Оптимизация вычислений при моделировании волновых процессов

Лытаев Михаил Сергеевич к.т.н., с.н.с.

Лаборатория прикладной информатики СПИИРАН - СПб ФИЦ РАН

5 апреля 2024



< ∃⇒



- Предыстория и мотивация
- Базовая математическая модель
- Оптимизация оператора распространения
- Стохастическая модель для учета неопределенностей
- Валидация
- Практические результаты и показатели

< ∃⇒

э

Предыстория и мотивация

- Диссертация «Разработка и исследование методов численного решения задачи распространения электромагнитных волн в неоднородной тропосфере» по специальности «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» в 2019 году в СПБГУТ им. М.А. Бонч-Бруевича
 - Параметры методов нужно выбирать вручную
 - Как интегрировать такие модели в сложные программные системы?
 - В различных предметных областях (гидро, атмосферная и сейсмоакустика, радиофизика, оптика, квантовая механика) используются похожие математические модели, а методы их решения зачастую переизобретаются. Принцип универсальности мат. моделей.
 - Хочется как-то системно посмотреть на данную проблему
- Прогресс в области методов оптимизации
- Цель работы: повышение эффективности численных методов решения задач распространения волн в неоднородных волноводах

Базовая математическая модель

• Уравнение Гельмгольца

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + k^2 n^2 (x, y, z) \psi = 0, \qquad (1)$$

• Начальное условие

$$\psi\left(0,y,z\right)=\psi_{0}\left(y,z\right)$$

- Граничные условия (прозрачные)
- Особенности
 - Огромный размер расчетной области по сравнению с длиной волны
 - ▶ $n^2(x, y, z)$ функция весьма произвольного вида (разрывы, высокая вариация)
 - Наблюдается все разнообразие эффектов распространения: интерференция, дифракция, рефракция, множественное переотражение
 - Эта «простая» модель лежит в основе значительного числа более сложных, по этому важно уметь эффективно ее вычислять

Схема



Рис.

Примеры. Гидроакустика



Рис.

3

Примеры. Тропосферное РРВ



Лытаев Михаил Сергеевич к.т.н., с.н.с. (ЛаборатОптимизация вычислений при моделировании вс

7 / 45

Однонаправленное уравнение Гельмгольца

Псевдодифференциальный оператор распространения

$$u(x + \Delta x, y, z) = \exp\left(i\beta\Delta x \left(\sqrt{1 + \frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{k^2}{\beta^2}n^2(x, y, z) - 1} - 1\right)\right) u(x, y, z)$$
(2)

Учитывает интерференцию, дифракцию, рефракцию Не учитывает образное рассеяние и множественное переотражение

- Спектральные методы
 - Вычислительно эффективны
 - Плохо учитывают ГУ
 - Ограничения на n²
- Конечно-разностные методы
 - Моделирование произвольных ГУ
 - ▶ Нет ограничений на *n*²
 - Множество различных аппроксимаций и искусственных параметров

8/45

Какие задачи описывает эта модель?

- Распространение радиоволн вблизи поверхности Земли
- Распространение акустических волн в морской среде
- Распространение акустических волн в тропосфере
- Распространение акустических колебаний в грунте
- Распространение оптических волн в волноводах

Аппроксимация двумерного оператора распространения

$$\exp\left(i\beta\Delta x\left(\sqrt{1+L}-1\right)\right) \approx \frac{\prod_{l=1}^{n}1+a_{l}L}{\prod_{l=1}^{m}1+b_{l}L} = \prod_{l=1}^{p}\frac{1+a_{l}L}{1+b_{l}L}$$
$$Lu = \frac{1}{k^{2}}\frac{\partial^{2}u}{\partial z^{2}} + \left(n^{2}(x,z)-1\right)u$$

Лытаев Михаил Сергеевич к.т.н., с.н.с. (ЛаборатОптимизация вычислений при моделировании вс

э.

(3)

Оптимизация расчетной сетки

Задача: найти оптимальные параметры расчетной сетки (Δx , Δz) и порядок аппроксимации (p) Дискретное дисперсионное соотношение

$$\tilde{k}_{x}(\Delta x, \Delta y, \Delta z, a_{1} \dots a_{p}, b_{1} \dots b_{p}, \theta) = k + \frac{\ln \prod_{l=1}^{p} t_{l}}{i\Delta x},$$

$$t_l = \frac{1 + a_l \xi_d^z}{1 + b_l \xi_d^z}, \quad \xi_d^z = -\frac{1}{\beta^2 \Delta z^2} \sin^2\left(\frac{k_z \Delta z}{2}\right) - \frac{4\alpha}{\beta^2 \Delta z^2} \sin^4\left(\frac{k_z \Delta z}{2}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{k^2}{\beta^2} - 1\right).$$

Истинное дисперсионное соотношение

$$k_{x}\left(\theta\right)=k\cos\theta$$

< ∃→

Оптимизация расчетной сетки

Ошибка дискретного дисперсионного соотношения (локальная ошибка)

$$R(\Delta x, \Delta y, \Delta z, a_1 \dots a_p, b_1 \dots b_p, \theta) = |\tilde{k}_x - k_x|$$

Задача оптимизации

$$rac{p}{\Delta x \Delta z}
ightarrow \mathsf{min}$$

при условии

$$R(\Delta x, \Delta y, \Delta z, a_1 \dots a_p, b_1 \dots b_p, \theta) < \varepsilon \frac{\Delta x}{x_{max}}, \ \theta \in [0, \theta_{max}]$$

- Установлена взаимосвязь между параметрами расчетной сетки, параметрами рациональной аппроксимации, максимальным углом распространения и ошибкой численной схемы
- Позволяет получить оптимальную сетку для заданного максимального угла распространения
- Не учитывает вариации n²

Оптимизация с учетом индекса преломления

Используя теорию псевдодифференциальных операторов, были получены следующие оценки на точность аппроксимации

$$R(\Delta x, \xi_1, \xi_2) = |\exp\left(i\beta\Delta x\left(\sqrt{1+\xi_1}-1\right)\right) - \prod_{l=1}^{p} \frac{1+a_l\xi_2}{1+b_l\xi_2}|.$$
$$R(\xi) = R(\Delta x, \xi, \xi)$$

$$\xi = -\frac{k^2}{\beta^2}\sin^2\theta + \frac{k^2}{\beta^2}n^2(x,z) - 1$$

Оптимальный коэффициент распространения

$$\beta_{opt} = k \sqrt{\frac{v_{min} + v_{max} - \sin^2 \theta_{max}}{2}}, \quad n^2(x, z) \in [v_{min}, v_{max}]$$

< ∃→

э.

Оптимизация с учетом индекса преломления

 $\Delta x \Delta z \rightarrow \max$

при условии

$$\tau(\Delta x, \Delta z) \cdot n_{steps} < \varepsilon, \tag{4}$$

$$\tau(\Delta x, \Delta z) = \sup_{|\xi_1 - \xi_2| < k_0^{-2} h(\Delta z), \xi_1, \xi_2 \in [\xi_{\min}, \xi_{\max}]} R(\Delta x, \xi_1, \xi_2).$$

Получен метод оптимизации расчетной сетки, порядка аппроксимации и коэффициента распространения в зависимости от максимального угла распространения, коэффициента преломления и требуемой точности

< ∃ >

Рациональная интерполяция на отрезке



Лытаев Михаил Сергеевич к.т.н., с.н.с. (ЛаборатОптимизация вычислений при моделировании вс



Рациональная интерполяция на отрезке



Puc.: Dependence of the approximation error *R* on the propagation angle for the Padé approximation, Clenshaw-Lord approximation, rational interpolation in the Chebyshev roots and AAA method. In all cases $\Delta x = 50\lambda$, rational approximation order is [6/7].

Лытаев Михаил Сергеевич к.т.н., с.н.с. (ЛаборатОптимизация вычислений при моделировании в

Исследованы различные методы рациональной аппроксимации на отрезке: Clenshaw-Lord, Rational inteerpolation, AAA

Макс. угол распространения	3°	10°	20°	45°	60°	80°
$ heta_{max}$						
Оптимальный Δx для	600λ	50λ	11λ	1.5λ	-	-
аппроксимации Паде						
Оптимальный Δx для	2600λ	200λ	40λ	8λ	4λ	1.4λ
рациональной интерполяции						

Таблица: оптимальные значения шага Δx (больше - лучше). Порядок аппроксимации [7/8].

Рациональная интерполяция псевдоразностного оператора

Обобщение теории пвевдодифференциальных операторов на псевдоразностные

$$P \approx P_1 P_2 = \exp\left(i\beta\Delta x \left(n(x,z)-1\right)\right) \exp\left(ik\Delta x \left(\sqrt{1+\frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}}-1\right)\right)$$
(5)

$$P_2\left(\delta^2\right) = f\left(\delta^2\right) = \exp\left(ik\Delta x \left(\sqrt{1+\frac{1}{k^2}g\left(\delta^2\right)}-1\right)\right).$$

$$g(\xi) = -\frac{1}{\Delta z^2}\ln^2\left(1+\frac{\xi}{2}+\sqrt{\left(1+\frac{\xi}{2}\right)^2-1}\right),$$

$$f\left(\xi\right) u \approx \prod_{l=1}^p \frac{1+a_l\xi}{1+b_l\xi}u,$$

$$\xi \in \left[-4\sin^2\left(\frac{k\sin\theta_{max}\Delta z}{2}\right),0\right]$$

< ∃→

Рациональная интерполяция псевдоразностного оператора



Рис The dependence of the absolute error of the discrete horizontal wavenumber on the propagation Лытаев Михаил Сергеевич к.т.н., с.н.с. (ЛаборатОптимизация вычислений при моделировании вс 5 апреля 2024 19/45

- Коэффициенты рациональной аппроксимации определяются как решение задачи минимизации дисперсионного соотношения
- Известны: $\Delta x, \Delta z$, максимальный угол распростанения θ_{max}

$$\operatorname{argmin}_{a_{1}\ldots a_{p},b_{1}\ldots b_{p}}\left[\max_{k_{z}\in[0,k_{z}^{max}]}\frac{1}{k}|\tilde{k}_{x}\left(k_{z},\Delta x,\Delta z,a_{1}\ldots a_{p},b_{1}\ldots b_{p}\right)-k_{x}\left(k_{z}\right)|\right]$$
(7)

Стохастическая оптимизация



Puc.: Dependence of the discrete dispersion relation error on the propagation angle for the Padé approximation, rational interpolation and the proposed method. In all cases $\Delta x = 50\lambda$, $\Delta z = 0.25\lambda$, approximation order is equal to [6/7], $\theta_{max} = 22^{\circ}$.

Acceptable error ε at distance x_{max} from the start propagation point are given

$$\operatorname{argmax}_{\Delta x, \Delta z, a_1...a_p, b_1...b_p} [\Delta x \Delta z],$$

on condition

$$\max_{k_z \in [0, k_z^{max}]} \frac{1}{k \Delta x} |\tilde{k}_x(k_z, \Delta x, \Delta z, a_1 \dots a_p, b_1 \dots b_p) - k(k_z)| < \frac{\varepsilon}{x_{max}}.$$

< ∃→

3

Стохастическая оптимизация



Puc.: Dependence of the discrete dispersion relation error on the propagation angle at distance $x_{max}=3E3\lambda$ for the Padé approximation ($\Delta x = 10.8\lambda$, $\Delta z = 0.005\lambda$) and the proposed approach ($\Delta x = 46.9\lambda$, $\Delta z = 0.67\lambda$). In all cases approximation order is equal to [6/7], $\theta_{max} = 22^{\circ}$, desired accuracy ε =3e-4.

Условие устойчивости

$$\forall k_z \operatorname{Im}\left(\tilde{k}_x\left(k_z\right)\right) > 0.$$

$$\prod_{l=1}^{p} \frac{(k\Delta z)^2 - 4a_l x}{(k\Delta z)^2 - 4b_l x}| < 1, \ x \in [0; 1].$$
(8)

`

Лытаев Михаил Сергеевич к.т.н., с.н.с. (ЛаборатОптимизация вычислений при моделировании вс

Ξ.

Дифракция на клине. Метод дифф. эволюции



Puc.: Wedge diffraction. Spatial distribution of the filed amplitude $(20 \log |\psi|)$, obtained by the proposed method. $\Delta x = 46.9\lambda$, $\Delta z = 0.67\lambda$, approximation order is equal to [6/7].

Дифракция на клине. Аппроксимация Паде



Puc.: Wedge diffraction. Spatial distribution of the filed amplitude (20 log $|\psi|$), obtained by the Padé method. $\Delta x = 10.8\lambda$, $\Delta z = 0.005\lambda$, approximation order is equal to [6/7].

Дифракция на клине. Аппроксимация Паде



Puc.: Wedge diffraction. Spatial distribution of the filed amplitude (20 log $|\psi|$), obtained by the Padé method. $\Delta x = 46.9\lambda$, $\Delta z = 0.67\lambda$, approximation order is equal to [6/7].

Дифракция на клине. Условие устойчивости



Puc.: Wedge diffraction. Spatial distribution of the filed amplitude (20 log $|\psi|$), obtained by the proposed method without stability condition. $\Delta x = 46.9\lambda$, $\Delta z = 0.67\lambda$, approximation order is equal to [6/7].

28 / 45

Стохастическая оптимизация

X _{max}	C	A (°)	Padé		DE		Runtime
(λ) ε		Umax ()	approximation		(proposed)		gain (r)
			Δx	Δz	Δx	Δz	
			(λ)	(λ)	(λ)	(λ)	
3000	3E-4	3	1563.2	3.01	2661.0	6.9	3.9
		10	69.5	0.06	291.8	2.5	174.9
		22	10.8	0.005	46.9	0.67	591.9
		30	5.12	0.002	23.3	0.32	728.1
		45	1.6	0.0004	9.1	0.07	995.3
		60	-	-	1.1	0.007	-
		90	-	-	0.5	0.0005	-
100	1E-2	45	3.7	0.02	16.8	0.65	147.6
		60	1.5	0.007	8.6	0.45	368.6
		90	-	-	3.3	0.11	-

Таблица: Optimal values of the grid steps Δx и Δz for the Padé approximation method and the proposed approach. "-" means that reasonable values could not be obtained.

Стохастическая оптимизация

- Дальнейшее развитие
 - Рассмотреть другие типы аппроксимации и топологии численных схем
 - Построение новых топологий численных схем при помощи генетического программирования

4 E b

-

Трехмерный оператор распространения

• Расщепление

$$L_d^{ADI} u = \left[\frac{1}{\beta^2} D_{\Delta y} + \frac{1}{2} \left(\frac{k^2}{\beta^2} - 1\right)\right] \left[\frac{1}{\beta^2} D_{\Delta z} + \frac{1}{2} \left(\frac{k^2}{\beta^2} - 1\right)\right] u.$$
(9)

- Показано, что существующие методы расщепления работают лишь для очень малых углов распространения
- Расщепление при помощи стохастической оптимизации

- 14 A

ъ.



- Не требует существенных изменений в существующие программные реализации
- Установлена количественная взаимосвязь между параметрами численной схемы, углом распространения, неоднородностями и точностью вычислений
- Разработаны методы выбора оптимальных расчетных параметров в зависимости от конкретной задачи
- Скорость вычислений увеличена в 10-100 раз
- Увеличены границы применимости (повышен максимальный угол распространения)
- Показано, что свойства численной схемы (точность, устойчивость) могут быть заданы априорно

- Параметры среды никогда не известны точно, обычно в виде случайной величины
- Учет неопределенностей многократный расчет прямой задачи
- Показано, что количественно неопределенности тропосферы или скорости звука в океане могут оказывать значительное влияние
- Разрабатываются эффективные алгоритмы учета неопределенностей

Неопределенность волновода испарения





Puc.: Comparison of simulation results for various values of the ED height SD (σ_h). f = 10 GHz, $h_{src} = 10$ m, $h_e = 20$ m.

Лытаев Михаил Сергеевич к.т.н., с.н.с. (ЛаборатОптимизация вычислений при моделировании во

Неопределенность волновода испарения





Puc.: Comparison of simulation results for various values of the ED height SD (σ_h). f = 10 GHz, $h_{src} = 10$ m, $h_e = 20$ m.

Лытаев Михаил Сергеевич к.т.н., с.н.с. (ЛаборатОптимизация вычислений при моделировании вс

- Почти все алгоритмы (согласованные со средой) основаны на многократном решении прямой задачи
- Поиск источника излучения
 - В условиях множественного переотражения
- Оптимизация расположения источников излучения
- Определение неоднородностей в среде по данным измерений
 - Строится нейронное псевдодифференциальное уравнение

Согласованное со средой местоопределение ИРИ



Рис.

★ ∃ >

< 3 D

< □ > < /□ >

Валидация

• Сравнение с альтернативными моделями и численными методами

- Универсальные методы и программные пакеты
 - * на практике малоэффективны, но можно использовать для сравнения
- Решение модельных задач для частных случаев
- Сравнение в экспериментами
 - экспериментальных данных мало
 - проводить измерения долго и дорого
 - погрешности, ошибки
 - не покрывают даже малой части возможных эффектов и явлений
 - преимущество междисплинарного подхода в возможности проверять на различных экспериментальных данных

< ∃ >

= nar

Моделирование ультразвуковой установки для борьбы с цианобактериями

- ультразвук -> маленькая длина волны -> требуется густая сетка
- Выбор и обоснование оптимальной диаграммы направленности



Рис.: Пространственное распределение амплитуды акустических волн в термоклине.

Моделирование зоны видимости в сетях VANET

- существенно трехмерная среда, частота 5 ГГц -> маленькая длина волны -> требуется густая сетка
- получены количественные характеристики распространения и влияния различных неоднородностей



Рис.: Распространение радиоволн на перекрестке.

40 / 45

Моделирование зоны видимости в сетях VANET

- Распространение в прямой видимости возможно на расстояниях, превосходящих 700 м от источника
- Без прямой видимости уровень сигнала существенно зависит от взаимного расположения зданий и антенн в зоне распространения
- При планировании беспроводных сетей в условиях отсутствия прямой видимости использование средств моделирования распространения волн является обязательным
- Легковые автомобили не оказывают существенного влияния на уровень сигнала
- Грузовые автомобили и автобусы могут способствовать затуханию на 10-20 дБм
- Влияние трафика более заметно в свободном пространстве без массивных препятствий, чем в волноводе городского каньона;
- Высота зданий не оказывает серьезного влияния на распространение, т.к. волны способны огибать здания сверху, если его высота превышает 4-5 этажей

Моделирование зоны видимости в сетях VANET

- В качестве баз данных расположения зданий и зеленых насаждений можно использовать данные картографического сервиса OpenStreetMap
- Метод трехмерного двунаправленного ПУ может эффективно применяться в задаче распространения радиоволн в условиях городской застройки
- Полноценные (indoor) трёхмерные реализации метода RT требуют больших вычислительных затрат при моделировании в реальных городских условиях,
- а упрощенные (outdoor) версии оставляют вопросы к своей адекватности и надежности, т.к. в них не проявляются некоторые важные эффекты распространения.

< 3 >

Моделирование ретранслятора на базе БПЛА



Рис.: Оптимальное расположение ретранслятора в горах.

Библиотека с открытым исходным кодом PyWaveProp



- Моделирование тропосферного распространения радиоволн над неровным рельефом, растительностью, в тропосферном волноводе
- Распространение акустических волн в неоднородной морской среде
- Автоматический выбор расчетных параметров
- Визуализация
- https://github.com/mikelytaev/wave-propagation

Показатели (с 2020 года)

- Публикации
 - ▶ 6 статей в журналах Q1/Q2
 - 2 статьи ВАК
 - ▶ 9+2(приняты) статей в трудах международных конференций (A, TopConf)
- Гранты
 - ► Грант РНФ № 21-71-00039 2021-2023 г (Руководитель)
 - ► Грант РНФ № 23-71-01069 2023-2025 г (Руководитель)
 - ▶ НИР № П33-1-26/9 от 15.06.2020. Федеральное агентство связи. 2020. (Исполнитель)
 - ► Бюджетная НИР FFZF-2022-0003 (Исполнитель)
- Конкурс на лучшую научную работу СПб ФИЦ РАН
 - Победитель (2022, 2023)
 - Призер (2020, 2021)

< ∃ >