arXiv:2601.00729v1 [math.NA] 2 Jan 2026

用于多维降维的统一迹优化框架

M. EL GUIDE *、A. ELICHI†、K. JBILOU‡、L. REICHEL§ 和 H. ALQAHTANI¶

摘要。 本文全面概述了几种多维降维方法，重点介绍多维主成分分析（MPCA）、多线性正交邻域保持投影（MONPP）、多维局部线性嵌入（MLLE）以及多维拉普拉斯特征映射（MLE）。这些技术均在基于迹优化的统一框架下进行表述，其中降维问题被表示为最大化或最小化问题。除线性MPCA和MONPP方法外，本文还介绍了这些方法的基于核的扩展。后者能够捕捉高维数据之间的非线性关系。比较分析阐述了每种方法的理论基础、假设和计算效率，以及其实际适用性。本研究为选择适合具体应用的降维技术提供了见解和指导。

1. 引言。 高维数据广泛存在于许多现代应用中，包括计算机视觉、模式识别、高光谱成像、音频分析和数据可视化。在这些应用中，每个观测通常可由大量变量表示，这些变量往往具有很强的相关性和复杂的几何结构。直接进行学习通常会受到维数灾难、计算成本和可解释性的阻碍。降维技术通过寻求能够保留数据中最相关信息的低维表示来解决这些问题，例如保留方差、邻域结构或类别可分性等方面的信息。

一种经典且广泛使用的方法是主成分分析（PCA） [15, 17]。PCA 是一种线性无监督方法，用于寻找称为主成分的正交方向，这些方向能够捕获数据中最大的方差。仅保留少量前导主成分时，PCA 可以提供一种紧凑表示，通常足以用于可视化、压缩和降噪等任务。然而，由于 PCA 不利用标签信息，因此在分类等监督任务中的判别能力可能受到限制。

为克服这一局限，人们提出了许多有监督的线性降维方法。线性判别分析（LDA） [8, 12, 27] 及相关的费舍尔型准则旨在确定能够最大化类间散度与类内散度之比的投影，从而增强降维后空间中的类别可分性。此外，人们还发展出种类丰富的流形和基于图的技术，以保留样本之间的局部几何关系。例如，局部线性嵌入（LLE） [28], 拉普拉斯特征映射（LE） [3], 局部保持投影（LPP） [14], 和正交邻域保持投影（ONPP） [21]。这些方法中的许多方法的核扩展，以及迹优化形式和广义特征值问题，均已有研究，例如[20, 24, 26, 29, 30]。

上述大多数方法都处理向量数据，因此假设每个样本都可以表示为欧几里得空间中的一个向量。然而，在许多应用中，数据天然具有多维结构。典型示例包括彩色图像和多光谱图像、视频序列、张量值时间序列以及多传感器测量。一种常见的变通方法是先将原始多维数组向量化为长向量，再应用主成分分析或线性判别分析等基于矩阵的技术。

*FGSES，穆罕默德六世理工大学，拉巴特，摩洛哥。电子邮箱：mohamed.elguide@um6p.ma
†法国加莱海岸奥帕尔大学，LMPA，F. Buisson 街 50 号，62228 加莱邮政区。电子邮箱：elichi.alaa@gmail.com
‡法国加莱海岸奥帕尔大学，LMPA，F. Buisson 街 50 号，62228 加莱邮政区。电子邮箱：khalide.jbilou@univ-littoral.fr §数学系，肯特州立大学，美国俄亥俄州肯特市 44122。电子邮箱：reichel@math.kent.edu
¶阿卜杜勒-阿齐兹国王大学数学系，拉比格校区 21911，沙特阿拉伯。电子邮箱：hfalqahtani@kau.edu.sa

然而，这种策略往往会破坏重要的空间相关性或多模态相关性，导致环境维数极高，并可能降低统计效率和计算效率。为解决这些问题，人们提出了多线性降维技术和基于张量的降维技术，例如通过高阶奇异值分解和张量分解来实现；另请参见 [7, 23, 31], ，以及基于图和流形的张量方法。

近年来，t-乘积框架已成为处理三阶张量的强大代数工具；参见 [1, 10, 11, 19]。借助这一形式体系，可以将奇异值分解和谱分解等许多熟悉的矩阵概念推广到张量，同时通过块循环表示和傅里叶变换保留便捷的线性代数结构。多种数值线性代数方法和谱技术已成功推广至这一框架 [9, 10, 11]。这表明，采用 t-乘积框架重新审视经典降维准则或许是顺理成章的。

在本文中，我们针对 t-乘积框架下的多维降维，构建了一个统一的基于迹的优化框架。基于张量迹算子和广义特征值问题，我们将若干著名的基于矩阵的降维方法推广到三阶张量。具体而言，我们提出并分析了多维主成分分析（MPCA）和多维正交邻域保持投影（MONPP），二者均以张量量的形式表述。我们还推导了这些方法的核扩展，以便对多维数据中的非线性结构建模，同时保留 t-乘积代数的计算优势。此外，我们还考虑了非线性流形学习技术的多维变体，例如拉普拉斯特征映射（MLE）和局部线性嵌入（MLLE），并展示了如何在迹优化技术框架内表述这些方法。

所提出的框架基于迹准则和张量代数，为线性、核和非线性多维降维方法提供了统一的视角。它阐明了不同方法之间的联系，确定了相应的张量特征值问题或广义特征值问题，并由此得到可直接在张量数据上运算、无需向量化的实用算法。

本文其余部分安排如下。第2节回顾了对本文分析至关重要的 t-乘积性质。第3节推导了关于张量迹优化的一些理论结果。这些结果构成了所提出的多维降维方法的基础。第4节介绍多维主成分分析（MPCA）方法，第5节讨论多维正交邻域保持投影（MONPP）方法。第6节介绍这些方法的核扩展。第7节讨论多维非线性方法，包括多维拉普拉斯特征映射（MLE）和多维局部线性嵌入（MLLE）。第8节报告了在若干基准数据集上进行的数值实验。这些示例展示了所提出方法的有效性和计算特性。最后，第9节给出结论。

2. 预备知识。本文研究三阶张量 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}$。张量用粗体大写花体字母表示，例如 $\mathscr{A}$。标准大写字母（如 A）表示矩阵；粗体小写字母（如 $\boldsymbol{aaa}$）表示管；标准小写字母（如 a）表示向量。三阶张量 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}$ 的第 $(i,\ j,\ k)$ 个元素记为 $\mathscr{A}_{i,\ j,\ k}$。

固定一个索引即可得到三阶张量 $\mathscr{A}$ 的一个切片。我们用 $\mathscr{A}(i,:,:) \in \mathbb{R}^{1\times n\times p}$ 表示第 i 个水平切片，用 $\mathscr{A}(:,j,:) \in \mathbb{R}^{m\times 1\times p}$ 表示第 j 个侧向切片，并用 $\mathscr{A}(:,:,k) \in \mathbb{R}^{m\times n\times 1}$ 表示第 k 个正面切片。固定两个索引即可得到 $\mathscr{A}$ 的一个纤维。列（1 模）、行（2 模）和管（3 模）纤维分别记为 $\boldsymbol{aaa}_{:jk}$、$\boldsymbol{aaa}_{i:k}$ 和 $\boldsymbol{aaa}_{ij:}$。

两个三阶张量 $\mathscr{A},\mathscr{B}\in\mathbb{R}^{m\times n\times p}$ 的 Frobenius内积定义为

$$\langle\mathscr{A},\mathscr{B}\rangle=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{p}\mathscr{A}_{i,j,k}\mathscr{B}_{i,j,k},$$

三阶张量 $\mathscr{A}$的弗罗贝尼乌斯范数由下式给出

$$\|\mathscr{A}\|_F=\|\mathscr{A}\|_F=\sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{p}\mathscr{A}_{i,j,k}^2}.$$

本文将频繁使用快速傅里叶变换 (FFT)。令$F_\ell\in\mathbb{C}^{\ell\times\ell}$ 表示阶数为 ℓ的离散傅里叶变换 (DFT) 矩阵。其元素定义如下:

$$(F_\ell)_{k,j}=\frac{1}{\sqrt{\ell}}\,\omega^{(k-1)(j-1)},\quad k,j=1,\ldots,\ell,$$

其中 $\omega=e^{-2\pi i/\ell}$ 且$i=\sqrt{-1}$ 矩阵F_ℓ 是酉矩阵；它满足$F_\ell^HF_\ell=I_\ell$，其中上标H表示转置和复共轭。

$v\in\mathbb{C}^\ell$ 的离散傅里叶变换由 $\widehat{v}=F_\ell v$给出。若$v\in\mathbb{R}^\ell$，则 $\widehat{v}$ 满足共轭对称关系

$$\widehat{v}_1\in\mathbb{R},\qquad \texttt{conj}(\widehat{v}_i)=\widehat{v}_{\ell-i+2},\quad i=2,\ldots,\left\lfloor\frac{\ell+1}{2}\right\rfloor,\tag{2.1}$$

其中 $\lfloor\alpha\rfloor$ 表示小于或等于 $\alpha\geq0$的最大整数。

满足 (2.1) 的向量 $\widehat{v}\in\mathbb{C}^\ell$ 称为共轭偶。此外，如果向量 $\widetilde{v}$ 为实数且共轭偶，那么其逆离散傅里叶变换$v=F_\ell^H\widetilde{v}$ 也为实数且共轭偶。

设 $\mathscr{A}\in\mathbb{R}^{m\times n\times p}$ 为一个三阶张量，其正面切片为 A_1,$A2$,...,A_p。算子 Bcirc 根据 $\mathscr{A}$ 的正面切片构造一个分块循环矩阵:

$$\texttt{Bcirc}(\mathscr{A})=\begin{pmatrix}A_1 & A_p & \cdots & A_2\\ A_2 & A_1 & \cdots & A_3\\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots\\ A_p & A_{p-1} & \cdots & A_1\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{mp\times np}.$$

算子 MatVec 及其逆算子 MatVec^{-1} 定义为

$$\texttt{MatVec}(\mathscr{A})=\begin{pmatrix}A_1\\ \vdots\\ A_p\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{mp\times n},\qquad \texttt{MatVec}^{-1}(\texttt{MatVec}(\mathscr{A}))=\mathscr{A}.$$

与 $\mathscr{A}$ 关联的分块对角矩阵定义为

$$\texttt{Bdiag}(\mathscr{A})=\text{BlocDiag}(A_1,\ldots,A_p),\tag{2.2}$$

其中，A_j、$j=1,\ldots,p$ 是 $\mathscr{A}$ 的正面切片。

令 $\widehat{\mathscr{A}}$ 表示沿 $\mathscr{A}$ 的第三模（沿所有管）应用离散傅里叶变换后得到的张量。用 Matlab 表示法,

$$\widehat{\mathscr{A}}=\texttt{fft}(\mathscr{A},[],3),\qquad \texttt{ifft}(\widehat{\mathscr{A}},[],3)=\mathscr{A},$$

其中 fft 和 ifft 分别表示快速傅里叶变换和逆快速傅里叶变换函数。与三阶张量 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}$ 相关联的分块循环矩阵 Bcirc($\mathscr{A}$) 可通过离散傅里叶变换进行块对角化：

$$(F_p \otimes I_m)\,\mathtt{Bcirc}(\mathscr{A})\,(F_p^H \otimes I_n) = \mathtt{Bdiag}(\widehat{\mathscr{A}}). \tag{2.3}$$

若 $\mathscr{A}$为实数，则 $\mathscr{A}$的正面切片满足

$$\widehat{\mathscr{A}_1} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \qquad \mathtt{conj}(\widehat{\mathscr{A}_i}) = \widehat{\mathscr{A}_{p-i+2}}, \quad i = 2,\ldots,\left\lfloor \frac{p+1}{2} \right\rfloor, \tag{2.4}$$

其中，conj($\mathscr{A}_i$)表示矩阵 $\mathscr{A}_i$的复共轭。

Kilmer 和 Martin [18] 引入了以下张量积。

定义 2.1. 设 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times \ell\times p}$ 和 $\mathscr{B} \in \mathbb{R}^{\ell\times n\times p}$。 $\mathscr{A}$ 和 $\mathscr{B}$ 的 *t*-乘积是张量 $\mathscr{C} \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}$ ，定义为

$$\mathscr{C} = \mathscr{A} * \mathscr{B} = \mathtt{MatVec}^{-1}\big[\mathtt{Bcirc}(\mathscr{A})\,\mathtt{MatVec}(\mathscr{B})\big].$$

设 $\mathscr{C} = \mathscr{A} * \mathscr{B}$ 是 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times \ell\times p}$ 和 $\mathscr{B} \in \mathbb{R}^{\ell\times n\times p}$的 t-乘积。则 $\mathscr{C}$的快速傅里叶变换可以按切片计算为

$$\widehat{\mathscr{C}} = \widehat{\mathscr{A}} \triangle \widehat{\mathscr{B}},$$

其中， $\triangle$表示逐面（逐正面切片）的乘积，即

$$\widehat{\mathscr{C}_i} = \widehat{\mathscr{A}_i}\widehat{\mathscr{B}_i}, \quad i = 1,\ldots,p.$$

我们回顾使用 t-乘积时三阶张量张量运算的一些定义和性质。这些内容由 Kilmer 等人 [18, 19]给出，并将在本文中使用。

定义 2.2. *(i)* 设 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}$。 $\mathscr{A}$ 的 *t*-转置是张量 $\mathscr{A}^T \in \mathbb{R}^{n\times m\times p}$： 先对每个正面切片进行转置，再将转置后的正面切片 $A_2^T,\ldots,A_p^T$ 逆序排列。*(ii)* 单位张量 $\mathscr{I}_{mmp}$ 是一个大小为 $m \times m \times p$ 的张量，其第一个正面切片为 $m \times m$ 单位矩阵，其余正面切片均为零矩阵。注意，在傅里叶域中，$\widehat{\mathscr{I}_{mmp}}$ 的所有正面切片都等于单位矩阵 I_m。*(iii)* 若方张量 $\mathscr{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$ 满足

$$\mathscr{Q}^T * \mathscr{Q} = \mathscr{Q} * \mathscr{Q}^T = \mathscr{I}_{mmp}.$$

(iv) 若张量 $\mathscr{Q}$ 的傅里叶域中的所有正面切片 Q_i, $i = 1,\ldots,p$ 经 快速傅里叶变换($\mathscr{Q}$, [], 3) 变换后均为正交矩阵，则称其为 *f*- 正交张量。*(v)* 若张量 $\mathscr{D} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$ 在傅里叶域中的所有正面切片均为对角矩阵，则称其为 *f*-对角张量。*(vi)* 若存在张量 $\mathscr{A}^{-1} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$ 使得方张量 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$ 满足

$$\mathscr{A} * \mathscr{A}^{-1} = \mathscr{I}_{mmp}.$$

定义 2.3. 设 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$。若张量 $\mathscr{A}$的所有正面切片 A_i, $i = 1,\ldots,p$，在傅里叶域中均为对称矩阵，则称张量 $\mathscr{A}$为 *f*-对称。若张量 $\mathscr{A}$的所有正面切片在傅里叶域中均为对称正定（半正定）矩阵，则称张量 $\mathscr{A}$为 *f*-正定（*f*-半正定）。

矩阵的奇异值分解（SVD）可以扩展到 t-乘积框架下的三阶张量；例如，参见 [11, 18, 19]。

定理 2.4. 设 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}$ 为实值张量。则存在张量 $\mathscr{U} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$、$\mathscr{S} \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}$ 和 $\mathscr{V} \in \mathbb{R}^{n\times n\times p}$，使得

$$\mathscr{A} = \mathscr{U} * \mathscr{S} * \mathscr{V}^T, \tag{2.5}$$

其中 $\mathscr{U}$ 和 $\mathscr{V}$ 是 f-正交张量，$\mathscr{S}$ 是 f-对角张量。
文献 [10]介绍了利用 t-乘积将特征值和特征向量推广到三阶张量的相关方法。

定义 2.5. 设 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$ 为三阶张量。若管 $\boldsymbol{\lambda} j \in \mathbb{C}^{1\times 1\times p}$ 满足下式，则称其为 $\mathscr{A}$对应于特征侧向切片 $\vec{\mathscr{V}}_j \in \mathbb{C}^{m\times 1\times p}$ 的特征管：

$$\mathscr{A} * \vec{\mathscr{V}}_j = \vec{\mathscr{V}}_j * \boldsymbol{\lambda}_j. \tag{2.6}$$

$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$对于每个 $j = 1,\ldots,$ m，令 $\lambda j(A_k), k = 1,\ldots,p$ 表示 $\mathscr{A}$的第 k 个正面切片 A_k 的第 j 个特征值。第 j 个特征管 $\boldsymbol{\lambda}_j$ 定义为

$$\boldsymbol{\lambda}_j(1,1,k) = \lambda_j(\widehat{A}_k), \quad k = 1,\ldots,p,$$

并且每个正面切片中的特征值按如下方式排序：

$$|\lambda_\ell(\widehat{A}_k)| \geq |\lambda_{\ell+1}(\widehat{A}_k)|, \quad \ell = 1,\ldots,m-1, \quad k = 1,\ldots,p.$$

定义 2.6（张量 f-对角化）。若三阶张量 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$ 在 t-乘积意义下与某个 f-对角张量相似，则称其为 f-可对角化的，即 ∎

$$\mathscr{A} = \mathscr{P} * \mathscr{D} * \mathscr{P}^{-1},$$

对于某个可逆张量 $\mathscr{P} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$ 和一个 f-对角张量 $\mathscr{D} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$。在这种情况下，$\mathscr{P}$ 和 $\mathscr{D}$分别包含 $\mathscr{A}$的特征切片和特征管。

如果三阶张量 $\mathscr{A}$是 f-对称且 f-正定的，那么它是 f-可对角化的，并且其所有 $\widehat{\ }$特征值 $\lambda_i(A_j), i = 1,\ldots,m, j = 1,\ldots,p$ 都为实数且为正 [10]。

3. 张量迹优化问题。我们首先引入三阶张量迹的概念。它在傅里叶域中定义。

D定义3.1（f-张量迹）。考虑一个方张量 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$，其正面切片为 $A_1,\ldots,A_p$.
$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$令 $\mathscr{A}$ =快速傅里叶变换($\mathscr{A}$, [],3)，并令 $A_i, i = 1,\ldots,p$ 表示 $\mathscr{A}$的正面切片。$\mathscr{A}$的前向迹定义为

$$\mathrm{Trace}_f(\mathscr{A}) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p} \mathrm{Trace}(\widehat{A}_i), \tag{3.1}$$

$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$其中，迹(A_i) 表示方阵 A_i 的迹，该方阵是张量 $\mathscr{A}$ 的第 i 个正面切片。

下一个 结果直接由 t-乘积、快速傅里叶变换的性质以及迹的定义得出 f 迹 f·

命题3.2。令 $\mathscr{A}$，$\mathscr{B} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$。则

$$\mathrm{Trace}_f(\mathscr{A}^T * \mathscr{A}) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p} \|\widehat{A}_i\|_F^2 = \|\mathscr{A}\|_F^2, \tag{3.2}$$

$$\mathrm{Trace}_f(\mathscr{A}^T * \mathscr{B}) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\langle \widehat{A}_i, \widehat{B}_i\rangle = \langle \mathscr{A}, \mathscr{B}\rangle,$$

其中 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 表示 *Frobenius*内积。

设 $\mathscr{A}$ 是一个 f-对称且 f-正定的三阶张量。我们将考虑如下形式的优化问题

$$\max_{\mathscr{V}} \mathrm{Trace}_f(\mathscr{V}^T * \mathscr{A} * \mathscr{V}),$$

其中，三阶张量 $\mathscr{V}$ 满足某些正交约束或广义正交约束。这类问题自然地出现在多维降维中。其解可用与 t-乘积相关的张量特征结构表示。

定理 3.3. 设 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$ 是一个 *f*-对称且 *f*-正定的张量，并设 $\mathscr{V} \in \mathbb{R}^{m\times d\times p}$。则

$$\max_{\mathscr{V}^T*\mathscr{V}=\mathscr{I}} \mathrm{Trace}_f\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{A} * \mathscr{V}\right) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{d}\lambda_j(\widehat{A}_i) = \frac{1}{p}\sum_{j=1}^{d}\|\boldsymbol{\lambda}_j\|_1, \tag{3.3}$$

$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$ … $_i$ $_i$ $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$其中，对于每个 i, $_i = 1$, $_i$ = 1 … $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{1\times 1\times p}$ ，p，$\lambda_1(A) \geq \cdots \geq \lambda_m(A)$ 是正面切片 A 的特征值，$\lambda j(A)$，j，.....，d 表示其最大的 d 个特征值，第 j 个特征管 j 定义为

$$\boldsymbol{\lambda}_j(1,1,i) = \lambda_j(\widehat{A}_i), \quad i = 1,\ldots,p, \tag{3.4}$$

使得 $\|\boldsymbol{\lambda}j\|_1 = \sum^p i{=}1\,\lambda j$（$\widehat{\ }A_i$）。

证明。根据定义 3.1 以及快速傅里叶变换和 t-乘积的性质，我们有

$$\mathrm{Trace}_f\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{A} * \mathscr{V}\right) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\mathrm{Trace}\left(\widehat{\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{A} * \mathscr{V}\right)}_i\right) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\mathrm{Trace}\left(\widehat{V}_i^T\widehat{A}_i\widehat{V}_i\right),$$

其中 $\widehat{\mathscr{V}} = \mathrm{fft}(\mathscr{V},\ [],\ 3)$，$\widehat{\ }V_i$表示其第$i$个正面切片。约束 $\mathscr{V}_T{*}\,\mathscr{V} = \mathscr{I}$在傅里叶域中等价于

$$\widehat{V}_i^T\widehat{V}_i = I_d, \quad i = 1,\ldots,p.$$

因此,

$$\max_{\mathscr{V}^T*\mathscr{V}=\mathscr{I}} \mathrm{Trace}_f\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{A} * \mathscr{V}\right) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\max_{\widehat{V}_i^T\widehat{V}_i=I_d}\mathrm{Trace}\left(\widehat{V}_i^T\widehat{A}_i\widehat{V}_i\right).$$

$\widehat{\ }$由于每个A_i 都是对称正定的，因此经典矩阵结果适用：

$$\max_{\widehat{V}_i^T\widehat{V}_i=I_d}\mathrm{Trace}(\widehat{V}_i^T\widehat{A}_i\widehat{V}_i) = \sum_{j=1}^{d}\lambda_j(\widehat{A}_i),$$

$\widehat{\ }$其中 $\lambda_j(A_i)$、$j = 1,\ldots,d$ 是 d 个最大的特征值，属于 A_i。因此

$$\max_{\mathscr{V}^T*\mathscr{V}=\mathscr{I}} \mathrm{Trace}_f\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{A} * \mathscr{V}\right) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{d}\lambda_j(\widehat{A}_i).$$

按特征管分组各项可得

$$\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{d}\lambda_j(\widehat{A}_i)=\frac{1}{p}\sum_{j=1}^{d}\|\boldsymbol{\lambda}_j\|_1,$$

其中 $\boldsymbol{\lambda}_j$ 由 (3.4) 定义。通过令每个 $\widehat{\mathcal{V}}_i$ 的列为与A_i 的最大 d 个特征值相对应的$\widehat{}$特征向量，可以构造优化器 $\mathcal{V}$。 □

现在，我们将这一结果推广到约束涉及 f-正定张量的情形。

定理 3.4. 设 $\mathcal{A}$、$\mathcal{B}\in\mathbb{R}^{m\times m\times p}$ 为 f-对称且 f-正定的张量，并设 $\mathcal{V}\in\mathbb{R}^{m\times d\times p}$。则

$$\max_{\mathcal{V}^T*\mathcal{B}*\mathcal{V}=\mathcal{I}}\text{Trace}_f\left(\mathcal{V}^T*\mathcal{A}*\mathcal{V}\right)=\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{d}\mu_{i,j},\tag{3.5}$$

其中，对于每个 $i=1,\ldots,p$，$\mu_{i,1}\geq\cdots\geq\mu_{i,m}$均为矩阵对 $(\widehat{A}_i,\widehat{B}_i)$的广义特征值。$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$特别地，$\mu_{i,j}$，$j=1,\ldots,d$ 表示最大的 d 个广义特征值。这里，$\mathcal{A}$和 $\mathcal{B}$是通过沿第三模应用快速傅里叶变换 $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$得到的。此外，(A_i,B_i) 表示第 i 对正面切片。

证明。根据定义 3.1 和 t-乘积的性质，我们有

$$\text{Trace}_f(\mathcal{V}^T*\mathcal{A}*\mathcal{V})=\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\text{Trace}\left(\widehat{(\mathcal{V}^T*\mathcal{A}*\mathcal{V})}_i\right)=\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\text{Trace}\left(\widehat{V}_i^T\widehat{A}_i\widehat{V}_i\right),$$

其中 $\widehat{\mathcal{V}}=\text{fft}(\mathcal{V},[],3)$，且 $\widehat{\mathcal{V}}_i$ 是 $\widehat{\mathcal{V}}$ 的第 i 个正面切片。约束 $\mathcal{V}_T*\mathcal{B}*\mathcal{V}=\mathcal{I}$ 等价于

$$\widehat{V}_i^T\widehat{B}_i\widehat{V}_i=I_d,\quad i=1,\ldots,p.$$

因此，

$$\max_{\mathcal{V}^T*\mathcal{B}*\mathcal{V}=\mathcal{I}}\text{Trace}_f(\mathcal{V}^T*\mathcal{A}*\mathcal{V})=\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\max_{\widehat{V}_i^T\widehat{B}_i\widehat{V}_i=I_d}\text{Trace}(\widehat{V}_i^T\widehat{A}_i\widehat{V}_i).$$

$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$由于矩阵 A_i 和 B_i 均为对称矩阵，且 B_i 为正定矩阵，对每个 i，我们得到矩阵优化问题

$$\max_{\widehat{V}_i^T\widehat{B}_i\widehat{V}_i=I_d}\text{Trace}(\widehat{V}_i^T\widehat{A}_i\widehat{V}_i).$$

$\widehat{\ }$令 V_i 由与矩阵对 $(\widehat{A}_i,\widehat{B}_i)$ 的 d 个最大广义特征值 $\mu_{i,1},\ldots,\mu_{i,d}$ 对应的 d 个广义特征向量组成，即可求解。最优值等于 $\sum_{j=1}^{d}\mu_{i,j}$。对 i 求和可得式 (3.5)。 □

评注 1. 直接在张量层面使用拉格朗日乘子，定理 3.4 中问题的一阶最优性条件导出广义特征管方程

$$\mathcal{A}*\mathcal{V}=\mathcal{B}*\mathcal{V}*\mathcal{D},$$

其中 $\mathcal{D}$是一个 f-对角张量，其管 $\boldsymbol{\lambda}j$，$j=1$，...，d，是这一对 $(\mathcal{A},\mathcal{B})$ 的广义特征管。等价地，

$$\mathcal{A}*\vec{\mathcal{V}}_j=\mathcal{B}*\vec{\mathcal{V}}_j*\boldsymbol{\lambda}_j,\quad j=1,\ldots,d,$$

$\vec{}$其中 $\mathscr{V}_j$ 表示 $\mathscr{V}$ 的第 j 个侧向切片。

类似的结果也适用于相关的最小化问题。我们首先考虑将（3.4）中的最大化替换为最小化后得到的最小化问题。该问题的解将在下文中使用。

定理 3.5. 设 $\mathscr{A} \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}$ 是 f-对称且 f-正定的张量，并设 $\mathscr{V} \in \mathbb{R}^{m\times d\times p}$。则

$$\min_{\mathscr{V}^T * \mathscr{V} = \mathscr{I}} \operatorname{Trace}_f\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{A} * \mathscr{V}\right) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{d} \widetilde{\lambda}_j(\widehat{A}_i), \tag{3.6}$$

$\widetilde{}$ $\widehat{}$ $\widetilde{}$ $\widehat{}$ $\widehat{}$ $\widetilde{}$ $\widehat{}$其中，对于每个 $i = 1, \ldots, p$， $\lambda_1(A_i) \leq \cdots \leq \lambda_m(A_i)$ 是 A_i 的特征值，而 $\lambda j(A_i)$，$j = 1, \ldots, d$，表示 A_i 的 d 个最小特征值。

证明。证明与定理 3.3 的证明类似，不同之处在于矩阵问题中

$$\min_{\widehat{V}_i^T \widehat{V}_i = I_d} \operatorname{Trace}(\widehat{V}_i^T \widehat{A}_i \widehat{V}_i),$$

$\widehat{}$最优值等于 d 个 A_i最小特征值之和。对 i 求和，并根据迹 f 的定义，即可得到式（3.6）。

□

顺便指出，将式（3.5）中的最大化替换为最小化后得到的最小化问题，可以通过选取每一对 $(\widehat{A}_i, \widehat{B}_i)$ 的 d 个最小广义特征值来求解，其中 $i = 1, \ldots, p$。

4. 基于 t-乘积的多维主成分分析（MPCA）。考虑一个由侧向切片组成的数据集 $\vec{\mathscr{X}}_1, \ldots, \vec{\mathscr{X}}_n \in \mathbb{R}^{m\times 1\times p}$ 并定义

$$\mathscr{X} = \left[\vec{\mathscr{X}}_1, \ldots, \vec{\mathscr{X}}_n\right] \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}.$$

Let

$$\mathscr{V} = \left[\vec{\mathscr{V}}_1, \ldots, \vec{\mathscr{V}}_d\right] \in \mathbb{R}^{m\times d\times p}, \qquad 1 \leq d \ll m,$$

这是一个定义到低维子空间的映射的张量。我们将在下文讨论该张量的选择。通过将 $\mathscr{X}$ 映射到低维空间所得到的张量 $\mathscr{Y}$ 为

$$\mathscr{Y} = \mathscr{V}^T * \mathscr{X} \in \mathbb{R}^{d\times n\times p}. \tag{4.1}$$

线性降维技术对高维数据 $\mathscr{X}$ 应用线性变换，以获得能够保留原始数据特定所需属性的低维表示。式（4.1）中的张量 $\mathscr{V}$ 通过求解一个优化问题来确定，该问题旨在使数据的方差、邻域结构或某种监督判别准则在降维后的空间中得以保留。不同的目标会导向不同的方法。本节重点介绍一种无监督的方差最大化方法，该方法可得到 MPCA。

一旦确定映射张量 $\mathscr{V}$，每个侧向切片 $\vec{\mathscr{X}}_i$ 将按照以下方式进行映射

$$\vec{\mathscr{Y}}_i = \mathscr{V}^T * \vec{\mathscr{X}}_i, \quad i = 1, \ldots, n.$$

如果 $\mathscr{V}$ 是 f-正交的，也就是说，如果 $\mathscr{V}_{T}* \mathscr{V} = \mathscr{I}$，那么 $\mathscr{Y}$ 表示将 $\mathscr{X}$ 投影到由侧向切片 $\{\vec{\mathscr{V}}_1, \ldots, \vec{\mathscr{V}}_d\}$ 生成的子空间上的 f-正交投影。

在矩阵情形下，主成分分析（PCA）是一种经典的无监督方法，可将一组相关变量转换为一组新的线性不相关变量，称为主成分。主成分按顺序排列，使得前几个主成分能够捕获数据的大部分方差，而与较小方差相关的主成分通常会被舍弃，以实现降维。主成分彼此不相关，但不一定统计独立，除非数据服从高斯分布；相关讨论示例见 [17] 。

此处考虑的张量类比是一种线性映射，旨在计算一个 f-正交张量$\mathscr{V} \in \mathbb{R}^{m\times d\times p}$，其中 $1 \le d \ll m$，使映射切片的方差最大。令

$$\vec{\mathscr{M}} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \vec{\mathscr{X}}_j$$

表示数据的均值，并定义中心化张量

$$\overline{\mathscr{X}} = \left[\vec{\mathscr{X}}_1 - \vec{\mathscr{M}}, \ldots, \vec{\mathscr{X}}_n - \vec{\mathscr{M}}\right] \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}.$$

映射数据的方差可表示为

$$\sum_{i=1}^{n} \left\| \mathscr{V}^T * \left(\vec{\mathscr{X}}_i - \vec{\mathscr{M}}\right)\right\|_F^2 = \sum_{i=1}^{n} \left\| \mathscr{V}^T * \vec{\overline{\mathscr{X}}}_i \right\|_F^2,$$

其中 $\mathscr{X}_i$ 表示 $\mathscr{X}$ 的第i个侧向切片。MPCA旨在求解以下优化问题

$$\max_{\mathscr{V}^T * \mathscr{V} = \mathscr{I}} \sum_{i=1}^{n} \left\| \mathscr{V}^T * \vec{\overline{\mathscr{X}}}_i \right\|_F^2. \tag{4.2}$$

利用 t he Frobenius内积和命题3.2，我们可以将式 (4.2) 中的求和写成张量迹 ce:

$$\sum_{i=1}^{n} \left\| \mathscr{V}^T * \vec{\overline{\mathscr{X}}}_i \right\|_F^2 = \sum_{i=1}^{n} \left\langle \mathscr{V}^T * \vec{\overline{\mathscr{X}}}_i, \mathscr{V}^T * \vec{\overline{\mathscr{X}}}_i \right\rangle = \mathrm{Trace}_f\left(\mathscr{V}^T * \overline{\mathscr{X}} * \overline{\mathscr{X}}^T * \mathscr{V}\right).$$

因此，MPCA 优化问题 (4.2) 可写为

$$\max_{\mathscr{V}^T * \mathscr{V} = \mathscr{I}} \mathrm{Trace}_f\left(\mathscr{V}^T * \overline{\mathscr{X}} * \overline{\mathscr{X}}^T * \mathscr{V}\right). \tag{4.3}$$

引入张量

$$\mathscr{A} = \overline{\mathscr{X}} * \overline{\mathscr{X}}^T \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}.$$

则 $\mathscr{A}$ 是 f-对称且 f-半正定的，MPCA 问题 (4.3) 可表示为

$$\max_{\mathscr{V}^T * \mathscr{V} = \mathscr{I}} \mathrm{Trace}_f\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{A} * \mathscr{V}\right).$$

根据定理 3.3，其最优值为

$$\max_{\mathscr{V}^T * \mathscr{V} = \mathscr{I}} \mathrm{Trace}_f\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{A} * \mathscr{V}\right) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{d} \lambda_j(\widehat{A}_i),$$

其中，$\widehat{\mathscr{A}} = \mathrm{fft}(\mathscr{A}, [], 3)$ 表示，A_i表示第i个正面切片，其特征值按照 $\lambda_1(A_i) \ge \ldots \ge \lambda_m(A_i)$的顺序排列。

5. 多维正交邻域保持投影。多维正交邻域保持投影（MONPP）将基于矩阵的正交邻域保持投影（ONPP）方法扩展到 [21] 张量值数据。该投影（或映射）的目标是通过线性张量映射降低高阶数据集的维数，同时保持局部邻域关系。继承自 ONPP 的一个关键特征是：映射后，每个样本都必须使用与原空间中完全相同的重构权重，根据其邻居进行重构。

5.1. 方法描述。设

$$\mathscr{X} = [\vec{\mathscr{X}}_1, \ldots, \vec{\mathscr{X}}_n] \in \mathbb{R}^{m\times n\times p},$$

其中，每个侧向切片 $\vec{\mathscr{X}}_\ell \in \mathbb{R}^{m\times 1\times p}$ 表示一个样本。设 $\mathscr{V} \in \mathbb{R}^{m\times d\times p}$，其中 $1 \le d \ll m$，表示映射张量；令 $\mathscr{W} \in \mathbb{R}^{n\times n\times p}$ 为重构权重的三阶张量。映射数据为

$$\mathscr{Y} = \mathscr{V}^T * \mathscr{X} \in \mathbb{R}^{d\times n\times p}.$$

与矩阵正交邻域保持投影类似，MONPP 旨在通过求解以下约束最小化问题来确定张量 $\mathscr{V}$

$$\min_{\mathscr{V}^T*\mathscr{V}=\mathscr{I}} \left\|\mathscr{V}^T * \mathscr{X} * \left(\mathscr{I} - \mathscr{W}^T\right)\right\|_F^2, \tag{5.1}$$

其中，$\mathscr{I} \in \mathbb{R}^{n\times n\times p}$ 是单位张量，且 t-转置按照定义2.1的含义取值。利用恒等式 $\|\mathscr{Z}\|_F^2 = \text{迹}_\text{f}(\mathscr{Z}^T * \mathscr{Z})$ 以及 t-乘积的性质，目标函数 (5.1) 可写为

$$\begin{aligned}\left\|\mathscr{V}^T * \mathscr{X} * (\mathscr{I} - \mathscr{W}^T)\right\|_F^2 &= \text{Trace}_\text{f}\left[\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{X} * (\mathscr{I} - \mathscr{W}^T)\right)^T * \mathscr{V}^T * \mathscr{X} * (\mathscr{I} - \mathscr{W}^T)\right] \\ &= \text{Trace}_\text{f}\left[(\mathscr{I} - \mathscr{W}) * \mathscr{X}^T * \mathscr{V} * \mathscr{V}^T * \mathscr{X} * (\mathscr{I} - \mathscr{W}^T)\right].\end{aligned}$$

利用约束 $\mathscr{V}^T * \mathscr{V} = \mathscr{I}$，该表达式可简化为

$$\left\|\mathscr{V}^T * \mathscr{X} * (\mathscr{I} - \mathscr{W}^T)\right\|_F^2 = \text{Trace}_\text{f}\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{M} * \mathscr{V}\right),$$

其中

$$\mathscr{M} = \mathscr{X} * (\mathscr{I} - \mathscr{W}^T) * (\mathscr{I} - \mathscr{W}) * \mathscr{X}^T \in \mathbb{R}^{m\times m\times p}. \tag{5.2}$$

因此，MONPP 问题可以表示为

$$\min_{\mathscr{V}^T*\mathscr{V}=\mathscr{I}} \text{Trace}_\text{f}\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{M} * \mathscr{V}\right). \tag{5.3}$$

张量 $\mathscr{M}$ 是 f-对称且 f-半正定的。变换到傅里叶域后，得到张量 $\widehat{\mathscr{X}} = \text{fft}(\mathscr{X}, [], 3)$ 和 $\widehat{\mathscr{W}} = \text{fft}(\mathscr{W}, [], 3)$。令 $\widehat{X}_i$ 和 $\widehat{W}_i$ 分别表示 $\widehat{\mathscr{X}}$ 和 $\widehat{\mathscr{W}}$，$\widehat{\ }$的正面切片。那么，$\mathscr{M} = \text{fft}(\mathscr{M}, [], 3)$ 的正面切片为

$$\widehat{M}_i = \widehat{X}_i(I - \widehat{W}_i^T)(I - \widehat{W}_i)\widehat{X}_i^T, \qquad i = 1, \ldots, p.$$

对于任意向量z，有

$$z^T\widehat{M}_i z = \left\|(I - \widehat{W}_i)\widehat{X}_i^T z\right\|_2^2 \ge 0.$$

由于 $\widehat{M}_i^T = \widehat{M}_i$，因此 $\mathscr{M}$ 根据定义 2.3 的含义是 f-对称且 f-半正定的。因此，最小化问题 (5.3) 是定理 3.5 的一个特例，其中 $\mathscr{A} = \mathscr{M}$。我们得到

$$\min_{\mathscr{V}^T * \mathscr{M} * \mathscr{V} = \mathscr{J}} \operatorname{Trace_f}\left(\mathscr{V}^T * \mathscr{M} * \mathscr{V}\right) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{d}\widetilde{\lambda}_j(\widehat{M}_i) = \frac{1}{p}\sum_{j=1}^{d}\left\|\widetilde{\boldsymbol{\lambda}}_j\right\|_1, \tag{5.4}$$

其中，$\widetilde{\lambda}_j(\widehat{M}_i)$、$j = 1,\ldots,d$表示矩阵 $\widehat{M}_i$的最小的d个特征值，并且

$$\left\|\widetilde{\boldsymbol{\lambda}}_j\right\|_1 = \sum_{i=1}^{p}\widetilde{\lambda}_j(\widehat{M}_i).$$

由此可知，通过如下方式可以确定满足（5.3）的张量 $\mathscr{V}$：对于每个$i = 1,\ldots,p$，令$\widehat{V}_i$的正面切片由 $\widehat{\mathscr{V}} = \text{fft}(\mathscr{V},[],3)$构成，其中包含与 $\widehat{M}_i$的d个最小特征值相对应的特征向量。

接下来需要构造权重张量 $\mathscr{W}$。这可以像矩阵正交邻域保持投影那样，通过局部线性嵌入来完成。给定数据张量 $\mathscr{X}$后，首先针对每个样本索引 ℓ，在适当的距离范围内确定一个k 最近邻集合，例如使用相应侧向切片的弗罗贝尼乌斯范数。随后确定重构权重，使每个样本都能表示为其邻居的线性组合，且组合系数之和为1；非邻居对应的权重设为零。$\widehat{}$权重矩阵W_i 出现在

$$\widehat{M}_i = \widehat{X}_i(I - \widehat{W}_i^T)(I - \widehat{W}_i)\widehat{X}_i^T, \qquad i = 1,\ldots,p,$$

根据 [21] 中描述的过程计算，并独立应用于张量 $\widehat{\mathscr{X}} = \text{fft}(\mathscr{X},\ [],\ 3)$ 的每个正面切片$\widehat{X}_i$。确定切片 $\widehat{W}_i$后，逆傅里叶变换得到张量 $\mathscr{W}$，与矩阵 M_i 相关的广义特征值问题完全刻画了 MONPP 映射张量 $\mathscr{V}$。

6. 多维核方法。核方法通过将数据隐式映射到高维（可能是无限维）特征空间，实现非线性降维。随后可以有效地将主成分分析等线性技术应用于特征空间中的元素；例如，参见 [24, 30, 29]。在我们的张量设定中

g，我们考虑一种隐 p式 y 定义的非线性特征映 p

$$\Phi : \mathbb{R}^{m\times 1\times p} \longrightarrow \mathscr{H},$$

其中 $\mathscr{H}$ 是一个实希尔伯特空间（特征空间）。给定数据切片

$$\vec{\mathscr{X}}_1,\ldots,\vec{\mathscr{X}}_n \in \mathbb{R}^{m\times 1\times p},$$

我们将它们收集到张量中

$$\mathscr{X} = [\vec{\mathscr{X}}_1,\ldots,\vec{\mathscr{X}}_n] \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}.$$

数据的特征空间表示为

$$\Psi = [\Phi(\vec{\mathscr{X}}_1),\ldots,\Phi(\vec{\mathscr{X}}_n)],$$

我们可以将其视为一个三阶张量，其中n 个样本沿第一模态位于 $\mathscr{H}$中。映射Φ 不会被显式计算。相反，所有计算都用核函数表示

$$K(\vec{\mathscr{X}}_i,\vec{\mathscr{X}}_j) = \left\langle \Phi(\vec{\mathscr{X}}_i), \Phi(\vec{\mathscr{X}}_j)\right\rangle_{\mathscr{H}}, \qquad i,j = 1,\ldots,n,$$

它定义了Gram矩阵

$$K = [K_{ij}]_{i,j=1}^{n} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad K_{ij} = K(\vec{\mathscr{X}}_i, \vec{\mathscr{X}}_j),$$

其为对称半正定矩阵。该矩阵完全刻画了数据在特征空间 $\mathscr{H}$ 中的几何结构。常用的一种核是高斯（RBF）核:

$$K(\vec{\mathscr{X}}_i, \vec{\mathscr{X}}_j) = \exp\left(-\frac{\|\vec{\mathscr{X}}_i - \vec{\mathscr{X}}_j\|_F^2}{2\sigma^2}\right), \tag{6.1}$$

或者，更一般地，采用以下形式的径向基函数（RBF）核

$$K(\vec{\mathscr{X}}_i, \vec{\mathscr{X}}_j) = \exp\left(-\frac{\|\vec{\mathscr{X}}_i - \vec{\mathscr{X}}_j\|_F^2}{c}\right), \tag{6.2}$$

对于某个参数 $c > 0$。也可以使用其他核（多项式核、拉普拉斯核、Sigmoid 核等）；唯一的要求是 K 为半正定矩阵，这样 $K_{ij} = K(\vec{\mathscr{X}}_i, \vec{\mathscr{X}}_j)$ 才对应希尔伯特空间中 $\mathscr{X}_i$ 与 $\mathscr{X}_j$ 之间的有效内积。

现在，我们在核框架下阐释基于张量的线性方法（MPCA 和 MONPP）。从概念上讲，我们用提升表示 Ψ 替代原始数据张量 $\mathscr{X}$，然后在特征空间中应用基于 t-乘积的映射。映射数据的形式为

$$\mathscr{Y} = \mathscr{V}^T * \Psi,$$

其中，$\mathscr{V}$ 是一个映射张量，用于求解适当的优化问题。然而，由于特征空间的维度通常非常高（而且往往无法显式获知），我们使用由核函数计算构建的格拉姆矩阵来表述该优化问题。这样便无需显式计算Ψ。

6.1. 多维核主成分分析（MKPCA）。多维核主成分分析（MKPCA）是 MPCA 的一种非线性核扩展。它在特征空间 $\mathscr{H}$中执行 MPCA，适用于具有非线性结构的数据的可视化、分类、去噪和特征提取。我们首先在特征空间中对数据进行中心化。令

$$\vec{\mathscr{M}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \vec{\mathscr{X}}_i$$

表示均值切片，并定义中心化张量

$$\overline{\mathscr{X}} = [\overline{\vec{\mathscr{X}}}_1, \ldots, \overline{\vec{\mathscr{X}}}_n], \qquad \overline{\vec{\mathscr{X}}}_i = \vec{\mathscr{X}}_i - \vec{\mathscr{M}}.$$

在特征空间中，我们考虑

$$\overline{\Psi} = [\Phi(\overline{\vec{\mathscr{X}}}_1), \ldots, \Phi(\overline{\vec{\mathscr{X}}}_n)],$$

该矩阵并未显式构造；相反，我们使用由式 (6.1) 或 (6.2) 得到的中心化Gram矩阵。MKPCA 的目标是求解

$$\max_{\mathscr{V}^T * \mathscr{V} = \mathscr{I}} \mathrm{Trace_f}\left(\mathscr{V}^T * \overline{\Psi} * \overline{\Psi}^T * \mathscr{V}\right). \tag{6.3}$$

引入特征空间协方差张量

$$\mathscr{A} = \overline{\Psi} * \overline{\Psi}^T$$

与线性MPCA的情形类似， $\mathscr{A}$是f-对称且f-半正定的。因此，定理 3.3适用。定义

$$\widehat{\mathscr{A}} = \texttt{fft}(\mathscr{A}, [], 3)$$

^并令A_i 为第i</style}个正面切片。优化问题 (6.3) 分解为p </style}个相互独立的矩阵优化问题

$$\max_{\widehat{V}_i^T \widehat{V}_i = I} \text{Trace}\big(\widehat{V}_i^T \widehat{A}_i \widehat{V}_i\big), \qquad i = 1, \ldots, p, \tag{6.4}$$

^其解可通过令V_i 为与*d </style}*个最大特征值对应的特征向量矩阵A_i得到。等价地，若记

$$\widehat{A}_i = \widehat{\overline{\Psi}}_i \widehat{\overline{\Psi}}_i^T,$$

^— ^— — ^其中 Ψ_i是 Ψ =fft(Ψ, [], 3) 的第i个正面切片。那么A_i的特征值是 Ψ_i的奇异值^的平方：

$$\max_{\widehat{V}_i^T \widehat{V}_i = I} \text{Trace}\big(\widehat{V}_i^T \widehat{A}_i \widehat{V}_i\big) = \sum_{j=1}^{d} \lambda_j(\widehat{A}_i) = \sum_{j=1}^{d} \big(\sigma_j^{(i)}(\widehat{\overline{\Psi}}_i)\big)^2, \tag{6.5}$$

其中 $\lambda_1(\widehat{A}_i) \geq \cdots \geq \lambda_d(\widehat{A}_i)$ 表示最大的*d </style}*个特征值，而$\sigma_j^{(i)}(\widehat{\Psi}_i)$是对应的奇异值。

在实际计算中， $\widehat{\overline{\Psi}}_i$ 不可用，但 Gram矩阵

$$\overline{G}_i = \widehat{\overline{\Psi}}_i^T \widehat{\overline{\Psi}}_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

可以通过核函数计算得到：

$$(\overline{G}_i)_{lq} = \left\langle \Phi(\overline{\vec{\mathscr{X}}}_l), \Phi(\overline{\vec{\mathscr{X}}}_q) \right\rangle_{\mathscr{H}} = K(\overline{\vec{\mathscr{X}}}_l, \overline{\vec{\mathscr{X}}}_q), \qquad l, q = 1, \ldots, n.$$

与标准核主成分分析一样，我们利用以下关系

$$\widehat{\overline{\Psi}}_i \widehat{\overline{\Psi}}_i^T u = \lambda u \quad \Longrightarrow \quad \overline{G}_i v = \lambda v, \quad v = \widehat{\overline{\Psi}}_i^T u,$$

^因此，A_i的谱可以通过$n \times n$ 矩阵G_i计算得到。中心化Gram矩阵G_i 由未中心化Gram矩阵G_i 通过以下方式确定

$$\overline{G}_i = H G_i H, \qquad H = I_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}\mathbf{1}^T,$$

其中G_i 由式（6.1）定义（或采用其他任意核）。

总结 MKPCA 所需的计算如下：对于每个$i = 1, \ldots, p$：

1. 使用核K构建中心化Gram矩阵$\overline{G}_i$。2. 计算G_i的d个最大特征值及其对应的特征向量$v_1^{(i)},\ldots,v^{(i)}{}_d$。3. 将映射数据的切片构造为

$$\widehat{\mathscr{Y}}(:,:,i)=\begin{bmatrix}(v_1^{(i)})^T\\ \vdots\\ (v_d^{(i)})^T\end{bmatrix},$$

它对应于第i个正面切片的前d个核主成分上n个样本的坐标。

4. 沿第三模执行逆快速傅里叶变换，以恢复映射后的张量

$$\mathscr{Y}=\texttt{ifft}(\widehat{\mathscr{Y}},[],3).$$

6.2. 多维核正交邻域保持投影（MKONPP）。我们以与 MKPCA 相同的思路，将 MONPP 扩展到核设置中。我们不直接对 $\mathscr{X}$ 应用 ONPP，而是在特征空间中对 Ψ应用 ONPP。回顾一下，在线性情形下，MONPP 的最小化目标为

$$\left\|\mathscr{V}^T*\mathscr{X}*(\mathscr{I}-\mathscr{W}^T)\right\|_F^2$$

在约束 $\mathscr{V}_T*\mathscr{V}=\mathscr{I}$下，其中 $\mathscr{W}\in\mathbb{R}^{n\times n\times p}$是重构权重张量。在核设置中，我们考虑中心化的特征空间数据Ψ，并定义 MKONPP 目标函数

$$\min_{\mathscr{V}^T*\mathscr{V}=\mathscr{I}}\left\|\mathscr{V}^T*\overline{\Psi}*(\mathscr{I}-\mathscr{W}^T)\right\|_F^2. \tag{6.6}$$

利用 $\|\mathscr{Z}\|_F^2=\text{Trace}_\text{f}(\mathscr{Z}_T*\mathscr{Z})$ 以及 t-乘积的性质，目标函数 (6.6) 可写为

$$\text{Trace}_\text{f}\left(\mathscr{V}^T*\mathscr{M}^{(\text{ker})}*\mathscr{V}\right),$$

其中

$$\mathscr{M}^{(\text{ker})}=\overline{\Psi}*\mathscr{Q}*\overline{\Psi}^T,\qquad \mathscr{Q}=(\mathscr{I}-\mathscr{W}^T)*(\mathscr{I}-\mathscr{W}), \tag{6.7}$$

且 $\mathscr{I}$是尺寸为（n，n，p）的单位张量。与线性情形一样，$\mathscr{Q}$是 f-对称且 f-正半定的，$\mathscr{M}^{(\text{ker})}$也如此。因此，最小化问题 (6.6) 等价于

$$\min_{\mathscr{V}^T*\mathscr{V}=\mathscr{I}}\text{Trace}_\text{f}\left(\mathscr{V}^T*\mathscr{M}^{(\text{ker})}*\mathscr{V}\right), \tag{6.8}$$

这是定理 3.5 的一个直接应用。令

$$\widehat{\mathscr{M}}^{(\text{ker})}=\texttt{fft}(\mathscr{M}^{(\text{ker})},[],3),$$

并将其正面切片记为 $\widehat{\ }M^{(\text{ker})}{}_i$、$i=1$、...、$p$。则

$$\widehat{M}_i^{(\text{ker})}=\widehat{\overline{\Psi}}_i\widehat{Q}_i\widehat{\overline{\Psi}}_i^T,\qquad i=1,\ldots,p,$$

$\widehat{\overline{\Psi}}_i$ 和 $\widehat{\overline{Q}}_i$ 分别是 Ψ 和 $\mathcal{Q}$ 的第 i 个正面切片。最小化问题（6.8）分解为 p 个矩阵最小化问题

$$\min_{\widehat{V}_i^T \widehat{V}_i = I} \operatorname{Trace}\left(\widehat{V}_i^T \widehat{M}_i^{(\ker)} \widehat{V}_i\right), \quad i = 1, \ldots, p,$$

$\widehat{V}_i$ 的解可通过令 V_i 为与 $\widehat{M}^{(\ker)}{}_i$ 的 d 个最小特征值对应的特征向量矩阵而获得。相应的最小值为

$$\min_{\mathcal{V}^T * \mathcal{V} = \mathcal{J}} \operatorname{Trace}_{\mathrm{f}}\left(\mathcal{V}^T * \mathcal{M}^{(\ker)} * \mathcal{V}\right) = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{d} \widetilde{\lambda}_j(\widehat{M}_i^{(\ker)}),$$

其中 $\widetilde{\lambda}_1(\widehat{M}^{(\ker)}{}_i) \le \cdots \le \widetilde{\lambda}_d(\widehat{M}^{(\ker)}{}_i)$。

与 MKPCA 中类似，$\widehat{\overline{\Psi}}_i$ 无法直接获得，但格拉姆矩阵

$$\overline{G}_i = \widehat{\overline{\Psi}}_i^T \widehat{\overline{\Psi}}_i \in \mathbb{R}^{n \times n}, \qquad i = 1, \ldots, p,$$

可以利用中心化数据通过核函数构造：

$$(\overline{G}_i)_{lq} = K(\overline{\vec{\mathcal{X}}}_l, \overline{\vec{\mathcal{X}}}_q), \qquad l, q = 1, \ldots, n.$$

将特征空间中的特征值问题写为

$$\widehat{M}_i^{(\ker)} u = \lambda u \quad \Longleftrightarrow \quad \widehat{\overline{\Psi}}_i \widehat{Q}_i \widehat{\overline{\Psi}}_i^T u = \lambda u, \qquad i = 1, \ldots, p,$$

并相乘 $\widehat{\overline{\Psi}}_i^T$ 从左侧乘以 $\widehat{\overline{\Psi}}_i$，即可在 n 维样本空间中得到等价的特征值问题

$$\overline{G}_i \widehat{Q}_i v = \lambda v, \qquad v = \widehat{\overline{\Psi}}_i^T u, \qquad i = 1, \ldots, p.$$

由此可知，对于每个 $i = 1, \ldots, p$，通过求解一个 $n \times n$ 特征值问题即可实现 MKONPP$\widehat{\ }$，该问题涉及由 $\mathcal{W}$ 构造的中心化Gram矩阵 G_i 和权重矩阵 Q_i。

权重张量 $\mathcal{W}$ 的选取方式与 MONPP（以及 [21]的矩阵正交邻域保持投影）类似。对于 $\widehat{\mathcal{X}} = \mathrm{fft}(\mathcal{X}, [], 3)$ 的每个正面切片 $\widehat{X}_i$ 以及每个样本索引 $l \in \{1, \ldots, n\}$，我们定义一个邻域 $\mathcal{N}_i(l)$，其中包含 k 个最近邻，例如使用弗罗贝尼乌斯范数度量列之间的距离，

$$d_i(l, q) = \left\| \widehat{X}_i^{(l)} - \widehat{X}_i^{(q)} \right\|_F,$$

其中 $\widehat{X}^{(l)}{}_i$ 表示 $\widehat{X}_i$ 的第 l 列。未归一化亲和权重的一种常见选取方式为

$$\widehat{w}_{lq}^{(i)} = \exp\left(- \frac{\left\| \widehat{X}_i^{(l)} - \widehat{X}_i^{(q)} \right\|_F^2}{2\sigma^2} \right), \qquad l, q = 1, \ldots, n, \tag{6.9}$$

其中 $\widehat{w}^{(i)}{}_{lq} = 0$ 若 $q \notin \mathcal{N}_i(l)$，$\sigma > 0$ 为缩放参数。随后对每一行进行归一化，使得

$$\sum_{q=1}^{n} \widehat{w}_{lq}^{(i)} = 1, \qquad l = 1, \ldots, n.$$

这确保每个样本都被重构为其邻居的凸组合。矩阵$\widehat{W}_i = [\widehat{w}^{(i)}{}_{lq}]$构成张量 $\widehat{\mathscr{W}}$ 的正面切片，通过逆快速傅里叶变换可得到 $\mathscr{W}$。

总之，MKPCA 和 MKONPP 通过将 t-乘积框架与核方法相结合，把 MPCA 和 MONPP 扩展到了非线性特征空间。所有计算均通过由张量核构建的格拉姆矩阵完成，从而在实现非线性降维的同时保留数据的多线性结构。

7. 多维非线性降维方法。本节讨论两种非线性降维方法。

7.1. 多维局部线性嵌入（MLLE）。经典的矩阵局部线性嵌入（LLE）是一种非线性降维技术，旨在揭示隐藏在高维数据集中的有意义的低维结构。其核心假设是，尽管数据位于高维空间中，但它们（近似地）处于一个光滑的低维流形上。LLE 不保留全局距离，而是着重保留局部几何。对于每个数据点，该方法首先在原始空间中确定其最近邻，并使用重构权重将其表示为这些邻居的线性组合。这些权重描述了每个点与其局部流形片之间的关系。第二步中，LLE 寻找一个低维嵌入，尽可能保留这些相同的重构关系：每个嵌入点仍应能由其邻居的相同加权组合近似表示。

在多维（张量）情况下，我们按如下方式进行：给定样本

$$\vec{\mathscr{X}}_1, \ldots, \vec{\mathscr{X}}_n \in \mathbb{R}^{m\times 1\times p}$$

以及张量

$$\mathscr{X} = [\vec{\mathscr{X}}_1, \ldots, \vec{\mathscr{X}}_n] \in \mathbb{R}^{m\times n\times p},$$

我们寻求一个降维后的张量

$$\mathscr{Y} \in \mathbb{R}^{d\times n\times p}, \qquad 1 \le d \ll m,$$

其侧向切片包含每种模式下 n 个样本的d维嵌入。MLLE 旨在求解以下张量形式的最小化问题:

$$\min_{\mathscr{Y}*\mathscr{Y}^T=\mathscr{I}_d} \operatorname{Trace}_f\left[\mathscr{Y} * \left(\mathscr{I} - \mathscr{W}^T\right) * (\mathscr{I} - \mathscr{W}) * \mathscr{Y}^T\right], \tag{7.1}$$

其中，$\mathscr{W} \in \mathbb{R}^{n\times n\times p}$ 是与数据 $\mathscr{X}$相关联的重构权重张量，$\mathscr{I}$是大小为 $(n,\ n,\ p)$ 的 f-单位张量。约束条件 $\mathscr{Y} * \mathscr{Y}_T = \mathscr{I}_d$（其中 $\mathscr{I}_d \in \mathbb{R}^{d\times d\times p}$）避免了平凡解$\mathscr{Y} = 0$，并确定嵌入的整体尺度。定义 f-对称且 f-半正定的“MLLE张量”

$$\mathscr{N} = \left(\mathscr{I} - \mathscr{W}^T\right) * (\mathscr{I} - \mathscr{W}) \in \mathbb{R}^{n\times n\times p}.$$

于是，(7.1) 可写为

$$\min_{\mathscr{Y}*\mathscr{Y}^T=\mathscr{I}_d} \operatorname{Trace}_f\left(\mathscr{Y} * \mathscr{N} * \mathscr{Y}^T\right).$$

利用迹f的定义和 t-乘积的性质，这个张量最小化问题在傅里叶域中分解为p 个相互独立的矩阵最小化问题。令

$$\widehat{\mathscr{Y}} = \texttt{fft}(\mathscr{Y}, [], 3), \quad \widehat{\mathscr{N}} = \texttt{fft}(\mathscr{N}, [], 3),$$

$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$并将Y_i 和N_i 分别记为 $\mathscr{Y}$和 $\mathscr{N}$的第i个正面切片。于是

$$\text{Trace}_f\left(\mathscr{Y} * \mathscr{N} * \mathscr{Y}^T\right) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p} \text{Trace}\left(\widehat{Y}_i \widehat{N}_i \widehat{Y}_i^T\right),$$

最小化问题 (7.1) 可表示为

$$\min_{\widehat{Y}_i \widehat{Y}_i^T = I_d} \text{Trace}\left(\widehat{Y}_i \widehat{N}_i \widehat{Y}_i^T\right), \qquad i = 1, \ldots, p. \tag{7.2}$$

$\widehat{\ }$由于每个N_i 都是对称半正定的，因此可通过求解特征值问题来获得 (7.2) 的解

$$\widehat{N}_i v = \lambda v, \qquad i = 1, \ldots, p, \tag{7.3}$$

并对每个i选取与d 个最小非零特征值对应的特征向量。更确切地说，$\widehat{\ }$若将N_i 的特征值按如下顺序排列

$$0 = \lambda_1^{(i)} \le \lambda_2^{(i)} \le \cdots \le \lambda_n^{(i)},$$

并将对应的特征向量记为$v^{(}{}_{j)\,i}$，$j = 1, \ldots, n$，则嵌入张量的第i个正面切片为

$$\widehat{Y}_i = \begin{bmatrix} \left(v_i^{(2)}\right)^T \\ \vdots \\ \left(v_i^{(d+1)}\right)^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times n}, \qquad i = 1, \ldots, p.$$

最后，通过以下方式在原始域中恢复多维嵌入

$$\mathscr{Y} = \texttt{ifft}(\widehat{\mathscr{Y}}, [], 3).$$

构成 $\mathscr{W}$的权重按照前面所述的基于邻域的方案构造（例如，在k 个最近邻上使用高斯权重）。

7.2. 多维拉普拉斯特征映射（MLE）。拉普拉斯特征映射是一种基于流形学习和谱图理论的非线性降维方法。该方法构建一个加权图，其节点为数据样本，边的权重则用于编码局部相似性。由此可确定与该图关联的对称邻接矩阵。根据该邻接矩阵构造图拉普拉斯矩阵，再利用与其最小非平凡特征值相对应的特征向量获得低维嵌入。该嵌入保留了局部邻域结构，并捕捉数据流形的内在几何。借助拉普拉斯特征映射对矩阵值数据进行降维的相关内容见 [2, 3]。

在多维场景中，设 $\mathscr{X} \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}$ 为数据张量（含有 n 个样本），$\mathscr{W} \in \mathbb{R}^{n\times n\times p}$为关联的图权重张量，$\mathscr{D} \in \mathbb{R}^{n\times n\times p}$ 为度张量。张量 $\mathscr{W}$和 $\mathscr{D}$将在下文定义，分别为计算所得张量 $\mathscr{W}$和 $\mathscr{D}$的逆傅里叶变换。引入由 $\mathscr{W}$和 $\mathscr{D}$确定的多层图的拉普拉斯张量：

$$\mathscr{L} = \mathscr{D} - \mathscr{W} \in \mathbb{R}^{n\times n\times p}. \tag{7.4}$$

多维拉普拉斯特征映射（MLE）方法旨在求解一个嵌入张量

$$\mathscr{Z} \in \mathbb{R}^{d\times n\times p}, \qquad 1 \le d \ll m,$$

其求解方式为

$$\min_{\mathscr{Z}*\mathscr{D}*\mathscr{Z}^T=\mathscr{I}_d} \mathrm{Trace}_f\left(\mathscr{Z} * \mathscr{L} * \mathscr{Z}^T\right), \tag{7.5}$$

其中，约束条件 $\mathscr{Z} * \mathscr{D} * \mathscr{Z}_T = \mathscr{I}_d$提供了归一化。利用 t-乘积的性质以及迹$f$的定义，最小化问题 (7.5) 在傅里叶域中解耦为 p 个广义特征值问题：令

$$\widehat{\mathscr{L}} = \texttt{fft}(\mathscr{L}, [], 3), \quad \widehat{\mathscr{D}} = \texttt{fft}(\mathscr{D}, [], 3), \quad \widehat{\mathscr{Z}} = \texttt{fft}(\mathscr{Z}, [], 3),$$

$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$并将变换后张量的第i个正面切片分别记为 L_i、D_i 和 Z_i。于是，最小化问题 (7.5) 等价于 p 个相互独立的最小化问题

$$\min_{\widehat{Z}_i\widehat{D}_i\widehat{Z}_i^T=I_d} \mathrm{Trace}\left(\widehat{Z}_i\widehat{L}_i\widehat{Z}_i^T\right), \qquad i = 1,\dots,p,$$

其解可通过求解广义特征值问题得到

$$\widehat{L}_i v_i^{(j)} = \lambda_j^{(i)} \widehat{D}_i v_i^{(j)}, \qquad i = 1,\dots,p. \tag{7.6}$$

对于每个i，我们将广义特征值按如下顺序排列

$$0 = \lambda_1^{(i)} \le \lambda_2^{(i)} \le \cdots \le \lambda_n^{(i)},$$

并舍弃与 $\lambda_1^{(i)} = 0$ 相关的特征向量。嵌入张量第 i 个正面切片的解为

$$\widehat{Z}_i = \begin{bmatrix} \left(v_i^{(2)}\right)^T \\ \vdots \\ \left(v_i^{(d+1)}\right)^T \end{bmatrix}, \qquad i = 1,\dots,p. \tag{7.7}$$

最后，原始域中的嵌入为

$$\mathscr{Z} = \texttt{ifft}(\widehat{\mathscr{Z}}, [], 3).$$

$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$对于每个正面切片$i = 1,\dots,p$，矩阵L_i和D_i满足

$$\widehat{L}_i = \widehat{D}_i - \widehat{W}_i, \tag{7.8}$$

其中，$\widehat{W}_i$是 $\widehat{\mathscr{W}} = \text{fft}(\mathscr{W}, [], 3)$的第$i$个正面切片。权重的一种标准且实用的选择是基于成对距离的高斯核：

$$\widehat{W}_{lqi} = \exp\left(-\frac{\|\widehat{\vec{X}}_i^{(l)} - \widehat{\vec{X}}_i^{(q)}\|_F^2}{2\sigma^2} \right), \quad l,q = 1,\ldots,n,\ i = 1,\ldots,p, \tag{7.9}$$

其中，$\backsimeq X^{(l)}{}_i$表示张量 $\widehat{\mathscr{X}} = \text{fft}(\mathscr{X}, [], 3)$ 的第 $^{(l)}{}_i$个正面切片 $\widehat{X}_i$的第l列，而 $\sigma > 0$是控制图连接局部性的缩放参数。因此，给定数据张量 $\mathscr{X} \in \mathbb{R}^{m\times n\times p}$，我们计算其变换 Z以及张量（7.9）。令对角矩阵 D_i，i=1，…，p 由对称矩阵W_i 的对角元素构成，并按（7.8）定义矩阵 L_i。然后，求解广义特征值问题（7.6）后，即可根据（7.7）确定矩阵 $\widehat{Z}_i$。

8. 数值实验。本节展示了所提出的多线性降维方法应用于若干基准多维数据集时的性能。总体流程是先将原始高维张量数据投影到低维子空间，再使用标准监督学习算法对降维表示进行分类。我们报告分类准确率和计算时间，并比较多维主成分分析（MPCA）及其核扩展（MKPCA）、多维正交邻域保持投影（MONPP）及其核变体（MKONPP）、多维局部线性嵌入（MLLE），以及拉普拉斯特征映射的张量版本（MLE）的性能。

给定一个降维后的张量

$$\mathscr{Y} \in \mathbb{R}^{d\times n\times p},$$

我们通过沿第一模和第三模对每个样本进行向量化，构造适用于传统分类器的矩阵。更具体地说，第 j 个样本被映射为 $\mathbb{R}^{dp}$中的一个向量，并将所有样本堆叠起来形成一个 $\mathbb{R}^{n\times dp}$ 中的矩阵。随后，在此矩阵表示上训练并评估分类器。对于核方法，我们选择带宽参数

$$\sigma = \sqrt{\frac{m_d}{2}},$$

其中，m_d 表示n 个样本之间所有成对平方距离的中位数。

每种降维方法均针对两个目标维数进行评估，分别为$d = 5$ 和$d = 10$。对于分类，我们使用四种广泛采用的分类器：随机森林（RF） [4], K近邻（KNN）[6], 支持向量机（SVM） [5], 和极端随机树 [13]。性能采用分层五折交叉验证进行衡量：在每一折中，80% 的数据用于训练，20% 用于测试。分类准确率定义为

$$\text{Accuracy}(\%) = \frac{\text{Number of correct predictions}}{\text{Total number of samples}} \times 100. \tag{8.1}$$

8.1. 数据集。我们的实验使用了以下基准数据集：

- **Salinas** [25]：一个包含 224 个光谱波段和 16 个农业类别的高光谱数据集。移除水吸收波段后，保留 204 个波段，并提取标记像素。张量表示采用与标准高光谱分类设置相同的空谱展开策略。

• **FSDD** [16]：自由口语数字数据集由 6 位说话者录制的数字（0–9）音频组成。针对 2,000 个信号计算大小为 $64 \times 64 \times 4$ 的时频表示（频谱图），并将其重塑为大小为 (4096，2000，4) 的张量。

• **步态识别** [32]：750个二值轮廓序列，来自10名进行行走动作的个体。每幅 128×128 轮廓图像被划分为水平条带，以构成尺寸为（8192，750，2）的三阶张量。

• **华盛顿特区购物中心（WDCM）**：由HYDICE传感器采集的华盛顿特区购物中心高光谱图像 [1]。完整场景包含 1208×307 个像素和191个光谱波段。从人工选取的 7×7 个图像块中提取四个类别（草地、树木、屋顶和道路），并将其重塑为尺寸为（4704，2000，2）的张量。

• **MNIST** [22]：一个包含手写数字（0–9）的数据集，图像为 28×28尺寸的灰度图像。对于基于张量的处理，将每幅图像划分为小图像块，以构成尺寸为（392，3000，2）的张量。

表8.1总结了这些数据集的张量结构和领域特征。

表 8.1：数据集规格、张量维度和类别分布。

数据集	张量	样本	类别	领域 / 模态
Salinas	(102, 2000, 2)	2000	16	高光谱图像
FSDD	(4096, 2000, 4)	2000	10	音频／口述数字
Gait	(8192, 750, 2)	750	10	人体运动剪影
华盛顿特区	(4704, 2000, 2)	2000	4	高光谱图像
MNIST	(392, 2000, 2)	3000	10	手写数字

8.2. 结果与讨论。 接下来，我们将展示各个数据集的定量结果。为简洁起见，我们报告 5 折交叉验证的平均分类准确率，以及各降维方法所需的相应 CPU 时间（包括投影和分类器训练）。

8.2.1. Salinas。 表 8.2 显示，对于几乎所有分类器和d的两种取值，MPCA 都取得了最高或接近最高的准确率。例如，使用支持向量机且$d = 10$时，MPCA 的准确率达到 92.90%，在此配置下优于其他方案。对于大多数方法，将维数从$d = 5$ 增加到$d = 10$ 通常会提高准确率（例如，MKPCA + 支持向量机：$86.60\% \rightarrow 90.40\%$），这表明稍丰富的子空间有助于保留判别性光谱信息。总体而言，对于 Salinas，采用$d = 10$ 时，“MPCA + （随机森林、支持向量机、极端随机树或 K近邻）”这一组合在准确率和计算开销之间实现了出色的权衡。

8.2.2. FSDD。 对于音频 FSDD 数据集（表 8.3），MPCA 与支持向量机相结合时表现最佳，在 . $= 10$ 维时达到 95.95%。MLE 和 MKPCA 的表现也颇具竞争力，尤其是在维度较高时；而正交邻域保持投影和 MKONPP 则明显落后。CPU 时间反映了 MPCA 在这个大型张量上的计算成本（约为 10^3 秒）。MKPCA 和 MLE 的速度快得多。计算资源有限时，可以采用 MKPCA 或 MLE 搭配性能强劲的分类器（例如支持向量机或极端随机树），在准确率和效率之间取得良好平衡。

8.2.3. 步态。对于步态数据集（表 8.4），所有基于主成分分析的方法（MPCA、MKPCA、MONPP）都取得了很高的准确率，尤其是在与基于树的分类器结合时。最佳表现为

[1] `http://lesun.weebly.com/hyperspectral-data-set.html`

表 8.2：Salinas 数据集的结果。

d	MPCA	MKPCA	MONPP	MKONPP	MLLE	MLE
随机森林 - 准确率 (%)						
$d = 5$	91.85	85.80	82.55	61.50	85.00	85.95
$d = 10$	92.65	88.95	84.35	64.70	87.60	86.15
K近邻 - 准确率 (%)						
$d = 5$	90.65	83.65	80.00	59.65	83.80	83.90
$d = 10$	90.30	87.10	81.65	64.60	85.80	84.60
支持向量机 - 准确率 (%)						
$d = 5$	92.60	86.60	83.35	64.75	78.20	83.10
$d = 10$	92.90	90.40	85.90	69.35	86.25	85.60
极端随机树 - 准确率 (%)						
$d = 5$	92.85	86.35	82.30	62.55	84.70	85.70
$d = 10$	92.55	88.65	84.35	66.10	87.45	86.30
CPU 时间（秒）						
$d = 5$	3.02	7.49	3.25	8.05	3.11	3.25
$d = 10$	2.87	7.30	3.38	8.72	4.84	3.26

表 8.3：FSDD 数据集的结果。

d	MPCA	MKPCA	MONPP	MKONPP	MLLE	MLE
随机森林 - 准确率 (%)						
$d = 5$	81.25	76.05	59.35	44.55	81.75	85.65
$d = 10$	90.65	85.95	61.45	54.60	86.25	87.95
K近邻 - 准确率 (%)						
$d = 5$	83.10	76.70	58.00	41.95	79.80	83.70
$d = 10$	90.60	87.90	59.40	55.20	82.90	83.75
支持向量机 - 准确率 (%)						
$d = 5$	88.90	82.70	55.25	43.05	84.60	87.35
$d = 10$	95.95	92.90	57.33	56.55	87.80	89.30
极端随机树 - 准确率 (%)						
$d = 5$	84.30	78.80	61.00	45.90	84.05	87.00
$d = 10$	92.30	89.15	62.65	57.90	87.70	87.80
CPU 时间（秒）						
$d = 5$	1085.58	10.08	137.28	21.47	7.57	6.09
$d = 10$	1082.25	11.22	137.64	21.27	10.36	6.31

使用 MPCA 或 MKPCA 配合极端随机树时获得 $d = 10$（约 99%）。这说明，维度相对较低的嵌入足以保留大部分具有区分性的时空步态信息。对于该数据集，MLLE 和 MLE 的竞争力较弱。在运行时间方面，MPCA 的开销最大，而 MKPCA 和 MLE 的开销则小得多。

表 8.4：步态数据集的结果。

d	MPCA	MKPCA	MONPP	MKONPP	MLLE	MLE
随机森林 - 准确率（%）						
$d = 5$	98.27	98.00	96.80	61.73	65.73	88.80
$d = 10$	98.67	98.67	96.80	69.73	68.27	91.07
K近邻 - 准确率（%）						
$d = 5$	94.93	95.47	94.80	63.20	92.40	91.07
$d = 10$	94.67	95.20	94.67	68.40	56.53	84.53
支持向量机 - 准确率 (%)						
$d = 5$	97.73	97.47	55.47	65.87	45.20	57.33
$d = 10$	98.53	98.53	58.80	74.93	63.87	71.87
极端随机树 - 准确率 (%)						
$d = 5$	99.07	98.80	97.07	65.33	66.13	89.07
$d = 10$	99.20	98.93	97.73	70.80	68.80	91.87
CPU 时间（秒）						
$d = 5$	1122.49	9.04	158.81	8.00	5.07	4.02
$d = 10$	1081.84	5.91	118.99	9.29	4.84	4.63

表 8.5：华盛顿特区数据集的结果。

d	MPCA	MKPCA	MONPP	MKONPP	MLLE	MLE
随机森林 - 准确率 (%)						
$d = 5$	95.40	95.25	89.00	77.85	94.25	95.55
$d = 10$	96.05	95.95	92.30	80.50	94.50	95.50
K近邻 - 准确率 (%)						
$d = 5$	93.30	94.30	82.70	76.95	93.05	95.45
$d = 10$	92.90	94.70	87.85	80.30	93.05	95.25
支持向量机 - 准确率 (%)						
$d = 5$	95.20	95.10	82.25	78.70	93.55	95.00
$d = 10$	95.85	96.40	88.25	82.45	93.45	95.45
极端随机树 - 准确率 (%)						
$d = 5$	95.70	95.55	89.90	77.85	94.45	96.25
$d = 10$	96.80	96.25	93.15	81.50	94.95	96.05
CPU 时间（秒）						
$d = 5$	229.89	9.44	36.28	16.46	5.63	5.11
$d = 10$	229.68	9.10	36.47	15.35	7.75	4.83

8.2.4. 华盛顿特区购物中心。表 8.5 报告了多种降维方法（MPCA、MKPCA、MONPP、MKONPP、MLLE、MLE）应用于华盛顿特区数据集时，在两个降维后的维数 $d = 5$ 和 $d = 10$ 下，使用多种分类器（随机森林、K近邻、支持向量机、极端随机树）所取得的准确率。图8.1展示了目标维数对该数据集准确率的影响。总体而言，将目标维数从 $d = 5$ 增至 $d = 10$ 的影响不大，但各种方法的准确率均稳定提升，尤以 MPCA 和 MKPCA 为甚，这表明较低的多线性维度已足以在此场景中实现准确分类性能，尤

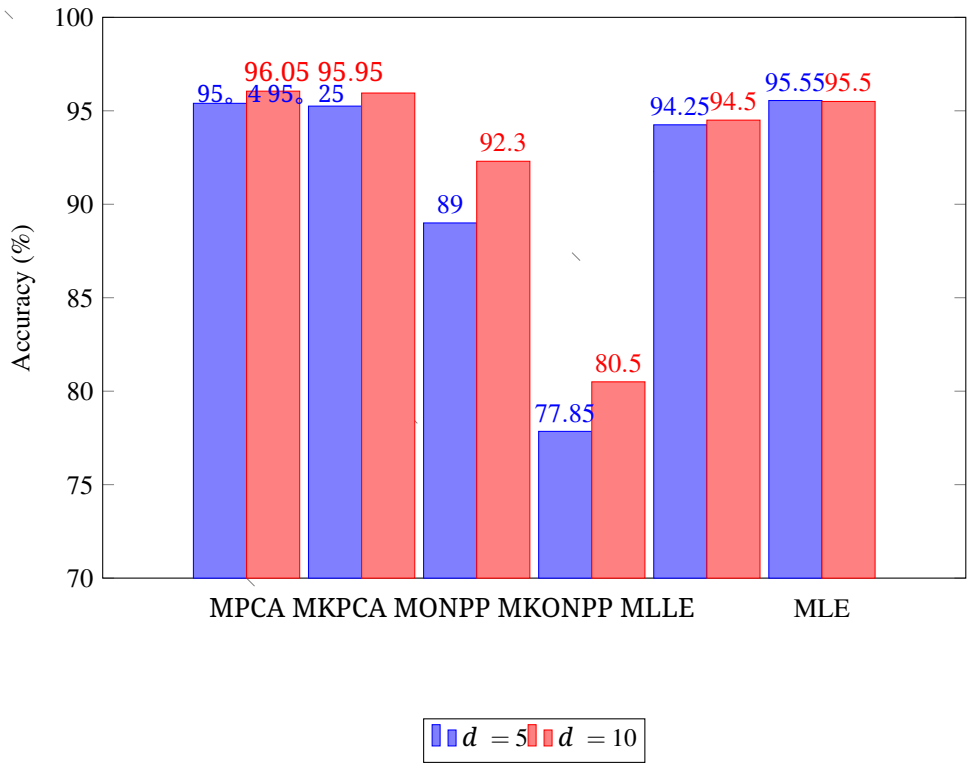

图 8.1：$d = 5$ 和$d = 10$在华盛顿特区数据集上的分类准确率。

其是 MPCA 和 MKPCA，这证实较低的多线性维度已足以在该场景中实现准确的分类性能。

8.2.5. MNIST。 对于 MNIST 数据集（表 8.6），无论采用何种降维方法，SVM 始终能够取得最佳的分类性能。在后述方法中，当$d = 10$时，MPCA、MONPP 和 MLE 的表现最佳，准确率约为 90% 或更高，而 MKONPP 和 MKPCA 的准确率略低。结果表明，将数字图像投影至$d = 10$维能够保留足够的判别信息，从而获得具有竞争力的识别准确率，同时大幅降低原始图像的维数。

8.2.6. 目标维数对 FSDD 的影响。图 8.2 展示了支持向量机在 FSDD 数据集上的分类准确率随目标维数$d \in \{2,4,6,8,10\}$变化的情况。

表 8.6：MNIST 数据集的结果。

d	MPCA	MKPCA	MONPP	MKONPP	MLLE	MLE
随机森林 - 准确率（%）						
$d = 5$	81.50	79.90	82.45	77.55	80.40	86.30
$d = 10$	87.35	84.15	88.30	83.10	87.30	89.10
K近邻 - 准确率（%）						
$d = 5$	83.80	79.65	83.55	75.35	77.20	85.10
$d = 10$	90.20	87.10	89.85	82.50	85.90	89.05
支持向量机 - 准确率（%）						
$d = 5$	87.00	84.30	86.35	78.70	81.40	87.75
$d = 10$	92.35	89.65	91.95	86.95	88.60	90.50
极端随机树 - 准确率（%）						
$d = 5$	84.45	81.15	83.90	77.95	81.75	87.10
$d = 10$	90.10	85.80	89.45	84.15	87.15	89.65
CPU 时间（秒）						
$d = 5$	3.95	7.33	3.67	7.81	4.17	3.54
$d = 10$	3.69	7.42	3.74	9.12	5.76	3.67

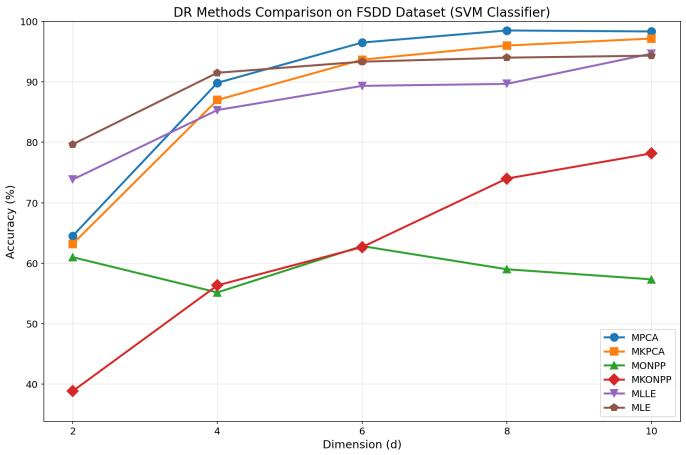

图 8.2：FSDD 数据集上多线性降维方法在目标维数$d = 2$、4、6、8、10 时的分类准确率比较。

在该数据集上，主成分分析是最有效的降维方法，其次是 MKPCA 和 MLE。对于较大的d值，MLLE 也具有竞争力；而基于 NPP 的方法（MONPP 和 MKONPP）仍不太适合这项特定的音频分类任务。

总之，实验表明，适度的多线性降维（$d \leq 10$）足以在广泛的多维数据类型上实现较高的分类准确率；所提出的基于张量的方法，尤其是 MPCA 及其核扩展，在.....之间实现了良好的平衡

判别能力与计算效率。

9. 结论。本文利用 t-积形式体系，通过三阶张量的代数结构，将若干经典的基于矩阵的降维技术扩展至多维场景。该张量框架保留了数据固有的多向相关性，而这些相关性在将高阶数组向量化或展平为矩阵时往往会遭到破坏。

通过将常用的迹优化准则重新表述于张量域中，我们得到了标准线性方法（如主成分分析和正交邻域保持投影）的多维对应方法，以及包括 LLE 和拉普拉斯特征映射在内的非线性流形学习技术。我们还提出了主成分分析和正交邻域保持投影的核化张量变体，使其能够在直接处理张量结构数据的同时捕捉非线性关系。总之，所提出的方法为处理高维多向数据提供了一套统一且灵活的工具，可应用于图像与视频分析、遥感、信号处理和多维数据可视化等领域。

在一组多样化基准数据集上进行的数值实验表明，这些基于张量的方法具有竞争力，且在分类性能方面往往表现更优，同时能将数据维度降低一至两个数量级。具体而言，MPCA 及其核扩展通常能在准确率与计算成本之间实现颇具优势的权衡；而基于流形的方法（MLLE 和 MLE）在某些情形下还可进一步提升分类性能，但代价是更高的复杂度。在所有数据集上，均使用支持向量机、K近邻、随机森林和极端随机树等标准分类器对降维后的表示进行评估，凸显了所提出的张量方法作为监督学习多维数据通用预处理工具的多功能性。

致谢。本项目由沙特阿拉伯吉达阿卜杜勒阿齐兹国王大学科学研究院（DSR）通过编号为 IPP: 1460-665-2025 的资助项目提供资助。作者谨此感谢 DSR 提供的技术与资金支持。

参考文献

[1] H. Avron 和 U. Mor。揭开管状张量代数的神秘面纱。*arXiv*预印本，2025。arXiv:2506.03311。 [2] Mikhail Belkin 和 Partha Niyogi。用于嵌入和聚类的拉普拉斯特征映射与谱技术。载于神经信息处理系统进展，第14卷，第585–591页，2001年。 [3] Mikhail Belkin 和 Partha Niyogi。用于降维和数据表示的拉普拉斯特征映射。《神经计算》，15(6):1373–1396，2003年。 [4] L. Breiman。随机森林。《机器学习》，45(1):5–32，2001年。 [5] C. Cortes 和 V. Vapnik。支持向量网络。《机器学习》，20(3):273–297，1995年。 [6] T. Cover 和 P. Hart。最近邻模式分类。《*IEEE* 信息论汇刊》，13(1):21–27，1967年。 [7] L. De Lathauwer、B. De Moor 和 J. Vandewalle。多线性奇异值分解。《*SIAM*矩阵分析与应用杂志》，21(4):1253–1278，2000。 [8] F. Dufrenois、A. El Ichi 和 K. Jbilou。使用张量-张量积的多线性判别分析。《数学建模杂志》，11(1):83–101，2023年。 [9] M. El Guide、A. El Ichi、K. Jbilou 和 R. Sadaka。基于 t-乘积的张量GMRES和Golub–Kahan方法及其在彩色图像处理中的应用。《线性代数电子期刊》，37:524–543，2021年。 [10] A. El Hachimi、K. Jbilou、A. Ratnani 和 L. Reichel。使用 t-乘积对三阶张量进行谱计算。《应用数值数学》，193:1–21，2023年。 [11] A. El Hachimi、K. Jbilou、A. Ratnani 和 L. Reichel。用于高阶奇异值分解的张量双对角化方法及其应用。《数值线性代数及其应用》，31(2):e2530，2024年。 [12] R. A. Fisher。在分类学问题中使用多重测量。《优生学年刊》，7(2):179–188，1936年。 [13] P. Geurts、D. Ernst 和 L. Wehenkel。极端随机树。《机器学习》，63(1):3–42，2006年。 [14] X. He 和 P. Niyogi。局部性保持投影。载于神经信息处理系统进展，第16卷，2003年。 [15] H. Hotelling。将统计变量复合体分析为主成分。《教育心理学杂志》，24(6):417–441，1933年。 [16] Z. Jackson、C. Souza、J. Flaks、Y. Pan、H. Nicolas 和 A. Thite。Jakobovski/free-spoken-digit-dataset：v1.0.8。Zenodo，2018年。

[17] I. T. Jolliffe。《主成分分析》。Springer，2002。 [18] M. E. Kilmer 和 C. D. Martin。三阶张量的分解策略。《线性代数及其应用》，435(3):641–658，2011。 [19] M. E. Kilmer、C. D. Martin 和 L. Perrone。作为矩阵算子的三阶张量：一个理论与计算框架及其在成像中的应用。《*SIAM*矩阵分析与应用杂志》，34(1):148–172，2013年。 [20] E. Kokiopoulou、J. Chen 和 Y. Saad。降维方法中的迹优化与特征值问题。《数值线性代数及其应用》，18(3):565–602，2011。 [21] E. Kokiopoulou 和 Y. Saad。正交邻域保持投影：一种基于投影的降维技术。《*IEEE*模式分析与机器智能汇刊》，29:2143–2156，2007。 [22] Y. LeCun、C. Cortes 和 C. Burges。MNIST手写数字数据库。在线，1998。 [23] H. Lu、K. N. Plataniotis 和 A. N. Venetsanopoulos。MPCA：张量对象的多线性主成分分析。《*IEEE*神经网络汇刊》，19(1):18–39，2008。 [24] K. R. Muller、S. Mika、G. R¨atsch、K. Tsuda 和 B. Sch¨olkopf。基于核的学习算法简介。《*IEEE*神经网络汇刊》，12:181–201，2001。[25] NASA-JPL AVIRIS。Salinas场景高光谱数据集。Zenodo，记录号15771735，2025。源自“Salinas高光谱数据集”仓库的版本。 [26] T. T. Ngo、M. Bellalij 和 Y. Saad。用于降维的迹比优化问题。《*SIAM*评论》，54(3):545–569，2012。[27] C. R. Rao。在生物分类问题中利用多重测量。《皇家统计学会杂志》，10(2):159–203，1948。 [28] S. T. Roweis 和 L. K. Saul。通过局部线性嵌入实现非线性降维。《科学》，290:2323–2326，2000。 [29] B. Sch¨olkopf、A. Smola 和 K. Muller。作为核特征值问题的非线性成分分析。《神经计算》，10:1299–1319，1998。 [30] J. Shawe-Taylor 和 N. Cristianini。《模式分析的核方法》。剑桥大学出版社，2004。 [31] M. A. O. Vasilescu 和 D. Terzopoulos。图像集合的多线性分析：张量脸。欧洲计算机视觉会议论文集，第447–460页，2002。 [32] K. Wen、Z. Tan、S. Niu 等。CASIA步态数据库：多视角步态识别基准。自动化研究所，中国科学院（CASIA），2005。