

Применение аппроксимации многомерных данных к решению динамических задач

С.Л. Ставцев

Институт вычислительной математики РАН

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И
ИНФОРМАТИКИ

22-27 АВГУСТА 2012г.

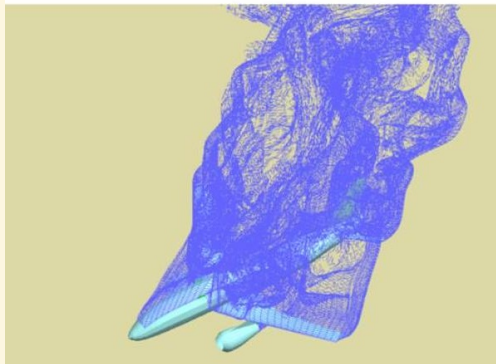
- 1 Постановка задачи
- 2 Малоранговые аппроксимации
- 3 Применение Tensor Train (ТТ) формата
- 4 Численные эксперименты

План доклада

- 1 Постановка задачи
- 2 Малоранговые аппроксимации
- 3 Применение Tensor Train (ТТ) формата
- 4 Численные эксперименты

Основные уравнения

Обтекание самолета под углом атаки $\alpha = 70^\circ$.



С.М. Белоцерковский,
И.К. Лифанов

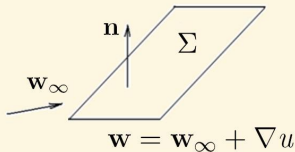
$$\Delta u(\mathbf{x}, t) = 0, \mathbf{x} \in R \setminus \Sigma,$$

$$\left(\frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial n} \right)^\pm = f, \mathbf{x} \in \Sigma,$$

на пелене :

$$\frac{\partial \mathbf{r}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \mathbf{w}(\mathbf{x}, t), \mathbf{x} \in \sigma,$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{w}(\mathbf{x}, t)}{\partial n} \right)^+ = \left(\frac{\partial \mathbf{w}(\mathbf{x}, t)}{\partial n} \right)^-$$



$$u(\mathbf{x}) = U_\Sigma[g](\mathbf{x}) = \iint_\Sigma g(\mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial n_{\mathbf{y}}} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\sigma_{\mathbf{y}},$$

$$\frac{\partial}{\partial n_{\mathbf{x}}} U_\Sigma[g](\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Sigma.$$

Алгоритм решения задачи обтекания тел

- Вычисление матрицы в левой части

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

и ее LU разложение. Требуется $\mathcal{O}(n_0^3)$ (при $n_0 = 10^4 < 15$ мин.).

Алгоритм решения задачи обтекания тел

- Вычисление матрицы в левой части

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

и ее LU разложение. Требует $\mathcal{O}(n_0^3)$ (при $n_0 = 10^4 < 15$ мин.).

- На каждом временном шаге:
 - Правая часть (1) — $\mathcal{O}(n_0 \cdot n_{k-1}) = \mathcal{O}(t_k^2 n^2)$ (5-20%T):

$$f(\mathbf{x}_i) = -\mathbf{n}_i \cdot \left(\mathbf{w}_\infty + \sum_{j=1}^{n_{k-1}} \Gamma_j \mathbf{w}_j(\mathbf{x}_i(t_k)) \right), \quad i = 1, \dots, n_0. \quad (2)$$

- Вычисление $\Gamma_{0j}, j = 1, \dots, n_0$ — $\mathcal{O}(n_0^2)$ (<10%T).
- Новое положение вихревой пелены:

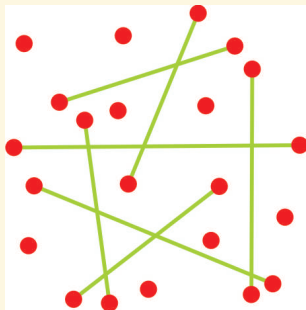
$$\mathbf{w}(\mathbf{x}_i, t_k) = \mathbf{w}_\infty(\mathbf{x}_i) + \sum_{j=1}^{n_k} \Gamma_j \mathbf{w}_j(\mathbf{x}_i(t_k)), \quad i = 1, \dots, m_k; \quad (3)$$

$$\mathbf{x}_i(t_k) = \mathbf{x}_i(t_{k-1}) + \mathbf{w}(\mathbf{x}_i, t_k), \quad i = 1, \dots, m_k. \quad (4)$$

Операций $\mathcal{O}(t_k^3 n)$ и $\mathcal{O}(t_k^2 n)$ соответственно (65-90%T).

Методы ускорения вычислений

$$\mathbf{w}(\mathbf{x}_i, t_k) = \mathbf{w}_\infty(\mathbf{x}_i) + \sum_{j=1}^{n_k} \Gamma_j \mathbf{w}_j(\mathbf{x}_i(t_k)), i = 1, \dots, m_k \quad (3)$$



Требуется ускорение вычисления сумм для функции $\mathbf{w}_j(\mathbf{x}_i(t_k))$.

Иерархические методы ускоренного вычисления суммы, в том числе:

- мультипольные разложения;
- вейвлеты;
- интерполяционные методы.

Сжимаемая матрица

$$A = (a_{ij}),$$

$$a_{ij} = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{x}_j^\pm - \mathbf{x}_i|^3}.$$

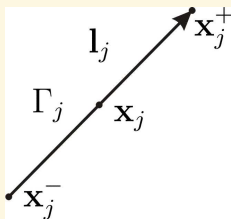
Вычисление скорости через матрицу:

$$\mathbf{w}(\mathbf{x}_i) = \mathbf{w}_\infty(\mathbf{x}_i) + \mathbf{c}_i \times \mathbf{x}_i + \mathbf{d}_i,$$

$$\mathbf{c}_i = (A\mathbf{a})_i, \quad \mathbf{d}_i = (A\mathbf{b})_i,$$

$$\mathbf{a}_j = \Gamma_j \mathbf{l}_j, \quad \mathbf{b}_j = \mathbf{a}_j \times \mathbf{x}_j,$$

$$\mathbf{l}_j = \mathbf{x}_j^+ - \mathbf{x}_j^-, \quad \mathbf{x}_j = \frac{\mathbf{x}_j^+ + \mathbf{x}_j^-}{2}.$$

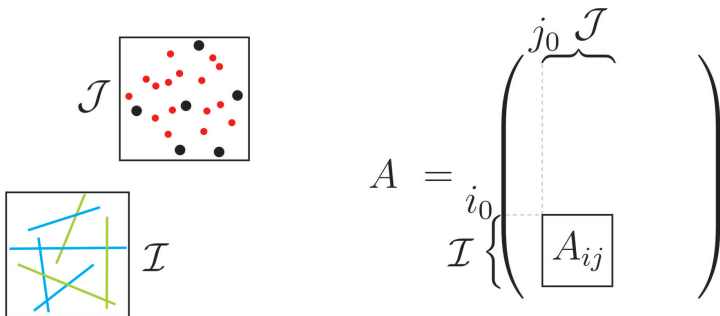


План доклада

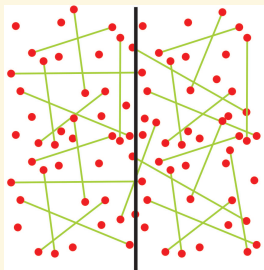
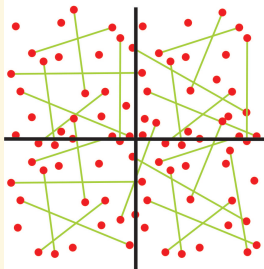
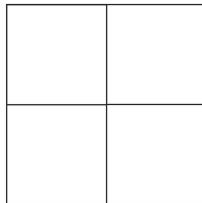
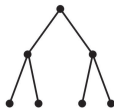
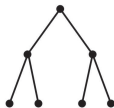
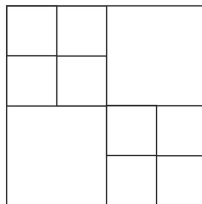
- 1 Постановка задачи
- 2 Малоранговые аппроксимации**
- 3 Применение Tensor Train (ТТ) формата
- 4 Численные эксперименты

Матричный блок

Выделение (малоранговых) блоков для разделенных областей.



Иерархичность построения блоков

*Вихри**Источники**Матрица**Вихри**Источники**Матрица*

Малоранговые блоки

Одноранговая матрица:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 5 & 7 \\ -3 & -5 & -7 \\ 6 & 10 & 14 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \cdot (3 \ 5 \ 7).$$

Для матрицы A с $size(A) = m \times n$ ранга r

$$A = UV^T, \quad size(U) = m \times r, \quad size(V) = n \times r.$$

Храним только $r(m + n)$ (вместо $m \cdot n$) элементов и вычисляем

$$y = UV^T x$$

за $\mathcal{O}(r(m + n))$, вместо $\mathcal{O}(m \cdot n)$!

Вычисление малоранговых аппроксимаций

- сингулярное разложение:

$$A = V\Sigma U^T,$$

где V, U — ортогональные матрицы, Σ — диагональная матрица с сингулярными числами;

- использование подматрицы максимального объема

$$A = CA_{\square}^{-1}R,$$

где A_{\square} — подматрица максимального объема, C — столбцы, R — строки, соответствующие A_{\square} .

Goreinov S.A., Tyrtyshnikov E.E., Zamarashkin N.L. A theory pseudo-skeleton approximations. // Linear Algebra Appl. 261:1-21, 1997.

План доклада

- 1 Постановка задачи
- 2 Малоранговые аппроксимации
- 3 Применение Tensor Train (ТТ) формата**
- 4 Численные эксперименты

ТТ-формат

$$a_{i_1 i_2 \dots i_d} = \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} \cdots \sum_{\alpha_{d-1}=1}^{r_{d-1}} G_{i_1 \alpha_1}^1 G_{\alpha_1 i_2 \alpha_2}^2 \cdots G_{\alpha_{d-1} i_d}^d,$$

ИЛИ

$$a(i_1, i_2, \dots, i_d) = G_1(i_1, \alpha_1) G_2(\alpha_1, i_2, \alpha_2) \dots G_d(\alpha_{d-1}, i_d),$$

$$i_j = 1, \dots, n_j, \quad j = 1, \dots, d,$$

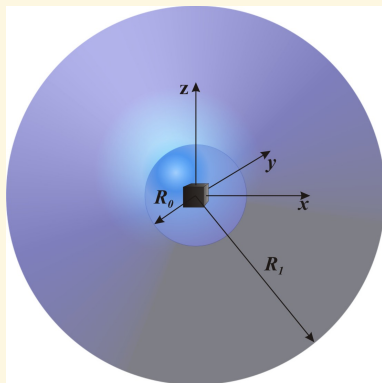
d — размерность массива, n_j — размерность j моды;
 $G_k(\alpha_{k-1}, i_k, \alpha_k)$, $k = 1, \dots, d$ — ядра (трехиндексные массивы);

r_k , $k = 1, \dots, d - 1$ — ТТ ранги.

Oseledets I.V., Tyrttyshnikov E.E. TT-cross algorithm for the approximation of multidimensional arrays. // Linear Algebra Appl. 432:1, pp.70-88, 2010.

<https://github.com/oseledets/TT-Toolbox>

Параметризация



$$a(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3}.$$

Область расчетных точек \mathbf{x} :

$$[-0.5, 0.5] \times [-0.5, 0.5] \times [-0.5, 0.5]$$

Область источников \mathbf{y} : $R_0 = 2.0$,
 $R_1 = R(\varepsilon)$

Вне области \mathbf{y}

$$A = \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}_0|^3} \cdot \frac{|\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}_0|^3}{|\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}|^3}.$$

Шаг по координатам \mathbf{x} равномерный.

По \mathbf{y} сферические координаты, шаг по радиусу:

$$h = R \frac{1 - \sqrt[3]{1 - \varepsilon}}{\sqrt[3]{1 - \varepsilon}}.$$

Пример ТТ рангов

Точность $\varepsilon = 10^{-2}$.

Число узлов по модам \mathbf{x} : $n = 256 = 2^8$; \mathbf{y} : $n = 2048 = 2^{11}$,
 $R_1 = 951$.

Квантизация (Quantic ТТ или QТТ формат):

$$i_k = \sum_{m=1}^{d_i} (2^{m-1} - 1) \Psi_{km}, \quad k = 1, \dots, d_i, \quad d_i = 8,$$

$$j_k = \sum_{m=1}^{d_j} (2^{d_j+1-m} - 1) \Xi_{km}, \quad k = 1, \dots, d_j, \quad d_j = 11.$$

Mode	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Rank	4	4	4	6	9	16	30	71	52
Mode	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Rank	27	15	9	7	4	4	4	3	2

Время расчета: < 5 минут, объем — < 1 Мб, $\mathcal{O}(dr^2)$.

Алгоритм использования тензорного поезда

- Для блока с разделенными \mathbf{x} и \mathbf{y} преобразуем координаты к данным в ТТ формате.
- Определяем набор мультииндексов $(\psi_{i1}, \dots, \psi_{id_i})$ для $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n_i$ и $(\xi_{i1}, \dots, \xi_{id_j})$ для $\mathbf{y}_i, i = 1, \dots, n_j$.
- Вычисляем факторы разложения:

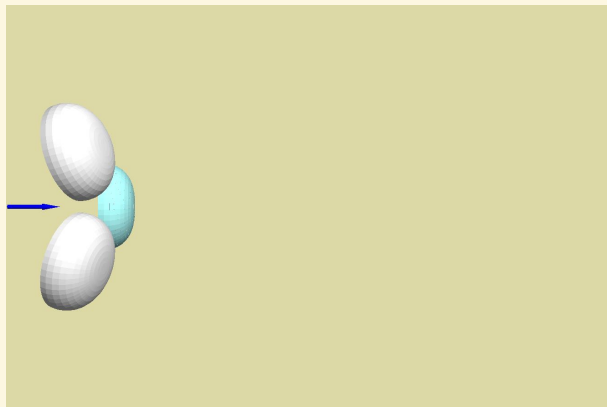
$$\begin{aligned}
 u(i, \alpha_{d_i}) &= G_1(\psi_{i1}, \alpha_1) \dots G_{d_i}(\alpha_{d_i-1}, \psi_{id_i}, \alpha_{d_i}), \\
 &\quad i = 1, \dots, n_i, \quad \alpha_{d_i} = 1, \dots, r_{d_i} \\
 v(i, \alpha_{d_i}) &= G_d(\xi_{id_j}, \alpha_d) \dots G_{d_i+1}(\alpha_{d_i+1}, \xi_{id_i+1}, \alpha_{d_i}), \\
 &\quad i = 1, \dots, n_j, \quad \alpha_{d_i} = 1, \dots, r_{d_i}, \quad d = d_i + d_j.
 \end{aligned}$$

- Учитывая однородность аппроксимируемой функции, преобразуем факторы.
- Дожимаем факторы с помощью SVD.
- Блоки не разделенные по \mathbf{x} и \mathbf{y} вычисляем явно.

План доклада

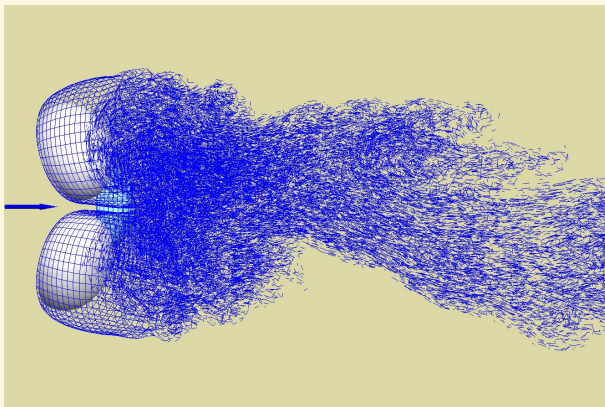
- 1 Постановка задачи
- 2 Малоранговые аппроксимации
- 3 Применение Tensor Train (ТТ) формата
- 4 Численные эксперименты

Результаты расчетов



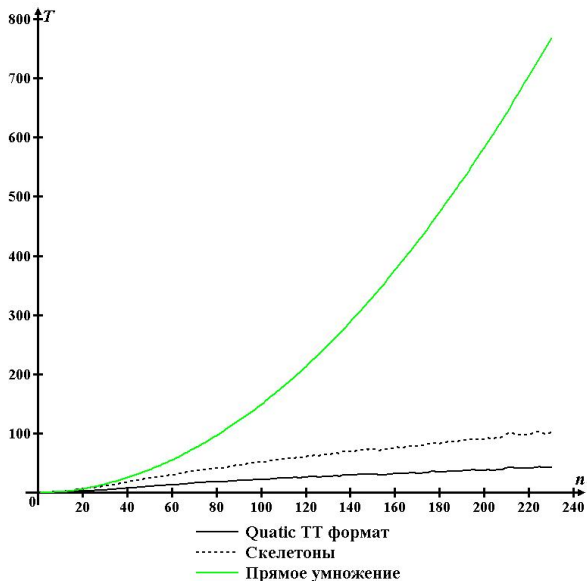
Геометрия
обтекаемых
объектов.

Результаты расчетов



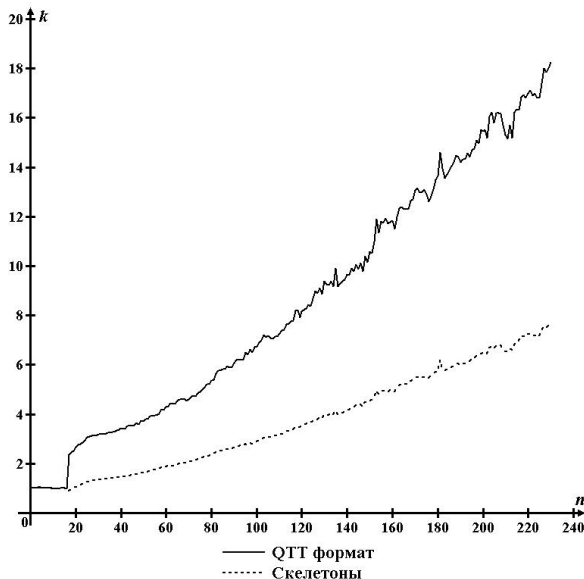
Вихревая
пелена за
объектами.

Результаты расчетов



Зависимость
времени
вычисления
 T от
номера
временного
шага n .

Результаты расчетов



Зависимость
коэффициента
ускорения
вычислений
 k от номера
временного
шага n .

Спасибо за внимание!