# Kurze Einführung in die Reduzierte-Basis-Methode

Martin Drohmann, Stefan Girke

Sommersemester 2012

## 1 RB-Verfahren für lineare, koerzive Probleme

Sei $X$ ein reeller Hilbertraum und $\mathcal{P} \subseteq \mathbb{R}^p$ eine Parametermenge. Dann sei zu jedem $\mu \in \mathcal{P}$ ein Differentialoperator $\mathcal{L}(\mu) : X \to X$ und ein $f(\mu) \in X$ definiert. Weiter definieren wir:

**Definition 1.1** (Parameterabhängiges, analytisches Problem)**.** Finde $u(\mu) \in X$, sodass

$$\mathcal{L}(\mu)[u(\mu)] = f(\mu) \tag{1}$$

gilt.

Um das Problem zu diskretisieren, definieren wir einen endlich-dimensionalen Teilraum $X_h \subseteq X$ mit Basis $\psi_1, \dots, \psi_H$ und $\dim X_h = H$. Für jedes $\mu \in \mathcal{P}$ sei nun $f_h(\mu) \in X_h$ und $\mathcal{L}_h(\mu) : X_h \to X_h$ ein passender diskreter Differentialoperator. Dann definieren wir:

**Definition 1.2** (Parameterabhängiges, diskretes Problem)**.** Finde $u_h(\mu) \in X_h$, sodass

$$\mathcal{L}_h(\mu)[u_h(\mu)] = f_h(\mu) \tag{2}$$

gilt. Dann lässt sich $u_h(\mu)$ darstellen als $u_h(\mu) = \sum_{i=1}^{H} u_i(\mu)\psi_i$. Weiter sei $F_i \in X_h'$ definiert durch $F_i(u_h(\mu)) = u_i(\mu)$. Dann ist das diskrete Problem äquivalent zum linearen Gleichungssystem

$$\boldsymbol{D}(\mu)\boldsymbol{u}(\mu) = \boldsymbol{f}(\mu),$$

mit der System-Matrix $\boldsymbol{D}(\mu) \in \mathbb{R}^{H\times H}$ und einem Rechte-Seite-Vektor $\boldsymbol{f}(\mu) \in \mathbb{R}^H$ mit folgenden Koeffizienten:

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{D}(\mu))_{ij} &= F_i(\mathcal{L}_h(\mu)[\psi_j]),\\ (\boldsymbol{f}(\mu))_i &= F_i(f_h(\mu)),\end{aligned}$$

Der Weg zum reduzierten Problem führt nun über einen $N$-dimensionalen Teilraum $X^{\text{red}} \subseteq X_h$ mit Basis $\varphi_1, \dots, \varphi_N$, $N \ll H$. Für alle $\mu \in \mathcal{P}$ seien zusätzlich Projektionen $P : X_h \to X^{\text{red}}, u_h(\mu) \mapsto \sum_{i=1}^{N} u_i^{\text{red}}(\mu)\varphi_i$ auf den reduzierten Teilraum und Funktionale $P_i : X_h \to \mathbb{R}, u_h(\mu) \mapsto u_i^{\text{red}}(\mu)$ gegeben. Dann gilt:

**Definition 1.3** (Parameterabhängiges, reduziertes Problem)**.** Finde $u_{\text{red}}(\mu) \in X^{\text{red}}$, sodass

$$P[\mathcal{L}_h(\mu)[u^{\text{red}}(\mu)]] = P[f_h(\mu)]. \tag{3}$$

Offensichtlich gilt

$$P_i[\mathcal{L}_h(\mu)[\varphi_i]] = P_i[f_h(\mu)].$$

Als lineares Gleichungssystem gilt es nun

$$\boldsymbol{D}^{\text{red}}(\mu)\boldsymbol{u}^{\text{red}}(\mu) = \boldsymbol{f}^{\text{red}}(\mu)$$

zu lösen. Die reduzierte Matrix $\boldsymbol{D}^{\text{red}} \in \mathbb{R}^{N\times N}$ und der reduzierte Vektor

$\boldsymbol{f}^{\mathrm{red}}(\mu) \in \mathbb{R}^N$ sind hier durch

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{D}^{\mathrm{red}}(\mu))_{ij} &= P_i(\mathcal{L}_h(\mu)[\varphi_j]),\\ (\boldsymbol{f}^{\mathrm{red}}(\mu))_i &= P_i(f_h(\mu)),\end{aligned}$$

gegeben.

**Beispiel 1.4** (Hilbertraum $L^2$)**.** Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Gebiet. Für $X_h = L^2(\Omega)$ mit dem zugehörigen $L^2$-Skalarprodukt $\langle u, v\rangle_{L^2(\Omega)} = \int_\Omega uv$ und $X^{\mathrm{red}}$ durch eine Orthonormalbasis bestimmt, gilt

$$P_i : u_h(\mu) \mapsto \int_\Omega u_h(\mu) \cdot \varphi_i = \sum_{j=1}^{H} \boldsymbol{u}_j^{\mathrm{red}}(\mu) \int_\Omega \psi_j \varphi_i.$$

**Beispiel 1.5** (Diskretisierung der Poisson-Gleichung)**.** Sei $\Omega = [0,1] \subseteq \mathbb{R}^1$ ein Gebiet. Die Poisson-Gleichung sei definiert durch

$$\begin{aligned} -\Delta k u &= 1 && \text{in } \Omega,\\ u &= 0 && \text{auf } \partial\Omega. \end{aligned}$$

für einen beliebig wählbaren Parameter $k \in [0,1]$. In obiger Notation wählen wir also $X = H_0^1(\Omega)$, $\mu := k$, $\mathcal{L}(\mu) := -\Delta k$, $f := 1$.

Zur Approximation der Lösung der Poisson-Gleichung benötigen wir einen passenden Teilraum $X_h$. Dazu sei $\mathcal{T}_h$ eine Zerlegung von $\Omega$ in $H$ äquidistante Intervalle $e_1, \ldots, e_H$ mit Länge $h$. Mit obiger Notation definieren wir

$$\psi_i(x) := \begin{cases} 1, & x \in e_i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

und $X_h := \mathrm{span}\{\psi_i\}_{i=1}^H$. Mit der Wahl der Finiten-Differenzen-Methode erhalten wir einen diskreten Differentialoperator

$$F_i[\mathcal{L}_h(\mu)[u_h(\mu)]] = F_i \left[ \mathcal{L}_h(\mu)[\sum_{i=1}^{H} u_i(\mu)\psi_i] \right] = \frac{u_{i-1}(\mu) - 2u_i(\mu) + u_{i+1}(\mu)}{h^2} \cdot \mu.$$

Offene Frage: Wie konstruiert man eine „gute“, reduzierte Basis?

**Definition 1.6** (Reduzierte Basis, RB-Räume)**.** Sei $S^{\mathrm{red}} := \{\mu^1, \dots, \mu^N\} \subseteq \mathcal{P}$ eine Menge von Parametern mit (o.B.d.A.) linear unabhängigen Lösungen $\{u_h(\mu^i)\}_{i=1}^N$ von (2). Dann ist

$$X^{\mathrm{red}} := \mathrm{span}\{u_h(\mu^i)\}_{i=1}^N$$

ein $N$-dimensionaler **Lagrange-RB-Raum**.

**Bemerkung.** Es existieren weitere Arten von RB-Räumen.

**Definition 1.7** (Offline/Online-Zerlegung von (3))**.** Sei (3) gegeben und $\mathcal{L}_h$, $f_h$ **separierbar parametrisch**, d.h.

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_h(\mu) &= \sum_{q=1}^{Q_\mathcal{L}} \Theta_\mathcal{L}^q(\mu)\mathcal{L}_h^q,\\ f_h(\mu) &= \sum_{q=1}^{Q_f} \Theta_f^q(\mu) f_h^q.\end{aligned}$$

für Funktionen $\Theta_\mathcal{L}^q : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ und $\mathcal{L}_h^q : X_h \to X_h$ für $q = 1, \dots, Q_\mathcal{L}$ bzw. Funktionen $\Theta_f^q : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ und $f_h^q \in X_h$ für $q = 1, \dots, Q_f$.

**Offline-Phase** Nach Berechnung einer reduzierten Basis $\Phi^{\mathrm{red}} = \{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ ermitteln wir

$$\begin{aligned}\boldsymbol{D}^{\mathrm{red},q} &:= (P_i(\mathcal{L}_h^q[\varphi_j]))_{i,j=1}^N \in \mathbb{R}^{N\times N},\\ \boldsymbol{f}^{\mathrm{red},q} &:= (P_i(f_h^q))_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N.\end{aligned}$$

**Online-Phase** Zu $\mu \in \mathcal{P}$ erhalten wir $\boldsymbol{D}^{\mathrm{red}}(\mu)$, $\boldsymbol{f}^{\mathrm{red}}(\mu)$ durch

$$\begin{aligned}\boldsymbol{D}^{\mathrm{red}}(\mu) &= \sum_{q=1}^{Q_\mathcal{L}} \Theta_\mathcal{L}^q(\mu) \cdot \boldsymbol{D}^{\mathrm{red},q},\\ \boldsymbol{f}^{\mathrm{red}}(\mu) &= \sum_{q=1}^{Q_f} \Theta_f^q(\mu) \cdot \boldsymbol{f}^{\mathrm{red},q}.\end{aligned}$$

# 2 Snapshot-basierte Basiskonstruktion

## 2.1 Motivation

**Ziel** (Snapshot-basierte Verfahren)**.** Bestimmung eines RB-Raumes $X^{\text{red}} = \text{span}\{u(\mu^i)\} \subseteq X$ mit Basis $\Phi^{\text{red}}$, welche $\mathcal{M} := \{u(\mu) \mid \mu \in \mathcal{P}\}$ möglichst genau approximiert, z.B. durch Minimierung des mittleren Projektionsfehlers

$$\min_{\substack{Y \subseteq X,\\ \dim Y = N}} \int_{\mathcal{P}} \|u(\mu) - P_Y u(\mu)\|^2 \mathrm{d}\mu.$$

**Bemerkung** (gute Basis $\Phi^{\text{red}}$)**.** (i) Orthogonalität (für numerische Stabilität),

(ii) Hierarchie, sodass Basisvektoren nach Relevanz geordnet sind, d.h. $X^{\text{red}}_{N'} := \text{span}\{\varphi_1, \dots, \varphi_{N'}\}$ für alle $1 \leq N' \leq N$ (zur Fehlerkontrolle).

**Bemerkung** (Numerische Behandlung)**.** Man geht wie folgt vor:

(i) Diskretisierung des Parameterraums: Wähle eine endliche Teilmenge $S_{\text{train}} = \{\mu^i\}_{i=1}^n \subseteq \mathcal{P}$ von **Trainingsparametern**, welche **Trainings-Snapshots** $M_{\text{train}} = \{u(\mu) \mid \mu \in S_{\text{train}}\} \subseteq \mathcal{M}$ definieren.

(ii) Einschränkung des Optimierungsproblems auf $S_{\text{train}}$: Wähle z.B.

$$\min_{\substack{Y \subseteq X,\\ \dim Y = N}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \|u(\mu^i) - P_Y u(\mu^i)\|^2.$$

**Definition 2.1** (Gram-Matrix)**.** Sei $X$ ein Hilbertraum, $\{u_i\}_{i=1}^n \subseteq X$. Dann ist die **Gram-Matrix** definiert als

$$\boldsymbol{K} := ((u_i, u_j))_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

## 2.2 Gram-Schmidt

**Definition 2.2** (Gram-Schmidt-Basis)**.** Sei $X$ ein Hilbertraum, $\{u_i\}_{i=1}^n \subseteq X$ linear unabhängig. Dann ist für $1 \leq m \leq n$ die **Gram-Schmidt-Basis**

$\Phi_{\mathrm{Gr},m} = \{\varphi_1, \dots, \varphi_m\}$ definiert durch

$$\overline{\varphi_m} := u_m - \sum_{i=1}^{m-1} (u_m, \varphi_i)\varphi_i,$$
$$\varphi_m := \frac{\overline{\varphi_m}}{\|\overline{\varphi_m}\|}$$

und $X_{\mathrm{Gr},m} := \mathrm{span}(\varphi_{\mathrm{Gr},m})$ bezeichnet den **Gram-Schmidt-RB-Raum**.

**Bemerkung** (Gram-Schmidt-Basis)**.** Die Gram-Schmidt-Basis

(i) ist orthonormal,

(ii) nicht hierarchisch und

(iii) hängt von der Reihenfolge der Snapshots ab.

## 2.3 Proper Orthogonal Decomposition (POD)

**Definition 2.3** (POD-Basis)**.** Sei $X$ ein Hilbertraum, $\{u_i\}_{i=1}^n \subseteq X$. Dann ist der **Empirische Korrelationsoperator** $R$ definiert durch

$$Ru := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (u_i, u) u_i \qquad \text{für } u \in X.$$

Es existiert eine orthonormale Menge $\{\varphi_i\}_{i=1}^{n'}$ von $n' < n$ Eigenvektoren zu reellen Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_{n'} > 0$ mit

$$Ru := \sum_{i=1}^{n'} \lambda_i (\varphi_i, u)\varphi_i \qquad \text{für } u \in X.$$

Für $1 \le m \le n'$ definieren wir $\Phi_{\mathrm{POD},m} := \{\varphi_i\}_{i=1}^m$ als **POD-Basis** und $X_{\mathrm{POD},m} = \mathrm{span}(\Phi_{\mathrm{POD},m}) \subseteq X$ als **POD-RB-Raum**.

**Bemerkung** (POD-Basis)**.** Die POD-Basis

(i) ist orthonormal,

(ii) ist hierarchisch,

(iii) optimal bzgl. mittlerem quadratischen Fehler und

(iv) hängt nicht von der Reihenfolge der Snapshots ab.

**Bemerkung.** Die Projektion $X \to X_{\mathrm{POD},m}$ wird in der statistischen Datenanalyse auch **Principal Component Analysis** (PCA) genannt.