

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА НА ОСНОВЕ ТЕНЗОРНЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ДАННЫХ

Е. Е. Тыртышников

Институт вычислительной математики Российской академии наук

24 августа 2012



ЧТО ТАКОЕ ТЕНЗОР

Тензор = d -линейная форма = d -мерный массив:

$$A = [a_{i_1 i_2 \dots i_d}]$$

Тензор A имеет:

- ▶ размерность (порядок) d = число индексов (измерений, мод, осей, направлений, путей)
- ▶ размер $n_1 \times \dots \times n_d$ (число отсчетов по каждой оси)

УМНОЖЕНИЕ 2×2 -МАТРИЦ

Правило “строка на столбец” дает 8 умножений:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{bmatrix}$$

АЛГОРИТМ ШТРАССЕНА ДЛЯ БЫСТРОГО УМНОЖЕНИЯ МАТРИЦ

В 1969 Штрассен (Strassen) открыл алгоритм, в котором всего 7 умножений. При умножении блочных 2×2 -матриц алгоритм Штрассена содержит 7 умножений блоков:

$$\alpha_1 = (a_{11} + a_{22})(b_{11} + b_{22})$$

$$\alpha_2 = (a_{21} + a_{22})b_{11}$$

$$\alpha_3 = a_{11}(b_{12} - b_{22})$$

$$\alpha_4 = a_{22}(b_{21} - b_{11})$$

$$\alpha_5 = (a_{11} + a_{12})b_{22}$$

$$\alpha_6 = (a_{21} - a_{11})(b_{11} + b_{12})$$

$$\alpha_7 = (a_{12} - a_{22})(b_{21} + b_{22})$$

$$c_{11} = \alpha_1 + \alpha_4 - \alpha_5 + \alpha_7$$

$$c_{12} = \alpha_3 + \alpha_5$$

$$c_{21} = \alpha_2 + \alpha_4$$

$$c_{22} = \alpha_1 + \alpha_3 - \alpha_2 + \alpha_6$$

КАНОНИЧЕСКОЕ ТЕНЗОРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ДЛЯ ПОИСКА БЫСТРОГО АЛГОРИТМА УМНОЖЕНИЯ $n \times n$ МАТРИЦ

$$\begin{bmatrix} c_1 & c_2 \\ c_3 & c_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 & b_2 \\ b_3 & b_4 \end{bmatrix} \quad c_k = \sum_{i=1}^{n^2} \sum_{j=1}^{n^2} h_{ijk} a_i b_j$$

$$h_{ijk} = \sum_{\alpha=1}^R u_{i\alpha} v_{j\alpha} w_{k\alpha}$$

$$\Rightarrow c_k = \sum_{\alpha=1}^R w_{k\alpha} \left(\sum_{i=1}^{n^2} u_{i\alpha} a_i \right) \left(\sum_{j=1}^{n^2} v_{j\alpha} b_j \right)$$

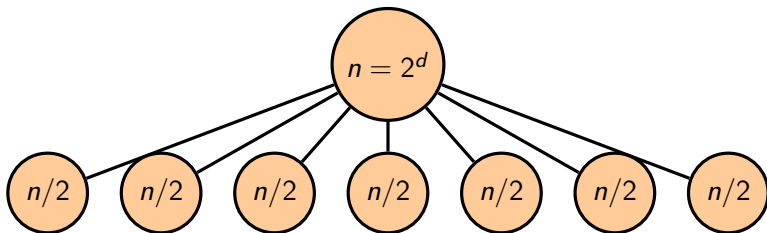
Теперь лишь R умножений блоков!

Если $n = 2$, то $R = 7$ (Strassen, 1969).

Рекурсия $\Rightarrow O(n^{\log_2 7})$ умножений для произвольного n .

РЕКУРСИЯ ДЛЯ БЫСТРОГО УМНОЖЕНИЯ МАТРИЦ

Используя рекурсию, можно перемножить две матрицы порядка $n = 2^d$ с затратой не более $7^d = n^{\log_2 7}$ и $7n^{\log_2 7}$ сложений-вычитаний.



КАНОНИЧЕСКОЕ ТЕНЗОРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ

Тензор вида

$$u(i)v(j)w(k)$$

называется *тензором ранга 1* или *скелетоном*.

Сумма скелетонов

$$a(i, j, k) = \sum_{\alpha=1}^r u(i, \alpha)v(j, \alpha)w(k, \alpha)$$

определяется матрицами

$$U = [u(i, \alpha)], \quad V = [v(j, \alpha)], \quad W = [w(k, \alpha)]$$

ТЕОРЕМА КРУСКАЛА

При условии

$$k(U) + k(V) + k(W) \geq 2r + 2$$

скелетоны в сумме r скелетонов определяются однозначно с точностью до порядка суммирования и r является наименьшим возможным числом слагаемых.

ГЛАВНАЯ ПРОБЛЕМА

Использовать массив как средство задания тензора практически невозможно:

- ▶ если $d = 300$ и $n = 2$, то получаем массив с числом элементов $2^{300} \gg 10^{83}$

ЧТО ДЕЛАТЬ

- ▶ Выделять более узкий, специальный класс тензоров.
- ▶ Найти подходящий *формат представления* и одновременно
- ▶ *эффективные методы* реализации тензорной арифметики исключительно в выбранном формате.
- ▶ Важно иметь *общий алгебраический подход* для широкого класса задач.

КАК ДЕЛАТЬ

Как это делать – было понято лишь в начале 2009 года.

Известные до этого форматы
(каноническое разложение, разложение Таккера)
по разным причинам малополезны.

Новые форматы:

- ▶ ТТ (тензорный поезд)
- ▶ НТ (иерархическое разложение Таккера)

Что мешало общему подходу появиться раньше?

МАТРИЦЫ В 20-М ВЕКЕ

Идея *разделения переменных* в теории матриц связана с понятием ранга матрицы.

- ▶ Скелетное разложение матрицы
- ▶ Сингулярное разложение

$$A = \sum_{\alpha=1}^r \sigma_{\alpha} v_{\alpha} u_{\alpha}^{\top}$$

- ▶ Теория приближений с понижением ранга (Шмидт, Лидский, Виландт, Мирский, Дж. фон Нейман)
- ▶ Эффективные алгоритмы: SVD (Голуб-Кахан), метод bidiagonalization (Ланцош), крестовый интерполяционный метод (ИВМ РАН).

КАНОНИЧЕСКОЕ ТЕНЗОРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ

Аналог скелетного разложения (Хичкок, 1927)

$$a(i_1, \dots, i_d) = \sum_{\alpha=1}^r u_1(i_1, \alpha) \dots u_d(i_d, \alpha)$$

В терминах *кронекеровского произведения* матриц

$$A = \sum_{\alpha=1}^r U_{1\alpha} \otimes \dots \otimes U_{d\alpha}$$

КАНОНИЧЕСКОЕ ТЕНЗОРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ

Случай $d \geq 3$ радикально отличается от случая $d = 2$:

- ▶ конечные алгоритмы вычисления ранга (минимального r) отсутствуют;
- ▶ ранг зависит от числового поля, которому принадлежат элементы тензоров;
- ▶ множество тензоров ранга не выше r незамкнуто;
- ▶ аппроксимация тензора с понижением ранга является сложной многомерной оптимизационной задачей.

ЧЕМ ЗАМЕНИТЬ КАНОНИЧЕСКИЙ ФОРМАТ?

Известное статистикам разложение Таккера

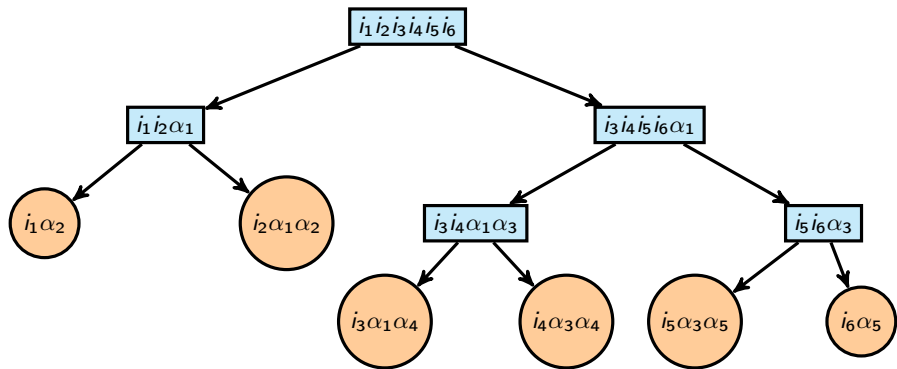
$$a(i_1, \dots, i_d) = \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} \dots \sum_{\alpha_d=1}^{r_d} g(\alpha_1, \dots, \alpha_d) q_1(i_1, \alpha_1) \dots q_d(i_d, \alpha_d)$$

не уменьшает число измерений.

Можно ли d -тензоры записывать с помощью обычных скелетных разложений обычных матриц?

Именно это сделано в начале 2009 года.

редукция размерности

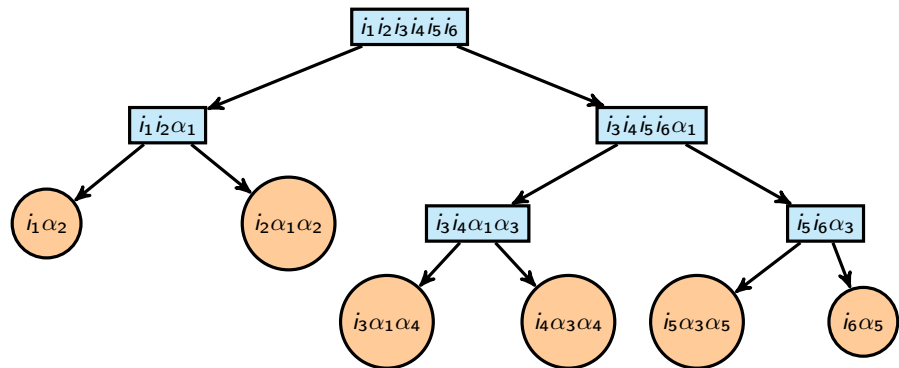


серия скелетных разложений:

$$a(i_1 i_2 ; i_3 i_4 i_5 i_6) = \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} u(i_1 i_2 ; \alpha_1) v(i_2 i_3 i_4 i_5 ; \alpha_1),$$

аналогично для u и v .

тензорный поезд



$$a(i_1, i_2, i_3, i_4, i_5, i_6) = \sum_{\alpha_1} \sum_{\alpha_2} \sum_{\alpha_3} \sum_{\alpha_4} \sum_{\alpha_5}$$

$$g_1(i_1, \alpha_2) g_2(\alpha_2, i_2, \alpha_1) g_3(\alpha_1, i_3, \alpha_4) g_4(\alpha_4, i_4, \alpha_3) g_5(\alpha_3, i_5, \alpha_5) g_6(\alpha_5, i_6)$$

ТЕНЗОРНЫЙ ПОЕЗД

ТТ-разложение d -тензора
(после перенумерации индексов суммирования)

$$a(i_1, \dots, i_d) = \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} \dots \sum_{\alpha_{d-1}=1}^{r_{d-1}}$$

$$g_1(i_1, \alpha_1) g_2(\alpha_1, i_2, \alpha_2) \dots g_{d-1}(\alpha_{d-2}, i_{d-1}, \alpha_{d-1}) g_d(\alpha_{d-1}, i_d)$$

$$a(i_1, \dots, i_d) = G_1^{i_1} G_2^{i_2} \dots G_{d-1}^{i_{d-1}} G_d^{i_d}$$

nd матриц размеров $r \times r$

ВСЕ СВОДИТСЯ К МАТРИЧНЫМ ВЫЧИСЛЕНИЯМ

- ▶ Вместо n^d элементов для представления используются dnr^2 элементов 3-тензоров.
- ▶ Минимальные значения ТТ-рангов являются обычными рангами обычных матриц, ассоциированных с исходным тензором:

$$r_k = \text{rank } A_k, \quad A_k = [a(i_1 \dots i_{k-1}; i_k \dots i_d)].$$

- ▶ Тензорная арифметика (сложение, умножения тензора на матрицу, поэлементные произведения, суммирование элементов) легко реализуется в ТТ-формате.

ОСНОВНЫЕ ТТ-АЛГОРИТМЫ

- ▶ Метод ТТ-округления сложности $O(dnr^3)$.
- ▶ Обобщенный крестовый интерполяционный метод, строящий тензорный поезд по специально выбираемым элементам тензора, число которых всего лишь порядка dnr^2 .
- ▶ Введение дополнительных измерений путем квантизации исходных измерений (QTT) и алгебраические дискретные вейвлет-преобразования (WTT).

ТТ-ОКРУГЛЕНИЕ

Цель ТТ-округления та же, что и при округлении результатов операций на компьютере. Два требования: *эффективность* и *гарантированная оценка погрешности*.

- ▶ Вычисляются сингулярные числа и специальным образом параметризованные сингулярные векторы одновременно для всех матриц A_k , ассоциированных с заданным тензорным поездом, с затратой всего лишь $O(dnr^3)$ операций.
- ▶ Погрешность ТТ-приближения в евклидовой (фробениусовой) норме отличается от погрешности наилучшего ε -приближения с заданными ТТ-рангами не более чем в $\sqrt{d-1}$ раз.

ТТ-ИНТЕРПОЛЯЦИЯ

Цель – интерполировать неявно заданный тензор некоторым тензорным поездом по *малой* части его элементов — порядка dnr^2 .

Крестовый интерполяционный метод для тензоров строится как обобщение крестового метода для матриц (1995) и опирается на следующий результат теории матриц.

ПРИНЦИП НАИБОЛЬШИХ ОБЪЕМОВ

Теорема (ИВМ РАН). Пусть матрица A имеет блочный вид

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix},$$

где $r \times r$ -блок A_{11} имеет наибольший определитель по модулю (объем) среди всех $r \times r$ -подматриц матрицы A . Тогда отклонение матрицы

$$A_r = \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{21} \end{bmatrix} A_{11}^{-1} \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \end{bmatrix}$$

от A в чебышевской норме не более чем в $(r + 1)^2$ превышает отклонение наилучшего приближения ранга r .

ТТ-КВАНТИЗАЦИЯ

При сохранении общего количества элементов тензора эффективность можно существенно повысить за счет *увеличения числа измерений и уменьшения числа отсчетов по каждому измерению.*

“Экстремальный” случай – превращение вектора размера $N = 2^d$ в d -тензор размеров

$$2 \times 2 \times \dots \times 2.$$

При использовании ТТ-формата с ограниченными ТТ-рангами сложность $O(N)$ может понижаться до $O(\log_2 N)$.

ТТ \rightarrow QТТ (квантизация исходных измерений)

ПРИМЕРЫ КВАНТИЗАЦИИ

$f(x)$ – функция на $[0, 1]$

$$a(i_1, \dots, i_d) = f(ih), \quad i = \frac{i_1}{2} + \frac{i_2}{2^2} + \dots + \frac{i_d}{2^d}$$

Значения f образуют тензор размера $2 \times \dots \times 2$.

ПРИМЕР 1. $f(x) = e^x + e^{2x} + e^{3x}$

ttrank= 2.7 ERROR=1.5e-14

ПРИМЕР 2. $f(x) = 1 + x + x^2 + x^3$

ttrank= 3.4 ERROR=2.4e-14

ПРИМЕР 3. $f(x) = 1/(x - 0.1)$

ttrank= 10.1 ERROR=5.4e-14

ТЕОРЕМЫ

Если имеется ε -аппроксимация с разделенными переменными

$$f(x + y) \approx \sum_{k=1}^r u_k(x)v_k(y), \quad r = r(\varepsilon),$$

то существует QTT-аппроксимация с погрешностью ε и TT-рангами $\leq r$.

Если $f(x)$ – сумма r экспонент, то существует QTT-разложение с рангами r .

Для полинома степени m существует TT-разложение с рангами $r = m + 1$.

Если $f(x) = 1/(x - \delta)$, то $r = \log \varepsilon^{-1} + \log \delta^{-1}$.

АЛГЕБРАИЧЕСКИЕ ВЕЙВЛЕТ-ФИЛЬТРЫ

$$a(i_1 \dots i_d) = u_1(i_1 \alpha_1) a_1(\alpha_1 i_2 \dots i_d) + e_1$$

$$u_1(i_1 \alpha_1) u(i_1 \alpha'_1) = \delta(\alpha_1, \alpha'_1)$$

$$a \rightarrow a_1 = u_1 a \rightarrow a_2 = u_2 a_1 \rightarrow a_3 = u_3 a_2 \quad \dots$$

ТТ-ИНТЕГРИРОВАНИЕ

Вычисляется d -мерный интеграл

$$I(d) = \int \sin(x_1 + x_2 + \dots + x_d) dx_1 dx_2 \dots dx_d =$$

$$\operatorname{Im} \int_{[0,1]^d} e^{i(x_1+x_2+\dots+x_d)} dx_1 dx_2 \dots dx_d = \operatorname{Im}\left(\left(\frac{e^i - 1}{i}\right)^d\right).$$

$n = 11$ узлов по каждому измерению \Rightarrow всего n^d значений!

Для построения ТТ-интерполяции из них реально вычисляется лишь *малая часть*.

d	$I(d)$	Относит. погрешность	Время
10	-6.299353e-01	1.409952e-15	0.14
100	-3.926795e-03	2.915654e-13	0.77
500	-7.287664e-10	2.370536e-12	4.64
1000	-2.637513e-19	3.482065e-11	11.60
2000	2.628834e-37	8.905594e-12	33.05
4000	9.400335e-74	2.284085e-10	105.49

Интеграл

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2}$$

приближается интегралом по конечному отрезку, а последний вычисляется по формуле прямоугольников.

Для машинной точности нужно порядка 2^{77} значений. Вектор значений рассматривается как тензор размеров $2 \times 2 \times \dots \times 2$.

При TT-интерполяции с машинной точностью TT-ранги ≤ 12 .
Меньше 1 сек. на ноутбуке.

ТЕНЗОРНЫЕ ПОЕЗДА В КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Большое число измерений естественно возникает в задачах квантовой молекулярной динамики:

$$H\Psi = \left(-\frac{1}{2}\Delta + V(R_1, \dots, R_f)\right)\Psi = E\Psi,$$

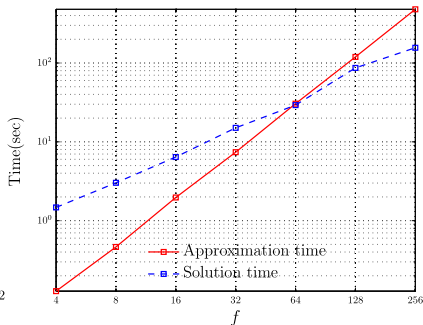
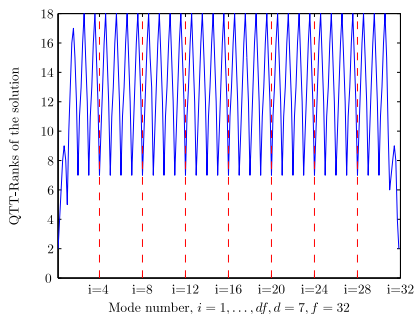
V – заданная поверхность потенциальной энергии (PES).

Вычисление V требует решения уравнения Шредингера при разных значениях координат атомов R_1, \dots, R_f . Метод ТТ-интерполяции позволяет найти тензорный поезд для V по относительно малому числу значений V .

ТЕНЗОРНЫЕ ПОЕЗДА В КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Потенциал Эно-Хайлеса:

$$V(q_1, \dots, q_f) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^f q_k^2 + \lambda \sum_{k=1}^{f-1} \left(q_k^2 q_{k+1} - \frac{1}{3} q_k^3 \right).$$



ТТ-ранги и время решения задачи Эно-Хайлеса
(Оселедец–Хоромский).

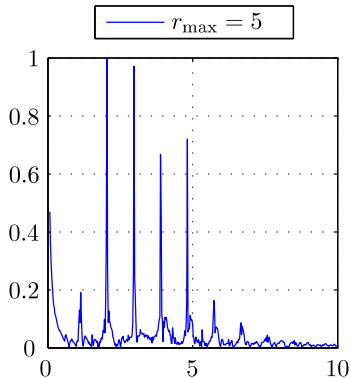
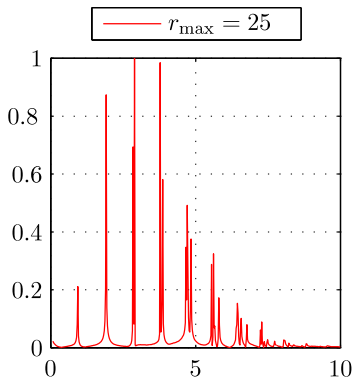
ВЫЧИСЛЕНИЕ СПЕКТРА

Вычисление спектра (многих собств. значений) – с помощью эволюции по времени:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = iH\Psi, \quad \Psi(0) = \Psi_0.$$

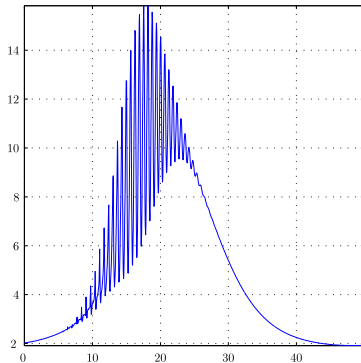
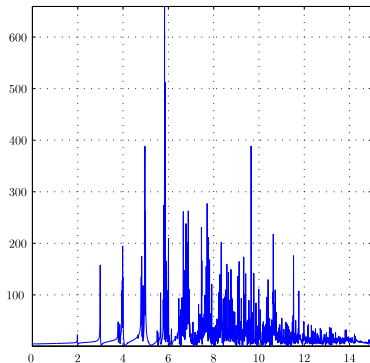
“Физическая схема” имеет вид $\Psi(t) = e^{iHt}\Psi_0$, вычисляется автокорреляционная функция $a(t) = (\Psi(t), \Psi_0)$, а затем спектр – с помощью Фурье-преобразования от $a(t)$.

ВЫЧИСЛЕНИЕ СПЕКТРА В ЦЕЛОМ



Спектры для потенциала Эно-Хайлеса при $f = 2$ и различных ТТ-рангах.

ВЫЧИСЛЕНИЕ СПЕКТРА



Спектры для потенциала Энно-Хайлеса при $f = 4$ и $f = 10$.

ТЕНЗОРНЫЕ ПОЕЗДА ДЛЯ УРАВНЕНИЙ С ПАРАМЕТРАМИ

Уравнение диффузии на квадрате $[0, 1]^2$. Область разбита на $p \times p$ квадратов с постоянными коэффициентами диффузии, p^2 параметров со значениями от 0.1 до 1.

256 точек по каждому из параметров,
пространственная сетка 256×256 .

Решение *при всех значениях параметров* приближается
тензорным поездом с относительной точностью 10^{-5} :

Число параметров	Память на хранение решения
4	8 Мб
16	24 Мб
64	78 Мб

WTT ДЛЯ СЖАТИЯ ДАННЫХ

Для сигнала $f(x) = \sin(100x)$ на равномерной сетке с шагом $1/2^d$ по $0 \leq x \leq 1$ после превращения его в тензор размеров $2 \times 2 \times \dots \times 2$ все ТТ-ранги точно равны 2. Если применить преобразования Добеши, то ненулевых коэффициентов будет *намного больше*:

ε	память(WTT)	память для фильтров	память(D4)	память(D8)
10^{-4}	2	152	3338	880
10^{-6}	2	152	19696	2010
10^{-8}	2	152	117575	6570
10^{-10}	2	152	845869	15703
10^{-12}	2	152	1046647	49761

$$\sin(100x), n = 2^d, d = 20$$

WTT ДЛЯ СЖАТИЯ МАТРИЦ

WTT для векторизованных матриц (применяется к тензору \tilde{a}):

$$a(i_1 \dots i_d; j_1 \dots j_d) \rightarrow \tilde{a}(i_1 j_1; \dots; i_d j_d).$$

Пример WTT-сжатия с точности $\varepsilon = 10^{-8}$ для матрицы Коши–Гильберта

$$a_{ij} = 1/(i - j) \text{ при } i \neq j, \quad a_{ii} = 0.$$

$n = 2^d$	память(WTT)	память(D4)	память(D8)	память(D20)
2^5	388	992	992	992
2^6	752	4032	3792	3348
2^7	1220	15750	13246	8662
2^8	1776	59470	41508	20970
2^9	2260	213392	102078	45638
2^{10}	2744	780590	215738	95754
2^{11}	3156	1538944	306880	176130

ТЕНЗОРНЫЕ ПОЕЗДА В ДИСКРЕТНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Среди элементов ТТ-интерполяции тензора найти минимум или максимум. **Задача дискретной оптимизации** решается как задача на собственные значения для диагональных матриц. Блочная минимизация отношения Релея в ТТ-формате, блоки размера 5, ТТ-ранги ≤ 5 (О. С. Лебедева).

Функция	Область	Размер	Число итер.	(Ax, x)	(Ae_i, e_i) $e_i \approx x$	Точный max
$\prod_{i=1}^3 (1 + 0.1 x_i + \sin x_i)$	$[1, 50]^3$	2^{15}	30	428.2342	429.2342	429.2342
то же	$[1, 50]^3$	2^{30}	50	430.7838	430.7845	
$\prod_{i=1}^3 (x + \sin x_i)$	$[1, 20]^3$	2^{15}	30	8181.2	8181.2	8181.2
то же	$[1, 20]^3$	2^{30}	50	8181.2	8181.2	

ВЫВОДЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

- ▶ ТТ-алгоритмы (см. <http://pub.inm.ras.ru>) – это эффективные новые инструменты для сжатия векторов и матриц. В ТТ-алгоритмах для матричных задач память и сложность зависят от размеров матриц *логарифмически*.
- ▶ Есть свободный доступ к текущей версии библиотеки ТТ-алгоритмов: <http://spring.inm.ras.ru/ose1>.
- ▶ Имеются некоторые общие теоремы об оценке ТТ-рангов. Получение более точных и общих оценок является предметом исследований. В отличие от оценок для линейных методов аппроксимации, при их получении приходится преодолевать трудности, связанные с существенно нелинейным характером ТТ-разложений.

ВЫВОДЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

- ▶ ТТ-методы интерполяции дают новые эффективные методы табуляции многих известных и возникающих в различных приложениях функций, в том числе многомерных и трудно вычисляемых.
- ▶ Есть примеры применения ТТ-методов для точного и быстрого вычисления многомерных интегралов.
- ▶ ТТ-методы могут успешно применяться для обработки изображений и сигналов и конкурировать с другими известными методами.
- ▶ ТТ-методы являются основой для численного решения многомерных задач квантовой химии, квантовой молекулярной динамики, оптимизации по параметрам и редукции моделей, многопараметрических и стохастических дифференциальных уравнений.