

基于 Mori-Zwanzig 格式和偏最小二乘的非线性模型降阶*

赖学方, 王晓龙, 聂玉峰

(西北工业大学 数学与统计学院, 西安 710129)

摘要: 本征正交分解及 Galerkin 投影是解决复杂非线性系统模型降阶问题常用的方法.然而,该方法在构造降阶系统过程中只截取基函数的部分模态,这通常会使得降阶系统不准确.针对该问题,提出了对降阶系统误差进行快速校正的方法.首先应用 Mori-Zwanzig 格式对降阶系统的误差进行分析,理论上得到误差模型的形式和有效预测变量.再通过偏最小二乘方法构造预测变量和系统误差的多元回归模型,建立误差预测模型.将所构造的误差预测模型直接嵌入到原降阶系统,得到新的降阶系统在形式上等价于对原模型的右端采用 Petrov-Galerkin 投影.最后给出了新的降阶系统的误差估计.数值结果进一步说明了所提方法能有效地提高降阶系统的稳定性和准确性,且具有较高计算效率.

关键词: 模型降阶; Mori-Zwanzig 格式; 偏最小二乘; 误差校正; Petrov-Galerkin 投影

中图分类号: O242.2 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.410230

Nonlinear Model Reduction Based on the Mori-Zwanzig Scheme and Partial Least Squares

LAI Xuefang, WANG Xiaolong, NIE Yufeng

(School of Mathematics and Statistics, Northwestern Polytechnical University,
Xi'an 710129, P.R.China)

Abstract: The proper orthogonal decomposition and the Galerkin projection are widely used methods for solving the model reduction problems of complex nonlinear systems. However, only a part of basis function modes are extracted with these methods to construct the reduced systems, which usually makes the reduced systems inaccurate. For this issue a method was proposed to efficiently correct the errors of the reduced systems. First, the Mori-Zwanzig scheme was employed to analyze the errors of the reduced systems, with the theoretical form of the error model and the effective predictive variables obtained. Then, the error prediction model was built by means of the partial least square method to construct the multiple regression model between the predictive variables and the system errors. The constructed error prediction model was directly embedded into the original reduced system, to get a modified reduced system formally equivalent to the model obtained with the Petrov-Galerkin projection on the right side of the original model. The error estimation of the modified reduced system

* 收稿日期: 2020-08-05; 修订日期: 2021-01-06

基金项目: 国家自然科学基金(11871400;11971386)

作者简介: 赖学方(1988—),男,博士生(E-mail: xfanglai@mail.nwpu.edu.cn);

聂玉峰(1968—),男,教授,博士,博士生导师(通讯作者. E-mail: yfnie@nwpu.edu.cn).

引用格式: 赖学方, 王晓龙, 聂玉峰. 基于 Mori-Zwanzig 格式和偏最小二乘的非线性模型降阶[J]. 应用数学和力学, 2021, 42(6): 551-561.

was given. Numerical results illustrate that, the proposed method can improve the stability and accuracy of the reduced systems effectively, and has high computation efficiency.

Key words: model reduction; Mori-Zwanzig scheme; partial least square; error correction; Petrov-Galerkin projection

引 言

科学和工程计算领域中的许多问题都是由偏微分方程 (partial differential equation, PDE) 来刻画的. 当关于 PDE 数值求解的规模较大时, 繁重的计算负担制约着方程求解的效率. 为此, 许多学者提出了模型降阶^[1-3]的方法. 在保证一定精度的前提下, 模型降阶构造一个低维模型来近似原来高维复杂模型, 从而减少计算成本, 提高数值模拟效率.

对带有时间项的非线性 PDE 在空间方向采用有限元或有限差分数值离散, 原方程在形式上可以转变为一个非线性动态系统. 本征正交分解 (proper orthogonal decomposition, POD)^[4] 是非线性系统模型降阶最为常用的方法之一, 已广泛应用于流体力学^[5-6]、结构力学与材料^[7-8]等诸多领域. POD 是一种数据驱动的模态分解方法, 能有效地提取系统变量的特征模态. 为构建降阶模型, 通常 POD 方法还需和 Galerkin 投影^[9]相结合. 然而, 在使用 POD 和 Galerkin 投影方法构造降阶模型时需截断 POD 基函数的部分模态, 当舍去的模态较多时, 降阶模型通常会不稳定和不准确.

为减少舍去的基函数模态对降阶模型误差的影响, Carlberg 等^[10-11]提出了基于 Petrov-Galerkin 投影和最小二乘 Petrov-Galerkin 投影的降阶方法. 另外, 一些研究者则通过构造 closure 模型^[12]来对降阶系统误差进行校正. 例如, San 等^[13]基于前馈神经网络对 Burger 方程的降阶模型构建了 closure 模型. Xie 等^[14]利用空间滤波方法构建了流体方面降阶问题的 closure 模型. 类似地, Wang 等^[15]研究了针对大涡模拟的 closure 模型. 特别地, 近年来研究者们又提出和发展了基于 Mori-Zwanzig (MZ) 格式的模型降阶方法^[16-17]. 根据 MZ 格式的相关理论, 舍去的基函数模态对降阶模型的影响可通过关于保留模态的记忆项来刻画. 为此, Parish 等^[18]基于 MZ 格式和变分多尺度法对降阶系统的 closure 模型进行了研究. 基于 MZ 格式, Pan 等^[19]利用稀疏多项式回归和神经网络方法构建了非线性系统的 closure 模型; Wang 等^[20]则利用长短时记忆网络对参数化的非线性降阶系统构建了 closure 模型. 目前, 尽管关于 closure 模型的研究取得了许多有效的进展, 但这些研究大多采用深度学习或者较为复杂的机器学习方法来构造 closure 模型, 因而模型的构建难度往往较大, 且需消耗较多的模型训练时间. 另外, 所构建的 closure 模型往往不能直接嵌入到原来的降阶模型中, 从而影响降阶模型的整体求解效率.

针对由 POD 和 Galerkin 投影方法所构造的非线性降阶系统的系统误差, 本文利用 MZ 格式和偏最小二乘 (partial least squares, PLS) 回归方法^[21-22]构造了一个更加高效准确的 closure 模型. 首先, 应用 MZ 格式对降阶系统的误差进行分析, 理论上推导得到 closure 模型的基本形式和预测变量; 然后通过 PLS 回归方法对 closure 模型进行建模. PLS 方法是一种高效稳定的统计方法, 它集成了主成分分析、典型相关分析的特点, 能有效解决多变量对多变量之间的建模问题. 此外, 在样本数据少、变量之间存在多重共线性的情况下, PLS 回归方法也有较好的表现. 特别地, 本文所提出方法最大的特点是所构造的 closure 模型能直接嵌入到原降阶模型中, 得到的新降阶模型和原降阶模型几乎有相同的模型复杂度, 从而既提高了降阶模型的精度, 又保证了模型的效率.

1 非线性系统模型降阶

1.1 POD 和 Galerkin 投影

考虑如下形式的非线性动态系统:

$$\frac{d\mathbf{u}(t)}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{u}(t) + \mathbf{f}(\mathbf{u}(t)), \quad \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0, \quad (1)$$

其中, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为常数矩阵, $\mathbf{u}(t) = [u_1(t), u_2(t), \dots, u_n(t)]^T \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, $u_i(t) = u(x_i, t)$ 表示系统 t 时刻在空

间位置 x_i 处的值,函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 为非线性函数.特别地,系统(1)可通过对带有时间项的非线性PDE在空间方向采用有限元或有限差分等数值方法离散得到,其中 n 表示空间离散点数.当 n 较大时,数值求解系统(1)将消耗巨大计算量,有时甚至是不可行的.

为减少计算代价,利用POD和Galerkin投影方法^[6]构造系统(1)的降阶模型.假设系统变量 $\mathbf{u}(t)$ 的POD基函数为 $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$,截取基函数 \mathbf{V} 的前 k 列记为 \mathbf{V}_k ,即 $\mathbf{V}_k = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k] \in \mathbb{R}^{n \times k}$.基于 k 维POD基函数 \mathbf{V}_k ,状态变量 $\mathbf{u}(t)$ 可近似为 $\mathbf{u}(t) \approx \mathbf{V}_k \mathbf{a}(t)$,将其代入系统(1),并对系统方程两边乘以变换矩阵 $\mathbf{W}_k^T \in \mathbb{R}^{k \times n}$,则可得原系统(1)的降阶系统为

$$\mathbf{W}_k^T \mathbf{V}_k \frac{d\tilde{\mathbf{a}}(t)}{dt} = \mathbf{W}_k^T \mathbf{A} \mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{a}}(t) + \mathbf{W}_k^T \mathbf{f}(\mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{a}}(t)), \quad (2)$$

其中, $\tilde{\mathbf{a}}(t) \in \mathbb{R}^k$ 为降阶系统的求解变量,它是系统(1)的变量 $\mathbf{u}(t)$ 在基函数空间下的系数向量.当 $k \ll n$ 时,降阶系统(2)的规模将远小于原系统(1)的规模.当变换矩阵 $\mathbf{W}_k \neq \mathbf{V}_k$,称上述方法为Petrov-Galerkin投影^[10-11].然而,恰当的变换矩阵 \mathbf{W}_k 并不容易直接得到.因此,一般取变换矩阵 $\mathbf{W}_k = \mathbf{V}_k$,称该方法为Galerkin投影.

1.2 系统非线性项近似

通常,降阶系统(2)对处理非二次多项式型的非线性项的效率不高.在求解系统(2)时,非线性项 $\mathbf{f}(\mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{a}}(t))$ 的计算规模仍正比于系统(1)的维度 n .对此,可对非线性项采用基于稀疏采样的近似方法.例如,基于离散经验插值方法^[23],系统(2)的非线性项 $\mathbf{f}(\mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{a}}(t))$ 可近似为

$$\mathbf{f}(\mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{a}}(t)) \approx \mathbf{S}(\mathbf{P}^T \mathbf{S})^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{f}(\mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{a}}(t)), \quad (3)$$

其中, $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times r}$ 和 $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{n \times r}$ 分别为非线性函数 $\mathbf{f}(\mathbf{u}(t))$ 的 r 维插值矩阵和POD基函数.基于式(3),在求解降阶系统(2)时,非线性项 $\mathbf{f}(\mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{a}}(t))$ 只需计算其 r 个插值点处的值,且通常 $r \ll n$.另外,当非线性函数 \mathbf{f} 的表达式未知时,则常采用基于动态模态分解的近似方法^[24].

2 基于MZ格式和PLS构造降阶系统closure模型

对于由POD和Galerkin投影方法构造的降阶系统(2),只截取基函数的部分模态通常会影响降阶系统的稳定性和准确性.为此,本节利用MZ格式和PLS方法构建降阶系统的closure模型,且将建立的closure模型直接嵌入到原降阶系统中,从而达到对降阶系统的误差进行校正的效果.

2.1 Mori-Zwanzig格式理论

先简要介绍一下MZ格式^[16]的理论,考虑如下一般形式的非线性常微分方程:

$$\frac{d\boldsymbol{\phi}(t)}{dt} = \mathbf{R}(\boldsymbol{\phi}(t)), \quad \boldsymbol{\phi}(0) = \boldsymbol{\phi}_0, \quad (4)$$

其中, $\boldsymbol{\phi}(t) \in \mathbb{R}^Q$, $\mathbf{R}(\cdot): \mathbb{R}^Q \rightarrow \mathbb{R}^Q$ 为非线性函数.将状态变量 $\boldsymbol{\phi}(t)$ 和 $\mathbf{R}(\cdot)$ 分成两部分:

$$\boldsymbol{\phi}(t) = [\hat{\boldsymbol{\phi}}(t) \setminus \hat{\boldsymbol{\phi}}^c(t)], \quad \mathbf{R}(\boldsymbol{\phi}(t)) = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{R}}(\hat{\boldsymbol{\phi}}(t), \hat{\boldsymbol{\phi}}^c(t)) \\ \hat{\mathbf{R}}^c(\hat{\boldsymbol{\phi}}(t), \hat{\boldsymbol{\phi}}^c(t)) \end{bmatrix}, \quad (5)$$

其中, $\hat{\boldsymbol{\phi}}(t) \in \mathbb{R}^{k_1}$, $\hat{\mathbf{R}}(\cdot, \cdot): \mathbb{R}^{k_1} \times \mathbb{R}^{Q-k_1} \rightarrow \mathbb{R}^{k_1}$, $\hat{\mathbf{R}}^c(\cdot, \cdot): \mathbb{R}^{k_1} \times \mathbb{R}^{Q-k_1} \rightarrow \mathbb{R}^{Q-k_1}$.基于MZ格式的相关理论^[16],有

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{\phi}}(t)}{dt} = \hat{\mathbf{R}}(\hat{\boldsymbol{\phi}}(t)) + \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\boldsymbol{\phi}}(s), t-s) ds + \mathbf{Q}(\hat{\boldsymbol{\phi}}_0, t), \quad (6)$$

其中, $\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\boldsymbol{\phi}}(s), t-s) ds$ 称作记忆项; $\mathbf{Q}(\hat{\boldsymbol{\phi}}_0, t)$ 为噪声项,且在一定条件下可以消掉.

2.2 应用MZ格式分析降阶系统

将MZ格式应用到降阶系统(2)中.已知 $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为系统状态变量 $\mathbf{u}(t)$ 的 n 维POD基函数,则 $\mathbf{u}(t)$ 可被准确分解为 $\mathbf{u}(t) = \sum_{i=1}^n \mathbf{v}_i a_i(t)$,记

$$\begin{cases} \mathbf{V}_k = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k], & \mathbf{V}_k^c = [\mathbf{v}_{k+1}, \mathbf{v}_{k+2}, \dots, \mathbf{v}_n], \\ \hat{\mathbf{a}} = [a_1, a_2, \dots, a_k], & \hat{\mathbf{a}}^c = [a_{k+1}, a_{k+2}, \dots, a_n]. \end{cases} \quad (7)$$

则对于基于 POD 和 Galerkin 投影方法构建的降阶系统(2),根据 MZ 格式,有

$$\mathbf{V}_k^T \mathbf{V}_k \frac{d\hat{\mathbf{a}}(t)}{dt} = \mathbf{V}_k^T \mathbf{A} \mathbf{V}_k \hat{\mathbf{a}}(t) + \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}(\mathbf{V}_k \hat{\mathbf{a}}(t)) + \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds, \quad (8)$$

其中,记忆项 $\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds$ 为降阶系统(2)的 closure 模型.另外,式(8)本应还包含噪声项 $\mathbf{Q}(\hat{\mathbf{a}}(t_0), t)$,但当给定条件 $\hat{\mathbf{a}}(t_0) = \mathbf{V}_k^T \mathbf{u}(t_0)$ 时,该噪声项可消掉^[18,20].相比于降阶系统(2),降阶系统(8)多了一个 closure 模型 $\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds$.注意,式(8)是一个准确模型,不是近似模型,但记忆核 \mathbf{K} 是一个相对复杂的算子,直接计算存在着困难.关于记忆项的估计有多种不同的模型,在这里采用如下形式的“ τ -模型”^[25]对记忆项进行近似:

$$\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds \approx \tau \int_{t-\tau}^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds \approx \frac{1}{2} \tau \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(t), 0), \quad (9)$$

其中, τ 是模型参数,称作记忆长度,它对模型的效果有着重要的影响.进一步地,利用模型(8),推导得到^[26]

$$\mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(t), 0) = \mathbf{V}_k^T \mathbf{H}'(\hat{\mathbf{u}}(t)) (\mathbf{I}_n - \mathbf{V}_k \mathbf{V}_k^T) \mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t)), \quad (10)$$

其中, $\hat{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{V}_k \hat{\mathbf{a}}(t)$, $\mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t)) = \mathbf{A} \hat{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{f}(\hat{\mathbf{u}}(t))$, $\mathbf{H}'(\hat{\mathbf{u}}(t))$ 为 $\mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t))$ 的 Jacobi 矩阵, $\mathbf{I}_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为单位矩阵.基于式(9)、(10),得到估计式(8)中记忆项的基本模型.

然而,在式(9)中,对于实际问题,如何选择一个合适的记忆长度参数 τ 并不容易.另外,在式(10)中,当非线性系统的形式较为复杂或者未知时,求解 Jacobi 矩阵 $\mathbf{H}'(\hat{\mathbf{u}}(t))$ 会有一些困难,且求解 Jacobi 矩阵的计算量仍正比于原高阶系统的维度.

2.3 PLS 构造 closure 模型

本文采用数据驱动的方法对式(8)中的记忆项进行估计.尽管由式(9)、(10)直接来估计记忆项存在一些困难,但可知记忆项 $\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds$ 能通过构建合适的模型由 $\mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t))$ 进行预测.为此,利用 PLS 回归^[21-22]构建 $\mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t))$ 与 $\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds$ 之间的预测模型:

$$\mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t)) \xrightarrow{\text{PLS}} \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds.$$

PLS 方法是一种能有效地解决多变量对多变量之间建模问题的统计方法,为表达方便,令

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{V}_k^T \mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t)), \quad \mathbf{X} = [\mathbf{x}(t_1), \mathbf{x}(t_2), \dots, \mathbf{x}(t_N)]^T \in \mathbb{R}^{N \times k},$$

$$\mathbf{y}(t) = \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds, \quad \mathbf{Y} = [\mathbf{y}(t_1), \mathbf{y}(t_2), \dots, \mathbf{y}(t_N)]^T \in \mathbb{R}^{N \times k},$$

其中, $\mathbf{x}(t_i)$ 和 $\mathbf{y}(t_i)$ 分别为对应变量在 t_i 时刻的采样数据, $i = 1, 2, \dots, N$. PLS 回归就是分别提取自变量 $\mathbf{x}(t)$ 和响应变量 $\mathbf{y}(t)$ 的主成分(潜变量),使提取的主成分(潜变量)不仅能够最大程度地表达变量各自的变异性信息,同时也尽可能地反映变量 $\mathbf{x}(t)$ 和变量 $\mathbf{y}(t)$ 之间的相关性.假设数据 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 已中心化处理,将 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 分解成:

$$\mathbf{X} = \mathbf{M} \mathbf{Z}^T + \mathbf{E}, \quad \mathbf{Y} = \mathbf{G} \mathbf{Q}^T + \mathbf{F}, \quad (11)$$

其中, $\mathbf{M} = [\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \dots, \mathbf{m}_l] \in \mathbb{R}^{N \times l}$, $\mathbf{G} = [\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_l] \in \mathbb{R}^{N \times l}$, \mathbf{m}_i 和 \mathbf{g}_i 分别为从 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 提取的主成分(潜变量),且假设满足 $\mathbf{m}_i = b_i \mathbf{g}_i$, l 为主成分(潜变量)的个数,满足 $l \leq k$.欲使 \mathbf{m}_i 与 \mathbf{g}_i 的协方差最大,求解约束优化问题^[22]:

$$\max_{\mathbf{w}, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^k} \{ \text{Cov} \{ \mathbf{X} \mathbf{w}, \mathbf{Y} \mathbf{c} \} \}, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{w}^T \mathbf{w} = 1, \quad \mathbf{c}^T \mathbf{c} = 1, \quad (12)$$

得到向量 \mathbf{w} 和 \mathbf{c} , 则有 $\mathbf{m}_1 = \mathbf{X} \mathbf{w}$, $\mathbf{g}_1 = \mathbf{Y} \mathbf{c}$, $\mathbf{z}_1 = \mathbf{X}^T \mathbf{m}_1 / (\mathbf{m}_1^T \mathbf{m}_1)$, $\mathbf{q}_1 = \mathbf{Y}^T \mathbf{g}_1 / (\mathbf{m}_1^T \mathbf{m}_1)$.然后,更新 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} ,从 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 中减去 \mathbf{m}_1 和 \mathbf{g}_1 的贡献:

$$\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{X} - \mathbf{m}_1 \mathbf{z}_1^T, \quad \mathbf{Y} \leftarrow \mathbf{Y} - \mathbf{g}_1 \mathbf{q}_1^T. \quad (13)$$

重复 l 次上述步骤,依次得到 $\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \dots, \mathbf{m}_l$ 和 $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_l$.最后,回归模型的系数矩阵为

$$\mathbf{B}_v = \mathbf{X}^T \mathbf{G} (\mathbf{M}^T \mathbf{X} \mathbf{X}^T \mathbf{G})^{-1} \mathbf{M}^T \mathbf{Y}. \quad (14)$$

推导得到 $\mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t))$ 及 $\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{u}}(s), t-s) ds$ 之间的回归模型为

$$\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{u}}(s), t-s) ds = \mathbf{B}_1^T \mathbf{V}_k^T \mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t)) + \boldsymbol{\xi} = \mathbf{B}^T \mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t)) + \boldsymbol{\xi}, \quad (15)$$

其中, $\boldsymbol{\xi}$ 表示回归模型的误差项.在实际计算中,主成分(潜变量)的个数 l 会影响模型(15)的效果,因此采用交叉验证的方式选择合适的 l 值.

另外,为增加模型的灵活性,也可使用 $\mathbf{V}_k^T \mathbf{A} \hat{\mathbf{u}}(t)$ 和 $\mathbf{V}_k^T \mathbf{f}(\hat{\mathbf{u}}(t))$ 作为回归模型的预测变量,即令 $\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_k^T \mathbf{A} \hat{\mathbf{u}}(t) \\ \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}(\hat{\mathbf{u}}(t)) \end{bmatrix}$.同样地,基于 PLS 回归,得到模型

$$\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{u}}(s), t-s) ds = \mathbf{B}_1^T \mathbf{V}_k^T \mathbf{A} \hat{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{B}_2^T \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}(\hat{\mathbf{u}}(t)) + \boldsymbol{\xi}^*, \quad (16)$$

其中, $\boldsymbol{\xi}^*$ 为回归模型(16)的误差项.当系数矩阵 $\mathbf{B}_1 = \mathbf{B}_2$ 时,模型(16)与模型(15)形式上是等价的.为简单起见,本文主要讨论模型(15)的情况.将模型(15)代入式(8),忽略回归模型中的误差项 $\boldsymbol{\xi}$,得到新的降阶系统:

$$\mathbf{V}_k^T \mathbf{V}_k \frac{d\bar{\mathbf{a}}(t)}{dt} = [\mathbf{V}_k(\mathbf{I}_k + \mathbf{B})]^T [\mathbf{A} \mathbf{V}_k \bar{\mathbf{a}}(t) + \mathbf{f}(\mathbf{V}_k \bar{\mathbf{a}}(t))], \quad (17)$$

其中, $\bar{\mathbf{a}}(t)$ 为系统的求解变量.令 $\mathbf{W}_k = \mathbf{V}_k(\mathbf{I}_k + \mathbf{B})$,降阶模型(17)相当于对原系统方程的右端采用了 Petrov-Galerkin 投影,而系统方程左端的投影矩阵仍为 \mathbf{V}_k .最后,讨论误差校正模型的计算复杂度问题.由于模型(17)和原降阶模型(2)的阶数相同,因此新模型(17)仍可以高效地求解.另外,由于变量 $\mathbf{H}(\hat{\mathbf{u}}(t))$ 和 $\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{u}}(s), t-s) ds$ 的维度均为降阶模型的阶数,因而构造误差校正模型所耗计算量通常也较小.

2.4 误差估计

下面对降阶系统(2)和(17)的解的误差进行分析^[1,18].首先,假设 $\tilde{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{a}}(t)$, $\bar{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{V}_k \bar{\mathbf{a}}(t)$ 和 $\hat{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{V}_k \hat{\mathbf{a}}(t)$ 分别为降阶系统(2)、降阶系统(17)和降阶系统(8)的数值解.另外,为简便记函数 $\mathfrak{F}(\mathbf{u}(t)) = \mathbf{A} \mathbf{u}(t) + \mathbf{f}(\mathbf{u}(t))$,则有

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{\mathbf{u}}(t)}{dt} = \mathbf{V}_k \mathbf{V}_k^T \mathfrak{F}(\tilde{\mathbf{u}}(t)), \\ \frac{d\hat{\mathbf{u}}(t)}{dt} = \mathbf{V}_k \mathbf{V}_k^T \mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t)) + \mathbf{V}_k \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{u}}(s), t-s) ds, \\ \frac{d\bar{\mathbf{u}}(t)}{dt} = \mathbf{V}_k [\mathbf{V}_k(\mathbf{I}_k + \mathbf{B})]^T \mathfrak{F}(\bar{\mathbf{u}}(t)). \end{cases} \quad (18)$$

假设 $\mathbf{u}(t)$ 为原系统(1)的数值解,由式(7)可知,有 $\mathbf{u}(t) = \mathbf{V}_k \hat{\mathbf{a}}(t) + \mathbf{V}_k^c \hat{\mathbf{a}}^c(t)$.记 $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) = \tilde{\mathbf{u}}(t) - \mathbf{u}(t)$ 为系统(2)与原系统(1)之间数值解的误差, $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) = \bar{\mathbf{u}}(t) - \tilde{\mathbf{u}}(t)$ 为系统(17)与原系统(1)之间数值解的误差.

定义 1 设矩阵 $\mathbf{M}' \in \mathbb{R}^{n \times n}$,定义其范数 $\mu(\mathbf{M}') = \lim_{h \rightarrow 0^+} (\|\mathbf{I} + h\mathbf{M}'\|_2 - 1)/h$,其中 \mathbf{I} 为单位矩阵.

假设 1 假设对任意 $\mathbf{u}'(t) \in \mathbb{R}^n$,下式成立:

$$\mu \left(\mathbf{V}_k^T \frac{\partial \mathfrak{F}(\mathbf{u}')}{\partial \mathbf{u}'} \mathbf{V}_k \right) \leq \hat{\mu}, \quad (19)$$

其中,范数 μ 由定义 1 所给出, $\hat{\mu}$ 是某个正常数.

假设 2 对于式(18)中的项,假设有

$$\left\| \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{u}}(s), t-s) ds \right\|_2 = \kappa, \quad \left\| \mathbf{B}^T \mathbf{V}_k^T \mathfrak{F}(\bar{\mathbf{u}}(t)) - \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{u}}(s), t-s) ds \right\|_2 = \gamma \kappa, \quad (20)$$

其中, γ, κ 均为非负常数. γ 体现了由 PLS 方法构造的模型(15)对降阶系统记忆项的预测效果, γ 值越小,模型的预测效果越好,反之相反.

下面讨论 $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)$ 和 $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)$.首先,将 $\tilde{\mathbf{u}}(t)$ 和 $\bar{\mathbf{u}}(t)$ 改写为

$$\tilde{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{V}_k \hat{\mathbf{a}}(t) + \mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{w}}(t), \quad \bar{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{V}_k \hat{\mathbf{a}}(t) + \mathbf{V}_k \bar{\mathbf{w}}(t), \quad (21)$$

其中, $\tilde{\mathbf{w}}(t) \in \mathbb{R}^k$, $\tilde{\mathbf{w}}(t) \in \mathbb{R}^k$. 对 $\tilde{\mathbf{e}}(t)$ 做分解 $\tilde{\mathbf{e}}(t) = \tilde{\mathbf{e}}_0(t) + \tilde{\mathbf{e}}_1(t)$, 其中 $\tilde{\mathbf{e}}_0(t) = \hat{\mathbf{u}}(t) - \mathbf{u}(t)$, $\tilde{\mathbf{e}}_1(t) = \tilde{\mathbf{u}}(t) - \hat{\mathbf{u}}(t)$. 同样地, 对 $\bar{\mathbf{e}}(t)$ 做分解 $\bar{\mathbf{e}}(t) = \bar{\mathbf{e}}_0(t) + \bar{\mathbf{e}}_1(t)$, 其中 $\bar{\mathbf{e}}_0(t) = \hat{\mathbf{u}}(t) - \mathbf{u}(t)$, $\bar{\mathbf{e}}_1(t) = \bar{\mathbf{u}}(t) - \hat{\mathbf{u}}(t)$.

先分析误差 $\tilde{\mathbf{e}}(t)$, 而 $\bar{\mathbf{e}}(t)$ 的分析方法类似. 由式(21)可得, $\tilde{\mathbf{e}}_1(t) = \tilde{\mathbf{u}}(t) - \hat{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{w}}(t)$, 然后由式(18)有

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{\mathbf{w}}(t)}{dt} &= \mathbf{V}_k^T \left(\frac{d\tilde{\mathbf{u}}(t)}{dt} - \frac{d\hat{\mathbf{u}}(t)}{dt} \right) = \\ &\mathbf{V}_k^T \mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{w}}(t)) - \mathbf{V}_k^T \mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t)) - \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds. \end{aligned} \quad (22)$$

结合上式, 对 $\tilde{\mathbf{w}}(t + \Delta t)$ ($\Delta t > 0$) 在 t 处进行 Taylor 级数展开, 并估计范数, 有

$$\begin{aligned} \|\tilde{\mathbf{w}}(t + \Delta t)\|_2 &= \left\| \tilde{\mathbf{w}}(t) + \Delta t \mathbf{V}_k^T \mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{w}}(t)) - \Delta t \mathbf{V}_k^T \mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t)) - \right. \\ &\Delta t \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds \left. \right\|_2 + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \leq \\ &\|\tilde{\mathbf{w}}(t) + \Delta t \mathbf{V}_k^T (\mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{w}}(t)) - \mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t)))\|_2 + \\ &\Delta t \left\| \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds \right\|_2 + \mathcal{O}((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (23)$$

一方面, 由中值定理可得

$$\begin{aligned} &\|\tilde{\mathbf{w}}(t) + \Delta t \mathbf{V}_k^T (\mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{w}}(t)) - \mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t)))\|_2 \leq \\ &\left(\max_{\eta(t)} \left\| \mathbf{I} + \Delta t \mathbf{V}_k^T \frac{\partial \mathfrak{F}(\mathbf{u}')}{\partial \mathbf{u}'} \Big|_{\mathbf{u}' = \mathbf{V}_k \eta(t)} \mathbf{V}_k \right\|_2 \right) \|\tilde{\mathbf{w}}\|_2. \end{aligned} \quad (24)$$

再由式(23), 有

$$\begin{aligned} \frac{\|\tilde{\mathbf{w}}(t + \Delta t) - \tilde{\mathbf{w}}(t)\|_2}{\Delta t} &\leq \frac{\left(\max_{\eta(t)} \left\| \mathbf{I} + \Delta t \mathbf{V}_k^T \frac{\partial \mathfrak{F}(\mathbf{u}')}{\partial \mathbf{u}'} \Big|_{\mathbf{u}' = \mathbf{V}_k \eta(t)} \mathbf{V}_k \right\|_2 \right) \|\tilde{\mathbf{w}}\|_2 - \|\tilde{\mathbf{w}}\|_2}{\Delta t} + \\ &\left\| \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds \right\|_2 + \mathcal{O}(\Delta t). \end{aligned}$$

再令 $\Delta t \rightarrow 0$, 并利用前面的假设 1 和假设 2, 就有

$$\frac{d\|\tilde{\mathbf{w}}(t)\|_2}{dt} \leq \hat{\mu} \|\tilde{\mathbf{w}}(t)\|_2 + \kappa. \quad (25)$$

由于 $\tilde{\mathbf{e}}_1(t) = \mathbf{V}_k \tilde{\mathbf{w}}(t)$, 则有 $\|\tilde{\mathbf{w}}(t)\|_2 = \|\tilde{\mathbf{e}}_1(t)\|_2$, 因而由式(25)可得

$$\|\tilde{\mathbf{e}}_1(t)\|_2 \leq \kappa \int_0^t \exp(\hat{\mu}(t-\tau)) d\tau = \frac{\kappa}{\hat{\mu}} (\exp(\hat{\mu}t) - 1), \quad (26)$$

进而可得

$$\begin{aligned} \|\tilde{\mathbf{e}}_1\|^2 &= \int_0^T \|\tilde{\mathbf{e}}_1(t)\|_2^2 dt \leq \frac{\kappa^2}{\hat{\mu}^2} \int_0^T (\exp(\hat{\mu}t) - 1)^2 dt = \\ &\frac{\kappa^2}{2\hat{\mu}^3} (\exp(2\hat{\mu}T) - 4\exp(\hat{\mu}T) + 2\hat{\mu}T + 3). \end{aligned} \quad (27)$$

另一方面, 根据式(21)后的定义, 可知误差 $\|\tilde{\mathbf{e}}_0(t)\|_2 = \|\hat{\mathbf{u}}(t) - \mathbf{u}(t)\|_2 = \|\hat{\mathbf{a}}^\circ(t)\|_2$, 进而得到

$$\begin{aligned} \|\tilde{\mathbf{e}}_0\| &= \sqrt{\int_0^T \|\tilde{\mathbf{e}}_0(t)\|_2^2 dt}. \text{最后, 系统(2)的整体误差为} \\ \|\tilde{\mathbf{e}}\| &= \sqrt{\int_0^T \|\tilde{\mathbf{e}}(t)\|_2^2 dt} \leq \sqrt{2(\|\tilde{\mathbf{e}}_0\|^2 + \|\tilde{\mathbf{e}}_1\|^2)} = \\ &\sqrt{2\|\tilde{\mathbf{e}}_0\|^2 + \frac{\kappa^2}{\hat{\mu}^3} (\exp(2\hat{\mu}T) - 4\exp(\hat{\mu}T) + 2\hat{\mu}T + 3)}. \end{aligned} \quad (28)$$

类似地, 对于系统(17)的误差 $\bar{\mathbf{e}}(t) = \bar{\mathbf{e}}_0(t) + \bar{\mathbf{e}}_1(t)$, 有 $\bar{\mathbf{e}}_1(t) = \bar{\mathbf{u}}(t) - \hat{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{V}_k \bar{\mathbf{w}}(t)$, 及

$$\frac{d\bar{\mathbf{w}}(t)}{dt} = \mathbf{V}_k^T (\mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{V}_k \bar{\mathbf{w}}(t)) - \mathfrak{F}(\hat{\mathbf{u}}(t))) + \mathbf{B}^T \mathbf{V}_k^T \mathfrak{F}(\bar{\mathbf{u}}(t)) - \int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds.$$

利用假设 1 和 2, 同样可以推导得到

$$\|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_1\|^2 = \int_0^T \|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_1(t)\|^2 dt \leq \frac{\gamma^2 \kappa^2}{2\hat{\mu}^3} (\exp(2\hat{\mu}T) - 4\exp(\hat{\mu}T) + 2\hat{\mu}T + 3), \quad (29)$$

以及系统 (17) 的整体误差为

$$\|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\| = \sqrt{\int_0^T \|\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)\|^2 dt} \leq \sqrt{2\|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0\|^2 + \frac{\gamma^2 \kappa^2}{\hat{\mu}^3} (\exp(2\hat{\mu}T) - 4\exp(\hat{\mu}T) + 2\hat{\mu}T + 3)}, \quad (30)$$

其中, 容易知道 $\|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0\|^2 = \|\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_0\|^2$, 而 $\|\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_1\|^2$ 与 $\|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_1\|^2$ 的误差界的差异在于系数 γ . 当由 PLS 方法构造的模型 (15) 对降阶系统记忆项 $\int_0^t \mathbf{K}(\hat{\mathbf{a}}(s), t-s) ds$ 有较好的预测效果时, 有 $\gamma < 1$, 则会有 $\|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\|$ 的误差上界小于 $\|\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}\|$ 的误差上界. 特别地, 当 $\gamma = 0$ 时, $\|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\| = \|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0\|$.

3 数值算例

利用数值算例验证所提模型的有效性. 记原系统 (1) 为 full-model, 由 POD 和 Galerkin 投影方法构造的降阶模型 (2) 为 POD-Galerkin, 本文提出的降阶模型 (17) 为 POD-Galerkin-PLS. 数值模拟的计算机配置为 Intel Core i7 处理器, 主频 3.4 GHz, 内存 8 GB, 运行软件为 MATLAB 软件. 定义相对误差:

$$E_2(k) = \frac{\sum_{i=1}^{N_t} \|\mathbf{V}_k \mathbf{V}_k^T \mathbf{u}(t_i) - \mathbf{V}_k \mathbf{a}(t_i)_{\text{rom}}\|_2}{\sum_{i=1}^{N_t} \|\mathbf{V}_k \mathbf{V}_k^T \mathbf{u}(t_i)\|_2}, \quad (31)$$

其中, $\mathbf{a}(t_i)_{\text{rom}}$ 为降阶系统的系数向量, $\mathbf{u}(t_i)$ 为原系统的解变量, N_t 为系统总时间步长数.

3.1 算例 1: 一维 Burger 方程

考虑如下形式的一维 Burger 方程^[13]:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} u^2 \right) = \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & t \in [0, 2], x \in [0, 1], \\ u(0, t) = u(1, t) = 0, u(x, 0) = \frac{x}{1 + \sqrt{1/M_0}} \exp\left(Re \frac{x^2}{4}\right), \end{cases} \quad (32)$$

其中, $M_0 = \exp(Re/8)$, Re 为 Reynolds 数, 等于 1 000. Burger 方程是研究激波常见的非线性 PDE, 可用来模拟冲击波的传播和反射. 对方程 (32) 进行空间方向的有限差分离散得到如式 (1) 的非线性动态系统, 原系统维数为 $n = 1\,024$. 对原系统和降阶系统均采用半隐向后 Euler 求解, 时间步长 $\Delta t = 0.001$ s, 其中求解原系统平均所用 CPU 时间为 2.12 s.

表 1 算例 1: 求解降阶模型所用 CPU 时间, 原系统求解所用 CPU 时间为 2.12 s (单位: s)

Table 1 Case 1: the CPU time for solving the reduced models (and the CPU time for solving the original system is 2.12 s) (unit: s)

order of system k	5	10	15	20	30
POD-Galerkin	4.79E-2	7.47E-2	8.71E-2	1.04E-1	1.19E-1
POD-Galerkin-PLS	4.27E-2	6.81E-2	9.49E-2	1.10E-1	1.27E-1

为构造降阶系统, 在区间 $t \in [0, 2]$ s 上均匀选取 200 个原系统的解向量, 图 1(a) 给出了解变量的 POD 模态数与模态累计能量百分比的情况, 尽管前面的模态所含能量明显多于后面的模态, 但只有选取足够多的模态时, 所选的模态才能较好地包含解变量的全部能量. 图 1(b) 比较了降阶模型的相对误差 $E_2(k)$, 明显地, POD-Galerkin-PLS 的相对误差要小于 POD-Galerkin 的结果. 对于 POD-Galerkin-PLS, PLS 方法的选取主成分 (潜变量) 个数等于降阶系统的阶数. 图 2 为系统的阶数 $k = 8$ 时两降阶系统求解得到的系数向量 $\mathbf{a}(t) = [a_1(t), a_2(t), \dots, a_8(t)]$ (图 2 仅给出了 $a_2(t), a_4(t), a_6(t), a_8(t)$ 的结果, 其余系数的结果类似). 由图 2 知, POD-Galerkin 的结果与原系统的结果有较大误差. 相比之下, 由于 closure 模型的校正, POD-Galerkin-PLS

的曲线能够较好地逼近原系统的曲线.需说明的是,随着模型阶数的增加,POD-Galerkin 的求解结果会越来越接近原系统的结果,从而 POD-Galerkin-PLS 与 POD-Galerkin 的求解结果差异性也越来越小.

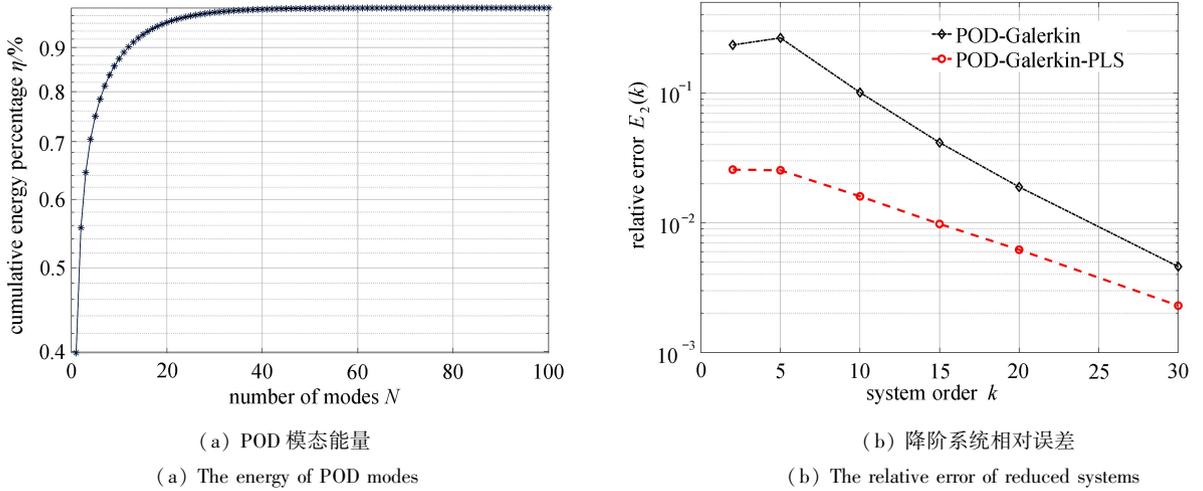


图1 算例1: POD 模态累计能量百分比和降阶系统的相对误差 $E_2(k)$

Fig. 1 Case 1: the cumulative energy percentage of POD modes and relative error $E_2(k)$ of reduced systems

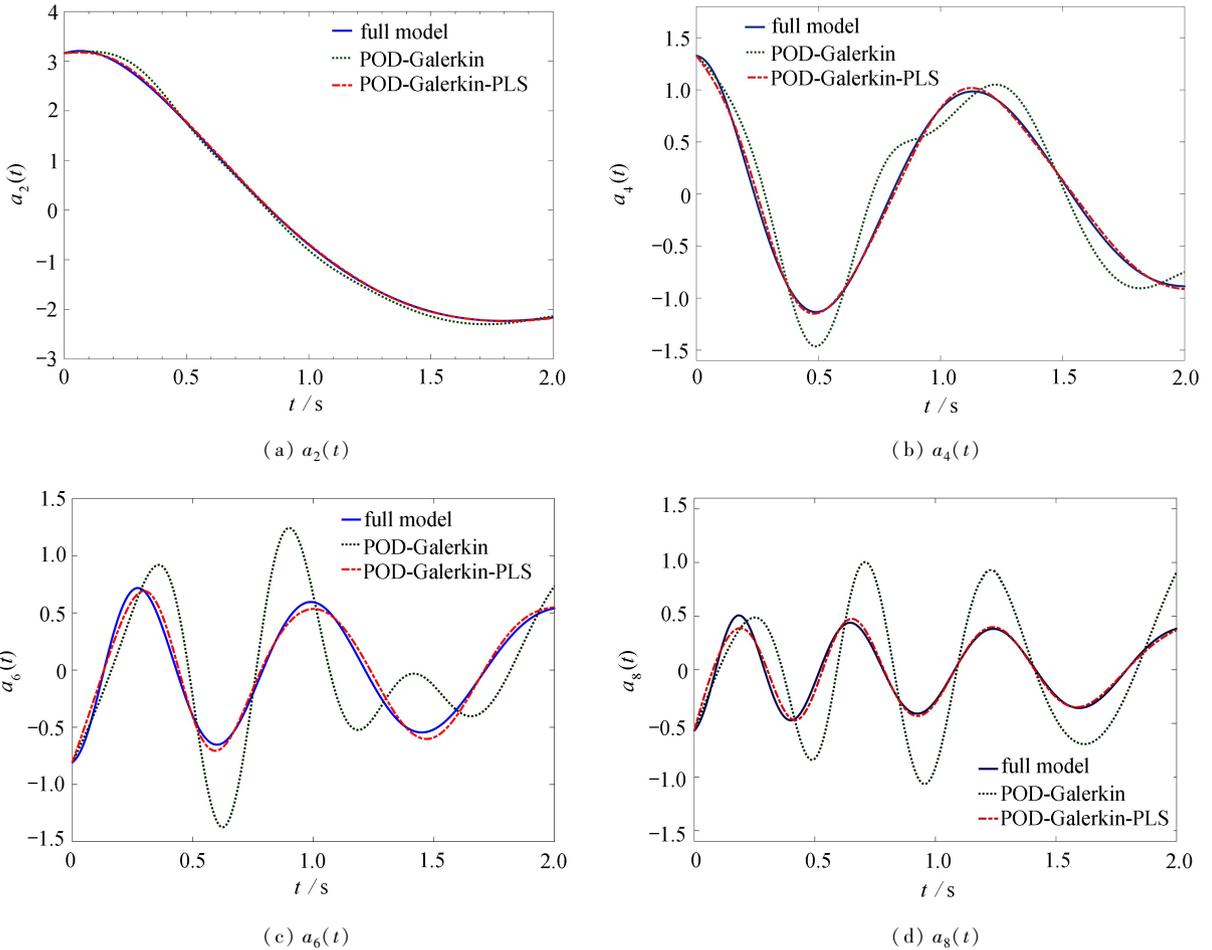


图2 算例1: 求解降阶系统得到的 POD 基的系数,系统的阶数 $k = 8$

Fig. 2 Case 1: the POD basis coefficients resulting from solving the reduced systems, system order $k = 8$

最后,表1 比较了求解两种降阶系统所耗的 CPU 时间.由于 POD-Galerkin 和 POD-Galerkin-PLS 这两种降阶系统在理论上具有相同的求解复杂度,故当阶数 k 相同时,求解这两种系统所耗 CPU 时间没有明显差

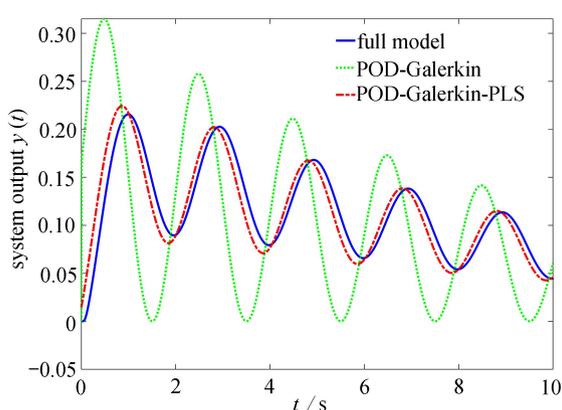
异.另外,降阶系统的求解时间远小于原系统求解时间.

3.2 算例 2: 非线性 Chafee-Infante 方程

算例 2 考虑非线性 Chafee-Infante 方程^[27],它是一个重要的非线性演化方程,常用作模型降阶的测试算例^[28].方程形式为

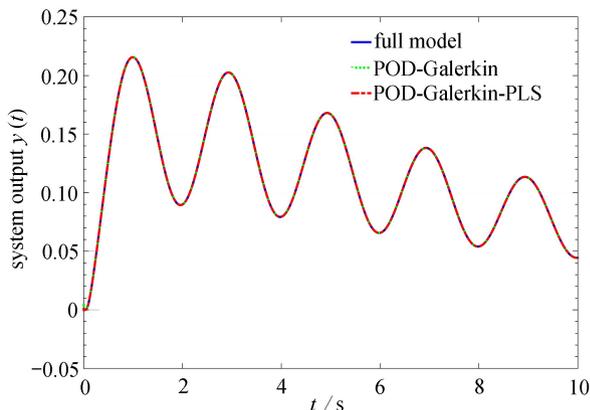
$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u^3 = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u, & (x, t) \in (0, L) \times (0, T], u(0, t) = i(t), t \in (0, T), \\ \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = 0, & t \in (0, T), u(x, 0) = 0, x \in (0, 1). \end{cases} \quad (33)$$

同样地,使用有限差分进行空间离散将方程转化为式(1)的形式. $L = 1$,原系数的维数为 $n = 1\,000$,时间长度 $T = 10\text{ s}$,时间步长为 $\Delta t = 0.001\text{ s}$.模型感兴趣的变量为系统方程右端点处的值,即系统输出 $y(t) = u(L, t)$.为保证数值格式稳定,使用半隐向后 Euler 方法求解原系统和降阶系统.



(a) 系统输出, 阶数 $k = 1$

(a) The outputs of systems, order $k = 1$

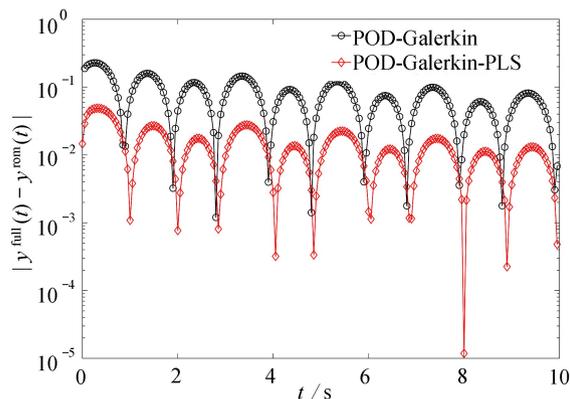


(b) 系统输出, 阶数 $k = 5$

(b) The outputs of systems, order $k = 5$

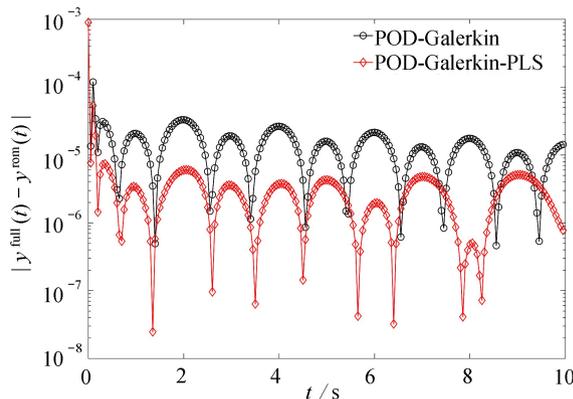
图 3 算例 2: 降阶系统的输出

Fig. 3 Case 2: the outputs of reduced systems



(a) 降阶系统, 阶数 $k = 1$

(a) The reduced system, order $k = 1$



(b) 降阶系统, 阶数 $k = 5$

(b) The reduced system, order $k = 5$

图 4 算例 2: 降阶系统输出的绝对值误差

Fig. 4 Case 2: the absolute value output errors of the reduced systems

从原系统中均匀选取 500 个样本构造降阶系统,采样区间为 $(0\text{ s}, 5\text{ s}]$,其余为预测区间.图 3 给出了系统输入为 $i(t) = \exp(-0.1t)(\sin(\pi t) + 1)/10$ 时两种降阶系统的输出.相应地,图 4 给出了降阶系统的输出与原系统的输出之间的误差情况 ($y^{\text{full}}(t)$ 和 $y^{\text{rom}}(t)$ 分别代表原系统和降阶系统的输出).由此可知,在模型准确性方面,POD-Galerkin-PLS 要明显优于 POD-Galerkin.当系统阶数 $k = 5$ 时,尽管 POD-Galerkin 的输出也能很好地匹配原系统的输出,但从图 4(b) 可知,POD-Galerkin-PLS 的误差情况要小于 POD-Galerkin 的误差

结果.最后,比较降阶系统的求解效率.由表 2 可知,求解两种降阶系统的所用 CPU 时间远小于求解原系统的 CPU 时间,而两降阶系统的求解所用 CPU 时间差别不大,在同一个数量级上.

表 2 算例 2: 求解降阶模型所用 CPU 时间,原系统求解所用 CPU 时间为 2.27 s(单位: s)

Table 2 Case 2: the CPU time for solving the reduced models (and the CPU time for solving the original system is 2.27 s) (unit: s)

order of system k	4	8	10	20
POD-Galerkin	1.52E-2	1.63E-2	1.89E-2	2.34E-2
POD-Galerkin-PLS	2.95E-2	3.31E-2	3.52E-2	5.04E-2

4 总 结

本文利用数据驱动的方法构建了一个更高精度的非线性系统降阶模型.具体地,针对由 POD 和 Galerkin 投影方法构造的非线性降阶模型,使用 Mori-Zwanzig 格式的相关理论和偏最小二乘回归,构造了降阶模型的 closure 模型,并将构造的 closure 模型直接嵌入到原降阶模型中.理论结果显示,带有 closure 模型的降阶模型在形式上相当于对原系统方程的右端采用 Petrov-Galerkin 投影.选取了 Reynolds 数为 1 000 的一维 Burgers 方程和非线性 Chafee-Infante 方程作为算例对所提方法进行验证.实验结果表明,在精度方面,新的降阶模型明显要优于原来基于 POD 和 Galerkin 投影方法得到的降阶模型;而在模型效率方面,求解新降阶系统和求解原降阶系统所耗 CPU 时间几乎保持相同的水平.在进一步的研究中,可以考虑将所提方法推广到参数化的非线性系统的降阶问题.

参考文献 (References):

- [1] 蒋耀林. 模型降阶方法 [M]. 北京: 科学出版社, 2010. (JIANG Yaolin. *Model Order Reduction Methods* [M]. Beijing: Science Press, 2010. (in Chinese))
- [2] SCHILDERS W H A, VORST H A V D, ROMMES J. *Model Order Reduction: Theory, Research Aspects and Applications* [M]. Berlin, Heidelberg: Springer, 2008.
- [3] 张珺, 李立州, 原梅妮. 径向基函数参数化翼型的气动力降阶模型优化 [J]. 应用数学和力学, 2019, **40**(3): 250-258. (ZHANG Jun, LI Lizhou, YUAN Meini. Optimization of RBF parameterized airfoils with the aerodynamic ROM [J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2019, **40**(3): 250-258. (in Chinese))
- [4] SIROVICH L. Turbulence and the dynamics of coherent structures I: coherent structures [J]. *Quarterly of Applied Mathematics*, 1987, **45**(3): 561-571.
- [5] 罗振东, 欧秋兰, 谢正辉. 非定常 Stokes 方程一种基于 POD 方法的简化有限差分格式 [J]. 应用数学和力学, 2011, **32**(7): 795-806. (LUO Zhendong, OU Qiulan, XIE Zhenghui. A reduced finite difference scheme and error estimates based on POD method for the non-stationary Stokes equation [J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2011, **32**(7): 795-806. (in Chinese))
- [6] AMBILI M, SARKAR A, PAÏDOUSSIS M P. Reduced-order models for nonlinear vibrations of cylindrical shells via the proper orthogonal decomposition method [J]. *Journal of Fluids and Structures*, 2003, **18**(2): 227-250.
- [7] 郭志文, 肖曼玉, 夏凉. 基于特征正交分解的材料微结构参数化表征模型及等效性能优化设计 [J]. 应用数学和力学, 2017, **38**(7): 250-258. (GUO Zhiwen, XIAO Manyu, XIA Liang. A POD-based parameterization model for material microstructure representation and its application to optimal design of material effective mechanical properties [J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2017, **38**(7): 250-258. (in Chinese))
- [8] GUO M W, HESTHAVEN J S. Data-driven reduced order modeling for time-dependent problems [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2019, **345**(1): 75-99.
- [9] KUNISCH K, VOLKWEIN S. Galerkin proper orthogonal decomposition methods for a general equation in fluid dynamics [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2019, **40**(2): 492-515.
- [10] CARLBERG K, BOU-MOSLEH C, CHARBEL F. Efficient nonlinear model reduction via a least-squares Petrov-Galerkin projection and compressive tensor approximations [J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2011, **86**(2): 155-181.

- [11] CARLBERG K, BARONE M, ANTIL H. Galerkin v. least-squares Petrov-Galerkin projection in nonlinear model reduction[J]. *Journal of Computational Physics*, 2017, **330**: 693-734.
- [12] SAGAUT P. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows: an Introduction*[M]. New York: Springer Science and Business Media, 2006.
- [13] SAN O, MAULIK R. Neural network closures for nonlinear model order reduction[J]. *Advances in Computational Mathematics*, 2018, **44**(6): 1717-1750.
- [14] XIE X, MOHEBUJJAMAN M, REBHOLZ L, et al. Data-driven filtered reduced order modeling of fluid flows [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2018, **40**(3): 834-857.
- [15] WANG Z, AKHTAR I, BORGGGAARD J, et al. Proper orthogonal decomposition closure models for turbulent flows: a numerical comparison[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2012, **237**: 10-26.
- [16] JING L, PANOS S. Mori-Zwanzig reduced models for uncertainty quantification[J]. *Journal of Computational Dynamics*, 2019, **6**(1): 39-68.
- [17] MA C, WANG J C, EE W N. Model reduction with memory and the machine learning of dynamical systems [J]. *Communications in Computational Physics*, 2019, **25**(4): 947-962.
- [18] PARISH E J, WENTLAND C R, DURAISAMY K. The adjoint Petrov-Galerkin method for non-linear model reduction[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, **365**: 112991.
- [19] PAN S, DURAISAMY K. Data-driven discovery of closure models[J]. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, 2018, **17**(4): 2381-2413.
- [20] WANG Q, RIPAMONTI N, HESTHAVEN J S. Recurrent neural network closure of parametric POD-Galerkin reduced-order models based on the Mori-Zwanzig formalism[J]. *Journal of Computational Physics*, 2020, **410**: 109402.
- [21] WOLD S, RUHE A, WOLD H, et al. The collinearity problem in linear regression. the partial least squares (PLS) approach to generalized inverses[J]. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 1984, **5**(1): 735-743.
- [22] ABDI H. Partial least squares regression and projection on latent structure regression (PLS regression) [J]. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, 2010, **2**(1): 97-106.
- [23] CHATURANTABUT S, SORENSEN D C. Nonlinear model reduction via discrete empirical interpolation[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2010, **32**(5): 2737-2764.
- [24] ALLA A, KUTZ J N. Nonlinear model order reduction via dynamic mode decomposition[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2017, **39**(5): 778-796.
- [25] PARISH E J, DURAISAMY K. A dynamic subgrid scale model for large eddy simulations based on the Mori-Zwanzig formalism[J]. *Journal of Computational Physics*, 2017, **349**: 154-175.
- [26] PARISH E J, DURAISAMY K. A unified framework for multiscale modeling using Mori-Zwanzig and the variational multiscale method[Z/OL]. arXiv Preprint, 2018. [2020-11-29]. <https://arxiv.org/pdf/1712.09669.pdf>.
- [27] CHAFEE N, INFANTE E F. A bifurcation problem for a nonlinear partial differential equation of parabolic type[J]. *Applicable Analysis*, 1974, **4**(1): 17-37.
- [28] BENNER P, BREITEN T. Two-sided projection methods for nonlinear model order reduction[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2015, **37**(2): 239-260.