Общероссийский математический портал

Е. Е. Тыртышников, Тензорные аппроксимации матриц, порожденных асимптотически гладкими функциями, *Матем. сб.*, 2003, том 194, номер 6, 147–160

DOI: <https://doi.org/10.4213/sm747>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.197.217.227

26 апреля 2023 г., 14:10:08

УДК 512.64+517.5

Е. Е. Тыртышников

Тензорные аппроксимации матриц, порожденных асимптотически гладкими функциями

Для широкого класса матриц (дискретных аналогов типичных интегральных операторов) установлена возможность аппроксимации суммой прямых произведений матриц меньшего размера. Получены оценки числа членов (тензорного ранга) и соответствующей погрешности. Показано, что тензорные аппроксимации как метод сжатия данных обеспечивают сверхлинейное сжатие.

Библиография: 19 названий.

§ 1. Введение

Во многих прикладных задачах (например, при дискретизации интегральных уравнений) возникает необходимость решать линейные системы ($Ax = f$) с большими плотными матрицами. Классические алгоритмы исключения элементов требуют огромных вычислительных затрат и поэтому малополезны. В отдельных случаях, когда плотная матрица имеет специальный вид (например, для теплицевых матриц) удается построить специальные алгоритмы малой вычислительной сложности [1], [2]. Однако в общем случае остается, по сути, только один путь – аппроксимировать A “хорошей” матрицей специального вида A_r и строить эффективные алгоритмы решения для A_r . При использовании быстро сходящихся итерационных алгоритмов (например, метода сопряженных градиентов и его обобщений) можно ограничиться задачей быстрого умножения матрицы A_r на вектор. В большинстве известных подходов для этой цели явным образом используют вид ядра интегрального оператора [3]–[6]. Матричная трактовка методов обсуждается в [7]–[11]. Методы аппроксимации, использующие только элементы исходной матрицы, развиваются в работах [12]–[16].

В упомянутых выше работах матрица A_r является многоуровневой блочной матрицей с блоками, ранг которых мал по сравнению с порядком исходной матрицы. Таким образом, блоки представляются суммами матриц вида uv^T , где u и v – вектор-столбцы (скелетоны). При определенных предположениях общее число компонент этих скелетонов имеет вид $O(n \log^\gamma n)$, где n – порядок матрицы A , а γ не зависит от n .

Соответствующие методы аппроксимации сводятся к построению многоуровневого блочного разбиения матрицы с определенной иерархией блоков и “локальной” скелетонной аппроксимации каждого отдельного блока. В настоящей работе мы рассмотрим подход, в котором нет логически сложной конструкции разбиений

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 02-01-00590) и Фонда поддержки отечественной науки.

на блоки и аппроксимации матрицы имеют “глобальный” характер. Это будут тензорные аппроксимации следующего вида:

$$A \approx A_r = \sum_{k=1}^r V_k^1 \times \cdots \times V_k^m. \quad (1)$$

Символ “ $\times$ ” обозначает прямое (кронекерово) произведение матриц: если $P = [p_{ij}]$ имеет размер $m_P \times n_P$ и Q имеет размер $m_Q \times n_Q$, то прямое произведение

$$P \times Q = [p_{ij}Q]$$

есть матрица размера $(m_P m_Q) \times (n_P n_Q)$. Таким образом, произведение строчных (соответственно столбцовых) размеров матриц $V_k^1, \dots, V_k^m$ из (1) равно порядку матрицы A . Будем считать, что матрица V_k^l имеет размер $n_l \times n_l$. Значит,

$$n = n_1 \cdots n_m. \quad (2)$$

Чтобы объяснить пользу тензорных аппроксимаций для вычислений, предположим, что $n_1 = \cdots = n_m = p$. Тогда общее число элементов матрицы A равно $p^{2m} = n^2$, а общее число элементов в матрицах V_k^l равно $rpm^2 = rmn^{2/m}$. Таким образом, при фиксированных m и r объем памяти для хранения тензорной аппроксимации A_r составляет $m rn^{2/m-2}$ — лишь малую часть от n^2 — объема памяти для хранения исходной матрицы A . При умножении A_r на вектор требуется лишь порядка $rpm^{m-1}p^2 = rmn^{1+1/m}$ арифметических операций — в отличие от n^2 операций для исходной матрицы A .

Обратим внимание на то, что при $m \geq 3$ тензорные аппроксимации как метод сжатия данных превосходят любые варианты упомянутых выше блочных скелетонных методов. Они дают *сверхлинейное сжатие*: отношение объема требуемой памяти для хранения аппроксимации к объему исходной памяти (n^2) есть величина порядка $n^{2/m-2}$ и в случае $m \geq 3$ при $n \rightarrow \infty$ стремится к нулю *быстрее*, чем $1/n$.

В работе [17] замечено, что с практической точки зрения тензорные представления интересны даже в случае, когда A является многоуровневой тёплицевой матрицей, а значит, для ее умножения на вектор можно использовать алгоритм быстрого преобразования Фурье сложности $O(n \log n)$. Пусть $r = 1$, $m = 3$ и $p = 2^s$. Тогда (в случае комплексных матриц и векторов) для умножения трехуровневой тёплицевой матрицы порядка n на вектор (на основе алгоритма Кули–Тьюки) достаточно выполнить в главном члене [2; § 4, с. 89]

$$3 \cdot \left(1 + \frac{2^m - 1}{m 2^m}\right) \cdot 2n \log_2 n = \frac{279}{12} ns$$

комплексных операций, а при использовании тензорного представления достаточно

$$2rmn^{1+1/m} = 6n2^{s/3}$$

операций. Неравенство

$$\frac{279}{72} s \leq 2^{s/3}$$

начинает выполняться при $s \geq 19$. Таким образом, тензорное представление выгоднее при $n < 2^{57}$ (хотя и проигрывает асимптотически).

В работе [18] впервые даны описание широкого класса матриц и доказательство того, что для них существуют достаточно точные тензорные аппроксимации с малым рангом r . Проведенные в этой работе построения ограничиваются, однако, случаем $m = 2$ и предположением о том, что элементы матрицы A представляют собой значения некоторой асимптотически гладкой функции на прямоугольной сетке в квадрате на плоскости. Сделанное выше замечание показывает особый интерес к тензорным аппроксимациям с $m \geq 3$, а в приложениях наибольшие трудности связаны с сетками в трехмерном пространстве и в пространствах большей размерности. Цель настоящей работы – представить результаты о существовании “малоранговых” тензорных аппроксимаций в этих более сложных случаях.

§ 2. Прямые произведения и скелетоны

Пусть $A = V^1 \times \cdots \times V^m$, где V^l – матрица порядка n_l , $1 \leq l \leq m$. Такую матрицу A естественно рассматривать как m -уровневую с уровнями порядков $n_1, \dots, n_m$ [2]. Это означает, что A является блочной $(n_1 \times n_1)$ -матрицей, в которой каждый блок есть блочная $(n_2 \times n_2)$ -матрица и т. д. Порядок матрицы A равен $n = n_1 \cdots n_m$. При указании позиции элемента a_{ij} , $1 \leq i, j \leq n$, матрицы A удобно использовать мультииндексы

$$i \leftrightarrow \mathbf{i} = (i_1, \dots, i_m), \quad j \leftrightarrow \mathbf{j} = (j_1, \dots, j_m),$$

при этом выполняются следующие соотношения:

$$\begin{aligned} i &= (i_1 - 1)n_2 \cdots n_m + (i_2 - 1)n_3 \cdots n_m + \cdots + (i_{m-1} - 1)n_m + i_m, \\ j &= (j_1 - 1)n_2 \cdots n_m + (j_2 - 1)n_3 \cdots n_m + \cdots + (j_{m-1} - 1)n_m + j_m, \\ 1 &\leq i_l, j_l \leq n_l, \quad 1 \leq l \leq m. \end{aligned}$$

Многоуровневую структуру можно вводить также для прямоугольных матриц и разного числа уровней для строк и столбцов. В таких случаях строчные и столбцовые мультииндексы имеют разное число компонент.

Матрица A естественным образом порождает, в частности, такие матрицы:

$$\begin{aligned} A_l &= [a_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^l], \quad \mathbf{p} = (i_1, j_1, \dots, i_{l-1}, j_{l-1}), \quad \mathbf{q} = (i_l, j_l, \dots, i_m, j_m), \\ a_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^l &= a_{\mathbf{i}\mathbf{j}}. \end{aligned}$$

Заметим, что A_l имеет размер $(n_1^2 \cdots n_{l-1}^2) \times (n_l^2 \cdots n_m^2)$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. *Для того чтобы матрица A была суммой не более чем r прямых произведений m матриц порядков $n_1, \dots, n_m$, необходимо, чтобы каждая из матриц A_l имела ранг не выше r .*

В случае $m = 2$ аналогичное наблюдение было сделано в [19], при этом условие на ранг является также достаточным. В этом случае предложение 1 позволяет строить тензорные аппроксимации минимального ранга с гарантированной

точностью по норме Фробениуса (корень квадратный из суммы квадратов модулей элементов) на основе скелетонного приближения для A_2 , которое можно вычислить с помощью стандартного алгоритма сингулярного разложения.

В случае $m \geq 3$ предложение 1 позволяет найти нижнюю оценку для r (с помощью сингулярного разложения матриц A_l). Оно же (путем рекурсивного применения) дает возможность построить некоторую тензорную аппроксимацию, но не обязательно наименьшего возможного ранга при заданной точности.

В наших построениях возникают не только m -уровневые, но и m -мерные матрицы. Под m -мерной матрицей B понимается таблица, в которой элементы позиционируются с помощью m индексов, или дискретная функция $b_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}$ на декартовом произведении m индексных множеств. Будем писать $B = [b_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}]$. Индексные множества многомерной матрицы могут иметь многоуровневое строение, в этом случае мы используем мультииндексы.

Ассоциируем с матрицей $A = V^1 \times \dots \times V^m$ следующую m -мерную матрицу:

$$A \leftrightarrow \mathcal{P}(A) = [b_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_m}], \quad \mathbf{p}_1 = (i_1, j_1), \dots, \mathbf{p}_m = (i_m, j_m).$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2. Для того чтобы матрица A была суммой r прямых произведений m матриц порядков $n_1, \dots, n_m$, необходимо и достаточно, чтобы элементы матрицы $\mathcal{P}(A)$ имели вид

$$b_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_m} = \sum_{k=1}^r u_{\mathbf{p}_1}^k \dots u_{\mathbf{p}_m}^k$$

для каких-то значений $u_{\mathbf{p}_1}^k, \dots, u_{\mathbf{p}_m}^k$.

Если r – наименьшее возможное число слагаемых, то будем говорить, что $\mathcal{P}(A)$ есть m -мерная матрица тензорного ранга r , представленная в виде суммы m -мерных скелетов (двумерный скелетон – это обычная (двумерная) матрица ранга 1).

§3. Сепарабельные аппроксимации

Предположим, что

$$a_{ij} = f(\mathbf{x}^i, \mathbf{y}^j), \quad \mathbf{x}^i = (x_1^i, \dots, x_m^i), \quad \mathbf{y}^j = (y_1^j, \dots, y_m^j), \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad (3)$$

где f – заданная функция, а $\{\mathbf{x}^i\}$ и $\{\mathbf{y}^j\}$ – две системы точек (сетки) в m -мерном пространстве. Относительно функции и сеток необходимо сделать некоторые предположения.

Будем считать, что

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = F(\mathbf{v}), \quad \mathbf{v} = \mathbf{x} - \mathbf{y}, \quad (4)$$

где F дифференцируема всюду, кроме точки $\mathbf{v} = 0$, и для смешанных производных

$$D^{\mathbf{p}} = \frac{\partial^{p_1} \dots \partial^{p_m}}{(\partial v_1)^{p_1} \dots (\partial v_m)^{p_m}}, \quad \mathbf{p} = (p_1, \dots, p_m),$$

при любом $p = p_1 + \dots + p_m \geq 0$ имеют место следующие неравенства:

$$|D^{\mathbf{p}} F(\mathbf{v})| \leq c d^p p! \|\mathbf{v}\|^{g-p}, \quad (5)$$

$$\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_m), \quad \|\mathbf{v}\| = \sqrt{v_1^2 + \dots + v_m^2},$$

где $c, d > 0$ и g – константы, не зависящие от $\mathbf{p}$. Для определенности положим $F(0) = 0$. Функцию F с указанными свойствами будем называть *полной асимптотически гладкой*.

Далее, рассмотрим системы одномерных сеток

$$0 \leq s_1^l < \dots < s_{n_l}^l \leq 1, \quad 0 \leq t_1^l < \dots < t_{n_l}^l \leq 1, \quad (6)$$

$$l = 1, \dots, m,$$

и будем считать, что

$$\mathbf{x}^i = \mathbf{x}^{\mathbf{i}} = (s_{i_1}^1, \dots, s_{i_m}^m), \quad \mathbf{y}^j = \mathbf{y}^{\mathbf{j}} = (t_{j_1}^1, \dots, t_{j_m}^m), \quad (7)$$

$$\mathbf{i} = (i_1, \dots, i_m), \quad \mathbf{j} = (j_1, \dots, j_m).$$

Определим минимальное расстояние между узлами сеток $\{\mathbf{x}^i\}$ и $\{\mathbf{y}^j\}$ следующим образом:

$$h_0 = \min_{1 \leq l \leq m} \min_{\substack{1 \leq \mu, \nu \leq n_l \\ \mu \neq \nu}} |s_{\mu}^l - t_{\nu}^l|. \quad (8)$$

При $0 < h < 1$ будем рассматривать “прямоугольные кольца”

$$\Pi_h = [-1, 1]^m \setminus (-h, h)^m. \quad (9)$$

При сделанных предположениях очевидно, что

$$\mathbf{x}^i - \mathbf{y}^j \in \Pi_{h_0}. \quad (10)$$

Полагая $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_m)$, позволим себе писать $F(\mathbf{v}) = F(v_1, \dots, v_m)$. Чтобы изучить свойства тензорных аппроксимаций $A_r \approx A$, достаточно исследовать *сепарабельные аппроксимации* $F_r \approx F$, где

$$F_r(\mathbf{v}) = F_r(v_1, \dots, v_m) = \sum_{k=1}^r \varphi_k^1(v_1) \cdots \varphi_k^m(v_m). \quad (11)$$

Главной целью сепарабельной аппроксимации является разделение переменных с гарантированной равномерной поточечной оценкой погрешности, поэтому в постановке задачи нет необходимости специфицировать класс функций, в котором следует искать $\varphi_k^1, \dots, \varphi_k^m$.

ЛЕММА 1. *Предположим, что для F существует сепарабельная функция F_r вида (11) такая, что*

$$|F(\mathbf{v}) - F_r(\mathbf{v})| \leq \varepsilon, \quad \mathbf{v} \in \Pi_{h_0}. \quad (12)$$

Тогда для матрицы A с элементами a_{ij} вида (3) существует тензорная аппроксимация A_r вида (1) с оценкой погрешности

$$\|A - A_r\|_C \leq \varepsilon, \quad (13)$$

где $\|\cdot\|_C$ есть наибольший по модулю элемент матрицы.

Мы опускаем доказательство, поскольку оно вполне очевидно.

В дальнейшем полагаем $\|\mathbf{v}\|^g = 0$ в случае $\mathbf{v} = 0$ (независимо от g).

ТЕОРЕМА 1. *Предположим, что $F(v_1, \dots, v_m)$ – полная асимптотически гладкая функция, производные которой удовлетворяют неравенствам (5), и множество Π_h имеет вид (9) при некотором $0 < h < 1$. Пусть γ – произвольное число такое, что $0 < \gamma < 1$. Тогда для любого целого $p \geq 0$ для F существует сепарабельная аппроксимация F_r вида (11) со следующими свойствами:*

$$r \leq (c_0 + c_1 \log h^{-1}) p^{m-1}, \quad (14)$$

$$|F(\mathbf{v}) - F_r(\mathbf{v})| \leq c_2 \gamma^p \|\mathbf{v}\|^g, \quad \mathbf{v} \in \Pi_h, \quad (15)$$

где константы c_0, c_1, c_2 зависят от γ и m , но не зависят от p .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Покроем Π_h семейством кубов $\{D_\nu\}$ (разных размеров) таким образом, что F имеет на D_ν сепарабельную аппроксимацию с p членами. Тогда очевидно, что F будет обладать сепарабельной аппроксимацией на Π_h с $r \leq Np$ членами, где N – общее число кубов.

Пусть D – любой куб со стороной a , принадлежащий множеству

$$\mathcal{R}(a) = [-(s+1)a, (s+1)a]^m \setminus (-sa, sa)^m,$$

где s – целое положительное число, которое мы выберем позже.

Разложим F в ряд Тейлора в центральной точке $\mathbf{v}^0 = (v_1^0, \dots, v_m^0)$ куба D :

$$\begin{aligned} F(v_1, \dots, v_m) &\approx F_p(v_1, \dots, v_m) \\ &= \sum_{k=0}^{p-1} \frac{1}{k!} \left(\Delta v_1 \frac{\partial}{\partial \xi_1} + \dots + \Delta v_m \frac{\partial}{\partial \xi_m} \right)^k F(\xi_1, \dots, \xi_m) \Big|_{\xi_1=v_1^0, \dots, \xi_m=v_m^0}, \quad (16) \\ \Delta v_1 &= v_1 - v_1^0, \dots, \Delta v_m = v_m - v_m^0. \end{aligned}$$

Для оценки остаточного члена (в форме Лагранжа) воспользуемся неравенствами (5). При условии $\mathbf{v} \in D$ находим

$$|F(\mathbf{v}) - F_p(\mathbf{v})| \leq (p+1)^{m-1} c \frac{d^p}{(sa)^p} \left(\frac{a}{2} \right)^p \max_{\mathbf{v} \in D} \|\mathbf{v}\|^g. \quad (17)$$

Легко видеть, что для всех $\mathbf{v} \in D$ выполняются неравенства

$$sa \leq \|\mathbf{v}\| \leq \sqrt{m}(s+1)a.$$

Следовательно, если $g \geq 0$, то

$$\max_{\mathbf{v} \in D} \|\mathbf{v}\|^g \leq (\sqrt{m}(s+1)a)^g \leq \left(\frac{\sqrt{m}(s+1)}{s} \right)^g \|\mathbf{v}\|^g.$$

Если $g < 0$, то

$$\max_{\mathbf{v} \in D} \|\mathbf{v}\|^g \leq \frac{1}{(sa)^{|g|}} \leq \frac{1}{\|\mathbf{v}\|^{|g|}} \left(\frac{\|\mathbf{v}\|}{sa} \right)^{|g|} \leq \left(\frac{\sqrt{m}(s+1)}{s} \right)^{|g|} \|\mathbf{v}\|^g.$$

Значит, при любом g получаем

$$\max_{\mathbf{v} \in D} \|\mathbf{v}\|^g \leq c_s \|\mathbf{v}\|^g, \quad c_s = \left(\frac{\sqrt{m}(s+1)}{s} \right)^{|g|}. \quad (18)$$

Выберем s таким образом, чтобы выполнялось условие $s > d$. Тогда

$$\gamma \equiv \frac{d}{s} < 1. \quad (19)$$

Объединяя (17), (18) и (19), находим

$$|F(\mathbf{v}) - F_p(\mathbf{v})| \leq c_2 \gamma^p \|\mathbf{v}\|^g, \quad \mathbf{v} \in D, \quad (20)$$

$$c_2 = c c_s \max_p \frac{(p+1)^{m-1}}{2^p}.$$

Далее, очевидно,

$$\Pi_h \subset \bigcup_k \mathcal{R}(a_k), \quad a_k = \left(1 + \frac{1}{s}\right)^k \frac{h}{s}, \quad k = 0, 1, \dots$$

При этом Π_h покрывается конечным числом множеств $\mathcal{R}(a_k)$, подчиненных условию $a_k \leq 1$. Следовательно, можно считать, что

$$k \leq \frac{\log_2 s + \log_2 h^{-1}}{\log_2(1 + 1/s)}.$$

Чтобы завершить доказательство, достаточно заметить, что каждое из множеств $\mathcal{R}(a_k)$ содержит $(2s+2)^m - (2s)^m$ кубов со стороной a_k .

ТЕОРЕМА 2. *Предположим, что матрица A порядка n имеет элементы*

$$a_{ij} = F(\mathbf{x}^i - \mathbf{y}^j),$$

где F — полная асимптотически гладкая функция, а $\{\mathbf{x}^i\}$ и $\{\mathbf{y}^j\}$ — сетки вида (7) в m -мерном пространстве.

Пусть $0 < h < 1$. Для $1 \leq l \leq m$ обозначим через τ_l количество различных чисел вида $\theta^l(\mu, \nu) = s_\mu^l - t_\nu^l$ таких, что

$$-h < \theta^l(\mu, \nu) < h, \quad 1 \leq \mu, \nu \leq n_l,$$

и положим

$$\tau = \tau_1 \cdots \tau_m.$$

Пусть $0 < \gamma < 1$. Тогда для любого целого $p \geq 0$ матрица A имеет тензорную аппроксимацию A_r вида (1) со следующими оценками:

$$r \leq (c_0 + c_1 \log h^{-1}) p^{m-1} + \tau, \quad (21)$$

$$|\{A - A_r\}_{ij}| \leq c_2 \gamma^p \|\mathbf{x}^i - \mathbf{y}^j\|^g, \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad (22)$$

где константы c_0, c_1, c_2 зависят от γ и m , но не зависят от p .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно лемме 1 достаточно установить существование сепарабельных аппроксимаций $F_r \approx F$ на множестве Π_{h_0} .

Теорема 1 утверждает, что сепарабельные аппроксимации существуют на Π_h . Если $h = h_0$, то все доказано (в этом случае $\tau = 0$). В общем случае следует рассмотреть сепарабельные функции теоремы 1 и увеличить соответствующее число членов r таким образом, чтобы аппроксимации имели место на множестве $\Pi_h \cup \mathcal{M}_h$, где

$$\mathcal{M}_h = \{\mathbf{v} : \mathbf{v} = \mathbf{x}^i - \mathbf{y}^j \in \Pi_{h_0} \setminus \Pi_h\}.$$

Нетрудно проверить, что для этого достаточно добавить τ членов.

Заметим, что если сетки $\{\mathbf{x}^i\}$ и $\{\mathbf{y}^j\}$ имеют общие узлы, то, очевидно, $h_0 = 0$. В этом случае $\tau > 0$. Если $\mathbf{x}^i = \mathbf{y}^i$, а h определяется равенством

$$h = \min_{1 \leq l \leq m} \min_{\substack{1 \leq \mu, \nu \leq n_l \\ \mu \neq \nu}} |s_\mu^l - s_\nu^l|,$$

то, как легко видеть, $\tau = 1$.

§ 4. Виртуальные уровни

В случае сеток в m -мерном пространстве естественно рассматривать тензорные аппроксимации с числом уровней m (m -членные прямые произведения). Однако интересно изучить также возможность введения *виртуальных* (не обусловленных геометрией задачи) уровней.

Пусть m обозначает, по-прежнему, размерность пространства и матрица A является m -уровневой с уровнями порядков $n_1, \dots, n_m$.

Предположим, что l -й уровень разбивается на μ^l подуровней порядков $n_1^l, \dots, n_{\mu^l}^l$. Следовательно,

$$n_l = n_1^l \cdots n_{\mu^l}^l, \quad 1 \leq l \leq m. \quad (23)$$

Тогда A можно рассматривать также как матрицу с числом уровней

$$m' = \sum_{l=1}^m \mu^l \quad (24)$$

и порядками уровней $n_1^1, \dots, n_{\mu^1}^1, \dots, n_1^m, \dots, n_{\mu^m}^m$. Элементы такой m' -уровневой матрицы удобно позиционировать с помощью составных мультииндексов

$$\begin{aligned} i \leftrightarrow \mathbf{i} = (\mathbf{i}^1, \dots, \mathbf{i}^m), \quad j \leftrightarrow \mathbf{j} = (\mathbf{j}^1, \dots, \mathbf{j}^m), \\ \mathbf{i}^l = (i_1^l, \dots, i_{\mu^l}^l), \quad \mathbf{j}^l = (j_1^l, \dots, j_{\mu^l}^l), \quad 1 \leq l \leq m. \end{aligned}$$

Полагаем, по-прежнему, что A имеет элементы $a_{ij} = F(\mathbf{x}^i - \mathbf{y}^j)$. При этом в случае $m' > m$ нам понадобятся некоторые дополнительные предположения относительно сеток $\{\mathbf{x}^i\}$ и $\{\mathbf{y}^j\}$. Будем считать, что каждая из одномерных сеток $\{s_u^l\}$, $\{t_v^l\}$, $1 \leq u, v \leq n_l$, имеет *вложенную периодическую структуру*, означающую, что при естественном соответствии индексов и мультииндексов

$$u \leftrightarrow \mathbf{u} = (u_1, \dots, u_{\mu^l}), \quad v \leftrightarrow \mathbf{v} = (v_1, \dots, v_{\mu^l})$$

многоуровневые матрицы

$$S^l = [s_{\mathbf{u}}^l - s_{\mathbf{v}}^l], \quad T^l = [t_{\mathbf{u}}^l - t_{\mathbf{v}}^l]$$

являются μ^l -уровневыми матрицами, в которых все уровни, кроме последнего, имеют тёплицев тип (см. [2]). Другими словами, это блочно-тёплицевы матрицы, в которых блоки являются блочно-тёплицевыми матрицами и т. д., при этом на предпоследнем уровне имеем блочно-тёплицевы матрицы с блоками общего вида. Данное требование к сеткам выполняется, в частности, в случае равномерных сеток. Предположение относительно одномерных сеток приводит к следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} s_{\mathbf{u}}^l &= \zeta_{u_1}^1 + \zeta_{u_2}^2 \frac{1}{n_1^l} + \cdots + \zeta_{u_{\mu^l-1}}^{\mu^l-1} \frac{1}{n_1^l n_2^l \cdots n_{\mu^l-2}^l} + \zeta_{u_{\mu^l}}^{\mu^l} \frac{1}{n_1^l n_2^l \cdots n_{\mu^l-1}^l}, \\ t_{\mathbf{v}}^l &= \eta_{v_1}^1 + \eta_{v_2}^2 \frac{1}{n_1^l} + \cdots + \eta_{v_{\mu^l-1}}^{\mu^l-1} \frac{1}{n_1^l n_2^l \cdots n_{\mu^l-2}^l} + \eta_{v_{\mu^l}}^{\mu^l} \frac{1}{n_1^l n_2^l \cdots n_{\mu^l-1}^l}, \\ 0 &\leq \zeta_{u_{\mu^l}}^{\mu^l} \leq 1, \quad 0 \leq \eta_{v_{\mu^l}}^{\mu^l} \leq 1, \\ \zeta_{u_k}^k &= \frac{u_k - 1}{n_k^l}, \quad \eta_{v_k}^k = \frac{v_k - 1}{n_k^l}, \quad 1 \leq u_k, v_k \leq n_k^l, \quad 1 \leq k \leq \mu^l - 1. \end{aligned} \quad (25)$$

Таким образом, можно ввести дополнительные переменные ζ^{kl}, η^{kl} , удовлетворяющие условиям

$$0 \leq \zeta^{kl}, \eta^{kl} \leq 1, \quad 1 \leq k \leq \mu^l,$$

и принимающие значения на определенных выше сетках $\{\zeta_{u_k}^k\}, \{\eta_{v_k}^k\}$. Чтобы подчеркнуть зависимость этих сеток от номера уровня l , будем писать также

$$\zeta_{u_k}^k = \zeta_{u_k}^{kl}, \quad \eta_{v_k}^k = \eta_{v_k}^{kl}.$$

При сделанных предположениях для A можно рассмотреть тензорные аппроксимации вида

$$A_r = \sum_{k=1}^r (A_{k1}^1 \times \cdots \times A_{k1}^{\mu^1}) \times \cdots \times (A_{km}^1 \times \cdots \times A_{km}^{\mu^m}), \quad (26)$$

где матрица A_{kl}^j имеет порядок n_k^l , $1 \leq j \leq \mu^l$, $1 \leq l \leq m$.

Обозначим через $n_{\min}$ минимальный порядок подуровней:

$$n_{\min} = \min_{1 \leq l \leq m} \min_{1 \leq k \leq \mu^l} n_k^l. \quad (27)$$

ТЕОРЕМА 3. *Предположим, что m -уровневая матрица A порядка n имеет элементы*

$$a_{ij} = F(\mathbf{x}^i - \mathbf{y}^j),$$

где F — полная асимптотически гладкая функция, а $\{\mathbf{x}^i\}$ и $\{\mathbf{y}^j\}$ — сетки вида (7) в m -мерном пространстве, и при этом l -й уровень разбивается на μ^l подуровней, $1 \leq l \leq m$, и соответствующие одномерные сетки удовлетворяют

соотношениям вложенной периодичности (25) с общим числом подуровней $m' \geq m$. Пусть

$$\delta = \frac{1}{n_{\min} - 1}, \quad (28)$$

где $n_{\min}$ – минимальный порядок подуровней (27).

Пусть $\delta < h < 1$. Для $1 \leq l \leq m$ обозначим через τ_l количество различных чисел вида $\theta^l(\alpha, \beta) = s_\alpha^l - t_\beta^l$ таких, что

$$-h - \delta < \theta^l(\alpha, \beta) < h + \delta, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq n_l,$$

и положим

$$\tau = \tau_1^{\mu^1} \cdots \tau_m^{\mu^m}.$$

Пусть $0 < \gamma < 1$.

Тогда для любого целого $p \geq 0$ матрица A имеет тензорную аппроксимацию A_r вида (26) со следующими оценками:

$$r \leq (c_0 + c_1 \log h^{-1}) p^{m'-1} + \tau, \quad (29)$$

$$|\{A - A_r\}_{ij}| \leq c_2 \gamma^p \|\mathbf{x}^i - \mathbf{y}^j\|^g, \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad (30)$$

где константы c_0, c_1, c_2 зависят от γ и m , но не зависят от p .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Будем рассматривать $F(v_1, \dots, v_m)$ как функцию от m' скалярных переменных

$$F(v_1, \dots, v_m) = \mathcal{F}(v_1^1, \dots, v_{\mu^1}^1, \dots, v_1^m, \dots, v_{\mu^m}^m),$$

где

$$v_l = v_1^l + v_2^l \frac{1}{n_1^l} + \cdots + v_{\mu^l-1}^l \frac{1}{n_1^l n_2^l \cdots n_{\mu^l-2}^l} + v_{\mu^l}^l \frac{1}{n_1^l n_2^l \cdots n_{\mu^l-1}^l}.$$

Для краткости будем писать

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}(\mathbf{v}'), \quad \mathbf{v}' = (v_1^1, \dots, v_{\mu^1}^1, \dots, v_1^m, \dots, v_{\mu^m}^m).$$

В силу формул (25) достаточно считать, что

$$-1 \leq v_\nu^l \leq 1, \quad 1 \leq \nu \leq \mu^l, \quad 1 \leq l \leq m. \quad (31)$$

При этом получаем

$$-1 - \delta \leq v_l \leq 1 + \delta, \quad 1 \leq l \leq m. \quad (32)$$

Очевидно, теорема будет доказана, если мы найдем для $\mathcal{F}$ сепарабельную аппроксимацию

$$\mathcal{F}_r(v_1^1, \dots, v_{\mu^1}^1, \dots, v_1^m, \dots, v_{\mu^m}^m) = \sum_{k=1}^r \prod_{l=1}^m \prod_{\nu=1}^{\mu^l} \varphi_\nu^{kl}(v_\nu^l) \quad (33)$$

с оценками (29) и (30) для r и погрешности $|\mathcal{F} - \mathcal{F}_r|$ в области

$$v_1^l \in [-1, 1] \setminus (-h, h), \quad v_\nu^l \in [-1, 1], \quad 2 \leq \nu \leq \mu^l, \quad 1 \leq l \leq m. \quad (34)$$

Ясно, что

$$(v_1^l, \dots, v_m^l) \in \Pi_h = [-1, 1]^m \setminus (-h, h)^m.$$

Как и в доказательстве теоремы 1, покроем Π_h тем же семейством кубов, рассмотрим любой куб $D \subset \mathcal{R}(a)$ и разложим $F(v_1, \dots, v_m)$ в ряд Тейлора в центральной точке $\mathbf{v}^0 = (v_1^0, \dots, v_m^0)$ куба D :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(v_1^1, \dots, v_m^m) &\approx \mathcal{F}_p(v_1^1, \dots, v_m^m) \\ &= \sum_{k=0}^{p-1} \frac{1}{k!} \left(\Delta v_1 \frac{\partial}{\partial \xi_1} + \dots + \Delta v_m \frac{\partial}{\partial \xi_m} \right)^k F(\xi_1, \dots, \xi_m) \Big|_{\xi_1=v_1^0, \dots, \xi_m=v_m^0}. \end{aligned} \quad (35)$$

В отличие от прежнего разложения (16) теперь будем рассматривать приращения следующего вида:

$$\Delta v_l = (v_1^l - v_l^0) + v_2^l \frac{1}{n_1^l} + \dots + v_{\mu^l-1}^l \frac{1}{n_1^l n_2^l \dots n_{\mu^l-2}^l} + v_{\mu^l}^l \frac{1}{n_1^l n_2^l \dots n_{\mu^l-1}^l}. \quad (36)$$

Согласно (36) и (28)

$$|\Delta v^l| \leq \frac{a}{2} + \delta.$$

Обозначим через D_δ куб со стороной $a + 2\delta$ и с тем же центром, что и у куба D . Кроме того, рассмотрим m' -мерную область

$$D' = \{\mathbf{v}' : (v_1^1, \dots, v_1^l) \in D, \quad v_\nu^l \in [-1, 1], \quad 1 \leq \nu \leq \mu^l, \quad 1 \leq l \leq m\}.$$

Если $\mathbf{v}' \in D'$, то $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_m) \in D_\delta$. Поэтому оценка (17) модифицируется таким образом:

$$|\mathcal{F}(\mathbf{v}') - \mathcal{F}_p(\mathbf{v}')| \leq (p+1)^{m-1} c \frac{d^p}{(sa - \delta)^p} \left(\frac{a}{2} + \delta \right)^p \max_{\mathbf{v} \in D_\delta} \|\mathbf{v}\|^g. \quad (37)$$

В данном случае

$$sa - \delta \leq \|\mathbf{v}\| \leq \sqrt{m}((s+1)a + \delta).$$

Отсюда

$$\max_{\mathbf{v} \in D_\delta} \|\mathbf{v}\|^g \leq c_s(a, \delta) \|\mathbf{v}\|^g, \quad \mathbf{v} \in D_\delta, \quad (38)$$

$$c_s(a, \delta) = \left(\frac{\sqrt{m}((s+1)a + \delta)}{sa - \delta} \right)^{|g|}. \quad (39)$$

Как и раньше, выберем $s > d$ и положим

$$\gamma \equiv \frac{d}{s} < 1.$$

Получаем

$$|\mathcal{F}(\mathbf{v}') - \mathcal{F}_p(\mathbf{v}')| \leq c \frac{(p+1)^{m-1}}{2^p} \left(\frac{s(a+2\delta)}{sa-\delta} \right)^p c_s(a, \delta) \gamma^p \|\mathbf{v}\|^g.$$

Неравенство (30) с константой c_2 , не зависящей от p , является следствием предельных соотношений

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} c_s(a, \delta) = c_s,$$

где c_s определяется согласно (18),

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\frac{s(a+2\delta)}{sa-\delta} \right)^p = 1, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} \frac{(p+1)^{m-1}}{2^p} = 0.$$

Оценка для r получается в полной аналогии с соответствующей оценкой теоремы 1 и последующим ее уточнением в теореме 2.

§ 5. Численные примеры

Рассмотрим равномерную сетку на единичном кубе $[0, 1]^3$ с числом узлов по каждой оси N и трехуровневые матрицы A с порядками уровней $n_1 = n_2 = n_3 = N$. Пусть $N = 10$. Тогда порядок матрицы A равен $n = N^3 = 1000$.

Будем считать, что элементы матрицы A имеют вид (3), (4) и соответствующая функция $F(\mathbf{v})$ зависит только от $\rho = \|\mathbf{v}\|$.

Чтобы построить для A тензорные аппроксимации, применим алгоритм сингулярного разложения для соответствующей матрицы A_3 (§2). При этом мы получим тензорную аппроксимацию вида

$$A \approx A_p = \sum_{k=1}^p B^k \times W^k,$$

где B^k и W^k — матрицы порядка N^2 и N соответственно. Затем мы опять применяем алгоритм сингулярного разложения для матриц $(B^k)_2$ (отображение $B^k \rightarrow (B^k)_2$ определяется так же, как $A \rightarrow A_2$; см. §2) и получаем тензорные аппроксимации вида

$$B^k \approx \sum_{j=1}^{r_k} U_j^k \times V_j^k,$$

где U_j^k и V_j^k — матрицы порядка N . В результате матрица A аппроксимируется суммой

$$r = r_1 + \dots + r_p$$

прямых произведений вида $U_j^k \times V_j^k \times W^k$.

При применении алгоритма сингулярного разложения выбирается аппроксимация наименьшего ранга, обеспечивающая заданную относительную точность ε по норме Фробениуса.

Таблица 1. Тензорные аппроксимации для функции $f = 1/\rho$

ε	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}
r	37	49	62	77
r_j	6, 6, 6, 6, 7, 6	6, 7, 7, 7, 7, 8, 7	7, 7, 7, 7, 8, 9, 9, 8	8, 8, 8, 8, 9, 9, 9, 9

Таблица 2. Тензорные аппроксимации для функции $f = 1/\rho^2$

ε	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}
r	36	48	63	76
r_j	6, 5, 6, 6, 7, 6	7, 6, 6, 7, 7, 8, 7	7, 7, 8, 8, 8, 8, 9, 8	8, 8, 8, 8, 8, 9, 9, 9

В таблицах 1, 2 приводятся примеры для двух различных функций $F = F(\rho)$, удовлетворяющих требованию полной асимптотической гладкости.

Заметим, что каждое из прямых произведений состоит из трех матриц порядка 10. Таким образом, в случае 37 членов для запоминания тензорной аппроксимации достаточно хранить $37 \cdot 3 \cdot 100 = 11100$ чисел. В действительности, поскольку матрицы W^k во многих членах одинаковы, памяти нужно почти на одну треть меньше: $37 \cdot 2 \cdot 100 + 6 \cdot 100 = 8000$. Для хранения исходной матрицы требуется $1000^2 = 1000000$ чисел.

Список литературы

1. Воеводин В. В. Об одном методе понижения порядка матриц при решении интегральных уравнений // Численный анализ на ФОРТРАНе. М.: Изд-во МГУ, 1979. С. 21–26.
2. Воеводин В. В., Тыртышников Е. Е. Вычислительные процессы с теплицевыми матрицами. М.: Наука, 1987.
3. Hackbusch W., Nowak Z. P. On the fast matrix multiplication in the boundary element method by panel clustering // Numer. Math. 1989. V. 54. №4. P. 463–491.
4. Myagchilov M. V., Tyrtshnikov E. E. A fast matrix-vector multiplier in discrete vortex method // Russian J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1992. V. 7. №4. P. 325–342.
5. Rokhlin V. Rapid solution of integral equations of classical potential theory // J. Comput. Phys. 1985. V. 60. P. 187–207.
6. Rokhlin V. Rapid solution of integral equations of scattering theory in two dimensions // J. Comput. Phys. 1990. V. 86. P. 414–439.
7. Тыртышников Е. Е. Методы быстрого умножения и решение уравнений // Матричные методы и вычисления. М.: ИВМ РАН, 1999. С. 4–41.
8. Tyrtshnikov E. E. Mosaic ranks and skeletons // Numerical analysis and its applications. Proceedings of WNAA-96. Berlin: Springer-Verlag, 1996. P. 505–516. (Lecture Notes in Comput. Sci. V. 1196.)
9. Tyrtshnikov E. E. Mosaic-skeleton approximations // Calcolo. 1996. V. 33. №1–2. P. 47–57.
10. Горейнов С. А. Мозаично-скелетонные аппроксимации матриц, порожденных асимптотически гладкими и осцилляционными ядрами // Матричные методы и вычисления. М.: ИВМ РАН, 1999. С. 42–76.
11. Sun X., Pitsianis N. P. A matrix version of the fast multipole method // SIAM Rev. 2001. V. 43. №2. P. 289–300.

12. Горейнов С. А., Замарашкин Н. Л., Тиртышников Е. Е. Псевдоскелетные аппроксимации матриц // Докл. РАН. 1995. Т. 343. № 2. С. 151–152.
13. Goreinov S. A., Tyrtyshnikov E. E. The maximal-volume concept in approximation by low-rank matrices // Contemp. Math. 2001. V. 208. P. 47–51.
14. Goreinov S. A., Tyrtyshnikov E. E., Yeremin A. Y. Matrix-free iterative solution strategies for large dense linear systems // Numer. Linear Algebra Appl. 1997. V. 4. № 4. P. 273–294.
15. Goreinov S. A., Tyrtyshnikov E. E., Zamarashkin N. L. A theory of pseudo skeleton approximations // Linear Algebra Appl. 1997. V. 261. P. 1–21.
16. Tyrtyshnikov E. E. Incomplete cross approximation in the mosaic-skeleton method // Computing, 2000. V. 64. № 4. P. 367–380.
17. Ibraghimov I. Application of 3-way decomposition for matrix compression // Numer. Linear Algebra Appl. 2002. V. 9. № 6–7. P. 551–565.
18. Tyrtyshnikov E. E. Kronecker-product approximations for some function-related matrices // Linear Algebra Appl. (to appear).
19. Van Loan C. F., Pitsianis N. P. Approximation with Kronecker products // Linear algebra for large scale and real-time applications. Proc. of the NATO Advanced Study Institute, Leuven, Belgium, August 3–14, 1992. Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 1993. P. 293–314. (NATO Adv. Sci. Inst. Ser. E Appl. Sci. V. 232.)

Институт вычислительной математики РАН,
г. Москва

Поступила в редакцию
31.10.2002