

Zusammenfassung

Effiziente Bestapproximation mittels Summen von Elementartensoren in hohen Dimensionen

Mike Espig

Die rechnergestützte Darstellung von Funktionen und die Diskretisierung partieller Differential- und Integralgleichungen mit Hilfe konventioneller numerischer Methoden ist infolge von zu hohem Speicher- und Rechenbedarf beschränkt auf drei oder vier Raumdimensionen. Viele hochdimensionale Probleme sind schwierig zu lösen, der Rechenaufwand der üblichen numerischen Verfahren wächst exponentiell mit der Dimension d . Mit N Freiheitsgraden kann nur eine Genauigkeit von $\mathcal{O}(N^{-\frac{r}{d}})$ erreicht werden, wobei r ein zusätzlicher Regularitätsparameter des zugrundeliegenden Problems ist. Diese Tatsache ist seit Bellman (1961) als „Fluch der Dimension“ bekannt.

Nach Zenger (1991) stellen dünne Gitter eine anerkannte und etablierte Technik zur Diskretisierung hochdimensionaler Probleme dar. Die wesentlichen Ideen sind dabei nicht neu und wurden bereits in Arbeiten von Babenko (1960) und Smolyak (1963) beschrieben. Dünne Gitter werden mit Hilfe einer Multiskalen-Tensorproduktbasis definiert, welche aus einer eindimensionalen hierarchischen Basis konstruiert ist. Ferner wird die Multiskalen-Tensorproduktbasis derart ausgedünnt, dass ausschließlich Teilräume einbezogen werden, deren Basisfunktionen einen signifikanten Anteil zur Lösung des Problems beitragen, wobei zusätzliche Glattheitseigenschaften vorausgesetzt sind. Die Anzahl der Freiheitsgrade beträgt hier $\mathcal{O}(n(\log n)^{d-1})$, wobei n die Anzahl der Gitterpunkte in einer Koordinatenrichtung bezeichnet. Bei stückweisen linearen Basisfunktionen wird z. B. bezüglich der L_2 -Norm eine Genauigkeit von $\mathcal{O}(n^{-2}(\log n)^{d-1})$ erreicht, sofern die gemischten zweiten Ableitungen der Lösung beschränkt sind. Seit den neunziger Jahren werden dünne Gitter insbesondere zur Lösung von Integral- und Differentialgleichungen in hohen Dimensionen eingesetzt, wie zum Beispiel in den Arbeiten von Zenger (1991), Griebel (1991), Bungartz (1992) und Schwab, Todor (2003) für stochastische elliptische Probleme.

Neuere vielversprechende Methoden setzen ebenfalls eine Tensorproduktbasis voraus. Hier wird versucht, die gesuchte Lösung möglichst genau als Linearkombination der Basisfunktionen darzustellen. Sei etwa u die gesuchte Lösung, welche mit Hilfe der Tensorproduktbasis dargestellt ist:

$$u = \sum_{l_1=1}^n \cdots \sum_{l_d=1}^n \hat{u}_{(l_1, \dots, l_d)} \bigotimes_{\mu=1}^d \varphi_{l_\mu \mu}.$$

Um den exponentiellen Speicheraufwand für die Koeffizienten $\hat{u} \in \mathbb{R}^{n^d} \cong \bigotimes_{\mu=1}^d \mathbb{R}^n$

zu umgehen, werden $d \cdot r$ Vektoren $\{u_{j\mu} \in \mathbb{R}^n : j \in \mathbb{N}_{\leq r}, \mu \in \mathbb{N}_{\leq d}\}$ derart bestimmt, dass für alle Multiindizes folgende Approximation bestmöglich erfüllt ist:

$$\widehat{u}_{(l_1, \dots, l_d)} \approx \underline{u}_{(l_1, \dots, l_d)} := \sum_{j=1}^r \prod_{\mu=1}^d (u_{j\mu})_{l_\mu}.$$

Dies bedeutet für die Lösung

$$u \approx \sum_{j=1}^r \bigotimes_{\mu=1}^d \left[\sum_{l_\mu=1}^n (u_{j\mu})_{l_\mu} \varphi_{l_\mu \mu} \right].$$

Ferner wird $\underline{u} \in \bigotimes_{\mu=1}^d \mathbb{R}^n$ mit Hilfe des Kronecker-Produktes wie folgt dargestellt:

$$\underline{u} = \sum_{j=1}^r \bigotimes_{\mu=1}^d u_{j\mu}.$$

Der Tensor \underline{u} setzt sich aus der Summe elementarer Tensoren zusammen, deshalb nennt man \underline{u} eine Summe von Elementartensoren oder auch Elementartensor-Summe. Ist die Anzahl der Summanden minimal, dann wird r der Tensorrang von \underline{u} genannt. Jeder Tensor kann als Summe von Elementartensoren geschrieben werden und hat demnach einen Tensorrang. Dieser kann allerdings außerordentlich groß sein, denn es gilt hier:

$$r \leq n^{d-1}.$$

Um Praktikabilität und Umsetzbarkeit der neuen, ambitionierten Methoden zu sichern, darf bei hochdimensionalen Problemen der Tensorrang aller beteiligten oder approximativ dargestellten Tensoren einschließlich der Näherungslösung nicht exponentiell von der Dimension abhängen. Ist diese Prämisse erfüllt, dann haben lineare Operationen mit Summen von Elementartensoren eine günstige Komplexität von $\mathcal{O}(dn^p r^q)$ und der Aufwand zur Speicherung von \underline{u} beträgt $\mathcal{O}(dnr)$, wobei $q, p \in \mathbb{N}_{\leq 2}$ sind. Für viele bedeutsame Fälle wurde diese Eigenschaft bereits in den Arbeiten von Beylkin, Mohlenkamp (2002), Tyrtyschnikov (2003, 2004), Grasedyck (2004), Gavriljuk, Hackbusch, Khoromskij (2005), Hackbusch, Khoromskij, Tyrtyschnikov (2005) und Hackbusch, Khoromskij (2006, 2006, 2007) nachgewiesen. In diesen Arbeiten konnte unter anderem gezeigt werden, dass viele hochdimensionale Probleme näherungsweise mit einer Komplexität der Ordnung $\mathcal{O}(dn^p \log^q(n))$ lösbar sind, wobei $p \in \mathbb{N}_{\leq 2}$ und q unabhängig von d sind.

Beim effizienten Einsatz von Elementartensor-Summen tritt folgendes fundamentales Problem auf. Zu einem gegebenen Tensor v mit Tensorrang R ist eine optimale Niedrigtensorrang-Approximation w^* mit Tensorrang $r \in \mathbb{N}_{<R}$ zu bestimmen. D.h., w^* ist derart zu berechnen, dass für alle Tensoren w mit Tensorrang

r folgende Ungleichung erfüllt ist:

$$\|w^* - v\| \leq \|w - v\|.$$

Für $d=2$ ist die Lösung bekannt und kann mittels Singulärwertzerlegung berechnet werden. Bei hohen Dimensionen, $d \geq 3$, wird eine alternierende Methode der kleinsten Quadrate (ALS)¹ verwendet. Beim ALS-Verfahren wird der zur Verfügung stehende Suchraum partitioniert und anschließend das Optimierungsproblem alternierend auf den einzelnen Partitionen gelöst. Diese Idee wurde schon von Yates (1933) benutzt. Die Ersten, die das ALS-Verfahren zum Approximieren von Tensoren einsetzten, waren wohl de Leeuw, Young und Takane (1976). Hier wird der Suchraum so unterteilt, dass man die Variablen einer Raumrichtung zu einer Partition vereinigt. Bei der Berechnung von Lösungen partieller Differentialgleichungen in hohen Dimensionen wurde das ALS-Verfahren von Beylkin und Mohlenkamp (2002, 2005) eingesetzt. Das ALS-Verfahren zum Approximieren von Elementartensor-Summen konvergiert häufig extrem langsam, dies wurde zum Beispiel von Paatero (1997) an einem Beispiel demonstriert. In dieser Arbeit verwendet Paatero erstmal das Gauß-Newton-Verfahren, welches den gesamten Suchraum mit einbezieht. In der Arbeit von Paatero ist das Gauß-Newton-Verfahren für den Fall $d=3$ zur Approximation von Tensoren mittels Elementartensor-Summen unter Berücksichtigung starker Nebenbedingungen beschrieben. Bei den dort betrachteten Anwendungen besitzt das Gauß-Newton-Verfahren gute Konvergenzeigenschaften. Im Allgemeinen ist aber eine gute Konvergenz nicht zu erwarten, denn das Gauß-Newton-Verfahren zur Minimierung von $h(w) := \frac{1}{2}\|w - v\|^2$ konvergiert nur unter der Voraussetzung

$$w^* = v$$

superlinear. Diese Voraussetzung widerspricht aber der Forderung $r \in \mathbb{N}_{<R}$. Ist diese Bedingung nicht erfüllt, dann kann das Gauß-Newton-Verfahren sogar divergieren.

Ziel dieser Arbeit ist es, ein effizientes und robustes Verfahren zu entwickeln, welches das oben beschriebene Approximationsproblem auch in allgemeinen Tensorprodukt-Prähilberträumen effizient löst. Ferner werden zu diesem Zweck die besten Niedrigtensorrang-Approximationen von Elementartensor-Summen analysiert.

Im ersten Kapitel werden grundlegende Definitionen und Eigenschaften des Tensorproduktes erläutert und die Darstellung von Tensoren in Untervektorräumen untersucht.

Im anschließenden Kapitel steht die beste Approximation mit Summen von Elementartensoren im Zentrum der Analyse. Mit Hilfe des zentralen Satzes dieses

¹Alternating Least Squares

Kapitels kann die Approximation auf einen endlich-dimensionalen Teilraum eingeschränkt werden. Ferner wird gezeigt, dass dieser Unterraum im Allgemeinen nicht abgeschlossen ist, demzufolge kann die Existenz einer besten Approximation nicht garantiert werden. Dieser Mangel führt zur Definition von Elementartensoren mit beschränkten Summanden.

Nachdem die Existenz der besten Approximation gesichert ist, wird im dritten Kapitel die Approximationsaufgabe präzise formuliert. Daneben sind die Zielfunktion und die erste und zweite Ableitung der Zielfunktion dargestellt. Dies ist für die numerische Umsetzung von Bedeutung.

Zur besseren Übersicht sind numerische Verfahren zur Behandlung nichtlinearer Optimierungsaufgaben im vierten Kapitel zusammengetragen. Hierbei wird besonderer Wert auf geeignete Methoden zur Lösung der gestellten Approximationsaufgabe gelegt.

Im fünften Kapitel steht die Lösung der Approximationsaufgabe im Mittelpunkt der Untersuchung. Im Besonderen ist die praktische Umsetzung eines Minimierungsschrittes beschrieben und seine Komplexität angegeben.

Anhand spezifischer Anwendungen wird die vorgestellte Methode im sechsten Kapitel revidiert und neue Berechnungsmethoden aufgezeigt. So kann z. B. mit Hilfe des Approximationsverfahrens die offene Frage nach einer effizienten Methode zur Berechnung der Maximumnorm einer Elementartensor-Summe und des zugehörigen Index beantwortet werden.

Die vorliegende Arbeit enthält eine neue iterative Methode zur lokal besten Approximation von Elementartensor-Summen in hohen Dimensionen mittels Tensoren niederen Tensorrangs. Ferner werden Aussagen über das Konvergenzverhalten dieses Verfahrens angegeben. Insgesamt verbessert diese Studie den effizienten Einsatz von Elementartensor-Summen und stellt damit ein neues, robustes Hilfsmittel zur Lösung hochdimensionaler Probleme bereit.