POD dekompozicija i diskretna empirijska interpolacija (DEIM) s primjenama

Bašić-Šiško, Angela

Master's thesis / Diplomski rad

2016

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:305550

Rights / Prava: In copyright/Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: 2024-05-14



Repository / Repozitorij:

Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb





SVEUČILIŠTE U ZAGREBU PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET MATEMATIČKI ODSJEK

Angela Bašić-Šiško

POD DEKOMPOZICIJA I DISKRETNA EMPIRIJSKA INTERPOLACIJA (DEIM) S PRIMJENAMA

Diplomski rad

Voditelj rada: prof. dr. sc. Zlatko Drmač

Zagreb, 2016.

Ovaj diplomski rad obranjen je dana	pred ispitnim povjerenstvom
u sastavu:	

 1.
 _______, predsjednik

 2.
 _______, član

 3.
 _______, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom _____.

Potpisi članova povjerenstva:

- 1. _____
- 2. _____
- 3.

Sadržaj

Sa	Sadržaj			
Uv	vod		2	
1	POI 1.1	POD	3 3	
	1.2 1.3	POD i rješenja dinamičkih sustava	9 12	
2	2 Diskretna empirijska interpolacija (DEIM)			
	2.1	EIM	16	
	2.2	DEIM	18	
	2.3	Q-DEIM	21	
	2.4	Primjeri	23	
	2.5	Model nižeg reda	34	
3 Primjena POD i DEIM metode		njena POD i DEIM metode	36	
	3.1	Nelinearno prodiranje viskoznog fluida u poroznom sredstvu	36	
Bi	bliogı	afija	46	

Uvod

U svijetu napredne tehnologije i znanosti nezaobilazno je korištenje matematičkih modela koji vjerno opisuju ponašanje društvenih i prirodnih pojava, tehničkih konstrukcija ili bioloških fenomena. Oni se uobičajeno sastoje od nekolicine povezanih parcijalnih diferencijalnih jednadžbi te nepoznatih prametara. Za dobro razumijevanje procesa često je potrebno višestruko simulirati sustav za različite vrijednosti parametara, dok je u drugima, recimo odlučivanju, nužno dobivati rezultate u realnom vremenu da bi oni bili od praktične koristi. Sve kompleksnije zadaće zahtijevaju visoku točnost i efikasnost numeričkih simulacija. Kako bi udovoljili prvom zahtjevu, potrebno je koristiti fine diskretizacijske mreže, pogotovo u blizini očekivanih nestabilnosti što implicira velik broj nepoznanica odnosno dimenzije modela koje se mjere u milijunima. Nažalost, ovakav pristup ima koban učinak na vremensku i memorijsku složenost problema pa vjerni teoretski modeli postaju beskorisni u praksi.

Kao odgovor na ovaj problem razvijeni su postupci za dobivanje modela smanjenog reda. Oni se konstruiraju iz visokodimenzionalnog modela tako da njegova glavna obilježja ostanu sačuvana, a trošak računanja se drastično snizi.

Prava ortogonalna dekompozicija (POD) je tehnika koja za skup podataka u nekom prostoru pronalazi ℓ vektora koji ga u nekom smislu najbolje opisuju. POD u kombinaciji s Galerkinovom projekcijom daje dobru metodu za određivanje modela smanjenog reda koju nazivamo POD-Galerkinova metoda. Njezin nedostatak je što u prisutnosti općenite nelinearnosti ne može izbjeći vraćanje na punu dimenziju. To je bila inspiracija za uvođenje (diskretne) empirijske interpolacijske metode. Ona funkcionira na principu aproksimacije nelinearnosti korištenjem kombinacije projekcije i interpolacije te zajedno s POD-Galerkin pristupom daje moćan alat za modeliranje sustava smanjenog reda.

U poglavlju 1 je opisana POD dekompozicija. Dana je definicija i neka osnovna svojstva u apstraktnom Hilbertovom prostoru \mathcal{H} , a zatim detaljnije proučena konačnodimenzionalna verzija ($\mathcal{H} = \mathbb{R}^m$) kada je POD vrlo blisko vezana s dekompozicijom singularnih vrijednosti. Na kraju smo diskutirali POD-Galerkinovu metodu u oba slučaja (beskonačno i konačnodimenzionalnom).

U poglavlju 2 govorimo o DEIM metodi. Ukratko opisujemo empirijsku interpolacijsku metodu (EIM), čija je DEIM diskretna verzija. Nakon toga definirana je DEIM aproksima-

SADRŽAJ

cija nelinearne funkcije te objašnjena uloga POD-a u njezinoj konstrukciji. Predstavljena su dva načina odabira interpolacijskih čvorova (DEIM i Q-DEIM algoritam), koja smo testirali na nekoliko numeričkih primjera. Poglavlje je završeno primjenom DEIM-a u poboljšanju POD-Galerkinove metode.

U posljednjem poglavlju 3 na konkretnom primjeru iz mehanike fluida primjenjujemo ranije opisane tehnike i diskutiramo njihovu učinkovitost.

Poglavlje 1

POD

1.1 POD

POD dekompozicija je metoda koja se koristi za dobivanje modela smanjenog reda. Za dani skup potataka u nekom prostoru cilj je pronaći potprostor, odnosno neku njegovu bazu koja u nekom smislu najbolje opisuje dane vektore.

Za početak opisujemo diskretan slučaj na Hilbertovom prostoru [9].

Neka je \mathcal{H} realan separabilan Hilbertov prostor i $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$ pripadni skalarni produkt. S $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$ označavamo normu na \mathcal{H} induciranu tim skalarnim produktom. Neka je dan konačan skup vektora u \mathcal{H}

$$\{y_j: j=1,\ldots,n\} \subset H.$$

Označimo s \mathcal{U} potprostor od \mathcal{H} koji oni razapinju i $r = \dim(\mathcal{U})$. Neka je $\ell \leq r$. Kažemo da ortonormalni vektori u_1, \ldots, u_ℓ čine POD bazu ranga ℓ za $\{y_j : j = 1, \ldots, n\}$ ako su rješenje minimizacijskog problema

$$\min_{z_1,\dots,z_\ell \in \mathcal{H}} \sum_{j=1}^n \alpha_j \left\| y_j - \sum_{k=1}^\ell \langle y_j, z_k \rangle_{\mathcal{H}} z_k \right\|_{\mathcal{H}}^2, \quad \langle z_k, z_i \rangle_{\mathcal{H}} = \delta_{ki}, \quad k, i = 1, \dots, \ell,$$
(1.1)

gdje su α_j , j = 1, ..., n pozitivne težine.

Dakle, POD baza je odabrana tako da minimizira srednju kvadratnu pogrešku aproksimacije zadanih vektora pripadnim Fourierovim razvojem u toj bazi. Raspis

$$\left\| y_{j} - \sum_{k=1}^{\ell} \langle y_{j}, u_{k} \rangle_{\mathcal{H}} u_{k} \right\|_{\mathcal{H}}^{2} = \left\| y \right\|_{\mathcal{H}}^{2} - 2 \sum_{k=1}^{\ell} \langle y_{j}, u_{k} \rangle_{\mathcal{H}}^{2} + \sum_{k=1}^{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \langle y_{j}, u_{k} \rangle_{\mathcal{H}} \langle y_{j}, u_{i} \rangle_{\mathcal{H}} \delta_{ki} =$$

$$= \left\| y \right\|_{\mathcal{H}}^{2} - \sum_{k=1}^{\ell} \left| \langle y_{j}, u_{k} \rangle_{\mathcal{H}} \right|^{2}$$

$$(1.2)$$

dozvoljava da (1.1) zapišemo u ekvivalentnom obliku

$$\max_{z_1,\ldots,z_\ell\in\mathcal{H}}\sum_{j=1}^n \alpha_j \sum_{k=1}^\ell |\langle y_j, z_k\rangle_{\mathcal{H}}|^2 , \ \langle z_k, z_i\rangle_{\mathcal{H}} = \delta_{ki}, \ k, i = 1,\ldots,\ell.$$
(1.3)

Rješavanje optimizacijskog problema (1.1) vodi na svojstveni problem. Neka je $\mathcal{R} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ nenegativan, hermitski, kompaktan linearan operator dan s

$$\mathcal{R}u = \sum_{j=1}^n \alpha_j \langle u, y_j \rangle_{\mathcal{H}} y_j, \ u \in \mathcal{H}.$$

Njegovi svojstveni parovi zadovoljavaju

$$\mathcal{R}u_k = \lambda_k u_k, \ \lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_r > \lambda_{r+1} = \cdots = 0.$$

Prvih ℓ svojstvenih vektora koji pripadaju ℓ najvećim svojstvenim vrijednostima će biti rješenje za (1.1), odnosno tražena POD baza i vrijedi

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left\| y_j - \sum_{k=1}^{\ell} \langle y_j, u_k \rangle_{\mathcal{H}} u_k \right\|_{\mathcal{H}}^2 = \sum_{k=\ell+1}^{r} \lambda_k,$$

to jest

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j \sum_{k=1}^\ell \langle y_j, u_k \rangle_{\mathcal{H}}^2 = \sum_{k=1}^\ell \lambda_k.$$

Nameće se pitanje odabira ranga POD baze. Ako svojstvene vrijednosti brzo opadaju uočavamo da će aproksimacija biti dobra i za male vrijednosti od ℓ . Ne postoji pravilo koje bi dalo odgovor za općeniti slučaj, ali u [13] je predloženo da se promatra omjer energije sadržane u ℓ odabranih POD modova i ukupne energije sustava

$$\mathcal{E}(\ell) = \frac{\sum_{k=1}^{\ell} \lambda_k}{\sum_{k=1}^{r} \lambda_k}.$$
(1.4)

U nastavku promatramo jednostavniji slučaj. Uzimamo da je \mathcal{H} konačnodimenzionalan. Neka je

$$dim\mathcal{H}=m<\infty.$$

Svaki takav prostor je izomorfan s \mathbb{R}^m . Pokazuje se da je POD tada u izravnoj vezi s dekompozicijom singularnih vrijednosti (SVD).

Teorem 1.1.1. [7, Teorem 2.3.1] Ako je $Y = (y_{ij})_{i=1,...,m} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ranga r, tada postoje ortogonalne matrice $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ i $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$, takve da je

$$U^{T}YV = \Sigma, \Sigma = diag(\sigma_1, \ldots, \sigma_r, \sigma_{r+1}, \ldots, \sigma_{\min\{m,n\}}),$$

pri čemu vrijedi

$$\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_{\min\{m,n\}} = 0.$$

Brojeve $\sigma_1, \ldots, \sigma_{\min\{m,n\}}$ zovemo singularne vrijednosti matrice Y. Vektore stupce matrice $U = (u_1, \ldots, u_m)$ zovemo lijevi, a vektore stupce matrice $V = (v_1, \ldots, v_n)$ desni singularni vektori matrice Y.

Iz teorema lako slijedi

$$YY^T = U\Sigma^2 U^T$$
 i $Y^T Y = V\Sigma^2 V^T$,

a odatle

$$YY^T u_k = \sigma_k^2 u_k, \quad Y^T Y v_k = \sigma^2 v_k, \quad k = 1, \dots, \min\{m, n\}.$$

Dakle, simetrične matrice YY^T i Y^TY imaju jednake netrivijalne svojstvene vrijednosti i one su jednake kvadratima pozitivnih singularnih vrijednosti matrice Y

$$\lambda_k = \sigma_k^2, \ k = 1, \dots, \min\{m, n\},\$$

a pripadni svojstveni vektori se podudaraju s odgovarajućim lijevim odnosno desnim singularnim vektorima. Zbog unitarne invarijantnosti Frobeniusove matrične norme slijedi

$$||Y||_F^2 = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n y_{ij}^2 = \sum_{i=1}^r \sigma_i^2.$$

Iako se na \mathbb{R}^m obično podrazumijeva standardni euklidski skalarni produkt

$$\langle x, y \rangle_{\mathbb{R}^m} = y^T x, \quad x, y \in \mathbb{R}^m,$$

ovdje uzimamo općenitiji slučaj težinskog skalarnog produkta određenog simetričnom pozitivno definitnom matricom $W \in \mathbb{R}^{m \times m}$

$$\langle x, y \rangle_W = \langle Wx, y \rangle_{\mathbb{R}^m} = y^T Wx, \quad x, y \in \mathbb{R}^m.$$

Ovakav pristup je odabran jer ponekad korištenje standardnog skalarnog produkta ne daje najbolje rezultate, na primjer zbog toga što nije u skladu s fizikalnom interpretacijom problema ili rezultira nestabilnom metodom. Ovdje se nećemo baviti problematikom odabira skalarnog produkta.

Teorem 1.1.2. [13, Teorem 1.8.] Neka je $Y \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ranga $r, W \in \mathbb{R}^{m \times m}$ simetrična pozitivno definitna, $D = diag(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ dijagonalna matrica s pozitivnim dijagonalnim elementima, $\bar{Y} = W^{\frac{1}{2}}YD^{\frac{1}{2}}$ i $\ell \in \{1, \ldots, r\}$. Neka je $\bar{Y} = \bar{U}\Sigma\bar{V}$ singularna dekompozicija matrice $\bar{Y}, \bar{U} = (\bar{u}_1, \ldots, \bar{u}_m)$ matrica lijevih i $\bar{V} = (\bar{v}_1, \ldots, \bar{v}_n)$ matrica desnih singularnih vektora. Tada je rješenje zadaće

$$\max_{z_1,\ldots,z_\ell\in\mathbb{R}^m}\sum_{j=1}^n\alpha_j\sum_{k=1}^\ell|\langle y_j,z_k\rangle_W|^2,\ \langle z_k,z_i\rangle_W=\delta_{ki},\ k,\ i=1,\ldots,\ell$$

dano vektorima $u_i = W^{-\frac{1}{2}} \bar{u}_i, i = 1, ..., \ell$ i vrijedi

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j \sum_{k=1}^\ell |\langle y_j, u_k \rangle_W|^2 = \sum_{i=1}^\ell \sigma_i^2.$$

Dokaz. Dokaz provodimo indukcijom po ℓ . Neka je $\ell = 1$. Zadaća glasi

$$\max_{z_1 \in \mathbb{R}^m} \sum_{j=1}^n \alpha_j \langle y_j, z_1 \rangle_W^2, \ \|z_1\|_W = 1.$$

Neka je $z_1 \in \mathbb{R}^m$ takav da je $||z_1||_W = 1$. Vektori u_1, \ldots, u_m čine ortonormiranu bazu za \mathbb{R}^m s obzirom na težinski skalarni produkt $\langle \cdot, \cdot \rangle_W$, pa možemo pisati

$$z_1 = \sum_{k=1}^m \langle z_1, u_k \rangle_W u_k.$$

Uvrštavanjem u funkciju cilja dobivamo

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_{j} \langle y_{j}, z_{1} \rangle_{W}^{2} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_{j} \left| \sum_{k=1}^{m} \langle z_{1}, u_{k} \rangle_{W} \langle y_{j}, u_{k} \rangle_{W} \right|^{2} =$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \alpha_{j} \sum_{k=1}^{m} \sum_{p=1}^{m} \langle z_{1}, u_{k} \rangle_{W} \langle y_{j}, u_{k} \rangle_{W} \langle z_{1}, u_{p} \rangle_{W} \langle y_{j}, u_{p} \rangle_{W} =$$

$$= \sum_{k=1}^{m} \sum_{p=1}^{m} \langle z_{1}, u_{k} \rangle_{W} \langle z_{1}, u_{p} \rangle_{W} \left\{ \sum_{j=1}^{n} \alpha_{j} \langle y_{j}, u_{k} \rangle_{W} y_{j}, u_{p} \right\}_{W} =$$

$$= \sum_{k=1}^{m} \sum_{p=1}^{m} \langle z_{1}, u_{k} \rangle_{W} \langle z_{1}, u_{p} \rangle_{W} \left\{ \sum_{j=1}^{n} \alpha_{j} \langle y_{j}, u_{k} \rangle_{W} W y_{j}, u_{p} \right\}_{\mathbb{R}^{m}}.$$

$$(1.5)$$

Prelaskom na matrični zapis dobivamo

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \langle y_j, u_k \rangle_W W y_j = W Y D Y^T W u_k.$$

Uočimo da je

$$WYDY^TWu_k = W^{\frac{1}{2}}\bar{Y}\bar{Y}^T\bar{u}_k = \sigma_k^2 W^{\frac{1}{2}}\bar{u}_k = \sigma_k^2 Wu_k$$

Dakle,

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_{j} \langle y_{j}, z_{1} \rangle_{W}^{2} = \sum_{k=1}^{m} \sigma_{k}^{2} \langle z_{1}, u_{k} \rangle_{W}^{2} \le \sigma_{1}^{2} \sum_{k=1}^{m} \langle z_{1}, u_{k} \rangle_{W}^{2} = \sigma_{1}^{2} ||z_{1}||_{W} = \sigma_{1}^{2}.$$

Nejednakost slijedi zbog $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_{\min\{m,n\}} = 0$. Ako uvrstimo $z_1 = u_1$, dobivamo

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j \langle y_j, u_1 \rangle_W^2 = \sum_{k=1}^m \sigma_k^2 \langle u_1, u_k \rangle_W^2 = \sigma_1^2 \langle u_1, u_1 \rangle_W^2 = \sigma_1^2,$$

što daje bazu indukcije.

Pretpostavimo da za neki $\ell \in \{1, ..., r - 1\}$ vrijedi tvrdnja teorema. Trebamo dokazati da je rješenje zadaće

$$\max_{z_1,...,z_{\ell+1} \in \mathbb{R}^m} \sum_{j=1}^n \alpha_j \sum_{k=1}^{\ell+1} |\langle y_j, z_k \rangle_W|^2 , \ \langle z_k, z_i \rangle_W = \delta_{ki}, \ k, i = 1, \dots, \ell+1$$

dano vektorima $u_1, \ldots, u_{\ell+1}$ i da je maksimalna vrijednost funkcije cilja jednaka $\sum_{i=1}^{\ell+1} \sigma_i^2$. Zbog pretpostavke indukcije taj optimizacijski problem ekvivalentan je problemu

$$\max_{z_{\ell+1} \in \mathbb{R}^m} \sum_{j=1}^n \alpha_j |\langle y_j, z_{\ell+1} \rangle_W|^2 , \ \langle u_k, z_{\ell+1} \rangle_W = 0, \ k = 1, \dots, \ell \ i \ \|z_{\ell+1}\|_W = 1.$$
(1.6)

Dakle, trebamo pokazati da je vektor $u_{\ell+1}$ rješenje od (1.6) i da je maksimalna vrijednost funkcije cilja jednaka $\sigma_{\ell+1}^2$. Neka je $z_{\ell+1} \in \mathbb{R}^m$ takav da je $\langle u_k, z_{\ell+1} \rangle_W = 0$, $k = 1, \dots, \ell$ i $||z_{\ell+1}||_W = 1$. Raspisom u

ortonormiranoj bazi dobivamo

$$z_{\ell+1} = \sum_{k=1}^m \langle z_{\ell+1}, u_k \rangle_W u_k = \sum_{k=\ell+1}^m \langle z_{\ell+1}, u_k \rangle_W u_k.$$

Uvrštavanjem u funkciju cilja, slično kao i ranije, slijedi

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_{j} |\langle y_{j}, z_{\ell+1} \rangle_{W}|^{2} = \sum_{k=\ell+1}^{m} \sigma_{k}^{2} \langle u_{\ell+1}, u_{k} \rangle_{W}^{2} \le \sigma_{\ell+1}^{2} \sum_{k=\ell+1}^{m} \langle z_{\ell+1}, u_{k} \rangle_{W}^{2} = \sigma_{\ell+1}^{2} ||z_{\ell+1}||_{W} = \sigma_{\ell+1}^{2}.$$

Vrijednost funkcije cilja za $z_{\ell+1} = u_{\ell+1}$ je

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_{j} |\langle y_{j}, z_{\ell+1} \rangle_{W}|^{2} = \sum_{k=\ell+1}^{m} \sigma_{k}^{2} \langle u_{\ell+1}, u_{k} \rangle_{W}^{2} = \sigma_{\ell+1}^{2} \langle u_{\ell+1}, u_{\ell+1} \rangle_{W}^{2} = \sigma_{\ell+1}^{2} ||u_{\ell+1}||_{W} = \sigma_{\ell+1}^{2}.$$

Označimo s $\lambda_k = \sigma_k^2$, k = 1, ..., r svojstvene vrijednosti matrice $\bar{Y}\bar{Y}^T$. Osim za $\bar{Y}\bar{Y}^T$, λ_k su svojstvene vrijednosti matrice YDY^TW koje odgovaraju svojstvenim vekrotima u_k definiranima u teoremu. Ova matrica je matrična reperezentacija linearnog operatora \mathcal{R} . Iz raspisa (1.2), prethodnog teorema i ekvivalencije zadaća (1.1) i (1.3) slijedi da vektori u_i , $i = 1, ..., \ell$ rješavaju

$$\min_{z_1,\ldots,z_\ell\in\mathbb{R}^m}\sum_{j=1}^n\alpha_j \left\|y_j-\sum_{k=1}^\ell\langle y_j,z_k\rangle_W z_k\right\|_W^2, \ \langle z_k,z_i\rangle_W=\delta_{ki}, \ k,i=1,\ldots,\ell$$

i da minimum iznosi $\sum_{i=\ell+1}^{r} \sigma_i^2 = \sum_{i=\ell+1}^{r} \lambda_i$.

Računanje POD baze. Metoda uzoraka.

Često kod računanja POD baze direktno računanje svojstvenih vektora operatora \mathcal{R} nije najbolji prsitup. Ako je \mathcal{H} beskonačnodimenzionalan, potrebno je riještiti beskonačnodimenzionalan svojstveni problem.

Definiramo $\mathcal{Y}: \mathbb{R}^n \to \mathcal{H},$

$$\mathcal{Y}x = \sum_{j=1}^{n} \sqrt{\alpha_j} x_j y_j, \ x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n.$$

 \mathcal{Y} je ograničen linearan operator čiji je adjungirani operator $\mathcal{Y}^* : \mathcal{H} \to \mathbb{R}^n$

$$\mathcal{Y}^* u = (\sqrt{\alpha_1} \langle u, y_1 \rangle_{\mathcal{H}}, \dots, \sqrt{\alpha_n} \langle u, y_n \rangle_{\mathcal{H}}), \ u \in \mathcal{H}.$$

Tada je $\mathcal{Y}\mathcal{Y}^* = \mathcal{R}$. Označimo $\mathcal{M} = \mathcal{Y}^*\mathcal{Y} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. \mathcal{M} je linearan operator na končnodimezionalnom prostoru čija je matrična reprezentacija dana s

$$M = (\sqrt{\alpha_i} \sqrt{\alpha_j} \langle y_i, y_j \rangle_{\mathcal{H}}))_{i,j=1,\dots,n} \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

POGLAVLJE 1. POD

Ako su $\lambda \in \mathbb{R}$ i $v \in \mathbb{R}^n$ takvi da vrijedi $Mv = \lambda v$ i $u = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \mathcal{Y}v$, onda je $\mathcal{R}u = \lambda u$. Dakle, POD modove možemo dobiti rješavanjući svojstveni problem u \mathbb{R}^n .

U terminima matrica Y i \overline{Y} , $M = \overline{Y}^T \overline{Y}$ i $u = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} W^{-\frac{1}{2}} \overline{Y} v = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} Y D^{\frac{1}{2}} v$. Osim toga, v se podudara s odgovarajućim desnim singularnim vektorom matrice \overline{Y} , odnosno

$$u_{i} = W^{-\frac{1}{2}}\bar{u}_{i} = \frac{1}{\sigma_{i}}W^{-\frac{1}{2}}\bar{Y}\bar{v}_{i} = \frac{1}{\sigma_{i}}YD^{\frac{1}{2}}\bar{v}_{i}.$$

Ako je \mathcal{H} beskonačnodimenzionalan, prednost ovog pristupa je očita. U primjenama ćemo imati konačnodimenzionalan $\mathcal{H} = \mathbb{R}^m$, obično proizašao iz diskretizacije funkcije rješenja dinamičkog sustava u prostornoj varijabli, a broj vektora *n* će biti dobiven uzorkovanjem funkcije u odabrnim vremenskim trenucima. Uzorkovane vrijednosti funkcije nazivamo uzorcima. Otud i ime metode. U ovom slučaju metoda je efikasnija od izravnog pristupa jer je u pravilu prostorna diskretizacija značajno finija od vremenske, tj. $m \gg n$.

1.2 POD i rješenja dinamičkih sustava

Vektori za koje određujemo POD bazu mogu biti dobiveni na više načina, na primjer eksperimentalno ili uzorkovanjem funkcije u odabranim točkama domene. U nastavku detaljnije opisujemo drugi slučaj kada je funkcija u pitanju rješenje dinamičkog sustava. Neka je T > 0, $y_0 \in \mathcal{H}$, $F : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ i

$$\dot{y}(t) = F(y(t)), \ t \in [0, T]$$

 $y(0) = y_0.$
(1.7)

Pretpostavljamo da je *F* dovoljno glatka da bude osigurana egzistencija i jedinstvenost rješenja $y : [0,T] \rightarrow \mathcal{H}$. Cilj POD metode u kontekstu dinamičkih sustava je pronaći ortonormiranu bazu konačnodimenzionalnog potprostora \mathcal{U} od \mathcal{H} unaprijed određene dimenzije $\ell < dim(\mathcal{H})$ koja u nekom smislu bolje opisuje trajektoriju $\{y(t) : t \in [0,T]\} \subset \mathcal{H}$ od drugih jednakobrojnih ortonormalnih skupova.

Ostvarivanju cilja možemo pristupiti na dva načina. Opisat ćemo svakoga od njih te iskazati teorem koji otkriva vezu među njima.

Diskretni slučaj

U realnim situacijama ponekad nije poznato pravilo po kojem je funkcija od interesa zadana na cijelom segmentu [0, T], nego su poznate njezine (aproksimativne) vrijednosti na nekom, obično konačnom podskupu $0 \le t_1 \le t_2 \le \cdots \le t_n \le T$. Radi jednostavnosti možemo pretpostaviti da se radi o ekvidistantnim točkama za koje vrijedi

$$\Delta t = \frac{T}{n-1}, \quad t_{i+1} - t_i = \Delta t, \quad i = 1, \dots, n-1.$$

Uzimamo

$$y_i = y(t_i) \in \mathcal{H}, i = 1, \dots, n.$$

Sjetimo se da smo ovakve vektore nazvali uzorcima funkcije. Kad je y zadano kao rješenje sustava običnih diferencijalnih jednadžbi y_i su približne vijednosti za $y(t_i)$ određene nekom numeričkom metodom. POD bazu ranga ℓ za uzorke odrđujemo kako je opisano ranije. Kako bi naglasili ovisnost POD baze o broju uzetih uzoraka uvodimo nove oznake

$$u_i^n = u_i, \ \lambda_i^n = \lambda_i, \ i = 1, \ldots, \ell.$$

Kažemo da u_i^n , $i = 1, ..., \ell$ čine POD bazu ranga ℓ za y. Kako bi ostale oznake bile dosljedne još postavimo $\mathcal{R}^n = \mathcal{R} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \langle u, y_j \rangle_{\mathcal{H}} y_j$. Jasno je da kvaliteta ovako dobivene baze

izravno ovisi o kvaliteti uzoraka. Oni moraju biti odabrani tako da dobro reprezentiraju cijelu trajektoriju. Ako su odabrani uzorci u ekvidistantnim točkama, *n* mora biti dovoljno velik da uhvati ponašanje funkcije, ali ne prevelik da postupak učini značajno računski zahtjevnijim.

Ponekad se uzorcima u početni skup vektora dodaju i konačne diferencije

$$\bar{\partial}_t y(t_i) = \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta t}, \quad i = 2, \dots, n$$

kako bi se poboljšala stabilnost i dobile bolje ocjene aproksimacije (vidi [10]). \mathcal{U} se ne mijenja kada se dodaju konačne diferencije jer su one linearne kombinacije uzoraka, ali vektori POD baze mogu ispasti drugačiji.

Neprekidni slučaj

Pretpostavljamo da je poznato rješenje sustava (1.7) na [0, T]. U tom slučaju skup za koji želimo odrediti POD bazu nije diskretan pa je potrebno prilagoditi funkciju cilja iz definicije POD baze (1.1).

Neka je $\ell < dim(\mathcal{H})$. Kažemo da ortonormirani vektori $u_i \in \mathcal{H}, i = 1, ..., \ell$ čine neprekidnu POD bazu za y ako rješavaju

$$\min_{z_1,\dots,z_\ell \in \mathcal{H}} \int_0^T \|y(t) - \sum_{i=1}^\ell \langle y(t), z_i \rangle_{\mathcal{H}} z_i \|_{\mathcal{H}}^2 dt, \quad \langle z_i, z_j \rangle_{\mathcal{H}} = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, \ell.$$
(1.8)

Usporedbom diskretne i neprekidne definicije može se uočiti da se funkcija cilja u (1.1) može dobiti kada integral u (1.8) aproksimiramo formulom numeričke integracije. Ova primjedba daje odgovor na pitanje kako odabrati težine α_i . U [9] je predloženo da se uzme

$$\alpha_1 = \alpha_n = \frac{\Delta t}{2}, \quad \alpha_i = \Delta t, \ i = 2, \dots, n-1$$

jer tada dobivamo trapeznu integracijsku formulu za koju vrijedi

$$\forall f \in C([0,T];\mathcal{H}) \quad \lim_{n \to \infty} \sum_{i=1}^n \alpha_i ||f(t_i)||_{\mathcal{H}}^2 = \int_0^1 ||f(t)||_{\mathcal{H}}^2 dt.$$

Optimizacijska zadaća se opet svodi na svojstveni problem. Uvedimo $\mathcal{R}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ zadan s

$$\mathcal{R}u = \int_{0}^{T} \langle u, y(t) \rangle_{\mathcal{H}} y(t) dt.$$

U narednom teoremu izrečena su najvažnija svojstva operatora \mathcal{R} .

Teorem 1.2.1. [14] Neka je \mathcal{H} separabilan, $y \in H^1(0, T; \mathcal{H})$ i α_i trapezne težine. Tada vrijedi sljedeće.

- \mathcal{R} je linearan, kompaktan, nenegativan hermitski operator.
- Postoje svojstvene vrijednosti λ_i , $i = 1, 2, 3, ..., za \mathcal{R}$ i pripadni svojstveni vektori $u_i \in \mathcal{H}, i = 1, 2, 3, ...$

$$\mathcal{R}u_i = \lambda_i u_i, \ \lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \dots, \quad \lim_{i \to \infty} \lambda_i = 0.$$

• u_i , $i = 1, 2, 3, ..., \ell$ je rješenje od (1.8).

•
$$\int_{0}^{T} \sum_{i=1}^{\ell} \langle y(t), u_i \rangle_{\mathcal{H}}^2 dt = \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i, \quad \int_{0}^{T} ||y(t) - \sum_{i=1}^{\ell} \langle y(t), u_i \rangle_{\mathcal{H}} ||u_i||_{\mathcal{H}}^2 dt = \sum_{i>\ell} \lambda_i$$

• $\lim_{n \to \infty} \|\mathcal{R}^n - \mathcal{R}\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})} = 0 \quad i \quad \lim_{n \to \infty} \lambda_i^n = \lambda_i, \quad \lim_{n \to \infty} u_i^n = u_i, \quad i = 1, \dots, \ell \quad kada \ je \ \lambda_\ell > \lambda_{\ell+1}.$

Teorem nam daje opravdanje da neprekdnu varijantu POD-a, koja nije praktično iskoristiva, zamijenimo diskretnom ako je broj dostupnih uzoraka dovoljno velik.

I ovdje se može unijeti utjecaj derivacije ý na određivanje POD baze (vidi [10]) na način da funkciji cilja u (1.8) dodamo član

$$\int_0^T \|\dot{y}(t) - \sum_{i=1}^\ell \langle \dot{y}(t), z_i \rangle_{\mathcal{H}} |z_i||_{\mathcal{H}}^2 dt.$$

1.3 POD-Galerkinova metoda

U prethodnim poglavljima opisana je metoda dobivanja POD baze za skup vektora i funkciju. Takva baza određuje niskodimenzionalni potprostor u blizini kojeg početni podaci obitavaju, ℓ baznih vektora predstavlja ℓ najvažnijih obilježja tih podataka. Zbog ovakvih svojstava POD bazu možemo iskoristiti za dobivanje modela nižeg reda.

Neka je zadan sustav (1.7). Zovemo ga puni sustav. Neka je y njegovo jedinstveno rješenje. Problematično je što \mathcal{H} može biti beskonačnodimenzionalan. Problem nije do kraja riješen ni ako nekom diskretizacijskom metodom \mathcal{H} zamijenimo njegovovom konačnodimenzionalnom aproksimacijom. Naime, obično je \mathcal{H} funkcijski prostor (H^1 , L^2 i sl.) pa za diskretizaciju možemo koristiti klasične metode poput konačnih diferencija, konačnih elemenata ili konačnih volumena. Kako bi osigurali dovoljnu točnost diskretizacije, dimenzije aproksimacijskog prostora znaju biti jako velike (mjerene u tisućama, pa čak i milijunima). Jednadžbe je tada moguće numerički riješiti, ali postupak može trajati predugo i zahtijeva dostupnost velike količine memorije. Mnogi modeli tada postaju beskorisni jer je potrebno dobivati rezultate u realnom vremenu.

U ovakvim prigodama pristupamo aproksimaciji punog modela modelom manjeg reda. Pri tome se javlja određeni gubitak točnosti koji postaje zanemariv u odnosu na dobrobiti, višestruko niži trošak simulacija.

Metoda koju koristimo je Galerkinova projekcija na $\mathcal{U} \leq \mathcal{H}$ čija je ortonormirana baza POD baza ranga ℓ za y, $\{u_1, \ldots, u_\ell\}$, za neki $\ell \ll dim(\mathcal{H})$. Označimo

$$w(t) = \sum_{i=1}^{\ell} q_i(t)u_i : [0,T] \to \mathcal{U}, \qquad (1.9)$$

gdje su koeficijenti q_i realne funkcije na [0, T]. Trajektorija rješenja y ne mora biti cijela sadržana u \mathcal{U} , pa ovako definirana funkcija w općenito nije rješenje punog sustava. Pretpotavljamo da je

$$w(t) \approx y(t), t \in [0, T].$$

Neka je (vidi [1])

$$\dot{w}(t) = F(w(t)) + r(t).$$
 (1.10)

Uzimamo da vrijedi Galerkinov uvjet ortogonalnosti

$$r \perp \mathcal{U},$$

odnosno $\forall t \in [0, T], v \in \mathcal{U} \langle r(t), v \rangle_{\mathcal{H}} = 0$. Skalarnim množenjem izraza (1.10) vekrorima $u_i, i = 1, \dots, \ell$ uzimajući u obzir (1.9) i Galerkinov uvjet ortogonalnosti izlazi

$$\dot{q}_i(t) = \left\langle F(\sum_{j=1}^{\ell} q_j(t)u_j), u_i \right\rangle_{\mathcal{H}}.$$

Dobili smo sustav običnih diferencijalnih jednadžbi koji nazivamo sustav smanjenog reda. Rješenje tog sustava je ℓ realnih funkcija, dok je rješenje punog sustava funkcija s vrijednostima u \mathcal{H} . Ovaj postupak nazivamo POD-Galerkinova metoda.

Dodatna prednost POD-Galerkinove metode se uočava kada je F linearna. Sustav smanjene dimenzije postaje

$$\dot{q}_i(t) = \sum_{i=1}^{\ell} q_i(t) \left\langle F(u_i), u_i \right\rangle_{\mathcal{H}}.$$
(1.11)

Uvodimo oznaku $B_{ij} = \langle F(u_i), u_i \rangle_{\mathcal{H}}, B \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$. Elementi matrice *B* ne ovise o *t* i mogu biti izračunati prije rješevnja sustava, koji tada možemo zapisati u sljedećem obliku

$$\dot{q}(t) = Bq(t), \tag{1.12}$$

gdje smo koristili oznaku $q(t) = (q_1(t), ..., q_\ell(t))^T$. U ovom obliku rješavanje običnih diferencijalnih jednadžbi ne ovisi o dimenziji prostora \mathcal{H} . Primjerice, neka je $\mathcal{H} = \mathbb{R}^m$ proizašao iz diskretizacije rješenja parcijalne diferencijalne jednadžbe u prostornoj varijabli. Da bi porgeška aprokimacije bila dovoljno mala *m* mora biti velik. Puni sustav je dimenzije *m* pa je iznimno skup za računanje. Odaberemo li $\ell \ll m$ i umjesto punog sustava odaberemo rješavati sustav smanjenog reda trošak računanja značajno se smanjuje i ne ovisi o *m*. Ako je *F* nelinearna izvrjednjavanje desne strane u (1.11) još uvijek ovisi o *m*. U idućem poglavlju ćemo opisati kako i tome doskočiti.

Nakon projekcije jednadžbe na \mathcal{U} preostalo je još odrediti novi početni uvjet. Dobit ćemo ga ortogonalnom projekcijom vektora y_0 na \mathcal{U} . Stavimo

$$w(0) = w_0 = \sum_{i=1}^{\ell} \langle y_0, u_i \rangle_{\mathcal{H}} u_i,$$

odnosno

$$q(0) = q_0 = (\langle y_0, u_1 \rangle_{\mathcal{H}}, \dots, \langle y_0, u_\ell \rangle_{\mathcal{H}})^T$$

Slučaj $\mathcal{H} = \mathbb{R}^m$

Ovdje detaljnije opisujemo metodu kada je \mathcal{H} konačnodimenzionalan, odnosno $\mathcal{H} = \mathbb{R}^m$. Već je napomenuto da se POD metoda osobito dobro ponaša kada je funkcija F linearna. Da to naglasimo, a ne izgubimo na općenitosti uzimamo

$$F = A + \mathbf{f},$$

gdje je $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ linearan operator, a **f** nelinearna vektorska funkcija zadana po komponentama, $f_i : S_i \to \mathbb{R}$, $S_i \subset \mathbb{R}^m$, i = 1, ..., m,

$$\mathbf{f}(x) = (f_1(x), \ldots, f_m(x))^T, \quad x = (x_1, \ldots, x_m)^T \in \bigcap_{i=1}^m S_i \subset \mathbb{R}^m.$$

Često u primjerima možemo naići na slučaj da je $f_i(x) = f_i(x_i) = f(x_i)$, za neku realnu funkciju jedne realne varijable f. To ne treba čuditi jer sustavi običnih diferencijalnih jednadžbi na kojima se primjenjuju ove tehnike najčešće bivaju dobiveni semidiskretizacijom skalarnih parcijalnih diferencijalnih jednadžbi gdje su funkcije upravo ovakvog oblika. Štoviše, u tom slučaju A je diskretna aproksimacija prostornog linearnog parcijalnog diferencijalnog operatora. Puni sustav glasi

$$\dot{y}(t) = Ay(t) + \mathbf{f}(y(t)), \quad t \in [0, T]
y(0) = y_0,$$
(1.13)

pri čemu je rješenje $y(t) = (y_1(t), \dots, y_m(t))^T \in \mathbb{R}^m$ za svaki $t \in [0, T]$ te $y_0 \in \mathbb{R}^m$. Nekom numeričkom metodom odredimo *n* uzoraka funkcije *y* u ekvidistantnim točkama na segmentu [0, T]

$$y_i \approx y(t_i) \in \mathbb{R}^m, \ i = 1, \dots, n$$

i postavimo $Y = (y_1, \ldots, y_n) \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Obično je n < m, pa metodom uzoraka odredimo POD bazu ranga $\ell < n, u_1, \ldots, u_\ell \in \mathbb{R}^m$ i označimo

$$U = (u_1, \ldots, u_\ell) \in \mathbb{R}^{m \times \ell}.$$

Aproksimacija rješenja u prostoru razapetom POD modovima (1.9) glasi

$$w(t) = U\mathbf{q}(t), \ t \in [0, T],$$

gdje je

$$\mathbf{q}(t) = (q_1(t), \ldots, q_\ell(t))^T,$$

a sustav smanjenog reda

$$\dot{q}_i(t) = \sum_{j=1}^{\ell} q_j(t) \langle Au_j, u_i \rangle_W + \left\langle \mathbf{f}(\sum_{j=1}^{\ell} q_j(t)u_j), u_i \right\rangle_W,$$

odnosno matrično

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{A}\mathbf{q}(t) + U^T W \mathbf{f}(U\mathbf{q}(t)), \quad t \in [0, T], \quad (1.14)$$

pri čemu je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$ s elementima

$$\mathbf{A}_{ij} = \langle Au_j, u_i \rangle_W.$$

Aproksimacija početnog uvjeta je dana s

$$q(0) = q_0 = U^T W y_0 \in \mathbb{R}^{\ell}.$$

U izrazu

$$U^T W \mathbf{f}(U \mathbf{q}(t))$$

možemo jasno vidjeti manu POD metode kada je **f** netrivijalna, odnosno problem nelinearan. Naime, $U\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^m$ pa je potrebno izvrjedniti *m* komponenti funkcije u svih *m* varijabli. Zbog toga se može dogoditi da aproksimacijom početnog modela POD metodom dobijemo manje točan model zanemarivo manje, ili čak veće složenosti u odnosu na puni sustav, pa metoda ne uspijeva ispuniti svoju svrhu.

Za kraj ćemo iskazati teorem koji govori o ocjeni greške POD metode u konačnodimenzionalnom slučaju.

Teorem 1.3.1. [13, Teorem 2.3.] Neka je $y \in C([0,T]; \mathbb{R}^m) \cap C^1([0,T]; \mathbb{R}^m)$ jedinstveno rješenje sustava (1.13) takvo da je $\ddot{y} \in L^2(0,T; \mathbb{R}^m)$ i $\ell \leq m$ fiksiran. Neka je $\{u_1^{(n)}, \ldots, u_\ell^{(n)}\}$ diskretna POD baza ranga ℓ za y. Pretpostavimo da implicitna Eulerova metoda

$$\langle \frac{Y_j - Y_{j-1}}{\Delta t}, u_i^n \rangle_W = \langle AY_j + \mathbf{f}(Y_j), u_i^n \rangle_W, \quad i = 1, \dots, \ell, \quad j = 2, \dots, n$$

$$\langle Y_1, u_i^n \rangle_W = \langle y_0, u_i^n \rangle_W \qquad \qquad i = 1, \dots, \ell$$

$$(1.15)$$

ima jedinstveno rješenje $\{Y_j\}_{j=1}^n$, gdje Y_j označava aproksimaciju od y u t_j . Tada postoji konstanta C > 0 takva da vrijedi

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j ||y(t_j) - Y_j||_W^2 \le C \left((\Delta t)^2 + \sum_{i=\ell+1}^m \left(\lambda_i^n + \sum_{j=1}^n \alpha_j |\langle \dot{y}(t_j), u_i^n \rangle_W |^2 \right) \right)$$

ukoliko je Δt dovoljno malo i **f** Lipschitz neprekidna.

Poglavlje 2

Diskretna empirijska interpolacija (DEIM)

Diskretna empirijska interpolacija razvijena je kao alat za poboljšanje POD metode za određivanje modela smanjenog reda. Promatrat ćemo je u kontekstu sustava običnih diferencijalnih jednadžbi (1.13) u slučaju kada je W jedinična matrica. Drugim riječima, prostor \mathbb{R}^m je opskrbljen standardnim skalarnim produktom. POD metoda uspješno se nosi s linearnim zadaćama jer pripadni model smanjenog reda ne ovisi o redu punog sustava, dok isto ne uspijeva postići s nelinearnima. Naime, pri izvrjednjavanju nelinearne komponente dolazi do vraćanja na dimenziju m.

Postoji više pristupa koji omogućavaju nošenje s ovim problemom. DEIM je predložen u [5], a radi na principu aproksimacije nelinearnosti kombinacijom projekcije i interpolacije. Satoji se od dva dijela, odabira potprostora bliskog trajektoriji funkcije te odabira interpolacijskih indeksa. Zajedno daju kosu projekciju funkcije na izabrani potprostor.

DEIM je pojednostavljena, diskretna varijanta empirijske interpolacijske metode (EIM).

2.1 EIM

Empirijska intepolacijska metoda je postupak za diskretizaciju parcijalne diferencijalne jednadžbe s nelinarnom ovisnošću o parametrima uvedena u [4]. Ključna ideja je zamijeniti nelinearnu komponentu njezinom afinom aproksimacijom. Ukratko opisujemo postupak konstrukcije aproksimacije.

Zadani su $\Omega \subset \mathbb{R}^k$, $\mathcal{T} \subset \mathbb{R}^p$ i dovoljno glatka funkcija $g(\cdot; t) \in L^{\infty}(\Omega)$ ovisna o parametru $t \in \mathcal{T}$.

Neka je $\tilde{\mathcal{T}} \subset \mathcal{T}$ odabaran podskup prostora parametara i $d_{max} \in \mathbb{N}$ manji od dimenzije potprostora od $L^{\infty}(\Omega)$ razapetog tajektorijom funkcije $g(\cdot; t)$. Konstruiramo niz rastućih

potprostora $W_d = span\{\xi_1, \ldots, \xi_d\}$ takav da vrijedi

$$0 \neq \xi_1 = g(\cdot; t_1), \quad t_1 \in \tilde{\mathcal{T}}$$
$$t_d = \arg \max_{t \in \tilde{\mathcal{T}}} \inf_{z \in W_{d-1}} ||g(\cdot; t) - z||_{L^{\infty}(\Omega)}, \quad \xi_d = g(\cdot; t_d), \quad d = 2, \dots, d_{max}$$

U njima ćemo tražiti aproksimaciju funkcije. U svakom koraku bira se parametar koji maksimizira udaljenost funkcije i njoj najbližeg elementa prethodnog potprostora u nizu tj. bira se parametar kojim je određena funkcija najgore aproksimirana u dosad odabranom potprostoru.

Nadalje, konstruiramo familiju rastućih skupova interpolacijskih točaka $X_d = \{x_1, ..., x_d\}$ na sljedeći način

$$x_{1} = \arg ess \sup_{x \in \Omega} |\xi_{1}(x)|, \quad v_{1} = \frac{\xi_{1}}{\xi_{1}(x_{1})},$$
$$x_{d} = \arg ess \sup_{x \in \Omega} |r_{d}(x)|, \quad v_{d} = \frac{r_{d}}{r_{d}(x_{d})}, \quad d = 2, \dots, d_{max}$$

gdje je

$$r_d = \xi_d - \sum_{j=1}^{d-1} \gamma_j^{d-1} q_j,$$

a $(\gamma_1^{d-1}, \dots, \gamma_{d-1}^{d-1})^T$ rješenje sustava

$$\sum_{j=1}^{d-1} \gamma_j^{d-1} v_j(x_i) = \xi_d(x_i), \quad i = 1, \dots, d-1.$$

Pokaže se da je $\{v_1, \ldots, v_d\}$ baza *d*-dimenzionalnog prostora W_d te da za svaku *d*-torku realnih brojeva β_j , $j = 1, \ldots, d$ postoji jedinstvena funkcija $v \in W_d$ takva da je $v(x_j) = \beta_j$, $j = 1, \ldots, d$.

Posljednje svojstvo garantira postojanje tražene aproksimacije, koja glasi

$$g_d(\cdot;t) = \sum_{j=1}^d c_j(t)q_j,$$

pri čemu su c_i odabrani tako kreirana funkcija interpolira g u čvorovima x_i , to jest

$$\sum_{j=1}^{d} q_j(x_i)c_j(t) = g(x_i; t), \quad i = 1, \dots, d.$$

Za razliku od drugih interpolacijskih tehnika, ovdje funkcije i čvorovi interpolacije nisu fiksirani unaprijed, već ih određuje konkretan problem. Također, kod povećavanja broja

čvorova interpolacije postojećem skupu samo se dodaju novi elementi. Interpolacijske funkcije ne ovise o parametru, pa nakon što se algoritam izvrši, koeficijente c_j možemo izračunati za bilo koju vrijednost od t. Pretpostavljena glatkoća funkcije omogućava da u algoritmu koristimo samo podskup prostora parametara što može bitno pojednostavniti računanje.

2.2 DEIM

Diskretna empirijska interpolacijska metoda kao i njezina neprekidna varijanta EIM inspirirana je potrebom da se riješi problem koji nelinearnosti uzrokuju u modelima smanjenoga reda, ali se može definirati i izvan tog konteksta kao metoda za aproksimaciju nelinearnih funkcija. U ovom odjeljku opisat ćemo je na takav način.

EIM je definiran na funkcijama oblika $g(\cdot; t) \in L^{\infty}(\Omega)$, za neku domenu $\Omega \subset \mathbb{R}^k$ i *t* iz prostora parametara $\mathcal{T} \subset \mathbb{R}^p$. Parametrizirane funkcije na koje primjenjujemo DEIM umjesto kontinuirane domene Ω uzimaju argumente iz konačnog skupa. Bez smanjenja općenitosti možemo pretpostaviti da je to skup $\{1, \ldots, m\}$, za neki $m \in \mathbb{N}$, tj. za svaki $i \in \{1, \ldots, m\}$ i $t \in \mathcal{T}$

$$g_i(t) := g(i; t) \in \mathbb{R},$$

pa g možemo promatrati kao vektorsku funkciju

$$g(t) = (g_1(t), \ldots, g_m(t))^T : \mathcal{T} \to \mathbb{R}^m.$$

Prvi korak je pronalazak potprostora $\mathcal{V} \leq \mathbb{R}^m$ dimenzije d < m na koji ćemo projicirati funkciju. \mathcal{V} mora biti što bliži trajektoriji $\{g(t), t \in \mathcal{T}\}$ da bi aproksimacija bila što bolja. Kod primjene na modele smanjenog reda idealno je da je trajektorija vezana uz neki niskodimenzionalni prostor, odnosno da vrijedi $d \ll m$. Dobar kandidat za traženi prostor je linearna ljuska POD baze ranga d za g. Možemo je odrediti iz matrice uzoraka $G = (g(t_1), \ldots, g(t_n)) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, gdje su t_1, \ldots, t_n odabrane točke u prostoru parametara. Dobivene vektore POD baze označimo s v_1, \ldots, v_d i

$$V = (v_1, \ldots, v_d) \in \mathbb{R}^{m \times d}$$

Neka je

$$Vc(t) = \sum_{i=1}^{d} c_i(t) v_i \approx g(t)$$

aproksimacija funkcije g u \mathcal{V} , pri čemu je $c(t) = (c_1(t), \dots, c_d(t))^T : \mathcal{T} \to \mathbb{R}^d$. Preostaje odrediti *c*. Sustav

$$g(t) = Vc(t) \tag{2.1}$$

ima *d* nepoznanica i *m* jednadžbi. Po pretpostavci je d < m, tj. sustav je preodređen, pa od *m* jednadžbi biramo njih *d*. Drugim riječima, biramo indekse $p_1, \ldots, p_d \in \{1, \ldots, m\}$ i konstruiramo matricu

$$S = (e_{p_1}, \ldots, e_{p_d}) \in \mathbb{R}^{m \times d}$$

Ovdje je $e_i = (0..., 0, \stackrel{i}{1}, 0, ..., 0) \in \mathbb{R}^m$ *i*-ti vektor kanonske baze za \mathbb{R}^m . Kažemo da su $p_1, ..., p_d$ interpolacijski indeksi, a *S* operator odabira. Primjenom operatora odabira na (2.1) dobivamo

$$S^T g(t) = S^T V c(t). (2.2)$$

Pretpostavimo da je $S^T V \in \mathbb{R}^{d \times d}$ nesingularna. Množenjem slijeva jednadžbe (2.2) matricom $(S^T V)^{-1}$ izlazi da je

$$c(t) = (S^{T}V)^{-1}S^{T}g(t).$$

Nakon što smo odredili nepoznate koeficijente, možemo dati formulu za DEIM aproksimaciju funkcije g,

$$\tilde{g}(t) = V(S^T V)^{-1} S^T g(t) = V(S^T V)^{-1} \begin{pmatrix} g_{p_1}(t) \\ \vdots \\ g_{p_d}(t) \end{pmatrix}, \quad t \in \mathcal{T}.$$
(2.3)

Preostaje pitanje odabira interpolacijskih indeksa, ali prije nego damo odgovor na to pitanje uvjerimo se da je njihov naziv opravdan. Naime, djelujemo li operatorom odabira na (2.3) možemo uočiti da je

$$S^T \tilde{g} = S^T g(t), t \in \mathcal{T}.$$

Dakle, p_i -ta komponenta funkcije g podudara se s p_i -tom komponentom funkcije \tilde{g} za i = 1, ..., d, pa DEIM aproksimacija zaista interpolira funkciju u indeksima p_i .

U ovom radu prezentirat ćemo dva načina konstrukcije operatora odabira. Prvi način predstavljen je u [5]. Radi se o pohlepnom algoritmu koji u svakom koraku ograničava rast spektralne norme inverza matrice $S^T V$, $||(S^T V)^{-1}||_2$. Postupak je dan u algoritmu 1.

Od ulaznih vektora se zahtijeva da su linearno nezavisni što osigurava da je $\mathbf{r} \neq 0$, a to implicira da je metoda dobro definitana tj. $S^T V$ je nesingularna. Prvi indeks odgovara poziciji po apsolutnoj vrijednosti najveće komponente prvog vektora, a ostali poziciji po apsolutnoj vrijednosti najveće komponente u \mathbf{r} , koji predstavlja rezidual DEIM aproksimacije reda j - 1 za trenutni ulazni vektor v_j . Izlazni indeksi su jedinstveno određeni, ne ponavljaju se i hijerarhijski su uređeni.

Algoritam je ovisan o odabranoj uređenoj bazi za \mathcal{V} . Međutim, jednom kada su indeksi odabrani, promjena baze neće rezultirati promjenom aproksimacijske funkcije. Da to potvrdimo, uzmimo $Z \in \mathbb{R}^{d \times d}$ nesingularnu i $X = (x_1, \ldots, x_d) \in \mathbb{R}^{m \times d}$ za koju vrijedi V = XZ. Tada je $span\{x_1, \ldots, x_d\} = \mathcal{V}$, štoviše $\{x_1, \ldots, x_d\}$ je baza za \mathcal{V} . Slijedi

$$\tilde{g}(t) = V(S^T V)^{-1} S^T g(t) = X Z(S^T X Z)^{-1} S^T g(t) = X(S^T X)^{-1} S^T g(t)$$

Algoritam 1 DEIM algoritam [5, Algoritam 1] Ulaz $v_1, ..., v_d$ linearno nezavisni Izlaz Interpolacijski indeksi $p_1, ..., p_d$ 1: $p_1 = \arg \max_i(|v_1(i)|); V_1 = (v_1); S_1 = (e_{p_1}); P = (p_1);$ 2: $\operatorname{za} j = 2, ..., d$ 3: Riješi $S_{j-1}^T V_{j-1} z = S_{j-1} v_j$ po z;4: $\mathbf{r} = v_j - V_{j-1} z; p_j = \arg \max_i(|\mathbf{r}(i)|);$ 5: $V_j = (V_{j-1}, v_j); S_j = (S_{j-1}, e_{p_j}); P = (P_{j-1}, p_j);$ 6: $\operatorname{kraj za}$

DEIM aprokimacija je jednoznačno određena odabirom vektora baze v_1, \ldots, v_d , pa kvaliteta aproksimacije direktno ovisi o njihovoj sposobnosti da dobro opišu trajektoriju. POD baza se nameće kao dobar odabir jer globalno optimalno hvata dinamiku funkcije, a to će potvrditi i sljedeći teorem o ocjeni greške.

Teorem 2.2.1. [5, Lema 3.2.] Neka je $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^m$ proizvoljni vektor. Neka je $\{v_j\}_{j=1}^d \subset \mathbb{R}^m$ zadani skup ortonormiranih vektora. Neka je $\tilde{\mathbf{g}} = V(S^TV)^{-1}S^T\mathbf{g}$, gdje je $V = (v_1, \ldots, v_d)$ i $S = (e_{p_1}, \ldots, e_{p_d})$, pri čemu su indeksi p_1, \ldots, p_d dobiveni algoritmom 1 za $\{v_j\}_{j=1}^d \subset \mathbb{R}^m$. Ocjena greške je dana s

 $\|\boldsymbol{g} - \tilde{\boldsymbol{g}}\|_2 \leq C \|(\boldsymbol{I}_m - \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^T)\boldsymbol{g}\|_2,$

UZ,

$$C = \|(S^T V)^{-1}\|_2 \le \frac{(1 + \sqrt{2m})^{d-1}}{|e_{p_1}^T v_1|} = \frac{(1 + \sqrt{2m})^{d-1}}{\|v_1\|_{\infty}} \le \sqrt{m}(1 + \sqrt{2m})^{d-1}.$$

Ocjena aproksimacije u teoremu je dana u odnosu na grešku najbolje aproksimacije (ortogonalna projekcija). Pokazuje se da je vrlo pesimistična s obzirom na uočeno ponašanje u numeričkim eksperimentima. Osim toga, problematično je i to što desna strana, preciznije $||(I_m - VV^T)\mathbf{g}||_2$, ovisi o parametru *t*, pa je ogradu skupo računati. Zbog toga je u [5] pokazano da je

$$\|(I_m - VV^T)\mathbf{g}\|_2 \approx \sigma_{d+1},\tag{2.4}$$

pri čemu je σ_{d+1} (d + 1)-va singularna vrijednost matrice uzoraka funkcije g

$$\mathbf{G} = (g(t_1), \ldots, g(t_n)) \in \mathbb{R}^{m \times n},$$

 $\check{\operatorname{cim}} \operatorname{je} \mathbf{g} \operatorname{blizu} \operatorname{span} \{g(t_1), \ldots, g(t_n)\}.$

Napomena 2.2.2. [8] Može se lako uočiti sličnost metode odabira interpolacijskih indeksa u DEIM metodi i odabira interpolacijskih točaka u EIM-u. Razlika je što se nova točka dobiva iz reziduala koji je razlika trenutne funkcije i njezine aproksimacije u prostoru razapetom prethodnim (normiranim) rezidualima, dok je u DEIM-u rezidual razlika trenutne funkcije i njezine aproksimacije u prostoru razapetom dosadašnjm vektorima. Pokazuje se da je i ta razlika samo prividna. Naime, izlazna vrijednost algoritma 1, odnosno interpolacijski indeksi, ostaju isti ako prvi izraz u koraku 5 zamijenimo s

$$V_j = (V_{j-1}, \mathbf{r}).$$

Štoviše, ova verzija algoritma se podudara s LU faktorizacijom s pivotiranjem po retcima, tj. S odgovara matrici permutacije dobivenoj faktorizacijom matrice V.

2.3 Q-DEIM

Q-DEIM [8] je metoda diskretne empirijske interpolacije koja se od DEIM-a razlikuje samo u izboru operatora odabira. U tom dijelu DEIM pokazuje slabosti koje ova metoda eliminira. Prednosti Q-DEIM-a su:

- bolja apriorna ocjena
- izbor operatora odabira ne ovisi o ortonormiranoj bazi prostora
- omogućava efikasniju implementaciju na računalu.

Algoritam se temelji na QR faktorizaciji, a ključni rezultati dani su u sljedećem teoremu. Problem je formuliran na \mathbb{C} .

Teorem 2.3.1. [8, Teorem 2.1.] Neka je d < m i $V = (v_1, \ldots, v_d) \in \mathbb{C}^{m \times d}$ takva da je $V^*V = I_d$. Postoji algoritam za računanje operatora odabira S složenosti $O(md^2)$ takav da je je

$$||(S^T V)^{-1}||_2 \le \sqrt{m-d+1} \frac{\sqrt{4^d+6d-1}}{3}$$

i za svaki $\mathbf{g} \in \mathbb{C}^m$

$$|(I_m - V(S^T V)^{-1}S^T)g||_2 \le \sqrt{m} O(2^d) ||(I_m - VV^*)g||_2.$$

Ako je V samo punog ranga, onda ocjena postaje

$$||(S^T V)^{-1}||_2 \le \frac{\sqrt{m-d+1}}{\sigma_{\min}(V)} \frac{\sqrt{4^d+6d-1}}{3}.$$

Postoji operator odabira S_{*} takav da je ocjena pogreške aproksimacije

$$||(I_m - V(S_*^T V)^{-1} S_*^T) g||_2 \le \sqrt{1 + d(m - d)} ||(I_m - V V^*) g||_2.$$

Operatori odabira S i S_{*} se ne mijenjaju ako U zamijenimo s UZ, gdje je $Z \in \mathbb{C}^{d \times d}$ proizvoljna unitarna matrica.

Operator S iz teorema konstruiran je na sljedeći način. Neka je

$$V^*\Pi = QR$$

QR faktorizacija s pivotiranjem po stupcima od V^* . R se može particionirati tako da je

$$R = (T K)$$

gdje je $T \in \mathbb{C}^{d \times d}$ gornje trokutasta matrica. Odgovarajuća particija od V^* glasi

$$V^*\Pi = (\tilde{V}_1^* \ \tilde{V}_2^*) = (QT \ QK).$$

Kao operator odabira S uzimamo matricu koja iz V^{*} uzima stupce koji tvore \tilde{V}_1^* , tj.

$$V^*S = \tilde{V}_1^*,$$

ili

$$S^T V = \tilde{V}_1 = T^* Q^*.$$

Ocjenjuje se $||(S^TV)^{-1}||_2$, odnosno zbog unitarne invarijantnosti matrične 2 norme $||T^{-1}||_2$. Operator S_* je odabran tako da maksimizira volumen (apsolutnu vrijednost determinante) matrice S_*^TV po svim $d \times d$ podmatricama od V. Povezanost dva operatora krije se u činjenici da se način odabira operatora S (pivotiranje u QR faktorizaciji) može se interpretirati kao lokalno pohlepni algoritam za maksimiziranje volumena od S^TV , a zbog napomene 2.2.2 (*LU* faktorizacija s pivotiranjem po retcima) ista interpretacija vrijedi i za DEIM. Pohlepni algoritam ne mora biti optimalan, ali eksperimentalno daje zadovoljavajuće rezultate. Unatoč boljoj ocjeni greške, S_* nije od praktične koristi jer ga je teško odrediti.

Jednom kad je poznat operator odabira, potrebno je odrediti $V(S^T V)^{-1}$. Zbog načina na koji je konstruiran *S* moguće je osigurati da dobiveni operator (numerički) egzaktno interpolira **g** u odabranim komponentama. Računamo ga na sljedeći način:

$$V(S^{T}V)^{-1} = \Pi \begin{pmatrix} T^{*} \\ K^{*} \end{pmatrix} Q^{*} (QT)^{-*} = \Pi \begin{pmatrix} I_{d} \\ K^{*}T^{-*} \end{pmatrix}.$$

Algoritam 2 za konstrukciju operatora S objedinjuje gornja razmatranja.

Pokazuje se da je ocjena iz teorema i dalje često pregruba jer se član $O(2^d)$ dostiže samo u umjetno stvorenim primjerima. U praksi je njegov utjecaj obično najviše O(d).

Algoritam 2 Q-DEIM algoritam [8]

Ulaz $V = (v_1, ..., v_d) \in \mathbb{R}^{m \times d}$ ortonormalna **Izlaz** Interpolacijski indeksi $p_1, ..., p_d$ Matrica $M = V(S^T V)^{-1}$ 1: Izračunati QR faktorizaciju s pivotiranjem stupaca za V^T : $V^T \Pi = QR$, gdje je $\Pi = (e_{p_1}, ..., e_{p_d}, ..., e_{p_m})$ i R = (T K), za $T \in \mathbb{R}^{d \times d}$. 2: $M = \Pi \begin{pmatrix} I_d \\ (T^{-1}K)^* \end{pmatrix}$

2.4 Primjeri

Primjer 1 (Rungeova funkcija)

U ovom odjeljku ćemo ispitatiti učinkovitost DEIM i Q-DEIM metoda. Za implementaciju i testiranje korišteno je softversko okruženje MATLAB. Zadana je funkcija

$$h: \Omega \times \mathcal{T} \to \mathbb{R},$$

 $\Omega \subset \mathbb{R}^k$ i $\mathcal{T} \subset \mathbb{R}^p$. Za potrebe testiranja uzimamo $k = p = 1, \Omega = [-1, 1], \mathcal{T} = [1, 25]$ i Rungeovu funkciju

$$h(x;t) = \frac{1}{1+tx^2}.$$

Ona je poznata kao primjer za koji interpolacija polinomima u ekvidistantnim točkama divergira. Primjer funkcije je preuzet iz [3].

Kako bi diskretne metode mogli primijeniti na ovakvu funkciju, moramo odrediti njezin semidiskretizirani oblik. Odaberemo $x_1, \ldots, x_m \in \Omega$ i definirajmo

$$g:\mathcal{T}\to\mathbb{R}^m$$

formulom

$$g(t) = \begin{pmatrix} h(x_1; t) \\ \vdots \\ h(x_m; t) \end{pmatrix}, \quad t \in \mathcal{T}.$$

U slučaju Rungeove funkcije na segmentu [-1, 1] uzimamo m = 100 ekvidistantnih točaka

$$x_i = -1 + 2\frac{i-1}{m-1}$$

Uzorkovanjem po prostoru parametara dobivamo uzorke funkcije

$$g(t_1),\ldots,g(t_n),$$



Slika 2.1: Rungeova funkcija u odabranim parametrima.

a iz njih POD metodom prostor \mathcal{V} i njegovu bazu v_1, \ldots, v_d . Kao što je već spomenuto, ne postoji definitivan odgovor koji je optimalan izbor broja d, ali (1.4) nam može dati ideju koji su dobri kandidati. Na primjer, može se uzeti najmanji d za koji je

$$\mathcal{E}(d) \ge 0.99,\tag{2.5}$$

što znači da je $\ge 99\%$ energije sadržano u prvih *d* POD modova. Mi ispitujemo kvalitetu aproksimacije za razne odabire *d*. Za Rungeovu funkciju smo odabrali *n* = 50 ekvidistantnih točaka na [1, 25],

$$t_i = 1 + 24 \frac{i-1}{n-1}.$$

Na slici 2.2 b) vidimo da singularne vrijednosti opadaju vrlo brzo, pa ne čudi da već za d = 2 dobivamo

$$\mathcal{E}(d) = 0.999101915961186 \ge 0.99. \tag{2.6}$$

Nakon što odredimo \tilde{g} želimo vidjeti koliko je ona dobra aproksimacija te kakva je stvarna greška u odnosu na teoretske ograde. Kako bi to napravili odabrali smo skup test parametara τ_1, \ldots, τ_N , u ovom primjeru N = 100. Važno je da se oni razlikuju od parametara



Slika 2.2: a) Prvih 5 elemenata POD baze i prvih 5 interpolacijskih čvorova dobivenih DEIM i Q-DEIM algoritmima za Rungeovu funkciju. b) Singularne vrijednosti matrice uzoraka Rungeove funkcije.

korištenih za konstrukciju POD baze jer DEIM aproksimacija mora biti dobra na čitavoj domeni funkcije g. Mjerimo proječnu grešku aproksimacije po N odabranih točaka

$$\frac{\sum_{i=1}^{N} \|g(\tau_i) - \tilde{g}(\tau_i)\|_2}{N}.$$
(2.7)

Koristeći ogradu iz teorema 2.2.1, (2.7) možemo odozgo ocjeniti s

$$\|(S^{T}V)^{-1}\|_{2} \frac{\sum_{i=1}^{N} \|g(\tau_{i}) - VV^{T}g(\tau_{i})\|_{2}}{N}.$$
(2.8)

Kako bi potvrdili da procjena (2.4) ima smisla, računamo i

$$\|(S^T V)^{-1}\|_2 \sigma_{d+1}.$$
(2.9)

Slika 2.3 pokazuje da je u primjeru Rungeove funkcije za manje vrijednosti d (2.9) zaista gornja ograda DEIM to jest Q-DEIM aproksimacije, ali za d > 15 ima manju vrijednost nego prava greška. Promatramo i međusobni odnos DEIM-a i Q-DEIM-a tako što uspoređujemo vrijednosti prave prosječne pogreške i

$$C = \|(S^T V)^{-1}\|_2 \tag{2.10}$$



Slika 2.3: Prava prosječna greška (2.7), ocjena greške (2.8) i aproksimativna ocjena greške (2.9) za aproksimaciju Rungeove funkcije a) DEIM, b) Q-DEIM metodom.



Slika 2.4: a) Prave prosječne greške aproksimacije Rungeove funkcije dobivene ortogonalnom projekcijom na V te DEIM i Q-DEIM metodom. b) Razlika prosječne grešake DEIM i Q-DEIM aproksimacije. c) Usporedba vrijednosti (2.10) za operatore odabira dobivene algoritmom 1 odnosno 2.

za operatore odabira dobivene algoritmom 1 odnosno 2. Iz grafa a) na slici 2.4 i tablice na 2.5 možemo uočiti da DEIM i Q-DEIM aproksimacije Rungeove funkcije nisu značajno lošije od optimalne aproksimacije u prostoru V, a usporedbom dvije interpolacijske metode vidljivo je da Q-DEIM ima nešto manju stvarnu grešku. Također, iz grafa c) na slici 2.4 slijedi da je Q-DEIM ocjena greške bolja, baš kao što smo i tvrdili na početku poglavlja 2.3.

Prosječna pogreska aproksimacije	d = 3	d = 11
Ortogonalna projekcija	0.018599237940343	6.630104829266435e-09
DEIM	0.032742907281842	1.282492786826466e-08
Q-DEIM	0.024564780441235	8.522771043086307e-09

Slika 2.5: Prosječne pogreške aproksimacije Rungeove funkcije ortogonalnom projekcijom te DEIM i Q-DEIM metodom za d = 3, 11.

Slike 2.6 i 2.7 prikazuju grafove Rungeove funkcije te njezine DEIM i Q-DEIM aproksimacije reda 3 odnosno 11 u tri odabrana parametra. Golim okom je vidljivo da se funkcije za d = 3 ne podudaraju iako procjena (2.6) sugerira da je 99% energije sadržano već u prva dva POD vektora. Međutim, za d = 11 nije više moguće na slici razaznati razliku među njima. To potvrđuje i tablica na slici 2.5 gdje se vidi da su prosječne pogreške aproksimacije u slučaju d = 3 reda veličine $O(10^{-2})$, dok je u slučaju d = 11 DEIM pogreška reda veličine $O(10^{-8})$, a Q-DEIM pogreška reda $O(10^{-9})$.



Slika 2.6: Grafovi Rungeove funkcije, njezine DEIM i Q-DEIM aproksimacije ranga 3 za vrijednosti parametra a) t = 5.4079, b) t = 12.4483, c) t = 21.4266.



Slika 2.7: Grafovi Rungeove funkcije, njezine DEIM i Q-DEIM aproksimacije ranga 11 za vrijednosti parametra a) t = 5.4079, b) t = 12.4483, c) t = 21.4266.

Primjer 2

Kao drugi primjer uzeli smo funkciju $h_M : [-3,3] \times [1,5] \rightarrow \mathbb{R}$

$$h_M(x;t) = x\sin(\frac{\pi tx}{2})\cos(\frac{\pi te^x}{8})$$

i odabrali mrežu od m = 1000 ekvidistantnih točaka u [-3,3] za prostornu diskretizaciju, n = 100 ekvidistantnih točaka na [1,5] u kojima smo izračunali uzorke te N = 200 test parametara.

Na grafu a) u 2.9 prikazano je prvih 5 točaka interpolacije i prvih 5 modova POD baze.



Slika 2.8: Funkcija h_M u odabranim parametrima.

U grafu b) je zanimljivo primijetiti da se nagli pad singularnih vrijednosti događa tek oko dvadesete po redu, pa je najmanji d za koji vrijedi (2.5) tek 16, za razliku od Rungeove funkcije, čiji je graf singularnih vrijednosti puno strmiji već od prve i ista nejednakost vrijedi za d = 2.



Slika 2.9: a) Prvih 5 elemenata POD baze i prvih 5 interpolacijskih čvorova dobivenih DEIM i Q-DEIM algoritmima za funkciju h_M . b) Singularne vrijednosti matrice uzoraka funkcije h_M .

Zanimljivo je promotriti položaj interpolacijskih indeksa na slici 2.9 a) te 2.11. Kod obje metode se fokusiraju na rubovima segmenta. Vidimo da se Q-DEIM indeksi prvo pojavljuju na desnom kraju, gdje se funkcije ponašaju najkaotičnije (2.8), a tek kasnije i na lijevom.

Na slici 2.10 prikazani su grafovi funkcije h_M u tri različita parametra, kao i pripadne aproksimacije ortogonalnom projekcijom te DEIM i Q-DEIM metodom reda 17.

Slika 2.12 daje uvid u ponašanje greške, ocjene greške i aproksimativne ocjene greške dviju interpolacijskih metoda za vrijeme povećavanja reda aproksimacije od 2 do 50. Ovdje primjećujemo da je (2.9) za sve odabrane d zaista gornja ograda greške aproksimacije, kadkad i bolja od (2.8).



Slika 2.10: Grafovi funkcije h_M , njezine ortogonalne projekcije te DEIM i Q-DEIM aproksimacije ranga 17 za vrijednosti parametra a) t = 1.335, b) t = 1.9675, c) t = 2.8719.



Slika 2.11: Prvih a) 17, b) 40 interpolacijskih indeksa DEIM i Q-DEIM algoritma za h_M .



Slika 2.12: Prava prosječna greška (2.7), ocjena greške (2.8) i aproksimativna ocjena greške (2.9) za aproksimaciju funkcije h_M a) DEIM, b) Q-DEIM metodom.

U ovom primjeru još smo proučavali kakav utjecaj odabir metode aproksimacije ima na vrijeme potrebno za izvrjednjavanje. Očekivano, pokazuje se da je vremenski najzahtjevnija ortogonalna projekcija, zahtjevnija i od računanja originalne funkcije. DEIM i Q-DEIM su uglavnom opravdali očekivanja o vremenskoj uštedi te su u tome podjednako uspješni. Jedina anomalija se javlja kod d = 43, kada je bilo brže izvrjedniti h_M nego njezinu DEIM aproksimaciju. Veća razlika u vremenu računanja originalne funkcije i interpolacijskih aproksimacija bi se uočila za veću dimenziju m.



Slika 2.13: Prosječno vrijeme potrebno za izvrjednjavanje funkcije h_M , njezine ortogonalne projekcije te aproksimacije DEIM i Q-DEIM metodom u sekundama.

2.5 Model nižeg reda

Vratimo se problemu s početka poglavlja. Tražimo model nižeg reda za sustav (1.13)

$$\dot{y}(t) = Ay(t) + f(y(t)), \quad t \in [0, T]$$

 $y(0) = y_0.$

POD-Galerkinovom metodom dobili smo sustav (1.14)

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{A}\mathbf{q}(t) + U^T \mathbf{f}(U\mathbf{q}(t)), \qquad t \in [0, T]$$
$$\mathbf{q}(0) = q_0.$$

Na nelinearni član $\mathbf{f}(U\mathbf{q}(t))$ sada primjenjujemo DEIM metodu. Prvi korak je određivanje POD baze, tj. matrice $V \in \mathbb{R}^{m \times d}$. Dobit ćemo je koristeći uzorke nelinearne funkcije iz punog sustava radije nego iz njegove POD aproksimacije. Te uzorke nije potrebno posebno računati jer su već bili izračunati kod konstrukcije POD baze U.

U drugoj fazi odabranim algoritmom se računa operator odabira $S \in \mathbb{R}^{m \times d}$.

Rezultirajući aproksimacijski nelinearni član glasi

$$V(S^{T}V)^{-1}S^{T}\mathbf{f}(U\mathbf{q}(t)) = V(S^{T}V)^{-1} \begin{pmatrix} f_{p_{1}}(U\mathbf{q}(t)) \\ \vdots \\ f_{p_{d}}(U\mathbf{q}(t)) \end{pmatrix}.$$
 (2.11)

Promotrimo prvo slučaj kada je f zadana tako da se izvrjednjava po komponentama tj.

$$\mathbf{f}(x) = (f(x_1), \dots, f(x_m))^T, \quad x = (x_1, \dots, x_m)^T, \tag{2.12}$$

gdje je f realna funkcija jedne realne varijable. Ova pretpostavka nam omogućavamo da (2.11) zapišemo kao

$$V(S^T V)^{-1} \mathbf{f}(S^T U \mathbf{q}(t)).$$
(2.13)

Preostaje (2.13) uvrstiti u (1.14). Napokon, POD-DEIM aproksimirajući sustav za (1.13) glasi

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{A}\mathbf{q}(t) + U^T V(S^T V)^{-1} \mathbf{f}(S^T U \mathbf{q}(t))$$
$$\mathbf{q}(0) = q_0.$$

Matrice $U^T V(S^T V)^{-1} \in \mathbb{R}^{\ell \times d}$ i $S^T U \in \mathbb{R}^{d \times \ell}$ odrede se unaprijed, pa složenost rješavanja sustava ne ovisi o dimenziji punog sustava, već samo o *d* i ℓ . Dakle, ovaj postupak je zaista riješio problem dizanja POD reduciranog modela na punu dimenziju kod izvrjednjavanja nelinearnih komponenti.

Ovo ipak vrijedi tek za vrlo ograničenu klasu nelinearnosti u sustavima običnih diferencijalnih jednadžbi. Za općenitu nelinearnu vektorsku funkciju **f**, odnosno bez pretpostavke (2.12), nije moguće napraviti prijelaz s (2.11) na (2.13). Promotrimo sada detaljnije takav slučaj. Neka je

$$\mathbf{f}(x) = (f_1(x^1), \dots, f_m(x^m))^T, \ x = (x_1, \dots, x_m) \in \mathbb{R}^m,$$

gdje je $x^i = (x_{r_1^i}, \dots, x_{r_{n_i}^i})^T \in \mathbb{R}^{n_i}$ za neki $0 \le n_i \le m$ i $1 \le r_1^i < \dots < r_{n_i}^i \le m, i = 1, \dots, m$. DEIM aproksimacija glasi

$$\tilde{\mathbf{f}}(x) = V(P^T V)^{-1} \begin{pmatrix} f_{p_1}(x^{p_1}) \\ \vdots \\ f_{p_d}(x^{p_d}) \end{pmatrix}$$

U [5] je opisan algoritam za izvrjednjavanje DEIM aproksimacije u tom slučaju. Efikasan je samo ako su brojevi n_i , i = 1, ..., m mali u odnosu na m. Naime, ako je n_i jednak (ili blizu) m, jasno je da će izvrjednjavanje pripadne komponentne funkcije ovisiti o m.

Poglavlje 3

Primjena POD i DEIM metode

3.1 Nelinearno prodiranje viskoznog fluida u poroznom sredstvu

Nelinearno prodiranje viskoznog fluida u poroznom sredstvu je pojava koja se događa na dodiru dva fluida različite viskoznosti koji se mogu miješati. Promatramo je na dvodimenzionalnoj pravokutnoj domeni. Porozno sredstvo je ispunjeno fluidom, a s jedne strane pravokutne domene uniformnom brzinom dotiče manje viskozan fluid. Na njihovoj granici manje viskozan fluid prodire u viskozniji i tako oblikuje uzorke koji izgledaju poput prstiju. Pojave kao ove uočavaju se u procesima kromatografskog razdvajanja, raspršivanja zagađivača, crpljenja nafte i mnogih drugih pa je njihovo istraživanje od velikog interesa. Znanstvenicima u proučavanju uvelike pomažu vjerne numeričke simulacije koje su vremenski i memorijski zahtjevne za računalo, pa je ovo dobar primjer na kojemu se mogu primijeniti metode smanjivanja reda modela koje su opisane u prethodna dva poglavlja. Detaljniji opis problema dan je u [6].

Bezdimenzionalne jednadžbe dane u terminima funkcije toka ψ , vrtložnosti ω , temperature *T* i koncentracije *c* za egzotermni procesu glase

$$\nabla^{2}\psi = -\omega$$

$$\omega = -R_{c}(\psi_{x}c_{x} + \psi_{y}c_{y}) + R_{T}(\psi_{x}T_{x} + \psi_{y}T_{y} + T_{y})$$

$$c_{t} + \psi_{y}c_{x} - \psi_{x}c_{y} = \nabla^{2}c + Daf(c)$$

$$T_{t} + \psi_{y}T_{x} - \psi_{x}T_{y} = Le\nabla^{2}T + Daf(c),$$
(3.1)

za $t \in [0, \tau]$ i $(x, y) \in [0, 2Pe] \times [0, Pe] = \Omega$, gdje je *Pe* Pécletov broj. Oznake funkcija s varijablom u indeksu označavaju parcijalnu derivaciju te funkcije po navedenoj varijabli, na primjer $c_t = \frac{\partial c}{\partial t}$. *Da* je Damköhlerov broj i u ovom primjeru uzimamo *Da* = 0.01, *Le* je Lewisov broj, a postavljamo ga na *Le* = 1. R_c i R_T su parametri koji označavaju utjecaj koncentracije odnosno temperature na viskoznost. Promatramo izotermalni slučaj pa je $R_T = 0$, a R_c postavljamo na 3. Funkcija f zadana je izrazom

$$f(c) = -c(c-1)(c+0.1).$$

Preostaje još zadati početne

$$c(x, y, 0) = T(x, y, 0) = \begin{cases} 1, & x \le Pe \\ 0, & x > Pe \end{cases}, y \in [0, Pe],$$

te rubne uvjete

$$\begin{split} c(x,0,t) &= c(x,Pe,t), \quad c_y(x,0,t) = c_y(x,Pe,t) \\ T(x,0,t) &= T(x,Pe,t), \quad T_y(x,0,t) = T_y(x,Pe,t) \\ \psi(x,0,t) &= \psi(x,Pe,t), \quad \psi_y(x,0,t) = \psi_y(x,Pe,t), \end{split}$$

 $za \ x \in [0, 2Pe], t \in [0, \tau] i$

$$c(0, y, t) = 1, c(2Pe, y, t) = 0,$$

 $T(0, y, t) = 1, T(2Pe, y, t) = 0,$
 $\psi(0, y, t) = 0, \psi(2Pe, y, t) = 0,$

 $za y \in [0, Pe], t \in [0, \tau].$

Prije primjene metoda za smanjivanje reda modela, potrebno je diskretizirati jednadžbe u prostornim varijablama. Budući da je problem dan na pravokutnoj domeni, odabiremo metodu centralnih konačnih diferencija na mreži m_x ekvidistantnih točaka u smjeru *x*-osi

$$x_1, ..., x_{m_x}$$

i m_y ekvidistantnih točaka u smjeru y-osi

 y_1,\ldots,y_{m_v} .

Za pripadne aproksimacije koristimo oznake

$$c(t) = (c_{11}(t), \dots, c_{m_x 1}(t), \dots, c_{1m_y}(t), \dots, c_{m_x m_y}(t))^T$$
$$c_{ij}(t) \approx c(x_i, y_j, t),$$

te slično za ostale funkcije. Dobivamo semidiskretizirani oblik jednadžbe s vrijednostima u \mathbb{R}^m , $m = m_x \cdot m_y$

$$c_{t}(t) = Ac(t) + b - F(\psi(t), c(t)) + Da \mathbf{f}(c(t))$$

$$T_{t}(t) = Le(AT(t) + b) - F(\psi(t), T(t)) + Da \mathbf{f}(T(t))$$

$$\omega(t) = -R_{c}(N(\psi(t), c(t) + A_{y}c(t)) + -R_{T}(N(\psi(t), T(t) + A_{y}T(t)))$$

$$A\psi(t) = -\omega(t),$$

(3.2)

gdje su

$$A, A_x, A_y \in \mathbb{R}^{m \times m}, \ b, b_x \in \mathbb{R}^m$$

rijetke matrice i vektori (vidi [6]), a nelinearne funkcije F, N i $\mathbf{f} : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ su zadane formulama

$$F(\psi, c) = (A_{y}\psi) \cdot (A_{x}c - b_{x}) - (A_{x}\psi) \cdot (A_{y}c)$$

$$N(\psi, c) = (A_{x}\psi) \cdot (A_{x}c - b_{x}) + (A_{y}\psi) \cdot (A_{y}c)$$

$$\mathbf{f}(c) = -c \cdot (c - 1) \cdot (c + 0.1).$$
(3.3)

.* označava operaciju množenja vektora po komponentama. Početnom uvjetu za koncentraciju na dodiru dvaju fluida doda se šum (slučajno odabrane vrijednosti između 0 i 1) koji će potaknuti nestabilnosti. U nastavku opisujemo rezultate dobivene za Pe = 200, $m_x = 150$, $m_y = 100$.

Kako bi dobili uzorke funkcija potrebne za konstrukciju POD baze potrebno je riješiti puni sustav. U [6] je predložena prediktor-korektor metoda s integracijom unaprijed koju smo i ovdje koristili. Promatrali smo proces na vremenskom segmentu [0, 200] s korakom $\Delta t = 0.5$. Za implementaciju i testiranje korišteno je softversko okruženje MATLAB.

Slika 3.1 prikazuje singularne vrijednosti matrica uzoraka traženih funkcija. One brzo opa-



Slika 3.1: Singularne vrijednosti matrica uzoraka funkcija $c, T, \omega i \psi$.

daju po iznosu. Naime, za funkcije c i T najmanji ℓ za koji vrijedi $\mathcal{E}(\ell) \ge 0.99$ je 2, za ω



8, a za ψ 3. Na slici 3.2 prikazano je prvih 6 članova POD baze za koncentraciju.

Na puni sustav prvo smo primijenili POD-Galerkinovu metodu. Na slici 3.3 mogu se

Slika 3.2: Prvih 6 elemenata POD baze za c.

vidjeti rješenja(koncentracija) punog i aproksimacijskog sustava dimenzije $\ell = 40$ u odabranim vremenskim trenucima. Treći redak pokazuje da smo smanjivanjem reda sustava na manje od 0.3% reda punog sustava dobili pogrešku veličine $O(10^{-3})$. Međutim, sustav nije linearan, pa je efikasnost rješavanja moguće povećati primjenom DEIM metode. Potrebno je prvo odrediti POD bazu za nelinearne funkcije koristeći pri-



Slika 3.3: U prvom stupcu prikazana je koncentracija dobivena rješavanjem punog sustava, pripadnog POD-Galerkinovog sustava za $\ell = 40$ te apsolutna vrijednost njihove razlike u trenutku t = 100, a u drugom stupcu u trenutku t = 200.

padne matrice uzoraka. Na slici 3.4 prikazane su singularne vrijednosti tih matrica, a na 3.5 prvih 6 elemenata POD baze za **f**. Nakon toga smo DEIM i Q-DEIM algoritmom odredili interpolacijske indekse.

Kombiniranjem POD-Galerkinove i DEIM metode dobili smo sustav neovisan o dimenziji punog semidiskretiziranog problema (m = 15000). Na slikama 3.6 i 3.7 se nalaze grafovi koncentracije određene iz tih sustava za POD dimenzije $\ell = 40$ te DEIM odnosno Q-DEIM



Slika 3.4: Singularne vrijednosti matrica uzoraka nelinearnih funkcija F, N i f.

dimenzije d = 40. Za usporedbu je prikazano i rješenje punog sustava te odgovarajuća pogreška.

Jasno je da je greška nešto veća nego kod čiste POD-Galerkinove metode. To možemo uočiti i na grafovima u prvom redu slike 3.8. Međutim, iz grafova u drugom redu iste slike evidentno je da se vrijeme rješavanja znatno smanjilo. Primjećujemo da u svim ispitivanim segmentima DEIM i Q-DEIM postižu vrlo slične rezultate.



Slika 3.5: Prvih 6 elemenata POD baze za funkciju f.



Slika 3.6: U prvom stupcu prikazana je koncentracija dobivena rješavanjem punog sustava, pripadnog POD-Galerkinovog sustava za $\ell = 40$ uz aproksimaciju nelinearnih dijelova DEIM metodom za d = 40 te apsolutna vrijednost njihove razlike u trenutku t = 100, a u drugom stupcu u trenutku t = 200.



Slika 3.7: U prvom stupcu prikazana je koncentracija dobivena rješavanjem punog sustava, pripadnog POD-Galerkinovog sustava za $\ell = 40$ uz aproksimaciju nelinearnih dijelova Q-DEIM metodom za d = 40 te apsolutna vrijednost njihove razlike u trenutku t = 100, a u drugom stupcu u trenutku t = 200.



Slika 3.8: U prvom redu prikazana je relativna greška (u odnosu na rješenje punog sustava) za koncentraciju dobivenu rješavanjem sustava POD-Galerkinovom metodom, kombinacijom POD-Galerkinove i DEIM metode (d = 25, 40, 60) te kombinacijom POD-Galerkinove i Q-DEIM metode (d = 25, 40, 60) za razne vrijednosti reda POD baze (ℓ). U drugom redu prikazano je vrijeme potrebno za rješavanje tih sustava.

Bibliografija

- D. Amsallem i C. Farhat, CME 345: MODEL REDUCTION Projection-Based Model Reduction, Lecture Notes, Stanford University, dostupno na https:// web.stanford.edu/group/frg/course_work/CME345/CA-CME345-Ch3.pdf (travanj 2016.).
- [2] J. Anderson, Y. C. Chang i A. Papachristodoulou, Model decomposition and reduction tools for large-scale networks in systems biology, Automatica 47 (2011), br. 6, 1165– 1174.
- M. Arnesen, *The Generalized Empirical Interpolation Method*, Institutt for matematiske fag, dostupno na https://brage.bibsys.no/xmlui//handle/11250/ 259278 (2014).
- [4] M. Barrault, Y. Maday, N. C. Nguyen i A. T. Patera, An 'empirical interpolation'method: application to efficient reduced-basis discretization of partial differential equations, Comptes Rendus Mathematique 339 (2004), br. 9, 667–672.
- [5] S. Chaturantabut i D. C. Sorensen, *Nonlinear model reduction via discrete empirical interpolation*, SIAM Journal on Scientific Computing **32** (2010), br. 5, 2737–2764.
- [6] _____, Application of POD and DEIM on dimension reduction of non-linear miscible viscous fingering in porous media, Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems 17 (2011), br. 4, 337–353.
- [7] Z. Drmač, V. Hari, M. Marušić, M. Rogina, Sanja Singer i Saša Singer, *Numerička analiza*, Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (2003).
- [8] Z. Drmac i S. Gugercin, A New Selection Operator for the Discrete Empirical Interpolation Method-improved a priori error bound and extensions, arXiv preprint arXiv:1505.00370 (2015).
- [9] M. Gubisch i S. Volkwein, Proper orthogonal decomposition for linear-quadratic optimal control, Bibliothek der Universität Konstanz, dostupno na http:// nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:352-250378, 2013.

- [10] M. Hinze i S. Volkwein, Proper orthogonal decomposition surrogate models for nonlinear dynamical systems: Error estimates and suboptimal control, Dimension Reduction of Large-Scale Systems, Springer, 2005, str. 261–306.
- [11] I. Kalashnikova, S. Arunajatesan, M. F. Barone, B. G. van Bloemen Waanders i J. A. Fike, *Reduced order modeling for prediction and control of large-scale systems*, Sandia National Laboratories Report, SAND (2014), br. 2014-4693.
- [12] C. W. Rowley, T. Colonius i R. M. Murray, Model reduction for compressible flows using POD and Galerkin projection, Physica D: Nonlinear Phenomena 189 (2004), br. 1, 115–129.
- [13] S. Volkwein, Model reduction using proper orthogonal decomposition, Lecture Notes, Institute of Mathematics and Scientific Computing, University of Graz, dostupno na http://www.math.uni-konstanz.de/numerik/personen/ volkwein/teaching/POD-Vorlesung.pdf (2011).
- [14] _____, Proper orthogonal decomposition: Theory and reduced-order modelling, Lecture Notes, University of Konstanz, dostupno na http://topmath.ma.tum.de/ foswiki/pub/IGDK1754/SummerSchool2013Data/volkwein-slides-1.pdf (2013).

Sažetak

U ovom radu proučavali smo pravu ortogonalnu dekompoziciju (POD) i diskretnu empirijsku interpolacijsku metodu (DEIM) te njihovu primjenu na dobivanje modela smanjenog reda.

POD baza ranga ℓ za zadani skup vektora u Hilbertovom prostoru \mathcal{H} je ortonormalan niz vektora u \mathcal{H} odabran tako da minimizira srednju kvadratnu pogrešku najbolje aproksimacije danih vektora na potprostor razapet nizom. Kada je \mathcal{H} konačnodimenzionalan, POD se svodi na dekompoziciju singularnih vrijednosti. Opisali smo diskretnu i neprekidnu POD dekompoziciju za rješenja dinamičkog sustava te metodu uzoraka za računanje POD baze. DEIM je metoda aproksimacije nelinearne funkcije f kosom projekcijom na prostor blizak njezinoj trajektoriji. Vidjeli smo da je dobro taj prostor fiksirati da bude linearna ljuska vektora POD baze za trajektoriju od f. Predstavili smo dva algoritma za odabir interpolacijskih indeksa koji određuju smjer kose projekcije, DEIM i Q-DEIM. Numeričkim eksperimentima potvrdili smo kvalitetu ovih metoda.

Finom semidiskretizacijom nestacionarnih parcijalnih diferencijalnih jednadžbi dobivaju se dinamički sustavi visoke dimenzije koje je skupo računati. POD-Galerkinova metoda primjenom Galerkinove projekcije na prostor razapet POD bazom konstruira model niže dimenzije koji aproksimira puni model. Redukciju dimenzije sustava ovom metodom nije moguće u potpunosti provesti ako je problem nelinearan. Tome smo doskočili tako što smo zamijenili nelinearni dio njegovom DEIM aproksimacijom. Numeričkim primjerom nelinearnog prodiranja viskoznog fluida u poroznom sredstvu demonstrirali smo metode u praksi te potvrdili teoretska razmatranja.

Summary

In this paper, we studied proper orthogonal decomposition (POD) and discrete empirical interpolation method (DEIM) as well as their application to obtain a reduced order model (ROM).

For a given set of vectors in a Hilbert space \mathcal{H} , POD basis of rank ℓ is orthonormal sequence in \mathcal{H} chosen so as to minimize the mean square error of the best approximation of given vectors in a subspace spanned by sequence. In case of finite dimensional \mathcal{H} , POD comes down to singular value decomposition. We describe discrete and continuous variant of POD for dynamical systems and a method of snapshots for determining the POD basis. DEIM is a method of approximation for nonlinear functions. It uses an oblique projection to the space close to the function trajectory. We saw that POD generated space is a good choice for that purpose. We presented two algorithms for selecting interpolation indices which determine the direction of the projection, DEIM and Q-DEIM. Quality of these methods was confirmed by two numerical experiments.

High dimensional dynamical systems obtained by fine semi-discretization of non-stationary partial differential equations are rather costly to solve numerically. POD-Galerkin method uses Galerkin projection onto a POD generated subspace to construct a reduced order model which approximates the full model. Order reduction cannot be fully achieved if the problem is nonlinear. This difficulty can be overcome by replacing the nonlinear part with its DEIM approximation. We demonstrated the method in practice and confirmed the theoretical arguments using the example of nonlinear miscible viscous fingering in porous media.

Životopis

Angela Bašić-Šiško rođena je u Splitu 1992. Pohađala je Osnovnu školu kneza Mislava u Kaštel Sućurcu, a nakon toga III. gimnaziju u Splitu. Godine 2011. upisala je Preddiplomski sveučilišni studij matematike na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Zagrebu gdje je 2014. stekla zvanje sveučilišne prvostupnice matematike te upisala Diplomski sveučilišni studij primijenjene matematike.