Метод экстра-компонент для быстрого вычисления специальных матрично-векторных произведений

ТЕРЕХОВ АНДРЕЙ ВАЛЕРЬЕВИЧ, Д.Ф.-М.Н.

Новосибирский Государственный Технический Университет - 2022

Постановка задачи

При вычислении некоторых интегральных преобразований требуется решить две фундаментальные проблемы:

1. Интегрирование быстро осциллирующих функций
2. Разработка экономичных методов вычисления матрично-векторных произведений

Terekhov, A.V. An extra-component method for evaluating fast matrix-vector multiplication with special functions. *Numerical Algorithms* (2022). https://doi.org/10.1007/s11075-022-01383-y

Преобразование Лагерра

$$a_i = \int_0^{\infty} f(x) l_i(\eta x)\, dx, \qquad f(x) = \eta \sum_{i=0}^{n} a_i l_i(\eta x)$$

Функции Лагерра

$$l_n(t) = \exp(-t/2) L_n(t), \; t \ge 0$$

Формула Родрига

$$L_n(t) = \frac{e^t}{n!} \frac{d^n}{dt^n} \left(t^n e^{-t} \right) = \frac{1}{n!} \left(\frac{d}{dt} - 1 \right)^n t^n, \; t \ge 0$$

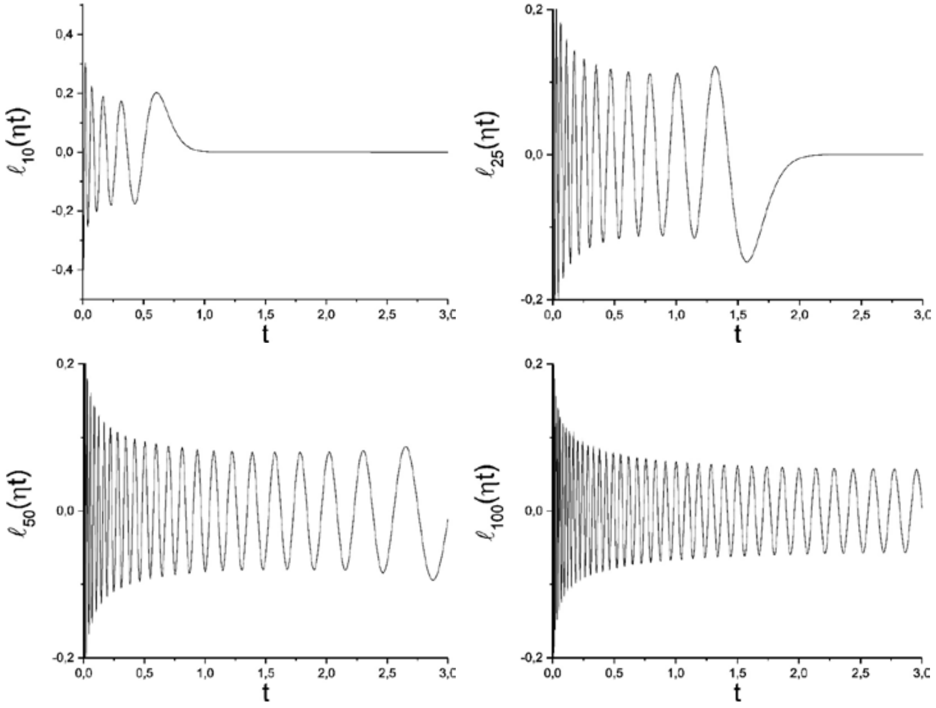
Рекуррентное соотношение

$$(n+1) L_{n+1}(t) = (2n+1-t) L_n(t) - n L_{n-1}(t), \quad n \ge 1,$$

$$L_1(t) = 1 - t,$$

$$L_0(t) = 1.$$

Быстро осциллирующие функции Лагерра



$$l_n(t) = \exp(-t/2) L_n(t), \; t \geq 0$$

$$l_n(t) = \frac{\cos\left(2\sqrt{nt} - \pi/4\right)}{\pi^{1/2} (nt)^{1/4}} + O\left(\frac{1}{n^{3/4}}\right), \quad t \in [a,b], \;\; 0 < a < b < \infty$$

Преобразование Фурье-Лагерра

$$a = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \dfrac{-Ik_0 - \eta/2}{-Ik_0 + \eta/2} & \dfrac{-Ik_1 - \eta/2}{-Ik_1 + \eta/2} & \dots & \dfrac{-Ik_{N_x} - \eta/2}{-Ik_{N_x} + \eta/2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \left(\dfrac{-Ik_0 - \eta/2}{-Ik_0 + \eta/2}\right)^n & \left(\dfrac{-Ik_1 - \eta/2}{-Ik_1 + \eta/2}\right)^n & \dots & \left(\dfrac{-Ik_{N_x} - \eta/2}{-Ik_{N_x} + \eta/2}\right)^n \end{pmatrix} \widetilde{f}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_N \\ x_1^2 & x_2^2 & x_3^2 & \dots & x_N^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_1^n & x_2^n & x_3^n & \dots & x_N^n \end{pmatrix}$$

Матрица Вандермонда

$$V_{i,j} := x_j^{i-1}$$

Дискретное преобразование Фурье

$$\mathbf{Y} = \mathcal{F}\mathbf{X}, \quad \mathcal{F} \in \mathbb{C}^{N\times N}, \quad \mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \mathbb{C}^{N}$$

$$\mathcal{F} = \frac{1}{\sqrt{N}}\left(\exp\left(-\frac{2\pi \mathrm{i} jk}{N}\right)\right)_{j,k=0}^{N-1} = \begin{bmatrix} \omega_N^{0\cdot 0} & \omega_N^{0\cdot 1} & \cdots & \omega_N^{0\cdot(N-1)} \\ \omega_N^{1\cdot 0} & \omega_N^{1\cdot 1} & \cdots & \omega_N^{1\cdot(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_N^{(N-1)\cdot 0} & \omega_N^{(N-1)\cdot 1} & \cdots & \omega_N^{(N-1)\cdot(N-1)} \end{bmatrix}$$

Матрица Вандермонда + Циркулянт + Унитарная

$O(N \log N)$ Быстрый алгоритм

Gauss, Carl Friedrich (1866). "Theoria interpolationis methodo nova tractata" [Theory regarding a new method of interpolation]. *Nachlass* (Unpublished manuscript). Werke (in Latin and German). Vol. 3. Göttingen, Germany: Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen. pp. 265–303.

Cooley, James W.; Tukey, John W. (1965). "An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series". *Math. Comput.* **19** (90): 297–301.

Полиномы Чебышева

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)),\ x \in \Omega,\ n \in \mathbb{Z}^+,\ \Omega = [-1, 1]$$

$$\int_{-1}^{1} T_n(x) T_m(x) \omega(x) dx = \frac{\pi}{c_n} \delta_{mn}, \qquad \|f\|^2_{L_{2,\omega}(\Omega)} = \int_{-1}^{1} \omega(x) |f(x)|^2 dx$$

$$\omega(x) = \left(1 - x^2\right)^{-1/2},\ c_0 = 1,\ c_n = 2 \text{ for } n \geq 1$$

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{f}_k T_k(x), \quad x \in \Omega,$$

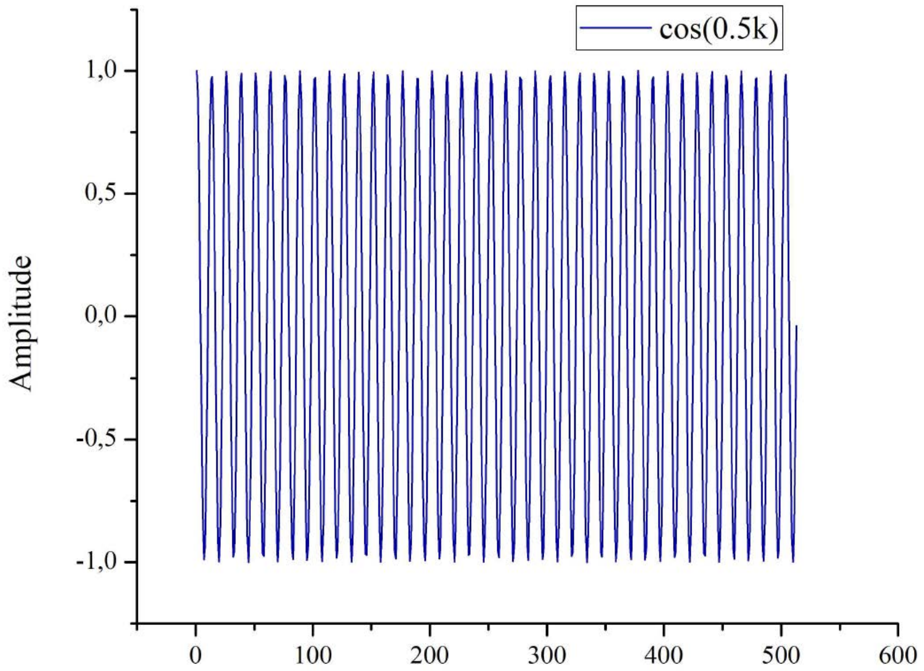
$$\hat{f}_k = \frac{c_k}{\pi} \int_{-1}^{1} f(x) T_k(x) \frac{dx}{\sqrt{1 - x^2}} = \frac{c_k}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(k\theta) f(\cos(\theta)) d\theta$$

Дискретное преобразование Чебышева

$$\mathbf{F} = A\hat{\mathbf{F}}$$

$$A := (\cos(m \arccos(x_n)))_{n,m=0}^{N,M} \in \mathbb{R}^{(N+1)\times(M+1)},$$

$$\mathbf{F} = (f(x_n))_{n=0}^{N}, \quad \hat{\mathbf{F}} = \left(\hat{f}_m\right)_{m=0}^{M}.$$



Рассмотрим первую строку матрицы A:

$$A_{1\cdot} = [1, \cos(\theta_0), \cos(2\theta_0), ..., \cos(M\theta_0)]$$

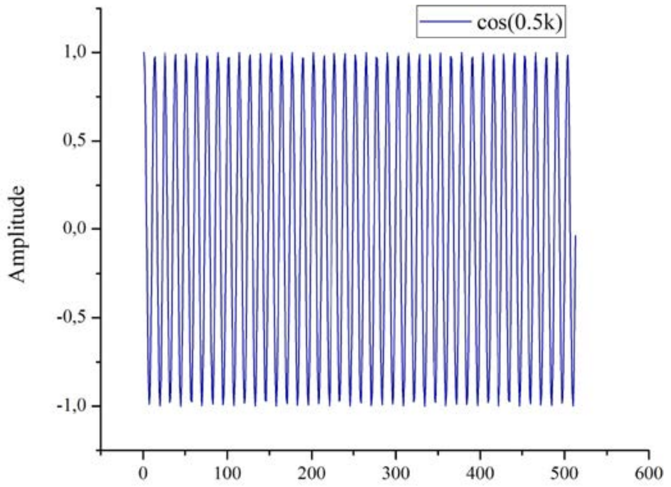
Функция Кайзера

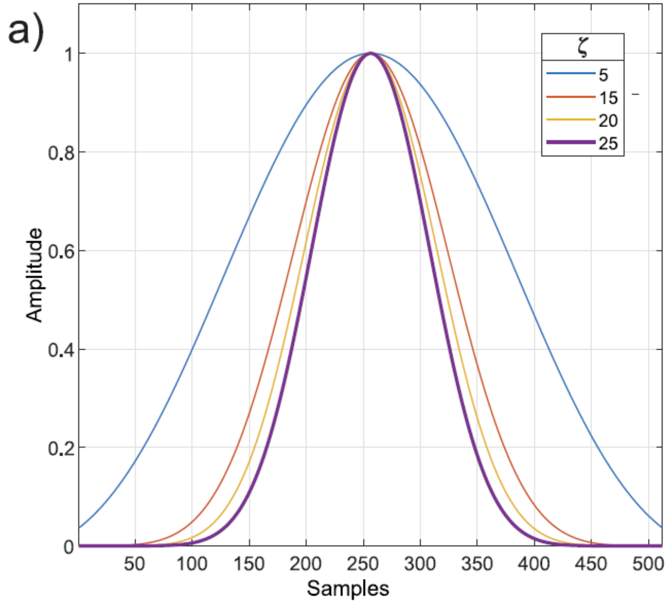
Оконное преобразование Фурье

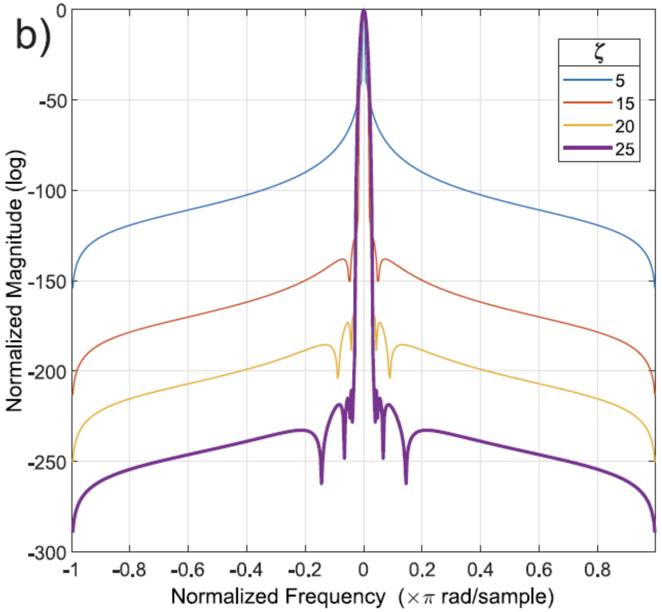
$$F(t,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) W(\tau - t) e^{-i\omega\tau}\, d\tau,$$

$$F(m,\omega) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f[n] w[n-m] e^{-j\omega n}$$

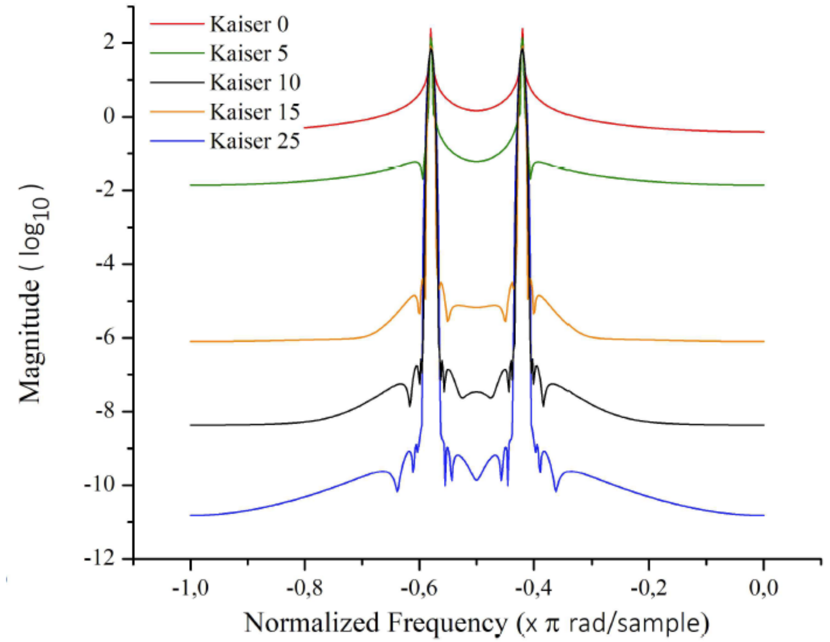
$$w_n^{\zeta,N} = \frac{I_0\left(\zeta\sqrt{1-\left(\frac{2n}{N}-1\right)^2}\right)}{I_0(\zeta)}, \quad 0 \le n \le N.$$







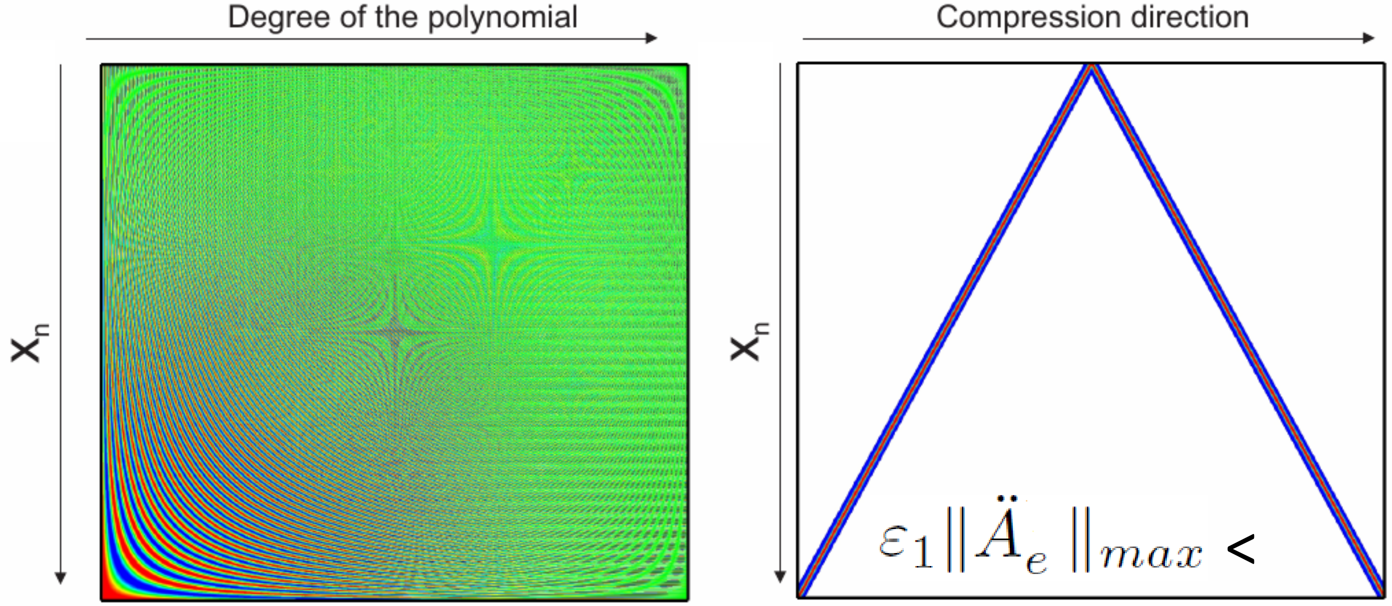
Сжатие строки



$$\ddot{A}_{1\cdot} = \mathcal{F} W_M A_{1\cdot}^{\mathrm{T}}$$

$$W_M = \operatorname{diag}\left\{w_0^{\zeta,M}, w_1^{\zeta,M}, ..., w_M^{\zeta,M}\right\} \in \mathbb{R}^{(M+1)\times(M+1)}$$

Сжатие матрицы

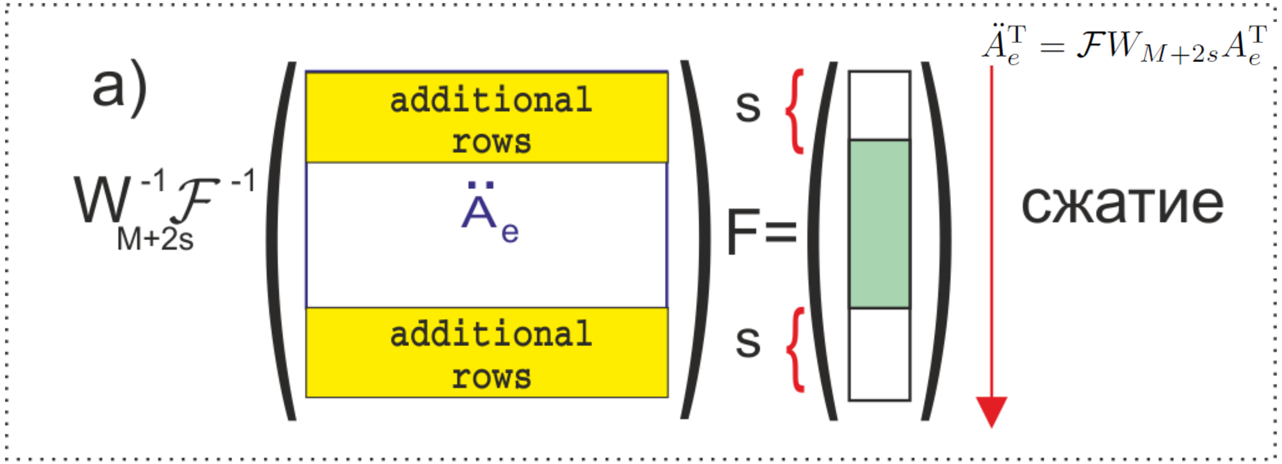


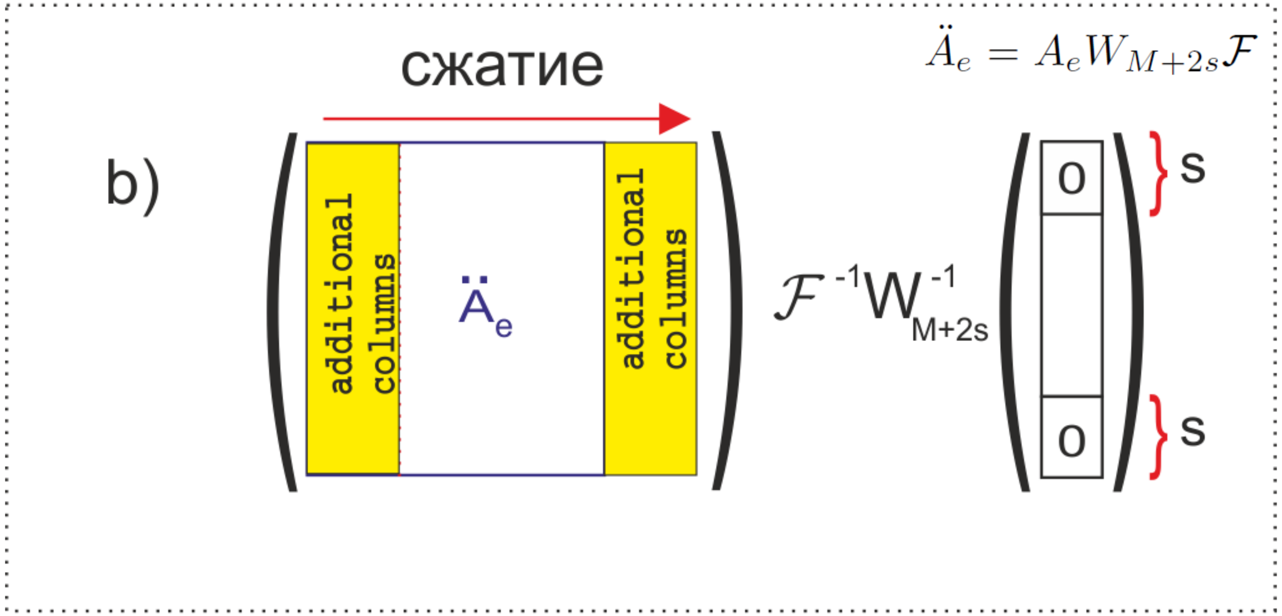
$$A$$

$$\ddot{A} = A W_M \mathcal{F}$$

$$\mathbf{F} = A \underbrace{W_M \mathcal{F} \mathcal{F}^* W_M^{-1}}_{I} \hat{\mathbf{F}} = \ddot{A} \mathcal{F}^* W_M^{-1} \hat{\mathbf{F}}$$

Экстра-компоненты для контроля точности расчетов

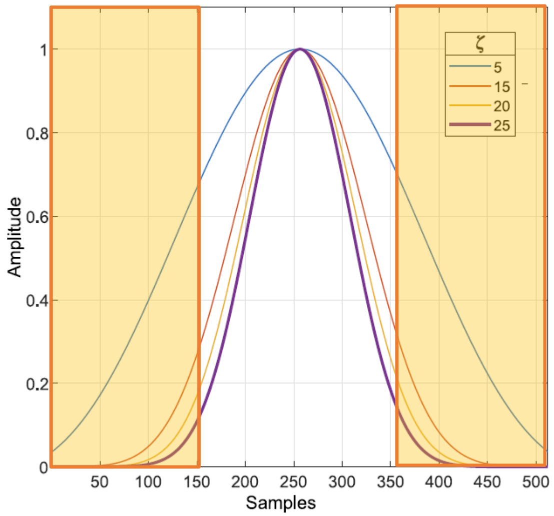




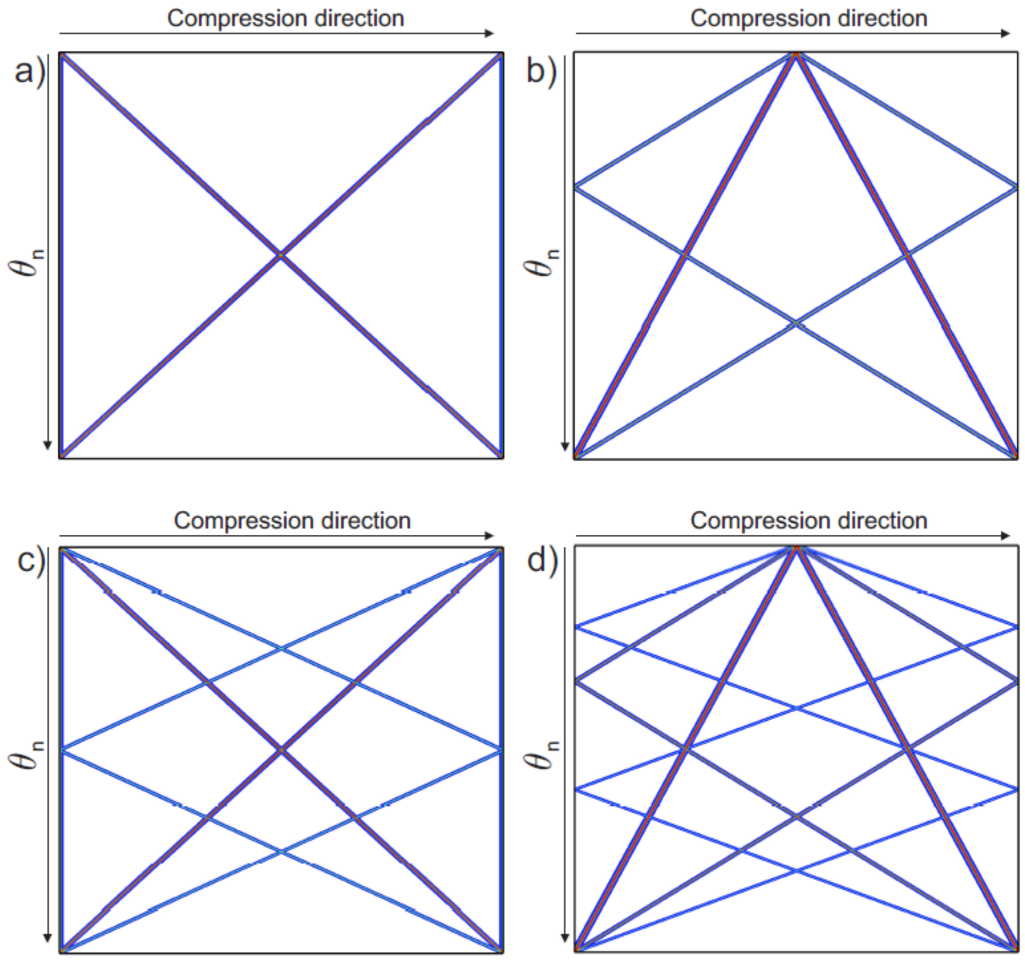
$$A_e := (\cos(m\theta_n))_{n=0,m=-s}^{N,M+s}$$

$$\hat{\mathbf{F}}^{[1]} = \Big(\underbrace{0, \ldots, 0}_{extra}, \underbrace{\hat{f}_0, \hat{f}_1, \ldots, \hat{f}_M}_{\hat{\mathbf{F}}}, \underbrace{0, \ldots, 0}_{extra}\Big)^{\mathrm{T}}$$

Функция Кайзера



Тригонометрические функции вида $\cos^n(x_k)$



a) $\cos^2(m\theta_n)$, b) $\cos^3(m\theta_n)$ c) $\cos^4(m\theta_n)$, d) $\cos^5(m\theta_n)$ and $\theta_n = \pi n/1024$

$$\cos^2(\theta_n t) = \left(e^{-i\theta_n t} + e^{i\theta_n t} + 2\right)/4,$$
$$\cos^3(\theta_n t) = \left(3e^{-i\theta_n t} + 3e^{i\theta_n t} + e^{-3i\theta_n t} + e^{3i\theta_n t}\right)/8,$$
$$\cos^4(\theta_n t) = \left(4e^{-2i\theta_n t} + 4e^{2i\theta_n t} + e^{-4i\theta_n t} + e^{4i\theta_n t} + 6\right)/16,$$
$$\cos^5(\theta_n t) = \left(10e^{-i\theta_n t} + 10e^{i\theta_n t} + 5e^{-3i\theta_n t} + 5e^{3i\theta_n t} + e^{-5i\theta_n t} + e^{5i\theta_n t}\right)/32$$

Принимая во внимание свойства функций Кайзера, в статье показано, что для тригонометрических функций число ненулевых элементов сжатой матрицы пропорционально O(n)

Алгоритм экстра-компонент для тригонометрических функций

$O(N^2 \log N)$

$O(N \log N)$

$O(N \log N)$

Algorithm 1 Multiplication $\mathbf{F} = A\hat{\mathbf{F}}$

1. *Precomputation stage*

   1.1 For a given $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ calculate $\zeta(\varepsilon_1)$ and $s(\varepsilon_2, \zeta)$.

   1.2 Set the extended matrix $A_e := (\cos(m\theta_n))_{n=0,m=-s}^{N,M+s}$.

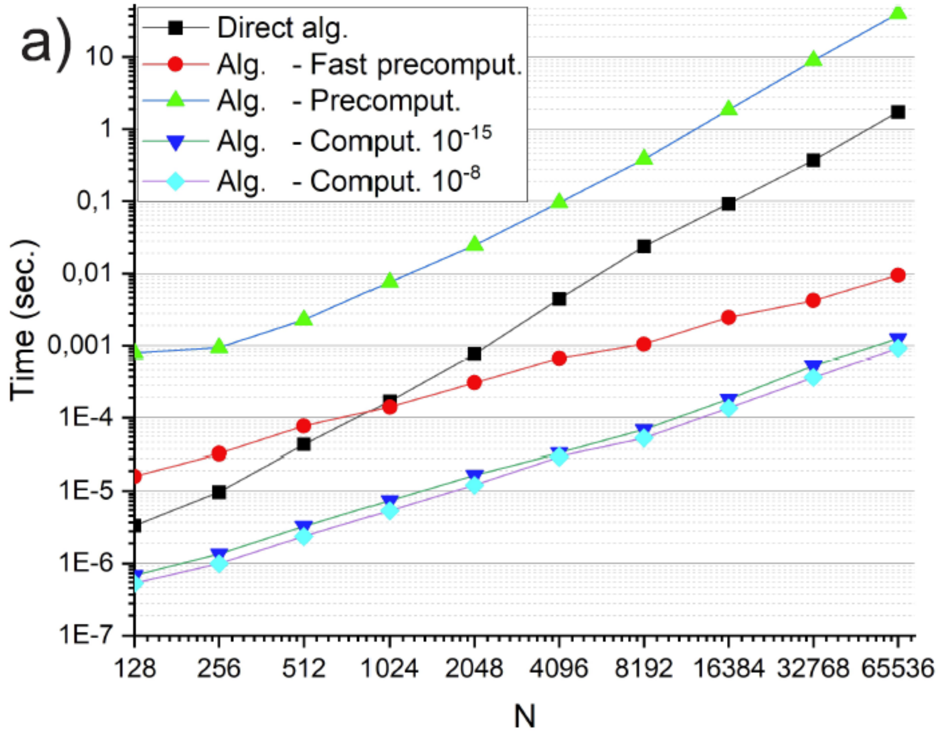
   1.3 Calculate the compressed matrix $\ddot{A}_e = A_e W_{M+2s} \mathcal{F}$ and store the elements with absolute values greater than $\varepsilon_1 \|\ddot{A}_e\|_{max}$.

2. *Computation stage*

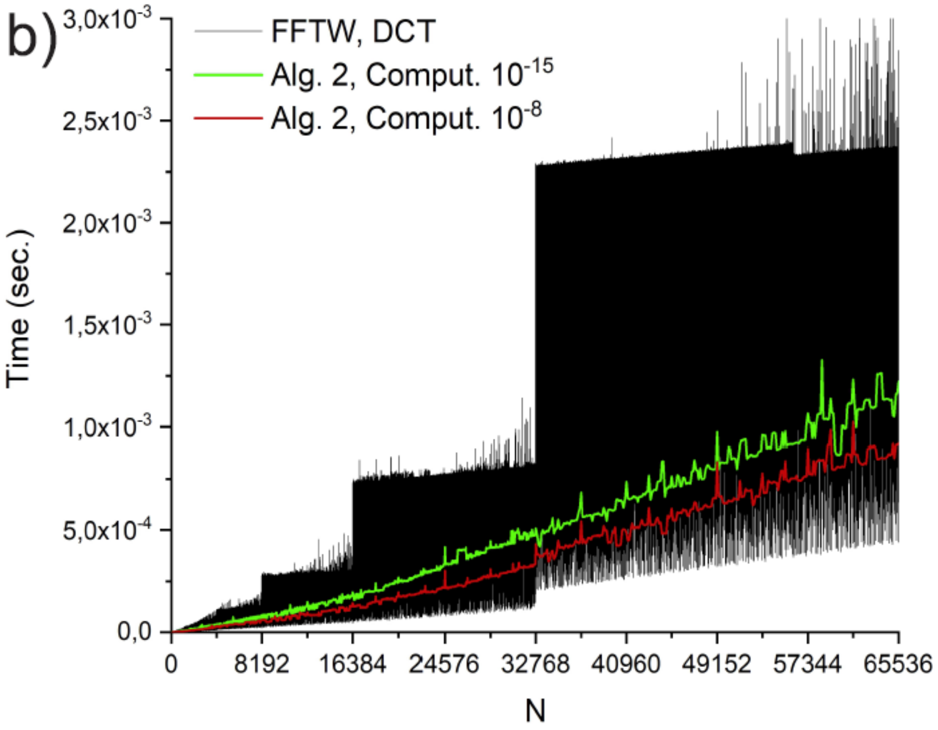
   2.1 Set $\hat{\mathbf{F}}^{[1]}$ according to (11).

   2.2 Calculate $\mathbf{F} = \ddot{A}_e \mathcal{F}^* W_{M+2s}^{-1} \hat{\mathbf{F}}^{[1]}$.

Результаты вычислительных экспериментов для тригонометрических функций



Зависимость времени счета от порядка матрицы преобразования



Зависимость времени счета от порядка матрицы преобразования

Преобразование Якоби

$$\|f\|^2_{L_{2,\omega^{(\alpha,\beta)}(\Omega)}} = \int_{-1}^{1} \omega^{(\alpha,\beta)}(x)|f(x)|^2 dx \qquad \omega^{(\alpha,\beta)}(x) = (1-x)^\alpha (1+x)^\beta$$

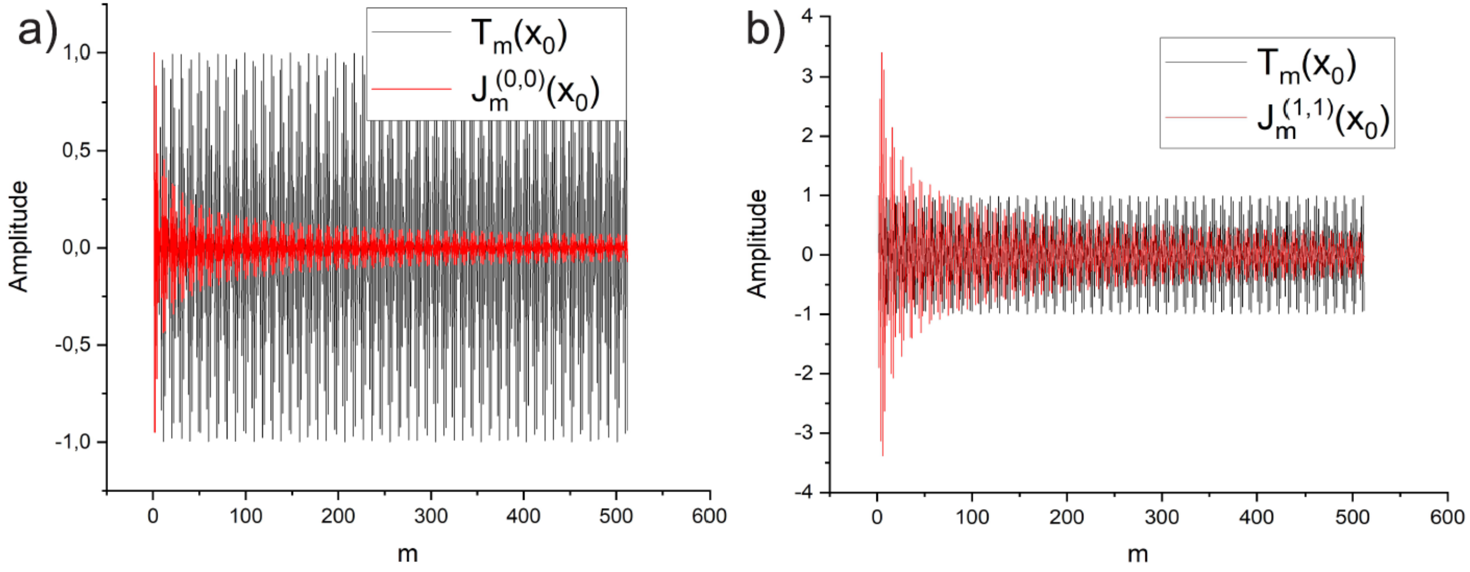
$$f(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \hat{f}_m^{(\alpha,\beta)} J_m^{(\alpha,\beta)}(x), \quad x \in \Omega$$

$$\hat{f}_m^{(\alpha,\beta)} = \frac{1}{\chi_m^{(\alpha,\beta)}} \int_{-1}^{1} \omega^{(\alpha,\beta)}(x) J_m^{(\alpha,\beta)}(x) f(x) dx$$

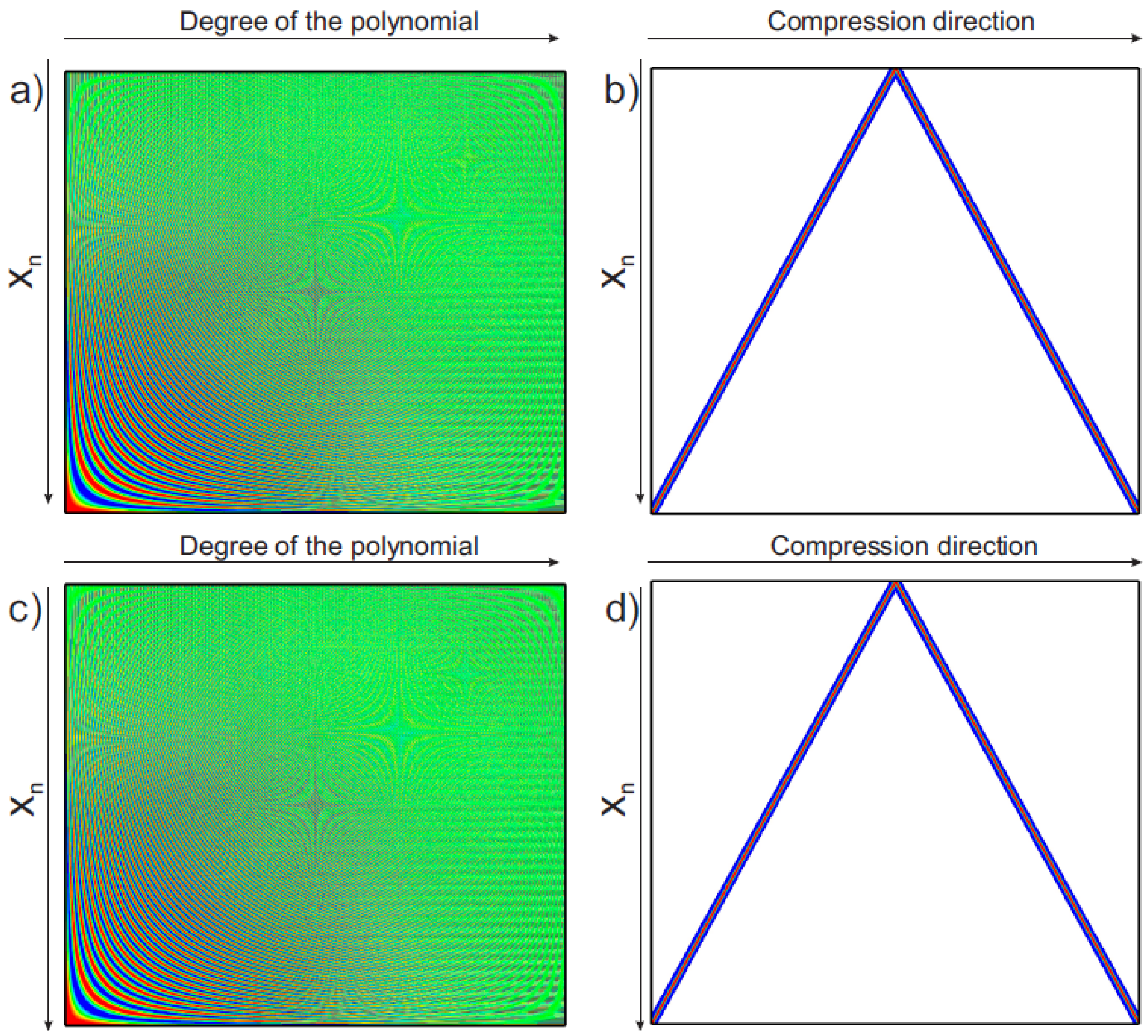
Чебышева, Лежандра, Гегенбауэра

Дискретное преобразование Якоби

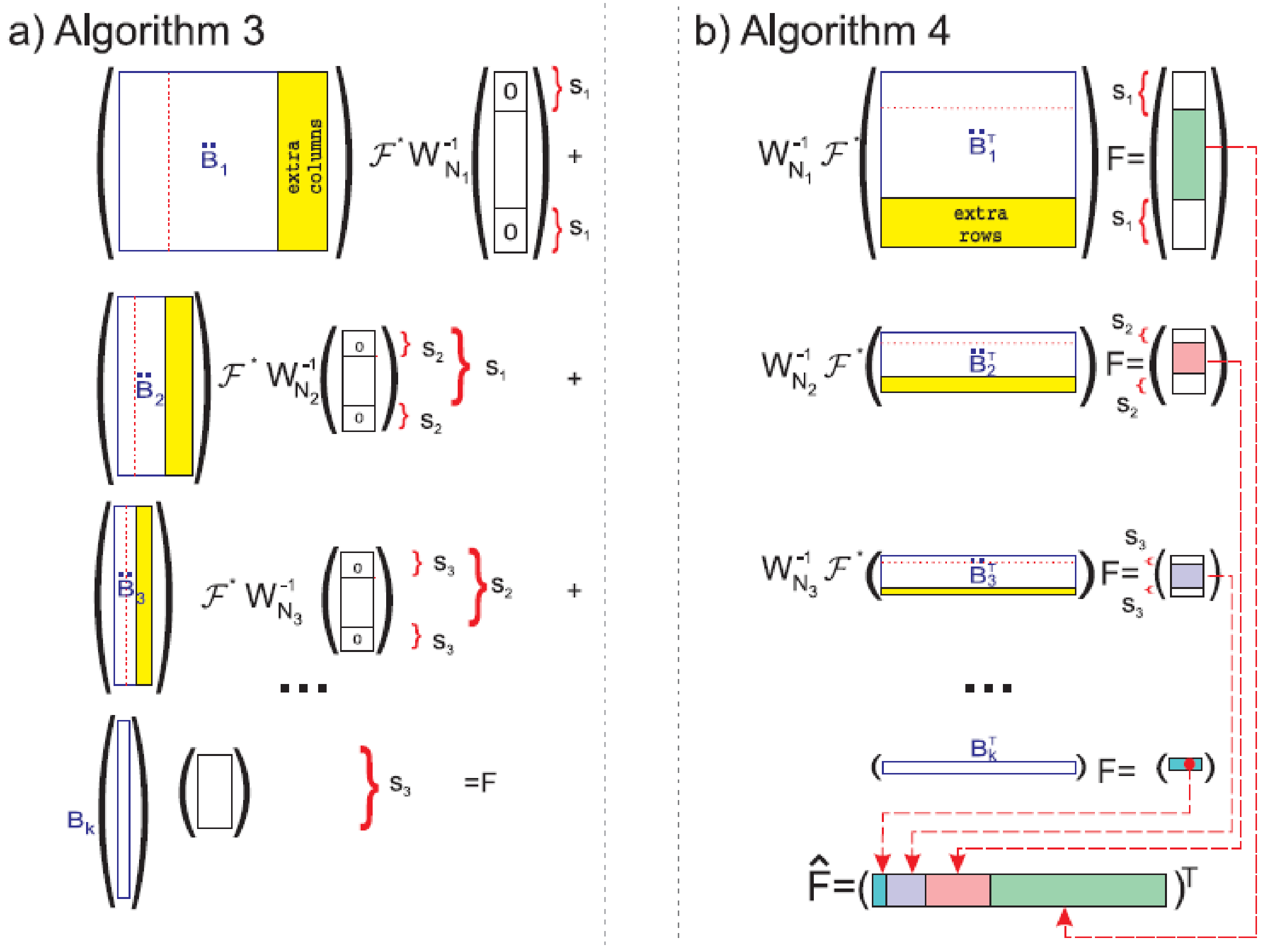
$$B := \left(J_m^{(\alpha,\beta)}(x_n)\right)_{n,m=0}^{N,M} \in \mathbb{R}^{(N+1)\times(M+1)}$$



Дискретное преобразование Якоби



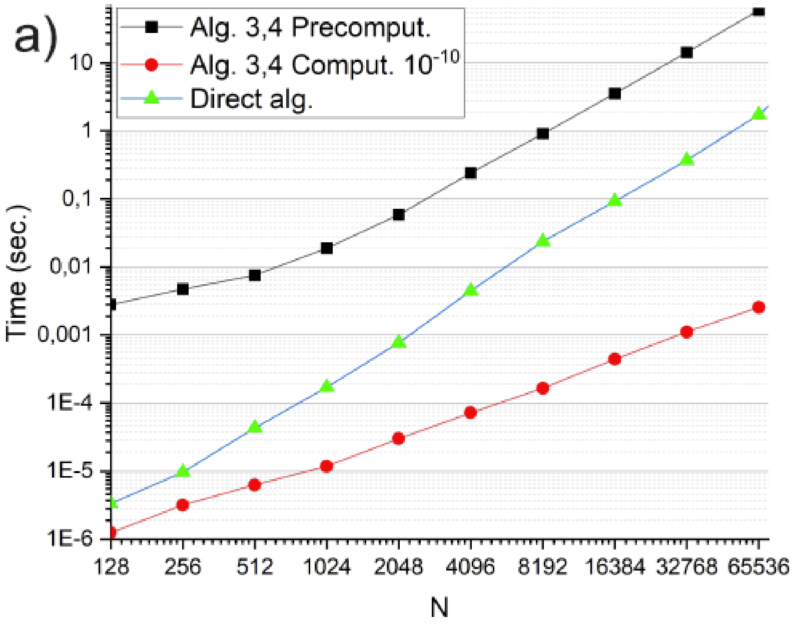
Блочный вариант метода экстра-компонент



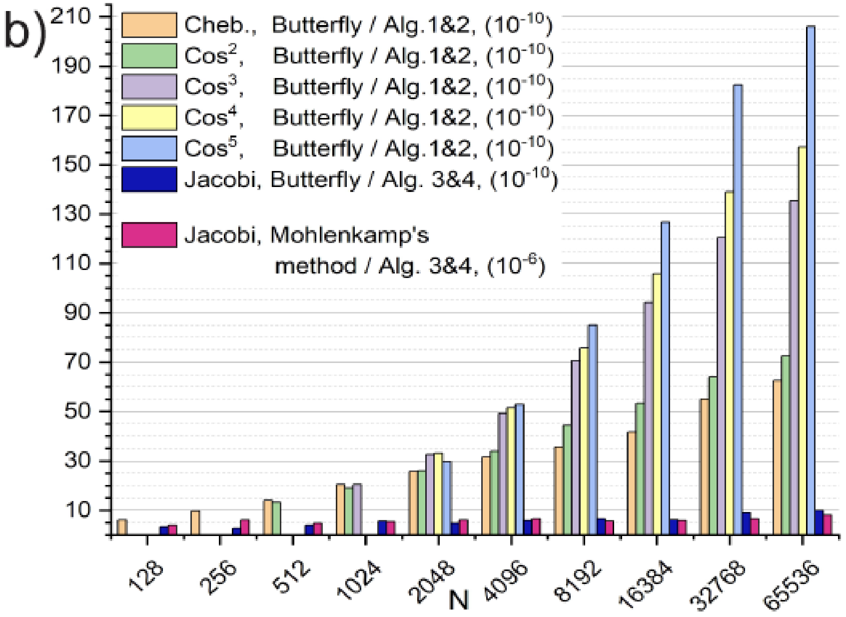
N	Alg. 3 (10^{-6}) $\varepsilon_1 = 10^{-6}$, $\varepsilon_2 = 10^{-4}$, bw= 16			Alg. 3 (10^{-10}) $\varepsilon_1 = 10^{-10}$, $\varepsilon_2 = 10^{-3}$, bw= 20				
	N_1	N_2	N_3	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5
128	135	-	-	151	29	-	-	-
256	271	-	-	304	60	-	-	-
512	539	33	-	600	160	-	-	-
1024	1078	60	-	1200	208	39	-	-
2048	2160	12	-	2340	336	51	-	-
4096	4312	230	-	4680	666	95	-	-
8192	8624	456	29	9360	1326	181	29	-
16384	17248	910	51	18720	2662	374	58	-
32768	34496	1820	99	37440	5292	704	98	-
65536	68796	3430	179	74536	10192	1352	184	29

Размер и число блоков

Оценка времени счёта

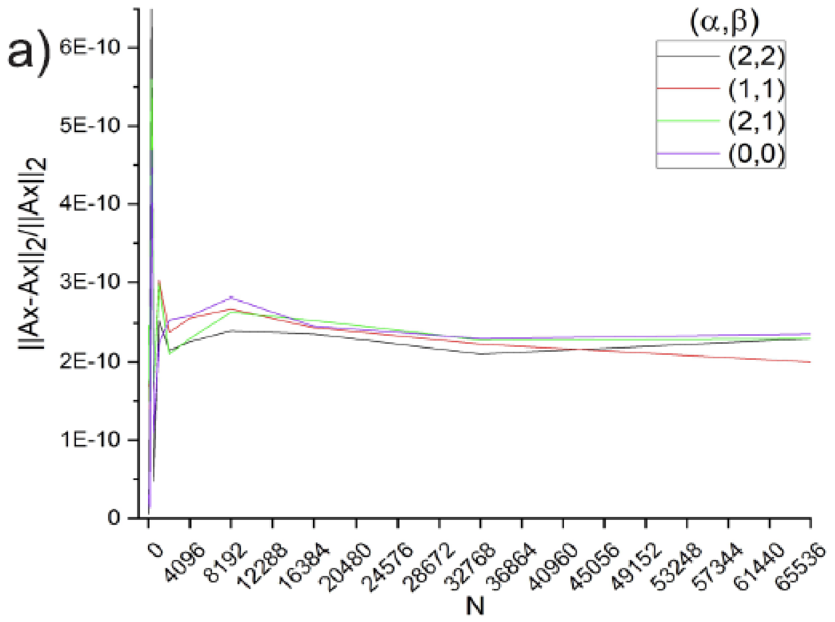


Сравнение времени счета
метода экстра-компонент и прямого
матрично-векторного произведения

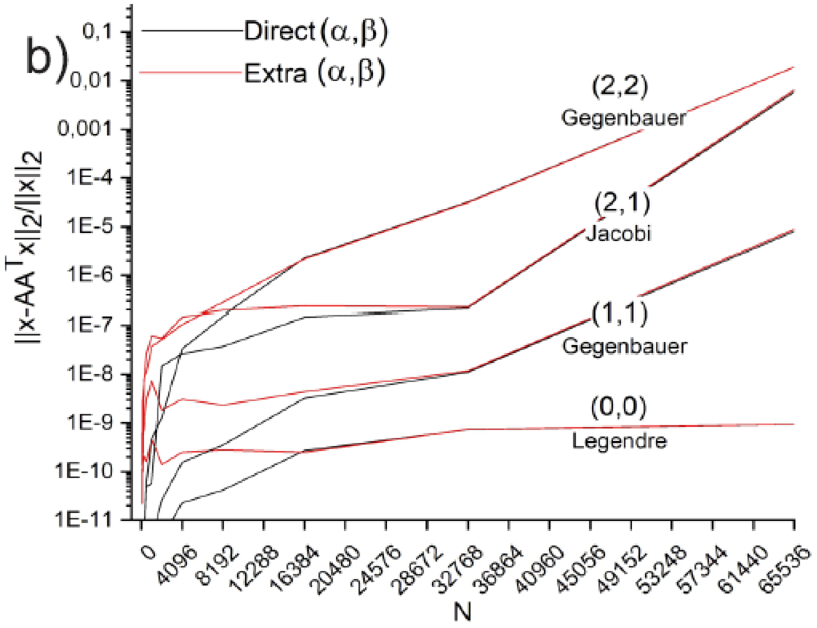


Сравнение времени счета для альтернативных подходов

Оценка точности метода экстра-компонент



Прямое преобразование

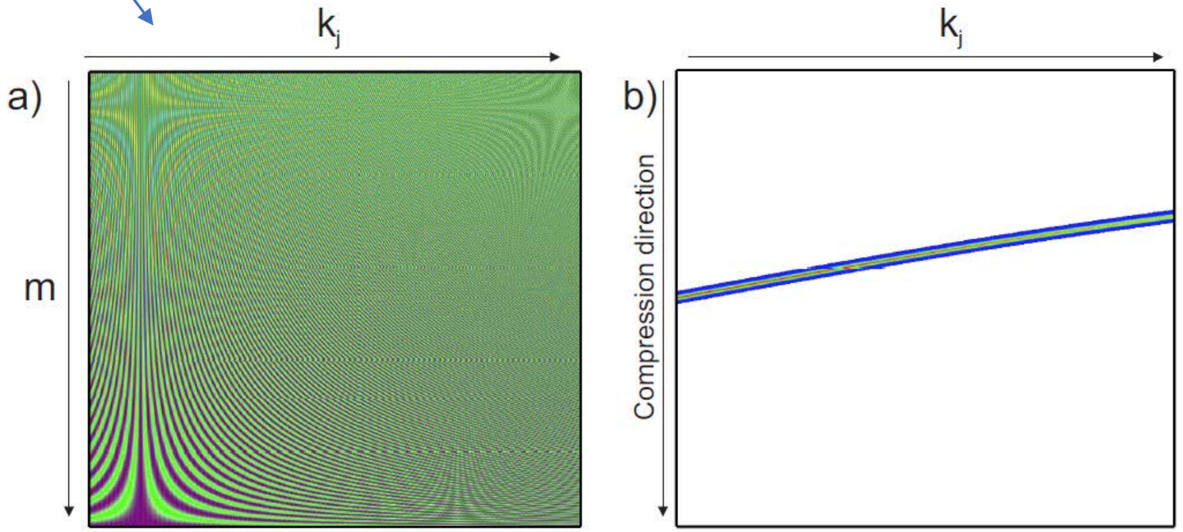


Прямое и обратное преобразования

Преобразование Фурье-Лагерра

$$a=\begin{pmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 \\ \dfrac{-Ik_0-\eta/2}{-Ik_0+\eta/2} & \dfrac{-Ik_1-\eta/2}{-Ik_1+\eta/2} & \ldots & \dfrac{-Ik_{N_x}-\eta/2}{-Ik_{N_x}+\eta/2} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \left(\dfrac{-Ik_0-\eta/2}{-Ik_0+\eta/2}\right)^n & \left(\dfrac{-Ik_1-\eta/2}{-Ik_1+\eta/2}\right)^n & \ldots & \left(\dfrac{-Ik_{N_x}-\eta/2}{-Ik_{N_x}+\eta/2}\right)^n \end{pmatrix}\widetilde{f}$$

Сжатая матрица



Двумерный вариант метода экстра-компонент для функций Лагерра

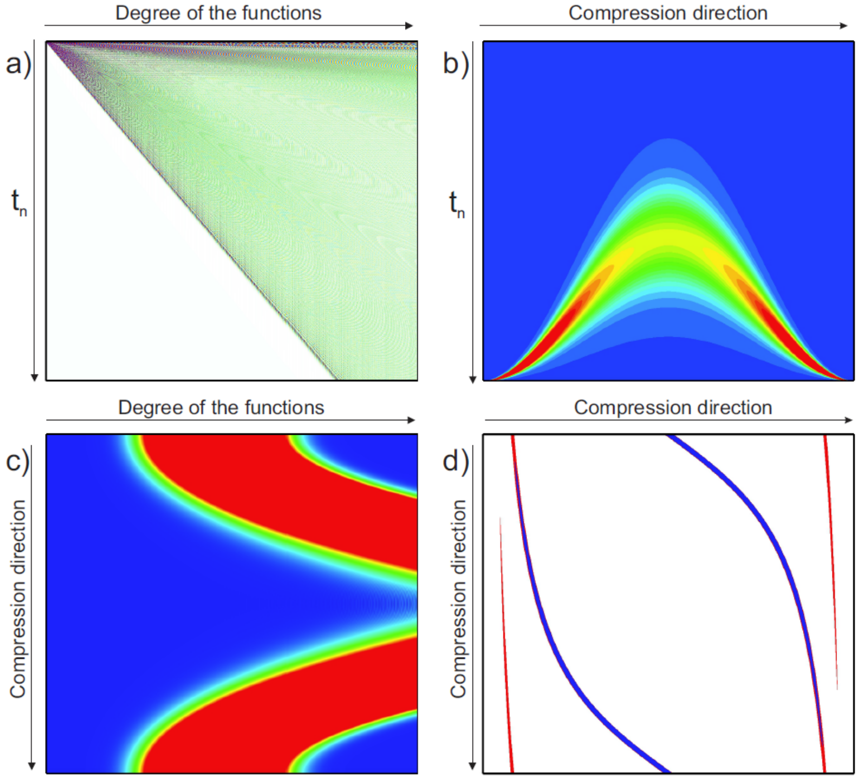
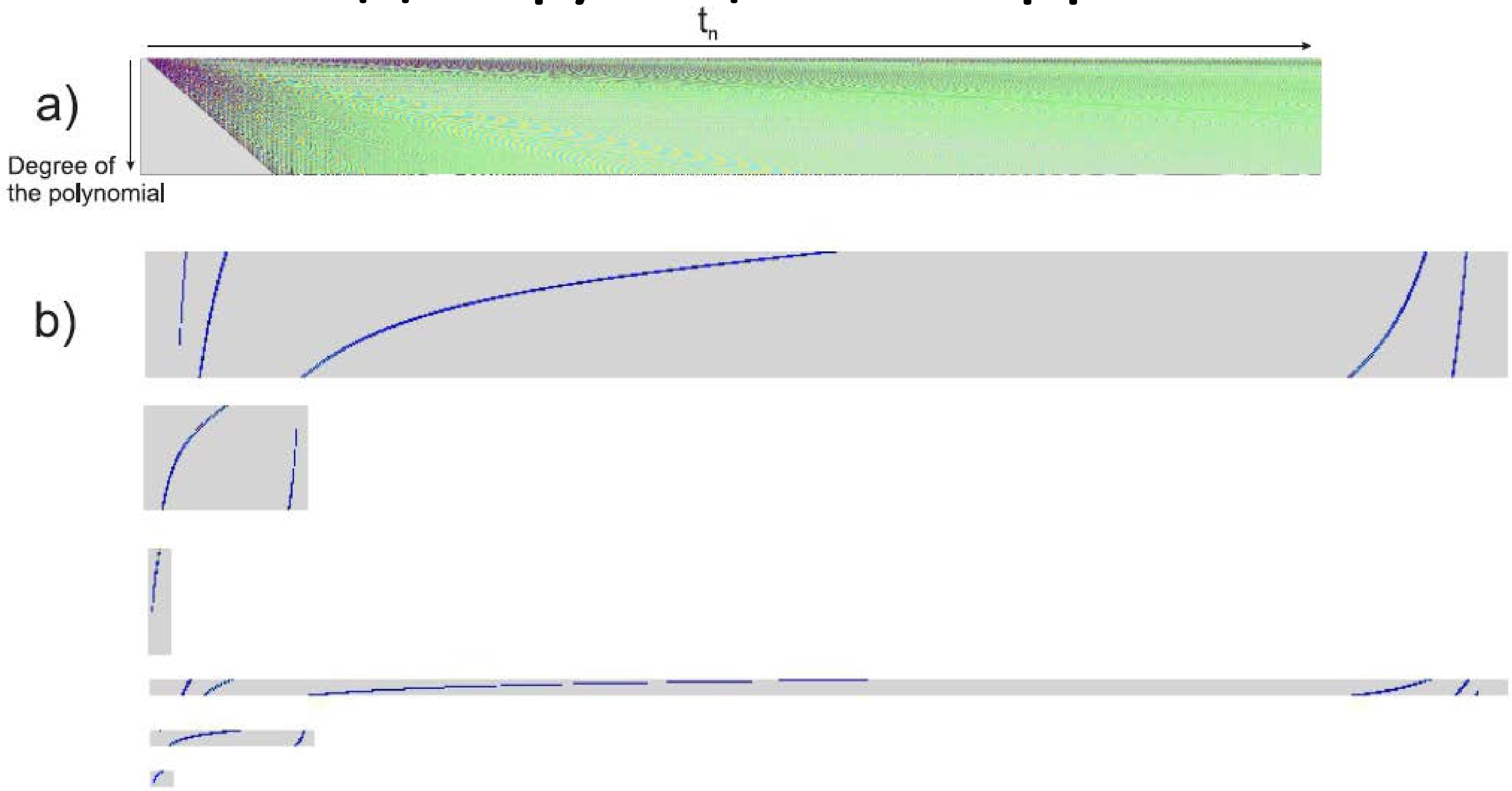


Fig. 9: a) Laguerre transform matrix $D \in \mathbb{R}^{1000\times1024}$ and compressed matrices b) $DW_{1023}\mathcal{F}$, c) $\mathcal{F}W_{999}D$, and d) $\mathcal{F}W_{999}DW_{1023}\mathcal{F}$

$$a_i = \int_0^\infty f(x) l_i(\eta x)\, dx, \qquad f(x) = \eta \sum_{i=0}^{n} a_i l_i(\eta x)$$

$$D := (l_m(t_n))_{n,m=0}^{N,M} \in \mathbb{R}^{(N+1)\times(M+1)}$$

Двумерный блочный вариант метода экстра-компонент для функций Лагерра



а) исходная матрица b) сжатые блоки

Двумерный блочный вариант метода экстра-компонент для неосциллирующих функций

$$A^{[1]}_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{\pi}\Lambda(j), & 0 = i \le j < N, \\ \frac{2}{\pi}\Lambda(j-i)\Lambda(j+i), & 0 < i \le j < N, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases}$$

$$\Lambda(z) = \Gamma(z+\tfrac{1}{2})/\Gamma(z+1);$$

$$A^{[2]}_{i,j} = \begin{cases} \dfrac{i\cos(\log i^2) - j\cos(\log j^2)}{(i-j)^2}, & i \ne j, \\ 0, & i = j, \end{cases}$$

$$A^{[3]}_{i,j} = \begin{cases} \dfrac{1}{i-j+\frac{1}{2}\cos(ij)}, & i \ne j, \\ 0, & i = j. \end{cases}$$

	Matrix $A^{[1]}$		Matrix $A^{[2]}$		
N	Wavelet (10^{-5})	Extra (10^{-5})	Wavelet (10^{-2})	Extra (10^{-2})	Extra (10^{-6})
64	1.73	1.36	2.37	2.0	1.0
128	2.89	2.63	4.13	3.7	1.6
256	5.18	5.16	8.25	6.6	2.0
512	9.7	9.5	14.8	10.3	3.7
1024	18.6	19.6	33	23	6.5

Beylkin, G., Coifman, R., Rokhlin, V.: Fast wavelet transforms and numerical algorithms I. Communications on Pure and Applied Mathematics **44**(2), 141–183 (1991)

Спасибо за внимание!