

Factorisation non-négative de tenseurs partiellement observés sous contrainte de régularité

Amaury DURAND^{1,2}, François ROUEFF¹, Jean-Marc JICQUEL², Nicolas PAUL³

¹LTCI, Telecom Paris, Institut Polytechnique de Paris. 19 Place Maruerite Perey, 91120 Palaiseau, France.

²EDF R&D, TREE, E36, Lab Les Renardières. Ecuelles, 77818 Moret sur Loing, France.

³EDF R&D, PRISME, P12. 6 quai Watier, 78400 Chatou, France.

amaury.durand@telecom-paris.fr

Résumé – Contrairement au cas où toutes les données sont observées, le problème de factorisation non-négative de tenseur partiellement observé n’admet pas nécessairement d’optimum global. Néanmoins, en imposant des contraintes de régularité sur les facteurs l’existence d’un optimum global peut être prouvée. Nous proposons un algorithme d’approximation de la complexité maximale garantissant l’existence d’un tel optimum ainsi qu’un algorithme d’optimisation sous cette contrainte.

Abstract – Contrary to the case where all entries are observed, the non-negative matrix factorization problem is not guaranteed to have a global optimum when the observed tensor has missing entries. This existence can however be proved in the case where some smoothness constraints are imposed on the factors. We propose an algorithm to estimate the maximal complexity constraint which guarantees the existence of such a global optimum as well as an optimization algorithm to solve the tensor factorization problem under this constraint.

1 Introduction

Les modèles de factorisation de tenseur sont répandus dans des domaines variés allant de la psychométrie et la chimométrie au traitement du signal et à l’apprentissage machine. Cette popularité s’explique en partie par leur flexibilité et leur facilité d’interprétation. Néanmoins, l’étude théorique de telles factorisations est encore limitée car elles nécessitent de résoudre des problèmes d’optimisation non-convexe. Il a de plus été observé que ces méthodes peuvent être sujettes à des dégénérescences comme c’est le cas de la décomposition PARAFAC (voir [9]). Dans ce cas particulier, l’ajout de contraintes de positivité des facteurs permet d’éviter ces dégénérescences et il a été prouvé dans [10] que le problème de factorisation non-négative de tenseur admettait un optimum global du fait que sa fonction objectif est coercive. Dans [4], nous montrons que, si le tenseur n’est que partiellement observé, la coercivité n’est plus vérifiée, mais qu’elle peut être rétablie par l’ajout de contraintes de régularité sur les facteurs. Nous y introduisons une contrainte de complexité maximale garantissant la coercivité de la fonction objectif. Cette complexité maximale est notamment utilisée pour prouver l’existence d’un optimum global au critère pénalisé. De plus, le calcul de cette complexité maximale peut être un outil intéressant pour obtenir une bonne initialisation de l’algorithme d’optimisation et/ou guider le choix de ses paramètres de pénalisation. Dans le présent article, nous proposons, dans un premier temps, un algorithme calculant une approximation (inférieure) de cette complexité maximale. Dans un second temps,

nous proposons un algorithme de résolution du problème d’optimisation sous cette contrainte. La suite est organisée comme suit. Dans la Section 2, nous décrivons le problème traité après avoir introduit les notations et résultats nécessaires. Les sections 3 et 4 contiennent la description des algorithmes de calcul de la complexité maximale et d’optimisation du problème contraint. Enfin des expériences numériques sont brièvement décrites en section 5 et nous concluons en section 6.

2 Description du problème

2.1 Notations

L’intervalle d’entiers entre i et j est noté $\llbracket i, j \rrbracket$. Les tenseurs et matrices sont représentés en gras majuscule et les vecteurs en gras minuscule. Pour les coordonnées, nous utilisons la police standard. Pour indexer les tenseurs, nous utilisons une grille d’entiers $\mathbf{i} = i_{1:n} := (i_1, \dots, i_N) \in \mathcal{I}$ où $\mathcal{I} := \prod_{n=1}^N \llbracket 1, I_n \rrbracket$. Le déroulement d’un tenseur \mathbf{X} sur son n -ème mode est noté $\mathbf{X}_{(n)}$, les notations \circ , \otimes et \otimes sont respectivement utilisées pour le produit tensoriel, le produit d’Hadamard et le produit de Khatri-Rao et $\langle \cdot, \cdot \rangle_F, \|\cdot\|_F$ désignent le produit scalaire et la norme de Frobenius (voir [8]). La norme de variation totale d’ordre $p \geq 1$ d’un vecteur $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^I$ est définie par $\|\mathbf{a}\|_{\text{TV},p} := \left(\sum_{i=1}^{I-1} |a_i - a_{i+1}|^p \right)^{1/p}$. Enfin, nous notons $\mathbb{S}_{I,q}^+ := \left\{ \mathbf{a} \in \mathbb{R}_+^I : \|\mathbf{a}\|_q = 1 \right\}$ la sphère du cône positif as-

sociée à la norme $\|\cdot\|_q$, qui désigne la norme q usuelle sur \mathbb{R}^I pour $q \in [1, \infty]$.

2.2 Problème considéré

Le problème de factorisation non-négative d'un tenseur $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{I_1 \times \dots \times I_N}$ peut s'exprimer comme l'approximation de \mathbf{X} par un tenseur du type $\sum_{r=1}^R \lambda_r \mathbf{a}_r^{(1)} \circ \dots \circ \mathbf{a}_r^{(N)}$ où $\lambda_r \geq 0$ et $\mathbf{a}_r^{(n)} \in \mathbb{S}_{I_n, q}^+$ pour $r \in \llbracket 1, R \rrbracket$ et $n \in \llbracket 1, N \rrbracket$. Les données manquantes sont encodées par un masque binaire $\mathbf{W} \in \{0, 1\}^{I_1 \times \dots \times I_N}$ et le problème se traduit par la minimisation d'une erreur quadratique pondérée. Le Théorème III.2 de [4] montre qu'en ajoutant une pénalité sur les facteurs, par exemple par leur norme de variation totale, il est possible de garantir que la fonction objectif sous-jacente admet un minimum global. Les arguments utilisés dans la preuve de ce résultat (voir [4, Section 6]) permettent de montrer que, pour $C \geq 0$ et $\boldsymbol{\rho} \in (0, +\infty]^N$ choisis, le problème (minimisé en $((\mathbf{a}_r^{(n)})_{r \in \llbracket 1, R \rrbracket, n \in \llbracket 1, N \rrbracket}, (\lambda_r)_{r \in \llbracket 1, R \rrbracket})$)

$$\min \left\| \mathbf{W} \circledast \left(\mathbf{X} - \sum_{r=1}^R \lambda_r \mathbf{a}_r^{(1)} \circ \dots \circ \mathbf{a}_r^{(N)} \right) \right\|_F^2 \quad (1)$$

t.q $\forall r \in \llbracket 1, R \rrbracket, \lambda_r \geq 0$

$$\forall n \in \llbracket 1, N \rrbracket, \mathbf{a}_r^{(n)} \in \mathbb{S}_{I_n, q}^+, \text{ et } \|\mathbf{a}_r^{(n)}\|_{\text{TV}, p} \leq \rho_n C$$

admet un optimum global. Il est notamment montré dans [4] qu'à $\boldsymbol{\rho}$ fixé, il existe une borne supérieure stricte à l'ensemble des C pour lesquels la fonction objectif contrainte du problème (1) est coercive. Le Lemme VI.4 de [4] montre que cette borne est égale à la constante $C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{I}_{\mathbf{W}})$ avec $\mathcal{I}_{\mathbf{W}} = \{\mathbf{i} \in \mathcal{I} : W_{\mathbf{i}} > 0\}$, où la grandeur $C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{I}')$ est définie pour $\mathcal{I}' \subset \mathcal{I}$ de la manière suivante. Tout d'abord, nous définissons, pour tout $n \in \llbracket 1, N \rrbracket$ et $\mathcal{J} \subset \llbracket 1, I_n \rrbracket$,

$$m_{n,p,q}(\mathcal{J}) := \inf \left\{ \|\mathbf{a}\|_{\text{TV}, p} : \mathbf{a} \in \mathbb{S}_{I_n, q}^+, \forall j \in \mathcal{J}, a_j = 0 \right\}.$$

Ensuite, pour $\mathcal{I}' \subset \mathcal{I}$, et $n \in \llbracket 1, N \rrbracket$, nous notons $\pi_n(\mathcal{I}') := \{\mathbf{i}_n : \mathbf{i} \in \mathcal{I}'\}$ la projection de \mathcal{I}' sur la n -ème coordonnée et définissons

$$\mathcal{J}(\mathcal{I}') := \left\{ \mathcal{J}_{1:N} : \begin{array}{l} \forall n \in \llbracket 1, N \rrbracket, \mathcal{J}_n \subseteq \pi_n(\mathcal{I}'), \\ \forall \mathbf{i} \in \mathcal{I}', \exists n \in \llbracket 1, N \rrbracket, \mathbf{i}_n \in \mathcal{J}_n \end{array} \right\}$$

la classe des N -uplets $\mathcal{J}_{1:N} = (\mathcal{J}_1, \dots, \mathcal{J}_N)$ où chaque élément \mathcal{J}_n est un sous ensemble des n -èmes coordonnées des vecteurs d'indices appartenant à \mathcal{I}' et tels que chaque vecteur d'indice \mathbf{i} appartenant à \mathcal{I}' admet au moins une coordonnée, par exemple la n -ème, dans le \mathcal{J}_n correspondant. Enfin, pour $\boldsymbol{\rho} \in (0, +\infty]^N$ et $\mathcal{I}' \subset \mathcal{I}$, nous définissons

$$C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{I}') := \min \{c_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{J}_{1:N}) : \mathcal{J}_{1:N} \in \mathcal{J}(\mathcal{I}')\}, \quad (2)$$

où

$$c_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{J}_{1:N}) := \begin{cases} \infty & \text{si } \exists n, \mathcal{J}_n = \llbracket 1, I_n \rrbracket, \\ \max_{n \in \llbracket 1, N \rrbracket} \frac{m_{n,p,q}(\mathcal{J}_n)}{\rho_n} & \text{sinon.} \end{cases}$$

Dans la prochaine section, nous proposons un algorithme itératif convergant en temps fini vers $C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{I}')$ de manière croissante.

3 Calcul de la complexité maximale

Dans un premier temps, nous supposons $m_{n,p,q}(\mathcal{J})$ connue et nous nous intéressons au calcul de $C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{I}')$ pour $\mathcal{I}' \subset \mathcal{I}$, $p, q \geq 1$ et $\boldsymbol{\rho} \in (0, +\infty]^N$ donnés. En d'autres termes, nous cherchons à minimiser la fonction $\mathcal{J}_{1:N} \mapsto c_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{J}_{1:N})$ sur l'ensemble discret $\mathcal{J}(\mathcal{I}')$. En observant que cette fonction est croissante si l'on munit $\mathcal{J}(\mathcal{I}')$ de l'ordre partiel défini, pour tout $\mathcal{J}_{1:N}, \mathcal{J}'_{1:N}$, par

$$\mathcal{J}_{1:N} \subset \mathcal{J}'_{1:N} \Leftrightarrow \forall n \in \llbracket 1, N \rrbracket, \mathcal{J}_n \subset \mathcal{J}'_n,$$

nous pouvons restreindre la minimisation aux $\mathcal{J}_{1:N} \in \mathcal{J}(\mathcal{I}')$ vérifiant que, pour tout $\mathcal{J}'_{1:N} \in \mathcal{J}(\mathcal{I}') \setminus \{\mathcal{J}_{1:N}\}$, $\mathcal{J}'_{1:N} \not\subset \mathcal{J}_{1:N}$. Nous notons $\mathcal{J}'(\mathcal{I}')$ cet ensemble. Nous proposons alors de construire itérativement les ensembles $(\mathcal{J}'(\mathcal{I}_k))_{k \in \llbracket 0, |\mathcal{I}'| \rrbracket}$ où $\mathcal{I}_k = \{\mathbf{i}^{(\ell)} : \ell \leq k\}$ pour une énumération $\mathbf{i}^{(1)}, \dots, \mathbf{i}^{(|\mathcal{I}'|)}$ de \mathcal{I}' donnée.

3.1 Algorithme proposé

L'algorithme se base sur la caractérisation de $\mathcal{J}'(\mathcal{I}' \cup \{\mathbf{i}\})$ en fonction de $\mathcal{J}'(\mathcal{I}')$. Par définition, il est déjà clair qu'un élément de $\mathcal{J}'(\mathcal{I}' \cup \{\mathbf{i}\})$ s'écrit forcément $\mathcal{J}_{1:N} +_m \mathbf{i}$ avec $\mathcal{J}_{1:N} \in \mathcal{J}'(\mathcal{I}')$ et où la notation $\mathcal{J}'_{1:N} = \mathcal{J}_{1:N} +_m \mathbf{i}$ signifie que $\mathcal{J}'_m = \mathcal{J}_m \cup \{i_m\}$ et $\mathcal{J}'_n = \mathcal{J}_n$ pour tout $n \neq m$. Néanmoins, nous pouvons être plus précis. Afin de comprendre cela, considérons d'abord l'exemple où $\mathcal{I} = \llbracket 1, 2 \rrbracket^2$ et $\mathcal{I}' = \{\mathbf{i}^{(1)}, \mathbf{i}^{(2)}, \mathbf{i}^{(3)}\} = \{(1, 1), (1, 2), (2, 2)\}$ comme illustré en Figure 1. Tout d'abord, on commence avec $\mathcal{I}_0 = \emptyset$, puis on ajoute $\mathbf{i}^{(1)} = (1, 1)$ et $\mathcal{J}'(\mathcal{I}_1)$ est alors donné par les noeuds de la première couche de l'arbre de la Figure 1. Pour $k = 2$, on construit $\mathcal{J}_{1:2} +_m \mathbf{i}^{(2)}$ pour tout $\mathcal{J}_{1:2} \in \mathcal{J}'(\mathcal{I}_1)$ et $m \in \llbracket 1, 2 \rrbracket$. Cela engendre les 4 noeuds de la deuxième couche de l'arbre. Nous pouvons alors retirer les noeuds grisés car ils contiennent tous les deux $(\{1\}, \emptyset)$ et donc ne sont pas dans $\mathcal{J}'(\mathcal{I}_2)$. La construction se poursuit en retirant à chaque itération les noeuds non valides.

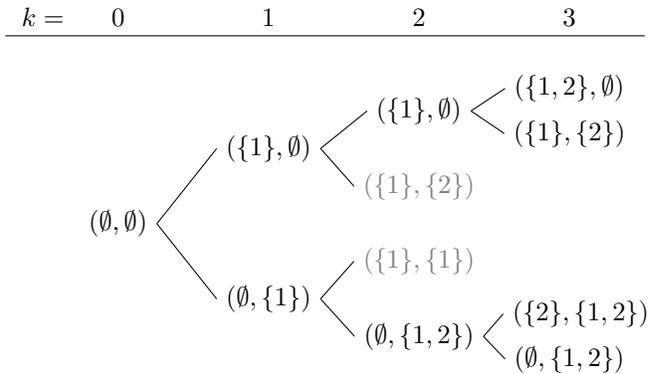


FIGURE 1 – Illustration de l'algorithme. Pour chaque colonne les noeuds non grisés sont les éléments de $\mathcal{J}'(\mathcal{I}_k)$.

L'exemple illustratif montre qu'à chaque itération, pour $m \in$

$\llbracket 1, N \rrbracket$ seul un sous ensemble de $\mathcal{J}'(\mathcal{I}_k)$ doit être considéré pour construire des éléments de $\mathcal{J}'(\mathcal{I}_{k+1})$. La Proposition suivante (cf [3, Proposition 8.6.1]) caractérise ce sous ensemble.

Proposition 3.1. Soient $\mathcal{I}' \subset \mathcal{I}$ et $\mathbf{i} \in \mathcal{I}$. Alors

$$\mathcal{J}'(\mathcal{I}' \cup \{\mathbf{i}\}) = \bigcup_{m=1}^N \{ \mathcal{J}_{1:N+m} \mathbf{i} : \mathcal{J}_{1:N} \in \mathcal{J}_m(\mathcal{I}', \mathbf{i}) \},$$

où $\mathcal{J}_m(\mathcal{I}', \mathbf{i})$ est l'ensemble des $\mathcal{J}_{1:N} \in \mathcal{J}'(\mathcal{I}')$ satisfaisant au moins l'une des assertions suivantes.

- (i) $i_m \notin \pi_m(\mathcal{I}')$.
- (ii) $i_m \in \mathcal{J}_m$.
- (iii) $i_m \in \pi_m(\mathcal{I}')$ et pour tout $\mathcal{J}'_{1:N} \in \mathcal{J}'(\mathcal{I}')$ tel que $i_m \in \mathcal{J}'_m$, on a $\mathcal{J}'_{1:N} \not\subset \mathcal{J}_{1:N} + m \mathbf{i}$.

L'étape k de l'algorithme, i.e. la construction de $\mathcal{J}(\mathcal{I}_{k-1} \cup \{\mathbf{i}^{(k)}\})$, consiste alors à vérifier, pour tout $\mathcal{J}_{1:N} \in \mathcal{J}(\mathcal{I}_{k-1})$ et tout $m \in \llbracket 1, N \rrbracket$, si $\mathcal{J}_{1:N} \in \mathcal{J}_m(\mathcal{I}_{k-1}, \mathbf{i}^{(k)})$. La complexité algorithmique du calcul obtenu pour $(\mathcal{J}'(\mathcal{I}_k))_{k \in \llbracket 0, |\mathcal{I}'| \rrbracket}$ dépend de \mathcal{I}' . Elle peut être très élevée, par exemple, si pour tous $\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \mathcal{I}'$ distincts et tout $n \in \llbracket 1, N \rrbracket$ on a $i_n \neq j_n$, alors l'algorithme proposé effectue $\mathcal{O}(N^{|\mathcal{I}'|})$ itérations. Néanmoins, lorsque les éléments de \mathcal{I}' ont beaucoup de coordonnées communes, l'arbre illustré en Figure 1 n'est pas entièrement construit et la complexité peut être bien plus faible en pratique.

Un avantage déterminant de cet algorithme repose sur le fait que, pour tout $k \in \llbracket 1, |\mathcal{I}'| - 1 \rrbracket$, $C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{I}_k) \leq C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{I}_{k+1})$. Ainsi, si l'algorithme est interrompu au bout de K itérations, la constante obtenue est un minorant de la constante cherchée $C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{I}')$ et peut donc être utilisée à sa place pour garantir l'existence d'un optimum global au problème (1).

Une autre observation intéressante est que la complexité de l'algorithme est considérablement diminuée dans le cas où tous les facteurs ne sont pas pénalisés, i.e. si l'un des ρ_n 's vaut $+\infty$. En effet, si $\rho_m = +\infty$ et $\pi_m(\mathcal{I}') = \llbracket 1, I_m \rrbracket$, on a (cf [3, Lemme 8.6.3])

$$C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{I}') = \min_{j \in \llbracket 1, I_m \rrbracket} C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}^{(-m)}, \mathcal{I}'_j^{(-m)}),$$

où $\boldsymbol{\rho}^{(-m)}$ est le vecteur $\boldsymbol{\rho}$ privé de sa m -ième composante et $\mathcal{I}'_j^{(-m)}$ est l'ensemble des $\mathbf{i}^{(-m)}$ pour \mathbf{i} parcourant \mathcal{I}' et vérifiant $i_m = j$.

3.2 Approximation de $m_{n,p,q}(\mathcal{J})$

Pour que l'approximation de $C_{p,q}(\boldsymbol{\rho}, \mathcal{I}')$ fournisse une valeur garantissant que le problème (1) admet un optimum global, il est suffisant d'avoir une borne inférieure de $m_{n,p,q}(\mathcal{J})$. Dans le cas où $p = q$, une telle borne est obtenue par le résultat suivant [3, Corollaire 8.7.4] où, pour tout $d \geq 1$, \mathbf{B}_d est la matrice $d \times d$ triangulaire supérieure constante égale à 1 au-dessus de la diagonale et $\|\mathbf{B}_d\|_{p,p} = \sup \{ \|\mathbf{B}_d x\|_p : x \in \mathbb{R}^d, \|x\|_p \leq 1 \}$. Dans le cas où $p = 1, 2$, une forme close de $\|\mathbf{B}_d\|_{p,p}$ est facilement obtenue. Pour $p > 2$, des bornes inférieures peuvent être obtenues à partir des inégalités (1.2) et (1.3) de [5].

Proposition 3.2. Soient $p \geq 1$, $\mathcal{J} = \{j_1, \dots, j_K\} \subset \llbracket 1, I_n \rrbracket$ avec $j_1 < \dots < j_K$ et $K \geq 1$. Alors

$$\left\| \mathbf{B}_{\Delta_{\mathcal{J}}^{\ddagger}(\mathcal{J})-1} \right\|_{p,p}^{-1} \leq m_{n,p,p}(\mathcal{J}) \leq \left\| \mathbf{B}_{\Delta_{\mathcal{J}}^{\ddagger}(\mathcal{J})-1} \right\|_{p,p}^{-1},$$

avec $\|\mathbf{B}_0\|_{p,p}^{-1} = +\infty$ et

$$\Delta_{\mathcal{J}}^{\ddagger}(\mathcal{J}) := \max \left\{ j_1, (I_n - j_K + 1), \max_{2 \leq k \leq K} \left\lfloor \frac{j_k - j_{k-1} + 1}{2} \right\rfloor \right\},$$

$$\overline{\Delta}_{\mathcal{J}}^{\ddagger}(\mathcal{J}) := \max \left\{ j_1, (I_n - j_K + 1), \max_{2 \leq k \leq K} \left\lceil \frac{j_k - j_{k-1} + 1}{2} \right\rceil \right\},$$

où pour tout $x \in \mathbb{R}$, $\lfloor x \rfloor \leq x \leq \lceil x \rceil$ constitue l'encadrement optimal de x par des entiers.

4 Algorithme HALS

Dans cette section, nous proposons d'utiliser un algorithme HALS (Hierarchical Alternating Least Squares) pour la résolution de (1), qui consiste à minimiser alternativement chaque $\mathbf{a}_r^{(n)}$ et λ_r . La minimisation en λ_r s'écrit simplement

$$\lambda_r = \left[\frac{\left\langle \mathbf{W} \otimes \mathbf{X}^{(r)}, \mathbf{W} \otimes (\mathbf{a}_r^{(1)} \circ \dots \circ \mathbf{a}_r^{(N)}) \right\rangle_F}{\left\| \mathbf{W} \otimes (\mathbf{a}_r^{(1)} \circ \dots \circ \mathbf{a}_r^{(N)}) \right\|_F^2} \right]_+,$$

avec $\mathbf{X}^{(r)} = \mathbf{X} - \sum_{s \neq r} \lambda_s \mathbf{a}_s^{(1)} \circ \dots \circ \mathbf{a}_s^{(N)}$. La minimisation en $\mathbf{a}_r^{(n)}$ est équivalente au problème

$$\min_{\mathbf{a} \in \mathbb{S}_{I_n, q}^+, \|\mathbf{a}\|_{\text{TV}, p} \leq \rho_n} \frac{1}{2} \mathbf{a}^\top \mathbf{M} \mathbf{a} + \mathbf{b}^\top \mathbf{a}, \quad (3)$$

où l'on a défini $\mathbf{M} = \lambda_r^2 \text{diag} \left(\mathbf{W}_{(n)}^{\otimes 2} \left(\bigotimes_{m \neq n} \mathbf{a}_r^{(m)} \right)^{\otimes 2} \right)$ et $\mathbf{b} = -\lambda_r \left(\mathbf{X}_{(n)}^{(r)} \otimes \mathbf{W}_{(n)}^{\otimes 2} \right) \bigotimes_{m \neq n} \mathbf{a}_r^{(m)}$.

Dans le cas où $\rho_n = +\infty$, la contrainte sur la norm TV disparaît et une approximation de la solution peut être obtenue par $\frac{[-\mathbf{M}^{-1} \mathbf{b}]_+}{\|[-\mathbf{M}^{-1} \mathbf{b}]_+\|_q}$, il est aussi possible de minimiser le

problème (3) sous contrainte $\mathbf{a} \in \mathbb{R}_+^{I_n}$ puis de normaliser le résultat. Dans le cas où $\rho_n < +\infty$, en observant que, pour $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{I_n}$, $\|\mathbf{a}\|_{\text{TV}, p} = \|\mathbf{L} \mathbf{a}\|_p$ où \mathbf{L} est la matrice $(I_n - 1) \times I_n$ ayant pour (i, j) -ème entrée $L_{i,j} = 1$ si $i = j$, $L_{i,j} = -1$ si $j = i + 1$ et $L_{i,j} = 0$ sinon, nous proposons de séparer les variables \mathbf{a} et $\mathbf{L} \mathbf{a}$ et de reformuler le problème par

$$\min_{\mathbf{a}, \mathbf{z}} \frac{1}{2} \mathbf{a}^\top \mathbf{M} \mathbf{a} + \mathbf{b}^\top \mathbf{a} + \mathbb{I}_{\mathbb{S}_{I_n, q}^+}(\mathbf{a}) + \mathbb{I}_{[0, \rho_n C]}(\|\mathbf{z}\|_p) \text{ t.q. } \mathbf{z} = \mathbf{L} \mathbf{a},$$

où $\mathbb{I}_{\mathcal{C}}(x) = 0$ si $x \in \mathcal{C}$ et $+\infty$ sinon. Ce problème peut être résolu par la méthode ADMM (Alternating Direction Method of Multipliers), voir par exemple [6]. La mise à jour de \mathbf{a} nécessite alors de minimiser une fonction quadratique sur $\mathbb{S}_{I_n, q}^+$ et nous pouvons appliquer les méthodes décrites dans le cas $\rho_n = +\infty$. La mise à jour de \mathbf{z} nécessite de calculer la projection orthogonale sur une boule de la norme p . Pour $p = 2$ la projection admet une forme close, le cas $p = 1$ est traité dans [2] et pour $p > 2$ des méthodes de Newton peuvent être utilisées comme dans la boite à outils Matlab BPDQ [7].

Missing	cpwopt		swntf	
	$R = 3$	$R = 6$	$R = 3$	$R = 6$
25%	96.5	99.7	100.0	100.0
50%	98.1	100.0	100.0	98.5
70%	99.3	100.0	79.9	65.7

TABLE 1 – Accuracy (en %).

5 Résultats expérimentaux

Afin d'évaluer le modèle proposé, nous construisons un tenseur $\mathbf{Y} = \mathbf{X} + \sigma \mathbf{E} \in \mathbb{R}^{I \times I \times I}$ où $I = 50$, $\mathbf{X} = \sum_{r=1}^R \lambda_r \mathbf{a}_r^{(1)} \circ \mathbf{a}_r^{(2)} \circ \mathbf{a}_r^{(3)}$ et \mathbf{E} est un tenseur de variables normales centrées réduites. L'écart type $\sigma > 0$ est pris comme dans [1], i.e. $\sigma = (100/\nu - 1)^{-1/2} \frac{\|\mathbf{X}\|_2}{\|\mathbf{E}\|_2}$ avec $\nu = 2$. Les $\mathbf{a}_r^{(3)}$ sont tirés uniformément sur $[0, 1]$ et les facteurs $\mathbf{a}_r^{(1)}$ et $\mathbf{a}_r^{(2)}$ sont les parties positives de fonctions générées à partir de 7 fonctions B-Spline d'ordre 4. Nous générons 60 tenseurs pour $R = 3, 6$. Parmi ces tenseurs, 30 sont tels que $\mathbf{a}_r^{(1)}$, $\mathbf{a}_r^{(2)}$ ne s'annulent pas et, pour les 30 autres, on autorise les facteurs à s'annuler sur des intervalles. Nous générons aussi 10 masques binaires de valeurs manquantes tirées uniformément pour différentes proportions. Ainsi, pour chaque rang et proportion de valeurs manquantes, 150 expériences sont lancées (15 tenseurs et 10 masques). Dans tous les cas, nous prenons $\rho = [I^{-1}, I^{-1}, \infty]$ et $p = q = 2$. Une borne inférieure de $C_{p,q}(\rho, \mathcal{I}_{\mathbf{W}})$ est calculée en utilisant les résultats de la section 3 et nous prenons $C = 0.9 \times C_{p,q}(\rho, \mathcal{I}_{\mathbf{W}})$ dans (1).

Nous comparons notre méthode, que l'on nomme swntf (pour Smooth Weighted Nonnegative Tensor Factorization), à la méthode cpwopt de [1] dans laquelle nous utilisons L-BFGS-B comme solveur pour traiter la contrainte de positivité. Dans les deux cas, une initialisation basée sur la SVD est utilisée. Pour les deux algorithmes le nombre d'itérations maximal est fixé à 10^3 et l'algorithme est stoppé si l'évolution relative de l'erreur devient inférieure à 10^{-6} . Les résultats sont évalués par l'accuracy définie dans [1] qui calcule la proportion de bonne reconstruction des facteurs dans les 150 expériences décrites plus haut. Les résultats sont présentés dans le tableau 1. Les deux méthodes donnent des résultats similaires jusqu'à 50% de valeurs manquantes mais, pour 70%, notre méthode se dégrade fortement contrairement à cpwopt. Cette différence peut s'expliquer par la robustesse de l'algorithme L-BFGS-B utilisé pour le critère non contraint.

6 Conclusion

Dans ce papier, nous avons proposé un algorithme permettant d'approcher la constante optimale de régularité des facteurs garantissant l'existence d'un optimum global au problème de factorisation non-négative de tenseur. Nous proposons aussi de résoudre le problème sous contrainte en se basant sur la méthode ADMM. Les expériences montrent que cet algorithme est moins robuste que l'algorithme L-BFGS-B utilisé dans l'état

de l'art. Néanmoins le calcul de la complexité maximale pour la coercivité est une approche nouvelle intéressante à approfondir pour évaluer les contraintes ou les pénalités de régularité adaptées à un problème donné de factorisation non-négative de tenseurs.

Références

- [1] Evrim Acar, Daniel M. Dunlavy, Tamara G. Kolda, and Morten Mørup. Scalable tensor factorizations for incomplete data. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 106(1) :41–56, 2011. Multiway and Multiset Data Analysis.
- [2] Laurent Condat. Fast projection onto the simplex and the l_1 ball. *Math. Program.*, 158(1-2, Ser. A) :575–585, 2016.
- [3] Amaury Durand. *Functional time series modeling and application to representation and analysis of multi-sites electrical load curves for energy management*. PhD thesis, Telecom Paris, 2022.
- [4] Amaury Durand, François Roueff, Jean-Marc Jicquel, and Nicolas Paul. New penalized criteria for smooth non-negative tensor factorization with missing entries. Submitted, March 2022.
- [5] Moshe Goldberg. Equivalence constants for lp norms of matrices. *Linear and Multilinear Algebra*, 21(2) :173–179, 1987.
- [6] Tom Goldstein, Brendan O'Donoghue, Simon Setzer, and Richard Baraniuk. Fast alternating direction optimization methods. *SIAM J. Imaging Sci.*, 7(3) :1588–1623, 2014.
- [7] D. K. Hammond, L. Jacques, M. J. Fadili, G. Puy, and P. Vandergheynst. The Basis Pursuit DeQuantizer (BPDQ) toolbox, July 2009.
- [8] Tamara G. Kolda and Brett W. Bader. Tensor decompositions and applications. *SIAM Review*, 51(3) :455–500, September 2009.
- [9] J. B. Kruskal, R. A. Harshman, and M. E. Lundy. *How 3-MFA Data Can Cause Degenerate Parafac Solutions, among Other Relationships*, page 115–122. North-Holland Publishing Co., NLD, 1989.
- [10] Lek-Heng Lim and Pierre Comon. Nonnegative approximations of nonnegative tensors. *Journal of Chemometrics*, 23(7-8) :432–441, 2009.