Didelės skaičiavimo apimties skaitinių algoritmų analizė ir optimizavimas

Rima Kriauzienė (VU MII)
Doktorantūros metai – 2015 m. – 2019 m.

Vadovas – prof. habil. dr. R. Čiegis (VGTU),
Konsultantas – prof. dr. J. Žilinskas (VU MII).

Mokslo kryptis: Informatika (09 P).

Spalio 18 d., 2016 m., Vilnius, Lietuva

Išlaikyti 3 egzaminus:

1. Skaitiniai metodai – 2016 m. sausis.
2. Daugiamačių duomenų vizualizavimo metodai – 2016 m. balandis.
3. Optimizacijos teorija, algoritmų sudėtingumas – 2016 m. rugsėjis.

Literatūros apžvalga ir analizė:

- Diferencialinių lygčių modeliai su neklasikinėmis kraštinėmis sąlygomis, jų optimalus parinkimas.

Mokslinio tyrimo vykdymas:
2.1. Tyrimo metodikos sudarymas:
1. Matematinių modelių parinkimas ir analizė.

Doktorantūros planas 2015 m. spalio 1 d. – 2016 m. spalio 1 d.

Dalyko pavadinimas	**Kreditų skaičius ECTS**	**Atsiskaitymo data**	**Įvykdyta**
Skaitiniai metodai	9	2016 m. sausis	10 2016-01-06
Daugiamačių duomenų vizualizavimo metodai	7	2016 m. balandis	10 2016-04-18
Optimizacijos teorija, algoritmų sudėtingumas	7	2016 m. rugsėjis	9 2016-07-01
Lygiagretieji ir paskirstytieji skaičiavimai	9	2016 m. gruodis	?

Dalyvavimas konferencijose, seminaruose, kitose doktorantų mobilumo veiklose

- Žiemos mokykla – NESUS Winter School & PhD Symposium 2016, February 8–11, 2016, West University of Timisoara, Romania.
- 21st International Conference Mathematical Modelling and Analysis, June 1 - 4, 2016, Tartu.

Išlaikyti 1 egzaminą:

- Lygiagretieji ir paskirstytieji skaičiavimai – 2016 m. gruodis.

Literatūros apžvalga ir analizė:
1. Neklasikinių uždavinių lygiagrečiųjų algoritmų sudarymas ir analizė.
2. Optimizavimo uždaviniai, kai esminiai apribojimai apibrėžiami diferencialinių lygčių modeliais.

Mokslinio tyrimo vykdymas:
2.1. **Tyrimo metodikos sudarymas**:
1. Matematinių modelių parinkimas ir analizė.
2. Skaičiavimo algoritmų ir lygiagrečiųjų algoritmų parinkimas ir realizavimas.

2.2. **Teorinis tyrimas**:
1. Matematinių modelių aproksimavimas diskrečiaisiais algoritmais.

2.3. **Empirinis tyrimas**:
1. Nelokaliųjų uždavinių sprendimas ir analizė.

2.4. **Gautų duomenų analizė, apibendrinimas, išvadų parengimas**:
1. Atliktų skaitinių algoritmų asimptotiniams metodams aptarimas ir išvadų parengimas.

Šriodingerio lygties Koši uždavinys

$$
\begin{aligned}
& i\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} = 0, \\
& \tilde{u}(x,0) = u_0(x), \quad -\infty < x < \infty.
\end{aligned} \tag{1}
$$

Norint uždavinį išspręsti baigtinėje srityje, formuluojame tokias kraštines sąlygas:

$$
\begin{aligned}
& i\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \ \ x \in [a,b], t \in [0,T] \\
& u(x,0) = u_0(x) \\
& L_l u(a) = 0, L_r u(b) = 0.
\end{aligned} \tag{2}
$$

Nagrinėjama sritis $x \in [A,B]$. Tada L_l, L_r turi būti

$$
\int_0^T \int_A^B |\tilde{u} - u|^2 \, dxdt \leq \varepsilon, \tag{3}
$$

$$
a \leq A < B \leq b. \tag{4}
$$

Literatūra

- X. Antoine and C. Besse. Unconditionally stable discretization schemes of non-reflecting boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation. Journal of Computational Physics, 188:157175, 2003. doi:10.1016/S00219991(03)00159-1

- A. Arnold. Numerically absorbing boundary conditions for quantum evolution equations. VLSI DESIGN, 6(14):313319, 1998.

- V.A. Baskakov and A.V. Popov. Implementation of transparent boundaries for numerical solution of the Schrödinger equation. Wave Motion, 14:123128, 1991.

- L. Di Menza C.H. Bruneau and T. Lehner. Numerical resolution of some nonlinear Schrödinger-like equations in plasmas. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 15(6):672696, 1999.

- L. Di Menza. Transparent and absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation in a bounded domain. Numerical Functional Analysis and Optimization, 18(78):759775, 1997. http://dx.doi.org/10.1080/01630569708816790.

- J. Szeftel. Design of absorbing boundary conditions for Schrödinger equations in Rd. SIAM J. Numer. Anal., 42:15271551, 2004.

Dirichlė kraštinės sąlygos

Kai sritis yra $x \in [A, B]$, galime parinkti kraštines sąlygas

- $L_l u(a) = u(a), L_r u(b) = u(b)$,
- $u(a) = u(b) = 0$.

Tiksliosios pralaidžios kraštinės sąlygos

Atlikę aritmetinius veiksmus

$$u_t + u_{xx} = 0,$$
$$-(-i)u_t + u_{xx} = 0,$$
$$\left(u_x - \sqrt{(-i)\partial_t} u\right)\left(u_x + \sqrt{(-i)\partial_t} u\right) = 0. \quad (5)$$

gauname

$$u_x = +\sqrt{(-i)\partial_t} u$$
$$u_x = -\sqrt{(-i)\partial_t} u.$$

Formuluojame tikslias kraštines sąlygas.

Tikslios pralaidžios kraštinės sąlygos

$$\partial_n u + e^{-i\frac{\pi}{4}} D_t^{1/2} u = 0, \quad (6)$$

kur,

$$D_t^{1/2} u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{u(x,s)}{\sqrt{t-s}} ds$$

yra nelokalus operatorius.Yra įvairūs būdai aproksimuoti šias kraštines sąlygas.

Vienas iš būdų aproksimuoti kraštines sąlygas racionaliomis trupmenomis

$$\partial_n u + e^{-i\frac{\pi}{4}} D_t^{1/2} u = 0.$$

Atliekame Laplaso transformaciją pagal t

$$\partial_n \hat{u} + e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt[+]{i\omega}\,\hat{u} = 0. \tag{7}$$

Furjė simbolio $\sqrt[+]{i\omega}$ aproksimacija racionaliomis trupmenomis

$$\sqrt[+]{i\omega} \approx a_0 + \sum_{k=1}^{m} \frac{a_k i\omega}{i\omega + d_k}$$

$$a_k > 0, d_k > 0, \quad k = 0, \ldots, m.$$

Pade koeficientų skaičiavimo formulės

$$a_0^m = 0, a_k^m = \frac{1}{m\cos^2\left(\frac{(2k+1)\pi}{4m}\right)}, d_k = \tan^2\left(\frac{(2k+1)\pi}{4m}\right).$$

Imkime $m = 3$.

[1] I. Alonso-Mallo and N. Reguera. Weak ill-posedness of spatial discretizations of absorbing boundary conditions for Schrödinger-type equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis. 40(1):134–158, 2002*

Furjė simbolio aproksimacijos paklaidos minimizavimas L_2 normoje

1 minimizavimo uždavinys

$$\min_{(a_0, a_1, \ldots a_m, d_1, \ldots d_m)} \int_0^{\bar{T}} \left| \sqrt[+]{i\omega} - a_0 - \sum_{k=1}^{m} \frac{a_k i\omega}{i\omega + d_k} \right|^2 \frac{d\omega}{1+\omega^2}$$

tačiau nėra aišku, koks turi būti $\bar{T}$. Testui mes parinkome $\bar{T} = 100$.

3 būdas: Šeftelio aproksimacija

J. Szeftel'is [1] pasiūlė įvesti atspindžio koeficientą

$$RC(\omega) = \frac{-\sqrt{\omega} - ia_0^m - i\sum_{k=1}^{m} \frac{a_k^m(-\omega)}{-\omega + d_k^m}}{\sqrt{\omega} - ia_0^m - i\sum_{k=1}^{m} \frac{a_k^m(-\omega)}{-\omega + d_k^m}}$$

ir koeficientus rasti, sprendžiant minimizavimo uždavinį simplekso metodu.

2 minimizavimo uždavinys

$$\min_{(a_0, a_1, \ldots a_m, d_1, \ldots d_m)} R, \quad R = \left(\int_0^{T/2\pi} \left| \frac{\sqrt{r} - a_0 r - \sum_{k=1}^{m} \frac{a_k r}{1+d_k r}}{\sqrt{r} + a_0 r + \sum_{k=1}^{m} \frac{a_k r}{1+d_k r}} \right|^2 \frac{dr}{1+r^2} \right)$$

[1] J. Szeftel. Design of Absorbing Boundary Conditions for Schrödinger Equations in $\mathbb{R}^d$. *SIAM journal on numerical analysis. 42(4):1527–1551, 2004*

Sprendinys $\tilde{u}$ yra žinomas, todėl paklaidą galime minimizuoti tiesiogiai:

$\min\left(E_2\right)$

$$\min\left(E_2\right) = \min_{(a_0, a_1, \dots a_m, d_1, \dots d_m)} \left(\int\limits_a^b \left| u - \tilde{u} \right|^2 dx \right)^{1/2} \tag{8}$$

$\min\left(E_\infty\right)$

$$\min\left(E_\infty\right) = \min_{(a_0, a_1, \dots a_m, d_1, \dots d_m)} \left(\max_{x \in [A,B], T \in [0,T]} \left| u - \tilde{u} \right| \right) \tag{9}$$

1 pav. rezultatų palyginimas, naudojant skirtingus skaičiavimo metodus, kai $m = 3$

Sprendžiame srityje $[a, b] \times [0, T] = [-5, 5] \times [0, 0.8]$ ant tinklelio $J \times N = 8000 \times 4000$

Approach	R	R_F	$\|u - U\|_\infty$	$\|u - U\|_2$
J. Szeftel	3.986e-05	0.02360	0.005308	0.005053
reconstruction	1.403e-05	0.13956	0.009848	0.010290
Pade	0.00341183	16.1883	0.179313	0.173595
direct aprox.	0.00036895	0.01023	0.012174	0.010087
min (E_∞)	0.00013281	0.00819	0.000628	0.000729
min (E_2)	0.00013438	0.01040	0.000719	0.000258
Pade(m=6)	–	–	0.0485	0.04778
Pade(m=9)	–	–	0.01407	0.01395
Pade(m=12)	–	–	0.004377	0.004266

Approach	a_0	a_1	a_2	a_3	d_1	d_2	d_3
J. Szeftel	0.727	2.14	5.74	46.6	6.91	65.8	1120
reconstruction	1.722e-4	2.42	6.67	85.6	2.99	59.9	2413
Pade	0	0.357	0.667	4.98	0.0717	1	13.9
direct aprox.	0.247	0.821	2.48	15.5	0.880	10.6	156
min (E_∞)	0.632	1.87	3.34	25.0	5.66	38.0	388
min (E_2)	1.01	2.11	3.30	24.5	10.4	51.3	413

2 pav. rezultatų palyginimas, naudojant skirtingus skaičiavimo metodus, kai $m = 3$

Sprendžiame srityje $[a, b] \times [0, T] = [0, 1.5] \times [0, 0.004]$ ant tinklelio $J \times N = 12000 \times 4000$

Approach	R	R_F	$\|u - U\|_\infty$	$\|u - U\|_2$
J. Szeftel	3.98535e-05	0.167591	0.440386	0.00499987
Pade	0.00341183	16.1883	0.881757	0.0101455
direct aprox.	0.00036895	0.01023	0.732199	0.00839742
min (E_∞)	0.106152	2031.33	0.009433	0.000127
min (E_2)	0.100055	14.2786	0.015290	8.17715e-05
Pade(m=6)	–	–	0.8095	0.009301
Pade(m=9)	–	–	0.7433	0.008526
Pade(m=12)	–	–	0.6825	0.007817
Pade(m=99)	–	–	0.05907	0.0006417

	Example 1		Example 2	
Approach	$\|u - U\|_\infty$	$\|u - U\|_2$	$\|u - U\|_\infty$	$\|u - U\|_2$
min (E_∞) ex. 1	0.000628	0.000729	0.797008	0.033327
min (E_2) ex. 1	0.000719	0.000258	0.78615	0.0328071
min (E_∞) ex. 2	0.594448	0.560109	0.009433	0.000127
min (E_2) ex. 2	0.575912	0.542315	0.015290	8.17715e-05

Ačiū už dėmesį.