

МЕТОДИКА РОЗДІЛЕННЯ ЗМІННИХ У ОБЧИСЛЮВАЛЬНІЙ МАТЕМАТИЦІ

В. Білецький

Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Університетська, 1, Львів, 79000, e-mail: v.biletsky@lnu.edu.ua

Описано використання методики розділення змінних у обчислювальній математиці. Розглянуто адитивне та мультиплікативне розділення змінних, розвинення методу Фур'є, розділене зображення функцій багатьох змінних і багатовимірних тензорів, сингулярний розклад і метод узагальненого розділення змінних.

Ключові слова: розділення змінних, числові методи, функції багатьох змінних, багатовимірні тензори, метод узагальненого розділення змінних.

1. РОЗДІЛЕННЯ ЗМІННИХ

Обчислювальна складність переважної більшості методів розв'язування багатовимірних задач зростає експоненціально зі збільшенням розмірності задачі. Це також зазвичай стосується обсягу ресурсів потрібних для зображення розв'язку задачі. Таку залежність називають *прокляттям розмірності (Curse of Dimensionality)* [23].

Розділення змінних дає змогу зменшити розмірність і досягнути компактності зображення розв'язку багатовимірної задачі. Ідею наближеного розділення змінних використовують для апроксимації операторів, функцій багатьох змінних і багатовимірних тензорів, а також для розв'язування багатовимірних інтегральних рівнянь та крайових задач.

2. МЕТОД ФУР'Є

Багато задач математичної фізики можна розв'язати методом розділення змінних (методом Фур'є). Головна ідея методу полягає у зведенні вихідної задачі до розв'язування рівнянь з меншою кількістю незалежних змінних. Зокрема, якщо це рівняння містить дві незалежні змінні, то його розв'язування зводять до рівнянь, які залежать від однієї змінної.

Спочатку застосування методу було обмежене задачами, які можна звести до рівностей виразів, що залежать від різних змінних. Наприклад, для звичайного диференціального рівняння це рівність вигляду

$$f(y)dy = g(x)dx, \quad (1)$$

де x – вільна змінна; $y(x)$ – невідома функція.

Очевидно, що послідовність подальших дій залежить від конкретної задачі. У згаданому випадку інтегрування обох частин рівності (1) дасть неявний вигляд загального розв'язку звичайного рівняння першого роду з розділеними змінними

$$\int f(y)dy = \int g(x)dx + C. \quad (2)$$

Зауважимо, що знайдений розв'язок задачі є частковим. Навіть, якщо кількість таких розв'язків нескінченна, то ми не знаємо чи знайшли всі розв'язки вихідної задачі.

Для рівнянь з невідомою функцією двох незалежних змінних $\omega(x, t)$ метод пропонує шукати розв'язок у вигляді добутку функцій різних аргументів

$$\omega(x, t) = \varphi(x)\psi(t).$$

Для деяких задач є сенс шукати розв'язок у вигляді суми функцій різних аргументів

$$\omega(x, t) = \varphi(x) + \psi(t).$$

Такі розв'язки називають, відповідно, розв'язками з мультиплікативним та адитивним розділенням змінних [9]. Природне узагальнення цих підходів передбачає відшукування розв'язку задачі у вигляді суми доданків з розділеними змінними

$$\omega(x, t) = \sum_k \varphi_k(x)\psi_k(t).$$

Метод розділення змінних – найбільш уживаний для розв'язування лінійних задач математичної фізики. Проте для нелінійних задач він набув популярності досить нещодавно і є доволі перспективним напрямом досліджень. Для деяких класів нелінійних задач можна отримати загальні розв'язки.

Подальше розвинення методу Фур'є передбачає різноманітні його узагальнення [9, 11, 13] та допомагає знайти розв'язки багатьох важливих прикладних задач. Варто також згадати узагальнення методу розділення змінних для випадку тензорного добутку сепарабельних гільбертових просторів [10, 43] та узагальнену схему розділення змінних [12].

3. ФУНКЦІЇ БАГАТЬОХ ЗМІННИХ

Найпростіший спосіб наближення функції багатьох змінних функціями однієї змінної розглянуто у [14, 17]. Тут функцію d змінних апроксимують сумою d функцій однієї змінної

$$f(x_1, \dots, x_d) \approx \sum_{j=1}^d \varphi_j(x_j).$$

Очевидно, що попри свою простоту, такий підхід має погану точність наближення, адже величина

$$\left\| f - \sum_{j=1}^d \varphi_j \right\|$$

цілком визначається функцією f і не може бути меншою наперед заданої величини.

У цьому випадку наближення функції багатьох змінних добутком функцій однієї змінної

$$f(x_1, \dots, x_d) \approx \prod_{j=1}^d \varphi_j^{(1)}(x_j)$$

має значну перевагу, оскільки для залишку можна знайти таке найкраще наближення:

$$f(x_1, \dots, x_d) - \prod_{j=1}^d \varphi_j^{(1)}(x_j) \approx \prod_{j=1}^d \varphi_j^{(2)}(x_j).$$

Повторюючи подібні міркування, отримуємо ряд

$$\sum_{k=1}^{\infty} \prod_{j=1}^d \varphi_j^{(k)}(x_j),$$

часткову суму якого приймають за наближення функції f . Такий спосіб апроксимації операторів і функцій багатьох змінних сумами доданків з розділеними змінними досліджено у [5, 8, 16, 18, 22, 25, 29, 36].

4. РОЗДІЛЕНЕ ЗОБРАЖЕННЯ ФУНКЦІЇ ТА ОПЕРАТОРІВ

У [27, 28] автори вводять поняття *розділеного зображення* функції багатьох змінних (*Separated Representation*)

$$f(x_1, \dots, x_d) \approx \sum_{k=1}^r s_k \varphi_1^{(k)}(x_1) \cdots \varphi_d^{(k)}(x_d), \quad (3)$$

де s_k – скаляр, а $\varphi_j^{(k)}$ – нормована функція однієї змінної.

Зафіксувавши потрібний рівень точності наближення ε , ми знаходимо такі r , $\{\varphi_j^{(k)}\}$ та $\{s_k\}$, що задовольняють умови

$$\left\| f(x_1, \dots, x_d) - \sum_{k=1}^r s_k \varphi_1^{(k)}(x_1) \cdots \varphi_d^{(k)}(x_d) \right\| < \varepsilon. \quad (4)$$

Ми намагаємося мінімізувати кількість доданків r . Параметр r відіграє ключову роль у подібних підходах наближення функцій. Його прийнято називати *рангом розділення* (*Separation Rank*). Розділене зображення функції, що має мінімальну кількість доданків r , називають оптимальним. У праці [27] наведено деякі важливі класи операторів, які мають невеликий ранг розділення для високої точності наближення.

Один із способів використання розділеного зображення полягає у виборі функцій $\{\varphi_j^{(k)}\}$ з деякої множини (базису) та подальшому визначенні оптимальних параметрів $\{s_k\}$. Такий підхід використовують, скажімо, так звані СІ методи (*Configuration Interaction*) [57]. Інший підхід передбачає заміну у вихідній задачі шуканої функції f її розділеним зображенням згідно з (3) та подальше розв'язування рівнянь стосовно $\{\varphi_j^{(k)}\}$ та $\{s_k\}$.

Незважаючи на свою простоту, таке зображення функції має цікаву структуру та потребує подальших досліджень. Розділене зображення не є проекцією функції на деякий підпростір, а радше нелінійним способом наближення функції багатьох змінних, що використовує меншу кількість параметрів.

Аналогічно вводять поняття розділеного зображення для оператора, що діє у багатовимірному просторі, та для багатовимірних тензорів.

Для розділеного зображення критичне збільшення накопиченої похибки обчислень можливе у випадку, коли норма функції f є суттєво меншою, ніж норма доданків її зображення

$$\|f\| \ll s_k.$$

Для оцінки похибки обчислень розділеного зображення вводять поняття числа його обумовленості

$$\kappa = \frac{\sqrt{\sum_{k=1}^r s_k^2}}{\|f\|}.$$

Багато операцій лінійної алгебри можуть бути виконані над розділеним зображенням функцій, зберігаючи результат у вигляді (3). Операції у d -вимірному

просторі можна замінити на комбінацію операцій у одновимірних просторах [53], обчислювальна складність якої лінійно (а не експоненціально) залежить від d . Очевидно, що є також залежність від рангу розділення r . Проте для багатьох задач математичної фізики параметр r майже не залежить від d , тому практично обчислювальна складність операцій лінійної алгебри є квазілінійною. У [27] описано основні операції над розділеним зображенням функцій, операторів та їхніх дискретних еквівалентів.

Для повноцінного використання такого розділення змінних у числових методах їхні алгоритми потрібно описати термінами розділеного зображення. Це передбачає необхідність адаптації складніших алгоритмів і схем, скажімо, методів розв'язування систем лінійних алгебричних рівнянь. Багато стандартних методів (наприклад, метод Гауса) не можна перекласти на мову розділеного зображення. З іншого боку, ми можемо використати наближені ітераційні методи розв'язування систем лінійних алгебричних рівнянь [28]. Також є змога використати метод найменших квадратів для розв'язування системи. Застосування подібних загальних стратегій для інших задач розглянуто у [28].

Отже, розв'язуючи вихідну задачу відповідними методами, ми можемо тримати всі функції та оператори у розділеному зображенні та динамічно визначати ранг розділення відповідно до заданої точності обчислень. Схожий підхід використовують для дискретизації нескінченновимірної задачі. Роль рангу розділення тут відіграє кількість ступенів вільності дискретизованої задачі.

Важливо, що після кожної виконаної операції результат обчислень перебуває у формі (3), проте ранг розділення може значно збільшитися, що може призвести до неконтрольованого зростання параметра r . Тому після кожної виконаної операції для її результату треба шукати інше розділене зображення, що має менший ранг розділення. Автори [27] пропонують одну з можливих процедур зменшення рангу розділення, що використовує циклічно-ітераційний метод послідовних найменших квадратів (*Alternating Least Squares*). Цей метод також часто використовують у статистиці [31, 39, 48, 49, 58].

Ідея запропонованого підходу зменшення рангу розділення полягає у побудові нового розділеного зображення

$$\sum_{k=1}^{\hat{r}} \hat{s}_k \hat{\phi}_1^{(k)}(x_1) \cdots \hat{\phi}_d^{(k)}(x_d).$$

Ранг нового зображення послідовно збільшують, починаючи з $\hat{r} = 1$, доки не вдасться досягнути необхідної точності

$$\left\| \sum_{k=1}^{\hat{r}} \hat{s}_k \hat{\phi}_1^{(k)}(x_1) \cdots \hat{\phi}_d^{(k)}(x_d) - \sum_{k=1}^r s_k \phi_1^{(k)}(x_1) \cdots \phi_d^{(k)}(x_d) \right\| < \varepsilon.$$

Для фіксованого \hat{r} метод обирає початкові значення для $\{\hat{\phi}_j^{(k)}\}$ та $\{\hat{s}_k\}$. Далі, використовуючи циклічний метод послідовних найменших квадратів, пробують поліпшити існуюче наближення.

5. ДВОВИМІРНИЙ ВИПАДОК

У двовимірному випадку ($d = 2$) розділене зображення функції (3) схоже до її сингулярного розкладу (*Singular Value Decomposition*) [7]. Тобто, ми можемо отримати оптимальне розділене зображення функції як часткову суму її сингулярного розкладу. Оскільки ми не маємо обмеження на ортогональність функцій $\{\phi_j^{(k)}\}$, то

зображення (3) є більш загальним, а сингулярний розклад – його частковий випадок. Також для фіксованого ε може існувати більше одного оптимального розділеного зображення, а сингулярний розклад, як відомо, існує єдиний.

Для методів наближення функцій двох змінних та операторів, які ґрунтуються на сингулярній теорії Шмідта, обґрунтовано їхню збіжність [1, 2, 18], тобто побудований ряд збігається до вихідної функції чи оператора

$$f(x, y) = \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_1^{(k)}(x) \varphi_2^{(k)}(y).$$

У [15] описано теорію сингулярного розкладу для загального випадку тензорного добутку двох просторів

$$H = H_1 \otimes H_2.$$

Побудований збіжний ітераційний процес наближення довільного елемента простору H сумою тензорних добутків елементів просторів H_1 та H_2

$$h = \sum_{k=1}^{\infty} h_1^{(k)} \otimes h_2^{(k)}.$$

При $d > 2$ розділене зображення принципово відрізняється від сингулярного розкладу. Сьогодні існують методи обчислення сингулярного розкладу функції чи оператора, але, незважаючи на проведені дослідження [32, 38, 46, 49], немає жодного обґрунтованого методу для знаходження оптимального розділеного зображення. Важливо, що сингулярний розклад визначають без заданої точності, тоді як визначення розділеного зображення потребує параметра ε . Також оптимальне зображення для меншого ε не є продовженням (доповненням новими доданками) оптимального зображення для більшої допустимої похибки. Зауважимо, що випадок $\varepsilon = 0$, що розглянутий, наприклад, у [55], є складною задачею.

Знаходження оптимального рангу розділення для заданого ε є також складною задачею. Проте на практиці майже завжди надають перевагу розділеним зображенням з рангом близьким до оптимального, за умови, що вони ліпше обумовлені чи потребують менших обчислювальних затрат. Наприклад, для двовимірного випадку алгоритм знаходження субоптимального зображення, що використаний у [30], є значно швидшим, ніж методи знаходження сингулярного розкладу, які дають оптимальний ранг розділення.

Зображення, схожі до (3), використовують у статистиці. Варті уваги, наприклад, *Canonical Decomposition* та *Parallel Factor Analysis* [32, 33, 38, 46]. Також були запропоновані інші зображення, що є більш обмеженими, ніж (3), проте мають кращі обчислювальні властивості чи передбачають простіші підходи до дослідження своїх властивостей. Наприклад, сингулярний розклад вищого порядку (*Higher Order Singular Value Decomposition*) [38] є узагальненням звичайного сингулярного розкладу, де сингулярні значення замінюють d -вимірними тензорами. Проте обчислювальна складність такого підходу експоненціально залежить від розмірності простору d . Так звані CI методи [57] використовують зображення вигляду (3), але вибирають функції $\{\varphi^{(k)}\}$ з множини попарно ортогональних елементів. Таке обмеження значно спрощує обчислення, але може призвести до значного збільшення рангу розділення r . Також існують неортогональні CI методи [50, 56].

Для зменшення обчислювальних затрат розділене зображення можна комбінувати з іншими підходами, що враховують специфіку задачі. Скажімо, тензор, що відповідає функції чи оператору, може бути розрідженим, мати діагональний

вигляд чи деяку іншу складнішу структуру [26, 42, 44, 45, 61]. Подібне поєднання може зробити практичну реалізацію розв'язування задачі значно ефективнішою.

6. БАГАТОВИМІРНІ ТЕНЗОРИ

Методи побудови наближень дискретних аналогів операторів і функцій багатьох змінних – тензорів сумами тензорних добутків тензорів менших розмірностей [24, 37, 40, 52] є важливим інструментом сучасної науки. Апроксимація багатовимірних тензорів має застосування у таких галузях: обробка сигналів, аналіз даних, теорія графів тощо.

Існує багато методів декомпозиції багатовимірних тензорів. Наприклад, метод Такера (*Tucker Decomposition*) чи CP метод (*CP Decomposition*) [19, 47]. CP метод будує канонічне наближення багатовимірного тензора у вигляді суми тензорних добутків одновимірних векторів. При фіксованій кількості доданків метод мінімізує норму різниці вихідного тензора та його наближення. Зазвичай для такої задачі використовують метод послідовних найменших квадратів, який не завжди достатньо точний. У [20, 21, 34, 35, 41, 51, 59, 60] описано можливі способи оптимізації чи модифікації методу послідовних найменших квадратів. Крім того, запропоновано альтернативні методи нелінійних найменших квадратів (*Nonlinear Least Squares*).

7. МЕТОД УЗАГАЛЬНЕНОГО РОЗДІЛЕННЯ ЗМІННИХ

Метод узагальненого розділення змінних запропоновано у [2, 3] для розв'язування багатовимірних інтегральних і матричних рівнянь та їхніх варіаційних аналогів. Також метод використовують для розв'язування обернених та оптимізаційних задач математичної фізики [54].

Ідея методу полягає у поданні розв'язку задачі

$$Au = f$$

у вигляді суми доданків з розділеними змінними

$$u(x_1, \dots, x_d) = \sum_{k=1}^{\infty} \prod_{j=1}^d \varphi_j^{(k)}(x_j),$$

які обчислюють послідовно згідно з умовою мінімуму функціонала

$$J_f(\varphi_1, \dots, \varphi_d) = \|f - A(\varphi_1 \otimes \dots \otimes \varphi_d)\|^2 \rightarrow \min.$$

Тут функції u та f належать простору інтегровних з квадратом у деякій обмеженій області функцій, а оператор A , що діє у цьому просторі, є лінійним і неперервним.

У [6] розвинуто метод узагальненого розділення змінних і запропоновано його модифікацію, що мінімізує на кожному кроці норму відхилення розв'язку та його наближення.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Аграновский М. Л. Об одном разложении в гильбертовом пространстве и его приложениях / М. Л. Аграновский, Р. Д. Баглай // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1977. – Т. 17, № 4. – С. 871-878.
2. Баглай Р. Д. К обработке двумерных сигналов на ЭВМ / Р. Д. Баглай, К. К. Смирнов // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1975. – Т. 15, № 1. – С. 241-248.

3. *Баляш Ю. Г.* Вариационно-итерационный метод решения многомерных интегральных уравнений / Ю. Г. Баляш, Н. Н. Войтович // Интегральные уравнения в прикладном моделировании: Тез. докл. XX республ. конф. – К., 1986. – С. 23-24.
4. *Баляш Ю. Г.* Приближенное вариационно-итерационное разделение переменных в многомерных задачах / Ю. Г. Баляш, Н. Н. Войтович // Волны и дифракция-85: IX Всесоюзный симпозиум по дифракции и распространению волн – Тбилиси, 1985. – С. 122-124.
5. *Верлань А. Ф.* К вопросу сходимости вариационно-итерационного метода аппроксимации функции двух переменных / А. Ф. Верлань, И. А. Серикова // Точность и надежность кибернетических систем. – 1975. – № 3. – С. 10-12.
6. *Войтович М. М.* Варіаційно-ітераційний метод узагальненого розділення змінних для розв'язання багатовимірних інтегральних рівнянь / М. М. Войтович, С. А. Ярошко // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 1997. – Т. 10, № 4. – С. 122-126.
7. *Гохберг И. Ц.* Введение в теорию линейных несамосопряженных операторов в гильбертовом пространстве / И. Ц. Гохберг, М. Г. Крейн. – М: Наука, 1965. – 448 с.
8. *Гришин А. П.* Экстремальная задача о представлении таблично заданной функции двух переменных через функции одного переменного / А. П. Гришин // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1977. – Т. 17, № 4. – С. 838-846.
9. *Зайцев В. Ф.* Метод разделения переменных в математической физике / В. Ф. Зайцев, А. Д. Полянин. – СПб: Книжный Дом, 2009. – 92 с.
10. *Каленюк П. И.* О разделении переменных в тензорном произведении гильбертовых пространств / П. И. Каленюк // Укр. мат. журн. – 1974. – Т. 25, № 5. – С. 652-657.
11. *Каленюк П. И.* Обобщение метода разделения переменных / П. И. Каленюк // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 1975 – Т. 1. – С. 10-15.
12. *Каленюк П. И.* Обобщенный метод разделения переменных / П. И. Каленюк, Я. Е. Баранецкий, З. Н. Нитребич. – К: Наук. думка, 1993. – 229 с.
13. *Каленюк П. И.* Якісні методи теорії диференціальних рівнянь / П. И. Каленюк, В. Я. Скоробогатько. – К: Наук. думка, 1977. – 124 с.
14. *Офман Ю. П.* О наилучшем приближении функций двух переменных функциями вида $\varphi(x) + \psi(x)$ / Ю. П. Офман // Изв. АН СССР. Сер. матем. – 1961. – Т. 25, № 2. – С. 239-252.
15. *Поспелов В. В.* К теории сингулярного разложения в тензорном произведении гильбертовых пространств / В. В. Поспелов // Математический сборник. – 1994. – Т. 185, № 7. – С. 109-118.
16. *Поспелов В. В.* О погрешности приближения функции двух переменных суммами произведений функций одного переменного / В. В. Поспелов // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1978. – Т. 18, № 5. – С. 1307-1308.
17. *Хавинсон С. Я.* Чебышевская теорема для приближения функции двух переменных суммами $\varphi(x) + \psi(x)$ / С. Я. Хавинсон // Изв. АН СССР. Сер. матем. – 1969. – Т. 33, № 3. – С. 617-632.
18. *Шура-Бура М. Р.* Аппроксимация функций многих переменных функциями, каждая из которых зависит от одного переменного / М. Р. Шура-Бура // Вычислительная математика. – 1957. – № 27. – С. 3-19.

19. *Acar E.* A scalable optimization approach for fitting canonical tensor decompositions / E. Acar, D. M. Dunlavy, T. G. Kolda // *Journal of Chemometrics.* – 2011. – Vol. 25, № 2. – P. 67-86.
20. *Jiang Y. Li.* Alternating coupled matrices resolution method for three-way arrays analysis / Y. Li, J.-H. Jiang, H.-L. Wu et al. // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems.* – 2000. – Vol. 52, № 1. – P. 33-43.
21. *Jiang J.-H.* Alternating coupled vectors resolution (ACOVER) method for trilinear analysis of three-way data / J.-H. Jiang, H.-L. Wu, Y. Li, R.-Q. Yu // *Journal of Chemometrics.* – 1999. – Vol. 13, № 6. – P. 557-578.
22. *Beatson R.* A short course on fast multipole methods / R. Beatson, L. Greengard // *Wavelets, multilevel methods and elliptic PDEs.* – 1997. – P. 1-37.
23. *Bellman R.* Adaptive Control Processes: A Guided Tour / R. Bellman. – Princeton University Press, 1961. – 255 p.
24. *Ishteva M.* Best rank- (R_1, R_2, R_3) approximation of tensors by means of a geometric newton method / M. Ishteva, S. Huffel, L. De Lathauwer, P. A. Absil // *Proceedings of the 6th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics.* – Psalidi, Kos, Greece, 2008. – P. 274-277.
25. *Beylkin G.* Fast wavelet transforms and numerical algorithms I / G. Beylkin, R. Coifman, V. Rokhlin // *Communications on pure and applied mathematics.* – 1991. – Vol. 44, № 2. – P. 141-183.
26. *Beylkin G.* Fast spectral projection algorithms for density-matrix computations / G. Beylkin, N. Coult, M. J. Mohlenkamp // *Journal of Computational Physics.* – 1999. – Vol. 152, № 1. – P. 32-54.
27. *Beylkin G.* Numerical operator calculus in higher dimensions / G. Beylkin, M. J. Mohlenkamp // *Proceedings of the National Academy of Sciences.* – 2002. – Vol. 99, № 16. – P. 10246-10251.
28. *Beylkin G.* Algorithms for numerical analysis in high dimensions / G. Beylkin, M. J. Mohlenkamp // *SIAM Journal on Scientific Computing.* – 2005. – Vol. 26, № 6. – P. 2133-2159.
29. *Beylkin G.* On approximation of functions by exponential sums / G. Beylkin, L. Monzon // *Applied and Computational Harmonic Analysis.* – 2005. – Vol. 19, № 1. – P. 17-48.
30. *Beylkin G.* Wave propagation using bases for bandlimited functions / G. Beylkin, K. Sandberg // *Wave Motion.* – 2005. – Vol. 41, № 3. – P. 263-291.
31. *Bro R.* PARAFAC. tutorial and applications / R. Bro // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems.* – 1997. – Vol. 38, № 2. – P. 149-171.
32. *Cardoso J.-F.* High-order contrasts for independent component analysis / J.-F. Cardoso // *Neural Computation.* – 1999. – Vol. 11, № 1. – P. 157-192.
33. *Cardoso J.-F.* Blind beamforming for non-gaussian signals / J.-F. Cardoso, A. Souloumiac // *IEE Proceedings F (Radar and Signal Processing).* – Vol. 140. – 1993. – P. 362-370.
34. *Chen Z.-P.* Pseudo alternating least squares algorithm for trilinear decomposition / Z.-P. Chen, Y. Li, R.-Q. Yu // *Journal of Chemometrics.* – 2001. – Vol. 15, № 3. – P. 149-167.
35. *Chen Z.-P.* On the self-weighted alternating trilinear decomposition algorithm-the property of being insensitive to excess factors used in calculation / Z.-P. Chen, H.-L. Wu, R.-Q. Yu // *Journal of Chemometrics.* – 2001. – Vol. 15, № 5. – P. 439-453.
36. *Christie I.* Kernel approximation for solving few-body integral equations / I. Christie, D. Eyre // *Few-body systems.* – 1986. – Vol. 1, № 2. – P. 111-122.

37. *De Lathauwer L.* A survey of tensor methods / L. De Lathauwer // Proceedings of the 2009 IEEE International Symposium on Circuits and Systems. – Taipei, Taiwan, 2009. – P. 2773-2776.
38. *De Lathauwer L.* A multilinear singular value decomposition / L. De Lathauwer, B. De Moor, J. Vandewalle // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. – 2000. – Vol. 21, № 4. – P. 1253-1278.
39. *De Lathauwer L.* On the best rank-1 and rank- (R_1, R_2, \dots, R_N) approximation of higher-order tensors / L. De Lathauwer, B. De Moor, J. Vandewalle // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. – 2000. – Vol. 21, № 4. – P. 1324-1342.
40. Dimensionality reduction for higher-order tensors: algorithms and applications / M. Ishteva, P. A. Absil, S. Huffel, L. De Lathauwer // International Journal of Pure and Applied Mathematics. – 2008. – Vol. 42, № 3. – P. 337-343.
41. *Faber N. M.* Short communication: On solving generalized eigenvalue problems using Matlab / N. M. Faber // Journal of Chemometrics. – 1997. – Vol. 11, № 1. – P. 87-91.
42. Fast spherical filter with uniform resolution // Journal of Computational Physics. – 1997. – Vol. 136, № 2. – P. 580-584.
43. *Friedman B.* An abstract formulation of the method of separation of variables / B. Friedman // Proceedings of the Conference on Differential Equations. – College Park, Maryland: University of Maryland Bookstore, 1956. – P. 209-226.
44. *Hrycak T.* An improved fast multipole algorithm for potential fields / T. Hrycak, V. Rokhlin // SIAM Journal on Scientific Computing. – 1998. – Vol. 19, № 6. – P. 1804-1826.
45. *Jones P.* Fast spectral projection algorithms for density-matrix computations / P. Jones, J. Ma, V. Rokhlin // Journal of Computational Physics. – 1994. – Vol. 113, № 1. – P. 35-51.
46. *Kolda T. G.* Orthogonal tensor decompositions / T. G. Kolda // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. – 2001. – Vol. 23, № 1. – P. 243-255.
47. *Kolda T. G.* Tensor decompositions and applications / T. G. Kolda, B. W. Bader // SIAM Review. – 2009. – Vol. 51, № 3. – P. 455-500.
48. *Kroonenberg P. M.* Principal component analysis of three-mode data by means of alternating least squares algorithms / P. M. Kroonenberg, J. De Leeuw // Psychometrika. – 1980. – Vol. 45, № 1. – P. 69-97.
49. *Leurgans S. E.* Canonical correlation analysis when the data are curves / S. E. Leurgans, R. A. Moyeed, B. W. Silverman // Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological). – 1993. – Vol. 55, № 3. – P. 725-740.
50. *Luchow A.* On the systematic improvement of fixed-node diffusion quantum monte carlo energies using pair natural orbital ci guide functions / A. Luchow, R. F. Fink // The Journal of Chemical Physics. – 2000. – Vol. 113. – P. 8457-8463.
51. *Chen Z.-P.* Novel trilinear decomposition algorithm for second-order linear calibration / Z.-P. Chen, H.-L. Wu, J.-H. Jiang et al. // Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems. – 2000. – Vol. 52, № 1. – P. 75-86.
52. *Ishteva M.* On the best low multilinear rank approximation of higher-order tensors / M. Ishteva, P. A. Absil, S. Huffel, L. De Lathauwer // Recent Advances in Optimization and its Applications in Engineering. – 2010. – P. 145-164.
53. *Pereyra V.* Efficient computer manipulation of tensor products with applications to multidimensional approximation / V. Pereyra, G. Scherer // Mathematics of Computation. – 1973. – Vol. 27, № 123. – P. 595-605.

54. *Bulatsyk O.* Phase Optimization Problems / O. Bulatsyk, B. Z. Katsenelenbaum, Y. P. Topolyuk, N. N. Voitovich. – Wiley, 2010. – 312 p.
55. *Rassias T. M.* Finite sums decompositions in mathematical analysis / T. M. Rassias, J. Simsa. – Wiley, 1995. – 172 p.
56. *Rudin S.P.* Configuration Interaction with Non-orthogonal Slater Determinants Applied to the Hubbard Model, Atoms, and Small Molecules: Ph. D. thesis / Ohio State University. – Columbus, Ohio, 1997. – 420 p.
57. *Sherrill C. D.* The configuration interaction method: Advances in highly correlated approaches / C. D. Sherrill, H. F. Schaefer III // *Advances in Quantum Chemistry.* – 1999. – Vol. 34. – P. 143-269.
58. *Smilde A.* Multi-way analysis: applications in the chemical sciences / A. Smilde, R. Bro, P. Geladi. – Wiley, 2005. – 396 p.
59. *Jiang J.-H.* Three-way data resolution by alternating slice-wise diagonalization (ASD) method / J.-H. Jiang, H.-L. Wu, Y. Li, R.-Q. Yu // *Journal of Chemometrics.* – 2000. – Vol. 14, № 1. – P. 15-36.
60. *Wu H.-L.* An alternating trilinear decomposition algorithm with application to calibration of HPLC-DAD for simultaneous determination of overlapped chlorinated aromatic hydrocarbons / H.-L. Wu, M. Shibukawa, K. Oguma // *Journal of Chemometrics.* – 1998. – Vol. 12, № 1. – P. 1-26.
61. *Yarvin N.* A generalized one-dimensional fast multipole method with application to filtering of spherical harmonics / N. Yarvin, V. Rokhlin // *Journal of Computational Physics.* – 1998. – Vol. 147, № 2. – P. 594-609.

Стаття: надійшла до редколегії 11.11.2015

доопрацьована 16.12.2015

прийнята до друку 23.12.2015

METHODOLOGY OF SEPARATION OF VARIABLES IN COMPUTATIONAL MATHEMATICS

V. Biletskyy

Ivan Franko National University of Lviv,

Universytetska Str., 1, Lviv, 79000, e-mail: v.biletskyy@lnu.edu.ua

A usage of a methodology of separation of variables in computational mathematics is described. We consider additive and multiplicative separation of variables, developments of Fourier method, separated representation of multivariate functions and tensors, singular value decomposition methods and the method of generalized separation of variables.

Key words: separation of variables, numerical methods, multivariate functions, multidimensional tensors, method of generalized separation of variables..