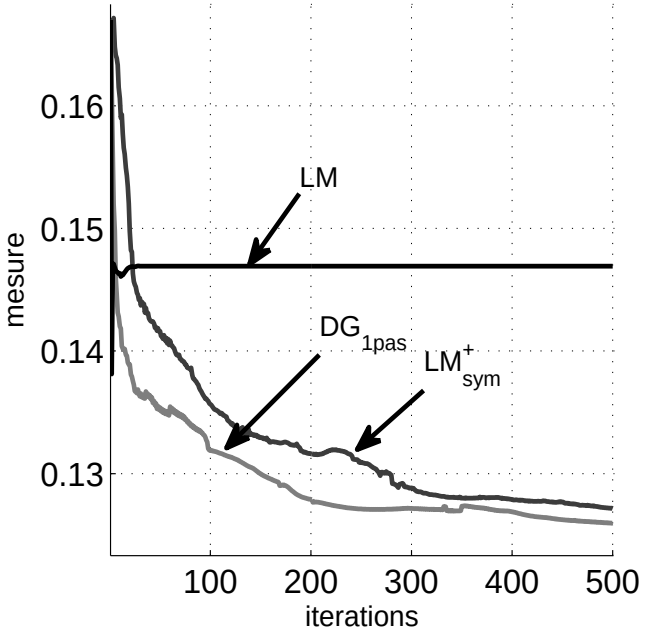


FIGURE 2 – La moyenne du critère de performance α en fonction du nombre d'itérations pour un RSB=4dB

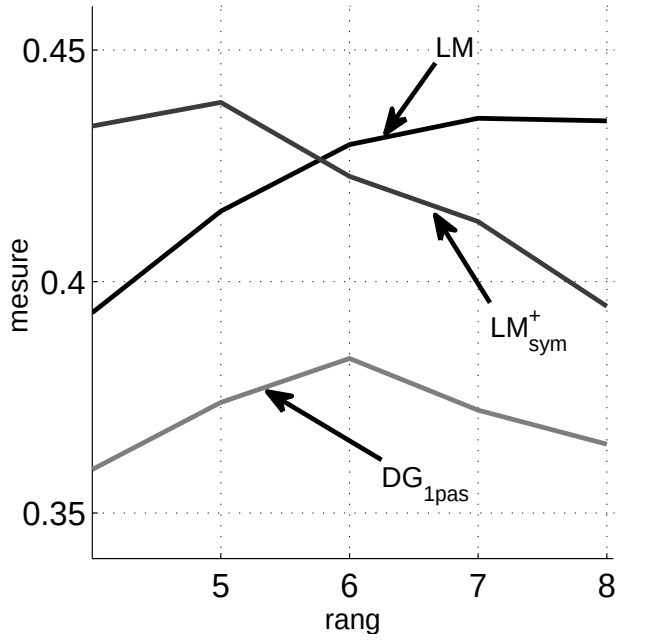


FIGURE 3 – La moyenne du critère de performance α en fonction du rang

à une méthode LM, exploitant uniquement la semi-symétrie du tableau. On envisage aussi de proposer une extension de notre procédure de calcul de pas optimal utilisée dans l'algorithme $\mathrm{DG}_{1\mathrm{pas}}$ au cas de deux pas scalaires optimaux : un pas scalaire optimal pour chacun des deux facteurs matriciels potentiellement différents. L'implémentation d'une version alternée, dans l'estimation des facteurs, de notre approche de type LM pourrait par ailleurs permettre d'en réduire le coût de calcul. A n'en pas douter qu'une étude de complexité numérique de ces différentes approches s'impose afin de réaliser une étude comparative équitable.

Références

[1] K. Madsen, H.B. Nielsen et O. Tingleff *Methods for non-linear least squares problems. second ed.* ; Department of Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark, Avril 2004.

[2] R.A. Harshman *Foundations of the PARAFAC procedure : models and conditions for an "explanatory" multimodal factor analysis* ; UCLA Working papers in Phonetics,1970,16,1-84.

[3] A. Yeredor *Non-orthogonal joint diagonalization in the least-squares sense with application in blind source separation* ; IEEE Transactions On Signal Processing, 2002, volume 50, numéro 7, pages 1545-1553.

[4] P. Comon, X. Luciani et A.L.F. De Almeida *Tensor Decompositions, Alternating Least Squares and other Tales* ; Journal Chemometrics,Wiley, 2009,volume 23, pages 393-405.

[5] P. Paatero *A weighted non-negative least squares algorithm for three-way 'PARAFAC' factor analysis*, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1997, volume 38, pages 223-242.

[6] A. KARFOUL, L. ALBERA et G. BIROT, *Blind Underdetermined Mixture Identification by Joint Canonical Decomposition of HO Cumulants*, IEEE Transactions on Signal Processing, 2010, volume 58, pages 638 - 649.

[7] A. CICHOCKI, R. ZDUNEK, A. PHAN and S. AMARI *Nonnegative matrix and tensor factorization* Wiley, nov. 2009, 477 pages.

[8] L. ALBERA, A. FERREOL, P. COMON et P. CHEVALIER, *Blind Identification of Overcomplete Mixtures of sources (BIOME)* Linear Algebra Applications, 2004, volume 391C, page 3-30.