

科学机器学习 +HW1 报告

2100012131 蒋鹏

2025 年 10 月 28 日

目录

1 问题描述	1
2 问题 1	2
2.1 计算格式	2
2.2 时间步长	2
2.3 结果展示	2
3 问题 2	2
3.1 计算格式	2
3.2 时间步长	5
3.3 不同基底数量下的结果展示	5
4 问题 3	5
4.1 计算方法	9
4.2 Koopman 算子的谱与 Koopman 模式	9
4.3 结果展示	9

1 问题描述

对于计算区域 $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ 上的二维对流扩散方程

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot ([u; v]c) = \nabla \cdot (D \nabla c) \quad (1)$$

其中 $c(t, x, y)$ 代表物质浓度。速度场 $[u; v] = [1; 0]$ ，扩散系数 $D = 0.01$ 。初始条件满足 $c(0, x, y) = 0$ 。上下边界为周期边界条件，左边为入流条件满足

$$c(t, 0, y) = \begin{cases} 1, 1/3 < y < 2/3 \\ 0, \text{其他} \end{cases} \quad (2)$$

右边为出流条件，满足 $\frac{\partial c(t, 1, y)}{\partial n} = 0$ ，这里可以假设 $c(t, x, y) = c(t, 1, y)$ 当 $x > 1$ 。

2 问题 1

采用有限体积方法, $dx = dy = 0.005$, 求解上述对流扩散方程, 计算到 $T = 1.5$.

2.1 计算格式

这是一个关于空间导数为散度型的方程, 进行有限体积推导, 得到

$$c'_{i,j} \approx \frac{D}{h^2}(c_{i,j+1} + c_{i,j-1} + c_{i-1,j} + c_{i+1,j} - 4c_{i,j}) + \frac{c_{i-1/2,j} - c_{i+1/2,j}}{h} \quad (3)$$

已知速度场分布, 利用迎风格式近似中点函数值; 再在时间方向上用一阶向前 Euler 离散, 得到数值格式

$$c_{i,j}^{n+1} = \frac{Ddt}{h^2}(c_{i,j+1}^n + c_{i,j-1}^n + c_{i-1,j}^n + c_{i+1,j}^n - 4c_{i,j}^n) + \frac{dt}{h}(c_{i-1,j}^n - c_{i,j}^n) \quad (4)$$

对于上下周期边界条件和右边出流条件: 引入影子单元构造相应的有限体积格式。

2.2 时间步长

1 这是一个对流扩散方程, 根据对流项的 CFL 条件和扩散方程的 L^2 稳定的 Von Neumann 条件:

$$\begin{cases} dt \leq dx \\ \frac{2Ddt}{h^2} \leq 1/2 \end{cases} \quad (5)$$

代入计算, 得到 $dt \leq 6.25e - 4$, 所以我们取 $dt = 5e - 4$ 。

2 若选择 $dt = 0.01$, 在两个临界点 $(0, 1/3), (0, 2/3)$ 的附近, 解出现部分负数值与部分无穷大, 与物理背景实际不符; 而在其他大范围内, 解接近 0, 如图2所示。

2.3 结果展示

计算结果如图1所示。

3 问题 2

采用基于正交分解的降阶模型对上述问题进行计算. 首先写出离散后的方程

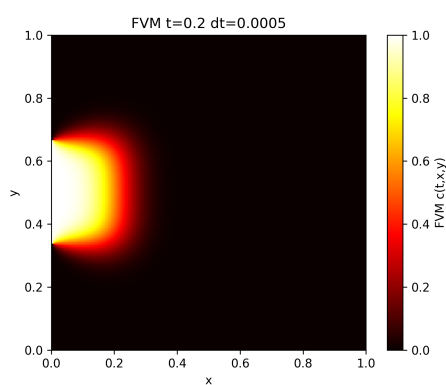
$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} = A\mathbf{c} + f \quad (6)$$

其中 A 是对流扩散方程离散后的矩阵, f 是边界条件的作用。

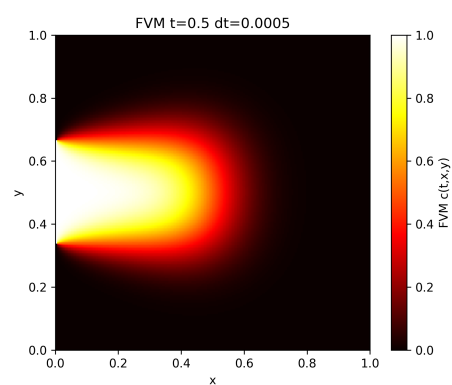
3.1 计算格式

取定 $N_{snap} = 100$, 对 $[0, T]$ 做等距划分, 得到数据集, 对其用梯形公式做积分近似, 进而得到快照矩阵 S . 设定基底维数为 k , 对 S 做 SVD 分解, 取左奇异向量矩阵的前 k 列为投影基底矩阵 V . 做低秩近似 $\mathbf{c} = V\mathbf{q}$, 进而有

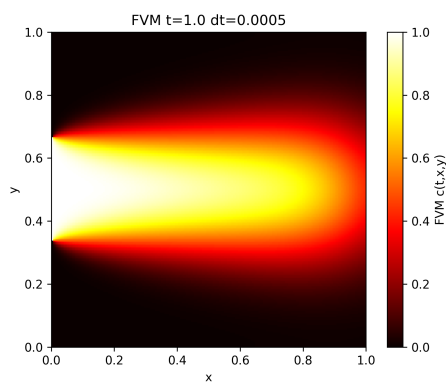
$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = V^T A V \mathbf{q} + V^T f \\ \mathbf{c} = V \mathbf{q} \end{cases} \quad (7)$$



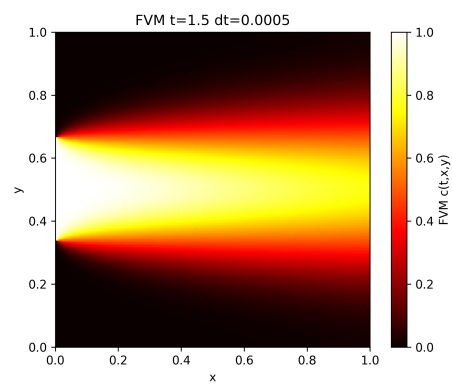
(a) FVM $t=0.2$ $dt=0.0005$



(b) FVM $t=0.5$ $dt=0.0005$

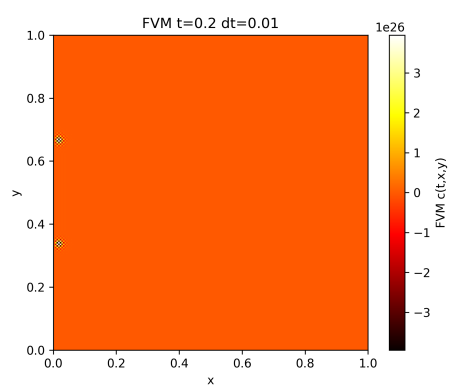


(c) FVM $t=1.0$ $dt=0.0005$

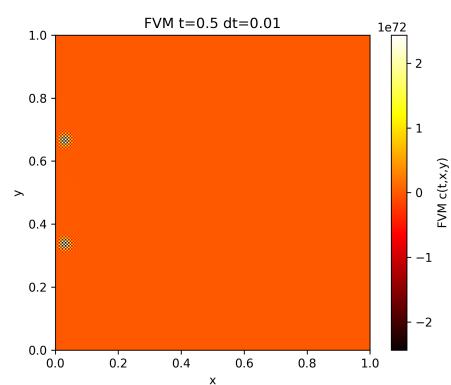


(d) FVM $t=1.5$ $dt=0.0005$

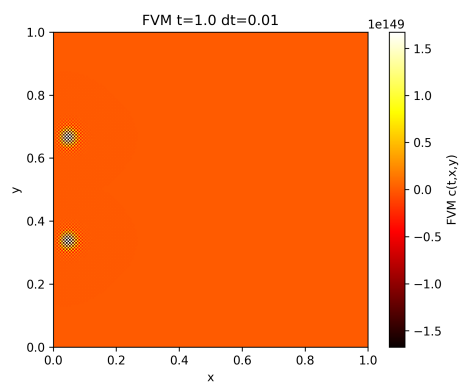
图 1: results of FVM $dt = 0.0005$



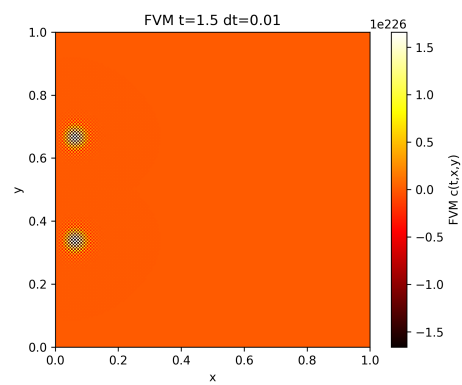
(a) FVM $t=0.2$ $dt=0.01$



(b) FVM $t=0.5$ $dt=0.01$



(c) FVM $t=1.0$ $dt=0.01$



(d) FVM $t=1.5$ $dt=0.01$

图 2: results of FVM $dt = 0.01$

用一阶向前 Euler 求解关于 \mathbf{q} 的 ODE，进而计算 \mathbf{c} 。

子函数求解矩阵-向量乘法 Ax ，与 FVM 中格式基本类似，只是需要单独处理 $i = 0$ 的情况：左端来自左边界，即 f 的作用。

3.2 时间步长

采用时间步长 $dt = 5e - 4$ ，与 FVM 中一致。

3.3 不同基底数量下的结果展示

设置基底数量 $k = 2, 5, 10, 15$ ，计算结果分别展示如图3、4、5、6所示。

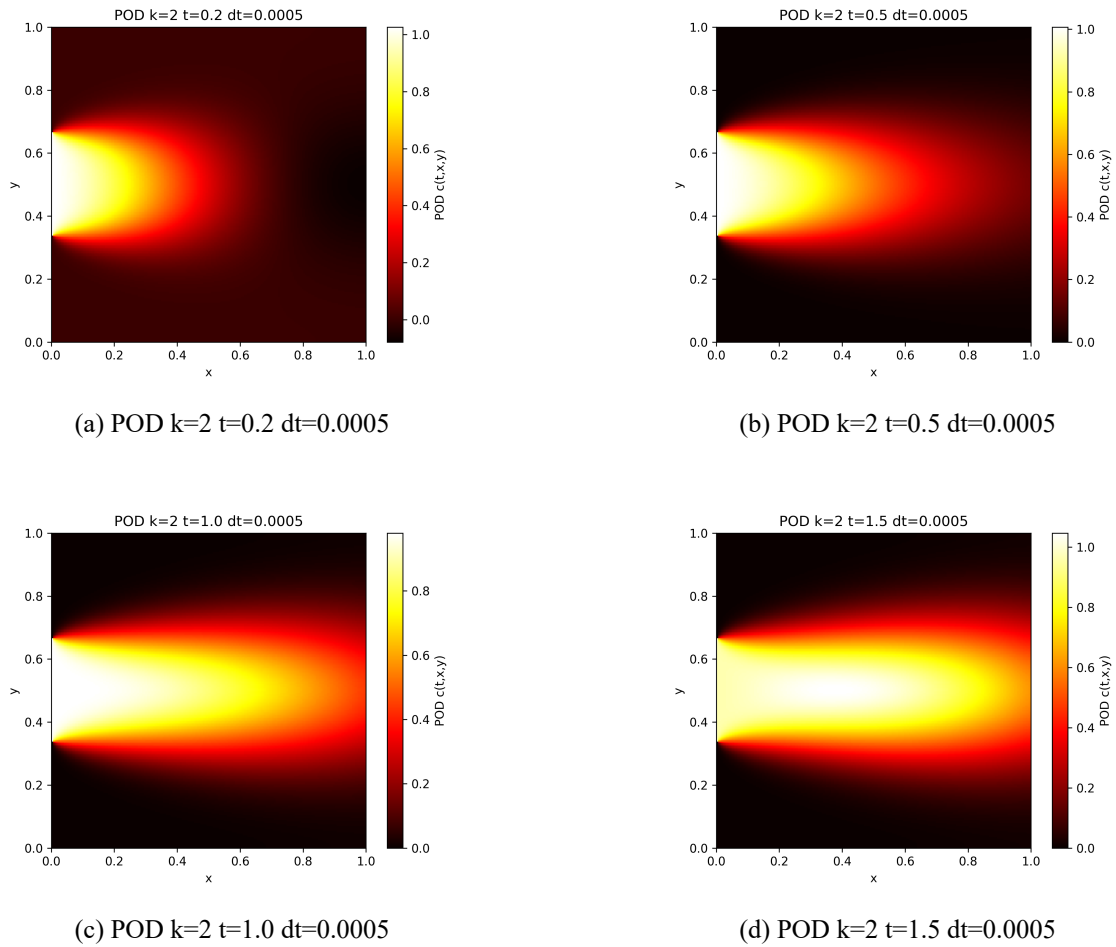
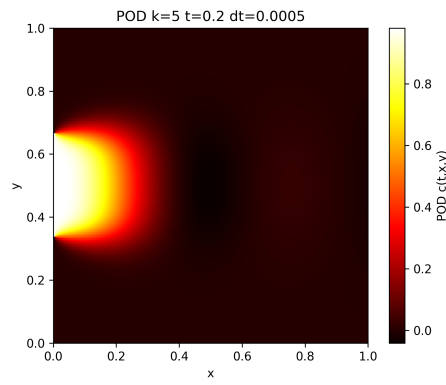


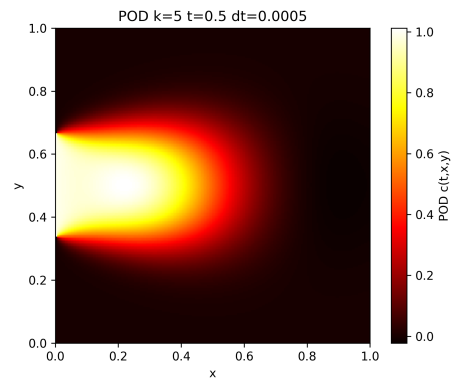
图 3: results of POD k = 2

4 问题 3

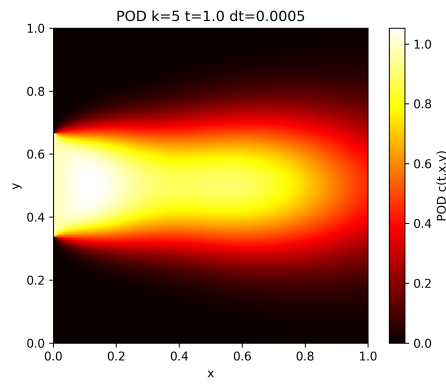
采用动力学模态分解方法进行计算。



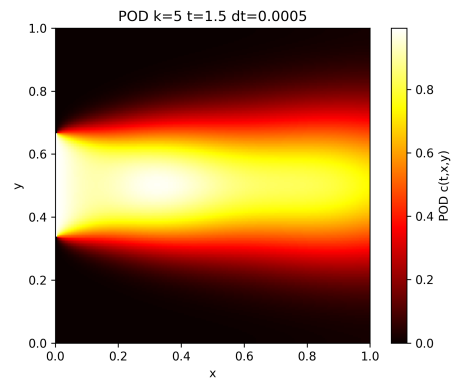
(a) POD k=5 t=0.2 dt=0.0005



(b) POD k=5 t=0.5 dt=0.0005

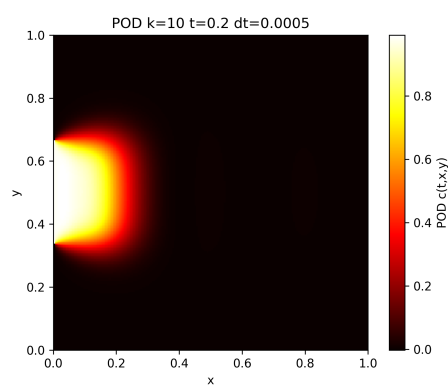


(c) POD k=5 t=1.0 dt=0.0005

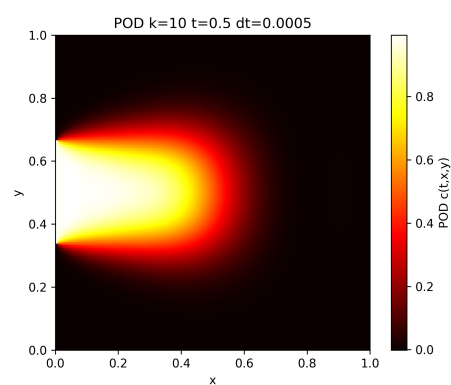


(d) POD k=5 t=1.5 dt=0.0005

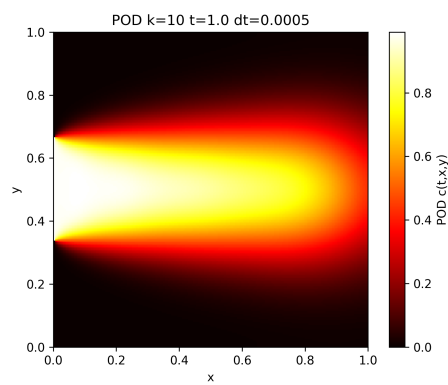
图 4: results of POD k = 5



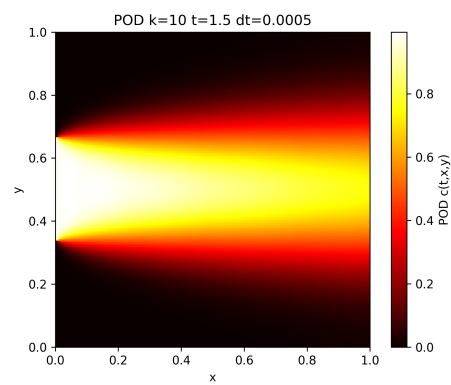
(a) POD k=10 t=0.2 dt=0.0005



(b) POD k=10 t=0.5 dt=0.0005

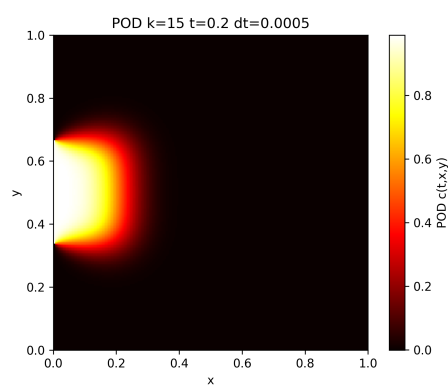


(c) POD k=10 t=1.0 dt=0.0005

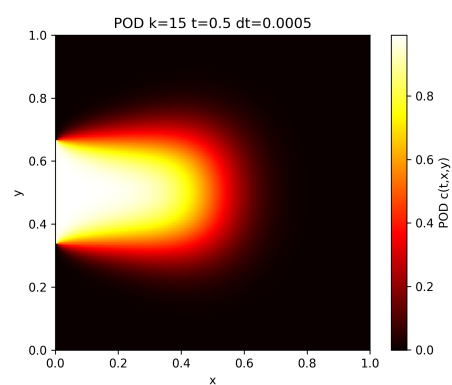


(d) POD k=10 t=1.5 dt=0.0005

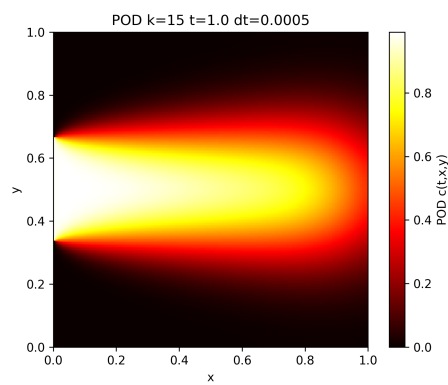
图 5: results of POD k = 10



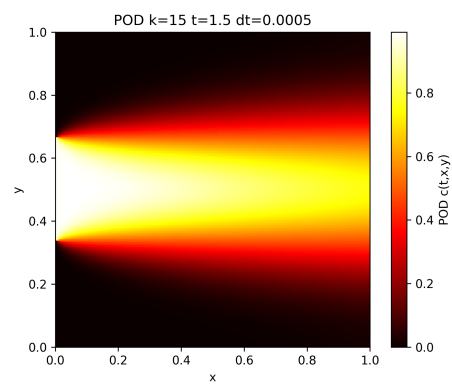
(a) POD k=15 t=0.2 dt=0.0005



(b) POD k=15 t=0.5 dt=0.0005



(c) POD k=15 t=1.0 dt=0.0005



(d) POD k=15 t=1.5 dt=0.0005

图 6: results of POD k = 15

4.1 计算方法

由问题 2 启发，做动力学建模 $\mathbf{c}(t + \Delta t) = K\mathbf{c}(t) + b$ ，即线性模型，进而有

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}(t + \Delta t) \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K & b \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}(t) \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8)$$

记对应动力学矩阵为 \bar{K} 。依然设定 $N_{snap} = 100$ ，对 $[0, T]$ 做等距划分，得到数据集，每个向量末尾分别添加元素 1，共 101 个向量。取 \bar{X} 为前 100 个向量， \bar{Y} 为后 100 个向量，以近似 $\bar{Y} = \bar{K}\bar{X}$ 。

对 \bar{X} 做 SVD，设秩为 r ，对 SVD 做满秩截断，Koopman 矩阵应为 $\bar{K} = YV\Sigma^{-1}U^*$ ，我们转而去求 $\tilde{K} = U^*YV\Sigma^{-1}$ 的特征对 $(\tilde{\lambda}_j, \tilde{w}_j, \tilde{v}_j)_{j=0}^{r-1}$ ，进而可以得到 \bar{K} 的特征对 $(\lambda_j, w_j, v_j)_{j=0}^{r-1}$ ，满足转换关系

$$\begin{cases} \lambda_j = \tilde{\lambda}_j \\ w_j = U\tilde{w}_j \\ v_j = YV\Sigma^{-1}\tilde{v}_j \end{cases} \quad (9)$$

将 W, V 做双正交归一化，即可以认为 $W^*V = I$ 。最后以 Koopman 模式计算 $\mathbf{c}(m)$ 。

4.2 Koopman 算子的谱与 Koopman 模式

所得到的 Koopman 算子的谱如图7所示。对应 Koopman 模式：

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{c}} = \begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ 1 \end{pmatrix} \\ \bar{\mathbf{c}}(m) = \sum_{j=0}^{r-1} \lambda_j^m v_j w_j^* \bar{\mathbf{c}}(0) \end{cases} \quad (10)$$

4.3 结果展示

计算结果展示如图8所示。

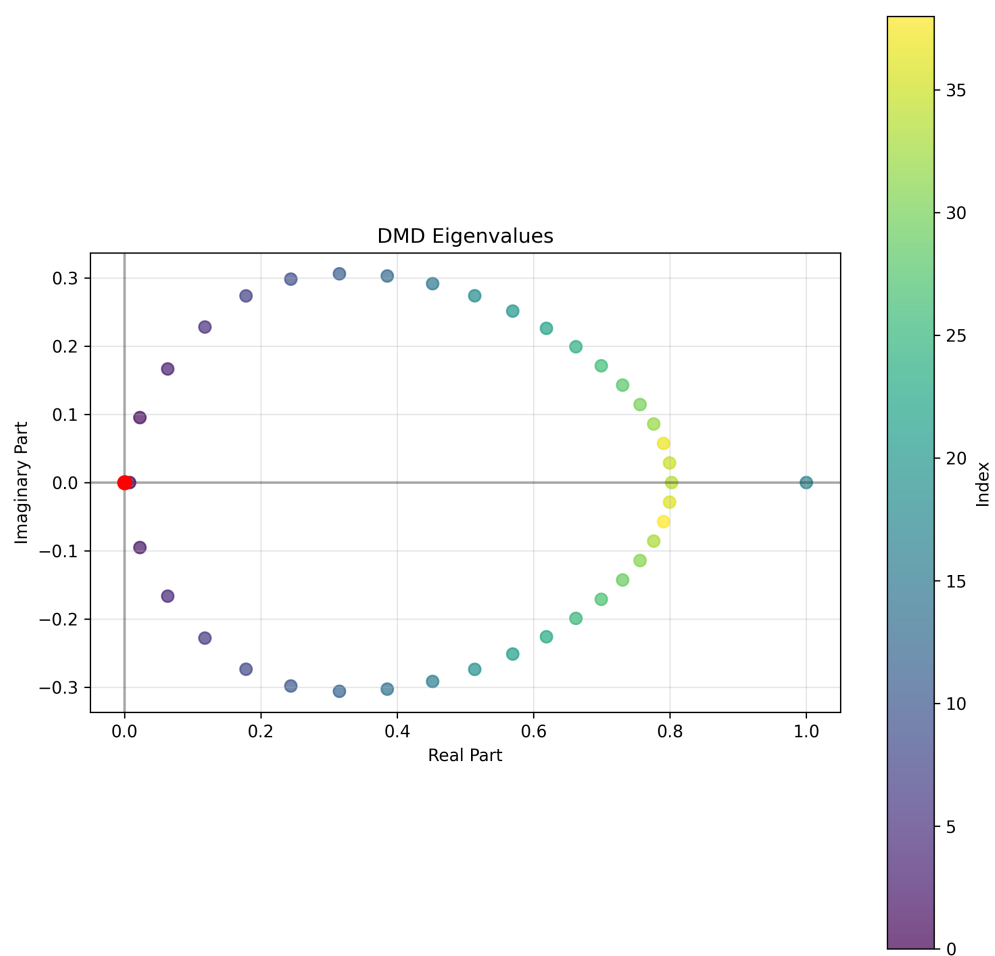
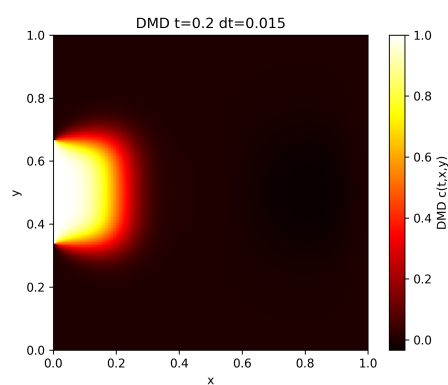
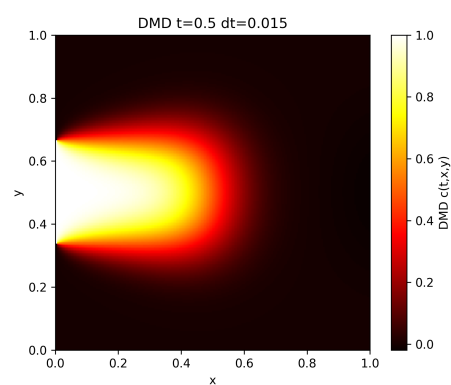


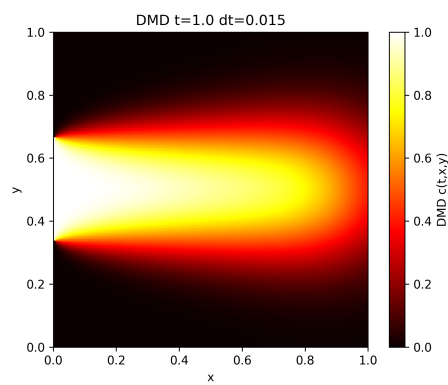
图 7: DMD Eigenvalues



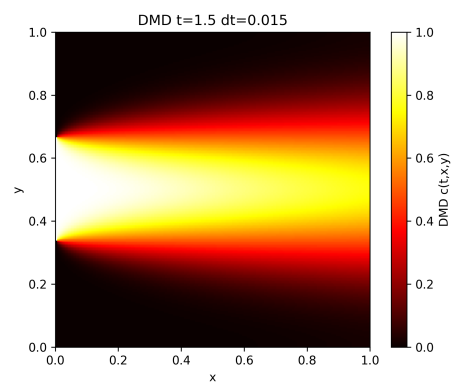
(a) DMD $t=0.2$ $dt=0.015$



(b) DMD $t=0.5$ $dt=0.015$



(c) DMD $t=1.0$ $dt=0.015$



(d) DMD $t=1.5$ $dt=0.015$

图 8: results of DMD $dt = 0.015$