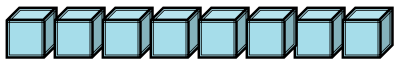
张量分解

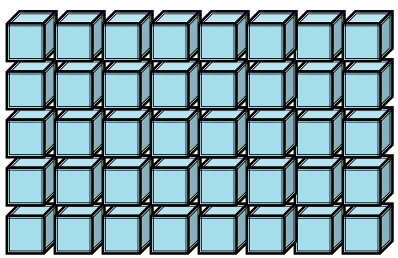
彭毅

基本概念及记号

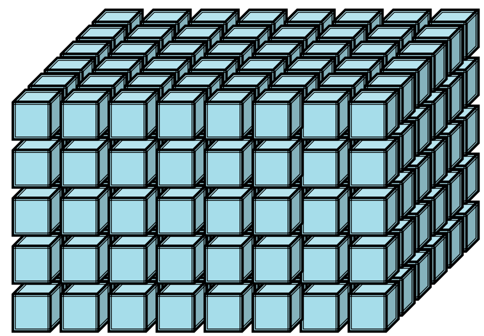
- 张量（tensor）
  - 多维数组



一阶张量
（向量）



二阶张量
（矩阵）

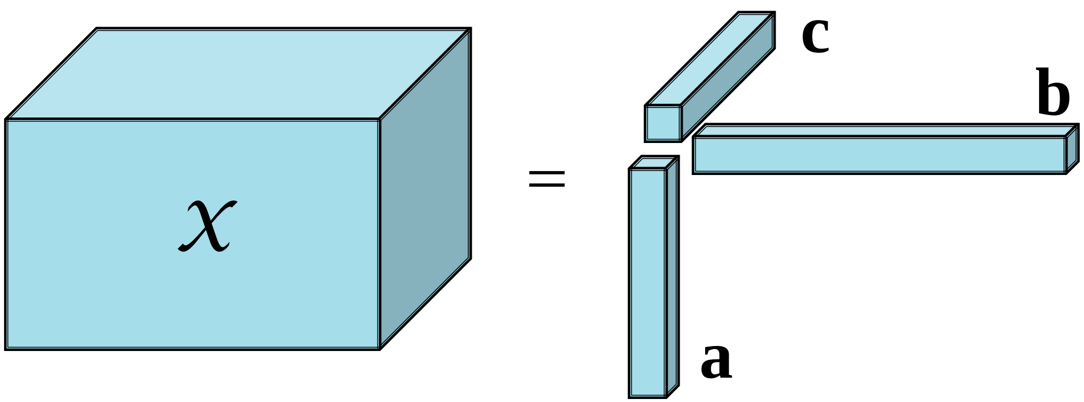


三阶张量

基本概念及记号

- 秩一张量/可合张量
  - N阶张量 $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \cdots \times I_N}$ 是一个秩一张量，如果它能被写成N个向量的外积，即

$$\mathcal{X} = \mathbf{a}^{(1)} \circ \mathbf{a}^{(2)} \circ \cdots \circ \mathbf{a}^{(N)}$$



三阶秩一张量：$\mathcal{X} = \mathbf{a} \circ \mathbf{b} \circ \mathbf{c}$

基本概念及记号

- 矩阵的Kronecker乘积
  - $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times J}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{K \times L}$，则

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}\mathbf{B} & a_{12}\mathbf{B} & \cdots & a_{1J}\mathbf{B} \\ a_{21}\mathbf{B} & a_{22}\mathbf{B} & \cdots & a_{2J}\mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{I1}\mathbf{B} & a_{I2}\mathbf{B} & \cdots & a_{IJ}\mathbf{B} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{IK \times JL}$$

  - 性质：$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})(\mathbf{C} \otimes \mathbf{D}) = (\mathbf{AC}) \otimes (\mathbf{BD})$

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})^{+} = \mathbf{A}^{+} \otimes \mathbf{B}^{+}$$

基本概念及记号

- 矩阵的Khatri-Rao乘积
  - $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times K}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{J \times K}$，则

$$\mathbf{A} \odot \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{b}_1 & \mathbf{a}_2 \otimes \mathbf{b}_2 & \cdots & \mathbf{a}_K \otimes \mathbf{b}_K \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{IJ \times K}$$

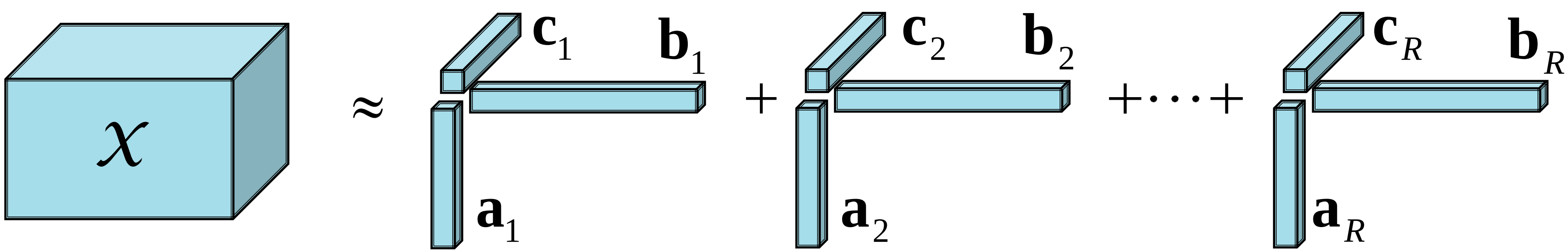
  - 性质：$\mathbf{A} \odot \mathbf{B} \odot \mathbf{C} = (\mathbf{A} \odot \mathbf{B}) \odot \mathbf{C} = \mathbf{A} \odot (\mathbf{B} \odot \mathbf{C})$

CP分解

CP分解

- CP分解的张量形式
  - 将一个张量表示成有限个秩一张量之和，比如一个三阶张量可以分解为

$$\mathcal{X} \approx \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} = \sum_{r=1}^{R} \mathbf{a}_r \circ \mathbf{b}_r \circ \mathbf{c}_r$$



三阶张量的CP分解

CP分解

- CP分解的矩阵形式
  - 因子矩阵：秩一张量中对应的向量组成的矩阵，如

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}\mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots & \mathbf{a}_R\end{bmatrix}$$

  - 利用因子矩阵，一个三阶张量的CP分解可以写成展开形式

$$\mathbf{X}_{(1)} \approx \mathbf{A}\left(\mathbf{C} \odot \mathbf{B}\right)^{\mathrm{T}}$$

$$\mathbf{X}_{(2)} \approx \mathbf{B}\left(\mathbf{C} \odot \mathbf{A}\right)^{\mathrm{T}}$$

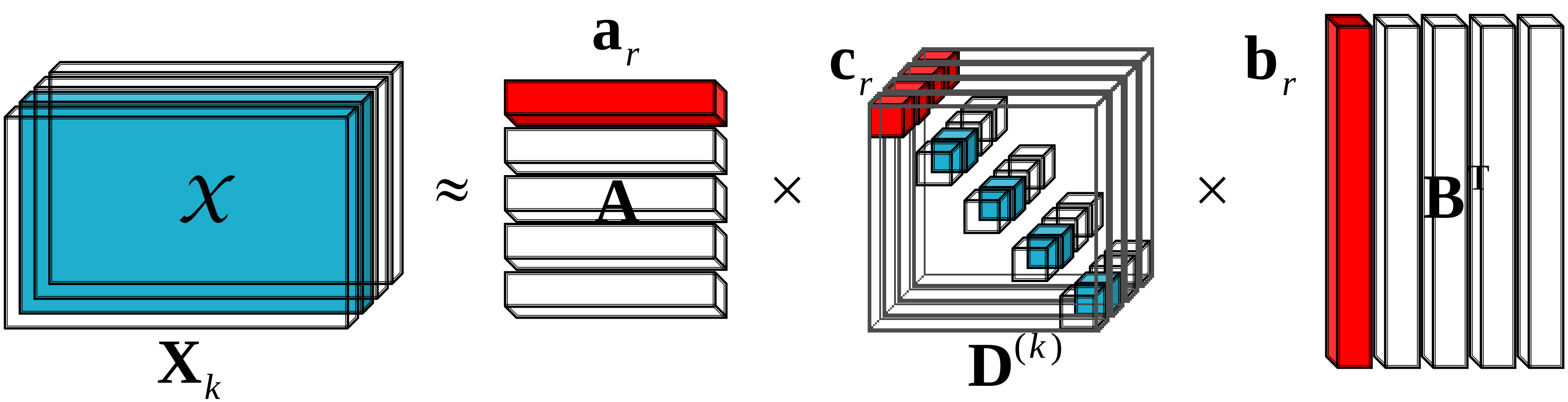
$$\mathbf{X}_{(3)} \approx \mathbf{C}\left(\mathbf{B} \odot \mathbf{A}\right)^{\mathrm{T}}$$

CP分解

- CP分解的切片形式
  - 三阶张量的CP分解有时按（正面）切片写成如下形式：

$$\mathbf{X}_k \approx \mathbf{A}\mathbf{D}^{(k)}\mathbf{B}^{\mathrm{T}}$$

其中 $\mathbf{D}^{(k)} \equiv \mathrm{diag}(\mathbf{c}_{k:})$



三阶张量CP分解的正面切片形式

CP分解

- CP分解的计算
  - 分解成多少个秩一张量（成分）之和？
    - 通常的做法是从1开始尝试，知道碰到一个“好”的结果为止
    - 如果有较强的应用背景和先验信息，可以预先指定
  - 对于给定的成分数目，怎么求解CP分解？
    - 目前仍然没有一个完美的解决方案
    - 从效果来看，交替最小二乘（Alternating Least Square）是一类比较有效的算法

CP分解

- CP分解的计算
  - ALS算法并不能保证收敛到一个极小点，甚至不一定能收敛到稳定点，它只能找到一个目标函数不再下降的点

  - 算法的初始化可以是随机的，也可以将因子矩阵初始化为对应展开的奇异向量，如将$\mathbf{A}$ 初始化为 $\mathcal{X}_{(1)}$ 的前 R 个左奇异向量