

本征正交分解

黄政宇

北京大学北京国际数学研究中心
北京大学国际机器学习研究中心



本堂课大纲

- 本征正交分解 (Proper Orthogonal Decomposition)
 - 直接分解方法
 - 奇异值分解
- 降阶模型算法
- 降阶模型实例



解的近似

➤ 常微分方程(ODE)

$$\frac{du}{dt} = f(\mathbf{u}(t), t, \mathbf{x})$$

其中 $\mathbf{u}(t) \in R^N$ 是状态变量

$\mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0$ 是初始条件

➤ 输出

$$y(t) = g(\mathbf{u}(t), t)$$



解的近似

➤ 降阶模型

$$\frac{d}{dt}(Vq(t)) = f(Vq(t), t, x) + r(t)$$

由于基底 V 并不依赖于时间

$$V \frac{d}{dt}(q(t)) = f(Vq(t), t, x) + r(t)$$
$$y(t) \approx g(Vq(t), t)$$

N 个微分方程组成的一组方程，其中涉及 k 个未知函数

$$q(t) = [q_1(t), q_2(t) \cdots \cdots q_k(t)]$$

超定系统 $k < N$



本征正交分解方法

➤ 本征正交分解(Proper Orthogonal Decomposition, POD)

固定初始条件 $\mathbf{u}_0 \in R^N$

给定 $0 \leq t \leq T$ 的解 \mathbf{u}_t ，本征正交分解方法寻求一个固定秩 k 的正交投影 $\Pi_{V,V}$ ，以最小化积分投影误差

$$J(\Pi_{V,V}) = \int_0^T \|\mathbf{u}(t) - \Pi_{V,V}\mathbf{u}(t)\|_2^2 dt = \int_0^T \|\varepsilon_{V^\perp}(t)\|_2^2 dt$$



本征正交分解方法

本征正交分解

定义对称正定矩阵 $\hat{K} \in R^{N \times N}$

$$\hat{K} = \int_0^T u(t)u(t)^T dt$$

\hat{K} 的特征值为 $\hat{\lambda}_1 \geq \hat{\lambda}_2 \geq \dots \geq \hat{\lambda}_N \geq 0$, 对应的特征向量为 $\hat{\phi}_i \in R^N$, 满足

$$\hat{K}\hat{\phi}_i = \hat{\lambda}_i\hat{\phi}_i, i = 1, 2, \dots, N$$

假设 $\hat{\lambda}_k > \hat{\lambda}_{k+1}$, 那么使 $J(\Pi_{V,V})$ 达到最小值的子空间 $\mathcal{V} = \text{range}(\hat{V})$, 是矩阵 \hat{K} 关于特征值 $\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \dots, \hat{\lambda}_k$ 的不变子空间。



本征正交分解方法

➤ 求解特征值问题

- 一般情况，求解特征值问题 $\hat{K}\hat{\phi}_i = \hat{\lambda}_i\hat{\phi}_i$ 在计算上难以处理
- 矩阵 \hat{K} 的维度 N 通常很大
 - 矩阵 \hat{K} 通常是稠密矩阵

状态数据通常以离散的向量形式(snapshot)提供

$$\{u(t_i)\}_{i=1}^{N_{snap}}$$

在这种情况下 $\int_0^T u(t)u(t)^T dt$ 可以利用数值积分规则进行近似

$$\int_0^T u(t)u(t)^T dt \approx \sum_{i=1}^{N_{snap}} \alpha_i u(t_i)u(t_i)^T$$



本征正交分解方法

➤ 求解特征值问题

定义快照(snapshot)矩阵 $S \in R^{N \times N_{snap}}$

$$S = \left[\sqrt{\alpha_1} u(t_1); \sqrt{\alpha_2} u(t_2); \cdots \cdots \sqrt{\alpha_{N_{snap}}} u(t_{N_{snap}}) \right]$$

那么

$$K = SS^T$$

目标：近似 K 的前 k 个特征值和特征向量。



本征正交分解方法

➤ 求解特征值问题

定义 $R = S^T S \in R^{N_{snap} \times N_{snap}}$, 假设 $Rank(R) = r \leq N_{snap}$,
求解特征值问题有

$$R\psi_i = \lambda_i\psi_i \quad i = 1, 2, \dots, r$$

那么 $K = SS^T$ 的前 r 个特征向量满足

$$\phi_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} S\psi_i$$

复杂度 : $\mathcal{O}(N_{snap}^2 N)$

条件数 (condition number) : $\text{cond}(R) \approx \text{cond}(S)^2$



奇异值分解

➤ 奇异值分解 (Singular Value Decomposition, SVD)

给定矩阵 $A \in R^{N \times M}$ ，存在两个正交矩阵， $U \in R^{N \times N} (UU^T = I)$ ， $V \in R^{M \times M} (VV^T = I)$ ，使得

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

其中 $\Sigma \in R^{M \times N} = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{\min\{M,N\}}\}$ 是对角矩阵，满足

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{\min\{M,N\}} \geq 0$$

那么 $\{\sigma_i\}_{i=1}^{\min\{M,N\}}$ 是矩阵 A 的奇异值，而 U 和 V 的列分别是 A 的左奇异向量和右奇异向量

$$U = [u_1 \ u_2 \ \dots \ u_N] \quad V = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_N]$$



奇异值分解

➤ 奇异值分解的性质

$\text{Rank}(A) = r$ ，其中 r 是最小非零奇异值的序号。

定义非零奇异值 $\Sigma_r = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r\}$ 的左、右奇异向量

$$U_r = [u_1 \ u_2 \ \dots \ u_r], \quad V_r = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_r]$$

以及

$$U_{N-r} = [u_{r+1} \ u_{r+2} \ \dots \ u_N], \quad V_{N-r} = [v_{r+1} \ v_{r+2} \ \dots \ v_N]$$

那么

$$A = U_r \Sigma_r V_r^T \qquad A = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T$$

$$\begin{aligned} \text{range}(A) &= \text{range}(U_r), & \text{range}(A^T) &= \text{range}(V_r) \\ \text{ker}(A) &= \text{range}(V_{N-r}), & \text{ker}(A^T) &= \text{range}(U_{N-r}) \end{aligned}$$



奇异值分解

➤ 奇异值分解的性质
给定

$$A = U_r \Sigma_r V_r^T \quad A = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T$$

我们能得到 AA^T 和 $A^T A$ 的特征值分解

$$AA^T = U_r \Sigma_r^2 U_r^T, \quad A^T A = V_r \Sigma_r^2 V_r^T$$

它们的非零特征值为 $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_r^2$

对应于 AA^T 的特征向量为 $U_r = [u_1 \ u_2 \ \dots \ u_r]$

对应于 $A^T A$ 的特征向量为 $V_r = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_r]$



奇异值分解

奇异值分解(Schmidt-Eckart-Young-Mirsky)

给点矩阵 $A \in R^{N \times M}$, 以及 $k < r = \text{rank}(A)$

$$\min_{\text{rank}(X)=k} \|A - X\|_2 = \sigma_{k+1}(A), \sigma_k(A) > \sigma_{k+1}(A)$$

$$\min_{\text{rank}(X)=k} \|A - X\|_F = \sqrt{\sum_{i=k+1}^r \sigma_i(A)^2}$$

$$\text{其中 } X = \sum_{i=1}^k \sigma_i u_i v_i^T$$



本征正交分解方法

➤ 奇异值分解的性质

给定快照(snapshot)矩阵 $S \in R^{N \times N_{snap}}$ 的奇异值分解

$$S = U_r \Sigma_r V_r^T$$

那么 \hat{K} 的特征值分解满足

$$\hat{K} = SS^T = U_r \Sigma_r^2 U_r^T$$

正交投影： V 由 U_r 的前 k 列组成

复杂度： $\mathcal{O}(N_{snap}^2 N)$

条件数 (condition number)： $\text{cond}(S)$



本堂课大纲

- 本征正交分解 (Proper Orthogonal Decomposition)
 - 直接分解方法
 - 奇异值分解

- 降阶模型算法

- 降阶模型实例



算法：降阶模型维度选取

➤ 维度选取

$\mathcal{E}_{POD}(k)$ 代表由前 k 个本征正交基向量捕获的快照的能量

$$\mathcal{E}_{POD}(k) = \frac{\sum_{i=1}^k \sigma_i^2(S)}{\sum_{i=1}^r \sigma_i^2(S)}$$

选取 k 使得

$$1 - \mathcal{E}_{POD}(k) \leq \epsilon$$

比如 $\epsilon = 0.1\%$



算法：降阶模型维度选取

➤ 本征正交分解

奇异值分解：

$$S \in R^{N \times N_{snap}}, S = U_r \Sigma_r V_r^T$$

V 由 U_r 的前 k 列组成

➤ 误差分析

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \mathcal{E}_{V^\perp}(t) + \mathcal{E}_V(t) \\ &= (I - \Pi_{V,V})u(t) + V(V^T u(t) - q(t)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\| \mathcal{E}_{V^\perp}(t_1) \mathcal{E}_{V^\perp}(t_2) \cdots \mathcal{E}_{V^\perp}(t_{N_{snap}}) \right\|_F &= \sqrt{\sum_{i=k+1}^r \sigma_i^2(S)} \\ \frac{\left\| \mathcal{E}_{V^\perp}(t_1) \mathcal{E}_{V^\perp}(t_2) \cdots \mathcal{E}_{V^\perp}(t_{N_{snap}}) \right\|_F^2}{\left\| u(t_1) u(t_2) \cdots u(t_{N_{snap}}) \right\|_F^2} &= 1 - \mathcal{E}_{POD}(k) \end{aligned}$$



算法: 快照矩阵的选取

➤ 含参数不含时间的偏微分方程问题 $f(u, \mu) = 0$

- 快照矩阵:

$$S = \text{span}\{u(\mu_j)\}_j^{N_{snap}}$$

$$S = \text{span}\{u(\mu_j), \nabla_{\mu} u(\mu_j) \dots \dots\}_j^{N_{snap}}$$

- 参数选取:

随机选取

贪心法: 从集合 D 中选取后验误差最大的

$$\mu_i = \operatorname{argmax}_{\mu \in D} \|r(\mu)\| = \operatorname{argmax}_{\mu \in D} \|f(Vq(\mu), \mu)\|$$



算法: 快照矩阵的选取

➤ 参数选取

随机选取 μ_1

求解高维模型 $f(u(\mu_1), \mu_1) = 0$

构建快照矩阵，以及相应的基底 V

循环 $i = 2, 3, \dots$

求解降阶模型： $\mu_i = \operatorname{argmax}_{\mu \in D} \|f(Vq(\mu), \mu)\|$

求解高维模型： $f(u(\mu_i), \mu_i) = 0$

拓展快照矩阵，以及相应的基底 V



算法：快照矩阵的选取

➤ 快照 (snapshot) 矩阵的选取

- 含参数且含时问题

$$S = \text{span}\{u(t_i; \mu_j)\}_{i,j}^{N_{snap}}$$

$$S = \text{span}\{u(t_i; \mu_j), \nabla_{\mu} u(t_i; \mu_j) \dots \dots\}_j^{N_{snap}}$$

- 参数选取：

随机选取

用贪心法从集合 D 中选取后验误差最大

$$\mu_i = \operatorname{argmax}_{\mu \in D} \sqrt{\int_0^T \left\| V \frac{d}{dt} q(\mu) - f(Vq(\mu), \mu) \right\|^2 dt}$$



本堂课大纲

- 本征正交分解 (Proper Orthogonal Decomposition)
 - 直接分解方法
 - 奇异值分解

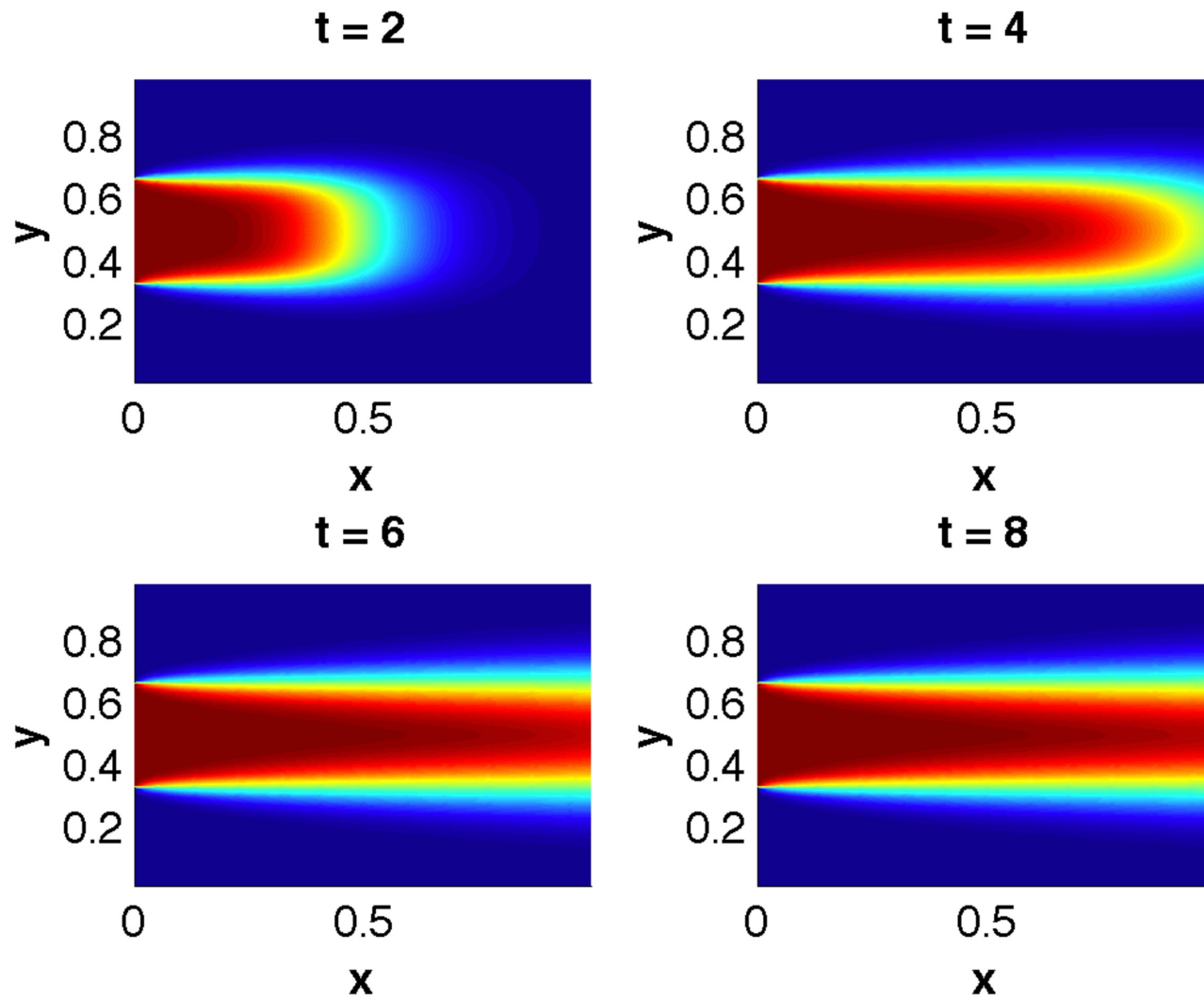
- 降阶模型算法

- 降阶模型实例



例子

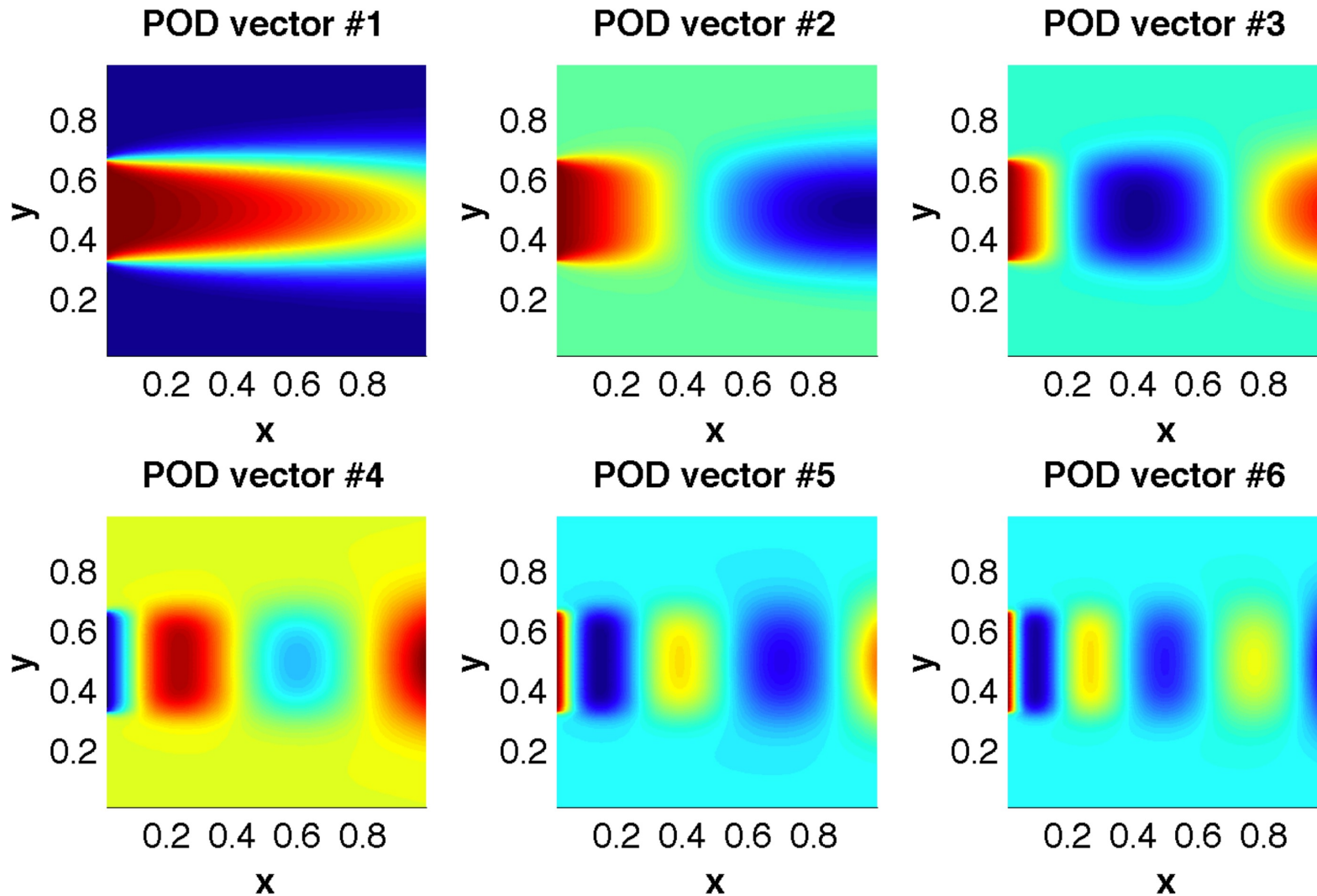
➤ 对流扩散方程 ($N = 5402$)





例子

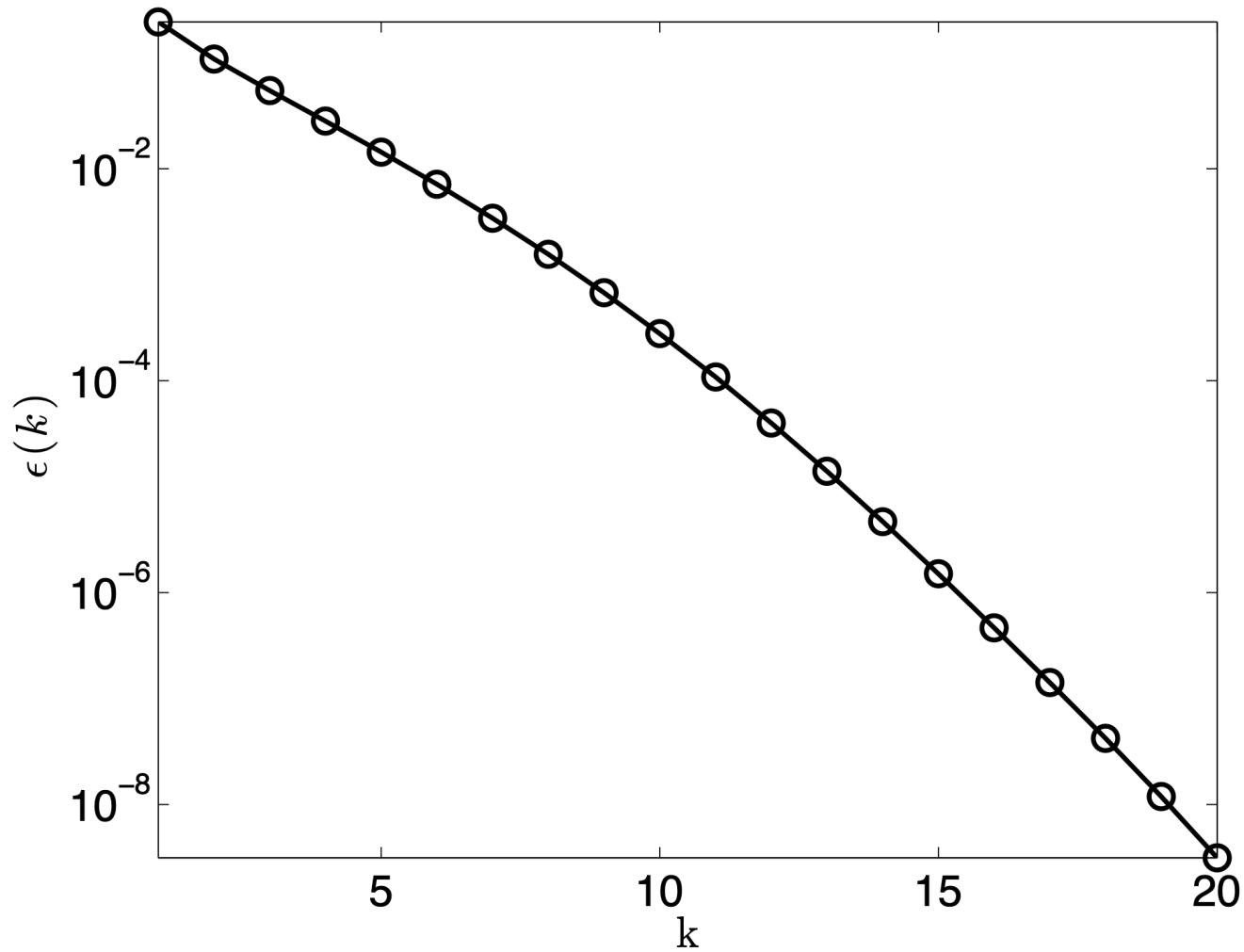
➤ 特征向量





例子

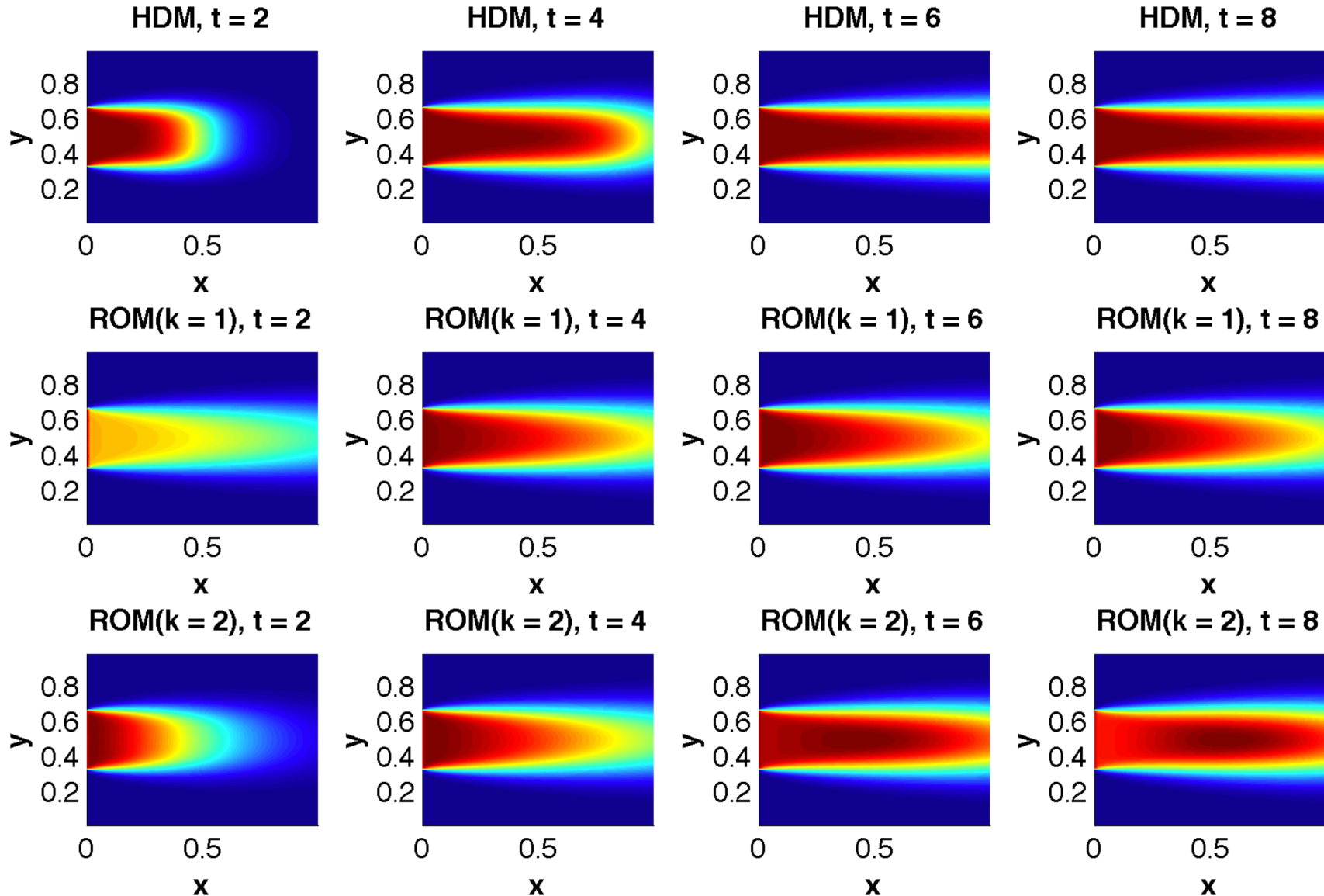
➤ 投影误差 ϵ_{V^\perp}





例子

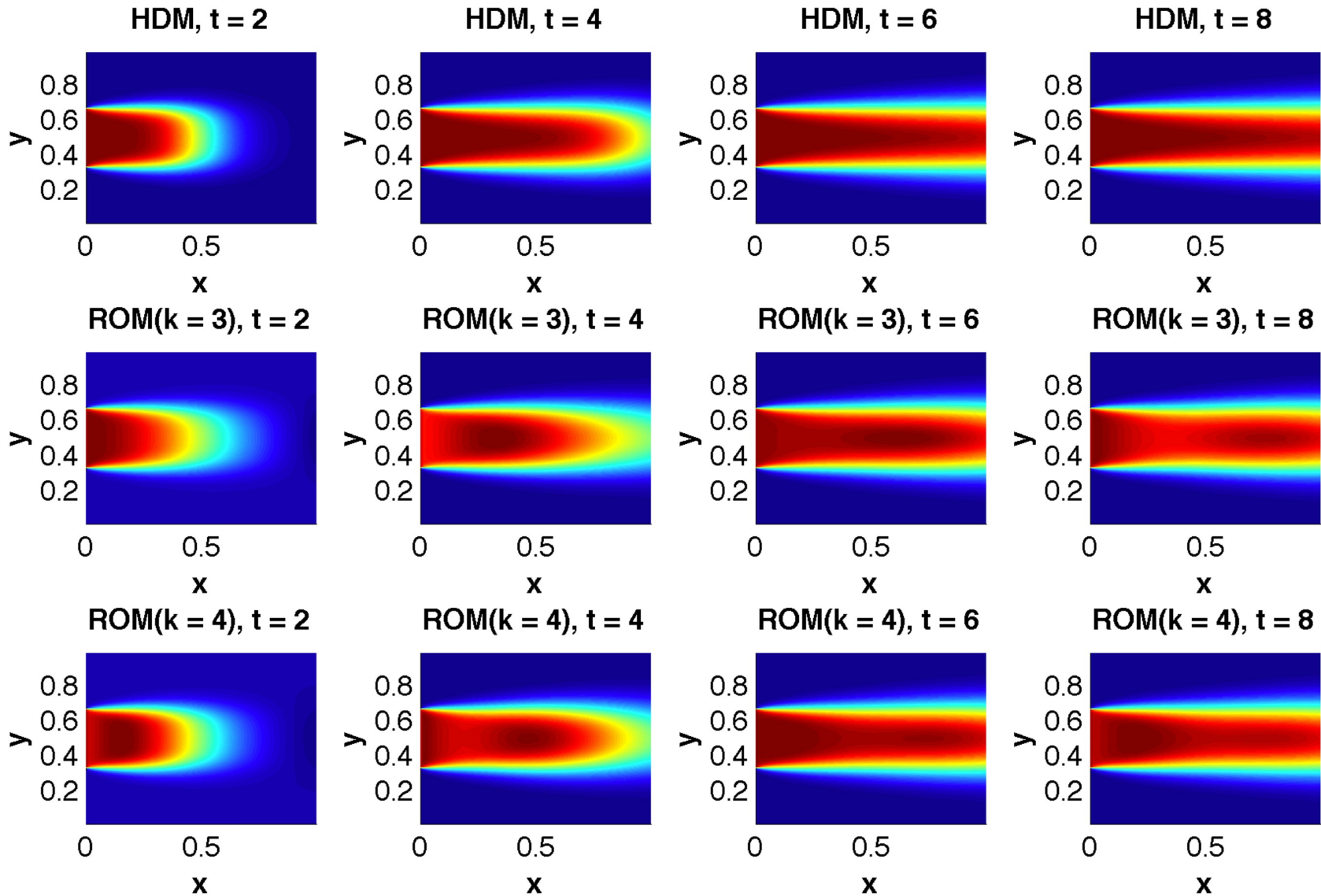
➤ 降阶模型的解





例子

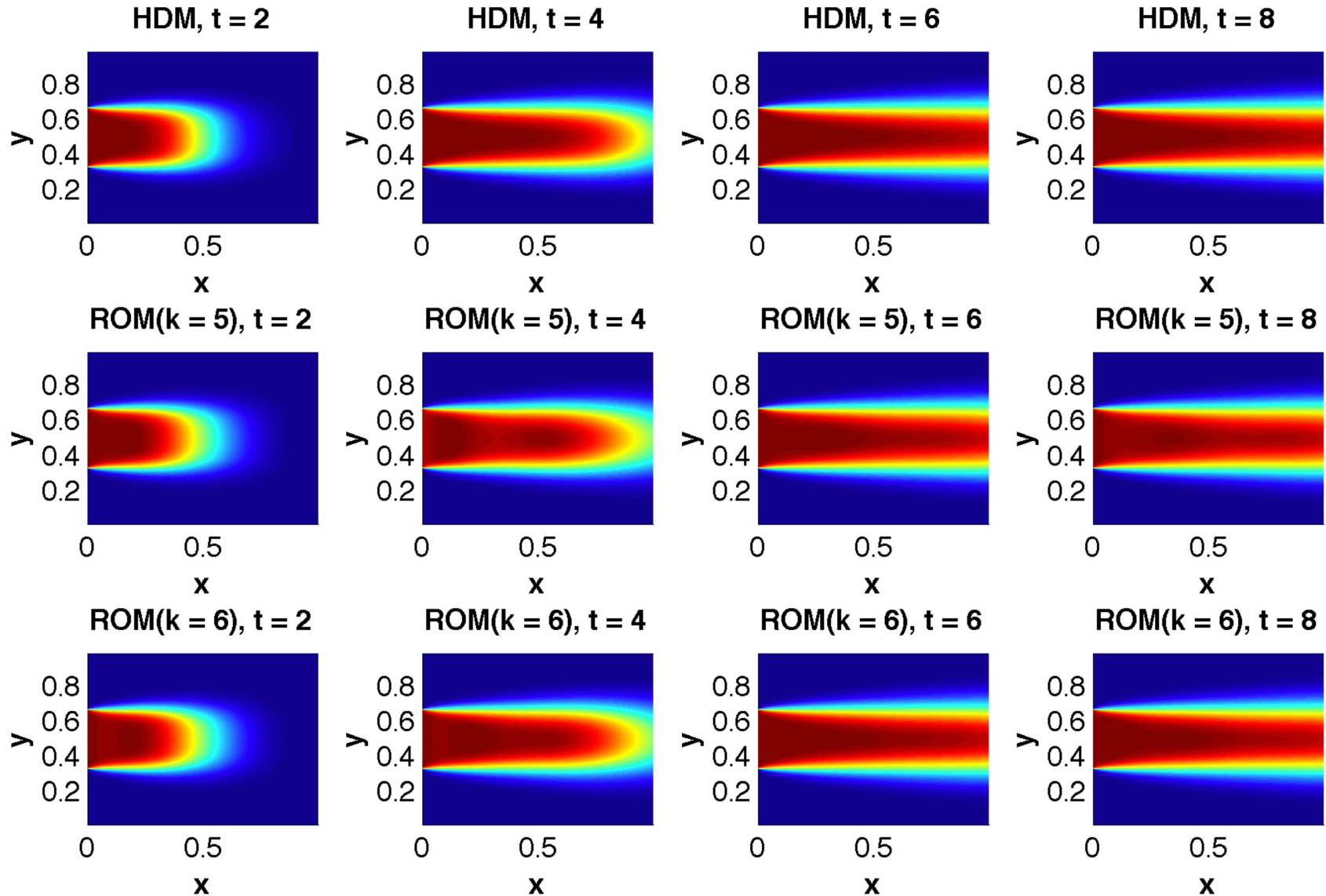
➤ 降阶模型的解





例子

➤ 降阶模型的解





例子

➤ 降阶模型误差 ε_V 和投影误差 ε_{V^\perp}

