Лекция 6. Тензорные разложения

М. В. Рахуба

28 февраля 2024 г.

В этом курсе мы в основном работаем с матрицами — двумерными массивами, но данные могут иметь и бо́льшую размерность. Тензором размерности d будем называть многомерный массив:

$$A = \{a_{i_1...i_d}\}_{i_1,...,i_d=1}^{n_1,...,n_d} \in \mathbb{R}^{n_1 \times ... \times n_d}.$$

При $n_1=\ldots=n_d=n$ хранение такого массива в компьютере требует n^d ячеек памяти, что при больших d может оказаться невозможным из-за экспоненциального роста n^d с размерностью d. Например, 2^{300} намного больше оценки числа атомов во Вселенной. Это проявление так называемого npo-клятия размерности. Поэтому в случае с тензорами высокой размерности нас будут интересовать способы их представления с помощью небольшого числа параметров или другими словами нас будет интересовать сжатие тензоров. В этом нам помогут тензорные разложения, которые по сути являются обобщением скелетного разложения матриц на тензоры размерности $d \geq 3$.

1 Кронекерово произвдение и векторизация

Свойства тензоров и тензорных разложений часто удается свести к матричному случаю. Чтобы научиться такие матрицы выписывать через элементы тензорных разложений, нам понадобятся две новые операции: кронекерово произведение и векторизация. Отметим также, что эти операции оказываются полезными и в других случаях, не связанных с тензорными разложениями. Например, при работе с изображениями.

1.1 Кронекерово произведение

Определение 1. Кронекеровым произведением матриц $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ и $B \in \mathbb{C}^{p \times q}$ называется:

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{mp \times nq}.$$

Обратим внимание, что Кронекерово произведение определено для матриц любых размеров и содержит в себе всевозможные попарные произвдения элементов матриц A и B.

Обращаем внимание, что такое определение тензора нередко можно встретить в публикациях по прикладной математике или глубинному обучению. Однако классически под тензором понимается более общий объект.

На практике не часто встречаются тензоры, которые можно сжать с помощью тензорных разложений без потери качества. Поэтому нас будет также интересовать вопрос построения приближений с контролируемой ошибкой (по аналогии как мы это делали для матриц через SVD и теорему Эккарта-Янга-Мирского).

Пример 1.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Утверждение 1. Пусть A, B, C, D — некоторые комплекснозначные матрицы. Тогда выполняются следующие свойства:

1. Ассоциативность:

$$(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C).$$

2. Дистрибутивность:

$$(A+B)\otimes C=A\otimes C+B\otimes C$$
, $A\otimes (B+C)=A\otimes B+A\otimes C$.

3.
$$(A \otimes B)^{\top} = A^{\top} \otimes B^{\top}$$
 $u (A \otimes B)^* = A^* \otimes B^*$.

4.
$$A \otimes B = (A \otimes I)(I \otimes B) = (I \otimes B)(A \otimes I)$$
.

5.
$$(AB) \otimes (CD) = (A \otimes C)(B \otimes D)$$
.

6.
$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$$
 для обратимых A, B .

Доказательство. Первые три свойства очевидно следуют из свойств транспонирования, комплексного сопряжения и умножения матриц, и их справедливость можно показать, явно расписав ij-ый элемент каждой итоговой матрицы. Здесь же докажем остальные.

4. Пользуясь правилом блочного умножения матриц:

$$(A \otimes I)(I \otimes B) = \begin{bmatrix} a_{11}I & \dots & a_{1n}I \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}I & \dots & a_{mn}I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B & & & \\ & \ddots & & \\ & & B \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{bmatrix} = A \otimes B.$$

Аналогично показывается $(I \otimes B)(A \otimes I) = A \otimes B$.

5. Используя свойство 4 имеем:

$$(A \otimes C)(B \otimes D) = (A \otimes I)(I \otimes C)(B \otimes I)(I \otimes D) =$$

$$= (A \otimes I)(B \otimes I)(I \otimes C)(I \otimes D) =$$

$$= ((AB) \otimes I)(I \otimes (CD)),$$

Формально свойство 4 записывается как $A\otimes B=(A\otimes I_p)(I_n\otimes B)=(I_m\otimes B)(A\otimes I_q)$, где $A\in\mathbb{C}^{m\times n},\ B\in\mathbb{C}^{p\times q}$, но для удобства мы будем позволять себе опускать размеры матриц I, так как в большинстве случаев они однозначно определяются из контекста.

Обратите особое внимание на свойство 5, которое будет нам неоднократно встречаться в дальнейшем. Также свойства 4 и 6 элементарно из него следуют.

где последнее равенство следует из $(A \otimes I)(B \otimes I) = (AB) \otimes I$ и $(I \otimes C)(I \otimes D) = I \otimes (CD)$. Действительно,

$$(I \otimes C)(I \otimes D) = \begin{bmatrix} C & & \\ & \ddots & \\ & & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D & & \\ & \ddots & \\ & & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} CD & & \\ & \ddots & \\ & & CD \end{bmatrix} = I \otimes CD.$$

Свойство $(A \otimes I)(B \otimes I) = (AB) \otimes I$ проверьте самостоятельно.

6. Пусть матрицы $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$, $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ обратимы, тогда:

$$(A\otimes B)(A^{-1}\otimes B^{-1})=(AA^{-1})\otimes (BB^{-1})=I_m\otimes I_n=I_{mn},$$
а значит $(A\otimes B)^{-1}=A^{-1}\otimes B^{-1}.$

Замечание 1. Кронекерово произведение не является коммутативным. Смотри пример 1.

На этом все свойства кронекерова произведения матриц, конечно, не заканчиваются. Мы познакомились только с самыми базовыми из них. Многие другие свойства можно получить используя свойство 5 из Утверждения 1 и применяя его к некоторым матричным разложениям. Например, несложно убедиться, что сингулярные числа $A \otimes B$ являются всевозможными попарными произведениями сингулярных чисел A и B. Отсюда сразу следует, что

$$||A \otimes B||_2 = ||A||_2 ||B||_2.$$

Векторизация

Определение 2. Определим $\text{vec}\left(\cdot\right)\colon\mathbb{C}^{m\times n}\to\mathbb{C}^{mn}$ как векторизацию матрицы по столбцам, то есть:

$$\operatorname{\mathsf{vec}}\left(\left[egin{array}{cccc} a_1 & a_2 & \dots & a_n \end{array}
ight]
ight) = \left[egin{array}{c} a_1 \ a_2 \ dots \ a_n \end{array}
ight], \quad oldsymbol{\mathit{zde}} & a_k \in \mathbb{C}^m.$$

Мы не зря вводим векторизацию вместе с кронекеровым произведением. Покажем, как эти две операции связаны связаны друг с другом.

$$\operatorname{vec}(AXB) = (B^{\top} \otimes A) \operatorname{vec}(X).$$

Доказательство. Сначала заметим, что

$$\operatorname{vec}\left(uv^{ op}
ight) = \operatorname{vec}\left(egin{bmatrix} v_1u & v_2u & \dots & v_nu \end{bmatrix}
ight) = egin{bmatrix} v_1u \ v_2u \ dots \ v_nu \end{bmatrix} = v \otimes u.$$

Пусть $X = uv^{\mathsf{T}}$, тогда из выписанного выше выражения и свойства 5 Утверждения 1 получим:

$$\operatorname{vec}\left(A(uv^{\top})B\right) = \operatorname{vec}\left((Au)(B^{\top}v)^{\top}\right) = (B^{\top}v) \otimes (Au) =$$

$$= (B^{\top} \otimes A)(v \otimes u) = (B^{\top} \otimes A)\operatorname{vec}\left(uv^{\top}\right) = (B^{\top} \otimes A)\operatorname{vec}(X).$$

Произвольный же X является суммой матриц ранга 1, поэтому для него данное утверждение тоже справедливо в силу линейности vec (\cdot) .

2 Тензорные разложения

В этом разделе мы поговорим о двух разложениях, которые обобщают скелетное разложение матриц на случай тензоров размерности больше 2. Эти разложения называются каноническим разложением и разложением Таккера. В отличие от разложения Таккера, канонические разложение по своим свойствам будет заметно отличаться от скелетного матричного разложения. Как мы увидим, у каждого из разложений будут свои достоинства и недостатки при использовании в приложениях. Также отметим, что существует и множество других тензорных разложений, которые остаются за рамками настоящего курса, но представляют значительный интерес с практической точки зрения.

2.1 Каноническое разложение

Определение 3. Пусть $A \in \mathbb{R}^{n_1 \times \dots \times n_d}, B \in \mathbb{R}^{m_1 \times \dots \times m_D}$ — тензоры размерностей d и D соответственно. Тогда их тензорным произведением назовем тензор $A \circ B \in \mathbb{R}^{n_1 \times \dots \times n_d \times m_1 \times \dots \times m_D}$ размерности (d+D) с элементами:

$$(A \circ B)_{i_1 \dots i_d j_1 \dots j_D} = a_{i_1 \dots i_d} b_{j_1 \dots j_D}.$$

Посмотрим, как мы можем использовать тензорное произведение для записи скелетного разложения матриц. Во-первых,

Иногда тензорное произведение \circ обозначают как \otimes , но в нашем курсе \otimes уже занято под кронекерово произведения.

заметим, что любая матрица ранга 1 имеет вид $A=uv^{\top}$ или $a_{ij}=u_iv_j$ в индексной записи. Отсюда, используя только что введенное определение, получим:

$$A = uv^{\top} = u \circ v.$$

По аналогии можно определить трехмерный тензор ранга 1, как ненулевой тензор с элементами $a_{ijk}=u_iv_jw_k$. С использованием тензорного произведения получим:

$$A = u \circ v \circ w$$
.

Обсудим теперь случай ранга r. Вспомним, что любая матрица ранга r записывается с помощью матриц $U = [u_1, \dots, u_r]$ и $V = [v_1, \ldots, v_r]$:

$$A = UV^{\top} = u_1 \circ v_1 + \dots + u_r \circ v_r, \tag{1}$$

причем ранг матрицы есть минимально возможное число слагаемых в (1). Обобщим это разложение на случай трехмерных массивов (обобщение для массивов размерности d>3 делается аналогично).

Определение 4. Каноническим разложением $A \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times n_3}$ назовем разложение вида:

$$A = \sum_{\alpha=1}^{r} u_{\alpha} \circ v_{\alpha} \circ w_{\alpha}.$$

Матрицы $U = [u_1, \ldots, u_r], V = [v_1, \ldots, v_r]$ и $W = [w_1, \ldots, w_r]$ назовем каноническими факторами, а минимально возможное r — каноническим рангом. Для краткости также будем использовать следующее обозначение:

$$A = [\![U, V, W]\!].$$

Теперь обсудим, что мы можем сказать про существование и единственность канонического разложения, и возможно ли найти наилучшее приближение тензора тензором меньшего канонического ранга. А также сравним эти свойства со скелетным матричным разложением. Подробнее про свойства канонического разложения можно ознакомится в 1.

Замечание 2 (Существование). Каноническое разложение существует для любого тензора, причем $r \leq n_1 n_2 n_3$, так как

$$A = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \sum_{k=1}^{n_3} a_{ijk} e_i \circ e_j \circ e_k,$$
 (2)

Обратите внимание, что мы можем не расставлять скобки в силу ассоциативности тензорного произведения.

¹Tamara G Kolda and Brett W Bader. Tensor decompositions and applications. SIAM review, 51(3):455-500, 2009

где e_i — векторы стандартного базиса. Более тонкое наблюдение заключается в том, что канонический ранг удовлетворяет $r \leq \min(n_1 n_2, n_1 n_3, n_2 n_3)$ (проверьте). Таким образом, как и в случае со скелетным разложением, оно всегда существуem.

Замечание 3 (Единственность). Скелетное разложение для матриц не является единственным. Действительно, для произвольной невырожденной S:

$$UV^{\top} = (US) \left(S^{-1}V^{\top} \right).$$

Оказывается, что при некоторых предположениях на тензор, каноническое разложение может быть единственным с точностью до перестановки слагаемых и шкалирования векторов. В случае с матрицами это бы означало, что S могло бы быть только произведением матрицы перестановки и диагональной матрицы, а не произвольной невырожденной матриией.

Замечание 4 (Существование наилучшего приближения). Согласно теореме Эккарта-Янга-Мирского для любой ненулевой матрицы всегда найдется наилучшее приближение (в смысле унитарно-инвариантной нормы) матрицей меньшего ранга. Для канонического разложения это уже не так. Множество тензоров ранга $\leq r$ не является замкнутым, а значит можно, например, построить последовательность тензоров $\{A_n\}$: rank $A_n=2$, которая сходится к тензору A: rank A=3. Это может оказаться чревато разными неприятными эффектами при попытке построить наилучшее приближение заданного ранга с помощью численных алгоритмов. Подробнее об этом будет рассказано на семинаре.

Таким образом, каноническое разложение обладает как некоторыми свойствами, которые могут оказаться полезными на практике, например, единственность, так и неприятными свойствами, как проблемы с построением наилучшего приближения заданного ранга. Далее мы обсудим разложение Таккера, которое по свойствам больше напоминает матричный случай.

2.2 Разложение Таккера

Для следующей попытки обобщить скелетное разложение воспользуемся следующей его записью:

$$A = UGV^{\top} = \sum_{\alpha, \beta = 1}^{r, r} g_{\alpha\beta} u_{\alpha} \circ v_{\beta},$$

для некоторой $G \in \mathbb{R}^{r imes r}$. Для матриц нет разницы, в каком виде выбирать скелетное разложение, так как один его вид сводится к другому: $A = \widetilde{U}V^{\top}$, где $\widetilde{U} = UG$. Для тензоров размерности $d \ge 3$ различия уже будут.

Определение 5. Разложением Таккера тензора $A \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times n_3}$ называют разложение вида:

$$A = \sum_{\alpha=1}^{r_1} \sum_{\beta=1}^{r_2} \sum_{\gamma=1}^{r_3} g_{\alpha\beta\gamma} \ u_{\alpha} \circ v_{\beta} \circ w_{\gamma},$$

где тензор

$$G = \{g_{\alpha\beta\gamma}\}_{\alpha,\beta,\gamma=1}^{r_1,r_2,r_3} \in \mathbb{R}^{r_1 \times r_2 \times r_3},$$

называется таккеровским ядром, а матрицы

$$U = [u_1, \dots, u_{r_1}] \in \mathbb{R}^{n_1 \times r_1},$$

$$V = [v_1, \dots, v_{r_2}] \in \mathbb{R}^{n_2 \times r_2},$$

$$W = [w_1, \dots, w_{r_3}] \in \mathbb{R}^{n_3 \times r_3}.$$

называются таккеровскими факторами. Кортеж чисел

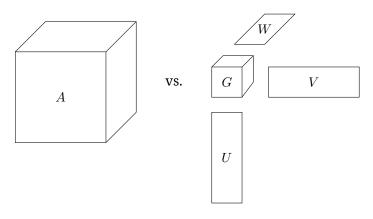
$$mlrank(A) = (r_1, r_2, r_3),$$

где каждое r_i является минимально возможным для A значением, называется мультилинейным или таккеровским рангом. Обозначать разложение Таккера будем следующим образом:

$$A = \llbracket G; U, V, W \rrbracket.$$

Существование разложения Таккера для любого тензора с рангами (n_1, n_2, n_3) также следует из (2).

Оценим, насколько разложение Таккера экономит память для случая $n_1=n_2=n_3=n$ и $r_1=r_2=r_3=r$, если $r\ll n$.



Дальше мы узнаем, что минимально возможные значения r_i для заданного тензора А достигаются одновременно, а значит данное нами определение мультилинейного ранга является корректным.

Каждый из факторов Таккера займет в памяти nr ячеек, ядро Таккера – еще r^3 , и все это вместо n^3 для хранения изначального тензора A:

$$\frac{\operatorname{mem}(\llbracket G;U,V,W\rrbracket)}{\operatorname{mem}(A)} = \frac{r^3 + 3nr}{n^3} = \left(\frac{r}{n}\right)^3 + \frac{3}{r}\left(\frac{r}{n}\right)^2 \ll 1.$$

Векторизация тензора. Чтобы лучше понять, как устроено разложение Таккера, нам необходимо свести его к известным нам объектам, а именно к векторам и матрицам. По аналогии с матричным случаем определим векторизацию тензора как применение функции reshape с использованием аргумента order='f' (то есть по столбцам в порядке увеличения индексов слева направо). Начнем с обобщения Утверждения 2.

Утверждение 3. Пусть определено [G; U, V, W]. Тогда:

$$\operatorname{vec}(\llbracket G; U, V, W \rrbracket) = (W \otimes V \otimes U) \operatorname{vec}(G).$$

Доказательство. Утверждение доказывается аналогично Утверждению 2. Необходимо только проверить, что

$$\operatorname{vec}(u \circ v \circ w) = w \otimes v \otimes u$$

и что

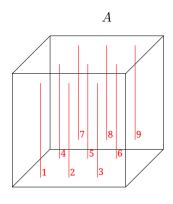
$$\llbracket (a \circ b \circ c); U, V, W \rrbracket = (Ua) \circ (Vb) \circ (Wc).$$

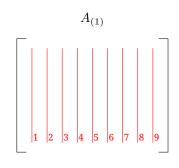
Далее пользуемся (2) для G.

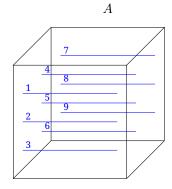
Матрицизации тензора. Таким образом, мы нашли, через какую матрицу соотносятся векторизации тензора A и тензора G. Теперь попробуем понять, как связаны их матрицизации (переупорядочивание элементов в матрицу). Дадим сначала определение одного из видов превращения тензора в матрицу — так называемую развертку по k-й моде.

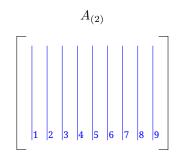
Определение 6. Разверткой по k-моде тензора $A \in \mathbb{R}^{n_1 \times \cdots \times n_d}$ назовем матрицу $A_{(k)} \in \mathbb{R}^{n_k imes (n_1 \cdot \ldots \cdot n_d)/n_k}$, столбцы которой являются $a_{i_1,\dots,i_{k-1},:\;,i_{k+1},\dots,i_d}\in\mathbb{R}^{n_k}$, расположенными в "фортрановском" порядке (увеличение индексов слева направо).

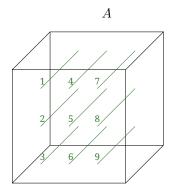
Визуализируем, как выглядят развертки для трехмерного массива $A \in \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3}$:

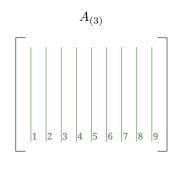












Несложно также записать, как будет выглядеть развертка по k-й моде ($k \in \{1, 2, 3\}$) на Python:

```
order = list(range(3))
order[0], order[k-1] = order[k-1], order[0]
Ak = np.transpose(A, order)
Ak = np.reshape(Ak, (nk, (n1*n2*n3)/nk), order='f')
```

Запишем теперь формулы для матрицизаций разложения Таккера тензора A.

Утверждение 4. A = [G; U, V, W] эквивалентно любой из:

$$\begin{split} A_{(1)} &= UG_{(1)}(W \otimes V)^{\top}, \\ A_{(2)} &= VG_{(2)}(W \otimes U)^{\top}, \\ A_{(3)} &= WG_{(3)}(V \otimes U)^{\top}. \end{split}$$

Доказательство. Докажем формулу для $A_{(1)}$. Остальные доказываются аналогично. Ключевым наблюдением является тот факт, что $vec(A) = vec(A_{(1)})$. Отсюда, используя утверждения 2 и 3 получим:

$$\operatorname{vec}\left(A_{(1)}\right) = \operatorname{vec}\left(A\right) = \ = (W \otimes V \otimes U) \operatorname{vec}\left(G\right) = (W \otimes V \otimes U) \operatorname{vec}\left(G_{(1)}\right) = \ = ((W \otimes V) \otimes U) \operatorname{vec}\left(G_{(1)}\right) = \operatorname{vec}\left(UG_{(1)}(W \otimes V)^{\top}\right),$$
а значит $A_{(1)} = UG_{(1)}(W \otimes V)^{\top}$.

Теперь мы готовы сформулировать теорему, которая проясняет наше определение мультилинейного ранга и объясняет, как этот ранг можно свести к хорошо знакомому нам матричному рангу.

Теорема 1. Для мультилинейного ранга тензора $A \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times n_3}$ справедливо:

$$mlrank(A) = (rank(A_{(1)}), rank(A_{(2)}), rank(A_{(3)})),$$

причем разложение Таккера со значением $(r_1, r_2, r_3) = mlrank(A)$ существует.

Доказательство. Пусть дано разложение Таккера с $G \in \mathbb{R}^{r_1 \times r_2 \times r_3}$ с некоторыми r_1, r_2, r_3 . Заметим, что

$$A_{(1)} = \underbrace{U}_{n_1 \times r_1} \underbrace{G_{(1)}(W \otimes V)^{\top}}_{r_1 \times n_2 n_3},$$

то есть число r_1 не может быть меньше ранга $A_{(1)}$. Покажем, как уменьшить r_1 в точности до rank $(A_{(1)})$. Пусть $A_{(1)}=U_1\Sigma_1V_1^{\top}$ — компактное SVD матрицы $A_{(1)}$, то есть $U_1 \in \mathbb{R}^{n_1 \times \operatorname{rank}(A_{(1)})}$. Тогда:

$$A_{(1)} = U_1 U_1^{\top} A_{(1)} = U_1 \underbrace{U_1^{\top} U G_{(1)}}_{\widetilde{G}_{(1)}} (W \otimes V)^{\top} = U_1 \widetilde{G}_{(1)} (W \otimes V)^{\top},$$

что по Утверждению 4 эквивалентно

$$A = [\widetilde{G}; U_1, V, W], \quad \widetilde{G} \in \mathbb{R}^{\operatorname{rank}(A_{(1)}) \times r_2 \times r_3}.$$

Аналогично сводим $r_2 \to \operatorname{rank}(A_{(2)})$ и $r_3 \to \operatorname{rank}(A_{(3)})$. То есть мы явно построили разложение с рангами разверток.

Таким образом, компоненты мультилинейного ранга есть размерности пространств натянутых соответственно на столбцы, строки и волокна (по 3-й размерности). Обратите внимание, что в случае $d \ge 3$ и $n_1, n_2, n_3 > 1$ эти размерности не обязаны совпадать, тогда так как при d=2 нам хорошо известно, что столбцовый и строчные ранги равны друг другу.

HOSVD алгоритм (без доказательства)

Обсудим теперь HOSVD (higher-order SVD) 2 — один из известных алгоритмов построения малорангового приближения в виде разложения Таккера. Для этого нам понадобится ввести норму на $\mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times n_3}$. Простейшим выбором является обобщение понятия нормы Фробениуса с матричного случая:

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j,k} |a_{ijk}|^2} \equiv \left\|\operatorname{vec}\left(A\right)\right\|_2.$$

Теперь сформулируем сам алгоритм.

1. С помощью SVD от $A_{(k)}$ для k=1,2,3, найдем $U_k \in \mathbb{R}^{n_k \times r_k}$ первые r_k левых сингулярных векторов $A_{(k)}$, причем:

$$||A_{(k)} - U_k U_k^{\top} A_{(k)}||_F \le \varepsilon_k ||A_{(k)}||_F.$$

2. Вычислим ядро по формуле:

$$G = [A; U_1^\top, U_2^\top, U_3^\top].$$

3. Положим $A_{HOSVD} = [G; U_1, U_2, U_3]$.

Можно показать, что в таком случае:

$$\|A - A_{\mathrm{HOSVD}}\|_F \leqslant \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2} \, \|A\|_F.$$

К сожалению, в отличие от двумерного случая, нам оказывается недоступным построение оптимального приближения, однако можно показать, что HOSVD алгоритм выдает квазиоптимальное приближение, а именно:

$$||A - A_{\text{HOSVD}}||_F \le \sqrt{3} \inf_{\text{mlrank}(B) \le (r_1, r_2, r_3)} ||A - B||_F.$$

Другие тензорные разложения

Разложения Таккера и каноническое разложения несложно записать и для размерности d > 3. Например, разложение Так² Lieven De Lathauwer, Bart De Moor, and Joos Vandewalle. A multilinear singular value decomposition. SIAM journal on Matrix Analysis and Applications, 21(4):1253-1278, 2000

Алгоритм можно запускать как по заданным значениям r_1, r_2, r_3 , из которых уже находим $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$, а можно сначала зафиксировать $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3 > 0$, и по ним подобрать значения r_1, r_2, r_3 .

Под mlrank $(B) \le (r_1, r_2, r_3)$ подразумевается покомпонентное сравне-

Результат также обобщается и на многомерный случай с константой квазиоптимальности \sqrt{d} вме-CTO $\sqrt{3}$.

кера тензора $A \in \mathbb{R}^{n_1 \times ... \times n_d}$ будет иметь вид:

$$A = \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} \cdots \sum_{\alpha_d=1}^{r_d} g_{\alpha_1 \dots \alpha_d} \ u_{\alpha_1}^{(1)} \circ \cdots \circ u_{\alpha_d}^{(d)}.$$

Проблема заключается в том, что нам необходимо хранить таккеровское ядро $G \in \mathbb{R}^{r_1 \times \cdots \times r_d}$, которое имеет такую же размерность, как и исходной тензор A. Значит даже при $r_k \ll n_k$, оно все еще подвержено проклятью размерности и при больших d оказывается непрактичным. Это мотивировало разработку и использование альтернативных тензорных разложений, для которых бы существовали надежные алгоритмы на основе сингулярного разложения, но которые при этом не были бы подвержены проклятью размерности. Например, разложение тензорного поезда³. Существуют разложения и более общего вида, удобно записывающиеся с помощью формализма так называемых тензорных диаграмм.

³ Ivan V Oseledets. Tensor-train decomposition. SIAM Journal on Scientific Computing, 33(5):2295-2317,

Автор благодарит Анну Федорову, которая помогала с подготовкой картинок и набором части теха этой лекции.

Список литературы

- [1] Tamara G Kolda and Brett W Bader. Tensor decompositions and applications. SIAM review, 51(3):455–500, 2009.
- [2] Lieven De Lathauwer, Bart De Moor, and Joos Vandewalle. A multilinear singular value decomposition. SIAM journal on Matrix Analysis and Applications, 21(4):1253–1278, 2000.
- [3] Ivan V Oseledets. Tensor-train decomposition. SIAM Journal on Scientific Computing, 33(5):2295-2317, 2011.
- [4] Е. Е. Тыртышников. Матричный анализ и линейная алгебра. Физматлит, 2007.
- [5] G.H. Golub and C.F. Van Loan. Matrix Computations, 4th Edition. The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 2013.