arXiv:2304.01294v3 [math.NA] 9 Mar 2024

利用高斯过程求解非线性偏微分方程的稀疏 Cholesky 分解

YIFAN C HEN、HOUMAN OWHADI 和 FLORIAN SCH ÄFER

Abstract. 近年来，基于机器学习的方法已被广泛用于自动求解偏微分方程（PDE）。在这些方法中，高斯过程（GP）和核方法因其灵活性、稳健的理论保证以及与传统方法的密切联系而备受关注。它们可以将一般非线性偏微分方程的求解转化为带有非线性偏微分方程诱导约束的二次优化问题。然而，复杂度瓶颈在于对由协方差核的逐点求值得到的稠密核矩阵进行计算；其 *partial derivatives*则源于偏微分方程约束，而这方面鲜有快速算法。

本文的主要目标是为处理此类核矩阵提供一种近线性复杂度算法。我们提出一种针对这些矩阵的稀疏 Cholesky 分解算法，该算法基于一种新颖的逐点测量与导数测量排序，使 Cholesky 因子近似稀疏。我们通过将该因子与高斯过程回归以及数值均匀化中基函数的指数衰减直接联系起来，对这种近似稀疏性作出严格论证。随后，我们采用在库尔贝克-莱布勒散度意义下最优的高斯过程 Vecchia 近似来计算近似因子。由此，我们能够以空间复杂度 $O(N\log^d(N/\epsilon))$和时间复杂度 $O(N\log^{2d}(N/\epsilon))$计算核矩阵的 ϵ-近似逆乔列斯基因子。我们将稀疏 Cholesky 分解集成到优化算法中，从而获得求解非线性偏微分方程的快速求解器。我们通过数值实验展示了该算法在一大类非线性偏微分方程（如非线性椭圆方程、Burgers 方程和 Monge-Amp`ere 方程）上的近线性空间与时间复杂度。总之，我们提供了一种快速、可扩展且准确的方法，用高斯过程和核方法求解一般偏微分方程。

Contents

1. 引言 2 1.1. 背景 2 1.2. 贡献与组织结构 3 1.3. 相关工作 4 2. 通过高斯过程求解非线性偏微分方程 5 2.1. 高斯过程框架 5 2.2. 有限维问题 6 2.3. 一般情形 7 3. 稀疏 Cholesky 分解算法 7 3.1. 无导数测量情形 7 3.2. 导数测量情形 11 4. 理论研究 15

2010 *Mathematics Subject Classification.* 65F30, 60G15, 65N75, 65M75, 65F50, 68W40.1

4.1. 严格结果的设定 15 4.2. 理论 16 5. 二阶优化方法 17 5.1. 高斯-牛顿迭代 17 5.2. 用于约化核矩阵的稀疏 Cholesky 分解 18 5.3. 一般情形 20 6. 数值实验 22 6.1. 非线性椭圆型偏微分方程 22 6.2. Burgers 方程 23 6.3. Monge-Amp`ere 方程 24 7. 结论 26 致谢 26 参考文献 27 附录 A. 超节点与聚合稀疏模式 31 附录 B. 球装填论证 32 附录 C. KL 最小化的显式公式 32 附录 D. 主要理论结果的证明 33 D.1. 定理 4.1 的证明 33 D.2. 定理 4.2 的证明 36 D.3. Cholesky 因子、条件协方差、条件期望与 Gamblets 之间的联系 38 D.4. 关于 Gamblets 指数衰减的结果 40 附录 E. 核矩阵的特征值界 45

1. Introduction

机器学习和概率推断 [50] 凭借自动求解计算问题的能力，日益受到欢迎。高斯过程（GP） [78] 提供了一种很有前景的方法，将传统数值算法的理论严谨性与机器学习求解器的灵活设计相结合 [54, 55, 62, 12, 8]。此外，高斯过程与核方法 [70, 67], 、神经网络 [52, 37, 30], 和无网格方法 [67, 84]有着深刻的联系。

本文研究高斯过程和核方法在求解非线性偏微分方程时的计算效率；在此过程中会遇到稠密核矩阵，其矩阵项由高斯过程协方差核函数的逐点函数值和导数导出。本文提出的方法在其他可获取高斯过程或函数导数信息的场景中也可能具有实际应用价值，例如贝叶斯优化 [81] 和偏微分方程发现 [43]。

1.1. 背景。 近期研究提出使用高斯过程和核方法求解非线性偏微分方程。该方法的基本思路是将偏微分方程视为机器学习中的数据，用以描述每个配置点处函数的逐点取值与导数之间的关系。随后，通过对未知函数施加高斯过程先验，并根据配置点处的偏微分方程数据求解最大后验（MAP）估计，即可得到偏微分方程的数值求解器 [8]。我们将在第 2 节回顾这一方法。简而言之，该方法将每个非线性偏微分方程转化为以下二次优化问题

并带有非线性、由偏微分方程诱导的约束：

$$\begin{cases} \min\limits_{\mathbf{z}\in\mathbb{R}^N} & \mathbf{z}^T K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})^{-1}\mathbf{z} \\ \text{s.t.} & F(\mathbf{z}) = \mathbf{y}\,, \end{cases} \tag{1.1}$$

其中， F 和 $\mathbf{y}$ 编码了偏微分方程以及源项/边界数据。 $K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi}) \in \mathbb{R}^{N\times N}$ 是一个正定核矩阵，其元素为 $k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$，或者是核函数导数的（线性组合），例如 $\Delta_{\mathbf{x}} k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$。此处，$\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^d$ 是空间中的一些采样配置点。像 $k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$ 这样的元素源自狄拉克测量，而像 $\Delta_{\mathbf{x}} k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$ 这样的元素则来自高斯过程的导数测量；更多细节见第2节。

在 [8, 3], 理论分析和数值实验表明了该方法的灵活性及其可证明的收敛性。对于具有光滑解的典型偏微分方程问题，使用 Mat´ern 核函数和高斯核函数，利用适量（即 $N \sim 10^3$ 到 10^4个）配置点即可实现较高精度；在这种情况下，该算法比有限差分等传统方法更高效，并且比基于神经网络的方法更简单、更具可解释性。然而，对稠密矩阵 $K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})$ 进行朴素计算会导致¨ively results in$O(N^3)$ 的空间/时间复杂度；随着配置点数量进一步增加，这将变得难以承受。本文旨在提供一种通用算法，使高斯过程方法能够可扩展地用于求解非线性偏微分方程。

1.2. 贡献与组织结构。 本文提出了一种算法，其空间复杂度为 $O(N\log^d(N/\epsilon))$，时间复杂度为 $O(N\log^{2d}(N/\epsilon))$。该算法输出一个置换矩阵 P_{perm} 和一个稀疏上三角矩阵 U ，其中有 $O(N\log^d(N/\epsilon))$ 个非零元素。所得矩阵满足以下条件：

$$\|K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})^{-1} - P_{\text{perm}}^T U U^T P_{\text{perm}}\|_{\text{Fro}} \le \epsilon\,, \tag{1.2}$$

其中， $\|\cdot\|_{\text{Fro}}$ 为弗罗贝尼乌斯范数。算法的详细内容将在第 3 节中阐述。

我们在第 4 节中严格分析该算法的误差。该分析要求在区域内有足够的狄拉克测量，并针对一类作为微分算子格林函数的核函数建立理论，例如 Mat´ern 类核函数。该理论依托线性代数、高斯过程条件化、屏蔽效应和数值均匀化之间的相互作用，揭示了置换后核矩阵的乔列斯基逆因子具有指数衰减/近似稀疏性。

利用这些稀疏因子，针对 (1.1) 的基于梯度的优化方法可扩展至大规模问题。我们还可以采用通常更高效的二阶方法，通过将约束线性化并求解序列二次规划问题来求解 (1.1)。这样，在每次迭代 $\mathbf{z}^k$ 时，会得到一个涉及约化核矩阵$K(\boldsymbol{\phi}^k,\boldsymbol{\phi}^k) := DF(\mathbf{z}^k)K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})(DF(\mathbf{z}^k))^T$ 的线性方程组；参见第 5 节。对于这个约化核矩阵，当区域内存在的狄拉克测量不足时，我们关于其稀疏 Cholesky 分解的理论保证不再成立。尽管如此，我们仍可采用略有不同的置换方式应用该算法，并将其与预条件共轭梯度法（pCG）结合来求解线性方程组。实验表明，pCG 仅需近乎恒定的迭代步数即可

收敛。对于许多非线性偏微分方程，我们观察到上述序列二次规划方法可在 $O(1)$ 步内收敛。因此，假设序列二次规划迭代能够收敛，我们的算法便可为一般非线性偏微分方程提供近线性空间／时间复杂度的求解器。收敛性假设取决于核函数的选择以及偏微分方程的性质；我们通过数值实验展示了该方法在求解非线性椭圆方程、Burgers 方程和 Monge-Amp`ère 方程时的表现；参见第 6 节。我们在第 7 节作总结。

1.3. 相关工作。

下面总结相关文献。

1.3.1. 机器学习与偏微分方程。 机器学习方法，例如基于神经网络（NN）和高斯过程的方法，在自动化科学计算（如求解偏微分方程）方面展现出显著潜力。该领域的近期进展包括利用准备好的解数据进行算子学习 [39, 6, 53, 44] ，以及在没有任何解数据的情况下学习单个解 [26, 61, 8, 31]。本文聚焦于后者。神经网络能够提供表达能力强的函数表示。文献中已有大量关于其经验成功的报告。然而，神经网络的训练通常需要大量调参，且耗时远超传统求解器 [20]。研究人员为稳定和加速训练过程投入了大量精力 [35, 74, 75, 14, 83]。

高斯过程和核方法基于一种更易解释且有坚实理论基础的函数表示，其根植于再生核希尔伯特空间（RKHS）理论 [76, 4, 56]；通过层次核学习 [80, 57, 11, 13], ，这些表示也可以具备较强的表达能力。尽管如此，稠密核矩阵仍很常见，这往往限制了可扩展性。在偏微分方程问题中，这些矩阵还可能涉及核函数的偏导数 [8], ，而与不涉及导数的对应方法相比，处理此类矩阵的快速算法发展较为有限。

1.3.2. 核矩阵的快速求解器。 稠密核矩阵（记作 Θ）的近似是科学计算和机器学习中的经典问题。现有的大多数方法都侧重于 Θ仅涉及核函数的逐点取值的情形。这些算法通常依赖低秩或稀疏近似，以及它们的组合与多尺度变体。低秩技术包括 Nystr¨om 近似 [77, 51, 7], 秩揭示 Cholesky 分解 [21], 从概率视角出发的诱导点方法 [59], 以及随机特征 [60]。基于稀疏性的方法包括协方差截断 [17], 局部专家（综述见 [42]），以及基于精度矩阵和随机微分方程的方法 [40, 63, 66, 65]。结合低秩与稀疏技术可以实现高效的结构化近似 [79], 并能更好地捕捉短程和长程相互作用 [64]。多尺度和分层思想也被用于寻求 Θ 的全尺度近似，其复杂度接近线性 。这类方法包括 $\mathcal{H}$ 矩阵 [23, 25, 24] 及其变体 [38, 1, 2, 36, 49, 48, 41, 18], 它们利用不同尺度下非对角块矩阵的低秩结构；基于小波的方法 [5, 19], 利用 Θ在小波基中的稀疏性；多分辨率预测过程 [32]；以及 Vecchia 近似 [73, 33]和稀疏 Cholesky 分解 [69, 68] ，它们依赖于在经过精心排序的点的条件下近似稀疏的相关性。

对于包含核函数导数的 Θ，已有若干研究 [16, 58, 15]利用结构化近似来扩展计算规模，但尚未证明严格的精度保证。诱导点方法 [82, 47] 也已得到探索；然而，由于该方法仅采用低秩近似，其精度和效率可能受到限制。

1.3.3. 空间统计学中的屏蔽效应。值得注意的是，[68], 中的稀疏 Cholesky 分解算法在形式上等价于 Vecchia 近似 [73, 33]„ 对于范围广泛的核函数，其空间复杂度达到当前最优水平，为 $O(N\log^d(N/\epsilon)$，时间复杂度为 $O(N\log^{2d}(N/\epsilon)$，且具有严格的理论保证。该算法针对条目不含导数的核矩阵设计，并与空间统计学中的屏蔽效应 [71, 72]相关。屏蔽效应表明，在适当的数据点排序下，空间随机场很可能呈现近似条件独立性。相关研究 [55, 56, 69] 针对由粗到细的数据点排序，给出了条件协方差指数衰减的定量结果，为 [68]奠定了理论基础。

一个根本性问题是：纳入空间场的导数信息后，屏蔽效应会如何变化，以及如何利用这一效应，将稀疏 Cholesky 分解方法扩展到包含核函数导数的核矩阵。针对这一新背景研究屏蔽效应，有助于众多可获得导数型测量的应用。

2. Solving nonlinear PDEs via GPs

本节回顾用于求解非线性偏微分方程的高斯过程框架 [8] 。我们将以一个典型的非线性椭圆方程为贯穿示例，说明主要思想，随后给出适用于一般非线性偏微分方程的更完整方案。

考虑以下非线性椭圆偏微分方程：

$$\begin{cases} -\Delta u + \tau(u) = f & \text{in } \Omega\,, \\ u = g & \text{on } \partial\Omega\,, \end{cases} \tag{2.1}$$

其中，τ 是一个非线性标量函数，Ω 是 $\mathbb{R}^d$ 中的有界开域，其边界为利普希茨边界。我们假设该方程在经典意义下存在强解。

2.1. **高斯过程框架**。第一步是在内部选取 M_Ω 个配置点，并在边界上选取 $M_{\partial\Omega}$ 个配置点，使得

$$\mathbf{x}_\Omega = \{\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_{M_\Omega}\} \subset \Omega \quad \text{and} \quad \mathbf{x}_{\partial\Omega} = \{\mathbf{x}_{M_\Omega+1}, ..., \mathbf{x}_M\} \subset \partial\Omega\,,$$

其中 $M = M_\Omega + M_{\partial\Omega}$。随后，通过为未知函数 u赋予均值为 0、协方差函数为 K: $\Omega\times\Omega \to \mathbb{R}$ 的高斯过程先验，该方法旨在根据采样得到的偏微分方程数据计算高斯过程的最大后验（MAP）估计量，从而得到以下优化问题

$$\begin{cases} \underset{u\in\mathcal{U}}{\text{minimize}} \ \|u\| \\ \text{s.t.} \quad -\Delta u(\mathbf{x}_m) + \tau(u(\mathbf{x}_m)) = f(\mathbf{x}_m), & \text{for } m = 1, \dots, M_\Omega\,, \\ \qquad u(\mathbf{x}_m) = g(\mathbf{x}_m), & \text{for } m = M_\Omega + 1, \dots, M\,. \end{cases} \tag{2.2}$$

其中， $\|\cdot\|$ 是与核/协方差函数 K对应的再生核希尔伯特空间（RKHS）范数。

关于一致性，当 K 足够光滑时，对于 M_Ω， $M_{\partial\Omega}\to\infty$，上述解将收敛到偏微分方程的精确解；参见 [8]中的定理 1.2，以及 [3]中的收敛速率。该方法可视为对许多基于径向基函数的无网格方法 [67] 和概率数值计算 [54, 12]的非线性推广。

2.2. **有限维问题**。下一步是将 (2.2) 转化为一个有限维问题以便计算。我们首先引入一些记号：

• 测量的记号：我们将测量函数记为

$$\phi_m^{(1)}=\delta_{\mathbf{x}_m},1\le m\le M\quad\text{and}\quad\phi_m^{(2)}=\delta_{\mathbf{x}_m}\circ\Delta,1\le m\le M_\Omega\,,$$

其中， $\delta_{\mathbf{x}}$ 是以$\mathbf{x}$为中心的狄拉克 δ 函数。对于足够正则的核函数，它们属于$\mathcal{U}^*$，即 $\mathcal{U}$的对偶空间。

此外，我们用简写记号 $\boldsymbol{\phi}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{\phi}^{(2)}$ 分别表示具有 $\phi_m^{(1)}$和 $\phi_m^{(2)}$作为元素的 M 维和 M_Ω维向量，并用 $\boldsymbol{\phi}$ 表示通过拼接 $\boldsymbol{\phi}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{\phi}^{(2)}$得到的 N维向量，其中 $N=M+M_\Omega$。

• 原始-对偶配对的记号：我们使用 $[\cdot,\cdot]$ 表示原始-对偶配对，即对于 $u\in\mathcal{U}$， $\phi_{(1)m}=\delta_{\mathbf{x}_m}\in\mathcal{U}^*$，有 $[u,\phi_{(1)m}]=u(\mathbf{x}_m)$。类似地，对于 $\phi_{(2)m}=\delta_{\mathbf{x}_m}\circ\Delta\in\mathcal{U}^*$，有$[u,\phi_{(2)m}]=\Delta u(\mathbf{x}_m)$。为简化表述，我们常常滥用记号，以 L^2 积分形式表示原始-对偶配对： $[u,\phi]=\int u(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}$。

• 核矩阵的记号：我们将 $K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})$ 写作具有 $N\times N$的矩阵，其元素为 $\int K(\mathbf{x},\mathbf{x}')\phi_m(\mathbf{x})\phi_j(\mathbf{x}')\,\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}\mathbf{x}'$，其中 ϕ_m 表示 $\boldsymbol{\phi}$ 的元素。此处，积分记号应按照上文所述的原始 - 对偶配对来理解。

类似地， $K(\mathbf{x},\boldsymbol{\phi})$ 是一个 N维向量，其元素为 $\int K(\mathbf{x},\mathbf{x}')\phi_j(\mathbf{x}')\,\mathrm{d}\mathbf{x}'$。此外，我们约定：如果函数中的变量是一个集合，就表示该函数作用于集合中的每个元素；输出将是一个向量或矩阵。例如， $K(\mathbf{x}_\Omega,\mathbf{x}_\Omega)\in\mathbb{R}^{M_\Omega\times M_\Omega}$。

然后，根据表示定理的一个泛化版本 [8], ，式 (2.2) 的最小化解具有如下形式

$$u^\dagger(\mathbf{x})=K(\mathbf{x},\boldsymbol{\phi})K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})^{-1}\mathbf{z}^\dagger\,,$$

其中 $\mathbf{z}^\dagger$ 是以下带有非线性约束的有限维二次优化问题的解

$$\text{(2.3)}\qquad\begin{cases}\underset{\mathbf{z}\in\mathbb{R}^{M+M_\Omega}}{\text{minimize}} & \mathbf{z}^TK(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})^{-1}\mathbf{z}\\ \text{s.t.} & -z_m^{(2)}+\tau(z_m^{(1)})=f(\mathbf{x}_m),\quad\text{for } m=1,\dots,M_\Omega\,,\\ & z_m^{(1)}=g(\mathbf{x}_m),\qquad\qquad\text{for } m=M_\Omega+1,\dots,M\,.\end{cases}$$

这里，$\mathbf{z}^{(1)}\in\mathbb{R}^M$、$\mathbf{z}^{(2)}\in\mathbb{R}^{M_\Omega}$ 和$\mathbf{z}$ 是它们的拼接。对于这个具体示例，我们可以明确写出 $K(\mathbf{x},\boldsymbol{\phi})$ 和 $K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})$：

$$\text{(2.4)}\qquad\begin{aligned}&K(\mathbf{x},\boldsymbol{\phi})=(K(\mathbf{x},\mathbf{x}_\Omega),K(\mathbf{x},\mathbf{x}_{\partial\Omega}),\Delta_{\mathbf{y}}K(\mathbf{x},\mathbf{x}_\Omega))\in\mathbb{R}^{1\times N}\,,\\ &K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})=\begin{pmatrix}K(\mathbf{x}_\Omega,\mathbf{x}_\Omega) & K(\mathbf{x}_\Omega,\mathbf{x}_{\partial\Omega}) & \Delta_{\mathbf{y}}K(\mathbf{x}_\Omega,\mathbf{x}_\Omega)\\ K(\mathbf{x}_{\partial\Omega},\mathbf{x}_\Omega) & K(\mathbf{x}_{\partial\Omega},\mathbf{x}_{\partial\Omega}) & \Delta_{\mathbf{y}}K(\mathbf{x}_{\partial\Omega},\mathbf{x}_\Omega)\\ \Delta_{\mathbf{x}}K(\mathbf{x}_\Omega,\mathbf{x}_\Omega) & \Delta_{\mathbf{x}}K(\mathbf{x}_\Omega,\mathbf{x}_{\partial\Omega}) & \Delta_{\mathbf{x}}\Delta_{\mathbf{y}}K(\mathbf{x}_\Omega,\mathbf{x}_\Omega)\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{N\times N}\,.\end{aligned}$$

这里， $\Delta_{\mathbf{x}}$， $\Delta_{\mathbf{y}}$ 分别是 k 关于第一个和第二个参数的拉普拉斯算子。显然，计算损失函数及其梯度需要处理稠密核矩阵 $K(\phi, \phi)$，其元素由 k 的导数 构成。

2.3. **一般情形**。 对于一般偏微分方程，该方法导出如下优化问题

$$\begin{cases} \min\limits_{u\in\mathcal{U}} & \|u\| \\ \text{s.t.} & \text{PDE constraints at } \{\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_M\}\in\overline{\Omega}\,, \end{cases}$$

以及与之等价的有限维问题

$$\begin{cases} \min\limits_{\mathbf{z}\in\mathbb{R}^N} & \mathbf{z}^T K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})^{-1}\mathbf{z} \\ \text{s.t.} & F(\mathbf{z})=\mathbf{y}\,, \end{cases} \tag{2.5}$$

其中， $\boldsymbol{\phi}$ 是对 u进行的狄拉克测量和导数测量的拼接；这些测量由偏微分方程在采样点处诱导。函数 F 对偏微分方程进行编码，向量$\mathbf{y}$ 则对右端项和边界数据进行编码。同样，显然计算瓶颈在于 $K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})^{-1}$这一部分。

备注 2.1。 这里，我们将“导数测量”定义为 $\mathcal{U}^*$中的一个泛函，它作用于 $\mathcal{U}$ 中的函数时会得到该函数各阶导数的线性组合。从数学上讲，假设导数的最高阶数为 J，那么点$\mathbf{x}_m$ 处相应的导数测量可写为 $\phi=\sum_{|\gamma|\le J} a_\gamma \delta_{\mathbf{x}_m}\circ D^\gamma$，其中多重指标为 $\gamma=(\gamma_1,\dots,\gamma_d)\in\mathbb{N}^d$且 $|\gamma|:=\sum_{k=1}^d\gamma_k\le J$。这里$D^\gamma := D^{\gamma_1}{}_{\mathbf{x}^{(1)}}\cdots D^{\gamma_d}{}_{\mathbf{x}^{(d)}}$ 是一个 $|\gamma|$阶微分算子，我们采用记号$\mathbf{x}=(\mathbf{x}^{(1)},\dots,\mathbf{x}^{(d)})$。我们要求这些测量线性无关，以确保 $K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})$可逆。$\lozenge$

3. The sparse Cholesky factorization algorithm

本节介绍一种用于 $K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})^{-1}$ 的稀疏 Cholesky 分解算法。第 4 节将基于线性代数、高斯过程条件化、空间统计学中的屏蔽效应以及数值均匀化之间的相互作用，阐述理论结果。

在第 3.1 小节中，我们概述了针对包含无导数测量的核矩阵的最先进稀疏 Cholesky 分解算法。在第 3.2 小节中，我们讨论了将这一思路扩展到包含导数型测量的核矩阵；这是本文的主要关注点。第 3.2 小节介绍的算法能够以近线性复杂度计算用于求解偏微分方程的高斯过程方法中的损失函数及其梯度。因此，一阶方法也变得可扩展。随后，我们在第 5 节将该算法扩展到二阶优化方法（例如高斯-牛顿方法）。

3.1. **无导数测量的情形**。 我们首先讨论 $\boldsymbol{\phi}$ 仅包含狄拉克型测量的情形。

考虑点集 $\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I}\subset\Omega$，其中 $I=\{1,2,\dots,M\}$如第 2.1 小节所述。我们假设这些点是散布的；为量化这一点，定义如下均匀性：

定义 3.1. 给定集合 A，点 $\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I}\subset\Omega$ 的齐次性参数定义为

$$\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I};\mathsf{A})=\frac{\min_{\mathbf{x}_i\neq\mathbf{x}_j\in I}\operatorname{dist}(\mathbf{x}_i,\{\mathbf{x}_j\}\cup\mathsf{A})}{\max_{\mathbf{x}\in\Omega}\operatorname{dist}(\mathbf{x},\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I}\cup\mathsf{A})}.$$

当 $\mathsf{A}=\emptyset$ 时，我们也将 $\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I})$ 写作：$=\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I};\emptyset)$。

在本文中，我们始终假设 $\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I})>0$。可以理解为，较大的 $\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I})$ 会使点在空间中的分布更加均匀。如果希望点不要离边界太近，考虑 $\mathsf{A}=\partial\Omega$ 也可能有用。

设 $\boldsymbol{\phi}$ 为 $\delta_{\mathbf{x}_i},1\leq i\leq M$ 的集合；它们都是狄拉克函数型测量，因此无需导数。在 [68], 中，提出了一种稀疏 Cholesky 分解算法，用于分解 $K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})^{-1}$。我们将该算法（稍作修改[1]）概括为以下三个步骤：重新排序、稀疏模式和 Kullback-Leibler（KL）最小化。

3.1.1. 重排序。 第一步是按由粗到细的尺度对这些点重新排序。这可以通过最大最小距离排序（最大最小排序）[22]来实现。我们将其推广为条件最大最小排序，定义如下：

定义 3.2（条件最大最小排序）。 对点集合 $\{\mathbf{x}_i,\ i\in I\}$ 以集合 A 为条件的最大最小排序，是通过依次选取与 A 及已选点距离最远的点$\mathbf{x}_i$ 得到的。如果 A 为空集，则任意选择一个索引 $i\in I$ 作为起始点。否则，第一个索引选择为

$$i_1=\arg\max_{i\in I}\operatorname{dist}(\mathbf{x}_i,\mathsf{A}).$$

对于已选出的前 q 个索引，我们选择

$$i_{q+1}=\arg\max_{i\in I\setminus\{i_1,\dots,i_q\}}\operatorname{dist}(\mathbf{x}_i,\{\mathbf{x}_{i_1},\dots,\mathbf{x}_{i_q}\}\cup\mathsf{A}).$$

通常令 $\mathsf{A}=\partial\Omega$ 或 $\emptyset$。我们引入算子 $P\colon I\to I$，将测量的顺序映射到相应点的索引，即 $P(q)=i_q$。可以将每个排序后点的长度尺度定义为

$$l_i=\operatorname{dist}(\mathbf{x}_{P(i)},\{\mathbf{x}_{P(1)},\dots,\mathbf{x}_{P(i-1)}\}\cup\mathsf{A}). \tag{3.1}$$

令 $\Theta=K(\tilde{\boldsymbol{\phi}},\ \tilde{\boldsymbol{\phi}})$ 表示对测量值重新排序后得到的核矩阵˜在 $\boldsymbol{\phi}$ 到 $\boldsymbol{\phi}=(\phi_{P(1)},$ ……，$\phi_{P(M)})$ 中；在此设定下有 $N=M$。一个重要的观察是，在最大最小排序下，Θ 和 Θ^{-1} 的 Cholesky 因子可能呈现近似稀疏性。例如，假设 $\Theta^{-1}=U^{\star}U^{\star T}$，其中$U^{\star}$ 是上三角 Cholesky 因子。那么在图 1 中，我们展示了 Mat´ern 核的$U^{\star}_{ij},\ i\leq j$ 的大小，其中 $j=1000,\ 2000$；点的总数为 $M=51^2$。从图中可以清楚地看出，当点远离当前第 j 个排序点时，矩阵元素会迅速衰减。

[1] [68]中提出了求取下三角乔列斯基因子的方法。本文介绍求取上三角乔列斯基因子的方法，因为这种方法的描述更加简洁。由于这一差异，在重新排序步骤中，我们采用的排序与 [68]中的排序相反。

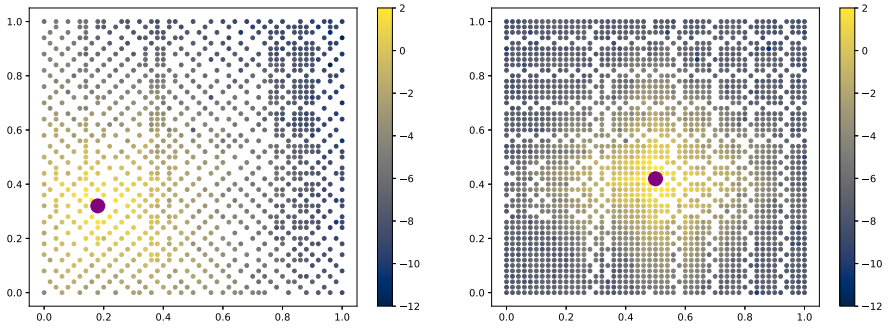

FIGURE 1. 演示在使用 Mat´ern 核进行狄拉克测量时的屏蔽效应，长度尺度为 $\nu = 5/2$ 且为 0.3。数据点在 $[0,1]^2$ 中均匀分布，网格大小为 $h = 0.02$。左图展示最大最小排序中第 1000 个点（大点），其对应的 A 为 $= \emptyset$；所有排在它之前的点（即 $i < 1000$）均根据相应的 $|U^\star_{ij}|$以不同强度着色。右图以相同方式绘制，但展示的是排序中的第 2000 个点。

注释 3.3。 人们或许会想知道，为什么这种由粗到细的重新排序会产生稀疏 Cholesky 因子。事实上，我们可以将 $U^\star$ 的元素解释为某个高斯过程的条件协方差。更具体地说，考虑高斯过程 $\xi \sim \mathcal{GP}(0,\ K)$。那么，根据˜ ˜定义，高斯随机变量 $Y_i := [\xi, \phi_i] \sim \mathcal{N}(0,\ K(\phi_i,\ \phi_i))$。我们有如下关系：

$$\frac{U^\star_{ij}}{U^\star_{jj}} = (-1)^{i\neq j} \frac{\mathrm{Cov}[Y_i, Y_j | Y_{1:j-1\setminus\{i\}}]}{\mathrm{Var}[Y_i | Y_{1:j-1\setminus\{i\}}]}, \quad i \le j\,. \tag{3.2}$$

这里采用 MATLAB 记法，因此 $Y_{1:j-1\setminus\{i\}}$ 对应于 $\{Y_q :\ 1 \le q \le j-1,\ q \neq i\}$。该公式的证明见附录 D.3。

公式 (3.2) 将 $U^\star$ 的取值与高斯过程的条件协方差联系起来。在空间统计学中，经验研究早已表明，对高斯过程进行粗尺度测量条件化后，更细尺度测量之间的协方差值会非常小。这种现象称为屏蔽效应，相关讨论见 [71, 72]等研究。这意味着，对粗尺度进行条件化会屏蔽掉细尺度相互作用。

因此，人们预期经过重新排序后，相应的 Cholesky 因子会变得稀疏。事实上，非对角元素呈指数衰减。关于这种定量衰减的严谨证明见 [69], ，其中测量仅由狄拉克函数泛函构成，而核函数是某个满足狄利克雷边界条件的微分算子的格林函数。[69]中定理 6.1 的证明实际上意味着

$$|U^\star_{ij}| \le C_1 l_M^{C_2} \exp\left(-\frac{\mathrm{dist}(\mathbf{x}_{P(i)}, \mathbf{x}_{P(j)})}{C_1 l_j}\right) \tag{3.3}$$

其中通用常数 C_1, C_2 取决于点所在的区域、核函数以及齐次性参数。我们将在采用一种新颖排序的第 4 节中证明，纳入导数型测量后，同样存在这种衰减。

值得一提的是，我们的分析还为式 (3.3) 提供了一种简单得多的证明。◊

3.1.2. 稀疏模式。 在确定排序后，我们的下一步是识别该排序下 Cholesky 因子的稀疏模式。

对于调节参数 $\rho \in \mathbb{R}^+$，我们选择上三角稀疏集$S_{P,\, l,\, \rho} \subset I \times I$ 如下

$$S_{P,l,\rho} = \{(i,j) \subset I \times I : i \leq j,\, \mathrm{dist}(\mathbf{x}_{P(i)}, \mathbf{x}_{P(j)}) \leq \rho l_j\}\,. \tag{3.4}$$

稀疏模式的选择受到注 3.3 中所述定量指数衰减结果的启发。这里，下标中的 P 表示排序， l 是与该排序相关联的长度尺度参数， ρ 是控制稀疏模式大小的超参数。在不存在歧义时，为简化记号，我们有时会省略下标。我们注意到，通过球装填论证（见附录 B），集合 $S_{P,\, l,\, \rho}$ 的基数由 $O(N\rho^d)$ 界定。

注 3.4。 最大最小排序和稀疏模式可以构造，其时间计算复杂度为 $O(N\log^2(N)\rho^d)$，空间复杂度为 $O(N\rho^d)$；见 [68] 中的算法 4.1 和定理 4.1。◊

3.1.3. *KL* 最小化。 确定排序和稀疏模式后，最后一步是使用 KL 最小化，根据给定的模式计算最佳近似稀疏 Cholesky 因子。

定义具有稀疏模式 $S_{P,l,\rho}$ 的稀疏上三角矩阵集合:

$$\mathcal{S}^{\mathrm{mtx}}_{P,l,\rho} := \{A \in \mathbb{R}^{N\times N} : A_{ij} \neq 0 \Rightarrow (i,j) \in S_{P,l,\rho}\}\,. \tag{3.5}$$

对于每一列 j，记 $s_j = \{i : (i,j) \in S_{P,l,\rho}\}$。集合 s_j 的基数记为 $\#s_j$。

KL 最小化步骤旨在求出

$$U = \arg\min_{\hat{U}\in\mathcal{S}^{\mathrm{mtx}}_{P,l,\rho}} \mathrm{KL}\left(\mathcal{N}(0,\Theta) \parallel \mathcal{N}(0,(\hat{U}\hat{U}^T)^{-1})\right)\,. \tag{3.6}$$

事实证明，上述问题有一个显式解

$$U_{s_j,j} = \frac{\Theta^{-1}_{s_j,s_j}\mathbf{e}_{\#s_j}}{\sqrt{\mathbf{e}^T_{\#s_j}\Theta^{-1}_{s_j,s_j}\mathbf{e}_{\#s_j}}}\,, \tag{3.7}$$

其中，$\mathbf{e}_{\#s_j}$ 是 $\mathbb{R}^{\#s_j}$ 中的一个标准基向量，其最后一个元素为 1，其余元素均为 0。这里，$\Theta^{-1}_{s_j,s_j} := (\Theta_{s_j,s_j})^{-1}$，其中 $\Theta_{s_j,s_j} \in \mathbb{R}^{(\#s_j)\times(\#s_j)}$ 是 Θ 的一个子矩阵，其指标集为 s_j。这个显式公式的证明与 [68], 中定理 2.1 的证明思路类似，唯一的区别是使用了上三角 Cholesky 因子。详细证明见附录 C。值得注意的是，该最优解等价于空间统计学中使用的 Vecchia 近似；相关讨论见 [68]。

通过 KL 最小化，在给定稀疏模式的情况下，我们可以找到 KL 散度意义下的最佳近似。计算过程天然适合并行处理，因为对于不同的列，公式 (3.7) 彼此独立。

注 3.5。 对于上述算法，使用稠密乔列斯基分解求逆 Θ_{s_j,s_j} 时，时间复杂度上界为 $O(\sum_{1\leq i\leq N}(\#s_j)^3)$，空间复杂度上界为 $O(\#S + \max_{1\leq i\leq N}(\#s_j)^2)$。

使用稀疏模式 $S_{P,l,\rho}$ 时，通过球装填论证（参见附录 B），可得到 $\#s_j = O(\rho^d)$ 和 $\#S = O(N\rho^d)$。因此，时间复杂度为 $O(N\rho^{3d})$，空间复杂度为 $O(N\rho^d)$。◊

注 释 3.6. 超节点 [68], 这一概念依赖于额外参数 λ，可用于对邻近测量的稀疏模式进行分组，并创建聚合稀疏模式 $S_{P,l,\rho,\lambda}$。该技术减少了冗余计算，并将 KL 最小化的算术复杂度降至 $O(N\rho^{2d})$，耗时 (参见附录 A)。本文始终采用这一方法。◊

注 释 3.7. 在 [68], 中，定理 3.4 已证明，对于一大类核矩阵，$\rho = O(\log(N/\epsilon))$ 足以得到一个 ϵ-近似因子，因此 KL 最小化的复杂度为 $O(N\log^{2d}(N/\epsilon))$（时间）和 $O(N\log^d(N/\epsilon))$（空间）。请注意，排序和聚合稀疏模式可在 $O(N\log^2(N)\rho^d)$ 的时间复杂度和 $O(N\rho^d)$ 的空间复杂度下构建；与 KL 最小化相比，这一构建步骤的复杂度通常较低。此外，该步骤可以预先计算。◊

3.2. **导数测量的情形**。上一小节讨论了由非导数型测量生成的核矩阵的稀疏 Cholesky 分解算法。在使用高斯过程求解偏微分方程和反问题时，$\boldsymbol{\phi}$ 可以包含导数测量，而这正是本文的重点。本小节旨在处理此类情形。

3.2.1. 非线性椭圆偏微分方程的情形。首先，我们考虑第 2.2 小节中的例子，其中有针对 $1 \le m \le M$ 的狄拉克测量 $\phi_m^{(1)} = \delta_{\mathbf{x}_m}$，以及针对 $1 \le m \le M_\Omega$ 的拉普拉斯型测量 $\phi_m^{(2)} = \delta_{\mathbf{x}_m} \circ \Delta$。我们的目标是扩展上一小节讨论的算法，使其包含这些导数测量。

我们必须解决的一个重要问题是这些测量的排序。具体而言，我们应将狄拉克测量排在导数型测量之前还是之后？为探讨这一问题，我们进行如下实验。首先，以任意方式对所有针对 $1 \le m \le M_\Omega$ 的导数型测量 $\phi_m^{(2)}$ 进行排序。然后，按顺序在这些测量之后依次加入狄拉克测量，并将其标记为$M_\Omega + 1$。对于该测量，我们绘制相应 Cholesky 因子 Θ^{-1} 的幅值，即针对 $i \le j$ 和 $j = M_\Omega + 1$ 的 $|U_{ij}^\star|$，方法与图 1 中类似。结果显示在图 2 的左侧。

遗憾的是，我们在图 2 左侧没有观察到明显的衰减。这可能是因为，即使在以拉普拉斯型测量为条件时，狄拉克测量仍可能与其他测量存在长程相互作用。这是因为调和函数存在一些未被拉普拉斯型测量捕捉到的自由度，因此相关性可能无法得到有效屏蔽。

或者，我们可以先对狄拉克测量进行排序，然后针对任意拉普拉斯测量，考察上述相同的量。这样就得到了图 2 的右侧，其中我们观察到所期望的快速衰减。这表明，导数测量应排在狄拉克测量之后；换言之，与逐点测量相比，导数测量应被视为更精细的尺度。

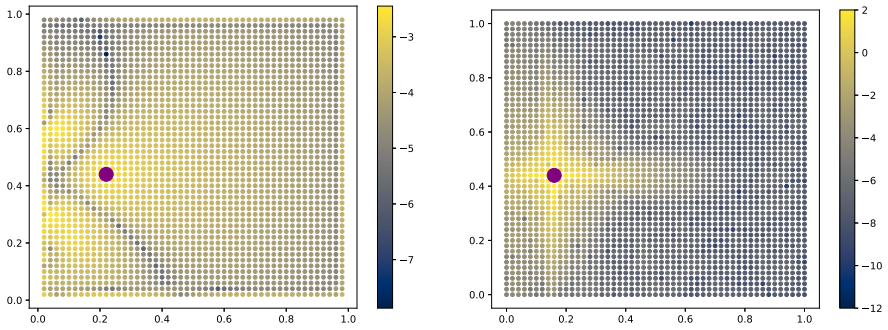

FIGURE 2. 展示了使用 Mat´ern 核、 $\nu = 5/2$ 且长度尺度为 0.3 时，导数型测量情境下的屏蔽效应。数据点在$[0,1]^2$ 中均匀分布，网格大小为 $h = 0.02$。在左图中，我们先排列拉普拉斯测量，然后选取一个狄拉克函数测量作为大点。各点根据 $|U^\star_{ij}|$按强度着色。在右图中，我们先排列狄拉克函数测量，然后选取一个拉普拉斯测量；展示方式与左图相同。

根据上述观察，我们可以设计如下的新排序。对于第 2.2 小节中的非线性椭圆偏微分方程示例，我们首先使用前面提到的最大最小排序对狄拉克测量进行排序 $\phi^{(1)}_m = \delta_{\mathbf{x}_m}$， $1 \le m \le M$ 。然后，将导数型测量 $\delta_{\mathbf{x}_m} \circ \Delta$， $1 \le m \le M_\Omega$ 按任意顺序加入该排序中。

同样，对于我们的记号，我们使用 $P : I_N \to I$ 将有序测量的索引映射到对应点的索引。这里 $I_N := \{1, 2, ..., N\}$,$N = M + M_\Omega$ ，且 I 的基数为 M。我们将有序测量的长度尺度定义为

$$l_i = \begin{cases} \operatorname{dist}(\mathbf{x}_{P(i)}, \{\mathbf{x}_{P(1)}, ..., \mathbf{x}_{P(i-1)}\} \cup \mathsf{A}), & \text{if } i \le M, \\ l_M, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{3.8}$$

我们将在第节的理论研究中论证上述长度尺度选择的合理性 n
4.

确定排序和长度尺度后，我们可以按照上一小节中的相同步骤来识别稀疏模式:

$$S_{P,l,\rho} = \{(i,j) \subset I_N \times I_N : i \le j,\, \operatorname{dist}(\mathbf{x}_{P(i)}, \mathbf{x}_{P(j)}) \le \rho l_j\} \subset I_N \times I_N\,. \tag{3.9}$$

然后，我们可以像第 3.1.3 小节那样使用 KL 最小化（见式（3.5）、（3.6）和（3.7））， 在该模式下求得最优稀疏因子。由此得到适用于含导数型测量的核矩阵的稀疏 Cholesky 分解算法。

注 3.8。 与注 3.6 类似，上述 KL 最小化步骤（利用超节点聚合稀疏模式的思路）可在时间复杂度为 $O(N\rho^{2d})$、空间复杂度为 $O(N\rho^d)$ 的条件下实现，其中参数 $\rho \in \mathbb{R}^+$ 决定稀疏集的大小。◊

我们给出一些数值实验，以展示此类算法的准确性。图 3 展示了以 KL 散度衡量的误差，即 KL $\left(\mathcal{N}(0,\ \Theta) \parallel \mathcal{N}(0,\ (U^{\rho}U^{\rho^T})^{-1})\right)$ 其中 U^{ρ} 是计算得到的稀疏因子。图中显示，KL误差随ρ呈指数级快速衰减。核函数越不光滑，衰减速率越快；对于同一个核函数，物理点数量增加时，衰减速率保持不变。请注意，对于固定的 ρ，点数增加时，KL误差会增大。定理 4.1 描述了这一效应；这也是预期之中的，因为点数越多，纳入的信息尺度越精细，矩阵会变得更加病态，近似误差也会增大。此外，定理 4.2 表明，只要 ρ 随点数的对数增长，就能达到相同的 KL误差。这一点在图 3 右侧也显而易见。图 4 左侧展示了算法的 CPU 时间，其随点数增加近乎线性增长。

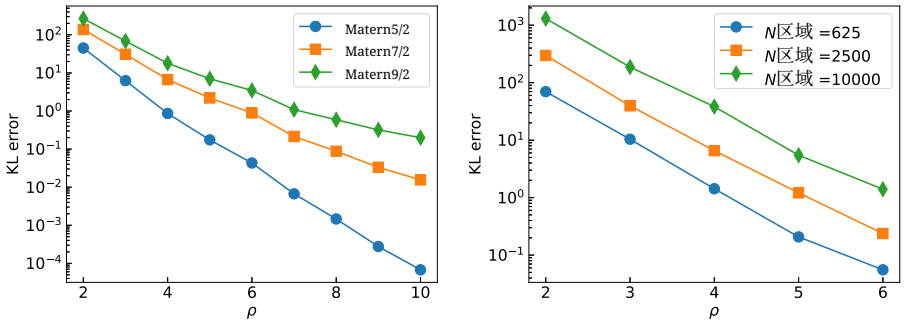

FIGURE 3. 在非线性椭圆偏微分方程示例中，展示稀疏 Cholesky 分解的精度 $K(\phi,\ \phi)^{-1}$。左图中，我们选择 Mat´ern 核函数，参数为 $\nu = 5/2,\ 7/2,\ 9/2$，长度尺度为 $l = 0.3$；物理点固定为在 $[0,1]^2$ 中均匀分布，网格大小为 $h = 0.05$；我们绘制了相对于不同 ρ的 KL 意义下测得的误差。右图中，我们固定 Mat´ern 核函数，参数为 $\nu = 5/2$，长度尺度为 $l = 0.3$。我们改变物理点的数量，这些点以网格大小 $h = 0.04$，0。02，0。01 均匀分布；因此 $N_{\text{domain}} = 625$，2500，10000 分别对应这些网格大小。

3.2.2. 一般情形。 我们介绍上一小节中讨论的适用于一般偏微分方程的算法。在一般情形 (2.5) 下，我们需要处理 $K(\phi,\ \phi)$，其中ϕ 是由偏微分方程导出的狄拉克测量与导数型测量的拼接。设物理点的数量为 M；这些点为 $\{\mathbf{x}_1,\ .....,\ \mathbf{x}_M\}$，其指标集记为 $I = \{1, ..., M\}$。不失一般性，我们可以假设 ϕ 包含这些点处的狄拉克测量 $\delta_{\mathbf{x}_m}$，以及这些点处最高阶数为 $J \in \mathbb{N}$的某些导数测量。导数测量的定义见注释 2.1。我们可以假设 ϕ 中包含狄拉克测量，是因为如果偏微分方程中没有涉及 $u(\mathbf{x})$ 的项，总可以向方程中添加 $0u(\mathbf{x})$。这些狄拉克测量的存在是该算法能够获得可证明保证的关键；详情见第 4 节。

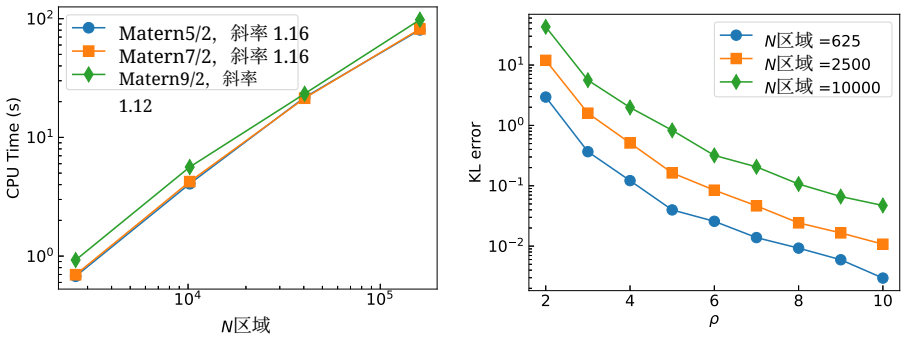

FIGURE 4.左图中，我们选择具有$\nu = 5/2, 7/2, 9/2$ 的 Mat´ern 核函数，长度尺度为 $l = 0.3$；物理点在 $[0,1]^2$ 中均匀分布，网格大小各不相同；我们使用个人电脑 MacBook Pro 2.4 GHz 四核 Intel Core i5，绘制了 $K(\phi,\phi)^{-1}$ 的分解算法所需的 CPU 时间。右图中，我们研究约化核矩阵 $K(\phi^k,\phi^k)^{-1}$ 的稀疏 Cholesky 分解。我们固定 Mat´ern 核函数为 $\nu = 5/2$，长度尺度为 $l = 0.3$。我们改变物理点的数量，这些点以网格大小为$h = 0.04$,0.02, 0.01 的网格均匀分布。我们绘制了不同ρ下的 KL误差。

与前文相同，记测量总数为 N。我们首先使用带有 A $= \emptyset$ 的最大最小排序对狄拉克测量 $\delta_{\mathbf{x}_m}$，$1 \le m \le M$ 进行排序。然后，以任意顺序将导数型测量加入该排序。

与上一小节类似，我们使用记号 $P: I_N \to I$ 将排序后测量的索引映射到相应点的索引；此处$I_N := \{1, 2, ..., N\}$。排序后测量的长度尺度由 (3.8) 定义。根据该排序，可以按照 (3.9) 确定稀疏模式（并使用注 3.6 中讨论的超节点对其进行聚合），然后像之前一样使用 KL 最小化 (3.5)(3.6)(3.7) 计算 ϵ-近似因子。算法1概述了一般的算法流程。

算法1 $K(\phi,\phi)^{-1}$ 的稀疏 Cholesky 分解

1：输入：测量 ϕ、核函数 K、稀疏度参数 ρ、超节点参数 λ2：输出：U^ρ, P_{perm} 满足 . $K(\phi,\phi)^{-1} \approx P^T \text{perm} U^\rho U^{\rho T} P_{\text{perm}}$3：重排序与稀疏模式：我们首先使用最大最小排序对狄拉克测量进行排序。接着，以任意顺序对导数测量进行排序。此过程得到一个记为 P_{perm}, ˜ ˜的置换矩阵，使得 $P_{\text{perm}}\phi = \phi$, 且对 ϕ 中的每项测量，长度尺度为 l。按照该排序，我们根据所选的 ρ 和 λ 构造聚合稀疏模式 $S_{P,l,\rho,\lambda}$。˜ ˜4：KL 最小化：通过 (3.7) 求解带有 $\Theta = K(\phi, \phi)$ 的 (3.6)，得到 U^ρ5：返回 U^ρ, P_{perm}

其复杂度与注 3.8 中的同阶；复杂度估计中的隐藏常数取决于 J，即导数测量的最高阶数。我们将在第 4 节给出近似精度的理论分析，该分析表明，$\rho = O(\log(N/\epsilon))$ 足以使一大类核矩阵达到 ϵ-近似。

4. Theoretical study

本节将对第 3.2 小节中针对 $K(\phi, \phi)^{-1}$ 的稀疏 Cholesky 因子分解算法进行理论研究。

4.1. 严格结果的设定。 我们介绍核函数、物理点和测量的设定，并将据此对该算法进行严格分析。

核函数。 我们首先描述区域和函数空间。设 Ω 是 $\mathbb{R}^d$ 中具有 Lipschitz 边界的有界凸区域。不失一般性，假设 $\mathrm{diam}(\Omega) \le 1$；否则，可以对该区域进行缩放。设 $H_0^s(\Omega)$ 为 Ω 中具有 $s \in \mathbb{N}$ 阶 L^2 导数且具有零迹的 Sobolev 空间。设算子

$$\mathcal{L} : H_0^s(\Omega) \to H^{-s}(\Omega)$$

满足假设 1。该假设与 [56] 第 2.2 节中的假设相同。

假设1。 以下条件对 $\mathcal{L} : H_0^s(\Omega) \to H^{-s}(\Omega)$ 成立：

(i) 对称性：$[u, \mathcal{L}v] = [v, \mathcal{L}u]$；(ii) 正定性：$[u, \mathcal{L}u] > 0$ 对于 $\|u\|_{H_0^s(\Omega)} > 0$；(iii) 有界性：

$$\|\mathcal{L}\| := \sup_u \frac{\|\mathcal{L}u\|_{H^{-s}(\Omega)}}{\|u\|_{H_0^s(\Omega)}} < \infty, \quad \|\mathcal{L}^{-1}\| := \sup_u \frac{\|\mathcal{L}^{-1}u\|_{H_0^s(\Omega)}}{\|u\|_{H^{-s}(\Omega)}} < \infty ;$$

(iv) 局部性：如果 u 和 v 的支集不相交，则 $[u, \mathcal{L}v] = 0$。

我们假设 $s > d/2$，因此 Sobolev 嵌入定理表明 $H_0^s(\Omega) \subset C(\Omega)$，从而对于 $\mathbf{x} \in \Omega$，有 $\delta_{\mathbf{x}} \in H^{-s}(\Omega)$。我们将核函数视为格林函数 $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := [\delta_{\mathbf{x}}, \mathcal{L}^{-1}\delta_{\mathbf{y}}]$。$\mathcal{L}$ 的一个例子可以是 $(-\Delta)^s$；我们使用零狄利克雷边界条件来定义 $\mathcal{L}^{-1}$，由此得到类似 Mat´ern 的核。

物理点。 考虑一个散布点集 $\{\mathbf{x}_i\}_{i \in I} \subset \Omega$，其中 $I = \{1, 2, ..., M\}$如第 3.1 小节所述；假设这些点的齐次性参数为正：

$$\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i \in I}; \partial\Omega) = \frac{\min_{\mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j \in I} \mathrm{dist}(\mathbf{x}_i, \{\mathbf{x}_j\} \cup \partial\Omega)}{\max_{\mathbf{x} \in \Omega} \mathrm{dist}(\mathbf{x}, \{\mathbf{x}_i\}_{i \in I} \cup \partial\Omega)} > 0 .$$

该条件确保这些点均匀分散。由于我们考虑齐次狄利克雷边界条件，且边界上不会有点，因此这里设 $A = \partial\Omega$。我们理论中的精度取决于 $\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i \in I}; \partial\Omega)$。

测量。设置与第 3.2.2 小节相同。我们假设 ϕ 包含所有离散点处的狄拉克测量，并且还包含其中一些点处最高至 $J \in \mathbb{N}$阶的导数型测量。我们要求 $J < s - d/2$，以便 Sobolev 嵌入定理能够保证这些导数测量定义良好。

为简化分析，我们假设所有测量均为 $\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma$ 类型，其多重指标为 $\gamma = (\gamma_1, ..., \gamma_d) \in \mathbb{N}^d$，且 $|\gamma| := \sum_{k=1}^d \gamma_k \leq J$；此处 $D^\gamma = D^{\gamma_1}{}_{\mathbf{x}^{(1)}} \cdots D^{\gamma_d}{}_{\mathbf{x}^{(d)}}$；参见注释 2.1。注意，当 $|\gamma| = 0$ 时，$\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma$ 对应于狄拉克测量。测量总数记为 N。

请注意，上述假设不适用于非线性椭圆偏微分方程示例中采用拉普拉斯测量的情形。排除这种情形纯粹是为了便于证明，因为这要求测量之间线性无关。不过，只要确保测量之间线性无关，类似的证明也可应用于拉普拉斯测量；参见注 D.1。

4.2. 理论。 在第 4.1 小节的设定下，我们考虑第 3.2.2 小节所述的排序 $P : \{1, 2, ..., N\} \to \{1, 2, ..., M\}$。回顾一下，对于此 P，我们首先根据以 $\partial\Omega$ 为条件的最大最小排序对狄拉克测量进行排序（因为不存在边界点）；然后，按照任意顺序排列导数测量。长度尺度参数定义如下

$$l_i = \begin{cases} \operatorname{dist}(\mathbf{x}_{P(i)}, \{\mathbf{x}_{P(1)}, ..., \mathbf{x}_{P(i-1)}\} \cup \partial\Omega), & \text{if } i \leq M, \\ l_M, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

我们记为 $\Theta = K(\tilde{\phi}, \tilde{\phi}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$，它是将 ϕ 中的~测量重新排序为 $\phi = (\phi_{P(1)} \cdots, \phi_{P(N)})$ 后得到的核矩阵。

定理 4.1。 *在第 4.1 小节的设定和上述给定的排序 P 下，我们考虑上三角 Cholesky 分解 $\Theta^{-1} = U^\star U^{\star T}$。那么，对于 $1 \leq i \leq j \leq N$，有*

$$\left| \frac{U^\star_{ij}}{U^\star_{jj}} \right| \leq C l_j^{-2s} \exp\left(-\frac{\operatorname{dist}(\mathbf{x}_{P(i)}, \mathbf{x}_{P(j)})}{C l_j} \right) \quad \text{and} \quad |U^\star_{jj}| \leq C l_M^{-s+d/2},$$

其中 C 是一个依赖于 Ω $\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i \in I}; \partial\Omega)$ $d, s, J, \|\mathcal{L}\|, \|\mathcal{L}^{-1}\|$ 的通用常数。

定理 4.1 的证明见附录D.1。该证明依赖于高斯过程回归、线性代数和数值均匀化之间的相互作用。具体而言，我们使用 (3.2) 将比值 $U^\star_{ij}/U^\star_{jj}$表示为高斯过程的归一化条件协方差。我们的技术创新是将这一归一化项与高斯过程的条件期望联系起来，从而得到恒等式

$$\left| \frac{U^\star_{ij}}{U^\star_{jj}} \right| = \left| \frac{\operatorname{Cov}[Y_i, Y_j | Y_{1:j-1\setminus i}]}{\operatorname{Var}[Y_i | Y_{1:j-1\setminus i}]} \right| = \left| \mathbb{E}[Y_j | Y_i = 1, Y_{1:j-1\setminus i} = 0] \right|,$$

其中 $Y \sim \mathcal{N}(0, \Theta)$。这种条件期望与数值均匀化文献 [55, 56] 中的算子值小波，即*Gamblets*，直接相关。我们可以应用偏微分方程工具来证明 Gamblets 的衰减结果。值得注意的是，与仅针对狄拉克测量的情形中基于指数衰减矩阵代数的冗长证明相比，条件期望这一联系简化了对一般

测量，相比于基于 [69] 中指数衰减矩阵代数、仅适用于狄拉克测量的冗长证明。

在我们的设定中，为了证明 Gamblets 的指数衰减（这是本文的技术贡献之一），我们需要关于导数测量的额外解析结果。最后，对于 $|U^\star_{jj}|$，我们通过界定 Θ 的最小和最大特征值来得到该估计。详情见附录D.1 和 E.1。

根据定理 4.1，当 $(i,\ j)$ 位于稀疏集$S_{P,\ l,\ \rho}$之外时，$|U^\star_{ij}|$ 呈指数级小。由此可证明，当$\rho = O(\log(N/\epsilon))$时，稀疏 Cholesky 分解算法会得到精度有保证的稀疏因子。详情见定理 4.2。

定理 4.2。在定理 *4.1* 的设定下，假设 U^ρ 是通过 *KL* 最小化(3.6) 并使用稀疏度参数 $\rho \in \mathbb{R}^+$ 得到的。那么，存在一个依赖于$\Omega\ \delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I};\ \partial\Omega)\ d, s, J, \|\mathcal{L}\|,$ $\|\mathcal{L}^{-1}\|$ 的常数，使得若$\rho \geq C\log(N/\epsilon)$，则有

$$\mathrm{KL}\left(\mathcal{N}(0,\Theta)\parallel\mathcal{N}(0,(U^\rho U^{\rho T})^{-1})\right)+\|\Theta^{-1}-U^\rho U^{\rho T}\|_{\mathrm{Fro}}+\|\Theta-(U^\rho U^{\rho T})^{-1}\|_{\mathrm{Fro}}\leq\epsilon\,,$$

其中 $\epsilon < 1$ 和 $\|\cdot\|_{\mathrm{Fro}}$ 是弗罗贝尼乌斯范数。

证明见附录 D.2。该证明基于 U^ρ的 KL 最优性，以及 [68]的引理 B.8 中给出的 KL 散度与弗罗贝尼乌斯范数之间的比较不等式。

注 4.3。 采用注 3.6 中的超节点思想后，定理 4.2 仍然成立，因为这只会扩大稀疏模式。
$\Diamond$

5. Second order optimization methods

使用第 3.2 小节中的算法，我们可以得到 $K(\phi,\ \phi)^{-1}$的稀疏 Cholesky 分解，从而能够快速计算式 (2.3)（以及更一般的式 (2.5)）中的损失函数及其梯度。因此，可以高效地实现一阶方法。

在 [8], 中，使用二阶高斯-牛顿算法求解该优化问题，并观察到其收敛速度非常快，通常只需 3 到 8 次迭代。本小节将讨论如何基于稀疏 Cholesky 的思想，使这类二阶方法具备可扩展性。与之前一样，我们先以非线性椭圆偏微分方程示例 (2.2) 来说明我们的思路，然后介绍一般算法。

5.1. **高斯-牛顿迭代**。 对于非线性椭圆偏微分方程示例，我们需要求解的优化问题是 (2.3)。利用方程 $z_m^{(2)} = \tau(z_m^{(1)}) - f(\mathbf{x}_m)$ 和边界数据，我们可以消去$\mathbf{z}^{(2)}$，并将 (2.3) 重写为无约束问题：

$$\underset{\mathbf{z}_\Omega^{(1)}\in\mathbb{R}^{M_\Omega}}{\text{minimize}}\ \left(\mathbf{z}_\Omega^{(1)}, g(\mathbf{x}_{\partial\Omega}), f(\mathbf{x}_\Omega)-\tau(\mathbf{z}_\Omega^{(1)})\right)K(\phi,\phi)^{-1}\begin{pmatrix}\mathbf{z}_\Omega^{(1)}\\ g(\mathbf{x}_{\partial\Omega})\\ f(\mathbf{x}_\Omega)-\tau(\mathbf{z}_\Omega^{(1)})\end{pmatrix},\tag{5.1}$$

其中，$\mathbf{z}^{(1)}\Omega$ 表示与内部点 $\mathbf{x}_\Omega$ 相关的 $i = 1, \ldots, M_\Omega$ 的 M_Ω 维向量，而 $f(\mathbf{x}_\Omega)$ g $(\mathbf{x}_{\partial\Omega})$ 和 $\tau(\mathbf{z}^{(1)}\Omega)$ 是将相应函数应用于其输入向量的各元素后得到的向量。明确地说，

(5.1) 中的表达式表示一个加权最小二乘优化问题；为简洁起见，省略了乘以矩阵的行向量中的转置符号。在 [8], ，有人提出了高斯-牛顿方法来求解该问题。该方法在当前迭代点对非线性函数 τ 进行线性化，并求解由此得到的二次优化问题，以获得下一次迭代值。

本文以一种略有不同但等价、且更便于阐述的方式介绍高斯-牛顿算法。为此，我们考虑公式（2.5）中的一般形式。在非线性椭圆偏微分方程示例中，我们有$\boldsymbol{\phi} = (\delta_{\mathbf{x}_\Omega}, \delta_{\mathbf{x}_{\partial\Omega}}, \delta_{\mathbf{x}_\Omega} \circ \Delta)$，其中 $\delta_{\mathbf{x}_\Omega}$ 表示狄拉克测量的集合（$\delta_{\mathbf{x}_1}$，...，$\delta_{\mathbf{x}_{M_\Omega}}$）； $\delta_{\mathbf{x}_{\partial\Omega}}$和 $\delta_{\mathbf{x}_\Omega} \circ \Delta$ 的定义也类似。相应地，我们还写作 $\mathbf{z} = (\mathbf{z}_\Omega, \mathbf{z}_{\partial\Omega}, \mathbf{z}_\Omega^\Delta) \in \mathbb{R}^N$，其中 $N = M + M_\Omega$。于是 $F(\mathbf{z}) = (-\mathbf{z}_\Omega^\Delta + \tau(\mathbf{z}_\Omega), \mathbf{z}_{\partial\Omega}) \in \mathbb{R}^M$，且 $\mathbf{y} = (f(\mathbf{x}_\Omega)\ g(\mathbf{x}_{\partial\Omega})) \in \mathbb{R}^M$，使得 $F(\mathbf{z}) = \mathbf{y}$。

求解 (5.1) 的高斯-牛顿迭代等价于以下用于求解 (2.5) 的序列二次规划方法: 对于 $k \in \mathbb{N}$，假设已得到 $\mathbf{z}^k$，则 $\mathbf{z}^{k+1}$ 由下式给出

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^{k+1} = \underset{\mathbf{z}\in\mathbb{R}^N}{\arg\min} \quad & \mathbf{z}^T K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})^{-1}\mathbf{z} \\ \text{s.t.} \quad & F(\mathbf{z}^k) + DF(\mathbf{z}^k)(\mathbf{z} - \mathbf{z}^k) = \mathbf{y}\,, \end{aligned} \tag{5.2}$$

其中，$DF(\mathbf{z}^k) \in \mathbb{R}^{M\times N}$ 是 F 在 $\mathbf{z}^k$处的雅可比矩阵。上述问题是带线性约束的二次优化问题。利用拉格朗日乘子，可得解的显式公式：$\mathbf{z}^{k+1} = K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})(DF(\mathbf{z}^k))^T\gamma$，其中 $\gamma \in \mathbb{R}^M$满足线性方程组

$$\left(DF(\mathbf{z}^k)K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})(DF(\mathbf{z}^k))^T\right)\gamma = \mathbf{y} - F(\mathbf{z}^k) + DF(\mathbf{z}^k)\mathbf{z}^k\,. \tag{5.3}$$

现在，我们引入测量的约化 集合 $\boldsymbol{\phi}^k = DF(\mathbf{z}^k)\boldsymbol{\phi}$。对于非线性椭圆偏微分方程，我们有

$$\boldsymbol{\phi}^k = (-\delta_{\mathbf{x}_\Omega} \circ \Delta + \tau(\mathbf{z}_\Omega^k) \cdot \delta_{\mathbf{x}_\Omega}, \delta_{\mathbf{x}_{\partial\Omega}})$$

其中，$\tau(\mathbf{z}_\Omega^k) \cdot \delta_{\mathbf{x}_\Omega} := (\tau(\mathbf{z}_1^k)\delta_{\mathbf{x}_1}, \ldots, \tau(\mathbf{z}_{M_\Omega}^k)\delta_{\mathbf{x}_{M_\Omega}})$。因此，我们可以等价地将解写为 $\mathbf{z}^{k+1} = K(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\phi})(DF(\mathbf{z}^k))^T\gamma$，其中 γ满足

$$K(\boldsymbol{\phi}^k,\boldsymbol{\phi}^k)\gamma = \mathbf{y} - F(\mathbf{z}^k) + DF(\mathbf{z}^k)\mathbf{z}^k\,. \tag{5.4}$$

请注意，$K(\boldsymbol{\phi}^k, \boldsymbol{\phi}^k) \in \mathbb{R}^{M\times M}$，与 $K(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\phi}) \in \mathbb{R}^{N\times N}$ 相比。维度有所降低。计算瓶颈在于涉及约化核矩阵 $K(\boldsymbol{\phi}^k, \boldsymbol{\phi}^k)$ 的线性方程组。

5.2. **约化核矩阵的稀疏 Cholesky 分解**。由于 $K(\boldsymbol{\phi}^k, \boldsymbol{\phi}^k)$ 也是由导数型测量构成的核矩阵，我们希望利用稀疏 Cholesky 分解的思路来近似其逆矩阵。首先仍需解决的问题是如何对这些测量进行排序。

首先，我们考察约化核矩阵的结构。注意，由于 $F(\mathbf{z}) = \mathbf{y}$ 在配置点处编码了偏微分方程，因此（5.2）中的F 线性化也等价于先对当前解处的偏微分方程进行线性化，再应用核方法。因此，$\boldsymbol{\phi}^k$ 通常包含 M_Ω 个对应于内部点处线性化偏微分方程的内部测量，以及 $M - M_\Omega$ 个对应于采样边界条件的边界测量。对于狄利克雷边界条件问题（本文主要关注此类问题），边界测量属于狄拉克型。值得注意的是，在

与 $K(\phi,\ \phi)$相比，现在我们不再在每个内部点处都有狄拉克测量。

我们首先使用最大最小排序对边界狄拉克测量进行排序，在 $\partial\Omega$上进行。然后，在给定 $\partial\Omega$ 的条件下，使用 Ω 中的最大最小排序对内部导数型测量进行排序。我们通过数值实验研究这种排序下的屏蔽效应。设 Θ 是约化核矩阵 $K(\phi^k,\phi^k)$ 重排序后的版本，那么类似于图 1 和图 2，我们展示相应 Cholesky 因子的幅值，即对于 $i \le j$绘制 $|U^\star_{ij}|$；其中，j 的选取对应于一些边界点和内部点。结果见图 5。

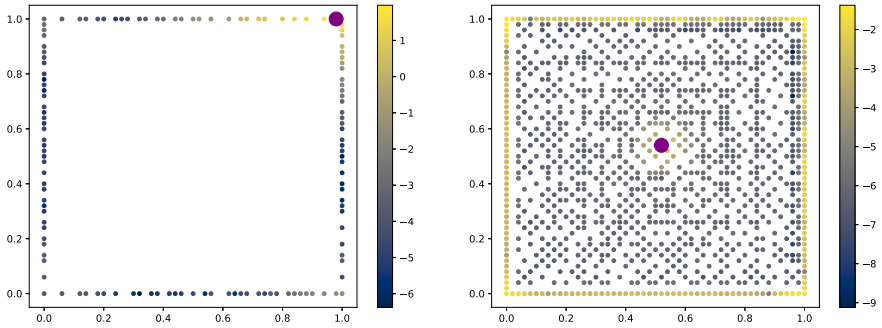

FIGURE 5. 约化核矩阵的屏蔽效应示例。我们选择 Mat´ern 核，其中 $\nu = 5/2$；长度尺度参数为 0.3。数据点在 $[0,1]^2$上均匀分布，网格大小为 $h = 0.02$。在左图中，我们展示一个边界点，所有排序在其之前的点均以一种颜色标记，其颜色强度随条目值 $|U^\star_{ij}|$缩放。右图以相同方式绘制，但对应的是一个内部测量。

从左图可以看出，边界狄拉克测量呈现出预期的屏蔽效应。然而，从右图可以看出，内部导数型测量与边界点之间仍存在很强的条件相关性。这意味着与边界点之间的相关性并未得到充分屏蔽。这也表明，内部狄拉克测量的存在是前文 $K(\tilde{\phi},\ \tilde{\phi})^{-1}$中稀疏 Cholesky 因子的关键。

图 5 右侧展示了一个负面结果：我们不能指望 Θ^{-1} 的 Cholesky 因子像之前那样稀疏。不过，从算法角度来说，我们仍然可以对矩阵应用稀疏 Cholesky 分解。我们通过数值实验检验这种分解的精度。在图 4 右侧，我们展示了所得分解的 KL 误差随稀疏度参数ρ的变化。尽管屏蔽效应并不完美，正如上文所述，但我们仍观察到，随着 ρ 增大，KL 误差持续衰减。

此外，尽管我们无法从理论上保证该分解仍像之前一样精确，但可以将其用作预条件子，以求解涉及$K(\phi^k,\ \phi^k)$的线性方程组。实践中，我们发现这一方法效果很好，预条件共轭梯度（预条件共轭梯度法）迭代的步数几乎保持不变，便能得到方程（5.4）的精确解。作为示例，图 6 展示了采用这一预条件方法时预条件共轭梯度法的迭代历程。停止条件是

预条件共轭梯度法的相对容差小于 $2^{-26} \approx 10^{-8}$，这是 Julia 中的默认条件。从图中可以看出，预条件共轭梯度法通常在 10–40 步内收敛，而且这种快速收敛不受点数影响。当 ρ较大时，分解更加精确，预条件子效果更好，因此所需的预条件共轭梯度步数更少。在所有情形下，达到停止条件所需的预条件共轭梯度步数大致相当，且并不多。

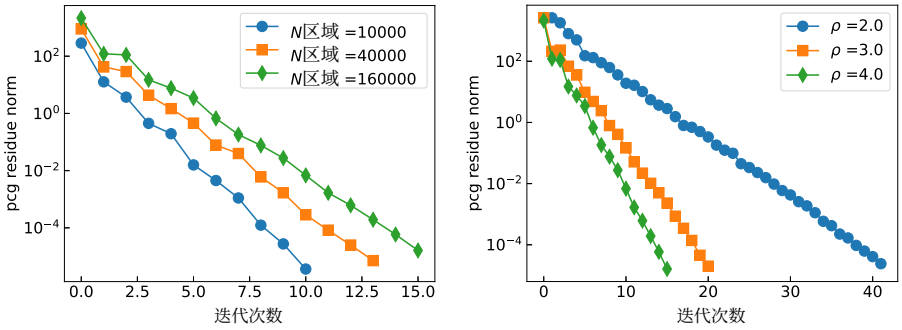

FIGURE 6. 预条件共轭梯度迭代的收敛历程示例。我们选择 Mat´ern 核，其中 $\nu = 5/2$；长度尺度参数为 0.3。左图中，我们选择数据点，使其在 $[0,1]^2$ 上均匀分布，网格尺寸各不相同；$\rho = 4.0$。我们展示每次预条件共轭梯度迭代中各迭代点的方程残差范数。右图中，我们选择数据点，使其在 $[0,1]^2$ 上均匀分布，网格大小为 0.0025，从而 $N_{\text{domain}} = 160000$。我们绘制了 $\rho = 2.0, 3.0, 4.0$ 对应的预条件共轭梯度迭代历程。

值得注意的是，由于 $K(\phi^k, \phi^k) = DF(\mathbf{z}^k)K(\phi,\phi)(DF(\mathbf{z}^k))^T$，并且我们对 $K(\phi,\phi)^{-1}$ 有可证明精确的稀疏 Cholesky 分解，因此每次预条件共轭梯度迭代中，对 $K(\phi^k, \phi^k)$ 进行矩阵向量乘法的效率很高。

5.3. 一般情形。 上一小节的描述可直接应用于一般非线性偏微分方程，对应于 (2.5) 中的一般 ϕ 和 F。我们先对边界采用最大最小排序，再对内部采用条件最大最小排序。我们将该排序记为 $Q\colon I \to I$。长度尺度定义为

$$l_i = \operatorname{dist}(\mathbf{x}_{Q(i)}, \{\mathbf{x}_{Q(1)}, \ldots, \mathbf{x}_{Q(i-1)}\} \cup \mathrm{A}), \tag{5.5}$$

对于边界测量，$\mathrm{A} = \emptyset$；对于内部测量，$\mathrm{A} = \partial\Omega$。利用该排序和长度尺度，我们通过 (3.4) 构造稀疏模式（并利用超节点的思想对其进行聚合），然后在第 3.1 小节中应用 KL 最小化，得到 $K(\phi^k, \phi^k)^{-1}$ 的近似因子。算法 2 概述了总体算法流程。现在，我们用 ρ_{r} 表示约化核矩阵的稀疏度参数。

现在，我们将所有内容整合起来，在算法 3 中概述使用二阶高斯-牛顿方法求解偏微分方程的总体算法流程。

对于参数的选择，我们通常将 t 设为 2 到 10 之间。将 $\rho = O$ 设置为 $(\log(N/\epsilon))$ 足以获得对 $K(\phi,\phi)^{-1}$ 的 ϵ 精度近似。我们

算法 2 对 $K(\boldsymbol{\phi}^k, \boldsymbol{\phi}^k)^{-1}$ 进行稀疏乔列斯基分解

1：输入：测量 $\boldsymbol{\phi}^k$、核函数 K、稀疏度参数 ρ_{r}、超节点参数 λ2：输出： $U^{\rho_{\mathrm{r}}}{}_{\mathbf{r}}$ Q_{perm}3：重新排序和稀疏模式：我们首先使用最大最小排序对边界测量进行排序。接下来，我们使用以 $\partial\Omega$ 为条件的最大最小排序对内部测量进行排序。此过程生成一个记为 Q_{perm} 的置换矩阵，使得 $Q_{\mathrm{perm}}\boldsymbol{\phi}^k = \tilde{\boldsymbol{\phi}}^k$，并为 $\tilde{\boldsymbol{\phi}}^k$ 中的每个测量生成长度尺度 l 。在该排序下，我们根据所选的 ρ_{r} 和 λ 值构造聚合稀疏模式 S_Q、l、ρ_{r}、λ 。4：KL 最小化：通过 (3.7) 求解带有 $\Theta = K(\tilde{\boldsymbol{\phi}}^k, \tilde{\boldsymbol{\phi}}^k)$ 的 (3.6)，以获得 $U^{\rho_{\mathrm{r}}}{}_{\mathbf{r}}$ 5：返回 $U^{\rho_{\mathrm{r}}}{}_{\mathbf{r}}$ Q_{perm}

算法 3利用稀疏乔列斯基分解加速高斯-牛顿法，以求解 (2.5)

1：输入：测量 $\boldsymbol{\phi}$，数据泛函 F，数据向量 y，核函数 K，高斯-牛顿步数 t，稀疏度参数 ρ, ρ_{r}，超节点参数 λ2：输出：解 $\mathbf{z}^t$3：使用算法1对 $K(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\phi})^{-1} \approx P^T\mathbf{perm}U^{\rho}U^{\rho T}P_{\mathrm{perm}}$ 进行分解 4：设置 $k = 0, \mathbf{z}^k = \mathbf{0}$ 或使用其他用户指定的初始猜测 5：当 $k < t$ 时，执行 6：构造约化测量 $\boldsymbol{\phi}^k = DF(\mathbf{z}^k)\boldsymbol{\phi}$7：使用算法 2 对 $K(\boldsymbol{\phi}^k, \boldsymbol{\phi}^k)^{-1}$ 进行分解，以得到 $Q^T_{\mathrm{perm}}U^{\rho_{\mathrm{r}}}\mathbf{r}$ $U^{\rho_{\mathrm{r}}}\mathbf{r}$ $^TQ_{\mathrm{perm}}$8：使用预条件共轭梯度法和预条件子 $Q^T_{\mathrm{perm}}U^{\rho_{\mathrm{r}}}\mathbf{r}\,U^{\rho_{\mathrm{r}}}\mathbf{r}$ $^TQ_{\mathrm{perm}}$ 求解 (5.4) 9：$\mathbf{z}^{k+1} = (P^T\mathbf{perm}U^{\rho}U^{\rho T}P_{\mathrm{perm}})\backslash((DF(\mathbf{z}^k))^T\gamma)$ 10：$k = k + 1$11：结束循环 12：返回 $\mathbf{z}^t$

对于应用于约化核矩阵 $K(\boldsymbol{\phi}^k, \boldsymbol{\phi}^k)^{-1}$ 的分解算法，我们尚无理论保证。不过，我们的经验表明，设置$\rho_{\mathrm{r}} = \rho$ 或设置为常数（如 $\rho_{\mathrm{r}} = 3$ ）在实践中效果良好。我们注意到，较大的 ρ_{r}会增加分解时间，同时减少求解线性方程组所需的预条件共轭梯度步数，如图 6 右侧所示。总体而言，这里存在权衡。

算法 3 求解 (5.2) 的总体复杂度为时间 $O(N\log^2(N)\rho^d + N\rho^{2d} + Mt\rho_{\mathrm{r}}^{2d} + T_{\mathrm{pCG}})$、空间 $O(N\rho^d + M\rho_{\mathrm{r}}^d)$，其中 $O(N\log^2(N)\rho^d)$ 是生成排序和稀疏模式所需的时间， $O(N\rho^{2d})$ 是分解所需的时间， $O(Mt\rho_{\mathrm{r}}^{2d})$ 是所有高斯-牛顿迭代中的分解所需的时间， T_{pCG}是预条件共轭梯度迭代所需的时间。

根据经验观察，我们发现 T_{pCG} 相对于 $N\rho^d$ 几乎呈线性增长。这是因为只需数量近乎恒定的 pCG 迭代即可获得准确解，而每次 pCG 迭代最多耗时$O(N\rho^d)$，如第5.2小节末尾提到的矩阵-向量乘法所述。此外，值得注意的是，生成排序和稀疏模式所需的时间（$O(N\log^2(N)\rho^d)$）在

实际操作中，与 KL 最小化所需的时间相比微不足道。此外，排序和稀疏模式可以预先计算一次，并在多次运行中重复使用。

6. Numerical experiments

在本节中，我们使用算法 3 求解非线性偏微分方程。数值实验在配备 2.4 GHz 四核 Intel Core i5 处理器的 MacBook Pro 个人电脑上进行。在所有实验中，物理数据点均匀分布在网格上；我们会在每个示例中说明网格的大小。我们始终将约化核矩阵的稀疏度参数 $\rho_{\mathrm{r}} = \rho$ 设为原始矩阵的稀疏度参数。所有示例均采用超节点思想，并设置参数 $\lambda = 1.5$。

我们的理论保证，一旦狄拉克测量按照最大最小排序排在前面，导数测量就可以任意排序。实际操作中，为方便起见，我们按照导数阶数从低到高排列；对于同阶导数，则按照对应测量的位置，采用与狄拉克测量相同的最大最小排序方式排列。

我们的代码位于 https://github.com/yifanc96/PDEs-GP-KoleskySolver。

6.1. 非线性椭圆型偏微分方程。我们的第一个示例是非线性椭圆方程

$$\begin{cases} -\Delta u + \tau(u) = f & \text{in } \Omega\,, \\ u = g & \text{on } \partial\Omega\,, \end{cases} \tag{6.1}$$

其中 $\tau(u) = u^3$。这里 $\Omega = [0,1]^2$。我们设定

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{600} \frac{1}{k^6} \sin(k\pi x_1) \sin(k\pi x_2)$$

将其作为真实解，并用它生成边界数据和右端项数据。我们将高斯-牛顿迭代次数设为 3。迭代的初始猜测为零函数。核函数的长度尺度设为 0。3。

我们首先研究关于 ρ 的解误差和 CPU 时间。我们选择内部点数量为 $N_{\mathrm{domain}} = 40000$；等价地，网格大小为 $h = 0.005$。在图 7 左侧，我们观察到，较大的 ρ 会带来较小的 L^2 解误差。对于 $\nu = 5/2, 7/2$ 的 Mat´ern 核，我们观察到，当 $\rho = 2$ 或 4 时，这种精度提升会趋于饱和；而当 $\nu = 9/2$ 时，精度会持续提升，直到 $\rho = 10$。较大的 ν 能达到如此高的精度，是因为解 u 相当光滑。使用更光滑的核可以提高近似精度。另一方面，通常需要更大的 ρ，才能让更光滑的核达到相同的近似精度，正如图 3 左侧所示。

在图 7 右侧，我们展示了针对不同核函数和 ρ计算解所需的 CPU 时间。较大的 ρ 通常会导致更长的 CPU 时间。但也有一些例外：对于 Mat´ern 核函数，当 $\nu = 7/2,\ 9/2$时，$\rho = 3$ 的 CPU 时间比 $\rho = 2$更短。原因同样是，这些较平滑的核函数通常需要更大的 ρ 才能获得准确的近似。当ρ 非常小时，尽管稀疏 Cholesky 分解速度很快，但由于预条件矩阵对该矩阵的近似效果不佳，pCG 迭代可能耗时较长。

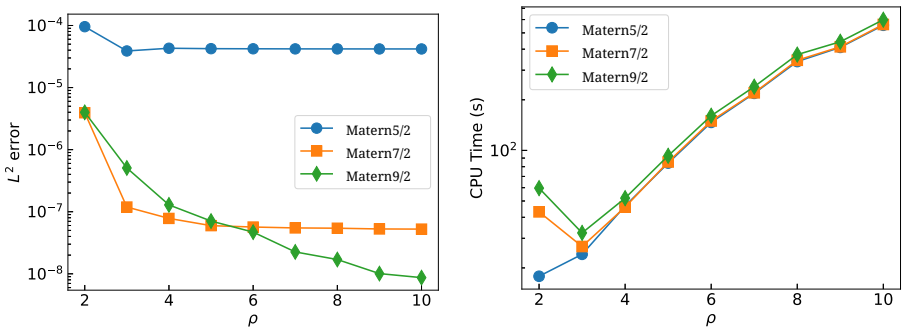

FIGURE 7. 非线性椭圆偏微分方程示例。左图显示解的 L^2 误差，右图显示 CPU 时间。两幅图均针对 ρ。我们设定 $N_{\text{domain}} = 40000$。

接下来，我们研究与物理点数量相关的 L^2 误差和 CPU 时间。我们固定 $\rho = 4.0$。在图 8 左侧可以看到，随着 N_{domain} 增大，精度有所提升。对于较平滑的 Mat´ern 核函数，当 $\nu = 7/2,\ 9/2$时，精度会达到 10^{-7}的下限。这是因为高斯-牛顿步数有限，且 ρ也有限。图 8 右侧展示了时间复杂度与点数近似呈线性关系。

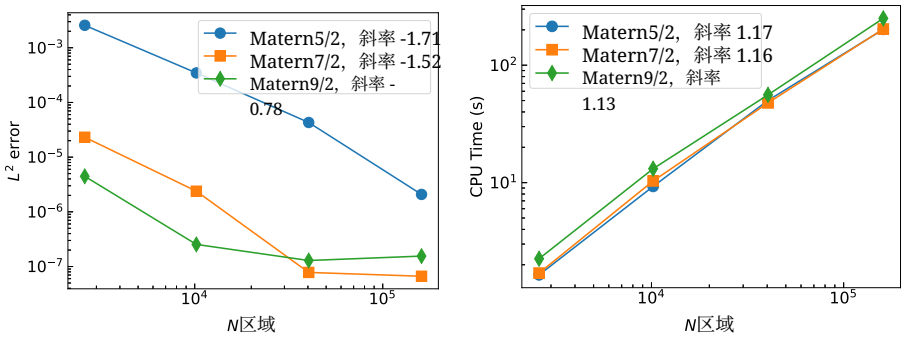

FIGURE 8. 非线性椭圆偏微分方程示例。左图显示解的 L^2 误差，右图显示 CPU 时间。两幅图均针对区域中物理点的数量。我们设定 $\rho = 4.0$。

6.2. **Burgers' 方程。** 第二个示例讨论随时间变化的 Burgers 方程：

$$\begin{aligned} \partial_t u + u\partial_x u - 0.001\partial_x^2 u = 0, \quad \forall (x,t) \in (-1,1) \times (0,1]\,, \\ u(x,0) = -\sin(\pi x)\,, \\ u(-1,t) = u(1,t) = 0\,. \end{aligned} \tag{6.2}$$

与 [8], 中使用时空高斯过程不同，我们首先对方程进行时间离散化，然后使用空间高斯过程求解由此得到的空间偏微分方程。这降低了

系统的维数，效率也更高。更具体地说，我们采用时间步长为 Δt 的Crank–Nicolson格式，得到

$$\frac{\hat{u}(x,t_{n+1})-\hat{u}(x,t_n)}{\Delta t}+\frac{1}{2}\left(\hat{u}(x,t_{n+1})\partial_x\hat{u}(x,t_{n+1})+\hat{u}(x,t_n)\partial_x\hat{u}(x,t_n)\right) = \frac{0.001}{2}\left(\partial_x^2\hat{u}(x,t_{n+1})+\partial_x^2\hat{u}(x,t_n)\right), \tag{6.3}$$

其中，$\hat{u}(t_n,x)$ 是真实解 $u(t_n,x)$ 的近似，且 $t_n = n\Delta t$。当已知 $\hat{u}(\cdot,t_n)$ 时，(6.3) 是关于函数 $\hat{u}(\cdot,t_{n+1})$ 的空间偏微分方程。我们可以从 $n = 0$开始迭代求解 (6.3)。我们以最后一个时间步的解作为初始猜测，进行两步高斯-牛顿迭代。

我们设定 $\Delta t = 0.02$，并计算 $t = 1$ 处的解。核函数的长度尺度设为 0.02。我们在分解算法中设定 $\rho = 4.0$。在图 9 左侧，我们展示了使用大小为 $h = 0.001$ 的网格得到的数值解，以及通过 Cole-Hopf 变换计算的真实解。可以看到，两者吻合得非常好，而且捕捉到了激波。这是因为我们使用了较小的网格大小，从而能够充分分辨激波。网格大小非常小时，我们需要处理许多大型稠密核矩阵，因此使用稀疏 Cholesky 分解算法来应对这一挑战。

在图 9 的右侧，我们展示了算法在不同 N_{domain} 下的 CPU 时间。我们清楚地观察到，时间复杂度近似呈线性增长。处理 50 个大小大于 10^4 的稠密核矩阵（因为 $1/\Delta t$ =50）时，总 CPU 时间少于 10 秒；这些矩阵按顺序处理（K 的维度为 ϕ，ϕ，约为 $3 \times N_{\text{domain}}$，因为我们有三种类型的测量）。

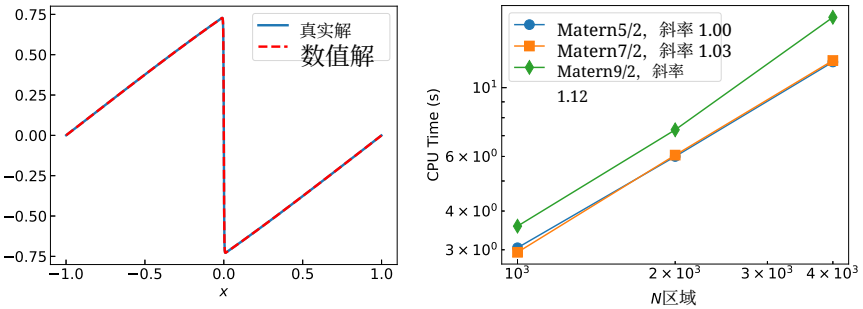

FIGURE 9. Burgers 方程示例。左图展示了 $t = 1$ 处数值解和真实解的示例。右图显示了 CPU 时间随物理点数量的变化。我们设置 $\rho = 4.0$。

我们还在下面的表 1 中展示了解的准确性。我们观察到很高的准确性：在 L^2 范数下为 $O(10^{-5})$，在 L^∞ 范数下为 $O(10^{-4})$。当我们将点数从 2000 增加到 4000 时，L^2 误差并未减小。这是因为我们使用了固定的时间步长 $\Delta t = 0.02$ 和固定的 $\rho = 4.0$。

6.3. 蒙日-安培方程。 我们的最后一个示例是二维空间中的蒙日-安培方程。

$$\det(D^2u) = f, \quad \mathbf{x} \in (0,1)^2\,. \tag{6.4}$$

N_{domain}	1000	2000	4000
L^2 误差	1.729e-4	6.111e-5	7.453e-5
L^∞ 错误	1.075e-3	2.745e-4	1.075e-4

TABLE 1. Burgers 方程示例。计算所得解在 $t = 1$ 处的 L^2 和 L^∞ 误差。我们使用 Mat´ern 核，$\nu = 7/2$。稀疏度参数 $\rho = 4.0$。

这里，我们选择 $u(\mathbf{x}) = \exp(0.5((x_1 - 0.5)^2 + (x_2 - 0,5)^2))$ 来生成边界和右端项数据。为确保解的唯一性，通常需要一些凸性假设。这里，为了检验我们的方法的广泛适用性，我们直接实现算法 3。我们采用 3 步高斯-牛顿迭代，初始猜测为 $u(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2$。我们选择 Mat´ern 核，其中 $\nu = 5/2$。核的长度尺度设为 0.3。

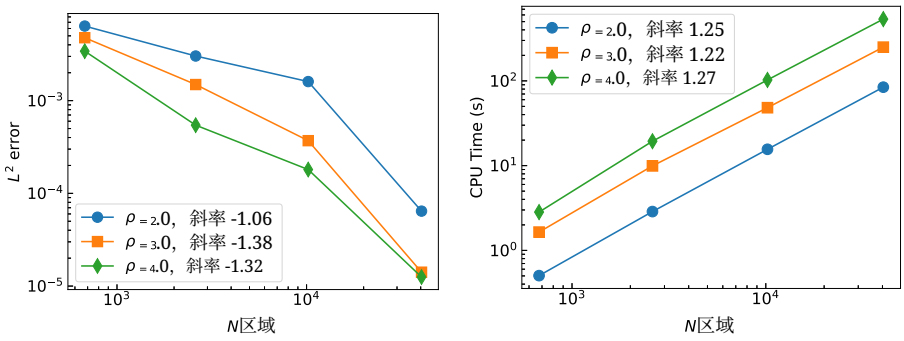

FIGURE 10. Monge-Amp`ère 方程示例。左图展示 L^2 误差，右图展示 CPU 时间。两图均以空间中的物理点数量为横轴，并且均考虑 $\rho = 2.0$，3。0，4。0。本例中我们选择 Mat´ern 核函数，并采用 $\nu = 5/2$ 。

在图 10 中，我们展示了解的 L^2 误差以及 CPU 时间随 N_{domain}的变化。我们再次观察到，时间复杂度近乎线性。然而，由于 $\det(D^2 u)$ 涉及函数的多个偏导数，我们需要相应地对核函数求导；为方便起见，我们在 Julia 中使用自动微分，这比前面数值示例中使用的手工编码导数稍慢。因此，总 CPU 时间比前面的示例更长，不过关于 N_{domain} 的扩展趋势仍然相似。

随着 N_{domain} 增大，L^2 解的误差在 $\rho = 2.0$，3。0，4。0 时减小。这表明，对于这类全非线性偏微分方程，我们的核方法是收敛的。然而，由于我们没有在解中纳入奇异性，这个例子可能并不属于最具挑战性的情形。尽管如此，这种简单方法与系统化快速求解器相结合所取得的成功，展现了其在自动化求解非线性偏微分方程及拓展应用方面的潜力。

7. Conclusions

本文研究了一种稀疏 Cholesky 分解算法，该算法能够扩展高斯过程方法的规模，以求解非线性偏微分方程。我们的算法依赖于一种新颖的排序方式，对高斯过程-偏微分方程方法中出现的狄拉克函数和导数型测量进行排序。采用这种排序后，核矩阵的逆的 Cholesky 因子变得近似稀疏，因此我们可以利用高效的 KL 最小化（等价于 Vecchia 近似）来计算稀疏因子。我们通过证明一大类核函数和导数测量对应的高斯过程条件协方差以及核矩阵的逆的 Cholesky 因子呈指数衰减，对近似精度进行了严格分析。

使用二阶 Gauss-Newton 方法求解非线性偏微分方程时，会出现一个约化核矩阵，其中缺少许多内部狄拉克测量。在这种情况下，衰减减弱，分解的精度也会下降。为弥补这一精度损失，我们使用 pCG 迭代，并将这个近似因子用作预条件子。在数值实验中，我们的算法实现了高精度，且计算时间随点数近似线性增长。这证明了高斯过程在自动化、高效且精确地求解一般偏微分方程方面具有潜力。我们预计，未来将把算法扩展到求解反问题，并将理论推广到更多核函数和测量泛函。

由于复杂度的 d 幂次关系，本文的算法最适用于低维偏微分方程问题。不过，我们指出，对于高维˜问题，如果这些点位于维数为 d的低维流形上，那么我们的算法的˜复杂度将取决于 d ，而非 d。对于测量为狄拉克函数的情形， [68] 已讨论过这一观察；本文考虑的是由偏微分方程诱导的导数测量，同样适用这一结论。对于真正的高维问题，应采用低秩近似，而不是追求本文通过稀疏 Cholesky 分解实现的更具雄心的全规模近似。潜在方法包括随机主元 Cholesky 分解 [7], ，该方法也涉及选择特定的排序以及P_{perm} （基于自适应随机排序，而非受物理因素启发的由粗到细排序），但不再进一步稀疏化这些 Cholesky 因子。值得探究这些方法之间的联系，以改进面向高维科学计算的低秩和稀疏近似。

Acknowledgements

YC 和 HO 感谢空军科学研究办公室通过 MURI 项目（奖项编号 FA9550-20-1-0358，机器学习与物理驱动建模和仿真）提供的支持。YC 还获得了美国国家科学基金会资助 DMS- 2205590 的部分支持。HO 还感谢能源部通过项目（奖项编号 DE-SC0023163，SEA-CROGS：面向地球与嵌入式系统的可扩展、高效、加速因果推理算子、图与脉冲）提供的支持。FS 感谢海军研究办公室通过项目（奖项编号 N00014-23-1-2545，解开计算）提供的支持。我们感谢 Xianjin Yang 对本文早期版本提出的宝贵意见。

References

[1] Sivaram Ambikasaran 和 Eric Darve。一种 $\mathcal{O}(n\log\ n)$ 快速直接求解器，用于部分层次半可分矩阵：及其在径向基函数插值中的应用。 *Journal of Scientific Computing* 57 477 501, 2013 , : – .[2]

Sivaram Ambikasaran、Daniel Foreman-Mackey、Leslie Greengard、David W Hogg 和 Michael O' Neil。高斯过程的快速直接方法。 *IEEE transactions on patternanalysis and machine intelligence*, 38(2):252–265, 2015。[3] Pau Batlle、Yifan Chen、Bamdad Hosseini、Houman Owhadi 和 Andrew M Stuart。用于非线性和参数化偏微分方程的核方法/高斯过程方法误差分析。 *arXiv preprint arXiv:2305.04962* 2023 , .[4]

Alain Berlinet 和 Christine Thomas-Agnan。 *Reproducing kernel Hilbert spaces in probability and statistics* 2011 。施普林

格科学与商业媒体，.[5] Gregory Beylkin、Ronald Coifman 和 Vladimir Rokhlin。快速小波变换与数值算法 I。 *Communications on pure and applied mathematics*, 44(2):141–183, 1991。[6] Kaushik Bhattacharya、Bamdad Hosseini、Nikola B Kovachki 和 Andrew M Stuart。参数化偏微分方程的模型降阶与神经网络。 *The SMAI journal of computational mathematics* 7 121 157, 2021 , : – .[7]

Yifan Chen、Ethan N Epperly、Joel A Tropp 和 Robert J Webber。随机主元 Cholesky 分解：仅需少量元素求值的核矩阵实用近似。 *arXivpreprint arXiv:2207.06503*, 2022。[8] Yifan Chen、Bamdad Hosseini、Houman Owhadi 和 Andrew M Stuart。用高斯过程求解和学习非线性偏微分方程。 *Journal of Computational Physics* 447 110668, , : .[9] 2021
Yifan Chen 和 Thomas Y Hou。通过子采样庞加莱不等式进行函数逼近。
Discrete and Continuous Dynamical Systems, 41(1):169–199, 2020。[10] Yifan Chen 和 Thomas Y Hou。多尺度椭圆偏微分方程上尺度化与通过子采样数据进行函数逼近。
Multiscale Modeling & Simulation, 20(1):188–219, 2022。[11] Yifan Chen、Houman Owhadi 和 Andrew Stuart。层次参数估计中经验贝叶斯与核流的一致性。 *Mathematics of Computation* 90 332 2527 2578, , ( ): – . 2021
[12] Jon Cockayne、Chris J Oates、Timothy John Sullivan 和 Mark Girolami。贝叶斯概率数值方法。
SIAM review, 61(4):756–789, 2019。[13] Matthieu Darcy、Boumediene Hamzi、Giulia Livieri、Houman Owhadi 和 Peyman Tavallali。使用数据自适应核进行随机微分方程的一次性学习。 *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 444:133583, 2023。[14] Arka Daw、Jie Bu、Sifan Wang、Paris Perdikaris 和 Anuj Karpatne。重新思考物理信息神经网络中采样的重要性。 *arXiv preprint arXiv:2207.02338*, 2022。[15] Filip De Roos、Alexandra Gessner 和 Philipp Hennig。利用导数进行高维高斯过程推断。载于 *International Conference on Machine Learning*，第 2535–2545 页。PMLR，2021。[16] David Eriksson、Kun Dong、Eric Lee、David Bindel 和 Andrew G Wilson。带导数的高斯过程回归的扩展。
Advances in neural information processing systems, 31, 2018。[17] Reinhard Furrer、Marc G Genton 和 Douglas Nychka。用于大型空间数据集插值的协方差截断。 *Journal of Computational and Graphical Statistics* 15 3 502 523, , ( ): – . 2006
[18] Christopher J Geoga、Mihai Anitescu 和 Michael L Stein。使用分层矩阵进行可扩展的高斯过程计算。
Journal of Computational and Graphical Statistics, 29 2 227 237, 2020 ( ): – .[19] D Gines、G Beylkin 和 J Dunn。非标准形式的 LU分解与直接多分辨率求解器。
Applied and Computational Harmonic Analysis, 5(2):156–201, 1998。[20] Tamara G Grossmann、Urszula Julia Komorowska、Jonas Latz 和 Carola-Bibiane Sch¨onlieb。物理信息神经网络能否胜过有限元方法？ *arXiv preprintarXiv:2302.04107*, 2023。[21] Ming Gu 和 Luiza Miranian。强秩揭示乔列斯基分解。 *Electronic Trans actions on Numerical Analysis* 17 76 92, 2004 , : – .

[22] Joseph Guinness。用于改进高斯过程近似的置换与分组方法。 *Technometrics*，60(4):415–429，2018。[23] Wolfgang Hackbusch。基于 H-矩阵的稀疏矩阵运算。第一部分：H-矩阵简介。 *Computing*，62(2):89–108，1999。[24] Wolfgang Hackbusch 和 Steffen B¨orm。通过自适应 H 2-矩阵进行数据稀疏近似。*Computing*，69:1–35，2002。[25] Wolfgang Hackbusch 和 Boris N Khoromskij。稀疏 H-矩阵运算，第二部分：应用于多维问题。 *Computing*，64(1):21–47，2000。[26] Jiequn Han、Arnulf Jentzen 和 Weinan E。使用深度学习求解高维偏微分方程。 *Proceedings of the National Academy of Sciences*，115(34):8505–8510，2018。[27] Moritz Hauck 和 Daniel Peterseim。椭圆型多尺度问题的超局部化。 *Mathematics of Computation* 92 341 981 1003, 2023 ，( ): – 。[28] Patrick Henning 和 Daniel Peterseim。多尺度有限元方法中的过采样。 *Multiscale Modeling & Simulation*，11(4):1149–1175，2013。[29] Thomas Y Hou 和 Pengchuan Zhang。具有粗糙系数的高阶椭圆算子的稀疏算子压缩。 *Research in the Mathematical Sciences*，4:1–49，2017。[30] Arthur Jacot、Franck Gabriel 和 Cl´ement Hongler。神经切线核：神经网络中的收敛与泛化。 *Advances in neural information processing systems*，31，2018。[31] George Em Karniadakis、Ioannis G Kevrekidis、Lu Lu、Paris Perdikaris、Sifan Wang 和 Liu Yang。物理信息机器学习。 *Nature Reviews Physics*，3(6):422–440，2021。[32] Matthias Katzfuss。大规模空间数据集的多分辨率近似。 *Journal of the American Statistical Association* 112 517 201 214, 2017 ，( ): – 。[33] Matthias Katzfuss 、 Joseph Guinness 、 Wenlong Gong 和 Daniel Zilber。高斯过程预测的 Vecchia 近似。 *Journal of Agricultural Biological and EnvironmentalStatistics*，25:383–414，2020。[34] Ralf Kornhuber、Daniel Peterseim 和 Harry Yserentant。基于子空间分解的一类变分多尺度方法的分析。 *Mathematics of Computation*，87 314 2765 2774，2018 ( ): – 。[35] Aditi Krishnapriyan、Amir Gholami、Shandian Zhe、Robert Kirby 和 Michael W Mahoney。刻画物理信息神经网络中可能的失效模式。 *Advances in Neu-ral Information Processing Systems*，34:26548–26560，2021。[36] Kenneth L. Ho 和 Lexing Ying。椭圆算子的分层插值分解：积分方程。 *Communications on Pure and Applied Mathematics* 69 7 1314 1353, , ( ): 2016 – 。[37] Jaehoon Lee 、 Yasaman Bahri 、 Roman Novak 、 Samuel S Schoenholz 、 Jeffrey Pennington 和 Jascha Sohl-Dickstein。作为高斯过程的深度神经网络。 *arXiv preprint arXiv:1711.00165*，2017。[38] Shengguo Li、Ming Gu、Cinna Julie Wu 和 Jianlin Xia。SPD 矩阵的新型高效稳健 HSS Cholesky 分解。 *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*，33 3 886( ): –904，2012。[39] Zongyi Li、Nikola Kovachki、Kamyar Azizzadenesheli、Burigede Liu、Kaushik Bhattacharya、Andrew Stuart 和 Anima Anandkumar。用于参数化偏微分方程的傅里叶神经算子。 *arXiv preprint arXiv:2010.08895*，2020。[40] Finn Lindgren、H¨avard Rue 和 J ohan Lindstr¨om。高斯场与高斯马尔可夫随机场之间的显式联系：随机偏微分方程方法。 *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)* 73 4 423 498, , ( ): 2011 – 。[41] Alexander Litvinenko 、 Ying Sun 、 Marc G Genton 和 David E Keyes。利用分层矩阵对大规模空间数据集进行似然近似。 *Computational Statistics & DataAnalysis*，137:115–132，2019。[42] Haitao Liu、Yew-Soon Ong、Xiaobo Shen 和 Jianfei Cai。当高斯过程遇上大数据：可扩展高斯过程综述。 *IEEE transactions on neural networks and learning systems*，31 11 4405 4423，2020 ( ): – 。[43] Da Long、Nicole Mrvaljevic、Shandian Zhe 和 Bamdad Hosseini。用于偏微分方程发现和算子学习的核方法。 *arXiv preprint arXiv:2210.08140*，2022。

[44] Lu Lu、Pengzhan Jin、Guofei Pang、Zhongqiang Zhang 和 George Em Karniadakis。基于算子通用逼近定理、通过 DeepONet 学习非线性算子。 *Nature machine intelligence*，3(3):218–229，2021。

[45] Tzon-Tzer Lu 和 Sheng-Hua Shiou。 2×2 *Computers & Mathe-* 分块矩阵 *matics with Applications* 43 1 2 119 129, 2002 的逆。，(-): – 。[46] Axel M 。 *Mathematics* alqvist 和 *of Computation* 83 290 2583 2603, 2014 Daniel Peterseim。椭圆型多尺度问题的局部化。，( ): – 。[47] Rui Meng 和 Xianjin Yang。用于求解非线性偏微分方程的稀疏高斯过程。 *arXiv preprint arXiv:2205.03760* 2022 ，。[48]

Victor Minden、Anil Damle、Kenneth L Ho 和 Lexing Ying。通过骨架化分解快速进行空间高斯过程最大似然估计。 *Multiscale Modeling& Simulation*，15(4):1584–1611，2017。[49] Victor Minden、Kenneth L Ho、Anil Damle 和 Lexing Ying。基于强可容许性的递归骨架化分解。 *Multiscale Modeling & Simulation*，15(2):768–796，2017。[50] Kevin P Murphy。 *Machine learning: a probabilistic perspective*。麻省理工学院出版社，2012。[51] Cameron Musco 和 Christopher Musco。Nystr ¨ *Ad-* om 方法 *vances in neural information processing systems* 30 2017 的递归采样。，，。[52] Radford M Neal。无限网络的先验。 *Bayesian learning for neural networks*，第 29–53 页，1996。[53] Nicholas H Nelsen 和 Andrew M Stuart。巴拿赫空间之间输入输出映射的随机特征模型。 *SIAM Journal on Scientific Computing*，43(5):A3212–A3243，2021。[54] Houman Owhadi。贝叶斯数值均质化。 *Multiscale Modeling & Simulation*，13 3 812( ): –828，2015。[55] Houman Owhadi。具有粗糙系数的多重网格与基于层次信息博弈的多分辨率算子分解。 *Siam Review*，59(1):99–149，2017。[56] Houman Owhadi 和 Clint Scovel。 *Operator-Adapted Wavelets ical Homogenization: From a Game Theoretic Approach to Numerical Approximation and Algorithm Design* 35 2019 *Fast Solvers and Numer* ，第 卷。 剑桥大学出版社，。[57] Houman Owhadi 和 Gene Ryan Yoo。核流：从利用数据学习核函数到深渊。 *Journal of Computational Physics*，389:22–47，2019。[58] Misha Padidar、Xinran Zhu、Leo Huang、Jacob Gardner 和 David Bindel。利用变分推断和导数信息扩展高斯过程。 *Advances in Neural Information Processing Systems*，34:6442–6453，2021。[59] Joaquin Quinonero-Candela 和 Carl Edward Rasmussen。稀疏近似高斯过程回归的统一观点。 *The Journal of Machine Learning Research* 6 1939 1959, ，：– 。 2005 [60] Ali Rahimi 和 Benjamin Recht。用于大规模核机器的随机特征。 *Advances in neural information processing systems* 20 2007 ，，。

[61] Maziar Raissi、Paris Perdikaris 和 George E Karniadakis。物理信息神经网络：求解涉及非线性偏微分方程的正问题和逆问题的深度学习框架。 *Journal of Computational physics*，378:686–707，2019。[62] Maziar Raissi、Paris Perdikaris 和 George Em Karniadakis。用于时间相关和非线性偏微分方程的数值高斯过程。 *SIAM Journal on ScientificComputing*，40(1):A172–A198，2018。[63] Lassi Roininen、Markku S Lehtinen、Sari Lasanen、Mikko Orisp ¨a ¨a 和 Markku Markkanen。相关性先验。 *Inverse problems and imaging*，5(1):167–184，2011。[64] Huiyan Sang 和 Jianhua Z Huang。大规模空间数据集的协方差函数会只度近似。 *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)* 74 1 111 132, 2012 ，( ): – 。

[65] Daniel Sanz-Alonso 和 Ruiyi Yang。高斯过程的有限元表示：平衡数值精度与统计精度。 *SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification* 10 4 1323 1349, 2022 ，( ): – 。

[66] Daniel Sanz-Alonso 和 Ruiyi Yang。Mat´ern 场的 SPDE 方法：图表示。 *Statistical Science*，37(4):519–540，2022。[67] Robert Schaback 和 Holger Wendland。核技术：从机器学习到无网格方法。 *Acta numerica*，15:543–639，2006。

[68] Florian Sch¨afer、Matthias Katzfuss 和 Houman Owhadi。通过 Kullback–Leibler 最小化进行稀疏 Cholesky 分解。 *SIAM Journal on Scientific Computing* 43 3 2019 2046, , ( ):A –A 。 2021
[69] Florian Sch¨afer、TJ Sullivan 和 Houman Owhadi。以近线性计算复杂度压缩、求逆稠密核矩阵并进行近似主成分分析。 *Multiscale Modeling& Simulation*，19(2):688–730，2021。[70] Bernhard Sch ¨ *Learning with kernels: support* olkopf、 *vector machines* 2002 Alexander J Smola、Francis Bach 等。, *regularization, optimization, and beyond*。麻省理工学院出版社，。[71] Michael L Stein。克里金法中的屏蔽效应。 *The Annals of Statistics* 30 1 298 323, , ( ): – 。[72] 2002 Michael L Stein。 2010 *The Annals of* Rietz 讲座：屏蔽效应何时成立？ *Statistics* 39 6 2795 ,( ): –2819，2011。[73] Aldo V Vecchia。连续空间过程的估计与模型识别。 *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)* 50 2 297 312, 1988 , ( ): – 。[74] Sifan Wang、Yujun Teng 和 Paris Perdikaris。理解并缓解物理信息神经网络中的梯度流病态。 *SIAM Journal on Scientific Computing*，43 5 3055( ):A –A3081，2021。[75] Sifan Wang、Xinling Yu 和 Paris Perdikaris。PINN 何时以及为何无法训练：神经切线核视角。 *Journal of Computational Physics*，449:110768，2022。[76] Holger Wendland。 *Scattered data approximation*，第 17 卷。剑桥大学出版社，2004。[77] Christopher Williams 和 Matthias Seeger。使用 Nystr¨om 方法加速核机器。 *Advances in neural information processing systems*，13，2000。[78] Christopher KI Williams 和 Carl Edward Rasmussen。 *Gaussian processes for machine learning* 2 2006 ，第 卷。麻省理工学院出版社，剑桥，MA，。[79] Andrew Wilson 和 Hannes Nickisch。用于可扩展结构化高斯过程的核插值（KISS-GP）。见 *International conference on machine learning*，第 1775–1784 页。PMLR，2015。[80] Andrew Gordon Wilson、Zhiting Hu、Ruslan Salakhutdinov 和 Eric P Xing。深度核学习。见 *Artificial intelligence and statistics*，第 370–378 页。PMLR，2016。[81] Jian Wu、Matthias Poloczek、Andrew G Wilson 和 Peter Frazier。带梯度的贝叶斯优化。 *Advances in neural information processing systems*，30，2017。[82] Ang Yang、Cheng Li、Santu Rana、Sunil Gupta 和 Svetha Venkatesh。具有导数观测的高斯过程稀疏近似。见 *AI 2018: Advances in Artificial Intel-ligence: 31st Australasian Joint Conference, Wellington, New Zealand, December 11-14*, 2018 507 518 2018 , *Proceedings*，第 – 页。施普林格，。[83] Qi Zeng、Yash Kothari、Spencer H Bryngelson 和 Florian Tobias Schaefer。竞争性物理信息网络。见 *The Eleventh International Conference on Learning Repre-sentations*，2023。[84] Xiong Zhang、Kang Zhu Song、Ming Wan Lu 和 X Liu。基于径向基函数配置的无网格方法。 *Computational mechanics*，26:333–343，2000。

APPENDIXA. SUPERNODES AND AGGREGATE SPARSITY PATTERN

超节点的概念借鉴自 [68], ，这使得在计算 (3.7) 时可以重用*re-use* Cholesky 因子，从而一次更新多列。

我们将测量分组成超节点，每个超节点由位置接近且长度尺度参数相似 l_i的测量点构成。为此，我们选取排序中尚未聚合到超节点的最后一个测量索引 $j \in I$，并将 $\{i$ 中尚未聚合的索引聚合到同一个超节点中：$(i, j) \in S_{P,\, l,\, \rho}$，$l_i \leq \lambda l_j\}$，其中 $\lambda > 1$。我们重复这一过程，直到每个测量都被聚合˜到某个超节点中。我们将所有超节点组成的集合记为 I，并将 $i \rightsquigarrow i$ 记作 $i \in I$˜ ˜ ˜，而当 i 是 i 所属的超节点时，将 $i \in I$ 记作该超节点。

其思路是为同一超节点中的所有测量指定相同的稀疏模式。为此，我们将超节点的稀疏集定义为其所包含所有节点的稀疏集的˜并集，即 $s_{\tilde{i}} := \{j : \exists i \rightsquigarrow i,\ j \in s_i\}$。接下来，我们引入聚合稀疏模式

$$S_{P,l,\rho,\lambda} := \bigcup_{\tilde{j}} \bigcup_{j \rightsquigarrow \tilde{j}} \{(i,j) \subset I \times I : i \leq j, i \in s_{\tilde{j}}\}.$$

在温和的假设条件下（[68]中的定理 B.5），可以证明超节点的数量为 $O(N/\rho^d)$，且每个超节点包含 $O(\rho^d)$ 个测量。超节点 $\#s_{\tilde{j}} = O$ 的稀疏集大小为 ρ^d。分组方式和聚合稀疏模式的直观示例见图 11，该图摘自 [68] 中的图 3。

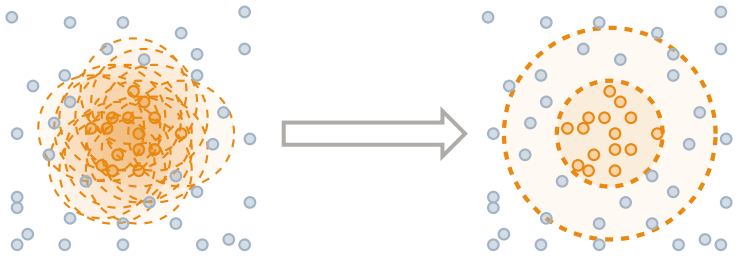

FIGURE 11. 左图展示了原始模式$S_{P,\, l,\, \rho}$。对于每个橙色点 j，其稀疏模式 s_j 包含半径为 ρ的圆内所有点。右图中，所有彼此接近且长度尺度˜相似的点 j被归为一个超节点 j。超节点可表示为一个由父节点 （半径为 $\approx \rho$的内球内的橙色点，或所有 $j \rightsquigarrow j$）和子节点 （半径为$\leq 2\rho$内的所有点，对应稀疏集 $s_{\tilde{j}}$）组成的列表。图经作者许可转载自 [68] 。

现在，我们可以利用聚合稀疏模式更高效地计算 (3.7)。设 $s_j^* = \{i : (i,\ j) \in S_{P,\, l,\, \rho,\, \lambda}\}$ 为 j 在聚合模式$S_{P,\, l,\, \rho,\, \lambda}$中的单独稀疏模式。在 (3.7) 中，我们需要计算 $\Theta^{-1}_{s_j^*,\ s_j^*}$ 的矩阵-向量乘积。为此，可以对 $\Theta_{s_j^*,\ s_j^*}$ 进行乔列斯基分解。若¨朴素地计算每个 $\Theta_{s_j^*,\ s_j^*}$ 的乔列斯基分解，则会产生 $O(N\rho^{3d})$

算术复杂度。然而，由于超节点构造，我们可以对$\Theta_{s_{\bar{j}},\, s_{\bar{j}}}$ 只分解一次，然后直接利用所得因子，为所有 $j \rightsquigarrow j$ 求得$\tilde{\Theta}_{s_j^*,\, s_j^*}$ 的 Cholesky 因子。这是因为我们的构造保证了

$$\Theta_{s_j^*, s_j^*} = \Theta_{s_{\bar{j}}, s_{\bar{j}}}[1 : \#s_j^*, 1 : \#s_j^*],$$

其中使用了 MATLAB 记法。上述关系表明，对于 $j \rightsquigarrow j$，$\Theta_{s_{\bar{j}},\, s_j^*}$ 的子 Cholesky$\tilde{}$因子会成为 $\Theta_{s_j^*,\, s_j^*}$ 的 Cholesky 因子。

因此，*Cholesky* 分解的一步适用于超节点中的所有 $O(\rho^d)$ 测量。总的来说，算术复杂度的上界为 $O(\rho^{3d} \times N/\rho^d) = O(N\rho^{2d})$。有关该算法的更多细节，请参阅 [68] 中的第 3.2 节，尤其是算法 3.2。

已有研究表明，聚合稀疏模式可在时间复杂度为 $O(N\log(N) + N\rho^d)$、空间复杂度为 $O(N)$ 的条件下构造；参见 [68] 中的定理 C.3。与生成最大最小排序和原始稀疏模式所需的时间复杂度 $O(N\log^2(N)\rho^d)$ 及空间复杂度 $O(N\rho^d)$ 相比，它们的阶更低，$l,\ \rho$ （参见注释 3.4）。

Appendix B. Ball-packing arguments

球装填论证有助于界定稀疏模式的基数。

命题 B.1. 考虑最大最小排序（定义 3.2）以及式 (3.4) 中定义的稀疏模式。对于每一列 j，记 $s_j = \{i : (i, j) \in S_{P,l,\rho}\}$。集合 s_j 的基数记为 $\#s_j$。那么，$\#s_j = O(\rho^d)$。

证明。固定一个 j。对于任意 $i \in s_j$，有 $\mathrm{dist}(\mathbf{x}_{P(i)}, \mathbf{x}_{P(j)}) \leq \rho l_j$。此外，根据最大最小排序的定义可知，对于 $i, i' \in s_j$ 和 $i \neq i'$，有 $\mathrm{dist}(\mathbf{x}_{P(i)}, \mathbf{x}_{P(i')}) \geq l_j$。因此，$s_i$的基数不超过球 $B(\mathbf{x}_{P(i)}, 2\rho l_j)$ 所能容纳的半径为 l_j的互不相交的球的数量。显然，$\#s_i = O(\rho^d)$。证明完毕。□

Appendix C. Explicit formula for the KL minimization

通过直接计算，可以证明 KL 最小化具有显式公式。该显式公式的证明采用了与 [68], 中定理 2.1 类似的方法，唯一的区别是使用了上三角 Cholesky 因子。

命题 C.1. 式 (3.6) 的解由式 (3.7) 给出。

证明。我们使用两个多元高斯分布之间 KL 散度的显式公式：

$$\begin{aligned} &\mathrm{KL}\left(\mathcal{N}(0, \Theta) \,\|\, \mathcal{N}(0, (UU^T)^{-1})\right) \\ =&\frac{1}{2}[-\log\det(U^T\Theta U) + \mathrm{tr}(U^T\Theta U) - N]\,. \end{aligned} \tag{C.1}$$

为了确定最小化解，常数项和缩放因子并不重要，因此我们关注 $-\log\det(U^T\Theta U)$ 和 $\mathrm{tr}(U^T\Theta U)$ 两部分。通过写成 $U = [U_{:,1}, ..., U_{:,M}]$，我们得到

$$-\log\det(U^T\Theta U) + \mathrm{tr}(U^T\Theta U) = \sum_{j=1}^{M}[-2\log U_{jj} + \mathrm{tr}(U_{:,j}^T\Theta U_{:,j})] - \log\det\Theta\,. \tag{C.2}$$

因此，最小化问题可分解为针对 U 的每一列分别进行。由于稀疏模式的选取，我们有 $U_{:,\ j}^T\Theta U_{:,\ j} = U_{s_j,\ j}^T\Theta_{s_j,\ s_j}U_{s_j,\ j}$。我们还可以进一步简化该公式

$$\mathrm{tr}(U_{:,j}^T\Theta U_{:,j}) = \mathrm{tr}(U_{s_j,j}^T\Theta_{s_j,s_j}U_{s_j,j})\,. \tag{C.3}$$

只需确定 $-2\log U_{jj} + \mathrm{tr}(U_{s_j,j}^T\Theta_{s_j,s_j}U_{s_j,j})$ 的最小化解。对其求导可得最优性条件:

$$-\frac{2}{U_{jj}}\mathbf{e}_{\#s_j} + 2\Theta_{s_j,s_j}U_{s_j,j} = 0\,, \tag{C.4}$$

其中，$\mathbf{e}^{\#s_j}$ 是 $\mathbb{R}^{\#s_j}$ 中的一个标准基向量，最后一个分量为 1，其余分量均为 0。

求解该方程可得到解

$$U_{s_j,j} = \frac{\Theta_{s_j,s_j}^{-1}\mathbf{e}_{\#s_j}}{\sqrt{\mathbf{e}_{\#s_j}^T\Theta_{s_j,s_j}^{-1}\mathbf{e}_{\#s_j}}}\,. \tag{C.5}$$

证明完毕。 □

Appendix D. Proofs of the main theoretical results

D.1. 定理 4.1 的证明。

定理 *4.1* 的证明。 我们利用高斯过程回归、线性代数与数值均匀化之间的相互作用来证明此定理。考虑高斯过程$\xi \sim \mathcal{N}(0, \mathcal{L}^{-1})$。对于每个测量泛函，我们定义高斯随机变量 $Y_i = [\xi, \tilde{\phi}_i] \sim \mathcal{N}(0, [\tilde{\phi}_i, \mathcal{L}^{-1}\tilde{\phi}_i]) = \mathcal{N}(0, \Theta_{ii})$。如注 3.3 所述并由命题 D.5 证明的，我们有 Cholesky 因子与高斯过程条件化之间的关系，如下所示

$$\frac{U_{ij}^\star}{U_{jj}^\star} = (-1)^{i\neq j}\frac{\mathrm{Cov}[Y_i, Y_j|Y_{1:j-1\setminus\{i\}}]}{\mathrm{Var}[Y_i|Y_{1:j-1\setminus\{i\}}]}, i \le j\,.$$

此外，根据命题 D.6，可以将高斯过程的条件协方差与条件期望联系起来，即

$$\frac{\mathrm{Cov}[Y_i, Y_j|Y_{1:j-1\setminus\{i\}}]}{\mathrm{Var}[Y_i|Y_{1:j-1\setminus\{i\}}]} = \mathbb{E}[Y_j|Y_i = 1, Y_{1:j-1\setminus\{i\}} = 0]\,. \tag{D.1}$$

上述条件期望与数值均匀化文献中引入的*Gamblets* 有关。事实上，利用关系 $Y_i = [\xi, \phi_i]$，我们有

$$\mathbb{E}[Y_j|Y_i = 1, Y_{1:j-1\setminus\{i\}} = 0] = [\mathbb{E}[\xi|Y_i = 1, Y_{1:j-1\setminus\{i\}} = 0], \tilde{\phi}_j] = [\psi_j^i, \tilde{\phi}_j]\,, \tag{D.2}$$

其中 $\psi_j^i(\mathbf{x}) := \mathbb{E}[\xi(\mathbf{x})|Y_i = 1, Y_{1:j-1\setminus\{i\}} = 0]$；它在 [55, 56] 中被称为 Gamblets。

重要的是，对于条件期望，根据命题 D.7，我们有以下变分刻画 [55, 56]:

$$\begin{aligned}\psi_j^i = \mathrm{argmin}_{\psi\in H_0^{\tilde{s}}(\Omega)} \quad & [\psi, \mathcal{L}\psi] \\ \text{subject to} \quad & [\psi, \tilde{\phi}_k] = \delta_{i,k} \ \text{ for } \ 1 \le k \le j-1\,.\end{aligned} \tag{D.3}$$

Gamblets 的一项主要性质是，在适当的假设下，它们具有指数衰减性质，这可用于证明我们的定理。我们

在附录 D.4 中汇总了相关的理论结果；我们将在证明中使用这些结果。

我们的定理证明分为两步。第一步是对 $|U^\star_{ij}/U^\star_{jj}|$ 给出界，第二步是对 $|U^*_{jj}|$ 给出界。

第一步中，我们分别讨论 $j \le M$ 和 $j > M$ 两种情况。事实上，$j \le M$ 这种情况已在 [69, 68] 中讨论过。这里的证明因此得以简化。

对于 $1 \le i \le j \le M$，根据上述讨论，我们有如下关系：

$$\left|\frac{U^\star_{ij}}{U^\star_{jj}}\right| = \left|[\psi^i_j, \tilde{\phi}_j]\right| = |\psi^i_j(\mathbf{x}_{P(j)})|\,, \tag{D.4}$$

˜这里我们用到了这样一个事实：$\phi_j = \delta_{\mathbf{x}_{P(j)}}$，因为所有狄拉克测量都排在前面。为了对 $|\psi^i_j(\mathbf{x}^{P(j)})|$ 给出界，我们将使用在命题 D.12 中证明的 Gamblets 指数衰减结果。具体而言，要将命题 D.12 应用于此情形，我们需要验证其假设，尤其是假设 2。

在我们的设定中，可以利用沃罗诺伊图构造区域 Ω 的一个区域划分。记 $X_{j-1} = \{\mathbf{x}^{P(1)}, \ldots\ldots, \mathbf{x}_{P(j-1)}\}$。注意，$X_M$ 将由所有物理点组成。对于 $1 \le k \le j-1$，我们将 τ_k 定义为包含 Ω 中所有满足以下条件的点的 Voronoi 单元：这些点到 $\mathbf{x}^{P(k)}$ 的距离小于到 X_{j-1} 中任何其他点的距离。由于我们假设 Ω 是凸的，τ_k 也是凸的。而有界凸区域本身就是一致利普希茨的。我们可以证明，这些 Voronoi 单元也都是一致利普希茨的（即，每个单元的利普希茨常数都有一致上界）。为此，注意这些单元是凸多边形；利普希茨常数取决于角点处的角度大小。由于每个单元都包含一个大小为 δh 的球，且位于一个大小为 h/δ 的球内（如下文论证所示），因此这些角度不可能任意小。所以，这些凸多边形每个角点处的角度大小都有一致的下界，因而它们是一致利普希茨的。

此外，为了验证假设 2 的其他部分，我们分析 X_{j-1} 的齐次性参数。根据定义，

$$\delta(X_{j-1}; \partial\Omega) = \frac{\min_{\mathbf{x}\neq\mathbf{y}\in X_{j-1}} \operatorname{dist}(\mathbf{x}, \{\mathbf{y}\}\cup\partial\Omega)}{\max_{\mathbf{x}\in\Omega} \operatorname{dist}(\mathbf{x}, X_{j-1}\cup\partial\Omega)}\,. \tag{D.5}$$

回顾最大最小排序的定义：对于点 $\{\mathbf{x}_i,\ i\in I\}$，给定集合 A $= \partial\Omega$ 后的最大最小排序通过依次选取$\mathbf{x}_i$ 中距 A 和已选点最远的点得到。这意味着

$$l_{j-1} = \operatorname{dist}(\mathbf{x}_{P(j-1)}, \{\mathbf{x}_{P(1)}, ..., \mathbf{x}_{P(j-2)}\}\cup\partial\Omega)\,.$$

因此我们有

$$\min_{\mathbf{x}\neq\mathbf{y}\in X_{j-1}} \operatorname{dist}(\mathbf{x}, \{\mathbf{y}\}\cup\partial\Omega) = l_{j-1}\,. \tag{D.6}$$

那么，根据三角不等式，有

(D.7)

$$\begin{aligned}\max_{\mathbf{x}\in\Omega} \operatorname{dist}(\mathbf{x}, X_{j-1}\cup\partial\Omega) &\le \max_{\mathbf{x}\in X_M} \operatorname{dist}(\mathbf{x}, X_{j-1}\cup\partial\Omega) + \max_{\mathbf{x}\in\Omega} \operatorname{dist}(\mathbf{x}, X_M\cup\partial\Omega)\\ &\le l_j + l_M/\delta(X_M;\partial\Omega) \le (1 + 1/\delta(X_M;\partial\Omega))l_j\,,\end{aligned}$$

其中，在第二个不等式中，我们使用了长度尺度 l_j 和 X_M的齐次性假设的定义，即 $\delta(X_M; \partial\Omega) > 0$，它具有以下

关系

$$\delta(X_M;\partial\Omega)=\frac{\min_{\mathbf{x}\neq\mathbf{y}\in X_M}\operatorname{dist}(\mathbf{x},\{\mathbf{y}\}\cup\partial\Omega)}{\max_{\mathbf{x}\in\Omega}\operatorname{dist}(\mathbf{x},X_M\cup\partial\Omega)}=\frac{l_M}{\max_{\mathbf{x}\in\Omega}\operatorname{dist}(\mathbf{x},X_M\cup\partial\Omega)}\,.$$

结合以上两个估计，我们得到 $\delta(X_{j-1};\partial\Omega)\geq 1/(1+1/\delta(X_M;\partial\Omega))>0$，其中我们用到了 $l_j\leq l_{j-1}$ 这一事实。因此， X_{j-1} 也均匀分布，且满足 $\delta(X_{j-1};\partial\Omega)>0$。

我们现在可以验证假设 2。首先，球 $B(\mathbf{x}\ l_j/2)$，$\mathbf{x}\in X_{j-1}$ 互不相交，因此每个 τ_k 内都有一个以 $\mathbf{x}^{P(k)}$ 为中心、半径为 $l_j/2$ 的球。其次，由于 $\max_{\mathbf{x}\in\Omega}\operatorname{dist}(\mathbf{x}\ X_{j-1}\cup\partial\Omega)\leq(1+1/\delta(X_M;\partial\Omega))l_j$，我们知道$\tau_i$包含在一个以 $\mathbf{x}^{P(k)}$ 为中心、半径为 $(1+1/\delta(X_M;\partial\Omega))l_j$ 的球内。因此，假设 2 在 $h=l_j/2,\delta=\min(1/(2+2/\delta(X_M;\partial\Omega)),1)$ 和 $Q=j-1$ 条件下成立。根据我们对测量的选择，假设 3 显然成立。

因此，应用命题 D.12，我们得到

$$\left|\frac{U^\star_{ij}}{U^\star_{jj}}\right|=|\psi^i_j(\mathbf{x}_{P(j)})|\leq Cl_j^{-2s}\exp\left(-\frac{\operatorname{dist}(\mathbf{x}_{P(i)},\mathbf{x}_{P(j)})}{Cl_j}\right),\tag{D.8}$$

其中，C是依赖于 Ω δ，d，s，$\|\mathcal{L}\|$，$\|\mathcal{L}^{-1}\|$的常数。我们得到 $|U^\star_{ij}/U^\star_{jj}|$对于 $j\leq M$ 的指数衰减。

对于 $j>M$ 和 $i\leq j$，我们有

$$\left|\frac{U^\star_{ij}}{U^\star_{jj}}\right|=\left|[\psi^i_j,\tilde\phi_j]\right|\leq\max_{0\leq|\gamma|\leq J}\left|D^\gamma\psi^i_j(\mathbf{x}_{P(j)})\right|,\tag{D.9}$$

其中我们用到了 $\tilde\phi_j$ 具有 $\delta_{\mathbf{x}_{P(j)}}\circ D^\gamma$这种形式这一事实。现在，对于 ψ^i_j，我们需要处理的点集是 X_M。与情形 $j\leq M$类似，我们将 $1\leq k\leq M$对应的这些点在 Ω 中的 Voronoi 单元定义为 τ_k。然后，使用前一种情形中的相同论证，我们知道假设 2 成立，其中 $h=l_M/2,\delta=\min(\delta(X_M;\partial\Omega)/2,1)$ 和 $Q=M$。根据我们对测量的选择，假设 3 显然成立。因此，命题 D.12 意味着

$$\max_{0\leq|\gamma|\leq J}\left|D^\gamma\psi^i_j(\mathbf{x}_{P(j)})\right|\leq Cl_M^{-2s}\exp\left(-\frac{\operatorname{dist}(\mathbf{x}_{P(i)},\mathbf{x}_{P(j)})}{Cl_M}\right),\tag{D.10}$$

其中 C是一个依赖于 Ω δ，d，s，$\|\mathcal{L}\|$，$\|\mathcal{L}^{-1}\|$，J的常数。

综上所述，我们得到

$$\left|\frac{U^\star_{ij}}{U^\star_{jj}}\right|\leq Cl_j^{-2s}\exp\left(-\frac{\operatorname{dist}(\mathbf{x}_{P(i)},\mathbf{x}_{P(j)})}{Cl_j}\right),\tag{D.11}$$

对于任意 $1\leq i\leq j\leq N$，注意到根据我们的定义，$l_j=l_M$对 $j>M$成立。

现在，我们分析 $|U^*_{jj}|$。注意，$\Theta=K(\tilde{\boldsymbol{\phi}},\tilde{\boldsymbol{\phi}})\in\mathbb{R}^{N\times N}$且 $\Theta^{-1}=U^\star U^{\star T}$。根据上述论证，我们知道命题 E.1 中的假设对 $h=l_M/2$、$\delta=\min(\delta(X_M;\partial\Omega)/2,1)$ 和 $Q=M$均成立。因此，对于任意向量 $w\in\mathbb{R}^N$，由命题 E.1 可得

$$w^T\Theta^{-1}w\leq Cl_M^{-2s+d}|w|^2\,,$$

对于取决于 $\delta(X_M)$ d 的某个常数 C，s，$\|\mathcal{L}\|$，J。这意味着

$$|U^{\star T}w|^2\leq Cl_M^{-2s+d}|w|^2\,.$$

令 w 为标准基向量$\mathbf{e}_j$，我们得到

$$\sum_{k=j}^{N} |U^\star_{jk}|^2 \le C l_M^{-2s+d},$$

这将导出 $|U^\star_{jj}| \le C l_M^{-s+d/2}$，其中某个 C取决于 $\delta(X_M; \partial\Omega)$ d， s， $\|\mathcal{L}\|$， J。 □

备注 D.1。 我们对第 4.1 节中的假设作一些说明：我们假设所有测量均为 $\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma$，其多重索引为 $\gamma = (\gamma_1, \dots \gamma_d) \in \mathbb{N}^d$和 $|\gamma| := \sum_{k=1}^d \gamma_k \le J$；此处 $D^\gamma = D^{\gamma_1}{}_{\mathbf{x}^{(1)}} \cdots D^{\gamma_d}{}_{\mathbf{x}^{(d)}}$。这一假设是为了便于表述，也可以推广。例如，考虑拉普拉斯测量时，也可以采用类似的证明。事实上，在这种情况下，定理 4.1 的证明的主要变化在于需要对 (D.9) 右端项进行估计，而现在需要估计 $|\Delta\psi_j^i|$。这里，$\widetilde{\psi_j^i}$由 (D.3) 定义，其中 $\phi_j = \delta_{\mathbf{x}_{P(j)}} \circ \Delta$。注意，定理 D.10 适用于一般测量；加入拉普拉斯测量后，只要保证测量之间线性无关（这是满足条件（D.32）所必需的），其条件就能满足。利用定理 D.10，我们可以在加入拉普拉斯测量后证明命题 D.12，从而得到对 (D.9) 右端项的估计。◊

D.2. **定理 4.2 的证明**。 我们需要以下引理，该引理取自 [68]中的引理 B.8。

引理D.2。 设 $\lambda_{\min}, \lambda_{\max}$ 分别为 $\Theta \in \mathbb{R}^{N\times N}$的最小和最大特征值。则存在一个普适常数 $\eta > 0$，使得对于任意矩阵 $M \in \mathbb{R}^{N\times N}$，有

- *If* $\lambda_{\max}\|\Theta^{-1} - MM^T\|_{\mathrm{Fro}} \le \eta$, *then*
  $$\mathrm{KL}\left(\mathcal{N}(0,\Theta) \,\|\, \mathcal{N}(0,(MM^T)^{-1})\right) \le \lambda_{\max}\|\Theta^{-1} - MM^T\|_{\mathrm{Fro}};$$
- *If* $\mathrm{KL}\left(\mathcal{N}(0,\Theta) \,\|\, \mathcal{N}(0,(MM^T)^{-1})\right) \le \eta$, *then*
  $$\|\Theta^{-1} - MM^T\|_{\mathrm{Fro}} \le \lambda_{\min}^{-1} \mathrm{KL}\left(\mathcal{N}(0,\Theta) \,\|\, \mathcal{N}(0,(MM^T)^{-1})\right).$$

利用该引理，我们可以证明定理 4.2。其证明与 [68]中的定理 B.6 的证明类似。

定理 *4.2* 的证明。 首先，通过覆盖论证，我们知道 $l_M = O(M^{-1/d}) = O(N^{-1/d})$。根据命题 E.1（取 $h = l_M/2$），我们知道

$$\lambda_{\max}(\Theta) \le C_1 N \quad \text{and} \quad \lambda_{\min}(\Theta) \ge C_1 N^{-2s/d+1} \tag{D.12}$$

对于某个常数 C_1，它依赖于 $\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I}; \partial\Omega)$ d， s， $\|\mathcal{L}\|$， $\|\mathcal{L}^{-1}\|$， J。

定理 4.1 表明，对于 $(i,j) \notin S_{P,l,\rho}$，有

$$|U^\star_{ij}| \le C l_M^{-s+d/2} l_j^{-2s} \exp\left(-\frac{\mathrm{dist}(\mathbf{x}_{P(i)}, \mathbf{x}_{P(j)})}{C l_j}\right) \le C N^\alpha \exp\left(-\frac{\rho}{C}\right),$$

对于某个依赖于 s的 α， d，其中 C 是依赖于 Ω、$\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I}; \partial\Omega)$ d， s， J， $\|\mathcal{L}\|$，$\|\mathcal{L}^{-1}\|$的通用常数；事实上， $\alpha \le 3s/d - 1/2$，利用了 l_j^{-1}， $l_M^{-1} = O(N^{1/d})$。此外，根据上一小节中的证明，我们知道对于所有 $1 \le i \le j \le N$，都有 $|U^*_{ij}| \le C N^{s/d-1/2}$。

现在，考虑上三角 Cholesky 分解 $\Theta^{-1} = U^\star U^{\star T}$。定义 $M^\rho \in \mathbb{R}^{N\times N}$，使得

$$M_{ij}^\rho = \begin{cases} U_{ij}^\star, & \text{if } (i,j) \in S_{P,l,\rho} \\ 0, & \text{otherwise}. \end{cases} \tag{D.13}$$

然后，利用上述关于 $U_{ij}^\star$ 的界，我们知道存在一个依赖于 s，d 的常数β，使得

$$\|\Theta^{-1} - M^\rho M^{\rho T}\|_{\text{Fro}} \le CN^\beta \exp\left(-\frac{\rho}{C}\right). \tag{D.14}$$

这里，我们可以使用一个简单的界

$$\begin{aligned}\|\Theta^{-1} - M^\rho M^{\rho T}\|_{\text{Fro}} &= \|U^\star U^{\star T} - M^\rho M^{\rho T}\|_{\text{Fro}} \\ \le &\sqrt{N^2 \cdot N^2 \cdot N^{2s/d-1} \cdot C^2 N^{2\alpha} \exp(-\frac{2\rho}{C})}\end{aligned}$$

由于矩阵 $U^\star U^{\star T} - M^\rho M^{\rho T}$ 中有 N^2 个元素，每个元素都是至多 N 项的求和，且每一项的形式为 $U_{ij}^\star U_{lk}^\star$，其中一项必定呈指数衰减，且有界于 $CN^\alpha \exp\left(-\frac{\rho}{C}\right)$，另一项则始终有界于 $O(l_M^{-s+d/2}) = O(N^{s/d-1/2})$，这是由 D.1 节末尾的结果得出的。利用柯西-施瓦茨不等式，可得矩阵的每个元素均有界于 $\sqrt{N^2 \cdot N^{2s/d-1} \cdot C^2 N^{2\alpha} \exp(-\frac{2\rho}{C})}$；将其平方、求和，再开平方，即可得到最终的界。因此，我们可以取$\beta = s/d + 3/2 + \alpha \le 4s/d + 1$。

由于 $\lambda_{\max}(\Theta) \le C_1 N$，我们知道存在一个常数 C'，使得当$\rho \ge C' \log(N)$ 时，

$$\lambda_{\max}(\Theta)\|\Theta^{-1} - M^\rho M^{\rho T}\|_{\text{Fro}} \le \eta,$$

对于引理D.2 中定义的 η。利用引理D.2，我们得到

$$\text{KL}\left(\mathcal{N}(0,\Theta) \,\|\, \mathcal{N}(0,(M^\rho M^{\rho T})^{-1})\right) \le \lambda_{\max}(\Theta)\|\Theta^{-1} - M^\rho M^{\rho T}\|_{\text{Fro}}.$$

根据 KL 最优性，最优解 U^ρ 将满足

$$\text{KL}\left(\mathcal{N}(0,\Theta) \,\|\, \mathcal{N}(0,(U^\rho U^{\rho T})^{-1})\right) \le \lambda_{\max}(\Theta)\|\Theta^{-1} - M^\rho M^{\rho T}\|_{\text{Fro}}. \tag{D.15}$$

这意味着

$$\text{KL}\left(\mathcal{N}(0,\Theta) \,\|\, \mathcal{N}(0,(U^\rho U^{\rho T})^{-1})\right) \le C_1 CN^{\beta+1}\exp(-\frac{\rho}{C}) \le C_1 CN^{4s/d+2}\exp(-\frac{\rho}{C}).$$

再次利用引理D.2，我们得到

$$\|\Theta^{-1} - U^\rho U^{\rho T}\|_{\text{Fro}} \le \frac{\lambda_{\max}(\Theta)}{\lambda_{\min}(\Theta)}\|\Theta^{-1} - M^\rho M^{\rho T}\|_{\text{Fro}} \le CN^{6s/d+1}\exp(-\frac{\rho}{C}). \tag{D.16}$$

此外，

$$\|\Theta - (U^\rho U^{\rho T})^{-1}\|_{\text{Fro}} \le \|\Theta\|_{\text{Fro}}\|\Theta^{-1} - U^\rho U^{\rho T}\|_{\text{Fro}}\|(U^\rho U^{\rho T})^{-1}\|_{\text{Fro}}, \tag{D.17}$$

根据上述估计，我们知道存在一个依赖于 Ω $\delta(\{\mathbf{x}_i\}_{i\in I}; \partial\Omega)$ d，s，J，$\|\mathcal{L}\|$，$\|\mathcal{L}^{-1}\|$的常数 C''，使得当 $\rho \ge C'' \log(N/\epsilon)$ 时，有

$$\text{KL}\left(\mathcal{N}(0,\Theta) \,\|\, \mathcal{N}(0,(U^\rho U^{\rho T})^{-1})\right) + \|\Theta^{-1} - U^\rho U^{\rho T}\|_{\text{Fro}} + \|\Theta - (U^\rho U^{\rho T})^{-1}\|_{\text{Fro}} \le \epsilon.$$

这样的 C'' 依赖于 C，即定理 4.1 中的通用常数；该常数依赖于定理 D.10 中的分析，而在本工作范围内我们不追踪其紧确取值。这些常数至多关于 s, d 呈多项式增长，可以由指数衰减项吸收。

上述界表明，使用 ρ logarithmicon N/ϵ，我们可以得到有界于 ϵ 的近似误差。□

D.3. **Cholesky 因子、条件协方差、条件期望与 Gamblets 之间的联系**。我们首先给出两个引理。

第一个引理讨论分块矩阵 [45] 的逆。

引理 D.3. 对于正定矩阵 $\Theta \in \mathbb{R}^{N\times N}$，若将其写成分块形式

$$\Theta = \begin{pmatrix} \Theta_{YY} & \Theta_{YZ} \\ \Theta_{ZY} & \Theta_{ZZ} \end{pmatrix}, \tag{D.18}$$

则，Θ^{-1} 等于

$$\begin{pmatrix} (\Theta_{YY} - \Theta_{YZ}\Theta_{ZZ}^{-1}\Theta_{ZY})^{-1} & -\Theta_{YY}^{-1}\Theta_{YZ}(\Theta_{ZZ} - \Theta_{ZY}\Theta_{YY}^{-1}\Theta_{YZ})^{-1} \\ -\Theta_{ZZ}^{-1}\Theta_{ZY}(\Theta_{YY} - \Theta_{YZ}\Theta_{ZZ}^{-1}\Theta_{ZY})^{-1} & (\Theta_{ZZ} - \Theta_{ZY}\Theta_{YY}^{-1}\Theta_{YZ})^{-1} \end{pmatrix}. \tag{D.19}$$

第二个引理讨论了高斯随机向量的条件协方差与精度矩阵之间的关系。

引理 D.4。设 $N \geq 3$ 和 $X = (X_1, ..., X_N)$ 是 $\mathbb{R}^N$ 中的一个 $\mathcal{N}(0, \Theta)$ 高斯向量。设 $Y = (X_1, X_2)$ 和 $Z = (X_3, ..., X_N)$。那么，

$$\mathrm{Cov}(Y_1, Y_2|Z) = \frac{-A_{12}}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2}, \tag{D.20}$$

and

$$\mathrm{Var}(Y_1|Z) = \frac{A_{22}}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2}, \tag{D.21}$$

其中 $A = \Theta^{-1}$。因此

$$\frac{\mathrm{Cov}(Y_1, Y_2|Z)}{\mathrm{Var}(Y_1|Z)} = \frac{-A_{12}}{A_{22}}. \tag{D.22}$$

证明。首先，我们知道 $\mathrm{Cov}(Y|Z) = \Theta_{YY} - \Theta_{YZ}\Theta_{ZZ}^{-1}\Theta_{ZY}$。根据引理 D.3，我们有

$$\Theta_{YY} - \Theta_{YZ}\Theta_{ZZ}^{-1}\Theta_{ZY} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}^{-1}. \tag{D.23}$$

对该矩阵求逆即可得到所需结果。□

借助这些引理，我们可以如下说明 Cholesky 因子与条件协方差之间的联系。

命题 D.5. 考虑正定矩阵 $\Theta \in \mathbb{R}^{N\times N}$。假设其逆矩阵的上三角 Cholesky 分解为 U，满足 $\Theta^{-1} = UU^T$。令 Y 为服从分布 $\mathcal{N}(0, \Theta)$ 的高斯向量。那么，我们有

$$\frac{U_{ij}}{U_{jj}} = (-1)^{i\neq j}\frac{\mathrm{Cov}[Y_i, Y_j|Y_{1:j-1\setminus\{i\}}]}{\mathrm{Var}[Y_i|Y_{1:j-1\setminus\{i\}}]}, \quad i \leq j. \tag{D.24}$$

证明。我们只需考虑 $i \neq j$ 的情形。首先考虑 $j = N$。记作$A = \Theta^{-1}$。根据 Cholesky 分解 $A = UU^T$ 的定义，我们知道$U_{:,N} = A_{:,N}/\sqrt{A_{NN}}$。因此，

$$\frac{U_{iN}}{U_{NN}} = \frac{A_{iN}}{A_{NN}}\,.$$

对于 $i \neq N$，由引理 D.4 可得

$$\frac{\mathrm{Cov}[Y_i, Y_N | Y_{1:N-1\setminus\{i\}}]}{\mathrm{Var}[Y_i | Y_{1:N-1\setminus\{i\}}]} = \frac{-A_{iN}}{A_{NN}}\,. \tag{D.25}$$

比较上述两个恒等式，可得该结论对 $j = N$ 成立。

对于 $j < N$，我们可以使用数学归纳法。注意，$U_{1:N-1,\ 1:N-1}$ 也是 $(\Theta_{1:N-1,\ 1:N-1})^{-1}$ 的上三角 Cholesky 因子，注意到以下事实（将引理 D.3 应用于矩阵 A 可得）：

$$(\Theta_{1:N-1,1:N-1})^{-1} = A_{1:N-1,1:N-1} - A_{1:N-1,N} A_{NN}^{-1} A_{N,1:N-1}$$

是舒尔补，这恰好是 Cholesky 分解中的余块。因此，将 $j = N$ 的结论应用于矩阵 $\Theta_{1:N-1,\ 1:N-1}$，可证明 (D.24) 对 $j = N-1$ 也成立。对 $j = 1$ 重复此过程即可完成证明。□

此外，条件协方差与条件期望的关系如下。

命题 D.6. 对于高斯向量 $Y \sim \mathcal{N}(0, \Theta)$，我们有

$$\frac{\mathrm{Cov}[Y_i, Y_j | Y_{1:j-1\setminus\{i\}}]}{\mathrm{Var}[Y_i | Y_{1:j-1\setminus\{i\}}]} = \mathbb{E}[Y_j | Y_i = 1, Y_{1:j-1\setminus\{i\}} = 0]\,. \tag{D.26}$$

证明。我们证明，对于维度为 d 的任意零均值高斯向量 Z，以及满足 $\mathrm{Var}[Z_w] \neq 0$ 的任意向量 $v, w \in \mathbb{R}^d$，有

$$\frac{\mathrm{Cov}[Z_v, Z_w]}{\mathrm{Var}[Z_w]} = \mathbb{E}[Z_v | Z_w = 1]\,, \tag{D.27}$$

其中 $Z_v = \langle Z, v\rangle$ 和 $Z_w = \langle Z, w\rangle$。事实上，直接计算即可验证这一点。我们有

$$\mathrm{Cov}(Z_v - \frac{\mathrm{Cov}[Z_v, Z_w]}{\mathrm{Var}[Z_w]} Z_w, Z_w) = 0\,,$$

这意味着它们相互独立，因为它们是联合高斯变量。由此得到

$$\mathbb{E}[Z_v - \frac{\mathrm{Cov}[Z_v, Z_w]}{\mathrm{Var}[Z_w]} Z_w | Z_w = 1] = 0\,,$$

进而可得 (D.27) 成立。

现在，我们令 Z 为在给定 $Y_{1:j-1\setminus\{i\}} = 0$ 条件下的高斯向量 Y。它仍然是一个高斯向量（其协方差矩阵是退化的）。将 (D.27) 应用于 $v = \mathbf{e}j, w = \mathbf{e}_i$，即可得到所需结果。□

最后，条件期望与一个变分问题相关联。以下命题取自 [55, 56]。由于分布是高斯的，可以将这一结果理解为：在约束条件下，高斯过程的最大似然估计量与条件期望一致。数学上，可以分别直接写出这两个问题的显式公式来证明这一点。

命题 D.7. 对于满足假设 1 的高斯过程 $\xi \sim \mathcal{N}(0, \mathcal{L}^{-1})$，其中 $\mathcal{L}: H_0^s(\Omega) \to H^{-s}(\Omega)$。那么，对于某些线性无关的测量$\phi_1, ..., \phi_l \in H^{-s}(\Omega)$，条件期望

$$\psi^\star(\mathbf{x}) := \mathbb{E}\left[\xi(\mathbf{x}) | [\xi, \phi_i] = c_i, 1 \le i \le l\right]$$

是以下变分问题的解：

$$\begin{aligned} \psi^\star = \operatorname{argmin}_{\psi \in H_0^s(\Omega)} \quad & [\psi, \mathcal{L}\psi] \\ \text{subject to} \quad & [\psi, \phi_i] = c_i \quad \text{for} \quad 1 \le i \le l\,. \end{aligned} \tag{D.28}$$

上述变分问题的解在文献中称为 Gamblets；参见定义 D.8。

D.4. **关于 Gamblets 指数衰减的结果**。我们汇总并整理了 [56] 中关于 Gamblets 指数衰减性质的一些理论结果，并给出了 [56] 中未涉及的有关导数测量的一些新结果。

第一个假设涉及区域及其划分。

假设 2（区域与划分：源自 [56] 中的构造 4.2）。假设 Ω 是 $\mathbb{R}^d$ 中具有 Lipschitz 边界的有界区域。考虑 $\delta \in (0,1)$ 和 $h > 0$。令 $\tau_1, ..., \tau_Q$ 为 Ω 的一个划分 $\subset \mathbb{R}^d$，使得每个 τ_i 的闭包都是凸的、具有一致的 Lipschitz 性质、包含一个圆心为$\mathbf{x}_i$ 且半径为 δh的球，并且包含于一个圆心为 $\mathbf{x}_i$ 且半径为 h/δ的球内。

第二个假设涉及与区域划分相关的测量泛函。

假设 3（测量泛函：来自 [56]中的构造 4.12）。设假设 2 成立。对于每个 $1 \le i \le Q$，令 $\phi_{i,\alpha}, \alpha \in \mathsf{T}_i$（其中 T_i 是一个指标集）为 $H^{-s}(\Omega)$ 中满足以下条件的元素：

- 线性无关性：当作用于子集 $H_0^s(\tau_i) \subset H_0^s(\Omega)$ 时，$\phi_{i,\alpha}, \alpha \in \mathsf{T}_i$ 线性无关。
- 局部性：对于每个 $\psi \in C_0^\infty(\Omega \backslash \tau_i)$ 和 $\alpha \in \mathsf{T}_i$，均有 $[\phi_{i,\alpha}, \psi] = 0$。

借助这些测量泛函，我们可以通过一个变分问题如下定义 Gamblets。请注意，根据命题 D.7，Gamblets 也是在给定测量泛函的条件下，某个高斯过程的条件期望。

定义 D.8 (Gamblets：摘自 [56] 中的第 4.5.2.1 节)。设假设 2 和 3 成立，且算子 $\mathcal{L}: H_0^s(\Omega) \to H^{-s}(\Omega)$ 满足假设 1。与算子 $\mathcal{L}$ 及测量泛函$\phi_{i,\alpha}, 1 \le i \le Q, \alpha \in \mathsf{T}_i$ 相关联的 Gamblets$\psi_{i,\alpha}, 1 \le i \le Q, \alpha \in \mathsf{T}_i$ 定义如下

$$\begin{aligned} \psi_{i,\alpha} = \operatorname*{arg\,min}_{\psi \in H_0^s(\Omega)} \quad & [\psi, \mathcal{L}\psi] \\ \text{subject to} \quad & [\psi, \phi_{k,\beta}] = \delta_{ik}\delta_{\alpha\beta} \quad \text{for} \quad 1 \le k \le Q, \beta \in \mathsf{T}_k\,. \end{aligned} \tag{D.29}$$

Gamblets 的一个关键性质是它们呈现指数衰减；见下述定理 D.10。

注D.9。关于（D.29）这类优化问题解的指数衰减结果最早在 [46], 中得到确立，其中测量泛函是有限元方法中的分片线性节点函数，且算子

$\mathcal{L} = -\nabla \cdot (a\nabla \cdot)$。随后， [55] 将结果扩展到分片常数测量泛函，并据此为具有粗糙系数的椭圆型偏微分方程开发了多重网格算法。之后， [29] 将分析扩展到一类具有分片多项式型测量泛函的强椭圆高阶算子，而 [9, 10] 则着重详细分析了子采样测量泛函的子采样长度尺度。所有这些结果都依赖于类似的质量追踪论证，而这类论证难以扩展到一般的高阶算子。

论文 [34]基于子空间迭代方法的指数收敛，为 [46] 中的指数衰减提供了一种更简单、更具代数性的证明。随后，文献 [56] 通过给出必要且充分条件，将这一技术推广到一般的任意整数阶算子和测量泛函。具体而言， [69] 中的作者利用 [56] 中的条件证明：当算子 $\mathcal{L}$ 满足假设 1，且测量泛函为狄拉克函数时，所需的指数衰减成立。我们还注意到，已有一些关于不同局部化方案的研究，这些方案能够带来对h 依赖性更弱的衰减估计以及更好的衰减率 [28, 27]。

在定理 D.10 中，我们给出确保指数衰减的 [56] 充分条件，并验证本文考虑的导数型测量确实满足这些条件；参见命题 D.11 和 D.12。◊

定理 D.10 (Gamblets 的指数衰减)**.** 设假设 *2* 和 *3* 成立。我们定义函数空间

$$\Phi^{\perp} := \{f \in H_0^s(\Omega) : [f, \phi_{i,\alpha}] = 0 \text{ for any } \alpha \in \mathsf{T}_i, 1 \le i \le Q\}.$$

此外，假设以下条件成立：

$$|f|_{H^t(\Omega)} \le C_0 h^{s-t} \|f\|_{H_0^s(\Omega)} \text{ for any } 0 \le t \le s \text{ and } f \in \Phi^{\perp}; \tag{D.30}$$

$$\sum_{1\le i\le Q, \alpha\in\mathsf{T}_i} [f, \phi_{i,\alpha}]^2 \le C_0 \sum_{t=0}^{s} h^{2t} |f|^2_{H^t(\Omega)} \text{ for any } f \in H_0^s(\Omega); \tag{D.31}$$

$$|y| \le C_0 h^{-s} \| \sum_{\alpha\in\mathsf{T}_i} y_\alpha \phi_{i,\alpha} \|_{H^{-s}(\tau_i)} \text{ for any } 1 \le i \le Q \text{ and } y \in \mathbb{R}^{|\mathsf{T}_i|}. \tag{D.32}$$

这里，$|\cdot|_{H^t(\Omega)}$ 表示 Ω 中阶数为 t 的索*об*列夫半范数。

那么，对于定义 *D.8* 中的 *Gamblets*，我们有

$$|D^\gamma \psi_{i,\alpha}(\mathbf{x})| \le C h^{-s} \exp(-\frac{\operatorname{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)}{Ch}), \mathbf{x} \in \Omega,$$

对于满足 $|\gamma| < s - d/2$ 的任意 $1 \le i \le Q$、$\alpha \in \mathsf{T}_i$ 和多重指标 γ。这里， C 是一个依赖于 C_0、Ω δ、d、s、$\|\mathcal{L}\|$、$\|\mathcal{L}^{-1}\|$ 的常数。

证明。 我们使用书籍 [56]中的结果。条件（D.30）、（D.31）和（D.32）等价于 [56] 中的条件 4.15。令

$$\Omega_i = \operatorname{int}\left(\bigcup_{j:\operatorname{dist}(\tau_i,\tau_j)\le\delta h} \tau_j \right) \subset B(\mathbf{x}_i, 3h/\delta). \tag{D.33}$$

那么，根据 [56], 中的定理 4.16，存在一个常数 C，它取决于 C_0， δ， d， s,$\|\mathcal{L}\|$, $\|\mathcal{L}^{-1}\|$ ，使得

$$\|\psi_{i,\alpha} - \psi_{i,\alpha}^n\|_{H_0^s(\Omega)} \le C h^{-s} \exp(-n/C), \tag{D.34}$$

其中 $\psi_{i,\alpha}^n$ 是将条件 $\psi \in H_0^s(\Omega)$ 替换为 $\psi \in H_0^s(\Omega_i^n)$ 后，(D.29) 的最小化解。这里，Ω_i^n 是由与 Ω_i 的图距离不大于 n 的 Ω_j 构成的集合；图距离的定义见 [56]中的定义 4.13。直观地说，可以将 Ω_i^n 理解为 Ω_i 的 n 层邻域。我们有 $\Omega_i^0 = \Omega_i$。

根据 Ω_i^n 的定义和假设 2，我们知道

$$B(\mathbf{x}_i, (n+1)\delta h) \cap \Omega \subset \Omega_i^n \subset B(\mathbf{x}_i, 9(n+1)h/\delta) \cap \Omega\,. \tag{D.35}$$

现在，利用 Sobolev 嵌入定理以及 $\psi_{i,\alpha}^n$ 的支撑集包含于 Ω_i^n 这一事实，可得

$$\begin{aligned} \|D^\gamma \psi_{i,\alpha}\|_{L^\infty(\Omega \setminus B(\mathbf{x}_i, 9nh/\delta))} &\le \|D^\gamma \psi_{i,\alpha}\|_{L^\infty(\Omega \setminus \Omega_i^n)} \\ &\le \|D^\gamma \psi_{i,\alpha} - D^\gamma \psi_{i,\alpha}^n\|_{L^\infty(\Omega)} \\ &\le C_1 \|\psi_{i,\alpha} - \psi_{i,\alpha}^n\|_{H_0^s(\Omega)} \\ &\le C_1 C h^{-s} \exp(-n/C)\,, \end{aligned} \tag{D.36}$$

其中，C_1 是一个依赖于 Ω d，J 的常数，并满足

$$\sup_{0 \le |\gamma| \le J} \|D^\gamma u\|_{L^\infty(\Omega)} \le C_1 \|u\|_{H_0^s(\Omega)}\,,$$

对于任意 $u \in H_0^s(\Omega)$。

由结果 (D.36) 可知，对于任意 $n \in \mathbb{N}$，一旦 $\mathrm{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) \ge 9(n+1)h/\delta$，就有

$$|D^\gamma \psi_{i,\alpha}(\mathbf{x})| \le C h^{-s} \exp(-\frac{n}{C})\,,$$

其中，C 是一个取决于 C_0, Ω $\delta, d, s, \|\mathcal{L}\|, \|\mathcal{L}^{-1}\|$ 的常数。这里我们利用了函数 $C \to C h^{-s} \exp(-\frac{n}{C})$ 是递增函数这一事实。

特别地，当 $9(n+1)h/\delta \le \mathrm{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) \le 9(n+2)h/\delta$ 时，上述不等式成立；由此关系可得 $n \sim \mathrm{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)/h$。将 n 用 $\mathrm{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)/h$ 表示后，我们得到存在一个常数 C，它取决于同一组变量，使得

$$|D^\gamma \psi_{i,\alpha}(\mathbf{x})| \le C h^{-s} \exp(-\frac{\mathrm{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)}{Ch})\,.$$

证明完毕。 □

下面我们证明，本文关注的导数测量满足条件 (D.30)、(D.31) 和 (D.32)。我们需要将每个导数测量按 h 的某个幂进行缩放；这只会使所得的 Gamblets 相应地缩放，不会影响指数衰减结论；参见命题 D.12。

命题 D.11. 设假设 2 和 3 成立。考虑 $J \in \mathbb{N}$ 和 $J < s - d/2$。对于每个 $1 \le i \le Q$，我们选择 $\{h^{d/2}\delta_{\mathbf{x}_i}\} \subset \{\phi_{i,\alpha}, \alpha \in \mathrm{T}_i\} \subset \{h^{d/2+|\gamma|}\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma, 0 \le |\gamma| \le J\}$。那么，条件 (D.30)、(D.31)、(D.32) 成立，其中常数 C_0 仅依赖于 δ, d, s 和 J。

证明。 我们将逐一验证这些条件。

条件（D.30）由书中第 15.4.5 节推出 [56], ，该节讨论了 $\{\phi_{i,\alpha}, \alpha \in \mathrm{T}_i\} = \{h^{d/2}\delta_{\mathbf{x}_i}\}$ 的情形。更准确地说，在我们的情形中，与这些狄拉克函数相比，我们有更多的测量泛函，因此空间 $\Phi^\perp$ 小于书中第 15.4.5 节所考虑的空间 [56]。这意味着该节的结果可直接适用，且（D.30）在我们的情形下显然成立。

对于条件（D.31）和（D.32），我们可以假设 $\{\phi_{i,\alpha}, \alpha \in \mathsf{T}_i\} = \{h^{d/2+|\gamma|}\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma, 0 \le |\gamma| \le J\}$，因为这只会使常数 C_0 变大。我们先考虑条件（D.31）。注意，在我们的证明中，C 表示一个通用常数，其值可能因位置而异；我们将说明它所依赖的变量。

考虑单位球 $B(0,1) \subset \mathbb{R}^d$。由于 $J < s - d/2$，Sobolev 嵌入定理表明

$$\sum_{0\le|\gamma|\le J} \|D^\gamma f\|_{L^\infty(B(0,1))} \le C\|f\|_{H^s(B(0,1))}, \tag{D.37}$$

对于任意 $f \in H^s(B(0,1))$，其中 C 是一个依赖于 d 和 s的常数。这意味着

$$\sum_{0\le|\gamma|\le J} |D^\gamma f(0)|^2 \le C\sum_{t=0}^{s} |f|^2_{H^t(B(0,1))}, \tag{D.38}$$

其中 C 依赖于 d，s 和 J。因此，使用变量代换 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i + \delta h\mathbf{x}'$，我们得到

$$\sum_{0\le|\gamma|\le J} h^{2|\gamma|}|D^\gamma f(\mathbf{x}_i)|^2 \le C\sum_{t=0}^{s} \delta^{2t-d}h^{2t-d}|f|^2_{H^t(B(\mathbf{x}_i,\delta h))}. \tag{D.39}$$

我们可以将 δ 吸收到 C 中，并得到

$$\sum_{0\le|\gamma|\le J} h^{d+2|\gamma|}|D^\gamma f(\mathbf{x}_i)|^2 \le C\sum_{t=0}^{s} h^{2t}|f|^2_{H^t(B(\mathbf{x}_i,\delta h))}, \tag{D.40}$$

其中 C依赖于 δ，d，s和 J，对于任意 $f \in H^s(B(\mathbf{x}_i, \delta h))$。现在，利用 $H^s(B(\mathbf{x}_i, \delta h)) \subset H^s_0(\Omega)$ 且 $\{\phi_{i,\alpha}, \alpha \in \mathsf{T}_i\} = \{h^{d/2+|\gamma|}\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma, 0 \le |\gamma| \le J\}$这一事实，我们得到

$$\sum_{\alpha\in\mathsf{T}_i} [f,\phi_{i,\alpha}]^2 \le C\sum_{t=0}^{s} h^{2t}|f|^2_{H^t(B(\mathbf{x}_i,\delta h))}, \tag{D.41}$$

对于任意 $f \in H^s_0(\Omega)$。对所有$\mathbf{x}_i$对应的不等式求和，得到

$$\sum_{1\le i\le Q,\alpha\in\mathsf{T}_i} [f,\phi_{i,\alpha}]^2 \le C\sum_{t=0}^{s} h^{2t}|f|^2_{H^t(\Omega)} \text{ for any } f \in H^s_0(\Omega), \tag{D.42}$$

其中 C 取决于 δ，d，s 和 J。这验证了条件（D.31）。

对于条件（D.32），我们有

$$\begin{aligned} \|\sum_{\alpha\in\mathsf{T}_i} y_\alpha\phi_{i,\alpha}\|_{H^{-s}(\tau_i)} &\ge \|\sum_{\alpha\in\mathsf{T}_i} y_\alpha\phi_{i,\alpha}\|_{H^{-s}(B(\mathbf{x}_i,\delta h))} \\ &= \|\sum_{0\le|\gamma|\le J} y_\gamma h^{d/2+|\gamma|}\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma\|_{H^{-s}(B(\mathbf{x}_i,\delta h))}, \end{aligned} \tag{D.43}$$

这里我们稍作符号上的滥用，将 y_α 记作 y_{γ_α}。

现在，根据定义，我们得到

$$
\begin{aligned}
&\|\sum_{0\le|\gamma|\le J} y_\gamma h^{d/2+|\gamma|}\delta_{\mathbf{x}_i}\circ D^\gamma\|_{H^{-s}(B(\mathbf{x}_i,\delta h))}\\
&=\sup_{v\in H_0^s(B(\mathbf{x}_i,\delta h))}\frac{\sum_{0\le|\gamma|\le J} y_\gamma D^\gamma v(\mathbf{x}_i)h^{d/2+|\gamma|}}{\|v\|_{H_0^s(B(\mathbf{x}_i,\delta h))}}\\
&=\sup_{v\in H_0^s(B(0,1))}\frac{\sum_{0\le|\gamma|\le J} y_\gamma D^\gamma v(0)h^{d/2+|\gamma|}(\delta h)^{-|\gamma|}}{\|v\|_{H_0^s(B(0,1))}(\delta h)^{d/2-s}}\\
&\ge Ch^s\|\sum_{0\le|\gamma|\le J} y_\gamma\delta_0\circ D^\gamma\|_{H^{-s}(B(0,1))},
\end{aligned}
\tag{D.44}
$$

其中 C 是一个依赖于 δ, s 的常数。在第二个等式中，我们使用了坐标变换 $\mathbf{x}=\mathbf{x}_i+\delta h\,\mathbf{x}'$。

现在，由于 $\delta_0\circ D^\gamma$, $0\le|\gamma|\le J$ 线性无关，我们知道存在一个依赖于 d, J 的 C'，使得

$$
\|\sum_{0\le|\gamma|\le J} y_\gamma\delta_0\circ D^\gamma\|_{H^{-s}(B(0,1))}\ge C'C|y| \tag{D.45}
$$

对任意 y 均成立。令 $C_0=C'C$，则条件（D.32）得证。 □

根据命题 D.11 并进行重新缩放，我们可以得到关于未缩放测量的以下结果。

命题 D.12。设假设 2 和 3 成立。考虑 $J\in\mathbb{N}$ 和 $J<s-d/2$。对于每个 $1\le i\le Q$，我们选取 $\{\delta_{\mathbf{x}_i}\}\subset\{\phi_{i,\alpha},\alpha\in\mathsf{T}_i\}\subset\{\delta_{\mathbf{x}_i}\circ D^\gamma,0\le|\gamma|\le J\}$。那么，对于定义 D.8 中的 Gamblets，我们有

$$
|D^\gamma\psi_{i,\alpha}(\mathbf{x})|\le Ch^{-2s}\exp\left(-\frac{\mathrm{dist}(\mathbf{x},\mathbf{x}_i)}{Ch}\right),
$$

对于任意 $1\le i\le Q$, $\alpha\in\mathsf{T}_i$ 以及满足 $|\gamma|<s-d/2$ 的多重指标 γ。这里 C 是一个依赖于 Ω δ, d, s, $\|\mathcal{L}\|$, $\|\mathcal{L}^{-1}\|$, J 的常数。

证明。 根据定理 D.10 和命题 D.11，我们知道

$$
|D^\gamma\psi_{i,\alpha}(\mathbf{x})|\le Ch^{-s}\exp\left(-\frac{\mathrm{dist}(\mathbf{x},\mathbf{x}_i)}{Ch}\right)
$$

当 $\psi_{i,\ \alpha}$ 是与满足 $\{h^{d/2}\delta_{\mathbf{x}_i}\}\subset\{\phi_{i,\alpha},\alpha\in\mathsf{T}_i\}\subset\{h^{d/2+|\gamma|}\delta_{\mathbf{x}_i}\circ D^\gamma,0\le|\gamma|\le J\}$ 的测量泛函相对应的 Gamblet 时，该结论成立。利用 $|\gamma|+d/2\le s$ 这一事实以及 Gamblets 的定义，我们知道，当测量泛函变为 $\{\delta_{\mathbf{x}_i}\}\subset\{\phi_{i,\alpha},\alpha\in\mathsf{T}_i\}\subset\{\delta_{\mathbf{x}_i}\circ D^\gamma,0\le|\gamma|\le J\}$ 时，对应的 Gamblets 将满足

$$
|D^\gamma\psi_{i,\alpha}(\mathbf{x})|\le Ch^{-2s}\exp\left(-\frac{\mathrm{dist}(\mathbf{x},\mathbf{x}_i)}{Ch}\right).
$$

证明完成。 □

Appendix E. Eigenvalue bounds on the kernel matrices

本节旨在给出核矩阵特征值的下界和上界。

命题 E.1. 设假设 2 和 3 成立。考虑 $J \in \mathbb{N}$ 和 $J < s - d/2$。对于每个 $1 \le i \le Q$, 我们选择 $\{\delta_{\mathbf{x}_i}\} \subset \{\phi_{i,\alpha}, \alpha \in \mathrm{T}_i\} \subset \{\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma, 0 \le |\gamma| \le J\}$。令 $\boldsymbol{\phi}$ 为所有 $\phi_{i,\alpha}$, $1 \le i \le Q, \alpha \in \mathrm{T}_i$的集合。设算子 $\mathcal{L}\colon H_0^s(\Omega) \to H^{-s}(\Omega)$ 满足假设 1，并假设核函数为格林函数 $K(\mathbf{x},\mathbf{y}) := [\delta_{\mathbf{x}}, \mathcal{L}^{-1}\delta_{\mathbf{y}}]$。那么，对于核矩阵 $K(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\phi})$，有

$$C_{\max} h^{-d} \mathrm{I} \succeq K(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\phi}) \succeq C_{\min} h^{2s-d} \mathrm{I}\,, \tag{E.1}$$

其中 $C_{\min}$ 是一个常数，取决于 $\delta, d, s, \|\mathcal{L}\|, \|\mathcal{L}^{-1}\|, J$，并且另外还取决于 Ω。I 为单位矩阵。

证明。只需考虑 $\{\phi_{i,\alpha}, \alpha \in \mathrm{T}_i\} = \{\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma, 0 \le |\gamma| \le J\}$ 的情形；其他情形下的核矩阵可视为此处所考虑情形的一个主子矩阵。该主子矩阵的特征值分别可由原始矩阵的最小特征值和最大特征值作为下界和上界。

假设 $K(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\phi}) \in \mathbb{R}^{N\times N}$。对于任意 $y \in \mathbb{R}^N$，根据定义，有

$$y^T K(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\phi}) y = [\sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} \delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma, \mathcal{L}^{-1}(\sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} \delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma)]\,. \tag{E.2}$$

我们先处理最大特征值。由 (E.2)，可得

$$y^T K(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\phi}) y \le \|\mathcal{L}^{-1}\| \| \sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} \delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma \|^2_{H^{-s}(\Omega)}\,.$$

由于假设 $J < s - d/2$，存在一个依赖于 Ω d， J 的常数 C_1，使得

$$\sup_{0\le|\gamma|\le J} \|D^\gamma u\|_{L^\infty(\Omega)} \le C_1 \|u\|_{H_0^s(\Omega)}\,,$$

对于任意 $u \in H_0^s(\Omega)$。这意味着对于任意 $0 \le |\gamma| \le J$ 和 $\mathbf{x}_i \in \Omega$，均有

$$\|\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma\|_{H^{-s}(\Omega)} = \sup_{u\in H_0^s(\Omega)} \frac{|D^\gamma u(\mathbf{x}_i)|}{\|u\|_{H_0^s(\Omega)}} \le C_1\,.$$

因此，可得

$$\begin{aligned}
&\| \sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} \delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma \|_{H^{-s}(\Omega)} \\
\le& \sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} |y_{i,\gamma}| \cdot \|\delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma\|_{H^{-s}(\Omega)} \\
\le& C_1 \sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} |y_{i,\gamma}| \\
\le& C_1 C_J \sum_{1\le i\le Q} |y_i| \le C_1 C_J \sqrt{Q} |y|\,,
\end{aligned} \tag{E.3}$$

其中，在该不等式中，我们使用了三角不等式。在第三个和第四个不等式中，我们使用了柯西-施瓦茨不等式，而 C_J 是一个依赖于 J的常数。这里，我们滥用记号，将 y_i 记作收集$y_{i,\ \gamma}$， $0 \le |\gamma| \le J$的向量。

现在，通过覆盖论证，我们知道 $Q = O(h^{-d})$。因此，结合 (E.3) 和 (E.2)，我们得到

$$y^T K(\phi,\phi) y \le \|\mathcal{L}^{-1}\| C_1^2 C_J^2 Q |y|^2 \le C_{\max} h^{-d} |y|^2 ,$$

其中，$C_{\max}$ 是一个依赖于 Ω δ，d，s，$\|\mathcal{L}\|$，$\|\mathcal{L}^{-1}\|$，J 的常数。我们如期得到了 $K(\phi,\phi)$ 的最大特征值上界。

对于最小特征值，再次利用 (E.2)，我们有

$$y^T K(\phi,\phi) y \ge \|\mathcal{L}\|^{-1} \| \sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} \delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma \|^2_{H^{-s}(\Omega)} .$$

现在，我们将使用以下事实

$$\|w\|^2_{H^{-s}(\Omega)} = \sup_{v\in H^s_0(\Omega)} 2\int wv - \|v\|^2_{H^s_0(\Omega)}$$

对于任意 $w \in H^{-s}(\Omega)$；注意，此处应将 $\int wv$ 理解为 $H^{-s}(\Omega)$ 与 $H^s(\Omega)$ 之间的对偶配对。为说明这一事实为何成立，我们记 $\tilde{w}$ 为 w 在 $H^s_0(\Omega)$ 中的黎斯表示元，因此有 $\int wv = \langle \tilde{w}, v\rangle_{H^s_0(\Omega)}$ 其中 $\langle\cdot,\cdot\rangle_{H^s_0(\Omega)}$ 是 $H^s_0(\Omega)$ 上的内积，且 $\|w\|_{H_0^{-s}(\Omega)} = \|\tilde{w}\|_{H^s_0(\Omega)}$。于是，很容易推出，上确界在 $v = \tilde{w}$ 处取得，最优值为左侧的 $\|w\|^2_{H^{-s}(\Omega)}$。

利用上述事实，我们得到

(E.4)
$$\| \sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} \delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma \|^2_{H^{-s}(\Omega)} = \sup_{v\in H^s_0(\Omega)} 2 \sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} D^\gamma v(\mathbf{x}_i) - \|v\|^2_{H^s_0(\Omega)} .$$

将 $v \in H^s_0(\Omega)$ 限制到 $v = \sum_{1\le i\le Q} v_i$，其中每个 $v_i \in H^s_0(B(\mathbf{x}_i, \delta h))$，我们得到

$$\begin{aligned} &\sup_{v\in H^s_0(\Omega)} 2 \sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} D^\gamma v(\mathbf{x}_i) - \|v\|^2_{H^s_0(\Omega)} \\ &\ge \sum_{1\le i\le Q} \left(\sup_{v_i\in H^s_0(B(\mathbf{x}_i,\delta h))} 2 \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} D^\gamma v_i(\mathbf{x}_i) - \|v_i\|_{H^s_0(B(\mathbf{x}_i,\delta h))} \right) \\ &= \sum_{1\le i\le Q} \| \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} \delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma \|^2_{H^{-s}(B(\mathbf{x}_i,\delta h)} , \end{aligned} \tag{E.5}$$

其中，在第一个不等式中，我们利用了球 $B(\mathbf{x}_i, \delta h)$ $1 \le i \le Q$ 两两不相交这一事实。

由 (D.44) 和 (D.45)，我们知道

$$\| \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} h^{d/2+|\gamma|} \delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma \|_{H^{-s}(B(\mathbf{x}_i,\delta h))} \ge C h^s |y_i| , \tag{E.6}$$

对于某个常数 C，其取决于 δ，d，s，J。这里我们再次将 y_i 记作由 $y_{i,\gamma}$，$0 \le |\gamma| \le J$ 收集而成的向量。通过变量代换，上述不等式意味着

$$\| \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma} \delta_{\mathbf{x}_i} \circ D^\gamma \|_{H^{-s}(B(\mathbf{x}_i,\delta h))} \ge C h^{s-d/2} |y_i| , \tag{E.7}$$

对于依赖于 δ 的某个常数 C，d，s，J。

结合 (E.4)、(E.5) 和 (E.7)，我们得到

$$\| \sum_{1\le i\le Q} \sum_{0\le|\gamma|\le J} y_{i,\gamma}\delta_{\mathbf{x}_i}\circ D^\gamma\|^2_{H^{-s}(\Omega)} \ge Ch^{2s-d}|y|^2 . \tag{E.8}$$

由 (E.2)，可得

$$y^T K(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\phi})y \ge C\|\mathcal{L}\|^{-1}h^{2s-d}|y|^2 . \tag{E.9}$$

证明完毕。 □

Courant Institute, New York University, NY 10012, Corresponding author
Email address: yifan.chen@nyu.eduApplied and Computational Mathematics, Caltech, Pasadena, CA 91106*Email address*: owhadi@caltech.edu

School of Computational Science and Engineering Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA 30332
Email address: florian.schaefer@cc.gatech.edu