ОТЧЕТ
Ивана Валерьевича Оселедца
по программе Фонда «Династия»

1. Результаты, полученные в 2014 году

2014 год был посвящен исследованиям в области приближений матриц и тензоров, основанных на их малоранговых представлениях. Можно выделить три основных результата.

1. Были завершены исследования по динамической малоранговой

аппроксимации тензоров: получена явная устойчивая схема интегрирования второго нелинейных уравнений, возникающих при применении принципа Дирака-Френкеля для задачи динамического малоранговой аппроксимации в формате тензорного поезда.

1. Предложено обобщение понятия объема для прямоугольных матриц. Предложен алгоритм вычисления экстремальных прямоугольных подматриц. Доказаны оценки на рост коэффициентов разложения. (совместно с А. Ю. Михалевым).

2. Предложен эффективный адаптивный метод построения рациональных Крыловских пространств для малоранговой аппроксимации решения уравнения Ляпунова и вычисления матричной экспоненты. Экспериментально показано, что метод превосходит подходы, описанные в литературе (совместо с Д. А. Колесниковым).

   Опишем полученные результаты более подробно

1.1 Динамическая малоранговая аппроксимация тензоров

Задача динамической малоранговой аппроксимации ставится следующим образом. Зафиксируем некоторое "хорошее"многообразие $\mathcal{M}$ в пространстве всех тензоров и будем искать приближение именно на этом многообразии. В качестве многообразия будем рассматривать множество тензоров, представимых в виде тензорного поезда с размерами ядер ограниченными сверху $r_k \leq r$,

$$A(i_1, \ldots, i_d) = G_1(i_1) \ldots G_d(i_d), \tag{1}$$

где $G_k(i_k)$ имеет размер $r_{k-1} \times r_k, r_0 = r_d = 1$.

Пусть есть тензор $A(t)$ который меняется во времени и требуется построить приближение $X(t) \in \mathcal{M}$ для $A(t)$. Естественным подходом является вычисление элемента наилучшего приближения, однако во многих приложениях такой выбор является неудачным: более того, при такой формулировке не учитывается зависимость от времени. Поэтому, *принцип Дирака-Френкеля* дает вариационный принцип для нахождения приближенной траектории:

$$\|\frac{dX}{dt} - \frac{dA}{dt}\| \rightarrow \min, \tag{2}$$

что имеет простой геометрический смысл: скорость $\frac{dA}{dt}$ ортогонально проектируется на касательное пространство к многообразию. Из вариационного принципа получается система обыкновенных дифференциальных уравнений на ядра $G_k(i_k)$. Такая система является нелинейной, и может быть вырожденной (т.е., матрица коэффициентов перед старшей производной может быть неполного ранга). Альтернативой является запись уравнений для полного решения $X(t)$, которая имеет вид

$$\frac{dX}{dt} = P_X(\frac{dA}{dt}),$$

где $P_X(Z)$ - проектор на касательное пространство в точке X. На основании явного представления проекторов нам удалось получить простую явную схему расщепления для интегрирования полученных уравнений движения, которая требует лишь простых матричных разложений и ортогонализации, а также решения вспомогательных линейных систем дифференциальных уравнений. Более того, удалось обобщить все соответствующие результаты, полученные в прошлом году в двумерном случае:

1. Если $A(t)$ лежит на многообразии, схема является точной

2. Схема имеет второй порядок

Результаты опубликованы в виде препринта "Time integration of tensor trains C. Lubich, I. Oseledets, B. Vandereycken.

В целом, этим результатом подводится итог исследованиям по решению базовых задач в тензорных форматах, которые включают в себя решение оптимизационных задач, решение динамических задач и крестовая аппроксимация (восстановление по небольшому числу элементов массива).

1.2 Объем прямоугольных матриц

В ходе исследований методов построения аппроксимации тензоров по небольшому числу элементов (крестовые методы), возникает задача выбора "хороших"линейно-независимых строк из матрицы A размера $N \times r$, \$ N $\geq$ r\$ Принцип максимального объема состоит в следующем: выберем подматрицу H размера $r \times r$, которая имеет максимальный объем (максимальный по модулю определитель), Тогда

$$A = CH, \tag{3}$$

где матрица коэффициентов C имеет ограниченные по модулю коэффициенты, $|C_{ij}| \leq 1$. Это означает, что из N r-мерных векторов можно выбрать r так, чтобы каждый вектор представлялся как линейная комбинация базисных с коэффициентами, по модулю не превосходящими 1. Однако для оценок часто требуются другие нормы коэффициентов, $\|c\|_p$. Выбирая только r векторов лучше, чем $\|c_i\|_\infty$ оценки получить нельзя (достаточно легко привести пример). Поэтому возникла идея выбирать $K \geq r$ базисных векторов и находить (неоднозначные) разложения по этим базисным векторам с минимальной нормой. В такой постановке возникает новое определение обобщенного объема прямоугольной матрицы:

$$\mathrm{Vol}_p(A) = V(\{y : y = Hx, \quad \|x\|_p \leq 1\}),$$

т.е. объем образа единичного шара в p-норме при действии линейного оператора. В случае $p = 2$ объем можно выписать аналитически,

$$\mathrm{Vol}_p(A) = \gamma \sqrt{\det A^* A},$$

Важным в приложениях является 1-объем, но для его вычисления нужно другие алгоритмы. Для 2-объема были получены следующие важные оценки на нормы коэффициентов. Если выбрать $K \geq r$ строк, соответствующие подматрице максимального 2-объема, то вторые нормы коэффициентов будут ограничены

$$\|c_i\| \leq \sqrt{\frac{r}{K - r + 1}}.$$

В частности, для $K = 2r - 1$ получаем, что $\|c_i\| \leq 1$.

По результатам работы опубликована 1 статья (Михалев А.Ю., Оселедец И.В., Прямоугольные подматрицы и их применение, ДАН, 2015)

1.3 Адаптивный метод построения рациональных Крыловских пространств

Еще одним важным направлением стал новый метод построения рациональных Крыловских пространств. Рассмотрим систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dy}{dt} = Ay, \quad y(0) = y_0.$$

Решением является $y(t) = e^{At} y_0$. Если матрица A большая, вычисление матричной экспоненты невозможно, поэтому используют методы, основанные на подпространствах небольшой размерности. Естественно искать решение в виде

$$y(t) = Uc(t),$$

где U имеет размер $N \times r$, $c(t)$ имеет размер $r \times 1$, матрица U имеет ортонормированные столбцы. Будем рассматривать только случай $A + A^* < 0$. Тогда функционал ошибки будет иметь вид

$$\int_0^\infty \|e^{At} y_0 - Uc(t)\|^2 dt \to \min,$$

и оптимальное подпространство U можно получить, решив уравнение Ляпунова

$$AX + XA^\top = y_0 y_0^\top,$$

и посчитав старшие r собственных векторов для его решения X. Ясно, что целиком матрицу X в памяти сохранить нельзя (она имеет размер $N \times N$) однако оказывается, что она достаточно хорошо приближается матрицей малого ранга. Не вдаваясь в технические подробности (их можно найти в статье), сформулируем результат, который удалось получить: построен метод вычисления подпространства U, основанный на векторах вида $(A + s_k I)^{-1} y_0$, где s_k вычисляются по простым и явным формулам. Метод оказался более эффективным, чем ранее известные подходы (которые использовали методы рациональной аппроксимации).

2. Список работ, подготовленных к печати

[1] A. Mikhalev, I. V. Oseledets. Rectangular maximum-volume submatrices and their applications. подготовлена.

[2] А. Ю. Михалев, И. В. Оседедец. Прямоугольные подматрицы максимального объема и их вычисление. *ДАН*. принята.

3. Список работ, опубликованных в 2014 году

[1] M. A. Botchev, I. V. Oseledets, E. E. Tyrtyshnikov. Iterative across-time solution of linear differential equations: Krylov subspace versus waveform relaxation. *Comput. Math. Appl.*, 67(2):2088–2098, 2014. doi:10.1016/j.camwa.2014.03.002.

[2] Anwesha Chaudhury, Ivan Oseledets, Rohit Ramachandran. A computationally efficient technique for the solution of multi-dimensional PBMs of granulation. *Comput. Chem. Eng.*, 61(11):234–244, 2014. doi:10.1016/j.compchemeng.2013.10.020.

[3] S. V. Dolgov, B. N. Khoromskij, I. V. Oseledets, D. V. Savostyanov. Computation of extreme eigenvalues in higher dimensions using block tensor train format. *Computer Phys. Comm.*, 185(4):1207–1216, 2014. doi:10.1016/j.cpc.2013.12.017.

[4] Jutho Haegeman, Christian Lubich, Ivan Oseledets, Bart Vandereycken, Frank Verstraete. Unifying time evolution and optimization with matrix product states. arXiv preprint 1408.5056, 2014.

[5] D. A. Kolesnikov, I. V. Oseledets. From low-rank approximation to an efficient rational Krylov subspace method for the Lyapunov equation. arXiv preprint 1410.3335, 2014.

[6] M. S. Litsarev, I. V. Oseledets. Low rank approximations for the DEPOSIT computer code. arXiv preprint 1403.4068, 2014.

[7] Mikhail S. Litsarev, Ivan V. Oseledets. The DEPOSIT computer code based on the low rank approximations. *Computer Phys. Comm.*, 185(10):2801–2082, 2014. doi:10.1016/j.cpc.2014.06.012.

[8] Christian Lubich, Ivan Oseledets, Bart Vandereycken. Time integration of tensor trains. arXiv preprint 1407.2042, 2014.

[9] Christian Lubich, Ivan V. Oseledets. A projector-splitting integrator for dynamical low-rank approximation. *BIT*, 54(1):171–188, 2014. doi:10.1007/s10543-013-0454-0.

[10] I. V. Oseledets, G. V. Ovchinnikov. Fast, memory efficient low-rank approximation of SimRank. arXiv preprint 1410.0717, 2014.

[11] Ivan Oseledets. Solving high-dimensional problems via stable and efficient tensor factorization techniques. In *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*, volume 246, pages 244–Phys, 2014.

[12] G. V. Ovchinnikov, D. A. Kolesnikov, I. V. Oseledets. Algebraic reputation model RepRank and its application to spambot detection. arXiv preprint 1411.5995, 2014.

[13] M. V. Rakhuba, I. V. Oseledets. Fast multidimensional convolution in low-rank formats via cross approximation. arXiv preprint 1402.5649, 2014.

[14] Zhang Zheng, Xiu Yang, Ivan V. Oseledets, George Em Karniadakis, Luca Daniel. Enabling high-dimensional hierarchical uncertainty quantification by ANOVA and Tensor-Train decomposition. *IEEE Trans. Comput-aided Des. Integr. Circuits Syst.*, 99, 2014. doi:10.1109/TCAD.2014.2369505.

4. Участие в научных конференциях в России и за рубежом

[1] I. V. Oseledets. Low-rank approximation of matrices and tensors. *INTELECT*, EPFL, September 24-26 2014 (Invited talk).

[2] I. V. Oseledets. Multidimensional numerical algorithms and their applications. *Conference on numerical analysis and scientific computing*, MPI MIS, January 7-10 2014 (Plenary talk).

[3] I. V. Oseledets. Multidimensional numerical algorithms and their applications. *Skoltech Colloqium*, Skoltech, January 30 2014 (Seminar talk).

[4] I. V. Oseledets. Numerical tensor methods: algorithms and tools. *ECMTB*, University of Groningen, June 15-19 2014 (Invited talk).

[5] I. V. Oseledets. Numerical tensor methods: algorithms and tools. *BGRS-SB-2014*, Institute of Numerical Mathematics and Mathematical Geophysics, June 23-28 2014 (Plenary talk).

[6] I. V. Oseledets. Numerical tensor methods: tools and applications. *SIAM Conference on Imaging Sciences*, Hong Kong Baptist University, May 12-14 2014 (Invited talk).

[7] I. V. Oseledets, C. Lubich, and B. Vandreycken. Time integration of tensor trains. *HDQD*, Université de Strasbourg, September 2-5 2014 (poster).

5. Работа в научных центрах и международных группах

Нет

6. Педагогическая деятельность и научное руководство

- Прочитаны два курса в Сколковском институте науки и технологий "Fast methods for partial differential equations и "numerical linear algebra"
- А. Ю. Михалев 30 сентября защитил кандидатскую диссертацию на тему "Метод приближения блочно-малоранговой матрицы по ее элементам"
- Руководство аспиранткой ИВМ РАН Д. А. Сушниковой, аспирантами МГУ М. А. Кузнецовым и П. В. Харюком, аспирантом МФТИ М. В. Рахубой, аспирантами Сколтеха Д. А. Колесниковым, В. Барановым, А. Чертковым, Е. Фроловым, А. Фонаревым, С. Ашмановым

7. Результаты гранта

В целом, поставленные задачи выполнены: завершенно исследование базовых алгоритмов приближения тензоров, получены интересные и важные результаты по динамической малоранговой аппроксимации, решения задач на собственные значения. Получен неожиданный результат по обобщению понятия объема матрицы. Не удалось уделить достаточного внимания исследованию методов разложения в конечных полях, но этот вопрос остается в поле зрения на следующие годы.