Conditions d'unicité uni-modale et partielle pour les décompositions CANDECOMP/PARAFAC des tableaux tridimensionnels de données

Xijing Guo[*,†], Sebastian Miron[*], David Brie[*] et Alwin Stegeman[‡]

[*] *Centre de Recherche en Automatique de Nancy (CRAN), France*
[†] *Xi'an Jiaotong University, China*
[‡] *Heijmans Institute for Psychological Research, Groningen, The Netherlands*

16 janvier 2013

Plan

Unicité essentielle de la décomposition CANDECOMP/PARAFAC (CP)

Décomposition CANDECOMP/PARAFAC (CP) d'un tableau tridimensionnel

$$\mathcal{X} = \sum_{r=1}^{R} \mathbf{a}_r \circ \mathbf{b}_r \circ \mathbf{c}_r = [\![\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}]\!], \quad \mathbf{A}(I \times R),\ \mathbf{B}(J \times R),\ \mathbf{C}(K \times R)$$

La **condition de Kruskal** [Kruskal, *Linear Algebra Applicat.*, 1977] :

Si

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

alors la décomposition CP de $\mathcal{X}$ est (essentiellement) unique.

Pour $R = 2$ ou 3, la condition de Kruskal est *nécessaire et suffisante*.

Collinearitiés /dépendances linéaires fortes $\Rightarrow$ non-unicité ou *unicité partielle*, *unicité uni-modale*.

Unicité essentielle de la décomposition CANDECOMP/PARAFAC (CP)

Décomposition CANDECOMP/PARAFAC (CP) d'un tableau tridimensionnel

$$\mathcal{X} = \sum_{r=1}^{R} \mathbf{a}_r \circ \mathbf{b}_r \circ \mathbf{c}_r = [\![\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}]\!], \quad \mathbf{A}(I \times R),\ \mathbf{B}(J \times R),\ \mathbf{C}(K \times R)$$

La **condition de Kruskal** [Kruskal, *Linear Algebra Applicat.*, 1977] :

Si

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

alors la décomposition CP de $\mathcal{X}$ est (essentiellement) unique.

Pour $R = 2$ ou 3, la condition de Kruskal est *nécessaire et suffisante*.

Collinearitiés /dépendances linéaires fortes $\Rightarrow$ non-unicité ou *unicité partielle*, *unicité uni-modale*.

Quelques résultats d'unicité partielle pour la décomposition CP

$\hookrightarrow$ Si deux modes (*e.g.* $\mathbf{A}$ and $\mathbf{B}$) sont de rang plein et si $\mathbf{C}$ possède un sous-ensemble de colonnes proportionnelles $\Rightarrow$ $\mathbf{C}$ *essentiellement unique* et les colonnes correspondantes de $\mathbf{A}/\mathbf{B}$ engendrent des *sous-espaces transformables* [Harshman, 1972]

$\hookrightarrow$ [Stegeman et de Almeida, 2009] $\rightsquigarrow$ conditions d'unicité *essentielle/partielle* pour le modèle PARALIND/CONFAC (difficiles à utiliser !)

$\hookrightarrow$ Conjectures ([Bro *et al.*, 2009])

- "If a subset of columns satisfies Kruskal's criterion, then that subset will be uniquely determined."
- "When linear dependences involve 'enough' factors they need not interfere with uniqueness"

Théorème 1

Considérons la décomposition CP $\mathcal{X} = [\![\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}]\!]$ *de rang* R. *Si la condition*

$$\mathrm{rank}(\mathbf{A}) + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} \geq 2R + 2$$

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.* $k_{\mathbf{A}} = 1$.
- Il n'y a pas de garantie quant à l'unicité de $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$.
- Si $k_{\mathbf{A}} = \mathrm{rank}(\mathbf{A})$, Théorème 1 $\Longleftrightarrow$ condition de Kruskal.

Théorème 2

Considérons la décomposition CP $\mathcal{X} = [\![\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}]\!]$ *de rang* R. *Si les conditions*

$$\begin{cases} \mathrm{rank}(\mathbf{A}) + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} \geq 2R + 1 \\ k_{\mathbf{B}} < \mathrm{rank}(\mathbf{B}) \quad \textit{et} \quad k_{\mathbf{C}} < \mathrm{rank}(\mathbf{C}) \end{cases}$$

sont satisfaites, alors la matrice $\mathbf{A}$ *peut être déterminée de façon unique.*

Théorème 1

Considérons la décomposition CP $\mathcal{X} = [\![\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}]\!]$ *de rang* R. *Si la condition*

$$\mathrm{rank}(\mathbf{A}) + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} \geq 2R + 2$$

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.* $k_{\mathbf{A}} = 1$.
- Il n'y a pas de garantie quant à l'unicité de $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$.
- Si $k_{\mathbf{A}} = \mathrm{rank}(\mathbf{A})$, Théorème 1 $\Longleftrightarrow$ condition de Kruskal.

Théorème 2

Considérons la décomposition CP $\mathcal{X} = [\![\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}]\!]$ *de rang* R. *Si les conditions*

$$\begin{cases} \mathrm{rank}(\mathbf{A}) + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} \geq 2R + 1 \\ k_{\mathbf{B}} < \mathrm{rank}(\mathbf{B}) \quad \textit{et} \quad k_{\mathbf{C}} < \mathrm{rank}(\mathbf{C}) \end{cases}$$

sont satisfaites, alors la matrice $\mathbf{A}$ *peut être déterminée de façon unique.*

Conditions d'*unicité uni-modale* de Kruskal [Kruskal, 1977]

Premier résultat

Si

$$\text{Condition } \#1 \begin{cases} \mathrm{rank}(\mathbf{A}) + \min(k_{\mathbf{B}}, k_{\mathbf{C}}) \geq R + 1 \\ \mathrm{rank}(\mathbf{A}) + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} + \max(\mathrm{rank}(\mathbf{B}) - k_{\mathbf{B}}, \mathrm{rank}(\mathbf{C}) - k_{\mathbf{C}}) \geq 2R + 1 \end{cases}$$

alors la matrice $\mathbf{A}$ peut être déterminée de façon unique.

Deuxième résultat

$$\begin{cases} \text{Condition } \#1 \\ k_{\mathbf{B}} = \mathrm{rank}(\mathbf{B}) \text{ et } k_{\mathbf{C}} = \mathrm{rank}(\mathbf{C}) \end{cases} \implies \mathrm{rank}(\mathbf{A}) + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} \geq 2R + 1,$$

Conditions d'*unicité uni-modale* de Kruskal [Kruskal, 1977]

Premier résultat

Si

$$\text{Condition } \#1 \begin{cases} \text{rank}(\mathbf{A}) + \min(k_{\mathbf{B}}, k_{\mathbf{C}}) \geq R+1 \\ \text{rank}(\mathbf{A}) + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} + \max(\text{rank}(\mathbf{B}) - k_{\mathbf{B}}, \text{rank}(\mathbf{C}) - k_{\mathbf{C}}) \geq 2R+1 \end{cases}$$

alors la matrice $\mathbf{A}$ peut être déterminée de façon unique.

Deuxième résultat

$$\begin{cases} \text{Condition } \#1 \\ k_{\mathbf{B}} = \text{rank}(\mathbf{B}) \text{ et } k_{\mathbf{C}} = \text{rank}(\mathbf{C}) \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad \text{rank}(\mathbf{A}) + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} \geq 2R+1,$$

Théorème 3

Si les conditions

$$\begin{cases} \operatorname{rank}(\mathbf{A}) + \min(k_{\mathbf{B}}, k_{\mathbf{C}}) \geq R + 2 \\ \operatorname{rank}(\mathbf{A}) + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} + \max\left(\operatorname{rank}(\mathbf{B}) - k_{\mathbf{B}}, \operatorname{rank}(\mathbf{C}) - k_{\mathbf{C}}\right) \geq 2R + 2, \end{cases}$$

sont satisfaites, alors la matrice $\mathbf{A}$ *peut être déterminée de façon unique.*

$$\begin{tikzcd}
\text{Théorème 1} \arrow[r, equal, "(2)"'] \arrow[r, bend left] \arrow[dr, "(1)"'] & \text{Théorème 3} \\
& \text{Théorème 2} \arrow[u, "(1)"']
\end{tikzcd}$$

(1) $\quad k_{\mathbf{B}} < \operatorname{rank}(\mathbf{B})$ et $k_{\mathbf{C}} < \operatorname{rank}(\mathbf{C})$

(2) $\quad k_{\mathbf{B}} = \operatorname{rank}(\mathbf{B})$ et $k_{\mathbf{C}} = \operatorname{rank}(\mathbf{C})$

Théorème 3

Si les conditions

$$\begin{cases} \operatorname{rank}(\mathbf{A}) + \min(k_{\mathbf{B}}, k_{\mathbf{C}}) \geq R + 2 \\ \operatorname{rank}(\mathbf{A}) + k_{\mathbf{B}} + k_{\mathbf{C}} + \max\left(\operatorname{rank}(\mathbf{B}) - k_{\mathbf{B}}, \operatorname{rank}(\mathbf{C}) - k_{\mathbf{C}}\right) \geq 2R + 2, \end{cases}$$

sont satisfaites, alors la matrice $\mathbf{A}$ *peut être déterminée de façon unique.*

$$\begin{tikzcd} \text{Théorème 1} \arrow[r, equal, "(2)"'] \arrow[r, bend left] \arrow[dr, "(1)"'] & \text{Théorème 3} \\ & \text{Théorème 2} \arrow[u, "(1)"'] \end{tikzcd}$$

(1) $\quad k_{\mathbf{B}} < \operatorname{rank}(\mathbf{B})$ et $k_{\mathbf{C}} < \operatorname{rank}(\mathbf{C})$

(2) $\quad k_{\mathbf{B}} = \operatorname{rank}(\mathbf{B})$ et $k_{\mathbf{C}} = \operatorname{rank}(\mathbf{C})$

Et les matrices $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$ ... ?

Partition de $\mathbf{A}$ en N sous-matrices

Considérons la partition suivante de la matrice $\mathbf{A}$

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

$$\mathrm{span}(\mathbf{A}) = \mathrm{span}(\mathbf{A}_1) \oplus \cdots \oplus \mathrm{span}(\mathbf{A}_N)$$

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

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

.

Théorème 4

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.

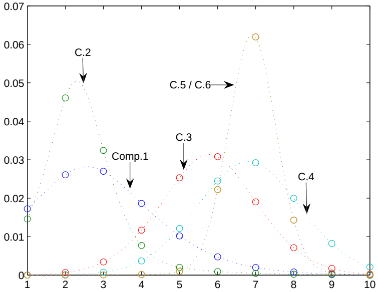
A l'intérieur de chaque sous-bloc, les colonnes de $\mathbf{A}_n$ sont déterminées de façon unique. Les sous-matrices $\mathbf{B}_n$ et $\mathbf{C}_n$ peuvent être déterminées de façon unique si le sous-modèle de mélange donné par $[\![\mathbf{A}_n, \mathbf{B}_n, \mathbf{C}_n]\!]$ est identifiable.

Exemple 1 (RSB = 20 dB, 20 expériences)

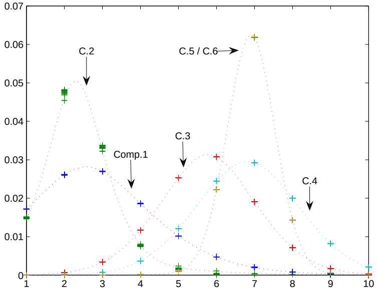
$R = 6 \quad I = 10 \quad J = 500 \quad K = 200 \qquad \mathbf{a}_6 = \mathbf{a}_5 \ (\mathrm{rank}(\mathbf{A}) = 5,\ k_{\mathbf{A}} = 1)$

$\mathbf{b}_6 = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3 + \mathbf{b}_4 + \mathbf{b}_5 (k_{\mathbf{B}} = 5) \qquad \mathbf{c}_6 = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 + \mathbf{c}_3 + \mathbf{c}_4 \ (k_{\mathbf{C}} = 4)$

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_4 | \mathbf{a}_5, \mathbf{a}_6]$$



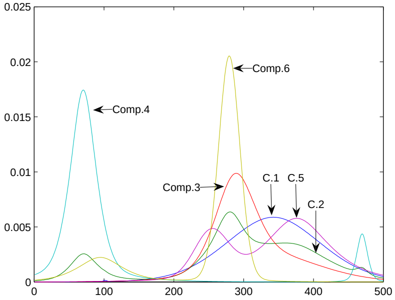
(a) référence



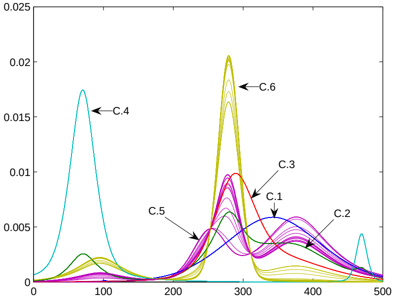
(b) estimé

FIGURE : Exemple 1 : Premier mode $(\mathbf{A})$

$$\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, \mathbf{b}_4 | \mathbf{b}_5, \mathbf{b}_6]$$



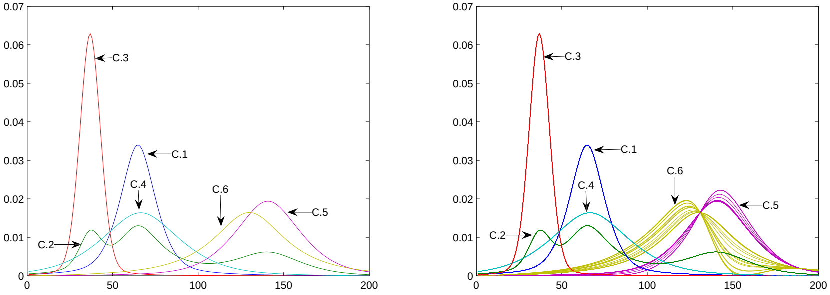
(a) référence



(b) estimé

FIGURE : Exemple 1 : Deuxième mode ($\mathbf{B}$)

$$\mathbf{C} = [\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3, \mathbf{c}_4 | \mathbf{c}_5, \mathbf{c}_6]$$



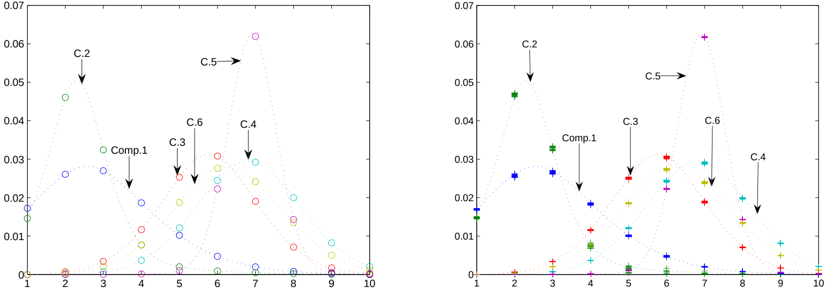
(a) référence

(b) estimé

FIGURE : Exemple 1 : Troisième mode ($\mathbf{C}$)

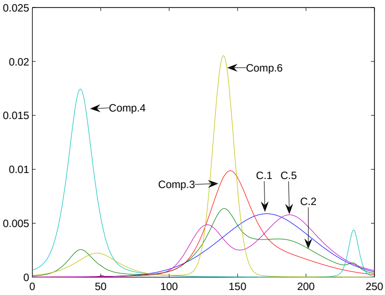
Exemple 2 (RSB = 20 dB, 20 expériences)

$$\mathbf{b}_6 = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3 + \mathbf{b}_4 + \mathbf{b}_5 (k_{\mathbf{B}} = 5), \quad \mathbf{c}_6 = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 + \mathbf{c}_3 + \mathbf{c}_4 (k_{\mathbf{C}} = 4)$$
$$\mathbf{a}_6 = \mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_4 (\mathrm{rank}(\mathbf{A}) = 5, k_{\mathbf{A}} = 2), \quad \mathbf{A\Pi}_A = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_5 \mid \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_4, \mathbf{a}_6]$$

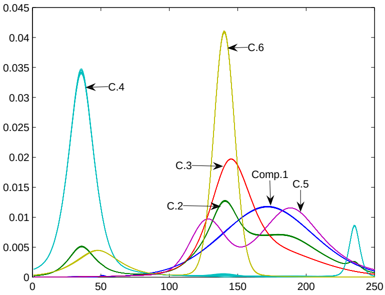


(a) référence (b) estimé

FIGURE : Exemple 2 : Premier mode ($\mathbf{A}$)

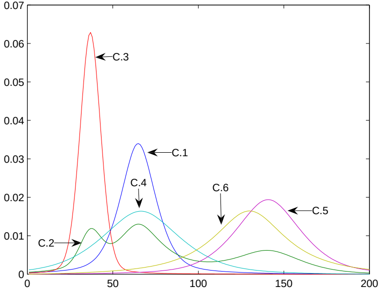


(a) référence

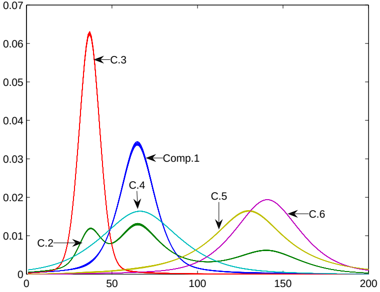


(b) estimé

FIGURE : Exemple 2 : Deuxième mode (**B**)



(a) référence



(b) estimé

FIGURE : Exemple 2 : troisième mode (**C**)

Conclusions

- Trois conditions suffisantes pour l'*unicité uni-modale* du modèle PARAFAC tridimensionnel
- Colonnes colinéaires acceptées dans l'un des modes
- Condition d'unicité pour la décomposition en sous-blocs de rang $< R$
- L'analyse de l'unicité est faite indépendamment pour chaque sous-bloc

Réf :

- X. Guo, S. Miron, D. Brie, A. Stegeman, *Uni-Mode and Partial Uniqueness Conditions for CANDECOMP/PARAFAC of Three-Way Arrays with Linearly Dependent Loadings*, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, Vol.33, Issue 1, pp. 111-129, 2012

`http://page-perso.cran.uhp-nancy.fr/perso_sm/publications.html`

FIN