But : résoudre $H x_* = b$ $\qquad H \in \mathbb{R}^{n^L \times n^L}$, $\; b \in \mathbb{R}^{n^L}$.

## I - Opérateurs en trains de tenseurs (TTO)

**Déf** : soit $H \in \mathbb{R}^{n_1 \cdots n_L \times n_1 \cdots n_L}$ $\quad (H^{j_1 \cdots j_L}_{i_1 \cdots i_L}$ où $1 \le i_\ell \le n_\ell$, $1 \le j_\ell \le n_\ell$, $\ell = 1, \dots, L)$

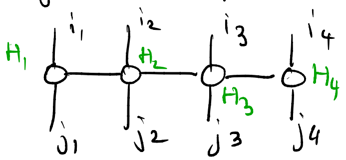
On appelle une décomposition TTO de $H$ un tuple $(H_1, \dots, H_L)$ de tenseurs d'ordre 4 tel que : $H_\ell \in \mathbb{R}^{n_\ell \times n_\ell \times R_{\ell-1} \times R_\ell}$, $\ell = 1, \dots, L$ $\quad (R_0 = R_L = 1)$

et $H^{j_1 \cdots j_L}_{i_1 \cdots i_L} = \underbrace{H_1[i_1, j_1]}_{1 \times R_1} \underbrace{H_2[i_2, j_2]}_{R_1 \times R_2} \cdots \underbrace{H_L[i_L, j_L]}_{R_{L-1} \times 1}$, $1 \le i_\ell, j_\ell \le n_\ell$, $\ell = 1, \dots, L$

$(R_1, \dots, R_{L-1})$ le rang TTO de la représentation.

Représentation diagrammatique :

$(L=4)$ : $H$ =




**Exemple** : $H = A_1 \otimes A_2 \otimes \cdots \otimes A_L$, $\; A_\ell \in \mathbb{R}^{n \times n}$ $\; \ell = 1, \dots, L$

→ $H^{j_1 \cdots j_L}_{i_1 \cdots i_L} = (A_1)_{i_1 j_1} (A_2)_{i_2 j_2} \cdots (A_L)_{i_L j_L}$.

→ $(A_1, \dots, A_L)$ est une représentation TTO de $H$ de rang 1.

Comment obtenir une représentation TTO de $H$ ?

→ la représentation TTO de $H \in \mathbb{R}^{n_1 \cdots n_L \times n_1 \cdots n_L}$ c'est la décomposition TT de $\tilde{H} \in \mathbb{R}^{n_1^2 \times n_2^2 \times \cdots \times n_L^2}$ : $\tilde{H}_{i_1 j_1 i_2 j_2 \cdots i_L j_L} = H^{j_1 \cdots j_L}_{i_1 \cdots i_L}$ pour tout $1 \le i_\ell, j_\ell \le n_\ell$, $\ell = 1, \dots, L$.

→ on a juste besoin d'appliquer la HSVD à $\tilde{H}$.

**Prop** : (algébrique) : soient $G, H \in \mathbb{R}^{n_1 \cdots n_L \times n_1 \cdots n_L}$
et $(G_1, \dots, G_L)$ et $(H_1, \dots, H_L)$ les représentations TTO respectives de $G$ et $H$ $\quad (R_1^G, \dots, R_{L-1}^G)$ $(R_1^H, \dots, R_{L-1}^H)$

① multiplication par un scalaire : $\lambda \in \mathbb{R}$
$\lambda H$ a une représentation TTO $(H_1, H_2, \dots, H_{L-1}, \lambda H_L)$.

② la somme $G+H$ a une représentation TTO $(S_1,\dots,S_L)$ :

$$S_1[i_1,j_1] = \big(G_1[i_1,j_1] \quad H_1[i_1,j_1]\big) \qquad 1\le i_1,j_1\le n_1$$

$$k=2,\dots,L-1 : \; S_k[i_k,j_k] = \begin{pmatrix} G_k[i_k,j_k] & 0 \\ 0 & H_k[i_k,j_k]\end{pmatrix} \qquad 1\le i_k,j_k\le n_k$$

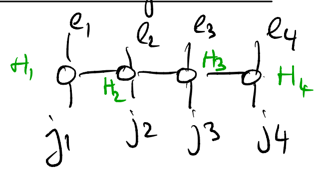
$$S_L[i_L,j_L] = \begin{pmatrix} G_L[i_L,j_L] \\ H_L[i_L,j_L]\end{pmatrix}, \qquad 1\le i_L,j_L\le n_L .$$

③ soit $X\in\mathbb{R}^{n_1\times\cdots\times n_L}$ et $(X_1,\dots,X_L)$ une représentation TT de $X$ de rang $(r_1^X,\dots,r_{L-1}^X)$ alors le produit $HX$ a une représentation TT $(C_1,\dots,C_L)$ donnée par :

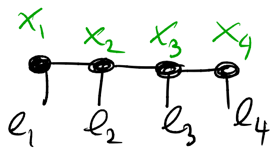
$$k=1,\dots,L : \; C_k[j_k] = \sum_{l_k=1}^{n_k} H_k[j_k,l_k]\otimes X_k[l_k] \in \mathbb{R}^{R^H_{k-1} r^X_{k-1} \times R^H_k r^X_k}.$$

<u>Preuve de ③ par les diagrammes</u> : $(L=4)$

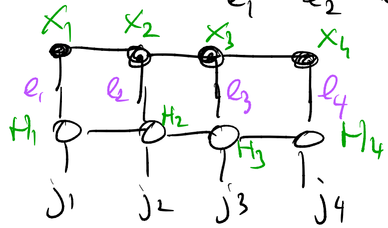
TTO de $H$ :



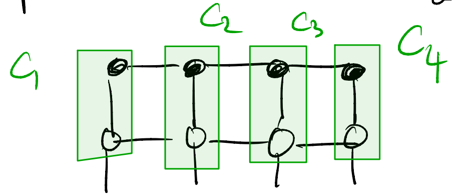
TT de $X$ :



$$(HX)_{j_1j_2j_3j_4} = \sum_{l_1l_2l_3l_4} H^{l_1\cdots l_4}_{j_1\cdots j_4}\, X_{l_1\cdots l_4} \longrightarrow$$



→ pour obtenir TT on définit les cœurs par les encadrements :



$$C_2[i_2] = \sum_{j_2=1}^{n_2} H_2[i_2,j_2]\otimes X_2[j_2] .$$

<u>Exemple</u> : $H = \sum_{k=1}^{L} h_k$ où $h_k = \underbrace{id\otimes\cdots\otimes id}_{k-1}\otimes \underset{k^e \text{ position}}{h} \otimes \underbrace{id\otimes\cdots\otimes id}_{L-k-1}$ $\quad h_k \in \mathbb{R}^{n^L\times n^L}$

$id\in\mathbb{R}^{n\times n}$

$h\in\mathbb{R}^{n\times n}$ ← par exemple le Laplacien discret

→ par la proposition, on a une représentation TTO de $H$ en rang $L$.

→ en fait on peut trouver une représentation de rang 2 : en 1D.

(astuce : $a+b = (a \ 1)\begin{pmatrix}1\\ b\end{pmatrix}$)

en généralisant l'astuce : $H_1[i_1,j_1] = (h_{i_1j_1} \quad \delta_{i_1j_1}) \in \mathbb{R}^{1\times 2}$ $\quad H_L[i_L,j_L] = \begin{pmatrix}\delta_{i_Lj_L}\\ h_{i_Lj_L}\end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2\times 1}$

$$H_k[i_k,j_k] = \begin{pmatrix}\delta_{i_kj_k} & 0\\ h_{i_kj_k} & \delta_{i_kj_k}\end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$$

## II - Résolution de systèmes linéaires

On veut résoudre $Hx_* = b$ (pour $x_* \in \mathbb{R}^{n^L}$), $H \in \mathbb{R}^{n^L\times n^L}$, $b \in \mathbb{R}^{n^L}$.

On suppose que $H$ est symétrique et définie-positive (SPD).

On suppose que l'on a une représentation TTO de $H$ et $b$.

Comme $H$ est SPD, $x_*$ est aussi la solution du pb de minimisation :

$$x_* = \underset{x\in\mathbb{R}^{n^L}}{\arg\min} \left(\frac{1}{2}\langle x, Hx\rangle - \langle x, b\rangle\right) \quad (*)$$

où $\langle , \rangle$ le produit scalaire de $\mathbb{R}^{n^L}$.

On va voir 2 approches :

① adapter les méthodes itératives des matrices pour les TT

② ALS/DMRG : approcher le pb (*) par :

$$x_*^{TT} = \underset{\substack{(X_1,\dots,X_L)\ TT\\ \text{de rang } r}}{\arg\min} \left(\frac{1}{2}\langle (TT X), H(TT X)\rangle - \langle TT X, b\rangle\right)$$

→ pour la résolution, on fixe $X_1,\dots,X_{k-1},X_{k+1},\dots,X_L$, on résout le pb de minimisation pour $X_k$ et on itère.

## ① Adaptation des méthodes itératives

**Observation** : $H = \sum_{k=1}^{L} h_k \in \mathbb{R}^{n^L \times n^L}$, $h_k = id \otimes \cdots \otimes id \otimes h \otimes id \otimes \cdots \otimes id$

$k^e$ position.

↑ Laplacien discret en $L$ dimensions !

→ regardons le conditionnement :

- le spectre de $h_k = \{\lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_n\}$ où $(\lambda_i)$ sont les vp de $h$.
- comme les $h_k$ commutent : le spectre de $H$ est
$$\left\{ \sum_{k=1}^{L} \lambda_{i_k} \ , \ \begin{array}{c} 1 \leq i_k \leq n \\ k = 1, \ldots, L \end{array} \right\}.$$
- $\mathrm{cond}_2 H = \dfrac{\max_{\Lambda \in Sp(H)} \Lambda}{\min_{\Lambda \in Sp(H)} \Lambda} = \dfrac{L \lambda_n}{L \lambda_1} = \dfrac{\lambda_n}{\lambda_1} = \mathrm{cond}_2 h$.

**Rappel** : le gradient à pas optimal pour résoudre $Ax = b$. ($A$ SPD)

**Algo** : input : $A, b, \varepsilon$

$x = 0$

$p = b$ (gradient $p = b - Ax$).

while $\|p\| > \varepsilon$

$\alpha = \dfrac{\|p\|^2}{\langle x, Ax \rangle}$

$x \leftarrow x + \alpha p$

$p \leftarrow p - \alpha A p$.

end

return $x$.

Pour adapter l'algo itératif, il suffit de voir si chaque étape est efficace en TT :

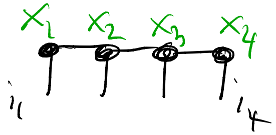
① opérations algébriques (comme, produit par un scalaire, produit matrice vecteur)

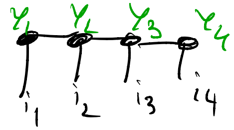
OK

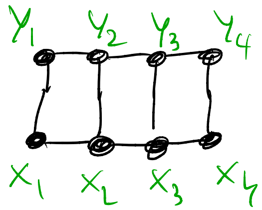
② produit scalaire : $\langle x, y\rangle$ avec $\begin{cases} x \text{ donné par un TT } (X_1,\dots,X_L) \text{ de rang } (r_1^X,\dots,r_{L-1}^X) \\ y \text{ ——— } (Y_1,\dots,Y_L) \text{ de rang } (r_1^Y,\dots,r_{L-1}^Y). \end{cases}$

$$\langle x, y\rangle = \sum_{i_1\dots i_L} x_{i_1\dots i_L}\, y_{i_1\dots i_L}$$

Représentation diagrammatique : (L=4)

$x =$ 

$y =$ 

$\langle x, y\rangle =$ 

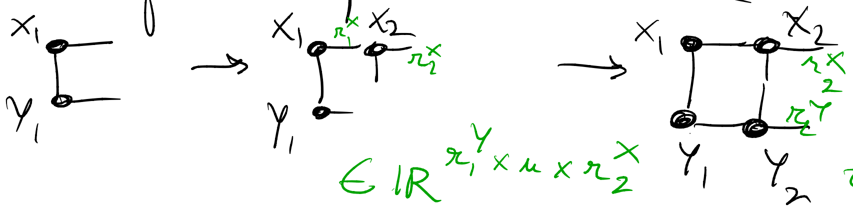
→ mauvaise manière de faire le produit scalaire : calculer pour $\ell = 1,\dots,L$

$$\left(\sum_{i_\ell=1}^{n_\ell} X_\ell[i_\ell]^{\alpha_\ell}_{\alpha_{\ell-1}}\; Y_\ell[i_\ell]^{\beta_\ell}_{\beta_{\ell-1}}\right)^{\alpha_\ell\beta_\ell}_{\alpha_{\ell-1}\beta_{\ell-1}} \in \mathbb{R}^{r^X_{\ell-1}r^Y_{\ell-1}\times r^X_\ell r^Y_\ell}.$$

$O(r^4)$

$r \sim 10^3/10^4$!

→ bonne manière de faire le produit scalaire

· assembler 

$\in \mathbb{R}^{r_1^Y \times n \times r_2^X}$ $\quad \in \mathbb{R}^{r_2^X \times r_2^Y}$

→ calcul coût en $O(r^2)$. $\quad r = \max(r_\ell^X, r_\ell^Y)$.

③ Compressions de trains de tenseurs (voir DM) : $\underset{\text{coût}}{O(r^3)}$ $\quad r$ = rang TT de $z$ dans l'algo itératif.

## ② ALS/DMRG

**ALS** : alternating linear scheme (Holtz, Rohwedda, Schneider 2012).
**DMRG** : Density Matrix Renormalisation Group (White 92)

Au lieu de résoudre

$$x_* = \underset{x \in \mathbb{R}^{n^L}}{\operatorname{argmin}} \left( \frac{1}{2} \langle x, Hx \rangle - \langle x, b \rangle \right)$$

on résout

$$x^{TT} = \underset{(X_1, \dots, X_L) \in \mathbb{R}^{n \times 1 \times r_1} \times \mathbb{R}^{n \times r_1 \times r_2} \times \dots \times \mathbb{R}^{n \times r_{L-1} \times 1}}{\operatorname{argmin}} \left( \frac{1}{2} \langle TT(X_1, \dots, X_L) H, TT(X_1, \dots, X_L) \rangle - \langle TT(X_1, \dots, X_L), b \rangle \right)$$

où

$$\begin{aligned} TT : \mathbb{R}^{n \times 1 \times r_1} \times \mathbb{R}^{n \times r_1 \times r_2} \times \dots \times \mathbb{R}^{n \times r_{L-1} \times 1} &\longrightarrow \mathbb{R}^{n^L} \\ (X_1, X_2, \dots, X_L) &\longmapsto (X_1[i_1] \cdots X_L[i_L])_{1 \leq i_k \leq n} \end{aligned}$$

A chaque étape :
- on fixe tous les tenseurs sauf le $k^e$ ($X_k$)
- on résout le pb de minimisation pour $X_k$
- on itère jusqu'à convergence.

<u>Mise en pratique</u> :

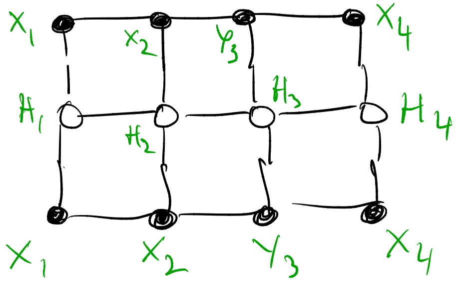
- à l'étape $k$ : on résout

$$X_k = \underset{Y_k \in \mathbb{R}^{n \times r_{k-1} \times r_k}}{\operatorname{argmin}} \left( \frac{1}{2} \overbrace{\langle TT(X_1, \dots, X_{k-1}, Y_k, X_{k+1}, \dots, X_L), H\,TT(X_1, \dots, X_{k-1}, Y_k, X_{k+1}, \dots, X_L) \rangle}^{\alpha} - \langle TT(X_1, \dots, X_{k-1}, Y_k, X_{k+1}, \dots, X_L), b \rangle \right)$$

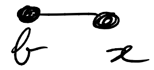
→ Euler-Lagrange eq : $H_{\mathrm{eff},k} X_k = b_k$.

Sous forme diagrammatique :

$(k=3, L=4)$ $\quad x =$

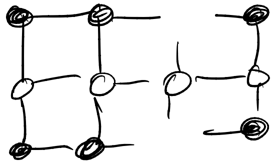



$F(x) = \langle b, x \rangle \qquad \nabla F = b.$

$F(x) =$ 

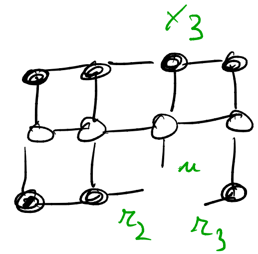

$\nabla F =$ 


$X_3 \in \mathbb{R}^{n \times r_2 \times r_3}$

$H_{eff,3} =$ 

$\mathbb{R}^{n r_2 r_3 \times n r_2 r_3}$

$\sim O(r^4 n^2)$

$H_{eff,3} X_3 =$ 


$b_3 =$