

ФОРМА 1. ОТЧЕТА ПО ПРОЕКТУ РФФ

Алгебраические методы редукции и параметризации нелинейных моделей ЗА 2020 ГОД

1.1 Заявленный в проекте план работы научного исследования на отчетный период

1. *Разработка и обоснование полностью алгебраического метода редукции моделей; применение метода редукции моделей к решению параметрических интегральных уравнений. Изучение минимальных описаний для линейных пространств, допускающих сходимость метода Ньютона без деградации точности в алгоритме DEIM.*

Предполагается разработать теоретически обоснованный алгебраический метод редукции нелинейных моделей. Для этого необходимо изучить динамическое поведение метода Ньютона. А именно, требуется получить минимально возможное описание линейного пространства, для которого не происходит деградации точности в редуцированном методе Ньютона. Предполагается применить разработанный алгоритм редукции модели для решения параметрических интегральных уравнений.

2. *Алгоритмы восполнения тензоров на основе малоранговых матричных и тензорных приближений.*

Для задачи восполнения тензоров малых рангов предлагается изучение возможности использования итерационных методов. Действительно, многие данные естественным образом представляются в виде тензоров. Как правило, данные имеют внутреннюю структуру. Наличие внутренней структуры соответствует в случае тензоризованных данных возможности приближать их тензорами малого тензорного ранга. Задача восполнения тензорных данных по небольшому числу элементов возникает в самых различных приложениях от рекомендательных систем и теории связи, до медицины и социальных наук.

Однако даже на самый первый взгляд задача тензорного восполнения представляется существенно более сложной, чем задача матричного восполнения. Во-первых, в случае тензоров нет однозначной трактовки наилучшего приближения, поскольку не существует однозначного определенного тензорного ранга. Сделать наилучший возможный выбор из всего многообразия тензорных разложений уже представляется нетривиальной задачей. Мы планируем изучить возможность использования в задаче тензорного восполнения так называемое разложения Таккера.

Во-вторых, в случае тензоров большой размерности требуется, чтобы доля заданных элементов, по которым происходит восполнения была существенно меньше, чем для матриц. Однако, если предположить, что вычислительным ядром тензорного метода будет матричный ASVP алгоритм, то это противоречит существующей теории. Более того, необходимо будет изучить распределение элементов на различных тензорных развертках.

3. *Разработка алгоритма поиска разреженного решения для аппроксимаций со сверхбольшим пространством допустимых параметров (Tensorised OMP, Tensorised Orthogonal Match Pursuit).*

Пусть для линейной системы $Ax = b$ с матрицей $A \in \mathbb{R}^{m \times N}$, $N \gg m$, требуется найти разреженное (малопараметрическое) решение. Это типичная ситуация для современных задач редукции нелинейных моделей. Стандартной процедурой поиска разреженного решения является жадный ОМР алгоритм. Однако, если размерность пространства параметров N очень велика, то применение ОМР становится невозможным. Будем дополнительно предполагать, что для некоторого тензорного представления x можно реализовать быструю процедуру решения задачи оптимизации

$$\|b - Ax\|_2 \rightarrow \inf.$$

Это возможно, например, для нелинейных моделей типа Вольтерра с использованием алгоритма ALS. Идея нового подхода построения разреженного приближения, состоит в том, что, анализируя малоранговое тензорное приближение, возможно получать информацию о разреженном решении.

Данный подход был нами экспериментально успешно опробован.

4. *Создание быстрых адаптивных вычислительных процедур в задачах идентификации параметров для нелинейных моделей. Получение достаточных условий их эффективности.*

Как показывает вычислительная практика, поиск оптимальных параметров для моделей высокого порядка (большой степени нелинейности) нельзя осуществлять методом „грубой силы“. Наличие большого количества локальных минимумов не позволяет локально сходящимся методам находить решения приемлемого качества. Необходимо разработать эффективные адаптивные процедуры перехода от простых моделей к более сложным. В этом случае, как можно наблюдать в некоторых численных экспериментах, получающиеся решения с высокой вероятностью находятся в области хорошего решения. В ходе проекта предполагается разработать такие адаптивные процедуры, а также найти достаточные условия на нелинейные модели, для которых эти процедуры являются эффективными.

Как видно из представленных нами результатов, на данный момент для частного, но важного случая

$$g(t) = Up(t), \quad U \in \mathbb{R}^{N \times m}, \quad p: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m \quad (1)$$

нами разработано два различных подхода к построению эффективных редукций задачи

$$y'(t) = -Ay(t) + F(y, t), \quad (2)$$

методами подпространства Крылова. Эффективность первого подхода, использующего асимптотическое расщепление, основана на сведении задачи к ряду однородных задач, решение которых может быть получено вычислением действия матричной экспоненты $\exp(-tA)$ на вектор. Ограничением этого подхода является то, что он разработан специально для функций, хорошо представимых рядом Фурье. Второй предложенный нами подход свободен от этих ограничений. Его недостатком является то, что приходится решать спроецированные системы

$$u'(t) = -H_k u(t) - E_1 p(t), \quad u(0) = 0 \quad (3)$$

с неавтономной правой частью. Поэтому естественно возникает вопрос о сравнении этих двух подходов.

Рассмотренный класс задач (1),(2) является модельной тестовой задачей для перехода к нелинейным задачам общего вида (2) большой размерности и/или зависящих от параметров. Поэтому следующей целью проекта на ближайший год ставится тестирование предложенных подходов на нелинейных тестовых задачах. Предполагаем, что обобщение наших подходов на нелинейные задачи возможно в рамках итераций типа релаксации «формы волны» (waveform relaxation).

Таким образом, в 2020 году предлагается:

1. Для решения задач вида (1),(2) для многих источников сравнить подход, основанный на асимптотическом расщеплении

$$y(t) = \mathfrak{R}(e^{i2\pi\omega_j t} \hat{p}_j) + \exp(-tA)\mathfrak{R}(\hat{p}_j), \quad \hat{p}_j = (A + i2\pi\omega_j I)^{-1} \tilde{p}_j, \quad (4)$$

с подходом на основе блочного подпространства Крылова согласно (3) и $r_k(t) = -R_k u(t) = \hat{U} \hat{p}(t)$, $\hat{U} \in \mathbb{R}^{N \times m}$.

2. Протестировать один, наиболее эффективный из двух вышеуказанных подходов на нелинейной тестовой задаче (2).
3. Разработать численные методы решения параметрических задач динамики вихревых структур на основе крыловских методов редукции с перезапуском.

В 2020 планируется провести анализ эффективности работы алгоритма построения численных решений нестационарных уравнений агрегации и дробления с использованием редуцированного базиса. Мы планируем провести исследование для нескольких классов параметрических задач.

Разработать численные методы решения задач динамики вихревых структур на основе методов редукции нелинейной модели.

Планируется 2-3 доклада на международной конференции и публикация не менее 3 статей в журналах, индексируемых Web of Science или Scopus.

1.2 Заявленные научные результаты на конец отчетного периода

Разработка и обоснование полностью алгебраического метода редукции моделей; применение метода редукции моделей к решению параметрических интегральных уравнений. Изучение минимальных описаний для линейных пространств, допускающих сходимость метода Ньютона без деградации точности в алгоритме DEIM.

Разработка алгоритма восполнения тензоров на основе малоранговых матричных и тензорных приближений.

Разработка алгоритма поиска разреженного решения для аппроксимаций со сверхбольшим пространством допустимых параметров (Tensorised OMP, Tensorised Orthogonal Match Pursuit).

Разработка быстрых адаптивных вычислительных процедур в задачах идентификации параметров для нелинейных моделей. Получение достаточных условий их эффективности.

Для решения задач Коши для многих источников реализовать и всесторонне протестировать два подхода эффективного построения редукций на основе крыловских подпространств. Первый подход основан на асимптотическом расщеплении решения, где выделяется его периодические по времени составляющие. Второй подход основан на использовании блочных подпространств Крылова. Реализовать и протестировать один, наиболее эффективный из двух вышеуказанных подходов на нелинейной тестовой задаче Коши.

В первую очередь, будут исследоваться классы задач с различными значениями показателей α для класса Броуновских ядер агрегации ($C_{i,j} = i^\alpha j^{-\alpha} + i^{-\alpha} j^\alpha$). Также планируется получить сравнение эффективности организации вычислений на основе использования редуцированного базиса с быстрой реализацией явного метода средней точки для решения уравнений Смолуховского, основанной на использовании малоранговых представлений кинетических коэффициентов. Мы планируем провести вычислительные эксперименты для задач с учётом эффекта ударных дроблений частиц в зависимости от значения параметра λ , соответствующего интенсивности разрушения агрегатов при столкновениях. Планируется исследование возможностей использования методов редукции моделей для получения периодических по времени численных решений уравнений агрегации и фрагментации, а также исследование возможности автоматического детектирования циклического поведения решения с использованием малопараметрических представлений.

Исследовать численные методы решения задач динамики вихревых структур на основе методов редукции нелинейной модели.

1.3 Сведения о фактическом выполнении плана работы на год

1.3.1. Разработка и обоснование полностью алгебраического метода редукции моделей; применение метода редукции моделей к решению параметрических интегральных уравнений. Изучение минимальных описаний для линейных пространств, допускающих сходимость метода Ньютона без деградации точности в алгоритме DEIM.

Было проведено изучение минимальных описаний для линейных пространств, допускающих сходимость редуцированного метода Ньютона без деградации точности в алгоритме DEIM. Оказалось, что как теоретическое, так и практическое решение этого вопроса весьма не просто. Можно утверждать, что публикации об успешном практическом применении алгоритма POD-DEIM (в его стандартной форме) связаны лишь со случайным удачным стечением обстоятельств.

Анализ POD-DEIM проводился для двух простых моделей, записанных в виде обыкновенных дифференциальных уравнений с параметрами $c > 0$ и $\alpha, \beta > 0$

$$y = y(x), y^{(2)} - cy - 3y^2 = 0$$

$$y(0) = -\frac{c}{2}, y(1) = -\frac{c}{2 \cosh^2(\frac{\sqrt{c}}{2})}$$

где $c > 0$ - параметр, и

$$y = y(x), y^{(2)} + y + \frac{\alpha^2}{y^3} = 0$$

$$y(0) = \beta, y(\frac{\pi}{2}) = 1.$$

Модели существенно отличаются нелинейными слагаемыми. В первом случае нелинейность полиномиальная, а во втором рациональная. С другой стороны, известные аналитические решения обоих уравнений обладают достаточной гладкостью. Наконец, простота рассмотренных моделей позволяет избежать сложных деталей, неотносящихся к существу POD-DEIM.

Применяя к дифференциальным уравнениям трехточечную разностную схему, были получены системы нелинейных алгебраических уравнений в форме

$$\vec{G}_{\vec{p}}(\vec{x}) = 0, \vec{x} \in \mathbb{R}^N, \quad (5)$$

подходящей для применения алгоритма POD-DEIM (здесь \vec{p} – вектор параметров).

Наиболее общая идея редукции размерности (5) состоит в поиске решений в подпространстве малой размерности r_a с базисом, определяемым столбцами матрицы $V \in \mathbb{R}^{N \times r_a}$. Столбцы V выбираются на основании данных о виде решений уравнения (5) при небольшом числе различных значений параметров \vec{p}

$$\vec{x} \approx V\vec{z}, \vec{z} \in \mathbb{R}^{r_a}.$$

Для того, чтобы сложность поиска «редуцированного» решения не зависела от N , в POD-DEIM используется конструкция интерполяционного проектора P ($\text{rank}(P) \geq r$, $\text{rank}(P) \ll N$)

$$V^T P \vec{G}(V\vec{z}) = 0, \quad P := U(S^T U)^{-1} S^T, \quad S := [\vec{e}_{i_1} \quad \vec{e}_{i_2} \quad \dots \quad \vec{e}_{i_k}].$$

Особенность этой конструкции заключается в использовании лишь очень небольшого количества значений входного вектора (небольшого количества «дорогих вычислений» с нелинейной функцией G).

Базисы V, U в методе POD-DEIM выбираются так, чтобы наилучшим образом (например в смысле фробениусовой нормы) приближать «типичные» векторы $\vec{x}_{\vec{p}}, \vec{F}(\vec{x}_{\vec{p}})$, называемые «снимками».

В стандартном подходе POD-DEIM допускается выделять линейную часть в функции $\vec{G}_{\vec{p}}(\vec{x})$. Однако, как оказалось, это преобразование может существенно влиять на точность метода.

Рассматривались два различных способа построения базиса U интерполяционного пространства. Нелинейное отображение $\vec{G}_{\vec{p}}(\vec{x})$ представлялось в виде суммы линейной $A\vec{x}$ и нелинейной частей $\vec{F}_{\vec{p}}(\vec{x}) + \vec{f}_{\vec{p}}$

$$\vec{G}_{\vec{p}}(\vec{x}) = \vec{F}_{\vec{p}}(\vec{x}) + A\vec{x} + \vec{f}_{\vec{p}}, A \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

Интерполяционный базис U строился как по значениям исходного отображения $G_{\mu}(\vec{x})$, так и по значениям его нелинейной части $F_{\mu}(\vec{x})$. Обозначая соответствующие проекторы через P_1 и P_2 , рассматривались редуцированные системы двух типов

$$V^T P_1 \vec{F}_{\vec{p}}(V\vec{z}) + V^T P_1 A V \vec{z} + V^T P_1 \vec{f}_{\vec{p}} = 0 \quad (6)$$

$$V^T P_2 \vec{F}_{\vec{p}}(V\vec{z}) + V^T A V \vec{z} + V^T \vec{f}_{\vec{p}} = 0 \quad (7)$$

В случае квадратичной нелинейности точность интерполяции, а также точность итоговой ошибки решения для обеих схем (6), (7) не отличались друг от друга.

Однако для случая уравнения с рациональной нелинейностью ситуация оказалась иной.

Во-первых, сингулярные числа матриц, построенных на снимках $\vec{G}_{\vec{p}}$ и $\vec{F}_{\vec{p}}$, падают значительно медленнее, чем в случае квадратичной нелинейности, и размерность интерполяционного пространства, необходимая для поддержания требуемой точности, существенно растет.

Во-вторых, несмотря на то, что точность, даваемая проектором P_1 по отдельности для линейной и нелинейной части,

$$\{\text{Точность на нелинейной части}\} = \|V^T P_1 \vec{F}_{\vec{p}}(V\vec{z}) - V^T \vec{F}_{\vec{p}}(V\vec{z})\|_2 \quad (8)$$

$$\{\text{Точность на линейной части}\} = \|V^T P_1 A V \vec{z} - V^T A V \vec{z}\|_2 \quad (9)$$

хуже точности, даваемой проектором P_2 . Однако, для суммы линейной и нелинейной частей

$$\|V^T P_1 \vec{F}_{\vec{p}}(V\vec{z}) - V^T \vec{F}_{\vec{p}}(V\vec{z}) + V^T P_1 A V \vec{z} - V^T A V \vec{z}\|_2$$

эта точность в 100 раз превосходит точность для отдельных частей, а результат для метода с проектором P_1 дает в 10 раз меньшую ошибку решения, чем метод с проектором P_2 .

Иными словами, решения исходного уравнения

$$F_{\vec{p}}(x) + A\vec{x} + \vec{f}_{\vec{p}} = 0$$

обладают малоранговыми свойствами. Проектирование уравнения с помощью проектора вида

$$P_1 F_{\vec{p}}(\vec{x}) + P_1 A \vec{x} + P_1 \vec{f}_{\vec{p}} = 0$$

сохраняет эти свойства, в то время как частичное проектирование вида

$$P_2 F_{\vec{p}}(\vec{x}) + A\vec{x} + \vec{f}_{\vec{p}} = 0,$$

часто используемое в DEIM, может их разрушить.

Было проведено исследование точности интерполирующего проектора P в зависимости от выбора узлов. При фиксированном базисе U точность интерполяционного проектора для произвольного вектора \vec{z} задается выражением

$$\begin{aligned} \|(I - P)\vec{z}\| &= \|(I - U(S^T U)^{-1} S^T)\vec{z}\| \\ &= \|(I - U(S^T U)^{-1} S^T)(I - U U^T)\vec{z}\| \\ &\leq \|(S^T U)^{-1}\| \epsilon_U(\vec{z}) \end{aligned}$$

где $\epsilon_U(\vec{z})$ - наилучшее приближение вектора \vec{z} вектором из линейной оболочки U . Таким образом, выбор индексов интерполяции следует осуществлять так, чтобы соответствующая подматрица матрицы с ортогональными столбцами U обладала наименьшей величиной $\|(S^T U)^{-1}\|$. В случае второй нормы, установлено, что метод наибольших объемов дает лучшие оценки на $\|(S^T U)^{-1}\|$, чем метод Гаусса с выбором главного элемента.

Другим важным элементом практической реализации POD-DEIM является построение начального приближения для редуцированной системы. Было показано, что векторы базиса аппроксимации V , могут быть использованы для квазиоптимального решения этой задачи. А именно, если базис V был сформирован с помощью «снимков», соответствующих параметрам $\vec{p}_1, \vec{p}_2 \dots \vec{p}_k$, то

$$\begin{bmatrix} x_{\vec{p}_1} & x_{\vec{p}_2} & \dots & x_{\vec{p}_k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V & V_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & \Sigma_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W^T \\ W_2^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V & V_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma W^T \\ \Sigma_2 W_2^T \end{bmatrix}$$

и ΣW^T содержит оптимальные приближения векторов $x_{\vec{p}_1} \dots x_{\vec{p}_k}$ в базисе V .

Таким образом, чтобы найти хорошее начальное приближение к решению для набора параметров \vec{p} , предлагается:

1. ввести метрику на пространстве параметров;
2. для требуемого набора параметров \vec{p} найти ближайший набор \vec{p}_j из множества снимков $\vec{p}_1 \dots \vec{p}_k$;
3. использовать координаты из ΣW^T в качестве начального приближения для \vec{z} .

1.3.2. Алгоритмы восполнения тензоров на основе малоранговых матричных и тензорных приближений.

В рамках проекта рассмотрена возможность обобщения матричного SVP алгоритма (Singular Value Projection) на случай тензоров размерности $d > 2$ (считается, что тензоры представлены в формате Таккера). По аналогии с матричным SVP рассматривается оператор сужения \mathcal{A} , функционал $\psi_{\mathcal{A}}$ и итерационная процедура:

$$\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times \dots \times n_d} \rightarrow \mathbb{R}^M; \quad (\mathcal{A}(T))_s = \frac{1}{\sqrt{q}} T_{i_1, s, i_2, s, \dots, i_d, s} \quad s = 1, \dots, M; \quad q = \frac{M}{n_1 n_2 \dots n_d};$$

$$\psi_{\mathcal{A}}(T) = \frac{1}{2} \|\mathcal{A}(T) - \mathbf{B}\|_F^2 \rightarrow \inf, \quad \text{rank}_1(T) \leq k_1, \text{rank}_2(T) \leq k_2, \dots, \text{rank}_d(T) \leq k_d; \quad (10)$$

$$T^{t+1} = \mathcal{P}_{k_1, \dots, k_d} (T^t - \tau \nabla \psi_{\mathcal{A}}(T^t)) = \mathcal{P}_{k_1, \dots, k_d} (T^t - \tau \mathcal{A}^T (\mathcal{A}(T^t) - \mathbf{B})).$$

Здесь M – число заданных элементов тензоров, а под $\mathcal{P}_{k_1, \dots, k_d}$ понимается любой известный способ приближения заданного тензора Таккер-структурой, возможно, неоптимального.

Целью работы была демонстрация того, что использование в данных структур большей размерности дает возможность уменьшения числа необходимых элементов для восстановления объекта, т.е. предполагается $q = o\left(\frac{1}{\max(n_1, \dots, n_d)}\right)$.

Рассматривались разные методы построения приближений тензора в формате Таккера. Наиболее подходящим оказался следующий способ: для разверток T_1, T_2, \dots, T_d , вычисляются их приближения с рангами Таккера k_1, k_2, \dots, k_d , соответственно. Ортонормированные правые факторы $V_1 \dots V_d$ сохраняются. Ядро Таккера получается сверткой исходного ядра с факторами $V_1 \dots V_d$:

$$T_{\text{core}} := T \times_1 V_1 \times_2 V_2 \cdots \times_d V_d$$

Основываясь на этом способе вычисления приближения Таккера, был предложен следующий итерационный алгоритм восстановления тензоров малого ранга по небольшому числу элементов:

1. Ядро Таккера инициализируется нулем, а факторы задаются случайными матрицами с ортогональными столбцами.
2. На каждой итерации, рассматривается одна из размерностей $s = 1 \dots d$, и градиентный шаг применяется к соответствующей развертке:

$$F_s(T^t, B) = T_s^t - \tau(A^*(A(T_s^t) - B))$$

3. Базис V_s^{t+1} вычисляется как «короткие» правые сингулярные факторы $F_s(T^t, B)$.
4. Ядро Таккера пересчитывается путем свертки $F_s(T^t, B)$ с факторами $V_1 \dots V_d$, включая обновленный фактор V_s :

$$T_{\text{core}}^{t+1} = F_s(T^t, B) \times_1 V_1^t \cdots \times_s V_s^{t+1} \cdots$$

Можно показать, что приведенные выше итерации эквивалентны следующему вычислению

$$T^{t+1} = P_{s, k_s}(F_s(T^t, B)) \times_1 V_1^t (V_1^t)^* \cdots \\ \cdots \times_{s-1} V_{s-1}^t (V_{s-1}^t)^* \times_{s+1} V_{s+1}^t (V_{s+1}^t)^* \cdots,$$

где $P_{s, k_s}(F_s(T^t, B))$ соответствует итерации матричного SVP, примененного к матрице развертки T_s^t .

5. Итерации проводятся циклически по каждой размерности $1 \dots d$.
 - Экспериментально показано, что алгоритм сходится геометрически при малом шаге ($\tau = \frac{1}{q}$).
 - Построено доказательство геометрической сходимости алгоритма в случае тензора со всеми рангами Таккера равными 1, малом шаге τ и числе элементов, обеспечивающем ограниченную изометрию оператора A на каждой развертке тензора T_i .
 - предложена оригинальная идея рассматривать задачу восстановления тензора, когда распределение заданных элементов не является равномерным. Это позволило на практике восстанавливать тензоры с меньшим числом заданных элементов в маске. В частности, предложено распределение индексов известных элементов с плотностью вероятности $p_{i_1 i_2 \dots i_d} = C \alpha^{i_1 + i_2 + \dots + i_d}$, где $0 > \alpha < 1$, C - константы. Таким образом, элементы концентрируются в «угловой» части тензора, что позволяет верхней подматрице маски развертки обладать лучшими свойствами изометричности. С помощью

такого неравномерного распределения элементов удалось снизить в 2-3 раза необходимую плотность известных значений q тензора размера $T \in \mathbb{R}^{30 \times 30 \times 30 \times 30}$.

- Явное построение одной развертки тензора и ее SVD-разложение требуют не менее $O(n_1 n_2 \dots n_d)$ операций, что неприемлемо на практике. Предложена (неэквивалентная) замена порядка операций, позволяющая значительно снизить сложность итерации алгоритма. Вместо

$$T^{t+1} = P_{s, k_s}(F_s(T^t, B)) \times_1 V_1^t (V_1^t)^* \cdots \times_{s-1} V_{s-1}^t (V_{s-1}^t)^* \times_{s+1} V_{s+1}^n (V_{s+1}^n)^* \cdots$$

предложено использовать итерационную процедуру вида

$$T^{t+1} = P_{s, k_s}(F_s(T^t, B) \times_1 V_1^t (V_1^t)^* \cdots \times_{s-1} V_{s-1}^t (V_{s-1}^t)^* \times_{s+1} V_{s+1}^t (V_{s+1}^t)^* \cdots),$$

где

$$F_s(T^t, B) = T_s^t - \tau(A^*(A(T_s^t) - B)).$$

В таком случае, SVD-разложение при вычислении проекции необходимо вычислять для матриц значительно меньшего размера.

$$F_s(T^t, B) \times_1 V_1^t (V_1^t)^* \cdots \times_{s-1} V_{s-1}^t \times_{s+1} V_{s+1}^t \cdots \in \mathbb{R}^{k_1 \dots k_{s-1} k_{s+1} \dots k_d \times n_s}$$

что снижает сложность алгоритма, но эмпирически сохраняет геометрическую сходимость.

Подготовлена к печати статья "Note: low-rank tensor train completion with side information based on Riemannian optimization," С.С. Будзинский, Н.Л. Замагарашкин

1.3.3. Разработка алгоритма поиска разреженного решения для аппроксимаций со сверхбольшим пространством допустимых параметров (Tensorised OMP, Tensorised Orthogonal Match Pursuit).

Предложен метод, позволяющий строить разреженное решение для сверхбольших тензоризованных систем линейных уравнений. А именно, пусть имеется линейный оператор

$$A : \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times \dots \times n_d} \rightarrow \mathbb{R}^m, \quad (11)$$

причем $n_1 \cdot n_2 \cdots n_d \gg m$. Будем считать, что столбцы матрицы оператора A имеют приблизительно одинаковую норму. От представления оператора A требуется только возможность быстрого умножения на тензор ранга 1, то есть вектор вида $v_1 \otimes v_2 \otimes \dots \otimes v_d$, где $v_i \in \mathbb{R}^{n_i}$. Кроме того, предположим, что решение задачи наименьших квадратов

$$v = \arg \min_u \|Au - b\|_2 \quad (12)$$

может быть хорошо приближено тензором малого ранга.

Предполагается, что число столбцов в A столь велико, что мы не имеем возможности даже пройтись на всем столбцам матрицы хотя бы один раз. Мы будем решать задачу наименьших квадратов для разреженного решения, а именно, поиска

$$v = \arg \min_{u: \|u\|_0 \leq k} \|Au - b\|_2 \quad (14)$$

Для ее решения был предложен алгоритм, названный нами тензоризованным OMP.

Идея алгоритма, получившая в ходе работ по проекту практически полное теоретическое обоснование, основывается на комбинации трех наблюдений:

Algorithm 1 Тензоризованный ОМР

Вход: тензоризованный линейный оператор \mathcal{A} , вектор правой части \mathbf{b} , количество компонент разреженного решения K , ранг тензора для малоранговой аппроксимации T , количество кандидатов C .

Инициализация:

- $\mathbf{x}^0 = 0$;
- $\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathcal{A}\mathbf{x}^0 = \mathbf{b}$;
- множество выбранных столбцов $S^0 = \emptyset$;
- множество столбцов для ортогонализации $Q^0 = \emptyset$;

for $k = 0, \dots, K - 1$ do

1. Вычислить решение ранга T для решения задачи наименьших квадратов

$$\mathbf{v}_T = \arg \min_{\substack{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_1 \times \dots \times n_d} \\ \text{rank } \mathbf{u} \leq T}} \|\mathbf{Q}^k \mathcal{A} \mathbf{u} - \mathbf{Q}^k \mathbf{b}\|_2 \quad (13)$$

Для простоты мы обозначили \mathbf{Q}^k и множество столбцов, и матрицу ортогонализации \mathbf{Q} к этим столбцам;

2. Найти C элементов с максимальными по модулю элементами в тензоре \mathbf{v}_T . Обозначим полученное множество \hat{S} ;
3. Построим матрицу $\hat{\mathbf{A}}$, состоящую из столбцов с номерами из \hat{S} . i -ый столбец может быть получен действием оператора \mathcal{A} на единичный вектор;
4. Применим один шаг метода ОМР к задаче с матрицей $\mathbf{Q}^k \hat{\mathbf{A}}$ и правой частью $\mathbf{Q}^k \mathbf{b}$. В результате получим некоторый номер столбца j_0 для матрицы исходного оператора \mathcal{A} ;
5. Добавим столбец j_0 в множество выбранных столбцов: $S^{k+1} = S^k \cup \{j_0\}$, а также столбец $\mathbf{Q}^k \mathbf{a}_{j_0}$ в множество столбцов для ортогонализации: $Q^{k+1} = Q^k \cup \{\mathbf{Q}^k \mathbf{a}_{j_0}\}$;

end for

return S^K

1. с вероятностью 1 в матрице со сверхбольшим числом столбцов ОМР алгоритм (жадный алгоритм поиска разреженных решений) выберет компоненту решения, которая соответствует компоненте нормального решения с наибольшим модулем;
2. тензорные решения малого ранга приближают нормальное решение задачи наименьших квадратов;
3. тензорные приближения малого ранга с высокой точностью приближают экстремальные значения тензора

Таким образом, решая задачу наименьших квадратов для вектора неизвестных в малоранговом тензорном виде, мы получаем не только хорошее приближение, но и позиции элементов с большим модулем. Эти позиции рассматриваются нами как кандидаты для применения ОМР алгоритма. При этом сверхбольшая система (система со сверхбольшим числом столбцов) редуцируется к системе существенно меньшей размерности, что позволяет применять для поиска разреженных решений стандартные «жадные» алгоритмы.

Доказано, что в среднем невязка на каждой итерации алгоритма падает более чем в 2 раза. Отметим, что мы не имеем возможности доказать, что тензоризованный алгоритм восстанавливает точно разреженные компоненты. Это практически невозможно. Матрицы со сверхбольшим числом столбцов удовлетворяют лишь весьма слабым условиям на когерентность.

Алгоритм применялся в задачах идентификации сложных нелинейных моделей. Число возможных параметров в этих задачах доходило до 10^{13} . Тензоризованный ОМР восстанавливал параметры, которые существенны в описании модели.

Подготовлена к печати статья "Тензоризованный ОМР алгоритм в задачах идентификации параметров сверхбольших нелинейных моделей," Н.Л. Замазашкин, Д.А. Желтков, С.В. Морозов

1.3.4. Создание быстрых адаптивных вычислительных процедур в задачах идентификации параметров для нелинейных моделей. Получение достаточных условий их эффективности.

Таблица 1: Зависимость точности тензорной модели Вольтерра (15) от её размеров

R	S_X, S_L	D_X	D_L	Отношения сигнал / шум, дБ
1	0	1	1	23.21
1	1	1	1	25.61
2	1	1	1	27.89
2	2	1	1	29.45
2	2	1	2	31.17
2	2	1	3	31.98
2	3	1	3	32.68
3	3	1	3	33.83
4	3	1	3	34.70
5	3	1	3	35.22
5	4	1	3	35.78
5	4	1	4	36.45
6	4	1	4	36.89
7	4	1	4	37.17
7	5	1	4	37.73
8	5	1	4	38.04
9	5	1	4	38.24
9	6	1	4	38.59
9	6	3	4	39.29
10	6	3	4	39.76
10	6	3	5	40.06
10	6	3	6	40.43
10	7	3	6	40.57
11	7	3	6	40.85

Как правило, в задачах идентификации параметров требуется не только определить значения параметров модели, но и их число. Это задача о выборе размеров моделей. В качестве нетривиального примера рассмотрим модель типа Вольтерра, используемую для

приближения сложных систем вход X -выход Y ,

$$Y_k \approx \sum_{r=1}^R \left(\prod_{d=1}^{\lfloor \frac{D_X}{2} \rfloor} \left(\sum_{i=-S_X}^{S_X} X_{k+i} u_{idr} + \alpha_{dr} \right) \right) \\ * \left(\prod_{d=1}^{\lfloor \frac{D_X}{2} \rfloor} \left(\sum_{i=-S_X}^{S_X} \bar{X}_{k+i} v_{idr} + \beta_{dr} \right) \right) \\ * \left(\prod_{d=1}^{D_L} \left(\sum_{i=-S_L}^{S_L} \sum_{p=0}^P a_{pdr} f_p(|X_{k+i}|) w_{idr} \right) \right).$$

Это тензорная модель. Параметрами, отвечающими за размер (сложность) данной модели, являются ранг тензора R , а также параметры, определяющие степень нелинейности модели D_X и D_L , и параметры задержек S_X и S_L . Определение наилучшего (минимального) набора параметров, гарантирующих высокую точность – сложная оптимизационная задача.

Для ее решения в ходе проекта предложен «жадный» адаптивный алгоритм:

- модель инициализируется минимальным набором параметров;
- на итерационном шаге осуществляется:
 - оптимизация всех моделей, для которых ровно один из размеров отличается от размеров текущей модели на предписанный шаг;
 - среди моделей выбирается наилучшая по критерию отношения получаемой точности к числу параметров. Размеры наилучшей модели принимаются за текущие. Итерации повторяются до достижения нужной точности.

Приведем результат работы эксперимента с приведенной выше моделью. В данном эксперименте считалось, что $S_L = S_X$, шаг по параметру D_X был равен 2, по остальным параметрам модели шаг 1. Стартовой моделью была модель с размерами $R = 1, D_X = D_L = 1, S_L = S_X = 0$. Увеличение точности модели в зависимости от размеров модели приведены в таблице 1. Эксперимент получен для сигнала реального усилителя, используемого в телекоммуникационном оборудовании поколения 4G. Данный результат является наилучшим известным внутри такой большой компании как Huawei.

1.3.5. Для решения задач вида $y'(t) = -Ay(t) + g(t)$, где $g(t) \approx Up(t)$, $U \in \mathbb{R}^{N \times m}$, $m \ll N$, $p : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$, для многих источников сравнить подход, основанный на асимптотическом расщеплении, с подходом на основе блочного подпространства Крылова.

Сравнение и анализ двух этих подходов показал, что второй подход, основанный на блочном подпространстве Крылова, оказывается в общем случае более эффективным и, следовательно, предпочтительным. Напомним, что первый подход разработан для источников, представимых в виде мод ряда Фурье. Эффективность второго подхода обусловлена тем, что аппроксимация $g(t) \approx Up(t)$, проводимая в рамках этого подхода с помощью усечённого сингулярного разложения, позволяет автоматически выявлять малоранговую структуру функции источника $g(t)$. При этом базис малорангового подпространства $g(t)$ не обязательно должен быть модами Фурье. Другими словами, область успешного применения у второго подхода шире, и для задач, где структура $g(t)$ заранее неизвестна, второй подход (на основе блочного подпространства Крылова) оказывается привлекательнее.

Тем не менее, в некоторых приложениях (таких как фотоника [3]) функция источника может быть задана в виде мод Фурье. Для такого класса задач подход, основанный на асимптотическом расщеплении, оказывается эффективнее первого. Это связано с более простой структурой редуцированной задачи Коши в первом подходе.

Результаты тестирования второго подхода и его сравнения с обычными экспоненциальными схемами интегрирования по времени представлены в препринте [2] и представлены на международной конференции NUMGRID2020 (<https://numgrid.ru/numgrid2020/>). Для рассмотренного класса нестационарных задач адвекции-диффузии, в том числе и на задачах, где малоранговость $g(t)$ априори не гарантирована, наш метод оказался наиболее эффективным.

Кроме того, нам удалось разработать новый алгоритм перезапуска для методов редуцирования моделей подпространства Крылова, в том числе для рациональных крыловских методов типа «сдвиг-обращение» [4, 1, 9]. Такие схемы с перезапуском лежат в основе методов обоих вышеуказанных подходов и могут применяться при решении линеаризованных систем типа (15), возникающих при решении нелинейных задач Коши, как обсуждается ниже. Этот тип перезапуска основан на наблюдении, что невязка приближённого решения мала на некотором небольшом временном интервале, и поэтому получил название «невязочно-временной». Предварительные тесты показывают высокую эффективность [5] невязочно-временного перезапуска по сравнению с другими известными схемами на основе подпространств Крылова [8, 7].

1.3.6. Протестировать один, наиболее эффективный из двух вышеуказанных подходов на нелинейной тестовой задаче $y'(t) = -Ay(t) + F(y, t)$. Экспоненциальная схема интегрирования по времени с блочным подпространством Крылова может быть обобщена для решения нелинейных задач на основе итераций типа релаксации «формы волны» (waveform relaxation) следующим образом. Рассмотрим итерационную схему, где приближённое решение на итерации k — функция $y_k(t) \approx y(t)$ на некотором интервале $t \in [0, T]$. Пусть для $y_k(t)$ известна невязка $r_k(t)$, $t \in [0, T]$, которую определим как $r_k(t) \equiv -Ay_k(t) + F(y_k(t), t) - y'_k(t)$. Наши вычисления будут организованы так, что вычисление и хранение невязки не слишком затратны. Вычитая из $y'(t) = -Ay(t) + F(y, t)$ соотношение $y'_k(t) = -Ay_k(t) + F(y_k(t), t) - r_k(t)$, получаем

$$(y(t) - y_k(t))' = -A(y(t) - y_k(t)) + F(y, t) - F(y_k, t) + r_k(t).$$

Это уравнение вместе с начальным условием $y(0) - y_k(0) = 0$ — задача Коши для поправки $y(t) - y_k(t)$, решать которую не легче, чем исходную задачу Коши $y'(t) = -Ay(t) + F(y, t)$, $y(0) = v$. Поэтому упростим задачу и заменим в ней $y(t)$ на $y_{k+1}(t)$:

$$\begin{aligned} (y_{k+1}(t) - y_k(t))' &= -A(y_{k+1}(t) - y_k(t)) + F'_y(\bar{y}_k, \bar{t})(y_{k+1}(t) - y_k(t)) + r_k(t), \\ \text{или } \xi'_k(t) &= -(A - F'_y(\bar{y}_k, \bar{t}))\xi_k(t) + r_k(t), \end{aligned} \quad (15)$$

где $\xi_k(t) \equiv y_{k+1}(t) - y_k(t)$ — итерационная поправка, F'_y — якобиан по y , а $\bar{y}_k = y_k(\bar{t})$ — значение $y_k(t)$ в некоторый фиксированный момент времени \bar{t} . В некоторых задачах (например, в нелинейном уравнении Шрёдингера) отображение F может не быть дифференцируемым по y . Тогда $F'_y(\bar{y}_k, \bar{t})$ можно заменить на любую матрицу, локально аппроксимирующую F . Уравнение (15) может быть эффективно решено экспоненциальной схемой с блочным подпространством Крылова при условии, что невязка $r_k(t)$ позволяет малоранговое представление $r_k(t) \approx U_k p_k(t)$. Как оказывается, такое представление возможно получить, если только длина временного интервала T не слишком велика. Решив эту задачу Коши,

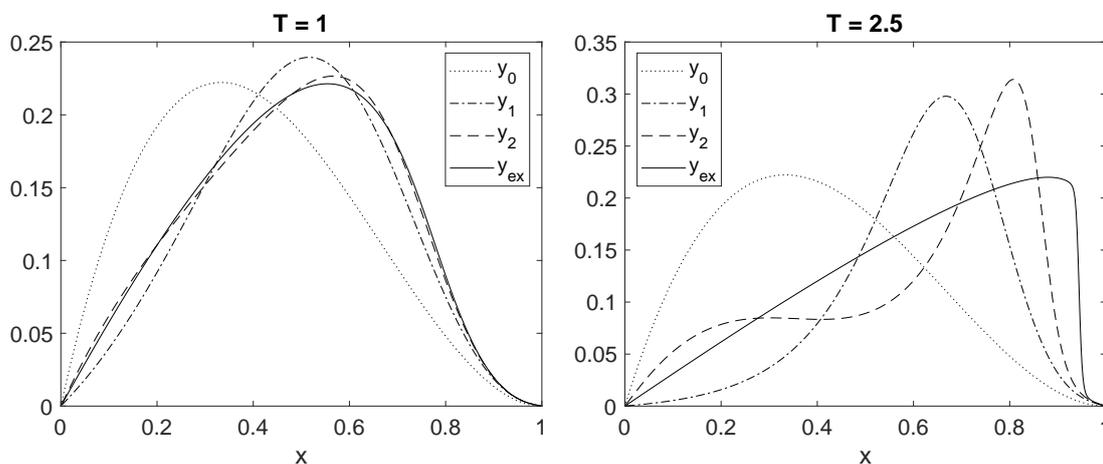


Рис. 1: Решения $y_k(T)$ дискретизированного по пространству нелинейного уравнения Бюргера $u_t = -\nu u_{xx} - uu_x$, $x \in [0, 1]$, блочным методом подпространства Крылова на итерациях $k = 0, 1, 2$ и точное решение $y_{ex}(T)$ для временного интервала $t \in [0, T]$. Левый график: $T = 1$, правый график: $T = 2.5$. Вектор $y_{ex}(T) \in \mathbb{R}^N$ содержит значения численного решения $u(x, T)$ на пространственной сетке $x_i = ih$, $i = 1, \dots, N$, $h = 1/(N + 1)$.

найдем поправку $\xi_k(t)$, а по ней — следующее приближение $y_{k+1}(t)$. Вывести выражение для невязки $r_{k+1}(t)$ несложно, кроме того возможно вычислить параметризацию невязки $r_{k+1}(t) \approx U_{k+1} p_{k+1}(t)$. Таким образом, получаем итерационную схему решения задачи Коши для нелинейного уравнения $y'(t) = -Ay(t) + F(y, t)$, где на каждой нелинейной итерации линейризованное уравнение для поправки решается «внутренними» итерациями блочного подпространства Крылова.

Заметим, что предложенная итерационная схема (15) существенно отличается от схемы, рассмотренной в нашей недавней работе [6], тем, что линейризованная задача сформулирована для поправки, а не для $y_{k+1}(t)$. Это позволяет достичь следующего важного эффекта: поскольку невязка $r_k(t)$ убывает, с ростом числа «внешних» итераций на решение (15) требуется всё меньше «внутренних» итераций. Действительно, на рис. 1 представлены три первых итерационных приближения $y_k(t)$, $k = 0, 1, 2$ при решении уравнения Бюргера. Для $T = 1$ (левый график) поправка $\xi_1(t)$ получена за 15 «внутренних» итераций метода блочного подпространства Крылова, а поправка $\xi_2(t)$ — за 5 итераций. Для $T = 2.5$ (правый график) на первых двух нелинейных итерациях потребовалось соответственно 26 и 7 «внутренних» итераций.

Тем не менее, возникает ряд вопросов о реализуемости и эффективности данной схемы, и эти вопросы требуют детальной проработки. Прежде всего, необходимо подробно исследовать возможность представления численного решения $y_k(t)$ и его невязки $r_k(t)$ в малоранговой форме для реальных задач большой размерности. Далее, понятно, что при большей длине T временного интервала будет требоваться большее число нелинейных итераций (что видно и на рис. 1: сходимость на левом графике лучше). С другой стороны, T не может быть слишком мало, иначе вычислительная работа на «внутренних» итерациях может не окупаться по сравнению обычными пошаговыми схемами интегрирования по времени. Следовательно, следует проработать вопрос оптимального выбора временного интервала, обеспечивающего наибольшую эффективность метода.

1.3.7. Анализ эффективности работы алгоритма построения численных решений нестационарных уравнений агрегации и дробления с использованием редуцированного базиса.

В 2020 году проведено подробное исследование задач моделирования агрегации частиц с источником мономеров и стоком частиц, превышающих максимально допустимый для класса Броуновских ядер коагуляции $C_{i,j} = i^a j^{-a} + i^{-a} j^a$ с использованием предложенной ранее методики редукции модели на основе метода POD (Proper Orthogonal decomposition). В случае $a > 0.5$ для известных задач с циклическими решениями предложен метод редукции модели, позволяющий значительно (в разы) ускорить расчёты с использованием сотен тысяч нелинейных уравнений без потери качественной структуры решений (их периодичности). Дополнительно проведены исследования для задач агрегации-дробления, подтверждена гипотеза о малоранговой структуре стационарных решений при различных значениях параметра интенсивности дроблений λ , протестирован эффективный численный метод решения уравнений агрегации-дробления на основе QTT-разложений.

1.3.8. Перейдем к рассмотрению численных методов решения задач динамики вихревых структур на основе методов редукции нелинейной модели.

Задача обтекания тела потоком несжимаемой жидкости с формированием вихревых структур за телом согласно методу дискретных вихрей формулируется следующим образом. На каждом временном шаге необходимо решить систему алгебраических уравнений

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^{n_0} \Gamma_{0j} \int_{L_y} \frac{d\mathbf{l}_y \times (\mathbf{x}_i - \mathbf{y})}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}|^3} = f(\mathbf{x}_i), \quad i = 1, \dots, n_0 \quad (16)$$

где Γ_{0j} - завихренность на обтекаемом теле, а расчет правой части выполняется согласно формуле

$$f(\mathbf{x}_i) = -\mathbf{n}_i \cdot \left(\mathbf{w}_\infty + \sum_{j=1}^{n_{k-1}} \Gamma_j \mathbf{w}_j(\mathbf{x}_i(t_k)) \right), \quad i = 1, \dots, n_0. \quad (17)$$

Причем новое положение вихревой пелены вычисляется как:

$$\mathbf{w}(\mathbf{x}_i, t_k) = \mathbf{w}_\infty(\mathbf{x}_i) + \sum_{j=1}^{n_k} \Gamma_j \mathbf{w}_j(\mathbf{x}_i(t_k)), \quad i = 1, \dots, m_k; \quad (18)$$

$$\mathbf{x}_i(t_k) = \mathbf{x}_i(t_{k-1}) + \mathbf{w}(\mathbf{x}_i, t_k), \quad i = 1, \dots, m_k. \quad (19)$$

Основные временные затраты приходятся не на решение системы (16) (т.к. n_0 мало), а на вычисление правой части (17), поэтому для ускорения решения задачи (16) - (19) важно разработать методы редукции модели для пересчета вихревой пелены, формируемой за телом. Таким образом, задачу расчета завихренности Γ_j вихревой пелены необходимо свести к решению неоднородной задачи Коши вида:

$$\frac{dy}{dt} = -Ay(t) + F(y, t), \quad y(0) = y_0. \quad (20)$$

В общем виде задачу (16) - (19) не удастся свести к задаче (20). Тем не менее для частного, но важного случая, можно разработать методы редукции модели вихреобразования за телом.

Рассмотрим случай, представленный на рисунке 2, где изображена вихревая пелена за планирующим парашютом. На этом рисунке показано 30 ((a) и (b)) и 50 временных шагов ((c) и (d)). Как видно из сравнения рисунков (b) и (d) вихревая пелена вблизи тела не меняется. Для таких рамок (вблизи тела) задача решалась с использованием редукции модели на значительном временном интервале, а для остальных рамок расчет проводился по стандартным формулам (16) - (19).

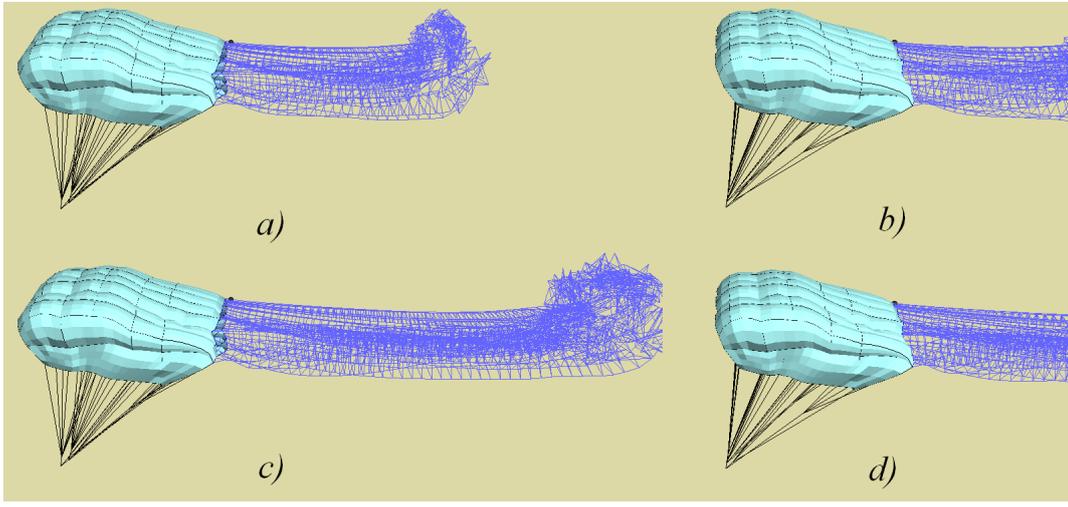


Рис. 2: Обтекание планирующего парашюта.

При таком подходе к решению задачи для нескольких первых десятков шагов структура вихревой пелены ищется по формулам (16) - (19). В силу того, что число шагов мало, расчет пелены по (17) - (18) выполняется быстро, а эти данные далее используются для формирования операторов A и $F(y, t)$ в (20).

Итак, в формуле (20) матрица A определяется как

$$A = B^{-1} \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{w}_j(\mathbf{x}_i), \quad (21)$$

где элементы матрицы $B = (b_{ij})$ определяются из (16):

$$b_{ij} = \frac{1}{4\pi} \int_{L_{y_j}} \frac{d\mathbf{l}_y \times (\mathbf{x}_i - \mathbf{y})}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}|^3}. \quad (22)$$

В (20) оператор $F(y, t)$ рассчитывается как

$$F(y, t) = B^{-1} \mathbf{n}_i \cdot \int_{\sigma_{ij}} \mathbf{y} \frac{d\mathbf{w}}{dt}, \quad (23)$$

где σ_{ij} – поверхность пелены, рассчитанная до момента времени t .

В (20) за y_0 берется распределение завихренности на неизменяемой части пелены в начальный момент времени, когда выполнен расчет на несколько десятков шагов.

1.4 Сведения о достигнутых конкретных научных результатах в отчетном году

1.4.1. Было проведено изучение минимальных описаний для линейных пространств, допускающих сходимость редуцированного метода Ньютона без деградации точности в алгоритме DEIM. Оказалось, что как теоретическое, так и практическое решение этого вопроса весьма не просто. Можно утверждать, что публикации об успешном практическом применении алгоритма POD-DEIM (в его стандартной форме) связаны лишь со случайным удачным стечением обстоятельств.

Показано, что предложенный ранее способ интерполяции нелинейной части отображения не может считаться удовлетворительным. Разработан подход с более высокой степенью надежности.

Доказано, что интерполяционные проекторы, построенные на принципе максимального объема (обобщенного максимального объема), превосходят проекторы на методе исключения Гаусса с выбором ведущего элемента.

Предложен эффективный метод выбора начальной точки в редуцированном методе Ньютона.

Разработан алгоритм восполнения тензоров малого ранга Таккера. Доказаны теоремы о линейной сходимости предложенного метода в частном случае, когда все ранги Таккера равны 1. Алгоритм применялся в задаче восстановления MIMO канала связи для систем 5G по небольшому числу измерений (менее 1% от общего числа параметров). Предложен метод восстановления с неравномерным распределением элементов в маске. Экспериментально показано, что такое неравномерное распределение позволяет использовать маски меньшей плотности.

Построен и обоснован метод поиска разреженных решений в тензоризованных моделях со сверхбольшим числом параметров.

Предложен «жадный» адаптивный алгоритм определения размеров параметров сложных тензоризованных моделей. Алгоритм показал высокую эффективность в реальных задачах построения Digital Predistorter для современных усилителей, используемых в телекоммуникационной аппаратуре поколений 4G и 5G.

1.4.2. Для решения задач Коши для многих источников удалось реализовать и всесторонне протестировать два подхода эффективного построения редукиций на основе крыловских подпространств.

Первый подход основан на асимптотическом расщеплении решения, где выделяется его периодические по времени составляющие. Второй подход основан на использовании блочных подпространств Крылова.

Как указывалось выше, результаты сравнений двух подходов показывают, что второй подход (использующий блочные подпространства Крылова) в общем случае, когда о функции источника нет дополнительной информации, более эффективен. Первый подход, основанный на асимптотическом разложении, более эффективен на задачах специального вида, где функция источника задана в виде комбинации ограниченного числа мод Фурье. Поэтому для разработки метода редуцирования нелинейных задач Коши за основу был выбран второй подход.

Нам удалось получить формулировку схемы редуцированного решения нелинейных задач Коши в виде, обеспечивающем снижение числа «внутренних» крыловских итераций с ростом «внешних» нелинейных итераций. Первые результаты внушают оптимизм. Тем не менее, как обсуждалось выше, теперь предстоит решение задач, связанных с эффективной реализацией метода наш подход теперь предстоит протестировать в более сложных и

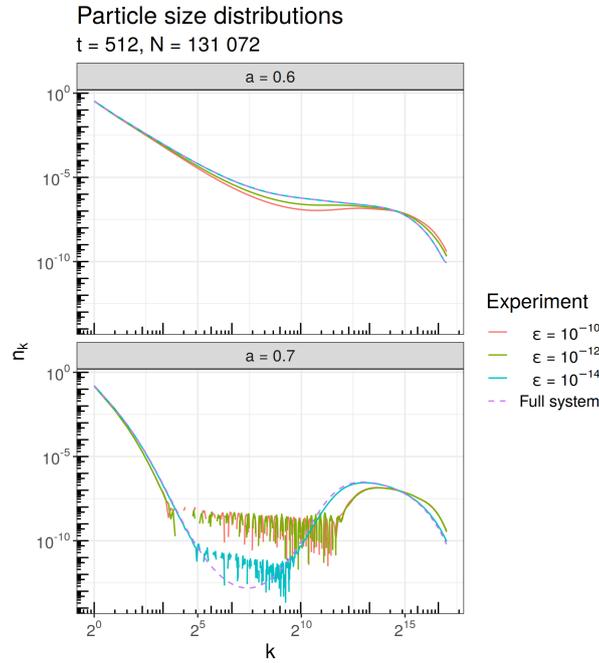


Рис. 3: Сравнение решений полной модели (фиолетовым цветом) с редуцированной (красный, зелёный и синий цвета)) в момент времени $t = 512$ при $N = 131072$, $a = 0.7$ и $a = 0.6$. Решение для $\varepsilon = 10^{-14}$ настолько близко к полному, что отклонения заметны лишь для самых малых значений концентраций частиц.

реалистичных приложениях большей размерности.

1.4.3. В ходе исследования эффективности использования и адаптации метода POD в применении в задачам агрегации с источником мономеров и стоком частиц. В результате исследования получены размерности редуцированных базисов в зависимости от внутреннего параметра точности ε метода POD и от размеров интервала модельного времени, используемого для построения базиса 2. Эксперименты позволяют продемонстрировать не только существование, но и реальную возможность построения маломерного базиса для приближения полного решения динамической задачи.

a	ε	Погрешность редуцированного решения	Отрезок для построения базиса	Размерность базиса
0.7	10^{-10}	3.5×10^{-3}	[0, 100]	68
0.7	10^{-11}	2.3×10^{-1}	[0, 28]	52
0.7	10^{-12}	2.8×10^{-5}	[0, 128]	101
0.7	10^{-13}	2.3×10^{-2}	[0, 68]	102
0.7	5×10^{-14}	4.2×10^{-3}	[0, 76]	112
0.7	10^{-14}	4.6×10^{-10}	[0, 256]	234

Таблица 2: Погрешность решений в зависимости от внутреннего параметра метода ε для метода POD при использовании $N = 65536$ уравнений. Ошибка редуцированного решения вычислялась, как максимум относительной погрешности во второй норме на отрезке времени [0, 256].

На рис 3 продемонстрировано сравнение распределений частиц по размерам (решений) для модели агрегации с источником и стоком частиц в зависимости от внутреннего параметра точности ε .

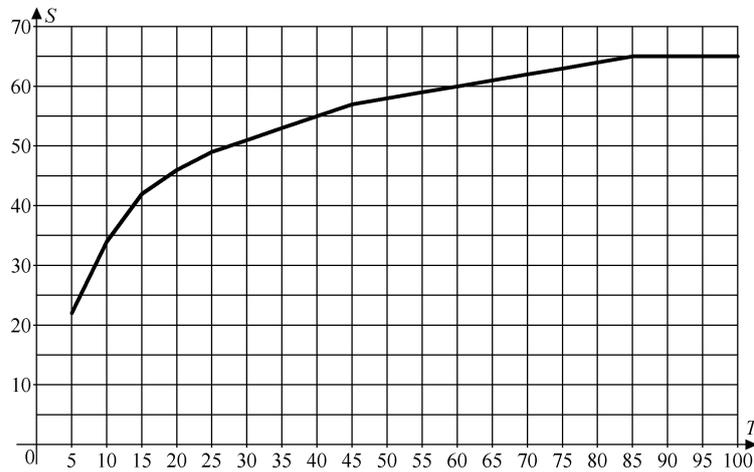


Рис. 4: Зависимость размерности редуцированной задачи от числа временных шагов.

1.4.4. В 2020 году было проведено исследование численных методов решения задач динамики вихревых структур на основе методов редукции нелинейной модели.

Эффективность использования методов редукции модели при решении задачи динамики вихревых структур определяется размерностью пространства, на котором решается редуцированная задача.

На рисунке 4 показана зависимость размерности пространства редуцированной задачи от времени в задаче обтекания планирующего парашюта (см. рисунок 2). Из рисунка 4 видно, что с ростом временного интервала, на котором решается редуцированная задача, возрастает эффективность использования редуцированного подхода по сравнению со стандартным методом.

Список литературы

- [1] M. A. Botchev. An accurate restarting for shift-and-invert Krylov subspaces computing matrix exponential actions of nonsymmetric matrices. Preprint <https://arxiv.org/abs/1912.02643>, 2019.
- [2] M. A. Botchev. Exponential time integrators for unsteady advection-diffusion problems on refined meshes. Preprint <https://arxiv.org/abs/2010.04756>, October 2020.
- [3] M. A. Botchev, A. M. Hanse, and R. Uppu. Exponential Krylov time integration for modeling multi-frequency optical response with monochromatic sources. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 340:474–485, 2018.
- [4] M. A. Botchev and L. A. Knizhnerman. ART: Adaptive residual-time restarting for Krylov subspace matrix exponential evaluations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 364(112311), 2020.
- [5] M. A. Botchev, L. A. Knizhnerman, and E. E. Tyrtysnikov. A residual concept for krylov subspace evaluation of the φ matrix function. Preprint <https://arxiv.org/abs/2010.08494>, October 2020.
- [6] G. L. Kooij, M. A. Botchev, and B. J. Geurts. A block Krylov subspace implementation of the time-parallel Paraexp method and its extension for nonlinear partial differential equations.

Journal of Computational and Applied Mathematics, 316(Supplement C):229–246, 2017.
<https://doi.org/10.1016/j.cam.2016.09.036>.

- [7] J. Niesen and W. M. Wright. Algorithm 919: A Krylov subspace algorithm for evaluating the φ -functions appearing in exponential integrators. *ACM Trans. Math. Softw.*, 38(3):22:1–22:19, Apr. 2012.
- [8] R. B. Sidje. ЕХРОКИТ. A software package for computing matrix exponentials. *ACM Trans. Math. Softw.*, 24(1):130–156, 1998. www.maths.uq.edu.au/expokit/.
- [9] М. А. Бочев. Точный перезапуск метода подпространства Крылова «сдвиг-обращение» для вычисления действия экспоненты несимметричных матриц. *Журнал Вычислительной Математики и Математической Физики*, 61(5), 2021.