IRKA is a Riemannian Gradient Descent Method

王康

数学科学学院

2024 年 9 月 29 日

1. 研究背景
2. ROPT
3. RGD
4. 算法的改进
5. 数值实验

降阶模型 (model order-reduction)

- 模型降阶 (model order-reduction) 方法是优化设计、优化控制和反问题应用中常见的方法。其降维本质是将随时间变化的多维物理过程进行低维的近似描述，在捕捉系统能量的意义上达到最优化，从而达到降低计算维数、减少计算量、节省计算时间和 CPU 负荷的效果。

全阶模型和降阶模型

- **全阶模型**

$$
\begin{aligned}
E\dot{x}(t) &= Ax(t) + Bu(t), x(0) = 0,\\
y(t) &= Cx(t),
\end{aligned}
$$

- **降阶模型**

$$
\begin{aligned}
\widehat{E}\dot{\widehat{x}}(t) &= \widehat{A}\widehat{x}(t) + \widehat{B}u(t), \widehat{x}(0) = 0,\\
\widehat{y}(t) &= \widehat{C}\widehat{x}(t),
\end{aligned}
$$

- **符号说明**

  $y(t), \widehat{y}(t) \in \mathbb{C}^p, u(t) \in \mathbb{C}^m, x(t) \in \mathbb{C}^n, \widehat{x}(t) \in \mathbb{C}^r$
  $A \in \mathbb{C}^{n\times n}, B \in \mathbb{C}^{n\times m}, E \in \mathbb{C}^{n\times n}, C \in \mathbb{C}^{p\times n}$
  $\widehat{A} \in \mathbb{C}^{r\times r}, \widehat{B} \in \mathbb{C}^{r\times m}, \widehat{E} \in \mathbb{C}^{r\times r}, \widehat{C} \in \mathbb{C}^{p\times r}$

转移函数

想要 $y(t)$ 和 $\widehat{y}(t)$ 在不同尺度下的输入 $u(t)$ 下始终保持近似，就需要保证 $\max_{t>0}|\widehat{y}(t)-y(t)|$ 对于所有的输入 $u(t)$ 都要尽可能小。

- 转移函数 (transfer function)：

$$H(s)=C(sE-A)^{-1}B \quad \widehat{H}(s)=\widehat{C}(s\widehat{E}-\widehat{A})^{-1}\widehat{B}$$

  输入 $u(t)$ 和输出 $y(t)$ 的拉普拉斯变换 $F(u)$ 和 $F(y)$，有这样的关系

$$F(y)=H(s)F(u)$$

  这就可以得到：

$$F(y)-F(\widehat{y})=[H(s)-\widehat{H}(s)]F(u)$$

- 联系

$$\max_{t>0}|\widehat{y}(t)-y(t)|\leqslant\left\|H-\widehat{H}\right\|_{\mathcal{H}_2}.$$

转移函数

- $\mathcal{H}_2$ 误差

$$\left\|H-\widehat{H}\right\|_{\mathcal{H}_2}=\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left\|H(\imath\omega)-\widehat{H}(\imath\omega)\right\|_{\mathrm{F}}^{2}\mathrm{d}\omega\right)^{1/2}$$

- 目标：不仅要求 $\widehat{H}$ 和 H 之间在 $\mathcal{H}_2$ 意义下尽可能接近，还要求 H 的临界系统性质也包含在 $\widehat{H}$ 中（如稳定性），并且 $\widehat{H}$ 的计算也是数值稳定的。
- 目标函数

$$\min_{\mathcal{H}_2}\left\|H-\widehat{H}\right\|_{\mathcal{H}_2}$$

$\mathcal{H}_2$ 空间

- H,$\widehat{H}$ 都是这个空间内的函数，满足的性质

$$\sup_{\xi>0}\int_{-\infty}^{\infty}\|H(\xi+\imath\omega)\|_{\mathrm{F}}^2\mathrm{d}\omega<\infty$$

- 内积

$$\langle F,G\rangle_{\mathcal{H}_2}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{trace}(F(\boldsymbol{\imath}\omega)^*G(\boldsymbol{\imath}\omega))\mathrm{d}\omega,$$

最优性条件

- 函数的极点-残差形式

$$\widehat{H}(s) = \sum_{i=1}^{r} \frac{c_i b_i^*}{s - \lambda_i}$$

b_i 和 c_i 称为残差向量.

- 若 $\widehat{H}(s)$ 是 H 的最优逼近, 则有:

$$\begin{aligned} H(-\overline{\lambda_i})b_i &= \widehat{H}(-\overline{\lambda_i})b_i \\ c_i^* H(-\overline{\lambda_i}) &= c_i^* \widehat{H}(-\overline{\lambda_i}) \\ c_i^* H'(-\overline{\lambda_i})b_i &= c_i^* \widehat{H}'(-\overline{\lambda_i})b_i. \end{aligned}$$

IRKA 的更新

由最优性条件，IRKA 迭代的更新为:

$$
\begin{aligned}
H(-\overline{\lambda_i^{(k)}})b_i^{(k)} &= \widehat{H}_{k+1}(-\overline{\lambda_i^{(k)}})b_i^{(k)} \\
(c_i^{(k)})^* H(-\overline{\lambda_i^{(k)}}) &= (c_i^{(k)})^* \widehat{H}_{k+1}(-\overline{\lambda_i^{(k)}}) \\
(c_i^{(k)})^* H'(-\overline{\lambda_i^{(k)}})b_i^{(k)} &= (c_i^{(k)})^* \widehat{H}'_{k+1}(-\overline{\lambda_i^{(k)}})b_i^{(k)}
\end{aligned}
$$

其中 $\widehat{H}_k(s) = \sum_{i=1}^r \frac{c_i^{(k)}\left(b_i^{(k)}\right)^*}{s-\lambda_i^{(k)}}$，$\lambda_i^{(k)}$ 是 $\widehat{H}(s)$ 的极点。
满足该插值条件每一步更新的函数可以保证唯一性。

1. 研究背景
2. ROPT
3. RGD
4. 算法的改进
5. 数值实验

流形空间

定理

$$\Sigma^{-}_{r,m,p}(\mathbb{C}) = \left\{ \begin{array}{c} \widehat{A} \in \mathbb{C}^{r\times r}\text{is Hurwitz}, \\ \widehat{C}(sI - \widehat{A})^{-1}\widehat{B} : \widehat{B} \in \mathbb{C}^{r\times m}, \widehat{C} \in \mathbb{C}^{p\times r} \\ (\widehat{A}, \widehat{B}, \widehat{C})\text{is minimal} \end{array} \right\}$$

函数空间恰好是一个嵌入子流形，并且在保持 $\mathcal{H}_2$ 范数意义下是一个黎曼子流形。

目标函数与黎曼梯度

首先 MOR 最优问题可以写成 $ROPT$ 问题：

$$\min_{\widehat{H}\in\Sigma_{r,m,p}^{-}(\mathbb{C})} f(\widehat{H}) = \left\|H - \widehat{H}\right\|_{\mathcal{H}_2}^2$$

接下来就可以计算其黎曼梯度：

$$\operatorname{grad} f(\widehat{H}) = \operatorname{Proj}_{\widehat{H}}\left(\nabla_{\overline{H}}\overline{f}(\widehat{H})\right) = \operatorname{Proj}_{\widehat{H}}\left(\widehat{H} - H\right)$$

其中的投影是从 $\mathcal{H}_2$ 空间向切空间 $\mathrm{T}_{\widehat{H}}\Sigma_{r,m,p}^{-}(\mathbb{C})$ 上的正交投影

最优性条件

由优化的最优性条件 $\operatorname{grad} f(p) = \operatorname{Proj}_p(\nabla \overline{f}(p)) = 0$ 得到

$$H - \widehat{H} \perp \mathrm{T}_{\widehat{H}} \Sigma^{-}_{r,m,p}(\mathbb{C})$$

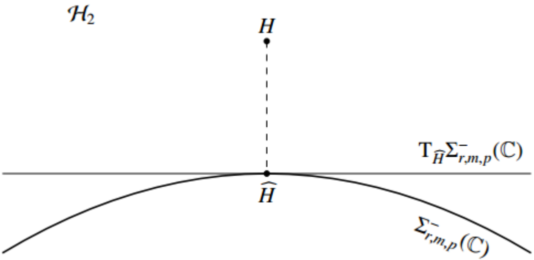

图 1

切空间

为了描述切空间，有以下的引理

引理

$\widehat{H}(s)=\sum_{i=1}^{r}\frac{c_ib_i^*}{s-\lambda_i}$ 对于这个函数处的切向量描述为:

$$\frac{e_jb_i^*}{s-\lambda_i},\frac{c_ie_\ell^*}{s-\lambda_i},\frac{c_ib_i^*}{(s-\lambda_i)^2}$$

其中，$i=1,2,\cdots,r;j=1,2,\cdots,p;\ell=1,2,\cdots,m$

正交性

定理

$\mathcal{F}$ 是 $\mathcal{H}_2$ 空间的任意一个函数，如何刻画 $F \perp \mathrm{T}_{\widehat{H}} \Sigma^-_{r,m,p}(\mathbb{C})$？

$$F(-\overline{\lambda_i})b_i = 0, c_i^* F(-\overline{\lambda_i}) = 0, c_i^* F'(-\overline{\lambda_i})b_i = 0$$

- $F = H - \widehat{H}$，即可得到 IRKA 插值最优条件。说明了满足黎曼优化最优条件得到的函数和通过插值最优性条件得到的函数其实是一个函数。
- $F = H - \widehat{H}_{k+1}$ 就可以得到

$$H - \widehat{H}_{k+1} \perp \mathrm{T}_{\widehat{H}_k} \Sigma^-_{r,m,p}(\mathbb{C})$$

即 $\widehat{H}_{k+1}$ 是 H 正交投影到 $\mathrm{T}_{\widehat{H}_k} \Sigma^-_{r,m,p}(\mathbb{C})$ 上的函数。

收缩

将 MOR 问题转化为黎曼优化问题，IRKA 可以解释为固定步长的 RGD

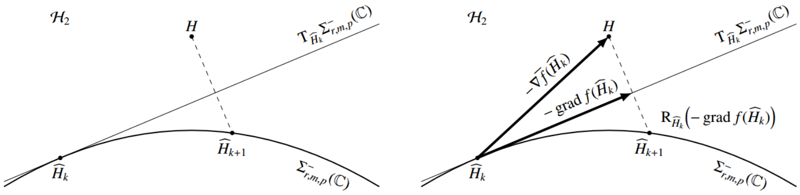

图 2: 迭代图示

收缩

定理

令 $\widehat{H}_{k+1}$ 和 $\widehat{H}_k$ 是 *IRKA* 迭代过程中的两个函数，在 $\widehat{H}_k - \operatorname{grad} f(\widehat{H}_k)$ 处的正交收缩存在，那么必有

$$\widehat{H}_{k+1} = \mathrm{R}_{\widehat{H}_k}\left(\operatorname{grad} f(\widehat{H}_k)\right)$$

按照 IRKA 进行迭代得到的 $\widehat{H}_{k+1}$ 和通过在 $\widehat{H}_k - \operatorname{grad} f(\widehat{H}_k)$ 处进行正交收缩得到的函数是一致的。这就表明 IRKA 就是一个固定步长为 1 的 RGD.

存在的问题

可能存在的一些问题:

- $\Sigma^{-}_{r,m,p}(\mathbb{C})$ 是 $\mathcal{H}_2$ 空间的一个嵌入子流形，实际上迭代过程中 $\widehat{H}_k$ 可能没有落在这个流形上。
- 在前面讲插值迭代的时候，强调 $\widehat{H}_{k+1}$ 是唯一的，事实上在一些情况下也不一定唯一

改进之处

- IRKA 迭代解释为固定步长为 1 的 RGD，可以考虑可变步长形式
$$\widehat{H}_{k+1} = \mathrm{R}_{\widehat{H}_k}(-\alpha_k \mathrm{grad} f(\widehat{H}_k))$$
适当的 α_k 可以保证每一步的函数都是稳定的。
- 若采用 $\widehat{H}_{k+1} = \mathrm{R}_{\widehat{H}_k}(-\alpha_k \mathrm{grad} f(\widehat{H}_k))$ 进行迭代，就会带来一个新的问题。得到的 $\widehat{H}_{k+1}$ 将不在是 $\widehat{H}_k$ 和 $\widehat{H}$ 之间的插值。而是 $H_{k,\alpha_k} = (1-\alpha_k)\widehat{H}_k + \alpha_k H$ 和 $\widehat{H}$ 的插值，也就是每一步并不是以精确值 H 为目标进行迭代。

计算技巧

在进行回溯计算的过程中，每一次回溯都需要计算大量的投影阵，为了方便可以采用如下形式进行更新

定理

对于 $H(s) = C(sE - A)^{-1}B$ 和 $\widehat{H}_k = \widehat{C}_k(s\widehat{E}_k - \widehat{A}_k)^{-1}\widehat{B}_k$，考虑带有可变步长的线搜索，给出以下的更新

$$
\begin{aligned}
\widehat{E}_{k+1} &= \widehat{E}_k - \alpha_k\left(\widehat{E}_k - \widehat{Q}_k^{-1}\widetilde{Q}_k^{\mathrm{T}} E \widetilde{P}_k \widehat{P}_k^{-1}\right) \\
\widehat{A}_{k+1} &= \widehat{A_k} - \alpha_k\left(\widehat{A_k} - \widehat{Q_k}^{-1}\widetilde{Q}_k^{\mathrm{T}} A \widetilde{P_k}\widehat{P_k^{-1}}\right) \\
\widehat{B}_{k+1} &= \widehat{B}_k - \alpha_k\left(\widehat{B}_k - \widehat{Q}_k^{-1}\widetilde{Q}_k^{\mathrm{T}} B\right), \\
\widehat{C}_{k+1} &= \widehat{C_k} - \alpha_k\left(\widehat{C_k} - C\widetilde{P_k}\widehat{P_k^{-1}}\right),
\end{aligned}
\tag{1}
$$

计算技巧

其中的 $\widetilde{P}_k, \widehat{P}_k, \widetilde{Q}_k, \widehat{Q}_k$ 都是通过解以下的方程得来：

$$
\begin{aligned}
A\widetilde{P}_k\widehat{E}_k^{\mathrm{T}} + E\widetilde{P}_k\widetilde{A}_k^{\mathrm{T}} + B\widetilde{B}_k^{\mathrm{T}} &= 0 \\
\widehat{A}_k\widehat{P}_k\widehat{E}_k^{\mathrm{T}} + \widehat{E}_k\widehat{P}_k\widehat{A}_k^{\mathrm{T}} + \widehat{B}_k\widehat{B}_k^{\mathrm{T}} &= 0 \\
A^{\mathrm{T}}\widetilde{Q}_k\widehat{E}_k + E^{\mathrm{T}}\widetilde{Q}_k\widehat{A}_k + C^{\mathrm{T}}\widehat{C}_k &= 0 \\
\widehat{A}_k^{\mathrm{T}}\widehat{Q}_k\widehat{E}_k + \widehat{E}_k^{\mathrm{T}}\widehat{Q}_k\widehat{A}_k + \widehat{C}_k^{\mathrm{T}}\widehat{C}_k &= 0.
\end{aligned}
\tag{2}
$$

算法

Algorithm 1: 回溯法 RGD

计算初始点的转移函数 $\widehat{H}_0$;
for *k in range(max)* **do**
  $\alpha_k = 1$;
  while *ROM* 是不稳定的或者增加了误差 **do**
    $\alpha_k = \alpha_k/2$;
    if $\alpha_k < \alpha_{\min}$ **then**
      break
    end
  end
  分量更新 $\widehat{H}_{k+1}$;
  if $\|\widehat{H}_k - \widehat{H}_{k+1}\|_{\mathcal{H}_2} \leqslant \text{tol} \cdot \alpha_k \|\widehat{H}_{k+1}\|_{\mathcal{H}_2}$ **then**
    break
  end
  return ROM

1. 研究背景
2. ROPT
3. RGD
4. 算法的改进
5. **数值实验**

CD player 实验

CD player 数据集如下：

class	LTIModel
number of equations	120
number of inputs	2
number of outputs	2
$solutionspace$	$numpy(120)$

表 1: FOM 数据结构

- FOM 的结构:120 个方程的微分方程组，其中输入和输出的函数都是 2 维的

FOM 结构

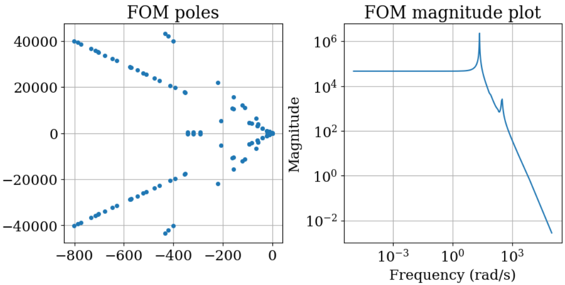

图 3: FOM 结构

- 全阶函数的极点在复平面的分布
- 转移函数

IKRA 迭代的参数与超参数

参数	值
r	6
A_0	$np.diag(np.arange(-1, -r-1, -1))$
B_0	$np.ones((r, fom.dim\_input))$
C_0	$np.ones((fom.dim\_output, r))$

表 2: 相关参数

IRKA 迭代

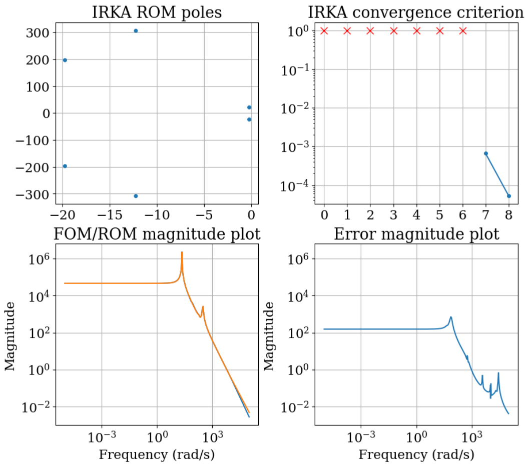

图 4: 近似图以及误差

IRKA 迭代

- ROM 是一个 6 阶的函数，有 6 个极点。
- 迭代进行了 8 步，纵轴表示插值点的相对变化率也就是前面公式中的 λ_i，在第 8 步相对误差就达到了 10^{-4}，其中红色的 ”$\times$” 表示该迭代点时并不是稳定。
- 全阶模型和最终找到的函数只在自变量 (可以看成系统输入的频率) 为 10^5 有少许的差异。
- 误差函数，可以发现在自变量取 1000 以下误差绝对还是相当大，但是到 1000 后绝对误差也会降得很小。

RGD with line search

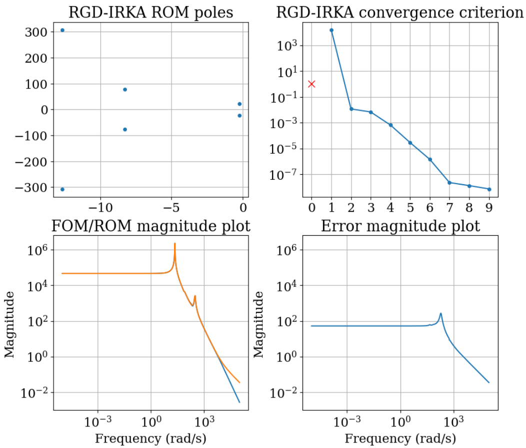

图 5: RGD with line search

RGD with line search

- 带回溯线搜索的 RGD 得到的也是 6 个极点的降阶模型，但从极点的分布来看，RGD 和 IRKA 得到的最后的函数并不同。
- 只有第 1 步是不稳定的。在后面迭代中，插值点 λ_i 的相对变化率都在逐渐减小，并且在 9 步之后前后步相对变化率可以达到 10^{-8}
- RGD 和 IRKA 的误差函数相差不大。

相对误差

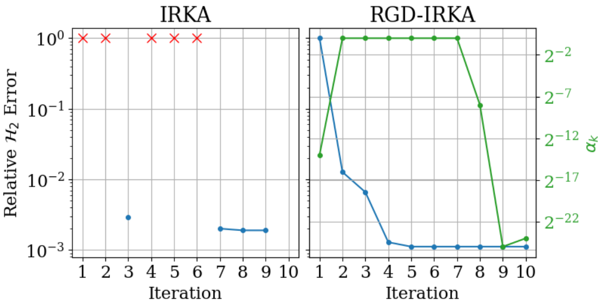

图 6: 相对误差

- 两种方法最后得到降阶模型的相对误差都在 10^{-3} 量级，但是带线搜索的 RGD 迭代过程稳定性更好。
- 带线搜索的 RGD 在最后几步迭代的步长变得很小。