数学　有界区域中配准方法的数学方面

Angelo Iollo、Jon Labatut、Pierre Mounoud、Tommaso Taddei

2026年1月7日

摘要

有界区域中的配准方法在模型降阶文献中受到了广泛关注，是一种有价值的非线性逼近工具。本文旨在从参数化模型降阶的角度，对 n 维区域中的配准方法相关成果进行简明而全面的综述。我们深入分析两类方法——向量流和复合映射：讨论如何施加双射约束，并评述这两类方法在利普希茨 n 维区域上的逼近性质。

arXiv:2601.03010v1 [math.NA] 6 Jan 2026

1 引言

过去几十年来，配准方法在科学计算领域受到了广泛关注。在计算机视觉和模式识别中，配准指的是寻找一种空间变换，使两个数据集对齐 [6, 20, 26]。配准技术与网格自适应中的变形技术 [22] 以及计算流体力学中的激波追踪方法 [33, 40] 具有重要的共同特征。近年来，配准方法在模型降阶（MOR）领域也受到了广泛关注：在这一背景下，人们提出了配准技术，以寻找一种参数化变换，从而提高与给定参数化偏微分方程（PDE）相关的解集的可压缩性 [5, 11, 16, 24, 35]。用于模型降阶的配准技术应准确保留区域几何，以便正确施加边界条件；此外，还应满足离线/在线 计算分解对计算资源和内存的要求。

我们用 Ω 表示 $\mathbb{R}^n$ 中的一个 Lipschitz 有界域。引入微分同胚集合 $\mathrm{Diff}(\Omega)$：若函数 $\Phi : \Omega \to \mathbb{R}^n$ 属于 $\mathrm{Diff}(\Omega)$，则它在边界处具有 C^1 类正则性，并且在 Ω 中是双射（一一对应且满射）。对于模型降阶应用，给定参数空间 $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^{n_\mu}$，我们关注参数化微分同胚 $\Phi : \Omega \times \mathcal{P} \to \Omega$，它们满足 (i) 对所有 $\mu \in \mathcal{P}$，$\Phi(\cdot, \mu) \in \mathrm{Diff}(\Omega)$，以及 (ii) Φ 关于参数连续。若引入参数化目标（或匹配）函数 $\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}} : C(\Omega; \mathbb{R}^n) \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$，那么配准的基于优化的 [36]或变分 [4] 方法旨在寻找一个参数化双射，使其近似最小化

$$\min_{\Phi \in \mathrm{Diff}(\overline{\Omega})} \mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}(\Phi; \mu), \tag{1}$$

对所有参数 $\mu \in \mathcal{P}$ 均成立。对于模型降阶，$\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}$ 应由我们希望追踪的解场相关特征来确定；在图像配准中，$\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}(\Phi; \mu)$衡量目标对象与变形后的参考对象之间的差异——我们在第 2 节给出两个实用的目标函数示例。

由于 $\mathrm{Diff}(\Omega)$ 是无限维的，配准技术的出发点是确定一种便于计算的有效有限维参数化。为此，我们引入函数 $\mathtt{N} : \mathbb{R}^M \to \mathrm{Lip}(\Omega; \mathbb{R}^2)$ 和惩罚函数 $\mathfrak{f}_{\mathrm{pen}} : \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}_+$，使得

$$\begin{cases} \mathcal{B}_{\mathtt{N}} = \left\{ \mathtt{N}(\mathbf{a}) \ : \ \mathbf{a} \in \mathbb{R}^M, \ \mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(\mathbf{a}) \le C \right\} \subset \mathrm{Bij}(\overline{\Omega}), \quad \text{for some } C > 0; \\ \mathtt{N}(\mathbf{a} = 0) = \mathtt{id}, \ \ \mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(\mathbf{a} = 0) < C; \\ \mathtt{N}, \ \mathfrak{f}_{\mathrm{pen}} \text{ are Lipschitz continuous.} \end{cases} \tag{2}$$

这里，$\mathrm{Bij}(\overline{\Omega})$ 指 Ω 中双射的集合。然后，我们引入 (1) 的替代形式

$$\min_{\mathbf{a} \in \mathbb{R}^M} \mathfrak{f}_\mu^{\mathrm{tg}}(\mathtt{N}(\mathbf{a})) \text{ s.t. } \ \mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(\mathbf{a}) \le C, \tag{3}$$

可使用标准优化技术（例如内点法）求解。为进一步简化优化任务，我们还可以考虑对式（3）进行蒂霍诺夫正则化，

$$\min_{\mathbf{a} \in \mathbb{R}^M} \mathfrak{f}_\mu^{\mathrm{obj}}(\mathbf{a}) := \mathfrak{f}_\mu^{\mathrm{tg}}(\mathtt{N}(\mathbf{a})) \ + \lambda \, \mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(\mathbf{a}), \tag{4}$$

其中应适当调节超参数 $\lambda > 0$，以确保满足双射约束。

不同的配准技术因对映射对 (N $\mathfrak{f}_{\text{pen}}$) 的选择而有所不同。第一类配准策略基于伪速度场 $v = v$(a) 的参数化，并将 N(a) 定义为向量场 v(a) 的流。第二类策略则利用位移场的直接参数化：为处理曲域，这些策略引入了一个从 Ω 到具有分段线性边界的区域 Ω_{P} 的变换。下文将第一类映射称为向量流 （VFs），将第二类映射称为复合映射 （CMs）。

VFs 的发展得益于最优传输 [28, 32]领域近期取得的进展。自 Christensen [9] 和 Beg [4], 的奠基性工作以来，VFs 已被广泛用于图像配准任务 [34]; VF 映射也被应用于网格自适应 [12], 、几何降阶 [18], 以及 [15, 19]中的模型降阶。特别是，Labatut [19] 的工作明确探讨了如何恰当地表示区域的边界，适用于二维和三维几何体。另一方面，复合映射最初在 [35, 36],的模型降阶文献中被引入，随后在 [23, 31]中得到进一步发展和应用。

本文旨在从参数化模型降阶的角度，介绍用于配准的速度场和复合映射的关键数学性质。最终目标是以严谨的数学方式比较参数化配准领域的先进技术。我们还希望找出现有技术的关键局限，为该领域未来的研究提供启发。最后，我们考察了速度场和复合映射的若干模态展开的性质：此处的目标是先验地降低配准问题的维数。

对速度场的分析利用了众所周知的结果（例如，参见 [39]）：与 [39], 不同，我们在此针对有限维情形陈述这些结果，并详细讨论近似问题（参见命题 3.3）。另一方面，关于复合映射的结果是新的，并将 [36] 的分析扩展至 n 维几何。这些结果为全面比较这两类方法奠定了严谨的基础。最后，关于基的选择的讨论是原创性的。

本文结构如下。第 2 节介绍用于配准的速度场和复合映射，并给出两个目标函数的实际示例；第 3 节陈述本文的理论结果，并详细讨论这两种策略。第 4 节讨论速度场和复合映射的模态展开生成方法，并通过数值实验评估模态基在一个典型测试案例中的精度。第 5 节证明第 3 节的结果。附录给出补充证明，这些证明要么曾在以往工作中的不同背景下出现，要么是众所周知结果的直接推论。

2 公式化

本节讨论两种在有界区域中有效参数化微分同胚的策略：向量流（速度场）和复合映射。给定利普希茨连通区域 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$，记$\mathbf{n}: \partial\Omega \to \mathbb{S}^2 = \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\|_2 = 1\}$ 为外单位法向量，并以 C^k(Ω;$\mathbb{R}^n$) 表示取值于 $\mathbb{R}^n$、直至边界均为 k 次可微函数的空间。记 $\mathcal{U}_0$ 为 C^1 法向位移等于零的向量场子空间，

$$\mathcal{U}_0 := \left\{\varphi \in C^1(\overline{\Omega};\mathbb{R}^n) : \varphi \cdot \mathbf{n}\big|_{\partial\Omega} = 0\right\},$$

我们进一步引入时变场空间

$$\mathcal{V}_0 := \{v \in C^1(\overline{\Omega} \times [0,1];\mathbb{R}^n) : v(\cdot,t) \cdot \mathbf{n}\big|_{\partial\Omega} = 0 \ \ \forall\, t \in [0,1]\}$$

下文中，id : Ω → Ω 表示恒等映射，id(x) = x，而 $\mathbb{1} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是单位矩阵。对于 Lipschitz 区域，法向量几乎处处（a.e.）有定义（参见拉德马赫定理 [41]）；因此，条件 $\varphi \cdot \mathbf{n}\big|_{\partial\Omega} = 0$ 和 $v(\cdot,t) \cdot \mathbf{n}\big|_{\partial\Omega} = 0$ 也应按几乎处处的意义理解。最后，我们介绍 $\mathbb{R}^n$ 中的一类重要微分同胚，它们对讨论至关重要。

定义 2.1. *[3]*设 Φ 是 *Lipschitz* 域Ω ⊂ $\mathbb{R}^n$上的一个微分同胚。若存在一个光滑向量场（同伦） X : Ω × [0, 1] → $\mathbb{R}^n$，使得 *(i)* $X(,0)$ = id，*(ii)*$X(,1)$ = Φ，*(iii)* 对所有 $t \in [0,1]$，映射 $X(,t) \in$ Diff(Ω)；*(iv)* 对所有 $t \in [0,1]$，映射 $\partial_t X(,t) \in C^1$(Ω)，则称 Φ 与恒等映射同伦。我们用 Diff_0(Ω) 表示与恒等映射同伦的微分同胚子集。

如下文所述（参见命题 3.4 和 3.9），我们可以轻松构造不属于 Diff_0(Ω) 的微分同胚；然而，对于模型降阶应用，Diff_0(Ω) 构成了相关的微分同胚集合。给定参数域 $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^{n_\mu}$，在模型降阶中，我们寻求参数化映射 Φ : Ω × $\mathcal{P}$ → Ω，使得对所有–$\mu \in \mathcal{P}$ [35]， Φ(·, μ) : Ω → Ω 都是微分同胚。利用定义 2.1，我们可以很容易地证明，如果 (i) $\mathcal{P}$ 是连通的，(ii) 对某个 $\mu' \in \mathcal{P}$， Φ(·, μ') 等于恒等映射，且 (iii) Φ 是关于参数连续的

那么对于所有 $\mu \in \mathcal{P}$，必有 $\Phi(\cdot,\ \mu) \in \mathrm{Diff}_0(\Omega)$。这一观察表明，这一微分同胚子集对于模型降阶应用具有实际意义。

在本文中，我们考虑延伸至 Ω 边界的微分同胚：在科学计算中，确保 Ω 的边界映射到自身十分重要，这样才能正确施加边界条件。请注意，我们可以轻易构造出属于 $\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 的微分同胚，它们无法延拓至 Ω 内，如下一个注释所示。

注释 2.1。 我们给出一个属于 $\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 且无法延拓至 Ω 的微分同胚示例。考虑 $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 :\ \|x\|_2 < 1\}$ 并定义函数 $\Phi : \Omega \to \Omega$，使得

$$\Phi(\xi) = r \begin{bmatrix} \cos(\theta + \phi(r)) \\ \sin(\theta + \phi(r)) \end{bmatrix} \quad \text{with } r = \|\xi\|_2,\ \ \theta = \arctan_2(\xi),$$

并且 二元反正切$_2 : \mathbb{R}^2 \to (-\pi, \pi]$ 是二元反正切函数，而 $\phi : [0,1)$ 是一个 $C^\infty(0,1)$ 函数，使得$\phi(r) = 0$ 对于 $r < 1/2$，且 $\lim_{r\to 1} \phi(r) = +\infty$。由于 $\phi \equiv 0$ 在 $r = 0$的一个邻域内，我们得出 Φ 在 $\xi = 0$ 的一个邻域内是恒等映射，因此它在 Ω 上属于 C^1 类。我们还注意到，Φ 是将半径为 r 的每个圆双射到其自身；因此，$\Phi \in$Diff(Ω)。此外，

$$X(\xi, t) = r \begin{bmatrix} \cos(\theta + t\phi(r)) \\ \sin(\theta + t\phi(r)) \end{bmatrix},$$

是从恒等映射到 Φ 的同伦；由此我们得出 $\Phi \in \mathrm{Diff}_0(\Omega)$。然而，对于任何$x \in \partial\Omega$，$\Phi$ 都不存在极限；因此，它无法连续延拓至 Ω。

2.1 用于配准的向量流

设 $v : \overline{\Omega} \times [0,1] \to \mathbb{R}^n$ 满足 $v \in C(\overline{\Omega} \times [0,1];\ \mathbb{R}^n)$，且对于所有 $t \in [0,1]$，$v(\cdot, t) \in C^1(\Omega;\ \mathbb{R}^n)$，并且 $v(\cdot, t) \cdot \mathbf{n}\big|_{\partial\Omega} = 0$。那么，我们称 $X : \Omega \times [0,1] \to \Omega$ 为向量场 v 的流，若

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t}(\xi, t) = v(X(\xi, t), t) \quad t \in (0,1], \\ X(\xi, 0) = \xi, \end{cases} \qquad \forall\, \xi \in \overline{\Omega}. \tag{5}$$

此外，我们定义 $F[v] : \Omega \to \overline{\Omega}$ 使得 $F[v](\xi) := X(\xi, t = 1)$。在这种方法中，我们寻求如下形式的微分同胚：

$$\mathtt{N}(\xi; \mathbf{a}) := F[v(\mathbf{a})](\xi), \quad \text{where } v(x, t; \mathbf{a}) = \sum_{i=1}^{M} (\mathbf{a})_i \phi_i(x, t), \tag{6}$$

其中 $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^M$ 是系数向量，而 $\phi_1 \ldots, \phi_M \in \mathcal{V}_0(\Omega)$ 线性无关。

2.2 用于配准的复合映射

与速度场不同，复合映射依赖于位移场的参数化。我们区分两种情形。如果 Ω 是多胞体（即，当 $n = 2$ 时为多边形，或当 $n = 3$ 时为多面体），我们定义

$$\mathtt{N}(\xi; \mathbf{a}) = \xi + \sum_{i=1}^{M} (\mathbf{a})_i \varphi_i(\xi), \tag{7}$$

其中 $\varphi_1 \ldots, \varphi_M \in \mathcal{U}_0(\Omega)$ 线性无关。对于一般曲域，我们引入与 Ω 同构的多胞体 Ω_P，以及利普希茨双射 $\Psi : \Omega_\mathrm{p} \to \Omega$。然后，我们定义 CM 试探形式：

$$\mathtt{N}(\mathbf{a}) = \Psi \circ \mathtt{N}_\mathrm{p}(\mathbf{a}) \circ \Psi^{-1}, \qquad \mathtt{N}_\mathrm{p}(\xi; \mathbf{a}) = \xi + \sum_{i=1}^{M} (\mathbf{a})_i \varphi_i(\xi), \tag{8}$$

其中 $\varphi_1 \ldots, \varphi_M \in \mathcal{U}_0(\Omega_\mathrm{P})$ 线性无关。关于映射 Ψ 的构造以及用于二维区域的多胞体 Ω_P，我们参见 [36] 的详尽讨论：向三维域的扩展仍是当前的研究课题。

2.3 代表性目标函数

我们给出两个实用的目标函数示例，它们既用于图像配准（例如参见 [39]），也用于模型降阶 [36]。具体而言，第一个目标函数用于 [35, 36] 中的模型降阶，并推广了 [4] 中用于图像配准的目标函数；第二个目标函数则广泛用于点集配准 [26]。

给定向量场 $u \in H^1(\Omega;\mathbb{R})$ 和 N 维线性空间 $\mathcal{Z}_N \subset L^2(\Omega;\mathbb{R})$，我们引入分布式目标函数：

$$\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}_{(1)}(\Phi) = \min_{\zeta\in\mathcal{Z}_N} \frac{1}{2}\int_\Omega (u\circ\Phi(\xi) - \zeta(\xi))^2\, d\xi. \tag{9}$$

线性空间 $\mathcal{Z}_N$ 编码了我们对目标的了解，并可使用 [37] 中介绍的自适应算法构建。

给定点集 $\{\xi_i\}_{i=1}^{N_0}$ 和 $\{y_j\}_{j=1}^{N_1}$，以及权重矩阵$\mathbf{P} = [P_{i,j}]_{i,\,j} \in \mathbb{R}^{N_1\times N_0}$使得 $P_{i,\,j}\in[0,1]$，且$\sum_j P_{i,\,j} = 1$，并且对于所有 $i = 1,\ldots\ldots, N_0$ 和 $j = 1,\ldots\ldots, N_1$，都有$\sum_i P_{i,\,j} = 1$，我们引入逐点目标函数：

$$\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}_{(2)}(\Phi) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N_0}\sum_{j=1}^{N_1} P_{i,j}\left\|\Phi(\xi_i) - y_j\right\|_2^2; \tag{10}$$

如 [26] 中所述，权重$\{P_{i,j}\}_{i,\,j}$描述点 ξ_i 被映射到点 y_j的可能性，并通过期望最大化（EM）过程进行自适应选择。

3 数学分析

3.1 极小值的存在性

我们引入带范数 $\|\cdot\|_V$ 的巴拿赫空间 $V \subset C(\Omega;\mathbb{R}^n)$。我们假设（6）中的向量场的限制 $\phi_1(\cdot,t=1)\ldots,\phi_M(\cdot,t=1)$ 属于 V；类似地，我们假设（7）中的 $\varphi_1,\ldots,\varphi_M$ 属于 V。最后，我们假设（1）中的目标函数 $\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}$ 关于 V 是 Fr´echet 可微的。回顾一下，$\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}$ 在 V 中 Fr´echet 可微，是指对于所有 $\Phi\in V$，存在一个线性连续算子 $D\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}[\Phi]: V\to\mathbb{R}$，使得

$$\lim_{\|h\|_V\to 0} \frac{\left|\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}[\Phi+h] - \mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}[\Phi] - D\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}[\Phi](h)\right|}{\|h\|_V} = 0. \tag{11}$$

注意，任何 Fr´échet 可微函数都是连续的；此外，如果 $\mathbf{a}\in\mathbb{R}^M \mapsto \mathtt{N}(\mathbf{a})\in V$ 可微，我们可以应用链式法则，推导出 E 的导数表达式：$\mathbf{a}\mapsto \mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}(\mathtt{N}(\mathbf{a}))$，

$$\frac{\partial E}{\partial a_i}(\mathbf{a}) \;=\; D\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}\left[\mathtt{N}(\mathbf{a})\right]\left(\frac{\partial \mathtt{N}}{\partial a_i}(\mathbf{a})\right), \quad i = 1,\ldots,M. \tag{12}$$

容易验证，(9) 和 (10) 在 $V = \mathrm{Lip}(\Omega;\mathbb{R}^n)$ 中 Fr´echet 可微。经过繁琐但直接的计算，我们确实可以得到 (9) 和 (10) 的 Fr´echet 导数的以下显式表达式：

$$\begin{aligned} D\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}_{(1)}[\Phi](h) &= \int_\Omega (u\circ\Phi(\xi) - \zeta_\Phi)\nabla u\circ\Phi(\xi) h(\xi)\; d\xi, \\ D\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}_{(2)}[\Phi]\,(h) &= \sum_{i=1}^{N_0}\left(\Phi(\xi_i) \;- \sum_{j=1}^{N_1} P_{i,j}\, y_j\right)\cdot h(\xi_i), \end{aligned} \tag{13}$$

其中 $\zeta_\Phi := \arg\min_{\zeta\in\mathcal{Z}_N}\int_\Omega (u\circ\Phi(\xi) \;-\zeta(\xi))\; d\xi$ 是 $u\circ\Phi$ 在 $\mathcal{Z}_N$上的投影。

下一个结果表明，在对惩罚项 $\mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}$ 和目标函数 $\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}$作出合理假设的条件下，问题 (4) 存在极小化子$\mathbf{a}^\star\in\mathbb{R}^M$。注意，(4) 的解不一定唯一。

命题 3.1. 假设$\mathtt{N}$ 和 $\mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}$ 满足(2)。此外，假设 *(i)* $E := \mathbf{a}\mapsto \mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}(\mathtt{N}(\mathbf{a}))$ 是 *Lipschitz*连续且下有界的，并且 *(ii)* $\lim_{\|\mathbf{a}\|_2\to\infty} \mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(\mathbf{a}) = +\infty$。那么，*(4)* 中的函数$\mathbf{a}\mapsto \mathfrak{f}^{\mathrm{obj}}(\mathbf{a})$ 具有在 $\mathbb{R}^M$中的一个最小值。

证明。 该结果是魏尔斯特拉斯定理的直接推论；参见 A 节。 □

3.1.1 梯度下降过程的应用

利用上述讨论，我们可能会想直接使用梯度下降技术来寻找（4）的一个局部最小值（为简化记号，我们省略惩罚项），

$$\mathbf{a}^{(k+1)} = \mathbf{a}^{(k)} - \gamma^{(k)} \nabla E(\mathbf{a}^{(k)}), \quad k = 1, 2, \dots \tag{14}$$

对于步长 $\gamma^{(k)} \in (0, 1]$ 的适当选择。我们通过经验发现，更新式（14）在实践中表现不佳：因此，我们应寻找适当的预条件器，以加快收敛。为此，我们利用式（4）的变分形式。下文中，我们仅考虑速度场；不过，同样的推理也适用于复合映射。

我们引入约化空间 $\mathcal{W}_M =$ 张成空间$\{\phi_i\}_{i=1}^M$ 以及带有内积 $(\cdot,\cdot)_H$ 和对偶配对 $\langle\cdot,\cdot\rangle_H$ 的希尔伯特空间 $H \subset \mathcal{V}_0(\Omega)$。给定速度场 $v, h \in \mathcal{W}_M$，我们将相应的系数向量记为 $\mathbf{a}, \mathbf{h} \in \mathbb{R}^M$，即 $v = \sum_i (\mathbf{a})_i \phi_i$ 和 $h = \sum_i (\mathbf{h})_i \phi_i$；接下来，我们将式（4）重述为

$$\min_{v \in \mathcal{W}_M} \widetilde{\mathfrak{f}}^{\mathrm{tg}}(v) := \mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}(\mathtt{N}(\mathbf{a})). \tag{15}$$

接下来，我们观察到

$$D\widetilde{\mathfrak{f}}^{\mathrm{tg}}[v](h) := \frac{1}{\epsilon} \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\widetilde{\mathfrak{f}}^{\mathrm{tg}}(v + \epsilon h) - \widetilde{\mathfrak{f}}^{\mathrm{tg}}(v)}{\epsilon} = \nabla E(\mathbf{a}) \cdot \mathbf{h},$$

对于所有 $v = \sum_{i=1}^M (\mathbf{a})_i \phi_i, h = \sum_{i=1}^M (\mathbf{h})_i \phi_i \in \mathcal{W}_M$。 I

n [27], the aut h$^{\text{or cons}}$ id$^{\text{ers a var}}$ iational 式（15）的梯度下降技术（14）的对应形式：

$$(v^{(k+1)}, \phi)_H = (v^{(k)}, \phi)_H - \gamma^{(k)} D\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}[v^{(k)}](\phi), \quad k = 1, 2, \dots, \qquad \forall\, \phi \in \mathcal{W}_M.$$

如果引入矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times M}$ 使得 $(\mathbf{A})_{i,\ j} = (\phi_j, \phi_i)_H$ 对于 $i, j = 1, \dots, M$，后者对应于代数更新中

$$\mathbf{a}^{(k+1)} = \mathbf{a}^{(k)} - \gamma^{(k)} \mathbf{A}^{-1} \left(\nabla E(\mathbf{a}^{(k)}) \right), \quad k = 1, 2, \dots. \tag{16}$$

我们注意到，(16) 关键取决于内积 $(\cdot,\cdot)_H$ 的选择，但与 $\mathcal{W}_M$的基的选择无关。在 [19], 以下， [4], Labatut 考虑 $\mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(v) = \frac{1}{2}\|\mathcal{K}v\|^2_{L^2(\Omega)}$ 以及 $(\cdot,\cdot)_H = (\mathcal{K}\cdot, \mathcal{K}\cdot)_{L^2(\Omega)}$，其中 $\mathcal{K}$ 是一个适当的微分算子，可确保 $H \subset \mathcal{V}_0(\Omega)$。我们还注意到，对于 H- $\mathcal{W}_M$的正交归一基，(14) 和 (16) 是一致的。

3.2 向量流的双射性和逼近性质

我们对速度场的性质进行了全面的数学分析；证明利用了数学分析和变分法中的众所周知的结果，并在附录 B 中给出。命题 3.2 表明，对于任意 $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^M$，速度场 N(a) (6) 是一个微分同胚：因此， ansatz (6) 无需引入惩罚函数即可满足 (2)。

命题 3.2。 设Ω 是一个有界*Lipschitz*区域，且 $v \in \mathcal{V}_0(\Omega)$。定义 $\Phi : \Omega \to \mathbb{R}^n$ 使得$\Phi = F[v]$。那么， Φ 是Ω上的微分同胚（一一对应且满射）。

命题 3.3 表明，$\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 中的任意元素都可以表示为 $\mathcal{V}_0(\Omega)$ 中某个向量场的流：这意味着，如果序列 $\phi_1, \dots, \phi_M, \dots$ 构成 $\mathcal{V}_0$ 的一组基，则对于 $M \to \infty$，VF 设定 (6) 在 $\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 中稠密 —— 更精确的表述见命题 3.5。因此，我们发现，未正则化问题 $\min_{\mathbf{a} \in \mathbb{R}^M} \mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}_\mu(\mathrm{N}(\mathbf{a}))$ 收敛于 $\min_{\Phi \in \mathrm{Diff}_0(\Omega)} \mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}_\mu(\Phi)$，当 $M \to \infty$ 时。

命题 3.3。 设Ω 是一个 *Lipschitz* 域，且 $\Phi \in \mathrm{Diff}_0(\Omega)$。那么，存在 $v \in \mathcal{V}_0(\Omega)$ 使得$\Phi = F[v]$。

下一个结果表明，速度场的雅可比行列式在 Ω 中严格为正。我们指出，命题 3.4 是微分几何中的一个著名结果，在连续介质力学中具有重要意义（例如参见[21, 命题 5.4，第 1]章）。注意，在（17）中，我们使用符号 ∇_x 表示速度场 $v = v(x,\ t)$ 的导数。最后，我们注意到，命题 3.4 提供了一种构造 $\mathrm{Diff}(\Omega) \setminus \mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 中元素的方法：设 Ω 为以原点为中心的三维单位球，并考虑满足 $\Phi(\xi) = -\xi$ 的映射 $\Phi : \Omega \to \Omega$。通过检查可验证， Φ 是一个微分同胚；然而， $J = \det(\nabla\Phi) = -1 < 0$。由此得出， $\Phi \in \mathrm{Diff}(\Omega) \setminus \mathrm{Diff}_0(\Omega)$。对于二维域，只需考虑 $\Phi(\xi) = \mathrm{vec}(\xi_1,\ -\xi_2)$。

命题 3.4. 设Ω 为一个 *Lipschitz* 域，并设 $v \in \mathcal{V}_0(\Omega)$。用 X 表示向量场 $v(5)$的流。则雅可比行列式 $J(\xi, t) := \det(\nabla X(\xi, t))$ 满足 $J(\xi, t = 0) = 1$ 并且

$$\frac{\partial}{\partial t} \log J(\xi, t) = \nabla_x \cdot v(X(\xi, t), t), \tag{17}$$

这意味着

$$J(\xi,t)=\exp\left(\int_0^t \nabla_x\cdot v(X(\xi,s),s)\,ds\right),\qquad \xi\in\Omega, t\in[0,1].$$

后者意味着 J 在Ω中严格为正（也就是说，Φ 保向）。

本节最后回顾一下，流连续依赖于数据。这里，我们依赖于针对利普希茨速度场的柯西-利普希茨定理：通过迪佩尔纳-利昂斯理论 [13]，可以将分析推广到正则性显著较低的输运场。

命题 3.5. 设 $v,w\in\mathcal{V}_0(\Omega)$，并令 L 为速度 v的 *Lipschitz* 常数。那么，我们有

$$\|F[v]-F[w]\|_{L^\infty(\Omega)}\le\frac{e^L-1}{L}\|v-w\|_{L^\infty(\Omega\times(0,1))}. \tag{18}$$

命题 3.5 对数值近似至关重要。给定 $\Phi=F[v]\in \mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 和近似空间 $\mathcal{W}_M:=\mathrm{span}\{\phi_i\}_{i=1}^M\subset\mathcal{V}_0(\Omega)$，我们得到

$$\inf_{\mathbf{a}\in\mathbb{R}^M}\|\Phi-\mathtt{N}(\mathbf{a})\|_{L^\infty(\Omega)}\le\frac{e^L-1}{L}\inf_{\phi\in\mathcal{W}_M}\|v-\phi\|_{L^\infty(\Omega\times(0,1))}, \tag{19}$$

其中，$v\in\mathcal{V}_0(\Omega)$ 是与 Φ 对应的速度场，即 $\Phi=F[v]$；而 $L=L(v)>0$ 是相应的 Lipschitz 常数。注意，（19）中的乘法常数不依赖于 $\mathcal{W}_M$ 中各元素的 Lipschitz 常数。

3.3 目标函数梯度的计算

鉴于基于梯度的方法在 (4) 中的应用，我们给出 M 维函数 $E:\mathbf{a}\mapsto \mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}(\mathtt{N}(\mathbf{a}))$ 的梯度的显式表达式。首先指出，我们的分析利用了$\mathbf{a}$ 是有限维的这一事实：关于推广到无限维情形，请参阅 [39, Theorem 8.10] and [30] 。

命题 3.6。 *VF* (6) 关于系数$\mathbf{a}$ 的导数为：

$$\frac{\partial\mathtt{N}}{\partial a_i}(\xi;\mathbf{a})=\nabla X(\xi,1;\mathbf{a})\int_0^1\left(\nabla X(\xi,\tau;\mathbf{a})\right)^{-1}\phi_i\left(X(\xi,\tau;\mathbf{a}),\tau\right)\,d\tau, \tag{20}$$

对于 $i=1,\ldots,M.$，将(20) 代入(12)，即可得到 E 的导数。

计算 (12) 需要求解非线性常微分方程组 (5)，以及求解 n^2 个线性常微分方程组来计算 ∇X （显式公式见方程 (37)）。另一种方法已广泛应用于偏微分方程约束优化（例如参见 [17, 29]），也应用于图像配准 [30], ；该方法依赖于求解伴随方程。第二种方法只需要额外求解 n 个线性常微分方程组。接下来的结果给出了上述两个目标函数对应的伴随方法表达式：请注意，使用伴随方法计算梯度，需要求解一个非线性正向问题来计算 X （参见 (5)），求解 n 个线性反向问题（参见 (21b) 和 (22b)）来计算 Λ，以及进行一次简单的函数求值（参见 (21a) 或 (22a)）。

命题 3.7. 考虑 $\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}=\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}{}_{(1)}$ 在 (9) 中，并令 $\Psi(\cdot;\mathbf{a}):=\big(u\circ\mathtt{N}(\mathbf{a})\ -\zeta_\Phi(\mathbf{a})\big)\nabla_x u\circ\mathtt{N}(\mathbf{a})$ （参见(13)）。那么，

$$\frac{\partial E}{\partial a_k}(\mathbf{a})=\int_{\Omega\times(0,1)}\Lambda(\xi,t;\mathbf{a})\cdot\phi_k\left(X(\xi,t;\mathbf{a}),t\right)\,d\xi dt,\quad k=1,\ldots,M, \tag{21a}$$

其中，伴随 $\Lambda(\mathbf{a}):\Omega\times[0,1]\to\mathbb{R}^n$ 满足：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial\Lambda}{\partial t}(\xi,t;\mathbf{a})=-\nabla_x v\left(X(\xi,t),t;\mathbf{a}\right)^\top\Lambda(\xi,t;\mathbf{a})\quad t\in(0,1),\\ \Lambda(\xi,1;\mathbf{a})=\Psi(\xi;\mathbf{a})\end{cases}\qquad\forall\xi\in\Omega。 \tag{21b}$$

考虑 $\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}=\mathfrak{f}^{\mathrm{tg}}{}_{(2)}$。那么，我们得到

$$\frac{\partial E}{\partial a_k}(\mathbf{a})\ =\ \sum_{i=1}^{N_0}\int_0^1\Lambda_i(t;\mathbf{a})\ \cdot\ \phi_k\left(X(\xi_i,t;\mathbf{a})\right)\,dt,\quad k=1,\ldots,M; \tag{22a}$$

其中，时变函数 $\Lambda_1(\mathbf{a})$ ...， $\Lambda_{N_0}(\mathbf{a}):\ [0,1]\to\mathbb{R}^n$ 满足：

$$\begin{cases}\dfrac{d\Lambda_i}{dt}(t;\mathbf{a})\ =\ -\nabla_x v\left(X(\xi_i,t),t;\mathbf{a}\right)^\top\ \Lambda_i(t;\mathbf{a})\quad t\in(0,1),\\ \Lambda_i(1;\mathbf{a})\ =\ \mathtt{N}(\xi_i;\mathbf{a})-\displaystyle\sum_{j=1}^{N_1}P_{i,j}y_j\end{cases}\qquad i=1,\ldots,N_0. \tag{22b}$$

备注 3.1。 命题 *3.7* 中的表达式依赖于连续方程的伴随：实际上，（5）的解 X 、代入（20）的梯度 ∇X 以及伴随状态（21b）-（22b）均通过标准龙格-库塔方法获得，而这些方法并不满足对偶一致性。因此，估计梯度仅在极限情况下保持一致。

3.4 双射性与多胞体中复合映射的逼近性质 s

我们首先引入一类对分析学十分重要的区域。这类区域是文献 [36] 中引入的多边形区域族的高维类比。它们是允许“单纯形”网格的有界 Lipschitz 区域。下文中，#(*A*) 表示集合 A 的基数。

定义 3.1 (单纯形)。 若闭集 σ 属于 $\mathbb{R}^n$ ，且可表示为有限集 $\{x_1,\dots,x_{k+1}\}$ 的凸包，并且不包含于任何 $k-1$ 维仿射子空间，则称其为 k 维单纯形（或 k 单纯形）。对于任意非空的 $I \subset \{x_1,\dots,x_k\}$， I 的凸包称为 σ 的一个面。它是一个$(\#(I)-1)$单纯形。

注意，0-单纯形是 $\mathbb{R}^n$ 中的一个点，1-单纯形是线段，2-单纯形是三角形，3-单纯形是四面体；根据构造，单纯形的任意面都属于其边界 $\partial\sigma$。下文给出多面体和多面体域的定义（例如参见 [10]）。

定义 3.2 （多面体）。 *</style}* K 是 $\mathbb{R}^n$ 的一个子集，若存在有限个 $\mathbb{R}^n$ σ_1中的 n-单纯形 σ_ℓ，使得

1. 这些单纯形 σ_i 的并集为 K;

2. 对任意 $1 \le i < j \le \ell$， $\sigma_i \cap \sigma_j$ 要么为空，要么是它们各自的一个完整面。

称族 $\mathcal{T}:=\{\sigma_1,\dots,\sigma_\ell\}$ 为 K的三角剖分；进一步记 $\mathcal{F}_k$ 为 σ_1，…， σ_ℓ的 k-维面族，其中 $k=0$，1，…，$n-1$。

定义 3.3 （多面体域）。 开集 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 是一个有界多面体域，当且仅当 Ω 是 $\mathbb{R}^n$ 中的连通利普希茨区域，且 Ω 是一个有界多面体。

多面体是有限个互不重叠单纯形的并集。我们注意到，多面体的边界不一定是利普希茨的（参见 [36]中的图 1(b)）。

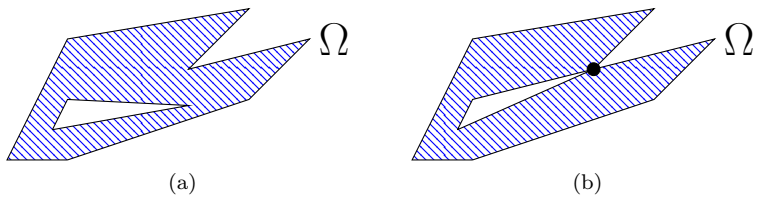

图1：定义3.2和定义3.3的解读。（a）多面体域的示例。（b）非利普希茨多面体的示例。

命题3.8表明，只要 $\mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(\mathbf{a}) = -\inf_{x\in\Omega}\det(\nabla \mathrm{N}(\mathbf{a})) < 0$，复合映射（7）就是 Ω 上的双射。另一方面，命题 3.9 表明，只要基 $\varphi_1,\varphi_2,\dots$,在 $\mathcal{U}_0(\Omega)$ 中稠密，复合映射在 $\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 中稠密。命题 3.9 也可用于证明 $\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 严格包含于 Diff(Ω)。考虑 $\Omega = (-1,1)^3$，并考虑 $\Phi(\xi) = \mathrm{vec}(\xi_1, -\xi_2, -\xi_3)$；显然， Φ 是一个雅可比行列式为正的微分同胚，但 $\varphi := \Phi - \mathrm{id}$ 不属于 $\mathcal{U}_0(\Omega)$；因此， $\Phi \in \mathrm{Diff}(\Omega) \setminus \mathrm{Diff}_0(\Omega)$。

命题3.8. 设 Ω 是 $\mathbb{R}^n$ 的多面体域。考虑向量值函数 $\Phi = \mathtt{id} + \varphi \; with \varphi \in \mathcal{U}_0(\Omega)$。那么 Φ 在Ω 中是双射（单射且满射），当$\min_{x\in\Omega} J(\Phi) > 0$时。

命题3. **9.** 设 Ω 是 $\mathbb{R}^n$ 的多面体域，并设 $\Phi \in \mathrm{Diff}_0(\Omega)$。那么， $\Phi = \mathtt{id} + \varphi \; with \; \varphi \in \mathcal{U}_0(\Omega$).

注3.2 （推广到曲域。）。 由于利普希茨双射的复合仍是利普希茨双射，我们也可以利用命题*3.8*证明，只要 N（a）在（8）中满足 $J(N_{\mathrm{p}}(\mathbf{a}))$ 在Ω中严格为正， N（a）就是Ω中的双射p。如 *[36]* 中针对 $n=2$维区域的讨论，式（8）对曲域而言是式（7）的非线性推广，但它在Diff_0（Ω）中并不稠密。相同的否定结论也适用于三维域。在 *[36],* 中，我们将说明，通过考虑与不同多胞体相关联的复合映射的复合，可以增强复合映射的表达能力（参见 *[36]*中的引理*3.3*）。本文不再进一步讨论这一问题。

3.5 讨论

速度场的求值需要针对每个点求解一个常微分方程（ODE）系统，而复合映射只需进行三次函数求值——此外，由于 Ψ^{-1} 与映射系数$\mathbf{a}$无关，因此在求解（4）之前，可以按需预先计算。速度场的求值因此要昂贵得多。

在离散层面直接计算速度场对应的 $\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial}$ $_{\mathbf{a}}$**(a)**，对于典型的时间积分格式（例如龙格－库塔法、线性多步法）而言，计算开销很大。另一方面，目标函数的连续梯度（参见命题 3.6）的计算开销与计算 **N(a)** 大致相同。

对于所有 $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^M$，速度场 (6) 均保证是 Ω 上的微分同胚（参见命题 3.2）；此外，$\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 中的任意元素都可以表示为形式 (5)（参见命题 3.3），这意味着当 $M \to \infty$ 满足以下条件时，速度场 (6) 在 $\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 中稠密——序列 $\phi_1, \phi_2, \ldots$ 在 $\mathcal{V}_0$ 中稠密（参见 (19)）。然而请注意，对 (5) 中常微分方程组的近似积分并不能保持双射约束；因此，必须对 (5) 进行精确积分，尤其是在 Ω 的边界附近。

当雅可比行列式的最小值严格为正时，形式为 (7)-(8) 的复合映射是双射（参见命题3.8）；因此，式 (4) 中针对复合映射的惩罚函数高度非线性。对于参数化配准任务，使用标准回归算法很难确保样本外参数对应的映射具有双射性（见 [36]）。此外，当且仅当 Ω 是多边形域时，复合映射在 $\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 中稠密（参见命题 3.9）：这意味着，对于曲域，其表达能力关键取决于多边形域 Ω_P 的选择，而在实践中，这一域可能难以选定 [36]。

总之，我们的分析揭示了一种根本性的权衡：对于一般的曲域，速度场是唯一在数学上严谨的选择，因为它们在 $\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 中稠密，并且能够简单地施加双射约束；但这种理论上的一致性，是以流积分所带来的显著更高计算成本为代价的。相反，复合映射提供了一种计算上颇具吸引力的代数替代方案，但它们在 $\mathrm{Diff}_0(\Omega)$ 中的稠密性严格限于多面体域，因为对于曲线几何，它们需要借助辅助变换。

4 截断基的选择

速度场和复合映射的有效性在很大程度上取决于式（6）和（8）中展开的选择。在先前的工作中，[19, 36]，我们采用了传统的有限元（FE）离散化：这种选择会产生维数非常高的展开，因此计算代价也非常高。为解决这一问题，我们提出两种不同的策略来构造经验展开，从而先验地降低优化问题（4）的维数先验，并有望使用更复杂的二阶优化算法；这类算法对于中等规模的最小化问题尤其有效。

4.1 用于配准的模态展开

为简化表述和数学分析，给定希尔伯特空间 $H \subset \mathcal{U}_0(\Omega)$（对于速度场则为 $H \subset \mathcal{V}_0(\Omega)$），我们引入高维（但有限维）空间 $H_\mathrm{hf} := \mathrm{span}\{\varphi_i\}_{i=1}^N \subset H$。给定 $u \in H_\mathrm{hf}$，我们将对应的系数向量记为$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$ $u = \sum_{i=1}^N$ $(\mathbf{u})_i \varphi_i$。接下来，我们引入高维最小化问题

$$\mathfrak{E} := \min_{\mathbf{u}\in\mathbb{R}^N} f(\mathbf{u}) + \xi \|\mathbf{u}\|_\mathbf{A}^2 \tag{23}$$

其中 $\xi > 0$, $\|\mathbf{u}\|_\mathbf{A}^2 = \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{u}$，$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N\times N}$ 是对称半正定矩阵，$f\colon \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ 是一个 Lipschitz 函数，其 Lipschitz 常数为

$$L(r) := \max_{\mathbf{u},\mathbf{u}'\in\mathbb{R}^N, \mathbf{u}\neq\mathbf{u}', \|\mathbf{u}\|_\mathbf{M}, \|\mathbf{u}'\|_\mathbf{M} \le r} \frac{|f(\mathbf{u}) - f(\mathbf{u}')|}{\|\mathbf{u}\|_\mathbf{M}}, \tag{24}$$

且 $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N\times N}$ 是对称正定矩阵。请注意，(23)可表示为带二次蒂霍诺夫正则化的最小化问题：我们指出，[19, 36]以及 [39] 中的方法也可以改写为 (23) 的形式。利用这一记法，我们旨在找到一个降阶基 (ROB) $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N\times m}$，满足 $m \ll N$，使得

$$\mathfrak{E}_m := \min_{\mathbf{a}\in\mathbb{R}^m} f(\mathbf{W}\mathbf{a}) + \xi \|\mathbf{W}\mathbf{a}\|_\mathbf{A}^2 \approx \mathfrak{E}. \tag{25}$$

我们的第一种策略是取广义特征值问题 $\mathbf{A}\boldsymbol{\phi} = \lambda \mathbf{M}\boldsymbol{\phi}$ 中与 m 个最小特征值对应的特征模态，即

$$\mathbf{W} = [\boldsymbol{\phi}_1, \ldots, \boldsymbol{\phi}_m], \quad \mathbf{A}\boldsymbol{\phi}_i = \lambda_i \mathbf{M}\boldsymbol{\phi}_i, \quad i = 1, \ldots, N; \ 0 \le \lambda_1 \le \ldots \le \lambda_N. \tag{26}$$

我们指出，在无界域中的点集配准背景下， [26, 第 6]节提出过类似的策略。

下一个引理为式 (26) 中$\mathbf{W}$ 的定义提供了依据：证明很直接，见附录 A。结果表明，如果$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}$ 的特征值增长得足够快，我们便可以考虑一个模态基，其中包含 $m \ll N$ ，代价是需要求解一个大规模对称特征值问题；显然，对于许多查询（参数化）配准任务而言，后者的计算成本可以分摊。在数值实验中，我们将考察这一选择的性能。请注意，引理 4.1 中的界取决于极小化子$\mathbf{u}^\star$的范数 r ：我们设想可以通过对函数 f引入额外假设，从上方约束 r 。此处省略细节。

引理 4.1. 设$\mathbf{u}^\star$ 是(23) 的全局极小化子，并记 $P_W\colon\ \mathbb{R}^N \to \mathrm{col}(\mathbf{W})$ 为 $\|\cdot\|_{\mathbf{M}}$-正交投影算子，并令 $P_W^\perp = \mathbb{1} - P_W$。那么，我们有

$$\|P_W^\perp \mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{M}} \le \frac{L^\star}{\xi \lambda_{m+1}}, \quad \text{with } L^\star = L(\|\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{M}}); \tag{27}$$

and

$$0 \le \mathfrak{E} - \mathfrak{E}_m \le \frac{(L^\star)^2}{\xi \lambda_{m+1}}. \tag{28}$$

我们还研究了另一种策略，该策略基于适当的、具有多项式源项的线性问题的解。设 $a\colon\ H \times H \to \mathbb{R}$ 为适当的线性形式， $\mathbb{P}_p(\mathbb{R}^n)$为由 n个变量构成、总次数不超过 p的多项式空间；则我们定义广义有限元空间：

$$\mathcal{W}_p := \left\{ u \in H_{\mathrm{hf}} \,:\, a(u,v) = \int_\Omega f \cdot v \, dx + \int_{\partial\Omega} g \cdot v \, dx, \ \forall\, v \in H_{\mathrm{hf}}, \ f, g \in [\mathbb{P}_p(\mathbb{R}^n)]^n \right\} \tag{29}$$

在数值实验中，我们考虑形式 $a(u,\ v) = \mathbf{v}^\top \mathbf{A}\mathbf{u}$。对于速度场，我们只需考虑式（29）的时空张量化扩展：

$$\mathcal{W}_p^{\mathrm{st}} := \{ u(x,t) = u'(x)\ell(t) \,:\, u' \in \mathcal{W}_p, \ \ell \in \mathbb{P}_p(\mathbb{R}) \}. \tag{30}$$

最后，我们简要讨论约束 $u \cdot \mathbf{n}\big|_{\partial\Omega} = 0$的施加。在 [36], 中，边界约束直接在空间中实施；而在 [19] 中，则通过 Nitsche 方法施加约束。对于曲域，法向量近似的质量会显著影响精度：本文不再进一步讨论这一问题。

4.2 数值结果：复合映射的模态展开方式选择

我们考虑 [36, 节 5], 中描述的测试案例，该案例利用复合映射进行配准。有关该测试案例的详细介绍，请参阅原论文。图2展示了多胞体 Ω_{P} （参见（8））以及与空间 H_{hf} 相关的有限元网格——在数值实验中，我们考虑七次多项式（$N = 784$），并在 [36, 算法4中1]采用基于$n_{\mathrm{train}} = 66$ 个参数的训练集的贪心过程，以生成有限元解 $\{\varphi_\mu\colon\ \mu \in \mathcal{P}_{\mathrm{train}}\}$。

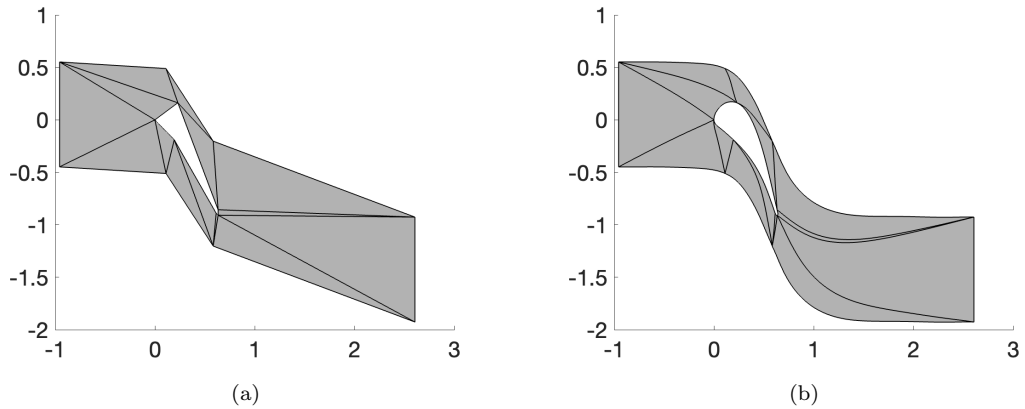

图 2：流经一组 LS89 涡轮叶片的无黏流。(a) 多胞体 Ω_{P} 和有限元网格；(b) 曲线区域 Ω。

图3展示了结果。图3(a)展示了第4.2节经验基的最坏情况投影误差的变化。

$$E_m^{\mathrm{proj}} = \max_{\mu\in\mathcal{P}_{\mathrm{train}}} \frac{\|\varphi_\mu - P_{\mathcal{W}_m}\varphi_\mu\|_{L^2(\Omega_{\mathrm{p}})}}{\|\varphi_\mu\|_{L^2(\Omega_{\mathrm{p}})}}; \tag{31}$$

图3(b)展示了目标函数的变化情况

$$E_m^{\mathrm{obj}} = \max_{\mu\in\mathcal{P}_{\mathrm{train}}} \mathfrak{f}_\mu^{\mathrm{tg}}(P_{\mathcal{W}_m}\varphi_\mu). \tag{32}$$

我们注意到，与标准 H^1 范数对应的特征空间相比，与 H^2 半范数对应的特征空间性能更优

$$\int_{\Omega_{\mathrm{p}}} \nabla\phi_i : \nabla v\, dx = \lambda_i \int_{\Omega_{\mathrm{p}}} \phi_i \cdot v\, dx \qquad \forall\, v \in H_{\mathrm{hf}},$$

以及各向同性线弹性算子（采用平面应变假设）

$$\int_{\Omega_{\mathrm{p}}} \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \nabla_{\mathrm{s}}\phi_i : \nabla_{\mathrm{s}} v \; + \frac{E}{2(1+\nu)} (\nabla\cdot\phi_i)(\nabla\cdot v) dx = \lambda_i \int_{\Omega_{\mathrm{p}}} \phi_i \cdot v\, dx \;\; \forall\, v \in H_{\mathrm{hf}},$$

其中 $E = 1$ 和 $\nu = \frac{1}{3}$。我们还注意到，与 H^2 特征空间相比，式（29）（标记为“gfem”）对应的性能较差。最后，我们指出，对于较小的 m值， H^2 特征空间方法与 gfem 方法在目标函数方面的性能相当。

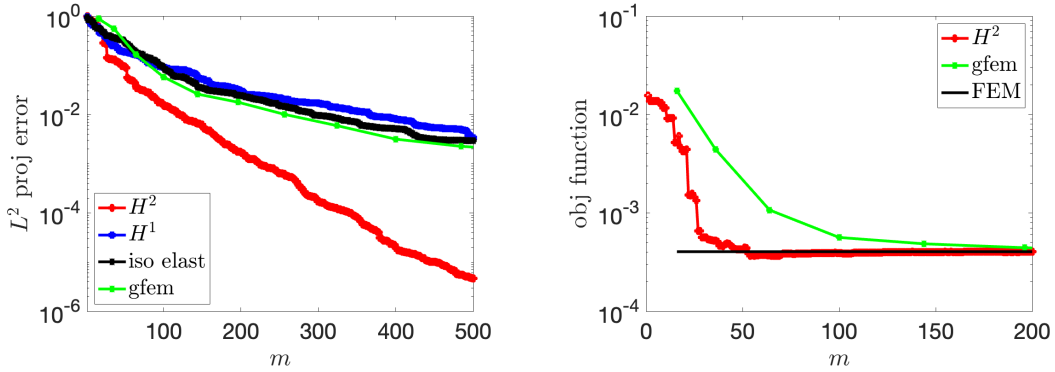

图3：流经一组 LS89 涡轮叶片的无黏流。(a) 相对投影误差 E_m^{proj}。(b) 最坏情况目标函数 E_m^{obj}，以及与有限元解的比较。

5 命题 3.8 和 3.9 的证明

我们依赖若干拓扑结果，这些结果既不利用区域的利普希茨正则性，也不利用映射 Φ 的可微性。为求完整起见，我们列出证明中用到的一些定义和结果。给定集合 $U \subset \mathbb{R}^n$，我们用 ∂U 表示 U 的边界，即 U 的闭包减去 U 的内部；此外，我们用 $\mathcal{O}_U$ 表示 U 上的诱导（或子空间）拓扑，$\mathcal{O}_U := \{A \cap U\colon \ A \text{ 在 } \mathbb{R}^d\}$. 中是开集。可以证明，有序对 $\mathcal{T}_U = (U,\ \mathcal{O}_U)$ 是一个拓扑空间。我们称 B 在 U 中是开集，若 $B \in \mathcal{O}_U$；类似地，若 B 在 U 中的补集 $B^{\mathrm{c}} := U \setminus B$ 属于 $\mathcal{O}_U$，则称 B 在 U 中是闭集。我们还称 $\mathcal{T}_U$ 是连通的，若它不能表示为两个互不相交的非空开集之并；若存在一条路径连接 U 中任意两点，则称 $\mathcal{T}_U$ 是道路连通的；最后，若 $\mathcal{T}_U$ 是道路连通的，并且任意两点之间的每条路径都可以在保持端点不变的情况下连续变形为任何其他这样的路径，则称 $\mathcal{T}_U$ 是单连通的。给定拓扑空间 X，Y，f：若映射 $X \to Y$ 满足 (i) 它是一个双射（一一对应且映满），(ii) 它是连续的，且 (iii) 其逆映射 f^{-1} 连续（也就是说，f 是开映射），则称 $X \to Y$ 是一个同胚。

定理5.1和5.2是拓扑学中的标准结果，可见于 [25, 第 3] 章（参见§23和习题6）；

定理 5.1。 在拓扑空间 T 中，任何同时与集合 C 及其补集$T \setminus C$ 相交的 T 连通子集，都会与 C 的边界相交。

定理 5.2。 拓扑空间 $\mathcal{T}_U$ 连通，当且仅当唯一既开又闭的集合是空集和 U。

定理 5.3 是布劳威尔不变域定理，可见 [25, 第 10]章。其证明比后面的定理复杂得多。

定理 5.3。 若 U是 $\mathbb{R}^n$的开子集，且 $f\colon\ U\to\mathbb{R}^n$是单射连续映射，则 $V\colon=f(U)$是 $\mathbb{R}^n$ 中的开集，并且 f 是 U 与 V之间的同胚。

若集合 U 是 $\mathbb{R}^n$ 的子集，且 U 是 $\mathbb{R}^n$ 中的开集，同时其边界 ∂U 局部上是某个连续函数的图像，则称 U 是具有连续边界的区域。请注意，这类区域的边界可能有尖点，但不会出现自交边界（例如图1(b)）。若 $U\subset\mathbb{R}^n$ 是具有连续边界的区域，则 ∂U 局部平坦 [7]，即对 ∂U 中的任意点 ξ，都存在一个开集 $N\ni\xi$ 和一个同胚 $h\colon N\to h(N)\subseteq\mathbb{R}^n$，使得 $h(N\cap\partial U)\subseteq\mathbb{R}^{n-1}\times(-\infty,\ 0)$，且 $h(N\cap\partial U)\subseteq\mathbb{R}^{n-1}\times\{0\}$。局部平坦区域具有一项重要性质，该性质由 Brown 证明（参见 [7, 定理 3]）。

定理 5.4。 设Ω 为一个边界连续（因而局部平坦）的开集。对于 $\partial\Omega$ 的任意连通分支 Σ，存在一个同胚 h_σ，它将 $\Sigma\times(-1,1)$ 映到 $\mathbb{R}^n$ 中 Σ 的一个邻域，使得对于任意 $\xi\in\Sigma,\ h_\sigma(\xi,0)=\xi$。这样的映射称为 Σ 的管状邻域。

定理 5.5 是 Hadamard 全局反函数定理的推广，并在 [14] 中得到了证明。正如 [14], 的作者所指出的，这个版本可用于带边流形，尤其适用于具有 Lipschitz 边界的有界区域。回顾一下，豪斯多夫拓扑空间是指不同点具有不同邻域的拓扑空间；此外，如果从 $X\to Y$ 到 f 的函数具有真性，则称其为真函数，即 Y 中任意紧集在 X 中的原像都是紧集。

定理 5.5。 设 X 和 Y 是豪斯多夫且道路连通的拓扑空间。若 $f\colon\ X\to Y$ 是真局部同胚，则存在 $k\in\mathbb{N}$，使得对于任意 $y\in Y$，$\#(f^{-1}(y))=k$（f 是一个“k 重覆盖”）。此外，若 Y 单连通，则 $k=1$，也就是说，f 是一个同胚。

给定多面体域 $\Omega\subset\mathbb{R}^n$，我们将 Ω 的一个三角剖分记为 $\mathcal{T}$。Ω 的子集 F 称为一个面，或称 Ω 的一个（$n-1$）维面，如果 (i) F 是超平面 H 的一个多面体域（称为 F的支撑超平面），并且 (ii) 如果 σ 是 Ω 中的一个（$n-1$）单纯形，且 $\sigma\cap F$包含一个（$n-2$）单纯形，那么或者 $\sigma\subset F$，或者 $\sigma\not\subset H$。对于任意 $0\le k\le n-2$，如果 $G\subset\partial\Omega$ 是某个（$k+1$）维面的面，则称 Ω 为 Ω 的一个 k 维面。设 F_1，……，F_ℓ 是多面体域 Ω 的面，且 H_1，……，H_ℓ 是它们的支撑超平面。如果 $\dim(\bigcap_{i=1}^{\ell}H_i)=n-\ell$，则称 F_1，……，F_ℓ 处于一般位置；也就是说，超平面的法向量$\mathbf{n}_1$，……，$\mathbf{n}_\ell$ 线性无关。利用这些定义，我们可以证明以下结果：证明是直接的，故略去。

引理 5.1。 设Ω 是 $\mathbb{R}^n$ 中的一个有界多面体域，$\mathcal{T}$是Ω的一个三角剖分，并令 $\mathcal{F}_k$ 表示 $\mathcal{T}$ 的k维面族（参见定义 *3.2*）。以下结论成立。

- Ω 的边界是 $\mathcal{F}_{n-1}$中$(n-1)$单纯形的并集。
- 由于 $\partial\Omega$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中无边界的利普希茨超曲面，任何包含于$\partial\Omega$ 中的$(n-2)$单纯形 $\sigma\in\mathcal{F}_{n-2}$，都是 $\mathcal{F}_{n-1}$ 中包含于 $\partial\Omega$的两个$(n-1)$单纯形的交集轨迹。

对于三维域，容易验证，顶点（0 维面）是 $\ell\ge3$ 个面之交，这些面的法向量$\mathbf{n}_1,\dots,\mathbf{n}_\ell$ 张成 $\mathbb{R}^3$；类似地，棱（1 维面）是 $\ell'\ge2$ 个面之交，这些面的法向量$\mathbf{n}_1,\dots,\mathbf{n}_{\ell'}$ 定义 $\mathbb{R}^3$的一个二维子空间。引理 5.2 将这一结果推广到 n维区域。

引理 5.2。 设$\Omega\subset\mathbb{R}^n$ 是一个多面体域。Ω 的一个 k维面 G 上的任意点，都包含于Ω 的 $n-k$ 个处于一般位置的面中。此外，G 包含于这些面的支撑超平面的交集中。

证明。 我们采用归纳法。当 $k=n-1$时，该性质显然成立。假设对于满足 $k+1\le n-1$的 k+1面该结论成立；下面证明该结论对于 k面也成立。

设 $\mathcal{T}$是 Ω 的一个三角剖分，设 G 是 Ω 的一个 k维面。 G上的任意点都位于一个 k单纯形$\sigma\subset G$ 中，而该单纯形包含于一个（k+2）维面的边界内。更确切地说，σ 位于 ∂F 的两个（$k+1$）维单纯形 τ和 τ'的交集中，参见引理 5.1。由于 σ位于一个 k维面中，因此它不包含于某个 $k+1$面的内部，从而 $\tau\cup\tau'$不包含于 F的一个面中。因此，σ位于 F 的两个不平行的面 E 和 E' 的交集中，而 σ 的支撑平面正是 τ 和 τ'的支撑平面的交集轨迹。

由于 E和 E'是Ω 的 $k+1$维面，因此其中任意一点都属于处于一般位置的$n-k-1$ 个支撑超平面的交集。由于 E和 E'不包含在某个 $k+1$维仿射子空间中，对于任意点 $\xi\in\sigma\subset E\cap E'$，都可以从包含 ξ的这 2($n-k-1$) 个面中选出 $n-k$ 个处于一般位置的面。相应支撑超平面的交集包含σ；因此，它包含 G。

□

5.1 复合映射的双射性

我们首先给出 [35, 命题 2.1]的一个推广。

命题 5.6。 设 $k \geq 0$ 和 $\Omega_0, \Omega_1, \ldots \Omega_k \subset \mathbb{R}^n$ 为边界连续且连通的有界区域，并满足：对任意 $i, j \in \{1, \ldots, k\}$，*(i)* $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$，若 $i \neq j$；且 *(ii)* $\Omega_1, \ldots, \Omega_k \subset \Omega_0$。

设 $\Omega = \Omega_0 \setminus \bigcup_{i=1}^{k} \overline{\Omega}_i$ 且 $\Phi : \Omega \mapsto \mathbb{R}^d$ 是一个局部单射连续映射，使得 $\forall i \in \{0, \ldots, k\}, \Phi(\partial\Omega_i) \subseteq \partial\Omega_i$。若存在 $y \in \partial\Omega_0$ 使得 $\#(\Phi^{-1}(y) \cap \partial\Omega_0) = 1$，或者 $\partial\Omega_0$ 是单连通的，则 $\Phi(\Omega) = \Omega$，且 Φ 是其像上的同胚。

证明。 我们将证明分为九个步骤。

1. 管状邻域的存在性

根据定理 5.4，对于任意 $0 \leq i \leq k$，存在一个从 $\partial\Omega_i \times (-1,1)$ 到 $\mathbb{R}^n$ 中 $\partial\Omega_i$ 的某个邻域的管状邻域 h_i，使得对于任意 $\xi \in \partial\Omega_i$，$h_i(\xi, 0) = \xi$。

2. 补集 $C_i := \mathbb{R}^n \setminus \Omega_i$ 是道路连通的，且 Ω 是连通的。

事实上，考虑 x 和 y 两个点 $\in \partial\Omega_i$ 和一条路径 $\gamma : [0,1] \to \mathbb{R}^n \setminus \Omega_i$ 将它们连接起来。设 ω_i^e 是 $\partial\Omega_i$ 的管状邻域。由定理 5.1可知，若 γ 与 ω_i^e 不相交，则它包含于 C_i中。否则，存在 $0 < t_0 < t_1 < 1$ 使得 $\gamma([0, t_0]) \subset C_i$，$\gamma([t_1, 1] \subset C_i$ 且$\gamma\{t_0, t_1\} \subset \omega_i^e$。由于 ω_i^e同胚于 $\partial\Omega_i \times (0, 1)$，且 $\partial\Omega_i$连通，因此 ω_i^e连通。所以，可以用一条端点相同的路径替换 $\gamma|_{[t_0,t_1]}$，该路径位于 ω_i^e 中。所得路径包含于 C_i中，并连接 x和 y。

用同样的推理可以证明，$\Omega = \Omega_0 \bigcap_{1 \leq i \leq k} C_i$ 是道路连通的。

3. $\Phi|_{\Omega}$（分别地，$\Phi|_{\partial\Omega}$）是从 $\mathbb{R}^n$（分别地，从 $\partial\Omega$）到开集的开映射。

我们回顾一下，若对于 A 中的任意开集 ω，$f(\omega)$ 在 B 中是开集，则函数 $f : A \to B$ 是开映射。只需证明，对于任意 $y \in \Phi(\omega)$，存在一个包含 y 的开集 $A \subset \Phi(\omega)$。我们用 $\xi \in \omega$ 表示 y 的原像中的一个元素。由于 Φ 是局部单射，存在 $\eta > 0$，使得以 ξ 为中心、半径为 η 的开球 $B_\eta(\xi)$ 包含于 ω 中，并且将 Φ 限制在 $B_\eta(\xi)$ 上所得的映射是单射。由定理 5.3 可知，$A := \Phi(B_\eta(\xi))$ 是开集。

由于 $\partial\Omega$ 局部上是连续函数的图像，因此它与 $\mathbb{R}^{n-1}$ 局部同胚；所以，我们可以应用相同的论证来证明 $\Phi|_{\partial\Omega}$ 是开映射。

4. $\partial\Phi(\overline{\Omega}) \subseteq \Phi(\partial\Omega) = \partial\Omega$。

设 $y \in \partial\Phi(\overline{\Omega})$。由于 Φ 连续且 Ω 是闭集，我们得到 $\Phi(\Omega)$ 是闭集；因此，$\Phi^{-1}(y)$ 非空。令 $\xi \in \Omega$ 使得 $\Phi(\xi) = y$。反设 $\xi \in \Omega$。因此，存在 $\eta > 0$ 使得开球 $B_\eta(\xi) \subset \Omega$。根据步骤 **3.**，$\Phi(B_\eta(\xi))$ 是开集。由于，$\Phi(B_\eta(\xi)) \subset \Phi(\Omega)$ 且 $y \in \Phi(B_\eta(\xi))$，$y \notin \partial\Phi(\Omega)$。矛盾。因此 $x \in \partial\Omega$ 且 $y \in \Phi(\partial\Omega)$。

根据步骤 **3.**，$\Phi(\partial\Omega_i)$ 是 $\partial\Omega_i$ 中的开集。由于 $\partial\Omega_i$ 是紧致的，因此它也是闭集；由于 Ω_i 的边界是连通的，定理 5.2 推出，对于 $i = 0, \ldots, k$，$\Phi(\partial\Omega_i) = \partial\Omega_i$。

5. $\Phi(\overline{\Omega}) \subseteq \overline{\Omega_0}$ 和 $\Phi^{-1}(\partial\Omega_0) = \partial\Omega_0$。

用反证法，设 $z = \Phi(\xi) \in C_0 = \mathbb{R}^d \setminus \Omega_0$，其中 $\xi \in \Omega$。由于 $\overline{\Omega}$ 是紧致的，且 Φ 连续，$\Phi(\Omega)$ 有界；由于 $\overline{C_0}$ 无界（因为 Ω 有界），存在 $y \in C_0 \setminus \Phi(\Omega)$。由于 C_0 连通（参见步骤 **2.**），存在一条路径 $\gamma \subset C$，连接 z 与 y。回想定理 5.1，γ 应与 $\partial\Phi(\Omega)) \subseteq \partial\Omega$ 相交，这与 $C_0 \cap \partial\Omega = \emptyset$的事实矛盾。因此，$\Phi(\Omega) \subseteq \Omega_0$。

由于 $\Phi(\Omega)$ 是开集（参见步骤 **3.**），我们必有 $\Phi(\Omega) \cap \partial\Omega_0 = \emptyset$，因此 $\Phi^{-1}(\partial\Omega_0) := \{x \in \Omega : \Phi(x) \in \partial\Omega_0\} = \{x \in \partial\Omega : \Phi(x) \in \partial\Omega_0\}$。由于对于 $i = 0, \ldots, k$，有 $\Phi(\partial\Omega_i) = \partial\Omega_i$（参见步骤 **4.**），我们得到 $\Phi^{-1}(\partial\Omega_0) = \{x \in \partial\Omega_0 : \Phi(x) \in \partial\Omega_0\} = \partial\Omega_0$。

6. 存在 $\mathbf{y} \in \partial\Omega_0$ 使得 $\#\Phi^{-1}(\mathbf{y}) = 1$。

根据上一步可知，对于任意 $y \in \partial\Omega_0$，都有 $\Phi^{-1}(y) \subset \partial\Omega_0$，因此 $\#(\Phi^{-1}(y)) = \#(\Phi^{-1}(y) \cap \partial\Omega_0)$。所以，如果存在 $y \in \partial\Omega_0$ 使得 $\#(\Phi^{-1}(y) \cap \partial\Omega_0) = 1$，则可得到所需结果。

假设 $\partial\Omega_0$ 是单连通的。由于 $\Phi|_{\partial\Omega_0}$ 是从 $\partial\Omega_0$ 到其自身的局部单射连续映射，根据定理 5.3，它是一个局部同胚。由于 $\partial\Omega_0$ 是紧致的，该映射也是真映射。此外，根据定理 5.5，$\Phi|_{\partial\Omega_0}$ 是一个同胚。特别地，对于任意 $y \in \partial\Omega_0$, $\#(\Phi^{-1}(y)) = 1$。

7. Φ 的延拓。

令 h_i 为 $\partial\Omega_i$ 的一个管状邻域，如步骤**1.**中所定义。我们用 ω_i 表示 h_i 的像，并用 ω_i' 表示开集 $h_i(\partial\Omega_i \times (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}))$。我们选择 h_i，使得 $h_i(\partial\Omega_i \times [0, 1)) \subset \Omega$ 且 $\Phi(\omega_i' \cap \Omega) \subset \omega_i$。

我们注意到，对于任意 $\xi \in \partial\Omega_i$，都存在 $\eta > 0$，使得 $\Phi|_{B_\eta(\xi) \cap \Omega}$ 是单射的，并且（参见步骤 **3.**）$\Phi(B_\eta(\xi) \cap \partial\Omega_i)$ 是 $\Phi(\xi)$ 的一个开邻域。因此我们得到

$$\forall \xi \in \partial\Omega_i,\ \exists \eta > 0 : \Phi\left(B_\eta(\xi) \cap \Omega\right) \cap \partial\Omega_i = \emptyset. \tag{33}$$

如果（33）不成立，则存在一个序列 $\{\xi_n\}_n \subset \Omega$ 收敛于 ξ，使得对于所有 $n > 0$，都有 $\Phi(\xi_n) \in \partial\Omega_i$。由于 $\lim_{n\to\infty} \Phi(\xi_n) = \Phi(\xi)$，且 $\Phi(B_\eta(\xi) \cap \partial\Omega_i)$ 是 $\partial\Omega_i$ 的开子集，$\Phi(\xi_n)$ 对于充分大的 n 属于 $\Phi(B_\eta(\xi) \cap \partial\Omega_i)$：这与 Φ 在 $B_\eta(\xi) \cap \Omega$ 中的单射性相矛盾。

令 $\sigma_i\colon \omega_i \to \omega_i$ 为由 $\sigma_i(h_i(\xi,t)) = h_i(\xi,-t)$ 定义的同胚，其中对任意 $(\xi,t) \in \partial\Omega_i \times (-1,1)$。于是我们定义 $\Psi_i : \Omega \cup \omega_i' \to \mathbb{R}^n$，使得若 $x \in \Omega$，则 $\Psi_i(x) = \Phi(x)$；若 $x \in \omega_i' \setminus \Omega$，则 $\Psi_i(x) = \sigma_i(\Phi(\sigma_i(x)))$。映射 Ψ_i是连续的，因为它是连续映射的复合；此外，它在任意$\xi \notin \partial\Omega_i$附近都是局部单射，因为 Φ 和 σ_i 都局部单射。

令 $\xi \in \partial\Omega_i$，并定义 $r > 0$，使得 $\Phi|_{B_r(\xi)\cap\Omega}$ 和 $\Phi|_{\sigma_i(B_r(\xi)\setminus\Omega)}$ 都是单射。设 $x \neq y \in B_r(\xi)$ 位于 $\partial\Omega_i$ 的同一侧。根据构造，若 $x, y \in \Omega$，则 $\Phi(x) \neq \Phi(y)$，因此 $\Psi_i(x) \neq \Psi_i(y)$；类似地，若 $x, y \notin \Omega$，则有 $\sigma_i(x) \neq \sigma_i(y)$，且对于某个 $\epsilon > 0$，$\sigma_i(x)$ $\sigma_i(y) \subseteq B_\epsilon(\xi) \cap \Omega$，因此 $\Psi_i(x) = \Phi(\sigma_i(x)) \neq \Phi(\sigma_i(y)) = \Psi_i(y)$。令 $x \in \Omega$ 且 $y \notin \Omega$，并设 $z = \sigma_i(y) \in \Omega$。反证可得，$\Psi_i(x) = \Psi_i(y)$，也就是说 $\Phi(x) = \sigma_i(\Phi(z))$。因此，$\Phi(x)$ 和 $\Phi(z)$ 位于 $\partial\Omega_i$ 的两侧：由于 Φ 是连续的，存在 $p \in B_r(\xi) \cap \Omega$，使得 $\Phi(p) \in \partial\Omega_i$，这与 (33) 矛盾。总之，我们已证明，对于任意不同的 x, $y \in B_r(\xi)$，$\Psi_i(x) \neq \Psi_i(y)$：因此函数 Ψ_i 是局部单射。

我们可以对 $\partial\Omega$ 的所有连通分支应用相同的论证：因此，我们得到 Φ 在 Ω 的某个开邻域上的连续且局部单射的延拓，记为 Ψ。定理 5.3 表明，Ψ 是一个局部同胚。

8. Φ 对 $\Phi^{-1}(\Omega)$ 的限制是到 Ω上的一个同胚。

设 ω 是 $\Phi^{-1}(\Omega)$ 的一个连通分支。考虑 $\Phi|_\omega\colon \omega \to \Omega$。存在一个开集 $\omega^+ \supset \omega$，在该开集上 Ψ 有定义，且满足 $\Psi(\omega^+ \setminus \omega) \cap \Omega = \emptyset$。若 U 是 ω^+ 的一个开集，那么根据步骤 **7.**$\Psi(U)$ 是开集。此外，$\Psi(U) \cap \Omega = \Psi(U \cap \omega) = \Phi(U \cap \omega)$。因此，$\Phi$ 将 ω 的开集映射为 Ω 的开集。由此，$\Phi|_\omega\colon \omega \to \Omega$ 是一个局部同胚。

由此可知，$\Phi(\omega)$ 在 Ω 中既开又闭（它是紧致的）。根据步骤 **2.**，Ω 是连通的；由于 $\Phi(\omega)$ 非空，我们可以应用定理 5.2 得出 $\Phi(\omega) = \Omega$。特别地，$\Phi^{-1}(\partial\Omega_0) \subset \omega$。若 ω' 是 $\Phi^{-1}(\Omega)$ 的另一个连通分支，则 $\partial\Omega_0 \subset \omega \cap \omega'$。因此，$\omega \cap \omega' \neq \emptyset$，从而 $\omega = \omega'$，即 $\Phi^{-1}(\Omega)$ 是连通的。

现在我们可以将定理 5.5 应用于 $\Phi|_{\Phi^{-1}(\Omega)}\colon \Phi^{-1}(\Omega) \to \Omega$。由于存在 $y \in \partial\Omega_0$，使得 $\#(\Phi^{-1}(y)) = 1$，它是一个同胚。

9. 结论

我们应证明 $\Phi^{-1}(\Omega) = \{x \in \Omega\colon \Phi(x) \in \Omega\} = \Omega$。

由于对所有 i 都有 $\Phi(\partial\Omega_i) = \partial\Omega_i$，我们必有 $\partial\Omega \subset \Phi^{-1}(\Omega)$。由于 $\Phi|_{\Phi^{-1}(\Omega)}$ 是一个同胚，$\Phi(\partial(\Phi^{-1}(\Omega))) = \partial\Phi(\Phi^{-1}(\Omega)) = \partial\Omega$。回顾步骤 **4.**，我们还得到 $\Phi(\partial\Omega) = \partial\Omega$。综上，我们证明了 $\Phi|_{\Phi^{-1}(\Omega)}$ 是单射，且 $\partial\Omega \subset \Phi^{-1}(\Omega)$；因此，我们有 $\partial\Omega = \partial(\Phi^{-1}(\Omega))$。

任意 $\xi \in \Omega$ 和 $\xi' \in \Phi^{-1}(\Omega)$ 都可以通过 Ω 中的路径 γ 连接。该路径 γ 不会切割 $\partial\Omega = \partial\Phi^{-1}(\Omega)$；因此，根据定理 5.1，$\xi \in \Phi^{-1}(\Omega)$。 □

我们对命题 5.6 的假设作如下说明。假设 $\#(\Phi^{-1}(y) \cap \partial\Omega) = 1$ 对于某个 $y \in \partial\Omega_0$，或者作为替代，假设 $\partial\Omega_0$ 是单连通的，是步骤 **6.** 所必需的，以排除这样的例子：其中$\Phi(\Omega) = \Omega$，但 Φ 不是单射（而是一个具有 $k \neq 1$的 k 重覆盖）。为给出一个具体例子，考虑实心环面 $\Omega = \Omega_0$ in $\mathbb{R}^3 \simeq \mathbb{C} \times \mathbb{R}$，它是通过绕轴 $\{0\} \times \mathbb{R}$旋转一个竖直圆盘得到的。映射$\Phi : (z,t) \mapsto (z^2, t)$ 将 Ω 映射到自身，是一个局部微分同胚（除轴 $\{0\} \times \mathbb{R}$外），但不是单射：注意，对于所有 $y \in \partial\Omega_0$，都有 $\#(\Phi^{-1}(y) \cap \partial\Omega) = 2$，且该环面的边界不是单连通的。接下来，我们将给出具有连续边界的连通有界域的一个刻画。

引理 5.3. 设$\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 是一个具有连续边界的连通有界域。存在具有连续且连通边界的有界区域$\Omega_0, \Omega_1, .. \Omega_k \subset \mathbb{R}^n$，使得对于任意 $i, j \in \{1, \dots, k\}$，*(i)*$\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$，若 $i \neq j$；*(ii)* $\Omega_i \subset \Omega_0$；*(iii)* $\Omega = \Omega_0 \setminus \bigcup_{i=1}^k \Omega_i$。

证明. 由于 Ω 有界且其边界连续，$\partial\Omega$ 有有限个连通分支，记为 $\Sigma_0, \dots \Sigma_k$。每个分支的补集都有两个连通分支，参见命题 5.6 的**2.** 步。其中一个包含 Ω。我们将 Ω_i 记为 $\mathbb{R}^n \setminus \Sigma_i$的有界分支。由于 Ω 有界，不失一般性，可假设 $\Omega \subset \Omega_0$：由于 Ω 连通，因此我们得到$\Sigma_i \subset \Omega_0$，其中 $i = 1, \dots, k$。这意味着 $\Omega_i \subset \Omega_0$，且 $\Omega_1, \dots, \Omega_k$ 两两不相交。因此，我们得到 $\Omega = \Omega_0 \setminus \bigcup_{i=1}^k \Omega_i$。

□

我们还需要一个引理。

引理 5.4. 设Ω 是一个多面体域，且 $\Phi = \mathrm{id} + \varphi$ 满足 $\varphi \in \mathcal{U}_0$ *{style id='10'>min*$_{x\in\Omega} J(\Phi) > 0$。若 F 是Ω的一个面，则 $\Phi(F) = F$。此外，$\Phi|_{\partial\Omega}$ 是到 $\partial\Omega$上的一个同胚。

证明。设 F 是Ω的一个面，令 H 为其支撑超平面，法向量为$\mathbf{n}$；由于对任意 $\xi \in F$、$\varphi(\xi)$，有 $\cdot\,\mathbf{n} = 0$，故 $\Phi(F) \subset H$。此外，由于 $\min_{x\in\Omega} J(\Phi) > 0$，$\Phi$ 是局部单射。

我们对面的维数进行归纳。设 v 是一个顶点，即一个 0 维面。根据引理 5.2，存在 n 个面 $F_1, \dots F_n$，其法向量为 $\mathbf{n}_1, \dots \mathbf{n}_n$，使得 $v = \bigcap_i F_i$ 且 $\operatorname{span}(\mathbf{n}_1, \dots \mathbf{n}_n) = \mathbb{R}^n$。由于，$\varphi(v)$ 与每个 $\mathbf{n}_i$ 正交，$\varphi(v) = 0$ 且 $\Phi(v) = v$。

设 e 是 Ω 的一条棱。它是一个由两个顶点 v_- 和 v_+ 界定的区间。由于区间上的任意局部单射连续映射都是单射，$\Phi\big|_e$ 是单射。利用介值定理，我们必有 $\Phi(e) = e$。

假设 $\Phi(F) = F$，且对于 Ω 的任意一个满足 $1 \le k \le n-2$ 的 k 维面，$\Phi\big|_F$ 都是单射。设 G 是 Ω 的一个 $(k+1)$ 维面，并设 P 是其 $(k+1)$ 维支撑平面。再次应用引理 5.2，任意 $\xi \in G$ 都属于 $\bigcap_{i=1}^{n-k-1} F_i'$，其中的 F_i' 是面，其支撑超平面为 H_i。由上述观察可知，$\Phi(\xi) \in \bigcap_{i=1}^{n-k-1} \Phi(F_i') \subset \bigcap_{i=1}^{n-k-1} H_i = P$。因此，$\Phi(G) \subset P$。由于 G 是一个多面体域（参见引理 5.1），它是一个维数为 P 的连通有界域。此外，$\Phi\big|_G$ 连续且局部单射，而 $\Phi\big|_{\partial G}$ 是单射（它是若干 k 维面的并）。因此，将命题 5.6 的结论应用于 $G \subset P$ 和 $\Phi\big|_G$，可得 $\Phi(G) = G$，且 $\Phi\big|_G$ 是单射。

因此，对于 Ω 的任意一个面 F，我们得到 $\Phi(F) = F$，且 $\Phi\big|_F$ 是单射。由于 Ω 的边界是各个面的并集，我们便得到了所需结果。 □

现在我们可以证明最终结果。

证明。(命题*3.8*)。由于 Ω 是多面体域，根据引理 5.3，存在 $k+1$ 个具有连续且连通边界的有界区域 $\Omega_0, \dots, \Omega_k$，使得 $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$（若 $0 < i < j$），且 $\Omega = \Omega_0 \setminus \bigcup_{i=1}^{k} \Omega_i$。此外，由于 Ω 具有 Lipschitz 边界，若 $\Phi = \mathrm{id}_- + \varphi \in C^1(\Omega\ \mathbb{R}^n)$ 且对所有 $\xi \in U$ 都有 $|\det(\nabla\Phi(\xi)| > 0$，我们可以借助反函数定理理证明 Φ 是局部单射。最后，引理 5.4 表明 $\Phi\big|_{\partial\Omega_0}$ 是单射。因此，利用命题 5.6，我们得出 Φ 是一个 C^1 双射，因而是微分同胚。 □

5.2 复合映射的近似性质

证明。（命题 3.9）根据命题 3.3，存在一个时变向量场 $v_\Phi \in \mathcal{V}_0(\Omega)$，使得 $\Phi = F[v_\Phi] := X(v,\ 1)$，其中 $(\xi,\ t) \mapsto X(\xi,\ t)$ 是相应的流——注意，v_Φ 与 Ω 的各个面相切。回顾引理 5.1 和引理 5.2 可知，Ω 的任意一个 k 维面上的点，都是 $n-k$ 个处于一般位置的面的交集轨迹中的点；因此，v_Φ 与任意维数的任意面相切。

接下来，考虑 Ω 的一个面 F。它是仿射超平面 H 上的一个多面体域，其法向量记为$\mathbf{n}$：因此，将 v_Φ 限制在 F 上，得到一个与 ∂F 相切的时变向量场（即 $\mathcal{V}_0(F)$ 的一个元素）。由于对于任意利普希茨连续速度场，方程 (5) 的解都是唯一的，$v_\Phi\big|_F$ 的流就是将 X限制在 F上的结果，即 $\Phi\big|_F = F[v_\Phi\big|_F]$。由于面 F是 H上的 Lipschitz 域，且 v_Φ与其边界相切，我们可以应用命题 3.2 得出 $\Phi(F) = F \subset H$。由于函数 $\xi \mapsto \xi \cdot \mathbf{n}$ 在 H 上为常数，对于任意 $\xi \in F$，我们得到

$$\varphi(\xi) \cdot \mathbf{n} = (\Phi(\xi) - \xi) \cdot \mathbf{n} = \Phi(\xi) \cdot \mathbf{n} - \xi \cdot \mathbf{n} = 0,$$

这就是所需的结果。 □

A Ex极小化子的存在性与截断基的性能 s

证明。（命题 3.1）由于 E 有下界，存在 $m^\star \in \mathbb{R}$ 使得 $\inf_{\mathbf{a}\in\mathbb{R}^M} E(\mathbf{a}) \ge m^\star$。给定 $R = E(0) + \lambda \mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(0) - m^\star$，我们得到

$$E(\mathbf{a}) + R \ge E(0) + \lambda \mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(0) = \mathfrak{f}^{\mathrm{obj}}(0), \quad \forall\, \mathbf{a} \in \mathbb{R}^M.$$

由于 $\lim_{\|\mathbf{a}\|_2\to\infty} \mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(\mathbf{a}) = +\infty$，存在 $C > 0$ 使得对于任何满足 $\|\mathbf{a}\|_2 \ge C$ 的 $\mathbf{a}$，都有 $\mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(\mathbf{a}) > R$。给定 $\mathcal{B}_C(0) := \{\mathbf{a} \in \mathbb{R}^M \text{ s.t. } \|\mathbf{a}\|_2 < C\}$，因此我们得到

$$\mathfrak{f}^{\mathrm{obj}}(\mathbf{a}) \ge E(\mathbf{a}) + R \ge E(0) + \lambda \mathfrak{f}_{\mathrm{pen}}(0) = \mathfrak{f}^{\mathrm{obj}}(0), \ \forall\, \mathbf{a} \notin \overline{\mathcal{B}_C(0)}. \tag{34}$$

由于 $\overline{\mathcal{B}_C(0)}$ 是 $\mathbb{R}^M$ 中的紧集，我们可以应用魏尔斯特拉斯定理，得出函数存在最小值 $\mathbf{a}^\star$，且该最小值在 $\mathcal{B}_C(0)$ 中：回顾 (34)，$\mathbf{a}^\star$ 也是 $\mathbb{R}^M$ 中 $\mathfrak{f}^{\mathrm{obj}}$ 的一个最小值。 □

证明。（引理 4.1）我们首先注意到

$$f(\mathbf{u}^\star) + \xi\|\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2 \le f(P_W\mathbf{u}^\star) + \xi\|P_W\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2. \tag{35}$$

特征向量 $\{\boldsymbol{\phi}_i\}_{i=1}^N$ 满足 $\boldsymbol{\phi}_i^\top \mathbf{A}\boldsymbol{\phi}_j = \delta_{i,\ j}\lambda_i$ 且 $\boldsymbol{\phi}_i^\top \mathbf{M}\boldsymbol{\phi}_j = \delta_{i,\ j}$ 对于 $i,\ j = 1,\ \ldots\ldots,\ N$ 和 $\delta_{i,\ j}$ 是克罗内克δ函数；因此我们得到 $\|\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2 = \|P_W\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2 + \|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2$。因此，将后者代入（35），并回想 f 是Lipschitz连续的，且 $\|P_W\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{M}} \le \|\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{M}}$，我们得到

$$\xi\|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2 \le f(P_W\mathbf{u}^\star) - f(\mathbf{u}^\star) \Rightarrow \|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2 \le \frac{L^\star}{\xi}\|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{M}}.$$

我们进一步注意到

$$\|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{M}}^2 = \frac{1}{\lambda_{m+1}}\underbrace{\sum_{i=m+1}^{N}\boldsymbol{\phi}_i^\top\mathbf{M}\mathbf{u}^\star\,\lambda_i}_{=\|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2}\underbrace{\lambda_i^{-1}\lambda_{m+1}}_{\le 1} \le \frac{1}{\lambda_{m+1}}\|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2;$$

因此我们得出 $\|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}} \le \frac{L^\star}{\xi\sqrt{\lambda_{m+1}}}$ 以及 $\|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{M}} \le \frac{L^\star}{\xi\lambda_{m+1}}$，即式（27）。

最后，我们有 $\mathfrak{E} \le \mathfrak{E}_m$ 并且还有

$$\mathfrak{E}_m - \mathfrak{E} = \underbrace{f(P_W\mathbf{u}^\star) - f(\mathbf{u}^\star)}_{\le L^\star\|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{M}}} + \underbrace{\xi\left(\|P_W\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2 - \|\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{A}}^2\right)}_{\le 0} \le L^\star\|P_W^\perp\mathbf{u}^\star\|_{\mathbf{M}} \overbrace{\le}^{(27)} \frac{(L^\star)^2}{\xi\lambda_{m+1}},$$

即式（28）。 □

B 向量流的性质

B.1 数学背景

下一个定理讨论 C^k 空间中的延拓问题。该结果由 Whitney [38]提出；进一步的分析与推广见 [8, 第 2 章5]（参见 [8, 定理 2.64]）。该结果利用了下文给出的拟凸区域定义：我们注意到，任意 Lipschitz 有界域都是拟凸的。延拓定理一直是分析学中广泛研究的课题；有关该主题的全面综述，请参阅专著 [1, 8] 。特别地，关于 Sobolev 空间中的延拓问题，另一个结果见 [1，定理 5.24]。

定义 B.1. 若存在常数 $C > 0$，使得对于任意一对点 x、$y \in \Omega$，都存在一条可求长曲线 $\gamma \subset \Omega$ 连接 x 与 y，并满足以下性质，则称有界区域 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 为拟凸的

$$length(\gamma) \le C\|x - y\|_2.$$

这个最小常数 C 称为区域的拟凸常数 。

定理 B.1. 设Ω 为拟凸区域，且 $\varphi \in C^1$(Ω)。若 $\nabla\varphi$ 可定义在边界 $\partial\Omega$上，并且在Ω内连续，则存在一个 C^1 延拓，将 φ 延拓到 $\mathbb{R}^n$中。此外，延拓算子是线性且有界的。

B.2 证明

证明。（命题 3.2）由于 Ω 是拟凸的，因此 Ω × (0,1) 也拟凸；因此，我们可以应用强延拓定理 B.1，证明存在一个 C^1 延拓 V，将速度 v 延拓到 Ω × (0, 1)。由于延拓算子是连续的，$t \mapsto V(\cdot, t)$ 也是连续的。不失一般性，我们假设 V 在 $\mathbb{R}^n \times [0, 1]$中具有紧支集；也就是说，对于某个常数 $R > 0$，当 $\|x\|_2 \ge R$ 且$t \in [0, 1]$时，它为零。

我们定义 V 的流 Ψ，$\Psi = F[V]$。由于 V 一致连续，且其支集包含于有界球 B_R(0) 中，因此存在 C_0, $C_1 > 0$，使得对所有 $\xi \in \mathbb{R}^n$ 和 $t \in [0, 1]$，$\|V(\xi, t)\|_2 \le C_0 + C_1\|\xi\|_2$。因此，回顾柯西-利普希茨定理可知，对于所有初始条件 $\xi \in \mathbb{R}^n$，方程 (5) 中常微分方程的解存在且唯一。对 (5) 求导可得 $\nabla\Psi$ 的形式表达式

$$\nabla\Psi(\xi) = \nabla X(\xi, t = 1), \text{ where } \begin{cases} \frac{\partial\nabla X}{\partial t}(\xi, t) = \nabla_x V(X(\xi, t), t)\nabla X(\xi, t) & t \in (0, 1] \\ \nabla X(\xi, 0) = \mathbb{1} \end{cases}$$

由于 $\nabla_x V$ 一致连续，因此后一个常微分方程也是适定的。最后，由于向量场 V 满足 [39, 定理 8.7], 的假设，我们发现 Ψ在 $\mathbb{R}^n$中是微分同胚。

若对所有 $t \in [0,1]$，$X(\Omega, t) = \Omega$，则 Ψ 在 Ω 上的限制等于 Φ——也就是说，$\Phi = \Psi\big|_{\Omega}$——因此 Φ是 Ω 上的双射。

现在我们证明，对于所有 $t \in [0,1]$，$X(\Omega, t) = \Omega$（另见 [32, 定理 4.4]）。为此，我们引入$\rho_0 \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n) \cap C^\infty(\mathbb{R}^n)$，并定义推前测度 $\rho(x,t) = \rho_0(\xi) \left(\det\big(\nabla X(\xi,t)\big)\right)^{-1}$的密度，其中 $x = X(\xi,t)$。给定 $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$——$C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ 是具有紧支撑的 $C^\infty(\mathbb{R}^n)$ 函数——并引入记号 $J(\xi,t) := \det\big(\nabla X(\xi,t)\big)$，我们得到[1]

$$
\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^n} \partial_t \rho(x,t)\phi(x)\,dx = \frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^n} \rho(x,t)\phi(x)\,dx \\
&\overset{(\mathrm{CV})}{=} \frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^n} \phi(X(\xi,t))\rho_0(\xi)\left(J(\xi,t)\right)\big)^{-1} J(\xi,t)\,d\xi = \frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^n} \phi(X(\xi,t))\rho_0(\xi)\,d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial}{\partial t}\phi(X(\xi,t))\rho_0(\xi)\,d\xi = \int_{\mathbb{R}^n} \nabla_x \phi(X(\xi,t))\cdot \partial_t X(\xi,t)\rho_0(\xi)\,d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \nabla_x \phi(X(\xi,t))\cdot v(X(\xi,t),t)\rho_0(\xi)\,d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \nabla_x \phi(X(\xi,t))\cdot v(X(\xi,t),t)\rho_0(\xi,t)\left(J(\xi,t)\right)^{-1} J(\xi,t)\,d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \nabla_x \phi(X(\xi,t))\cdot v(X(\xi,t),t)\rho(X(\xi,t),t)J(\xi,t)\,d\xi \\
&\overset{(\mathrm{CV})}{=} \int_{\mathbb{R}^n} \nabla_x \phi(x)\cdot v(x,t)\rho(x,t)\,dx
\end{aligned}
$$

其中 $\overset{(\mathrm{CV})}{=}$ 表示应用变量替换公式。若 v 和 X （从而 ρ）足够光滑，则可得

$$
\int_{\mathbb{R}^n} \left(\partial_t \rho(\cdot,t) + \nabla_x \cdot \left(v(\cdot,t)\rho(\cdot,t)\right)\right)\phi\,dx = 0 \qquad \forall\, \phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n), \quad \forall\, t \in [0,1].
$$

由于 $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ 在 $L^2(\Omega)$ 中稠密，我们还可以得到

$$
\int_{\Omega} \left(\partial_t \rho(\cdot,t) + \nabla_x \cdot \left(v(\cdot,t)\rho(\cdot,t)\right)\right)\phi\,dx = 0 \qquad \forall\, \phi \in L^2(\Omega), \quad \forall\, t \in [0,1].
$$

然后，代入 $\phi \equiv 1$ 并应用高斯定理，可得

$$
\frac{d}{dt}\int_\Omega \rho(x,t)\,dx = \int_\Omega \partial_t \rho(x,t)\,dx = -\int_{\partial\Omega} \partial_t \rho(x,t)\,\underbrace{v(x,t)\cdot \mathbf{n}(x)}_{=0}\,dx = 0
$$

因此

$$
\int_\Omega \rho(x,t)\,dx = \int_\Omega \rho_0(\xi)\,d\xi, \quad \forall\, \rho_0 \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)\cap C^\infty(\mathbb{R}^n). \tag{36}
$$

恒等式 (36) 可通过稠密性论证轻易推广到一般情形。事实上，我们可以引入一个序列 $\{v_j\}_{j=1}^\infty \subset C^\infty$，使得 $\lim_j \|v - v_j\|_{C^1(\Omega\times(0,1))} = 0$，并将 X_j 定义为 v_j的流，将ρ_j 定义为相应推前测度的密度。由于 $v_j \in C^\infty$，我们可以轻易证明$X_j \in C^\infty$ 也成立（参见 [39, 定理 8.9]），因此 $\rho_j \in C^\infty$。利用 (18)，我们可以证明 X_j 在 $L^\infty(\Omega)$ 中收敛至 X；此外，采用类似的论证[2]，还可以证明 ∇X_j 在 $L^\infty(\Omega)$中收敛至 ∇X。总之，对于所有 $t \in [0,1]$，我们有 $\lim_j \|\rho(\cdot,t) - \rho_j(\cdot,t)\|_{L^2(\Omega)} = 0$，这意味着 ρ满足 (36)。

反证法中，假设对于某个 $\xi \in \Omega$ 和 $t \in (0,1]$，有 $X(\xi,t) \notin \Omega$。由于 $X(\cdot,t)$ 是连续的且是全局微分同胚，因此存在一个开邻域 $A = \mathcal{B}_r(\xi) \cap \Omega$，使得对于所有$\xi \in A$，$X(\xi,t) \notin \Omega$。现在考虑 $\rho_0 : \Omega \to \mathbb{R}_+$，使其满足：(i) $\rho_0(\xi) \geq 0$；(ii) $\rho_0 \in C^\infty(\Omega)$；(iii) 对所有 $\xi \notin A$，$\rho_0(\xi) = 0$；以及 (iv) $\int_\Omega \rho_0(\xi)\,d\xi = 1$。利用推前密度的定义，由于 $\Omega \cap X(A,t) = \emptyset$，我们得到

$$
\int_\Omega \rho(x,t)\,dx = \int_{\Omega\cap X(A,t)} \rho(x,t)\,dx = 0 \neq 1 = \int_\Omega \rho_0(\xi)\,d\xi,
$$

[1]注意，这里需要考虑在 $\mathbb{R}^n$ 上进行积分，因为我们不知道 $X(\cdot,t)$ 是否是 Ω 中的微分同胚。[2]如果定义 $W = \nabla X$ 和 $W_j = \nabla X_j$，则可得到差值 $e_j = W - W_j$ 满足（省略其对 ξ 的依赖）：

$$
\begin{cases} \partial_t e_j = \nabla v W - \nabla v_j W_j = \nabla v_j e + (\nabla v - \nabla v_j)W & t \in (0,1] \\ e_j(0) = 0 \end{cases}
$$

回顾引理 B.1、公式（41），以及任何收敛序列都是有界的这一事实，我们很容易得出

$$
\max_{\xi\in\overline{\Omega}} \|W(\xi,t) - W_j(\xi,t)\|_2 \leq C\|\nabla v(\cdot,t) - \nabla v_j(\cdot,t)\|_{L^\infty(\Omega\times(0,1))},
$$

这意味着序列 $\{W_j\}_j$ to W 在 L^∞ 中收敛。

这与（36）矛盾。 □

证明。（命题 3.3）由于 $\Phi \in \mathrm{Diff}_0(\Omega)$，根据定义，存在一个同伦 $X : \Omega \times [0,1] \to \Omega$，使得 (i) 对所有 $\xi \in \Omega$，$X(\xi,\ t=0) = \xi$；(ii) $X(\xi,\ t=1) = \Phi(\xi)$；(iii) 对所有 $t \in [0,1]$，$X(\cdot,\ t) \in \mathrm{Diff}_0(\Omega)$。接着，我们可以定义向量场 v，使得 $v(X(\xi,\ t),\ t) := \frac{\partial X}{\partial t}(\xi,\ t)$。根据构造，对于所有 $\xi \in \Omega$，$t \mapsto X(\xi,\ t)$ 都是常微分方程组 (5) 的唯一解。

反设 $v(x,\ \bar{t}) \cdot \mathbf{n}(x) \neq 0$，其中某个 $x \in \partial\Omega$ 满足边界 $\partial\Omega$ 局部可微（因而法向量 $\mathbf{n}$ 有良好定义），且 $\bar{t} \in (0,1]$。由于 $X(\cdot,\ \bar{t}) \in \mathrm{Diff}_0(\Omega)$，必有 $X(\partial\Omega,\ \bar{t}) = \partial\Omega$，因此存在唯一的 $\xi \in \partial\Omega$，使得 $X(\xi,\ \bar{t}) = x$。接下来，我们引入与轨迹相关的距离函数

$$t \in [0,1] \mapsto d(\xi,t) := \mathrm{dist}(X(\xi,t), \partial\Omega),$$

$t \in [0,1] \mapsto X(\xi,\ t)$。由于对所有 $t \in [0,1]$，$X(\cdot,\ t) \in \mathrm{Diff}_0(\Omega)$，必有 $d(\xi,\ t) \equiv 0$。另一方面，回顾一下，对于所有边界 $\partial\Omega$ 局部可微的 $x \in \partial\Omega$，均有 $\nabla_x \mathrm{dist}(x,\ \partial\Omega) = \mathbf{n}(x)$，可得

$$d(\xi, \bar{t} + \Delta t) = \underbrace{d(\xi,\bar{t})}_{=0} + \underbrace{\frac{\partial d}{\partial t}(\xi,t)}_{=\partial_t X(\xi,\bar{t}) \cdot \nabla_x \mathrm{dist}(x,\partial\Omega)} \Delta t + o(\Delta t) = v(x,\bar{t}) \cdot \mathbf{n}(x) \Delta t + o(\Delta t),$$

对所有 $|\Delta t| \ll 1$ 均成立。这意味着 $t \mapsto d(\xi,\ t)$ 在 $t =$ 的一个邻域内不为零 $\bar{t}$。矛盾。 □

证明。（命题 3.4）我们注意到，(5) 是一个依赖于初始条件 $\xi \in \Omega$ 和参数 $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^M$ 的常微分方程组。对 $\xi \in \Omega$ 求 (5) 的导数可得，$t \mapsto \nabla X(\xi,\ t)$ 满足

$$\begin{cases} \frac{\partial \nabla X}{\partial t}(\xi,t) = \nabla_x v(X(\xi,t),t) \nabla X(\xi,t) \quad t \in (0,1], \\ \nabla X(\xi,0) = \mathbb{1}. \end{cases} \tag{37}$$

回顾行列式导数的雅可比公式，可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial t}(\xi,t) = &\ J(\xi,t) \mathrm{trace}\left((\nabla X(\xi,t))^{-1} \frac{\partial \nabla X}{\partial t}(\xi,t) \right) \\ = &\ = J(\xi,t) \mathrm{trace}\left((\nabla X(\xi,t))^{-1} \nabla_x v\left(X(\xi,t),t\right) \nabla X(\xi,t) \right). \end{aligned}$$

由于对于任意一对相容的方阵 A 和 B，迹$(AB) =$ 迹(BA)，因此可得

$$\frac{\partial J}{\partial t}(\xi,t) = J(\xi,t) \mathrm{trace}\left(\nabla_x v\left(X(\xi,t),t\right)\right) = J(\xi,t) \left(\nabla_x \cdot v\left(X(\xi,t),t\right)\right),$$

这就是所要证明的结果。 □

证明。(命题 *3.5*)。我们用 X 表示与 v 相关的流，用 Y 表示与 w 相关的流。给定 $\xi \in \Omega$，我们定义 $e(t) := \|X(\xi,t) - Y(\xi,t)\|_2$。于是有

$$\begin{aligned} e(t) &= \Big\| \int_0^t \left(\partial_t X(\xi,s) - \partial_t Y(\xi,s)\right) ds \Big\|_2 = \Big\| \int_0^t \left(v(X(\xi,s),s) - w(Y(\xi,s),s)\right) ds \Big\|_2 \\ &\leq \int_0^t \left\| v(X(\xi,s),s) - w(Y(\xi,s),s) \right\|_2 ds \\ &\leq \int_0^t \left\| v(X(\xi,s),s) - v(Y(\xi,s),s) \right\|_2 ds + \int_0^t \left\| v(Y(\xi,s),s) - w(Y(\xi,s),s) \right\|_2 ds \end{aligned}$$

利用 Lipschitz 常数的定义，并引入 $\delta(t) := \sup_{\xi \in \Omega} \left\| v(\xi,s) - w(\xi,s) \right\|_2$，我们得到

$$e(t) \leq \int_0^t L e(s)\, ds + \int_0^t \delta(s)\, ds.$$

然后，应用 Gronwall 不等式，并注意到 $\max_{s \in [0,1]} \delta(s) \leq \|v - w\|_{L^\infty(\Omega \times (0,1))}$，可得

$$\begin{aligned} e(t) \leq &\ \int_0^t \delta(s) e^{L(t-s)}\, ds \leq \|v - w\|_{L^\infty(\Omega\times(0,1))} \int_0^t e^{L(t-s)}\, ds \\ &= \|v - w\|_{L^\infty(\Omega\times(0,1))} \frac{e^{Lt} - 1}{L}, \end{aligned}$$

这就是所需的结果。 □

B.2.1 目标函数梯度的计算

鉴于命题 3.6 和 3.7 的证明，我们回顾以下引理。

引理 B.1. （参见 *[2]*）考虑以下常微分方程组：

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = A(t)x(t) + b(t) \quad t > 0, \\ x(0) = x_0, \end{cases} \tag{38}$$

其中 $A: \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}^{n\times n}$ 和 $b: \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}^n$ 是光滑函数。存在一个状态转移矩阵$\Phi: \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}^{n\times n}$，它仅依赖于 A，使得(38) 的解为

$$x(t) = \Phi(t,s)x(s) + \int_s^t \Phi(t,\tau)b(\tau)\,d\tau, \quad \forall\, t,s \in \mathbb{R}_+, t > s. \tag{39}$$

证明。（命题 3.6）。对 (5) 关于 a_i 求导，可得

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t}\dfrac{\partial X}{\partial a_i}(\xi,t) = \nabla_x v\left(X(\xi,t),t\right)\dfrac{\partial X}{\partial a_i}(\xi,t) + \dfrac{\partial v}{\partial a_i}\left(X(\xi,t),t\right) \quad t \in (0,1) \\ \dfrac{\partial X}{\partial a_i}(\xi,0) = 0, \end{cases} \tag{40}$$

对于 $i = 1,\dots,M$。注意到，(40) 和 (37) 可写成具有相同矩阵 $A(t) = \nabla_x v(X(\xi,t)\ t)$ 的 (38) 形式的参数化常微分方程组；因此，它们共享同一个状态转移矩阵 Φ。

利用引理 B.1，我们由此得到

$$\Phi(t,\tau;\xi) = \nabla X(\xi,t)\left(\nabla X(\xi,\tau)\right)^{-1}. \tag{41}$$

将 (41) 代入 (39)，最终得到

$$\frac{\partial X}{\partial a_i}(\xi,t) = \nabla X(\xi,t)\int_0^t \left(\nabla X(\xi,\tau)\right)^{-1}\phi_i\left(X(\xi,\tau),\tau\right)\,d\tau, \quad \text{for } i = 1,\dots,M,$$

即 (20)。 □

证明。（命题 3.7）。(21) 和 (22) 的证明采用完全相同的论证，因此我们只对 (22) 给出严格证明。下文为简化记号，省略对**a**的依赖。首先，给定 $k \in \{1,\dots,M\}$，我们将 (12) 改写为

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = \sum_{i=1}^{N_0}\Psi_i \cdot \frac{\partial \mathbb{N}}{\partial a_k}(\xi_i) = \sum_{i=1}^{N_0}\Psi_i \cdot \frac{\partial X_i}{\partial a_k}(1) \tag{42}$$

其中 $X_i(t) = X(\xi_i,t)$ 且 $\Psi_i := X_i(1) - \left(\sum_{j=1}^{N_1} P_{i,j}y_j\right)$ 对 $i = 1,..,N_0$成立。利用伴随的定义，我们得到

$$\int_0^1 \left(\frac{d\Lambda_i}{dt}(t) + \nabla_x v\left(X_i(t),t\right)^\top \Lambda_i(t)\right)\cdot\frac{\partial X_i}{\partial a_k}(t)\,dt = 0, \quad \text{for } i = 1,\dots,N_0.$$

对第一项分部积分，并利用 (22b) 的终端条件以及 $\frac{\partial X_i}{\partial a_k}(0) = 0$ 这一事实，可得 ——

$$\int_0^1 \left(\frac{d}{dt}\frac{\partial X_i}{\partial a_k}(t) - \nabla_x v\left(X_i(t),t\right)\frac{\partial X_i}{\partial a_k}(t)\right)\cdot\Lambda_i(t)\,dt = \Psi_i\cdot\frac{\partial X_i}{\partial a_k}(1), \quad \text{for } i = 1,\dots,N_0. \tag{43}$$

比较 (42) 与 (43)，可推出

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = \sum_{i=1}^{N_0}\int_0^1 \left(\frac{d}{dt}\frac{\partial X_i}{\partial a_k}(t) - \nabla_x v\left(X_i(t),t\right)\frac{\partial X_i}{\partial a_k}(t)\right)\cdot\Lambda_i(t)\,dt$$

然后利用式 (40)，我们得到

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = \int_0^1 \frac{\partial v}{\partial a_k}\left(X_i(t),t\right)\cdot\Lambda_i(t)\,dt,$$

即式（22b）。 □

参考文献

[1] R. A. Adams 和 J. J. Fournier。《Sobolev空间》，第140卷。爱思唯尔，第二版，2003。[2] M. Baake 和 U. Schlaegel。皮亚诺–贝克级数。《斯捷克洛夫数学研究所学报》，275(1):155–159，2011。[3] A. Banyaga。《经典微分同胚群的结构》，第400卷。Springer Science & Business Media，2013。[4] M. F. Beg、M. I. Miller、A. Trouv´e 和 L. Younes。通过微分同胚的测地流计算大变形度量映射。《国际计算机视觉杂志》，61:139–157，2005。[5] T. Blickhan。利用线性最优传输求解降阶基问题的配准方法。SIAM科学计算杂志，46(5):A3177–A3204，2024。[6] L. G. Brown。图像配准技术综述。《ACM计算调查》（CSUR），24(4):325–376，1992。[7] M. Brown。拓扑流形的局部平坦嵌入。《数学年刊》（2），75:331–341，1962。[8] A. Brudnyi 和 Y. Brudnyi。扩张与迹问题的几何分析方法：第1卷，第102卷。Springer Science & Business Media，2011。[9] G. E. Christensen、R. D. Rabbitt 和 M. I. Miller。使用大变形运动学的可变形模板。《IEEE图像处理汇刊》，5(10):1435–1447，1996。[10] P. G. Ciarlet。椭圆问题的有限元法。SIAM，2002。[11] S. Cucchiara、A. Iollo、T. Taddei 和 H. Telib。通过凸位移插值实现模型降阶。《计算物理学杂志》，514:113230，2024。[12] M. De Buhan、C. Dapogny、P. Frey 和 C. Nardoni。一种弹性形状匹配优化方法。《数学报告》，354(8):783–787，2016。 [13] R. J. DiPerna 和 P.-L. Lions。常微分方程、输运理论与Sobolev空间。《数学新进展》，98(3):511–547，1989。[14] C.-W. Ho。关于真映射的注记。《美国数学会会刊》，51:237–241，1975。[15] A. Iollo 和 D. Lombardi。通过最优质量传输得到对流模态。《物理评论E》，89(2):022923，2014。[16] A. Iollo 和 T. Taddei。通过高斯模型学习最优传输，映射参数化流中的相干结构。《计算物理学杂志》，471:111671，2022。[17] A. Jameson。通过控制理论进行气动设计。《科学计算杂志》，3:233–260，1988。[18] A. Kabalan、F. Casenave、F. Bordeu、V. Ehrlacher 和 A. Ern。基于弹性的变形技术及其在降阶建模中的应用。《应用数学建模》，141:115929，2025。[19] J. Labatut、A. Iollo 和 T. Taddei。对流主导的可压缩参数化流的非线性计算流体力学数据插值。载于 AIAA SCITECH 2025论坛，第2132页，2025。[20] J. Ma、H. Zhou、J. Zhao、Y. Gao、J. Jiang 和 J. Tian。通过局部线性变换实现遥感图像配准的鲁棒特征匹配。《IEEE地球科学与遥感汇刊》，53(12):6469–6481，2015。[21] J. E. Marsden 和 T. J. Hughes。弹性力学的数学基础。Courier Corporation，1983。[22] A. T. McRae、C. J. Cotter 和 C. J. Budd。利用有限元法在平面与球面上实现基于最优传输的网格自适应。SIAM科学计算杂志，40(2):A1121–A1148，2018。[23] M. A. Mirhoseini 和 M. J. Zahr。通过基于优化的隐式特征跟踪对流主导偏微分方程进行模型降阶。《计算物理学杂志》，473:111739，2023。[24] R. Mojgani 和 M. Balajewicz。用于对流主导偏微分方程的基于低秩配准的流形。载于《AAAI人工智能会议论文集》，第35卷，第399–407页，2021。

[25] J. Munkres。《拓扑学》。Pearson Education Limited，第二版，2014年。[26] A. Myronenko 和 X. Song。点集配准：相干点漂移。《IEEE模式分析与机器智能汇刊》，32(12):2262–2275，2010年。[27] J. Neuberger。《Sobolev梯度与微分方程》。Springer Science & Business Media，2009年。[28] G. Peyr´e 和 M. Cuturi。计算最优传输：及其在数据科学中的应用。《机器学习基础与趋势》®《机器学习》，11(5-6):355–607，2019年。[29] O. Pironneau。椭圆系统的最优形状设计。载于《系统建模与优化：第十届IFIP会议论文集，美国纽约市，1981年8月31日至9月4日》，第42–66页。Springer，2005年。[30] T. Polzin。《大变形微分同胚度量映射：理论、数值方法与应用》。博士论文，吕贝克中央大学图书馆，2018年。[31] A. H. Razavi 和 M. Yano。基于配准的参数化空气动力学问题非线性模型降阶及其在跨音速Euler流和RANS流中的应用。《计算物理学杂志》，521:113576，2025年。[32] F. Santambrogio。《应用数学家的最优传输》，第87卷。Springer，2015年。[33] G. R. Shubin、A. Stephens、H. Glaz、A. Wardlaw 和 L. Hackerman。稳态激波跟踪、牛顿法与超音速钝体问题。《SIAM科学与统计计算杂志》，3(2):127–144，1982年。[34] A. Sotiras、C. Davatzikos 和 N. Paragios。可变形医学图像配准：综述。《IEEE医学影像汇刊》，32(7):1153–1190，2013年。[35] T. Taddei。一种用于模型降阶的配准方法：数据压缩与几何降阶。《SIAM科学计算杂志》，42(2):A997–A1027，2020年。[36] T. Taddei。复杂几何中的配准复合映射。《SIAM科学计算杂志》，47(1):B220–B251，2025年。[37] T. Taddei 和 L. Zhang。参数化一维双曲型偏微分方程的基于时空配准的模型降阶。《ESAIM：数学建模与数值分析》，55(1):99–130，2021年。[38] H. Whitney。区域边界上的可微函数。《数学年刊》，35(3):482–485，1934年。[39] L. Younes。《形状与微分同胚》，第171卷。Springer，第二版，2010年。[40] M. J. Zahr 和 P.-O. Persson。一种基于优化的方法，用于对含不连续解的守恒律进行高阶精度离散。《计算物理学杂志》，365:105–134，2018年。[41] W. P. Ziemer。《弱可微函数：Sobolev空间与有界变差函数》，第120卷。Springer Science & Business Media，2012年。