Савостьянов Дмитрий Валериевич

Быстрая полилинейная аппроксимация матриц и интегральные уравнения

01.01.07 — Вычислительная математика

ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Институте вычислительной математики РАН

Научный руководитель:

член-корреспондент РАН, профессор Е. Е. Тыртышников

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор А. Б. Самохин, кандидат физико-математических наук И. Е. Капорин

Ведущая организация:

Пензенский государственный университет

Защита состоится « <u>22</u> » заседании диссертационного со тельной математики РАН по ад	вета Д 002.04		 птуте вычисли-
С диссертацией можно ознаг лительной математики РАН.	комиться в биб	блиотеке Ин	ститута вычис-
Автореферат разослан « <u>17</u> » _	ноября	_ 200 6 г.	

Овщая характеристика равоты

Актуальность работы

Диссертация посвящена построению быстрых методов приближенного умножения на плотные неструктурированные матрицы, возникающие при численном решении интегральных уравнений. Сложность заключается в том, что возникающие плотные матрицы обычно слишком большие, и их нельзя разместить в оперативной памяти компьютера или на жестком диске, а часто и вычислить за разумное время. Снижение размерности возникающих систем за счет выбора хорошей адаптивной сетки и аккуратного способа построения дискретизации является теоретически и практически сложной проблемой, решение которой требует глубокого изучения свойств исходной задачи. Зачастую в инженерных расчетах детальный анализ задачи не может быть произведен (в силу нехватки времени или информации о свойствах задачи) и дискретизация происходит на несложной, но чрезмерно мелкой сетке с использованием простых базисных функций. Для сохранения хорошей точности моделирования приходится рассматривать и решать линейные системы больших и очень больших размеров. При этом в них содержится много избыточной информации, которую можно без большого ущерба для точности отбросить, значительно снизив число параметров, описывающих систему. Автоматическое обнаружение специфики исходных задач и получение малопараметрической аппроксимации заданных линейных систем — интересная и практически важная задача.

В работах Е. Е. Тыртышникова было показано, что с алгебраической точки зрения многие быстрые подходы к решению интегральных уравнений (мультипольные разложения, кластеризация граничных элементов, интерполяция на регулярную сетку, локальные волны) явно или неявно базируются на одном и том же наблюдении: для весьма широкого класса ядер матрицы, возникающие при дискретизации, могут быть разбиты на блоки, большинство из которых близки к матрицам малого ранга. В предложенном им же методе неполной крестовой аппроксимации для каждого блока строится билинейная аппроксимация $a_{ij} \approx \tilde{a}_{ij} = \sum_{\alpha=1}^r u_{i\alpha} v_{j\alpha}$, где ранг r мал по сравнению с размерами блока. В результате для матрицы A размера $N \times N$ строится аппроксимация \tilde{A} , такая что $\|A - \tilde{A}\|_F \leqslant \varepsilon \|A\|_F$, и хранение \tilde{A} и умножение на нее требует $\mathcal{O}(N\log^a N\log^b \varepsilon^{-1})$ ($\alpha > 0$, b > 0) ячеек памяти и арифметических действий соответственно.

При решении трехмерных объемных интегральных уравнений на тензорных сетках элементы матрицы A определяются шестью индексами $a_{ij}=a_{i_1i_2i_3j_1j_2j_3}$ и могут быть аппроксимированы в виде mpuлинейной суммы $a_{i_1i_2i_3j_1j_2j_3}\approx \tilde{a}_{(i_1j_1)(i_2j_2)(i_3j_3)}=\sum_{\alpha=1}^r u_{(i_1j_1)\alpha}v_{(i_2j_2)\alpha}w_{(i_3j_3)\alpha}$. Матрица при этом представляется суммой прямых (кронекеровых) произведений

 $A \approx \tilde{A} = \sum_{\alpha=1}^{r} U_{\alpha} \times V_{\alpha} \times W_{\alpha}$. Как метод эффективного представления данных трилинейные аппроксимации дают *сверхлинейное* сжатие, их использование при решении линейных систем приводит к алгоритмам *сублинейной* сложности, что значительно расширяет возможности применения объемных интегральных уравнений при решении трехмерных задач.

Существующие подходы к построению трилинейного разложения не позволяют оперировать большими объемами данных, характерными для интегральных уравнений. Поэтому развитие быстрого метода вычисления трилинейной аппроксимации — актуальная задача. Кроме интегральных уравнений, трилинейная аппроксимация применяется также при обработке результатов эксперимента, сигналов, статистических данных, больших массивов графической и видео-информации и в других задачах.

Исследования, отраженные в диссертации, поддерживались грантами РФФИ №02-01-00590-а, 04-07-90336-в, 05-01-00721-а и 06-01-08052-офи.

Цели работы

Основная цель работы состоит в развитии эффективного метода неполной крестовой аппроксимации для тензоров (трехмерных массивов). Перед автором были поставлены три задачи:

- 1. выяснить, возможно ли построение крестовой аппроксимации для тензоров на основе неполной информации об их элементах;
- 2. предложить быстрый алгоритм малопараметрической аппроксимации тензоров по *небольшому числу* его элементов;
- 3. рассмотреть применение этого алгоритма к модельным задачам, используя малопараметрическое представление не только матрицы, но и векторов итерационного процесса.

Методы исследования

Предлагаемые в данной работе алгоритмы малопараметрического описания линейных систем основаны на дискретном аналоге метода разделения переменных. Билинейная аппроксимация — это дискретный аналог расщепления источников и приемников, трилинейная аппроксимация — аналог расщепления по физическим координатам. Отметим, что при построении быстрого алгоритма трехмерной крестовой аппроксимации основное внимание уделено аппроксимации массива $[a_{ijk}]$ в виде разложения $[a_{ijk}]$ в виде $[a_{ij$

$$a_{ijk} \approx \tilde{a}_{ijk} = \sum_{i'=1}^{r_1} \sum_{j'=1}^{r_2} \sum_{k'=1}^{r_3} g_{i'j'k'} u_{ii'} v_{jj'} w_{kk'}$$

с как можно меньшими значениями *модовых рангов* r_1, r_2, r_3 . При этом задача поиска трилинейного разложения для исходного массива $[a_{ijk}]$ сводится к поиску трилинейного разложения для ядра $[g_{i'j'k'}]$. Поскольку размеры ядра много меньше размеров исходного массива, для решения этой задачи можно применить известные алгоритмы поиска трилинейного разложения, такие как супер-обобщенное разложение Шура, метод переменных направлений или метод Гаусса-Ньютона.

Научная новизна работы

Предлагаемый в работе алгоритм трехмерной крестовой аппроксимации (алгоритм 3) является новым и принадлежит автору. Автору не известны другие алгоритмы решения той же задачи, обладающие сравнимой или более низкой асимптотикой сложности. Теоремы, дающие обоснование возможности построения данного метода и корректности его составных частей, являются новыми и принадлежат автору, за исключением теоремы 1, полученной в соавторстве с И. В. Оселедцем и Е. Е. Тыртышниковым. Метод билинейной аппроксимации матрицы (алгоритм 1) является одной из возможных модификаций метода неполной крестовой аппроксимации, предложенного Е. Е. Тыртышниковым. Алгоритм поиска подматрицы наибольшего объема, то есть модуля детерминанта (алгоритм 4) предложен С. А. Горейновым. Алгоритмы построения тензорных предобусловливателей (алгоритмы 5 и 6) являются новыми и получены в соавторстве с И. В. Оселедцем. Все прочие результаты являются новыми и принадлежат автору.

Постановка задачи принадлежит Е. Е. Тыртышникову, результаты данной работы следует рассматривать как обобщение для трехмерных тензоров матричных техник, предложенных им же.

Защищаемые положения

На защиту выносятся следующие результаты работы:

- 1. Теорема существования трехмерной крестовой аппроксимации, которая строится по небольшому числу столбцов, строк и распорок исходного массива.
- 2. Алгоритм трехмерной неполной крестовой аппроксимации. В качестве входного параметра алгоритм использует процедуру вычисления любого элемента массива $[a_{ijk}]$, однако этот массив не вычисляется и не хранится полностью. Для построения аппроксимации $[a_{ijk}]$ в виде разложения Таккера достаточно вычислить порядка $\mathcal{O}(nr^a)$

 $(r=\max(r_1,r_2,r_3),\ 1\leqslant \alpha\leqslant 2)$ элементов массива и совершить порядка $\mathcal{O}(nr^3)$ дополнительных действий. Алгоритм следует основным идеям, используемым при построении билинейной аппроксимации в методе неполной крестовой аппроксимации для матриц, и сохраняет главные достоинства этого метода — надежность, высокую эффективность, гибкость в применении к различным типам задач и простоту в практическом использовании.

3. Результаты применения методов полилинейной аппроксимации к модельным и практическим задачам. Тестирование алгоритма трехмерной неполной крестовой аппроксимации на модельном объемном интегральном уравнении и демонстрация сублинейной сложности возникающего метода.

Практическая значимость работы

Методы полилинейной аппроксимации могут быть использованы при численном решении интегральных уравнений, заданных на контурах, поверхностях или в конечном объеме. Они особенно эффективны в случае, когда размерность возникающей линейной системы N слишком велика, чтобы матрицу можно было за разумное время вычислить полностью и разместить в оперативной памяти или на жестком диске. Использование билинейных аппроксимаций в большинстве случаев позволяет снизить сложность вычисления матрицы и умножения на нее до $\mathcal{O}(N\log^a N\log^b \varepsilon^{-1})$ с некоторыми $\alpha>0,\ b>0$. Использование трилинейных аппроксимаций при решении объемных интегральных уравнений на тензорных сетках позволяет снизить сложность этих операций до $\mathcal{O}(N^{2/3}\log^a N\log^b \varepsilon^{-1})$, то есть до величины асимптотически меньшей числа неизвестных.

Необходимо заметить, что методы би— и трилилинейной аппроксимации позволяют быстро вычислять аппроксимацию матрицы и умножать ее на вектор. Для их успешного применения на практике, как правило, необходимо предобусловливание, то есть приближение обратной матрицы с такими же ограничениями на память и объем вычислений. В работе предлагается способ построения супероптимального тензорного предобусловливателя малого ранга, отвечающего этим требованиям. Для решения трехмерных объемных интегральных уравнений с сублинейной асимптотикой сложности необходимо кроме того использовать в итерационном процессе структурированные векторы. Свойства сходимости возникающих итерационных процессов теоретически пока не изучены, однако в численном эксперименте с модельным уравнением демонстрируется их сходимость и сублинейная сложность.

Хотя в диссертации обсуждается только применение трилинейной аппроксимации для решения интегральных уравнений, трилинейное разложение является вычислительным ядром многих других задач, возникая при обработке данных эксперимента в физике, в задаче о ядерном магнитном резонансе в химии, при обработке сигнала в инженерной практике, слепом разделении сигналов в МІМО (multiple-input multiple-output) системах передачи информации, томографии мозга и внутренних органов в медицине, обработке статистического материала в факторном анализе, социологии и экономике, в мультимедийных приложениях для обработки больших массивов графической и видео-информации, в задачах идентификации голоса или образа, в теории сложности при поиске оптимального алгоритма. Во всех этих задачах для эффективного приближенного представления больших плотных массивов данных могут применяться предложенные в диссертации алгоритмы.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на различных конференциях, в т.ч. на международной конференции «Матричные методы и операторные уравнения» (Москва, ИВМ РАН, 2005), на «Ломоносовских чтениях» (Москва, ВМиК МГУ, 2006), на третьей международной конференции «Математические идеи П. Л. Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания» (Обнинск, ИАТЭ, 2006), на 13-ой конференции ILAS (Амстердам, 2006), на «Тихоновских чтениях» (Москва, ВМиК МГУ, 2006); а также на семинаре «Вычислительные и информационные технологии в математике» (научн. рук. ак. В. В. Воеводин, проф. В. И. Лебедев, чл.-корр. Е. Е. Тыртышников, ИВМ РАН).

Публикации

Основные результаты диссертации отражены в публикациях [1-6].

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав основного текста и заключения. Объем диссертации — 143 страницы. Библиография включает в себя 81 наименование. Диссертация содержит 41 рисунок и 10 таблиц.

Краткое содержание равоты

Введение. Диссертация посвящена построению быстрых методов приближенного умножения на большие плотные неструктурированные матрицы, возникающие при численном решении интегральных уравнений. Называя метод «быстрым», обычно имеют в виду, что его сложность составляет $o(N^2)$, где N — размерность линейной системы; в последнее время этот термин относят к алгоритмам почти линейной по N сложности ($\mathcal{O}(N\log^a N)$, a>0). Для приближенных методов отдельно выделяют зависимость сложности от параметра точности ε , обычно тоже логарифмическую, указывая $\mathcal{O}(N\log^a N\log^b \varepsilon^{-1})$, a>0, b>0. При этом для сохранения аппроксимации параметр ε выбирается порядка точности дискретизации.

Основным результатом нашей работы является развитие метода cyблинейной сложности, т.е. o(N). Аналогичные алгоритмы с такой асимптотикой сложности нам не известны.

Естественно, возможность построения быстрого метода основана в первую очередь на обнаружении и использовании некоторой особенности возникающих плотных матриц. В основном обсуждается два вида специфики.

Первый вид связан с наличием у ядра трансляционной симметрии. При использовании равномерных сеток это приводит к возникновению в матрице теплицевых и ганкелевых структур. При этом затраты памяти снижаются до $\mathcal{O}(N)$, а сложность получаемых методов составляет $\mathcal{O}(N\log N)$. Эти методы сейчас достаточно хорошо изучены и в данной диссертации рассматриваются лишь для сравнения.

Второй вид специфики связан с выделением в плотной матрице бло- $\kappa o s$, для которых может быть построено малоранговое приближение. Эта матричная трактовка была предложена Е. Е. Тыртышниковым в 1993 г. для таких известных методов построения быстрых алгоритмов, как мультипольные разложения (В. Рохлин, L. Greengard, С. Anderson), кластеризация граничных элементов (M. Hackbusch), интерполяция на регулярную (иерархическую) сетку (Ю. М. Нечепуренко, А. Brandt), использование локальных волн (wavelets, среди авторов — R. Coifman, B. Рохлин, С. Schwab). Эти методы развивались, однако, вовсе не на основе наблюдения за неявной структурой возникающей матрицы. Первые три из них являются вообще говоря безматричными, то есть исходная матрица в явном виде не участвует в операции умножения. Они формулируются на аналитическом языке для конкретного ядра интегрального оператора $(\log |x-y|, 1/|x-y|, e^{i\kappa|x-y|}/|x-y|)$. При этом действие интегрального оператора рассматривается в терминах взаимодействия источников и приемников. Для каждого источника (или группы источников) определяются

зоны дальнодействия, в которой потенциал взаимодействия не содержит сингулярности, и интегральный оператор может быть приближен суммой нескольких операторов с разделенными переменными на основе какоголибо разложения ядра. Погрешность разложения при этом определяет точность аппроксимации. Дискретный аналог зон дальнодействия — блоки матрицы, отвечающие геометрически хорошо отделенным друг от друга элементам сеток. Они допускают малоранговое приближение, что снижает затраты на хранение и умножение на матрицу в целом. В 1995 году Е. Е. Тыртышниковым было показано, что при определенных предположениях для аппроксимации матрицы достаточно вычислить лишь небольшое число элементов каждого блока. В 1998 году для решения этой задачи им же предложен метод неполной крестовой аппроксимации — конструктивный алгоритм с почти линейной сложностью. Матрица присутствует в этом алгоритме лишь виртуально и задана процедурой вычисления любого элемента; полностью она никогда не вычисляется и не хранится.

Основной результат нашей работы основан на третьем, не описанном выше, виде специфики плотных матриц. Речь идет о представлении многоуровневой матрицы, порожденной интегральным уравнением, в виде суммы тензорных (прямых, кронекеровых) произведений. Эта операция является дискретным аналогом расщепления ядра по геометрическим координатам. При этом для трехуровневых матриц при определенных предположениях касательно ядра (в работах Е. Е. Тыртышникова показано, что им удовлетворяют все основные типы интегральных уравнений) достигается сверхлинейное сжатие данных, а возникающие методы решения имеют сложность, асимптотически меньшую числа неизвестных, то есть o(N). Предлагаемый в нашей работе алгоритм вычисления тензорных аппроксимаций может считаться развитием (нетривиальным) метода крестовой аппроксимации для матриц и следует основным его идеям: в частности, рассматривает матрицу системы как виртуальный объект и строит аппроксимацию на основе лишь небольшого числа элементов. За счет этого сверхлинейной скоростью обладают как этап решения системы, так и этап построения аппроксимации.

Первая глава диссертации посвящена крестовой аппроксимации матриц и является своеобразной предысторией метода крестовой аппроксимации для тензоров. В разделе 1.1 приводится алгоритм построения крестовой (билинейной) аппроксимации блоков матрицы на основе информации о малой части его элементов. Алгоритм основан на последовательном вычислении строк и столбцов с выбором ведущего элемента в духе метода определения ранга с помощью разложения Гаусса и с контролем точности по случайному множеству элементов. Приводится способ эффективного вычисления критерия остановки, не требующий проверки точности

аппроксимации для всех элементов блока. Определенная эмпирика, присущая этому критерию, на практике приводит к тому, что полученная аппроксимация блока имеет несколько завышенный ранг. В том же разделе рассматриваются алгоритмы снижения ранга вычисленной аппроксимации, которые мы называем методами «дожимания» или переаппроксимации. Раздел завершают численные эксперименты, демонстрирующие выгоду от применения дожимателей. В разделе 1.2 предложена параллельная версия метода. Поскольку после вычисления матричного разбиения все блоки могут быть вычислены и аппроксимированы независимо, задача состоит лишь в сбалансированном их распределении по процессорам. Предложена оценочная функция сложности и методика распределения блоков по процессорам, позволяющая достичь хорошего баланса нагрузки по процессорам при генерации матрицы и решении системы.

Вторая глава посвящена методу трехмерной крестовой аппроксимации. В разделе 2.1 содержится введение в задачу, показана выгода от применения тензорных аппроксимаций, объяснена связь тензорного разложения матриц с каноническим разложением массива, дан краткий обзор существующих методов построения трилинейного разложения, указаны их основные достоинства, ограничения и недостатки. Определено разложение Таккера, объяснена его связь с задачей трилинейной аппроксимации, приведен классический алгоритм его вычисления на основе сингулярного разложения. Поставлена задача о быстром вычислении разложения Таккера.

Содержанием раздела 2.2 является теорема о существовании разложения Таккера, в котором факторы U,V и W состоят из элементов массива.

Теорема 1. Пусть массив $\mathcal{A} = [\mathfrak{a}_{\mathfrak{i}\mathfrak{j}k}]$ может быть с точностью ε приближен разложением Таккера

$$a_{ijk} = \sum_{i'=1}^{r_1} \sum_{j'=1}^{r_2} \sum_{k'=1}^{r_3} g_{i'j'k'} u_{ii'} v_{jj'} w_{kk'} + \epsilon_{ijk}, \qquad |\epsilon_{ijk}| \leqslant \epsilon.$$

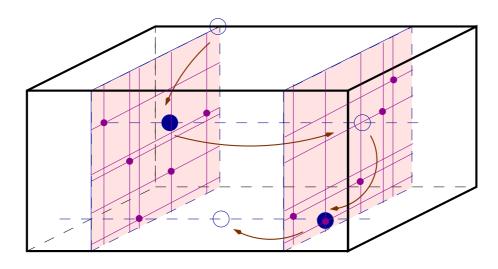
Тогда существует аппроксимация того же вида, в которой факторы U, V, W состоят соответственно из r_1 столбцов, r_2 строк и r_3 распорок массива \mathcal{A} , а для вычисления ядра требуются лишь элементы факторов. Погрешность такой аппроксимации не превосходит

$$\epsilon' \leqslant ((r_1+1) + r_1(r_2+1) + r_1r_2(r_3+1)) \ \epsilon.$$

Этот факт дает обоснование адаптивному методу построения разложения Таккера, последовательно наращивающему опорные базисы U, V, W за счет вычисления новых строк, столбцов и распорок массива.

В разделе 2.3 дано описание алгоритма трехмерной крестовой аппроксимации. В простейшем виде он реализуется применением крестового метода к матрице $A^{(3)} = [\mathfrak{a}_{(ij)k}]$ (развертке массива вдоль третьего индекса)

Рис. 1. Схема работы трехмерного крестового метода



и затем рекуррентному применению его для эффективного вычисления срезок $A_k = [\mathfrak{a}_{ij}^k]$ при заданных k (см. рис. 1). Затем рассматриваются более эффективные версии алгоритма, использующие единые базисы строк и столбцов для представления всех вычисленных A_k . Предлагаются методы приближенной, но более быстрой реализации отдельных компонент алгоритма. В заключение раздела приведена оценка сложности полученного метода.

Раздел 2.4 посвящен деталям, которые необходимы для эффективной реализации трехмерного крестового метода. Обсуждается, как с почти линейной сложностью найти подматрицу прямоугольной матрицы, имеющую максимальный, или близкий к нему, объем. Вводится понятие domunupyowed подматрицы — так называется подматрица A_{\square} прямоугольной матрицы A, если все элементы AA_{\square}^{-1} по модулю не превосходят единицы. Обсуждается связь подматрицы максимального объема и доминирующей подматрицы. Максимальный элемент всей матрицы оценивается через максимальный элемент в ее подматрице максимального объема.

Теорема 2. Пусть B — подматрица максимального объема среди всех подматриц размера $r \times r$ в A, тогда $\max(B) \geqslant \max(A)/(2r^2+r)$, где $\max(A)$ — максимальное значение модуля элемента матрицы A. Если при этом матрица A имеет ранг r, то $\max(B) \geqslant \max(A)/r^2$.

На основе этой теоремы эффективно решается задача определения максимального (или близкого к нему) элемента в малоранговой матрице, заданной произведением факторов.

Обсуждается технология добавления векторов в опорный базис, основанная на применении реортогонализации. Показано, как при этом эффективно пересчитывать доминирующую подматрицу.

- 1. все элементы в матрице ${\bf U}{\bf U}_{\boxdot}^{-1}$ по модулю не превосходят $r_{\mathfrak p}+1,$
- 2. объем подматрицы U_{\Box} связан с максимально возможным среди всех подматриц такого размера неравенством

$$|\det \mathbf{U}_{\square}| \geqslant |\det \mathbf{U}_{\max}|/(r+r_{\mathfrak{p}})^{(r+r_{\mathfrak{p}})/2}.$$

Указана необходимость контроля над точностью аппроксимации на основе дополнительного, например, случайного, набора элементов. Предложена стратегия построения «нулевого приближения» к очередной вычисляемой срезке, значительно ускоряющая сходимость алгоритма после совершения нескольких первых итераций.

Теорема 4. Пусть для матрицы A размера $n_1 \times n_2$ существует малоранговое приближение вида

$$A = UBV^{T} + E$$
, $||E||_{F} = \varepsilon$,

где унитарные факторы U и V имеют размеры $n_1 \times r_1$ и $n_2 \times r_2$ соответственно. Рассмотрим «нулевое приближение»

$$A_0 = UB_0V^\top, \qquad B_0 = U_\square^{-1}A_\square V_\square^{-1},$$

где U_\square и V_\square — доминирующие подматрицы в U и V, а A_\square — подматрица, стоящая в A на пересечении строк, отвечающих положению U_\square , и столбцов, отвечающих положению V_\square . Точность такой аппроксимации

$$||A - A_0||_F \leqslant \sqrt{n_1 n_2 r_1 r_2 + 1} \varepsilon.$$

Раздел 2.5 содержит численные эксперименты по сжатию модельных числовых массивов, подобных ядрам типовых интегральных операторов. Численные эксперименты проводятся с апостериорной проверкой, на основе которой продемонстрирована надежность метода. Приведены результаты сжатия данных, показана почти линейная скорость работы.

В разделе 2.6 приведено более систематическое экспериментальное исследование зависимости асимптотики полученного алгоритма от размера

массива, от требуемой точности и от вида ядра. Показано, что практическая скорость работы метода полностью согласуется с теоретической оценкой, а в некоторых случаях оказывается даже лучше нее.

Третья глава содержит различные приложения описанных методов аппроксимации матриц для быстрого решения интегральных уравнений. Раздел 3.1 посвящен применению мозаично-скелетонного метода для решения задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца на гладком контуре. В нем сформулированы задачи и приведены классические определения и факты из теории потенциала. Затем обсуждается метод дискретизации и способ вычисления матричных элементов. Эксперименты, проведенные с использованием параллельной вычислительной платформы, демонстрируют хорошее ускорение метода, а также значимую выгоду от применения алгоритмов переаппроксимации. Раздел 3.2 посвящен задаче гидроакустики мелкого моря, сформулированной в терминах теории потенциала. Применение для ее решения малоранговых аппроксимации позволило снизить время генерации матрицы и полного решения задачи от дней до минут. В разделе 3.3 приведены эксперименты по применению метода тензорных аппроксимаций для решения простейшего объемного интегрального уравнения. Результаты сжатия матрицы, отвечающей дискретизации на сетке $m \times m \times m$ показаны в таблице 1.

Таблица 1. Сжатие матрицы модельной задачи. Точность $\, \varepsilon = 10^{-5} \,$

Размер сетки т	16	32	64	128	256	512
Полная матрица	128MB	8GB	512GB	32TB	2PB	128PB
Тензорная аппр.	74KB	320KB	1.1MB	6MB	25MB	114MB
Ранг	11	13	15	16	17	19
Время аппр.	0.6 c.	1.5 c.	8.4 c.	54 c.	5.5 мин.	30 мин.

Для построения эффективного итерационного метода предлагается использовать структурированные векторы, аппроксимируя их в формате разложения Таккера. Предлагается способ построения тензорного предобусловливателя заданного ранга. Демонстрируется сходимость полученного алгоритма и высокая скорость его работы. Однако исследование концепции структурированных векторов и полученных на ее основе вариантов итерационных методов, равно как и техники предобусловливания, конечно же, является предметом отдельной и весьма обширной работы.

В четвертой главе описывается одна из особенно интересных для нас практических задач, сводимых к решению интегрального уравнения. Речь идет о распространении электромагнитной волны в неоднородной трех-

мерной среде с затуханием. Для того, чтобы избежать сложностей с правильным выбором неотражающего краевого условия, задача формулируется в виде объемного интегрального уравнения. В силу специального вида его ядра, на равномерной сетке матрица задачи является суммой трехуровневой теплицевой и трехуровневой теплиц-ганкель-теплицевой матрицы. Использование этих структур позволило сократить затраты памяти на хранение этой плотной матрицы с \mathfrak{n}^6 до $\mathcal{O}(\mathfrak{n}^3)$ элементов, но тем не менее, оперативная память персональной станции позволяет использовать только сетки размером до $64 \times 64 \times 64$. Для практических вычислений этого было недостаточно, так как в принципиально важном случае — приближении источника к зоне неоднородности — возникающие дискретизационные шумы не позволяли достичь требуемого разрешения. Размер сетки был увеличен за счет использования многопроцессорных систем. Предложен алгоритм распределенного хранения и умножения на теплицеву матрицу, учитывающий ее структуру и особенность кластерных систем. Его применение позволило производить расчет на сетках вплоть до $256 \times 256 \times 256$, используя 256 процессоров. Результаты этого расчета были использованы для решения обратной задачи, то есть зондирования неоднородности, и привели к хорошему качеству восстановления искомых параметров.

Используя метод трехмерной крестовой аппроксимации, мы можем эффективно решить ту же задачу на одном процессоре, причем в том числе и на неравномерной сетке. Эксперименты демонстрируют хорошее результаты сжатия матрицы обсуждаемой задачи, что служит основанием для развития еще более эффективных методов ее решения.

Основные результаты равоты

- 1. Получена теорема, обосновывающая возможность поиска трилинейной аппроксимации по неполной информации об исходном массиве.
- 2. Предложен быстрый алгоритм для нахождения аппроксимации трехмерного массива (тензора) на основе информации о небольшом числе его элементов. Основное внимание при этом было уделено разработке метода, приближающего заданный трехмерный массив в виде разложения Таккера. Алгоритм реализован набором процедур на языке фортран.
- 3. Алгоритм протестирован на модельных и практических задачах и продемонстрировал свою надежность, высокую эффективность, гибкость в применении к различным типам задач и простоту в практическом использовании.

Пувликации по теме диссертации

- 1. Оселедец И. В., Савостьянов Д. В. Трехмерный аналог алгоритма крестовой аппроксимации и его эффективная реализация $/\!\!/$ В сборнике «Матричные методы и технологии решения больших задач» под ред. Е. Е. Тыртышникова М.: ИВМ РАН, 2005. С. 65–100.
- 2. Оселедец И. В., Савостьянов Д. В. Тензорные ранги сверхбольших трехмерных матриц // В сборнике «Матричные методы и технологии решения больших задач» под ред. Е. Е. Тыртышникова М.: ИВМ РАН, 2005. С. 147–174.
- 3. Оселедец И. В., Савостьянов Д. В. Минимизационные методы аппроксимации тензоров и их сравнение *∥* ЖВМиМФ. 2006. Т. 46, №10. С. 1641-1650.
- 4. Савостьянов Д. В., Тыртышников Е. Е. Применение многоуровневых матриц специального вида для решения прямых и обратных задач электродинамики // Вычислительные методы и программирование. 2006. Т. 7. С. 1–16.
- 5. Савостьянов Д. В. Параллельная реализация метода решения объемного интегрального уравнения электродинамики на основе многоуровневых теплицевых матриц // В сборнике «Методы и технологии решения больших задач» под ред. В. И. Агошкова и Е. Е. Тыртышникова М.: ИВМ РАН. 2004. С. 139–170.
- 6. Оселедец И. В., Савостьянов Д. В., Ставцев С. Л. Применение нелинейных методов аппроксимации для быстрого решения задачи распространения звука в мелком море // В сборнике «Методы и технологии решения больших задач» под ред. В. И. Агошкова и Е. Е. Тыртышникова М.: ИВМ РАН. 2004. С. 139–170.

Изд. лиц. ИД №03991 от 12.02.2001. Компьютерный набор. Подписано в печать 15.11.2006. Усл. печ. л. 0.8. Тираж 100 экз.

Институт вычислительной математики РАН. 119333, Москва, ул. Губкина, 8.