УДК 004.272.2:519.63
DOI: https://doi.org/10.31474/2415-7902-2023-1-53-62

**Дмитрієва О.А., Гуськова В.Г.**

# ПАРАЛЕЛЬНЕ ВИЗНАЧЕННЯ СПЕКТРУ СИМЕТРИЧНИХ ТЕПЛИЦЕВИХ МАТРИЦЬ З ПЕРЕТВОРЕННЯМИ ЛЕВІНСОНА-ДАРБІНА

*У роботі досліджено сучасні підходи до математичного моделювання випадкових полів із застосуванням кореляційних матриць надвисоких розмірностей. Розглянуто прийоми побудови сурогатних моделей, орієнтованих на зменшення високої розмірності стохастичних вхідних просторів. Проведено порівняльний аналіз сучасних числових методів пошуку власних чисел заповнених матриць з оцінюванням можливостей розпаралелювання процесу обчислень. Для визначення діапазону спектру розподілу власних чисел симетричних теплицевих матриць і подальшої локалізації власних чисел запропоновано використання кіл Гершгоріна. Обґрунтовано використання паралельної процедури відокремлення і уточнення всіх власних чисел матриці з застосуванням пріоритетного пошуку найменшого(-ших), найбільшого(-ших) власних чисел. Розроблено програмний застосунок відокремлення і уточнення всіх власних чисел симетричних теплицевих заповнених матриць, що утворюються при математичному моделюванні випадкових полів. В якості тестових матриць в роботі застосовувалося генерування випадкових векторів довільних розмірностей з подальшим формуванням на таких векторах симетричних теплицевих матриць. Дослідження проводилися як для послідовних так і для паралельних реалізацій обчислювальних процесів. При тестуванні основні завдання було спрямовано на проведення порівняльного аналізу точності отриманих розв'язань, оцінювання коефіцієнту відношення загальної кількості завдань розбиття до таких, які приводили до отримання власного числа. Запропонований програмний продукт може використовуватися у числових симуляторах при реалізації математичних моделей потоків підземних вод та фізико-хімічних процесів розчинення речовин у глибоких водоносних горизонтах.*

***Ключові слова: спектр, власне число, симетричні теплицеві матриці, паралельні обчислення, перетворення Левінсона-Дарбіна, алгоритм Тренча, випадкове поле, висока розмірність***

**Вступ.** При моделюванні випадкових процесів з необхідними характеристиками, які описують поведінку різних об'єктів, виникає потреба у генерації випадкових полів [1]. Одним із основних завдань стохастичного моделювання є ефективне подання невизначеності у випадкових полях [2-6]. Такі невизначеності є визначальними при обробці сигналів, оцінюванні властивостей матеріалів, поведінки будівельних конструкцій та споруд, водоносних горизонтів та оптичних ліній зв'язку з випадковими спотвореннями, при дослідженні фізико-хімічних процесів у пористих середовищах, під час аналізу соціальних та економічних процесів.

Одним із сучасних напрямків використання випадкових полів є числові симулятори для створення та реалізації моделей потоків підземних вод та фізико-хімічних процесів розчинення речовин у глибоких водоносних горизонтах [4]. Складність цих моделей, у яких, зазвичай, використовуються випадкові багатовимірні просторові поля, пов'язані з реалізацією дуже ресурсоємних як за часом, так і за обсягами пам'яті чисельних підходів. Саме тому відзначається зростаючий інтерес до розробки більш швидких та надійних статистичних апроксимацій для дорогих у обчислювальному відношенні симуляторів.

Так в [5] випадкові поля генеруються при створенні моделей потоку підземних вод, включаючи перенесення забруднюючих речовин. В [6] промодельовано процеси геологічного зберігання $CO_2$ у глибоких солоних водоносних горизонтах, що є потенційним способом обмеження викидів парникових газів в атмосферу при збереженні використання палива. При чисельній реалізації таких типів стохастичних процесів останнім часом активно почали використовувати сурогатні моделі, які, будучи орієнтованими на скорочення дуже високої розмірності вхідних і вихідних просторів в емуляторах гауссівських процесів, тим не менш, забезпечують збереження якісних особливостей вихідних моделей.

**Об’єкт дослідження в роботі** – процеси розпаралелювання обчислень власних значень симетричних теплицевих матриць, які утворюються при моделюванні стохастичних полів.

**Предмет дослідження в роботі** – паралельні чисельні методи відокремлення і уточнення власних чисел позитивно визначених симетричних теплицевих матриць великої розмірності.

**Мета роботи** спрямована на розробку і ефективну паралельну реалізацію чисельних методів визначення спектру симетричних теплицевих матриць із застосуванням алгоритмів Тренча та перетворень Левінсона-Дарбіна.

**Завдання роботи** полягають у дослідженні сучасних підходів до математичного моделювання випадкових полів із застосуванням кореляційних матриць надвисоких розмірностей; проведенні порівняльного аналізу числових методів пошуку власних чисел позитивно визначених, симетричних теплицевих заповнених матриць; визначенні за допомогою кіл Гершгоріна відрізку, якому належать всі власні числа теплицевої матриці; побудові паралельної процедури відокремлення і уточнення всіх власних чисел матриці з застосуванням пріоритетного пошуку найменшого(-ших), найбільшого(-ших) власних чисел; програмній реалізації і тестуванні розроблених методів.

**Методи досліджень в роботі** базувалися на основних положеннях обчислювальної математики із залученням апарату лінійної алгебри та теорії матричних обчислень. Аналіз предметної області здійснювався із застосуванням основних підходів теорії ймовірностей і математичної статистики, теорії інтегральних рівнянь. При математичному моделюванні для оцінювання алгоритмічної складності і трудомісткості реалізації використовувався апарат теорії алгоритмів і теорії обчислювальних систем. Програмна реалізація, тестування і візуалізація отриманих результатів здійснювалися із залученням сучасних обчислювальних технологій.

**1. Оцінка сучасного стану порушеної проблеми.** При побудові математичних моделей стохастичних процесів виникає необхідність наближених обчислень власних чисел та векторів однорідного інтегрального оператора Фредгольма другого роду, ядром якого є задана кореляційна функція процесу, що моделюється [3]. При цьому збільшення розмірності кореляційної матриці призводить до значного зростання обчислювальної складності завдання на власні значення, оскільки, крім високої розмірності, матриця є заповненою. У той же час утворена матриця є позитивно визначеною, симетричною та теплицевою, що, безумовно, необхідно враховувати у подальших дослідженнях. При цьому зрозуміло, що через високі розмірності кореляційних матриць знаходження власних значень аналітичними методами є неможливим, тому орієнтуються на чисельні методи розв’язання або методи розкладання. Незважаючи на наявність величезної кількості робіт, присвячених проблематиці визначення власних чисел, обліку специфіки видів та розмірностей матриць, а також спрямованості пошуку (найбільші, найменші власні числа, обмежена множина, амплітуда спектру тощо) питання розробки ефективних алгоритмів, у тому числі таких, що допускають паралельну реалізацію, залишаються актуальними та затребуваними.

**2. Дослідження існуючих підходів до вирішення порушеної проблеми.** Одним з основних методів наближених обчислень власних чисел і векторів кореляційної матриці високої розмірності є швидке перетворення Фур'є [7], яке забезпечує розкладання реальної функції на нескінченну лінійну комбінацію ортогональних, зазвичай, тригонометричних, базисних функцій. Як варіант поширення аналізу Фур'є від детермінованих функцій до випадкових процесів у роботах [8-10] розглядають декомпозицію Карунена-Лоева, яка є розкладанням процесу на ряд ортогональних функцій, а процес знаходження коефіцієнтів, за аналогією зі швидким перетворенням Фур'є, спрямований на мінімізацію середньоквадратичної помилки. Однак ефективність використання розкладання Карунена-Лоева сильно залежить від кількості випадкових величин, необхідних у усіченому поданні розширення для досягнення заданої точності, є дуже дорогим для завдань великої розмірності з малою кореляційною довжиною [8], що зумовлює застосування таких підходів переважно до завдань, визначених у низькорозмірних вхідних просторах [9]. Саме тому протягом останнього десятиліття було розроблено кілька методів представлення багатовимірних моделей для зменшення високої розмірності стохастичних вхідних просторів [4]. Такі підходи дозволяють розбити вихідну багатовимірну модель на набір підмоделей нижчої розмірності, що призводить до менших обчислювальних зусиль при реалізації підмоделей, які опрацьовують будь-яким чисельним методом(-ами). Одним із кращих методів для використання у багатовимірних моделях є метод стохастичної колокації [6]. Проте для деяких моделей кількість стохастичних ступенів свободи, необхідних для отримання прийнятних результатів, як і раніше, є надто значною. Однією з альтернатив подолання проблеми високої розмірності є розробка підходів, спрямованих на розпаралелювання обчислювального процесу.

Виходячи з величезної різноманітності розв'язуваних проблем, у яких висуваються ті чи інші обмеження, пов'язані з визначенням спектра власних чисел, багато авторів пропонують деякі модифікації відомих алгоритмів [10-13], нові підходи до організації паралельних обчислювальних процесів, оскільки проблема пошуку власних чисел для деяких матриць може виникати не тільки як відокремлене завдання лінійної алгебри, а й як похідне завдання під час аналізу стійкості чисельних схем, розв'язання нормальних диференційних рівнянь, передавальних функцій систем управління тощо.

Відомо [11], що немає прямих методів, використання яких призводило б до обчислення спектра довільної матриці за кінцеве число операцій, проте це завдання успішно реалізують ітераційні методи, засновані, наприклад, на QR-розкладанні [12-13]. Однак, у разі наявності деяких особливостей матриць, які можуть бути успішно використані для пошуку спектра, можна запропонувати ефективніші методи, ніж QR-алгоритм.

Так у роботі [14] для чисельного моделювання вібраційних процесів запропоновано модифікацію алгоритму Чебишева-Девідсона. Автори заявляють про скорочення часу обчислень з використанням запропонованої модифікації, а також про більшу стабільність, але при цьому йдеться про сильно розріджені стрічкові матриці, а основне завдання полягає у обчисленні кількох найменших власних значень та відповідних власних векторів. У роботах [15-16] розглядаються питання спектральної структури позитивно визначених ермітових теплицевих матриць з використанням перетворень Левінсона-Дарбіна [16], але так само, як і в попередній групі робіт, авторів цікавлять лише проблеми знаходження найменших власних значень.

В [15] було запропоновано ітераційну процедуру обчислення власних значень теплицевих матриць, яка при незначних модифікаціях допускає ефективну паралельну реалізацію. Також питанням паралельної реалізації присвячено роботу [17], в якій розглядається підхід, заснований на факторному зрушенні з використанням алгоритму Левінсона-Дарбіна [11] для організації паралельної процедури знаходження власних чисел теплицевих матриць. В роботі [16] також був використаний алгоритм Левінсона-Дарбіна і метод Ньютона вже для обчислення найменшого власного значення симетричної позитивно визначеної тепличної матриці. В той же час пропонований в цій роботі підхід дозволяє паралельно визначити будь-яке власне значення або, взагалі, всі.

**3. Розробка та обґрунтування математичної моделі.** При моделюванні стохастичного поля утворюється кореляційна симетрична теплицева матриця $R_n$ порядку n×n, яка має наступний вигляд

$$R_n = \begin{pmatrix} \rho_0 & \rho_1 & \rho_2 & \cdots & \rho_{n-2} & \rho_{n-1} \\ \rho_1 & \rho_0 & \rho_1 & \cdots & \rho_{n-3} & \rho_{n-2} \\ \rho_2 & \rho_1 & \rho_0 & \cdots & \rho_{n-4} & \rho_{n-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \rho_{n-2} & \rho_{n-3} & \cdots & \cdots & \rho_0 & \rho_1 \\ \rho_{n-1} & \rho_{n-2} & \cdots & \cdots & \rho_1 & \rho_0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Основною метою дослідження є визначення спектру матриці (1), яка, з одного боку, має дуже високу розмірність, тобто $n \to \infty$, а з іншого боку, така матриця має регулярну структуру, яка однозначно задається вектором з елементами $\{\rho_k\}, 0 \le k, \le n-1$ , відтоді сама матриця може бути утворена з елементів вектору у такий спосіб

$$R_n = \{\rho_{|k-l|}\},\ 0 \le k, l \le n-1.$$

Метод Тренча полягає у знаходженні коренів раціональної функції $q_n(\lambda)$. При зроблених припущеннях щодо матриці $R_n$, це завдання рівнозначне завданню знаходження власних значень зсувних матриць $R_m - \lambda I_m$. Для знаходження власних значень матриці $R_n$ можна використовувати модифікований алгоритм Левінсона-Дарбіна [11], еквівалентний в даному випадку побудові $LDL^T$ розкладання для матриці $R_m - \lambda I_m$. Процедура пошуку власних чисел теплицевої матриці у відповідності до [15] може бути зведеною до пошуку нулів раціональної функції

$$q_m(\lambda) = \frac{p_m(\lambda)}{p_{m-1}(\lambda)}, \quad (2)$$

де

$$p_m(\lambda) = det[R_m - \lambda I_m].$$

Такий підхід дозволяє визначити будь-яке власне значення $R_n$, яке також не є власним значенням жодної з вкладених підматриць $R_1, R_2, \dots, R_{n-1}$.

Побудова процедури обчислювального процесу відбувається у наступній послідовності. Спочатку відбувається ініціалізація стартових значень

$$q_1(\lambda) = \rho_0 - \lambda, \quad z_{1,1}(\lambda) = \frac{\rho_1}{q_1(\lambda)},$$

далі рекурсивно визначається (нарощується) раціональна функція $q_n(\lambda)$ у відповідності до співвідношень

$$q_m(\lambda) = \left(1 - z_{m-1,m-1}^2(\lambda)\right) q_{m-1}(\lambda),$$

$$z_{m,m}(\lambda) = q_m^{-1}(\lambda)\left(\rho_m - \sum_{j=1}^{m-1} \rho_{m-1}\, z_{j,m-1}(\lambda)\right),$$

$$z_{j,m}(\lambda) = z_{j,m-1}(\lambda) - z_{m,m}(\lambda) z_{m-j,m-1}(\lambda), 1 \le j \le m-1.$$

Схематична ілюстрація роботи алгоритму знаходження власних чисел теплицевої матриці $R_n$ наведена на рис. 1. Спочатку з використанням кіл Гершгоріна визначається амплітуда розкиду власних значень. Для запобігання точного співпадіння власного значення і початкових границь розбиття в модель додаються випадкові збурення, що незначно розширюють визначені границі. Далі запускаються процедури розбиття отриманого відрізку з генерацією множини завдань, кожне з яких має на меті відокремлення «свого» власного значення. Як тільки власне число стає ізольованим, запускається процедура уточнення (стискання) інтервалу ізоляції до досягнення заданої точності. Такі процедури стискання можуть реалізовуватися незалежно, а кількість обчислювальних процесів уточнення регламентується розмірністю початкової матриці і числом наявних процесорів. В роботі процедура уточнення виконувалася з використанням методу бієкції, при тому, що можна було б застосувати методи, які характеризуються кращими показниками збіжності ітераційного процесу. В той же час, враховуючи специфіку матриць, для яких виконується пошук власних чисел, слід зазначити, що дуже малі власні значення у такий спосіб обчислюються точніше, ніж в конкуруючих алгоритмах.

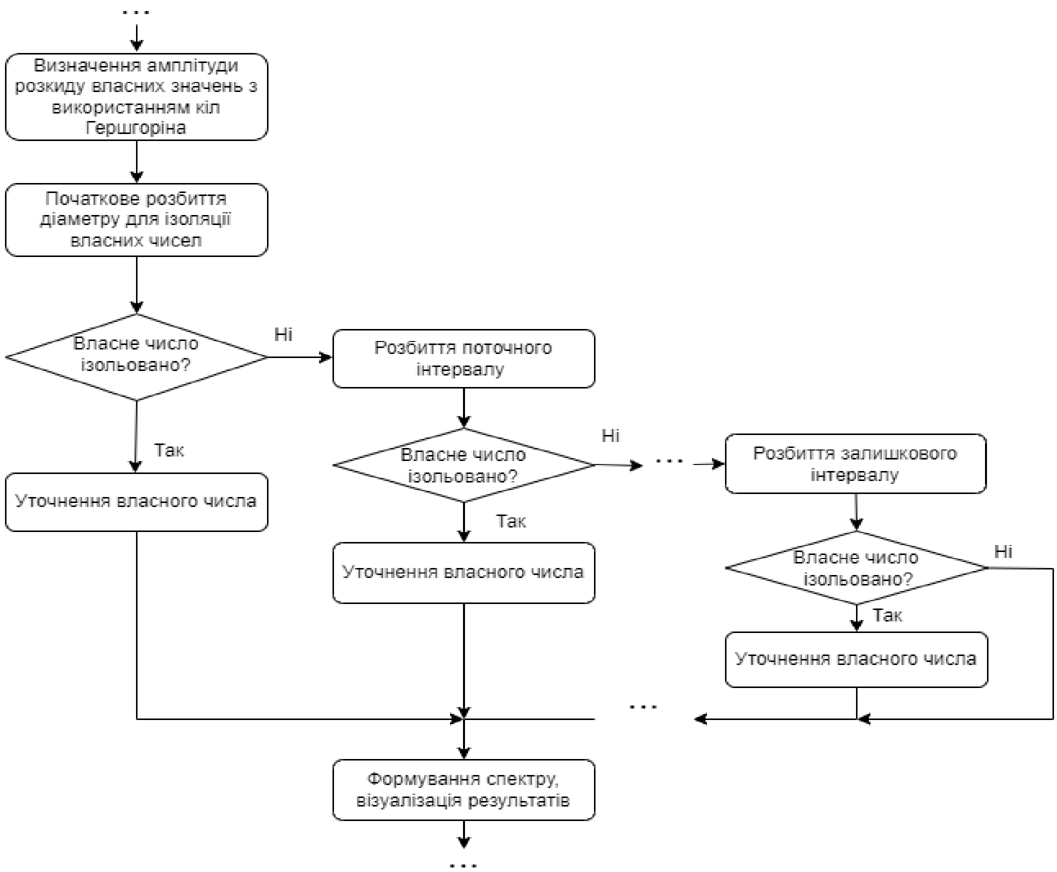
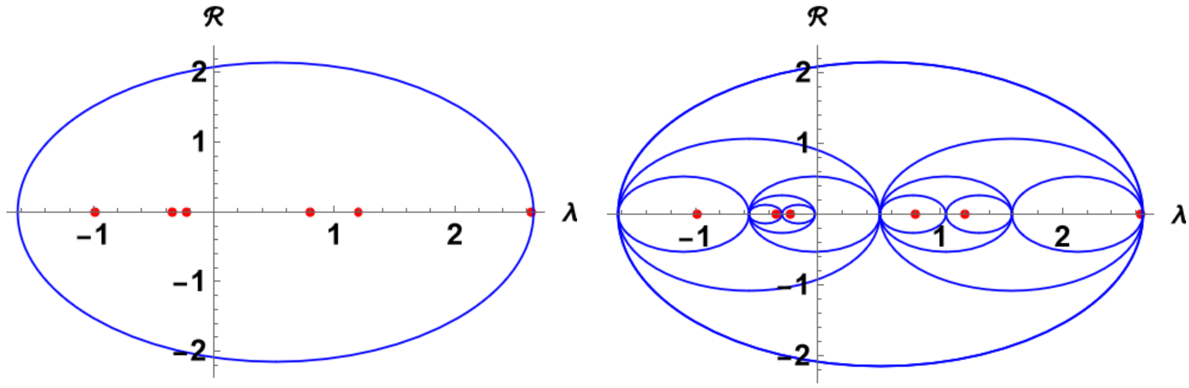



**Рисунок 1** – Схема розпаралелювання процедури ізоляції і уточнення власних чисел

На основі запропонованої моделі було розроблено програмну систему, яка може працювати як в послідовному варіанті, так і з орієнтацією на паралельну архітектуру. Причому зрозуміло, що розподілення обчислень відбувається лише після визначення амплітуди розкиду всіх власних значень. Основною перевагою розробленої програмної реалізації є можливість керування порядком і кількістю визначення власних чисел з огляду на проблематику поставленого завдання. Якщо завдання спрямовані на пошук найбільшого (найбільших) або найменшого (найменших) власних чисел, у програмному коді передбачена можливість відповідних налаштувань. В противному випадку ніяких втручань у послідовність обчислень не відбувається.

**4. Тестова реалізація процедури визначення власних чисел теплицевих матриць.** В якості тестових матриць в роботі застосовувалося генерування випадкових векторів довільних розмірностей з подальшим формуванням на таких векторах симетричних теплицевих матриць. Дослідження проводилися як для послідовних так і для паралельних реалізацій обчислювальних процесів. При тестуванні основний упор здійснювався на проведення порівняльного аналізу точності отриманих розв'язків. Також оцінювалося відношення загальної кількості згенерованих завдань до результативних, таких, які приводили до ізолювання власного числа на інтервалі. Разом з тим слід зазначити, що оцінки отримувалися для матриць, які генерувалися випадково, отже, з одного боку порівняння кожного разу проводилося на неспівпадаючих матрицях, а з іншого боку, велика кількість проведених експериментів надає змогу стверджувати, що на всі типи показників, які досліджувалися, конкретні значення елементів матриці не впливають. Мова йде лише про впливовість розмірностей матриць і заданої точності обчислень. На рис. 2 наведені схеми утворення кіл Гершгоріна для випадково згенерованої симетричної теплицевої матриці, n=6. На рис. 2а) наведено результат початкового визначення границь інтервалу дійсної вісі, який містить всі власні числа згенерованої матриці. Після застосування процедур ізоляції і уточнення кожного власного числа для всієї множини, утворюється остаточний розподіл кіл Гершгоріна з відокремленими власними числами (рис. 2б).



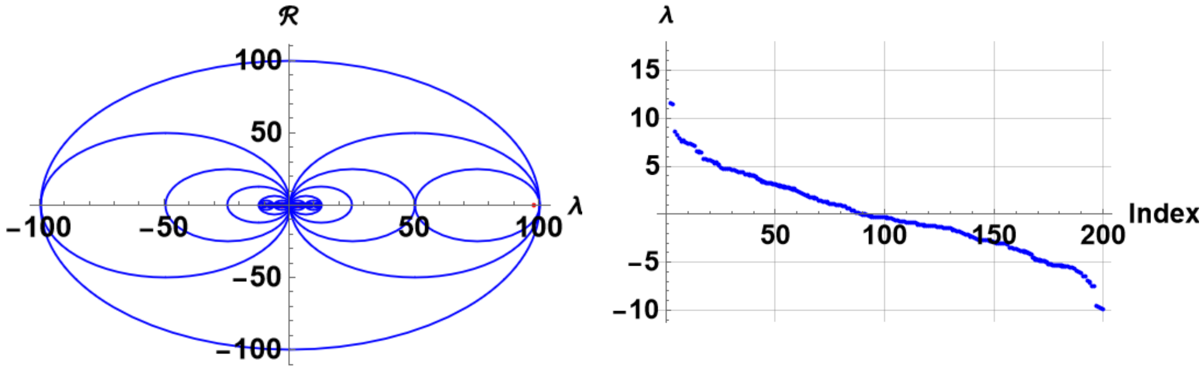

а) коло Гершгоріна для визначення амплітуди відрізку, що містить всі власні числа матриці

б) остаточний розподіл кіл Гершгоріна з відокремленими власними числами

**Рисунок 2** – Кола Гершгоріна для випадково згенерованої симетричної теплицевої матриці, n=6

На рис. 3 наведено результати комп'ютерних експериментів, які проводилися з випадково згенерованою симетричною теплицевою матрицею розмірності n=200. Показано остаточний розподіл кіл Гершгоріна з відокремленими власними числами (рис. 3а) та розподіл всіх власних чисел тестової матриці (рис. 3б).

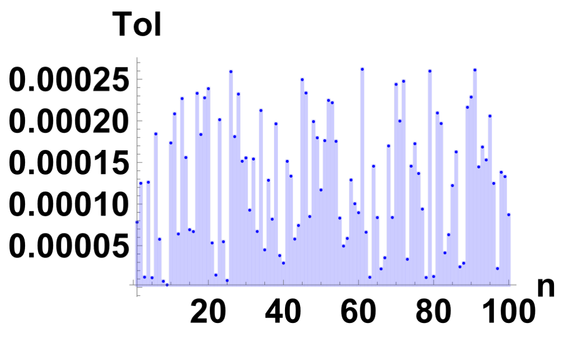
Розроблена програмна система дозволяє також забезпечувати задану точність обчислень $\epsilon$ шляхом стискання відповідного інтервалу ізоляції $[\alpha_i, \beta_i]$ для кожного $i$-го $(i = 1,2, \dots, n)$ власного значення до амплітуди $(\beta_i - \alpha_i)/2 < \epsilon$. На рис. 4 показано результати розбіжностей при обчислень власних значень випадково згенерованої симетричної теплицевої матриці з заданими порядками точності $\epsilon = 10^{-3}$ (рис. 4 а) і $\epsilon = 10^{-6}$ (рис. 4 б).



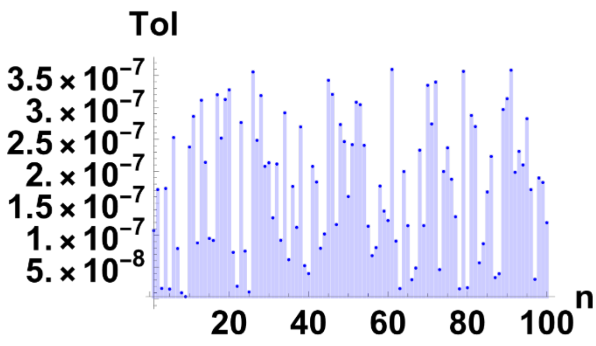

а) остаточний розподіл кіл Гершгоріна з відокремленими власними числами, n=200

б) розподіл власних чисел симетричної теплицевої матриці, n=200

**Рисунок 3** – Кола Гершгоріна і розподіл власних чисел для випадково згенерованої симетричної теплицевої матриці, n=200

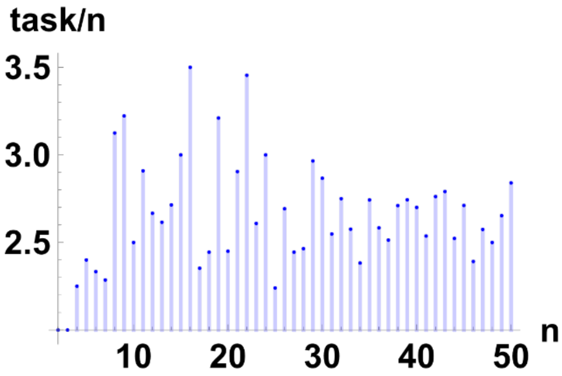



а) $\epsilon = 10^{-3}$

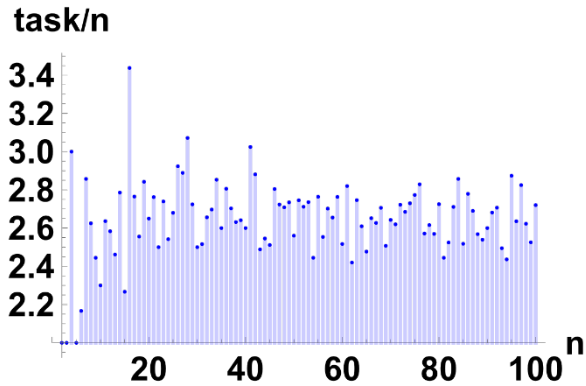



б) $\epsilon = 10^{-6}$

**Рисунок 4** – Абсолютні величини розбіжностей всіх власних чисел для випадково згенерованої симетричної теплицевої матриці, n=100




n=2,3,…,50




n=2,3,…,100

**Рисунок 5** – Усереднені показники відношень загальної кількості згенерованих завдань до результативних при визначенні власних чисел для випадково згенерованих симетричних теплицевих матриць

Результативність запропонованого підходу також перевірялась із застосуванням критерію, що регламентує відношення загальної кількості завдань розбиття до результативних, таких, які приводили до отримання власного числа. Можна сказати, що цей показник залишався сталим для будь-яких розмірностей матриць (рис. 5 а),б)). Тут слід сказати, що, оскільки всі експерименти були неповторюваними через застосування генераторів випадкових чисел для теплицевих матриць довільних розмірностей, то, зрозуміло, що навіть для матриць співпадаючих розмірностей, цей показник може відрізнятися.

**Висновки.** Результати досліджень, наведені у статті, орієнтовано на застосування у математичних моделях, які спрямовані на опрацювання випадкових багатовимірних просторових полів, що пов'язано з реалізацією дуже ресурсоємних як за часом, так і за ресурсами пам'яті чисельних підходів. У роботі досліджено сучасні підходи до математичного моделювання випадкових полів із застосуванням кореляційних матриць надвисоких розмірностей. Розглянуто прийоми побудови сурогатних моделей, орієнтованих на зменшення високої розмірності стохастичних вхідних просторів. Проведено порівняльний аналіз сучасних числових методів пошуку власних чисел заповнених матриць з оцінюванням можливостей розпаралелювання процесу обчислень. Для визначення діапазону спектру розподілу власних чисел симетричних теплицевих матриць і подальшої локалізації власних чисел запропоновано використання кіл Гершгоріна. Обґрунтовано використання паралельної процедури відокремлення і уточнення всіх власних чисел матриці з застосуванням пріоритетного пошуку найменшого(-ших), найбільшого(-ших) власних чисел. Розроблено програмний застосунок відокремлення і уточнення всіх власних чисел симетричних теплицевих заповнених матриць, що утворюються при математичному моделюванні випадкових полів. В якості тестових матриць в роботі застосовувалося генерування випадкових векторів довільних розмірностей з подальшим формуванням на таких векторах симетричних теплицевих матриць. Дослідження проводилися як для послідовних так і для паралельних реалізацій обчислювальних процесів. При тестуванні основні завдання було спрямовано на проведення порівняльного аналізу точності отриманих розв’язань, оцінювання коефіцієнту відношення загальної кількості завдань розбиття до таких, які приводили до отримання власного числа.

**Наукова новизна** полягає в розробці модифікації методу Тренча з використанням перетворень Левінсона-Дарбіна, які орієнтовані на організацію паралельної процедури обчислення власних чисел позитивно визначених симетричних теплицевих матриць великої розмірності.

**Практичне значення роботи** полягає у створені програмного застосунку відокремлення і уточнення всіх власних чисел симетричних теплицевих заповнених матриць, що утворюються при математичному моделюванні випадкових полів. Розроблений програмний застосунок дозволяє проводити паралельні обчислення для визначення власних чисел з застосуванням процедури пріоритетного пошуку найменшого(-ших), найбільшого(-ших) власних чисел. Запропонований програмний продукт може використовуватися у числових симуляторах при реалізації математичних моделей потоків підземних вод та фізико-хімічних процесів розчинення речовин у глибоких водоносних горизонтах.

## Список літератури


1. Liu Y. Advances in gaussian random field generation/ Y. Liu, J. Li, S. Sun, B. Yu// Computational Geosciences. –2019, Vol. 23(5). P. 1011-1047.
2. Crevillen-Garcia D. Gaussian process modelling for uncertainty quantification in convectively-enhanced dissolution processes in porous media/ D. Crevillen-Garcia, R.D. Wilkinson, A.A. Shah// Advances in Water Resources. 2017, Vol. 99. P. 1–14.
3. Efimov A. Modeling of random processes based on Karhunen-Loeve decomposition/ A. Efimov// Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics. 2022, Vol. 22(4). P. 779-784.
4. Eftekhari A. High-Dimensional Dynamic Stochastic Model Representation/ A. Eftekhari, S. Scheidegger. 2022. P. 1-26, https://doi.org/10.48550/arXiv.2202.06555
5. D. Crevillen-Garcia. Surrogate modelling for the prediction of spatial fields based on simultaneous dimensionality reduction of high-dimensional input/output spaces/ D. Crevillen-Garcia// Royal Society Open Science. – 2018, Vol. 5(4). P. 1–16, https://doi.org/10.1098/rsos.171933.
6. Opportunities and challenges in CO2 geologic utilization and storage/[L. Zhang, W. Nowak, S. Oladyshkin, Y. Wang, J. Cai]// Advances in Geo-Energy Research. 2023, Vol. 8(3). P. 141–145.
7. Fritz J. Application of FFT-based algorithms for large-scale universal kriging problems/ J. Fritz, I. Neuweiler, W. Nowak// Mathematical Geosciences. 2009, Vol. 41(5). P. 509–533.
8. Research on the Karhunen–Loève Transform Method and Its Application to Hull Form Optimization/ [H. Chang, C. Wang, Z. Liu, B. Feng, C. Zhan, X. Cheng]// Journal of Marine Science and Engineering. 2023, Vol. 11(1). https://doi.org/10.3390/jmse11010230
9. Pranesh S. Faster computation of the Karhunen–Loève expansion using its domain independence property/ S. Pranesh, D. Ghosh // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2014, Vol. 285. https://doi.org/10.1016/j.cma.2014.10.053.
10. Wang L. Karhunen-Loeve expansions and their applications/ L. Wang// PhD thesis. 2008, London School of Economics and Political, 292 p. http://etheses.lse.ac.uk/id/eprint/2950
11. Demmel J. Applied numerical linear algebra/ J. Demmel. 1997, SIAM, Philadelphia. 416 p.
12. Unfried J. Fast Time-Evolution of Matrix-Product States using the QR decomposition/ J. Unfried, J. Hauschild, F. Pollmann // Quantum Physics. 2022. P. 1-6. https://doi.org/10.48550/arXiv.2212.09782

13. Ni X. A randomized algorithm for the QR decomposition-based approximate SVD/ X. Ni, A.B. Xu// Numerical Analysis. 2023. https://doi.org/10.48550/arXiv.2305.11450
14. A New Subspace Iteration Algorithm for Solving Generalized Eigenvalue Problems/ [B. Wang, H. An, H. Xie, Z. Mo. 2023. P. 1-17. https://arxiv.org/pdf/2212.14520.pdf
15. Trench W. Numerical solution of the eigenvalue problem for Hermitian Toeplitz matrices/ W. Trench// SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. – 1989, Vol. 10(2). P. 135-146.
16. Cybenko G. The numerical stability of the Levinson-Durbin algorithm for Toeplitz systems of equations/ G. Cybenko// Siam Journal on Scientific and Statistical Computing. – 1980, Vol. 1(3). P. 303-319.
17. Noor F. Using MPI on PC Cluster to Compute Eigenvalues of Hermitian Toeplitz Matrices/ F. Noor, S. Misbahuddin// Algorithms and Architectures for Parallel Processing. 2010, Springer, Berlin. 323 p.

## References

1. Liu, Y., Li, J., Sun, S. and Yu, B. (2019) Advances in gaussian random field generation. Computational Geosciences. Vol. 23(5), 1011-1047.
2. Crevillen-Garcia, D., Wilkinson, R.D. and Shah, A.A. (2017) Gaussian process modelling for uncertainty quantification in convectively-enhanced dissolution processes in porous media. Advances in Water Resources. Vol. 99, 1–14.
3. Efimov, A. (2022) Modeling of random processes based on Karhunen-Loeve decomposition. Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics. Vol. 22(4), 779-784.
4. Eftekhari, A. and Scheidegger, S. (2022) High-Dimensional Dynamic Stochastic Model Representation. https://doi.org/10.48550/arXiv.2202.06555
5. Crevillen-Garcia, D. (2018) Surrogate modelling for the prediction of spatial fields based on simultaneous dimensionality reduction of high-dimensional input/output spaces. Royal Society Open Science. Vol. 5(4), P.1–16. https://doi.org/10.1098/rsos.171933
6. Zhang, L., Nowak, W., Oladyshkin, S., Wang, Y. and Cai, J. (2023) Opportunities and challenges in CO2 geologic utilization and storage. Advances in Geo-Energy Research. Vol. 8(3), 141–145.
7. Fritz, J., Neuweiler, I. and Nowak, W. (2009) Application of FFT-based algorithms for large-scale universal kriging problems. Mathematical Geosciences. Vol. 41(5), 509–533.
8. Chang, H., Wang, C., Liu, Z., Feng, B., Zhan, C. and Cheng, X. (2023) Research on the Karhunen–Loève Transform Method and Its Application to Hull Form Optimization. Journal of Marine Science and Engineering. Vol. 11(1). https://doi.org/10.3390/jmse11010230
9. Pranesh, S. and Ghosh, D. (2014) Faster computation of the Karhunen–Loève expansion using its domain independence property. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. Vol. 285. https://doi.org/10.1016/j.cma.2014.10.053
10. Wang, L. (2008) Karhunen-Loeve expansions and their applications. PhD thesis. London School of Economics and Political, 292. http://etheses.lse.ac.uk/id/eprint/2950
11. Demmel, J. (1997) Applied numerical linear algebra. SIAM, Philadelphia. 416.
12. Unfried, J., Hauschild, J. and Pollmann, F. (2022) Fast Time-Evolution of Matrix-Product States using the QR decomposition. Quantum Physics. https://doi.org/10.48550/arXiv.2212.09782
13. Ni, X. and Xu, A.-B. (2023) A randomized algorithm for the QR decomposition-based approximate SVD. Numerical Analysis. https://doi.org/10.48550/arXiv.2305.11450
14. Wang, B., An, H., Xie, H. and Mo, Z. (2023) A New Subspace Iteration Algorithm for Solving Generalized Eigenvalue Problems. https://arxiv.org/pdf/2212.14520.pdf
15. Trench, W. (1989) Numerical solution of the eigenvalue problem for Hermitian Toeplitz matrices. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. Vol. 10(2), 135-146.
16. Cybenko, G. (1980) The numerical stability of the Levinson-Durbin algorithm for Toeplitz systems of equations. Siam Journal on Scientific and Statistical Computing. Vol. 1(3), 303-319.
17. Noor, F. and Misbahuddin S. (2010) Using MPI on PC Cluster to Compute Eigenvalues of Hermitian Toeplitz Matrices. Algorithms and Architectures for Parallel Processing. 2010, Springer, Berlin. 323.

*Надійшла до редакції 30.05.2023*

**O. Dmytriieva, V. Huskova**

**PARALLEL DETERMINATION OF THE SPECTRUM OF SYMMETRIC TOEPLITZ MATRIXES WITH LEVINSON-DARBIN TRANSFORMATIONS**

***Purpose.*** *The paper investigates modern approaches to mathematical modeling of random fields using correlation matrices of superhigh dimensions.*

***Methodology.*** *Techniques for constructing surrogate models focused on reducing the high dimension of stochastic input spaces have been considered. A comparative analysis of modern numerical methods for searching for eigenvalues of filled matrices has been carried out with an assessment of the possibilities of parallelizing the computation process. To determine the range of the distribution spectrum of eigenvalues of symmetric Toeplitz matrices and subsequent localization of eigenvalues, the use of Gershgorin circles has been proposed. As test matrices, we used the generation of random vectors of arbitrary dimensions, followed by the formation of symmetric Toeplitz matrices on such vectors.*

***Results.*** *The studies have been carried out both for serial and parallel implementations of computational processes. When testing, the main tasks were aimed at conducting a comparative analysis of the accuracy of the solutions obtained, at estimating the coefficient of the ratio of the total number of partitioning problems to those that led to obtaining an eigenvalue.*

***Scientific novelty.*** *The use of a parallel procedure for separating and refining all matrix eigenvalues using a priority search for the smallest(s), largest(s) of eigenvalues has been justified. A software application has been developed for separating and refining all eigenvalues of symmetric Toeplitz filled matrices, which are formed in the course of mathematical modeling of random fields.*

***Practical significance.*** *The proposed software product can be used in numerical simulators for the implementation of mathematical models of groundwater flows and physicochemical processes of dissolution in deep aquifers.*

***Keywords: spectrum, eigenvalue, symmetric Toeplitz matrices, parallel computing, Levinson-Darbin transform, Trench algorithm, random field, high dimensionality.***

## Відомості про авторів

**Дмитрієва О.А.**[1,2], докт. техн. наук, проф.,

[1]проф. кафедри математичних методів системного аналізу Національного технічного університету України «КПІ ім. І. Сікорського», e-mail: olga.dmytriyeva@lll.kpi.ua

[2]проф. Інституту моделювання водно-екологічних систем університету Штутгарта, Німеччина, e-mail: olga.dmytriyeva@iws.uni-stuttgart.de

**Гуськова В.Г.**, PhD, ст. викл. кафедри математичних методів системного аналізу Національного технічного університету України «КПІ ім. І. Сікорського», e-mail: guskovavera2009@gmail.com

**Dmytriieva O.**[1,2]**,** Doctor of Technical Sciences, Professor,

[1]Prof. of the Department of Mathematical Methods in System Analysis, National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”, e-mail: olga.dmytriyeva@lll.kpi.ua,

[2]Prof. of the Institute for modelling hydraulic and environmental systems, University of Stuttgart, e-mail: olga.dmytriyeva@iws.uni-stuttgart.de.

**Huskova V.**, PhD Tech., Senior Lecturer of the Department of Mathematical Methods in System Analysis, National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”, e-mail: guskovavera2009@gmail.com