Секция «Вычислительная математика и кибернетика»

Метод решения задачи оптимизации в TT и QTT форматах

Лебедева Ольга Сергеевна
Аспирант
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Факультет вычислительной математики и кибернетики, Москва, Россия
E-mail: lebedevaos@gmail.com

С открытием в 2009 году TT формата разложения тензоров (Tensor Train decomposition) для ряда многомерных задач стало возможным избавиться от «проклятия размерности» и получать решение в виде разложения с малым числом параметров [1, 2, 3]: вместо показательной зависимости общего числа неизвестных от количества измерений задачи TT разложение может давать линейную зависимость. TT разложение также может применяться к большим немногомерным задачам: число размерностей формально увеличивается путём введения виртуальных измерений, после чего применяется TT разложение. Такой формат представления векторов и матриц получил название QTT (Quantics Tensor Train) [4].

На основе TT и QTT разложений стали появляться новые методы решения задач различных классов, в том числе методы решения линейных систем, задач на собственные значения, вычисления многомерных интегралов и пр. В данной работе мы предлагаем метод решения задачи оптимизации, основанный на разложении в TT формате и методе решения экстремальной симметричной спектральной задачи.

Предположим, требуется найти максимум (минимум) некоторой достаточно гладкой функции $f(t_1, \ldots, t_d)$ на d-мерном параллелепипеде. Рассмотрим её сужение на тензорное произведение d одномерных сеток с n узлами по каждому направлению: $a_{i_1,\ldots,i_d}$. Чтобы найти максимальный элемент массива $a_{i_1,\ldots,i_d}$, нужно вычислить все его элементы, что уже при $d = 10$ потребует слишком много времени и памяти почти на любых сетках. Однако, если $a_{i_1,\ldots,i_d}$ представлено (хотя бы приближённо) в виде малопараметрического разложения в TT формате, то оказывается возможным найти максимальный элемент за время, пропорциональное d, то есть логарифмически зависящее от общего числа неизвестных!

Для этого мы рассматриваем спектральную задачу с матрицей $diag(a)$, представленной в QTT формате:

$$diag(a)x = \lambda x. \qquad (1)$$

Старшее собственное значение будет представлять собой максимальный элемент тензора, а соответствующий собственный вектор указывать на положение максимума. Идея решения задачи оптимизации с помощью спектральной задачи для диагональной матрицы встречается, например, в работе [5] применительно к каноническому формату.

Для экстремальной задачи на собственные значения симметричной матрицы нами был построен итерационный метод решения — метод минимизации отношения Рэлея типа сопряжённых градиентов в блочном QTT формате со сложностью выполнения итерации, пропорциональной d [6]. Для этого метода верна теория сходимости, разработанная в [7]. Отметим, что собственные векторы диагональной матрицы вида

$e_i = (0 \ldots 0\ 1\ 0 \ldots 0)^T$ в точности представляются в QTT формате с числом элементов nd, благодаря чему становится возможным применение выбранного итерационного метода.

Осталось понять, как можно получить разложение в TT формате тензора $a_{i_1,\ldots,i_d}$, не вычисляя все его элементы. Оно может быть вычислено как комбинация QTT разложений функций, для которых известно аналитическое представление [8], как решение какой-то задачи, полученное в QTT формате и пр. Наибольший же практический интерес представляет крестовый метод построения TT разложения [3], который даёт приближённое разложение в TT формате по небольшому числу элементов тензора, обращаясь к ним в режиме «чёрный ящик».

Нами были проведены численные эксперименты для ряда модельных функций и нескольких задач моделирования иммунологических процессов. При написании кода мы использовали процедуры библиотеки TT-Toolbox [8]. Логарифмическая скорость выполнения итерации и требуемой памяти от общего числа неизвестных подтвердилась.

Литература

1. Oseledets I. V. A new tensor decomposition // Doklady Mathematics / Springer. V.80 2009. P. 495-496

2. Oseledets I. V., Tyrtyshnikov E. E. Breaking the curse of dimensionality, or how to use SVD in many dimensions // SIAM J. Sci. Comput. 2009. V. 31, 157; 5. P. 3744–3759.

3. Oseledets I., Tyrtyshnikov E. TT-cross approximation for multidimensional arrays // Linear Algebra and its Applications. 2010. V. 432, 157; 1. P. 70–88.

4. Oseledets I.V. Approximation of $2^d \times 2^d$ Matrices Using Tensor Decomposition - SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 2010 .

5. Espig M. Effiziente Bestapproximation mittels Summen von Elementartensoren in hohen Dimensionen. PhD thesis, Universitat Leipzig, 2008.

6. Лебедева О. С. Блочный тензорный метод типа сопряжённых градиентов для минимизации отношения Рэлея в QTT формате // Сборник тезисов XVII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2010» секция «Вычислительная математика и кибернетика». М., 2010, С.142-143.

7. Lebedeva O.S. Block tensor conjugate gradient-type method for Rayleigh quotient minimization in two-dimensional case // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2010. V. 50, 157; 5. P. 749–765.

8. Oseledets I. V. Explicit tensor-train representation of certain functions // Preprint 2010-04, INM RAS. 2010.

9. TT-Toolbox http://spring.inm.ras.ru/osel/

Слова благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 10-01-00757-а, 09-01-91332-ННИО$_{\text{а}}, 08-01-00115)$, грантомРФФИ$/PFG09-01-91332$, программойПриоритетныхисс