Doctoraat Nick Vannieuwenhov

The Tensor Rank Decomposition: Truncatio



Nick Vannieuwenhoven studeerde in 2010 af als Master in de Informatica aan de Faculteit Wetenschappen van KU Leuven. Vervolgens startte hij zijn doctoraatsonderzoek bij de onderzoeksgroep NALAG (Numerical Analysis and Applied Mathematics) van het Departement Computerwetenschappen, onder supervisie van de professoren Karl Meerbergen en Raf Vandebril. Een jaar later behaalde hij een FWO-aspirantenmandaat voor zijn onderzoek dat resulteerde in de verhandeling getiteld: 'The Tensor Rank Decomposition: Truncation and Identifiability'. Nick Vannieuwenhoven behaalde op 24 februari 2015 de doctoraatstitel met gelukwensen van de examencommissie. Sinds oktober 2015 vervolgt hij zijn onderzoek aan de KU Leuven als postdoctoraal onderzoeker van het FWO.

3G, 4G of 5G?

Beeld je de moeilijkheden in voor de ontwikkelaars van web-applicaties bij het plaatsen van een eenvoudige afbeelding. Idealiter moet je rekening houden met de heterogeniteit van de toestellen en dataverbindingen van de bezoekers. Voor een bezoeker met een desktopcomputer en een 100Mbps-verbinding maakt het weinig uit of een afbeelding 1KB dan wel 5MB groot is; ze wordt in beide gevallen meteen weergegeven. Een smartphone-gebruiker heeft er echter baat bij om een gecomprimeerde afbeelding te ontvangen om het mobiele dataverbruik te beperken. Een elegante oplossing voor deze heterogeniteit bestaat erin om een dataoverdrachtsprotocol op te stellen waarbij de bezoeker zelf kan bepalen hoeveel data verzonden mogen worden. De webapplicatie past dan een geschikt compressie-algoritme toe. Aangezien een populaire webapplicatie enkele duizenden verzoeken per minuut moet kunnen afhandelen, lijkt een offline compressiefase gecombineerd met een slimme dataoverdracht de aangewezen strategie te zijn.

Een protocol dat bovenstaande beperkingen respecteert, kan gebaseerd worden op de singulierewaardenontbinding (SWO). Ze ontbindt een matrix als een lineaire combinatie van rang-1 matrices (*singular vector tuples* (SVTs) genaamd) die onderling orthogonaal staan en zodanig zijn geordend dat de singuliere waarden een degressieve rij vormen. Het Eckart—Young (EY) theorema stelt dat de som van de eerste R SVTs de beste rang-R benadering van de oorspronkelijke matrix vormt.

In een SWO-gebaseerd protocol beschouwen we een afbeelding als een matrix en berekenen we haar SWO eerst offline. Vervolgens kan elke bezoeker een gepersonaliseerde gecomprimeerde afbeelding vragen. De zender zal dan, zonder verdere berekeningen te vereisen, opeenvolgende SVTs versturen, die bij de ontvanger eenvoudig geassembleerd kunnen worden tot een som van rang-1 matrices. Dit proces eindigt wanneer de bezoeker aangeeft geen verdere data te willen ontvangen. Door het EY-theorema zal de gereconstrueerde matrix een optimale benadering vormen. Het versturen van een SVT kost weinig omdat enkel de singuliere waarde en de bijbehorende linkse en rechtse singuliere vector worden verstuurd.

Figuur 1 illustreert het voorgaande idee. Na het ontvangen van de eerste 50 SVTs kan men de linkse afbeelding in Figuur 1 reconstrueren. De compressiefactor voor de opslag van deze afbeelding ten opzichte van de oorspronkelijke 500x698 afbeelding bedraagt 500*698 / (50*(500+698)) = 5.8. Na het ontvangen van de eerste 100 SVTs kan men de middelste afbeelding uit Figuur 1 reconstrueren. De compressiefactor bedraagt hier nog steeds 2.9. De afbeelding die men kan reconstrueren uit de eerste 200 SVTs, wordt rechts in Figuur 1 weergegeven.



Figuur 1: Een SWO afknotten geeft aanleiding tot een sequentie van optimale benaderingen.

3D, 4D of 5D?

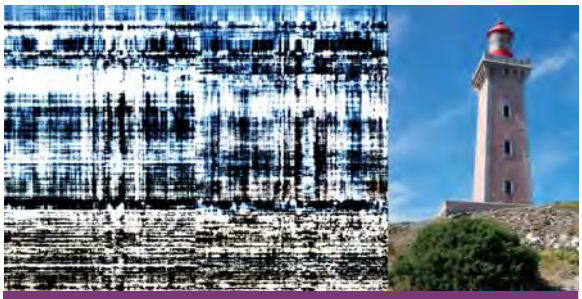
Een beperking van het voorgaande protocol is dat het enkel werkt voor tweedimensionale rijen en dus niet overweg kan met kleurenafbeeldingen. De voorstelling van een gekleurde pixel op een computerscherm in de gebruikelijke kleuren-systemen zoals RGB of CMYK vereist immers de specificatie van drie waarden. Een kleurenafbeelding is een voorbeeld van een (driedimensionale) *tensor*: een rij die met drie indices geadresseerd wordt.

Het concept van een rang-1 matrix $\mathbf{A} = \mathbf{u}\,\mathbf{v}^T$ — een matrix waarbij het element A(I,J) op positie (I,J) de waarde **u**(I) * **v**(J) heeft, waarin **a**(K) verwijst naar het Kde element in de vector **a** — kan uitgebreid worden naar tensoren: bij een rang-1 tensor A = **u** o **v** o **w** heeft het element A(I,J,K) op positie (I,J,K) de waarde **u**(I) * **v**(J) * **w**(K). Elke tensor kan men schrijven als een lineaire combinatie van rang-1 tensoren. Zo'n ontbinding van

en:
n and Identifiability



Figuur 2: Afzonderlijke TROs van toenemende rangen.



Figuur 3: Een TRO afknotten geeft geen sequentie van optimale benaderingen.

minimale lengte noemt men dan een *tensorrangontbinding* (TRO). Het aantal rang-1 termen in deze minimale ontbinding definieert de rang van de tensor.

Een tensor kan men benaderen door een TRO met een kleiner aantal rang-1 termen. Figuur 2 geeft hier een voorbeeld van. De linkse afbeelding toont een optimale benadering van rang 50. De middelste en rechtse afbeeldingen geven respectievelijk een optimale benadering met een rang-100 en rang-200 TRO weer. Men zou kunnen besluiten dat de TRO een goede generalisatie is van de SWO omdat Figuur 1 op een zwart-wit versie van Figuur 2 lijkt. De compressiefactoren zijn nu zelfs nog beter: van links naar rechts bekomen we een factor 17.4, 8.7 en 4.6. Voor elke rang-1 tensor dienen we namelijk slechts drie vectoren op te slaan: een van lengte 500, een van lengte 698 en een van lengte 3.

No free lunch

Om het protocol uit te breiden naar kleurenafbeeldingen wensen we ook een generalisatie van het EY-theorema: we zoeken een TRO die de eigenschap bezit dat de som van de eerste R rang-1 termen tegelijkertijd de beste rang-R benadering van de oorspronkelijke tensor oplevert. Het is precies deze eigenschap waardoor je bij matrices uit één SWO een sequentie van afbeeldingen kan reconstrueren waarin elke opeenvolgende afbeelding er visueel beter uitziet dan de voorgaande. Het blijkt dat deze eigenschap op een spectaculaire wijze kan falen voor tensoren. Dit fenomeen wordt weergegeven in Figuur 3, waar we een rang-200 TRO (rechts) afknotten naar respectievelijk rang 50 (links) en 100 (midden). Het is duidelijk dat deze afgeknotte TROs niet lijken op de drie optimale benaderingen in Figuur 2.

In samenwerking met prof. Johannes Nicaise van het Departement Wiskunde van de KU Leuven werd een bewijs geleverd voor het ontbreken van een EY-theorema voor tensoren. We toonden aan dat een ontbinding met deze eigenschappen in het algemeen enkel kan bestaan voor matrices.

Identificeerbaarheid

Hoewel er voor tensoren geen EY-theorema bestaat, beschikt de TRO wel over een andere wenselijke eigenschap: uit onderzoek blijkt dat de individuele rang-1 termen in een TRO namelijk vaak uniek zijn.

In de chemometrie wordt de TRO gebruikt voor het identificeren van individuele fluoroforen in een chemische mengeling. Bij een fluorescente spectroscopie wordt op verschillende tijdstippen een zogenaamde emissie-excitatiematrix opgesteld; deze matrix bevat op positie (I,J) de intensiteit van de reflectie van licht met golflengte I wanneer de chemische mengeling geëxciteerd wordt met licht met golflengte J. Door deze matrices op te stapelen in de derde dimensie verkrijgt men een driedimensionale tensor. Het blijkt uit de wet van Beer—Lambert dat deze tensor een TRO bezit waarbij de rang exact overeenstemt met het aantal fluoroforen in de mengeling. Dankzij de uniekheid van de TRO kan men dan de individuele fluoroforen identificeren aan de hand van de opgemeten tensor die de tijdsafhankelijke emissie–excitatie intensiteiten bevat.

In samenwerking met prof. Luca Chiantini van de Universiteit van Siena en prof. Giorgio Ottaviani van de Universiteit van Firenze ontwierpen we een algoritme om na te gaan of een tensor een unieke TRO van een gegeven rang bezit.

Conclusies

In deze thesis werden enkele fundamentele eigenschappen van de TRO onderzocht. We toonden aan dat zulke ontbindingen vaak uniek zijn. Helaas houdt dit ook in dat een generalisatie van het EY-theorema naar de TRO onmogelijk is.

Nick Vannieuwenhoven, Karl Meerbergen,
Raf Vandebril