ОТЧЕТ
Ивана Валерьевича Оселедца
по программе Фонда «Династия»

1. Результаты, полученные в 2013 году

В 2013 году исследования снова были посвящены вычислительным методам работы с многомерными массивами (тензорами). 30 сентября 2013 года вышел приказ о присвоении степени доктора физико-математических наук.

1.1 Основные результаты

1.1.1 Вычисление многомерных сверток

В 2013 году предложены новые методы вычисления многомерных сверток в малоранговых форматах на основе крестовой интерполяции. Задача вычисления многомерной свертки имеет вид

$$(f * g)(x) \equiv \int_{\mathbb{R}^d} f(y)\, g(x-y)\, dy, \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

При дискретизации на равномерной сетке получаем суммирование вида

$$(f * g)_{\mathbf{i}} = \sum_{\mathbf{j}} f_{\mathbf{j}}\, g_{\mathbf{i}-\mathbf{j}}, \tag{1}$$

где $\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \{0, \ldots, n-1\}^d$ являются **мультииндексами**.

Прямое вычисление требует $\mathcal{O}(n^{2d})$ операций. Классический подход основан на использовании быстрого преобразования Фурье, что снижает вычислительную сложность до $\mathcal{O}(n^d \log n)$ операций.

Нашей основной задачей являлось *приближенное вычисление свертки* в следующих предположениях:

1. f и g заданы в малоранговых форматах (TT-формат, формат Таккера).
2. Результат *хорошо приближается* в малоранговом формате.

Такая постановка является стандартной. Задача состоит в том, чтобы оптимальным образом вычислить малоранговое приближения для результата. Предыдущие подходы основаны на *глобальной фильтрации* (Хоромский, Хоромская), *локальной фильтрации* (Савостьянов, Тыртышников) применении идей тензоризации и QTT-формата (Казеев, Хоромский, Тыртышников). Все эти подходы используют арифметику малоранговых форматов и *свободны от проклятия размерности*, но обладают существенной сложностью в зависимости от рангов порядка $\mathcal{O}(r^6) - \mathcal{O}(r^8)$, а QTT-подход имеет асимптотику по n порядка $\mathcal{O}(\log n)$, однако константа, спрятанная в $\mathcal{O}(\cdot)$ достаточно высокая. Типичный размер n, для которого необходимо вычислять свертки, составляет $10^3 - 10^4$. В совместной работе с М.В. Рахубой удалось предложить новый алгоритм приближенного вычисления свертки в малоранговых форматах. Он имеет асимптотику $\mathcal{O}(dnr^2 + r^4)$ в трехмерном случае, который был для нас наиболее интересен. Идея метода очень простая. Задача вычисления свертки сводится к умножению многоуровневой теплицевой матрицы на вектор. Классический алгоритм сводит задачу к умножению многоуровневой циркулянтной матрицы на вектор. Циркулянтная матрица диагонализуется с помощью преобразования Фурье. Имеем

$$C = F_d^{-1}(F_d a \circ F_d b),$$

где $F_d = F \otimes F \otimes \ldots \otimes F$ — матрица d-мерного преобразования Фурье. Поэтому, классический алгоритм состоит из трех шагов:

1. Вычислить два преобразования Фурье.
2. Перемножить Фурье-образы
3. Вычислить обратное преобразование Фурье

Очевидно, что 1) и 3) не меняют малоранговой структуры и рангов. На шаге два, в худшем случае, ранги будут перемножаться. Однако из наших предположений следует, что результат хорошо приближается тензором малого ранга. Более того, так как выполняемая операция — произведение, вычисление элементов такого тензора является дешевой операцией. Основной идеей является применение *крестового метода* аппроксимации тензоров, который позволяет восстановить тензор ранга r по $\mathcal{O}(dnr^2)$ элементам, и существуют надежные адаптивные алгоритмы вычисления таких элементов. В итоге, удалось получить *существенное ускорение* расчетов за счет простого метода.

1.2 Динамическая малоранговая аппроксимация в TT/HT форматах

Второй основной результат является продолжением исследований прошлого года, посвященных динамической малоранговой аппроксимации матриц, и обобщает их на многомерный случай. Эта работа выполнялась совместно с C. Lubich и B. Vanderbreycken. Множество тензоров с фиксированными TT-ранга образует многообразие. Если есть некоторая траектория $A(t)$, то можно определить динамическую малоранговую аппроксимацию из вариационного принципа *Дирака-Френкеля.*

$$(A(t) - X(t), \delta v) = 0. \tag{2}$$

Из вариационного принципа (2) получаются дифференциальные уравнения на параметры разложения

$$X(t) = X_1(i_1, t) X_2(i_2, t) \dots X_d(i_d, t).$$

Получено обобщение KSL-схемы, которое обладает такими же свойствами, как и в матричном случае.

1. Первый порядок по времени, абсолютная устойчивость
2. Если $A(t)$ имеет точный ранг, KSL-схема является точной.

Реализация KSL-схемы удивительно проста и не требует сложных вычислений (в отличие от предыдущих подходов). На ее основе можно создавать очень эффективные вычислительные методы, например, для задач квантовой молекулярной динамики.

1.3 Явная тензорная структура WTT-матриц

Получены явные представления для матриц преобразований вейвлетовского типа (совместно с В.А. Казеевым). Частным случаем таких преобразований является преобразование показано. Доказаны теоремы о тензорных рангах матриц: если фильтры WTT-преобразований имеют порядок r (для преобразования Хаара $r = 1$), то полученная матрица будет иметь тензорные ранги $r^2 + 1$ (для преобразования Хаара - 2). Верен другой, более сильный результат: применение преобразования с рангами фильтров r к тензору ранга R приводит к тензору ранга $r + R$, что существенно меньше простого следствия оценки на тензорный ранг матрицы, $(r^2 + 1)R$.

Полученные оценки показывают новую связь между двумя классическими областями: вейвлет-разложениями и тензорами. Это открывает новые возможности для построения алгоритмов сжатия и анализа данных.

1.4 Прямоугольные подматрицы наибольшего объема

Одним из направлений исследования являются матричные методы, которые составляют основу всех построенных вычислительных подходов. Задача нахождения *подматрицы максимального объема* является одной из ключевых. В $n \times r$ матрице A, $n > r$, требуется найти $r \times r$ матрицу с наибольшим по модулю определителем. Такое свойство обеспечивает следующее. Если $\widehat{A}$ - подматрица наибольшего объема, то в матрице $A\widehat{A}^{-1}$ все элементы по модулю не превосходят 1. У этого факта есть простая геометрическая интерпретация. Пусть у нас есть n r-мерных векторов. Тогда всегда можно выбрать r векторов из них так, что любой разлагается по этим базисным с коэффициентами, по модулю не превосходящими 1. Во многих приложениях, однако, такой оценки недостаточно. Необходимо, чтобы *сумма модулей коэффициентов разложения* была как можно меньше. Легко привести контрпример, когда для r векторов это сделать нельзя. Поэтому А.Ю. Михалевым была предложена следующая постановка задачи: необходимо выбрать K векторов $a_1, \dots, a_K$, $K \geq r$ так, чтобы любой вектор можно было бы разложить (неединственным образом) по ним с минимальной суммой модулей коэффициентов разложения. Основной вопрос - как выбирать такие вектора и какую можно получить оценку.

Сформулирована гипотеза: оптимальным будет выбор таких векторов $a_1, \dots, a_K$, для которых объем множества

$$S(a_1, \dots, a_K) = \{ \sum_{i=1^K} \alpha_i a_i, \quad |\alpha_i| \leq 1 \}$$

является наибольшим. Получение алгоритмов и оценок для такой гипотезы позволит пролить новый свет как на методы крестовой аппроксимации, так и на задачи, связанные со сжатыми измерениями (compressed sensing).

2. Список работ, подготовленных к печати

[1] M. A. Rakhuba, I. V. Oseledets. Fast multidimensional convolution in low-rank format via cross approximation. подготовлена.

[2] А. Ю. Михалев, И. В. Офёркин, А. В. Сулимов, И. В. Оселедец, Е. Е. Тыртышников, В. Б. Сулимов. Континуальная модель растворителя:существенное ускорение расчетов при использовании мультизарядового приближения больших матриц. подготовлена.

[3] П.В. Харюк, И.В. Оселедец. WTT-разложение для семейств массивов и его применение для сжатия изображений. подготовлена.

3. Список работ, опубликованных в 2013 году

[1] P. A. Absil, I. V. Oseledets. Low-rank retractions: a survey and new results. Technical Report UCL-INMA-2013.04-v1, U.C.Louvain, October 2013.

[2] M. A. Botchev, I. V. Oseledets, E. E. Tyrtyshnikov. Time stepping free numerical solution of linear differential equations: Krylov subspace versus waveform relaxation. Technical Report 23803, University of Twente, 2013.

[3] Anwesha Chaudhury, Ivan Oseledets, Rohit Ramachandran. A computationally efficient technique for the solution of multi-dimensional PBMs of granulation. *Comput. Chem. Eng.*, pages 1–34, 2013. doi:`10.1016/j.compchemeng.2013.10.020`.

[4] S. V. Dolgov, B. N. Khoromskij, I. V. Oseledets, D. V. Savostyanov. Computation of extreme eigenvalues in higher dimensions using block tensor train format. arXiv preprint 1306.2269, 2013.

[5] Vladimir A. Kazeev, Ivan V. Oseledets. The tensor structure of a class of adaptive algebraic wavelet transforms. Preprint 2013-28, ETH SAM, Zürich, 2013.

[6] Christian Lubich, Ivan V. Oseledets. A projector-splitting integrator for dynamical low-rank approximation. *BIT*, pages 1–18, 2013. doi:`10.1007/s10543-013-0454-0`.

[7] Vladimir Lyashev, Ivan Oseledets, Delai Zheng. Tensor-based multiuser detection and intra-cell interference mitigation in LTE PUCCH. In *Proc. TELFOR 2013*, 2013.

[8] A. Yu. Mikhalev, I. V. Oseledets. Adaptive nested cross approximation of non-local operators. arXiv preprint 1309.1773, 2013.

[9] E.A. Muravleva, I.V. Oseledets. Fast low-rank solution of the Poisson equation with application to the Stokes problem. arXiv preprint 1306.2150, 2013.

[10] I. V. Oseledets. Constructive representation of functions in low-rank tensor formats. *Constr. Appr.*, 37(1):1–18, 2013. doi:`10.1007/s00365-012-9175-x`.

4. Участие в научных конференциях в России и за рубежом

[1] I. V. Oseledets. *Workshop on Matrix and Tensor Equations*, EPFL, October 10-11 2013 (Invited talk).

[2] I. V. Oseledets. Numerical linear algebra meets quantum computations. *CECAM Workshop*, ETH Zurich, May 15–18, 2013 (Invited talk).

[3] I. V. Oseledets. Numerical tensor methods and their applications. *ILAS*, Providence, USA, June 3–7, 2013 (Plenary speaker).

[4] I. V. Oseledets. Numerical tensor methods in higher dimensions. *Workshop on Novel Numerical Methods*, TU Munich, July 29 2013 (Invited talk).

[5] I. V. Oseledets. Numerical tensor methods: multiparametric and non-stationary problems. *MODRED 2013*, CIRM, June 10–14 2013 (Invited talk).

[6] I. V. Oseledets. Solving high-dimensional problems via stable and efficient tensor factorization techniques. *246 ACS meeting*, Indianapolis, September 8-12 2013 (Invited talk).

[7] I. V. Oseledets. Tensor methods for the solution of multiparametric and time-dependent problems. MPI MIS, Leipzig, January 21-23 2013 (Plenary talk).

[8] I. V. Oseledets. Tensors and computations. *Deline Christmas meeting*, IMSU, January 8 2013 (Plenary talk).

[9] I. V. Oseledets and A. Yu. Mikhalev. Numerical tensor methods and their applications. *ILAS*, Providence, USA, June 3–7, 2013 (Invited talk).

[10] И.В. Оселедец. Современные вычислительные методы и средства разработки программного обеспечения. САФУ, February 4-9 2013 (Пленарная лекция).

5. Работа в научных центрах и международных группах

- ETZ Zurich (май), группа проф. C. Schwab

6. Педагогическая деятельность и научное руководство

- Курс лекций для студентов 5 курса ФПФЭ МФТИ “Матричные методы анализа и сжатия данных”
- Руководство аспирантом МГУ А.Ю. Михалевым, аспиранткой ИВМ РАН Д.А. Сушниковой, студентом 6 курса МФТИ М.В. Рахубой, студентами 5 курса ВМК М.А. Кузнецовым и П.В. Харюком