ОТЧЕТ
Оселедца Ивана Валерьевича
по программе Фонда «Династия»

1. Результаты, полученные в 2012 году

Основное направление исследований в 2012 году связано с исследованием и обоснованием свойств вычислительных методов работы с многомерными массивами (тензорами). По результатам работ 16 марта защищена докторская диссертация “Вычислительные тензорные методы и их применения” по специальности 01.01.07 “Вычислительная математика”. Диссертация в данный момент находится на утверждении ВАК.

1.1 Основной результат

Методы разделения переменных играют важнейшую роль во многих приложениях, и анализ таких методов с точки зрения линейной алгебры представляет огромный интерес. Основным инструментом для представления многомерных массивов служат малопараметрические представления. В двумерном случае “рабочей лошадкой” является сингулярное разложение матриц. При попытке обобщить сингулярное разложение на случае многих переменных возникают принципиальные трудности, связанные либо с неустойчивостью представлений, или с завышенной сложностью. “Тензорные поезда” (или ТТ-формат) свободен от этих недостатков. Его можно вычислить, использую лишь сингулярное разложение, а число параметров не обязано зависеть экспоненциально от числа координатных осей. Напомним, что ТТ-форматом называется представление d-мерного массива в виде

$$A(i_1, \ldots, i_d) = G_1(i_1) \ldots G_d(i_d).$$

В этом виде можно записать различные малопараметрические представления, которые используются в приложениях, включая аппроксимацию волновых функций спиновых систем, скрытые марковские цепи и многие другие.

Основной результат связан с исследованием нестационарных задач вида

$$\frac{dy}{dt} = F(y),$$

и поиске приближенного решения в структурированном (ТТ)-формате. Практически все свойства ТТ-разложения можно получить как обобщение некоторых матричных результатов для матриц малого ранга. В двумерном случае для решения нестационарных уравнений очень успешным является подход, основанный на *динамической малоранговой аппроксимации.* Пусть у нас есть некоторая матрица, зависящая от времени, $A(t)$, и мы хотим приблизить ее матрицей $X(t)$ ранга r:

$$A(t) \approx X(t) = U(t)S(t)V^\top(t).$$

Естественно, можно вычислить наилучшую аппроксимацию potоточечно, но в этом случае зависимость $U(t), S(t), V(t)$ может быть негладкой, а также могут не сохраняться свойства исходной системы. Например, если $A(t)$ представляет собой решение уравнения Шредингера, то норма $A(t)$ не меняется, а при ортогональной проекции на многообразию матриц фиксированного ранга автоматически будет меняться норма приближения.

Подход динамической малоранговой аппроксимации имеет другую природу, и связан с так называемым *принципом Дирака-Френкеля.* $X(t)$ будем определять из вариационного условия

$$(A(t) - X(t), \delta v) = 0, \quad (1)$$

где δv — произвольный вектор из касательного пространства к многообразию матриц ранга r в точке X. Из (1) можно получить систему обыкновенных дифференциальных уравнений на параметры U, S, V вида

$$\begin{aligned}\dot{U} &= (I - UU^\top)\dot{A}VS^{-1}\\ \dot{V} &= (I - VV^\top)\dot{A}^\top US^{-\top}\\ \dot{S} &= U^\top \dot{A}V.\end{aligned} \tag{2}$$

Видно, что могут возникнуть существенные сложности, если S близка к вырожденной матрице. Однако, в 2012 году удалось (совместно с профессором Кристианом Любихом) получить совершенно нестандартную и простую явную устойчивую схему численного интегрирования для задачи (2) (препринт статьи уже подготовлен, и будет доступен в ближайшие недели). Опишем основную идею метода. Систему уравнений (2) можно переписать в виде одного уравнения для $X(t)$:

$$\dot{X} = P_X(\dot{A}),$$

где P_X — **проектор на касательное пространство**, который имеет очень простой вид:

$$P_X Z = UU^\top Z + ZVV^\top - UU^\top ZVV^\top.$$

Основная идея схемы интегрирования состоит в использовании схемы расщепления по этим трем слагаемым. Оказывается, что каждую подсистему можно проинтегрировать точно. При этом, важную роль играет порядок, в котором берется расщепление. Оказывается, что если сначала сделать шаг по $P_1 Z = UU^\top$, потом по $P_2 Z = -UU^\top ZVV^\top$, потом по $P_3 Z = ZVV^\top$ то получится эффективная схема, точность и устойчивость которой можно строго обосновать. Отметим, что этот факт в начале был установлен экспериментально.

Шаг по P_1 сводится к решению уравнения

$$\dot{US} = \dot{A}V, \quad \dot{V} = 0,$$

который легко проинтегрировать. Введем переменную $K = US$, тогда

$$K_0 = U_0 S_0, \quad K_1 = K_0 + (A_1 - A_0)V_0,$$

и после этого нужно вычислить любую факторизацию вида

$$K_1 = U_1 \widehat{S}_1, \quad U_1^\top U_1 = I.$$

Несмотря на то, что такая факторизация является неединственной, можно выбрать любую. На втором шаге модифицируется S

$$\widetilde{S}_1 = \widehat{S}_1 - U_1^\top (A_1 - A_0)V_0^\top,$$

после чего происходит аналогичное шагу по K интегрирование по $L = VS^\top$:

$$L_0 = V_0 \widetilde{S}_1^\top, \quad L_1 = L_0 + (A_1^\top - A_0^\top)U_1,$$

и вычисляется факторизация вида

$$L_1 = V_1 S_1^\top,$$

которая и определяет финальные V_1, S_1. Можно доказать следующие утверждения:

1. Схема является схемой первого порядка для системы (2)

2. Точность схемы не зависит от вырожденности/невырожденности матрицы S, а именно, если мы завысили ранг многообразия, то схема будет вести себя как будто она записана для "правильного" ранга

Численные эксперименты показали существенное превосходство KSL-схемы над другими подходами.

1.2 Другие результаты 2012 года

Отметим некоторые другие результаты 2012 года.

- Выявлена явная тензорная структура матриц вейвлетовского типа (совместно с В.А. Казеевым).
- Построен метод нахождения нескольких минимальных собственных значений на основе минимизации блочного отношения Рэлея (совместно с Д.В. Савостьяновым и Б.Н. Хоромским).

2. Список работ, подготовленных к печати

[1] V.A. Kazeev and I.V. Oseledets. On the tensor structure of a certain class of adaptive wavelet transforms. подготовлена.

[2] B. N. Khoromskij and I. V. Oseledets. Approximate computation of the minimal eigenvalue in high dimensions. подготовлена.

[3] C. Lubich and I. V. Oseledets. Projector-splitting integrators for the dynamical low-rank approximation of matrices and tensors. подготовлена.

[4] A.Yu. Mikhalev and I.V. Oseledets. Multicharge approximation method using maximum volume principle. подготовлена.

[5] E.A. Muravleva and I.V. Oseledets. Fast low-rank solution of the Poisson equation with application to the Stokes problem. подготовлена.

[6] I. V. Oseledets, B. N. Khoromskij, and D. V. Savostyanov. Approximate block eigensolver in high dimensions using TT-format. подготовлена.

[7] S. V. Dolgov, Boris N. Khoromskij, and Ivan V. Oseledets. Fast solution of multi-dimensional parabolic problems in the TT/QTT–format with initial application to the Fokker-Planck equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2012. принята.

[8] I. V. Oseledets. Constructive representation of functions in low-rank tensor formats. *Constr. Appr.*, 2012. принята.

3. Список работ, опубликованных в 2012 году

[1] S. V. Dolgov, Boris N. Khoromskij, Ivan V. Oseledets, and Eugene E. Tyrtyshnikov. Low-rank tensor structure of solutions to elliptic problems with jumping coefficients. *J. Comput. Math.*, 30(1):14–23, 2012.

[2] S. V. Dolgov and I. V. Oseledets. Solution of linear systems and matrix inversion in the TT-format. *SIAM J. Sci. Comput.*, 34(5):A2718–A2739, 2012.

[3] Sergey Dolgov, Boris N. Khoromskij, Ivan V. Oseledets, and Eugene E. Tyrtyshnikov. A reciprocal preconditioner for structured matrices arising from elliptic problems with jumping coefficients. *Linear Algebra Appl.*, 436(9):2980–3007, 2012.

[4] S. A. Goreinov, I. V. Oseledets, and D. V. Savostyanov. Wedderburn rank reduction and Krylov subspace method for tensor approximation. Part 1: Tucker case. *SIAM J. Sci. Comput.*, 34(1):A1–A27, 2012.

[5] I. V. Oseledets, B. N. Khoromskij, and R. Schneider. Efficient time-stepping scheme for dynamics on TT-manifolds. Preprint 24, MPI MIS, 2012.

[6] I. V. Oseledets and A. Yu Mikhalev. Representation of quasiseparable matrices using excluded sums and equivalent charges. *Linear Algebra Appl.*, 436(3):699–708, 2012.

4. Участие в научных конференциях в России и за рубежом

[1] I. V. Oseledets. Computational tensor methods and their applications. *SLMA*, KU Leuven, September 10–14, 2012 (Invited speaker).

[2] I. V. Oseledets. Problems that tensor methods can not solve yet. *28 GAMM Seminar*, MPI MIS, Leipzig, January 16–18, 2012 (Invited speaker).

[3] I. V. Oseledets. Tensor train decomposition and its applications. *NIPS*, Lake Taho, December 2–8, 2012 (Invited talk).

[4] И. В. Оселедец. Высокопроизводительные программные комплексы на Python на примере вычислительных тензорных методов. *Научный сервис в сети Интернет: поиск новых решений*, September 17–22, 2012 (Секционный доклад).

5. Работу в научных центрах и международных группах;

- Институт Макса Планка, Лейпциг (Германия), совместные научные исследования в рамках совместной лаборатории GERRUS LAB, участие в конференциях (январь-февраль).

6. Педагогическая деятельность и научное руководство

- Практикум на ЭВМ для студентов 3 курса ВМиК МГУ.
- Курс лекций для студентов 5 курса ФПФЭ МФТИ “Матричные методы анализа и сжатия данных”
- Руководство аспирантом 3 года ВМиК МГУ А. Ю. Михалевым, студенткой 5 курса ВМиК МГУ Д. Сушниковой, студентами 4 курса ВМиК МГУ М. А. Кузнецовым и П. В. Харюком