

УДК 519.632.4

ПОСТРОЕНИЕ Z-ПЕРЕСТАВЛЕННЫХ МАТРИЦ В QTT-ФОРМАТЕ

© 2020 г. Л. Б. Маркеева^{1,*}, И. В. Цыбулин²¹ 143026 Москва, ул. Большой бульвар, 30, Сколковский Институт Науки и Техники, Россия² 119021 Москва, ул. Льва Толстого, 16, Яндекс, Россия

*e-mail: l.markeeva@skoltech.ru

Поступила в редакцию 27.07.2020 г.
Переработанный вариант 27.07.2020 г.
Принята к публикации 04.08.2020 г.

В работе представлен метод построения матриц в QTT-формате, столбцы и строки которых переупорядочены специальным образом – z-перестановкой. Для получения матрицы в данной перестановке вводится новая операция в QTT-формате (Quantized Tensor Train) – z-kron. Такое переупорядочивание позволяет уменьшить QTT-ранги аппроксимации матрицы жесткости, что позволяет ускорить сходимость численного решения системы. Например, при решении задачи Дирихле для уравнения Пуассона методом конечных элементов (МКЭ), где для хранения матрицы коэффициентов используются QTT-формат, переупорядочение строк и столбцов в матрице коэффициентов размера $n \times n$, где $n = 4^d$, позволяет предотвратить экспоненциальный по d рост рангов. Библ. 9. Фиг. 3.

Ключевые слова: малоранговые тензорные аппроксимации, метод конечных элементов, z-перестановка, z-крон, tensor train, quantized tensor train.

DOI: 10.31857/S0044466920120091

ВВЕДЕНИЕ

В работах [1] и [2] было показано, что для класса эллиптических уравнений в полигональных ограниченных двумерных областях с аналитическими правыми частями существуют малопараметрические аппроксимации решения в формате квантизованного тензорного произведения (*quantized tensor train*, QTT). Точность приближения решения убывает экспоненциально с числом параметров в TT-разложении, что позволяет говорить об оптимальном алгоритме решения таких задач. Для реализации эффективного практического алгоритма необходимо решить несколько задач, одной из таких задач посвящена данная работа. Основная идея подхода состоит в том, что используются конечные элементы низкого порядка на очень мелкой “виртуальной” сетке, а аппроксимация строится на дискретном уровне. Оказывается, что нумерация конечных элементов играет важную роль в структуре возникающих тензоров. Для получения небольшого числа параметров, необходимо использовать так называемую z-перестановку (см. ниже фиг. 3). Сама матрица перестановки имеет полный тензорный ранг, поэтому необходимо уметь формировать переставленную матрицу напрямую. Основное предположение состоит в том, что дискретная матрица жесткости может быть представлена в виде суммы кронекеровских произведений матриц, соответствующих “одномерным” операторам. Для этого случая мы предлагаем и обосновываем метод построения QTT-представления для матриц жесткости в z-перестановке. Основой для этого служит модифицированная операция кронекеровского произведения (z-kron), которая позволяет напрямую собирать матрицы, в которых переставлены строки и столбцы в соответствии с z-перестановкой, из QTT-представлений матриц, соответствующих “одномерным” операторам.

В разд. 1 приводится основная информация о QTT-формате и важных для данной работы операциях. В разд. 2 вводится операция z-крон и доказывается, что она порождает QTT-матрицы с переставленными строками и столбцами в z-перестановке. Разд. 3 содержит эксперименты, которые показывают, что матрица коэффициентов метода конечных элементов имеет более маленькие ранги аппроксимации будучи z-переставленной по сравнению с каноническим порядком строк и столбцов.

1. QTT-ФОРМАТ

В данном разделе будут описаны основные идеи TT- и QTT-форматов. Более детальная информация о свойствах TT-формата представлена в [3].

Tensor Train формат (TT-формат) – это нелинейный метод малоранговой аппроксимации многомерных массивов (тензоров). Рассмотрим d -мерный тензор $T \in \mathbb{R}^{n_1 \times \dots \times n_d}$. Мы говорим, что тензор T представлен в TT-формате, если его элемент представляется в виде

$$T_{i_1 \dots i_d} = \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} \dots \sum_{\alpha_{d-1}=1}^{r_{d-1}} G_1(i_1, \alpha_1) G_2(\alpha_1, i_2, \alpha_2) \dots G_{d-1}(\alpha_{d-2}, i_{d-1}, \alpha_{d-1}) G_d(\alpha_{d-1}, i_d), \quad (1)$$

где $0 \leq i_k \leq n_k - 1$, $k \in [1 \dots d]$; G_t называется *ядром*; $t \in [1 \dots d]$; G_2, \dots, G_{d-1} – трехмерные тензоры с размерами $r_{j-1} \times n_j \times r_j$; G_1, G_d – матрицы размеров $n_1 \times r_1$ и $r_{d-1} \times n_d$ соответственно. Верхние пределы суммирования $r_1 \dots r_{d-1}$ в (1) называются *рангами аппроксимации* или просто *рангами*.

Уравнение (1) можно представить как произведение матриц

$$T_{i_1 \dots i_d} = G_1(i_1) G_2(i_2) \dots G_{d-1}(i_{d-1}) G_d(i_d), \quad (2)$$

где $G_k(i_k)$ – матрица размера $r_{k-1} \times r_k$, $k \in [1 \dots d]$.

Объем памяти, занимаемый тензором T , может быть оценен по следующей формуле:

$$S = r_1 n_1 + \sum_{i=2}^{d-1} r_{i-1} n_i r_i + r_{d-1} n_d. \quad (3)$$

Дополнительно введем понятие *эффективного ранга* (e.rank) r_e , которое может быть вычислено путем решения следующего уравнения:

$$S = r_1 n_1 + \sum_{i=2}^{d-1} r_{i-1} n_i r_i + r_{d-1} n_d = r_e n_1 + \sum_{i=2}^{d-1} r_e^2 n_i + r_e n_d. \quad (4)$$

Перейдем к представлению многомерных матриц в TT-формате. Рассмотрим многомерную матрицу $M \in \mathbb{R}^{(n_1 \times \dots \times n_d) \times (m_1 \times \dots \times m_d)}$. Элемент с индексом $i_1 \dots i_d$; $j_1 \dots j_d$ представляется в TT-формате в виде

$$M_{\substack{i_1 \dots i_d \\ j_1 \dots j_d}} = \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} \dots \sum_{\alpha_{d-1}=1}^{r_{d-1}} V_1(i_1, j_1, \alpha_1) V_2(\alpha_1, i_2, j_2, \alpha_2) \dots V_{d-1}(\alpha_{d-2}, i_{d-1}, j_{d-1}, \alpha_{d-1}) V_d(\alpha_{d-1}, i_d, j_d), \quad (5)$$

где $0 \leq i_k \leq n_k - 1$, $0 \leq j_k \leq m_k - 1$, V_j при $j \in [2 \dots d - 1]$ – это четырехмерные тензоры с размерностями $r_{j-1} \times n_j \times m_j \times r_j$; V_1 и V_d – трехмерные тензоры с размерностями $n_1 \times m_1 \times r_1$ и $r_d \times n_d \times m_d$ соответственно.

В матричной форме (5) может быть представлено в виде

$$M_{\substack{i_1 \dots i_d \\ j_1 \dots j_d}} = V_1(i_1, j_1) V_2(i_2, j_2) \dots V_{d-1}(i_{d-1}, j_{d-1}) V_d(i_d, j_d), \quad (6)$$

где $V_k(i_k, j_k)$ – матрица размера $r_{k-1} \times r_k$, $k \in [1 \dots d]$, а пара i_k, j_k представляет собой “длинный индекс”. Важно отметить, что ядра V_k могут рассматриваться как блочные матрицы размера $r_{k-1} \times r_k$, в которых каждый блок имеет размерность $n_k \times m_k$.

Из (5) следует, что если TT-ранг M равен 1, то M может быть представлена как кронекерово произведение матриц:

$$M = M_1 \otimes M_2 \otimes \dots \otimes M_{d-1} \otimes M_d, \quad (7)$$

где M_k – это матрицы размера $n_k \times m_k$, $k \in [1 \dots d]$.

Сложность многих основных операций с тензорами в TT-формате может быть оценена сверху как dnr^α , где $\alpha \in \{2, 3\}$, $n = \max(n_1, \dots, n_d)$, $r = \max(r_1, \dots, r_{d-1})$.

QTT-формат возникает при введении “виртуальных размерностей”, а именно, когда индексы исходного тензора (например, вектора) представляются n -арным кодом. Рассмотрим пример с бинарным кодированием индексов вектора $v \in R^{2^d}$. Данный вектор может быть представлен в

виде тензора V с размерностями $\underbrace{2 \times 2 \times \dots \times 2}_{d \text{ раз}}$. QTT-разложением или QTT-аппроксимацией назовем ТТ-разложение или ТТ-аппроксимацию тензора V . Превращение вектора v в d -мерный тензор эквивалентно кодированию индекса этого вектора $0 \leq i \leq 2^d - 1$ в бинарном формате:

$$i = \overline{i_1, i_2, \dots, i_d} = \sum_{k=1}^d 2^{k-1} i_k \leftrightarrow (i_1, i_2, \dots, i_d), \tag{8}$$

где $i_k \in \{0, 1\}$, $k \in [1 \dots d]$. Аналогичная идея используется для представления матрицы $M \in R^{2^d \times 2^d}$ в QTT-формате.

Полезной вспомогательной операцией является *сильное произведение Кронекера* (см. [4]) $\triangleright\triangleleft$, которая определяется как операция между двумя блочными матрицами. Использование такой операции для компактного представления ТТ-разложений различных тензоров было предложено в работе [5].

Каждое ядро в ТТ-представлении матрицы можно рассматривать как блочную матрицу. Тогда операция $\triangleright\triangleleft$ похожа на матричное произведение, но элементы блочных матриц перемножаются друг с другом с использованием кронекеровского произведения вместо матричного произведения, тогда как умножение блочных матриц происходит по стандартному правилу.

$$C = K \triangleright\triangleleft L = \begin{bmatrix} K_{11} & \dots & K_{1r_2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{r_1} & \dots & K_{r_2} \end{bmatrix} \triangleright\triangleleft \begin{bmatrix} L_{11} & \dots & L_{1r_3} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{r_2} & \dots & L_{r_2 r_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} \otimes L_{11} + \dots + K_{1r_2} \otimes L_{r_2} & \dots & K_{11} \otimes L_{1r_3} + \dots + K_{1r_2} \otimes L_{r_2 r_3} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{r_1} \otimes L_{11} + \dots + K_{r_2} \otimes L_{r_2} & \dots & K_{r_1} \otimes L_{1r_3} + \dots + K_{r_2} \otimes L_{r_2 r_3} \end{bmatrix}. \tag{9}$$

Например,

$$C = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \end{bmatrix} \triangleright\triangleleft \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \right] = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 3 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 4 \\ 6 & 3 & 8 & 4 \\ 3 & 6 & 4 & 8 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 3 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 4 \\ 6 & 3 & 8 & 4 \\ 3 & 6 & 4 & 8 \end{pmatrix} \end{bmatrix}. \tag{10}$$

Такая операция позволяет компактно записывать матрицы в ТТ-формате. В частности, для QTT-формата представление имеет вид (см. [6])

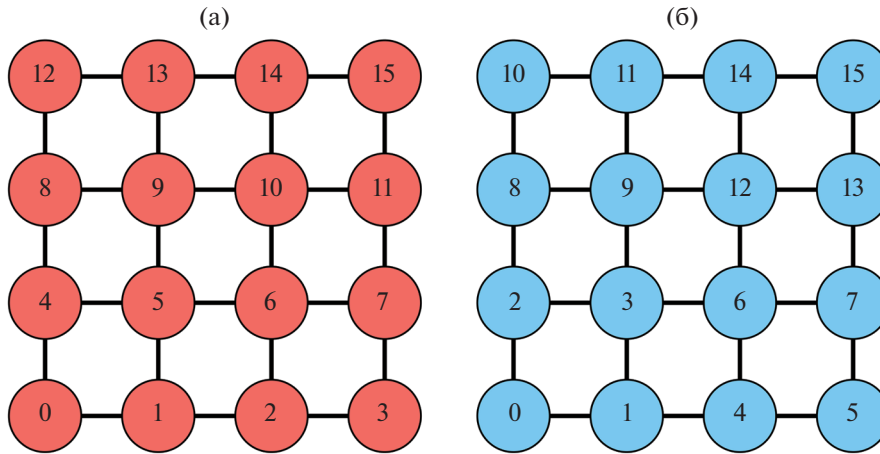
$$M = J_1 \triangleright\triangleleft \dots \triangleright\triangleleft J_d, \tag{11}$$

где J_i размера $r_{i-1} \times r_i$, с размером блока $n_i \times m_i$, где $i \in [1, d]$.

В следующем разделе мы покажем, как строить матрицы в QTT-формате с переставленными в z-последовательности строками и столбцами при помощи операции z-крон.

2. ОПЕРАЦИЯ Z-ПРОИЗВЕДЕНИЯ

В данном разделе вводится понятие z-нумерации (z-перестановки, z-последовательности), и вводится операция z-крон, которая позволяет строить QTT-матрицы размера $4^d \times 4^d$, в которых строки и столбцы переупорядочены в z-последовательности.



Фиг. 1. Примеры нумерации элементов сетки: (а) – каноническая нумерация, (б) – z-нумерация.

2.1. Порядок элементов в матрицах

Рассмотрим квадрат, на котором введена равномерная сетка с числом узлов $2^d \times 2^d$ (т.е. всего 4^d узлов). Координата каждого узла в сетке однозначно задается парой чисел (i, j) , где $i, j \in [0, 2^d - 1]$. Нам необходимо пронумеровать узлы этой сетки. Каноническое упорядочивание связано с последовательным обходом элементов сетки по столбцам или строкам, а z-упорядочивание имеет более сложную структуру. Эти нумерации представлены на фиг. 1.

1. *Каноническая нумерация.* Позиция узла с номером (i, j) в канонической нумерации определяется по формуле:

$$\mathcal{L}(i, j) = i + 2^d j; \tag{12}$$

2. *z-нумерация.* Представим i и j в бинарном формате:

$$i = \sum_{k=1}^d 2^{k-1} i_k \leftrightarrow (i_1, i_2, \dots, i_d), \quad j = \sum_{k=1}^d 2^{k-1} j_k \leftrightarrow (j_1, j_2, \dots, j_d). \tag{13}$$

Позиция узла с номером (i, j) в z-нумерации определяется по формуле:

$$\mathcal{L}(i, j) = i_1 + 2j_1 + 4i_2 + 8j_2 + \dots + 2^{2d-2} i_d + 2^{2d-1} j_d = \sum_{k=1}^d 2^{2k-2} i_k + \sum_{k=1}^d 2^{2k-1} j_k. \tag{14}$$

2.2. Z-крон

Предположим, что на нашей равномерной сетке с 4^d узлами задан линейный оператор, который определяется матрицей размера $4^d \times 4^d$. Различная нумерация узлов сетки будет приводить к перестановке строк и столбцов матрицы. Мы будем рассматривать матрицы, которые являются кронекеровым произведением двух “одномерных” QTT-матриц:

$$K_{\substack{i_1, \dots, i_d \\ j_1, \dots, j_d}} = K_1(i_1, j_1) \dots K_d(i_d, j_d), \quad L_{\substack{i_1, \dots, i_d \\ j_1, \dots, j_d}} = L_1(i_1', j_1') \dots L_d(i_d', j_d'), \quad \text{где } i_k \in \{0, 1\}. \tag{15}$$

Хорошо известно [3], что кронекерово произведение двух d -мерных QTT-матриц представляет собой $2d$ -мерную QTT-матрицу, где каждый элемент вычисляется по формуле:

$$M_{\substack{i_1, \dots, i_d, i_1', \dots, i_d' \\ j_1, \dots, j_d, j_1', \dots, j_d'}} = K_{\substack{i_1, \dots, i_d \\ j_1, \dots, j_d}} L_{\substack{i_1', \dots, i_d' \\ j_1', \dots, j_d'}} = K_1(i_1, j_1) \dots K_d(i_d, j_d) L_1(i_1', j_1') \dots L_d(i_d', j_d'). \tag{16}$$

Классическое кронекерово произведение соответствует канонической нумерации узлов квадратной сетки. Для получения линейного оператора, соответствующего z-перестановке, необхо-

димом ввести новую операцию, которую мы называем z -*kron* и обозначаем через \odot . Данная операция применяется к двум d -мерным QTT-матрицам из (15). Результатом операции является TT-матрица $M \in \mathbb{R}^{4^d \times 4^d}$, содержащая d ядер. Каждый элемент матрицы определяется в виде

$$M_{\substack{z_1, \dots, z_d \\ z'_1, \dots, z'_d}} = K_{\substack{i_1, \dots, i_d \\ j_1, \dots, j_d}} L_{\substack{i'_1, \dots, i'_d \\ j'_1, \dots, j'_d}}, \quad \text{где } z_k = i_k + 2j_k, \quad z'_k = i'_k + 2j'_k, \quad k \in [1 \dots d]. \quad (17)$$

Такая матрица в QTT-формате может быть записана как $M = K_{\substack{i_1, \dots, i_d \\ j_1, \dots, j_d}} \odot L_{\substack{i'_1, \dots, i'_d \\ j'_1, \dots, j'_d}}$ и представлена в виде

$$M_{\substack{z_1, \dots, z_d \\ z'_1, \dots, z'_d}} = M_1(z_1, z'_1) M_2(z_2, z'_2) \dots M_d(z_d, z'_d), \quad (18)$$

где M_k получаются через кронекерово произведение $M_k(z_k, z'_k) = L(i'_k, j'_k) \otimes K(i_k, j_k)$.

Покажем, что $M_k(z_k, z'_k) = L(i'_k, j'_k) \otimes K(i_k, j_k)$ действительно приводит нас к (17):

$$\begin{aligned} M_{\substack{z_1, \dots, z_d \\ z'_1, \dots, z'_d}} &= K_{\substack{i_1, \dots, i_d \\ j_1, \dots, j_d}} \odot L_{\substack{i'_1, \dots, i'_d \\ j'_1, \dots, j'_d}} = (L_1(i'_1, j'_1) \otimes K_1(i_1, j_1)) \dots (L_d(i'_d, j'_d) \otimes K_d(i_d, j_d)) = \\ &= (L_1(i'_1, j'_1) \dots L_d(i'_d, j'_d)) \otimes (K_1(i_1, j_1) \dots K_d(i_d, j_d)). \end{aligned} \quad (19)$$

Учитывая тот факт, что кронекерово произведение двух чисел есть умножение, получаем

$$(L_1(i'_1, j'_1) \dots L_d(i'_d, j'_d)) \otimes (K_1(i_1, j_1) \dots K_d(i_d, j_d)) = L_1(i'_1, j'_1) \dots L_d(i'_d, j'_d) K_1(i_1, j_1) \dots K_d(i_d, j_d) = M_{\substack{z_1, \dots, z_d \\ z'_1, \dots, z'_d}}. \quad (20)$$

2.3. Связь z -крона и z -нумерации

Снова рассмотрим две QTT-матрицы:

$$A_{\substack{k_1, \dots, k_d \\ l_1, \dots, l_d}} = A_1(k_1, l_1) \dots A_d(k_d, l_d), \quad B_{\substack{m_1, \dots, m_d \\ n_1, \dots, n_d}} = B_1(m_1, n_1) \dots B_d(m_d, n_d), \quad k_t, l_t, m_t, n_t \in \{0, 1\}. \quad (21)$$

Пусть

$$C_{\substack{i_1, \dots, i_d \\ j_1, \dots, j_d}} = A_{\substack{k_1, \dots, k_d \\ l_1, \dots, l_d}} \odot B_{\substack{m_1, \dots, m_d \\ n_1, \dots, n_d}}, \quad i_t, j_t \in \{0, 1, 2, 3\}. \quad (22)$$

Обозначим через \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} матрицы A , B , C в обычном представлении. Матрицы, индексы которых были квантованы и представлены TT-матрицами, будем обозначать как $A_{\substack{k_1, \dots, k_d \\ l_1, \dots, l_d}}$, $B_{\substack{m_1, \dots, m_d \\ n_1, \dots, n_d}}$, $C_{\substack{i_1, \dots, i_d \\ j_1, \dots, j_d}}$ соответственно; q -е ядро A, B, C по-прежнему обозначаем через A_q, B_q, C_q . Тогда верна следующая теорема.

Теорема 1. Для (22) верно, что

$$C_{ij} = \mathbf{A}_{kl} \mathbf{B}_{mn}, \quad i = \mathcal{L}(k, m), \quad j = \mathcal{L}(l, n). \quad (23)$$

Доказательство. Выделим младший разряд в индексах:

$$\begin{aligned} i^H &= \lfloor i/4 \rfloor, & i^L &= i \bmod 4, & j^H &= \lfloor j/4 \rfloor, & j^L &= j \bmod 4, \\ k^H &= \lfloor k/2 \rfloor, & k^L &= k \bmod 2, & m^H &= \lfloor m/2 \rfloor, & m^L &= m \bmod 2, \\ l^H &= \lfloor l/2 \rfloor, & l^L &= l \bmod 2, & n^H &= \lfloor n/2 \rfloor, & n^L &= n \bmod 2. \end{aligned} \quad (24)$$

Сначала докажем, что

$$i = \mathcal{L}(k, m) \Leftrightarrow i^H = \mathcal{L}(k^H, m^H), \quad i^L = \mathcal{L}(k^L, m^L). \quad (25)$$

Действительно, полагая $i^H = \mathcal{L}(k^H, m^H)$, $i^L = \mathcal{L}(k^L, m^L)$, по формуле (14) получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(k, m) &= \mathcal{L}(2k^H + k^L, 2m^H + m^L) = \sum_{t=2}^d 2^{2t-2} k_{t-1}^H + k^L + \sum_{t=2}^d 2^{2t-1} m_{t-1}^H + 2m^L = \\ &= 4 \left(\sum_{t=1}^{d-1} 2^{2t-2} k_t^H + \sum_{t=1}^{d-1} 2^{2t-1} m_t^H \right) + k^L + 2m^L = 4Z(k^H, m^H) + Z(k^L, m^L) = 4i^H + i^L = i, \end{aligned} \tag{26}$$

где k_t^H, m_t^H есть t -й разряд числа k^H, m^H соответственно.

Далее применим метод математической индукции по d для доказательства (23).

1. $d = 1$: этот результат следует из свойств кронекерова произведения:

$$C_{ij} = A_k \underset{l}{\circlearrowleft} B_m = B_m \underset{n}{\otimes} A_k = \mathbf{B}_{mn} \mathbf{A}_{kl}. \tag{27}$$

2. По свойству кронекерова произведения имеем

$$i = k + 2m = \mathcal{L}(k, m), \quad j = l + 2n = \mathcal{L}(l, n). \tag{28}$$

3. Пусть для $d = q$ утверждение теоремы (23) истинно. Тогда для любых A^q, B^q, C^q имеем

$$C_{ij}^q = \mathbf{A}_{kl}^q \mathbf{B}_{mn}^q, \quad i = \mathcal{L}(k, m), \quad j = \mathcal{L}(l, n); \tag{29}$$

здесь верхний индекс q обозначает, что данное уравнение выписано для $d = q$.

Теперь рассмотрим (i, j) элемент матрицы C^{q+1} для $d = q + 1$. Напомним, что i, j -й элемент матрицы C имеет ТТ-индекс $\begin{matrix} i_1 \dots i_d \\ j_1 \dots j_d \end{matrix}$, где $0 \leq i_t, j_t \leq 4$. Также используем обозначения (24).

Пусть $L(a) = a \bmod 2$, $H(a) = \lfloor a/2 \rfloor$, тогда получим

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{kl}^{q+1} \mathbf{B}_{mn}^{q+1} &= C_{ij}^{q+1} = \prod_{t=1}^{q+1} (B_t \otimes A_t)_{i_t, j_t} = \prod_{t=1}^{q+1} (B_t)_{H(i_t), H(j_t)} (A_t)_{L(i_t), L(j_t)} = \\ &= [\prod_{t=1}^q (B_t)_{H(i_t), H(j_t)} (A_t)_{L(i_t), L(j_t)}] (B_{q+1})_{H(i^L), H(j^L)} (A_{q+1})_{L(i^L), L(j^L)} = \\ &= \mathbf{A}_{k^H l^H}^q \mathbf{B}_{m^H n^H}^q (B_{q+1})_{H(i^L), H(j^L)} (A_{q+1})_{L(i^L), L(j^L)}. \end{aligned} \tag{30}$$

Из предположения индукции имеем

$$i^H = \mathcal{L}(k^H, m^H), \quad j^H = \mathcal{L}(l^H, n^H). \tag{31}$$

Из (30) следует, что

$$\mathbf{A}_{kl}^{q+1} = \mathbf{A}_{k^H l^H}^q (A_{q+1})_{L(i^L), L(j^L)}. \tag{32}$$

С другой стороны, верно

$$\mathbf{A}_{kl}^{q+1} = \prod_{t=1}^{q+1} (A_t)_{k_t, l_t} = [\prod_{t=1}^q (A_t)_{k_t^H, l_t^H}] (A_{q+1})_{k^L, l^L} = \mathbf{A}_{k^H l^H}^q (A_{q+1})_{k^L, l^L}. \tag{33}$$

Отсюда следует, что

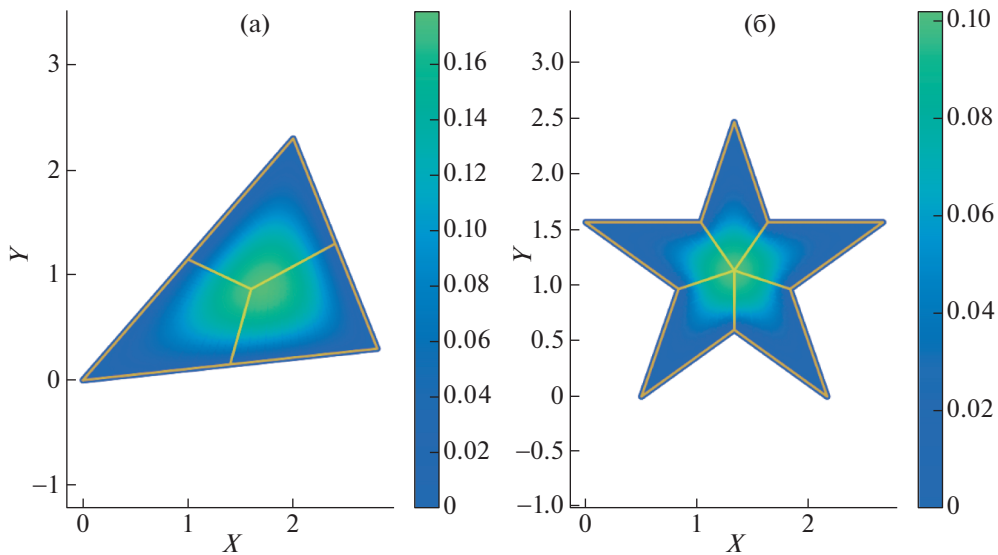
$$k^L = i^L \bmod 2, \quad l^L = j^L \bmod 2, \tag{34}$$

а из (34), (31) и (25) следует (23) для $d = q + 1$.

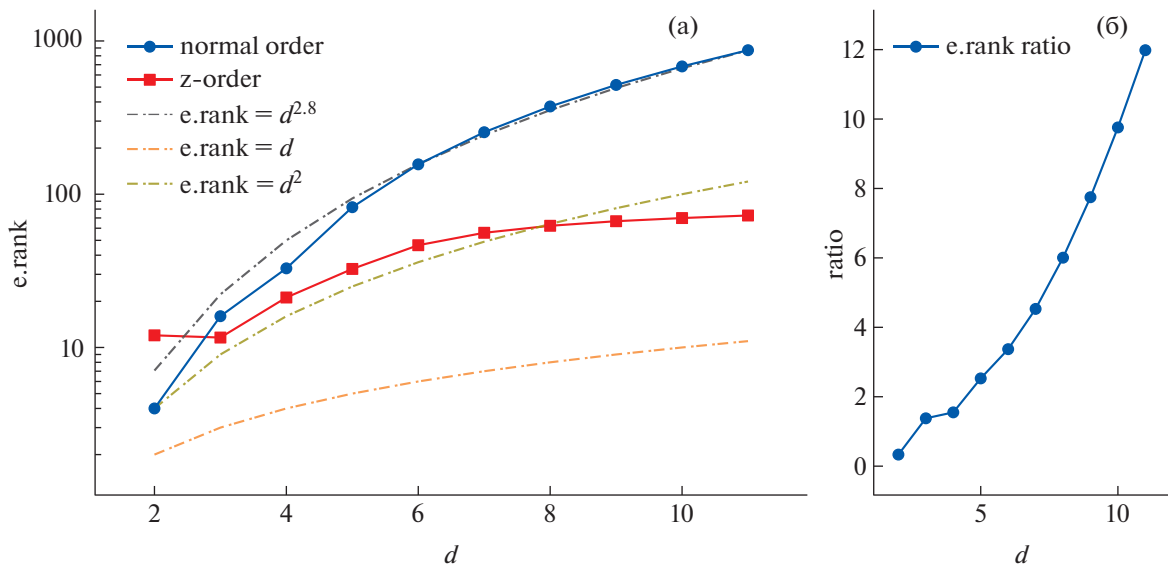
3. ЧИСЛЕННАЯ ИЛЛЮСТРАЦИЯ

В качестве численной иллюстрации предложенного алгоритма сборки матриц жесткости в z -перестановке рассмотрим модельную задачу Дирихле для уравнения Пуассона с единичной правой частью и нулевыми граничными условиями Дирихле в ограниченной двумерной области Ω с кусочно-гладкой границей $\partial\Omega$:

$$\begin{aligned} -\Delta u &= 1 \quad \text{в } \Omega, \\ u|_{\partial\Omega} &= 0. \end{aligned} \tag{35}$$



Фиг. 2. Примеры областей и их разбиение на четырехугольные подобласти и визуализация решения задачи Дирихле для уравнения Пуассона с нулевым граничным условием и единичной правой частью. (а) — остроугольный треугольник, разбитый на 3 четырехугольника, (б) — пятиконечная звезда, разбитая на 5 четырехугольников.



Фиг. 3. (а) — график зависимости эффективного ранга глобальной матрицы жесткости в методе конечных элементов от d для канонического порядка и z-переставленных строк и столбцов, (б) — график отношения эффективного ранга канонического порядка элементов и z-перестановки для той же матрицы.

В качестве областей $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ мы рассмотрим многоугольные ограниченные области, показанные на фиг. 2. Хорошо известно [7], что задача корректно поставлена в H_0^1 . Наличие углов приводит к возникновению угловых сингулярностей, которые необходимо разрешать с использованием адаптивных методов; преимущество тензорного подхода состоит в том, что можно использовать очень мелкие “виртуальные” равномерные сетки, достаточные для разрешения угловых сингулярностей, и уменьшать число параметров за счет использования малопараметрических представлений для приближения дискретного решения. Эта идея получила свое развитие в работе [8], где удалось достигнуть очень мелких сеток, вплоть до 2^{60} “виртуальных” узлов. В нашем примере

для построения матриц жесткости в тензорном формате область разбивается на четырехугольники, как показано на фиг. 2. Каждый четырехугольник отображается на квадрат, в соответствующем квадрате строится равномерная сетка, и используются билинейные конечные элементы. Схема дискретизации из [9] предназначена для дискретизации эллиптических уравнений на непрямоугольной области, таким образом, чтобы были эффективно применимы тензорные методы.

Матрица жесткости строится в двух перестановках, которые обсуждались в данной работе. Цель эксперимента состоит в том, чтобы сравнить число параметров, требуемое для представления матриц.

Мы проверили различные области Ω с различным числом подобластей q от 3 до 11 (все результаты доступны по ссылке: <https://github.com/RerRayne/qtt-laplace>).

Вне зависимости от выбираемой нами конфигурации поведение эффективных QTT-рангов глобальной матрицы жесткости совпадало с представленным на фиг. 3. В статье [2] показано, что QTT-ранги растут не более чем экспоненциально. В наших экспериментах для канонического порядка мы наблюдали полиномиальный рост QTT-рангов со степенью порядка 2.8. В случае z -нумерации строк и столбцов эффективные ранги растут линейно по d .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данная работа развивает QTT-технологии решения задач математической физики, которая затронута в нескольких недавних работах. Основным результатом состоит во введении новой операции между матрицами, которая позволяет строить представление двумерных операторов в z -перестановке из их одномерных представлений. Численные эксперименты показали, что в примерах, рассмотренных ранее в [9], такое представление позволяет получить логарифмическую зависимость объема памяти, необходимой для хранения дискретизованного оператора, от числа неизвестных, что позволяет использовать эффективные тензорные решатели. Стоит отметить, что практическое применение такой технологии и ее сравнение с другими известными подходами (адаптивные сетки, hp-метод, спектральные методы и др.) еще только предстоит сделать. Только недавно удалось преодолеть принципиальные сложности, связанные с обусловленностью дискретных операторов на очень мелких виртуальных сетках [8]. Мы рассчитываем в дальнейших работах получить практически применимые результаты для решения различных классов двумерных и трехмерных задач математической физики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Morton G.* A computer oriented geodetic data base and a new technique in file sequencing. Ottawa: International Business Machines Company, 1966.
2. *Kazeev V., Schwab C.* Quantized tensor-structured finite elements for second-order elliptic PDEs in two dimensions // *Numerische Mathematik*. 2018. V. 1. № 138. P. 133–190.
3. *Oseledets I.* Tensor-train decomposition // *SIAM Journal on Scientific Comput.* 2011. V. 5. № 33. P. 2295–2317.
4. *De Launey W., Seberry J.* The strong Kronecker product // *J. of Combinatorial Theory*. 1994. V. 2. № 66. P. 192–213.
5. *Kazeev V., Khoromskij B.* Low-rank explicit QTT representation of the Laplace operator and its inverse // *SIAM Journal on Matrix Analys. and Applicat.* 2012. V. 3. № 33. P. 742–758.
6. *Kazeev V., Reichmann O., Schwab C.* Low-rank tensor structure of linear diffusion operators in the TT and QTT formats // *Linear Algebra and its Applicat.* 2013. V. 11. № 438. P. 4204–4221.
7. *Strang G., Fix G.* An analysis of the finite element method. New Jersey: Prentice-hall Englewood Cliffs, 1973.
8. *Bachmayr M., Kazeev V.* Stability of Low-Rank Tensor Representations and Structured Multilevel Preconditioning for Elliptic PDEs // *Foundations of Comput. Math.* 2020. P. 1–62.
9. *Markeeva L., Tsybulin I., Oseledets I.* QTT-isogeometric solver in two dimensions: arXiv preprint arXiv:1802.02839. 2018.