МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

**Морозов Станислав Викторович**

# Построение чебышевских приближений для матриц и тензоров и их применения

Специальность 1.1.6 —
«Вычислительная математика»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2024

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики им. Г. И. Марчука Российской академии наук.

Научный руководитель: **Тыртышников Евгений Евгеньевич**
академик РАН, доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Кашин Борис Сергеевич,**
академик РАН, доктор физико-математических наук, профессор,
Математический институт имени В. А. Стеклова Российской академии наук, отдел теории функций, заведующий отделом, главный научный сотрудник

**Протасов Владимир Юрьевич,**
член корреспондент РАН, доктор физико-математических наук,
МГУ имени М. В. Ломоносова, механико-математический факультет, кафедра общих проблем управления,
профессор

**Капорин Игорь Евгеньевич,**
доктор физико-математических наук,
Федеральное государственное учреждение Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук,
главный научный сотрудник

Защита состоится «25» декабря 2024 г. в 17 ч. 30 мин. на заседании диссертационного совета МГУ.012.1 Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 52, факультет ВМК, аудитория №685.
Email: ds@cs.msu.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М. В. Ломоносова (Ломоносовский проспект, д. 27) и на портале `https://dissovet.msu.ru/dissertation/3227`.

Автореферат разослан «___» ноября 2024 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
МГУ.012.1,
чл-корр РАН, д.ф.-м.н Ильин Александр Владимирович

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** На сегодняшний день задача построения малоранговых приближений матриц является важным компонентом во многих областях науки, таких как вычислительная математика, вычислительная гидродинамика, рекомендательные системы, машинное обучение и других. Эта задача может быть легко решена с помощью сингулярного разложения (SVD) в унитарно инвариантных нормах, таких как спектральная норма или норма Фробениуса. В то же время, в некоторых приложениях может потребоваться приближать матрицу поэлементно, то есть в чебышевской норме. Недавние результаты[1,2] показывают, что эффективные приближения в норме Чебышева могут иметь большие перспективы. Так, например, некоторые функционально порожденные матрицы или матрицы, возникающие в моделях с латентными переменными, могут не иметь хороших приближений в унитарно-инвариантных нормах, но допускать эффективные поэлементные приближения. Другим интересным примером, демонстрирующим различие между приближениями в унитарно-инвариантных нормах и норме Чебышева, является единичная матрица. С точки зрения унитарно-инвариантых норм, единичная матрица является классическим примером матрицы полного ранга, которая не допускает малоранговых приближений. С другой стороны, можно показать[1], что в чебышевской норме ранг, требуемый для достижения заданной точности приближения $\varepsilon$, растет как $O(\log n)$ с размером матрицы $n$ при фиксированной точности $\varepsilon$. Кроме того, стоит отметить, что вопрос о точности приближения единичной матрицы в норме Чебышева также связан с важной задачей функционального анализа об оценке поперечников по Колмогорову.

В современной науке также имеется множество примеров задач, в которых данные или решения представляются в виде тензоров. Примеры могут включать в себя теорию аппроксимации, механику сплошных сред, дифференциальные уравнения и анализ данных. Однако число элементов, требуемых для хранения $d$–мерного тензора $T \in \mathbb{R}^{n_1 \times \dots \times n_d}$ равно $n_1 \dots n_d$, что делает явное хранение и обработку тензоров неприемлемым даже для небольших значений $d$. Для решения этой проблемы используются малопараметрические представления тензоров. Наиболее популярными среди них являются каноническое разложение, HOSVD и разложение в формате тензорного поезда. На сегодняшний день большинство алгоритмов строят аппроксимации в норме Фробениуса, однако в некоторых приложениях требуется приближать тензоры таким образом, что ошибка приближения каждого элемента ограничена и мала.

Данная диссертация посвящена вопросам построения малоранговых приближений матриц и тензоров в чебышевской норме, а также исследованию

[1] Udell, M. Why are big data matrices approximately low rank? / M. Udell, A. Townsend // SIAM Journal on Mathematics of Data Science. — 2019. — Vol. 1, no. 1. — P. 144–160.

[2] Budzinskiy, S. When big data actually are low-rank, or entrywise approximation of certain function-generated matrices / S. Budzinskiy // arXiv preprint arXiv:2407.03250. — 2024.

свойств построенных алгоритмов. Стоит отметить, что эти задачи являются трудными. На момент начала исследования было известно только о методах построения приближений ранга 1 (неоптимальных) для матриц[3]. Однако, даже для ранга 1 можно показать, что задача проверки существует ли приближение, гарантирующее точность $\varepsilon$, является NP-полной[4].

**Целью** данной работы является создание эффективных алгоритмов для построения малоранговых приближений матриц и тензоров в норме Чебышева. Кроме того, целью работы является теоретический анализ предложенных методов: изучение гарантий и свойств алгоритмов. Также работа ставит своей целью программную реализацию алгоритмов и их эмпирическое исследование.

Для достижения поставленных целей необходимо было решить следующие **задачи**. Важным компонентом для решения задачи о построении малоранговых приближений матриц и тензоров в чебышевской норме является *задача наилучшего равномерного приближения*, которая ставится следующим образом:

$$\|a - Vu\|_\infty \to \min_{u \in \mathbb{R}^r},$$

где $a \in \mathbb{R}^n$ и $V \in \mathbb{R}^{n \times r}$. Таким образом, необходимо было найти условия, при которых задача о построении наилучшего равномерного приближения корректна, а также предложить эффективные алгоритмы для ее решения. Автору неизвестно, чтобы задача о наилучшем равномерном приближении ранее изучалась в литературе. Кроме того, необходимо было изучить вопросы существования и единственности решения задач о построении малоранговых чебышевских приближений для матриц и тензоров, предложить алгоритмы их решения и исследовать вопросы корректности и свойства алгоритмов. Также необходимо было программно реализовать полученные алгоритмы и численно изучить их эффективность.

**Научная новизна:**

1. Впервые были исследованы свойства задачи о наилучшем равномерном приближении, предложен алгоритм решения задачи, доказана скорость его сходимости.
2. Впервые предложен метод, позволяющий строить чебышевские приближения произвольного ранга для матриц.
3. Впервые предложен метод, позволяющий строить оптимальные чебышевские приближения ранга 1 для матриц.
4. Впервые предложен метод, позволяющий строить чебышевские приближения тензоров в каноническом формате.

**Теоретическая и практическая значимость**. Диссертация имеет преимущественно теоретический характер. Представленные результаты позволяют

[3] Даугавет, В. О равномерном приближении функции двух переменных, заданной таблично, произведением функций одной переменной / В. Даугавет // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1971. — Т. 11, № 2. — С. 289–303.

[4] Gillis, N. Low-rank matrix approximation in the infinity norm / N. Gillis, Y. Shitov // Linear Algebra and its Applications. — 2019. — Vol. 581. — P. 367–382.

строить малоранговые приближения матриц и тензоров в чебышевской норме. Практическая значимость работы состоит в реализации предложенных алгоритмов на языке C++ с интерфейсами для языка Python, в том числе с использованием технологий параллельного программирования OpenMP. Разработанные программы способны строить за разумное время приближения к матрицам с размерами до нескольких десятков тысяч строк и столбцов.

**Методология и методы исследования.** Результаты, полученные в диссертации, основаны на применении теоретических методов вычислительной математики и верифицированы при помощи большого количества численных экспериментов. В теоретических исследованиях были использованы методы линейной алгебры, анализа, общей топологии, оптимизации и дискретной математики.

**Основные положения, выносимые на защиту:** Основным результатом работы являются алгоритмы для решения задачи наилучшего равномерного приближения, а также задач малоранговой аппроксимации матриц и тензоров и теоретический анализ алгоритмов.

1. Предложен эффективный алгоритм решения задачи наилучшего равномерного приближения, доказаны гарантии его работы, оценена скорость сходимости.
2. Предложен метод переменных направлений для построения малоранговых чебышевских приближений матриц, теоретически изучены его свойства.
3. Предложен алгоритм, позволяющий находить оптимальные приближения ранга 1 для матриц в чебышевской норме.
4. Предложен метод переменных направлений, позволяющий строить эффективные малоранговые приближения тензоров в каноническом формате в чебышевской норме.

**Достоверность** полученных результатов обеспечивается большим количеством дополняющих друг друга теоретических результатов и численных экспериментов.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались на:

1. Matrix Equations and Tensor Techniques IX, Perugia, September 9-10, 2021.
2. Numerical Methods and Scientific Computing (NMSC21), CIRM Luminy, November 8-12, 2021.
3. Random Matrix Theory and Beyond, НТУ Сириус, 8-9 августа 2022.
4. Материалы и технологии XXI века, Казань, 30 ноября - 2 декабря 2022.
5. The 6th International Conference on Matrix Methods and Machine Learning in Mathematics and Applications, Москва, 15-18 августа 2023.
6. Матричные методы и интегральные уравнения, НТУ Сириус, 25-31 августа 2023.
7. Матричные методы и интегральные уравнения, НТУ Сириус, 12-15 августа 2024.

**Личный вклад.** Автор принимал активное участие в постановке задачи и получении всех основных результатов. В работе [1] автором были самостоятельно проанализированы условия корректности задачи наилучшего равномерного приближения, изучены ее свойства и предложен алгоритм решения. Доказательство теоремы о сходимости алгоритма было получено совместно с Е. Е. Тыртышниковым. В работе [2] автором был самостоятельно предложен метод построения оптимальных приближений ранга 1. Результаты о поведении знаков в методе переменных направлений были получены совместно с М. С. Смирновым. Метод переменных направлений для тензоров и все результаты о свойствах метода в [3] получены автором полностью самостоятельно. В [4] автором самостоятельно были получены результаты о сходимости метода. Быстрый алгоритм получен в результате обсуждений с А. И. Осинским и Д. А. Желтковым. Создание программных реализаций алгоритмов и проведение всех численных экспериментов было выполнено автором полностью самостоятельно.

Диссертационное исследование является самостоятельным и законченным трудом автора.

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 4 печатных изданиях, 4 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 3 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, 3 глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 138 страниц, включая 15 рисунков, 1 таблицу и 4 страницы цитируемой и авторской литературы. Список литературы содержит 40 наименований.

## Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, излагается научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

**Первая глава** посвящена *задаче наилучшего равномерного приближения*

$$\|a - Vu\|_\infty \to \min_{u \in \mathbb{F}^r}, \tag{1}$$

где $V \in \mathbb{F}^{n \times r}$ и $a \in \mathbb{F}^n$. В качестве $\mathbb{F}$ в данной главе рассматривается вещественное $\mathbb{R}$ или комплексное $\mathbb{C}$ поле. Ключевым понятием в связи с задачей наилучшего равномерного приближения является понятие *чебышевских* матриц.

**Определение.** *Будем говорить, что матрица $V \in \mathbb{C}^{n \times r}$ при $n \geq r$ является чебышевской, если любые $r$ строк матрицы $V$ линейно независимы.*

Если матрица $V$ является чебышевской, то решение задачи (1) существует, единственно и непрерывно зависит от матрицы $V$ и вектора $a$. В противном случае для некоторых векторов $a$ решение будет не единственным.

В работе доказывается несколько критериев того, что вектор $\hat{u} \in \mathbb{R}^r$ является решением задачи (1). Одним из важных критериев является теорема об альтернансе, аналогичная известной теореме Чебышева о приближении непрерывной функции на отрезке полиномами. Будем обозначать при помощи круглых скобок упорядоченные множества. Пусть $J' \subset (1, 2, \dots, n)$. Обозначим через $a(J')$ подвектор вектора $a$, содержащий элементы с номерами из $J'$, а через $V(J')$ подматрицу матрицы $V$, содержащую строки с номерами из $J'$.

**Теорема.** *Рассмотрим задачу (1) с чебышевской матрицей $V \in \mathbb{R}^{n\times r}$ и вектором $a \in \mathbb{R}^n$, который не принадлежит образу матрицы $V$. Пусть $\hat{u} \in \mathbb{R}^r$. Обозначим невязку через $w = a - V\hat{u}$. Тогда $\hat{u}$ является решением (1) тогда и только тогда, когда существует множество целых чисел $1 \le j_1 < j_2 < \dots < j_{r+1} \le n$ такое, что*

$$|w_{j_1}| = |w_{j_2}| = \dots = |w_{j_{r+1}}| = \|w\|_\infty$$

*и знаки в последовательности*

$$w_{j_1}\Delta_1, w_{j_2}\Delta_2, \dots, w_{j_{r+1}}\Delta_{r+1}$$

*чередуются, где $\Delta_k = \det V((j_1, \dots, j_{k-1}, j_{k+1}, \dots, j_{r+1}))$.*

Введем понятие *характеристического множества*.

**Определение.** *Пусть $J = (1, 2, \dots, n)$ и $J' \subset J$. Обозначим*

$$\mu(J') = \min_{u\in\mathbb{C}^r} \|a(J') - V(J')u\|_\infty .$$

*Будем говорить, что $J'$ является характеристическим множеством, если $\mu(J) = \mu(J')$ и для любого подмножества $J'' \subsetneq J'$ выполнено $\mu(J'') < \mu(J)$.*

В первой главе доказывается следующий результат.

**Теорема.** *Пусть $V \in \mathbb{F}^{n\times r}$, где $n > 2r$ при $\mathbb{F} = \mathbb{C}$ и $n > r$ при $\mathbb{F} = \mathbb{R}$. Пусть вектор $a \in \mathbb{F}^n$ не принадлежит образу матрицы $V$. Тогда существует по крайней мере одно характеристическое множество, состоящее не более чем из $2r + 1$ элементов при $\mathbb{F} = \mathbb{C}$ и не более чем из $r + 1$ элементов при $\mathbb{F} = \mathbb{R}$. Кроме того, если матрица $V$ является чебышевской, то любое характеристическое множество состоит не менее чем из $r + 1$ точек.*

Из приведенного результата следует, что если матрица $V$ является чебышевской, то в вещественном случае характеристическое множество задачи (1) состоит ровно из $r + 1$ элементов. Стоит отметить, что для решения задачи (1) при размере матрицы $(r + 1) \times r$ существуют явные формулы[5]. Таким образом,

[5]Дзядык, В. К. О приближении функций на множествах, состоящих из конечного числа точек / В. К. Дзядык // Сборник «Теория приближения функций и ее приложения». — 1974. — С. 69–80.

решение задачи наилучшего равномерного приближения может быть сведено к поиску характеристического множества и решению задачи при $n = r + 1$. Большая часть дальнейшего анализа посвящена вещественному случаю.

Одним из основных результатов первой главы является алгоритм решения задачи (1). Алгоритм представляет собой итерационную процедуру поиска характеристического множества. Пусть $J_1$ — произвольное упорядоченное множество из $r + 1$ индексов строк матрицы $V$. На $t$–ом шаге алгоритм строит решение $u_t \in \mathbb{R}^r$ задачи

$$\|a(J_t) - V(J_t)u\| \to \min_{u \in \mathbb{R}^r}$$

и вычисляет невязку $w_t = a - V u_t$. Пусть максимальный по модулю элемент в векторе $w_t$ достигается в позиции $\hat{j}_t$. Если $\hat{j}_t \in J_t$, то $J_t$ является характеристическим множеством, а $u_t$ — решением задачи. В противном случае можно заменить один элементов множества $J_t$ на $\hat{j}_t$ таким образом, что $\mu(J_{t+1}) > \mu(J_t)$, где $J_{t+1}$ обозначает множество после замены. Затем приведенная процедура повторяется для множества $J_{t+1}$. Можно доказать следующий результат о сходимости предложенного метода.

**Теорема.** *Пусть матрица $V \in \mathbb{R}^{n\times r}$ является чебышевской и $a \in \mathbb{R}^n$. Обозначим минимальное по модулю значение $r \times r$ определителя матрицы $V$ через $m > 0$, а максимальное по модулю значение $r \times r$ определителя матрицы $V$ через $M > 0$. Пусть $u_t$ является решением на $t$–ой итерации алгоритма и $w_t = a - V u_t$. Пусть также $J_t$ обозначает текущее множество индексов на $t$–ой итерации. Обозначим также*

$$\overline{E}_t = \|w_t\|_\infty, \quad \underline{E}_t = \|w_t(J_t)\|_\infty, \quad \mu = \min_{u\in\mathbb{C}^r} \|a - Vu\|_\infty.$$

*Тогда алгоритм находит решение задачи наилучшего равномерного приближения за конечное число операций, причем*

$$0 \le \overline{E}_t - \mu \le \frac{(r+1)M}{m}\left(1 - \frac{m}{(r+1)M}\right)^{t-1}(\mu - \underline{E}_1).$$

Сложность алгоритма составляет $O(r^3 + Inr)$ операций, где $I$ — число итераций метода. Численные эксперименты показывают, что число итераций может быть оценено как $O(r^{1.5}\log n)$ для случайных матриц.

Кроме этого, в первой главе обсуждаются вопросы решения задачи (1) в комплексном случае.

**Вторая глава** посвящена исследованию задачи построения малоранговых чебышевских приближений для матриц. Пусть $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ и $r \in \mathbb{N}$. Рассмотрим задачу

$$\|A - UV^T\|_C \to \min_{U\in\mathbb{R}^{m\times r}, V\in\mathbb{R}^{n\times r}}, \tag{2}$$

где $\|X\|_C = \max\limits_{i,j} |x_{ij}|$ является нормой Чебышева. Решение задачи (2) всегда существует, однако может быть не единственным. Основным результатом второй главы является метод переменных направлений для решения задачи (2) и его анализ. Поскольку явное решение задачи (2) может быть достаточно сложным, рассмотрим задачу, когда одна из матриц ($U$ или $V$) известна.

$$\|A - UV^T\|_C \to \min_{U \in \mathbb{R}^{m \times r}}. \tag{3}$$

Эта задача может быть разбита на множество независимых задач вида

$$\|a - Vu\|_\infty \to \min_{u \in \mathbb{R}^r},$$

где $V \in \mathbb{R}^{n \times r}$ и $a \in \mathbb{R}^n$. Пусть $V$ является чебышевской матрицей. Тогда существует единственное отображение $\phi : \mathbb{R}^{m \times n} \times \mathbb{R}^{n \times r} \to \mathbb{R}^{m \times r}$ такое, что

$$\phi(A, V)^i = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^r} \|a^i - Vx\|_\infty, \quad i = 1, \ldots, m,$$

где верхним индексом обозначен вектор, содержащий элементы строки матрицы. Заметим, что $\phi(A, V)$ является решением задачи (3) (однако решение задачи (3) может быть не единственно). Аналогично для чебышевской матрицы $U \in \mathbb{R}^{m \times r}$ определим отображение $\psi : \mathbb{R}^{m \times n} \times \mathbb{R}^{m \times r} \to \mathbb{R}^{n \times r}$ такое, что $\psi(A, U)$ является решением задачи

$$\|A - UV^T\|_C \to \min_{V \in \mathbb{R}^{n \times r}}.$$

**Определение.** *Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Будем говорить, что пара последовательностей чебышевских матриц $\{U^{(t)} \in \mathbb{R}^{m \times r}\}_{t \in \mathbb{N}}$ и $\{V^{(t)} \in \mathbb{R}^{n \times r}\}_{t \in \mathbb{N}}$ получена методом переменных направлений для матрицы $A$ и начальной точки $V^{(0)}$, где $V^{(0)} \in \mathbb{R}^{n \times r}$ является чебышевской матрицей, если*

$$\begin{cases} U^{(t)} = \phi(A, V^{(t-1)}), \\ V^{(t)} = \psi(A, U^{(t)}) \end{cases}$$

*при всех $t \in \mathbb{N}$.*

В работе вводится понятие *двумерного альтернанса ранга $r$* и доказывается, что наличие структуры альтернанса является необходимым условием решения задачи (2), а также, что все предельные точки метода переменных направлений обладают этой структурой.

Заметим, что если матрица $V$ является чебышевской, то $\phi(A, V)$ не обязательно является чебышевской. Во второй главе детально изучается метод переменных направлений для построения приближений ранга 1 и доказывается, что для почти всех матриц $A$ метод переменных направлений порождает последовательность чебышевских матриц, если начальное приближение является

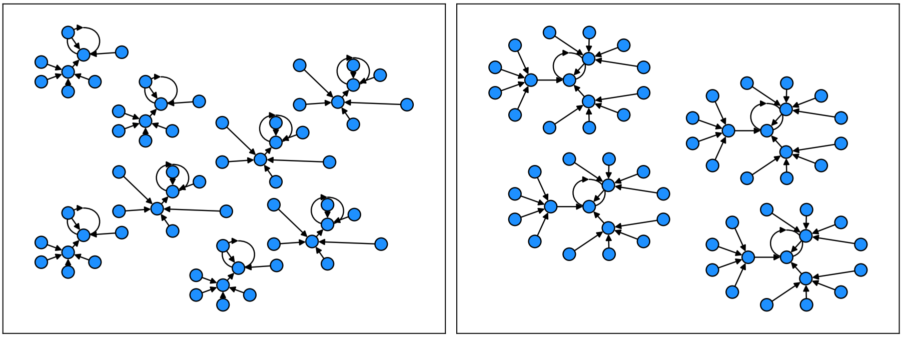

Рис. 1 — Примеры графов перехода знаков для случайных матриц.

чебышевской матрицей. Заметим, что в случае приближения ранга 1 задача может быть записана как

$$\|A - uv^T\|_C \to \min_{u \in \mathbb{R}^m, v \in \mathbb{R}^n}. \tag{4}$$

**Определение.** *Будем говорить, что матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ сохраняет чебышевские системы, если для любых чебышевских векторов $u \in \mathbb{R}^m$ и $v \in \mathbb{R}^n$, векторы $\phi(A, v)$ и $\psi(A, u)$ также являются чебышевскими.*

Можно доказать следующий результат:

**Теорема.** *Матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ сохраняет чебышевские системы тогда и только тогда, когда все строки и столбцы матрицы $A$ имеют единственный максимальный по модулю элемент. Множество матриц, сохраняющих чебышевские системы, является открытым и плотным в $\mathbb{R}^{m \times n}$, а его дополнение в $\mathbb{R}^{m \times n}$ имеет лебегову меру нуль.*

Во второй главе также изучается вопрос поведения знаков компонент векторов, получаемых в результате работы метода переменных направлений. Пусть для чебышевского вектора $v \in \mathbb{R}^n$ отображение $\mathcal{S} : \mathbb{R}^n \to \{-1, 1\}^n$ обозначает вектор с компонентами $\mathcal{S}(v)_i = \operatorname{sign}(v_i)$, $i = 1, \ldots, n$.

**Теорема.** *Пусть матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ сохраняет чебышевские системы. Если векторы $v, \hat{v} \in \mathbb{R}^n$ являются чебышевскими и $\mathcal{S}(v) = \mathcal{S}(\hat{v})$, то*

$$\mathcal{S}(\phi(A, v)) = \mathcal{S}(\phi(A, \hat{v})).$$

*Аналогично, если векторы $u, \hat{u} \in \mathbb{R}^m$ являются чебышевскими и $\mathcal{S}(u) = \mathcal{S}(\hat{u})$, то*

$$\mathcal{S}(\psi(A, u)) = \mathcal{S}(\psi(A, \hat{u})).$$

Из теоремы следует, что знаки компонент вектора на следующем шаге метода переменных направлений зависят только от знаков компонент вектора на предыдущем шаге. Таким образом, для пары начальных точек с одинаковыми знаками компонент, метод переменных направлений порождает последовательности векторов с одинаковыми знаками. Более того, можно показать, что правила, по которым меняются знаки векторов подчинены определенной структуре. Введем пару отображений $\mathcal{R} : \{-1, 1\}^m \to \{-1, 1\}^n$ и $\mathcal{T} : \{-1, 1\}^n \to \{-1,1\}^m$, определенных по формулам

$$\mathcal{R}(p) = \mathcal{S}(\psi(A, p)),\ \ \mathcal{T}(q) = \mathcal{S}(\phi(A, q)),$$

где $p \in \{-1, 1\}^m$ и $q \in \{-1, 1\}^n$. Наконец, пусть $\mathcal{V} = \mathcal{R} \circ \mathcal{T}$. Отображение $\mathcal{V}$, определяет как знаки вектора $v^{(k+1)} = \psi(A, \phi(A, v^{(k)}))$ зависят от знаков вектора $v^{(k)}$ в процессе работы метода переменных направлений. При помощи отображения $\mathcal{V}$ определим *граф перехода знаков* $G_A$ матрицы $A$. Вершинами графа являются являются элементы множества $\{-1, 1\}^n$, и между вершинами $t_1$ и $t_2$ есть ребро тогда и только тогда, когда $\mathcal{V}(t_1) = t_2$.

**Теорема.** *Пусть матрица $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ сохраняет чебышевские системы. Обозначим через $F$ множество всех чисел $j \in \{1, \dots, n\}$ таких, что максимальное по модулю значение в столбце $a_j$ также является максимальным по модулю значением в своей строке. Пусть $k = |F|$. Тогда выполнены следующие утверждения.*

1. *Для каждой вершины в графе $G_A$ существует ровно одно ребро, исходящее из нее. Граф $G_A$ не содержит ориентированных циклов за исключением петель, причем каждая компонента слабой связности графа содержит ровно 1 петлю.*
2. *Все компоненты слабой связности графа $G_A$ имеют $2^{n-k}$ вершин.*
3. *Все компоненты слабой связности графа $G_A$ изоморфны.*
4. *Глубина графа $G_A$ не превосходит $\min(m,n)$.*

Примеры графов перехода знаков приведены на Рис. 1.

На основании результатов о поведении знаков и наличия двумерного альтернанса ранга 1 можно построить метод, позволяющий находить оптимальные приближения ранга 1. Введем необходимые обозначения. Пусть вектор $v \in \mathbb{R}^n$ является чебышевским и пара последовательностей $\{u^{(t)}\}_{t\in\mathbb{N}}$ и $\{v^{(t)}\}_{t\in\mathbb{N}}$ получена методом переменных направлений для матрицы $A$ и начальной точки $v^{(0)} = v$. Последовательность $\|A - u^{(t)}(v^{(t)})^T\|_C$ не возрастает и, поскольку состоит только из неотрицательных чисел, сходится. Обозначим предел этой последовательности через $E(A, v)$.

**Теорема.** *Пусть $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ сохраняет чебышевские системы и $L \subset \{-1, 1\}^n$ является множеством вершин графа $G_A$, обладающих петлями. Тогда*

$$\min\{\|A - uv^T\|_C : u \in \mathbb{R}^m, v \in \mathbb{R}^n\} = \min_{v\in L} E(A,v).$$

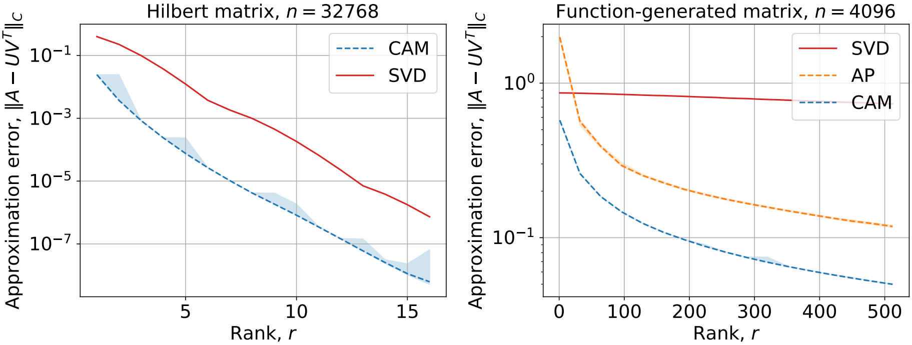


Рис. 2 — Ошибка малоранговой аппроксимации при помощи метода переменных направлений (CAM), переменных проекций (AP) и SVD. Итерационная процедура была запущена из 20 случайных начальных точек. Закрашенная область соответствует минимальным и максимальным значениям для различных инициализаций, а пунктирная кривая медианным значениям. На левом графике приведены результаты для матрицы Гильберта размера $n = 32{,}768$, на правом для функционально порожденной матрицы размера $n = 4{,}096$.

Таким образом, оптимальное решение может быть найдено за конечное число запусков метода переменных направлений. Стоит отметить, что в действительности количество начальных точек может быть значительно уменьшено. Заметим однако, что задача построения оптимальных чебышевских приближений ранга 1 для матриц является NP-полной[6].

Вторая глава завершается численным исследованием предложенного алгоритма. Результаты работы метода переменных направлений сравнивались с приближениями при помощи SVD и *метода переменных проекций*[7]. Известно, что сингулярные числа матрицы $H = \left[\dfrac{1}{i+j}\right]_{i,j=1}^{n}$ убывают экспоненциально. Это означает, что она может быть хорошо приближена матрицами малого ранга в унитарно-инвариантных нормах при помощи SVD. На Рис. 2 приведены результаты точности приближения при помощи метода переменных направлений (CAM) и SVD для матрицы размера $n = 32{,}768$. Результаты для метода переменных проекций не приводятся, потому что время его работы становится неприемлемо большим на матрице размера $n = 32{,}768$. Можно показать[8,9], что некоторые классы функционально порожденных матриц могут быть хорошо

[6] Gillis, N. Low-rank matrix approximation in the infinity norm / N. Gillis, Y. Shitov // Linear Algebra and its Applications. — 2019. — Vol. 581. — P. 367–382.

[7] Budzinskiy, S. Quasioptimal alternating projections and their use in low- rank approximation of matrices and tensors / S. Budzinskiy // arXiv preprint arXiv:2308.16097. — 2023.

[8] Budzinskiy, S. When big data actually are low-rank, or entrywise approximation of certain function-generated matrices / S. Budzinskiy // arXiv preprint arXiv:2407.03250. — 2024.

[9] Udell, M. Why are big data matrices approximately low rank? / M. Udell, A. Townsend // SIAM Journal on Mathematics of Data Science. — 2019. — Vol. 1, no. 1. — P. 144–160.

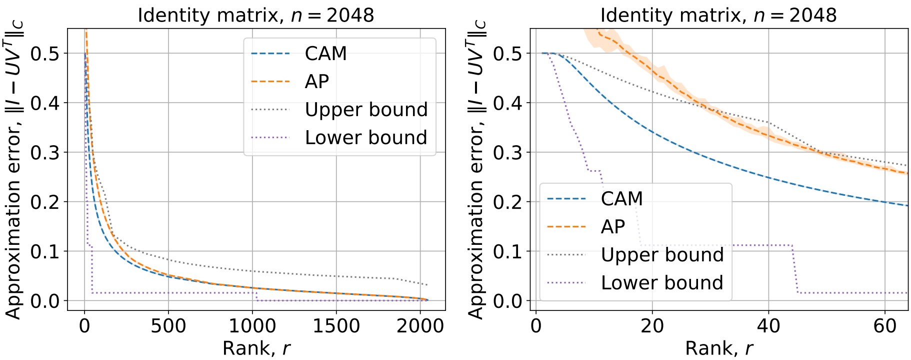


Рис. 3 — Ошибка малоранговой аппроксимации единичной матрицы размера $n = 2{,}048$ при помощи метода переменных направлений (CAM) и метода переменных проекций (AP). Правый график содержит результаты для малых рангов в более крупном масштабе. Итерационные процедуры были запущены из 20 случайных начальных точек. Закрашенные области соответствуют минимальным и максимальным значениям, а пунктирные кривые медианным значениям. Графики также содержат известные в литературе верхние и нижние оценки.

| Точность, $\varepsilon$ | 128 | 256 | 512 | 1,024 | 2,048 | 4,096 | 8,192 | 16,384 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.45 | 6 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
| 0.4 | 8 | 9 | 10 | 12 | 13 | 15 | 17 | 18 |
| 0.25 | 17 | 22 | 27 | 33 | 40 | 47 | 54 | 62 |
| 0.1 | 60 | 84 | 112 | 145 | 184 | 228 | 278 | 333 |

Таблица 1 — Минимальный ранг, требуемый методу переменных направлений для достижения точности $\varepsilon$ для единичной матрицы различных размеров.

приближены матрицами малого ранга в чебышевской норме. В частности, было показано, что если $\{x_j\}_{j=1}^n$ равномерно распределены на $d$–мерной сфере, то матрица $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, где

$$a_{ij} = \exp\left(-\|x_i - x_j\|_2^2\right), \quad i,j = 1, \ldots, n, \tag{5}$$

допускает малоранговое приближение в чебышевской норме. В данном эксперименте было сгенерировано $n = 4{,}096$ случайных точек из равномерного распределения на $d$–мерной сфере, где $d = 8{,}192$, и вычислена матрица $A$ по формулам (5). На Рис. 2 приведены результаты точности приближения для различных методов.

На Рис. 3 приведены результаты для единичной матрицы размера $n = 2{,}048$. Также на графике приведены известные в литературе верхние и нижние оценки на чебышевские приближения единичной матрицы. Легко видеть, результаты работы метода переменных направлений лежат в точности между верхними и нижними оценками для всех рангов. Кроме того, результаты работы метода переменных направлений превосходят во всех экспериментах результаты для метода переменных проекций и SVD.

В Таблице 1 приведены минимальные значения рангов, требуемые для достижения точности $\varepsilon$ при помощи метода переменных направлений при $\varepsilon \in \{0.45, 0.4, 0.25, 0.1\}$ и различных размеров единичной матрицы. Эксперимент показывает как ведет себя точность приближения единичной матрицы для различных размеров и демонстрирует масштабируемость алгоритма.

**Третья глава** посвящена исследованию задачи построения малоранговых чебышевских приближений в каноническом формате для тензоров. Для простоты изложения, все представленные результаты сформулированы для трехмерных тензоров, однако они могут быть естественным образом перенесены на $d$–мерный случай. Пусть $T \in \mathbb{R}^{m \times n \times k}$. Требуется решить задачу

$$\left\| T - \sum_{t=1}^{r} u_t \otimes v_t \otimes w_t \right\|_C \to \min_{u_t \in \mathbb{R}^m, v_t \in \mathbb{R}^n, w_t \in \mathbb{R}^k}, \tag{6}$$

где $\|X\|_C = \max\limits_{i,j,l} |x_{ijl}|$ обозначает чебышевскую норму тензора. Основным результатом третьей главы является метод переменных направлений для решения задачи (6). По аналогии с матричным случаем рассмотрим задачу, когда все факторы, кроме одного, известны и требуется найти оставшийся фактор, минимизирующий чебышевскую норму ошибки.

Обозначим через $U \in \mathbb{R}^{m \times r}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times r}$ и $W \in \mathbb{R}^{k \times r}$ матрицы, составленные из векторов $u_t$, $v_t$ и $w_t$ соответственно. Пусть матрицы $U$ и $V$ известны и построим матрицу $W$, минимизирующую чебышевскую норму ошибки. Эта задача может быть записана как

$$W = \operatorname*{arg\,min}_{X \in \mathbb{R}^{k \times r}} \left\| (U \odot V) X^T - T^{(1,2)} \right\|_C, \tag{7}$$

где через $U \odot V = \begin{bmatrix} u_1 \otimes v_1 & \dots & u_r \otimes v_r \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{mn \times r}$ обозначено произведение Хатри-Рао матриц $U$ и $V$, а матрица $T^{(1,2)} \in \mathbb{R}^{mn \times k}$ получена из тензора $T$ склеиванием первых двух размерностей. Нетрудно заметить, что задача (7) может быть разбита на набор независимых подзадач

$$w^l = \operatorname*{arg\,min}_{x \in \mathbb{R}^r} \left\| (U \odot V) x - t_l^{(1,2)} \right\|_\infty, \quad l = 1, 2, \dots, k, \tag{8}$$

где через $w^l$ обозначен вектор с элементами $l$–ой строки матрицы $W$, а $t_l^{(1,2)}$ обозначает $l$–ый столбец матрицы $T^{(1,2)}$. Если матрица $U \odot V$ является чебышевской, можно определить функцию $\chi : \mathbb{R}^{m \times n \times k} \times \mathbb{R}^{m \times r} \times \mathbb{R}^{n \times r} \to \mathbb{R}^{k \times r}$ такую, что $l$–ая строка $\chi(T, U, V)$ определяется как

$$\chi(T, U, V)^l = \operatorname*{arg\,min}_{x \in \mathbb{R}^r} \left\| (U \odot V) x - t_l^{(1,2)} \right\|_\infty, \quad l = 1, 2, \dots, k.$$

Функция $\chi$ определяет оптимальное значение матрицы $W$ при известных $U$ и $V$. Аналогичным образом определим функции $\phi(T, V, W)$ и $\psi(T, U, W)$, дающие оптимальное значение третьего фактора, при известных двух остальных.

**Определение.** *Пусть $T \in \mathbb{R}^{m\times n\times k}$. Будем говорить, что тройка последовательностей чебышевских матриц $\{U^{(t)} \in \mathbb{R}^{m\times r}\}_{t\in\mathbb{N}}$, $\{V^{(t)} \in \mathbb{R}^{n\times r}\}_{t\in\mathbb{N}}$ и $\{W^{(t)} \in \mathbb{R}^{k\times r}\}_{t\in\mathbb{N}}$ получена методом переменных направлений для тензора $T$ и пары начальных точек $(V^{(0)}, W^{(0)})$, где $V^{(0)} \in \mathbb{R}^{n\times r}$ и $W^{(0)} \in \mathbb{R}^{k\times r}$ являются чебышевскими матрицами, если*

$$\begin{cases} U^{(t)} = \phi(T, V^{(t-1)}, W^{(t-1)}), \\ V^{(t)} = \psi(T, U^{(t)}, W^{(t-1)}), \\ W^{(t)} = \chi(T, U^{(t)}, V^{(t)}) \end{cases}$$

*при всех $t \in \mathbb{N}$.*

Рассмотрим более подробно задачу построения приближений ранга 1:

$$\|T - u\otimes v\otimes w\|_C \to \min_{u\in\mathbb{R}^m, v\in\mathbb{R}^n, w\in\mathbb{R}^k}. \tag{9}$$

Также как и в матричном случае, процедура метода переменных направлений требует обоснования корректности.

**Определение.** *Будем говорить, что тензор $T \in \mathbb{R}^{m\times n\times k}$ сохраняет чебышевские системы, если для любых чебышевских векторов $u \in \mathbb{R}^m$, $v \in \mathbb{R}^n$ и $w \in \mathbb{R}^n$, векторы $\phi(T, v, w)$, $\psi(T, u, w)$ и $\chi(T, u, v)$ также являются чебышевскими.*

Можно доказать следующий результат:

**Лемма.** *Тензор $T \in \mathbb{R}^{m\times n\times k}$ сохраняет чебышевские системы тогда и только тогда, когда любая его двумерная срезка имеет единственный максимальный по модулю элемент. Множество всех тензоров, сохраняющих чебышевские системы, является открытым и плотным $\mathbb{R}^{m\times n\times k}$, а его дополнение в $\mathbb{R}^{m\times n\times k}$ имеет лебегову меру нуль.*

Знаки векторов, порождаемых методом переменных направлений, также как и в матричном случае, зависят только от знаков начальных векторов. А именно, пусть для чебышевского вектора $v \in \mathbb{R}^n$ отображение $\mathcal{S} : \mathbb{R}^n \to \{-1, 1\}^n$ обозначает вектор с компонентами $\mathcal{S}(v)_i = \operatorname{sign}(v_i)$, $i = 1, \dots, n$. Тогда можно доказать, что если $v, \hat{v} \in \mathbb{R}^n$ и $w, \hat{w} \in \mathbb{R}^k$ являются чебышевскими, $\mathcal{S}(v) = \mathcal{S}(\hat{v})$ и $\mathcal{S}(w) = \mathcal{S}(\hat{w})$, то $\mathcal{S}(\phi(T, v, w)) = \mathcal{S}(\phi(T, \hat{v}, \hat{w}))$. Аналогичное утверждение верно для $\psi$ и $\chi$. Более того, если тройка последовательностей $\{u^{(t)}\}_{t\in\mathbb{N}}$, $\{v^{(t)}\}_{t\in\mathbb{N}}$ и $\{w^{(t)}\}_{t\in\mathbb{N}}$ получена методом переменных направлений для тензора $T$ и чебышевской пары начальных точек, то знаки векторов $u^{(t)}$, $v^{(t)}$ и $w^{(t)}$ стабилизируются для достаточно большого $t$.

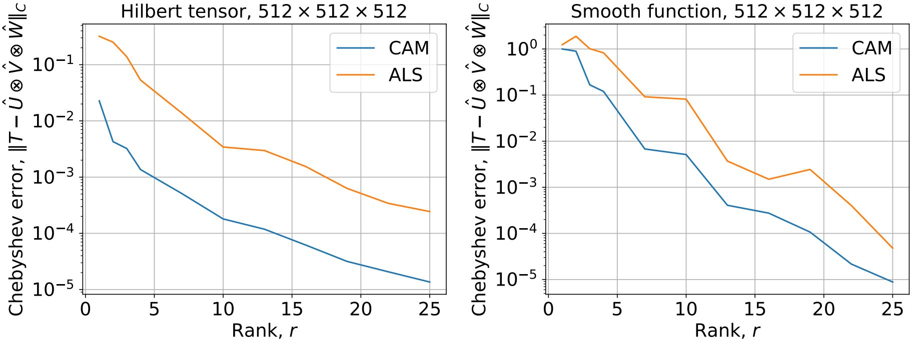


Рис. 4 — Ошибка малоранговой аппроксимации для тензора Гильберта при помощи метода переменных направлений (CAM) и метода переменных наименьших квадратов (ALS). На левом графике приведена ошибка в норме Чебышева, а на правом в норме Фробениуса.

Кроме этого, в третьей главе анализируются свойства предельных точек последовательностей, порождаемых методом переменных направлений. В работе вводится понятие структуры *трехмерного альтернанса* и доказывается, что наличие этой структуры является необходимым условием оптимальности решения задачи (9), а также, что все предельные точки метода переменных направлений обладают трехмерным альтернансом.

Третья глава завершается численным исследованием предложенного алгоритма. Результаты работы метода переменных направлений сравнивались с приближениями при помощи алгоритма переменных наименьших квадратов (ALS). Рассмотрим тензор

$$T = \left[\frac{1}{i+j+l}\right]_{i,j,l=1}^{512}.$$

На левой части Рис. 4 приведены результаты работы метода переменных направлений (CAM) и алгоритма ALS. Рассмотрим также тензор, порожденный значениями функции $f(x,y,z) = \cos(2\pi xyz)$ на равномерной сетке в кубе $[0,1]^3$, а именно,

$$T = \left[\cos\left(2\pi \cdot \frac{i-1}{n} \cdot \frac{j-1}{n} \cdot \frac{l-1}{n}\right)\right]_{i,j,l=1}^{n}.$$

В данном эксперименте было выбрано $n = 512$. На правой части Рис. 4 приведены результаты эксперимента. Проведенные эксперименты показывают, что метод переменных направлений позволяет строить более точные приближения в чебышевской норме, чем алгоритм ALS.

Еще один эксперимент посвящен восстановлению данных из равномерного шума. Пусть $U \in \mathbb{R}^{m\times r}$, $V \in \mathbb{R}^{n\times r}$ и $W \in \mathbb{R}^{k\times r}$. Рассмотрим тензор

$$T = U \otimes V \otimes W + N,$$

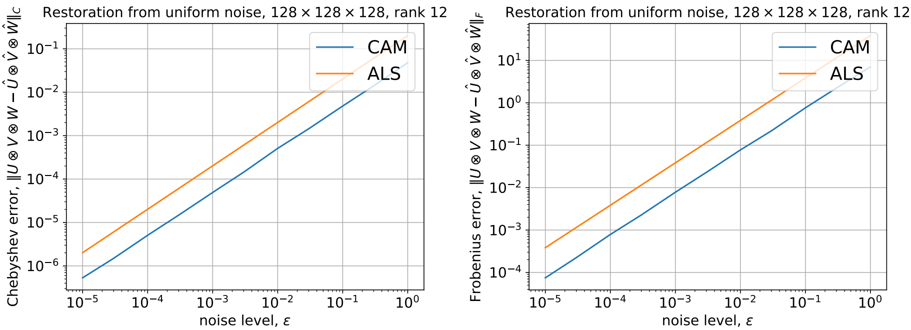


Рис. 5 — Ошибка восстановления малорангового тензора из равномерного шума при помощи метода переменных направлений (CAM) и метода переменных наименьших квадратов (ALS). На левом графике приведена ошибка в норме Чебышева, а на правом в норме Фробениуса.

где $N \in \mathbb{R}^{m \times n \times k}$ является случайным тензором с независимыми одинаково распределенными элементами из равномерного распределения $\mathcal{U}(-\varepsilon, \varepsilon)$. В данном эксперименте варьировался уровень шума $\varepsilon$ и для каждого $\varepsilon$ были сгенерированы случайные матрицы $U$, $V$ и $W$ с элементами из стандартного нормального распределения и тензор $N$ с элементами из равномерного распределения. Далее метод переменных направлений и алгоритм ALS были применены для восстановления тензора $U \otimes V \otimes W$. Пусть метод строит факторы $\hat{U}$, $\hat{V}$ и $\hat{W}$. Тогда ошибка восстановления была вычислена как $\|U \otimes V \otimes W - \hat{U} \otimes \hat{V} \otimes \hat{W}\|$. В данном эксперименте было выбрано $m = n = k = 128$ и $r = 12$. На Рис. 5 приведена ошибка восстановления в нормах Чебышева и Фробениуса. Из приведенных графиков видно, что метод переменных направлений лучше восстанавливает малоранговую структуру как в норме Чебышева, так и в норме Фробениуса.

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые состоят в следующем:

1. Предложен эффективный алгоритм решения задачи наилучшего равномерного приближения, доказаны гарантии его сходимости, приведены различные критерии оптимальности решения задачи.
2. Предложен метод переменных направлений для построения малоранговых чебышевских приближений матриц, теоретически изучены его свойства. Проведенные численные эксперименты демонстрируют эффективность и масштабируемость предложенного алгоритма.
3. Предложен алгоритм, позволяющий находить оптимальные приближения ранга 1 для матриц в чебышевской норме.
4. Предложен метод переменных направлений, позволяющий строить эффективные малоранговые приближения тензоров в каноническом формате в чебышевской норме и изучены его свойства. При помощи обширного численного исследования продемонстрирована эффективность предложенной процедуры.

## Публикации автора по теме диссертации


1. *Замарашкин, Н. Л.* Об алгоритме наилучшего приближения матрицами малого ранга в норме Чебышёва / Н. Л. Замарашкин, С. В. Морозов, Е. Е. Тыртышников // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2022. — Т. 62, № 5. — С. 723—741. — (RSCI, двухлетний импакт-фактор РИНЦ: 1,115) [1.2 / 1.0]. Перевод:
   Zamarashkin, N. L. On the Best Approximation Algorithm by Low-Rank Matrices in Chebyshev's Norm / N. L. Zamarashkin, S. V. Morozov, E. E. Tyrtyshnikov // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2022. — Vol. 62, no. 5. — P. 701–718. — (Scopus, Web of Science, JCI 2023 — 0.31) [1.2 / 1.0].
   Автором были самостоятельно проанализированы условия корректности задачи наилучшего равномерного приближения, изучены ее свойства, предложен и реализован алгоритм решения. Доказательство теоремы о сходимости алгоритма было получено совместно с Е. Е. Тыртышниковым.
2. *Morozov, S.* On the optimal rank-1 approximation of matrices in the Chebyshev norm / S. Morozov, M. Smirnov, N. Zamarashkin // Linear Algebra and its Applications. — 2023. — Т. 679. — С. 4—29. — (Scopus, Web of Science, JCI 2023 — 0.81) [1.7 / 1.5].
   Автором был самостоятельно предложен и реализован метод построения оптимальных приближений ранга 1. Результаты о поведении знаков в методе переменных направлений были получены совместно с М. С. Смирновым.
3. *Морозов, С. В.* Метод переменных направлений для построения малорангового поэлементного приближения тензоров в каноническом формате / С. В. Морозов // Вычислительные методы и программирование. — 2024. — Т. 25, № 3. — С. 302—314. — (RSCI, двухлетний импакт-фактор РИНЦ: 0,511) [1.0 / 1.0]. Перевод:
   Morozov, S. V. Alternating minimization method for low-rank entrywise approximation of tensors in canonical polyadic format / S. V. Morozov // Numerical Methods and Programming. — 2024. — Vol. 25, no. 3. — P. 302–314.
4. *Morozov, S.* Refining uniform approximation algorithm for low-rank Chebyshev embeddings / S. Morozov, D. Zheltkov, A. Osinsky // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. — 2024. — Т. 39, № 5. — С. 311—328. — (Scopus, Web of Science, JCI 2023 — 0.28) [1.2 / 1.0].
   Автором самостоятельно были получены результаты о сходимости метода. Быстрый алгоритм получен в результате обсуждений с А. И. Осинским и Д. А. Желтковым. Программная реализация и численные эксперименты выполнены автором полностью самостоятельно.

*Морозов Станислав Викторович*

Построение чебышевских приближений для матриц и тензоров и их применения

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать ___.___._____. Заказ № _____________
Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.
Типография ________________________________________