基于投影的降阶模型

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

- 解的近似
  - 解的低维特性
  - 降阶模型
- 低维投影
  - 正交投影
  - 斜投影
- 基于投影的降阶模型
  - Petrov-Galerkin 模型
  - Galerkin 模型
  - 理论分析

解的近似

- 常微分方程(ODE)

$$\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} = f(\boldsymbol{u}(t), t, x)$$

其中 $\boldsymbol{u}(t) \in R^N$ 是状态变量

$\boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}_0$ 是初始条件

- 输出

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

解的近似

- 解的低维特性

在许多情况下，状态变量可以被精确地表示为一系列向量的线性组合，这些向量形成了一个低维线性空间的基。

$S \in R^N$ 定义一个低维线性空间 $k = \dim(S)$

$$S = \text{span}(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots\cdots \boldsymbol{v}_k)$$

$\boldsymbol{u}(t) = q_1(t)\boldsymbol{v}_1 + q_2(t)\boldsymbol{v}_2 \cdots\cdots + q_k(t)\boldsymbol{v}_k$
$\boldsymbol{q}(\mathrm{t}) = [q_1(t); q_2(t); \cdots\cdots; q_k(t)]$ 是$\boldsymbol{u}(t)$在S中的广义坐标，也是降阶状态变量

$\boldsymbol{u}(t) = V_S\, \boldsymbol{q}(\mathrm{t})$　　$V_S = [\boldsymbol{v}_1; \boldsymbol{v}_2 \cdots\cdots; \boldsymbol{v}_k]$

解的近似

- 解的低维特性

在许多情况下，低维线性空间S以及相应的基底V_S均是未知。

试验基底 $V \in R^{N\times k}$，（k不精确，V和V_S也会不同）

初始假设(ansatz)

$$\boldsymbol{u}(t) \approx V\boldsymbol{q}(\mathrm{t})$$

带回原方程

$$\frac{d}{dt}\left(V\boldsymbol{q}(\mathrm{t})\right) = f(V\boldsymbol{q}(\mathrm{t}), t, x) + r(t)$$

$$y(t) \approx g(V\boldsymbol{q}(\mathrm{t}), t)$$

$r(t)$是由于子空间逼近而产生的残差。

解的近似

- 降阶模型

$$\frac{d}{dt}\left(V\boldsymbol{q}(\mathrm{t})\right) = f(V\boldsymbol{q}(\mathrm{t}), t, x) + r(t)$$

由于基底V并不依赖于时间

$$V\frac{d}{dt}\left(\boldsymbol{q}(\mathrm{t})\right) = f(V\boldsymbol{q}(\mathrm{t}), t, x) + r(t)$$

$$y(t) \approx g(V\boldsymbol{q}(\mathrm{t}), t)$$

N个微分方程组成的方程，其中涉及k个未知函数

$$\boldsymbol{q}(\mathrm{t}) = [q_1(t), q_2(t) \cdots\cdots q_k(t)]$$

超定系统 $k < N$

本堂课大纲

- 解的近似
  - 解的低维特性
  - 降阶模型
- 低维投影
  - 正交投影
  - 斜投影
- 基于投影的降阶模型
  - Petrov-Galerkin 模型
  - Galerkin 模型
  - 理论分析

低维投影

- 正交性

$u, y \in R^N$

u, y 相对于R^N中的标准内积，彼此正交（orthogonal）

$u^T y = 0$

u, y 相对于R^N中的标准内积，是标准正交（orthonormal）

$u^T y = 0, u^T u = 1, y^T y = 1$

$V \in R^{N \times k}$是一个正交矩阵

$V^T V = I$

低维投影

- 投影(Projection)

矩阵 $\Pi \in R^{N\times N}$ 是线性空间R^N中的投影矩阵，如果

$$\Pi^2 = \Pi$$

- $\mathrm{range}(\Pi)\oplus\ker(\Pi) = R^N$
- Π可对角化，特征值是0或者1

$$\Pi = P\begin{bmatrix} I_m & \\ & 0_{N-m} \end{bmatrix} P^{-1}$$

- 可逆矩阵P 不一定是正交矩阵

其中 $\mathrm{range}(\Pi) = \{y: y = \Pi x\}$ $\ker(\Pi) = \{x: \Pi x = 0\}$

低维投影

- 投影(Projection)

  考虑投影矩阵

$$\Pi = P\begin{bmatrix} I_m & \\ & 0_{N-m} \end{bmatrix} P^{-1}$$

  将P分拆为

$$P = [P_1\ P_2] \qquad P_1 \in R^{N\times m} \qquad P_2 \in R^{N\times(N-m)}$$

  那么，任意$w \in R^N$

$$\Pi w \in \text{range}(\Pi) = \text{range}(P_1) = \mathcal{S}_1$$
$$w - \Pi w \in \ker(\Pi) = \text{range}(P_2) = \mathcal{S}_2$$

$$R^N = \mathcal{S}_1 \oplus \mathcal{S}_2$$

正交投影与斜投影

- 正交投影

考虑投影矩阵

$$\Pi = P\begin{bmatrix} I_m & \\ & 0_{N-m} \end{bmatrix} P^T$$

Π 定义了沿着 S_2 方向到 S_1 的投影

$R^N = S_1 \oplus S_2$

假设 $S_2 = S_1^{\perp}$，那么Π是正交投影矩阵。

正交投影与斜投影

- 正交投影

$V \in R^{N\times k}$是一个正交矩阵 $(V^TV = I)$, 它的列向量张成了S_1，对于$u \in R^N$，将它正交投影到 S_1

$$u \to VV^Tu$$

投影矩阵$\Pi_{V,V} = VV^T$是正交投影矩阵。

当$u \in S_1$， $u = Vq$

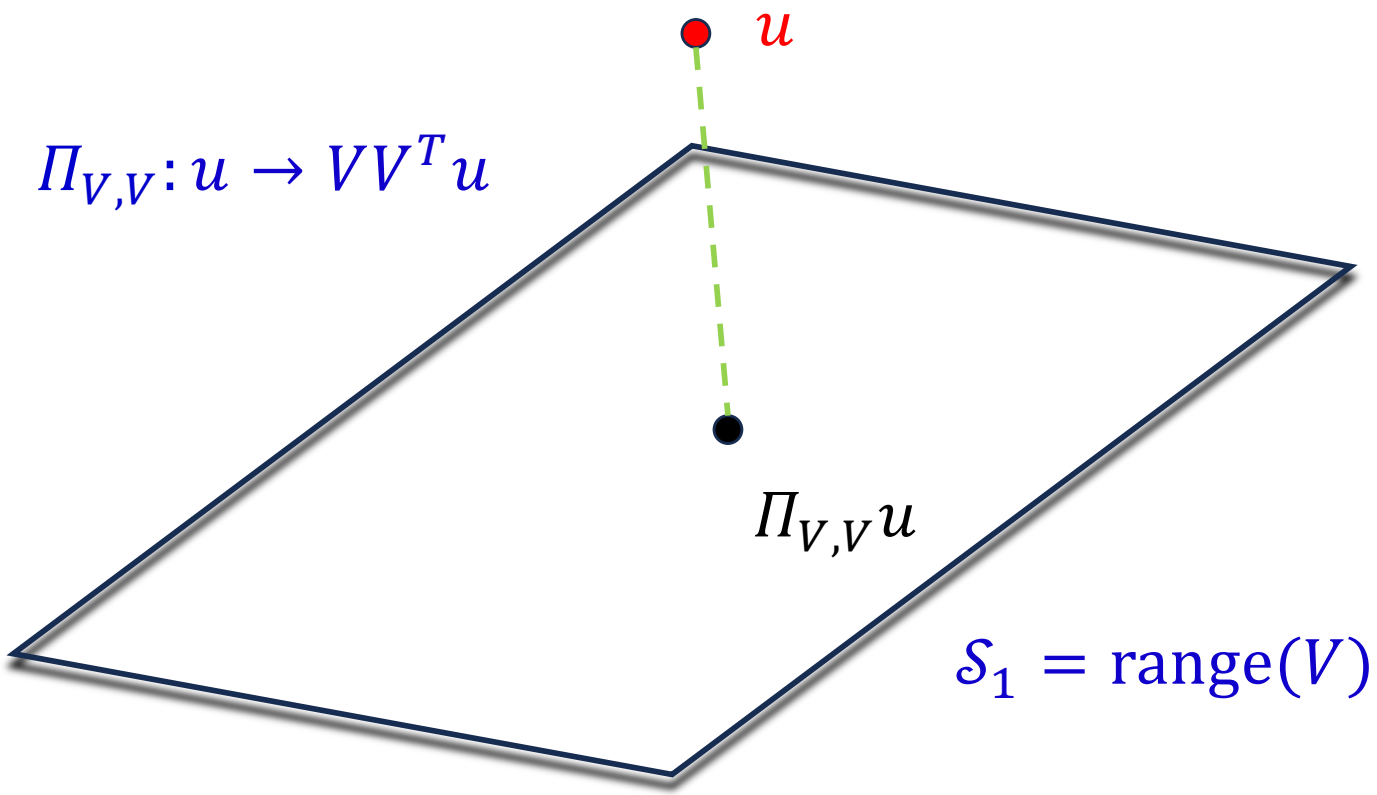
$$\Pi_{V,V}u = VV^TVq = Vq$$

当u与S_1正交， $V^Tu = 0$

$$\Pi_{V,V}u = VV^Tu = 0$$

正交投影与斜投影

- 正交投影

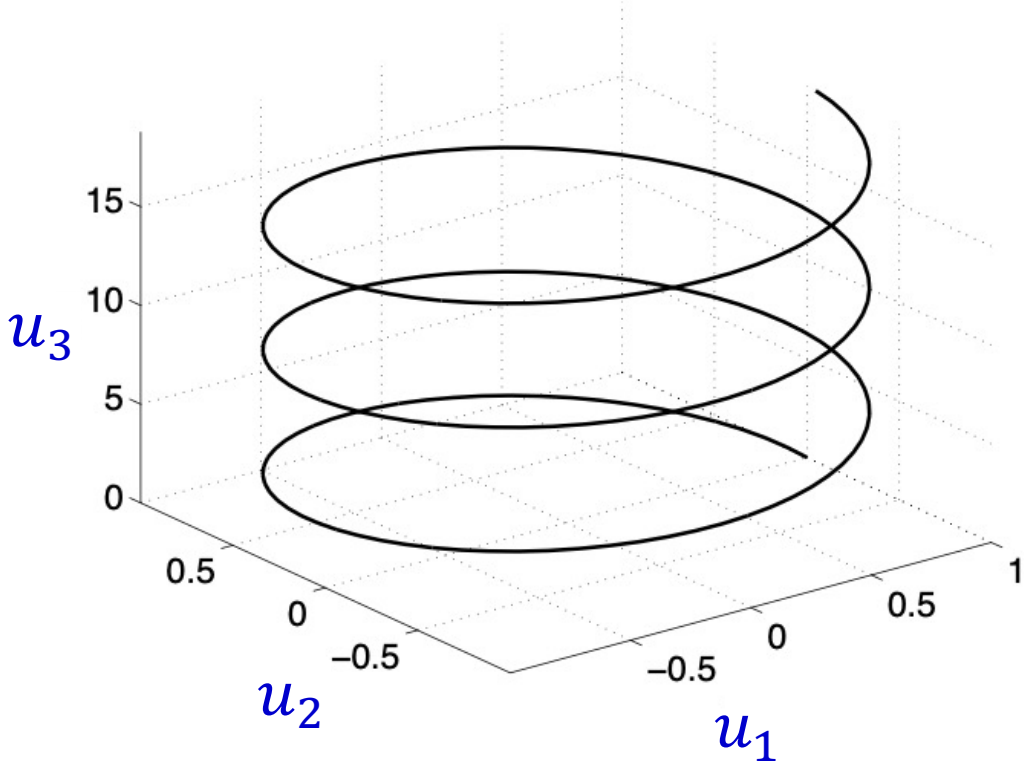


正交投影与斜投影

- 练习：三维的螺旋($N = 3$)

$$u(t) = [\cos t\,, \sin t\,, t]$$

投影到 $\mathrm{span}\{e_1, e_2\}$, $\mathrm{span}\{e_2, e_3\}$, $\mathrm{span}\{e_1, e_3\}$

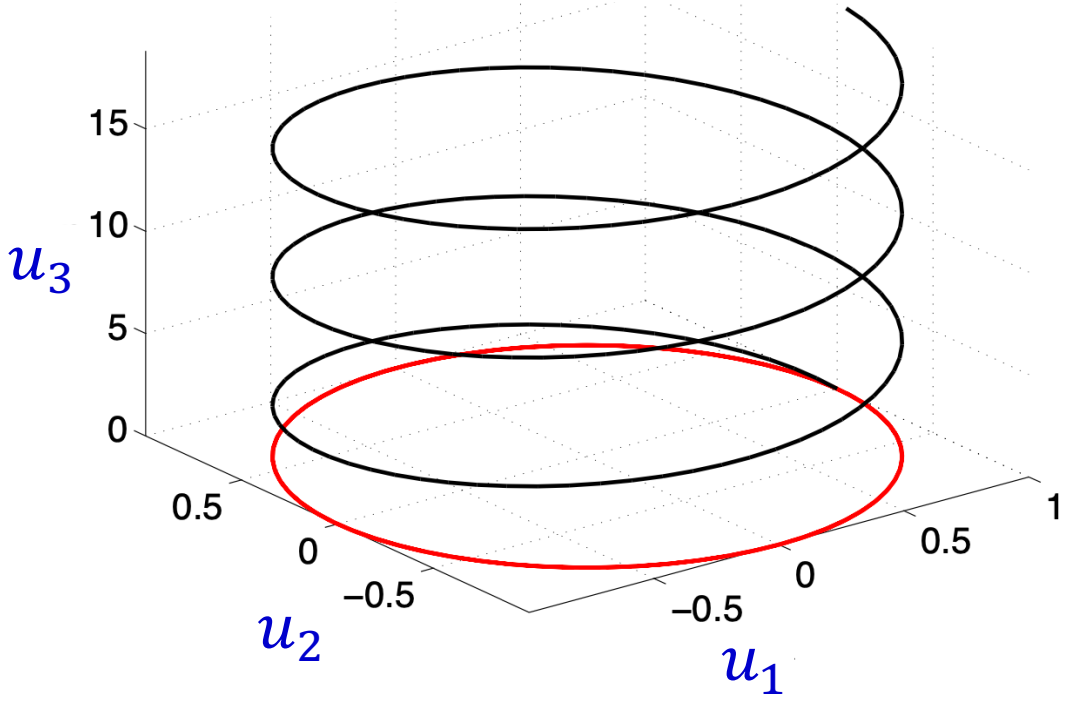


正交投影与斜投影

- 练习：三维的螺旋($N = 3$)

$$u(t) = [\cos t, \sin t, t]$$

投影到 $\mathrm{span}\{e_1, e_2\}$

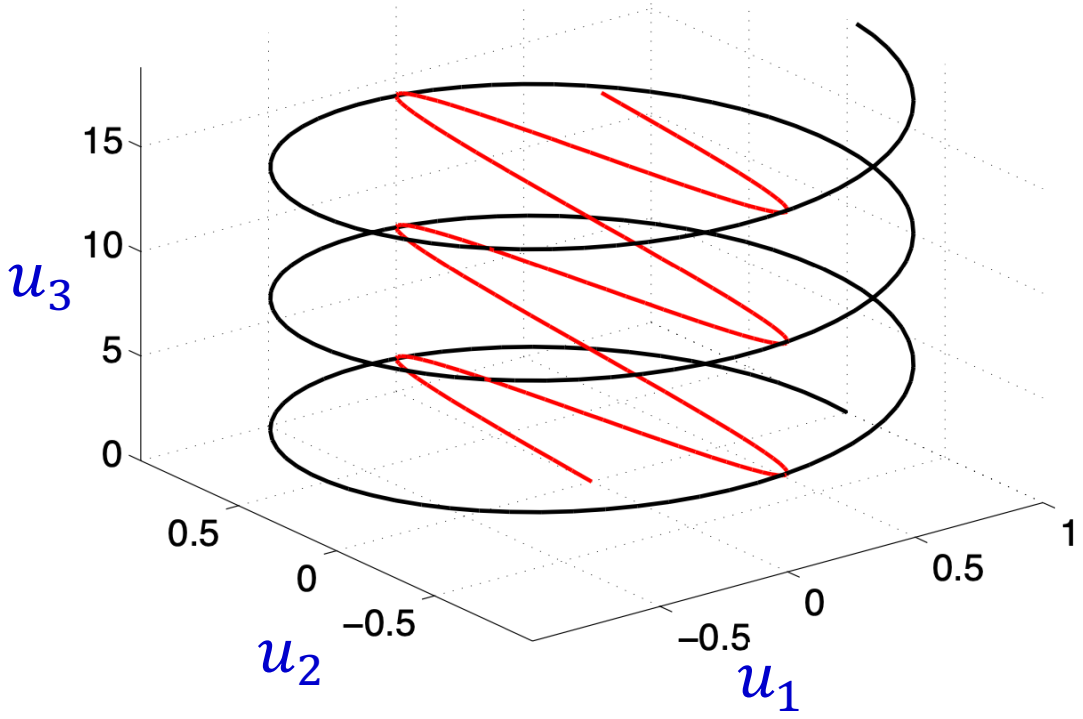


正交投影与斜投影

- 练习：三维的螺旋($N = 3$)

$$u(t) = [\cos t\,, \sin t\,, t]$$

投影到 $\mathrm{span}\{e_2, e_3\}$

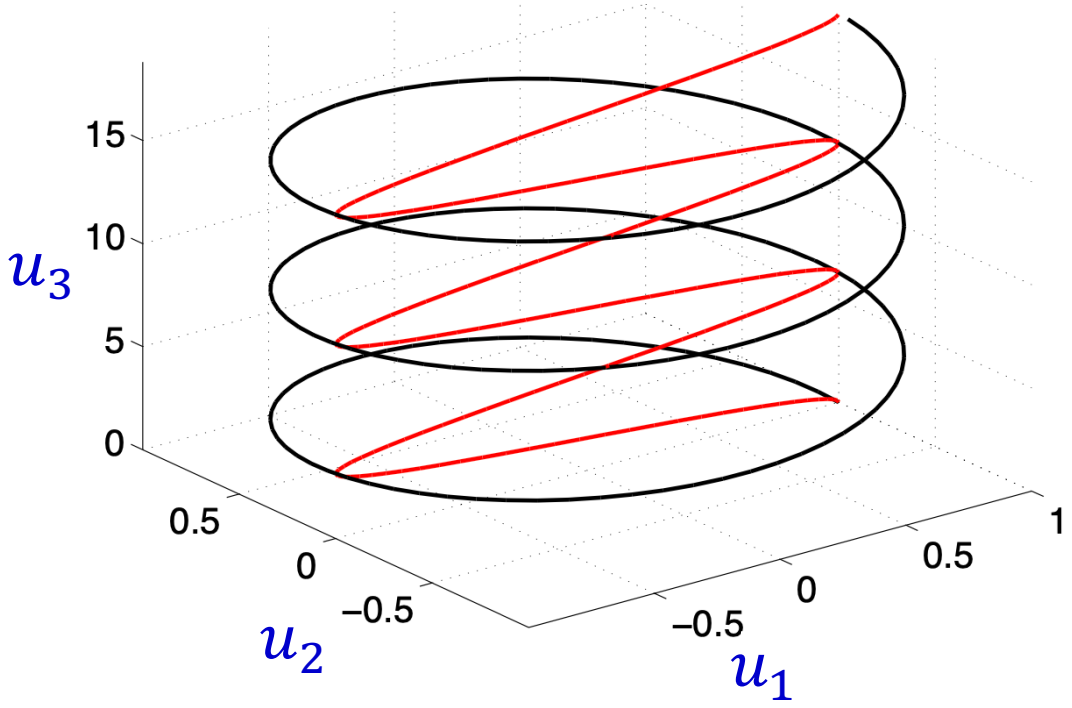


正交投影与斜投影

- 练习：三维的螺旋($N = 3$)

$$u(t) = [\cos t, \sin t, t]$$

投影到 $\mathrm{span}\{e_1, e_3\}$



正交投影与斜投影

- 斜投影

考虑投影矩阵

$$\Pi = P\begin{bmatrix} I_m & \\ & 0_{N-m} \end{bmatrix}P^T$$

Π 定义了沿着 S_2 方向到 S_1 的投影

$R^N = S_1 \oplus S_2$

假设 $S_2 \neq S_1^{\perp}$ ，那么Π是斜投影矩阵。

正交投影与斜投影

- 斜投影

$V, W \in R^{N\times k}$是两个列满秩矩阵，它们的列向量张成了S_1 和 $S_2^{\perp}$ ，沿着 S_2 方向到 S_1 的投影

$$u \to V(W^TV)^{-1}W^Tu$$

投影矩阵是$\Pi_{V,W} = V(W^TV)^{-1}W^T$是斜投影矩阵。

当$u \in S_1$，$u = Vq$

$$\Pi_{V,W}u = V(W^TV)^{-1}W^TVq = Vq = u$$

当$u \in S_2$，$W^Tu = 0$

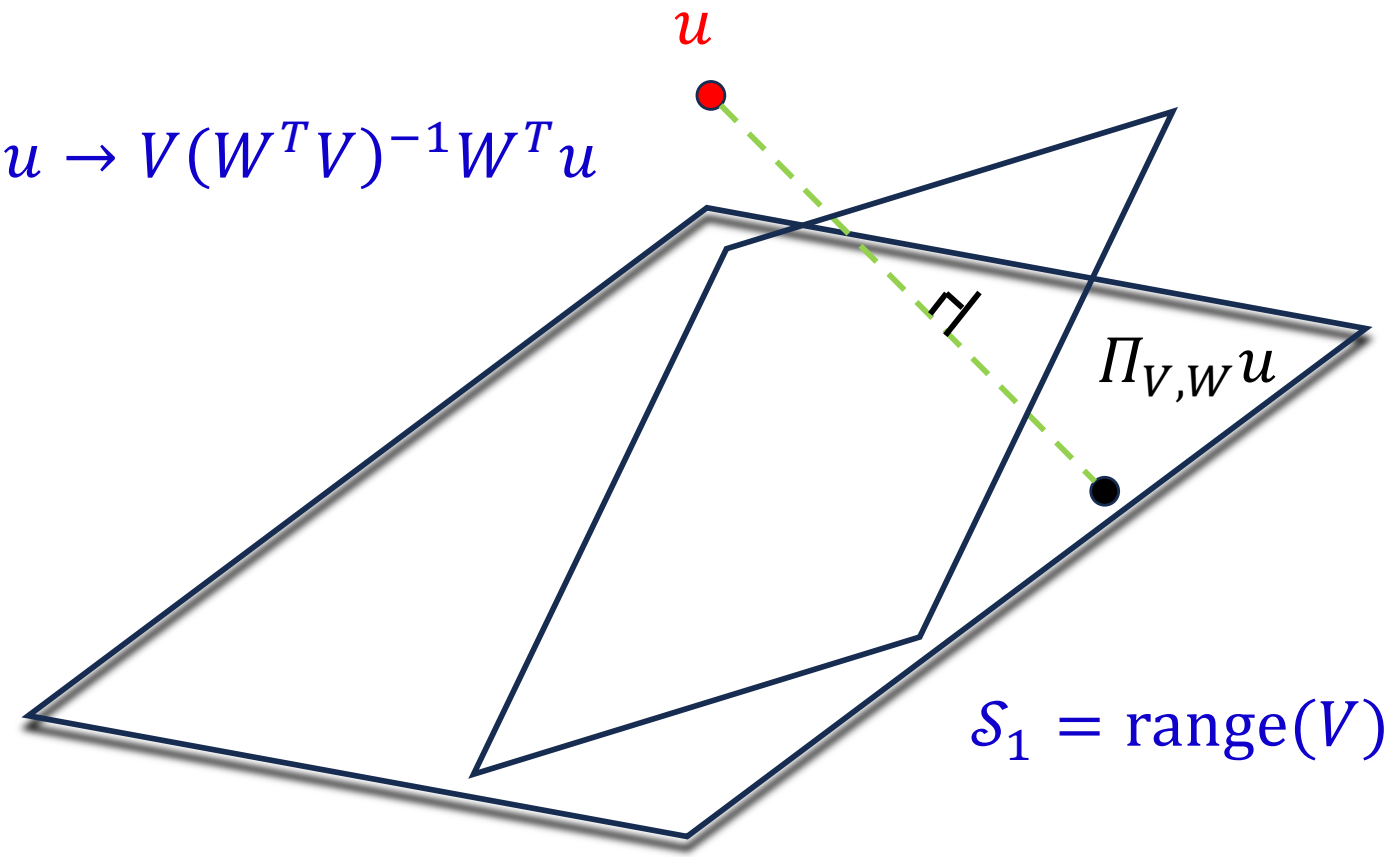
$$\Pi_{V,W}u = V(W^TV)^{-1}W^Tu = 0$$

正交投影与斜投影

- 斜投影

$S_2^{\perp} = \text{range}(W)$

$\Pi_{V,W}: u \to V(W^T V)^{-1} W^T u$

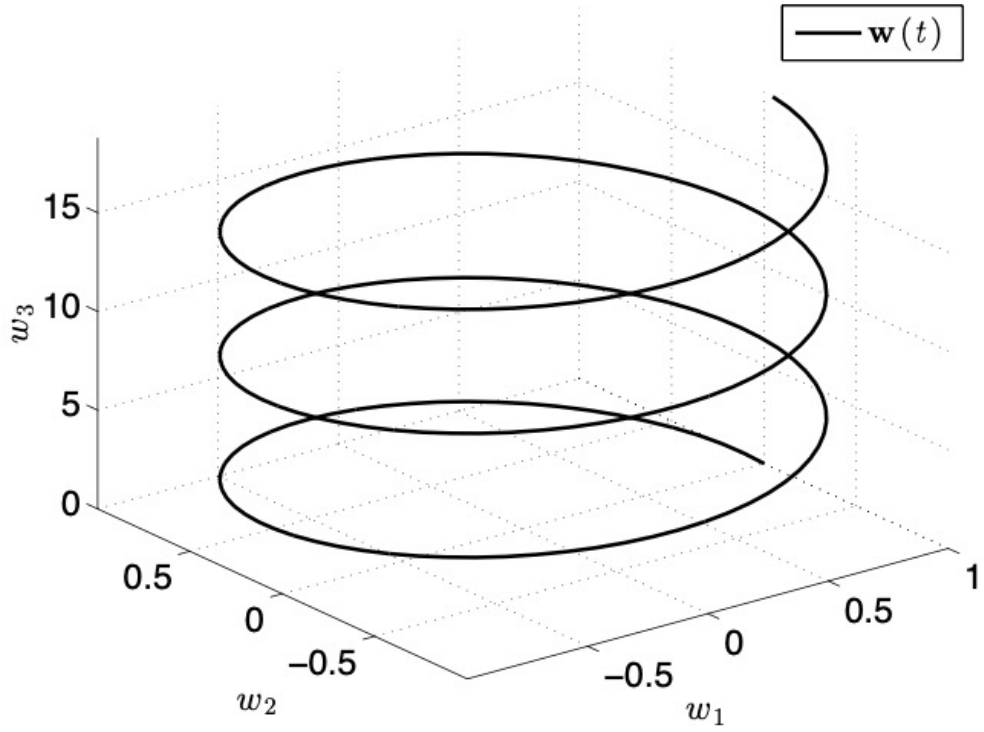


正交投影与斜投影

- 练习：三维的螺旋($N = 3$)

$$u(t) = [\cos t\,, \sin t\,, t]$$

$$V = \text{span}\{e_1, e_2\},\ W = \text{span}\{e_1 + e_3, e_2 + e_3\}$$

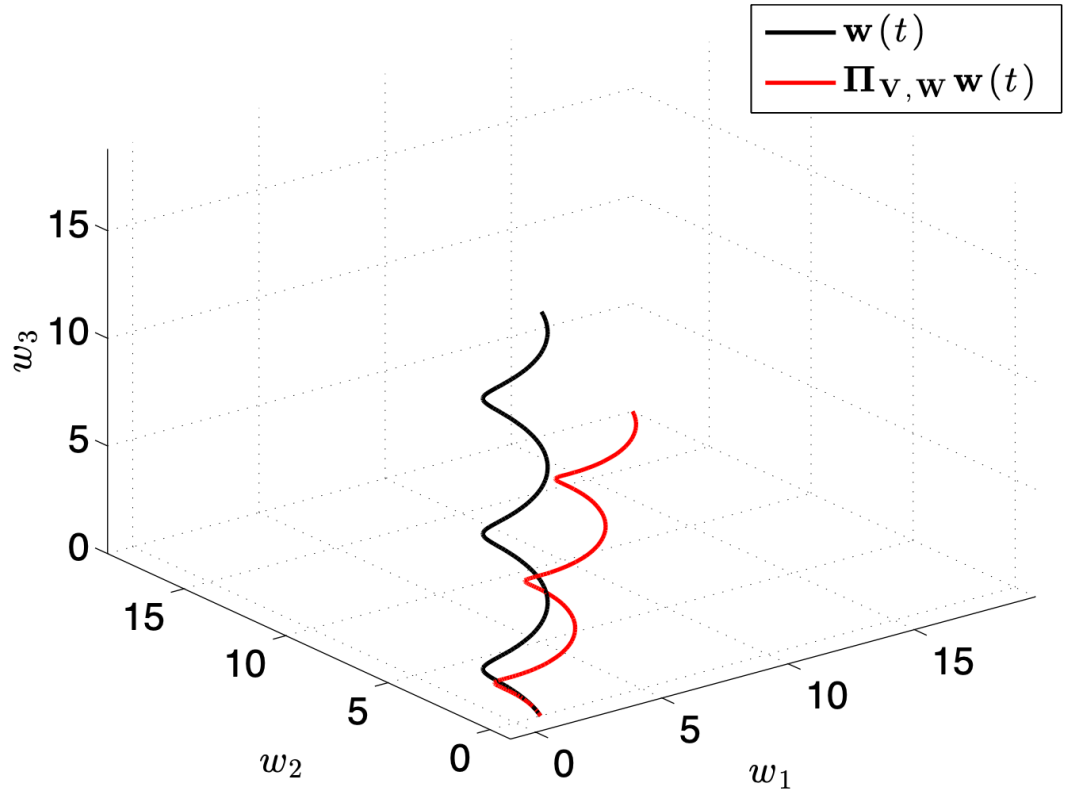


正交投影与斜投影

- 练习：三维的螺旋($N = 3$)

$$u(t) = [\cos t\,, \sin t\,, t]$$

$$V = \text{span}\{e_1, e_2\},\ W = \text{span}\{e_1 + e_3, e_2 + e_3\}$$



本堂课大纲

- 解的近似
  - 解的低维特性
  - 降阶模型
- 低维投影
  - 正交投影
  - 斜投影
- 基于投影的降阶模型
  - Petrov-Galerkin 模型
  - Galerkin 模型
  - 理论分析

基于投影的降阶模型

- 高维模型（High Dimensional Model）

$$\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} = f(\boldsymbol{u}(t), t)$$
$$y(t) = g(\boldsymbol{u}(t), t)$$
$$\boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}_0$$

$f(\boldsymbol{u}(t), t)$高维模型

$\boldsymbol{u}(t) \in R^N$:高维状态变量
$y(t) \in R^q$:输出变量(通常情况$q \ll N$)

基于投影的降阶模型

- 基于投影的降阶模型（Projection based Reduced Order Model）

$$\frac{d\boldsymbol{q}}{dt} = f_r(\boldsymbol{q}(t), t)$$
$$y(t) = g_r(\boldsymbol{q}(t), t)$$

$f_r(\boldsymbol{u}(t), t)$基于投影的降阶模型

$\boldsymbol{q}(\mathrm{t}) \in R^k$:降阶的低维状态变量
$y(t) \in R^q$:输出变量

基于投影的降阶模型

- 设计基于投影的降阶模型
  - 计算上可行、便宜
  - 适用于广泛的动力系统
  - 最小化使用高维模型计算出的解与使用降阶模型计算出的解之间的某种误差度量（误差标准）
  - 尽可能多地保留高维模型的属性。

基于投影的降阶模型

- 降阶模型

$$V\frac{d}{dt}\left(\boldsymbol{q}(\mathrm{t})\right) = f(V\boldsymbol{q}(\mathrm{t}), t, x) + r(t)$$

$$r(t) = f(V\boldsymbol{q}(\mathrm{t}), t, x) - V\frac{d}{dt}\left(\boldsymbol{q}(\mathrm{t})\right)$$

- 残差假设

存在测试存在基底$W \in R^{N\times k}$，$W^{\mathrm{T}}r(t) = 0$

- Petrov-Galerkin 基于投影的降阶模型

$$W^{T}V\frac{d}{dt}\left(q(t)\right) = W^{T}f(Vq(t), t, x)$$

基于投影的降阶模型

- Petrov-Galerkin 基于投影的降阶模型

$$\frac{dq(t)}{dt} = (W^T V)^{-1} W^T f(Vq(t), t, x)$$

$$y(t) \approx g(V\boldsymbol{q}(t), t)$$

- Galerkin 基于投影的降阶模型（$W = V$）

$$\frac{dq(t)}{dt} = V^T f(Vq(t), t, x)$$

$$y(t) \approx g(V\boldsymbol{q}(t), t)$$

例子

- 线性模型

$$f(\boldsymbol{u}(t), t, x) = A\boldsymbol{u}(t) + Bw(t)$$
$$g(\boldsymbol{u}(t), t, x) = C\boldsymbol{u}(t) + Dw(t)$$

- Petrov-Galerkin 基于投影的降阶模型

$$\frac{d\boldsymbol{q}(t)}{dt} = (W^T V)^{-1} W^T \left(AV\boldsymbol{q}(t) + Bw(t)\right)$$

$$y(t) \approx CV\boldsymbol{q}(t) + Dw(t)$$

$$A_r = (W^T V)^{-1} W^T AV \in R^{k\times k}$$
$$B_r = (W^T V)^{-1} W^T B \in R^{k\times p}$$
$$C_r = CV \in R^{k\times k}$$
$$D_r = D \in R^{k\times k}$$

初值条件

- Petrov-Galerkin 基于投影的降阶模型

$$\frac{d\boldsymbol{q}(t)}{dt} = (W^T V)^{-1} W^T f(V\boldsymbol{q}(t), t, x)$$

$$y(t) \approx g(V\boldsymbol{q}(t), t)$$

方法一：

$$\boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}_0 \in R^N$$

$$\boldsymbol{q}(0) = (W^T V)^{-1} W^T \boldsymbol{u}_0 \in R^k$$

误差：$\boldsymbol{u}(0) - V\boldsymbol{q}(0) = (I_N - V(W^T V)^{-1} W^T)\boldsymbol{u}_0$

方法二：

$$\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{u}(0) + V\boldsymbol{q}(t)$$

本堂课大纲

- 解的近似
  - 解的低维特性
  - 降阶模型
- 低维投影
  - 正交投影
  - 斜投影
- 基于投影的降阶模型
  - Petrov-Galerkin 模型
  - Galerkin 模型
  - 理论分析

理论分析

不变性

对于Petrov-Galerkin 基于投影的降阶模型

$$\frac{d\boldsymbol{q}(t)}{dt} = (W^T V)^{-1} W^T f(V\boldsymbol{q}(t), t, x)$$
$$\boldsymbol{q}(0) = (W^T V)^{-1} W^T \boldsymbol{u}_0$$

的解$\boldsymbol{u}(t) = V\boldsymbol{q}(t)$与子空间的基底选取无关。

考虑：$\tilde{W} = WQ_1$ $\tilde{V} = VQ_2$

理论分析

- 不变性

$\mathcal{W} = \mathrm{Range}(W)$　　$\mathcal{V} = \mathrm{Range}(V)$

$\mathcal{W}$ 和 $\mathcal{V}$ 是R^N的k维子空间，属于Grassmann流形$G(k, N)$

基于Petrov-Galerkin 投影的降阶模型 $\Longleftrightarrow$ $(\mathcal{W}, \mathcal{V})$

理论分析

- 误差分析(基于Galerkin投影的降阶模型)

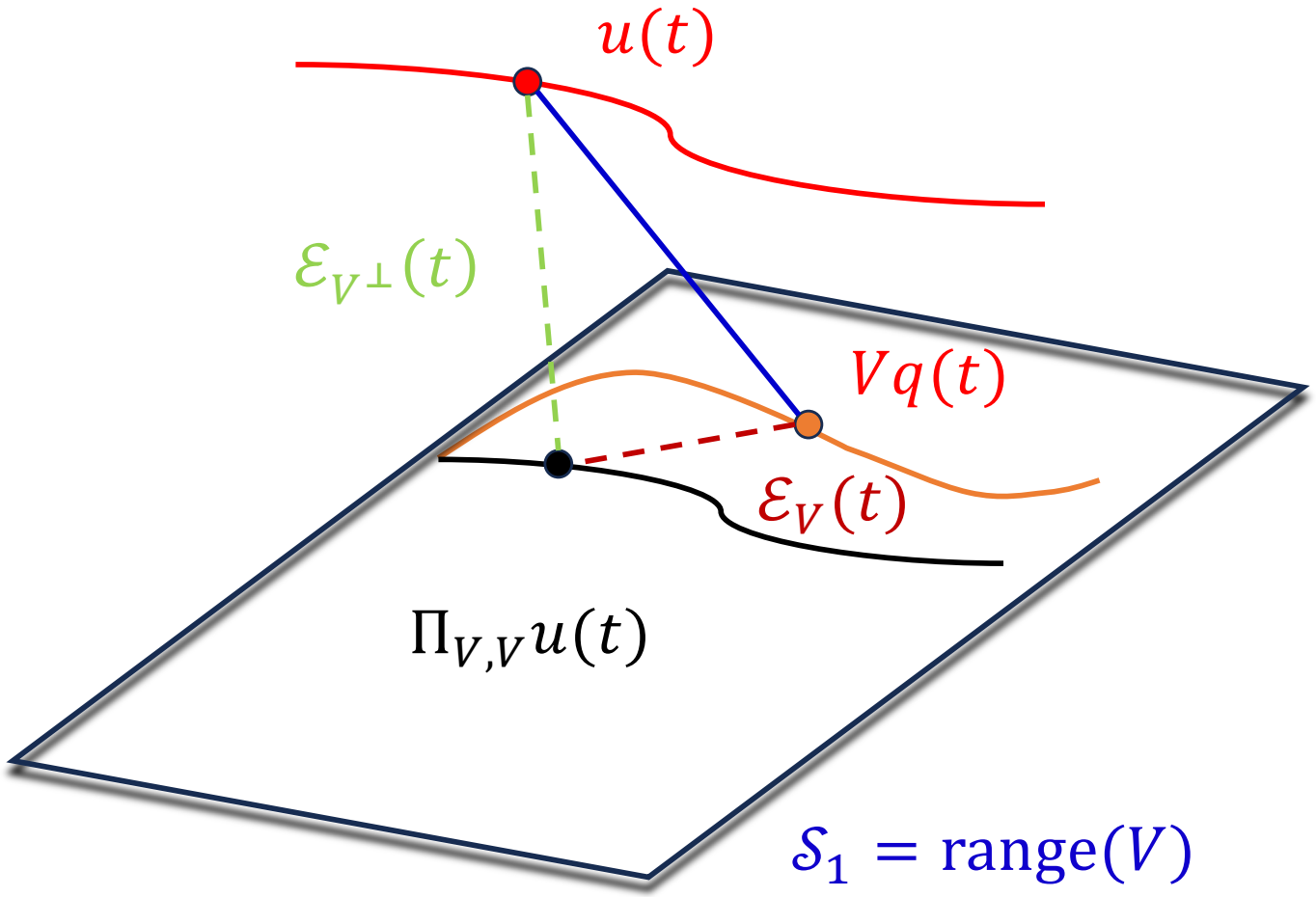
$$W = V, \qquad \Pi_{V,V} = VV^T$$

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

投影误差：$\mathcal{E}_{V\perp}(t) = (I - \Pi_{V,V})\boldsymbol{u}(t)$
真实的解轨迹$\boldsymbol{u}(t)$并不严格属于空间V。

模型误差：$\mathcal{E}_V(t) = V(V^T\boldsymbol{u}(t) - q(t))$
一个“等价”，但不同的动力系统被求解了。

理论分析


$u(t)$
$\mathcal{E}_{V^\perp}(t)$
$Vq(t)$
$\mathcal{E}_V(t)$
$\Pi_{V,V}u(t)$
$\mathcal{S}_1 = \mathrm{range}(V)$

理论分析

误差分析

对于线性模型$\frac{du(t)}{dt} = Au(t)$，我们考虑基于Galerkin投影的降阶模型，假设$u(0) = Vq(0)$，那么

$$\|\mathcal{E}(t)\|_2 \leq (\|F(T, V^T AV)\|_2 \|V^T AV_c\|_2 + 1)\left\|\mathcal{E}_{V^\perp}(t)\right\|_2$$

其中$\|f(t)\|_2 = \sqrt{\int_0^T f(t)^2 dt}$，$F(T, M): L_2([0, T], R^N) \to L_2([0, T], R^N)$，满足$F(T, M)u(t) = \int_0^T e^{M(t-\tau)} u(\tau) d\tau$，$V_c$是$V$的正交补。

理论分析

稳定性分析

对于稳定线性模型

$$\frac{du(t)}{dt} = Au(t) \qquad \mathrm{Re}(\lambda(A) \leq 0)$$

如果A对称，那么基于Galerkin投影的降阶模型仍然稳定；

如果A不对称，那么基于Galerkin投影的降阶模型可能不稳定。