



融
数
系
天
真
地

中国科学院数学与系统科学研究院
Academy of Mathematics and Systems Science
Chinese Academy of Sciences



中国科学院数学与系统科学研究院

计算数学与科学与工程计算研究所
Institute of Computational Mathematics and Scientific Engineering Computing

低秩张量优化问题的几何方法

答辩人: 彭任锋

导师: 袁亚湘研究员

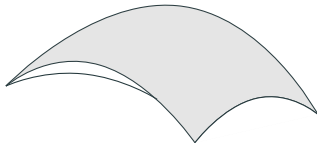
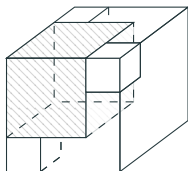
博士论文答辩

2026年4月29日

中国科学院大学

中国科学院数学与系统科学研究院

计算数学与科学与工程计算研究所



1. 低秩张量分解及优化问题 第一章
2. 工作一: 乘积流形上的预条件优化方法 第二、三章
3. 工作二: Tucker 张量代数簇上的低秩优化方法 第四章
4. 工作三: 归一化的张量链分解: 几何与应用 第五章
5. 总结与展望 第六章

低秩张量分解及优化问题

张量的定义

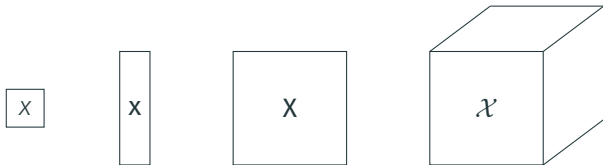
代数上: 线性空间张量积空间中的元素 (Rota, 1976; ...)

· $v \in V_1 \otimes V_2 \otimes \cdots \otimes V_d$ 是一个 d 阶张量

物理上: 张量场 (Wang-Lukyanenko-Yagola, 2019; ...)

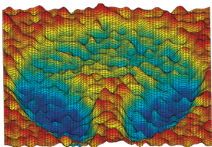
· 描述空间中每个点上的物理或几何属性 (如应力、曲率等)

向量与矩阵的高阶推广 (Voigt, 1898; ...)



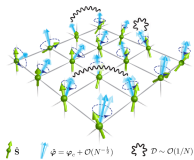
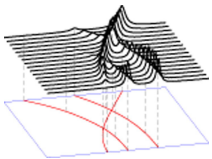
零阶、一阶、二阶、三阶张量

张量: 高维数据的有力表达工具



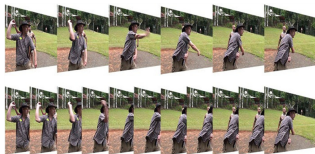
高维函数离散

高维时间序列



量子多体系统

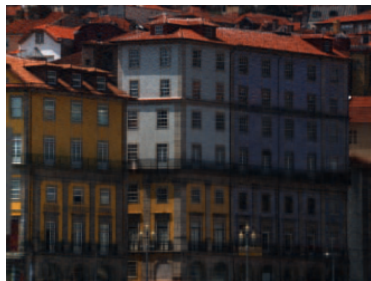
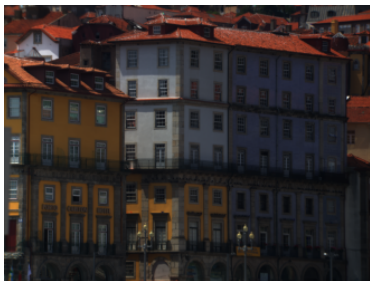
逐帧视频数据



从张量到低秩张量

低秩假设

- ☹️ 完整储存一个张量: $\mathcal{O}(n^d)$ 个参数!
- 😊 低秩张量分解: 节省储存量!



完整图像: 20MB

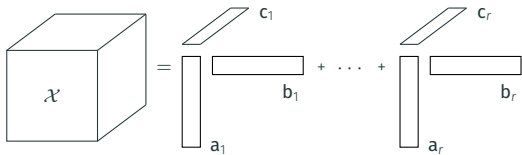
压缩图像: 0.4MB

张量有什么样的**低秩结构**呢?

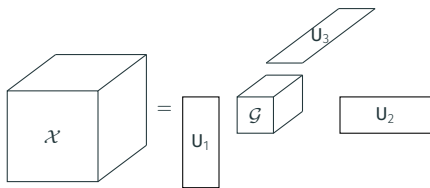
张量分解

标准多元分解 (Hitchcock, 1927)

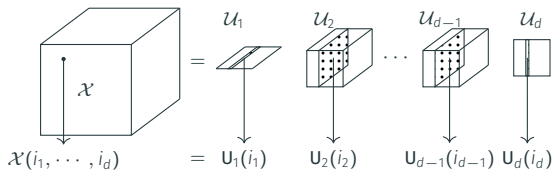
分解成秩 1 张量之和



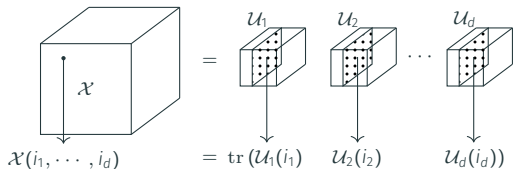
Tucker 分解 SVD 到高阶 SVD (Tucker, 1963)



张量链分解 (tensor train, TT) (Oseledet, 2011)



张量环分解 (tensor ring, TR) (Zhao-Zhou-Xie-Zhang-Cichocki, 2016)



低秩优化问题 变量为低秩矩阵张量的优化问题

- 低秩矩阵/张量补全 (Wen-Yin-Zhang, 2012; Xu-Yin-Wen-Zhang, 2012; Shen-Liu, 2020; Wang-Liu-Cui-Han, 2023; Gao-P.-Yuan, 2024; Qin-Ming-Sun-Zhang, 2025; ...)
- 数理金融: (Glau-Kressner-Statti-2020; ...)
- 低秩半定规划 (Lemon-So-Ye, 2015; Wang-Deng-Liu-Wen, 2023; Tang-Toh, 2023; ...)
- 低秩张量回归 (Zhang-Luo-Raskutti-Yuan, 2020; Chen-Luo, 2023; ...)
- 高维微分方程的低秩解: (Bachmayr, 2023; Wang-Lin-Liao-Liu-Xie, 2024; ...)

应用

- 推荐系统 (Frolov-Oseledets, 2017; Zhuang-Fu-Ng, 2021; ...)
- 图像与视频处理 (Luo-Zhao-Li-Ng-Meng, 2023; ...)
- 天气预报 (Loucheur-Absil-Journée, 2023; ...)
- 交通数据分析 (Phipps-Johnson-Kolda, 2023; Ming-Qin-Zhang-Xu-Qi, 2025; ...)

低秩矩阵优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{X}), \\ \text{s. t.} \quad & \mathbf{X} \in \mathbb{R}_{\leq r}^{m \times n} := \{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n} : \text{rank}(\mathbf{X}) \leq r\} \end{aligned}$$

低秩张量优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathcal{X}), \\ \text{s. t.} \quad & \mathcal{X} \in \mathcal{M}_{\leq r} = \{\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times \cdots \times n_d} : \text{Rank}(\mathcal{X}) \leq r\} \end{aligned}$$

- f : 连续可微函数
- Rank: 某种张量的秩

求解低秩优化问题的三类几何方法

流形优化方法

$$\begin{aligned} \min & f(X), \\ \text{s. t. } & X \in \mathbb{R}_r^{m \times n} \end{aligned}$$

代数簇优化方法

$$\begin{aligned} \min & f(X), \\ \text{s. t. } & X \in \mathbb{R}_{\leq r}^{m \times n} \end{aligned}$$

求解低秩优化问题的几何方法

参数化方法 $(\mathcal{M}, \varphi): \varphi(\mathcal{M}) = \mathbb{R}_{\leq r}^{m \times n}$

$$\begin{aligned} \min_x & g(x) = f(\varphi(x)), \\ \text{s. t. } & x \in \mathcal{M} \end{aligned}$$

低秩矩阵优化的几何方法

💡 流形优化方法

- 在线的黎曼梯度法 (Shalit-Weinshall-Chechik, 2010)
- 黎曼共轭梯度法 (Vandereycken, 2013)

$$\mathbb{T}_X \mathbb{R}_r^{m \times n} = \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{U} & \mathbf{U}^\perp \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \text{shaded} & \text{shaded} \\ \text{shaded} & \text{white} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{V} & \mathbf{V}^\perp \end{bmatrix}^\top \right\}$$

💡 代数簇优化方法

- 投影梯度方法及其变种 (Schneider-Uchmajew, 2015; Olikier-Gallivan-Absil, 2023)
- 梯度采样方法 (Hosseini-Uchmajew, 2019)
- 黎曼秩自适应方法 (Gao-Absil, 2022)

$$\mathbb{T}_X \mathbb{R}_{\leq r}^{m \times n} = \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{U} & \mathbf{U}^\perp \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \text{shaded} & \text{white} \\ \text{white} & \text{white} \\ \text{white} & \text{white} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{V} & \mathbf{V}^\perp \end{bmatrix}^\top \right\}$$

💡 参数化方法

- LR 分解: $\mathcal{M} = \mathbb{R}^{m \times r} \times \mathbb{R}^{n \times r}$, $\varphi(\mathbf{L}, \mathbf{R}) = \mathbf{L}\mathbf{R}^\top$
(Mishra-Apuroop-Sepulchre, 2012; Levin-Kileel-Boumal, 2024; Olikier-Uchmajew-Vandereycken, 2025)
- Burer-Monteiro 分解: $\mathcal{M} = \mathbb{R}^{m \times r}$, $\varphi(\mathbf{R}) = \mathbf{R}\mathbf{R}^\top$
(Burer-Monteiro, 2003)
- 去奇异化: (Khrukov-Oseledets, 2018; Rebjock-Boumal, 2024)

如何在低秩优化问题上利用几何设计方法?



低秩张量优化面临的挑战

挑战

- 👉 相比于低秩矩阵, 低秩张量有**更复杂的几何**
- 👉 不同张量分解的性质不同, 同时影响几何与优化方法
- 👉 数值方法对秩参数敏感

Tensor algebra has many similarities but also many striking differences with matrix algebra – e.g., low-rank tensor factorization is essentially unique under mild conditions; determining tensor rank is NP-hard, on the other hand, and the best low-rank approximation of a higher rank tensor may not even exist.

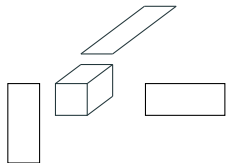
(Sidiropoulos-De Lathauwer-Fu-Huang-Papalexakis-Faloutsos, 2017)

固定秩张量流形上的优化方法

$$\min_{\mathcal{X}} f(\mathcal{X}) \quad \text{s. t. } \mathcal{X} \in \mathcal{M}_r = \{\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times \dots \times n_d} : \text{rank}_{\text{tc}}(\mathcal{X}) = r\}$$

固定秩 Tucker 张量构成的集合

- 光滑流形 (Uschmajew-Vandereycken, 2013)
- 黎曼共轭梯度法 (Kressner-Steinlechner-Vandereycken, 2014)
- 商空间黎曼共轭梯度法 (Kasai-Mishra, 2016)



固定秩张量链张量构成的集合

- 光滑流形 (Holtz-Rohwedder-Schneider, 2012)
- 黎曼共轭梯度法 (Steinlechner, 2016)
- 商空间几何 (Cai-Huang-Wang-Wei, 2026)



☹ \mathcal{M}_r 非闭!

张量代数簇上的优化方法

$$\min_{\mathcal{X}} f(\mathcal{X}), \quad \text{s. t. } \mathcal{X} \in \mathcal{M}_{\leq r}$$

- $f: \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times \cdots \times n_d} \rightarrow \mathbb{R}$: 光滑函数

张量链分解代数簇

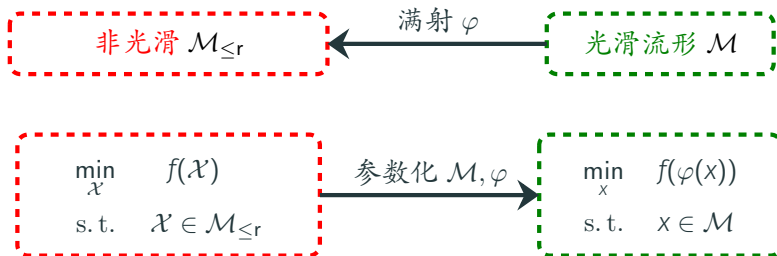
- 切锥 (Kutschan, 2018)
- 秩自适应方法 (Vermeylen-Olikier-Absil-Van Barel, 2023)

Tucker 张量代数簇

$$\mathcal{M}_{\leq r} = \{\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times \cdots \times n_d} : \text{rank}_{\text{tc}}(\mathcal{X}) \leq r\}$$

- $\mathcal{M}_{\leq r}$: 闭的实代数簇
- 最优性条件 (Luo-Qi, 2023)

张量的参数化方法



例子

- 通过张量分解形式给出 (Kasai-Mishra, 2016; Dong-Gao-Guan-Glineur, 2022; Cai-Huang-Wang-Wei, 2022; Gao-P.-Yuan, 2024)
- 去奇异化方法 (Gao-P.-Yuan, 2024)

$$\mathcal{M} = \left\{ (\mathcal{X}, \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \dots, \mathbf{P}_d) : \begin{array}{l} \mathcal{X} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times \dots \times n_d}, \\ \mathbf{P}_k \in \text{Gr}(n_k - r_k, n_k), \\ \mathcal{X} \times_k \mathbf{P}_k = 0 \text{ 对于 } k \in [d] \end{array} \right\}$$

$$\varphi : (\mathcal{X}, \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \dots, \mathbf{P}_d) \mapsto \mathcal{X}$$

低秩矩阵张量优化中的其他类型方法

交替最小化方法

$$\min_x f(\varphi(x))$$

φ : 某种张量分解

$$\text{s. t. } x \in \mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \times \mathcal{M}_2 \times \cdots \times \mathcal{M}_K \quad \mathcal{M}: \text{张量分解的“块”}$$

- 每一步 $x_r^{(t+1)} = \arg \min_{x_r} f(\varphi(x_1^{(t+1)}, \dots, x_{r-1}^{(t+1)}, x_r, x_{r+1}^{(t)}, \dots, x_k^{(t)}))$
- 交替最小化方法 (Xu-Yin, 2013; Cai-Chen-Han, 2013; Yuan-Wen-Zhang, 2014; Hardt-Wootter, 2014; Sun-Luo, 2016; Cho-Cai-Liu-Eldar-Xu, 2016; Liu-Morita, 2020; ...)

基于核范数优化的方法

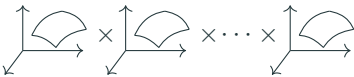
$$\min \|\mathcal{X}\|_*, \quad \text{s. t. } \mathcal{A}(\mathcal{X}) = \mathbf{b}^*$$

- 矩阵核范数: (Fazel, 2002; Candès-Tao, 2005; Recht, 2011; Ding-Chen, 2020; ...)
- 基于展平矩阵: $\sum_{k=1}^d \|\mathbf{X}_{(k)}\|_*$
(Gandy-Recht-Yamada, 2011; Liu-Hansson-Vandenbergh, 2013; ...)
- 交替方向乘子法: (Gandy-Recht-Yamada, 2011; ...)
- 基于张量核范数: (Yuan-Zhang, 2016; ...)

主要工作

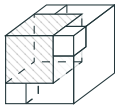
💡 乘积流形上的预条件优化方法

- ✓ 利用黎曼 Hessian 算子对角块设计度量
- ✓ 应用于典型相关分析与张量补全问题



💡 Tucker 张量代数簇上的优化方法

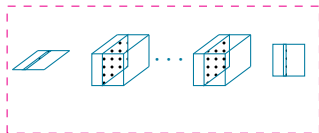
- ✓ 有界秩 Tucker 张量集合在每一点处的切锥
- ✓ 几何方法与秩自适应方法



💡 归一化的张量链分解的几何与应用

- ✓ 固定秩流形结构
- ✓ 应用于科学计算与量子信息论中的典型问题

单位范数

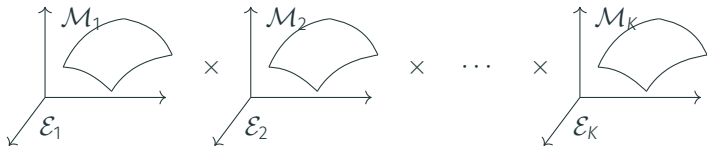


乘积流形上的预条件优化方法

乘积流形上的优化问题

$$\min_{x \in \mathcal{M}} f(x)$$

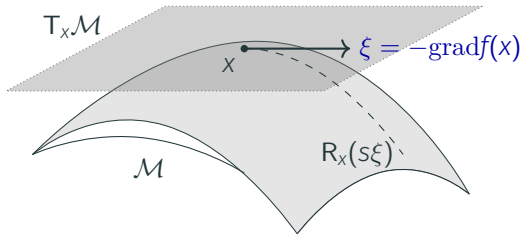
- $f: \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$: 光滑函数



$$\text{乘积流形 } \mathcal{M} := \mathcal{M}_1 \times \mathcal{M}_2 \times \cdots \times \mathcal{M}_K$$

- 来源于低秩矩阵与张量分解 \Rightarrow 参数空间构成乘积流形
- 典型相关分析、奇异值分解 \Rightarrow 两个正交矩阵流形的乘积
- 联合近似张量对角化问题 \Rightarrow 多个正交矩阵流形的乘积

动机一: 不同的度量, 不同的黎曼梯度



流形优化一阶方法的框架 (Absil-Mahony-Sepulture, 2009; Boumal, 2023)

0. 选择合适的度量 g

1. 选择搜索方向 (例如负黎曼梯度) $g(\text{grad}f(x), \eta) = \langle \nabla f(x), \eta \rangle, \eta \in T_x \mathcal{M}$

$$\xi = -\text{grad}f(x) = -P_{T_x \mathcal{M}} \nabla f(x)$$

2. 确定步长 s

3. 线搜索以及收缩映射 $R_x(s\xi)$

不同的度量 g , 不同的黎曼梯度!

动机二: 降低条件数

黎曼梯度法的局部收敛速率 (Boumal, 2023)

黎曼梯度法的步长选取为 $x^{(t+1)} = R_{x^{(t)}}(-\frac{1}{L}\text{grad}f(x^{(t)}))$

- 严格局部极小值点 x^* : $\text{grad}f(x^*) = 0$ 以及 $\text{Hess}f(x^*) \succ 0$
- 线性收敛速率: $1 - 1/\kappa_g(\text{Hess}f(x^*))$

度量相关的 Rayleigh 熵

- $\text{Hess}f(x)$ 的 Rayleigh 熵:

$$q_x(\xi) := \frac{g_x(\xi, \text{Hess}f(x)[\xi])}{g_x(\xi, \xi)}$$

- 条件数: $\kappa_g(\text{Hess}f(x)) := \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$

特征值: $\lambda_{\max} = \sup_{\xi \in T_x \mathcal{M}} q_x(\xi)$; $\lambda_{\min} = \inf_{\xi \in T_x \mathcal{M}} q_x(\xi)$

不同的度量 g , 不同的条件数!

如何选择合适的黎曼度量以加速流形优化方法?

利用二阶信息设计度量

黎曼 Hessian 算子

$$\begin{aligned} \text{Hess}_e f(x)[\eta] &= (H_{11}(x)[\eta_1] + H_{12}(x)[\eta_2] + \cdots + H_{1K}(x)[\eta_K], \\ &\quad H_{21}(x)[\eta_1] + H_{22}(x)[\eta_2] + \cdots + H_{2K}(x)[\eta_K], \\ &\quad \vdots \\ &\quad H_{K1}(x)[\eta_1] + H_{K2}(x)[\eta_2] + \cdots + H_{KK}(x)[\eta_K]) \end{aligned}$$

逼近“对角块” $\hat{H}_k(x) \approx H_{kk}(x)$: 易构造; 易求逆

$$\begin{aligned} g_x(\xi, \eta) &= \text{tr}(\xi_1^T \hat{H}_1(x)[\eta_1]) + \cdots + \text{tr}(\xi_K^T \hat{H}_K(x)[\eta_K]) \\ &\approx \sum_{k=1}^K \langle \xi_k, H_{kk}(x)[\eta_k] \rangle \end{aligned}$$

对于 $\xi, \eta \in T_x \mathcal{M}$

黎曼梯度 \Rightarrow 预条件效果 \Rightarrow 称 g 为预条件度量

$$\text{grad}_g f(x) = \Pi_x \left(\hat{H}_1(x)^{-1}[\partial_1 f(x)], \hat{H}_2(x)^{-1}[\partial_2 f(x)], \dots, \hat{H}_K(x)^{-1}[\partial_K f(x)] \right)$$

黎曼预条件梯度法 (RGD)

- 搜索方向: $\eta^{(t)} = -\text{grad}_g f(x^{(t)})$
- 步长: $s^{(t)}$
- 更新: $x^{(t+1)} = R_{x^{(t)}}(s^{(t)}\eta^{(t)})$

黎曼预条件共轭梯度法 (RCG)

- 搜索方向: $\eta^{(t)} = -\text{grad}_g f(x^{(t)}) + \beta^{(t)}\mathcal{T}_{t \leftarrow t-1}\eta^{(t-1)}$
 $\mathcal{T}_{t \leftarrow t-1}$: 向量传输; $\beta^{(t)}$: 共轭梯度参数
- 步长: $s^{(t)}$
- 更新: $x^{(t+1)} = R_{x^{(t)}}(s^{(t)}\eta^{(t)})$

应用一: 典型相关分析

- 给定两个数据矩阵 $X \in \mathbb{R}^{n \times d_x}$ 和 $Y \in \mathbb{R}^{n \times d_y}$

两个广义 Stiefel 流形乘积上的优化问题

$$\begin{aligned} \min_{U \in \mathbb{R}^{d_x \times m}, V \in \mathbb{R}^{d_y \times m}} \quad & f(U, V) := -\text{tr}(U^T \Sigma_{xy} V N) \\ \text{s. t.} \quad & (U, V) \in \mathcal{M} = \text{St}_{\Sigma_{xx}}(m, d_x) \times \text{St}_{\Sigma_{yy}}(m, d_y) \end{aligned}$$

- $\Sigma_{xx} := X^T X + \lambda_x I_{d_x}$, $\Sigma_{yy} := Y^T Y + \lambda_y I_{d_y}$, $\Sigma_{xy} := X^T Y$
- $N := \text{diag}(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_m)$: $\mu_1 > \mu_2 > \dots > \mu_m$
- 广义 Stiefel 流形: $\text{St}_{\Sigma_{xx}}(m, d_x) = \{U \in \mathbb{R}^{d_x \times m} : U^T \Sigma_{xx} U = I_m\}$

计算二阶信息 (Yger-Berar-Gasso-Rakotomamonjy, 2012; Shustin-Avron, 2023)

- 度量: $g_{(U,V)}(\xi, \eta) := \langle \xi_1, \hat{H}_1(U, V)[\eta_1] \rangle + \langle \xi_2, \hat{H}_2(U, V)[\eta_2] \rangle$

$$\hat{H}_1(U, V)[\eta_1] := \Sigma_{xx} \eta_1 \quad \hat{H}_2(U, V)[\eta_2] := \Sigma_{yy} \eta_2$$

- 黎曼 Hessian 算子:

$$\begin{aligned} \text{Hess}_g f(U, V)[\eta] = \Pi_{(U,V)} & \left(\eta_1 \text{sym}(U^T \Sigma_{xy} V N) + U \text{sym}(\eta_1^T \Sigma_{xy} V N) \right. \\ & + U \text{sym}(U^T \Sigma_{xy} \eta_2 N) - \Sigma_{xx}^{-1} \Sigma_{xy} \eta_2 N, \\ & \left. \eta_2 \text{sym}(V^T \Sigma_{xy}^T U N) + V \text{sym}(\eta_2^T \Sigma_{xy}^T U N) \right. \\ & \left. + V \text{sym}(U^T \Sigma_{xy}^T \eta_1 N) - \Sigma_{yy}^{-1} \Sigma_{xy}^T \eta_1 N \right) \end{aligned}$$

新的左右预条件度量

新的左右预条件度量 $\delta > 0$

$$\cdot g_{(U,V)}(\xi, \eta) := \langle \xi_1, \hat{H}_1(U, V)[\eta_1] \rangle + \langle \xi_2, \hat{H}_2(U, V)[\eta_2] \rangle$$

$$\hat{H}_1(U, V)[\eta_1] := \Sigma_{xx} \eta_1 M_{1,2}; \quad M_{1,2} = (\text{sym}(U^T \Sigma_{xy} V N)^2 + \delta I)^{\frac{1}{2}}$$

$$\hat{H}_2(U, V)[\eta_2] := \Sigma_{yy} \eta_2 M_{2,2}; \quad M_{2,2} = (\text{sym}(V^T \Sigma_{xy}^T U N)^2 + \delta I)^{\frac{1}{2}}$$

新度量下黎曼 Hessian 算子 $\text{Hess}f(U^*, V^*)$ 有更小的条件数

$(U^*)^T \Sigma_{xy} V^* = \Sigma^*$, $\Sigma^* = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_m)$: 矩阵 $\Sigma_{xx}^{-1/2} \Sigma_{xy} \Sigma_{yy}^{-1/2}$ 最大的 m 个奇异值

☺ 条件数显式表达:

$$\kappa_{\text{new}}(\text{Hess}_{\text{new}}f(U^*, V^*)) = \frac{\max\left\{ \max_{i,j \in [m], i \neq j} \frac{(\mu_i + \mu_j)(\sigma_i + \sigma_j)}{\sqrt{\mu_i^2 \sigma_i^2 + \delta} + \sqrt{\mu_j^2 \sigma_j^2 + \delta}}, \max_{i \in [m]} \frac{\mu_i(\sigma_i + \sigma_{m+1})}{\sqrt{\mu_i^2 \sigma_i^2 + \delta}} \right\}}{\min\left\{ \min_{i,j \in [m], i \neq j} \frac{(\mu_i - \mu_j)(\sigma_i - \sigma_j)}{\sqrt{\mu_i^2 \sigma_i^2 + \delta} + \sqrt{\mu_j^2 \sigma_j^2 + \delta}}, \min_{i \in [m]} \frac{\mu_i(\sigma_i - \sigma_{m+1})}{\sqrt{\mu_i^2 \sigma_i^2 + \delta}} \right\}}$$

☺ 更小的条件数

$$\kappa_{\text{new}}(\text{Hess}_{\text{new}}f(U^*, V^*)) \leq \kappa_g(\text{Hess}_g f(U^*, V^*))$$

数值验证: 不同度量上的测试

实验平台

- 个人笔记本电脑 Intel Core i9 CPU @ 2.4GHz×8 和 32GB 内存
- Matlab R2020b, MacOS Ventura 13.1
- 代码公开可见 <https://github.com/JimmyPeng1998>

不同度量上的测试

$$g_{(\mathbf{U}, \mathbf{V})}(\xi, \eta) := \langle \xi_1, \hat{H}_1(\mathbf{U}, \mathbf{V})[\eta_1] \rangle + \langle \xi_2, \hat{H}_2(\mathbf{U}, \mathbf{V})[\eta_2] \rangle$$

- RGD/RCG (E): 欧氏度量
- RGD/RCG (L1): $\hat{H}_1(\mathbf{U}, \mathbf{V})[\eta_1] := \sum_{xx}\eta_1$, $\hat{H}_2(\mathbf{U}, \mathbf{V})[\eta_2] := \eta_2$
- RGD/RCG (L2): $\hat{H}_1(\mathbf{U}, \mathbf{V})[\eta_1] := \eta_1$, $\hat{H}_2(\mathbf{U}, \mathbf{V})[\eta_2] := \sum_{yy}\eta_2$
- RGD/RCG (L12): (Shustin and Avron, 2023)

$$\hat{H}_1(\mathbf{U}, \mathbf{V})[\eta_1] := \sum_{xx}\eta_1, \hat{H}_2(\mathbf{U}, \mathbf{V})[\eta_2] := \sum_{yy}\eta_2$$

✓ RGD/RCG (LR12):

$$\hat{H}_1(\mathbf{U}, \mathbf{V})[\eta_1] := \sum_{xx}\eta_1 \mathbf{M}_{1,2}, \hat{H}_2(\mathbf{U}, \mathbf{V})[\eta_2] := \sum_{yy}\eta_2 \mathbf{M}_{2,2}$$

不同的度量, 不同的条件数

度量	方法	迭代步数	时间(秒)	梯度范数	$D(U, U^*)$	$D(V, V^*)$	κ_g
(E)	RGD	10000	249.11	5.95e-02	2.69e-05	2.66e-05	2.10e+04
	RCG	1745	31.03	1.70e-05	4.01e-10	3.89e-10	
(L1)	RGD	10000	255.33	1.02e+00	4.12e-04	4.07e-04	1.43e+07
	RCG	2500	74.13	4.94e-02	2.85e-04	2.79e-04	
(L2)	RGD	10000	245.81	8.20e-01	4.13e-04	4.05e-04	1.52e+07
	RCG	2500	56.16	6.90e-02	2.93e-04	2.90e-04	
(L12)	RGD	10000	274.91	4.67e-04	9.68e-07	9.57e-07	1.12e+04
	RCG	937	30.39	8.82e-07	1.68e-09	1.65e-09	
(LR12)	RGD	6607	195.03	1.34e-06	7.47e-16	7.46e-16	2.38e+03
	RCG	410	15.38	8.49e-07	4.63e-09	4.53e-09	

子空间距离 $D(U, U^*) := \|UU^T - U^*(U^*)^T\|_2$

- 新提出的度量收敛最快、条件数最低!

应用二: 张量补全问题

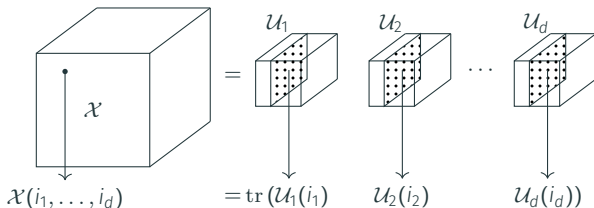
基于张量环分解的张量补全问题

利用张量环分解, 恢复仅部分元素已知的张量

$$\min_{(\mathcal{U}_1, \dots, \mathcal{U}_d) \in \mathcal{M}_{\mathcal{U}}} \frac{1}{2p} \|\mathcal{P}_{\Omega}(\llbracket \mathcal{U}_1, \dots, \mathcal{U}_d \rrbracket_{\text{TR}}) - \mathcal{P}_{\Omega}(\mathcal{A})\|_{\text{F}}^2$$

· $\mathcal{M}_{\mathcal{U}}$: TR 分解的参数空间

$$\mathcal{M}_{\mathcal{U}} = \mathbb{R}^{r_1 \times n_1 \times r_2} \times \mathbb{R}^{r_2 \times n_2 \times r_3} \times \dots \times \mathbb{R}^{r_d \times n_d \times r_1}$$



问题重述

$$\begin{array}{ccc} & \text{模态 2 矩阵化} & \\ (\mathcal{U}_1, \dots, \mathcal{U}_d) \in \mathcal{M}_{\mathcal{U}} & \xrightarrow{\mathbf{W}_k = (\mathcal{U}_k)_{(2)}} & \mathcal{M} \ni (\mathbf{W}_1, \dots, \mathbf{W}_d) \\ \mathbb{R}^{r_1 \times n_1 \times r_2} \times \dots \times \mathbb{R}^{r_d \times n_d \times r_1} & \xleftarrow{\mathcal{U}_k = \text{ten}_{(2)}(\mathbf{W}_k)} & \mathbb{R}^{n_1 \times r_1 r_2} \times \dots \times \mathbb{R}^{n_d \times r_d r_1} \\ & \text{模态 2 张量化} & \end{array}$$

补全问题的等价形式 $\Omega_{(k)}$: Ω 的模态 k 展平矩阵

$$\min_{\vec{\mathbf{W}} := (\mathbf{W}_1, \dots, \mathbf{W}_d) \in \mathcal{M}} f(\vec{\mathbf{W}}) := \frac{1}{2p} \left\| \mathbf{P}_{\Omega_{(k)}}(\mathbf{W}_k \mathbf{W}_{\neq k}^T) - \mathbf{P}_{\Omega_{(k)}}(\mathbf{A}^{(k)}) \right\|_F^2$$

☺ 搜索空间: 矩阵的乘积流形

$$\mathcal{M} = \mathbb{R}^{n_1 \times r_1 r_2} \times \mathbb{R}^{n_2 \times r_2 r_3} \times \dots \times \mathbb{R}^{n_d \times r_d r_1}$$

预条件度量

计算“对角块”

$$\partial_{\mathbf{W}_k, \mathbf{W}_k}^2 f(\vec{\mathbf{W}})[\vec{\xi}] = \frac{1}{\rho} P_{\Omega(k)} (\xi_k \mathbf{W}_{\neq k}^\top) \mathbf{W}_{\neq k} \quad \text{对所有的 } k \in [d].$$

得到预条件度量

$$g_{\vec{\mathbf{W}}}(\vec{\xi}, \vec{\eta}) := \sum_{k=1}^d \text{tr} \left(\xi_k^\top \hat{H}_k(\vec{\mathbf{W}})[\eta_k] \right) \quad \text{对于 } \vec{\xi}, \vec{\eta} \in T_{\vec{\mathbf{W}}} \mathcal{M},$$

这里

$$\hat{H}_k(\vec{\mathbf{W}})[\eta_k] := \eta_k \left(\mathbf{W}_{\neq k}^\top \mathbf{W}_{\neq k} + \underbrace{\delta I_{r_{k+1} r_k}}_{\text{平移项}} \right)$$

⇒ 黎曼预条件优化方法

预条件度量的高效计算

显式计算 $\mathbf{W}_{\neq k}^\top \mathbf{W}_{\neq k}$ 的代价: $\mathcal{O}(n^{d-1})$

利用张量积结构高效计算: $4d(d-2)nr^5 + 2dnr^4$

计算预条件度量的高效算法

- 计算 $\tilde{\mathbf{H}}_1 = \sum_{i_j=1}^{n_j} \text{vec}(\mathbf{U}_j(i_j)^\top) \text{vec}(\mathbf{U}_j(i_j)^\top)^\top$
- 对 $l = 2, 3, \dots, d-1$, 逐步计算 $j = \text{mod}(k-2+d, d) + 1$

$$\tilde{\mathbf{H}}_l = \sum_{i_j=1}^{n_j} (\mathbf{U}_j(i_j) \otimes \mathbf{I}_{r_k}) \tilde{\mathbf{H}}_{l-1} (\mathbf{U}_j(i_j)^\top \otimes \mathbf{I}_{r_k})$$

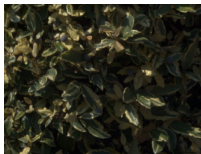
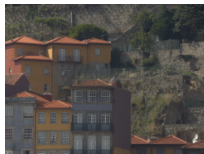
- 最终得到的 $\tilde{\mathbf{H}}_{d-1}$ 即为 $\mathbf{W}_{\neq k}^\top \mathbf{W}_{\neq k}$

测试方法 基于不同张量分解的不同数值方法

- ✓ TR-RGD: 黎曼预条件梯度法^{TR}
- ✓ TR-RCG: 黎曼预条件共轭梯度法^{TR}
 - TR-GD: 欧氏梯度法^{TR} (Zhao-Sugiyama-Yuan-Cichocki, 2019)
 - TR-ALS: 交替最小二乘方法^{TR} (Wang-Aggarwal-Aeron, 2017)
 - TT-RCG: 黎曼共轭梯度法^{TT} (Steinlechner, 2015)
 - CP-WOPT: 有限内存 BFGS 法^{CP} (Acar-Dunlavy-Kolda-Mørup, 2011)
 - GeomCG: 黎曼共轭梯度法^{Tucker} (Kressner-Steinlechner-Vandereycken, 2014)
 - HaLRTC: 高精度低秩张量补全法^{核范数方法} (Liu-Musialski-Wonka-Ye, 2012)

高光谱图像恢复

两个高光谱图像 左图: “Ribeira House Shrubs”; 右图: “Bom Jesus Bush”



采样率 p	结果	TR-RCG	TR-RGD	TR-ALS	HaLRTC	TT-RCG	CP-WOPT	geomCG
左图: Ribeira House Shrubs								
0.1	峰值信噪比	38.4310	37.5599	38.3964	21.3404	19.3895	22.6050	19.9492
	相对误差	0.1058	0.1170	0.1062	0.7569	0.9476	0.6544	0.8884
0.3	峰值信噪比	39.9493	40.0437	38.8803	23.4366	29.6771	24.3917	35.3738
	相对误差	0.0888	0.0879	0.1005	0.5946	0.2899	0.5327	0.1505
0.5	峰值信噪比	40.4171	40.4871	38.3704	26.1920	29.8119	25.7736	36.2973
	相对误差	0.0842	0.0835	0.1066	0.4330	0.2854	0.4544	0.1353
右图: Bom Jesus Bush								
0.1	峰值信噪比	40.5529	40.0065	40.1682	24.7499	21.4320	23.5259	21.9541
	相对误差	0.1185	0.1262	0.1239	0.7310	1.0711	0.8417	1.0086
0.3	峰值信噪比	40.4514	40.3119	39.9008	27.6014	25.3039	23.1848	35.0618
	相对误差	0.1199	0.1219	0.1278	0.5265	0.6859	0.8754	0.2230
0.5	峰值信噪比	40.4516	39.9737	39.4380	30.1986	24.9847	23.2231	34.9976
	相对误差	0.1199	0.1267	0.1348	0.3904	0.7115	0.8715	0.2247

$$\text{PSNR} := 10 \log_{10} \left(n_1 n_2 n_3 \max(\mathcal{A})^2 / \|\mathcal{X} - \mathcal{A}\|_{\text{F}}^2 \right); \text{relerr}(\mathcal{X}) := \|\mathcal{X} - \mathcal{A}\|_{\text{F}} / \|\mathcal{A}\|_{\text{F}}$$

本章小结

- 乘积流形上的预条件优化方法框架 (利用二阶信息)
- 应用于典型相关分析与**基于张量环分解的张量补全问题**

优化问题

$$\min_{\vec{w}} \frac{1}{2p} \| P_{\Omega^{(k)}}(W_k W_{\neq k}^T) - P_{\Omega^{(k)}}(A^{(k)}) \|_F^2$$

s. t. $\vec{W} := (W_1, W_2, \dots, W_d) \in \mathcal{M}$

- 流形优化方法
- 代数簇优化方法
- ✓ 参数化方法

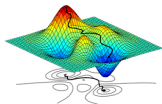
挖掘几何

乘积流形 \mathcal{M}
来自张量环分解的参数空间

设计新的预条件度量

设计算法

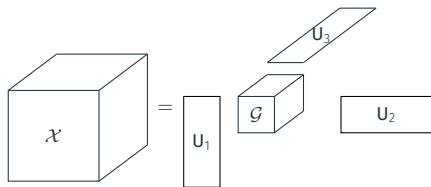
黎曼预条件优化算法



得到解

Tucker 张量代数簇上的低秩优化方法

Tucker 分解



$$\mathcal{X} = \mathcal{G} \times_1 \mathbf{U}_1 \times_2 \mathbf{U}_2 \times_3 \mathbf{U}_3$$

- \mathcal{G} : 核张量 $\mathcal{G} \in \mathbb{R}^{r_1 \times r_2 \times r_3}$
- \mathbf{U}_k : 因子矩阵 (“主成分”) $\mathbf{U}_k \in \mathbb{R}^{n_k \times r_k}$

Tucker 分解 (Tucker, 1963)

- 矩阵情形: $\mathbf{X} = \mathbf{S} \times_1 \mathbf{U} \times_2 \mathbf{V} = \mathbf{USV}^T$
- Tucker 秩: $\text{rank}_{\text{tc}}(\mathcal{X}) = (r_1, r_2, \dots, r_d)$ 是一个数组而非一个数!

Tucker 张量代数簇 有界 Tucker 秩张量组成的集合

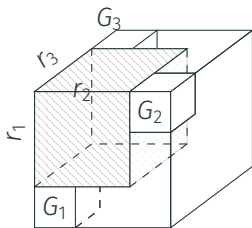
$$\mathcal{M}_{\leq r} = \{\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times \dots \times n_d} : \text{rank}_{\text{tc}}(\mathcal{X}) \leq r\}$$

Bouligand 切锥的显式表达式

$\mathcal{C} \in \mathbb{R}^{r_1 \times \dots \times r_d}$, $\mathbf{R}_{k,2} \in \mathbb{R}^{(n_k - r_k) \times \ell_k}$, $\mathbf{U}_{k,1} \in \text{St}(r_k - \ell_k, n_k)$ 以及 $\mathbf{U}_{k,2} \in \text{St}(n_k - r_k, n_k)$ 为满足 $[\mathbf{U}_k \ \mathbf{U}_{k,1} \ \mathbf{U}_{k,2}] \in \mathcal{O}(n_k)$ 的任意值, $k \in [d]$

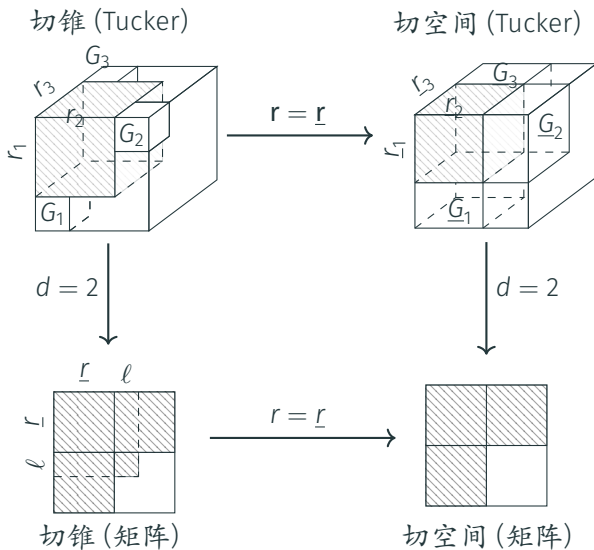
$$\mathcal{V} = \mathcal{C} \times_{k=1}^d [\mathbf{U}_k \ \mathbf{U}_{k,1}] + \sum_{k=1}^d \mathcal{G} \times_k (\mathbf{U}_{k,2} \mathbf{R}_{k,2}) \times_{j \neq k} \mathbf{U}_j$$

三阶张量切锥的几何刻画 ($d = 3$)



$$\times_{k=1}^3 [\mathbf{U}_k \ \mathbf{U}_{k,1} \ \mathbf{U}_{k,2}]$$

与矩阵结果的联系



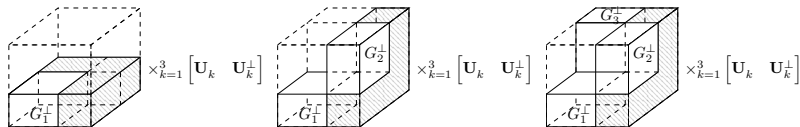
显式表达式 (Gao-P-Yuan, 2025)

- 指标集 $I = \{k \in [d] : \text{rank}(X_{(k)}) < r_k\}$
- $\mathcal{C}_{i_1, \dots, i_d} \in \mathbb{R}^{\tilde{n}_1 \times \tilde{n}_2 \times \dots \times \tilde{n}_d}$ 为满足若 $i_k = 1$ 则 $(\mathcal{C}_{i_1, \dots, i_d})_{(k)} \mathbf{G}_{(k)}^\top = 0$ 以及 $i_j = 0$ 对于 $j \in [d] \setminus \{k\}$ 的自由变量, $\tilde{n}_k = (1 - i_k)r_k + i_k(n_k - r_k)$

$$\mathcal{W} = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_d=0}^1 \left(\sum_{k \in [d] \setminus I} i_k^2 \mathcal{C}_{i_1, \dots, i_d} \times_{k=1}^d ((1 - i_k) \mathbf{U}_k + i_k \mathbf{U}_k^\perp) \right)$$

☺ $\mathcal{N}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}$ 是一个线性空间!

三阶张量的示例 不同的秩亏程度 $|| = 2, 1, 0$



Tucker 张量代数簇上的结论

与矩阵代数簇的联系

$$\mathcal{M}_{\leq r} = \bigcap_{k=1}^d \text{ten}_{(k)} \left(\mathbb{R}_{\leq r_k}^{n_k \times n_{-k}} \right)$$

↓ 利用切锥显式表达

$$\mathbb{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r} = \bigcap_{k=1}^d \text{ten}_{(k)} \left(\mathbb{T}_{\mathcal{X}_{(k)}} \mathbb{R}_{\leq r_k}^{n_k \times n_{-k}} \right)$$

Tucker 张量代数簇上优化问题的一阶最优性条件

$$\min_{\mathcal{X}} f(\mathcal{X}) \quad \text{s. t. } \mathcal{X} \in \mathcal{M}_{\leq r}$$

• 利用法锥显式表达直接给出

$$-\nabla f(\mathcal{X}) \in \mathbf{N}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r} \iff \mathbf{P}_{\mathbf{N}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(-\nabla f(\mathcal{X})) = -\nabla f(\mathcal{X})$$

$$\iff \begin{cases} \nabla f(\mathcal{X}) \times_{k=1}^d \mathbf{P}_{V_k} = 0 \\ (\nabla f(\mathcal{X}) \times_k \mathbf{P}_{\mathbf{U}_k}^\perp \times_{j \neq k} (\mathbf{U}_j)^\top)_{(k)} (\mathbf{G}_{(k)})^\top = 0 \text{ 对于 } k \in [d] \setminus l \end{cases}$$

Tucker 张量代数簇上的优化问题求解

$$\min_{\mathcal{X}} f(\mathcal{X}) \quad \text{s. t. } \mathcal{X} \in \mathcal{M}_{\leq r}$$

投影梯度法 矩阵: (Schneider-USchmajew, 2015; ...)

$$\mathcal{X}^{(t+1)} = \mathbf{P}_{\leq r} \left(\mathcal{X}^{(t)} + s^{(t)} \mathbf{P}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}^{(t)}} \mathcal{M}_{\leq r}} (-\nabla f(\mathcal{X}^{(t)})) \right)$$

☹ $\mathbf{P}_{\leq r}$ 和 $\mathbf{P}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}^{(t)}} \mathcal{M}_{\leq r}}$ 无显式表达!

近似投影

💡 高阶奇异值分解代替 $\mathbf{P}_{\leq r}$: (De Lathauwer-De Moor-Vandewalle, 2000)

$$\mathbf{P}_{\leq r}^{\text{HO}}(\mathcal{A}) := \mathbf{P}_{\leq r_d}^d (\mathbf{P}_{\leq r_{d-1}}^{d-1} \cdots (\mathbf{P}_{\leq r_1}^1(\mathcal{A})))$$

💡 往切锥上的近似投影代替 $\mathbf{P}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}^{(t)}} \mathcal{M}_{\leq r}}$:

$$\tilde{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A}) = \mathcal{A} \times_{k=1}^d \mathbf{P}_{\tilde{\mathcal{S}}_k} + \sum_{k=1}^d \mathcal{G} \times_k \left(\mathbf{P}_{\tilde{\mathcal{S}}_k}^{\perp} \left(\mathcal{A} \times_{j \neq k} \mathbf{U}_j^{\top} \right)_{(k)} \mathbf{G}_{(k)}^{\dagger} \right) \times_{j \neq k} \mathbf{U}_j,$$

这里 $\tilde{\mathcal{S}}_k := [\mathbf{U}_k \tilde{\mathbf{U}}_{k,1}]$

梯度相关的近似投影方法

$$\mathcal{X}^{(t+1)} = \mathbf{P}_{\leq r}^{\text{HO}} \left(\mathcal{X}^{(t)} + s^{(t)} \tilde{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}^{(t)}} \mathcal{M}_{\leq r}}(-\nabla f(\mathcal{X}^{(t)})) \right)$$

梯度相关的近似投影方法 (GRAP 方法)

- 搜索方向: $g^{(t)} = \tilde{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}^{(t)}} \mathcal{M}_{\leq r}}(-\nabla f(\mathcal{X}^{(t)}))$
- 步长: $s^{(t)}$ Armijo 回溯线搜索
- 更新: $\mathcal{X}^{(t+1)} = \mathbf{P}_{\leq r}^{\text{HO}}(\mathcal{X}^{(t)} + s^{(t)}g^{(t)})$

☺ 近似投影为**正交投影** $\langle \mathcal{A}, \tilde{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A}) \rangle = \|\tilde{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A})\|_{\text{F}}^2$

☺ 满足**角度条件**

$$\tilde{\omega} \|\mathbf{P}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A})\|_{\text{F}} \leq \|\tilde{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A})\|_{\text{F}} \leq \|\mathbf{P}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A})\|_{\text{F}}$$

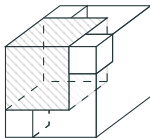
这里 $\tilde{\omega} \in (0, 1)$ 为常数.

⇒ 收敛性保证!

免收缩映射的搜索方向

回顾切锥的显式表达

$$\begin{aligned}\mathcal{V} &= \mathcal{C} \times_{k=1}^d [\mathbf{U}_k \quad \mathbf{U}_{k,1}] + \sum_{k=1}^d \mathcal{G} \times_k (\mathbf{U}_{k,2} \mathbf{R}_{k,2}) \times_{j \neq k} \mathbf{U}_j \\ &= \mathcal{V}_0 + \sum_{k=1}^d \mathcal{V}_k \quad (d+1) \text{ 个块}\end{aligned}$$



观察

$$\mathcal{X} + \mathcal{V}_0 \in \mathcal{M}_{\leq r} \quad \text{以及} \quad \mathcal{X} + \mathcal{V}_k \in \mathcal{M}_{\leq r}$$

免收缩映射的线搜索方向

$$\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A}) := \arg \max_{\mathcal{V} \in \{\tilde{\mathbf{P}}_0(\mathcal{A}), \dots, \tilde{\mathbf{P}}_d(\mathcal{A})\}} \|\mathcal{V}\|_F$$

· 由部分投影 $\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1, \dots, \mathcal{V}_d$ 得到:

$$\mathbf{P}_0(\mathcal{A}) := \arg \min_{\mathcal{V}_0} \left\{ \|\mathcal{V}_0 - \mathcal{A}\| : \mathcal{V}_0 = \mathcal{C} \times_{k=1}^d [\mathbf{U}_k \quad \mathbf{U}_{k,1}] \in \mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r} \right\}$$

$$\mathbf{P}_k(\mathcal{A}) := \arg \min_{\mathcal{V}_k} \left\{ \|\mathcal{V}_k - \mathcal{A}\| : \mathcal{V}_k = \mathcal{G} \times_k (\mathbf{U}_{k,2} \mathbf{R}_{k,2}) \times_{j \neq k} \mathbf{U}_j \in \mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r} \right\}$$

免收缩映射的近似投影梯度法

$$\mathcal{X}^{(t+1)} = \mathcal{X}^{(t)} + s^{(t)} \hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}^{(t)}} \mathcal{M}_{\leq r}}(-\nabla f(\mathcal{X}^{(t)}))$$

免收缩映射的近似投影梯度法 (rfGRAP 方法)

- 搜索方向: $g^{(t)} = \hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}^{(t)}} \mathcal{M}_{\leq r}}(-\nabla f(\mathcal{X}^{(t)}))$
- 步长: $s^{(t)}$ Armijo 回溯线搜索
- 更新: $\mathcal{X}^{(t+1)} = \mathcal{X}^{(t)} + s^{(t)} g^{(t)}$ 无收缩映射!

☺ **正交投影** $\langle \mathcal{A}, \hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A}) \rangle = \|\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A})\|_F^2$

☺ **角度条件**

$$\hat{\omega} \|\mathbf{P}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A})\|_F \leq \|\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A})\|_F \leq \|\mathbf{P}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(\mathcal{A})\|_F$$

这里 $\hat{\omega} \in (0, 1/\sqrt{d+1})$ 为常数

⇒ 收敛性保证!

收敛性结果

全局收敛性

- Armijo 回溯线搜索 + 角度条件 \Rightarrow 稳定性度量收敛:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|P_{T_{\mathcal{X}^{(t)}} \mathcal{M}_{\leq r}}(-\nabla f(\mathcal{X}^{(t)}))\|_F = 0$$

局部收敛性

- 若 $\text{rank}_{\text{tc}}(\mathcal{X}^*) = r$, 则有 $\|\text{grad}f(\mathcal{X}^*)\|_F = 0$ 且

$$\|\mathcal{X}^{(t)} - \mathcal{X}^*\|_F \leq C \begin{cases} e^{-ct}, & \text{if } \theta = \frac{1}{2}, \\ t^{-\frac{\theta}{1-2\theta}}, & \text{if } 0 < \theta < \frac{1}{2} \end{cases}$$

通过 Łojasiewicz 不等式 $|f(\mathcal{X}) - f(\mathcal{Y})|^{1-\theta} \leq L \|P_{T_{\mathcal{X}} \mathcal{M}_{\leq r}}(-\nabla f(\mathcal{Y}))\|_F$ 证明

数值上: 秩参数选取敏感

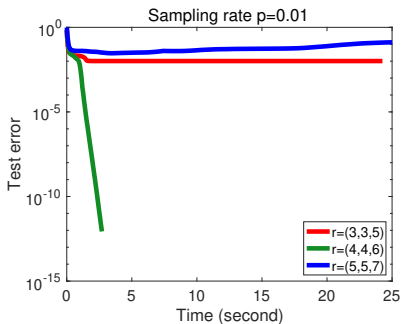
不同秩参数选取下的张量补全 固定秩流形上的优化问题

$$\min_{\mathcal{X} \in \mathcal{M}_r} \|P_{\Omega}(\mathcal{X}) - P_{\Omega}(\mathcal{A})\|_F^2$$

黎曼共轭梯度法的数值表现

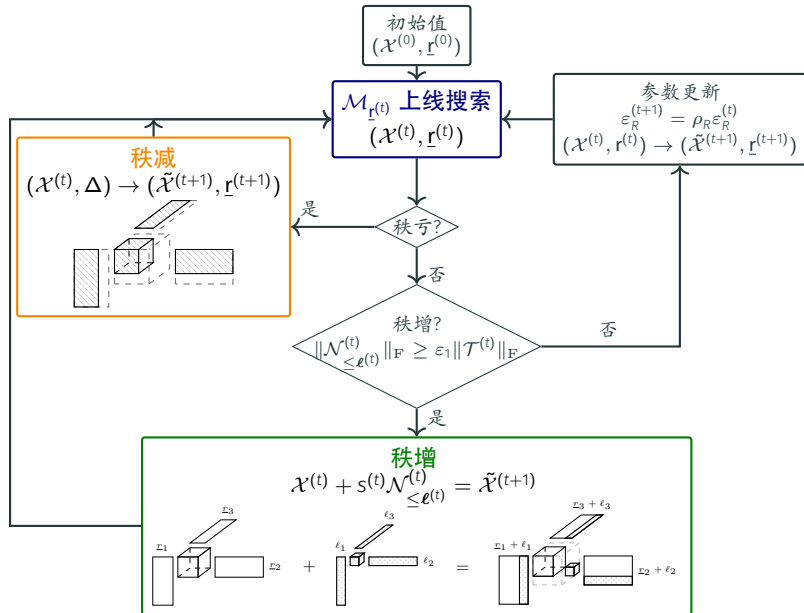
(Kressner-Steinlechner-Vandereycken, 2014)

- 真实秩: $\mathbf{r}^* = (4, 4, 6)$
- 秩参数:
选小了, 选对了, 选大了
 $\mathbf{r} = (3, 3, 5), (4, 4, 6), (5, 5, 7)$



☹ 数值表现对秩参数选取敏感!

Tucker 秩自适应方法 (TRAM) 的流程图



数值实验: 张量补全问题

$$\min \frac{1}{2} \|P_{\Omega}(\mathcal{X}) - P_{\Omega}(\mathcal{A})\|_F^2, \text{ s. t. } \mathcal{X} \in \mathcal{M}_{\leq r}$$

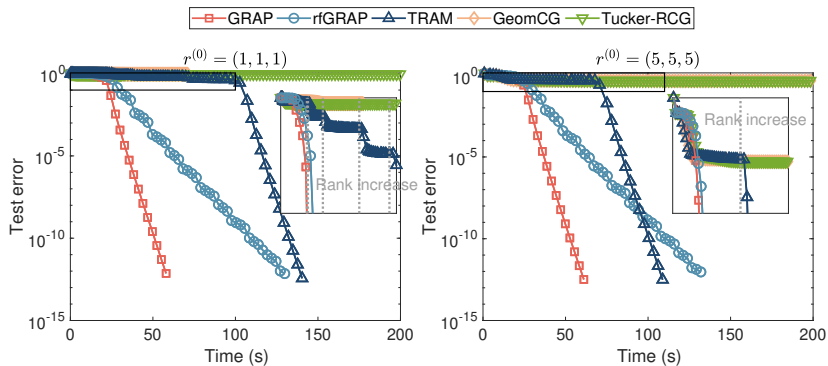
测试方法

- 😊 GRAP: 梯度相关近似投影梯度法^{Tucker}
- 😊 TRAM: Tucker 秩自适应算法^{Tucker}
- GeomCG: 黎曼共轭梯度法^{Tucker} (Kressner et al., 2014)
- Tucker-RCG: 商空间预条件黎曼共轭梯度法^{Tucker} (Kasai and Mishra, 2016)
- CP-AltMin: 基于图信息的交替最小化方法^{CP} (Guan et al., 2020)
- TT-RCG: 黎曼共轭梯度法^{TT} (Steinlechner, 2015)
- TR-RGD: 预条件黎曼梯度法^{TR} (Gao, P., and Yuan, 2024)



人工数据集: 秩选小了

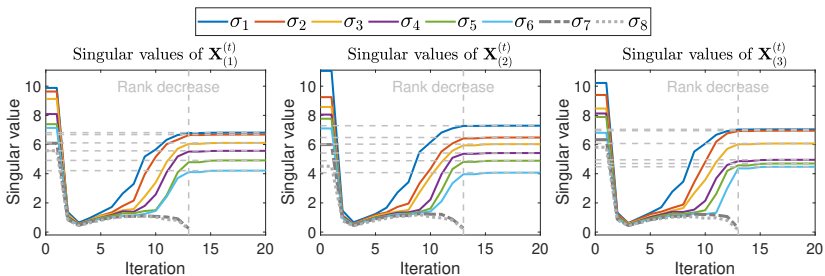
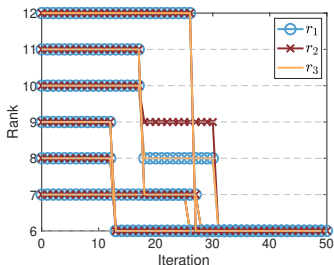
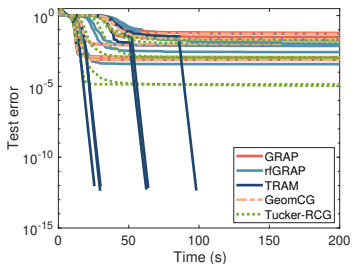
秩选小了 $r^{(0)} < r^*$



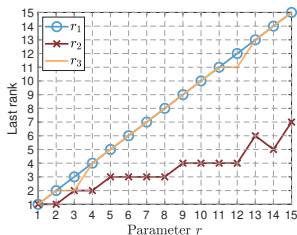
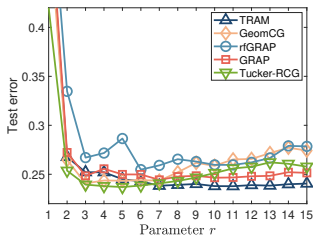
- 通过秩增机制找到合适的秩参数

人工数据集: 秩选大了

秩选大了 $r > r^*$ 通过秩减机制找到合适的秩参数

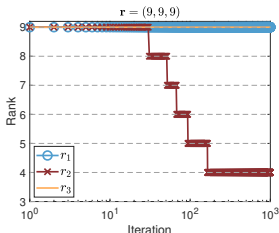
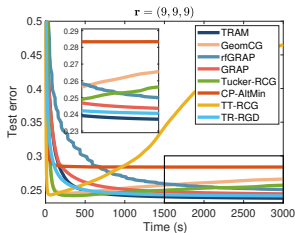


电影评分 MovieLens 1M 数据集



TRAM 方法对秩参数选取不敏感

第二个模态 (电影种类) 上的低秩性



- TRAM 方法在所有的方里表现最好

本章小结

- Tucker 张量代数簇上的优化问题

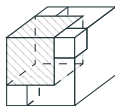
优化问题

$$\begin{aligned} \min_{\mathcal{X}} f(\mathcal{X}) \\ \text{s. t. } \mathcal{X} \in \mathcal{M}_{\leq r} \end{aligned}$$

- 流形优化方法
- ✓ 代数簇优化方法
- 参数化方法

挖掘几何

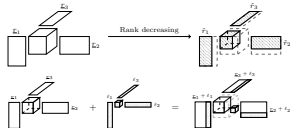
Tucker 张量代数簇 $\mathcal{M}_{\leq r}$
切锥显式表达



设计算法

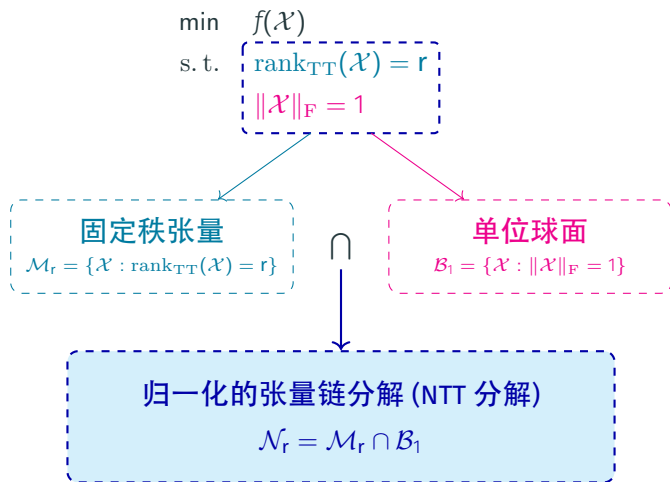
- GRAP: 梯度相关近似投影方法
- rfGRAP: 免收缩映射的梯度相关近似投影方法
- TRAM: Tucker 秩自适应方法

TRAM 秩减秩增机制



归一化的张量链分解: 几何与应用

归一化的张量链分解



应用 (单位范数+低秩性)

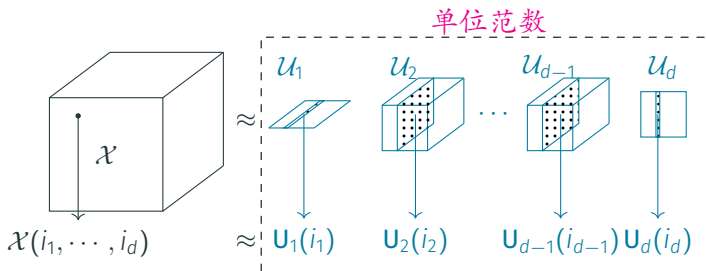
- 科学计算: 归一化的特征向量 (White, 2005; ...)
- 量子信息: 量子态 (Mehraban-Tahmasbi, 2024)

归一化的张量链分解

NTT 分解

给定 $\mathcal{X} \in \mathbb{C}^{n_1 \times n_2 \times \dots \times n_d}$

- 通过**单位范数**的张量 $[\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2, \dots, \mathcal{U}_d]$ 逼近 \mathcal{X}
- \mathcal{X} 中每个元素通过矩阵乘积逼近



- 核张量 $\mathcal{U}_k \in \mathbb{C}^{r_{k-1} \times n_k \times r_k}$
- 参数量 $\sum_{k=1}^d r_{k-1} n_k r_k = \mathcal{O}(dnr^2) \ll n^d$

低秩逼近

存在性

给定一个张量 $\mathcal{X} \in \mathbb{C}^{n_1 \times n_2 \times \dots \times n_d}$

☺ 若 $\|\mathcal{X}\|_F = 1$, 则它的 NTT 分解存在, 并满足 $r_k = \text{rank}(X_{\langle k \rangle})$

$$\mathcal{X} = \llbracket \mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2, \dots, \mathcal{U}_d \rrbracket$$

☹ 若 $\|\mathcal{X}\|_F \neq 1$ (通常情况), 精确 NTT 分解是不存在的

低秩逼近

给定 $\mathbf{r} = (1, r_1, r_2, \dots, r_{d-1}, 1)$

• 最佳秩 \mathbf{r} 逼近

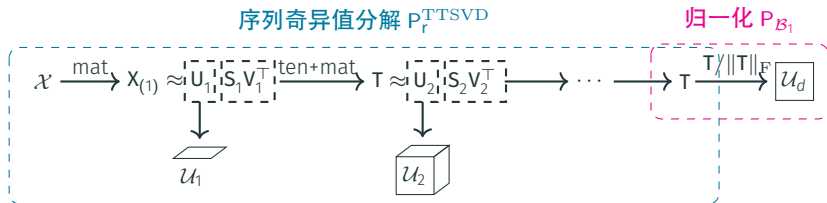
$$P_{\mathcal{N}_r}(\mathcal{X}) := \arg \min_{\mathcal{Y} \in \mathcal{N}_r} \|\mathcal{Y} - \mathcal{X}\|_F$$

是**计算上不可行的**! \mathcal{N}_r : 秩为 \mathbf{r} 的 NTT 张量

低秩逼近

$$\tilde{P}_{\mathcal{N}_r}(\mathcal{X}) = P_{B_1}(P_r^{\text{TTSVD}}(\mathcal{X}))$$

$\tilde{P}_{\mathcal{N}_r}$ 的示意图



拟优性 和最佳低秩逼近“差的不多”

$$\|\tilde{P}_{\mathcal{N}_r}(\mathcal{X}) - \mathcal{X}\|_F \leq (2\sqrt{d-1} + 1) \|P_{\mathcal{N}_r}(\mathcal{X}) - \mathcal{X}\|_F$$

流形结构

固定秩的 NTT 张量构成的集合

$$\mathcal{N}_r = \{\mathcal{X} \in \mathbb{C}^{n_1 \times n_2 \times \cdots \times n_d} : \text{rank}_{\text{TT}}(\mathcal{X}) = r, \|\mathcal{X}\|_{\text{F}} = 1\}$$

固定秩流形

$$\mathcal{M}_r = \{\mathcal{X} : \text{rank}_{\text{TT}}(\mathcal{X}) = r\}$$

单位球面

$$\mathcal{B}_1 = \{\mathcal{X} : \|\mathcal{X}\|_{\text{F}} = 1\}$$

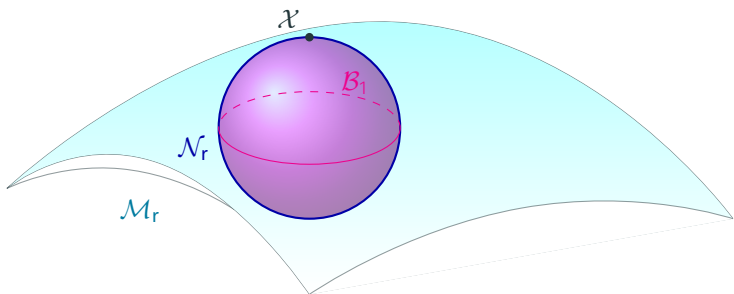
横截相交

$$T_{\mathcal{X}}\mathcal{M}_r + T_{\mathcal{X}}\mathcal{B}_1 = \mathbb{C}^{n_1 \times n_2 \times \cdots \times n_d}$$

\mathcal{N}_r 是一个光滑流形!

固定秩 NTT 张量构成的集合: 几何结构示意

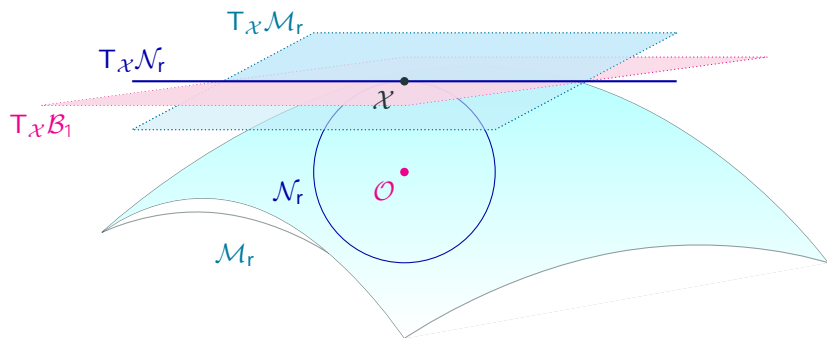
两个流形的交集



$$\mathcal{N}_r = \mathcal{M}_r \cap B_1$$

固定秩 NTT 张量构成的集合: 几何结构示意

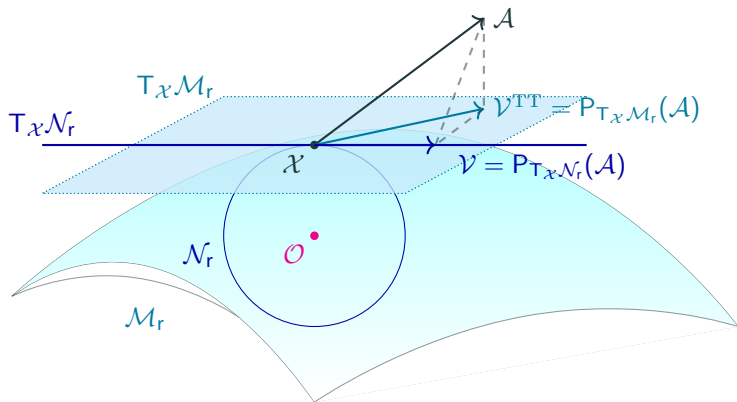
切空间



$$T_x \mathcal{N}_r = T_x \mathcal{M}_r \cap T_x \mathcal{B}_1$$

固定秩 NTT 张量构成的集合: 几何结构示意

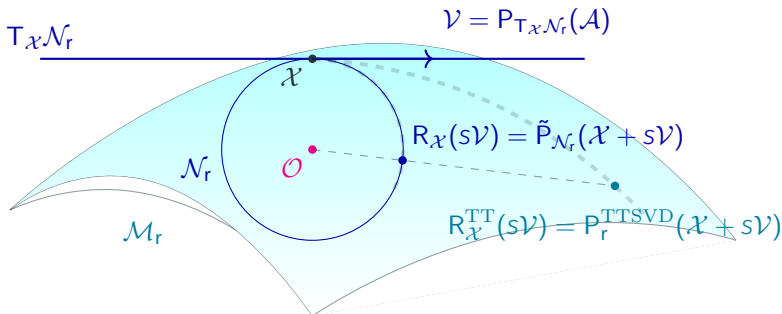
切空间投影



$$P_{T_x \mathcal{N}_r} = P_{T_x \mathcal{B}_1} \circ P_{T_x \mathcal{M}_r} = P_{T_x \mathcal{M}_r} \circ P_{T_x \mathcal{B}_1}$$

固定秩 NTT 张量构成的集合: 几何结构示意

通过收缩映射在流形上移动



$$R_{\mathcal{X}}(s\mathcal{V}) = \tilde{P}_{\mathcal{N}_r}(\mathcal{X} + s\mathcal{V}) = P_{\mathcal{B}_1}(\mathbf{P}_r^{\text{TTSVD}}(\mathcal{X} + s\mathcal{V}))$$

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathcal{X}) \\ \text{s. t.} \quad & \text{rank}_{\text{TT}}(\mathcal{X}) = r \\ & \|\mathcal{X}\|_{\text{F}} = 1 \end{aligned}$$

- 黎曼梯度: $\text{grad}f(\mathcal{X}) = \text{P}_{\mathcal{T}_{\mathcal{X}}\mathcal{N}_r}(\nabla f(\mathcal{X}))$

黎曼共轭梯度法 (RCG 方法)

- 搜索方向: $\mathcal{V}^{(t)} = -\text{grad}f(\mathcal{X}^{(t)}) + \beta^{(t)}\mathcal{T}_{t \leftarrow t-1}\mathcal{V}^{(t-1)}$
 $\mathcal{T}_{t \leftarrow t-1}$: 向量传输; $\beta^{(t)}$: 共轭梯度参数
- 步长: $s^{(t)}$
- 更新: $\mathcal{X}^{(t+1)} = \text{R}_{\mathcal{X}^{(t)}}(s^{(t)}\mathcal{V}^{(t)})$

应用一: 高维特征值问题的低秩解

计算高维特征值问题的低秩解

$$\begin{aligned} \min_{\mathcal{X}} \quad & \text{vec}(\mathcal{X})^\top \mathbf{H} \text{vec}(\mathcal{X}) \\ \text{s. t.} \quad & \mathcal{X} \in \mathcal{N}_r \end{aligned}$$

具有张量积结构的矩阵

· 泊松方程的离散 $-\Delta u = f \Rightarrow \mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{b}$

$$\mathbf{H} = \mathbf{T}_{n_d} \otimes \mathbf{I}_{n_2} \otimes \cdots \otimes \mathbf{I}_{n_1} + \cdots + \mathbf{I}_{n_d} \otimes \mathbf{I}_{n_{d-1}} \otimes \cdots \otimes \mathbf{I}_{n_{d-1}} \otimes \mathbf{T}_{n_1}$$

$$\mathbf{T}_n = \text{tridiag}(-1, 2, -1) \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

· 横场 Ising 哈密顿量 (Ising, 1925)

$$\mathbf{H} = - \sum_{k=1}^{d-1} \mathbf{S}_k^{(z)} \mathbf{S}_{k+1}^{(z)} - t \sum_{k=1}^d \mathbf{S}_k^{(x)},$$

$$\mathbf{S}^{(z)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{S}^{(x)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \mathbf{S}_k^{(z)} = \mathbf{I}_{2^{k-1}} \otimes \mathbf{S}^{(z)} \otimes \mathbf{I}_{2^{d-k}}, \mathbf{S}_k^{(x)} = \mathbf{I}_{2^{k-1}} \otimes \mathbf{S}^{(x)} \otimes \mathbf{I}_{2^{d-k}}, \text{ 设 } t = 1$$

应用一: 拉普拉斯算子上的测试

$$H = T_{n_d} \otimes I_{n_2} \otimes \cdots \otimes I_{n_1} + \cdots + I_{n_d} \otimes I_{n_{d-1}} \otimes \cdots \otimes I_{n_{d-1}} \otimes T_{n_1}$$

对比的方法

- NTT-RCG: \mathcal{N}_r 上的黎曼共轭梯度法
- Single-site DMRG: 单站点密度矩阵重整化群方法 (White, 2005, PRB)
数学上为交替最小化方法 (Holtz-Rohwedder-Schneider, 2012)

d	NTT-RCG			Single-site DMRG		
	时间 (秒)	λ_{\max} 的相对误差	$\text{dist}(\mathcal{X}, \mathbf{x}^*)$	时间 (秒)	λ_{\max} 的相对误差	$\text{dist}(\mathcal{X}, \mathbf{x}^*)$
8	1.55	1.3598e-15	2.1491e-07	1.63	1.8085e-13	5.5952e-06
16	2.67	3.0596e-15	6.3571e-07	3.82	9.6773e-14	5.0423e-06
32	3.94	2.8896e-14	6.1342e-06	17.05	1.2057e-13	9.1063e-06
64	11.88	9.7453e-15	6.1905e-06	85.50	1.4165e-13	1.4724e-05
128	27.03	1.1558e-14	1.2112e-05	512.65	1.1332e-13	1.7337e-05
256	86.49	1.3258e-14	2.4897e-05	3438.71	1.1751e-13	2.6551e-05

- 与 DMRG 相比, 达到相同的精度时间更短

应用二: 量子通道最小输出 Rényi p-熵

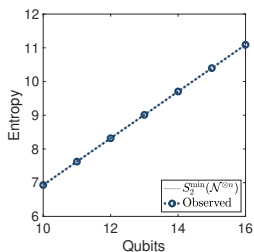
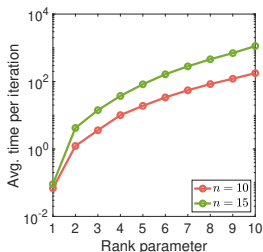
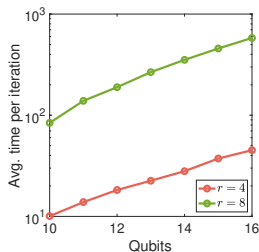
在低秩 NTT 张量上计算最小输出 Rényi p-熵

$$\min_{|\psi\rangle} f^{(n)}(|\psi\rangle) = \frac{1}{1-p} \log \text{tr}(\mathcal{N}_{A \rightarrow B}^{\otimes n}(|\psi\rangle\langle\psi|)^p)$$

$$\text{s. t. } |\psi\rangle = \text{vec}([\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2, \dots, \mathcal{U}_n]), \quad [\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2, \dots, \mathcal{U}_n] \in \mathcal{N}_r.$$

数值结果 反对称通道

- 左: 平均每步迭代时间 (关于量子比特的增长)
- 中: 平均每步迭代时间 (关于秩参数的增长)
- 右: NTT-RCG 计算出的最小熵值



- 计算量随量子比特数多项式增长, 计算结果符合量子信息规律

本章小结

· 归一化的张量链分解及其应用

优化问题	$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathcal{X}) \\ \text{s. t.} \quad & \text{rank}_{\text{TT}}(\mathcal{X}) = r \\ & \ \mathcal{X}\ _{\text{F}} = 1 \end{aligned}$	<ul style="list-style-type: none">✓ 流形优化方法- 代数簇优化方法- 参数化方法
挖掘几何	归一化的张量链分解的几何 固定秩流形 \mathcal{N}_r	$\begin{aligned} \mathcal{N}_r &= \mathcal{M}_r \cap \mathcal{B}_1 \\ \text{T}_x \mathcal{N}_r &= \text{T}_x \mathcal{M}_r \cap \text{T}_x \mathcal{B}_1 \end{aligned}$
设计算法	\mathcal{N}_r 上的黎曼共轭梯度法	<ul style="list-style-type: none">🖥 科学计算<ul style="list-style-type: none">✓ 球面数据恢复✓ 高维特征值问题低秩解🖥 量子信息论<ul style="list-style-type: none">✓ 稳定子秩的计算✓ Rényi 熵的计算

总结与展望

主要工作及贡献

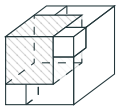
💡 乘积流形上的预条件优化方法

- ✓ 给出基于黎曼 Hessian 条件数的收敛速率常数刻画
- ✓ 针对张量环格式张量补全问题, 给出新的预条件算法



💡 Tucker 张量代数簇上的优化方法

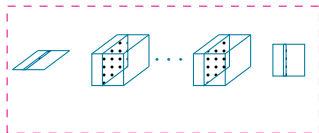
- ✓ 有界秩 Tucker 张量集合在每一点处的切锥、法锥
- ✓ 具有收敛性保证的几何方法与秩自适应方法



💡 归一化的张量链分解的几何与应用

- ✓ 固定秩 NTT 张量具有的流形结构
- ✓ 应用于科学计算与量子信息论中的典型问题

单位范数



低秩张量优化中的挑战: 我们的解答

👉 相比于低秩矩阵, 低秩张量有更复杂的几何

- ✓ Tucker 张量代数簇的几何
- ✓ 张量环分解的商几何
- ✓ 归一化 张量链分解的几何

👉 不同张量分解的性质不同, 同时影响几何与优化方法

- ✓ 张量环分解: 黎曼预条件方法
- ✓ Tucker 分解: 几何方法; 去奇异化方法
- ✓ 张量链分解: 去奇异化方法

👉 数值方法对秩参数敏感

- ✓ Tucker 秩自适应方法 (TRAM)

- 💡 将所提出的乘积流形预条件框架应用于其他问题, 以及通过并行计算有望进一步加速黎曼优化方法的运算效率.
- 💡 如何将 NTT 框架扩展到高效计算多个特征向量或特征子空间
- 💡 如何将低秩张量优化中的几何结构与优化方法引入到大规模神经网络训练与模型压缩中, 并提高训练效率

谢谢各位专家!

邮箱: pengrenfeng@lsec.cc.ac.cn