

# ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

Факультет прикладної математики та інформатики  
Кафедра обчислювальної математики

## КУРСОВА РОБОТА

На тему

**Ієрархічні матриці у методі граничних елементів**

Студентки 5-го курсу групи ПмП-51  
напряму підготовки  
6.040301 "Прикладна математика"  
Солук О.О.

Керівник  
Вавричук В.Г.

Національна шкала \_\_\_\_\_  
Кількість балів \_\_\_\_\_ Оцінка ECTS \_\_\_\_\_

# Зміст

<b>1</b>	<b>1. Вступ.</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>2. Обчислення за допомогою ієрархічних матриць.</b>	<b>4</b>
2.1	Означення кластерного дерева. . . . .	4
2.2	Означення блочного кластерного дерева . . . . .	5
2.3	Умова допустимості . . . . .	6
2.4	Означення $\mathcal{H}$ -матриці . . . . .	7
<b>3</b>	<b>3. Розв'язання модельного інтегрального рівняння.</b>	<b>8</b>
3.1	Модельна задача . . . . .	8
3.2	Розклад ядра в ряд Тейлора . . . . .	9
3.3	Наближення низького рангу блоків матриці . . . . .	10
3.4	Одновимірний випадок побудови блочного кластерного дерева . . . . .	12
3.4.1	Приклад побудови кластерного дерева . . . . .	12
3.4.2	Умова допустимості . . . . .	13
3.5	Приклад побудови блочного кластерного дерева. . . . .	14
3.6	Побудова матриці . . . . .	15
3.6.1	Недопустимі листки . . . . .	15
3.6.2	Допустимі листки . . . . .	16
3.6.3	Репрезентація ієрархічної матриці . . . . .	16
3.7	Розпис інтегралів . . . . .	18
3.7.1	Допустимі блоки . . . . .	18
3.7.2	Недопустимі блоки . . . . .	18
3.8	Метод спряжених градієнтів . . . . .	20
3.9	Чисельні експерименти . . . . .	21
3.9.1	Приклад 1 . . . . .	21
3.9.2	Приклад 2 . . . . .	21
3.9.3	Приклад 3 . . . . .	22
<b>4</b>	<b>4. Розв'язання задачі Діріхле для рівняння Лапласа на площині</b>	<b>23</b>
4.1	Геометрична бісекція . . . . .	23
4.2	Обмежувальні коробки . . . . .	24
4.3	Інтерполяція . . . . .	25
4.3.1	Вироджене наближення . . . . .	25
4.3.2	Апроксимація тензорним добутком на обмежувальних коробках	25
4.3.3	Побудова апроксимації низького рангу . . . . .	27
4.4	Внутрішня задача Діріхле . . . . .	28

4.4.1	Потенціал простого шару . . . . .	28
4.4.2	Реалізація . . . . .	30
<b>5</b>	<b>Висновок</b>	<b>31</b>

# 1. Вступ.

Ієрархічна матриця ( $\mathcal{H}$ -матриця) використовується для апроксимації розрідженими даними щільних матриць. Ці матриці застосовують коли намагаються розв'язати систему лінійних рівнянь

$$Ax = b \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad x \in \mathbb{R}^n$$

з майже лінійною складністю  $O(n \log(n))$ .

Вперше концепцію ієрахічних матриць запропонував Вольфганг Хакбуш в 1998 році. Він розширив ідею панельних кластерних методів, зробивши її застосовною до загальних алгебраїчних операцій над матрицями, оберненими матрицями тощо. Також введені означення для двовимірного випадку.

В цій роботі розглянуто базові означення та процес побудови  $\mathcal{H}$ -матриць, їх застосування на прикладі одновимірної модельної задачі, для розв'язування якої використовують метод граничних елементів (BEM - boundary element method). Введено означення ієрархічних матриць для багатовимірного випадку. Розглянуто двовимірний випадок на прикладі задачі Діріхле для рівняння Лапласа.

Текст цієї роботи написано на основі матеріалів [1],[2]. Також, деякі графічні ілюстрації взяті з роботи [1].

## 2. Обчислення за допомогою ієрархічних матриць.

### 2.1 Означення кластерного дерева.

**Означення 2.1 (Дерево)** Нехай  $V$  - непорожня множина і  $E \subseteq V \times V$  є бінарним відношенням над  $V$ . Пара  $\mathbb{T} = (V, E)$ , де множина  $V = V(\mathbb{T})$  є множиною вершин  $\mathbb{T}$ , а множина  $E = E(\mathbb{T})$  - множина ребер  $\mathbb{T}$ , називається деревом, якщо виконуються такі умови:

- Унікальна вершина  $v \in V$  називається коренем дерева і позначається  $root(\mathbb{T})$   
 $\Leftrightarrow \forall w \in V : w \neq v$  виконується  $(w, v) \notin E$ .
- Для будь-якої вершини  $v \in V \setminus root(\mathbb{T})$  існує єдиний простий шлях з  $root(\mathbb{T})$  до  $v$ .

Іншими словами, дерево - це неорієнтований зв'язний граф без простих циклів.

Введемо такі позначення:

- Для вершини  $v \in V$  множина її синів визначається як

$$S(v) = \{w \in V | (v, w) \in E\}$$

- Множину всіх листків дерева  $\mathbb{T}$  визначають як  $\mathcal{L}(\mathbb{T}) = \{v \in V | S(v) = \emptyset\}$
- Рівень дерева  $\mathbb{T}$  визначається рекурсивно як

$$\mathbb{T}^{(0)} = root(\mathbb{T})$$

$$\mathbb{T}^{(l)} = \{v \in V | \exists w \in \mathbb{T}^{(l-1)} : (w, v) \in E\}$$

Може позначатися як *level*.

- Висотою дерева  $d(\mathbb{T})$  називається найдовший простий шлях від кореня до листка.

Як  $I = 0, 1 \dots n - 1$  позначемо скінченну множину індексів з потужністю  $|I| = n$ . В майбутньому, в ролі  $I$  використовуватимемо індекси базових функцій, отриманих для дискретизації з методу граничних елементів.

**Означення 2.2 (Кластерне дерево)** Дерево  $\mathbb{T}_I$  називається кластерним деревом над множиною індексів  $I$  з  $root(\mathbb{T}_I) = I$ , якщо наступні умови виконуються:

- $I \in V$  є коренем  $\mathbb{T}_I$  і  $\forall v \in V, v \neq \emptyset \Rightarrow v \subseteq I$ .
  - Якщо  $v \in V$  не є листком ( $S(v) \neq \emptyset$ ), то він рівний об'єднанню своїх синів, тобто  $v = \bigcup_{w \in S(v)} w$ .
- $v \in V$  називають кластером.

## 2.2 Означення блочного кластерного дерева

Блочне кластерне дерево - це кластерне дерево над множиною індексів  $I \times I$  замість  $I$ . В загальному, для неквадратних матриць, що належать до  $\mathbb{R}^{I \times J}$ , потрібно два різні кластерні дерева  $\mathbb{T}_I$  та  $\mathbb{T}_J$ , тому ми розглядаємо інше кластерне дерево  $\mathbb{T}_J$ , яке базується на множині індексів  $J$  потужності  $|J| = m$ .

**Означення 2.3** Нехай  $\mathbb{T}_I$  і  $\mathbb{T}_J$  - кластерні дерева над множинами індексів  $I$  та  $J$  відповідно. Кластерне дерево  $\mathbb{T}_{I \times J} = \mathbb{T}_{\mathbb{T}_I \times \mathbb{T}_J} = (V, E)$  називається блочним кластерним деревом над добутком множини індексів  $I \times J$ , якщо  $\forall v \in V$  виконуються наступні умови:

- $\mathbb{T}_{I \times J}^{(0)} = I \times J$
- Якщо  $v \in \mathbb{T}_{I \times J}^{(l)}$ , то існують  $\tau \in \mathbb{T}_I^{(l)}$  і  $\sigma \in \mathbb{T}_J^{(l)}$  такі, що  $v = \tau \times \sigma$ .
- Для синів  $v = \tau \times \sigma$ , де  $\tau \in \mathbb{T}_I$  і  $\sigma \in \mathbb{T}_J$  виконується
$$S(v) = \begin{cases} \emptyset, \text{якщо } S(\tau) = \emptyset \text{ або } S(\sigma) = \emptyset \\ \{\tau' \times \sigma' : \tau' \in S(\tau), \sigma' \in S(\sigma)\}, \text{інакше} \end{cases}$$

**Означення 2.4** Блочне кластерне дерево  $\mathbb{T}_{I \times J}$  для  $\mathbb{T}_I$  та  $\mathbb{T}_J$  називається однорідним, якщо

$$level(t \times s) = level(t) = level(s) \quad (2.1)$$

для всіх  $t \times s \in \mathbb{T}_{I \times J}$ .

Властивості блочного кластерного дерева  $\mathbb{T}_{I \times J}$ :

- Якщо обое кластерні дерева  $\mathbb{T}_I$  і  $\mathbb{T}_J$  є бінарними деревами, то отримане блочне кластерне дерево є quad-деревом, тобто кожний внутрішній вузол має точно чотири нащадки.
- $|\mathcal{L}(\mathbb{T}_{I \times J})| \leq |\mathcal{L}(\mathbb{T}_I)| \cdot |\mathcal{L}(\mathbb{T}_J)|$
- $|\mathbb{T}_{I \times J}^{(l)}| \leq |\mathbb{T}_I^{(l)}| \cdot |\mathbb{T}_J^{(l)}|$
- $d(\mathbb{T}_{I \times J}) = \min\{d(\mathbb{T}_I), d(\mathbb{T}_J)\}$
- Якщо  $\mathbb{T}_{I \times J}$  - однорідне

$$S(t \times s) \neq \emptyset \Rightarrow S(t \times s) = \{t' \times s' : t' \in S(t), s' \in S(s)\}$$

Кількість можливих блоків  $t \times s$  з вузлами  $t, s$ , що належать дереву  $\mathbb{T}_I$  становить  $(\#\mathbb{T}_I)^2 = (2n-1)^2 = \mathcal{O}(n^2)$ . Оскільки ми не можемо тестувати всі можливі комбінації, нашою метою є зменшення квадратичної збіжності для збірки матриці. Можливим варіантом є тестування блоків рівень за рівнем починаючи від кореня  $I$  дерева  $\mathbb{T}_I$  і в подальшому заглиблюючись в дерево. Блоки, що тестуються, зберігають в блочному кластерному дереві  $\mathbb{T}_{I \times I}$ , листки якого утворюють поділ множини індексів  $I \times I$ .

Алгоритм побудови блочного кластерного дерева (викликати з параметрами  $\text{BuildBlockClusterTree}(I, I)$ ):

---

**Algorithm 1** Побудова блочного кластерного дерева  $\mathbb{T}_{I \times I}$ 

---

```
procedure BuildBlockClusterTree(cluster t,s)
if (t, s) is admissible then
   $S(t \times s) := \emptyset$ ;
else
   $S(t \times s) := \{t' \times s' | t' \in S(t) \text{ and } s' \in S(s)\}$ ;
  for  $t' \in S(t)$  and  $s' \in S(s)$  do
    BuildBlockClusterTree( $t', s'$ );
  end for
end if
```

---

## 2.3 Умова допустимості

Під час побудови блочного кластерного дерева  $\mathbb{T}_{I \times J}$  потрібна допоміжна умова, яка перевіряє чи блок  $b = \tau \times \sigma \in \mathbb{T}_{I \times J}$  є відповідного розміру і в особливості чи він може бути наближений розрідженою матрицею. Це робиться за допомогою умови допустимості, яка в певному сенсі залежить від геометрії основної проблеми. Умова допустимості певним чином збалансовує точність апроксимації та вимоги до пам'яті  $\mathcal{H}$ -матриць.

**Означення 2.5** Умова допустимості є булівською функцією

$$Adm : \mathbb{T}_{I \times J} \rightarrow \{true, false\}$$

для якої виконується умова

$$Adm(b) \Rightarrow Adm(b'), \quad \text{для всіх синів } b' \subseteq b \in \mathbb{T}_{I \times J}$$

і властивість

$$Adm(b) = true, \quad \text{для всіх листків } b \in \mathbb{T}_{I \times J}$$

**Означення 2.6** Поділ  $\mathcal{P}$  називається допустимим ( $\mathcal{P}_{Adm}$ ), якщо всі  $b = (\tau \times \sigma) \in \mathcal{P}$  є допустимими.

Стандартна умова допустимості була вперше описана в класичній побудові  $\mathcal{H}$ -матриць, де вона застосовується для розподілу, здебільшого для проблем, що вирішуються за допомогою методу граничних елементів.

**Означення 2.7** Нехай  $\eta > 0$  - фіксований параметр. Кажуть, що блок  $b = \tau \times \sigma$  задовольняє стандартну умову допустимості, якщо

$$Adm_\eta(b) = true \Leftrightarrow \min(\text{diam}(\Omega_\tau), \text{diam}(\Omega_\sigma)) \leq \eta \cdot \text{dist}(\Omega_\tau, \Omega_\sigma)$$

де  $\Omega_\tau$  і  $\Omega_\sigma$  визначаються як

$$\Omega_\tau := \bigcup_{i \in \tau} \text{supp}(\varphi_i)$$

$$\Omega_\sigma := \bigcup_{i \in \sigma} \text{supp}(\varphi_i)$$

В попередніх означеннях "diam" і "dist" позначають Евклідовий діаметр і відстань між  $\Omega_\tau$  та  $\Omega_\sigma$ . Вони визначаються наступним чином:

$$diam(\Omega_\tau) := \max_{x_i, x_j \in \Omega_\tau} \|x_i - x_j\|$$

$$dist(\Omega_\tau, \Omega_\sigma) := \min_{x_i \in \Omega_\tau, x_j \in \Omega_\sigma} \|x_i - x_j\|$$

Якщо в означенні 4.3 замінити "min" на "max" то отримуємо сильну умову допустимості:

$$Adm_\eta(b) = true \Leftrightarrow \max(diam(\Omega_\tau), diam(\Omega_\sigma)) \leq \eta \cdot dist(\Omega_\tau, \Omega_\sigma)$$

**Означення 2.8** Блочне кластерне дерево  $\mathbb{T}_{I \times J}$  для  $\mathbb{T}_I$  та  $\mathbb{T}_J$  називається допустимим у відповідності до умови допустимості, якщо

$$t \times s \in \text{допустимим} \text{ або } sons(t) = \emptyset \text{ або } sons(s) = \emptyset \quad (2.2)$$

виконується для всіх листків  $t \times s \in \mathcal{L}(\mathbb{T}_{I \times J})$ .

## 2.4 Означення $\mathcal{H}$ -матриці

На допустимих блоках апроксимуємо за допомогою структури `gkmatrix`. На недопустимих листках використовуємо структуру `fullmatrix`.

$n_{min}$  - розмірність найменшого листка.

**Означення 2.9** Нехай  $M \in \mathbb{R}^{I \times J}$  - матриця над множиною індексів  $I \times J$ . Підматриця  $(M_{i,j})_{(i,j) \in I' \times J'}$  для підмножини  $I' \times J'$  множини  $I \times J$  позначається як  $M|_{I' \times J'}$ .

**Означення 2.10** ( $\mathcal{H}$ -матриця) Нехай  $k, n_{min} \in \mathbb{N}_0$ . Множина  $\mathcal{H}$ -матриць, що базується на допустимому поділі  $\mathcal{P}_{Adm}$  над блочним кластерним деревом  $\mathbb{T} := \mathbb{T}_{I \times J}$  визначається як

$$\mathcal{H}(\mathbb{T}, k) := \{M \in \mathbb{R}^{I \times J} | \forall \tau \times \sigma \in \mathcal{P}_{Adm} : rank(M|_{\tau \times \sigma}) \leq k \text{ або } \min(|\tau|, |\sigma|) \leq n_{min}\}$$

Спрощене означення  $\mathcal{H}$ -матриці виглядає наступним чином

**Означення 2.11** Нехай  $\mathbb{T}_{I \times I}$  - блочне кластерне дерево над множиною індексів  $I$ . Означаємо множину  $\mathcal{H}$ -матриць як

$$\mathcal{H}(\mathbb{T}_{I \times I}, k) := \{M \in \mathbb{R}^{I \times I} | rank(M|_{t \times s}) \leq k \text{ для всіх допустимих листків } t \times s \text{ дерева } \mathbb{T}_{I \times I}\}$$



### 3. Розв'язання модельного інтегрального рівняння.

#### 3.1 Модельна задача

Розглянемо застосування  $\mathcal{H}$ -матриць на прикладі одновимірного інтегрального рівняння Фредгольма першого роду. Нехай задано функцію  $F : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ . Шукаємо функцію  $u : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ , яка задовільняє наступне інтегральне рівняння:

$$\int_0^1 \ln |x - y| u(y) dy = F(x), x \in [0, 1]$$

де  $g(x, y) = \ln |x - y|$  називається ядром інтегрального рівняння і має невизначеність на діагоналі  $x = y$ .

Використовуючи метод Гальоркіна, проектуємо дане рівняння на  $n$ -вимірний простір  $V_n = \text{span}\{\varphi_0, \dots, \varphi_{n-1}\}$  і отримуємо:

$$\int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(x) \ln |x - y| u(y) dy dx = \int_0^1 \varphi_i(x) F(x) dx$$

$$0 \leq i < n$$

Потрібно знайти  $u_n$  в просторі  $V_n$ :

$$u_n = \sum_{j=0}^{n-1} u_j \varphi_j$$

таке, що вектор коефіцієнтів  $u$  є розв'язком лінійної системи

$$Gu = f$$

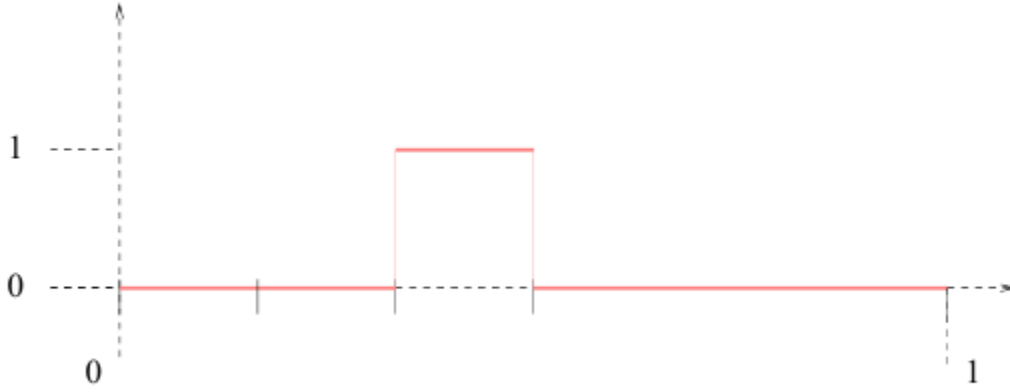
$$G_{ij} = \int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(x) \ln |x - y| \varphi_j(y) dy dx$$

$$f_i = \int_0^1 \varphi_i(x) F(x) dx$$

В цьому прикладі визначаємо базисні функції як

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } \frac{i}{n} \leq x < \frac{i+1}{n} \\ 0, & \text{інакше} \end{cases}$$

які в загальному матимуть вигляд



Матриця  $G$  є щільною, тобто всі елементи не є нулями. Потрібно знайти наближену матрицю  $\tilde{G}$ , яка може бути збереженою в розрідженому форматі. Для того, щоб це досягти потрібно замінити ядро  $g(x, y) = \ln |x - y|$  на розкладене ядро

$$\tilde{g}(x, y) = \sum_{v=0}^{k-1} g_v(x) h_v(y)$$

Таким чином, інтегрування за змінною  $x$  буде відкремленням від інтегрування за змінною  $y$ . Проте, ядро  $g(x, y) = \ln |x - y|$  не можна наблизити розкладеним ядром на цій області  $[0, 1] \times [0, 1]$  (хіба що при великому  $k$ ). Змість цього, ми будемо локальні наближення на підобластях  $[0, 1] \times [0, 1]$ , де  $g$  є гладкою.

## 3.2 Розклад ядра в ряд Тейлора

Нехай  $\tau := [a, b]$ ,  $\sigma := [c, d]$ ,  $\tau \times \sigma \subset [0, 1] \times [0, 1]$  буде підобластю з властивістю  $b < c$  і інтервали є роз'єднаними, тобто

$$\tau \cap \sigma = \emptyset$$

Тоді ядро є визначеним на  $\tau \times \sigma$ .  $x_0 := (a + b)/2$

**Лема 3.1** (Похідні  $\ln |x - y|$ ) *Похідні  $g(x, y) = \ln |x - y|$  для  $x \neq y$  і  $v \in \mathbb{N}$  мають вигляд*

$$\begin{aligned} \partial_x^v g(x, y) &= (-1)^{v-1} (v-1)! (x-y)^{-v} \\ \partial_y^v g(x, y) &= (v-1)! (x-y)^{-v} \end{aligned}$$

**Лема 3.2** (Розклад Тейлора для  $\ln |x - y|$ ) *Для будь-якого  $k \in \mathbb{N}$  функція*

$$\tilde{g}(x, y) = \sum_{v=0}^{k-1} \frac{1}{v!} \partial_x^v g(x_0, y) (x - x_0)^v$$

наближає ядро  $g(x, y) = \ln |x - y|$  з похибкою

$$|g(x, y) - \tilde{g}(x, y)| \leq (1 + \frac{|x_0 - a|}{|c - b|})(1 + \frac{|c - b|}{|x_0 - a|})^{-k}$$

Доведення. Нехай  $x \in [a, b]$ ,  $a < b$  і  $y \in [c, d]$ . В радіусі збіжності ряд Тейлора для ядра  $g(x, y)$  в точці  $x_0$  задовільняє

$$g(x, y) = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} \partial_x^v g(x_0, y) (x - x_0)^v$$

Залишок  $g(x, y) - \tilde{g}(x, y) = \sum_{v=k}^{\infty} \frac{1}{v!} \partial_x^v g(x_0, y) (x - x_0)^v$  може бути оцінений як:

$$\begin{aligned} \left| \sum_{v=k}^{\infty} \frac{1}{v!} \partial_x^v g(x_0, y) (x - x_0)^v \right| &= \left| \sum_{v=k}^{\infty} (-1)^{v-1} \frac{(v-1)!}{v!} \left( \frac{x - x_0}{x_0 - y} \right)^v \right| \\ &\leq \sum_{v=k}^{\infty} \left| \frac{x - x_0}{x_0 - y} \right|^v \leq \sum_{v=k}^{\infty} \left( \frac{|x_0 - a|}{|x_0 - a| + |c - b|} \right)^v \\ &= (1 + \frac{|x_0 - a|}{|c - b|})(1 + \frac{|c - b|}{|x_0 - a|})^{-k} \end{aligned}$$

Радіус збіжності покриває весь інтервал  $[a, b]$ .

Якщо  $c \rightarrow b$ , то оцінка залишку прямує до нескінченості і наближення буде як завгодно поганим. Проте, якщо замінити умову  $b < c$  (диз'юнкція інтервалів) сильнішою умовою допустимості

$$diam(\tau) \leq dist(\tau, \sigma)$$

то похибка апроксимації може бути оцінена як

$$|g(x, y) - \tilde{g}(x, y)| \leq \frac{3}{2} (1 + \frac{2}{1})^{-k} = \frac{3}{2} 3^{-k}$$

Це означає, що ми отримуємо рівномірну оцінку для похибки наближення незалежно від інтервалів, якщо умова допустимості виконується. Похибка зростає експоненціально в залежності від порядку  $k$ .

### 3.3 Наближення низького рангу блоків матриці

Множина індексів  $I = \{0, 1, \dots, n-1\}$  містить індекси базових функцій  $\varphi_i$ , які використовуються в дискретизації Галеркіна. Фіксуємо дві підмножини  $t$  і  $s$  множини індексів  $I$  та визначимо відповідні області:

$$\tau = \bigcup_{i \in t} supp(\varphi_i)$$

$$\sigma = \bigcup_{i \in s} supp(\varphi_i)$$

Якщо  $\tau \times \sigma$  задовільняє умову допустимості, то ми можемо наблизити ядро  $g$  в цій підобласті рядом Тейлора  $\tilde{g}$  і замінити елементи матриці

$$G_{ij} = \int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(x) g(x, y) \varphi_j(y) dy dx$$

використовуючи вироджене ядро  $\tilde{g} = \sum_{v=0}^{k-1} g_v(x) h_v(y)$  для індексів  $(i, j) \in t \times s$ :

$$\tilde{G}_{ij} = \int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(x) \tilde{g}(x, y) \varphi_j(y) dy dx$$

Розділяємо подвійний інтеграл на два звичайні

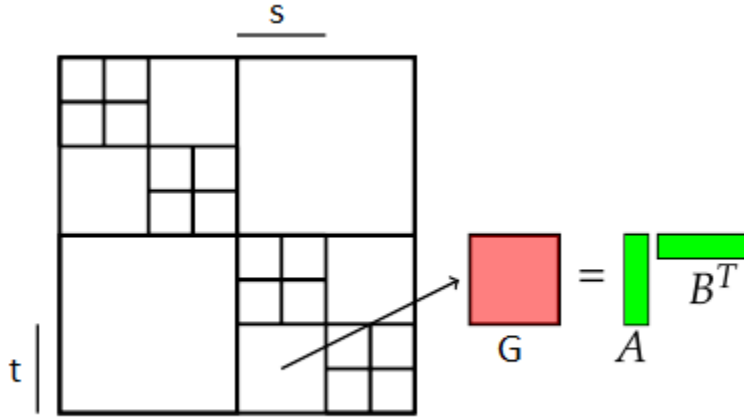
$$\begin{aligned} \tilde{G}_{ij} &= \int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(x) \sum_{v=0}^{k-1} g_v(x) h_v(y) \varphi_j(y) dy dx \\ &= \sum_{v=0}^{k-1} \left( \int_0^1 \varphi_i(x) g_v(x) dx \right) \left( \int_0^1 \varphi_j(y) h_v(y) dy \right) \end{aligned}$$

Підматриця  $G|_{t \times s}$  може бути записана в факторизованій формі

$$G|_{t \times s} = AB^T, \quad A \in \mathbb{R}^{t \times \{0, \dots, k-1\}}, \quad B \in \mathbb{R}^{s \times \{0, \dots, k-1\}}$$

де елементами матриць  $A$  і  $B$

$$A_{iv} := \int_0^1 \varphi_i(x) g_v(x) dx, \quad B_{jv} := \int_0^1 \varphi_j(y) h_v(y) dy$$



Матриця  $AB^T$  має найбільший ранг  $k$  в незалежності від потужності  $s$  і  $t$ . Похибка наближення блоку матриці оцінена в наступній лемі.

**Лема 3.3** Поелементна похибка для елементів матриці  $G_{ij}$  апроксимується ядром  $\tilde{g}$  в допустимих блоках  $t \times s$  ( $g$  в інших блоках) обмежена наступним чином

$$|G_{ij} - \tilde{G}_{ij}| \leq \frac{3}{2} n^{-2} 3^{-k}$$

**Доведення.**  $|G_{ij} - \tilde{G}_{ij}| = |\int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(x)(g(x, y) - \tilde{g}(x, y)\varphi_j(y)dydx|$

$$\leq \int_0^1 \int_0^1 |\varphi_i(x)| \frac{3}{2} 3^{-k} |\varphi_j(y)| dydx$$

$$= \frac{3}{2} 3^{-k} \int_0^1 \varphi_i(x) dx \int_0^1 \varphi_j(y) dy$$

$$= \frac{3}{2} n^{-2} 3^{-k} \quad \blacksquare$$

Припустимо, що ми поділили множину індексів  $I \times I$  над матрицею  $G$  на допустимі блоки, де застосовується апроксимація низького рангу, і недопустимі блоки, де використовуємо елементи матриці  $G$ .

$$I \times I = \bigcup_{v=1, \dots, b} t_v \times s_v$$

Глобальну похибку наближення оцінюємо, застосовуючи норму Фробеніуса

$$\|M\|_F^2 := \sum M_{ij}^2$$

**Лема 3.4** *Похибка наближення  $\|G - \tilde{G}\|_F$  для матриці  $\tilde{G}$ , побудованої за допомогою ядра  $\tilde{g}$  в допустимих блоках  $t_v \times s_v$  та з допомогою  $g$  на недопустимих блоках, обмежена наступним чином*

$$\|G - \tilde{G}\|_F \leq \frac{3}{2} n^{-1} 3^{-k}$$

Постає питання, як поділити множину індексів  $I \times I$  на допустимі та недопустимі блоки. Тривіальним поділом був би  $\mathcal{P} := \{(i, j) | i \in I, j \in I\}$ , де є тільки блоки розмірності  $1 \times 1$ , ранг рівний 1. В цьому випадку, матриця  $\tilde{G}$  є ідентичною до  $G$ , але в цьому випадку ми не апроксимуємо матрицю у великих підблоках матрицями низького рангу.

## 3.4 Одновимірний випадок побудови блочного кластерного дерева

### 3.4.1 Приклад побудови кластерного дерева

В одновимірному випадку кластерне дерево - збалансоване бінарне дерево.

**Приклад.** Одновимірний випадок.

Як корінь дерева  $\mathbb{T}_I$  беремо множину індексів  $I_0^{(0)} = \{0, \dots, n - 1\}$ . Для легкості презентації припустимо, що кількість базисних функцій  $n$  є степенем 2:

$$n = 2^p$$

Розглядаємо випадок, коли  $p = 3$ . Починаючи з кореня, де тільки один кластер, це дерево конструюється шляхом поділу кожної множини індексів  $I_i^{(j)}$  на два нащадки  $I_{2i}^{(j+1)}$  і  $I_{2i+1}^{(j+1)}$  при  $0 \leq i, j \leq p$ . Нарешті на рівні  $p$  всі кластери (вузли) є листками,

наприклад  $\mathcal{L}(\mathbb{T}) = \{I_i^{(3)}\}_{i=0}^7$ . Кожен вузол (окрім листків) отриманого дерева матиме рівно два нащадки:

Два нащадки  $I_0^{(0)}$ :  $I_0^{(1)} = \{0, \dots, \frac{n}{2} - 1\}$  і  $I_1^{(1)} = \{\frac{n}{2}, \dots, n - 1\}$ .

Два нащадки  $I_0^{(1)}$ :  $I_0^{(2)} = \{0, \dots, \frac{n}{4} - 1\}$  і  $I_1^{(2)} = \{\frac{n}{4}, \dots, \frac{n}{2} - 1\}$ .

Два нащадки  $I_1^{(1)}$ :  $I_2^{(2)} = \{\frac{n}{2}, \dots, \frac{3n}{4} - 1\}$  і  $I_3^{(2)} = \{\frac{3n}{4}, \dots, n - 1\}$ .

З практичної точки зору,  $\mathbb{T}_I$  зазвичай є бінарним деревом. Висота бінарного дерева  $\approx \log(n)$ , а отже складність побудови cluster tree -  $O(n \log(n))$ .

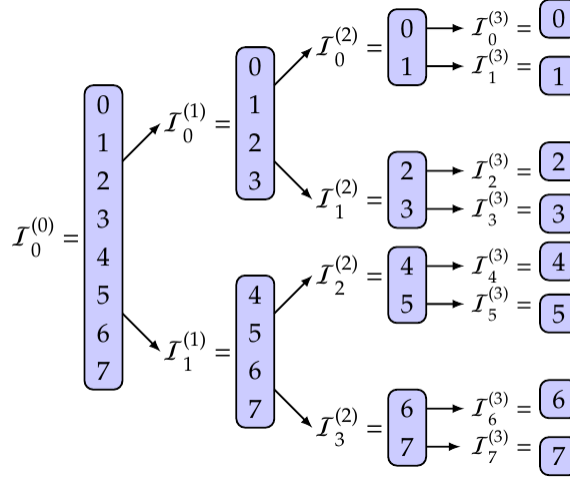
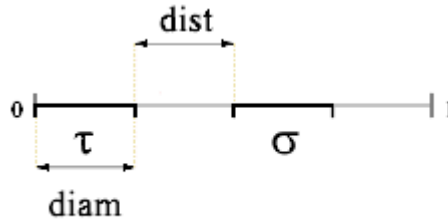


Рис. 3.1: Кластерне дерево при  $p=3$ .

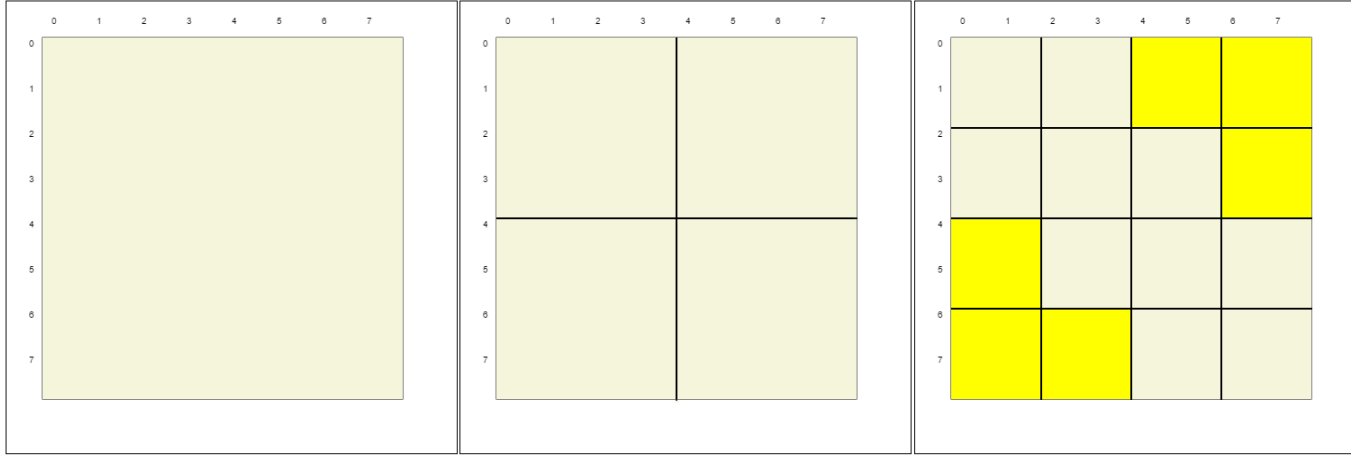
### 3.4.2 Умова допустимості

В подальшому для одновимірної проблеми ми будемо використовувати стандартну умову допустимості в такому вигляді



$$diam(\tau) \leq dist(\tau, \sigma)$$

### 3.5 Приклад побудови блочного кластерного дерева.



Кроки побудови блочного кластерного дерева при  $p=3$ :

1. Коренем дерева є блок  $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\} \times \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$ , який не задовільняє умову допустимості, тому що відповідною областю до множини індексів  $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$  є інтервал  $[0, 1]$  і

$$\text{diam}([0, 1]) = 1 \leq 0 = \text{dist}([0, 1], [0, 1])$$

2. Чотирьма нащадками кореня в дереві  $\mathbb{T}_{I \times I} \in$

$$\{0, 1, 2, 3\} \times \{0, 1, 2, 3\}, \quad \{0, 1, 2, 3\} \times \{4, 5, 6, 7\},$$

$$\{4, 5, 6, 7\} \times \{0, 1, 2, 3\}, \quad \{4, 5, 6, 7\} \times \{4, 5, 6, 7\}.$$

Жоден з них не задовільняє умову допустимості.

3. Після подальшого поділу, отримуємо такі блоки:

$$\{0, 1\} \times \{0, 1\}, \quad \{0, 1\} \times \{2, 3\}, \quad \{0, 1\} \times \{4, 5\}, \quad \{0, 1\} \times \{6, 7\},$$

$$\{2, 3\} \times \{0, 1\}, \quad \{2, 3\} \times \{2, 3\}, \quad \{2, 3\} \times \{4, 5\}, \quad \{2, 3\} \times \{6, 7\},$$

$$\{4, 5\} \times \{0, 1\}, \quad \{4, 5\} \times \{2, 3\}, \quad \{4, 5\} \times \{4, 5\}, \quad \{4, 5\} \times \{6, 7\},$$

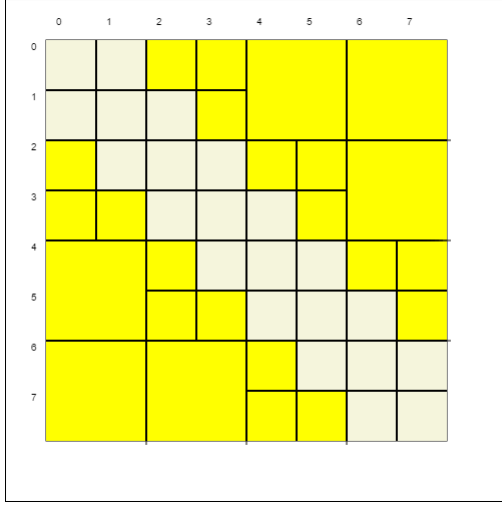
$$\{6, 7\} \times \{0, 1\}, \quad \{6, 7\} \times \{2, 3\}, \quad \{6, 7\} \times \{4, 5\}, \quad \{6, 7\} \times \{6, 7\}.$$

Деякі з цих вузлів задовольняють умову допустимості, наприклад вузол  $\{0, 1\} \times \{4, 5\}$ , тому що відповідною областю є  $[0, \frac{1}{4}] \times [\frac{1}{2}, \frac{3}{4}]$ :

$$\text{diam}([0, \frac{1}{4}]) = \frac{1}{4} = \text{dist}([0, \frac{1}{4}], [\frac{1}{2}, \frac{3}{4}])$$

Вузли на діагоналі не задовольняють умову допустимості (відстань від відповідної області до себе самої рівна нулю) і деякі вузли не на діагоналі (наприклад  $\{0, 1\} \times \{2, 3\}$ ) не задовольняють умову допустимості.

4. Нащадками цих вузлів є  $\{(i, j)\}$  для індексів  $i, j$ . Кінцева структура буде:



Аналогічно можна побудувати блочного кластерного дерева для  $p = 4$  чи  $p = 5$ .

## 3.6 Побудова матриці

Ієрархічна матриця розкладається на допустимі і недопустимі листки дерева  $\mathbb{T}_{I \times I}$ . Для них створені два підкласи, опрацювання яких різняться.

### 3.6.1 Недопустимі листки

В недопустимих, але малих блоках  $t \times s \subset I \times I$  обчислюємо елементи матриці  $(i, j)$  за формулою

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{ij} &:= \int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(x) \ln |x - y| \varphi_j(y) dy dx \\ &= \int_{i/n}^{(i+1)/n} \int_{j/n}^{(j+1)/n} \ln |x - y| dy dx \end{aligned}$$

**Означення 3.1** (репрезентація *fullmatrix*) Кажуть, що матриця  $M$  розмірності  $n \times m$  зберігається у вигляді *fullmatrix*, якщо її елементи  $M_{ij}$  зберігаються як дійсні числа у масиві довжиною  $nm$  в стовпцевому порядку

$$M_{11}, \dots, M_{n1}, M_{12}, \dots, M_{n2}, \dots, M_{1m}, \dots, M_{nm}$$

Порядок елементів матриці в репрезентації *fullmatrix* є таким самим, як і в стандартних пакетах лінійної алгебри (MATLAB, BLAS, LAPACK тощо).

Реалізація на мові програмування *Kotlin*:

```
data class Fullmatrix(
    var rows: Int = 0,
    var cols: Int = 0,
    var e: Array<DoubleArray> = Array(rows){DoubleArray(cols)})
```



### 3.6.2 Допустимі листки

В допустимих блоках  $t \times s \subset I \times I$  з відповідними областями  $[a, b] \times [c, d]$  і  $x_0 := (a + b)/2$  обчислюємо відповідну матрицю у факторизованій формі

$$\begin{aligned}\tilde{G}|_{t \times s} &:= AB^\top \\ A_{iv} &:= \int_{i/n}^{(i+1)/n} (x - x_0)^v dx \\ B_{jv} &:= \begin{cases} (-1)^{v+1} v^{-1} \int_{j/n}^{(j+1)/n} (x_0 - y)^{-v} dy, & \text{якщо } v > 0 \\ \int_{j/n}^{(j+1)/n} \ln |x_0 - y| dy, & \text{якщо } v = 0 \end{cases}\end{aligned}$$

Підходящою репрезентацією для відповідної матриці  $\tilde{G}|_{t \times s}$  є формат `rkmatrix` наведений нище.

**Означення 3.2** (репрезентація `rkmatrix`) Кажуть, що матриця  $M$  розмірності  $n \times m$  найбільшого рангу  $k$  зберігається у вигляді `rkmatrix`, якщо вона зберігається у факторизованій формі  $M = AB^\top$ , де обидві матриці  $A \in \mathbb{R}^{n \times k}$  і  $B \in \mathbb{R}^{m \times k}$  зберігаються як масиви (в стовпцевому порядку).

Реалізація на мові програмування *Kotlin*:

```
data class Rkmatrix(
    val k:Int, val rows:Int, val cols:Int,
    var a:Array<DoubleArray> = Array(rows){
        DoubleArray(k)
    },
    var b:Array<DoubleArray> = Array(cols){
        DoubleArray(k)
    })
```

### 3.6.3 Репрезентація ієрархічної матриці

**Означення 3.3** (репрезентація  $\mathcal{H}$ -матриці) Нехай  $\mathbb{T}_{I \times I}$  - блочне кластерне дерево над множиною індексів  $I$ . Кажуть, що матриця  $M \in \mathcal{H}(\mathbb{T}_{I \times I}, k)$  зберігається в  $\mathcal{H}$ -matrix репрезентації, якщо підматриці, що відповідають недопустимим листкам, зберігаються у вигляді `fullmatrix`, а ті, що відповідають допустимим листкам - у вигляді `rkmatrix`.

Однією можливою реалізацією  $\mathcal{H}$ -matrix репрезентації є зберігання допустимих і недопустимих блоків матриці в списку. Збірка і множення матриці на вектор робиться для кожного блоку окремо. Проте, ми використаємо іншу реалізацію, яка базується на структурі `block cluster tree`  $\mathbb{T}_{I \times I}$  (не тільки на листках) і таким чином зберігає матрицю у більш структурованому вигляді.

Кожен блок  $t \times s$  в дереві  $\mathbb{T}_{I \times I}$  може бути

- листком - тоді відповідний блок матриці представлений у вигляді `fullmatrix` або `rkmatrix`.

- не листком - тоді блок  $t \times s$  розкладають на його синів  $t' \times s'$  з  $t' \in S(t)$  та  $s' \in S(s)$ . Це означає матриця, що відповідає блоку  $t \times s$  – *supermatrix* і вона складається з підматриць, що відповідають блоку  $t' \times s'$ .

Реалізація на мові програмування *Kotlin*:

```
data class Supermatrix(var rows:Int = 0, var cols:Int = 0,
    var blockrows:Int=0, var blockcols:Int =0,
    var rkmatrix:Rkmatrix?=null,
    var fullmatrix: Fullmatrix?=null,
    var supermatrix: Array<Array<Supermatrix>>?=null)
```

$$M \in \mathbb{R}^{rows \times cols}$$

Матриця може бути

- rkmatrix - тоді

$$r \neq null, \quad f = null, \quad s = null$$

Матриця  $r$  - це репрезентація rkmatrix матриці  $M$ .

- fullmatrix - тоді

$$r = null, \quad f \neq null, \quad s = null$$

Матриця  $f$  - це репрезентація fullmatrix матриці  $M$ .

- supermatrix - тоді

$$r = null, \quad f = null, \quad s \neq null$$

Матриця  $s$  містить вказівники на підматриці  $M_{i,j}$ :

$$\begin{pmatrix} M_{1,1} & \dots & M_{1,blockcols} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{blockrows,1} & \dots & M_{blockrows,blockcols} \end{pmatrix}$$

в порядку

$$M_{1,1}, \dots, M_{blockrows,1}, M_{1,2}, \dots, M_{blockrows,2}, \dots, M_{1,blockcols}, \dots, M_{blockrows,blockcols}$$

Реалізацією  $\mathcal{H}$ -матриці є дерево з вузлами, що реалізовані як *supermatrix*. На додаток, структура та ж сама, що і в блочному кластерному дереві  $\mathbb{T}_{I \times I}$  (нащадки  $\equiv$  підматриці) і підматриці, що відповідають допустимим та недопустимим листкам, зберігаються в форматі rkmatrix і fullmatrix.

## 3.7 Розпис інтегралів

Для заповнення  $\mathcal{H}$ -матриці потрібно обчислити інтеграли. Для цього будемо застосовувати наступні формули, отримані за правилом інтегрування частинами:

$$\int \log(x)dx = x \log(x) - \int 1dx = x \log(x) - x \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} \int x \log(x)dx &= \int \log(x)d\left(\frac{x^2}{2}\right) = \frac{x^2 \log(x)}{2} - \int \frac{x}{2}dx = \frac{x^2 \log(x)}{2} - \frac{x^2}{4} = \frac{1}{4}x^2(2 \log(x) - 1) \\ \int x \log(x)dx &= \frac{1}{4}x^2(2 \log(x) - 1) \end{aligned} \quad (3.2)$$

### 3.7.1 Допустимі блоки

Для заповнення матриці  $A$ :

$$\int_a^b (x - x_0)^v dx = \frac{(x - x_0)^{v+1}}{v+1} \Big|_a^b$$

Для заповнення матриці  $B$  при  $v > 0$ :

$$\int_a^b (x_0 - y)^{-v} dy = -\frac{(x_0 - y)^{-v+1}}{-v+1} \Big|_a^b$$

У випадку  $v \leq 0$  розглядаємо два випадки для того, щоб розкрити модуль

$$\int_a^b \log |x_0 - y| dy = \begin{cases} \int_a^b \log(x_0 - y) dy, & \text{якщо } y \leq x_0 \\ \int_a^b \log(y - x_0) dy, & \text{якщо } y > x_0 \end{cases}$$

До отриманих інтегралів застосовуємо (3.1).

### 3.7.2 Недопустимі блоки

Для розв'язання інтегралів можемо розглянути два методи.

- З огляду на розташування інтервалів  $[a, b]$  і  $[c, d]$  розкриваємо інтеграли.
- $a = b$

$$\begin{aligned} \int_a^b \int_a^b \log |x - y| dy dx &= \int_a^b \left\{ \int_a^x \log(x - y) dy + \int_x^b \log(y - x) dy \right\} dx = \\ \int_a^b \left\{ \left( -(x - y) \log(x - y) + (x - y) \right) \Big|_{y=a}^{y=x} + \left( (y - x) \log(y - x) - (y - x) \right) \Big|_{y=x}^{y=b} \right\} dx &= \\ \int_a^b \left\{ (x - a) \log(x - a) - x + a + (b - x) \log(b - x) - b + x \right\} dx &= \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_a^b \left\{ (x-a) \log(x-a) + (b-x) \log(b-x) + a-b \right\} dx = \\
& \left( \frac{1}{4}(x-a)^2(2\log(x-a)-1) - \frac{1}{4}(b-x)^2(2\log(b-x)-1) + ax - bx \right) \Big|_{x=a}^{x=b} = \\
& \frac{1}{4}(b-a)^2(2\log(b-a)-1) + ab - b^2 + \frac{1}{4}(b-a)^2(2\log(b-a)-1) - a^2 + ab = \\
& \frac{1}{2}(b-a)^2(2\log(b-a)-1) - (b-a)^2 = \\
& (b-a)^2 \log(b-a) - \frac{3(b-a)^2}{2}
\end{aligned}$$

•  $a < c$

$$\begin{aligned}
& \int_a^b \int_c^d \log|x-y| dy dx = \int_a^b \int_c^d \log(y-x) dy dx = \\
& \int_a^b \left\{ \left( (y-x) \log(y-x) - y + x \right) \Big|_{y=c}^{y=d} \right\} dx = \\
& \int_a^b \left\{ (d-x) \log(d-x) - d + x - (c-x) \log(c-x) + c - x \right\} dx = \\
& \int_a^b \left\{ (d-x) \log(d-x) - (c-x) \log(c-x) + c - d \right\} dx = \\
& \left( -\frac{1}{4}(d-x)^2(2\log(d-x)-1) + \frac{1}{4}(c-x)^2(2\log(c-x)-1) + cx - dx \right) \Big|_{x=a}^{x=b} = \\
& -\frac{1}{4}(d-b)^2(2\log(d-b)-1) + \frac{1}{4}(c-b)^2(2\log(c-b)-1) + \frac{1}{4}(d-a)^2(2\log(d-a)-1) \\
& -\frac{1}{4}(c-a)^2(2\log(c-a)-1) + cb - db - ca + da
\end{aligned}$$

•  $a > c$

$$\begin{aligned}
& \int_a^b \int_c^d \log|x-y| dy dx = \int_a^b \int_c^d \log(x-y) dy dx = \\
& \int_a^b \left\{ \left( -(x-y) \log(x-y) + x - y \right) \Big|_{y=c}^{y=d} \right\} dx = \\
& \int_a^b \left\{ -(x-d) \log(x-d) + (x-c) \log(x-c) + c - d \right\} dx = \\
& \left( -\frac{1}{4}(x-d)^2(2\log(x-d)-1) + \frac{1}{4}(x-c)^2(2\log(x-c)-1) + cx - dx \right) \Big|_{x=a}^{x=b} = \\
& -\frac{1}{4}(b-d)^2(2\log(b-d)-1) + \frac{1}{4}(b-c)^2(2\log(b-c)-1) + \frac{1}{4}(a-d)^2(2\log(a-d)-1) \\
& -\frac{1}{4}(a-c)^2(2\log(a-c)-1) + cb - db - ca + da
\end{aligned}$$

- Застосовуємо формулу інтегрування частинами

$$\int_a^b \int_c^d \log |x - y| dy dx = \int_a^b \mathcal{F}(x) dx$$

$$\int \log |y - x| dy = [u = y - x \rightarrow dy = du] = \int \log |u| du$$

Застосовуємо інтегрування частинами  $\int f g' = f g - \int f' g$ , де  $f = \log |u|$ ,  $g' = 1$ .

$$\int \log |u| du = u \log |u| - \int 1 du = u \log |u| - u = (y - x) \log |y - x| - y + x + C$$

$$\mathcal{F}(x) = \left( (y - x) (\log (|y - x|) - 1) \right) \Big|_{y=c}^{y=d} = (d - x) (\log |d - x| - 1) + (x - c) \log |x - c| - d + c$$

Аналогічно до виведення (3.2) можна розписати отримані інтеграли

$$\begin{aligned} \int_a^b \mathcal{F}(x) dx &= \int_a^b \left\{ (d - x) (\log |d - x| - 1) + (x - c) \log |x - c| - d + c \right\} dx = \\ &= \left( -\frac{(x - d)^2 (2 \ln (|x - d|) - 1)}{4} + \frac{(x - c)^2 (2 \ln (|x - c|) - 1)}{4} - dx + cx \right) \Big|_a^b \end{aligned}$$

## 3.8 Метод спряжених градієнтів

Метод спряжених градієнтів (conjugate gradient method) - це найпопулярніший ітеративний метод для розв'язування великих систем лінійних рівнянь. Такі ітеративні методи добре підходять, коли розглядають розріджені матриці. Метод спряжених градієнтів є ефективним для систем у вигляді

$$Ax = b$$

де  $x$ -невідомий вектор

$b$  - відомий вектор

$A$  - відома, квадратна, симетрична, додатньо визначена матриця.

Ці системи виникають у багатьох задачах, таких як скінченна різниця і метод скінченних елементів для розв'язання диференціальних рівняння з частинними похідними.

Цей метод випливає з того, що  $x_*$ (розв'язок системи) мінімізує єдиним чином квадратичну функцію

$$f(x) = \frac{1}{2} x^\top A x - x^\top b, x \in \mathbb{R}^n$$

Метод спряжених градієнтів вимагає від матриці тільки можливості помножити її на вектор, що дає можливість застосовувати спеціальні формати зберігання матриці.

---

**Algorithm 2** Алгоритм методу спряжених градієнтів

---

```
 $r_0 := b - Ax$   
 $p_0 := r_0$   
 $k := 0$   
while true do  
   $\alpha_k := \frac{r_k^\top r_k}{p_k^\top A p_k}$   
   $x_{k+1} := x_k + \alpha_k p_k$   
   $r_{k+1} := r_k - \alpha_k A p_k$   
  if  $r_{k+1}$  достатньо мале then  
    вийти з циклу  
  end if  
   $\beta_k = \frac{r_{k+1}^\top r_{k+1}}{r_k^\top r_k}$   
   $p_{k+1} := r_{k+1} + \beta_k p_k$   
   $k := k + 1$   
end while  
результатом є  $x_{k+1}$ 
```

---

### 3.9 Чисельні експерименти

В усіх наведених експериментах, розглядаємо випадок  $n_{min} = 2k$ .

#### 3.9.1 Приклад 1

Розглядаємо рівняння

$$\int_0^1 \log |x - y| u(y) dy = x \log |x| + (1 - x) \log |1 - x| - 1$$

Враховуючи  $\frac{d(|x|)}{dx} = \frac{x}{|x|}$  і застосувавши формулу похідної від добутку, можемо показати що точний розв'язок  $u^*(x) = 1$ :

$$\int \log |x - y| dy = (y - x)(\log |y - x| - 1)$$

$$\frac{d}{dy} \left( (y - x)(\log |y - x| - 1) \right) = \log |y - x| - 1 + (y - x) \frac{1}{|y - x|} \frac{(y - x)}{|y - x|} = \log |y - x|$$

#### 3.9.2 Приклад 2

Розглядаємо рівняння

$$\int_0^1 \log |x - y| u(y) dy = \frac{2x^2 \log |x| - 2 \log |x - 1| (x^2 - 1) - 2x - 1}{4}$$

Точний розв'язок даного рівняння має вигляд  $u^*(x) = x$

$\begin{matrix} \text{k} \\ \text{n} \end{matrix}$	1	$\frac{n}{4}$	$\frac{n}{2}$	$\frac{3n}{4}$	n
4	8.881784E-16	8.881784E-16	8.8818E-16	8.8818E-16	8.8818E-16
16	1.99770E-6	2.02060E-14	2.020606E-14	2.020606E-14	2.042810E-14
64	1.9708842E-5	4.993783E-13	4.9938E-13	4.993783E-13	5.140338E-13
256	7.34135E-5	1.18067E-11	1.18067E-11	1.18067E-11	1.176681E-11
1024	2.3177027E-4	2.04782E-10	1.98478E-10	1.9847878E-10	2.00121E-10

Табл. 3.1: Похибки при різних  $n$  і  $n_{min}$

$\begin{matrix} \text{k} \\ \text{n} \end{matrix}$	1	$\frac{n}{4}$	$\frac{n}{2}$	$\frac{3n}{4}$	n
4	0.142393	0.142393	0.1423937	0.1423937	0.1423937
16	0.035737	0.0357365	0.0357365	0.0357365	0.0357365
64	0.00894708	0.00894237	0.00894237	0.00894237	0.00894237
256	0.0022506	0.00223609	0.00223609	0.00223609	0.00223609
1024	7.7118E-4	5.590532E-4	5.59053E-4	5.59053E-4	5.5905321665E-4

Табл. 3.2: Похибки при різних  $n$  і  $k$

### 3.9.3 Приклад 3

Розглядаємо рівняння

$$\int_0^1 \log|x-y|u(y)dy = -\frac{(12y^3 - 18y^2) \ln(|y-x|) + (18x^2 - 12x^3) \ln(|y-x|) - 4y^3 +}{36} \\ + \frac{(9-6x)y^2 + (18x-12x^2)y}{36}$$

Точний розв'язок даного рівняння має вигляд  $u^*(x) = x(1-x)$

$\begin{matrix} \text{k} \\ \text{n} \end{matrix}$	1	$\frac{n}{4}$	$\frac{n}{2}$	$\frac{3n}{4}$	n
4	0.09689281	0.09689281	0.09689281	0.09689281	0.09689281
16	0.03246286	0.032463147	0.032463147	0.03246314722	0.03246314722
64	0.00873409	0.008736689	0.008736689	0.008736689	0.008736689
256	0.002215192	0.0022232	0.0022232	0.0022232047	0.00222320
1024	5.40425E-4	5.58247E-4	5.58247E-4	5.582473E-4	5.582473E-4

Табл. 3.3: Похибки при різних  $n$  і  $k$

## 4. Розв'язання задачі Діріхле для рівняння Лапласа на площині

В попередньому розділі, ми розглядали одновимірний випадок побудови ієрархічної матриці. Тепер проаналізуємо багатовимірний випадок і розглянемо розв'язання задачі Діріхле для рівняння Лапласа методом граничних елементів в  $\mathbb{R}^2$ .

Розширення на  $n$ -вимірний випадок вимагає зміни методу побудови кластерного дерева. Зокрема для побудови багатовимірного кластерного дерева застосовуємо метод бісекцій. Також розширюємо умову допустимості.

### 4.1 Геометрична бісекція

Для побудови багатовимірного кластерного дерева для заданої множини базисних функцій використовуємо метод геометричної бісекції.

Складність геометричних операцій для ієрархічної матриці напряду пов'язана з кількістю листків блочного кластерного дерева, тому кластерне дерево повинне забезпечувати, що блоки стають допустимими якомога швидше. Допустимість блоку залежить від діаметрів носіїв базисних функцій і від відстаней між ними. Ми можемо спробувати вибрати кластерне дерево таким чином, щоб діаметри зменшувалися швидко.

Для кожного  $i \in I$  позначаємо носій відповідної базисної функції  $\varphi_i$  як  $\Omega_i := \text{supp}(\varphi_i)$ . Оскільки працювати з носіями функцій буде важко, ми вибираємо точку  $x_i \in \Omega_i$  для кожного індекса  $i \in I$  і надалі працюємо з цими точками.

Побудова кластерного дерева починається з повної множини індексів  $I$ , яка є коренем кластерного дерева. Тоді ми застосовуємо відповідну техніку для знаходження непересічного поділу множини індексів і застосовуємо цей поділ для побудови дочірніх кластерів. Цю процедуру застосовуємо рекурсивно до до всіх синів доки множини індексів не є достатньо малими.

Ми хочемо поділити множину індексів  $\hat{t} \in I$ , що відповідає кластеру  $t$ . Для кожного індекса  $i \in \hat{t}$ , що відповідає точці  $x_i \in \mathbb{R}^n$  можемо визначити

$$a_l := \min\{(x_i)_l : i \in \hat{t}\}$$

$$b_l := \max\{(x_i)_l : i \in \hat{t}\}$$

для кожного  $l \in \{1, \dots, n\}$ .

Таким чином всі точки знаходяться в паралельній осі коробці  $[a_1, b_1] \times \dots \times [a_n, b_n]$ . Тепер є вибір: ми можемо розділити коробку в усіх напрямках координат одночасно (отримуємо  $2^n$  підмножини) або ми можемо вибрати координатний напрям



найбільшої відстані і поділити коробку перпендикулярно до цього напрямку на дві підмножини.

При першому підході, ми отримуємо, що діаметри субдомейнів поділені навпіл. Але це призводить до маленької кількості кластерів, а отже ми отримуємо маленьку кількість кандидатів, з яких будемо обирати при побудові поділу блоків.

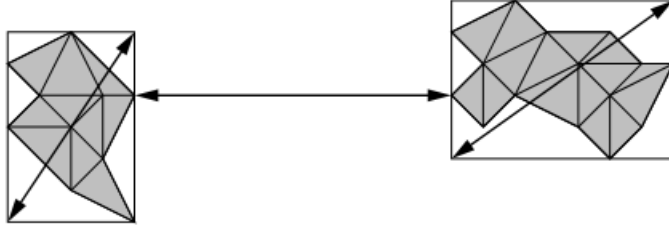
Другий підхід призводить до побудови дерева з великою кількістю кластерів. Недоліком є те, що діаметри кластерів будуть збільшуватися в  $\sqrt{1 - \frac{3}{4n}}$  разів після одного кроку процедури. Водночас виконання  $n$  кроків дасть нам  $2^n$  кластерів з діаметрами, поділеними навпіл, точно як і в першому підході.

## 4.2 Обмежувальні коробки

Перевіряти умову допустимості для всієї області визначення може збирати велику кількість ресурсів, тому ми шукаємо спрощену умову. Традиційним способом є визначення кіл (в 2D) або сфер (3D) Чебишева для області визначення, оскільки діаметри і відстані між колами і сферами може бути порахована зі складністю  $O(1)$ . Однак ми застосовуємо простішу техніку: коробки, паралельні осям.

Для кожного кластера  $t \in \mathbb{T}_I$  визначаємо коробку паралельну осям  $Q_t \subseteq \mathbb{R}^n$  так що виконується  $\Omega_t \subseteq Q_t$ . Цю коробку назвемо обмежувальною коробкою кластера  $t$ .

Замінюючи області визначення  $\Omega_t$  і  $\Omega_s$  в загальній умові допустимості більшими коробками  $Q_t$  і  $Q_s$ , ми отримуємо наступну умову допустимості  $\max(diam(Q_t), diam(Q_s)) \leq \eta \cdot dist(Q_t, Q_s)$



Якщо  $Q_t = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_n, b_n]$  і  $Q_s = [c_1, d_1] \times \dots \times [c_n, d_n]$ , то діаметр і відстань рахуємо за наступними формулами

$$diam(Q_t) = \left( \sum_{l=1}^n (b_l - a_l)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$diam(Q_s) = \left( \sum_{l=1}^n (d_l - c_l)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$dist(Q_t, Q_s) = \left( \sum_{l=1}^n dist([a_l, b_l], [c_l, d_l])^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

Ці величини можна порахувати зі складністю  $O(1)$ .

## 4.3 Інтерполяція

### 4.3.1 Вироджене наближення

В попередньому розділі для розкладу ядра використовувався розклад Тейлора. Тепер будемо використовувати інтерполяцію для побудови апроксимації:

- $(x_v)_{v \in K}$  - множина інтерполяційних точок в  $\mathbb{R}^n$
- $(\mathcal{L}_v)_{v \in K}$  - відповідна функція Лагранжа, для якої виконується

$$\mathcal{L}_v(x_\mu) = \sigma_{v,\mu}$$

для всіх  $v, \mu \in K$ .

Внаслідок інтерпрляції отримуємо

$$\tilde{g}(x, y) := \sum_{v \in K} g(x_v, y) \mathcal{L}_v(x)$$

Використовуючи цю апроксимацію матрицю  $G$  замінюємо на матрицю  $\hat{G}$ , визначену наступним чином

$$\tilde{G}_{ij} = \int_{\Omega} \varphi_i(x) \int_{\Omega} \tilde{g}(x, y) \varphi_j(y) dy dx = \sum_{v \in K} \int_{\Omega} \varphi_i(x) \mathcal{L}_v(x) dx \int_{\Omega} \varphi_j(y) g(x_v, y) dy = (AB^T)_{ij}$$

де відповідні матриці визначені наступним чином

$$A_{iv} := \int_{\Omega} \varphi_i(x) \mathcal{L}_v(x) dx$$

$$B_{jv} := \int_{\Omega} \varphi_j(x) \tilde{g}(x_v, y) dy$$

Очевидно, що ранг матриці  $\tilde{G} = AB^T$  обмежений числом  $K$ , тож ми знайшли альтернативний метод для обчислення низькорівневих апроксимацій.

### 4.3.2 Апроксимація тензорним добутком на обмежувальних коробках

Потрібно знайти множину інтерполяційних точок і відповідну множину функцій Лагранжа для кожного кластера  $t \in \mathbb{T}_I$ , такі що похибка апроксимації відповідної області визначення  $\Omega_t$  є достатньо малою.

Застосовуємо наступне спрощення: замість наближення функції ядра на загальній підмножині  $\Omega_t \in \mathbb{R}^n$ , ми апроксимуємо її на обмежувальній коробці  $Q_t \supseteq \Omega_t$ .

Оскільки обмежувальна коробка  $Q_t$  є тензорним добутком інтервалів, застосовуємо інтерполяцію на інтервалах. Для інтервала  $[-1, 1]$ , хорошим вибором є точки Чебишева  $m$ -того порядку

$$(x_v)_{v=0}^m = \left( \cos \left( \frac{2v+1}{2m+2} \pi \right) \right)_{v=0}^m$$

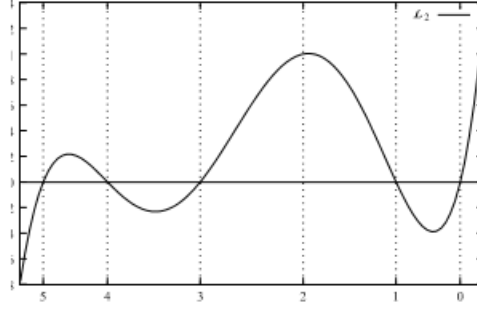
Поліноми Лагранжа мають вигляд

$$\mathcal{L}_v(x) = \prod_{\mu=0, \mu \neq v}^m \frac{x - x_\mu}{x_v - x_\mu}$$

Відповідний інтерполяційний оператор задається наступним чином

$$\mathcal{J}_m : C[-1, 1] \rightarrow \mathcal{P}_m$$

$$f \mapsto \sum_{v=0}^m f(x_v) \mathcal{L}_v$$



Для того, щоб отримати інтерполяційний оператор для непорожнього інтервалу  $[a, b]$ , ми використовуємо афінні трансформацію

$$\Phi_{[a,b]} : [-1, 1] \rightarrow [a, b]$$

$$x \mapsto \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x$$

і визначаємо трансформований інтерполяційний оператор  $\mathcal{J}_m^{[a,b]} : C[a, b] \rightarrow \mathcal{P}_m$  як

$$\mathcal{J}_m^{[a,b]}[f] := (\mathcal{J}_m[f \circ \Phi_{[a,b]}]) \circ \Phi_{[a,b]}^{-1} = \sum_{v=0}^m f(\Phi_{[a,b]}(x_v)) \mathcal{L}_v \circ \Phi_{[a,b]}^{-1}$$

Визначаємо трансформовані інтерполяційні точки

$$x_v^{[a,b]} := \Phi_{[a,b]}(x_v) = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x_v$$

і відповідні функції Лагранжа

$$\mathcal{L}_v^{[a,b]} := \mathcal{L}_v \circ \Phi_{[a,b]}^{-1}$$

Зазначимо, що

$$\mathcal{L}_v^{[a,b]}(x_\mu^{[a,b]}) = \mathcal{L}_v \circ \Phi_{[a,b]}^{-1}(\Phi_{[a,b]}(x_\mu)) = \mathcal{L}_v(x_\mu) = \sigma_{v\mu}$$

правдиве для всіх  $v, \mu \in \{0, \dots, m\}$ . Звідси отримуємо, що

$$\mathcal{L}_v^{[a,b]}(x) = \prod_{\mu=0, \mu \neq v}^m \frac{x - x_\mu^{[a,b]}}{x_v^{[a,b]} - x_\mu^{[a,b]}}$$

В  $n$ -вимірному випадку, областю визначення інтерполяції є обмежувальна коробка, паралельна до осей  $Q_t = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_n, b_n]$ . Оскільки область визначення має структуру тензорного добутку, напряду використовуємо інтерполяцію тензорним добутком, тобто визначаємо

$$\mathbb{J}_m^t := \mathcal{J}_m^{[a_1, b_1]} \otimes \dots \otimes \mathcal{J}_m^{[a_n, b_n]}$$

Визначаємо

- множину мультиіндексів

$$K := \{v \in \mathbb{N}_0^n : v_i \leq m \text{ для всіх } i \in \{1, \dots, d\}\} = \{0, \dots, m\}^n$$

- відповідні точки інтерполяції

$$x_v^t := (x_{v_1}^{[a_1, b_1]}, \dots, x_{v_n}^{[a_n, b_n]})$$

- поліноми Лагранжа

$$\mathcal{L}_v^t := \mathcal{L}_{v_1}^{[a_1, b_1]} \otimes \dots \otimes \mathcal{L}_{v_n}^{[a_n, b_n]}$$

Тепер ми можемо визначити  $\mathcal{J}_m^t$  в знайомій формі

$$\mathcal{J}_m^t[f](x) = \sum_{v \in K} f(x_v^t) \mathcal{L}_v^t(x)$$

Оцінити  $\mathcal{L}_v^t$  досить просто

$$\mathcal{L}_v^t(x) = (\mathcal{L}_{v_1}^{[a_1, b_1]} \otimes \dots \otimes \mathcal{L}_{v_n}^{[a_n, b_n]})(x) = \prod_{i=1}^n \mathcal{L}_{v_i}^{[a_i, b_i]}(x_i) = \prod_{i=1}^n \prod_{\mu=0, \mu \neq v_i}^m \frac{x_i - x_\mu^{[a_i, b_i]}}{x_{v_i}^{[a_i, b_i]} - x_\mu^{[a_i, b_i]}}$$

### 4.3.3 Побудова апроксимації низького рангу

Розглянемо допустиму пару кластерів  $(t, s)$ . Допустимість каже, що виконується наступна умова

$$\min\{\text{diam}(Q_T), \text{diam}(Q_s) \leq \nu \text{dist}(Q_t, Q_s)\}$$

Якщо  $\text{diam}(Q_t) \leq \text{diam}(Q_s)$ , то ми застосовуємо інтерполяцію до першого аргумента функції ядра. Відповідний блок матриці має вигляд  $(AB)^\top$ , і ми обчислюємо матриці  $A^{t,s}$  та  $B^{t,s}$  наступним чином

$$A_{iv}^{t,s} = \int_{\Omega} \varphi_i(x) \mathcal{L}_v^t(x) dx$$

$$B_{jv}^{t,s} = \int_{\Omega} \varphi_j(y) g(x_v^t, y) dy$$

де  $x_v^t$  і  $\mathcal{L}_v^t$  - перетворені інтерполяційні точки і поліноми Лагранжа відповідно.

Якщо  $\text{diam}(Q_s) \leq \text{diam}(Q_t)$ , то ми застосовуємо інтерполяцію до другого аргумента функції ядра і обчислюємо матриці  $A^{t,s}$  та  $B^{t,s}$ :

$$A_{iv}^{t,s} = \int_{\Omega} \varphi_i(x) g(x, x_v^s) dx$$

$$B_{jv}^{t,s} = \int_{\Omega} \varphi_j(y) \mathcal{L}_v^s(y) dy$$

## 4.4 Внутрішня задача Діріхле

Нехай  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  - обмежена однозв'язна область з границею  $\Gamma \subset C^2$ .

Знайти функцію  $u$ , яка гармонічна в  $\Omega$ , неперервна в  $\bar{\Omega}$  і задовольняє граничну умову

$$u = f \text{ на } \Gamma$$

де  $f$  - задана неперервна функція.

$$\Updownarrow$$

Знайти  $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$  :

$$\Delta u = 0 \text{ в } \Omega$$

$$u = f \text{ на } \Gamma$$

де  $f \in C(\Gamma)$  - задана.

Фундаментальний розв'язок рівняння Лапласа при  $\Omega \in \mathbb{R}^2$  має вигляд

$$\Phi(x, y) = \frac{1}{2\pi} \log \frac{1}{|x - y|} = -\frac{1}{2\pi} \log(|x - y|)$$

Нас цікавить проблема граничного інтегралу, тобто множина  $\Omega$  буде підмноговином. В нашому випадку,  $\Omega$  є одновимірним підмноговином  $\mathbb{R}^2$  тобто є кривою.

### 4.4.1 Потенціал простого шару

**Означення 4.1** Вважаємо, що задано  $\varphi \in C(\Gamma)$ . Функція

$$u(x) = \int_{\Gamma} \varphi(y) \Phi(x, y) ds(y), x \notin \Gamma$$

називається потенціалом простого шару.

Зафіксуємо  $n$  точок  $p_0, \dots, p_{n-1} \in \mathbb{R}^2$  і нехай  $p_0 := p_n$ . Означимо афінну параметризацію

$$\gamma_i : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^2$$

$$y \mapsto p_{i-1}(1 - y) + p_i y$$

для  $i \in \{1, \dots, n\}$ .

Нехай для всіх  $i, j \in \{0, \dots, n - 1\}$  з  $i \neq j$  виконується  $p_i \neq p_j$ . Тепер можемо визначити багатокутну криву

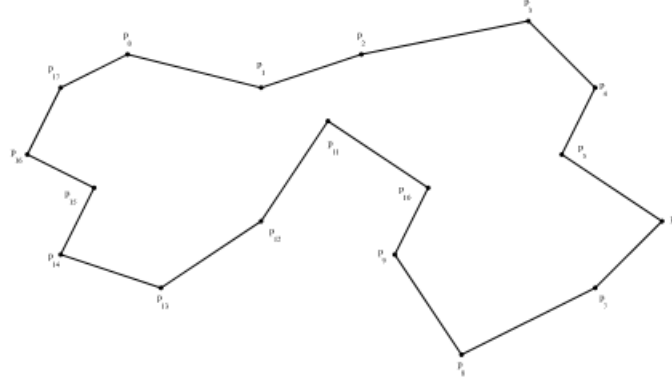
$$\Gamma := \bigcup_{i=1}^m \gamma_i([0, 1])$$

На кривій  $\Gamma$ , можемо означити оператор потенціалу простого шару

$$\Upsilon_{slp}[u](x) := -\frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} \log(\|x - y\|) u(y) dy$$

і відповідну білінійну форму

$$a_{slp}(u, v) := -\frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} v(x) \int_{\Gamma} \log(\|x - y\|) u(y) dy dx$$



Дискретизуємо  $a_{slp}(\cdot, \cdot)$  кусково-постійними функціями  $(\varphi_i)_{i=1}^n$  визначиними як

$$\varphi_i \circ \gamma_j = \delta_{ij}$$

для  $i, j \in I := 1, \dots, n$ .

Коефіцієнти відповідних матриць задаються наступним чином

$$\begin{aligned} G_{ij} &= a_{slp}(\varphi_j, \varphi_i) = -\frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} \varphi_i(x) \int_{\Gamma} \log(\|x - y\|) \varphi_j(y) dy dx \\ &= -\frac{1}{2\pi} \|p_i - p_{i-1}\| \|p_j - p_{j-1}\| \int_0^1 \int_0^1 \log(\|\gamma_i(x) - \gamma_j(y)\|) dy dx \end{aligned}$$

Цей інтеграл можна знайти за допомогою квадратури Гауса, проте він має особливість, якщо  $i = j$ , тому для цього випадку порахуємо інтеграл точно:

$$\gamma_i(x) - \gamma_i(y) = p_{i-1}(1-x) - p_i x - p_{i-1}(1-y) + p_i y = p_{i-1}(y-x) + p_i(y-x) = (p_{i-1} + p_i)(y-x)$$

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_0^1 \log \|\gamma_i(x) - \gamma_i(y)\| dy dx &= \int_0^1 \int_0^1 \log (\|p_{i-1} + p_i\| |x - y|) dy dx = \\ &= \log \|p_{i-1} + p_i\| + \int_0^1 \int_0^1 \log |x - y| dy dx \end{aligned}$$

Тепер ми можемо побудувати ієрархічну матрицю так як в попередньому розділі, замінивши логарифмічне ядро  $g(x, y) = \log(\|x - y\|)$  відповідними апроксимаціями.

Базисні функції для нашої задачі мають вигляд:

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } x \in \gamma_i[0, 1] \\ 0, & \text{якщо } x \notin \gamma_i[0, 1] \end{cases}$$

Після знаходження  $u_n$ , розв'язок можна порахувати наступним чином:

$$\begin{aligned} u(x) &= -\frac{1}{2\pi} \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma_i} \log \|x - y\| u(y) ds(y) = -\frac{1}{2\pi} \sum_{i=1}^n \|p_i - p_{i-1}\| \int_0^1 \log \|x - \gamma_i(y)\| u(\gamma_i(y)) dy \approx \\ &= -\frac{1}{2\pi} \sum_{i=1}^n u_i \|p_i - p_{i-1}\| \int_0^1 \log \|x - \gamma_i(y)\| dy \end{aligned}$$

#### 4.4.2 Реалізація

Опрацювання повних матриць (full matrix) включає детальну оцінку сингулярних інтегралів.

Розглянемо опрацювання низькорівневих блоків. Вони відповідають допустимим парам кластерів  $(t, s)$  і вимагає оцінки вироджених наближень функції ядра. Припустимо, що  $diam(Q_t) \leq diam(Q_s)$  виконується. Тоді апроксимація має вигляд

$$\tilde{g}(x, y) = \sum_{v \in K} \log(\|x_v^t - y\|) \mathcal{L}_v^t(x)$$

Потрібно обчислити матриці

$$A_{iv}^{(t,s)} = \int_{\Gamma} \varphi_i(x) \mathcal{L}_v^t(x) dx = \|p_i - p_{i-1}\| \int_0^1 \mathcal{L}_v^t(\gamma_i(x)) dx$$

$$B_{jv}^{t,s} = -\frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} \varphi_j(y) \log(\|x_v^t - y\|) dy = -\frac{1}{2\pi} \|p_j - p_{j-1}\| \int_0^1 \log(\|x_v^t - \gamma_j(y)\|) dy$$

Оскільки  $\gamma_i$  є афінними функціями, то перший інтегранд є поліномом степеня  $m$ , тому ми можемо застосувати точну квадратуру для їхнього обрахунку.

Для того, щоб виконати обчислення, нам потрібні наступні дані:

- Масив розмірності  $n$ , який містить координати точок  $(p_i)_{i=0}^{n-1}$ .
- масиви  $xq$  і  $wq$  розмірності  $q$ , які містять точки і ваги відповідних квадратур (наприклад Гауса).
- Масив  $l$  розмірності  $p$ , що містить трансформовані інтерполяційні точки.

Щоб заповнити матрицю  $B^{t,s}$  потрібно проінтегрувати функцію ядра для точок  $x_v^t$  на інтервалах заданих точками  $p_{i-1}$  і  $p_i$ . В цьому випадку, це може бути зроблено аналітично. В загальному, ми можемо використовувати ту саму квадратуру, як у випадку інтегрування поліномів Лагранжа.

## Висновок

В цій роботі розглянуто основні принципи побудови та використання  $\mathcal{H}$ -матриць. Описано такі ключові поняття як дерево, кластерне дерево та блочне кластерне дерево, які лягли в основу означення структури ієрархічної матриці. Також розглянуто відповідні структури через які ієрархічні матриці реалізують програмно: `rkmatrix`, `fullmatrix` та `supermatrix`. Наведено алгоритми реалізації блочного кластерного дерева і методу спряжених градієнтів.

Застосування  $\mathcal{H}$ -матриць розглянуто на прикладі методу скінченних елементів (ВЕМ). У даному прикладі застосовується метод Галеркіна та метод спряжених градієнтів. Розглянута теорія побудови  $\mathcal{H}$ -матриць для двовимірного випадку на прикладі задачі Діріхле для рівняння Лапласа.



## Бібліографія

- [1] Steffen Börm *Hierarchical Matrices* / Lars Grasedyck, Wolfgang Hackbusch — електронний ресурс, 2005. — 136 с.
- [2] Mohammad Izadi *Hierarchical Matrix Techniques on Massively Parallel Computers. Dissertation*—К.: Max Planck Institute for Mathematics in the Sciences,2012.— 212 с.
- [3] Нікольський Ю.В. *Дискретна математика* / Пасічник В.В., Щербина Ю.М.— К.: Видавнича група BHV,2007.—368 с.
- [4] Wolfgang Hackbusch *Hierarchical Matrices: Algorithms and Analysis*—К.: Springer-Verlag,2015.— 505 с.
- [5] Lin Lin *Fast construction of hierarchical matrix representation from matrix-vector multiplication* / Jianfeng Lu, Lexing Ying — К.: Journal of Computational Physics 230 4071–4087,2011.—17 с.
- [6] Jonathan Richard Shewchuk *An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain* —К.:School of Computer Science, Pittsburg,PA 15213,1994.—64 с.