arXiv:2302.00348v1 [math.NA] 1 Feb 2023

离散经验插值法与杠杆分数：问题适配基函数的时间并行构造

JULIA SCHLEUSS 和 KATHRIN SMETANA

Abstract. 为解决异质时变问题，近期有人提出了一种算法，可通过在不同时间点启动模拟，以极易并行且局部的方式构造问题适配基函数，详见 [Schleuß、Smetana、ter Maat，SIAM J. Sci. Comput.， 2022+]。该算法从不同的随机抽取的起始时间点出发，并行地对问题进行多次模拟，每次仅模拟少数几个时间步。为此，算法采用基于问题（随时间变化的）数据函数的数据依赖概率分布，例如杠杆分数。本文提出一项关键的新贡献：在所提出的算法中，基于（离散）经验插值法（DEIM）进行确定性时间点选择。我们通过数值实验考察基于 DEIM 的时间点选择的性能，并将其与杠杆分数采样方法进行比较。

1. Introduction

近期，有研究提出了一种问题适配基函数，可通过在时间上采用极易并行的方式构造，以应对 [19]中的异质时变问题。该方法的核心新思路是选取时间上的重要点，并将这些点作为局部终止时间点，仅在时间上并行执行偏微分方程（PDE）的局部模拟。由此得到的基函数定义在空间上，可与多尺度方法或模型降阶方法中的时间步进方案结合。此外，我们推测，这些基函数也可能有助于在区域分解方法中构造稳健的代数自适应粗空间（参见 [12]）。

构造这类基函数的一种成熟方法是本征正交分解（POD） [20, 4, 14] ，它对偏微分方程在时间网格点处的解进行奇异值分解（SVD）。然而，在降阶之前，必须按时间顺序计算全局解轨迹。正如 [19] 中的数值实验所示，即使在顺序计算的情形下， [19] 中提出的方法也能优于 POD。

Date：2023年2月2日。2010 *Mathematics Subject Classification.* 65C20、65M55、65M60、65M75。*Key words and phrases.* 多尺度方法、模型降阶、随机数值线性代数、区域分解方法。Julia Schleuß 的研究工作由德国研究联合会（DFG，德国研究基金会）通过德国卓越战略 EXC 2044-390685587 项目资助，项目名称为 M¨unster：动力学—几何—结构。

为选择重要的时间点，采用随机数值线性代数（NLA）中的数据依赖采样策略 [9, 8], ，例如杠杆分数采样 [19]。为此，需要对时变数据函数进行离散化，并用矩阵表示，其中矩阵的每一列对应时间网格中的一个时间点。通常，上述采样方法用于构造 CUR 或类似的低秩矩阵分解（例如，参见 [16]），即通过矩阵的列或行来近似矩阵。在[22] 中，提出了一种基于（离散）经验插值法（离散经验插值法，DEIM）的 CUR 近似矩阵分解 [3, 6] ，数值实验表明，对于若干测试案例，该方法的性能优于基于杠杆分数的方法。

基于这些观察，本文的主要新贡献和研究目的，是探究一种确定性的、基于离散经验插值法（DEIM）的时间点选择方法在 [19] 中提出的基生成算法中的表现，并将其与 [19] 中采用杠杆分数采样的随机时间点选择方法进行比较。尽管 [22] 中的作者观察到，对于低秩矩阵近似，DEIM 优于基于杠杆分数的方法，但我们在此发现，就时间点选择而言，这一结论通常并不成立。

本文其余部分的安排如下。首先，我们在第 2 节介绍一般的问题设定。然后，我们回顾 [19] 中的并行及局部时间基生成算法，见第3 节，并特别在第 3.1 小节讨论相关时间点的选择。随后，我们在第 4 节展示数值实验，对比基于 DEIM 和杠杆分数的时间点选择方法，并在第 5 节得出结论。

2. Problem setting

我们研究如下形式的时间依赖偏微分方程 $\partial_t u(t,\ x)+A(t,\ x)\ u(t,\ x)\ =f\ (t,\ x)$，其中 $A(t,\ x)$ 表示一个可能包含非均匀时间依赖系数函数的椭圆微分算子。随后，例如在空间上采用有限元法、在时间上采用隐式欧拉法进行离散化，我们要求解以下离散线性系统：给定初始值的离散表示 $\mathbf{u}_0 \in \mathbb{R}^N$，通过求解以下系统可得到 $n = 1,\ .....,\ M$ 时刻的解 $\mathbf{u}_n \in \mathbb{R}^N$。

$$(\mathbf{M} + \Delta_T \mathbf{A}_n)\, \mathbf{u}_n = \Delta_T \mathbf{F}_n + \mathbf{M}\, \mathbf{u}_{n-1}. \tag{2.1}$$

这里，$\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N\times N}$、$\mathbf{A}_n \in \mathbb{R}^{N\times N}$ 和 $\mathbf{F}_n \in \mathbb{R}^N$ 分别是标准的质量矩阵和刚度矩阵以及右端向量，而 Δ_T 表示时间步长。

我们在此假设，空间和时间的离散足够精细，使得（2.1）的精确解与离散解之间的离散误差很小。为确保这一点，问题（2.1）可能需要具有很高的维数，因此求解的计算成本很高，例如，当系数函数包含需要充分分辨的细尺度特征时。作为解决方法，我们构造合适的问题适配基函数，这些基函数在空间中定义，并将其与时间步进格式结合起来。

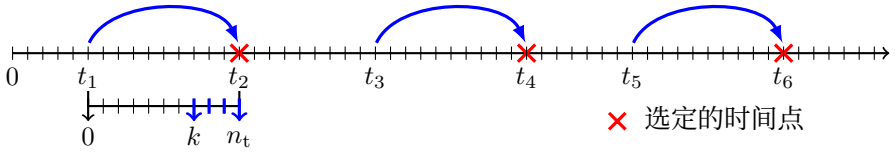

FIGURE 1. 算法1示意图 [19] 该算法在时间上并行构建问题适配基函数。

3. GENERATING PROBLEM-ADAPTED BASIS FUNCTIONS IN PARALLEL IN TIME

下面简要介绍文献 [19]提出的随机基生成算法。

为构造适用于问题（2.1）近似的基函数，[19] 算法1会从数据依赖概率分布中随机选取 $n_{\text{rand}} \in \mathbb{N}$ 个时间网格上的时间点（参见小节3.1），随后如图1所示，并行执行若干次偏微分方程模拟，每次仅计算少量时间步。对于每个起始时间点，抽取一个高斯随机向量作为初始条件，然后计算偏微分方程的局部解，历时 n_t 个时间步。这里，每次采用随机初始条件进行的偏微分方程局部时间模拟，都会在一个时间点上近似得到一个局部近似空间，该空间在 Kolmogorov 意义下是最优的（参见 [1, 5, 18, 13, 21, 15]）；详情见文献 [19] 的第4节和第5.1小节。随后，存储在最后 $n_t - k + 1$ 个时间点处计算得到的局部解轨迹，并通过奇异值分解（SVD）进行压缩，以提取降阶基函数。

因此，该算法非常适合现代计算架构，因为它能够将可用的计算预算拆分并分配到整个时间区间，从而便于实现高度并行的计算。

3.1. 讨论：选择时间点。

在本小节中，我们回顾基生成算法 [19] 中如何随机选取相关时间点，并提出一个关键的新思路：采用基于离散经验插值法的确定性时间点选择方法。

由于偏微分方程的解随时间的变化受到数据函数的影响，因此 [19] 中的时间点选择由数据函数随时间的变化情况指导。为此，我们将时变数据函数表示为矩阵，其中每一列对应一个时间点。然后，利用随机化数值线性代数 [9, 8] 中的列子集选择技术来检测重要的时间点。具体而言，杠杆分数采样方法 [10] 似乎是一个很有吸引力的选择，因为它能够检测数据函数中的异质特征，正如 [19]中的数值实验所示（见 [19]中的第 5.3 小节）。

杠杆分数采样。杠杆分数 [10] 是根据输入矩阵的（截断）SVD 计算得出的，反映了各列或各行对矩阵最佳低秩近似的影响。因此，杠杆分数常用于构造 CUR 或类似的低秩矩阵分解 [16]，通过直接选取矩阵的部分列或行来近似矩阵。选取足够多的列或行后，所得

近似以很高的概率几乎与最优低秩近似一样好 [16]。

基于离散经验插值法的选择。 最近， [22]提出了一种基于离散经验插值法的 CUR 矩阵分解方法。该方法通过迭代处理主奇异向量，确定性地选取矩阵中最重要的列或行。在每一步中，先从下一个奇异向量中去除其在已选分量上的投影，再选取一个新索引（参见 [22]中的算法1）。研究证明，恰好选取 r 列或行所得到的近似，其精度几乎与秩为r 的奇异值分解 [22, 一样高（定理41]）。

[22] 中的数值实验表明，对于包括稀疏非负矩阵，以及包含文本分类或癌症遗传学数据集的矩阵在内的测试案例，与基于杠杆分数的 CUR 分解相比，DEIM-CUR 方法能够提供精度更高的低秩矩阵近似。无论采用随机杠杆分数采样，还是确定性地选择杠杆分数最高的列或行，观察到的结果均成立。

新的贡献。 我们首次提出，在 [19] 的算法1中采用一种确定性的时间点选择方法，该方法基于 [22]中介绍的 DEIM 列选择程序。我们采用 [22] 提出的基于奇异值分解的 DEIM 方法，因为两种方法都需要进行（截断）奇异值分解，因此在计算成本方面，可以与 [19] 采用的随机杠杆分数采样方法进行公平比较。尽管如此，也可以采用 [11] 提出的成本较低的基于 QR 分解的 DEIM 程序；此外，还可以使用 [2]介绍的随机化 Gram-Schmidt 算法，进一步降低计算成本。另一种选择是采用 [17]提出的方法，将随机采样与 DEIM 方法结合起来。

4. 数值实验

下文将通过数值实验研究 [19] 的算法1中基于 DEIM 的确定性时间点选择方法的性能，并将其与 [19]采用的随机杠杆分数采样方法进行比较。为此，我们考虑 [19], 中的两个测试案例，即源项随时间变化，且渗透率系数在空间和时间上均大致变化的问题。这些实验为 DEIM 方法适用于哪些情况、又不适用于哪些情况提供了一些参考。

4.1. **炉灶问题**。

首先，我们考虑一个热方程，其中有三个空间上互不相交的热源，它们随时间开启和关闭，如图 2（左上）所示。有关数值实验的完整说明，请参阅 [19, 第 6 小节。1] 。为了在 [19], 的算法1中选择时间点，我们将 [22] 中的 DEIM 列选择算法1应用于一个矩阵，该矩阵以列的形式包含与各时间点对应的右端向量；也就是说，这与用于计算杠杆分数的矩阵相同，详见 [19]（见图 2 （左下））。

我们在图2 （左上）中观察到，DEIM 算法完美地捕捉到了三个不同的源项，因为它选取的时间点对应于炉灶的峰值。此外，我们在图2 （右侧）中看到，对于 DEIM

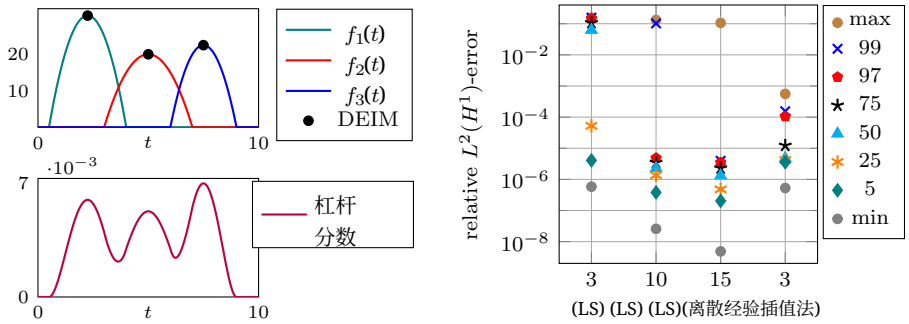

FIGURE 2. 与三个空间不相交源相关的源项 f_i，根据算法1计算得到的离散经验插值法时间点，见 [22]（左上），以及秩3杠杆分数概率分布（左下）。相对 $L^2(H^1)$-误差的分位数，其中 $n_{\text{rand}} = 3$、10、15个从杠杆分数中随机抽取的时间点，与 $n_{\text{rand}} = 3$ 确定性选取的离散经验插值法时间点进行比较，$n_t = 15$、$k = 13$、$\texttt{tol} = 10^{-8}$以及100。000次算法1的实现，见 [19]（右）。

时间点选择，所有情况下的相对 $L^2(H^1)$-误差都低于 10^{-3}，因为三个炉灶均被检测到。如果从杠杆分数概率分布中抽取相同数量的时间点，我们会发现至少 25% 的情况下误差低于 10^{-4}，但至少 50% 的情况下误差高于 $5 \cdot 10^{-2}$，且并非所有炉灶都能被检测到。对于随机选取的 10（15）个时间点，97（99）% 的情况下误差低于 10^{-5}。因此，采用随机时间点选择时，必须进行少量过采样，才能以较高概率检测到全部三个炉灶。尽管如此，相应的局部偏微分方程模拟可以以高度并行的方式执行，因此不会显著增加实际运行时间。然而，我们发现，对于这个测试案例，确定性 DEIM 方法有助于确定实现良好近似精度所需的最小时间点集合。

4.2. **时变渗透率系数问题**。接下来，我们考虑一个实验，其中使用了现实世界中的渗透率系数 κ_0，该系数取自SPE10基准问题，参见图3；测试案例的详细信息见 [19, 第6小节。3]由于图4（左图和中图）所示区域中的渗透率和流入具有不同的配置与组合，该问题的解轨迹相当复杂。由于流入和渗透率均随时间变化，我们将 [22] 中的离散经验插值法列选择算法分别应用于两个矩阵：一个矩阵以各时间点对应的右端向量为列，另一个矩阵的列包含每个时间点上渗透率场的取值。相应的杠杆分数见图4（右图）。

在图5（左）中，我们观察到，对于基于 DEIM 的时间点选择，相对 $L^2(H^1)$-误差在所有情况下都高于 10^{-1}。此外，如图5（右）所示，时间区间 $(3, 10)$ 内的相对 L^2-误差相当大；由此可推断，对于该测试案例，DEIM方法无法检测到时变数据函数的所有不同配置和组合，因此也无法捕捉解随时间变化的所有不同形态。这在一定程度上是因为所选时间点位于数据函数跳变至新值的位置，如图4（中）所示。因此，我们改为

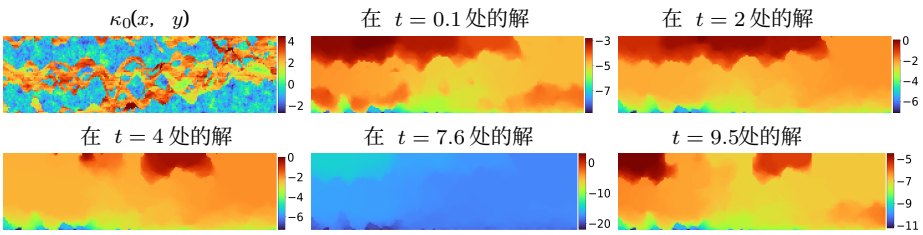

FIGURE 3. 渗透率场 κ_0 来自 [7] 以及在不同时间点求得的解，以 10 为底的对数值绘制。

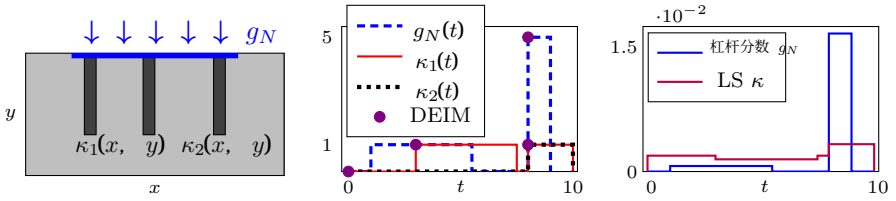

FIGURE 4. g_N $\kappa_1\ t\ \cdot\kappa_1\ x\ y\ +\kappa_2\ t\ \cdot$随时间变化的流入和高导 $\kappa_2\ x\ y$ 10^3, 0 电通道 ( ) (,) ( ) (,) （左图和中图；深灰色对应于浅灰色至）。 [22] 中由算法1计算得到的 DEIM 时间点：对于秩为1的 g_N 和秩为 3 的 $\kappa = \kappa_0 + \kappa_1 + \kappa_2$ （中图），以及与 g_N 相关的秩为 1 杠杆分数和对应于 κ 的秩为 3 杠杆分数（右图）。

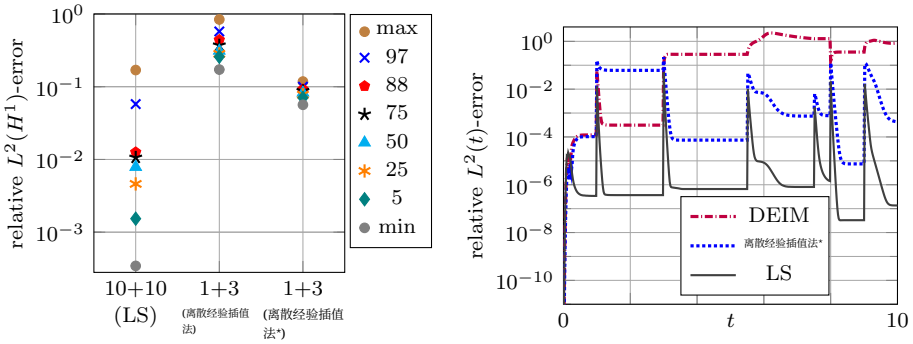

FIGURE 5. 随机从杠杆分数中抽取的 $L^2(H^1)$个时间点与确定性选择的离散经验插值法 $n_{\text{rand}} = 4($ $1 + 3)$个时间点相比，其相对 $n_{\text{rand}} = 20(10 + 10)$误差的分位数；$n_t = 15$、 $k = 13$、 $\texttt{tol} = 10^{-8}$，以及算法1在 [19] 中的25.000次实现（左）。 * 表示选择局部起始时间而不是结束时间点。相对 $L^2(t)$误差的平均值（右）。

在算法1中使用通过 DEIM 选出的时间点作为局部起始时间，而不是结束时间点，见 [19] ，并观察图5 ，发现相对 $L^2(H^1)$-误差以及时间区间 (3，10) 内的相对 L^2-误差均有所降低。然而，我们看到，对于这种 DEIM 方法的变体，相对 L^2 (H^1)-误差在所有情况下仍高于 $5 \cdot 10^{-2}$，且在时间区间 (1，3) 内未能准确捕捉解。由于时变流入（渗透率）的秩为 1（3），我们已经选取了通过 DEIM 方法可获得的最大时间点数；除非对 DEIM 进行扩展（例如加入随机采样，参见 [17]），否则无法进一步改善结果。此外，我们从图5 （左）中观察到，杠杆分数采样方法通过抽取 20 个（10+10）

时间点。虽然与 DEIM 方法相比，所选时间点的数量更多，但我们强调，相应的局部偏微分方程模拟可以并行执行。因此，对于此测试案例，我们发现杠杆分数采样方法优于基于 DEIM 的时间点选择方法。

5. Conclusion

本文提出了一种基于确定性 DEIM 的时间点选 [22]算法1，其中 [19] 该方法以令人尴尬地并行且局部的方式，及时构造用于近似（异质）时变问题的问题适配基函数。

数值实验表明，基于 DEIM 的时间点选择能够找出提供良好近似精度所需的最小时间点集合。然而，我们也观察到，在某些情况下，DEIM方法未能检测出所有与近似相关的时变数据函数组合。

References

[1] I. Babuˇska 和 R. Lipton，广义有限元方法的最优局部近似空间及其在多尺度问题中的应用，Multiscale Model. Simul., 9 (2011), 第 373–406 页。[2] O. Balabanov 和 L. Grigori，随机化 Gram-Schmidt 过程及其在 GMRES 中的应用，SIAM J. Sci. Comput., 44 (2022), 第 A1450–A1474 页。[3] M. Barrault、Y. Maday、N. C. Nguyen 和 A. T. Patera，“经验插值”方法：应用于偏微分方程的高效降阶基离散，C. R. Math. Acad. Sci. Paris, 339 (2004), 第 667–672 页。[4] G. Berkooz、P. Holmes 和 J. L. Lumley，本征正交分解在湍流分析中的应用，Annu. Rev. Fluid Mech., 25 (1993), 第 539–575 页。[5] A. Buhr 和 K. Smetana，随机化局部模型降阶，SIAM J. Sci. Comput., 40 (2018), 第 A2120–A2151 页。[6] S. Chaturantabut 和 D. C. Sorensen，通过离散经验插值实现非线性模型降阶，SIAM J. Sci. Comput., 32 (2010), 第 2737–2764 页。[7] M. A. Christie 和 M. J. Blunt，第十届 SPE 对比解项目：上尺度技术比较，SPE Reservoir Evaluation & Engineering, 4 (2001), 第 308–317 页。[8] M. Derezi´nski 和 M. W. Mahoney，随机数值线性代数中的行列式点过程，Notices Amer. Math. Soc., 68 (2021), 第 34–45 页。[9] P. Drineas 和 M. W. Mahoney，随机化数值线性代数：随机数值线性代数，Commun. ACM, 59 (2016), 第 80–90 页。[10] P. Drineas、M. W. Mahoney 和 S. Muthukrishnan，相对误差 CUR 矩阵分解，SIA M J. Matrix Anal. Appl., 30 (2008), 第 844–881 页。[11] Z. Drmaˇc 和 S. Gugercin，离散经验插值法的新选择算子——改进的先验误差界及其扩展，SIAM J. Sci. Comput., 38 (2016), 第 A631–A648 页。[12] A. Heinlein 和 K. Smetana，一种基于最优局部近似空间的全代数且稳健的两层 Schwarz 方法，arXiv 预印本 arXiv:2207.05559, (2022)。[13] A. Kolmogoroff, ¨关于给定函数类中函数的最佳近似，Ann. of Math. (2), 37 (1936), 第 107–110 页。[14] K. Kunisch 和 S. Volkwein，抛物型问题的 Galerkin 本征正交分解方法，Numer. Math., 90 (2001), 第 117–148 页。[15] C. Ma、R. Scheichl 和 T. Dodwell，基于局部最优谱近似的广义有限元方法的新型设计与分析，SIAM J. Numer. Anal., 60 (2022), 第 244–273 页。[16] M. W. Mahoney 和 P. Drineas，用于改进数据分析的 CUR 矩阵分解，Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 106 (2009), 第 697–702 页。

[17] B. Peherstorfer、Z. Drmaˇc 和 S. Gugercin，采用随机和确定性采样点的离散经验插值与缺失数据适用的正交本征分解的稳定性，SIAM J. Sci. Comput., 42 (2020), 第 A2837–A2864 页。[18] J. Schleuß 和 K. Smetana，抛物型问题的最优局部近似空间，Multiscale Model. Simul., 20 (2022), 第 551–582 页。[19] J. Schleuß、K. Smetana 和 L. ter Maat，时间上的随机准最优局部近似空间，SIAM J. Sci. Comput., (2022+)。（已获接收发表。预印本：https://arxiv.org/abs/2203.06276）。[20] L. Sirovich，湍流与相干结构动力学。I. 相干结构，Quart. Appl. Math., 45 (1987), 第 561–571 页。[21] K. Smetana 和 A. T. Patera，适用于基于组件的静态凝聚过程的最优局部近似空间，SIAM J. Sci. Comput., 38 (2016), 第 A3318–A3356 页。[22] D. C. Sorensen 和 M. Embree，一种由离散经验插值法诱导的 CUR 分解，SIAM J. Sci. Comput., 38 (2016), 第 A1454–A1482 页。

Faculty of Mathematics and Computer Science University of Münster Einstein- , , , „ str. 62 48149 Münster Germany julia.schleuss@uni-muenster.de.

Department of Mathematical Sciences, Stevens Institute of Technology, 1 Castle Point Terrace, Hoboken, NJ 07030, United States of America, ksmetana@stevens.edu.