

# Effiziente und gesicherte Modellreduktion für parametrisierte dynamische Systeme

Efficient and Certified Model Reduction for Parametrized Dynamical Systems

Bernard Haasdonk, Universität Stuttgart

**Zusammenfassung** Im vorliegenden Beitrag wird gezeigt, wie einige charakteristische Komponenten von Reduzierte-Basis-Verfahren auf die Ordnungsreduktion von parametrisierten linearen dynamischen Systemen übertragen werden können. Den Schlüssel für Effizienz des Reduktionsprozesses stellt eine Offline/Online-Zerlegung dar, welche unter Annahme einer affinen Parameterabhängigkeit der Systemkomponenten realisiert werden kann. Zusätzlich ist eine Absicherung der reduzierten Simulationsergebnisse durch garantierte, schnell zu berechnende und scharfe A-posteriori-Fehlerschranken möglich. Experimente zeigen die Anwendbarkeit der parametrischen Reduktionstechnik, die Zuverlässigkeit der Fehlerschätzer und die

erreichte Laufzeit-Beschleunigung. ▶▶▶ **Summary** In the current presentation, we show that some characteristic components of Reduced Basis Methods can be transferred to model reduction of parametrized linear dynamical systems. The key for efficiency of the reduced scheme is an offline/online decomposition, which is obtained in case of affine parameter-dependence of the system components. Additionally, certification of the reduced system solution is possible by guaranteed, rapidly computable and tight a-posteriori error bounds. Experiments demonstrate the applicability of the reduction scheme, the reliability of the error estimators and the runtime gain.

**Schlagwörter** Parametrisierte dynamische Systeme, Modellordnungsreduktion, Reduzierte-Basis-Methoden, A-posteriori-Fehleranalyse, Offline/Online-Dekomposition ▶▶▶ **Keywords** Parametrized dynamical systems, model order reduction, reduced basis methods, a-posteriori error estimation, offline/online decomposition

## 1 Einleitung

Reduzierte-Basis-Methoden (RB-Methoden) sind ein erfolgreicher Ansatz für Modellordnungsreduktion (MOR) von parametrisierten partiellen Differentialgleichungen. Dies sind partielle Differentialgleichungen, welche durch einen endlichdimensionalen Parametervektor charakterisiert sind. Solche Parameter können beispielsweise Geometrie, Materialeigenschaften, Randwerte, Anfangswerte oder Steuerungsgrößen beschreiben. Der Bedarf an parametrisierten reduzierten Modellen kann sich aus Vielfach-Anfragen, in denen zahlreiche Simulationen unter Parametervariation durchgeführt werden müssen,

ergeben. Dies ist im Fall von Parameterstudien, Parameteroptimierung, inverse Problemen etc. der Fall. Ebenso können Echtzeit-Anforderungen eine Motivation für beschleunigte Modelle mit geringer Dimension sein, z. B. zur Steuerung oder in interaktiven Simulationsumgebungen. Neben parametrisierten reduzierten Modellen ist ebenfalls eine rigorose parameterabhängige Quantifikation des Reduktionsfehlers notwendig. Diese Anforderungen werden durch RB-Methoden erfüllt. In den letzten Jahren wurden verschiedene Typen von stationären oder zeitabhängigen, linearen und nichtlinearen parametrisierten partiellen Differen-

tialgleichungen mit dieser Technik behandelt. Frühe Referenzen auf RB-Methoden für zeitabhängige Probleme sind [8; 15], welche in den letzten Jahren in weiteren Arbeiten verallgemeinert wurden [7; 9]. Insbesondere umfassen die Problemklassen, welche bislang erfolgreich mit RB-Methoden approximiert wurden, verschiedene Konvektions-Diffusions-, Burgers-, Stokes-, Navier-Stokes-, Helmholtz-, Boussinesq- oder Fokker-Planck-Gleichungen, siehe [8; 9; 11; 12; 15; 16; 18] und die dortigen weiterführenden Referenzen. Auf dem Gebiet der Modellordnungsreduktion von dynamischen Systemen sind diese Methoden noch nicht sehr etabliert, aber das Interesse an der Reduktion von parametrisierten Systemen nimmt zu. Die frühe Arbeit [2] betrachtet bereits die Lösung von parametrisierten Systemen durch Konkatenation von Projektionsbasen für spezielle Parameterwahlen. Parametrisierte Systeme werden weiter mit Interpolation oder Momentenabgleich behandelt [5; 17]. Polynomiell parametrisierte Systeme werden in [6] behandelt. Einige neuere Ansätze umfassen interpolatorische Verfahren mit Dünngittern [3] oder Superposition von lokal reduzierten Modellen [13].

Im vorliegenden Artikel fassen wir einige wesentliche Ergebnisse aus [10] zusammen und zeigen damit, dass charakteristische Komponenten von RB-Methoden auf die Reduktion von dynamischen Systemen übertragen werden können. Dies geschieht anhand linearer zeitvarianter oder zeitinvarianter Systeme mit Ausgabe-Schätzung. Eine sogenannte Offline/Online-Zerlegung ist der Schlüssel für effiziente Simulation. In der Offline-Phase werden die reduzierte Basis und parameter-unabhängige Hilfsgrößen vorberechnet. In der Online-Phase erlauben diese Vorbereitungen eine schnelle Assemblierung der parameterabhängigen reduzierten Systemkomponenten und eine Online-Simulation für variierende Parameter mit einer Berechnungskomplexität, welche unabhängig von der ursprünglichen Modellordnung ist. Die möglicherweise teure Offline-Phase zahlt sich im Fall eines Szenarios von Vielfach-Anfragen aus, in dem eine genügend hohe Anzahl von Einzelsimulationen mit wechselnden Parametern erwartet wird. Zusätzlich zu effektiven reduzierten Simulationsverfahren ist Fehlerkontrolle durch A-posteriori-Fehlerschätzer möglich. Diese basieren auf Residualanalyse, können ebenfalls effektiv in eine Offline- und Online-Phase zerlegt werden und ergeben dadurch schnelle und rigorose Fehler-schranken. Im Gegensatz zu A-priori-Fehlerschranken im Frequenzraum bei klassischen MOR-Verfahren ergeben diese A-posteriori-Fehlerschätzer Schranken für den Zustandsvektor und die Ausgabe punktweise in der Zeit.

Im folgenden Abschnitt führen wir das reduzierte Simulationsverfahren für parametrisierte Probleme ein. Abschnitt 3 widmet sich der algorithmischen Zerlegung in eine Offline- und Online-Phase. Für die vorliegende Formulierung wird in Abschnitt 4 A-posteriori-Fehleranalyse demonstriert, einschließlich einer vollständigen Offline/Online-Zerlegung. Experimente in

Abschnitt 5 belegen die Anwendbarkeit der Modellreduktionstechnik, die Qualität der A-posteriori-Fehlerschätzer und den Laufzeitgewinn durch die reduzierten Modelle. Wir schließen in Abschnitt 6 mit einigen Schlussbemerkungen.

## 2 Parametrische Modellordnungsreduktion

Wir betrachten die folgende Form eines parametrisierten zeitvarianten dynamischen Systems für eine Zustandsvariable  $x(t) \in \mathbb{R}^n$ , Eingabe  $u(t) \in \mathbb{R}^m$  und Ausgabe  $y(t) \in \mathbb{R}^p$  für  $t \in [0, \infty)$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}x(t) &= \mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu})x(t) + \mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu})u(t) \\ y(t) &= \mathbf{C}(t, \boldsymbol{\mu})x(t) + \mathbf{D}(t, \boldsymbol{\mu})u(t). \end{aligned}$$

Die Systemmatrizen  $\mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $\mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu}) \in \mathbb{R}^{n \times m}$ ,  $\mathbf{C}(t, \boldsymbol{\mu}) \in \mathbb{R}^{p \times n}$ ,  $\mathbf{D}(t, \boldsymbol{\mu}) \in \mathbb{R}^{p \times m}$  hängen von einem Parameter  $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P} \subset \mathbb{R}^d$  aus einer beschränkten Parametermenge  $\mathcal{P}$  ab. Der Parameter  $\boldsymbol{\mu}$  wird während einer einzelnen Simulation des dynamischen Systems als konstant angenommen. Gelegentlich werden die Lösung und die Ausgabe mit  $x(t, \boldsymbol{\mu})$ ,  $y(t, \boldsymbol{\mu})$  bezeichnet, um ihre Parameterabhängigkeit zu betonen. Zu einer gegebenen Projektionsmatrix  $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times k}$  mit reduzierter Ordnung  $k \ll n$  und biorthogonalem  $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ , i. e.  $\mathbf{W}^T \mathbf{V} = \mathbf{I}_{k \times k}$ , lautet das durch Projektion gewonnene reduzierte System herkömmlicherweise [1]

$$\frac{d}{dt}\hat{x}(t) = \hat{\mathbf{A}}(t, \boldsymbol{\mu})\hat{x}(t) + \hat{\mathbf{B}}(t, \boldsymbol{\mu})u(t) \quad (1)$$

$$\hat{y}(t) = \hat{\mathbf{C}}(t, \boldsymbol{\mu})\hat{x}(t) + \hat{\mathbf{D}}(t, \boldsymbol{\mu})u(t)$$

mit reduzierten Systemmatrizen

$$\hat{\mathbf{A}}(t, \boldsymbol{\mu}) := \mathbf{W}^T \mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu}) \mathbf{V}, \quad \hat{\mathbf{B}}(t, \boldsymbol{\mu}) := \mathbf{W}^T \mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu})$$

$$\hat{\mathbf{C}}(t, \boldsymbol{\mu}) := \mathbf{C}(t, \boldsymbol{\mu}) \mathbf{V}, \quad \hat{\mathbf{D}}(t, \boldsymbol{\mu}) := \mathbf{D}(t, \boldsymbol{\mu})$$

und Anfangsbedingung

$$\hat{x}(0) = \hat{x}_0 := \mathbf{W}^T x(0). \quad (2)$$

In RB-Methoden wird die Projektionsbasis  $\mathbf{V}$  in einer simulationsgestützten Weise konstruiert, sodass  $\text{colspan} \mathbf{V} \subset \text{span}\{x(t_i, \boldsymbol{\mu}_i)\}_{i \in I}$ . Hier bezeichnen  $t_i$ ,  $\boldsymbol{\mu}_i$  geeignet ausgewählte Zeitpunkte und Parameter und  $x(t_i, \boldsymbol{\mu}_i)$  sind sogenannte *Snapshots* der Lösung. Die Basismatrix  $\mathbf{V}$  ist häufig orthonormalisiert bezüglich eines problemspezifischen Skalarproduktes, sodass das reduzierte System numerisch stabiler ist. Für Details zu Basisgenerierung und Snapshot-Wahl in RB-Methoden, verweisen wir auf [8; 9]. Wir betonen, dass im Folgenden keinerlei Annahmen an die Basis  $\mathbf{V}$  gestellt werden, außer Biorthogonalität von  $\mathbf{V}$  und  $\mathbf{W}$ . Die Qualität einer Basis lässt sich einheitlich durch die erhaltenen A-posteriori-Fehlerschätzer beurteilen. Daher sind die Methode und die Ergebnisse gleichwohl gültig und anwendbar für Krylov-Unterraum-Basen, Basen aus modaler Reduktion, balanciertem Abschneiden oder POD. Indem wir

im Weiteren die Parameterabhängigkeit ignorieren, sind die Fehlerschätzer direkt auf alle Standardtechniken zur nichtparametrischen linearen Modellreduktion anwendbar.

### 3 Offline/Online-Zerlegung

Zur effizienten Berechnung stellen wir einige Bedingungen an die Matrizen und Anfangsdaten. Wir fordern, dass die Systemmatrizen in eine gewichtete Summe aus parameterunabhängigen Komponenten mit parameterabhängigen Koeffizienten zerlegt werden kann. Diese Idee der linearen Überlagerung von Systemmatrizen ist auch in [2] angenommen worden. Hier führen wir eine verfeinerte Argumentation, welche in einem Reduktionsverfahren resultiert, dessen Komplexität vollkommen unabhängig von der Dimension  $n$  ist. Wir nehmen präziser an, dass eine separable Parameterabhängigkeit der Systemmatrizen

$$\mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu}) = \sum_{q=1}^{Q_A} \sigma_A^q(t, \boldsymbol{\mu}) \mathbf{A}^q, \quad (3)$$

vorliegt mit skalaren parameter- und zeitabhängigen Koeffizientenfunktionen  $\sigma_A^q$  und parameter- und zeitunabhängigen Matrizen  $\mathbf{A}^q$  für eine geringe Anzahl  $Q_A$  von Komponenten. Wir bemerken, dass die hochgestellten Indizes  $q$  keine Potenz bezeichnen, sondern einen reinen Zählindex. Eine entsprechende separable Zerlegung wird für die Matrizen  $\mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu})$  und  $\mathbf{C}(t, \boldsymbol{\mu})$  angenommen. Wir nehmen ebenso an, dass die Anfangsdaten-Variationen des Systems nicht beliebig, sondern auch durch Parametervariationen beschrieben werden als  $x(0) = x_0(\boldsymbol{\mu})$  mit

$$x_0(\boldsymbol{\mu}) = \sum_{q=1}^{Q_{x_0}} \sigma_{x_0}^q(\boldsymbol{\mu}) x_0^q. \quad (4)$$

Unter Verwendung der angenommenen Parameterabhängigkeiten kann die reduzierte Simulation schnell ausgeführt werden in einer Komplexität, welche vollkommen unabhängig von  $n$  ist. Dies wird durch eine Offline/Online-Zerlegung erreicht, ähnlich zum stationären Fall [16].

In der *Offline-Phase* werden die parameterunabhängigen Größen des Reduktionsverfahrens berechnet. Diese Phase darf beliebig zeitaufwendig sein, da sie sich in Anbetracht genügend vieler Online-Simulationen auszahlen wird. Zunächst werden die biorthogonalen Projektionsmatrizen  $\mathbf{V}$  und  $\mathbf{W}$  durch ein beliebiges Verfahren generiert. Anschließend werden die folgenden parameterunabhängigen Größen berechnet:

$$\hat{\mathbf{A}}^q := \mathbf{W}^T \mathbf{A}^q \mathbf{V}, \quad \hat{\mathbf{B}}^q := \mathbf{W}^T \mathbf{B}^q, \quad (5)$$

$$\hat{\mathbf{C}}^q := \mathbf{A}^q \mathbf{V}, \quad \hat{x}_0^q := \mathbf{W}^T x_0^q. \quad (6)$$

In der *Online-Phase* ist der Parameter  $\boldsymbol{\mu}$  bekannt, und die reduzierten Systemmatrizen werden in einer Komplexität

unabhängig von  $n$  assembliert. Insbesondere erhalten wir aus (3)–(4) und (5)–(6):

$$\hat{\mathbf{A}}(t, \boldsymbol{\mu}) = \sum_{q=1}^{Q_A} \sigma_A^q(t, \boldsymbol{\mu}) \hat{\mathbf{A}}^q, \quad \hat{x}_0(\boldsymbol{\mu}) = \sum_{q=1}^{Q_{x_0}} \sigma_{x_0}^q(\boldsymbol{\mu}) \hat{x}_0^q,$$

und entsprechend für  $\mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu})$ ,  $\mathbf{C}(t, \boldsymbol{\mu})$ . Die separable Parameterabhängigkeit der Komponenten ist keine sehr restriktive Annahme, da einige Möglichkeiten existieren, eine solche exakte oder approximative Zerlegung zu erhalten. Falls das dynamische Systeme aus einer Diskretisierung eines physikalischen Problems resultiert, können die physikalischen Parameter häufig durch die Diskretisierung hindurch verfolgt werden und ergeben somit explizit eine solche gewünschte Zerlegung. Dies wurde z. B. für Finite-Volumen (FV) Verfahren in [9] realisiert. Dies erfordert offensichtlich volle Kontrolle über die Diskretisierung, was durch eigene Entwicklung von Diskretisierungs-Code realisiert werden kann, anstatt kommerzielle oder andere Black-box-Diskretisierungspakete zu verwenden. Falls gewisses algebraisches Modellwissen über die Parameterabhängigkeit vorhanden ist, z. B. die Anzahl der Komponenten, und die Koeffizientenfunktionen, können die unbekannt Matrixkomponenten rekonstruiert werden durch Aufstellen von entsprechenden Matrixgleichungen von Beispielmatrizen und Lösen nach den Komponenten. Falls die Matrizen als explizite Funktionen  $\mathbf{A}(\boldsymbol{\mu}, t)$  gegeben sind, oder aus einem Black-box-Diskretisierungs-Software-Paket zur Verfügung stehen, können Approximationsmethoden verwendet werden, um Approximationen durch endliche Summen zu erhalten, z. B. polynomielle oder empirische Interpolation.

### 4 A-posteriori-Fehlerschätzer

Ein weiterer attraktiver Aspekt von RB-Methoden ist die rigorose Fehleranalyse. Insbesondere können A-posteriori-Fehlerschätzer hergeleitet werden. Diese ermöglichen es, die Qualität des reduzierten Modells während der reduzierten Simulation zu bestimmen. Insbesondere ergeben diese Fehlerschätzer eine theoretische Fundierung für empirische Basisgenerierungsalgorithmen wie POD-Greedy [9] oder andere Snapshot-basierte Verfahren. Da die Fehlerschätzer nicht auf eine bestimmte Wahl der Basis eingeschränkt sind, sind die ebenso anwendbar auf nichtparametrische Probleme und herkömmliche Reduktionsverfahren wie modale Reduktion, balanciertes Abschneiden, Momentenabgleich etc. Die Fehleranalyse ist residuenbasiert, daher definieren wir den Fehler und das Residuum durch

$$e(t, \boldsymbol{\mu}) := x(t, \boldsymbol{\mu}) - \mathbf{V} \hat{x}(t, \boldsymbol{\mu}),$$

$$R(t, \boldsymbol{\mu}) := \mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu}) \mathbf{V} \hat{x}(t) + \mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu}) u(t) - \mathbf{V} \frac{d}{dt} \hat{x}(t).$$

Dieses Residuum hat die bemerkenswerte Eigenschaft, dass es Null ergibt, falls sich die exakte Lösung  $x(t)$

im Span der Spalten von  $\mathbf{V}$  bewegt, d. h. das reduzierte System reproduziert die detaillierte Lösung ohne Approximationsfehler.

Um A-posteriori-Fehlerschätzer herzuleiten, müssen geeignete Normen gewählt werden. Wir nehmen an, dass eine symmetrische, positiv definite Matrix  $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  gegeben ist, und bezeichnen  $\langle x, x' \rangle_{\mathbf{G}} := x^T \mathbf{G} x'$  als das zugehörige Skalarprodukt. Dies induziert eine Vektornorm  $\|x\|_{\mathbf{G}} := \sqrt{\langle x, x \rangle_{\mathbf{G}}}$  auf  $\mathbb{R}^n$  und eine Matrixnorm  $\|\mathbf{A}\|_{\mathbf{G}} := \sup_{\|x\|_{\mathbf{G}}=1} \|\mathbf{A}x\|_{\mathbf{G}}$  für  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Für den Ausgabevektor verwenden wir die einfache 2-Norm punktweise in der Zeit, und definieren daher die induzierte Matrixnorm  $\|\mathbf{C}\|_{\mathbf{G}} := \sup_{\|x\|_{\mathbf{G}}=1} \|\mathbf{C}x\|$  für  $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{p \times n}$ . Die matrix  $\mathbf{G}$  kann im Folgenden als  $\mathbf{G} = \mathbf{I}_{n \times n}$  gewählt werden, was die 2-norm  $\|\cdot\|$  für Vektoren und Matrizen reproduziert. Es sind jedoch andere problemabhängige Wahlen für  $\mathbf{G}$  möglich, welche die Konstanten in der untenstehenden Fehlerschätzung verbessern können. Bei dynamischen Systemen, die durch Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen erhalten wurden, ist die Matrix  $\mathbf{G}$  üblicherweise die Massenmatrix der Finite-Elemente- (FE) oder FV-Basis. Hiermit ist  $\|e\|_{\mathbf{G}}$  die Norm des Fehlers, gemessen in dem analytischen FE/FV-Funktionsraum. Mit diesen Notationen geben wir den folgenden A-posteriori-Fehlerschätzer für die Zustandsvariable und die Ausgabe an. Der Einfachheit halber beschränken wir uns auf ein zeitinvariantes  $\mathbf{A}$ , die übrigen Systemmatrizen sind jedoch beliebig zeitvariant.

**Satz 1 (A-posteriori-Fehlerschätzer).** Sei  $\mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{A}(\boldsymbol{\mu})$  zeitinvariant, und besitze für alle  $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}$  nur stabile Pole. Es sei eine Konstante  $C_1(\boldsymbol{\mu})$  bekannt mit

$$C_1(\boldsymbol{\mu}) \geq \sup_t \|\exp(\mathbf{A}(\boldsymbol{\mu})t)\|_{\mathbf{G}}. \quad (7)$$

Dann gilt für alle  $t \in [0, \infty)$ ,  $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}$  für den Zustandsvektor

$$\|x(t, \boldsymbol{\mu}) - \mathbf{V}\hat{x}(t, \boldsymbol{\mu})\|_{\mathbf{G}} \leq \Delta_x(t, \boldsymbol{\mu}) \quad (8)$$

mit Schranke

$$\Delta_x(t, \boldsymbol{\mu}) := C_1(\boldsymbol{\mu}) \left( \|e(0, \boldsymbol{\mu})\|_{\mathbf{G}} + \int_0^t \|\mathbf{R}(\tau, \boldsymbol{\mu})\|_{\mathbf{G}} d\tau \right).$$

Falls zusätzlich eine obere Schranke  $C_2(\boldsymbol{\mu}) \geq \sup_t \|\mathbf{C}(t, \boldsymbol{\mu})\|_{\mathbf{G}}$ , vorliegt, gilt für alle  $t \in [0, \infty)$ ,  $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}$  für die Ausgabe

$$\|y(t, \boldsymbol{\mu}) - \hat{y}(t, \boldsymbol{\mu})\| \leq \Delta_y(t, \boldsymbol{\mu}) := C_2(\boldsymbol{\mu}) \Delta_x(t, \boldsymbol{\mu}).$$

Für den Beweis und eine erweiterte Formulierung mit Hilfe des adjungierten Problems verweisen wir auf den ausführlichen Artikel [10].

Wir bemerken, dass ähnliche Aussagen für instabile Systeme möglich sind, falls nur endliche Zeiten  $t \in [0, T]$  betrachtet werden. Ähnlich können Systeme mit zeitvarianter Matrix  $\mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu})$  behandelt werden durch geeignete Modifikation der Konstante  $C_1$  und/oder zusätzlichen Termen in der Fehlerschranke.

Das obige Ergebnis ist praktisch relevant, da eine volle Offline/Online-Zerlegung der Fehlerschranke möglich ist, was eine schnelle und rigorose Fehleranalyse während der reduzierten Simulation ermöglicht. Dies basiert auf der Tatsache, dass die Residuennormen mit Hilfe der Definition exakt bestimmt werden können. Wir erhalten damit die Umformulierung (Parameter- und Zeitabhängigkeit in der Notation unterdrückt):

$$\begin{aligned} \|R\|_{\mathbf{G}}^2 &= R^T \mathbf{G} R \\ &= \dot{x}^T \mathbf{M}_1 \dot{x} + u^T \mathbf{M}_2 u + \left( \frac{d}{dt} \dot{x} \right)^T \mathbf{M}_3 \left( \frac{d}{dt} \dot{x} \right) + \\ &\quad 2u^T \mathbf{M}_4 \dot{x} - 2 \left( \frac{d}{dt} \dot{x} \right)^T \mathbf{M}_5 \dot{x} - 2 \left( \frac{d}{dt} \dot{x} \right)^T \mathbf{M}_6 u, \end{aligned} \quad (9)$$

mit Hilfsmatrizen

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1(t, \boldsymbol{\mu}) &:= \mathbf{V}^T \mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{G} \mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu}) \mathbf{V}, \\ \mathbf{M}_2(t, \boldsymbol{\mu}) &:= \mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{G} \mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu}), \\ \mathbf{M}_3 &:= \mathbf{V}^T \mathbf{G} \mathbf{V}, \\ \mathbf{M}_4(t, \boldsymbol{\mu}) &:= \mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{G} \mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu}) \mathbf{V}, \\ \mathbf{M}_5(t, \boldsymbol{\mu}) &:= \mathbf{V}^T \mathbf{G} \mathbf{A}(t, \boldsymbol{\mu}) \mathbf{V}, \\ \mathbf{M}_6(t, \boldsymbol{\mu}) &:= \mathbf{V}^T \mathbf{G} \mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu}). \end{aligned} \quad (10)$$

Die Offline/Online-Zerlegung ist dann offensichtlich: In der Offline-Phase, können wir die zeit- und parameterunabhängigen Matrixkomponenten berechnen, d. h.

$$\mathbf{M}_1^{q,q'} := \mathbf{V}^T (\mathbf{A}^q)^T \mathbf{G} \mathbf{A}^{q'} \mathbf{V}$$

für  $q, q' = 1, \dots, Q_A$  und ähnlich für  $\mathbf{M}_2^{q,q'}$ ,  $\mathbf{M}_3$  (nicht parameterabhängig),  $\mathbf{M}_4^{q,q'}$ ,  $\mathbf{M}_5^q$  und  $\mathbf{M}_6^q$ . In der Online-Phase werden diese kleinen Matrizen kombiniert und die Matrizen aus (10)–(11) assembliert, d. h.

$$\mathbf{M}_1(t, \boldsymbol{\mu}) := \sum_{q,q'}^{Q_A} \sigma_A^q(t, \boldsymbol{\mu}) \sigma_A^{q'}(t, \boldsymbol{\mu}) \mathbf{M}_1^{q,q'}$$

und analog für  $\mathbf{M}_2, \mathbf{M}_4, \mathbf{M}_5, \mathbf{M}_6$ . Hier ist festzuhalten, dass  $\mathbf{M}_3$  bereits aus der Offline-Phase zur Verfügung steht. Die Größen  $\hat{x}(t)$ ,  $\frac{d}{dt} \hat{x}(t)$  und  $u(t)$  stehen während der reduzierten Simulation zur Verfügung, daher kann die quadrierte Residuennorm online berechnet werden. Der Anfangsfehler in der obigen Schranke  $\Delta_x(t, \boldsymbol{\mu})$  kann leicht zu 0 gemacht werden, indem gewährleistet wird, dass die Komponenten der Anfangsdaten in dem reduzierten Raum liegen, d. h.  $x_0^q \in \text{colspan} \mathbf{V}$ . Für nichtverschwindenden Anfangsfehler und allgemeine Basis  $\mathbf{V}$  wird die Norm des Anfangsfehlers für den Fehlerschätzer benötigt, was wiederum durch eine Offline/Online-Zerlegung berechnet werden kann [10]. Zur Berechnung der Fehlerschranken, kann das Integral häufig nicht analytisch bestimmt werden, sondern muss durch eine Quadraturformel approximiert werden. Weiter ist das reduzierte System kontinuierlich in

der Zeit, was erst nach einer Zeitdiskretisierung zu einem berechenbaren Simulationsverfahren führt. Diese Diskretisierungsschritte führen zusätzliche kleine (aber kontrollierbare) numerische Fehler in die Analysis ein. Es können auch A-posteriori-Fehlerschätzer hergeleitet werden, welche auf spezielle Zeitdiskretisierungsverfahren angepasst sind, und diese Diskretisierungsfehler berücksichtigen [8; 9; 15].

## 5 Experimente

Als parametrisiertes dynamisches System betrachten wir eine Diskretisierung eines (dimensionslosen) Konvektionsproblems auf einem rechteckigen Gebiet  $\Omega = [0, 2] \times [0, 1]$  mit Endzeit  $T = 1$ . Die Anfangs- und Randdaten bestehen aus einer nichtnegativen radialen Funktion mit Zentrum auf der oberen Kante und gegebenem Maximalwert  $\mu_0 \in [0, 1]$ , in der Zeit linear abfallend und verschwindend für  $t = T = 1$ . Das Geschwindigkeitsfeld wurde als gewichtete Überlagerung zweier zeitinvarianter divergenzfreier parabolischer Vektorfelder in  $x_1$ - und  $x_2$ -Richtung gewählt. Die freien Gewichtungsparemeter sind  $\mu_1, \mu_2 \in [0, 1]$ , welche es erlauben, einen Nullfluss, reine  $x_1$ - und  $x_2$ -Flüsse und ihre Überlagerungen durch geeignete Parameterwahl zu modellieren. Die Gesamtparametrisierung des Modells ist gegeben durch  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_0, \mu_1, \mu_2)^T \in \mathcal{P} := [0, 1]^3$ . Bild 1 illustriert den Anfangs- und Endzustand einer Lösungstrajektorie für  $\boldsymbol{\mu} = (1, 1, 1)^T$ . Als Ausgabe wählen wir den Konzentrationsmittelwert in dem unteren rechten Viertel  $\Omega_o = [1, 2] \times [0, 0,5] \subset \Omega$ . Die Ortsdiskretisierung besteht aus einer FV-Diskretisierung erster Ordnung auf einem regulären Dreiecksgitter aus 65.536 Elementen.

Das resultierende dynamische System hat die Dimension  $n = 65.536$ , eine Eingabe  $m = 1$  und eine Ausgabe  $p = 1$ . Die Parameter- und Zeitvariation der Randwerte wird erreicht durch Festhalten der Eingabe  $u(t) \equiv 1$  und Variieren der System-Matrizen. Die Matrix  $\mathbf{A}(\boldsymbol{\mu})$  ist parameterabhängig mit  $Q_A = 2$  Komponenten und zeitinvariant. Die Matrix  $\mathbf{B}(t, \boldsymbol{\mu})$  ist sowohl parameter- als auch zeitabhängig mit  $Q_B = 2$  Komponenten. Die Ausgabematrix  $\mathbf{C}$  ist konstant und  $\mathbf{D} = 0$ . Die Anfangsdaten bestehen aus  $Q_{x_0} = 1$  Komponente und die Matrix  $\mathbf{G}$  ist gewählt als die FV-Massenmatrix der Diskretisierung, welche diagonal ist. Für die Zeitdiskretisierung verwenden wir eine Euler-vorwärts-Diskretisierung erster Ordnung mit 2048 Zeitschritten sowohl für das detaillierte als auch das reduzierte System. Wir bemerken, dass

das Problem auch durch eine zeitinvariante Eingangsmatrix und einem zeitvarianten Eingangssignal modelliert werden könnte. Wir wollen jedoch mit obiger Formulierung die Anwendbarkeit auf zeitvariante Probleme betonen.

Wir konstruieren eine einfache Basis, indem wir die Lösungs-Trajektorien für  $\boldsymbol{\mu} = (0, 0, 0)^T$  und  $\boldsymbol{\mu} = (1, 1, 1)^T$  berechnen, 129 Snapshots äquidistant in der Zeit für jede Trajektorie speichern, und eine POD anwenden, welche in 109 Basisvektoren als Spalten von  $\mathbf{V}$  resultiert. Da eine POD-Basis orthonormal bezüglich  $\langle \cdot, \cdot \rangle_G$  ist, können wir  $\mathbf{W} = \mathbf{G}\mathbf{V}$  wählen und garantieren hiermit die Biorthogonalität. Von dieser Basiswahl erwarten wir keine uniforme Approximation in dem globalen Parameterraum, sondern nur eine gute Approximation in Umgebungen der Trainings-Parameter. Es gibt einige Möglichkeiten für bessere globale Basisgenerierung von parametrisierten Problemen, z. B. durch Optimierung [4; 19], oder akkumulative Greedy-Verfahren [8] kombiniert mit POD-Ansätzen [9] und Adaptivität. Der Einfachheit halber verwenden wir diesen lokalen trajektorienbasierten Ansatz, um die Unabhängigkeit der Methodik von der Basiswahl zu betonen.

Die typischen Ergebnisse der Ausgabeschätzung sind für  $\boldsymbol{\mu} = (1, 1, 1)^T$  und variierender reduzierter Dimension  $k = 20, 30, 40$  in Bild 2 dargestellt. Jedes Diagramm enthält die exakte und reduzierte Ausgabe, welche nicht unterscheidbar sind aufgrund der offensichtlichen Präzision des reduzierten Modells. Zusätzlich sind die gesicherten oberen und unteren Schranken  $\hat{y}(t, \boldsymbol{\mu}) \pm \Delta_y(t, \boldsymbol{\mu})$  dargestellt. Die Entwicklung der Ausgabe spiegelt die zugrundeliegende Physik wider: Es dauert eine gewisse Zeit, bis der Konzentrations-Schweif den Zielbereich  $\Omega_o$  erreicht (Ausgabe 0 zu frühen Zeiten). Anschließend nimmt die Konzentration im Ausgabebereich zu bis relevante Anteile das Gebiet wieder verlassen haben. Offensichtlich ist in allen Fällen die exakte Ausgabe innerhalb der Fehlerschranken, was die theoretische Aussage der *gesicherten* A-posteriori-Schranken belegt. Wie durch die Integralformel für  $\Delta_x(t, \boldsymbol{\mu})$  zu erwarten ist, wächst die Fehlerschranke in der Zeit monoton an. Dies beschränkt die Aussagekraft der Schätzer auf endliche Zeitintervalle. Langzeit oder asymptotische Aussagen im Zeitbereich können hiermit nicht erhalten werden. Durch Vergleich der Diagramme sieht man, dass die Schranken mit sinkender reduzierter Modelldimension an Schärfe verlieren. Indem man das linke Diagramm extrapoliert,

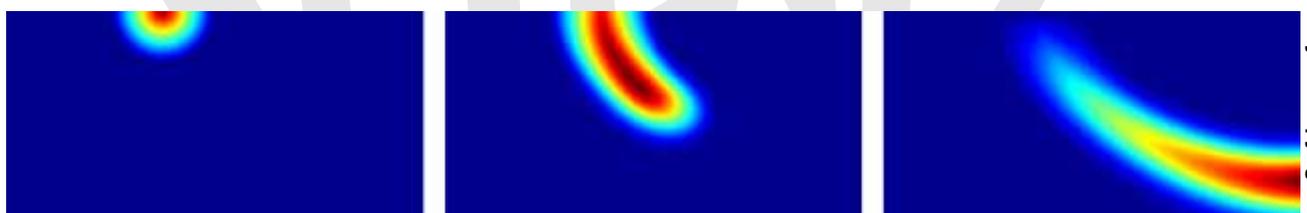
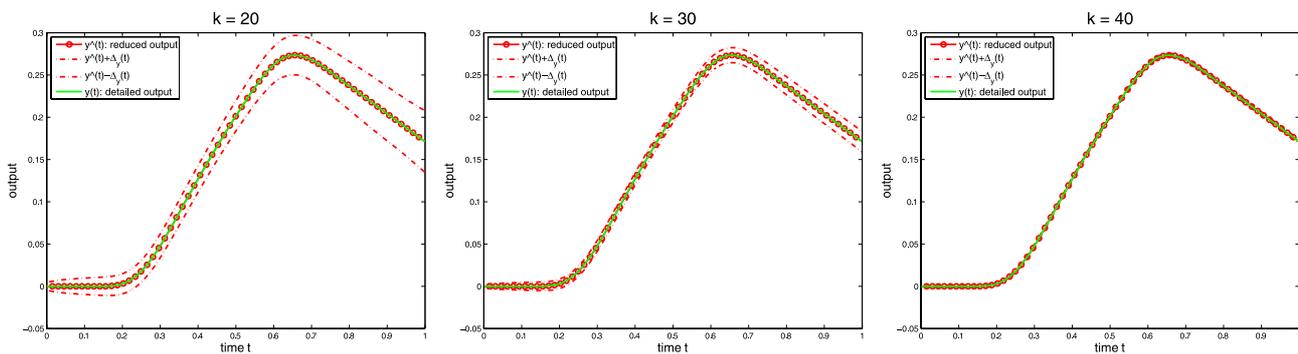


Bild 1 Darstellung der Lösungsvariation für  $\boldsymbol{\mu} = (1, 1, 1)^T$  zu Zeiten  $t = 0, 0, 0,5, 1,0$ .



**Bild 2** Ausgabeschätzung in der Zeit für  $\mu = (1, 1, 1)^T$ : reduzierte Ausgabe mit garantierten Fehlerschranken und exakter Lösung. Von links nach rechts verwenden wir Modelldimension  $k = 20, 30, 40$ .

existiert eine kritische untere Dimension  $k$ , an dem sich die Fehlerschranken in der selben Größenordnung wie die Ausgabe bewegen. In diesen Fällen ist die Rigorosität der Schätzer offensichtlich ohne praktische Relevanz. Andererseits können die Fehlerschranken für gut approximierende reduzierte Modelle tatsächlich sehr klein sein, wie die rechten Diagramme belegen. Idealerweise können die Fehlerintervalle sogar 0 ergeben, falls das reduzierte Modell exakt ist. Das heißt, exakte Approximation kann während der reduzierten Simulation verifiziert und festgestellt werden in einer Komplexität unabhängig von  $n$ .

Nachdem wir mit obigen Experimenten die Absicherung der reduzierten Simulationsergebnisse durch garantierte Fehlerschranken illustriert haben, kommen wir nun zur Demonstration der Effizienz des reduzierten Simulationsverfahrens bezüglich Rechenzeit. Hierfür sind die Laufzeit einer einzelnen detaillierten Simulation und der Online-phase von reduzierten Simulation mit und ohne Fehlerschätzung und variierender reduzierter Dimension  $k$  von Interesse. Tabelle 1 fasst diese Ergebnisse gemittelt über 10 Zeitmessungen zusammen, welche auf einem Standard Notebook (Intel Centrino vPro Core2 Duo, 2,53 GHz, 1,93 GB RAM) erhalten wurden.

Als Vorüberlegung ist zunächst zu bemerken, dass die Reduktionsfaktoren von 600–3000 in der Modelldimension nicht in dieser Ausprägung in der Laufzeit wiederzufinden sein werden, da die detaillierten Modelle durch große, aber dünn besetzte Systemmatrizen

gegeben sind, die reduzierten Systeme jedoch durch kleine, aber voll besetzten Matrizen charakterisiert sind. Trotzdem sehen wir deutlich, wie die reduzierten Modelle immer noch eine Beschleunigung um den Faktor 14–34 realisieren. Dies ist sehr bemerkenswert, da das Zeitdiskretisierungsverfahren noch sehr einfach ist. Die explizite Vorwärtsdifferenzen des detaillierten Systems hat Komplexität  $O(n^\alpha)$  für  $\alpha = 1$  in jedem Zeitschritt, welche durch die einzelne Multiplikation einer dünn besetzten Matrix und dem Zustandsvektor dominiert wird. Momentan können wir also sogar diese einfache Matrix-Vektor-Multiplikationen mit dem reduzierten System beschleunigen. Daher erwarten wir noch höhere Beschleunigungswerte, falls wir implizite Diskretisierungsverfahren verwenden, welche typischerweise mit  $\alpha \in [1, 3]$  skalieren. Weiter sehen wir, dass die Fehlerschätzung die Online-Laufzeit etwa verdoppelt, was verständlich ist in Anbetracht der zusätzlich benötigten Größen aus Abschnitt 4, welche assembliert und integriert werden müssen. Insgesamt ist die Laufzeitabhängigkeit von der reduzierten Modelldimension  $k$  nicht so ausgeprägt, wie man erwarten würde. Stattdessen indizieren die Laufzeit-Messungen einen dominierenden dimensionsunabhängigen Laufzeitanteil. Im vorliegenden Fall sind dies die Auswertung der Online-Koeffizienten des Modells und die Linearkombinations-Schleifen für das Zusammenfügen der Systemkomponenten, welche für jede der 2048 Zeitschritte durchgeführt werden. Die Laufzeiten sind typisch für allgemeine zeitvariante Systeme. Da einige Systemkomponenten im vorliegenden Anwendungsbeispiel jedoch zeitinvariant sind, bestünde hier problemspezifisch eine Beschleunigungsmöglichkeit, indem die Assemblierung der entsprechenden Matrizen vollständig in der Offline-Phase erfolgt.

**Tabelle 1** Laufzeitvergleich des detaillierten und reduzierten Verfahrens mit variierender Dimension  $k$ , mit und ohne Fehlerschätzung, Ergebnisse gemittelt über 10 Läufe.

Simulation	Dimension	Laufzeit [s]	
		mit $\Delta_y(\mu)$	ohne $\Delta_y(\mu)$
detailliert	$n = 65.536$	–	37,6
reduziert	$k = 100$	2,6	1,2
reduziert	$k = 80$	2,1	1,2
reduziert	$k = 60$	1,8	1,1
reduziert	$k = 40$	1,5	1,1
reduziert	$k = 20$	1,4	1,1

## 6 Schlussfolgerungen

Motiviert durch RB-Methoden, haben wir ein Verfahren vorgestellt, welches schnelle reduzierte Modelle für parametrisierte dynamische Systeme erzeugen kann. Im Fall von Vielfach-Simulationsanfragen oder Echtzeit-Simulationen ist die resultierende Offline/Online-Zerlegung ein effektiver algorithmischer Ansatz. Insbe-

sondere wird die reduzierte Basis in der Offline-Phase konstruiert, in welcher eventuelle zeitaufwendige trajektorienbasierte Algorithmen wie POD akzeptabel sind. Wir haben ein Beispiel eines A-posteriori-Fehlerschätzers für die Zustandsvariable und die Ausgabe angegeben. Die Fehlerschätzer erlauben auch eine vollständige Offline/Online-Zerlegung. Dies bedeutet, dass die reduzierte Simulation nicht nur eine schnelle reduzierte Lösung produziert, sondern zusätzlich eine schnelle und rigorose Schätzung des Fehlers im Zeitbereich liefert. Diese sind in einer Online-Komplexität ermittelbar, welche vollkommen unabhängig von der Dimension  $n$  ist. Diese A-posteriori-Fehlerschätzer sind selbstverständlich auch anwendbar auf nichtparametrische Probleme unter Variation des Eingangs  $u$ . Insbesondere können die Schätzer für herkömmliche MOR-Techniken, wie modale Reduktion, Momentenabgleich, balanciertes Abschneiden etc. verwendet werden. Da bei diesen Verfahren häufig eine effektive A-posteriori-Fehlerkontrolle fehlt, können unsere Fehlerschätzer einen Beitrag zur Echtzeit-Absicherung dieser traditionellen Reduktionsverfahren darstellen.

### Danksagung

Der Autor bedankt sich bei Prof. Dr. M. Ohlberger und Prof. Dr. B. Lohmann für konstruktive Diskussionen. Die vorliegende Arbeit konnte mit finanzieller Unterstützung durch die Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen des Exzellenzclusters *Simulation Technology (EXC 310/1)* an der Universität Stuttgart und der Landesstiftung Baden-Württemberg gGmbH umgesetzt werden.

### Literatur

- [1] A. C. Antoulas. *Approximation of Large-Scale Dynamical Systems*. SIAM Publications, Philadelphia, PA, 2005.
- [2] E. Balmes. Parametric families of reduced finite element models, theory and applications. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 10(4):381–394, 1996.
- [3] U. Baur and P. Benner. Modellreduktion für parametrisierte Systeme durch balanciertes Abschneiden und Interpolation. *at – Automatisierungstechnik*, 57(8):411–419, 2009.
- [4] T. Bui-Thanh. *Model-Constrained Optimization Methods for Reduction of Parameterized Large-Scale Systems*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2007.
- [5] L. Daniel, O. Siong, L. Chay, K. Lee, and J. White. Multi-parameter moment-matching model-reduction approach for generating geometrically parameterized interconnect performance models. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 23(5):678–693, 2004.
- [6] O. Farle, V. Hill, P. Ingelström, and R. Dyczij-Edlinger. Ordnungsreduktion linearer zeitinvarianter Finite-Elemente-Modelle mit multivariater polynomieller Parametrisierung (model order reduction of linear finite element models parameterized by polynomials in several variables). *at – Automatisierungstechnik*, 54:161–169, 2006.
- [7] M. A. Grepl, Y. Maday, N. C. Nguyen, and A. T. Patera. Efficient reduced-basis treatment of nonaffine and nonlinear partial differential equations. *M2AN, Math. Model. Numer. Anal.*, 41(3):575–605, 2007.
- [8] M. A. Grepl and A. T. Patera. A posteriori error bounds for reduced-basis approximations of parametrized parabolic partial differential equations. *M2AN, Math. Model. Numer. Anal.*, 39(1):157–181, 2005.
- [9] B. Haasdonk and M. Ohlberger. Reduced basis method for finite volume approximations of parametrized linear evolution equations. *M2AN, Math. Model. Numer. Anal.*, 42(2):277–302, 2008.
- [10] B. Haasdonk and M. Ohlberger. Efficient Reduced Models and A-Posteriori Error Estimation for Parametrized Dynamical Systems by Offline/Online Decomposition. *SimTech Preprint 2009-23*, Universität Stuttgart, 2009. Submitted to MCMDS.
- [11] N. Jung, B. Haasdonk, and D. Kröner. Reduced Basis Method for Quadratically Nonlinear Transport Equations. *International Journal of Computational Science and Mathematics*, 2(4):334–353, 2009.
- [12] D. J. Knezevic, N. C. Nguyen, and A. T. Patera. Reduced basis approximation and a posteriori error estimation for the parametrized unsteady boussinesq equations. *Technical Report*, MIT, Cambridge, 2009. Submitted to M3AS.
- [13] B. Lohmann and R. Eid. Efficient order reduction of parametric and nonlinear models by superposition of locally reduced models. In *Methoden und Anwendungen der Regelungstechnik. Erlangen-Münchener Workshops 2007 und 2008*, Shaker Verlag, Aachen, 2009.
- [14] M. Meyer and H. G. Matthies. Efficient model reduction in non-linear dynamics using the Karhunen-Loève expansion and dual-weighted-residual methods. *Computational Mechanics*, 31:179–191, 2003.
- [15] D. V. Rovas, L. Machiels, and Y. Maday. Reduced basis output bound methods for parabolic problems. *IMA J. Numer. Anal.*, 26(3):423–445, 2006.
- [16] G. Rozza, D. B. P. Huynh, and A. T. Patera. Reduced basis approximation and a posteriori error estimation for affinely parametrized elliptic coercive partial differential equations: application to transport and continuum mechanics. *Arch. Comput. Meth. Eng.*, 15(3):229–275, 2008.
- [17] E. B. Rudnyi, C. Moosmann, A. Greiner, T. Bechtold, and J. G. Korvink. Parameter preserving model reduction for MEMS system-level simulation and design. In *Proc. of MATHMOD 2006*, 2006.
- [18] T. Tonn and K. Urban. A reduced-basis method for solving parameter-dependent convection-diffusion problems around rigid bodies. In P. Wesseling, E. Onate, and J. Periaux, editors, *ECCOMAS CFD 2006 Proceedings*, 2006.
- [19] S. Volkwein and K. Kunisch. Optimal snapshot location for computing POD basis functions. *Technical report*, University of Graz, 2008.

Manuskripteingang: 29. Januar 2010



**Jun.-Prof. Dr. Bernard Haasdonk** ist Nachwuchsgruppenleiter im Exzellenzcluster *SimTech* der Universität Stuttgart. Hauptarbeitsgebiete: Angewandte Mathematik, Modellreduktion, Maschinelles Lernen.

Adresse: Universität Stuttgart, Institut für Angewandte Analysis und Numerische Simulation, Pfaffenwaldring 57, D-70569 Stuttgart, Fax: +49-(0)711 685 65599, E-Mail: haasdonk@mathematik.uni-stuttgart.de