



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 154 за 2018 г.](#)



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Алексеев А.К., [Бондарев А.Е.](#)

О применении разложения
по динамическим модам в
задачах вычислительной
газовой динамики

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Алексеев А.К., Бондарев А.Е. О применении разложения по динамическим модам в задачах вычислительной газовой динамики // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 154. 30 с. doi:[10.20948/prepr-2018-154](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-154)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-154>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

А.К.Алексеев, А.Е.Бондарев

**О применении разложения
по динамическим модам в задачах
вычислительной газовой динамики**

Москва — 2018

Алексеев А.К., Бондарев А.Е.

О применении разложения по динамическим модам в задачах вычислительной газовой динамики

Метод разложения по динамическим модам (Dynamic mode decomposition, DMD) представляет собой алгоритм поиска оператора эволюции (решения обратной операторной задачи) в конечномерном пространстве решений задачи (численных или экспериментально полученных) по набору решений (срезов, "snapshots") в некоторые последовательные моменты времени. Расширение фазового пространства за счет использования нелинейного (относительно переменных задачи) базиса позволяет построить глобальный линейный оператор, описывающий линейную эволюцию в расширенном "спрямляющем пространстве" (оператор Купмана) и сопряженный ему оператор Перрона-Фробениуса. Метод DMD эквивалентен сжато представлению линейного оператора эволюции в виде произведения прямоугольных матриц, что обеспечивает значительную экономию необходимой памяти при вычислениях. Рассмотрены основные свойства метода DMD и предоставляемые им возможности. Представлены результаты применения DMD к нелинейному нестационарному двумерному течению сжимаемого невязкого газа.

Ключевые слова: разложение по динамическим модам, оператор Купмана, оператор Перрона-Фробениуса, уравнения Эйлера

Alexey Kirillovich Alexeev, Alexander Evgenyevich Bondarev

On the application of the dynamic mode decomposition in problems of computational fluid dynamics

The Dynamic mode decomposition (DMD) method is an algorithm for searching for an evolution operator (inverse operator problem solutions) in a finite-dimensional problem solution space (numerical or experimentally obtained) in a set of solutions (slices, "snapshots") in some consecutive moments of time. Expansion of the phase space due to the use of a nonlinear basis (relative to the variables of the problem) allows us to construct a global linear operator describing a linear evolution in the extended "rectifying space" (the Coopman operator) and the Perron-Frobenius operator that is its adjoint one. The DMD method is equivalent to a compressed representation of a linear evolution operator in the form of a product of rectangular matrices, which provides significant savings in the required memory during calculations. The main properties and possibilities of the DMD method are considered. The results of DMD application to nonlinear nonstationary two-dimensional flow of compressible inviscid gas are presented.

Key words: dynamic mode decomposition, Coopman operator, Perron-Frobenius operator, Euler equations

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект 18-11-00215.

Введение

В последнее время при анализе течений приобретает все большую популярность разложение по динамическим модам (Dynamic mode decomposition, DMD). В частности, DMD буквально на глазах становится популярным методом анализа и визуализации нестационарных структур в течениях жидкости, применяемым как к данным расчета, так и данным эксперимента. Некоторые особенности и перспективы использования DMD мы хотим здесь обсудить. Более или менее полный обзор работ, посвященных разработке и применению DMD, крайне затруднен из-за экспоненциального роста количества публикаций на эту тему. Часть статей, представляющих особый интерес для целей данной работы, представлены в [1-11].

С формальной точки зрения, DMD служит методом построения аппроксимации оператора Купмана [12,13], который является линейным оператором, описывающим динамику системы в некотором пространстве наблюдаемых (нелинейных функций динамических переменных). Оператор Купмана тесно связан (сопряжен) с оператором Перрона-Фробениуса (пропагатором обобщенного уравнения Лиувилля), описывающим линейную динамику плотности вероятности [14-19].

Таким образом, оператор Купмана открывает перспективы для линейного анализа существенно нелинейных задач. В некотором смысле этот метод глобальной линеаризации аналогичен методу вложения Карлемана [20], используемому при решении ОДУ с полиномиальной правой частью.

Аппроксимация оператора Купмана требует либо априорного знания подходящего набора нелинейных базисных функций, либо сталкивается с "проклятием размерности". Это создает серьезные вычислительные проблемы для применения в крупномасштабных задачах, типа задач вычислительной аэрогазодинамики. Тем не менее, и в таком случае сохраняется возможность получения некоторой нелинейной информации с использованием методов ядра (kernel trick), в том числе в бесконечномерном пространстве [5,6].

Фактически в DMD речь идет о методе численного определения части собственных чисел Λ и правых собственных векторов Ω_R линейного оператора A , задающего эволюцию течения на некотором временном интервале в некотором пространстве наблюдаемых (функций от динамических переменных). Собственные правые вектора обозначаются как динамические (Купмановские) моды, коэффициенты разложения по этим векторам обозначаются как амплитуды (собственные функции Купмана). В качестве исходных данных используется набор пространственных полей (срезов, snapshots) течения, чаще всего (но не обязательно) расположенных через фиксированный интервал времени. DMD перспективен с точки зрения поиска и визуализации нестационарных структур в потоке, в особенности с учетом имеющегося потенциала применения к нелинейным процессам.

Используемые в DMD алгоритмы с незначительными дополнительными усилиями позволяют определить также и набор левых собственных векторов Ω_L оператора и, соответственно, сформировать сжатое представление оператора Купмана в виде произведения прямоугольных матриц $A_r = \Omega_R \Lambda \Omega_L$. Такая форма позволяет преодолеть одно из основных препятствий, возникающих при использовании оператора A в явном виде, а именно огромный размер матрицы. Наличие вычислимой аппроксимации оператора A представляет интерес с точки зрения нескольких классов задач: в частности, позволяет автоматически получать сопряженный оператор A^* , используемый при решении задач восприимчивости [21,22], а также оператор A^*A , спектр которого позволяет определять наиболее быстро возрастающие возмущения на конечном интервале времени [23-25].

В данной работе рассмотрены вопросы аппроксимации оператора Купмана в линейном и нелинейном вариантах, включая оценку купмановских частот через собственные числа, вопросы зависимости динамических мод от интервалов времени между срезами, корректность задачи определения оператора Купмана, перспективные области применимости, существующие вычислительные проблемы. Данные вопросы рассмотрены с точки зрения применимости к задачам вычислительной аэрогазодинамики. В качестве тестового примера рассмотрена задача взаимодействия сверхзвуковой струи с плоской поверхностью в автоколебательном режиме.

1. Разложение по динамическим модам

Рассмотрим основные элементы метода DMD в соответствии с основополагающими работами [1,2]. Пусть мы имеем набор расчетов $N+1$ срезов (snapshots) $Sn_1^{N+1} = \{u_1 \dots u_{N+1}\} \in R^{M \times (N+1)}$, представляющих мгновенные поля нестационарного течения в последовательные моменты времени, отстоящие друг от друга на равный временной интервал Δt . Каждый срез представлен вектором $u_i \in R^M$. В [1,2] показано, что при достаточно длинном наборе данных можно получить собственные числа $\lambda_j \in C$ и правые собственные вектора $v_j \in C^M$ оператора A , что позволяет представить срезы в виде

$$u_k = \sum_j a_j v_j \lambda_j^{k-1} = \sum_j a_j v_j e^{(\sigma_j + i\omega_j)(k-1)\Delta t}. \quad (1)$$

Правые собственные вектора оператора A обозначаются как динамические (купмановские) моды, им соответствуют (купмановские) собственные числа, амплитуды разложения $a_i \in C$ обозначаются как собственные функции Купмана.

Основной вычислительной задачей с этой точки зрения является определение динамических мод, собственных чисел и коэффициентов

разложения по известному набору срезов. Осуществлять это можно различными методами, мы здесь придерживаемся в основном [1]. Предполагается, что существует (неизвестный) линейный оператор $A(\Delta t) \in R^{M \times M}$, такой, что $u_{i+1} = Au_i$. Тогда срезы представляют последовательность Крылова $Sn_1^{N+1} = \{u_1, Au_1, A^2u_1, \dots, A^Nu_1\}$, из которой выделим два набора срезов $X = \{u_1 \dots u_N\}$ и $Y = \{u_2 \dots u_{N+1}\} = AX$, $X, Y \in R^{M \times N}$. По мере увеличения числа срезов последовательность Sn_1^{N+1} должна все более точно захватывать основные физические особенности изучаемого процесса. Естественно предположить, что после превышения некоторого критического числа срезов следующие срезы будут линейно зависеть от предыдущих (аналогично итерационным процессам крыловского типа). Когда этот предел достигнут, можно выразить u_{N+1} через предыдущие срезы (с погрешностью r):

$$u_{N+1} = c_1u_1 + c_2u_2 + \dots + c_Nu_N + r. \quad (2)$$

Подставив u_{N+1} в Y и введя сопровождающую матрицу $C \in R^{N \times N}$

$$C = \begin{pmatrix} 0 & & c_1 \\ 1 & 0 & c_2 \\ & 1 & 0 \\ & & \dots & \dots \\ & & & 1 & c_N \end{pmatrix}, \quad (3)$$

получим $Y = X \cdot C + r$, при малом r выполняется $Y \approx X \cdot C$ и, соответственно, одно из основных соотношений DMD:

$$A \cdot X = Y = X \cdot C. \quad (4)$$

Формально из (4) можно сразу получить выражение $A = XCX^{-1}$, указывающее на связь спектров матриц A и C , однако мы и далее будем следовать подходу [1], как более пригодному для крупномасштабных задач (с большими размерами матриц).

Можно показать, что спектр сопровождающей матрицы $Cy^c = \lambda y^c$, $\{y^c\} = \Omega_R^c$ позволяет определять спектр оператора A . Для этого используем сингулярное разложение (SVD) [26] набора срезов

$$X = U \Sigma V^*, \quad (5)$$

где $U \in R^{M \times N}$, $V \in R^{N \times N}$.

Так как матрица срезов в большинстве интересных случаев необратима, используем псевдообратную матрицу (Moore-Penrose [26]) $X^+ = X^*(X \cdot X^*)^{-1}$,

которая для SVD имеет вид $V\Sigma^+U^*$. Ниже $\Sigma^+ = \text{diag}(\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_r^{-1}, 0, \dots, 0)$ иногда будем обозначать как Σ^{-1} .

Тогда из $Y = XC$ следует

$$C = V\Sigma^{-1}U^*Y. \quad (6)$$

Трансформируем матрицу C с помощью преобразования:

$$\tilde{C} = (V\Sigma^{-1})^{-1}C(V\Sigma^{-1}). \quad (7)$$

Оператор $\tilde{C} \in R^{N \times N}$ имеет смысл пропагатора в маломерном пространстве, натянутом на N векторов U .

При данном преобразовании собственные числа сохраняются, а собственные вектора изменяются: $y^C = V\Sigma^{-1}y^{C^-}$, $y^{C^-} = \Sigma V^*y^C$.

Далее, подставив (6) в (7), получим

$$\tilde{C} = U^*YV\Sigma^{-1}. \quad (8)$$

Из $A \cdot X = X \cdot C$ получим $A \cdot U\Sigma V^* = U\Sigma V^* \cdot C$, $A \cdot U = U\Sigma V^* \cdot C \cdot (\Sigma V^*)^{-1}$ и $A \cdot U = U\tilde{C}$.

Учтя $\tilde{C} = W\Lambda W^{-1}$ ($W = \Omega_R^{C^-}$), получим

$$A \cdot UW = UW \cdot \Lambda. \quad (9)$$

Отсюда видно, что собственные числа Λ матрицы \tilde{C} совпадают с собственными числами A .

Правый собственный вектор A имеет вид:

$$\Omega_R^A = UW = U\Omega_R^{C^-}. \quad (10)$$

Поскольку матрицы C и \tilde{C} несимметричны, правые собственные вектора не образуют ортогонального базиса. Для полного описания необходимо использование левых собственных векторов, которые образуют с правыми биортогональную пару. Левые собственные вектора получаются из $A \cdot X = X \cdot C$ с помощью SVD разложения $A \cdot U\Sigma V^* = U\Sigma V^* \cdot C$, далее из цепочки преобразований $V\Sigma^+U^* \cdot A \cdot U\Sigma V^* = C$ и $V\Sigma^+U^* \cdot A = C \cdot V\Sigma^+U^*$,

$U^* \cdot A = (V\Sigma^+)^{-1} \cdot C \cdot V\Sigma^+U^* = \tilde{C}U^*$, учитывая $U^* \cdot A = W\Lambda W^{-1}U^*$, получаем $W^{-1}U^* \cdot A = \Lambda W^{-1}U^*$, что позволяет определить левый собственный вектор A

$$\Omega_L^A = W^{-1}U^* = \Omega_L^{C^-}U^*. \quad (11)$$

Таким образом, весь спектр оператора A (собственные числа и собственные вектора) может быть определен по SVD разложению набора срезов.

Наличие правых Ω_R^A и левых Ω_L^A собственных векторов позволяет производить разложение функций в ряд по правым собственным векторам (1) $u_k = \sum a_j v_j \lambda^{k-1}$, ($k=1, N$). При этом коэффициенты разложения a_j (амплитуды динамических мод) могут считаться по начальному приближению $u_1 = a_j v_j$ с использованием условия биортогональности $v_k l_i^* = \delta_{ik}$:

$$a_i = u_1 l_i^* = a_k v_k l_i^*. \quad (12)$$

Несколько иной вариант построения DMD, использующий разложение по ненормированным собственным векторам A представлен в [2]. Еще один метод, существенно отличающийся от [1,2], описан в [3] и использует оптимизационный подход, позволяющий сокращать размеры базиса.

2. Построение сжатой аппроксимации оператора Купмана

Имеющийся набор данных позволяет сконструировать оператор A через произведение матриц

$$A_r = \Omega_R^A \Lambda \Omega_L^A. \quad (13)$$

Получившаяся аппроксимация полностью эквивалентна DMD:

$$u_k = (\Omega_R \Lambda \Omega_L)(\Omega_R \Lambda \Omega_L) \dots \Omega_R \Lambda (\Omega_L u_1) = (\Omega_R \Lambda \Omega_L)^{k-1} u_1 = \Omega_R \Lambda^{k-1} \Omega_L u_1 = \sum a_i v_i \lambda_i^{k-1}. \quad (14)$$

В численных экспериментах удалось добиться восстановления полной матрицы оператора A в маломерном случае (матрица 5×5) с помощью выражения (13) и квадратных матриц.

Но для задач газодинамики явный матричный вид, где все матрицы имеют полный размер (квадратные) $A \in R^{M \times M}$, $\Omega_R \in R^{M \times M}$, $\Omega_L \in R^{M \times M}$, $\Lambda \in R^{M \times M}$, использовать невозможно из-за огромных требований к памяти (размер $3M^2 + M$) и времени счета. Например, для двумерных задач (сетка (100×100)), размер одного среза $M \sim 4 \times 10^4$. Для трехмерных задач размер одного среза на такой, достаточно скромной, сетке составляет $M \sim 5 \times 10^6$.

Поэтому вариант с неявным сжатым построением A_r через произведение прямоугольных матриц, где $A \in R^{M \times M}$, $\Omega_R \in R^{M \times N}$, $\Omega_L \in R^{N \times M}$, $diag(\Lambda) \in R^N$, представляет существенный интерес, так как обеспечивает хранение оператора в сжатом виде ($2M \times N + N$ вместо $3M^2 + M$ чисел).

В двумерном случае для $M \sim 4 \times 10^4$ и $N \sim 40$ экономия памяти достигает трех порядков по величине, экономия времени счета больше из-за нелинейного роста времени расчета спектра при увеличении размеров матрицы.

3. Анализ частот

DMD позволяет рассчитать набор сопряженных пар собственных чисел $\lambda_j = a_j \pm ib_j$ и соответствующих собственных векторов. Собственные числа можно записать как $\lambda_j = |\lambda_j| e^{\pm i\alpha_j} = |\lambda_j| (\cos \alpha_j \pm i \sin \alpha_j) = |\lambda_j| e^{\pm i\omega_j \Delta t}$, $|\lambda_j| = e^{\sigma_j \Delta t}$. Здесь α_j – фазовый угол, а величина $\omega_j = \alpha_j / \Delta t$ в работах по DMD трактуется как частота.

Однако, из-за периодичности и возможности разного направления вращения, фазовый угол определен неединственным образом. Например, углы $(\alpha_j, -\alpha_j)$ и $(\alpha_j - 2\pi, 2\pi - \alpha_j)$ соответствуют одной и той же паре сопряженных чисел, но получены различным направлением вращения и, соответственно, дают разные частоты вращения

$$\begin{aligned} (\omega_j^{(1)}, -\omega_j^{(1)}) &= (\alpha_j / \Delta t, -\alpha_j / \Delta t) \\ (\omega_j^{(2)}, -\omega_j^{(2)}) &= ((\alpha_j - 2\pi) / \Delta t, (2\pi - \alpha_j) / \Delta t). \end{aligned} \quad (15)$$

Таким образом, одного набора срезов и, соответственно, собственных чисел недостаточно для однозначного определения частот вращения собственных векторов.

В данной работе определение частот ω_j осуществлялось сравнением двух наборов срезов для близких интервалов между наблюдениями ($\Delta t \gg \delta t$), которые формально дают $\alpha_k(\Delta t)$ и $\alpha_k(\Delta t + \delta t)$. К сожалению, дифференцирование $\omega_k = d\alpha_k / dt$ оказалось существенно неустойчивым.

Поэтому применялся менее прозрачный алгоритм. В соответствии с ним фиксировались собственные вектора и числа, определенные по первому набору срезов. Второй набор срезов $u_k^{(2)}$ сравнивался с прогнозом с помощью невязки

$$\varepsilon(\Delta t + \delta t) = \sum_k \sum_j (u_{k,j}^{(2)} - \sum_i a_i v_{i,j} e^{\sigma_j(k-1)\Delta t} e^{i\omega_j(k-1)(\Delta t + \delta t)}) \cdot (u_{k,j}^{(2)} - \sum_i a_i v_{i,j} e^{\sigma_j(k-1)\Delta t} e^{i\omega_j(k-1)(\Delta t + \delta t)})^* / 2. \quad (16)$$

При этом предполагалось, что каждая комбинация частот соответствует некоторому двоичному числу разрядностью N_{compl} (здесь N_{compl} – количество комплексных собственных чисел). Таким образом, сравнивались невязки для $\omega_j^{(1)}(\Delta t + \delta t)$, $-\omega_j^{(1)}(\Delta t + \delta t)$ и $\omega_j^{(2)}(\Delta t + \delta t)$, $-\omega_j^{(2)}(\Delta t + \delta t)$. Частоты, при которых наблюдался минимум $\varepsilon(\Delta t + \delta t)$, соответствовали некоторой смеси частот $\omega_j^{(1)}$ и $\omega_j^{(2)}$, отражающей вращение собственных чисел в разных направлениях. Более высокие гармоники, соответствующие $\alpha_j + 2\pi m$, не проверялись.

При умеренном количестве комплексных векторов (N_{compl} порядка 10) этот алгоритм оказался работоспособен. К сожалению, вычислительные затраты растут как $2^{N_{compl}}$, что ограничивает его применимость, при расчетах с большим набором срезов (порядка 40) часть собственных чисел с наименьшими $|\lambda_j|$ игнорировалась. Поэтому, несмотря на полученные результаты, для полного анализа частот (с учетом всех источников неединственности) дифференцирование $\omega_k = d\alpha_k/dt$ представляется единственным перспективным вариантом, и вопрос о его устойчивой реализации остается открытым [7].

4. Корректность задачи построения оператора Купмана

Рассмотренное выше построение A_{ji} является обратной задачей по восстановлению оператора из наблюдений его действия. Большинство обратных задач поставлены некорректно [27], поэтому для этой задачи нельзя исключить неустойчивости при определении амплитуд и частот. Рассматриваемая задача имеет некоторые аналогии с задачами интегральной геометрии по восстановлению функции по набору ее интегралов [28], которые в значительной степени являются некорректно поставленными.

Рассмотрим с эвристической точки зрения непрерывный аналог нашей задачи, сводящийся к поиску функции двух переменных $A(x, y)$ по набору функций $u(x, t_k)$, $k = 1, N-1$, таких, что $u(x, t_k + \Delta t) = \int A(x, y)u(y, t_k)dy$. Пусть искомая функция возмущена: $A(x, y) = A_0(x, y) + n \sin(n^2 y)$. Норма $\|A(x, y) - A_0(x, y)\|_C \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$.

В то же время

$$\begin{aligned} |u_n(x, t_k + \Delta t) - u_0(x, t_k + \Delta t)| &\leq \left| \int_a^b n \sin(n^2 y) u(y, t_k) dy \right| = \\ &\left| -u(y, t_k) \frac{1}{n} \cos(n^2 y) \Big|_a^b + \int_a^b \frac{\partial u(y, t_k)}{\partial y} \frac{1}{n} \cos(n^2 y) dy \right| \leq \frac{C}{n}, \end{aligned} \quad (17)$$

и $\|u_n(x, t_k) - u_0(x, t_k)\|_C \leq \frac{C}{n}$.

Таким образом для достаточно гладких функций (например, $u(x, t) \in H^1(\Omega)$) исходные данные $u(x, t_k)$ могут содержать сколь угодно малую погрешность, при которой вариация искомой функции $A(x, y)$ сколь угодно велика, что иллюстрирует неустойчивость и некорректность задачи.

В связи с этим регуляризация решения данной задачи представляет существенный интерес. Работа [3] при поиске амплитуд в оптимизационном подходе использует регуляризацию DMD через регуляризующий член, содержащий модули амплитуд $a_k = l_k u_1$, несмотря на полученные

положительные результаты, регуляризация только по части переменных выглядит недостаточной.

Из (13) видно, что в основе DMD лежит предположение о том, что оператор A диагонализируем, что существенно ограничивает область применимости. В случае общего положения случайная действительная матрица является диагонализируемой [29], поэтому, даже если точная матрица недиагонализируема, влияние погрешности расчета “с вероятностью, близкой к 1” превратит ее в диагонализируемую. Таким образом, в расчетах мы сталкиваемся с диагонализируемыми матрицами, но они могут быть неустойчивы.

5. DMD для истинно нелинейных задач (EDMD)

Строго говоря, первоначальная версия DMD работает в пространстве решений основной задачи и поэтому является некоторой линейной аппроксимацией оператора эволюции. В работах [5-6] рассмотрено расширение DMD с использованием нелинейных базисных функций и метода ядра (kernel trick), которое строит оператор Купмана как линейный оператор в базисе нелинейных функций динамических переменных. Соответствующий вариант называется EDMD (Extending Dynamic Mode Decomposition). В соответствии с ним выбирается набор нелинейных функций от $x \in R^M$ $\{\psi_1(x) \dots \psi_L(x)\}$ длиной L ($L \gg M$) и формируются векторы $\vec{\psi}(x_i) = \{\psi_1(x_i) \dots \psi_L(x_i)\}$. Набирается набор $N+1$ срезов, позволяющих сформировать набор $\Psi_X, \Psi_Y \in C^{L \times L}$ (функций от $X, Y \in R^{M \times M}$), таких, что $\Psi_Y = A\Psi_X$.

Пропагатор $A = \Psi_Y \Psi_X^+$ имеет также форму

$$A = HG^+ \in C^{L \times L} \quad (18)$$

с использованием Грамианов $H = \Psi_Y \Psi_X^*$, $G = \Psi_X \Psi_X^*$ и $A = \Psi_Y \Psi_X^+ = \Psi_Y \Psi_X^* (\Psi_X \Psi_X^*)^+$.

Аналог сопровождающей матрицы $C = \Psi_X^+ \Psi_Y = (\Psi_X^* \Psi_X)^+ \Psi_X^* \Psi_Y$ может быть записан как

$$C = \tilde{G}^+ \tilde{H} \in C^{N \times N}, \quad (19)$$

где $\tilde{G} = \Psi_X^* \Psi_X = \psi_i(x_m) \psi_j(x_m)$, $\tilde{H} = \Psi_X^* \Psi_Y = \psi_i(x_m) \psi_j(y_m)$, $\tilde{G}, \tilde{H} \in R^{N \times N}$.

Использование грамианов позволяет использовать в EDMD метод ядра (kernel trick). Для этого надо выбрать словарь функций так, чтобы их скалярное произведение соответствовало значениям некоторой функции двух переменных (функции ядра) $\vec{\psi}(x_j)^T \vec{\psi}(x_i) = \psi_k(x_j) \psi_k(x_i) = f(x_i, x_j)$. В таком случае можно генерировать матрицы $\tilde{G}_{ij} = f(x_i, x_j)$ и $\tilde{H}_{ij} = f(y_i, x_j)$, используя функцию ядра f вместо скалярного произведения, что позволяет радикально сократить объем вычислений. Набор ядер достаточно велик, достаточно часто они описывают

скалярное произведение в бесконечном пространстве (например, $f(u, v) = \tanh(u \cdot v)$).

В качестве примера расширим пространство наблюдений до полиномов степени α и используем конечномерное ядро

$$f(z, x) = (1 + z^* x)^\alpha = (1 + z_i^* x_i)^\alpha. \quad (20)$$

В простейшем двумерном случае $\vec{z}, \vec{v} \in R^2$
 $f(\vec{z}, \vec{v}) = (1 + \vec{z}\vec{v})^2 = (1 + z_1 v_1 + z_2 v_2)^2 = (1 + 2z_1 v_1 + 2z_2 v_2 + 2v_1 v_2 z_1 z_2 + z_1^2 v_1^2 + z_2^2 v_2^2)$

скалярное произведение $(\psi_i \psi_j)$ можно рассчитать как покомпонентным умножением, так и прямым расчетом функции. Использование ядра позволяет экономно рассчитывать скалярное произведение $f(\vec{z}, \vec{v}) = (\vec{\psi}(\vec{z}), \vec{\psi}(\vec{v}))$, в шестимерном пространстве $\vec{\psi}(\vec{v}) = \{1, \sqrt{2}v_1, \sqrt{2}v_2, v_1 v_2, v_1^2, v_2^2\} \in R^6$. При дальнейшем росте размерности пространства динамических переменных или степени полинома эффективность этого подхода резко растет.

Построение сопровождающей матрицы $C = \tilde{G}^+ \tilde{H}$ или ее действия позволяет считать $C_2, C_4, C_\alpha \dots$ (или их спектр) с помощью kernel trick с умеренными затратами ресурсов. Это позволяет получить информацию только о собственных числах оператора Купмана.

Строго говоря, полное построение пропагатора EDMD $A = \Psi_Y \Psi_X^\dagger$ и даже его действия на вектор в пространстве полиномов затруднено из-за огромного размера памяти (L^2).

Однако линейная часть пропагатора A в форме EDMD может быть представлена достаточно компактно, в размерности динамических переменных и числа срезов.

Запишем EDMD в виде $\vec{\psi}_y = A \vec{\psi}_x$, ($\psi_k(u_{i+1}) = A_{kj} \psi_j(u_i)$, $A_{kj} \in R^{L \times L}$). Если существуют компоненты вектора $\vec{\psi}(\vec{u}_i) = \{\psi_1(\vec{u}_i) \dots \psi_L(\vec{u}_i)\}^L$, соответствующие линейным по u_i членам, то их можно сгруппировать с младшими индексами. Тогда нелинейную динамику можно описать в укороченном виде

$$y_i = W_{ij} \psi_j(\vec{x}), \quad (21)$$

$$(\vec{x} = \vec{u}_i, \vec{y} = \vec{u}_{i+1}, W_{ml} \in R^{M \times L}).$$

Несмотря на то что $W_{ml} \in R^{M \times L}$ сокращена по сравнению с первоначальным видом $A_{kj} \in R^{L \times L}$, наличие в размерности переменной $L \gg M$ по-прежнему исключает ее практическую применимость. Аналогично [30,31] разложим W_{mk} по нелинейному базису в виде

$$W_{mk} = \beta_{mi} \vec{\psi}_k(\vec{u}_i). \quad (22)$$

В соответствии с [30] β_{mi} можно определить через

$$B = (G + \lambda E)^+ Y = (\Psi_X \Psi_X^* + \lambda E)^+ Y. \quad (23)$$

Теперь мы получаем еще одну форму оператора Купмана $y = \vec{B}_\phi(\vec{x})$, которая оперирует с линейным выходом от нелинейного входа и в индексной форме имеет вид:

$$y_m = \beta_{mi} \phi_i(\vec{x}), \quad (24)$$

$$\beta_{mi} \in R^{M \times N}.$$

Нелинейные базисные функции имеют вид $\phi_i(\vec{x}) = (\psi_k(\vec{u}_i) \psi_k(\vec{x}))$, $i = 1 \dots N$. Kernel trick позволяет в этом выражении заменить скалярное произведение на функцию ядра $\psi_k(\vec{u}_i) \psi_k(\vec{x}) = f(\vec{u}, \vec{x})$, что делает вычисление базисных функций осуществимым.

$$x_i^{n+1} = \tilde{B}_{im} \varphi(\vec{x}^n, \vec{x}_m) = \tilde{B}_{im} \varphi_m(\vec{x}^n) = \tilde{B}_{im} (1x_k^n + X_{km})^\alpha. \quad (25)$$

Данная форма описывает действие оператора Купмана, а $\tilde{B}_{im} \in R^{M \times N}$ является вычислимой аппроксимацией оператора Купмана (точнее, его проекцией на фазовые переменные). К сожалению, физически прозрачной трактовки как $\phi_i(\vec{x})$, так и \tilde{B}_{im} на данный момент предложить не удастся. Поэтому проблема аппроксимации как самого оператора Купмана, так и его собственных векторов для крупномасштабных задач (типа задач вычислительной газодинамики) по-прежнему упирается в поиск базиса приемлемой размерности. Это обуславливает применение DMD в его первоначальной форме для сильно нелинейных задач и ограничивает область применимости.

6. Связь оператора Купмана с оператором Перрона-Фробениуса

Как уже обсуждалось, DMD позволяет глобальную линейризацию задач за счет построения оператора Купмана по набору расчетов для систем ОДУ и ЧДУ, включая уравнения газовой динамики. Эта линейризация основана на том, что оператор Купмана (линейный) является сопряженным оператором Перрона-Фробениуса [15-19].

Для иллюстрации этого факта в соответствии с [15] рассмотрим эволюцию фазового пространства $u = f^t(u_0)$, эволюцию пространства наблюдаемых (функций от фазовых переменных) $a(u(t))$ и эволюцию соответствующей

функции распределения $\rho(u, t) = (L^t \circ \rho)(u) = \int \delta(u - f^t(u_0)) \rho(u_0, 0) du_0$. Эволюция плотности распределения описывается оператором Перрона-Фробениуса

$$P^t(v, u) = \delta(v - f^t(u)). \quad (26)$$

Оператор Купмана

$$K^t(u, v) = \delta(v - f^t(u)) \quad (27)$$

описывает эволюцию любой наблюдаемой

$$[K^t a](u) = a(f^t(u)) = \int K^t(u, v) a(v) dv. \quad (28)$$

Операция усреднения наблюдаемой по фазовой переменной соответствует скалярному произведению

$$\begin{aligned} \langle a \rangle(t) = (\rho, a) &= \int a(u) \rho(u) du = \frac{1}{|\rho_M|} \int a(f^t(u)) \rho(u) du = \\ &= \frac{1}{|\rho_M|} \int [K^t a](u) \rho(u) du = \frac{1}{|\rho_M|} \int \delta(v - f^t(u)) a(v) \rho(u) du dv, \end{aligned}$$

относительно которого операторы Купмана и Перрона-Фробениуса являются сопряженными:

$$\int [K^t a](u) \rho(u) du = \int [P^t \rho](v) a(v) dv, \quad (K^t a, \rho) = (P^t \rho, a). \quad (29)$$

Таким образом, эффект глобальной линеаризации достигается за счет неявного перехода к некоторой “кинетической” постановке, так как оператор Перрона-Фробениуса является пропагатором линейного уравнения Лиувилля. Однако явная форма этого уравнения в работах по DMD не указывается, и ее возможная форма остается неясной.

С помощью DMD оператор Купмана достаточно надежно считается для задач аэрогазодинамики. Формально это позволяет рассчитывать оператор Перрона-Фробениуса с очень умеренными затратами вычислительных мощностей. Однако остается открытым вопрос, как обойти «проклятие размерности», типичное для задач, моделирующих перенос плотности вероятности некоторой физической величины. Для оператора Купмана это удастся сделать с помощью метода ядра (*kernel trick*), однако переход от оператора Купмана к оператору Перрона-Фробениуса не является тривиальным с точки зрения размера используемой памяти вследствие прямоугольной формы матриц левых и правых собственных векторов оператора Купмана.

Формально получить его можно в соответствии с [16] как

$$P = (\Psi_X \Psi_X^*)^+ \Psi_Y \Psi_X^*. \quad (30)$$

Однако здесь *kernel trick* не проходит, и мы сталкиваемся с "проклятием размерности" $P \in R^{L \times L}$, $L \gg M$.

7. Перспективные приложения оператора Купмана

Основными приложениями DMD на данный момент являются визуализация течения с помощью действительных и мнимых компонент динамических мод (правых собственных векторов), собственных чисел в различных представлениях, амплитуд разложения в зависимости от частоты.

На наш взгляд, построение аппроксимации оператора Купмана в виде произведения трех матриц имеет определенные перспективы в целом ряде дополнительных приложений. Часть из них относятся к линейному анализу (немодовый рост возмущений, восприимчивость), часть (наиболее сложная) – к нелинейному.

7.1 Восприимчивость

С учетом того, что собственные вектора Ω_L, Ω_R для оператора Купмана A и оператора B совпадают, DMD представляется перспективным методом расчета восприимчивости течения к возмущениям начального поля. Собственные правые вектора прямого $A(\Delta t)$ и сопряженного операторов $A^*(\Delta t)$ (Ω_R и Ω_L соответственно) биортогональны. Это обстоятельство существенно при определении восприимчивости течения к внешним возмущениям. Известно из [21,22], что чтобы максимально возбудить k -ую моду прямой задачи v_k , начальное приближение должно соответствовать k -ой моде сопряженной задачи l_k . Таким образом, если правые собственные вектора A (динамические моды) полезны при поиске основных особенностей течения, левые собственные вектора определяют восприимчивость течения к возмущению.

Наличие собственных векторов Ω_L в нашем случае позволяет практически автоматически определять восприимчивость течения к возмущениям начального поля (в комплексном случае вычисляется восприимчивость как к амплитуде, так и к фазе возмущения). В работах [21,22] для этого ставились и решались сопряженные задачи.

7.2 Сингулярные вектора

В работах [23-25] показано, что возмущения, максимально растущие на данном временном интервале (сингулярные вектора), можно связать с собственными векторами оператора, получаемого из произведения прямого и сопряженного пропагаторов. Для решения линейного уравнения $du/dt = Bu$ при постоянном B существует оператор

$$u(t) = e^{B\Delta t} u_1 = Lu_1. \quad (31)$$

Норма решения имеет вид

$$\|u(t)\| = (Lu_1, Lu_1) = (u_1, L^*Lu_1). \quad (32)$$

Поиск максимально (в данной норме) растущих линейных возмущений $\|u(t)\|/\|u_1\|$ на временном интервале Δt сводится к поиску собственных векторов задачи $L^*L\eta_{\max} = \sigma_{\max}^2 \eta_{\max}$ с максимальным собственным числом σ_{\max}^2 . Соответствующие величины можно определить с помощью простой итерации с использованием действия оператора L^*L . В [23-25] соответствующий спектр определялся итерационным методом, включающим повторное решение прямой и сопряженной задач. В нашем случае мы практически автоматически получаем его аппроксимацию в виде A^*A .

При достаточно малом сдвиге по времени между срезами оператор Купмана соответствует линейным процессам, что потенциально позволяет использовать его для расчета сингулярных векторов.

7.3 Расчет оператора Перрона-Фробениуса

Оператор Перрона-Фробениуса интересен прежде всего с точки зрения задач расчета переноса случайной погрешности данных задачи.

Определенные перспективы применения этого оператора имеются для прогноза погоды на ансамбле [32-34] с точки зрения перехода от расчета ансамбля решений к расчету плотности распределения решений, что могло бы привести к созданию более эффективного алгоритма.

Оператор Перрона-Фробениуса представляет интерес также с точки зрения численного расчета мерозначных решений уравнений газодинамики, перспективных с точки зрения моделирования турбулентности [35]. В отличие от варианта, описанного в [35], этот подход позволяет отказаться от метода Монте-Карло, что также дает надежду на создание более эффективного подхода с численной точки зрения.

Вычислительно дешевый метод расчета уравнения Лиувилля может быть также полезен при поиске и анализе многозначных решений [36].

8. Результаты тестовых расчетов

Тесты проводились как для маломерных тестовых задач, с известным заранее матричным оператором A , так и для полноразмерной задачи, с оператором A , восстанавливаемым по набору N срезов, полученных при решении двумерных нестационарных уравнений Эйлера.

В расчетах для SVD разложения использовались программы DGESVD (LAPACK [37]) и SNAUPD, SNEUPD (ARPACK [38]), результаты близки.

Для расчета спектра (собственных значений, левых и правых собственных векторов) сопровождающей матрицы (несимметричной и имеющей комплексные собственные числа и вектора) использована подпрограмма DGEEV (LAPACK).

В расчетах для маломерных задач ($M \times N$, где $M=5$ и $N=5$) удается полностью восстановить исходный A по набору его действий. Для полноразмерной задачи удалось восстановить аппроксимацию оператора в виде произведения прямоугольных матриц $M \times N$, где $M=36000$ и $N=10 \div 50$, некоторые результаты представлены ниже.

8.1 Модельная газодинамическая задача

Известно, что при нормальном воздействии недорасширенной сверхзвуковой струи на плоскую поверхность режим течения зависит от таких параметров, как число Маха на срезе M_a , степень нерасчетности $n = p_0 / p_a$, расстояние от среза сопла x/d_a , $\gamma = C_p / C_v$. В некотором достаточно узком интервале этих параметров наблюдаются автоколебательные режимы течения [39,40].

В данной работе для тестирования DMD использованы результаты расчета нестационарного автоколебательного течения с помощью уравнений (2D+1) Эйлера. Конечномерная аппроксимация уравнений Эйлера рассматривается как конечномерная нелинейная динамическая система.

Следует отметить, что влияние вязкости здесь не учитывается, однако отрывное течение, вызванное падением ударных волн, может быть смоделировано при помощи невязких методов с удовлетворительным совпадением с экспериментальными данными [41]. Поэтому нестационарные результаты расчетов представляются пригодными для тестирования DMD и удобны вследствие низкой вычислительной стоимости. Решалась следующая система уравнений:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_k)}{\partial x^k} = 0; \quad (33)$$

$$\frac{\partial(\rho U_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_k U_i + P \delta_{ik})}{\partial x^k} = 0; \quad (34)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_k h_0)}{\partial x^k} = 0. \quad (35)$$

Здесь $U_1 = U, U_2 = V$ – компоненты скорости, $h_0 = (U^2 + V^2)/2 + h$, $h = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P}{\rho} = \gamma e$, $e = \frac{RT}{\gamma-1}$, $E = \left(e + \frac{1}{2}(U^2 + V^2) \right)$ – энтальпии и энергии, $P = \rho RT$ – уравнение состояния. Расчеты проводятся в области $\Omega = (0 < x < X_{\max}, 0 < y < Y_{\max})$ на временном интервале $(0 < t < t_f)$ с записью полей течения (срезов) через Δt . В качестве начальных данных используется либо произвольное поле течения, либо запись поля в некоторый момент времени.

На левой границе ($x=0$) приняты условия втекания, соответствующие параметрам на срезе сопла и параметрам окружающей среды, на правой границе задано условие непротекания. На боковых границах ($y=0, y=Y_{\max}$) накладываются условия равенства нулю производных первого порядка в уравнениях для момента импульса, плотность и температура окружающей среды в дозвуковой области, условия вытекания в сверхзвуковой области.

Расчеты проводились с помощью методов второго порядка точности по пространственной координате, описанных в работах [42,43], и второго порядка по времени.

На рис. 1 представлена история изменения давления на оси симметрии (сетка 100×90). Можно выделить явно выраженный переходный режим и следующий за ним режим нелинейных автоколебаний.

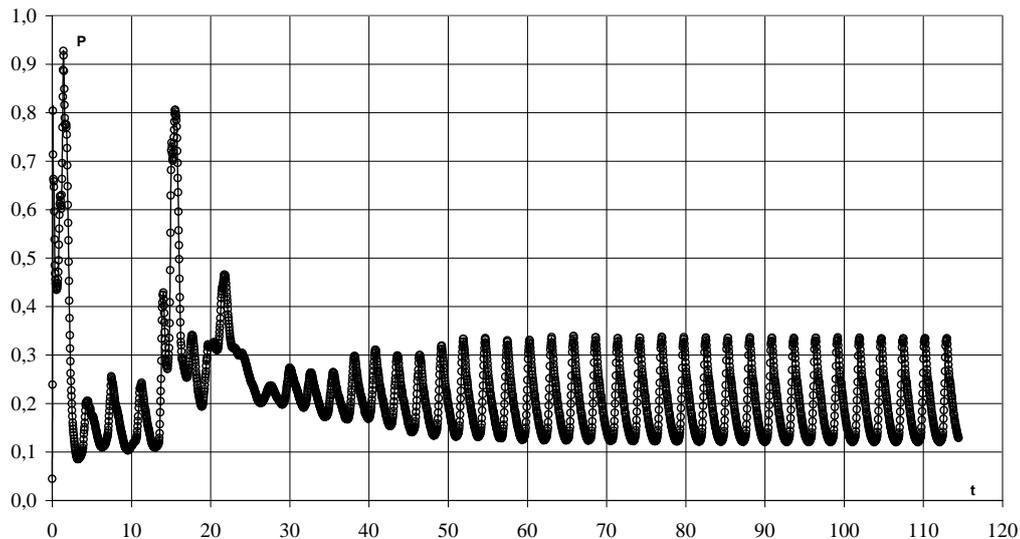


Рис. 1

Для этого режима характерно периодическое образование и исчезновение отрывной зоны. На Рис. 2 и 3 представлены изолинии плотности для случая

максимального и минимального давления (развитая отрывная зона) в центре, а также соответствующие линии тока. Результаты представлены для числа Маха на срезе $M_a = 4.0$, $\gamma = 1.4$, $x/d_a = 15$, нерасчетности $n = 4$. Течение направлено вдоль оси X и тормозится у стенки с правой стороны за ударной волной. Линии тока указывают на безотрывное течение на рис. 2 и на существенный отрыв на рис. 3. Переключение между этими двумя режимами является причиной колебаний давления.

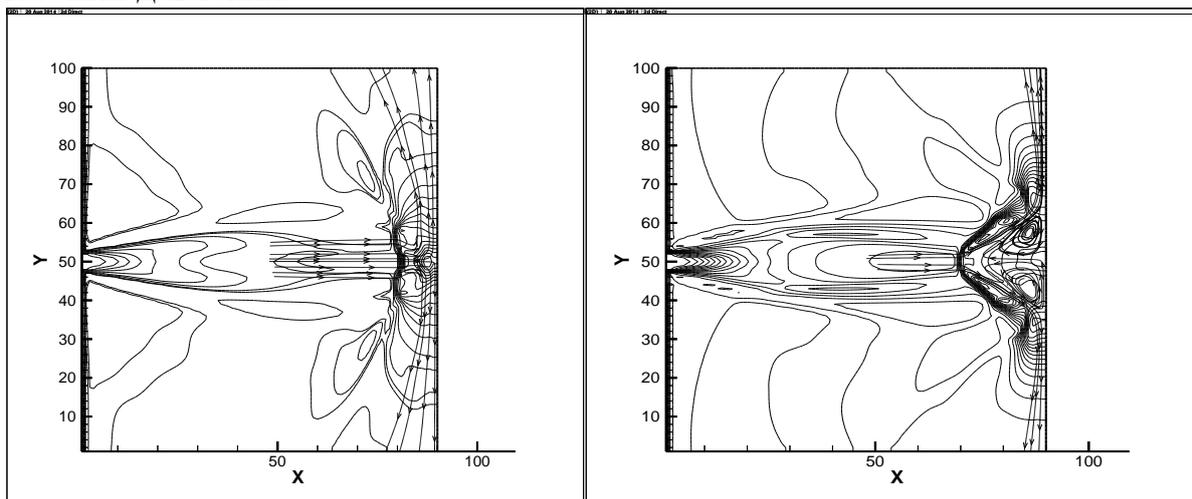


Рис. 2

Рис. 3

8.2 DMD анализ для линейного режима

Для малого расстояния Δt между срезами (несколько шагов счета разностного алгоритма) вероятна реализация линейного режима. Для линейного случая типично, что собственные числа не лежат на единичной окружности. Рис. 4 представляет комплексные собственные числа (зависимость $\lambda_{\text{Re}}(\lambda_{\text{Im}})$) для линейного режима. Интервал между срезами составляет $\Delta t = 5\tau$ (где τ – шаг конечно-объемного алгоритма). Данные соответствуют колебательной части решения, малый интервал между срезами Δt выбран, чтобы гарантировать нахождение на линейном режиме, использовано 15 срезов.

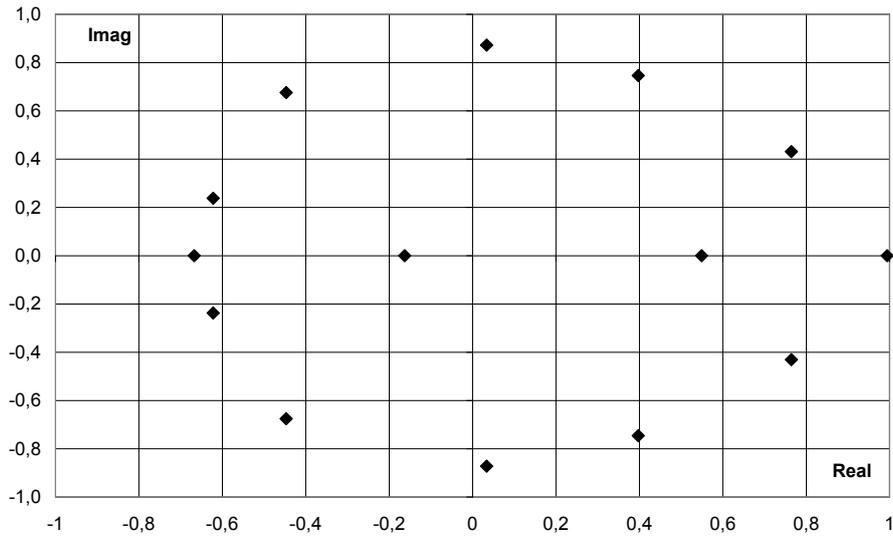


Рис. 4

Рассмотрим влияние шага между срезами Δt на Ω_R^A , (Ω_L^A). На рис. 5 и 6 представлены действительные собственные вектора $\Omega_{R,1}$ (компонента, соответствующая плотности) для $\Delta t = k \cdot \tau$ ($k = 5, 10$ шагов счета разностной схемы), можно заметить, что они изменяются слабо при изменении времени между срезами.

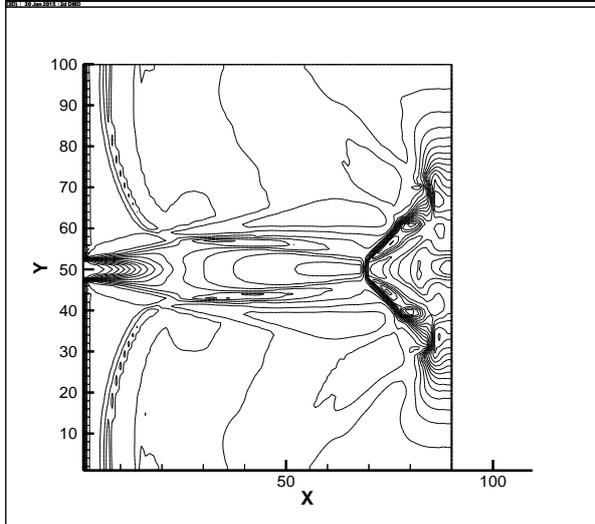


Рис. 5

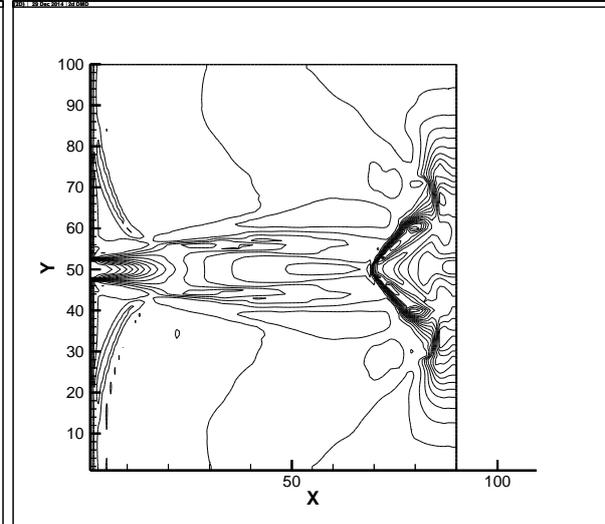


Рис. 6

Для $\Delta t = k \cdot \tau$ ($k = 5, 10$) на рис. 7 и 8 представлены амплитуды комплексных векторов $Amp(\Omega_{R,4})$, записанных в виде $v_k = Amp_k e^{i\varphi_k}$. Они также визуально схожи, хотя различия более заметны.

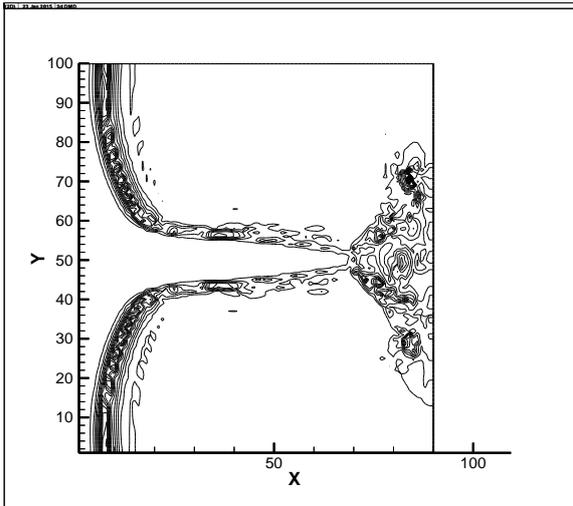


Рис. 7

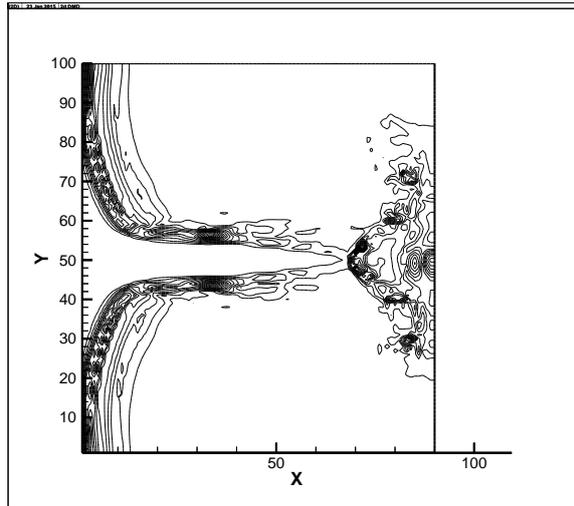


Рис. 8

Вариация некоторых компонент собственных чисел в зависимости от числа шагов k по времени представлена на рис. 9. Для действительных мод представлена величина собственного числа (линии 1,2), для комплексной моды представлен фазовый сдвиг α_4 (линия 3), можно отметить, что он меняется линейно в зависимости от числа шагов счета k .

Сравнение рисунков с рис. 5 по рис. 8 указывает на относительно малую зависимость Ω_R и Ω_L от k . В линейном приближении при малых расстояниях между срезами Δt динамика сводится к вариации $\Lambda(\Delta t)$ при постоянных Ω_R и Ω_L .

Можно сказать, что основная часть перестройки течения в данном случае идет за счет поворотов в комплексной плоскости и растяжения постоянных собственных векторов.

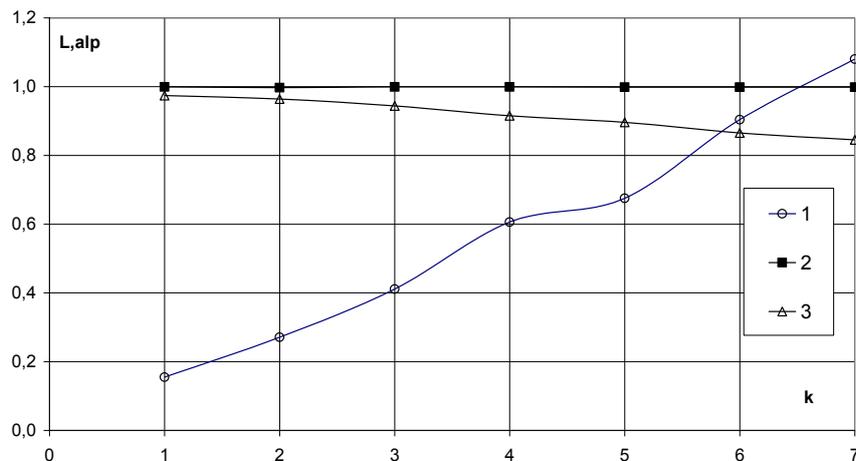


Рис. 9

При очень малых интервалах между срезами наблюдается рябь в поле течения, вероятно связанная с малыми колебаниями на дискретном шаге. При $k \geq 5$ рябь визуально не заметна.

8.3 DMD анализ для существенно нелинейного режима

Автоколебательная часть течения является существенно нелинейной, поэтому применение DMD с использованием только динамических переменных представляется не совсем оправданным (здесь надо использовать EDMD). Тем не менее, в большом количестве работ DMD используется на нелинейных режимах, и не без успеха. Рассмотрим и мы результаты использования DMD вне зоны его формальной применимости.

Ниже для тестирования метода рассмотрена только автоколебательная часть течения. На рис. 10 представлена зависимость $\lambda_{\text{Re}}(\lambda_{\text{Im}})$ для автоколебательных режимов (20 срезов) для интервала между срезами $\Delta t = 780, 790, 800$ шагов (на рис. 1, 2, 3 соответственно), несколько превышающего период колебаний ($T_{\text{osc}} \approx 750$ шагов). Собственные числа лежат на единичной окружности.

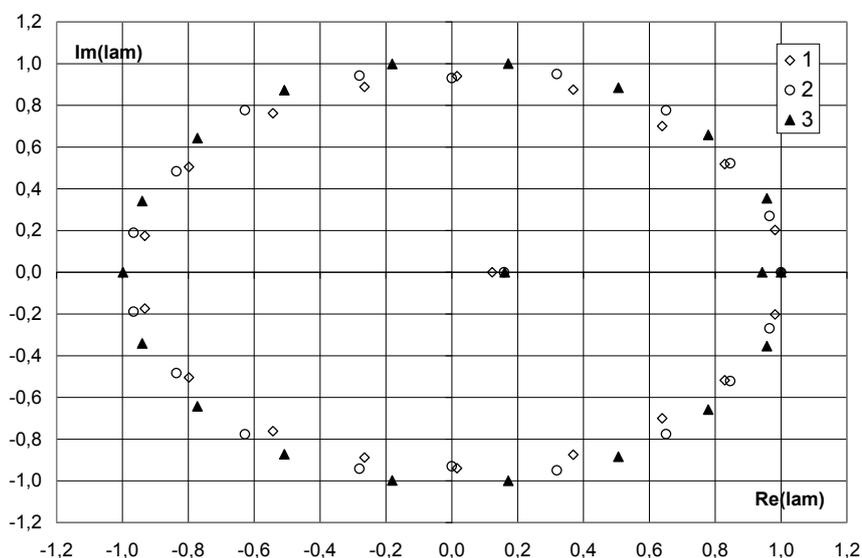


Рис. 10

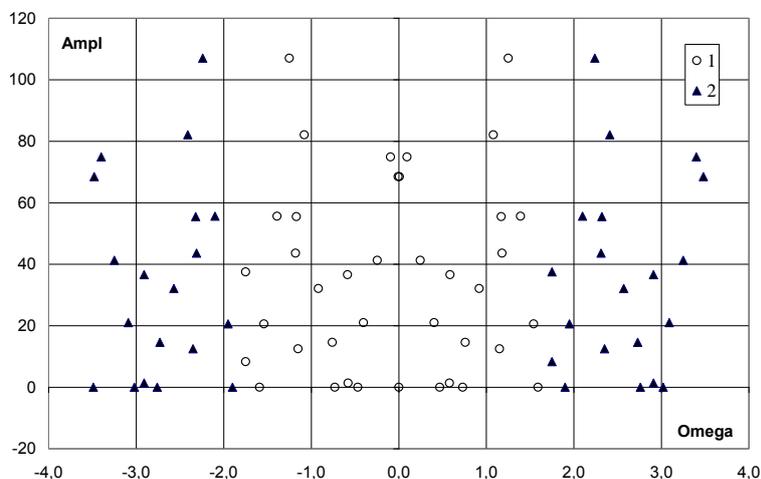


Рис. 11. 1 - меньшая частота $\omega_j^{(1)}$, 2 - большая частота $\omega_j^{(2)}$

Как уже отмечалось, фазовый угол $\alpha_k(\lambda_k)$ определен неединственным образом и не дает однозначной информации о частоте. Для углов, представленных на рис. 10 (для $\Delta t = 780$), амплитуды колебаний (собственные функции оператора Купмана) $|a_k(\omega_k)|$ представлены на рис. 11 для минимальной $\omega_j^{(1)}$ и максимальной частот $\omega_j^{(2)}$ (без учета возможного сдвига на $2m\pi$). Очевидны трудности при определении частот даже при наличии явно выраженной доминирующей частоты, причем в $\omega_j^{(1)}$ она просто не наблюдается.

Подход, упомянутый в разделе 3 (уравнение (16)), позволяет определять частоты ω_j сравнением двух наборов данных $\alpha_k(\Delta t)$ и $\alpha_k(\Delta t + \delta t)$ для близких интервалов между наблюдениями ($\Delta t \gg \delta t$). На рис. 12 представлена зависимость амплитуды от частоты для 10 (линия 1) и 40 (линия 2) срезов, максимум амплитуды соответствует основной частоте автоколебательного режима ($\omega \approx 2.3$).

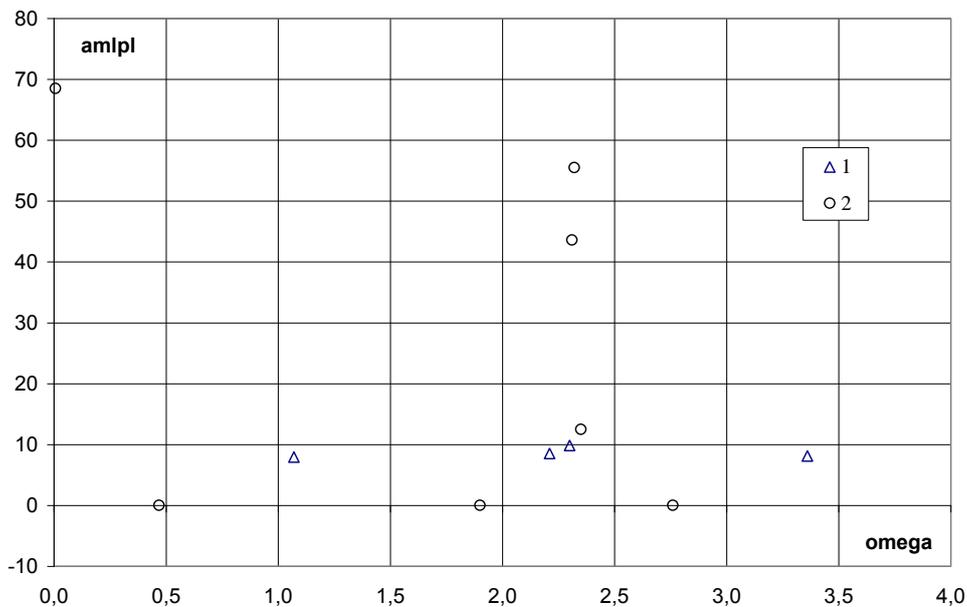


Рис. 12

Результаты, соответствующие 40 срезам, получены сохранением не более 10 пар комплексных собственных чисел с максимальным модулем при отбрасывании остальных. Таким образом, видно, что при умеренном количестве комплексных переменных (порядка 10) алгоритм расчета частот (16) работоспособен. К сожалению, затраты (в виде числа расчетов) растут как $2^{N_{comp}}$, что ограничивает его применимость. В связи с этим (а также с не разрешенной в данном подходе проблемой неединственности фазового угла при сдвигах $2m\pi$) регуляризация задачи, которая могла бы обеспечить получение частот дифференцированием фазовых углов, представляется крайне целесообразной.

Следует отметить, что результаты аппроксимации существенно зависят как от числа срезов, так и от расстояния Δt между срезами. На рис. 13 представлена зависимость нормы невязки $\|r\|$ (уравнение (2)) от числа срезов N в логарифмическом масштабе. В целом наблюдается сходимость по числу срезов, но после некоторого числа срезов она ухудшается.

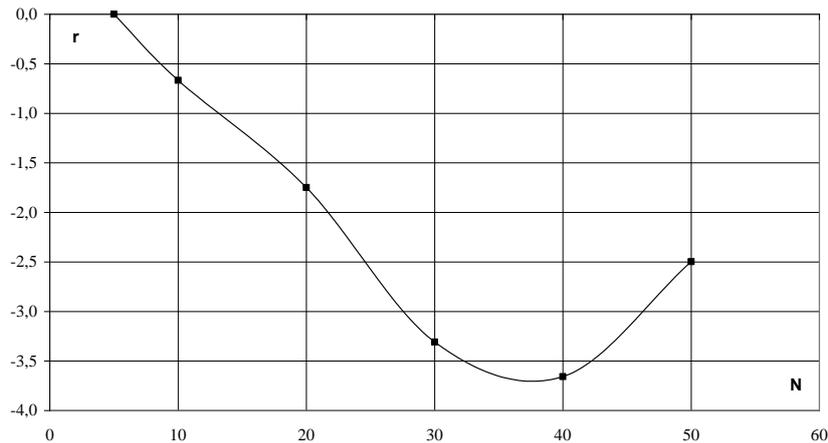


Рис. 13. Логарифм относительной нормы погрешности $\text{Log}_{10}(\|r\|/\|r_0\|)$ (2) в зависимости от числа срезов N

Существенным параметром в DMD является интервал между срезами Δt . На рис. 14 представлена зависимость нормы невязки (2) $\|r\|$ от расстояния между срезами Δt для 10 срезов.

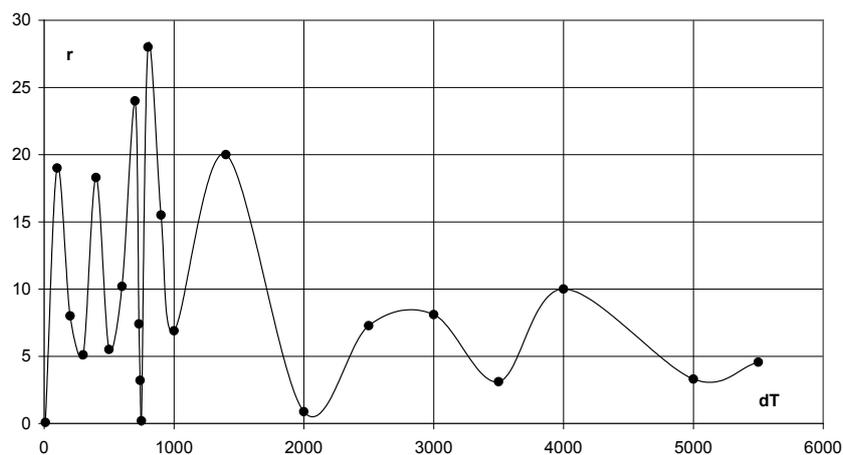


Рис. 14

Одной из причин немонотонности в данном случае является резонанс Δt с частотой колебаний, в резонансном случае $\Delta t = T_{osc}$ количество независимой информации в наборе срезов резко уменьшается, что ухудшает результаты

DMD. Это иллюстрирует тот факт, что невязка r (2) не является надежным критерием качества DMD, так как не связана с нормой оператора Купмана.

В качестве альтернативы при анализе сходимости оператора Купмана при увеличении числа срезов могла бы быть использована 2-норма оператора

$$\|A_k - A_m\|_{2;k,m \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \quad (37)$$

В данной работе эта норма вычислялась итерациями $\|A\|_2 = \max_{u \neq 0} \|Au\| / \|u\| = \max_{u \neq 0} (Au, Au) / (u, u) = \max_{u \neq 0} (A^* Au, u) / (u, u)$, но, к сожалению, сходимость операторов в этой норме при увеличении числа срезов (в диапазоне 10-50) в расчетах подтвердить не удалось. Вероятно, для получения сходимости нужно решить проблему регуляризации рассматриваемой обратной операторной задачи.

8.4 Расчет частот с помощью EDMD

Построение оператора Купмана $A = \Psi_Y \Psi_X^+$ в нелинейном пространстве затруднено из-за огромного размера необходимой памяти, также проблематично построение левых и правых собственных векторов. Однако построение сопровождающей матрицы $C = \Psi_X^+ \Psi_Y = (\Psi_X^* \Psi_X)^+ \Psi_X^* \Psi_Y = \tilde{G}^+ \tilde{H} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ с помощью kernel trick [5,6] вполне осуществимо. Так как собственные числа пропагатора и сопровождающей матрицы совпадают, существует возможность расчета собственных чисел пропагатора и соответствующих фазовых углов.

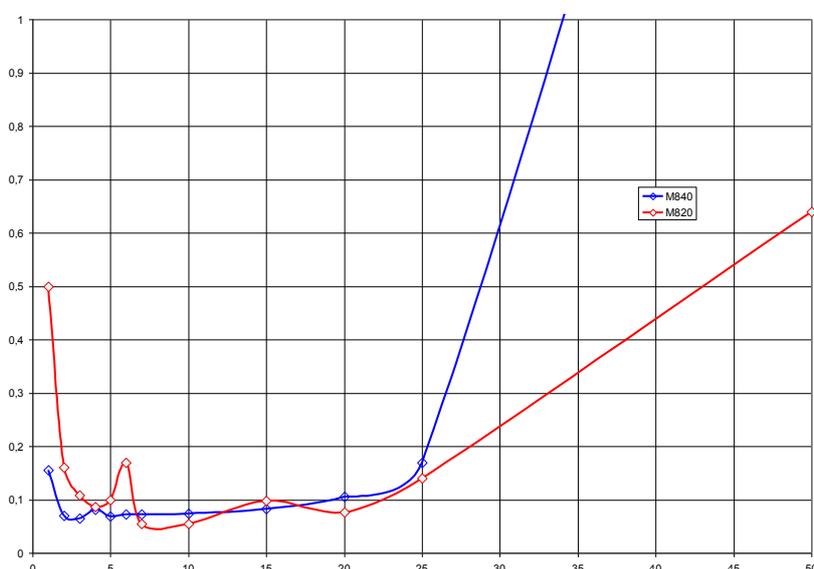


Рис. 15

Рассмотрим колебательную часть течения после окончания переходных процессов, ей соответствует условие $|\lambda_j| \approx 1$. На Рис. 15 представлено отклонение амплитуд от 1 в зависимости от порядка полинома

$\chi(\alpha) = \sum_i \left(|\lambda_j| - 1 \right)^2$, $\alpha = 1 \div 50$. Можно сделать вывод, что нелинейность данной задачи учитывается полиномами степени 7-10.

Есть также надежда (которую еще предстоит проверить), что дифференцирование какой-либо из матриц C_α для некоторой степени полинома α будет устойчиво, и им удастся воспользоваться для пересчета фазовых углов в частоты.

Она отчасти подкрепляется тем, что оператор (25) $x_i^{n+1} = \tilde{B}_{im} \varphi(\bar{x}^n, \bar{x}_m) = \tilde{B}_{im} \varphi_m(\bar{x}^n) = \tilde{B}_{im} (1 + x_k^n X_{km})^\alpha$, $\alpha = 10$, продемонстрировал свою работоспособность. На рис. 16 представлено поле течения, а на рис. 17 – его прогноз с помощью нелинейного оператора (25), совпадение визуально выглядит приемлемым.

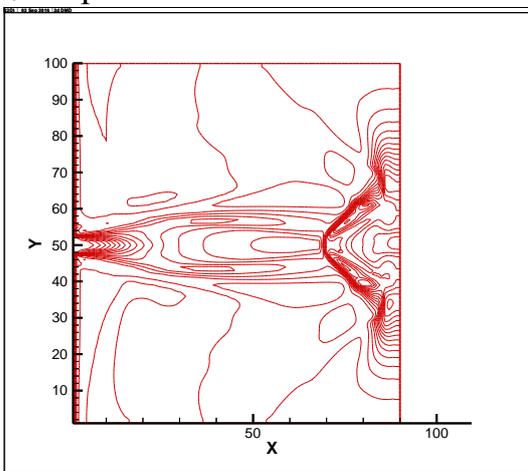


Рис. 16

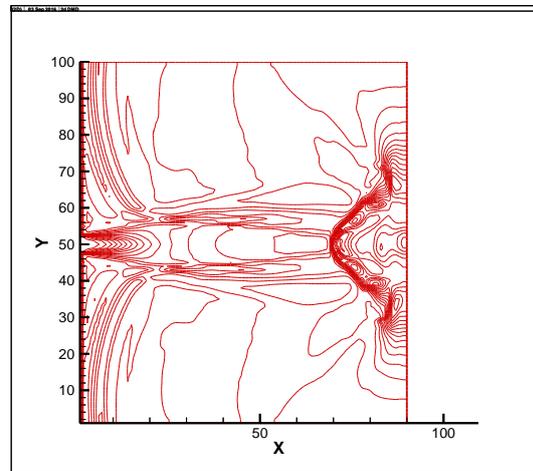


Рис. 17

9. Обсуждение

Разложение по динамическим модам является новой быстро развивающейся областью, имеющей серьезные перспективы при анализе структуры течения. Тем не менее, для дальнейшего прогресса необходимо преодолеть следующие ограничения:

1. DMD в расчете дает фазовые углы (собственные числа) без определения направлений вращения и сдвигов на период, т.е. неединственным и неупорядоченным способом. Определение частот ω_i по такому набору является непростой ручной задачей. Алгоритм перебора для определения частот, использованный в данной работе, применим при относительно малом числе комплексных собственных чисел и нуждается в совершенствовании или замене. Впрочем, проблемы трактовки λ_i и вычисления ω_i не влияют на качество восстановления соответствующих динамических мод.

2. Задача определения оператора по набору результатов его действия на исходный вектор является некорректно поставленной, и ее успех в

значительной степени определяется успешной регуляризацией. Наблюдаемая в расчетах высокая чувствительность DMD к выбору срезов, вероятно, связана с некорректностью постановки.

3. В основе DMD лежит предположение, что оператор A диагонализируем, что, строго говоря, ограничивает применимость метода. Однако, согласно [29], любая действительная матрица в случае общего положения диагонализируема. Таким образом, с учетом погрешности расчетов можно считать, что диагонализируемость оператора A в практических расчетах присутствует с вероятностью, близкой к единице, однако может сопровождаться неустойчивостью. Поскольку задача построения пропагатора по наблюдениям неустойчива и сама по себе, проблема с устойчивостью диагональной формы оператора может быть разрешена в рамках регуляризации задачи.

4. Для истинно нелинейных задач необходимо построение достаточно короткого набора нелинейных базисных функций, так как применение EDMD не решает полностью вопросов с построением аппроксимаций левых и правых собственных векторов.

Теоретически возможно построение оператора Купмана в словаре нелинейных функций от динамических переменных, однако для задач вычислительной аэрогазодинамики оно представляется затруднительным. Вопрос упирается в создание достаточно короткого “нелинейного словаря”. Возможным методом решения может служить оптимизационная постановка в норме L_1 , обеспечивающая отсев части базисных векторов [4].

Рассматриваемая нестационарная задача взаимодействия струи с преградой является сильно нелинейной, в частности содержит нестационарные ударные волны и отрывные зоны. Течение на линейном (малое время) участке успешно описывается оператором Купмана, имеющим линейную форму и работающим в пространстве решений. DMD на нелинейном (автоколебательном) участке позволяет определить основную частоту колебаний, но структура спектра неустойчива и существенно зависит от параметров задачи (числа срезов, расстояния между ними) и регуляризации задачи. Надеяться на качество результатов, полученных с помощью DMD на нелинейном участке, особых оснований нет. В случае полиномиальных переменных (EDMD) численно реализуемо определение спектра сопровождающей матрицы, а также проекции оператора Купмана на пространство фазовых переменных.

Выводы

Разложение по динамическим модам эквивалентно аппроксимации оператора Купмана в виде произведения матриц правых и левых собственных векторов и матрицы собственных значений $A = \Omega_R \Lambda \Omega_L$. Это позволяет вместо хранения полной матрицы оператора A (размером $M \times M$) хранение двух

прямоугольных и одной диагональной матриц ($2M \times N + N$ чисел), что обеспечивает экономию памяти и времени расчета на несколько порядков по величине.

Наличие сжатой аппроксимации оператора A может представлять интерес с точки зрения решения задач восприимчивости [21,22], определения сингулярных векторов [23,24] и переноса плотности распределения погрешности с помощью уравнения Перрона-Фробениуса.

Метод DMD можно использовать как для линейного, так и для нелинейного анализа решения. Истинно нелинейная форма DMD реализуется с помощью kernel trick [5,6] (EDMD), однако и она имеет серьезные проблемы с точки зрения используемой памяти и не позволяет воспользоваться всеми возможностями стандартного DMD. Применение EDMD имеет хорошие перспективы с точки зрения оценки частот на истинно нелинейном режиме течения.

Представляется, что для полного применения истинно нелинейного DMD (EDMD) потребуется определение некоторого (краткого) нелинейного словаря наблюдаемых.

Библиографический список

1. Schmid P. J. Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data, *J. Fluid Mech.* (2010) v. 656 p. 5-28.
2. Rowley C. W., Mezic I., Bagheri S., Schlatter P., and Henningson D. S. Spectral analysis of nonlinear flows. *J. Fluid Mech.*, v. 641:115-127, 2009.
3. Jovanovic M. R., Schmid P. J., and Nichols J. W. Sparsity-promoting dynamic mode decomposition, *Phys. of Fluids*, v. 26, 024103 (2014).
4. Tu J. H., Rowley C. W., Luchtenburg D. M., Brunton S. L., and Kutz J. N. On dynamic mode decomposition: theory and applications, *Journal of Computational Dynamics* 1(2): 391-421, Dec. 2014.
5. Williams M. O., Kevrekidis I. G. and Rowley C. W. A data-driven approximation of the Koopman operator: Extending dynamic mode decomposition, *J. Nonlinear Sci.*, 2015. Vol. 25, Issue 6, pp. 1307–1346.
6. Williams M.O., Rowley C.W., Kevrekidis I.G., A Kernel Approach to Data-Driven Koopman Spectral Analysis, arXiv:1411.2260v1 2014.
7. Alekseev A.K. On Relationship of Koopman Eigenvalues and Frequencies in Dynamic Mode Decomposition//arXiv:1603.06508. 2016.
8. Alekseev A.K., Bistrián D.A., Bondarev A.E., Navon I.M. On Linear and Nonlinear Aspects of Dynamic Mode Decomposition, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 2016, V. 82, Issue 6, p. 348–371.
9. Korda Milan, Mezic Igor, On Convergence of Extended Dynamic Mode Decomposition to the Koopman Operator, arXiv:1703.04680v3, 2017.

10. Абдуракипов С.С., Дулин В.М., Маркович Д.М., Ханъялич К. Определение мод неустойчивости в газовом факеле, Письма в ЖТФ, 2013, том 39, вып. 6, С. 79-86.
11. Kabanov D.I., Kasimov A.R. Linear stability analysis of detonations via numerical computation and dynamic mode decomposition, *Phys. Fluids*, v. 30, 036103-1---036103-19, 2018.
12. Koopman B. Hamiltonian systems and transformations in Hilbert space, (1931) *Proc. Nat. Academy of Sciences of the USA*, 17, pp.315-318.
13. Lan Y.H., Mezic I. Linearization In the Large of Nonlinear Systems and Koopman Operator Spectrum, *Physica D-nonlinear Phenomena*, v. 242, p. 42–53, 2013.
14. Lasota A. and Mackey M. C. *Chaos, Fractals, and Noise: stochastic aspects of dynamics*. Springer-Verlag, 1994.
15. Cvitanovic P., Artuso R., Mainieri R., Tanner G., Vattay G. *Chaos: Classical and Quantum*, Appendix H, H.1. Koopmania, (Niels Bohr Institute, Copenhagen 2013); ChaosBook.org, version 13.
16. Klus S., Koltai P., and Schutte Ch. On the numerical approximation of the Perron-Frobenius and Koopman operator, arXiv:1512.05997v3 2016.
17. Klus S. and Schutte Ch. Towards tensor-based methods for the numerical approximation of the Perron-Frobenius and Koopman operator arXiv:1512.06527v2 2016.
18. Bowen Huang and Umesh Vaidya, Data-Driven Approximation of Transfer Operators: Naturally Structured Dynamic Mode Decomposition, arXiv:1709.06203v2 2017.
19. Klus S., Nuske F., Koltai P., Wu Hao, Kevrekidis I., Schutte Ch., and Noe F. Data-driven model reduction and transfer operator approximation, arXiv:1703.10112v2, 2017.
20. Carleman T. Application De La Théorie Des Équations Intégrales Linéaires Aux Systèmes D'Équations Différentielles NonLinaires, *Acta Math.*, Vol. 59, pp. 63-87, 1932.
21. Dobrinsky A. and Collis S. Adjoint Parabolized Stability Equations for Receptivity Prediction, *AIAA-2000-2651*, pp. 1-15.
22. Hill D.C. Adjoint systems and role in the receptivity problem for boundary layers, *J. Fluid Mech.* 292 (1995) 183.
23. Moore A. M., Perez C. L., and Zavala-Garay J., A non-normal view of the wind-driven ocean circulation. *J. Phys. Oceanogr.*, 32, 2681-2705, 2002.
24. Farrell B.F. and A.M. Moore An adjoint method for obtaining the most rapidly growing perturbation to oceanic flows, *J. Phys. Oceanogr.*, 22 338-349, 1992.
25. Theferthen L.N., Trefethen A. E., Reddy S. C., and Driscoll T. A. Hydrodynamic Stability without Eigenvalues// *Science* -1993. v. 261, N 5121, pp. 578-584.
26. Голуб Дж., Ван Лоун Ч., *Матричные вычисления*, Мир 1999.

27. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач, М., Наука, 1979.
28. Cormack A. M. Representation of a function by its line integrals, with some radiological applications, *J. Appl. Phys.* 34 (1963), 2722-2727.
29. Zhang Zhi-Nan, Zhang Jian-Ning, On The Computation of Jordan Canonical Form, *International Journal of Pure and Applied Mathematics*, Vol. 78 N. 2, 2012, 155-160.
30. Kashima H., Ide T., Kato T., Sugiyama M. Recent Advances and Trends in Large-scale Kernel Methods, IEICE Transactions on Information and Systems, vol.E92-D, n.7, pp.1338-1353, 2009.
31. Jakel F., Scholkopf B., Wichmann F. A. A tutorial on kernel methods for categorization, *J. Math. Psychology* 51 (2007) 343-358.
32. Thuburn J., Climate sensitivities via a Fokker–Planck adjoint approach, *Q. J. R. Meteorol. Soc.* (2005), 131, pp. 73–92.
33. Berner J., Ha S.-Y., Hacker J. P., Fournier A., Snyder C., 2011: “Model uncertainty in a mesoscale ensemble prediction system: Stochastic versus multi-physics representations”, *Mon. Wea. Rev.*, 139, 1972-1995.
34. Epstein E. (1969). Stochastic dynamic prediction. *Tellus*, 21(6):739-759.
35. Fjordholm Ulrik S., Mishra Siddhartha, Tadmor Eitan, On the computation of measure-valued solutions, *Acta Numerica* (2016), pp. 567–679.
36. Jin Shi, Liu Hailiang, Osher Stanley, Tsaid Richard, Computing multi-valued physical observables for the high frequency limit of symmetric hyperbolic systems, *Journal of Computational Physics*, 210 (2005) 497–518.
37. Anderson E., Bai Z., Bischof C., Blackford S., Demmel J., Dongarra J., Du Croz J., Greenbaum A., Hammarling S., McKenney A., and Sorensen D., *LAPACK Users' Guide, Third Edition, SIAM, 1999.*
38. Lehoucq R. B.; Sorensen D. C.; Yang C., *ARPACK Users Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicitly Restarted Arnoldi Methods.* SIAM, (1998).
39. Глазнев В.Н., Запрягаев В.И., Усков В.Н. и др, *Струйные и нестационарные течения в газовой динамике*, Новосибирск, СО АН, 2000.
40. Zuckerman N. and Lior N., Jet Impingement Heat Transfer: Physics, Correlations, and Numerical Modeling, *Advances in Heat Transfer*, V. 39, 565-631 2006.
41. Pundir B. and Dhanak M. Surface Pressure Fluctuations Due to an Impinging Supersonic Underexpanded Jet. *AIAA 2010-107*, p 1-13.
42. Sun M., Katayama K. An artificially upstream flux vector splitting for the Euler equations, *JCP*. 2003. V. 189. P. 305-329.
43. Van Leer B., Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov’s method, *J. Comput. Phys.*, 32 (1979), 101–136.

Оглавление

Введение	3
1. Разложение по динамическим модам.....	4
2. Построение сжатой аппроксимации оператора Купмана	7
3. Анализ частот	8
4. Корректность задачи построения оператора Купмана	9
5. DMD для истинно нелинейных задач (EDMD)	10
6. Связь оператора Купмана с оператором Перрона-Фробениуса	12
7. Перспективные приложения оператора Купмана	14
8. Результаты тестовых расчетов	16
9. Обсуждение.....	25
Выводы	26
Библиографический список.....	27