Визуализация многомерных функций с помощью канонического разложения

А.К. Алексеев ^{1,2}, А.Е.Бондарев ¹, Ю.С. Пятакова ²

¹ ИПМ им М.В. Келдыша РАН, Миусская пл., 4, 125047, Москва, Россия ² РКК Энергия им. С.П. Королева, Ленина 4а, Королев, 141700, Россия

Аннотация

Для визуализации многомерных данных рассмотрено использование аппроксимации многомерной функции с помощью тензора высокого порядка и канонического разложения. Формально, с точки зрения требуемых вычислительных ресурсов (объема оперативной памяти и времени счета) каноническое разложение не имеет конкурентов. Однако, в настоящее время основной алгоритм, реализующий каноническое разложение, основывается на произведении Хатри-Рао, использующем матризацию тензора, что ограничивает его область применимости тензорами относительно малой размерности. Для преодоления этой проблемы разработан алгоритм расчета форм-матриц канонического разложения с помощью комбинации метода переменных наименьших квадратов и стохастического градиентного спуска. Этот алгоритм не имеет ограничений с точки зрения порядка анализируемого тензора. Представлены численные результаты для аппроксимации функций в шестимерном пространстве, демонстрирующие высокую вычислительную эффективность и качество результатов. Другой проблемой канонического разложения являются неустойчивости, возникающие при определении ранга разложения. Представлены результаты численных расчетов, демонстрирующие поиск оптимального ранга, обеспечивающего минимум невязки истинного решения и его аппроксимации.

Ключевые слова

Многомерная функция, аппроксимация, визуализация, каноническое разложение, ранг тензора.

On the Visualization of Multidimensional Functions Using Canonical Decomposition

A.K. Alekseev^{1,2}, A.E. Bondarev¹, Yu. S. Pyatakova²

¹ Keldysh Institute of Applied mathematics of RAS, Miusskaya sq. 4, Moscow, 125047, Russia ² RSC Energia, Lenina 4a, Korolev, 141700, Russia

Abstract

The approximation of the multidimensional function using the high order tensor and canonical decomposition is considered for the purpose of visualization. Formally, from the standpoint of computational resources (operational memory volume and the time of computation) the canonical decomposition is beyond comparison. However, at present, the main algorithm that calculates the canonical decomposition is based on the Khatri-Rao product, which implies matrization. This circumstance restricts the domain of applicability by tensors of the relatively small order. In order to overcome this drawback, the algorithm of the computation of alternating least squares and stochastic gradient descent. This algorithm has no restrictions from the standpoint of the order of the tensor under the consideration. The numerical tests are presented for the approximation of functions in six-dimensional space that demonstrate the high computational efficiency and high quality of

ГрафиКон 2022: 32-я Международная конференция по компьютерной графике и машинному зрению, 19-22 сентября 2022 г., Рязанский государственный радиотехнический университет им. В.Ф. Уткина, Рязань, Россия

EMAIL: aleksev.k.alekseev@gmail.com (А.К. Алексеев); bond@keldysh.ru, (А.Е. Бондарев); yuliya.pyatakova@rsce.ru (Ю.С. Пятакова) ORCID: 0000-0001-8317-8688 (А.К. Алексеев); 0000-0003-3681-5212 (А.Е. Бондарев); 0000-0002-8055-7807 (Ю.С. Пятакова)

Use permitted under Creative Commons License Attribution 4.0 International (CC BY 4.0).

results. The instabilities arising at the estimation of the rank of the decomposition are another trouble of the canonical decomposition. The results of the numerical tests are presented that illustrate the search for the optimal rank providing the minimum of the discrepancy of the exact solution and its approximation.

Keywords

Multidimensional function, approximation, visualization, canonical decomposition, tensor rank.

1. Введение

Визуализация многомерных данных (функций в пространстве более трех измерений) представляет сложную задачу как из-за психологических проблем (человеческого восприятия многомерности), так и из-за технических проблем - экспоненциального роста требуемой памяти при увеличении размерности задачи ("проклятия размерности"). В данной работе мы рассмотрим возможности, предоставляемые аппроксимацией многомерных функций записанных в тензорной форме с использованием канонического разложения с точки зрения экономии вычислительных ресурсов. Мы будем воспринимать тензор просто как многомерный массив [1,2], соответствующий сеточной функции, определенной на регулярной (это существенно) сетке в многомерном пространстве. Конечной нашей целью (в перспективе) является визуализация плотности распределения (для уравнения Больцмана естественно $\Omega \subset R^6$) и полей газодинамических переменных, численно получаемых при параметрических исследованиях. В параметрических задачах как тензор мы рассматриваем набор полей течения

$$\theta_{p;ijk;m_{g_1}...m_{g_l}}^n = (\rho_{ijk;m_{g_1}...m_{g_l}}^n, u_{ijk;m_{g_1}...m_{g_l}}^n, v_{ijk;m_{g_1}...m_{g_l}}^n, w_{ijk;m_{g_1}...m_{g_l}}^n, e_{ijk;m_{g_1}...m_{g_l}}^n),$$
(1)

соответствующий решению задачи в пространстве параметров $(\mathcal{G}_1...\mathcal{G}_k) \subset \Omega_k \subset \mathbb{R}^k$. Поэтому рассматриваемые задачи определены в $\Omega \subset \mathbb{R}^{4+k}$. В качестве примера здесь мы рассмотрим функцию f(x, y, x, u, v, w), определенную в области $\Omega \subset \mathbb{R}^6$.

Важно, что тензорная запись численных решений потенциально позволяет сжимать и анализировать данные численных расчетов многопараметрических задач (определенных в пространствах большой размерности (больше трех)). Сжатие данных осуществляется с помощью тензорных разложений [1,2], применение одного из которых (канонического разложения [3,4] является основной темой данной работы. Следует отметить, что применяемые идеи и технические средства достаточно далеки от стандартов тензорного исчисления [5].

Мы рассмотрим возможности аппроксимации шестимерных тензоров с помощью простейшего тензорного разложения, (каноническое разложение [3,4]) и проиллюстрируем эти возможности численными экспериментами. Выбор используемого порядка тензоров связан с потребностями уравнения Больцмана, не является принципиальным и не препятствует применению используемых алгоритмов для параметрических задач аэрогазодинамики.

2. Каноническое разложение

Каноническое разложение тензора $A_{ij\ldots k}$ в индексном виде для не нормированных ядер записывается как

$$A_{ij...k} = \sum_{1}^{R} Q_{i,r} Q_{j,r} ... Q_{k,r}$$
(2)

Если соответствующие компоненты ядер ортогональны, то это выражение единственно с точностью до перестановки членов и масштабирования. Задача определения набора ядер

 $Q^n = \{Q_r^1, ..., Q_r^N\}$ в вариационной форме имеет вид

$$Q^{n} = \underset{Q^{n}}{\operatorname{argmin}} \left\| A - \sum_{1}^{R} Q_{r}^{1} \otimes Q_{r}^{2} \otimes \dots \otimes Q_{r}^{N} \right\|$$
(3)

Ключевой величиной при использовании канонического разложения является ранг тензора *R*, который априори может не быть известен.

По данным [1,6] ранг тензора невычислим (точнее, полувычислим сверху) из-за некорректности постановки задачи его определения

$$R = \underset{R}{\operatorname{arg\,min}} \left\| A - \sum_{1}^{R} Q_{r}^{1} \otimes Q_{r}^{2} \otimes \dots \otimes Q_{r}^{N} \right\|$$
(4)

Каноническое разложение подразумевает очень серьезное сжатие $N^n \rightarrow N \cdot n \cdot R$, где N размерность пространства, n - число узлов по одному направлению, R -ранг тензора. Для рассматриваемого шестимерного случая и сетки, содержащей 100 узлов по каждой координате в несжатом случае необходимо хранить 10^{12} чисел, что соответствует оперативной памяти 64 ТБ (для 64-значного числа) и параметрам мощнейших современных суперкомпьютеров. Каноническое разложение при ранге 100 потребует хранения $6 \cdot 10^4$ чисел (~4MБ), что много меньше памяти современного персонального компьютера.

3. Численный алгоритм, реализующий каноническое разложение

Наш подход соответствует некоторой комбинации стохастического градиентного спуска [7] и метода переменных наименьших квадратов (ALS) [8]. Изложим его подробно, поскольку описания этого алгоритма в литературе авторам найти не удалось. С помощью канонического разложения наша функция f(x, y, x, u, v, w) аппроксимируется в виде

$$f_{ijklmp} = \sum_{\alpha=1}^{R} Q^{x}(\alpha, i) \cdot Q^{y}(\alpha, j) \cdot Q^{z}(\alpha, k) \cdot Q^{u}(\alpha, l) \cdot Q^{v}(\alpha, m) \cdot Q^{w}(\alpha, p)$$
(5)

Покажем как рассчитывается первое ядро $Q^x(\beta,i)$ (связанное с координатой x), остальные ядра определяются аналогично. Выберем ранг и число параметров по координатам. Определим нить вдоль x (переменный индекс $i=1...N_x$), зафиксировав остальные индексы j,k,l,m,p с помощью случайного равномерно распределенного выбора. Рассмотрим невязку на этой нити, для этого суммируем по i локальные невязки

$$\varepsilon_f(Q^x) = \sum_{i}^{N_x} \{\sum_{\alpha=1}^{R} Q^x(\alpha,i) \cdot Q^y(\alpha,j) \cdot Q^z(\alpha,k) \cdot Q^u(\alpha,l) \cdot Q^v(\alpha,m) \cdot Q^w(\alpha,p) - \widetilde{f}_{ijklmp}\}^2 / 2$$
(6)

Здесь \tilde{f}_{ijklmp} - точное значение функции в точке i, j, k, l, m, p, которое мы можем рассчитать (в данной работе из аналитических выражений для тестовых функций). Невязку в соответствии с подходом ALS считаем зависящей только от одного ядра $Q^{x}(\alpha, i)$. Внесем возмущение $\Delta Q^{x}(\beta, i)$. Соответствующая вариация невязки примет вид:

$$\Delta_{x}\varepsilon_{f} = \sum_{i} \{ (\sum_{\alpha=1}^{R} (Q^{x}(\alpha,i) \cdot Q^{y}(\alpha,j) \cdot Q^{z}(\alpha,k) \cdot Q^{u}(\alpha,l) \cdot Q^{v}(\alpha,m) \cdot Q^{w}(\alpha,p) - \widetilde{f}_{ijklmp}) \cdot (\sum_{\beta=1}^{R} \Delta Q^{x}(\beta,i) \cdot Q^{y}(\beta,j) \cdot Q^{z}(\beta,k) \cdot Q^{u}(\beta,l) \cdot Q^{v}(\beta,m) \cdot Q^{w}(\beta,p)) \}.$$

$$(7)$$

Выберем специальное возмущение $\Delta Q^x(\beta, i)$ не равное нолю только в одной точке i, β , что позволит избавиться от суммирования по i и β в (7). Тогда можно выделить соответствующее значение градиента невязки в форме:

$$\nabla_{x,i,\beta}\varepsilon_{f} = \left(\sum_{\alpha} \left(Q^{x}(\alpha,i) \cdot Q^{y}(\alpha,j) \cdot Q^{z}(\alpha,k) \cdot Q^{u}(\alpha,l) \cdot Q^{v}(\alpha,m) \cdot Q^{w}(\alpha,p) - \widetilde{f}_{ijklmp} \right) \cdot \left(Q^{y}(\beta,j) \cdot Q^{z}(\beta,k) \cdot Q^{u}(\beta,l) \cdot Q^{v}(\beta,m) \cdot Q^{w}(\beta,p) \right) \right\}.$$
(8)

Недостатком выражения (8) в сравнении с методами ALS, использующими произведение Хатри-Рао [8], является невозможность прямого использования условия $\nabla_{x,i,\beta} \varepsilon_f = 0 \cdot ($ из-за того,

что искомая величина $Q^{x}(\alpha, i)$ суммируется по α) для расчета ядер (фактор-матриц). Достоинством (8) является его экономичность с точки зрения используемой памяти (матризация тензора не используется).

Итерации метода наискорейшего спуска, минимизирующие функционал (6) для элемента ядра Q^x (в точке β, i), имеют вид (τ - шаг итерации).

$$\{Q^{x}(\beta,i)\}^{n+1} = \{Q^{x}(\beta,i)\}^{n} - \tau \nabla_{x,i,\beta} \varepsilon_{f}$$

$$\tag{9}$$

Итерации идут по одному ядру на выбранной нити до установления. В расчетах в качестве критерия останова использовалась величина невязки на нити (6). Итерации прекращались при $\varepsilon_{c} \leq \varepsilon_{1} = 10^{-9}$.

После окончания итерации на текущем ядре переходим к следующему ядру, используя новую случайную нить. После того, как мы локально оптимизировали все ядра, мы переходим к следующему шагу глобальной итерации (от новых значений ядер) и снова начинаем поиск оптимальных ядер начиная с Q^x . Формально качество аппроксимации функции каноническим разложением на каждом шаге глобальной итерации может быть оценено с помощью следующей невязки

$$\widetilde{\varepsilon}_{total} = \sum_{i,j,k,l,m,p} \{ \sum_{\alpha} Q^{x}(\alpha,i) \cdot Q^{y}(\alpha,j) \cdot Q^{z}(\alpha,k) \cdot Q^{u}(\alpha,l) \cdot Q^{v}(\alpha,m) \cdot Q^{w}(\alpha,p) - \widetilde{f}_{ijklmp} \}^{2} / 2$$
(10)

К сожалению, она напрямую невычислима (по крайней мере на обычных персональных компьютерах) из-за проблем с размерностью и соответствующими огромными затратами компьютерного времени. Мы его значение численно оценивали с помощью метода Монте-Карло:

$$\varepsilon = \frac{1}{2Mc} \sum_{s=1}^{s=MC} \left\{ \sum_{\alpha=1}^{R} Q^{x}(\alpha, i) \cdot Q^{y}(\alpha, j) \cdot Q^{z}(\alpha, k) \cdot Q^{u}(\alpha, l) \cdot Q^{v}(\alpha, m) \cdot Q^{w}(\alpha, p) - \widetilde{f}_{ijklmp} \right\}^{2},$$
(11)

где на каждом шаге суммирования каждый индекс из i, j, k, l, m, p выбирался случайно и равномерно. В результате мы вычисляли среднюю по ансамблю сумму квадратов ошибки аппроксимации. Число попыток в ансамбле находилось в интервале 1000÷100000.

4. Результаты численных экспериментов

В численных экспериментах использовалась сетка, содержащая 100 узлов по каждой координате. В процессе отладки проводилось сравнение численных (полученных прямым численным дифференцированием) и аналитических градиентов (полученных с помощью выражения (8)) показавшее их практически полное совпадение.

4.1. Тестовые задачи

В качестве тестов использованы следующие многомерные функции, расположенные в порядке возрастания сложности. Начнем с простейшего очевидного случая, в котором ранг тензора равен единице

$$f = x \cdot y \tag{12}$$

Потребовалось 30 итераций, для ранга 1 $\varepsilon = 3.27 \cdot 10^{-14}$ (получено полное совпадение), для ранга 2 $\varepsilon = 2.78 \cdot 10^{-6}$, 3- $\varepsilon = 4.6 \cdot 10^{-5}$, 4- $\varepsilon = 3.34 \cdot 10^{-6}$, 5- $\varepsilon = 2.44 \cdot 10^{-4}$, 10- $\varepsilon = 1.63 \cdot 10^{-4}$. По мере увеличения ранга увеличивается зашумленность результата, по всей видимости это отражает неустойчивости при определении ранга, возникающие вследствие некорректности для ранга канонического разложения. На рисунке 1 представлена точная функция (12), на рисунке 2 представлена ее аппроксимация ранга 5. Можно отметить наличие слабого, но заметного шума.



Рисунок 1 – Точная функция (12)



Рисунок 2 – Аппроксимация (12), ранг 5

В качестве следующего примера рассмотрим функцию, описываемую следующим уравнением (гауссиану)

$$f = \exp\{-[((x-0.5) + (y-0.5) + (z-0.5) + (u-0.5) + (v-0.5) + (w-0.5))]^2\}$$
(13)

Формально эта функция определена в шестимерном пространстве, но, по сути, эта функция одномерна (зависит только от радиуса) и определяется произведением векторов, поэтому ее ранг равен единице, что подтверждено расчетами. Потребовалось 30 итераций. Для ранга 1 $\varepsilon = 5.31 \cdot 10^{-13}$ и наблюдается полное совпадение функции и ее аппроксимации. Для ранга 2 $\varepsilon = 6.92 \cdot 10^{-7}$, 3- $\varepsilon = 2.78 \cdot 10^{-6}$, 4- $\varepsilon = 6.74 \cdot 10^{-4}$, 5- $\varepsilon = 3.91 \cdot 10^{-5}$, 10- $\varepsilon = 5.13 \cdot 10^{-3}$.

По мере увеличения ранга увеличивается зашумленность результата, что иллюстрируется рисунками 3 и 4. На рисунке 3 представлена точная функция (13), на рисунке 4 представлена ее аппроксимация ранга 5.



Рисунок 3 – Точная функция (13)

Рисунок 4 – Аппроксимация (13)

Наиболее сложный для расчетов вариант (истинно шестимерный)

$$f = \sin(5x) + \sin(5y) + \sin(5z) + \sin(5u) + \sin(5v) + \sin(5w)$$
(14)

сходится достаточно медленно, требует около 300 итераций и достаточно большое значение ранга. На рисунках 5 и 6 представлены результаты ранга 200 в плоскости x, y, остальные переменные соответствуют серединам интервалов.







Рисунок 6 – Аппроксимация (14)

4.2. Сходимость итераций

На рисунке 7 представлено поведение невязки (11) в зависимости от числа итераций. Локальная сходимость достигается на каждом шаге глобальной итерации. Сходимость по норме градиента не наблюдается.



Рисунок 7 – Сходимость невязки (11) в зависимости от числа итераций

4.3. Ранг канонического разложения

Численная оценка ранга тензора получается перебором по величине ранга при решении вариационной задачи. Предполагалось, что с увеличением ранга невязка должна убывать. Однако для некоторых простых геометрий поведение имеет противоположный характер. Например, для многомерной гауссианы (13) минимум невязки получается при ранге 1. Увеличение ранга эту невязку несколько увеличивает. Для поверхности (14) (300 итераций) результаты зависимости невязки от ранга представлены на рисунке 8.



Рисунок 8 – Зависимость невязки от величины ранга для функции, описываемой (14)

Для этой функции зависимость невязки от ранга достаточно немонотонна. Хотя в целом увеличение ранга невязку уменьшает. Поэтому при расчетах нужно адаптировать ранг для уменьшения невязки.

5. Обсуждение

Численные эксперименты показали, что ранг тензора очень сильно зависит от типа аппроксимируемой функции. По мере увеличения ранга увеличивается зашумленность результата, поэтому выбор величины ранга "с запасом", позволяющий несколько упростить алгоритм, может привести к ухудшению качества результатов.

6. Заключение

Численные эксперименты показывают, что каноническое разложение позволяет эффективно аппроксимировать и хранить многомерные функции. Затраты компьютерного времени на работу с функциями в шестимерном пространстве (при использовании 100 узлов по каждой координате, что формально требует хранение и работу с 10^{12} чисел) составляют 2-3 минуты на ПК (процессор Intel I5, 2.66 ГГц) при затратах памяти на хранение ядер в максимальном случае около 10^5 чисел.

7. Список источников

- [1] Hackbusch. W. Tensor Spaces and Numerical Tensor Calculus. Springer, 2012. 500 p.
- [2] Yorick H., Willi-Hans S. Matrix Calculus, Kronecker Product and Tensor Product: A Practical Approach to Linear Algebra, Multilinear Algebra and Tensor Calculus with Software I, WOS 2019 373 p.
- [3] Carroll J.D., Chang J.-J. Analysis of Individual Differences in Multidimensional scaling via an Nway generalization of "Eckart-Young" Decomposition//Psychometrika. 1970. N 35 P. 283–319.
- [4] Kolda T. G. and Bader B. W. Tensor Decompositions and Applications//SIAM Review. 2009. N 51(3). P. 455–500.
- [5] Коренев Г.В., Тензорное исчисление, М. МФТИ, 1995. 239 с.
- [6] Silva V. D., Lim L -H. Tensor rank and the ill-posedness of the best low rank approximation problem//SIAM J. Matrix Anal. Appl. 2008. N 30(3). P. 1084-1127.
- [7] Siaminou I., Liavas A. P. An Accelerated Stochastic Gradient for Canonical Polyadic Decomposition//arXiv:2109.13964v1 2021.
- [8] Comon P., Luciani X., and De Almeida A. L.F. Tensor decompositions, alternating least squares and other tales//Journal of Chemometrics. 2009. V. 23, N. 7-8. P. 393–405.