

# Введение в тензорные разложения и их приложения

Блинов В.Н.  
НЦЧ РАН, Яндекс

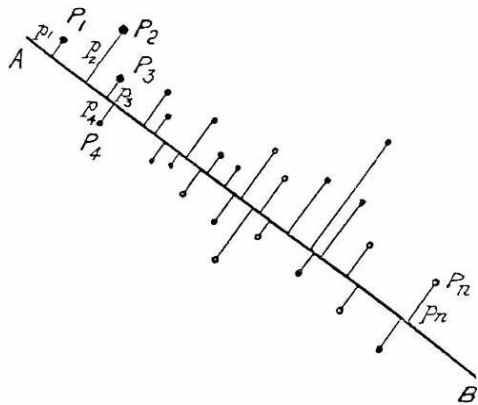
# План

- Матрицы; PCA, SVD, ранг
- Многомерные тензоры; разложения как обобщение ранга
- Каноническое разложение и разложение Такера
- Иерархические разложения

# РСА

- Анализ главных компонент (Principal component analysis)

Для заданного набора из  $N$  векторов  $x_i$  размерности  $n$  найти прямую (линейное многообразие большей размерности), сумма квадратов расстояний до которых минимально.



$$\sum_{i=1}^N (a, x_i)^2 \rightarrow \max$$

$$a^T X^T X a \rightarrow \max$$

Применения:

- снижение размерности;
- фильтрация шума

# SVD

- Сингулярное разложение (singular value decomposition).

Идея: связать матрицу из PCA с исходной матрицей  $X$

$$X^T X \rightarrow \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n), X \sim \text{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sqrt{\lambda_n})?$$

$$V^T X^T X V = D, U = X V D^{-1/2}$$

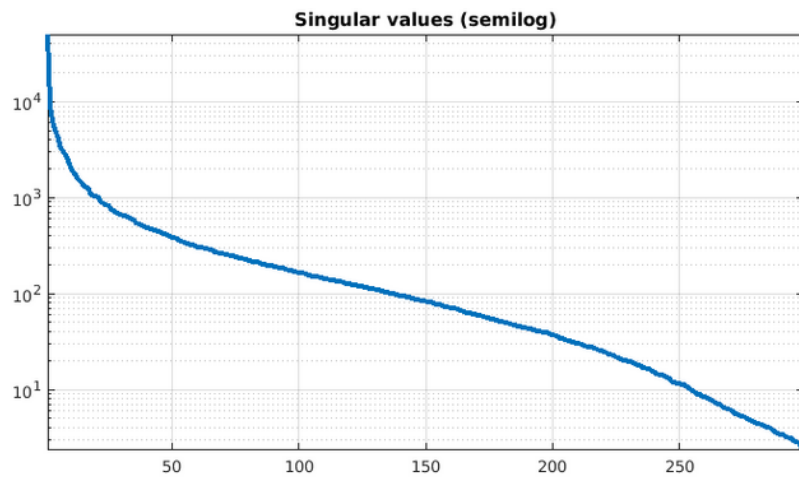
Тогда  $U^T U = E$ ,  $V^T V = E$ , что даёт сингулярное разложение матрицы  $X$ :

$$X = U \Sigma V^T \quad \text{Для любой матрицы } X!$$

$$\begin{pmatrix} X & X & X \\ X & X & X \\ X & X & X \\ X & X & X \\ X & X & X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & u_3 & u_4 & u_5 \\ u_1 & u_2 & u_3 & u_4 & u_5 \\ u_1 & u_2 & u_3 & u_4 & u_5 \\ u_1 & u_2 & u_3 & u_4 & u_5 \\ u_1 & u_2 & u_3 & u_4 & u_5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & & \\ & \sigma_2 & & & \\ & & \sigma_3 & & \\ & & & & \\ & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 & v_1 & v_1 \\ v_2 & v_2 & v_2 \\ v_3 & v_3 & v_3 \end{pmatrix}$$

# SVD

- приложения: сжатие изображений



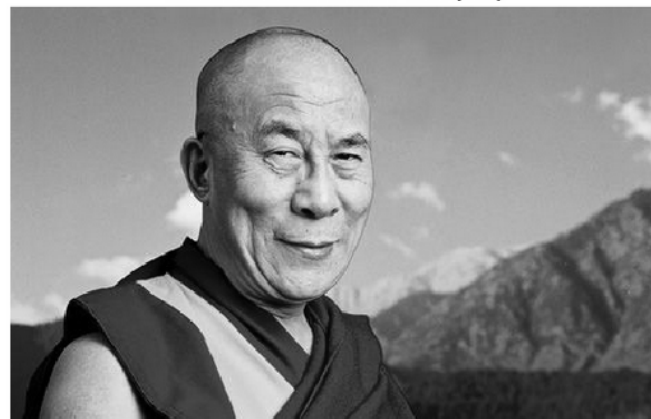
Reconstruction with  $n=10$



Reconstruction with  $n=50$



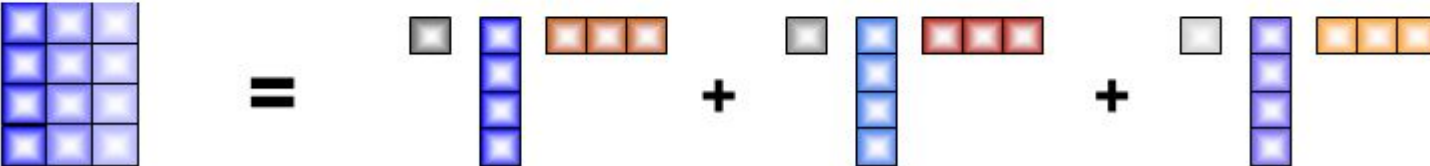
Reconstruction with  $n=299$  (full)



# SVD

- Почему это хорошо работает для картинок?

SVD можно рассматривать как разложение в виде суммы матриц ранга 1, причём вклад каждого слагаемого определяется величиной соответствующего сингулярного числа. В изображениях яркость пикселя задаётся целым числом, а ошибку можно оценить сверху суммой отброшенных сингулярных чисел. Если последняя сумма, к примеру, меньше 1, то можно гарантировать, что и отклонение яркости каждого пикселя в сжатом изображении от оригинала будет не больше 1.

$$X = U \cdot \Sigma \cdot V^H = \sum_{i=1}^r \sigma_i \cdot u_i \cdot v_i^H$$


Кроме того, SVD предоставляет оптимальное в некотором смысле приближение с заданным рангом (теорема Эккарта-Янга). Эквивалентность матричных норм позволяет выписать оценки на ошибку в более “полезной” для заданной задачи норме.

# Тензоры

- Под тензором мы будем понимать многомерное обобщение матрицы, как массива чисел с тремя и более индексами.
- В научных задачах всего возникают в задачах в виде таблиц значений функции на дискретных наборах значений аргументов.

Рассмотрим обобщение предыдущей задачи сжатия изображения в трёхмерном случае; трёхмерные изображения на самом деле вполне естественны:

- обычные фотографии содержат несколько каналов цвета, что делает их 3-тензорами;
- объёмные изображения МРТ;
- цветные видеоролики-уже 4-тензоры!

Задачи те же, как применить SVD к этим объектам?

Нужно определиться с понятием ранга.

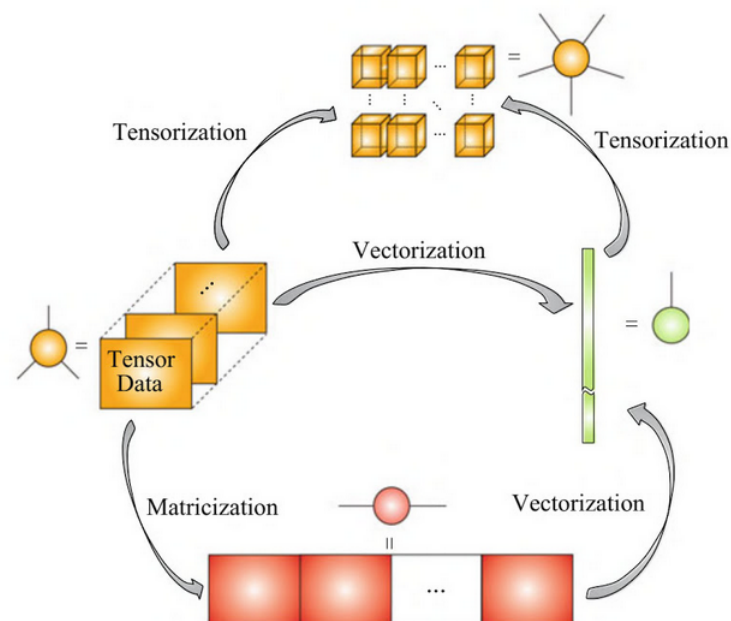
# Базовые операции

- Изменение размерности

4-тензор  $4 \times 5 \times 6 \times 7$  можно рассматривать как

- вектор,
- матрицу  $20 \times 42$ ,
- 3-тензор  $24 \times 5 \times 7$ ,
- ...

объединяя и разделяя индексы.



- Алгебраические операции

- сложение,
- вычитание,
- свёртка,
- тензорное произведение,
- ...

*Тензорные разложения сохраняют возможность произведения вычислений, это не просто архивация данных!*

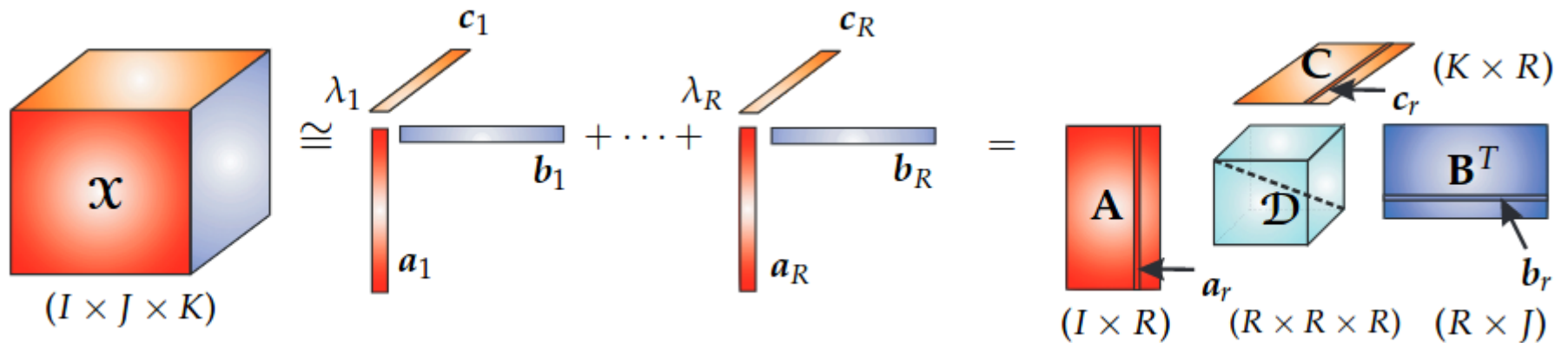
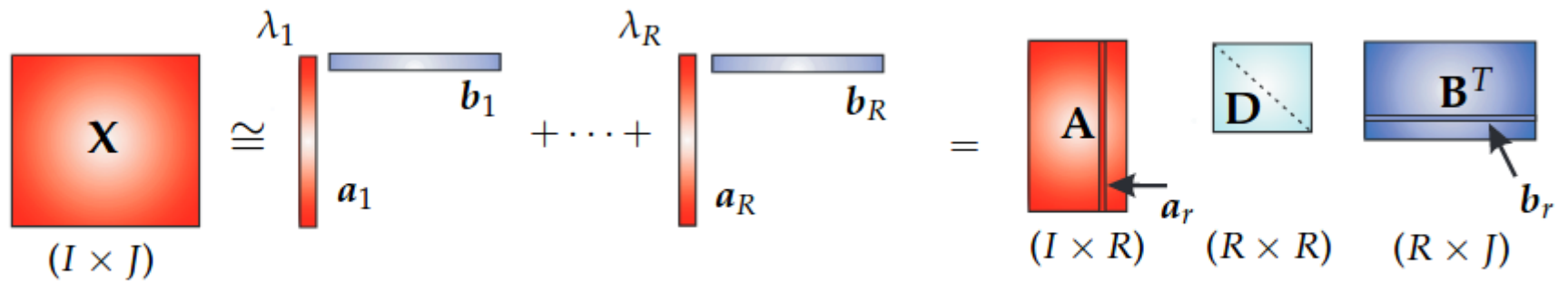


# Проблемы

- Как получить разложение?
- Итеративные методы (ALS) плохо сходятся - наилучшее приближение фиксированного ранга может не существовать

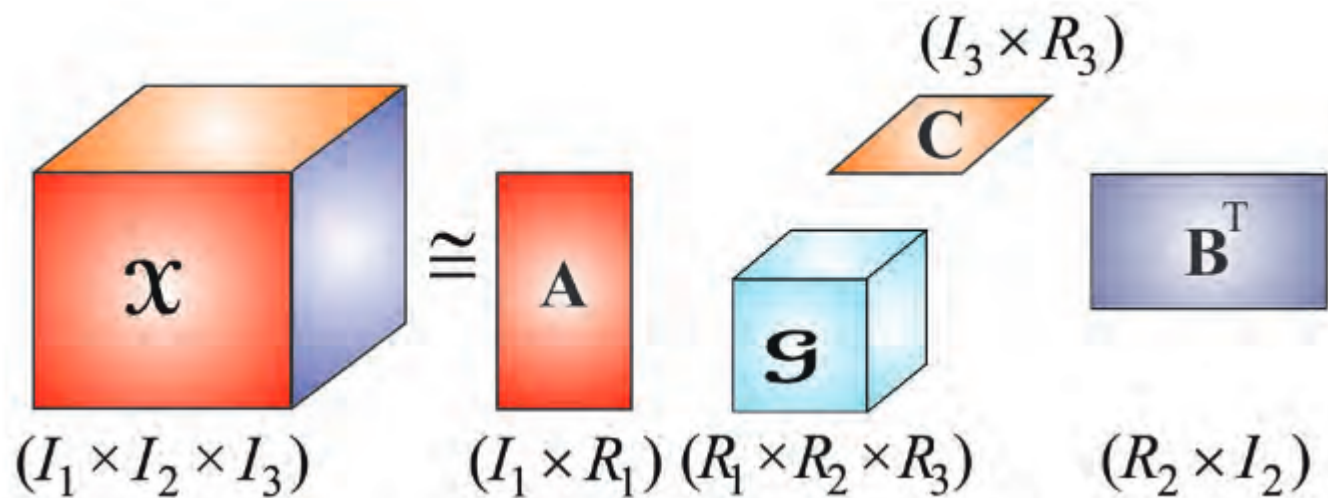
# Каноническое разложение

В качестве простейшего обобщения SVD можно рассмотреть *каноническое разложение* (PARAFAC, CANDECOMP)



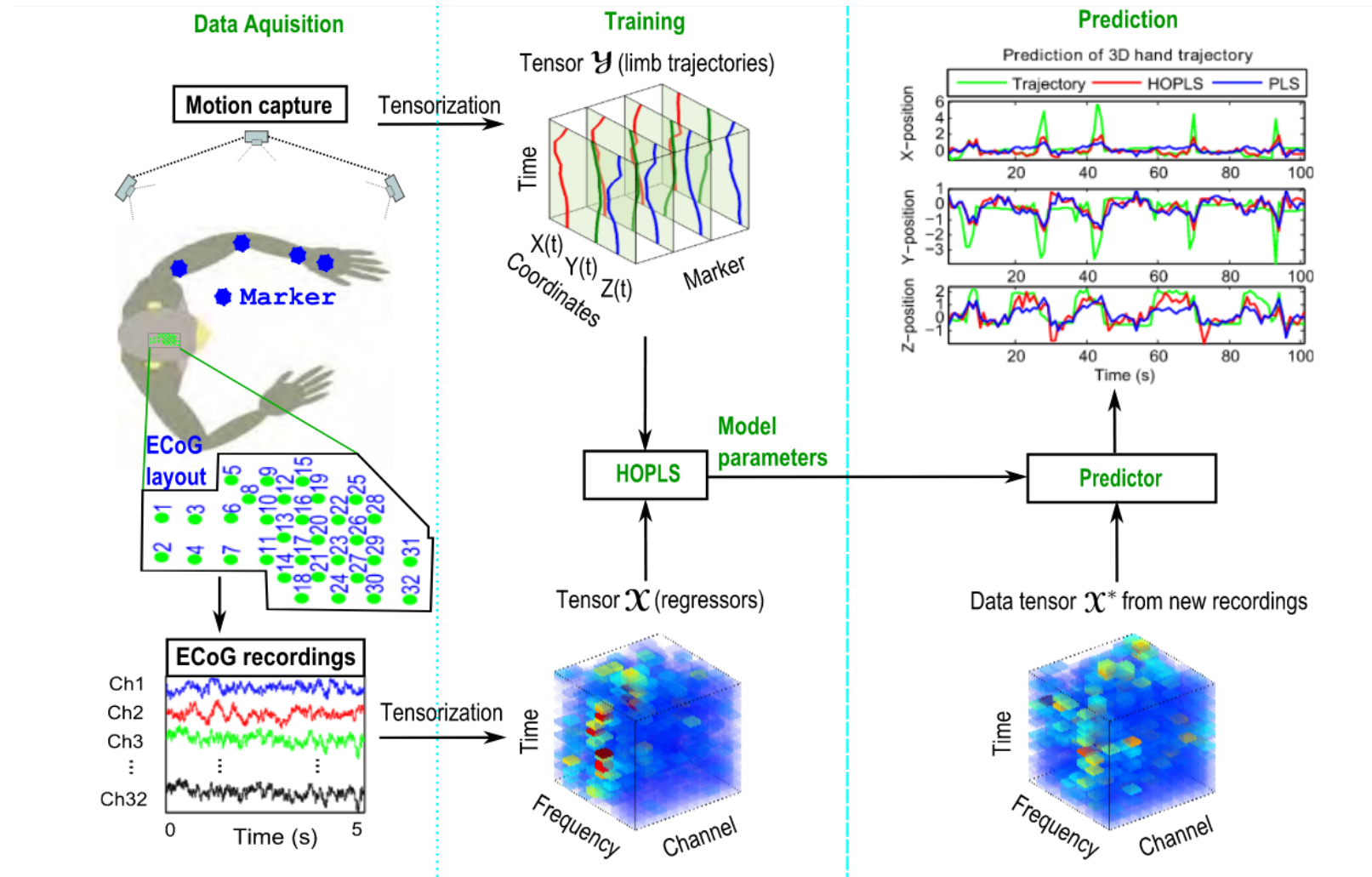
# Разложение Такера и HOSVD

- Более устойчивым вариантом является разложение Такера



Его можно получить путём SVD-разложения вдоль каждой размерности и объединению результатов.

# Приложения: HOPLS



**Figure 14:** Prediction of arm movement from brain electrical responses. *Left:* Experiment setup. *Middle:* Construction of the data and response tensors and training. *Right:* The new data tensor (bottom) and the predicted 3D arm movement trajectories ( $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  coordinates) obtained by tensor-based HOPLS and standard matrix-based PLS

# PLS

$$\begin{array}{c} \mathbf{X} \\ (I \times N) \end{array} \cong \begin{array}{c} \mathbf{T} \\ (I \times R) \end{array} \begin{array}{c} \mathbf{P}^T \\ (R \times N) \end{array} = \sum_{r=1}^R \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \mathbf{t}_r \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \mathbf{p}_r^T \end{array}$$

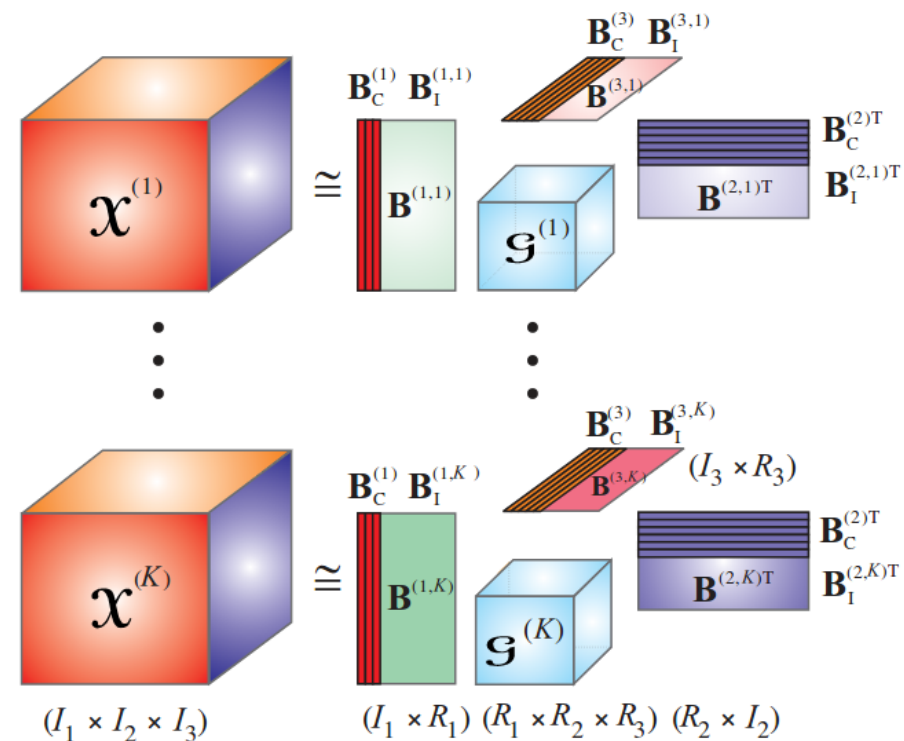
$$\begin{array}{c} \mathbf{Y} \\ (I \times M) \end{array} \cong \begin{array}{c} \mathbf{U} \\ (I \times R) \end{array} \begin{array}{c} \mathbf{Q}^T \\ (R \times M) \end{array} = \sum_{r=1}^R \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \mathbf{u}_r \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \mathbf{q}_r^T \end{array}$$

# Классификация изображений

## *Linked multiway component analysis (LMWCA)*

Оптимизация коэффициентов разложения с учётом наличия общих и индивидуальных компонент.

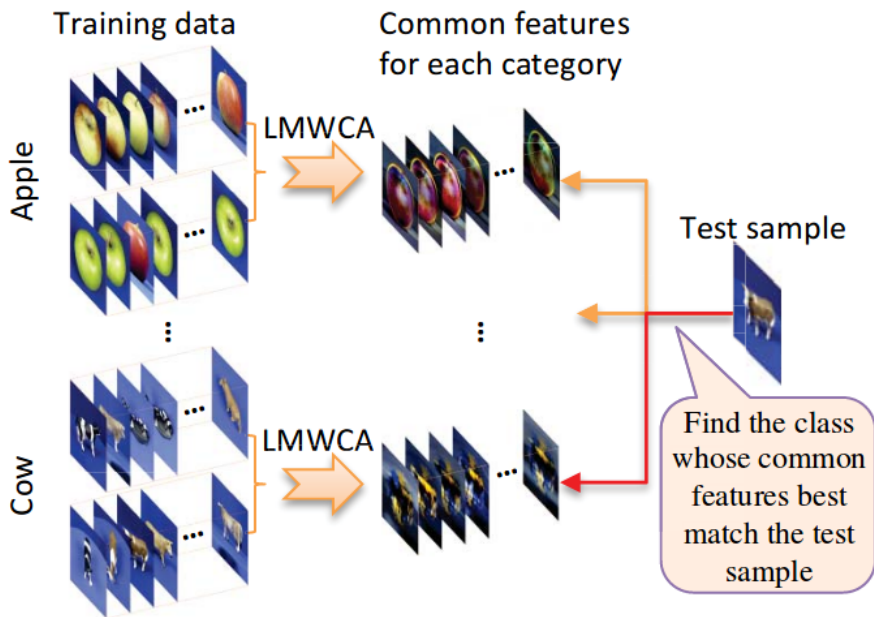
Отбрасывая общие компоненты остаётся только “непохожесть” каждого тензора на остальные.



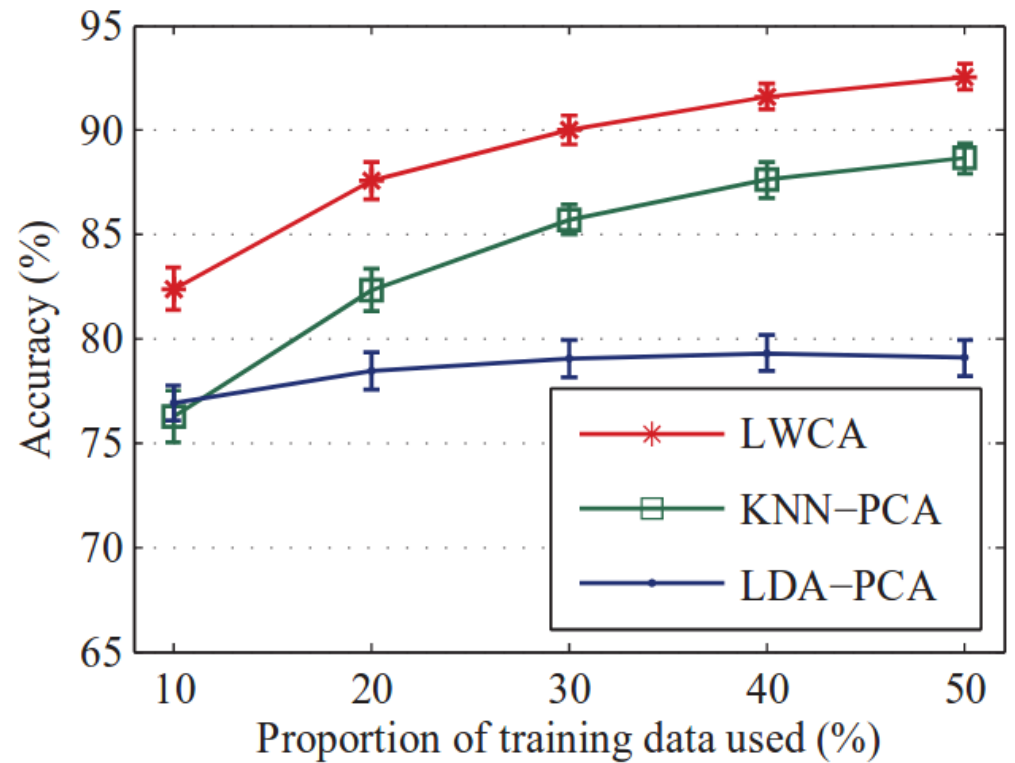
# LMWCA



Sample images from different and same categories



Classification based on LMWCA



Performance comparison

# АСИМПТОТИКА

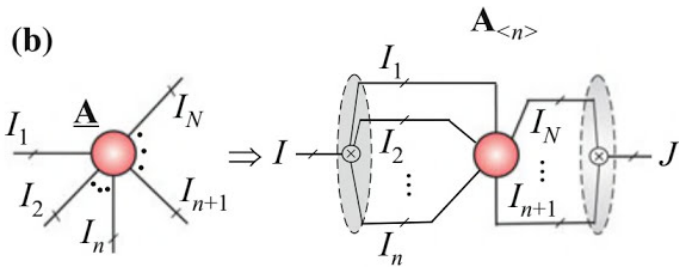
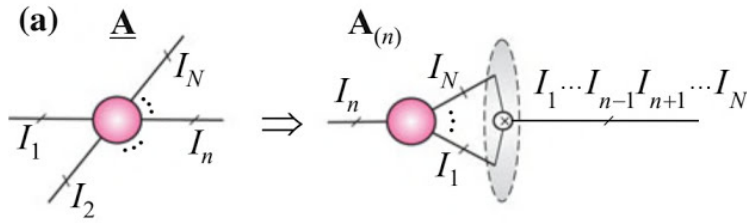
**Table 4:** Storage complexities of tensor models for an  $N$ th-order tensor  $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I \times I \times \dots \times I}$ , whose original storage complexity is  $\mathcal{O}(I^N)$ .

1. CPD	$\mathcal{O}(NIR)$
2. Tucker	$\mathcal{O}(NIR + R^N)$
3. TT	$\mathcal{O}(NIR^2)$
4. QTT	$\mathcal{O}(NR^2 \log_2(I))$

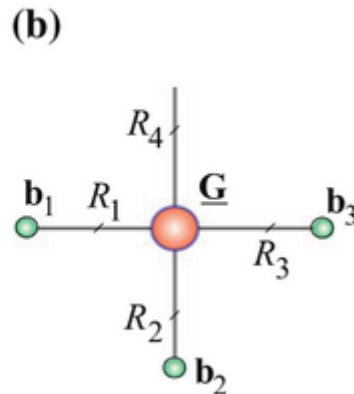
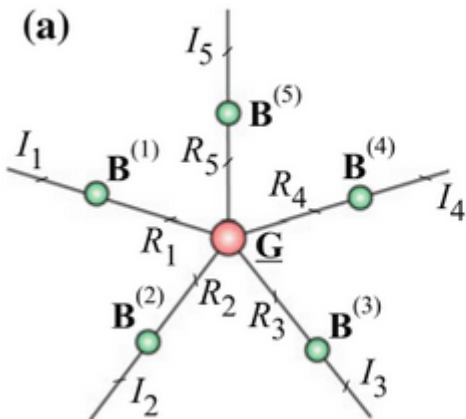


# Иерархические разложения

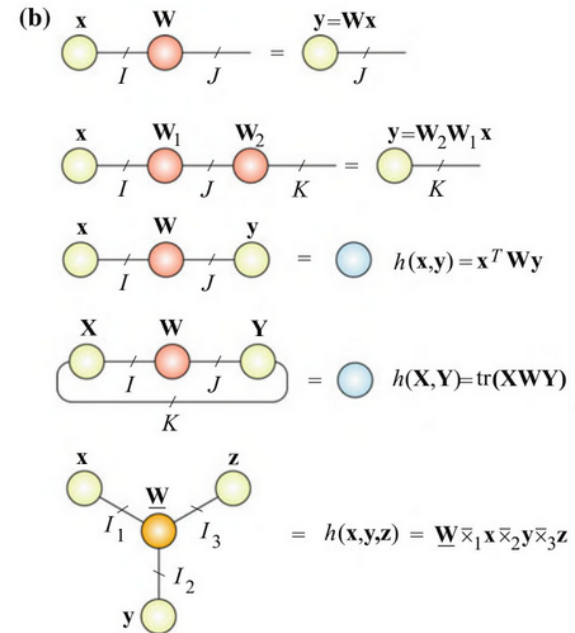
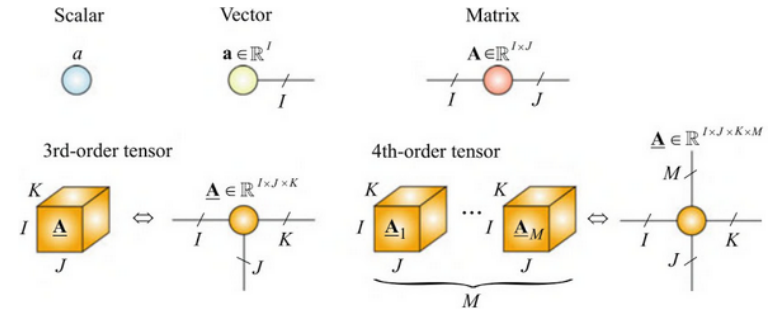
операции с индексами



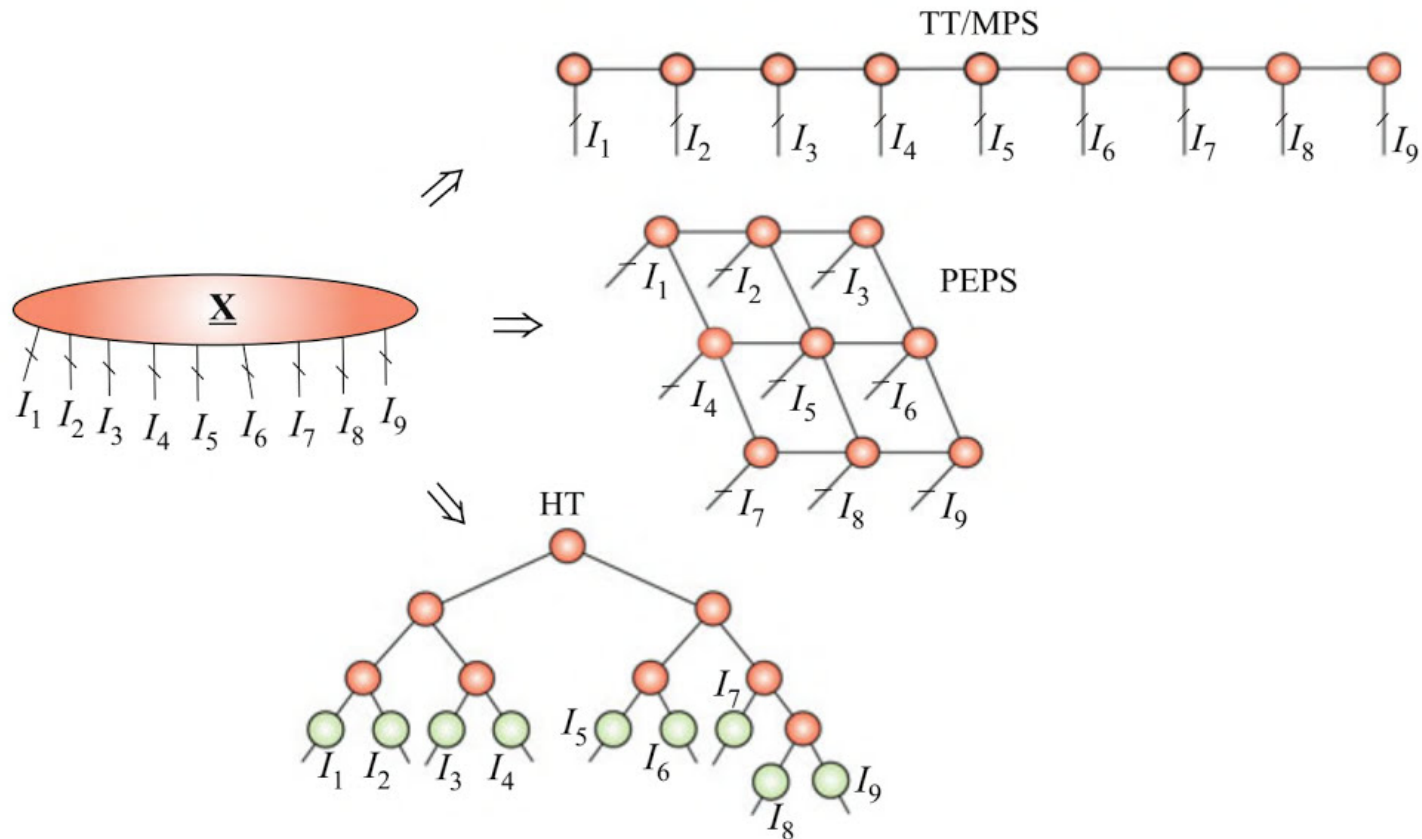
разложение Такера



принятые обозначения для работы с разложениями



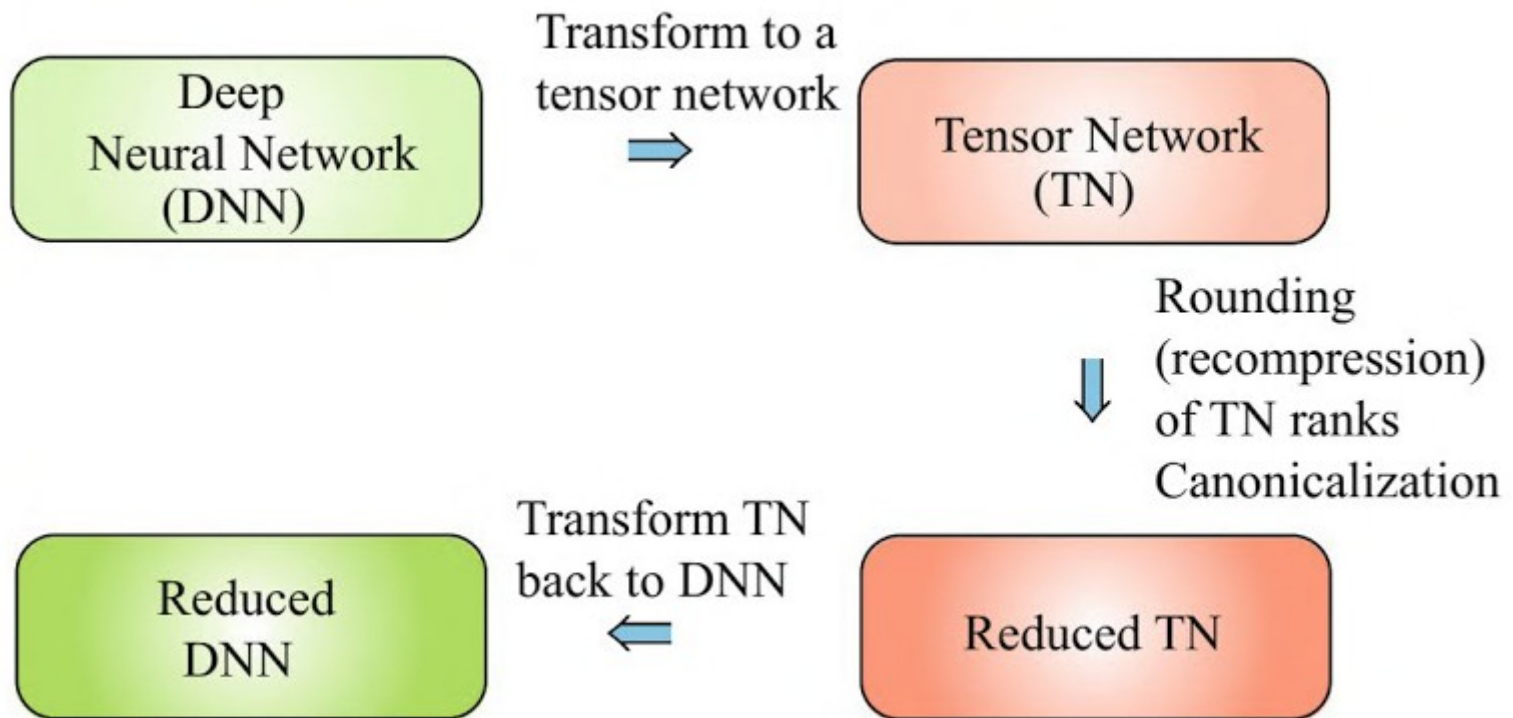
# Иерархические разложения



**Fig. 7** Illustration of the decomposition of a 9th-order tensor,  $\underline{\mathbf{X}} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_9}$ , into different forms of tensor networks (TTNs). In general, the objective is to decompose a very high-order tensor into sparsely (weakly) connected low-order and small size core tensors, typically 3rd-order and 4th-order cores. Top: The Tensor Train (TT) model, which is equivalent to the Matrix Product State (MPS) with closed boundary conditions (CBC). Middle: The Projected Entangled-Pair States (PEPS). Bottom: The Hierarchical Tucker (HT)

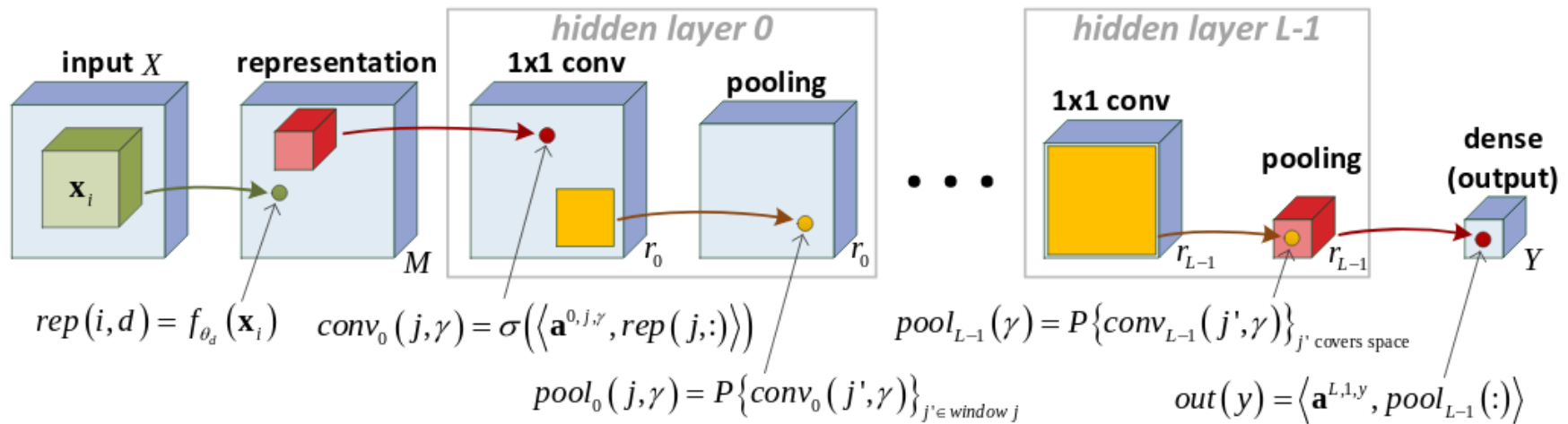
# DNN+TN

Тензорные разложения для оптимизации нейронных сетей



# DNN ~ TN

- Некоторые типы нейронных сетей (например, т.н. convolutional rectifiers [1]) могут быть реализованы с помощью тензорных разложений с изменённым тензорным произведением



[1] Cohen, Nadav, and Amnon Shashua. "Convolutional rectifier networks as generalized tensor decompositions." International Conference on Machine Learning. 2016.