

不确定性量化的高精度数值方法和理论

汤涛^①, 周涛^②

① 香港浸会大学数学系, 香港

② 中科院数学与系统科学研究院, 北京100190

E-mail: ttang@math.hkbu.edu.hk, tzhou@lsec.cc.ac.cn

本文为《中国科学》庆贺林群院士 80 华诞专辑撰写

摘要 不确定性量化 (Uncertainty Quantification, UQ) 是近年来国际上热门的研究课题, 其应用领域包括水文学、流体力学、数据同化、天气预测等等。由于 UQ 问题中的大量随机参数引起的超大计算量, 如何设计高效的高精度数值方法变得非常重要, 与其相关的计算技术和数学理论也引起人们的高度重视。本文将综述不确定性量化研究中的高精度数值方法和最新进展。我们主要讨论基于正交多项式的逼近方法, 其中包括正交多项式 Galerkin 投影方法和随机配置方法。本文将侧重基于样本 (数据) 信息的随机配置方法, 包括随机抽样, 确定性抽样和结构随机样本。我们将重点介绍离散投影算法和压缩感知算法, 并介绍相关数值分析进展, 即如何确定样本的使用数量 M 与逼近空间基函数的自由度 N 的对应关系, 以保证算法的稳定性和最优收敛性质。我们还将介绍高维空间中基于任意数量和任意位置节点的插值算法, 以及一个相关的研究课题, 即正倒向随机微分方程数值方法。最后, 我们尝试探讨不确定性量化研究面临的挑战和亟待解决的研究问题。

关键词 不确定性量化, 多项式逼近, 随机配置方法, 离散 L^2 投影, 压缩感知, 正倒向随机微分方程

MSC (2010) 主题分类 41A10, 60H35, 65C30, 65C50

1 引言

不确定性量化 (UQ) 研究的是什么? 首先, 现实世界中许多实际问题的数学模型背后存在很大的不确定性, 这些不确定性可能来自于问题中的参数、实验测量值、几何区域的复杂性等等。那么, 如何通过量化这些不确定因素, 以减少不确定性带来的风险, 即是不确定性量化研究的主要目的。

近几年, 对带有不确定性的实际问题的建模与数值模拟受到了空前的关注, 也就是人们常说的不确定性量化 (Uncertainty Quantification, UQ)。UQ 正是为了处理模型背后的不确定性。UQ 方法可以分为概率框架和非概率框架, 本文将主要探讨在概率框架下的建模及计算方法。概率论框架为处理不确定性因素提供了良好的工具。通过使用概率论的工具, 可以将大部分的不确定性建模成随机变量 (或随机函数), 于是, 问题归结为如何求解所得到的随机问题。UQ 研究的一个核心问题是如何处理由于随机输入带来的高维逼近。对于实际应用问题, 比如油藏模拟, 天气预测, 数据同化, 流体力学, 我们通常需要处理 30-50 维, 甚至上百维的随机参数。因此, 设计快速有效的不确定性量化方法变得十分迫切。

UQ 研究在欧美得到了很大的重视和发展, 吸引了大量的应用数学家的关注, UQ 数值方法也得到了很大的发展。至今, UQ 已经在美国成为最重要的应用数学研究方向之一。美国能源部, 空军,

国家实验室都设立专项经费, 支持 UQ 方法的研究。2012年, 美国工业与应用数学学会 (SIAM) 开始组织 UQ 年会 (SIAM Conference on UQ), 两年举办一次, 前两届会议每次都有 500 余人参会。2013 年 SIAM 和美国数理统计协会 (ASA) 创立联合期刊 (SIAM/ASA Journal on UQ), 专门发表 UQ 领域的前沿研究成果。

随着 UQ 研究的深入, 对于随机数学模型的计算方法研究有了跨越性的发展, 我们这里简单介绍其中的一部分:

蒙特卡洛方法 (Monte Carlo Methods)。蒙特卡洛方法及其改进方法 [1] 是简单常用的基于样本的方法。在蒙特卡洛方法中, 我们利用概率分布随机的产生一些样本, 对每一个样本而言, 所要解决的问题变成了一个确定的问题。通过求解这些确定问题, 可以得到精确解的一些统计量信息, 比如均值或者方差。蒙特卡洛方法实施简单, 可以利用现成的程序, 利于并行计算。但众所周知, 蒙特卡洛方法的收敛率非常低: 均值收敛率是 $1/\sqrt{K}$ (K 是所使用的样本的数量), 这意味着我们需要使用大量的样本才能得到较精确的数值结果。如果所对应的确定问题求解困难, 这将是一个很大的挑战。于是很多改进的蒙特卡洛方法也就应运而生, 比如 Latin 抽样方法 [2,3], 拟蒙特卡洛方法 [4,5] 等, 但这些方法仍然有一定的应用局限性。

摄动方法 (Perturbation Methods)。这是一个比较流行的不基于样本的方法。该方法将一个随机函数在其均值附近展开成泰勒级数, 然后取一个合理的截断。通常情况下, 最多我们可以进行二阶展开的截断, 因为对于更高阶的情形, 得到的求解系统将会变得非常复杂。此方法被广泛的用于各种工程领域的应用问题 [6,7]。然而, 该方法还有一个固有缺陷, 即对于不确定性的放大, 因此一般只应用于小尺度的随机输入问题, 比如小于 10% 的随机扰动。

矩方程方法 (Moment Equation Methods)。在矩方程方法中, 我们试图直接求解随机解的各阶矩所满足的方程。这些关于矩的方程需要从原始的随机问题出发推导得出。对于一些简单的问题, 比如线性问题, 该方法比较有效。但通常情况下, 当我们推导某阶矩方程的时候, 需要使用更高阶矩的信息。这就产生了所谓的“封闭 (Closure)”问题, 因此, 我们通常需要对高阶矩做一些必要的假设。关于此方法的更细节的介绍可以参考文献 [8]。

多项式逼近方法 (Generalized Polynomial Chaos)。多项式逼近方法是近年来非常流行的计算方法, 其基本思想就是将精确解在随机参数空间进行多项式展开。这种想法最早由维纳 (Wiener) 于 1939 年引入 [9], 维纳使用 Hermite 多项式来处理带有高斯型随机参数的问题, 该方法也被称为“Hermite Chaos”, 虽然 Chaos 的含义为“混沌”, 我们这里仍将它翻译成多项式逼近, 从而减少与动力系统中混沌定义的冲突。Ghanem 和 Spanos 随后将这种逼近方法和空间上有限元方法结合, 应用于带有不确定性输入的的动力学模型中 [10], 取得了成功。近年来, 这种方法得到了迅速发展。Xiu 和 Karniadakis 基于 Askey 系统将多项式逼近方法推广 [11], 从而处理带有任意类型随机参数输入的问题。比如使用 Laguerre 多项式处理 Gamma 随机参数输入, 使用 Jacobi 多项式处理 Beta 分布的随机参数输入等等。并且, Xiu 和 Karniadakis 也给出了相应的离散型随机参数及其对应的离散正交多项式。最初的多项式逼近方法采用 Galerkin 投影, 也就是说, 在随机参数空间对精确解做一个有限阶多项式展开, 然后将此展开带入原问题, 在展开多项式空间中做 Galerkin 投影, 进而得到了一个关于展开系数的联立的方程组, 通过求解方程组, 我们获得精确解的全部信息。如果精确解对于随机参数有良好的正则性, 此方法可以达到指数收敛。然而, 求解联立的方程组并不容易, 因为方程组的规模远大于原始随机问题的规模, 并且我们需要更新现有的程序。而且, 对于复杂的数学模型, 所形成的联立方程组也将十分复杂, 这对于多项式 Galerkin 投影方法是一个挑战。

随机配置法 (Stochastic Collocation)。随机配点法是当今最流行的 UQ 计算方法之一, 它结

合了蒙特卡洛方法和传统多项式 Galerkin 投影方法的优点。随机配置方法试图通过计算一些特殊的样本信息, 来构造高精度的多项式逼近(我们这里关注高阶随机配置方法, 特别的, 基于多项式逼近的随机配置方法)。这种方法避免了求解联立的方程组, 只需要求解一定数量、与原随机问题同等规模的确定问题, 便于实现, 利于并行。随机配置方法最早的想法是基于张量积高斯点和张量多项式插值 [12]。这就面临严重的维数祸根问题 (Curse of dimensionality): 所需要的张量积节点个数随着维数的增加呈指数快速增长。考虑到对于每一个样本, 需要求解与随机问题同等规模的确定问题, 这在实际应用中是不能接受的。随后, 高维求积中流行的稀疏节点 [13,14] 被引入到 UQ 的计算当中, 以减弱维数祸根问题。这种方法仍然是一种张量方法, 但是稀疏节点的设计试图减轻张量积节点对于维数的严重依赖。基于稀疏节点的插值方法在 UQ 计算中取得了很大的成功 [15-18]。然而, 随着 UQ 需求的不断深入, 上述传统的张量型插值方法已经无法满足实际需求, 随机配置方法也已经产生了多种变形, 并将多个研究领域有机结合, 产生了许多重要的数值分析结果, 我们将在后面的章节中对此做详细介绍。

在本文后面的章节中, 我们将主要讨论基于多项式逼近的方法, 包括 Galerkin 投影方法和随机配置方法。这其实可以把 UQ 问题转化一个随机参数空间的逼近论问题, 即我们寻求数学模型 (见下节描述) 精确解 $u(x, Z)$ 的多项式逼近:

$$u_N(x, Z) = \sum_{n=1}^N \hat{c}_n(x) \phi_n(Z).$$

其中 x 是空间变量, $Z \in \Gamma \subset \mathbb{R}^d$ 是 d 维随机参数, $\phi_n(Z)$ 是选取的多项式基函数。UQ 的实际问题通常需要处理很高维数的随机参数, 即 $d \gg 1$ 。这使得展开项数 $N = N(d)$ 也相当大。本文中, 我们将主要探讨随机配置方法, 并分成三种框架: 离散最小二乘投影方法, 压缩感知方法和基于任意分布高维节点的插值方法。基本思想就是通过一些样本数据构建以上的多项式逼近, 假设我们已经获得 (通过求解相关的数学模型, 详细见后面的讨论) 样本信息 $\{u(x, z_m)\}_{m=1}^M$, 其中 $\{z_m\}_{m=1}^M$ 是在随机参数空间抽取的样本。通过样本信息, 我们可以构建:

$$\sum_{n=1}^N \phi_n(z_m) \hat{c}_n(x) \approx u(x; z_m), \quad m = 1, \dots, M.$$

在离散投影方法的框架下, 我们要求 $M > N(d)$ 。那么, 一个自然并重要的问题是: 最少需要多少样本才能保证算法的稳定性? 因此, 我们将着重讨论如何确定样本数量 M 与展开项数 $N(d)$ 的依赖关系, 以保证算法具有稳定性和最佳收敛性。特别的, 我们将介绍相关的最新进展, 包括随机抽样方法, 确定性抽样结果, 无穷区域问题 $\Gamma \equiv \mathbb{R}^d$ 等。在压缩感知的框架下, 我们试图寻求精确解的稀疏逼近, 这使得我们可以使用较少的样本, 即 $M < N(d)$, 我们同样关心算法的稳定性和最佳逼近性质。通过讨论, 我们将呈现压缩感知方法和离散投影方法的联系和对应关系。最后我们讨论高维插值问题, 即 $M = N(d)$ 。为了适应实际需求, 我们将强调“无结构”节点重要性, 即我们希望使用任意位置, 任意数量的节点。

本文接下来的组织结构如下: 第二节中我们介绍所讨论的模型问题: 随机椭圆方程。第三节介绍 Galerkin 投影方法和随机配置方法。第四节至第六节是本文的重点, 我们将系统的分别介绍离散投影方法, 压缩感知方法和插值方法, 并给出最新的算法和相关的数值分析结果, 同时我们将给出一些数值算例。在第七节中, 我们将介绍一个相关的研究课题: 正倒向随机微分方程的数值方法。最后, 我们将在第八节中探讨 UQ 研究的发展趋势和未来可能的研究方向。

2 模型问题

这一节中我们讨论基于概率框架的 UQ 数学模型问题, 我们将考虑 UQ 研究中的一个常用数学模型: 随机椭圆问题。选取这个模型问题的原因是多方面的。首先, 随机椭圆问题结构相对简单, 并且有很多重要应用, 比如随机振动, 油藏管理, 复合材料 [19-24]; 再次, 随机椭圆问题的解具有许多特有的数学性质, 因此产生了许多漂亮的数值分析结果。我们现在来给出随机椭圆问题

$$-\nabla_x \cdot (\kappa(x, \omega) \nabla_x u) = f(x, \omega), \quad u|_{\partial D} = 0, \quad (2.1)$$

其中 $D \in \mathbb{R}^\tau$ ($\tau = 1, 2, 3$) 是一个物理区域。 ω 是定义在一个完备概率空间 (Ω, \mathcal{F}, P) 上的事件, 其中 Ω 是事件空间, \mathcal{F} 是 σ -代数, P 是概率测度。扩散系数 $\kappa(x, \omega)$ 和 $f(x, \omega)$ 是给定的随机函数, 进而, 方程的解 $u(x, \omega)$ 也是一个随机函数。为了保证问题的适定性, 我们假定

$$\exists \kappa_{\min} > 0, \text{ s.t. } P\{\omega \in \Omega : \kappa(x, \omega) \geq \kappa_{\min} > 0 \forall x \in \overline{D}\} = 1, \quad (2.2)$$

$$\int_D \int_\Omega f^2(x, \omega) dx dP < +\infty. \quad (2.3)$$

有了上面的假设, 通过 Lax - Milgram 引理, 我们容易得到如下的适定性结果 (参见[18]): 在 (2.2) - (2.3) 的假设下, 模型问题 (2.1) 的解存在唯一, 且成立如下估计

$$\|u\|_{L^2_P(\Omega) \otimes H^1_0(D)} \leq \frac{c_p}{\kappa_{\min}} \left(\int_D \int_\Omega f^2(x, \omega) dx dP \right)^{1/2}. \quad (2.4)$$

其中 c_p 是相关的 Poincaré 常数。

2.1 Karhunen-Loève 展开

通常情况下, 人们期望使用有限个随机变量来度量模型问题的随机输入 (即有限维随机输入假设)。这个目标可以通过许多工具来实现, 比如 Karhunen-Loève 展开, 下面我们简要介绍关于随机函数 Karhunen-Loève 展开:

首先, 对于任意一个随机函数 $\kappa(x, \omega)$, 我们定义它的均值函数, 即数学期望 $\mathbb{E}(\cdot)$:

$$\bar{\kappa}(x) = \mathbb{E}[\kappa(x, \cdot)] = \int_\Omega \kappa(x, \omega) dP, \quad x \in D. \quad (2.5)$$

类似的, 我们可以定义它的 τ 阶矩 ($\tau \in \mathbb{N}$)

$$\bar{\kappa}_\tau(x) = \mathbb{E}[\kappa^\tau(x, \cdot)] = \int_\Omega \kappa^\tau(x, \omega) dP, \quad x \in D. \quad (2.6)$$

随机函数 $\kappa(x, \omega)$ 的协方差函数定义如下

$$\text{Cov}_\kappa(x, y) = \mathbb{E}[(\kappa(x, \cdot) - \bar{\kappa}(x))(\kappa(y, \cdot) - \bar{\kappa}(y))], \quad x, y \in D. \quad (2.7)$$

根据定义, $\text{Cov}_\kappa(x, y) : \overline{D} \times \overline{D} \rightarrow \mathbb{R}$ 是对称正定的协方差函数 [10,25]。我们引入自共轭紧算子 $T_\kappa : L^2(D) \rightarrow L^2(D)$:

$$T_\kappa v(\cdot) = \int_D \text{Cov}_\kappa(x, \cdot) v(x) dx, \quad \forall v \in L^2(D). \quad (2.8)$$

令 $\{\lambda_i\}_{i=1}^\infty$ 和 $\{\varphi_i\}_{i=1}^\infty$ 分别为算子 T_κ 的非负特征值序列和归一化的正交特征函数, 即

$$T_\kappa \varphi_i = \lambda_i \varphi_i, \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots > 0, \quad \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \text{ for } i, j \in \mathbb{N}^+, \quad (2.9)$$

进一步, 我们定义互不相关, 且均值为 0 方差为 1 (i.i.d) 的随机变量:

$$Z_i(\omega) := \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} \int_D (\kappa(x, \omega) - \bar{\kappa}(x)) \varphi_i(x) dx, \quad i = 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

$$\mathbb{E}[Z_i] = 0, \quad \mathbb{E}[Z_i Z_j] = \delta_{ij}, \quad i, j \in \mathbb{N}^+. \quad (2.11)$$

那么, 成立如下的 Karhunen-Loève 展开,

$$\kappa(x, \omega) = \bar{\kappa}(x) + \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} Z_i(\omega) \varphi_i(x). \quad (2.12)$$

通过对上述的 Karhunen-Loève 展开做有限项截断, 我们便可以得到关于随机函数 $\kappa(x, \omega)$ 的有限维随机变量逼近

$$\kappa(x, \omega) \approx \kappa_d(x, \omega) = \bar{\kappa}(x) + \sum_{i=1}^d \sqrt{\lambda_i} Z_i(\omega) \varphi_i(x). \quad (2.13)$$

根据 Mercer's 定理 [25], 下面的估计对所有二阶矩有界的随机函数成立

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \sup_{x \in D} \mathbb{E} \left[(\kappa(x, \cdot) - \kappa_d(x, \cdot))^2 \right] = \lim_{d \rightarrow \infty} \sup_{x \in D} \sum_{i=d+1}^{\infty} \lambda_i \varphi_i^2(x) = 0. \quad (2.14)$$

并且, 在均方范数的意义下, 有限项截断的 Karhunen-Loève 展开具有最优误差估计 [10].

2.2 有限维模型问题

在后面的讨论中, 我们将考虑有限维的数学模型, 并假设模型问题中的随机系数 $\kappa(x, \omega)$ 具有类似 Karhunen-Loève 展开的结构, 即:

$$\begin{cases} -\nabla_x \cdot (\kappa(x, Z) \nabla_x u) = f(x, Z), & u|_{\partial D} = 0, \\ \kappa(x, Z) = \bar{\kappa}(x) + \sum_{j=1}^d Z_j(\omega) \psi_j(x), \end{cases} \quad (2.15)$$

注意, 我们使用了 $\psi_j(x) = \sqrt{\lambda_j} \varphi_j(x)$ 使符号简化。为了符号简单, 我们将在后面的描述中省略 ω 。对于 d 维随机参数输入的模式 (2.15), 我们仍然假设 (2.2) 和 (2.3) 成立。并假设随机参数 $\{Z_j\}_j$ 相互独立, 且对于每一个随机参数 Z_j , 其支撑区域为 $\Gamma_j \subset \mathbb{R}$, 从而随机向量 Z 的支撑区域是 $\Gamma = \prod_{j=1}^d \Gamma_j$ 。另外, 我们假设对于每一个随机参数 Z_j , 存在相应的概率密度函数 ρ_j , 进而, 随机向量 $Z = (Z_1, \dots, Z_d)$ 的联合概率密度函数为 $\rho = \prod_{j=1}^d \rho_j$ 。进而, 我们有类似 (2.4) 的先验估计

$$\|u\|_{L^2_\rho(\Gamma) \otimes H^1_0(D)} \leq \frac{c_p}{\kappa_{\min}} \left(\int_D \int_\Gamma \rho(Z) f^2(x, Z) dx dZ \right)^{1/2}. \quad (2.16)$$

实际上, 上述有限维模型 (2.15) 是原模型 (2.1) 的一个逼近。显然, 逼近程度由随机函数 $\kappa(x, \omega)$ 的 Karhunen-Loève 截断程度决定。归根结底, 这将由 $\kappa(x, \omega)$ 的协方差函数的性质决定, 因为协方差

函数的性质决定了 Karhunen-Loève 展开中特征值收敛于零的速度。比如如果我们考虑常用的 Gauss 型随机函数:

$$\text{Cov}_\kappa(x, y) = \sigma^2 \exp\left(-\frac{\|x - y\|^2}{L^2}\right), \quad x, y \in D \quad (2.17)$$

其中的参数 L 被称为相关常数。那么, 其特征值具有快速的收敛率 [26]。然而, 在许多实际问题中, 比如地下水渗流问题 [27], 我们需要考虑指数型随机函数:

$$\text{Cov}_\kappa(x, y) = \sigma^2 \exp\left(-\frac{\|x - y\|_1}{L^2}\right), \quad x, y \in D \quad (2.18)$$

上述协方差函数的特征值收敛速度较慢。因此, 如果我们要求一定的截断精度, 指数型随机函数模型需要考虑较高维数的随机参数输入。关于随机函数的协方差函数及其特征值的收敛性质, 以及 Karhunen-Loève 展开的快速数值计算方法, 可以参见 [26] 及其中的参考文献。

对于有限维数学模型 (2.15), 无论从数值方法上还是在模型分析上, 研究者都给与了极大的关注 [28-33]。一个重要的问题是, (2.15) 的解对于随机参数具有怎样的正则性? 因为这将决定多项式逼近方法的合理性和收敛性。文献 [12,34] 首先给出了模型问题 (2.15) 的解对于随机参数的光滑行分析, 特别的, [12] 证明了有限维模型问题 (2.15) 的解“解析的”依赖于随机参数。文献 [34,35] 考虑了可列个随机参数的情形 (无限维随机输入), 同样证明了相关的解析正则性质。这些正则性分析结果也说明了使用多项式逼近的合理性。并且, 这些正则性结果决定了多项式逼近方法的快速收敛性质。

注 1 对许多特殊的问题, 方程的解对于随机参数并没有很好的光滑性, 非线性双曲问题就是典型的例子 [37-41]。实际上, 对于双曲问题, 只有对一些特殊的模型问题, 或者在一些极其特殊的条件下, 才能得到上面介绍的解析正则性, 感兴趣的读者可以参见 [37-39]。如何对非线性随机双曲问题设计有效的算法仍然是一个重要的研究方向。

3 多项式逼近: Gelerkin 投影方法和随机配置方法

现在, 我们讨论对于模型椭圆问题 (2.15) 的多项式逼近 (Generalized Polynomial Chaos, gPC) 方法。该方法寻求在随机参数空间中的多项式逼近:

$$u(x, Z) \approx \sum_{\alpha \in \mathcal{I}} \hat{c}_\alpha(x) \phi_\alpha(Z), \quad (3.1)$$

其中 ϕ_n 是根据随机参数的分布信息所选取的多项式基函数, $\hat{u}_n(x)$ 是我们要求解的展开系数。在 gPC 方法中, 我们选取在 L^2_ρ 意义下正交的多项式, 即:

$$\mathbb{E}[\phi_\alpha(Z)\phi_\beta(Z)] = \int_{\Gamma} \phi_\alpha(Z)\phi_\beta(Z)\rho(Z)dZ = \delta_{\alpha,\beta},$$

其中 $\delta_{\alpha,\beta}$ 是 Kronecker delta 函数。

注意这里的 $\phi_\alpha(Z)$ 是 d 个变量的正交多项式基函数。由于我们已经假定 Z 的各个分量相互独立, 于是 $\phi_\alpha(Z)$ 是单变量多项式基函数的张量积, 即

$$\phi_\alpha(Z) = \prod_{j=1}^d \phi_{\alpha_j}^{(j)}(Z_j), \quad \int_{\Gamma_j} \phi_n^{(j)}(Z_j)\phi_m^{(j)}(Z_j)\rho_j(Z_j)dZ_j = \delta_{n,m}, \quad (3.2)$$

其中 $\phi_{\alpha_j}^{(j)}$ 代表第 j 个方向阶数为 α_j 的多项式基函数。在每一个随机方向, ρ_j 决定了所选取的多项式的类型。比如, 均匀分布概率密度对应了 Legendre 多项式, Beta 分布密度函数对应了 Jacobi 多项式, Gaussian 分布概率密度对应 Hermite 多项式, 具体参见 [42,43]。

在上面的描述中, 我们使用了多重指标: $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}_0^d$ 是一个 d 维指标, 且有相关定义 $Z^\alpha = \prod_j Z_j^{\alpha_j}$ 以及 $|\alpha| = \sum_{j=1}^d \alpha_j$ 。对于任何一个向下封闭 (参见 [44]) 的 d 维指标集合 $\mathcal{I} \subset \mathbb{N}_0^d$, 我们记集合的指标总数是 $|\mathcal{I}| = N$, 实际上, 我们可以将所有指标按某种规则进行排序 (比如字典 (Lexicographical) 排序), 于是有

$$u_N(x, Z) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}} \hat{c}_\alpha(x) \phi_\alpha(Z) = \sum_{n=1}^N \hat{c}_n(x) \phi_n(Z).$$

任何一个 d 维的有限项多项式空间, 可以由其对应的指标集进行表示, 比如, 通常考虑的张量多项式空间 (Tensor Product, TP), 完全多项式空间 (Total Degree, TD), 以及双曲多项式空间 (Hyperbolic Cross, HC), 分别对应以下指标集:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{d,k}^T &= \left\{ \alpha \in \mathbb{N}_0^d \mid \max_j \alpha_j \leq k \right\}, & T_k^d &= \text{span} \{ z^\alpha \mid \alpha \in \mathcal{I}_{d,k}^T \} \\ \mathcal{I}_{d,k}^P &= \left\{ \alpha \in \mathbb{N}_0^d \mid |\alpha| \leq k \right\}, & P_k^d &= \text{span} \{ z^\alpha \mid \alpha \in \mathcal{I}_{d,k}^P \}, \\ \mathcal{I}_{d,k}^H &= \left\{ \alpha \in \mathbb{N}_0^d \mid \prod_j \alpha_j + 1 \leq k + 1 \right\}, & H_k^d &= \text{span} \{ z^\alpha \mid \alpha \in \mathcal{I}_{d,k}^H \} \end{aligned}$$

注意上面的 d 代表随机参数的个数, 也就是随机参数的维数, k 代表多项式阶数。可以看出, 张量多项式空间 P_k^d 要求每个方向上, 所使用的多项式阶数不超过 k , 而完全多项式空间则要求所有方向多项式的阶数之和不超过 k 。可以看出, 张量空间 P_k^d 和完全多项式空间 T_k^d 的自由度 (Degree of Freedom, DoF) 分别是

$$p_k^d \triangleq \dim T_k^d = (k+1)^d, \quad t_k^d \triangleq \dim P_k^d = \binom{d+k}{k}.$$

双曲多项式空间 H_k^d 的自由度难于确定, 文献 [44] 提供了以下的上界估计:

$$h_k^d \leq \lfloor (k+1)(1 + \log(k+1))^{d-1} \rfloor.$$

从上面的公式, 我们立刻可以看出随机参数的维数引出的严重问题: 多项式空间的自由度随着随机参数的维数 d 快速增长。为了便于理解, 我们在图 1 中给出了二维空间自由度的差别。

3.1 Galerkin 投影方法

为了得到模型问题 (2.15) 的解的多项式逼近 $u_N(x, Z)$, 我们需要求解相关的展开系数 $\{\hat{c}_n(x)\}_n$ 。这可以通过 Galerkin 投影方法 (也被称作随机 Galerkin 投影方法) 得到: 我们将展开式 (3.1) 带入模型问题 (2.15), 并在所考虑的 (有限维) 多项式空间中做 Galerkin 投影, 得到

$$\begin{cases} -\nabla \cdot [\mathbf{A}(x) \nabla \mathbf{c}] = \mathbf{f}, & x \in D; \\ \mathbf{u}|_{\partial D} = 0, \end{cases} \quad (3.3)$$

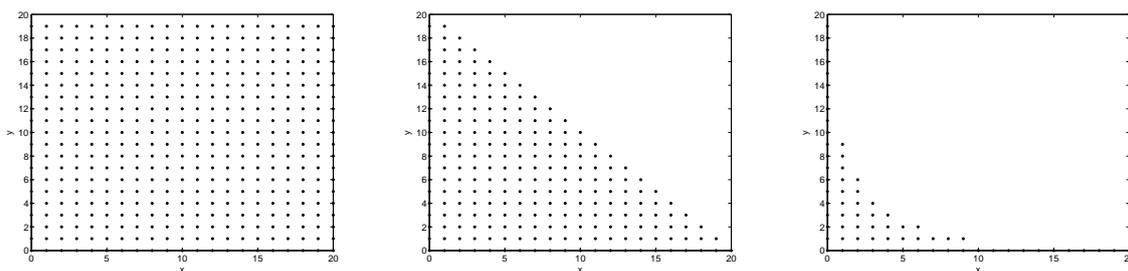


图 1 二维多项式空间自由度比较。左图: TP 空间, 中图: TD 空间, 右图: HC 空间

其中 $\mathbf{c} = (\hat{c}_1(x), \dots, \hat{c}_N(x))^T$ 是需要求解的未知向量, 且 $\mathbf{f} = (\hat{f}_1(x), \dots, \hat{f}_N(x))^T$ 满足

$$\hat{f}_n(x) = \int_{\Gamma} \rho(Z) f(x, Z) \phi_n(Z) dZ, \quad n = 1, \dots, N.$$

gPC-Galerkin 方程组 (3.3) 的系数矩阵 $\mathbf{A}(x) = [\mathbf{A}_{n,m}(x)]$ 的元素满足

$$\mathbf{A}_{n,m}(x) = \int_{\Gamma} \rho(Z) \kappa(x, Z) \phi_n(Z) \phi_m(Z) dZ, \quad 1 \leq n, m \leq N. \quad (3.4)$$

注意到方程组 (3.3) 是关于未知系数的确定性方程。通过求解 (3.3), 我们便得到了模型问题的多项式逼近解 $u_N(x, Z)$ 。从而, 一些统计量信息都可以通过逼近解 $u_N(x, Z)$ 得到, 比如函数 u 的均值可以由下式得到

$$\mathbb{E}[u] \approx \mathbb{E}[u_N] = \int_{\Gamma} \left(\sum_{n=1}^N \hat{c}_n(x) \phi_n(Z) \right) \rho(Z) dZ = \hat{c}_1(x), \quad (3.5)$$

注意, 我们的排序中默认第一项 $\hat{u}_1(x)$ 是常数项。同理, 方差信息可以由下式得到

$$\text{Var}[u] = \mathbb{E} \left[(u - \mathbb{E}[u])^2 \right] \approx \sum_{n=2}^N (\hat{c}_n(x))^2. \quad (3.6)$$

上述的多项式逼近方法已经被广泛应用于 UQ 的计算之中, 比如随机扩散问题 [45-47], 随机流体计算 [48], 随机守恒律方程 [40,41,49], 等等。我们之前已经讨论过, 模型问题的解对于随机参数具有良好的光滑性质, 因此, 上述 Galerkin 方法可以达到指数收敛性, 收敛率远远快于传统的蒙特卡洛方法。感兴趣的读者可以参见 [30, 33-36]。

虽然 Galerkin 投影方法数学描述清楚, 并引发了许多漂亮的数值分析结果。然而在实际操作中, 我们需要求解一个大规模方程组 (规模远大于原始模型), 这对实际应用提出了巨大挑战。此外, 可以看出, Galerkin 方法中形成的联立方程组的形式是由原数学模型决定的。如果原数学模型极其复杂, 那么所形成的 gPC-Galerkin 方程组也将极其复杂。

另外, 在实际应用中, 通常会考虑时间依赖的数学模型, 并且需要进行长时间数值模拟。对于这些问题, Galerkin 方法的应用也面临挑战 [54]。一方面, 长时间模拟需要的计算量太大, 难以实现。另一方面, 模型的精确解随着时间可能有剧烈的演化, 然而, 在 gPC 方法中, 我们使用了固定的多项式基函数, 这也许会在时间演化过程中会产生问题。近几年, 研究人员给出了一种全新的尝试: 动态正交 (Dynamically Orthogonal, DO) 逼近方法。这种方法针对于时间演化的问题, 试图动态的寻找精确

解的 Karhunen-Loève 截断逼近, 因为截断的 Karhunen-Loève 展开具有最优性。比如, 我们考虑如下的随机扩散问题:

$$\begin{cases} u_t(x, t, \omega) - \nabla \cdot (a(x, \omega) \nabla u(x, t, \omega)) = f(x, t, \omega), & \text{in } D \times \mathcal{T} \times \Omega, \\ u(x, t, \omega) = 0 & \text{on } \partial D \times \mathcal{T} \times \Omega, \\ u(x, 0, \omega) = u_0(x, \omega), & \text{on } D \times \Omega, \end{cases} \quad (3.7)$$

其中 $t \in \mathcal{T}$ 是时间变量。DO 方法寻求如下的逼近解:

$$u_N(x, t, \omega) = \bar{U}(x, t) + \sum_{n=1}^N U_n(x, t) Y_n(t, \omega). \quad (3.8)$$

也就是说, 我们要求两组基 $\{U_n(x, t)\}$ 和 $\{Y_n(t, \omega)\}$ 都随时间演化。为了保证逼近展开的唯一可解性, 需要引入动态正交逼近条件:

$$\mathbb{E}[Y_i(t, \cdot)] = 0, \quad \langle U_i(\cdot, t), U_j(\cdot, t) \rangle = \delta_{ij}, \quad \left\langle \frac{\partial U_i(\cdot, t)}{\partial t}, U_j(\cdot, t) \right\rangle = 0, \quad 1 \leq i, j \leq N, \quad \forall t \in \mathcal{T}. \quad (3.9)$$

通过把 (3.8) 带入随机扩散方程, 并结合动态正交条件 (3.9) 在两组基空间中做投影, 可以推导出 $\{U_n(x, t)\}$ 和 $\{Y_n(t, \omega)\}$ 所满足的方程组, 具体可以参见 [55-57]。

注意, 这时得到的动态正交方程组远比 gPC-Galerkin 方程组仍然是联立方程组, 并且形式复杂, 然而, 由于我们试图寻找最佳逼近 (截断的 Karhunen-Loève 展开), 我们期望展开项数远小于 gPC-Galerkin 方法中的展开项数。一个和动态正交方法相关的尝试 (动态双正交) 也出现在文献 [58,59] 中。动态正交方法最初由 [55] 引入, 并应用于随机流体的模拟之中, 之后引起很大的关注并被应用于更多实际问题, 参见 [60,61]。然而, 对于这种方法的数值分析工作, 比如收敛性质, 并没有广泛展开。近期, 文献 [62] 给出了这种方法与 Schrödinger 方程计算中的 MCTDH (Multi-Configuration time-dependent Hartree) 方法 [63,64] 的密切关联, 并给出了动态正交方法对于随机扩散问题的收敛性证明:

定理 1 (Musharbash, Nobile & Zhou, [62]) 假设 $z_N(t)$ 是精确解 $u(t)$ 的最佳 N 项逼近 (我们可以把 $z_N(t)$ 看作 $u(t)$ 的 N 项 Karhunen-Loève 截断)。如果当 $0 \leq t \leq \bar{t}$ 时, $z_N(t) \in (H^2(D) \cap H_0^1(D)) \otimes L^2(\Omega)$ 且关于时间连续可微。并且 $z_N(t)$ 对应的最小特征值满足 $\sigma(z_N(t)) \geq \rho > 0, \forall t \in [0, \bar{t}]$ 。那么存在 $0 < \hat{t} \leq \bar{t}$ 使得以 $u_N(0) = z_N(0)$ 为初值的 DO 逼近解成立以下估计 (当 $0 < t \leq \hat{t}$):

$$\|u_N(t) - z_N(t)\|_{L^2(D) \otimes L^2(\Omega)}^2 + a_{\min} \int_0^t \|u_N(\tau) - z_N(\tau)\|_1^2 d\tau \leq 2\alpha e^{2\beta(t)} \int_0^t \|z_N(\tau) - u(\tau)\|_1^2 d\tau, \quad (3.10)$$

其中

$$\beta(t) = \frac{C}{\rho} t, \quad \alpha = \max \left\{ \frac{a_{\max}^2}{2a_{\min}}, 4\rho^{-1} \right\}.$$

上述的 C 是一个依赖于 $z_N(t)$ 以及给定条件的常数, $\|\cdot\|_1, |\cdot|_1$ 分别是函数空间 $H^1(D) \otimes L^2(\Omega)$ 中定义的范数和半范数。

上述定理表明, 在一定的条件下, DO 逼近解可以和最佳逼近解相比拟。但对于长时间的模拟, 如果想保持最佳逼近性质, 也许需要一些自适应的思想选取最重要的展开项。并且, 这个定理还局限于随机扩散问题以及满足特定条件的非线性问题, 对于更一般问题的收敛性证明, 仍是一个很重要的研究课题。

3.2 随机配置方法

在这一节, 我们介绍随机配置方法, 这将是本文接下来讨论的重点。最初的随机配置方法的思想简单, 即基于参数空间一些特殊的配置点 (比如随机参数对应的多项式的 Gauss 点), 进行张量型拉格朗日多项式差值 [15,17,37,65]。然而, 随着 UQ 研究的发展, 随机配置方法的最新研究成果不断出现, 其构建方法也出现多种变型, 本文我们将尽可能阐述随机配置方法的一般性框架。

在随机配置方法中, 我们仍然寻求模型问题 (2.15) 的多项式逼近

$$u(x, Z) \approx u_N(x, Z) = \sum_{n=1}^N \hat{c}_n(x) \phi_n(Z) \quad (3.11)$$

主要目标仍然是求解多项式展开的未知系数 $\{\hat{c}_n\}_n$ 。在随机配置方法的框架下, 我们利用一些样本信息来构建未知系数: 令 $\{z_m\}_{m=1}^M$ 是 M 个在随机参数空间 Γ 中选取的样本。对于每一个样本 z_m , 若令 $Z = z_m$, 模型问题变成了一个确定性问题, 于是我们可以使用通常的确定性算法 (比如有有限元方法) 来获得 $u(x, z_m)$ 。一旦对于所有样本 $\{z_m\}_{m=1}^M$, 我们得到相应的样本解 $\{u(x, z_m)\}_{m=1}^M$, 便可以通过如下关系构建多项式逼近

$$\sum_{n=1}^N \phi_n(z_m) \hat{c}_n(x) \approx u(x; z_m), \quad m = 1, \dots, M. \quad (3.12)$$

上述问题中“ \approx ”的具体含义我们将在后面分情况具体讨论。注意到, 为了得到上述逼近, 我们只需求解 M 个和原始问题一样规模, 一样形式的方程, 从而可以使用现有的应用软件。并且, 对不同的样本可以使用并行处理器, 这是随机配置方法和我们上一节介绍的 Galerkin 逼近方法的显著区别。

通常情况下, 对于每个样本 z_m , 我们需要对物理空间进行离散, 因此所得到的信息 $u(x, z_m)$ 通常是一个离散解, 我们假设离散物理空间 (比如有有限元离散) 的自由度为 K , 也就是说, $u(x, z_m) = (u(x_1, z_m), \dots, u(x_K, z_m))$ 是一个 K 维向量, 对于每一个物理网格点, 问题 (3.12) 可以写成代数问题

$$\mathbf{A} \mathbf{c}_k \approx \mathbf{u}_k, \quad k = 1, \dots, K. \quad (3.13)$$

其中设计矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ 的元素满足 $\mathbf{A}_{m,n} = \phi_n(z_m)$, 并且有

$$\mathbf{c}_k = (\hat{c}_1(x_k), \dots, \hat{c}_N(x_k))^{\top}, \quad \mathbf{u}_k = (\mathbf{u}(x_k, z_1), \dots, \mathbf{u}(x_k, z_M))^{\top}, \quad k = 1, \dots, K. \quad (3.14)$$

为了描述方便, 在接下来的讨论中, 我们将忽略下标 k , 也就是忽略物理空间的离散。为了便于理解, 读者可以想象未知函数是一个只关于随机参数的高维函数, 进而我们考虑模型问题:

$$\mathbf{A} \mathbf{c} \approx \mathbf{u}. \quad (3.15)$$

由上面的讨论可以看出, 如何在高维随机参数空间中选取样本 $\{z_m\}_{m=1}^M$ 将是一个关键问题, 这将决定所形成的设计矩阵 \mathbf{A} 的性质, 从而对于后续算法的稳定性和收敛性产生影响。针对逼近问题 (3.15), 我们将在后面的三个小节中分别讨论以下三种方法

- 离散最小二乘投影 ($M > N$): 我们通过样本点的信息拟合未知系数。在这个框架下, 我们关心如何确定 M 与 N 的关系, 以保证算法的稳定性和最优收敛性。
- 压缩感知方法 ($M < N$): 我们期望用少量的样本信息, 通过稀疏优化算法重构稀疏的多项式逼近。这种框架前提是解具有稀疏结构, 我们同样关心算法的稳定性和收敛性, 并且通过后面的介绍我们发现, 压缩感知算法和离散最小二乘算法具有密切的联系。

- 基于任意位置高维节点的最小插值 ($M = N$): 我们要求 (3.12) 在样本点上精确满足等式。同样, 我们需要考虑算法的稳定性和收敛性。

在开始上述三种方法的讨论之前, 我们强调使用的样本点满足“无结构”性质。比如, 我们可以随意 (或者说, 根据实际问题或者实际资源) 控制样本点的使用个数。因为在实际应用中, 对于每一个样本, 我们需要付出很大的计算代价, 想象每一个样本点的模拟耗时巨大。另外, 鉴于实际资源限制, 我们期望可以根据资源确定使用样本的次数, 比如, 如果有 M 个并行处理器, 我们自然希望使用 M 个样本 (或者整数倍), 以便提高使用效率。另外, 对于许多实际应用问题, 样本点的位置可以由问题本身给出, 或者由工程应用人员给出, 我们无法控制样本点的位置。因此, 我们强调“无结构”, 期望能够处理任意位置的样本, 比如随机样本。

为了更加便于理解, 作为对比, 我们介绍以下两个典型的“结构”样本:

张量积高斯点: 我们知道, 在一维情形下, 高斯 (Gauss) 节点具有良好的插值性质。于是, 在高维情形, 一个自然的想法是使用基于一维高斯点的张量积节点。比如我们在每个方向使用 K 个高斯点, 那么在 d 维空间的张量积高斯点的个数是 $M = K^d$ 。显然, 节点个数随着维数的增加呈指数增长。尽管张量积可以继承一维高斯节点的高代数精度, 在实际应用中, 由于维数的祸根问题, 仍是不可取的。

稀疏节点 (Sparse Grid): 稀疏节点也属于张量积节点, 但是稀疏节点的设计试图减轻张量积节点对于维数的严重依赖。原始的稀疏节点是由 Smolyak [13] 在高维求积中引入的, 随后, 稀疏节点得到了快速的发展 [14,66,67]。

如果我们令 Θ_k^j 表示在方向 j 上的一组节点 (节点个数由参数 k 决定), 那么一个高维的 ℓ 层稀疏节点可以由下式给出

$$\Theta_\ell = \bigcup_{|\alpha| \leq \ell} \bigotimes_{j=1}^d \Theta_{\alpha_j}^j.$$

我们可以随意定义不同的一维节点 Θ_k^j , 但是, 流行的方法是选取 Θ_k^j 为 $2^k + 1$ 个 Chebyshev Gauss-Lobatto 节点, 即:

$$\Theta_k^j = \left\{ \cos \left(\frac{(n-1)\pi}{2^k} \right) \right\}_{n=1}^{2^k}$$

可以看出, 这种选取方法具有“嵌套”性质, 即 $\Theta_k^j \subset \Theta_{k+1}^j$, 并且由此建立的高维稀疏节点 Θ_ℓ 继承了这种嵌套性质。

基于上述稀疏节点的插值方法被广泛的应用于 UQ 计算之中, 取得了一定的成功 [15-18]。然而, 由于稀疏节点仍然是一种张量节点, 节点个数仍然随着维数增加而快速增加。为了说明这一点, 我们在表格 1 中给出了高维情况下稀疏节点的个数与维数 d 及层数 ℓ 的关系, 以及同指标下 (d, ℓ) 完全多项式空间和张量多项式空间的自由度。注意表格 1 中的张量多项式空间的自由度 p_ℓ^d 实际上也对应了张量积节点的个数。显然, 张量积节点是不可取的一种节点。而稀疏节点确实一定程度上解决了维数祸根问题, 但是, 我们同时注意到, 稀疏节点的节点个数是随着层数 ℓ 跳跃增长的, 这使得我们无法随意的控制所使用的样本点的数量。另一方面, 张量积节点和稀疏节点的节点位置都是由一维节点的选取规则确定的, 我们无法改变节点的位置, 也就是说, 无法使用任意位置的节点。为了直观, 我们在图 2 中给出了两种节点的对比。最后需要强调, 虽然把稀疏节点定义为“结构”样本, 然而, 关于

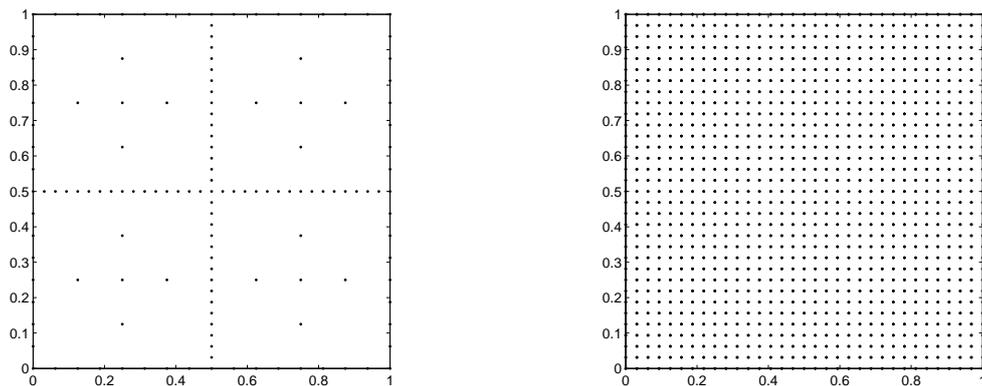


图 2 左图: 由“clenshaw-curtis”选点规则 [16] 生成的稀疏节点 ($\ell=5$)。右图: 同数量一维节点生成的张量积节点。

dimension d	level ℓ	Sparse Grid	t_ℓ^d	p_ℓ^d
10	1	21	11	1024
	2	221	66	59,049
	3	1581	286	1,048,576
20	1	41	21	1,048,576
	2	841	231	$\approx 3.5 \times 10^9$
50	1	101	51	$\approx 1.1 \times 10^{16}$
	2	5101	1326	$\approx 7.2 \times 10^{23}$

表 1 稀疏节点的个数与维数 d 和层数 ℓ 的关系, 以及同指标下 (d, ℓ) 完全多项式空间和张量多项式空间的自由度。

稀疏节点的研究仍然是一个热点, 许多自适应的想法被引入其中 [68-70], 这也是 UQ 研究中的一个活跃方向。

4 离散最小二乘投影

离散最小二乘投影是一种经典的逼近方法, 该方法在众多的应用数学领域有重要应用, 比如计算统计。通常情况下, 我们需要考虑噪声干扰下的最小二乘逼近, 即样本信息受噪声干扰。关于这类问题的研究, 可以参见 [71,72] 及其中的参考文献。在 UQ 的应用中, 我们实际上已经把这些噪声的扰动建模成了相关的随机变量, 于是我们可以假定对于每个样本点 z_m , 可以在没有噪声的干扰下得到解的信息 $u(x, z_m)$ 。注意, 样本信息 $u(x, z_m)$ 的计算同样存在误差, 比如时空离散误差。但这些误差与噪声误差不属同类, 并且, 现代计算方法的研究已经可以很好的控制时空离散误差。于是, 不失一般性, 我们这里考虑基于无噪声样本信息的离散最小二乘投影方法。这类计算方法已经被成功的应用于 UQ 的计算之中 [73-76]。

在离散最小二乘的框架下, 未知系数 \hat{c}_n 通过以下的优化问题确定 (注意这里 $M > N$)

$$u_N := P_M^N u = \arg \min_{p \in \mathbb{P}^N} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M (p(z_m) - u(z_m))^2, \quad (4.1)$$

其中 \mathbb{P}^N 是所使用的多项式逼近空间, 例如完全多项式空间 T_k^d 。为了符号简单, 我们省略了空间变量 x , 即我们考虑模型问题(3.15)。我们引入以下离散内积

$$\langle u, v \rangle_M = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M u(z_m)v(z_m) \quad (4.2)$$

及其诱导的离散范数 $\|u\|_M = \langle u, u \rangle_M^{1/2}$ 。

优化问题 (4.1) 实际上等价于以下代数问题

$$\mathbf{c} = \arg \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^N} \|\mathbf{A}\mathbf{z} - \mathbf{u}\|_2. \quad (4.3)$$

其中 \mathbf{A} 是设计矩阵。上述问题的解也可以通过求解以下的“正规”方程得到

$$\hat{\mathbf{A}}\mathbf{c} = \hat{\mathbf{u}}, \quad (4.4)$$

其中矩阵 $\hat{\mathbf{A}}$ 及向量 $\hat{\mathbf{u}}$ 满足

$$\hat{\mathbf{A}} := \mathbf{A}^\top \mathbf{A} = \left(M \langle \phi_i, \phi_j \rangle_M \right)_{i,j=1,\dots,N}, \quad \hat{\mathbf{u}} := \mathbf{A}^\top \mathbf{u} = \left(M \langle u, \phi_j \rangle_M \right)_{j=1,\dots,N}. \quad (4.5)$$

上述问题是数值代数中标准的最小二乘问题, 我们可以通过基于 QR 分解的算法求解 (4.3), 或者通过基于 Cholesky 分解的算法求解 (4.4)。

通过上面的描述, 我们可以看出, 如何选取样本是离散最小二乘的一个核心问题, 因为这决定了设计矩阵的性质, 从而直接决定计算方法的稳定性和可靠性。我们接下来讨论基于“无结构”样本点的离散最小二乘方法。

4.1 随机抽样

随机抽样方法是一个自然的选择, 并且, 随机抽取的样本满足我们的“无结构”要求, 我们可以控制样本的使用数量。在随机抽样方法中, 样本 $\{z_m\}_{m=1}^M$ 通过概率密度函数 $\rho(Z)$ 随机产生。因此, 产生的设计矩阵 \mathbf{A} 是一个随机矩阵。这种方法已经被成功应用于 UQ 的计算之中 [75,78,79]。在实际计算中, 通常取 2 倍左右的样本, 即 $M = 2N$ 。虽然关于离散最小二乘投影方法的研究有相当长的历史, 但是, 在 UQ 的计算框架下, 其数值分析结果在过去几乎是空白的。

对于有界区域的情形, 文献 [75] 考虑 ρ 是 $[-1, 1]$ 上均匀概率密度的情形 (即 $d = 1$, 且随机参数满足均匀分布), 证明了如果样本点的数量 M 平方的依赖于多项式空间的自由度, 即 $M = cN^2$, 那么离散投影方法以高概率 (With high probability) 稳定, 并且, 离散投影逼近方法的误差可以被多项式空间的最佳逼近误差控制住。文献 [73] 几乎同时给出了更一般的结果:

定理 2 (Cohen, Davenport & Leviatan, [73]) 令 $\rho(Z)$ 是前面讨论的某一概率测度, 其中 $Z \in \Gamma \subset \mathbb{R}^d$ 。令 $\{\phi_\alpha(Z)\}$ 是以测度 $\rho(Z)$ 正交的基函数。考虑任何向下封闭的基函数空间 $\{\phi_i(Z)\}_{i=1}^N$ (注意, 如前所述, 我们使用了字典排序)。记

$$K(N) = \sup_{Z \in \Gamma} \sum_{i=1}^N \phi_i^2(Z).$$

假设 $\{z_i\}_{i=1}^M$ 是根据测度 $\rho(Z)$ 随机产生的样本点。对于任意的 $r > 0$, 如果样本点的个数 M 满足

$$\frac{M}{\log M} \gtrsim rK(N) \quad (4.6)$$

那么基于基函数 $\{\phi_i(Z)\}_{i=1}^N$ 以及随机样本 $\{z_i\}_{i=1}^M$ 所形成的设计矩阵以高概率稳定, 即有

$$\Pr \left[\|\hat{\mathbf{A}} - \mathbf{I}\| \geq \frac{1}{2} \right] \leq 2M^{-r}.$$

上述定理的证明使用了随机矩阵的估计工具。注意, 定理考虑了更一般的概率分布情形。并且, 定理的结果并不限于多项式基函数。如果将上述定理限制为 $d = 1$ 以及 Legendre 基函数的情形 (对应均匀测度), 那么上述定理与文献 [75] 的结果一致, 即需要 $M = cN^2$ 。对于一般的情形, 我们需要考察 $K(N)$ 的增长趋势。比如, 上述结果在文献 [79] 中被具体到高维情形。对于均匀随机参数的情况, 文献 [79] 证明了如果使用高维 Legendre 基函数, 对于任意的向下封闭指标集多项式逼近空间, 平方依赖的样本点个数 ($M = cN^2$) 可以确保离散投影方法以高概率稳定。而考虑 Chebyshev 概率密度 (对于 Chebyshev 基函数), 平方依赖的关系可以被减弱成 $M \sim N^{\frac{3}{2}}$ 。

对于无界区域的情形, 即 $\Gamma = [-\infty, \infty]^d$, 上述的分析方法都遇到困难。比如带有高斯型随机参数的问题, 相关的研究并没有完全展开。文献 [44] 中给出了一些数值结果, 表明在无穷区域上 (使用 Hermite 多项式) 若想保证稳定性几乎是不可能的, 因为所使用的样本点个数需满足 $M \sim N^{cN}$, 这显然是不现实的。文献 [80] 给出了一个解决方案: 使用 Hermite 函数 (Function) 作为基函数取代 Hermite 多项式, 这在谱方法的研究领域是流行的做法。并且, 文献 [80] 使用了映射的均匀分布样本点, 即

$$z(\xi) = \frac{L}{2} \log \frac{1-\xi}{1+\xi}, \quad \xi \in (-1, 1),$$

其中 ξ 是 $[-1, 1]$ 上均匀分布的样本, L 是自由选取的参数。在这个框架下, [80] 给出了如下的稳定性结果:

定理 3 (Tang & Zhou, [80]) 任取 $r > 0$, 假设样本点个数满足 $\frac{M}{\log M} \gtrsim rN$, 并且 $L \gtrsim \sqrt{N}$ 。那么成立如下的稳定性结果:

$$\Pr \left[\|\hat{\mathbf{A}} - \mathbf{I}\| \geq \frac{5}{8} \right] \leq 2M^{-r},$$

其中 $\Pr[\Omega]$ 表示 Ω 发生的概率, $\|\cdot\|$ 表示矩阵的谱范数。

另外, 文献 [80] 还引入了谱方法中的尺度因子 (Scaling) 来加快 Hermite 函数逼近的收敛速度, 即我们寻求如下的展开

$$f(y) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \tilde{H}_n(\alpha z) \Leftrightarrow f\left(\frac{z}{\alpha}\right) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \tilde{H}_n(z), \quad (4.7)$$

其中 \tilde{H}_n 是 Hermite 函数, $\alpha > 0$ 是一个尺度因子。使用尺度因子的想法为了让样本 $\{z_i\}_{i=1}^M$ 充分分布在未知函数的有效区域内。假设当 $|z| > Q$ 时我们有 $f \sim 0$ 。那么我们应该使用如下的尺度因子

$$\max_{1 \leq j \leq m} \{|z_j|\} / \alpha \leq Q \quad \Rightarrow \quad \alpha = \max_{1 \leq j \leq m} \{|z_j|\} / Q. \quad (4.8)$$

这个想法最早在谱方法研究中引入 [77], 并取得了很好的效果。在随机抽样的框架下, 由于 $\{z_i\}_{i=1}^M$ 是随机产生的样本。上面介绍的 α 也许并不有效; 也许存在极少量样本具有很大的绝对值, 这意味着上

面介绍的尺度因子可能会过度压缩样本。鉴于此, 我们试图放弃一些极端的样本, 我们不妨假设样本如下排序

$$|z_1| \leq |z_2| \leq \cdots \leq |z_M|.$$

那么, 我们选择如下的尺度因子

$$\tilde{\alpha} = \max_{1 \leq j \leq \tilde{m}} \{|z_j|\} / Q, \quad \tilde{m} = \lfloor \mu m \rfloor,$$

其中 μ 是一个接近 1 的参数。也就是说, 我们放弃了 $m - \lfloor \mu m \rfloor$ 个可能的极端样本。如上考虑的尺度因子在文献 [80] 中通过数值算例被证明非常有效。然而, 在实际应用中如何选取最优的参数 Q, μ 仍然是需要研究的课题。

4.2 确定性抽样

在随机抽样方法中, 我们注意到, 所有的数值分析结果都是依概率的, 或者是在期望的意义下。因此, 总存在计算失败的概率 (比如不稳定)。然而, 现实情况下, 我们不可能重复操作多次离散投影方法的计算, 而是期待每一次抽取 M 个样本后, 计算都是可靠并稳定的。这促使我们设计高维空间得确定性样本。目前为止, 这类研究结果相对稀少。

最近, 文献 [76, 81] 介绍了如下的确定性样本, 称为 Weil 样本: 假设 $\mathcal{M} > 2k+1$ 是一个素数, Weil 样本通过如下方法产生

$$\Theta_{\mathcal{M}} := \{z_j = \cos(y_j) : \mathbf{y}_j = 2\pi(j, j^2, \dots, j^d) / \mathcal{M}, j = 0, \dots, \lfloor \mathcal{M}/2 \rfloor\}, \quad (4.9)$$

其中 $\lfloor \mathcal{M}/2 \rfloor$ 表示 $\mathcal{M}/2$ 的整数部分。注意上述样本集包含的样本数量是 $M = \lfloor \mathcal{M}/2 \rfloor + 1$ 。实际上, 我们可以证明, 上述方法产生的样本 $\{z_m\}_{m=0}^{M-1}$ 与 $\{z_m\}_{m=M}^M$ 是重合的, 具体的证明可以参见 [81]。为了方便描述, 我们将 Weil 样本的下标重新排序为 1 到 M 。

Weil 样本的设计是受数论中 Weil 指数和定理的启发, 这也是我们称其为 Weil 样本的原因, 为了方便读者, 我们将 Weil 指数和定理介绍如下 [82]:

Weil 定理 假定 \mathcal{M} 是一个素数。令 $f(x) = m_1x + m_2x^2 + \cdots + m_dx^d$, 如果存在 $j, 1 \leq j \leq d$, 使得 $\mathcal{M} \nmid m_j$, 那么有

$$\left| \sum_{j=0}^{\mathcal{M}-1} e^{\frac{2\pi i f(j)}{\mathcal{M}}} \right| \leq (d-1)\sqrt{\mathcal{M}}. \quad (4.10)$$

在文献 [76] 中, 作者证明了 Weil 样本渐进的服从 Chebyshev 分布:

定理 4 (Zhou, Narayan & Xu, [76]) 令 Θ_{M_K} 是由第 K 个素数所确定的 Weil 样本集合 $\{x_{j,K}\}_{j=1}^{M_K}$ 。对于每一个 K , 我们定义相关样本 Θ_{M_K} 的测度如下:

$$\rho_K := \frac{1}{M_K} \sum_{j=1}^{M_K} \delta(x_{j,K}),$$

其中 $\delta(x)$ 是通常的狄拉克函数。令 ρ_c 是正规化的 Chebyshev 测度, 那么随着 $K \rightarrow \infty$, 在分布意义下成立 $\rho_K \rightarrow \rho_c$ 。

现在, 我们考虑基于 Weil 样本的离散投影算法, 我们首先假设随机参数服从 Chebyshev 分布。自然的, 我们使用高维的 Chebyshev 多项式作为基函数。进而, 我们可以给出矩阵 $\hat{\mathbf{A}} = [\hat{a}_{i,j}]$ 元素的相关估计 [76]:

$$\hat{a}_{i,j} \leq \frac{(d-1)\sqrt{M}+1}{2}, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (4.11)$$

$$\frac{\mathcal{M}}{2^{d+1}} - \frac{(d-1)\sqrt{\mathcal{M}}}{2} \leq \hat{a}_{i,i} \leq \frac{\mathcal{M}}{2^{d+1}} + \frac{(d-1)\sqrt{\mathcal{M}}}{2}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.12)$$

上述估计的证明需要使用 Weil 指数和定理。结合上面的估计和圆盘定理, 可以得到如下的稳定性结果, 并进而得到最近逼近分析结果:

定理 5 (Zhou, Narayan & Xu, [76]) 考虑由 Chebyshev 基函数和 Weil 样本定义的正规矩阵 $\hat{\mathbf{A}}$, 如果 $M \geq C(d)N^2$, 那么有如下的稳定性结果

$$\left\| \frac{2^{d+1}}{M} \hat{\mathbf{A}} - \mathbf{I} \right\| \leq \frac{1}{2},$$

其中 $\|\cdot\|$ 是矩阵的谱范数, \mathbf{I} 是 $\mathbb{R}^{N \times N}$ 的单位矩阵, $C(d)$ 是一个依赖于维数 d 的常数。若令 $f(Z) \in L^2_\rho(\Gamma)$, $P^N f, P^N_M f$ 分别是 $f(Z)$ 在 Chebyshev 多项式空间 \mathbb{P}_N 中的最佳逼近和离散最小二乘逼近 (通过使用 Weil 样本)。那么成立如下的估计

$$\|f - P^N_M f\|_{L^2_\rho} \leq C \|f - P^N f\|_{L^\infty}.$$

即离散投影的误差可以被最佳逼近误差控制。

可以看出, 上面的稳定性和收敛性结果都是“确定性”的, 而非在期望意义下或者是以高概率成立。也就是说, 只要满足我们要求的条件 $M \geq C(d)N^2$, 基于 Weil 样本的离散投影方法就是稳定的, 并且可以达到最佳逼近的效果。但是, 这里的样本个数和多项式空间自由度是一个平方依赖关系, 而不是使用随机样本时的 $M \sim N^{\frac{2d+3}{2}}$ [79]。不过, 这个瓶颈只体现在理论分析的框架上, 我们随后将通过数值例子证明 Weil 样本和随机样本有着同样的表现。

在上述讨论中, 我们假定了随机参数服从 Chebyshev 分布。对于一般的随机分布, 为了使用 Weil 样本, [76] 介绍了加权的离散最小二乘:

$$P^N_{M,w} u = \min_{p \in \mathbb{P}_N} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M w_m (u(z_m) - p(z_m))^2, \quad (4.13)$$

其中 $\{w_m\}_m$ 是权重。引入加权离散内积

$$\langle u, v \rangle_{w,M} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M w_i u(z_i) v(z_i) \quad (4.14)$$

及其导出的加权离散范数 $\|u\|_{w,M} = \langle u, u \rangle_{w,M}^{1/2}$ 。

定理 4 为我们设计权重提供了重要依据。考虑原始的最小二乘问题 $w_i \equiv 1$, 随着 $M \rightarrow \infty$, 样本序列 $\{z_m\}$ 服从 Chebyshev 分布 ρ_c 。因此成立如下的渐进关系

$$\|u\|_{w,M}^2 = \|u\|_M^2 = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M u^2(z_i) \simeq \int_{\Gamma} u^2(Z) \rho_c(Z) dZ.$$

因此, 在之前的讨论中, 我们自然使用 Chebyshev 逼近。如果考虑一般的多项式逼近, 即

$$u_N(Z) = \sum_{j=1}^N \hat{c}_j \phi_j(Z),$$

其中 $\{\phi_j\}$ 是以权函数 $\rho(Z)$ 正交的一般多项式。由于基函数以权 ρ 正交, 我们需要调整权重以便

$$\|u\|_{w,M}^2 = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M w_m u^2(z_m) \simeq \int_{\Gamma} u^2(Z) \rho(Z) dZ.$$

注意, 我们仍使用 Weil 样本 $\{z_m\}$ (渐进服从 Chebyshev 分布)。因此, 我们调整权重如下

$$w_m = \frac{\rho(z_m)}{\rho_c(z_m)} = \pi^d \rho(z_m) \prod_{q=1}^d \left(1 - (z_m^q)^2\right)^{1/2},$$

其中 z_m^q 是向量 z_m 的第 q 个元素。以均匀分布作为特例: 即 $\rho(Z) \equiv 2^{-d}$, 我们需要做如下调整:

$$w_m = \frac{\rho(z_m)}{\rho_c(z_m)} = (\pi/2)^d \prod_{q=1}^d \left(1 - (z_m^q)^2\right)^{1/2}. \quad (4.15)$$

这种加权的最小二乘也相当于对设计矩阵做一个预条件子, 相关的研究也广泛出现于 ℓ^1 - 优化之中 [82]。需要指出, (4.15) 和统计和工程应用中的重要性抽样有紧密联系 [83]。

注2 注意上面讨论的确定点是针对于有界区域设计的, 如何对于无穷区域问题涉及有效的确定点, 是一个值得研究的课题。

注3 加权最小二乘也适用于其他类型样本, 比如随机样本。比如考虑 Legendre 逼近, 但通过 Chebyshev 测度产生样本, 我们仍然可以使用上面介绍的加权最小二乘, 这种框架在压缩感知中也是常用的技巧。另外, 拟随机 (Quasi Mento Carlo, QMC) 样本, 作为一种确定性样本, 也可以在离散投影算法中发挥重要作用, 参见文献 [84-86]。特别的, 在文献 [84] 中, 作者分析了使用 QMC 样本的离散投影的稳定性, 其分析结果显示, 稳定性条件需要 $M \sim N^4$, 这显然不能接受, 然而, 这个结果仅限于数值分析, 因为 QMC 样本与随机样本具有相似的数值表现。这同时意味着在数值分析上, 稳定性条件 $M \sim N^4$ 还有巨大的改进空间。

4.3 结构随机样本

下面我们介绍一种介于随机样本和确定性样本之间的样本: 结构随机样本。我们之前提到, 基于一维 Gauss 求积节点的张量积节点并不适合实际应用, 因为样本点的数量随着随机参数的维数呈指数跳跃增长 (见表格 1)。然而在理论上, 这种节点由于其较高的代数精度具有一定的优势。我们这里探讨使用这种样本的可能性。基本想法是通过随机选取其中的一部分样本, 把这种“结构”样本转化成“非结构”的样本。

我们现在来描述这个想法: 假设我们想在双曲多项式空间 H_k^d 中寻求对于 $u(Z)$ 的逼近。即

$$u(x) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}_{d,k}^H} \hat{c}_\alpha \phi_\alpha(x) = \sum_{n=1}^N \hat{c}_n \phi_n(x), \quad (4.16)$$

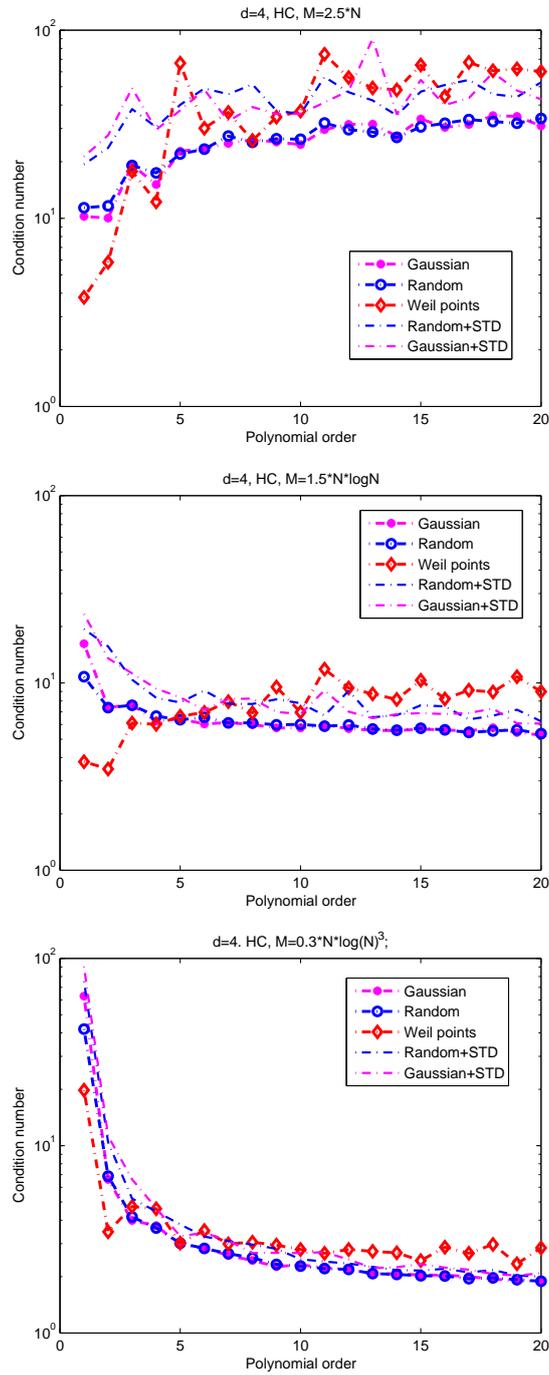


图 3 四维双曲多项式空间对于不同样本点的设计矩阵的条件数随着多项式阶数 k 的变化情况。上图: $M = \frac{5}{2}N$. 中图: $M = \frac{3}{2}N \log N$. 下图: $M = 0.3N \log^3 N$

展开的多项式项数是 $N = |\mathcal{I}_{d,k}^H| = h_k^d$ 。不失一般性, 我们假设 $\{\phi_n(x)\}$ 是 Chebyshev 多项式基函数。实际上, 上述逼近也可以看作是在张量积空间 P_k^d 的逼近

$$u(x) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}_{d,k}^P} \hat{c}_\alpha \phi_\alpha(x), \quad \hat{c}_\alpha = 0 \text{ if } \alpha \in \mathcal{I}_{d,k}^P \setminus \mathcal{I}_{d,k}^T. \quad (4.17)$$

也就是说, 在张量积空间的许多展开系数是 0, 这有些类似于压缩感知中的“稀疏表示”。我们将在后面的章节中对这个概念做详细的讨论。

令 $\{z_m, w_m\}_{m=1}^{\mathcal{M}}$ 是张量积 Chebyshev 多项式空间所对应的张量积高斯节点及对应的权, 其中 $\mathcal{M} = p_k^d = (k+1)^d$ 。如果我们通过使用张量积高斯节点给出设计矩阵,

$$\tilde{\mathbf{A}} = \left(\phi_n(z_m) \right)_{n=1, \dots, N, m=1, \dots, \mathcal{M}} \in \mathbb{R}^{\mathcal{M} \times N},$$

并且考虑一个使用权重给出的预条件矩阵:

$$\tilde{\mathbf{W}} = \text{diag}(\sqrt{w_1}, \dots, \sqrt{w_{\mathcal{M}}}).$$

那么, 根据张量积高斯节点的代数精度, 我们有

$$(\tilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{A}})^\top (\tilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{A}}) = \mathbf{I}.$$

然而, 张量积节点是典型的结构性网格点, 网格点的数量随着维数的增加呈指数增长 (\mathcal{M} 很大, 且 $N \ll \mathcal{M}$), 现实中并不被采用。因此, 我们考虑通过随机选取方式, 选取使用其中的 M 个节点及其对应的权

$$N < M \leq \mathcal{M}. \quad (4.18)$$

从而得到相关的随机设计矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ 及预条件矩阵 $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{M \times N}$, 并考虑如下的最小二乘问题

$$\mathbf{c} = \arg \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^N} \|\mathbf{W}\mathbf{A}\mathbf{z} - \mathbf{W}\mathbf{u}\|_2. \quad (4.19)$$

我们提醒读者注意上面 M 和 \mathcal{M} 的区别, 并注意随机选取一部分样本等价于随机选取较大矩阵 $\tilde{\mathbf{A}}$ 的一部分行向量。我们期待这些随机选取的张量积节点对于双曲多项式空间 (完全多项式空间可以同样考虑) 的离散投影具有良好的性质。

这个想法是文献 [87] 介绍的, 并给出了以下的稳定性分析:

定理 6 (Zhou, Narayan & Xiu, [87]) 如果通过上述讨论所选出的样本点的个数满足

$$\frac{M}{\log M} \geq C(d)\mu N, \quad (4.20)$$

则设计矩阵满足以下稳定性条件

$$\left\| \frac{1}{M} \mathbf{A}^\top \mathbf{A} - \mathbf{I} \right\| \leq \frac{1}{2} \quad (4.21)$$

的概率不低于 $1 - M^{1-\mu}$, 其中 $\mu > 1$ 是一个常数。

注意, 上述的估计基本上是一个线性的依赖关系 (相差一个 \log 项)。另外, 我们强调, 这个框架并不限于 Chebyshev 分布, 实际上, 文献 [87] 提供的一般性的框架, 其理论结果包含通常的有界区域的分布类型, 包括均匀分布, Beta 分布; 也包括无穷区域的分布, 比如 Gaussian 分布, Gamma 分布。

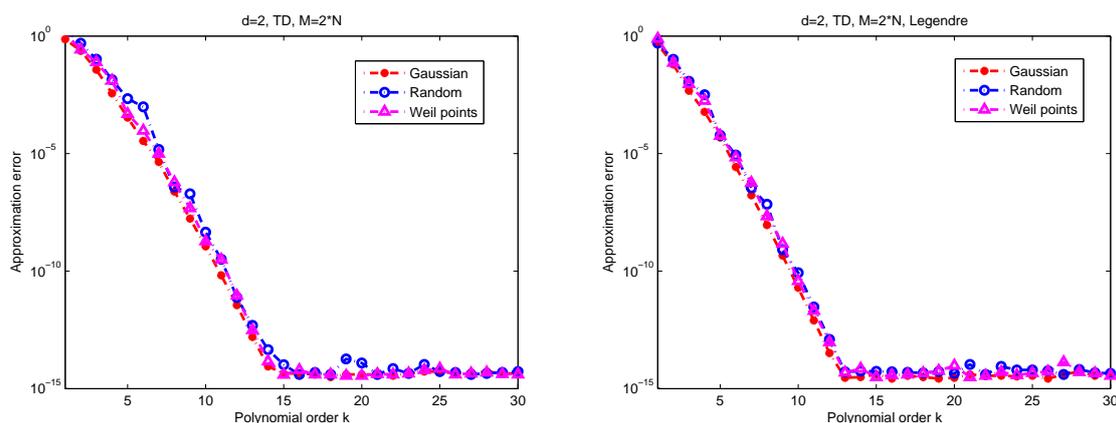


图 4 二维完全多项式空间的逼近误差。左图: Chebyshev 逼近。右图: Legendre 逼近。

4.4 数值算例

在这一节中,我们将提供一些数值算例来测试离散投影方法的稳定性和收敛性。测试中我们将使用上面讨论的三种样本。我们首先来测试稳定性,这需要考察如下矩阵的条件数: $\text{cond}(\hat{\mathbf{A}}) = \frac{\sigma_{\max}(\hat{\mathbf{A}})}{\sigma_{\min}(\hat{\mathbf{A}})}$ 。在图 3 中,我们呈现了四维双曲多项式空间中 (Chebyshev 基函数),条件数随多项式阶数增长的变化关系。注意,当使用随机样本以及结构随机样本时,上述定义的条件数是一个随机变量,在这些情况下,我们将重复 200 次试验,进而呈现平均意义下的条件数。在图中,我们使用 Gaussian 表示基于结构随机点得到的数值结果,使用 Random 表示基于随机样本产生的数值结果。而使用 Weil 样本得到的数值结果,我们用 Weil points 表示。同时,我们呈现了两种随机样本的条件数的上界,用相应的虚线画出。在图 3 (上),我们考虑线性依赖关系 $M = \frac{5}{2}N$,图 3 (中)考查拟线性依赖关系 $M = \frac{3}{2}N \log N$,而在下图中,我们使用 $M = 0.3N \log^3 N$ 。

首先可以看出,所测试的三种抽样方法具有非常相似的表现。即,拟线性的依赖关系 (log-线性,中图和下图)使得条件数得到良好的控制,并且对于 $M = 0.3N \log^3 N$ 情形,条件数随多项式阶数呈下降趋势。然而,线性的依赖关系 (上图)使得条件数随着多项式阶数的增长而增长。另外,在前两幅图中,Weil 样本稍逊于随机样本 (但基本和随机样本的上界吻合),然而,我们已经说明,Weil 样本作为确定样本,可以得到非概率意义下的数值分析结果。另外可以看出,log-线性依赖关系已经很好的控制了条件数的增长,因此,文献 [85] 提供了很精确 (Sharp) 的估计结果,而文献 [76,79] 中的估计结果也许存在很大的改进空间。

接下来我们测试算法的收敛性,并采用以下的函数 $u(Z) = \exp^{-\sum_{i=1}^d c_i Z_i}$ 作为测试函数,其中 $\{c_i\}$ 是随机产生的一些常数。我们将呈现 L^∞ 范数意义下的逼近误差,这将通过计算在 2000 个随机生成的样本点上的误差得到。在图 4 中,我们给出了二维完全多项式空间的逼近性质,即随着多项式阶数 k 增加,逼近误差的表现。左图考虑的是 Chebyshev 分布,使用 Chebyshev 多项式作为基函数。右图中,我们考虑均匀分布的情形,相应的基函数是 Legendre 多项式。注意,在这种情况下,如果我们使用“Chebyshev”类型样本 (随机 Chebyshev 样本,Weil 样本,随机选取的 Chebyshev 高斯点),需要计算加权的离散最小二乘投影。我们使用在应用中比较实际的线性依赖关系,即 $M = cN$ 。从图中可以看出,线性的依赖关系使得算法随着多项式阶数的增加达到指数收敛的效果,收敛误差达到了

机器精度。然而, 需要指出的是, 收敛性的恶化 (Blow Up) 也许会在更高的多项式阶数以后出现。

注4 以上的数值结果表明, 拟线形的依赖关系 $M \sim N \log N$ 似乎可以保证算法的稳定性。这从一定程度上说明, 我们介绍的关于 Weil 样本的稳定性分析仍然很粗糙, 并没有达到最优。这个问题实际上可以转化为一个“初等问题”: 考虑由 Weil 样本 (4.9) 以及 Chebyshev 基函数所形成的设计矩阵 $\hat{\mathbf{A}}$, 如何证明定理 5 在条件 $M \sim N \log N$ 下成立? 事实上, 这个结论已经在数值试验中得到验证, 但目前所采用的矩阵元素的估计和圆盘定理也许都不是最好的选择。并且, 在 Weil 样本的框架下, 对于加权最小二乘的稳定性分析仍然空白, 因为由于基函数的更换, 我们似乎无法再使用 Weil 定理对矩阵的元素进行估计, 这也是一个值得思考的课题。另外, 关于随机样本的证明结果 $M \sim N^{\frac{3}{2}}$ 也有一定的改进空间。

5 压缩感知方法

压缩感知是近来国际上热门的研究方向, 并且已经被应用于多个领域, 比如医学成像、图像处理等等 [88-92]。压缩感知的主要思想为: 利用信号稀疏性的特征, 通过尽量少的观测信息恢复信号。在我们讨论的框架下, 这意味着样本点的数量少于多项式逼近空间的自由度 ($M < N$)。压缩感知试图寻找“稀疏解”, 在 UQ 应用中, 这要求所求解的问题在多项式逼近空间有着稀疏展开 (或展开系数只有一小部分起重要作用), 幸运的是, 很多 UQ 实际问题包括模型问题 (2.15) 都满足这一要求 [33,35,93]。

我们接下来讨论基于压缩感知工具的随机配置方法, 寻求未知系数 \mathbf{c} 的稀疏逼近, 一个自然的想法是求解以下优化问题:

$$\mathbf{P}_0 : \min \|\mathbf{c}\|_0 \text{ s. t. } \mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{u}, \quad (5.1)$$

其中 $\|\mathbf{c}\|_0 : \#\{\alpha : \hat{c}_\alpha \neq 0\}$ 是向量 \mathbf{c} 非零元素的个数。在通常情况下, 上述优化问题 \mathbf{P}_0 的求解并不平凡, 事实上, \mathbf{P}_0 是一个 NP 完全问题。为了突破这个瓶颈, 研究者提出了许多解决方案。比如, 将上述的优化问题 \mathbf{P}_0 凸化, 寻求 ℓ_1 -范数最小意义下的稀疏解 \mathbf{c} , 即

$$\mathbf{P}_1 : \min \|\mathbf{c}\|_1 \text{ s. t. } \mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{u}, \quad (5.2)$$

其中 $\|\mathbf{c}\|_1$ 就是通常的 ℓ_1 -范数。优化问题 \mathbf{P}_1 可等价描述为线性规划, 求解相对简单。并且, 可以证明, 如果矩阵 \mathbf{A} 满足某种条件, 比如 RIP 条件 (我们将在后面讨论), 那么问题 \mathbf{P}_0 和问题 \mathbf{P}_1 等价 [88,89]。

在实际应用中, 为了考虑截断误差或数据的噪声误差影响, 可以把上述的优化问题转化成以下的优化问题 (Basis Pursuit Denoising):

$$\mathbf{P}_{i,\varepsilon} : \min \|\mathbf{c}\|_i \text{ s. t. } \|\mathbf{A}\mathbf{c} - \mathbf{u}\|_2 \leq \varepsilon, \quad i = 0, 1.$$

在接下来的讨论中, 我们将只考虑 ℓ_1 优化问题 (5.2)。为了方便描述, 我们首先定义对 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^N$ 在 ℓ_p -范数意义下的最佳 s 项逼近

$$\sigma_{s,p}(\mathbf{v}) = \inf_{\|\mathbf{y}\|_0 \leq s} \|\mathbf{y} - \mathbf{v}\|_p \quad (5.3)$$

显然, 如果 \mathbf{v} 是 s -稀疏的 (或者说, 稀疏度是 s), 即 $\|\mathbf{v}\|_0 \leq s$, 那么有 $\sigma_{s,p}(\mathbf{v}) = 0$ 。令 \mathbf{A} 是一个 $M \times N$ 矩阵, 我们给出定义:

如果存在正常数 $\delta_s < 1$, 使得对稀疏度不高于 s 的任何向量 $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^M$ 都成立下式:

$$(1 - \delta_s) \|\mathbf{c}\|_2^2 \leq \|\mathbf{A}\mathbf{c}\|_2^2 \leq (1 + \delta_s) \|\mathbf{c}\|_2^2, \quad (5.4)$$

我们称矩阵 \mathbf{A} 是以 δ_s 为 RIP (Restricted Isometry Property) 常数的 s -阶 RIP 矩阵。

对 RIP 矩阵, 成立如下结果 [88]:

引理 1 如果 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ 的 s -阶 RIP 常数满足 $\delta_s \leq 0.307$ 。对于一个给定的 $\tilde{\mathbf{c}} \in \mathbb{R}^N$, 令 $\mathbf{c}^\#$ 是以下 ℓ_1 -优化问题的解

$$\mathbf{c}^\# = \arg \min \|\mathbf{c}\|_1 \text{ s. t. } \mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{A}\tilde{\mathbf{c}}. \quad (5.5)$$

那么成立以下的估计

$$\|\mathbf{c}^\# - \tilde{\mathbf{c}}\|_2 \leq C \frac{\sigma_{s,1}(\tilde{\mathbf{c}})}{\sqrt{s}}, \quad (5.6)$$

其中 $C > 0$ 是一个依赖于 δ_s 的常数。特别的, 如果 $\tilde{\mathbf{c}}$ 是 s 稀疏的, 我们有 $\mathbf{c}^\# = \tilde{\mathbf{c}}$ 。

5.1 随机抽样

根据前面的讨论可以看出, 如何选取样本使得设计矩阵具有良好性质 (比如 RIP 性质), 是压缩感知算法的一个关键问题, 这和离散投影方法类似。在压缩感知的研究中, 我们知道, 可以通过随机抽样的方法构造良好的 RIP 矩阵, 参考文献 [88-90,92,94]。然而, 上述文献都针对稀疏 Fourier 展开的重构。在 UQ 的计算中, 我们更关心一般的代数多项式基函数, 比如 Legendre 多项式, Chebyshev 多项式等等。最近, 许多研究者将压缩感知的思想应用于 UQ 的计算之中, 使用随机抽样方法, 取得了一定的成功, [95,96]。相关的理论研究工作也开始展开, 文献 [97] 研究了对一维稀疏 Legendre 多项式的重构算法, 文献 [97] 以 RIP 矩阵及逼近论中有界正交多项式系统为根基:

引理 2 令 $\{\phi_n\}_n$ 是一个以 ρ 正交的有界正交基函数系统, 且

$$\sup_n \|\phi_n\|_\infty = \sup_n \sup_z |\phi_n(z)| \leq L, \quad (5.7)$$

其中 $L \geq 1$ 。令 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ 为设计矩阵, 它的元素满足 $\{a_{n,m} = \phi_{n-1}(z_m)\}_{1 \leq n \leq N, 1 \leq m \leq M}$, 其中 $\{z_m\}_{m=1}^M$ 是使用测度 ρ 所产生的随机样本。如果样本数量满足

$$M > C\delta^{-2}L^2s \log^3(s) \log(N), \quad (5.8)$$

那么正规化的设计矩阵 $\frac{1}{\sqrt{M}}\mathbf{A}$ 的 s -阶 RIP 常数 δ_s 以高概率 $1 - N^{-\gamma \log^3(s)}$ 满足 $\delta_s \leq \delta$ 。其中 $C, \gamma > 0$ 是绝对常数。

由上述引理, 文献 [97] 给出了关于一维稀疏 Legendre 多项式的重构结果:

定理 7 (Rauhut & Ward, [97]) 考虑一维 Legendre 多项式 $\{L_n\}$ 的设计矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$, 其元素满足

$$\{a_{m,n} = L_n(z_m)\}_{1 \leq n \leq N, 1 \leq m \leq M},$$

令 \mathbf{W} 为对角矩阵, 其对角元素满足 $\{w_{m,m} = (\pi/2)^{-1/2}(1 - z_m^2)^{1/4}\}_{1 \leq m \leq M}$, 其中 $\{z_m\}_{1 \leq m \leq M}$ 是由 Chebyshev 测度产生的随机样本。令 $u(z) = \sum_{n=1}^N \hat{c}_n L_n$ 是一个任意的多项式函数。如果样本数量满足

$$M > Cs \log^3(s) \log(N), \quad (5.9)$$

那么通过计算以下的 ℓ_1 -优化问题

$$\mathbf{c}^\# = \arg \min \|\mathbf{c}\|_1 \quad \text{subject to} \quad \mathbf{W}\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{W}\mathbf{A}\tilde{\mathbf{c}}. \quad (5.10)$$

我们能够以高概率 $1 - N^{-\gamma \log^3(s)}$ 在最佳 s 项逼近的意义下重构 $\tilde{\mathbf{c}} = (\hat{c}_1, \dots, \hat{c}_n)$, 即

$$\|\mathbf{c}^\# - \tilde{\mathbf{c}}\|_2 \leq \frac{C\sigma_s(\tilde{\mathbf{c}})_1}{\sqrt{s}}. \quad (5.11)$$

其中 $C, \gamma > 0$ 是绝对常数。特别的, 如果 $\tilde{\mathbf{c}}$ 是 s 稀疏的, 我们可以得到精确的重构。

注意, 在上述定理中, 虽然我们考虑的是 Legendre 逼近 (相关的测度是均匀测度), 但使用了通过 Chebyshev 测度产生的随机样本 (并没有使用均匀测度产生得样本), 并设计了一个预条件的 ℓ_1 -优化问题。这是受正交多项式的性质启发, 因为我们知道, Legendre 多项式并不是一致有界的 ($\max_z |L_n(z)| \sim \sqrt{n}$), 然而, Chebyshev 多项式满足一致有界的条件, 并且, 如下的估计成立 [98,100]:

引理 3 对于任意的 $n \geq 1$ 和 $z \in [-1, 1]$, 有

$$(1 - z^2)^{1/4} |L_n(z)| \leq \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{1 + \frac{1}{2n}}. \quad (5.12)$$

也就是说, 经过上述变换的 Legendre 多项式是一致有界的。因此, 以引理 2 为出发点, 在定理 7 中, 我们使用了 Chebyshev 随机样本及相关的预条件矩阵 \mathbf{W} 。并且, 数值表明, Chebyshev 随机样本比均匀分布的样本有更好的表现 [97]。

上述结果是针对于一维问题给出的, 文献 [99] 将上面的结果推广到了高维情形, 我们首先给出文献 [99] 的主要定理, 然后再加以讨论:

定理 8 (Yan, Guo & Xiu, [99]) 假定 $\{\phi_n\}_{n=1}^N$ 是完全多项式空间的 Legendre 基函数。令 $u(Z) = \sum_{n=1}^N \hat{c}_n \phi_n$ 是一个任意的多项式函数。考虑 Legendre 设计矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$, 它的元素满足

$$\{a_{n,m} = \phi_n(z_m)\}_{1 \leq n \leq N, 1 \leq m \leq M},$$

其中的样本点 $\{z_m\}_{1 \leq m \leq M}$ 是通过均匀测度产生的随机样本。如果

$$M > 3^k s \log^3(s) \log(N), \quad (5.13)$$

那么通过计算 ℓ_1 -优化问题 (5.5), 能够以高概率 $1 - N^{-\gamma \log^3(s)}$ 在最佳 s 项逼近的意义下重构 $\tilde{\mathbf{c}} = (\hat{c}_1, \dots, \hat{c}_n)$ 。如果 $\tilde{\mathbf{c}}$ 是 s 稀疏的, 可以得到精确的重构。

如果考虑预条件矩阵 \mathbf{W} , 其元素满足

$$w_{m,m} = \prod_{q=1}^d (\pi/2)^{-1/2} (1 - (z_m^q)^2)^{1/4}, \quad m = 1, \dots, M,$$

并且使用通过 Chebyshev 分布产生的随机样本 $\{z_m\}_{1 \leq m \leq M}$, 且如果

$$M > 2^d s \log^3(s) \log(N), \quad (5.14)$$

那么我们可以通过求解预条件的 ℓ_1 -优化问题 (5.10), 以高概率 $1 - N^{-\gamma \log^3(s)}$ 在最佳 s 项逼近的意义下重构 $\tilde{\mathbf{c}} = (\hat{c}_1, \dots, \hat{c}_n)$ 。如果 $\tilde{\mathbf{c}}$ 是 s 稀疏的, 我们可以得到精确的重构。

定理 8 既考虑了均匀抽样的重构性质, 也考虑了通过 Chebyshev 抽样 (预条件的优化问题) 的重构性质。并且容易看出, 在高维情形下, 即 $d \gg k$, 预条件的 Chebyshev ℓ^1 -优化也许没有直接的 ℓ^1 -优化算法高效, 因为此时我们有 $2^d > 3^k$ 。这 and 低维问题 (比如一维) 有很大的不同, 在一维的情形, 预条件的 Chebyshev ℓ^1 -优化比直接的 ℓ^1 -优化算法高效的多 [97]。

最后我们指出, 随着压缩感知算法的快速发展, 出现了很多改进的 ℓ^1 -优化算法, 这些算法同样可以应用到 UQ 的计算之中, 感兴趣的读者可以参见 [101]。

5.2 确定性抽样

虽然随机抽样在压缩感知的算法中非常流行, 然而, 在实际应用中, 确定性抽样方法在存储及工程设计中都有一定的优势。目前关于确定性抽样的工作, 同样主要集中在重构稀疏的傅立叶展开 [102-105]。对于 UQ 计算中关心的代数多项式, 比如 Chebyshev 多项式, 确定性抽样的结果非常稀少。

文献 [81] 中考虑使用 Weil 样本来重构稀疏的 Chebyshev 多项式。通过分析设计矩阵的列相干性质, 证明了 ℓ^1 -优化可以重构任意 s 稀疏的 Chebyshev 多项式, 即:

定理 9 (Xu & Zhou, [81]) 假设 $u = \sum_{\alpha \in \Lambda} c_\alpha \phi_\alpha$ 是 $P(\Lambda)$ 中的任意的 Chebyshev 多项式函数, \mathbf{c} 是相应的展开系数, 其中 $P(\Lambda)$ 是任意的向下封闭多项式空间, 比如张量空间或者完全多项式空间, Λ 是相应的多重指标集合。如果 $M \geq C(\Lambda)s^2$ 是产生 Weil 样本使用的素数, 假设 $\mathbf{c}^\#$ 是相关稀疏优化问题 (5.2) 的解 (基于 Chebyshev 基函数和 Weil 样本), 那么成立如下估计:

$$\|\mathbf{c}^\# - \mathbf{c}\|_2 \lesssim \frac{\sigma_{s,1}(\mathbf{c})}{\sqrt{s}}.$$

注意, 相比于随机抽样的理论分析结果, 平方依赖关系 $M \geq C(\Lambda)s^2$ 显然不令人满意。这个瓶颈也出现在其他确定性抽样方法中, 比如重构稀疏傅立叶展开 [104]。不过, 我们将在后面的数值例子中说明, 确定性抽样方法和随机抽样方法具有同样的数值表现。Weil 样本的有效性并不令人惊讶, 因为 Weil 样本渐进的服从 Chebyshev 分布 (定理 4)。并且, 文献 [81] 介绍了预条件的 ℓ^1 优化算法, 使得可以使用 Weil 来处理不同类型的稀疏多项式, 具体细节可以参见 [81]。

5.3 结构随机样本

在压缩感知的应用中, 同样存在一种介于确定性样本与随机样本之间的选择: 结构随机样本。与确定性样本相比, 结构随机样本多了些随机性, 使得我们可以证明其相关的结构随机矩阵具有较好的 RIP 性质, 同时, 结构随机样本形成的结构随机矩阵的随机性较弱, 一般仅具有行向量随机。更为重要的是, 在很多实际应用中, 已知的观测矩阵通常为一结构随机矩阵, 比如部分 Fourier 矩阵, 参见 [90,94]。

在 UQ 的计算框架下, 结构随机样本指的是使用随机选取一部分高斯求积节点 (注意, 高斯求积节点是由多项式空间决定的确定性样本), 如同离散投影算法。我们不过多重复细节, 感兴趣的读者可以参见 [106]。下一节中, 我们将最后通过数值算例给出结构随机样本的数值表现。

5.4 数值算例

接下来, 我们提供一些简单的数值算例, 来验证基于压缩感知的随机配置方法的数值表现。为了简便, 我们将目标函数取做稀疏多项式, 即 $u = \sum_{\alpha} \hat{c}_\alpha \phi_\alpha$, 并观察在使用不同抽样方法 (随机抽样, Weil 样本, 结构随机样本) 时 ℓ^1 -优化算法的数值表现。我们将同样测试预条件的 ℓ^1 -优化算法。

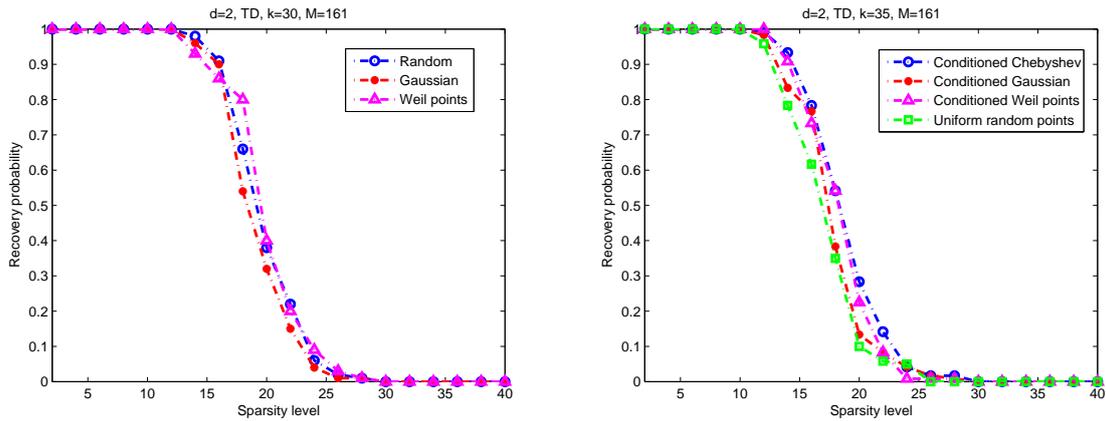


图 5 随着稀疏度 s 增长，重构概率的变化 ($d = 2$)。左图：稀疏 Chebyshev 多项式。右图：稀疏 Legendre 多项式。

我们首先固定一个稀疏度 s ，注意 $s < N$ ，然后随机产生 s 个非零系数，并令其他的展开系数为 0，从而得到一个 s 稀疏的多项式（目标函数）。上面的过程将重复 200 次，并使用 ℓ_1 优化算法对多项式进行重构，记录重构的概率。重构成功的标准定为 $\|\mathbf{c}^\# - \tilde{\mathbf{c}}\|_\infty \leq 10^{-3}$ 。对于 ℓ_1 -优化问题的计算，我们使用现成的应用程序 SPGL1 [107]。

首先考虑一个低维算例：二维的完全多项式空间。在图 5（左）中，我们考虑稀疏 Chebyshev 多项式的重构，其中多项式阶数是 $k = 20$ ，所使用的样本点的个数固定为 $M = 74$ 。图中呈现了随着稀疏度 s 增加，算法重构多项式的成功概率。可以看出，重构概率从 1 变为 0。三种抽样方法（随机抽样，Weil 样本，结构随机样本）具有相似的数值表现。在图 5（右）中，我们考虑稀疏 Legendre 多项式的重构，相关的参数为 $k = 35$ 和 $M = 66$ 。注意，在数值试验中，对于 Weil 样本 (Δ)，Chebyshev 随机点 (\circ) 和随机抽取的 Chebyshev 高斯点 ($*$)，我们需要计算预条件的 ℓ_1 优化算法。我们同时测试了均匀随机样本 (\square) 的数值表现。可以看出，在这个低维的测试中，使用预条件的算法稍微优于直接的 ℓ_1 优化算法（即直接使用均匀样本），这和 [97] 中的理论结果一致。

接下来我们进行较高维数的测试 ($d = 20$)，我们仍然考虑完全多项式空间。在图 6（左）中，我们考虑稀疏 Chebyshev 多项式的重构，多项式阶数是 $k = 3$ ，我们固定样本个数为 $M = 169$ 。同样，三种抽样方法具有一致的数值表现。在图 6（右）中，我们考虑稀疏 Legendre 多项式的重构，相关的参数为 $k = 4$ 和 $M = 99$ 。注意，对于 Weil 样本 (Δ)，Chebyshev 随机点 (\circ) 和随机抽取的 Chebyshev 高斯点 ($*$)，我们同样需要计算预条件的 ℓ_1 优化算法。我们同时测试了均匀随机样本的 (\square) 的数值表现（无需预条件）。可以看出，在这个高维的测试中，无需预条件的均匀随机样本的表现远优于预条件的算法，这和 [106] 中的理论结果一致（定理 7），实际上，我们有 $3^k \ll 2^d$ 。另外，我们注意到，在预条件的框架下，结构随机抽样（Chebyshev 高斯点 $*$ ）较其他的抽样方法具有一定的优势。

6 高维插值

这一节中，我们讨论高维插值问题，为了适应实际需求，我们希望可以任意使用任意个数，任意分布

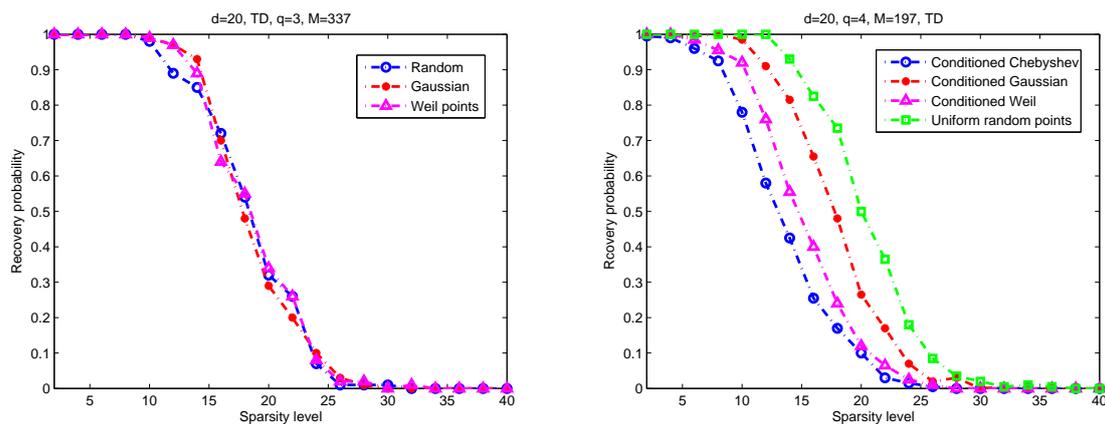


图 6 随着稀疏度 s 的增长, 重构概率的变化 ($d = 20$)。左图: 稀疏 Chebyshev 多项式。右图: 稀疏 Legendre 多项式。

的插值节点。我们知道, 当 $d = 1$ 时, 任意不同的 $M + 1$ 个节点可以唯一确定一个 M 阶多项式。然而 $d \geq 2$ 时, 基于任意节点的插值是一个非常有挑战的问题。

6.1 最小插值 (Least interpolation)

首先, 我们简单介绍“最小插值”方法, 注意, 这里我们要求 $M = N$ 。我们关心的是: 对于任意 N 个不同的高维空间配置点 $\{z_1, \dots, z_N\}$ 及函数值信息 $\{u_n = u(z_n)\}_{n=1}^N$, 如何找到多项式 $p(Z)$, 满足

$$p(z_n) = u_n, \quad n = 1, \dots, N. \quad (6.1)$$

或者说, 求解模型问题

$$\mathbf{A}c = \mathbf{u}. \quad (6.2)$$

对于一维多项式插值 ($d = 1$), 相关结果比较完备: 任意 N 个不同的配置点可以唯一决定一个 $N - 1$ 阶多项式。并且我们知道, 高斯点具有最高的代数精度和良好的插值稳定性。

然而, 高维多项式插值与一维插值完全不同。首先, 任意 N 个不同配置点的多项式插值未必唯一, 比如考虑二维空间 ($d = 2$), $z_1 = (0, 0) \in \mathbb{R}^2$ 和 $z_2 = (1, 1) \in \mathbb{R}^2$, 且 $u_1 = 0, u_2 = 1$, 显然, 存在无穷多个阶数为 1 的多项式满足插值条件。另外, 对于高维插值问题, 在未明确配置点的位置之前, 无法准确确定插值多项式的阶数。比如仍然考虑二维空间, 一阶多项式有 3 个自由度 ($1, Z_1, Z_2$), 然而, 并非任意 3 个不同的配置点都可以确定一阶多项式, 比如 $z_n = (n, n) \in \mathbb{R}^2, n = 1, 2, 3$, 实际上, 我们可以找到唯一的二阶多项式, 满足此插值条件。

可见, 高维插值问题是相当不平凡的。除了基于一维插值的张量型插值, 相关的结果非常稀少。文献 [108,109] 引入了“最小插值”的概念, 来处理高维插值问题。近年来, 文献 [110,111] 将这个框架推广到 UQ 的计算之中。注意, 在 UQ 的框架下, 我们希望找到由 $\rho(Z)$ 确定的多项式逼近, 即

$$p(Z) \in \mathbb{P}^d \triangleq \text{span}\{\phi_\alpha, \alpha \in \mathbb{N}_0^d\}. \quad (6.3)$$

其中 ϕ_α 由 (3.2) 定义。我们假定 $\{\phi_\alpha\}_{\alpha \in \mathbb{N}_0^d}$ 构成 $L_\rho^2(\Gamma)$ 空间的完备正交基，这意味着对于任意的函数 $u(Z) \in L_\rho^2(\Gamma)$ 成立

$$u = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}_0^d} \hat{u}_\alpha \phi_\alpha, \quad (6.4)$$

其中

$$\hat{u}_\alpha = \langle u, \phi_\alpha \rangle_\rho = \int_\Gamma \rho(Z) \phi_\alpha(Z) u(Z) dZ. \quad (6.5)$$

对于任意的 $k \in \mathbb{N}_0$ ，定义投影算子 \mathcal{P}_k

$$\mathcal{P}_k u = \sum_{\|\alpha\| \leq k} \hat{u}_\alpha \phi_\alpha, \quad (6.6)$$

对于任意的配置点 $z \in \Gamma$ ，我们形式上定义如下的广义函数

$$\delta_z(\cdot) = \sum_{\alpha} \phi_\alpha(z) \phi_\alpha, \quad (6.7)$$

并定义对多项式函数的操作（具体参见 [108]）

$$\delta_z^*(u) \triangleq \langle \delta_z, u \rangle_\rho = \sum_{\alpha} \hat{u}_\alpha \phi_\alpha(z) = u(z), \quad \forall u \in \mathbb{P}^d. \quad (6.8)$$

关于 δ_z ，成立以下引理 [110]：

引理 4 对于 d 维空间中 N 个不同的配置点 $\mathcal{Z} = \{z_1, \dots, z_N\}$ ，定义空间

$$\delta(\mathcal{Z}) = \text{span}\{\delta_{z_n}, n = 1, \dots, N.\}, \quad (6.9)$$

则空间 $\delta(\mathcal{Z})$ 的维数是 N ，且 δ_{z_n} 构成空间的一组基。

对于 $u(Z) \in L_\rho^2(\Gamma)$ ，我们定义“最小阶数”投影算子 $u_{\downarrow, \rho}$

$$u_{\downarrow, \rho} \triangleq \mathcal{P}_k u, \quad k = \min\{j : \mathcal{P}_j u \neq 0\}. \quad (6.10)$$

这个定义是原始定义 [108,109] 的推广，在 [108,109] 中， $u_{\downarrow, \rho}$ 给出函数 u 在原点的泰勒展开中非零的最小多项式阶数项。注意，算子 $u_{\downarrow, \rho}$ 是依赖于 ρ 的。比如，考虑一维情形， $\Gamma = (-1, 1)$ ，令 $f = \sin(\pi z)$ 。如果 $\rho = 1/2$ （对应均匀测度），那么 $u_{\downarrow, \rho} = (3/\pi)z$ （ $k = 1$ ）；如果 $\rho = (1+z)/2$ （对应 beta 测度），那么 $u_{\downarrow, \rho} = 1/\pi$ （ $k = 0$ ）。

接下来，定义空间 $\delta(\mathcal{Z})$ 的最小阶数投影

$$\delta(\mathcal{Z})_{\downarrow, \rho} = \text{span}\{f_{\downarrow, \rho}, f \in \delta(\mathcal{Z})\}. \quad (6.11)$$

对于空间 $\delta(\mathcal{Z})_{\downarrow, \rho}$ ，以下结论成立：

定理 10（Narayan & Xiu, [110]）空间 $\delta(\mathcal{Z})_{\downarrow, \rho}$ 的维数是 N ，且空间中存在唯一的多项式 $p(Z)$ ，使得

$$p(z_n) = u_n, \quad n = 1, \dots, N. \quad (6.12)$$

定理 10 表明，通过上面的操作，我们找到了对于 N 个任意不同样本点信息的唯一可解多项式空间。即存在 Lagrange 插值基函数 $\ell_n(Z) \in \delta(\mathcal{Z})_{\downarrow, \rho}$ ，使得

$$p(Z) = \sum_{n=1}^N u_n \ell_n(Z), \quad \ell_n(z_m) = \delta_{n,m}. \quad (6.13)$$

注意, 这些 Lagrange 插值基函数并没有显示的表达式, 然而, $\{\ell_n\}$ 与基函数 $\{\phi_n\}$ 的表达关系可以通过一系列基本的数值代数操作来实现, 我们这里不再介绍具体细节, 感兴趣的读者可以参见 [108]。

上面的讨论给出了高维空间中, 对于任意分布配置点的一种多项式插值策略。这个策略引入了一般的测度 ρ , 当 ρ 是高斯测度时, 上面的最小阶数插值退化为文献 [108,109] 中介绍的多项式插值。同时, 我们注意到, 配置点的位置实际上决定了多项式插值空间。最后, 我们提出一个更接近于实际应用的问题: 自适应选择插值节点, 即假设我们已经使用了 $N-1$ 个配置点进行插值, 那么, 第 N 个配置点应该如何选取?

6.2 径向基插值

我们注意到, 上面介绍的最小插值工具可以使用无结构的节点, 即可以寻求在任意数量和任意位置节点上的多项式插值。经典的径向基函数 (Radial Basis Function, RBF) 插值同样满足这个“无结构”的需求 [136]。

径向基函数 $\phi: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个仅依赖于距离 $\|z\|$ 的函数, 即 $\phi(z) = \phi(\|z\|)$, 其中 $\|\cdot\|$ 是欧几里得距离。RBF 插值思想就是考虑

$$u_N(z) = \sum_{j=1}^M c_j \phi(\|z - z_j\|), \quad (6.14)$$

其中 $\{z_j\}_{j=1}^M$ 是一组任意的插值节点。其中的系数 $\{c_j\}_{j=1}^M$ 可以由下面的方程确定

$$u(z_k) = u_N(z_k) = \sum_{j=1}^M c_j \phi(\|z_k - z_j\|), \quad k = 1, \dots, M. \quad (6.15)$$

在 UQ 的框架下, 我们关心 z 是服从某种分布的随机参数, 假设其密度函数是 $\rho(z)$, 因此, 我们希望寻求在以 $\rho(z)$ 为权函数意义下的逼近, 即 $\|u - u_N\|_\rho$ 。自然, 我们关心以下问题:

- 如果插值节点允许选择, 如何选取最优的插值节点? 插值节点是否需要考虑相应的分布信息 $\rho(z)$?
- 如何选取有效的径向基函数? 同样, 是否需要考虑相应的分布信息 $\rho(z)$?
- 最后, 我们仍然关心插值算法的稳定性和收敛性。

在无结构节点的框架下, 虽然 RBF 看似是一个完美的工具, 但其在 UQ 中的应用并不广泛, 目前的工作主要停留在数值试验的层面, 比如使用随机点, QMC, CVT 点进行径向基差值 [137]。然而, 相关的数值分析结果几乎空白, 这也许是一个值得关注的研究课题。

7 相关课题: 正倒向随机微分方程数值方法

从前面的讨论我们可以看出, 高维逼近算法是 UQ 计算中的一个核心问题。我们既介绍了经典的 Galerkin 投影方法和离散投影方法, 也介绍了新兴的最小差值方法和压缩感知方法。抛开 UQ 研究以及逼近论本身, 高维逼近在许多其他研究方向中扮演着重要的角色, 比如计算统计, 计算金融等等。接下来, 我们以正倒向随机微分方程的数值方法为例, 再次阐述高维数值逼近方法的重要性。

作为随机控制问题里的伴随方程, Bismut 在 1973 年 [112] 首次引入了线性倒向随机微分方程 (Backward stochastic differential equations, BSDEs) 的概念, 并证明了解的存在唯一性。1990

年, Pardoux 和 Peng [113] 解决了一般形式的非线性倒向随机微分方程解的存在唯一性, 这一重要研究成果奠定了倒向随机微分方程的理论基础。此后, 倒向随机微分方程在诸多研究领域取得了重要应用, 比如随机最优控制 [114-116], 对策论 [117,118], 偏微分方程理论 [119,120], 金融数学 [121] 等等。倒向随机微分方程的理论已经成为概率论及随机分析的一个重要分支, 并且, 倒向随机微分方程本身也被推广到更一般的情形, 比如正倒向随机微分方程 (Forward backward stochastic differential equations, FBSDEs), 带跳的正倒向随机微分方程等等。

在介绍正倒向随机微分方程的数值计算方法之前, 我们首先介绍基本的数学符号: (Ω, P, \mathcal{F}) 表示完备的概率空间, 其中 Ω 是事件空间, P 是概率测度, \mathcal{F} 是 σ -域 (σ -代数)。令 $(W_t)_{t \geq 0}$ 为定义在概率空间 (Ω, P, \mathcal{F}) 上的 d -维布朗运动 (Brownian motion)。我们用 \mathcal{F}_t 来表示由布朗运动 $\{W_s, s \leq t\}$ 所产生的 σ -域流:

$$\mathcal{F}_t = \sigma\{W_s, 0 \leq s \leq t\}.$$

我们记 $(\Omega, P, \{\mathcal{F}_t\}_{t \geq 0}, \mathcal{F})$ 为完备的域流概率空间。

对定义在概率空间 (Ω, P, \mathcal{F}) 中的随机变量 X , 我们用 $\mathbb{E}[X]$ 表示其数学期望, 用 $\mathbb{E}_t[X] = \mathbb{E}[X|\mathcal{F}_t]$ 表示其在信息流 \mathcal{F}_t 下的条件数学期望。对 $p \geq 1$, 我们用 $L^p = L^p_{\mathcal{F}}(0, T; \mathbb{R}^m)$ 表示取值于 \mathbb{R}^m 、关于 \mathcal{F}_t 适应的随机过程集合, 且该集合中的过程 X_t 满足

$$\|X_t\|_{L^p} = \left(\int_0^T \mathbb{E}[|X_t|^p] dt \right)^{\frac{1}{p}} < \infty.$$

在完备域流概率空间 $(\Omega, P, \{\mathcal{F}_t\}_{0 \leq t \leq T}, \mathcal{F})$ 中, 正倒向随机微分方程具有以下形式:

$$\begin{aligned} x_t &= x_0 + \int_0^t b(s, x_s, y_s, z_s) ds + \int_0^t \sigma(s, x_s, y_s, z_s) dW_s, \\ y_t &= \xi + \int_t^T f(s, x_s, y_s, z_s) ds - \int_t^T z_s dW_s, \end{aligned} \quad (7.1)$$

其中 $x_0 \in \mathcal{F}_0$, $\xi \in \mathcal{F}_T$, W_t 是标准 r -维布朗运动, $b: \Omega \times [0, T] \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^{m \times r} \rightarrow \mathbb{R}^d$ 、 $\sigma: \Omega \times [0, T] \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^{m \times r} \rightarrow \mathbb{R}^{d \times r}$ 、 $f: \Omega \times [0, T] \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^{m \times r} \rightarrow \mathbb{R}^m$ 是给定的函数。 $x_t \in \mathbb{R}^d$, $y_t \in \mathbb{R}^m$ 和 $z_t \in \mathbb{R}^{m \times r}$ 是待确定的随机过程。注意本文中关于布朗运动 W_s 的积分都是 Itô 型积分。

我们称随机过程 x_t , y_t 和 z_t 是正倒向随机微分方程(7.1)的解, 如果它们满足方程, 且这些随机过程是关于域流适应的、平方可积的 (属于 L^2 空间)。如果 (7.1) 中的 b 和 σ 不依赖于 y_t 和 z_t , 我们称 FBSDEs (7.1) 是非耦合的。当 b 和 σ 依赖于 y_t 但不依赖于 z_t 时, 我们称 FBSDEs (7.1) 为弱耦合的。Pardoux 和 Peng 在标准假设下, 给出了以下非耦合的 FBSDEs 解的存在唯一性 [113]:

$$\begin{cases} x_t = x_0 + \int_0^t b(s, x_s) ds + \int_0^t \sigma(s, x_s) dW_s, \\ y_t = \varphi(X_T) + \int_t^T f(s, x_s, y_s, z_s) ds - \int_t^T z_s dW_s, \quad t \in [0, T], \end{cases} \quad (7.2)$$

并且, 若 $b(s, x)$, $\sigma(t, x)$, $f(t, x, y, z)$ 和 φ 都是确定性函数, 则在一定的光滑性条件下, 正倒向随机微分方程 (7.2) 的解 (y_t, z_t) 可以表示成

$$y_t = u(t, x_t), \quad z_t = \nabla_x u(t, x_t) \sigma(t, x_t), \quad (7.3)$$

其中 $u = u(t, x)$ 是以下抛物型偏微分方程在经典意义下的解:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d a_{i,j} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^d b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} + f(t, x, u, \nabla u \sigma) = 0, \quad u(T, x) = \varphi(x), \quad (7.4)$$

其中 $u(T, x) = \varphi(x)$, $a = \sigma \sigma^*$ 。表达式 (7.3) 被称为非线性 Feynman-Kac 公式 [117]。非线性 Feynman-Kac 公式深刻地揭示了正倒向随机微分方程的解和拟线性抛物型偏微分方程的解之间的联系。这种联系也促进了正倒向随机微分方程和偏微分方程的交叉研究。

7.1 正倒向随机微分方程的离散方法

一般情况下, 正倒向随机微分方程 (7.1) 的解并没有解析表达式, 因此, 数值求解正倒向随机微分方程成为近年来的活跃方向 [122-124], 随着越来越多学者的参与, 正倒向随机微分方程数值方法的研究取得了一定的突破, 比如蒙特卡洛回归迭代方法 [125], 基于偏微分方程的方法 [126,127], 积分离散方法 [128-131], 导数逼近格式 [132, 133] 等等。接下来, 我们通过介绍一个简单的高阶数值格式, 来介绍数值求解正倒向随机微分方程的基本思想, 并阐述高维逼近方法在其中扮演的重要角色。

我们首先将时间求解区间 $[0, T]$ 进行抛分

$$0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_{N-1} < t_N = T,$$

并记 $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$, $\Delta t = \max_n \Delta t_n$, 以及 $\Delta W_{n+1} = W_{t_{n+1}} - W_{t_n}$ 。

考虑非耦合的正倒向随机微分方程 (7.2), 我们有

$$y_{t_n} = y_{t_{n+1}} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(r, x_r, y_r, z_r) dr - \int_{t_n}^{t_{n+1}} z_r dW_r. \quad (7.5)$$

对上式两端取条件数学期望 $\mathbb{E}_t[\cdot]$ 可以得到

$$y_{t_n} = \mathbb{E}_t[y_{t_{n+1}}] + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbb{E}_t[f(r, x_r, y_r, z_r)] dr. \quad (7.6)$$

进一步, 将 (7.5) 式两边同乘 ΔW_{n+1} , 然后两边取条件数学期望 $\mathbb{E}_t[\cdot]$ 可以得到

$$\begin{aligned} 0 = & \mathbb{E}_{t_n}[y_{t_{n+1}}(\Delta W_{n+1})^\top] + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbb{E}_{t_n}[f(r, x_r, y_r, z_r)(\Delta W_{n+1})^\top] dr \\ & - \mathbb{E}_{t_n}\left[\int_{t_n}^{t_{n+1}} z_s dW_s (\Delta W_{n+1})^\top\right]. \end{aligned} \quad (7.7)$$

由解的适应性、布朗运动的性质以及 Itô 等距公式, 上式变为

$$0 = \mathbb{E}_{t_n}[y_{t_{n+1}}(\Delta W_{n+1})^\top] + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbb{E}_{t_n}[f(r, x_r, y_r, z_r)(\Delta W_{t_n, r})^\top] dr - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbb{E}_{t_n}[z_r] dr, \quad (7.8)$$

其中 $\Delta W_{t_n, r} = W_r - W_{t_n}$ 。

等式 (7.7) 和 (7.8) 中的被积分函数在信息流 \mathcal{F}_{t_n} 下是 r 确定性函数。我们引入如下的求积公式:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbb{E}_{t_n}^x[f(s, x_s, y_s, z_s)] ds$$

$$= \theta_1 \Delta t_n f(t_n, x, y_{t_n}, z_{t_n}) + (1 - \theta_1) \Delta t_n \mathbb{E}_{t_n}^x [f(t_{n+1}, x_{t_{n+1}}, y_{t_{n+1}}, z_{t_{n+1}})] + R_y^n, \quad (7.9)$$

其中 $\theta_1 \in [0, 1]$, R_y^n 是求积公式引入的误差项。将 (7.9) 带入 (7.7) 得到

$$\begin{aligned} y_{t_n} = & \mathbb{E}_{t_n}^x [y_{t_{n+1}}] + \theta_1 \Delta t_n f(t_n, x, y_{t_n}, z_{t_n}) \\ & + (1 - \theta_1) \Delta t_n \mathbb{E}_{t_n}^x [f(t_{n+1}, x_{t_{n+1}}, y_{t_{n+1}}, z_{t_{n+1}})] + R_y^n. \end{aligned} \quad (7.10)$$

同理，对关于 z_t 的方程，我们可以得到

$$\begin{aligned} -\mathbb{E}_{t_n}^x [y_{t_{n+1}} \Delta W_{n+1}^\top] = & (1 - \theta_2) \Delta t_n \mathbb{E}_{t_n}^x [f(t_{n+1}, x_{t_{n+1}}, y_{t_{n+1}}, z_{t_{n+1}}) \Delta W_{n+1}^\top] \\ & - \{(1 - \theta_3) \Delta t_n \mathbb{E}_{t_n}^x [z_{t_{n+1}}] + \theta_3 \Delta t_n z_{t_n}\} + R_z^n, \end{aligned} \quad (7.11)$$

对于正向方程，我们以欧拉格式进行离散，得到

$$x^{n+1} = x^n + b(t_n, x^n) \Delta t_n + \sigma(t_n, x^n) \Delta W_n. \quad (7.12)$$

假设我们关心 (y_t, z_t) 在一系列空间网格 $\Theta_h \subset \mathbb{R}^d$ 上的值。基于上面的讨论，我们可以给出以下求解非耦合的 FBSDEs 的格式 (θ -格式)：

给定终端条件， $\forall x \in \Theta_h$ ，求解关于 x 随机变量 y^n 和 z^n ($n = N - 1, N - 2, \dots, 1, 0$)

$$\begin{aligned} x^{n+1} = & x^n + b(t_n, x^n) \Delta t_n + \sigma(t_n, x^n) \Delta W_n \\ y^n = & \mathbb{E}_{t_n}^x [y^{n+1}] + \theta_1 \Delta t_n f(t_n, x, y^n, z^n) \\ & + (1 - \theta_1) \Delta t_n \mathbb{E}_{t_n}^x [f(t_{n+1}, x^{n+1}, y^{n+1}, z^{n+1})], \\ -\mathbb{E}_{t_n}^x [y^{n+1} \Delta W_{n+1}^\top] = & (1 - \theta_2) \Delta t_n \mathbb{E}_{t_n}^x [f(t_{n+1}, x^{n+1}, y^{n+1}, z^{n+1}) \Delta W_{n+1}^\top] \\ & - \{(1 - \theta_3) \Delta t_n \mathbb{E}_{t_n}^x [z^{n+1}] + \theta_3 \Delta t_n z^n\}, \end{aligned}$$

其中 (y^n, z^n) 代表 (y_t, z_t) 在时间 t_n 的数值逼近解。

注意到，在求解过程中，我们需要对一系列条件期望进行逼近。以 $\mathbb{E}_{t_n}^{x_i} [y^{n+1}]$, $x_i \in \Theta_h$ 为例，根据条件数学期望的定义，我们有

$$\mathbb{E}_{t_n}^{x_i} [y^{n+1}] = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} Y^{n+1} \left(x_i + b(t_n, x_i) \Delta t_n + \sqrt{2\Delta t} \sigma(t_n, x_i) \mathbf{u} \right) e^{-\|\mathbf{u}\|^2} d\mathbf{u}. \quad (7.13)$$

其中 $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_d)^\top$ 。也就是说，我们需要处理一系列在 \mathbb{R}^d 上的高维积分。假设我们可以使用某种高维求积公式对条件期望进行数值逼近，一般情况下，由于正向方程离散格式的影响，在处理高维积分时，我们需要若干非网格点上的函数信息，这又需要进行 \mathbb{R}^d 上的高维插值。

因此，高维插值和数值求积在正倒向随机微分方程的求解中扮演着重要角色，在每个时间层的网格点 $x_i \in \Theta_h$ 上，我们都要重复的进行高维数值求积和高维插值的运算，这给倒向随机微分方程的快速求解带来了巨大的挑战。如何能够较精确快速的处理高维数值求积和高维插值，是求解正倒向随机微分方程的一个核心问题。

在上面的讨论中，我们谨以简单的数值格式阐述高维逼近在求解正倒向随机微分方程中的重要性。更多关于求解正倒向随机微分方程的高阶数值格式可以参见前面提到的文献。特别的，我们需要指出，为了寻求高阶数值逼近格式，通常需要对正向方程进行高阶离散，这给求解带来很大的困难。最近，文献 [132] 介绍了一种基于导数逼近的方法，巧妙地避开了这个困难。在 [132] 的数值格式中，

正向方程仍然使用欧拉格式进行离散, 然而, 得到的数值解 (y^n, z^n) 可以达到高精度, 这对于实际应用有巨大好处, 因为在金融领域中, 人们往往只关心 (y^n, z^n) 的值。关于该格式的构造细节, 感兴趣的读者可以参见 [132]。

7.2 亟待解决的研究问题

虽然关于正倒向随机微分方程数值方法的研究取得了很快的发展, 由于问题的特殊性, 还有大量的问题需要解决, 比如:

高维正倒向随机微分方程的求解。 在实际应用中, 方程组得规模通常可以达到上百维。这给计算带来挑战, 因为我们需要处理上百维空间的插值和数值求积。另外, 跳驱动的正倒向随机微分方程也在实际问题中有重要应用, 最近, 一些学者也发现, 可以使用跳驱动的正倒向随机微分方程来建模非局部 (non-local) 模型 [134], 这也是一个值得关注的课题。

随机最优控制问题。 随机最优控制问题 [114-116] 和正倒向随机微分方程有着密切的联系。可以说, 正倒向随机微分方程高阶算法的一个重要应用就是求解随机最优控制问题, 然而, 由于随机最优控制问题的复杂性, 这方面的研究还非常稀少。

正倒向双重随机微分方程。 正倒向双重随机微分方程 [135] 和博弈论、滤波等问题有密切联系。通过正倒向双重随机微分方程的科学计算方法研究, 提出求解博弈、滤波等问题的高效高精度可靠的科学计算方法也是一个重要的研究方向。

另外, 需要指出的是, 本节的讨论仅限于正倒向随机微分方程高阶数值格式。正倒向随机微分方程理论本身还有大量的重要问题亟待解决。

8 总结

在本文中, 我们讨论了 UQ 计算中的高阶方法的设计及其最新的数值分析结果。主要讨论了基于多项式逼近的方法, 在随机配置方法的讨论中, 基于高维问题和实际应用灵活性的考虑, 我们强调“无结构”网格的重要性。需要指出, 在这种框架下, 仍然有许多问题亟待解决。比如在于离散投影算法中, 我们已经看出, 目前的数值分析结果和实际应用仍然有一定的距离, 在实际应用中, 由于计算资源的限制, 一般选取 2-3 倍基函数的样本。因此, 一个更加实际的问题是: 如果我们只能进行 M 次确定模型的模拟, 我们如何在众多的竞争样本中, 选取最优的可以进行模拟的 M 个样本?

在本文高阶算法的讨论中, 我们并未给出具体的证明细节。这些数值分析结果需要使用数值代数, 谱方法, 随机矩阵等许多技巧的结合, 在此我们提供几个值得阅读的参考书 [94,100,138-140]。最后我们强调, 本文只讨论了 UQ 研究领域的一类问题: 带有随机参数输入的数学模型的多项式逼近方法。然而, UQ 研究还有众多重要问题需要解决。虽然我们无法预测可能的发展趋势, 我们仍然尝试在这里提出几个可能重要的研究方向:

高维问题的降维。 这是一个相当重要的研究方向。因为随机参数的维数直接决定问题的困难程度。为了降低计算量, 提前对随机参数进行敏感性分析是非常必要的, 通过敏感性分析, 可以确定起关键作用的一部分随机参数, 从而有效的减少计算量。这方面的尝试可以参见 [141-143] 及其中的参考文献。

光滑性的缺失。 我们已经指出, 并不是所有问题的解都连续的依赖于随机参数, 典型的例子是随机双曲问题。对于随机双曲问题, 只有在极其特殊的情况下, 才能够得到良好的正则型结果。另外,

流体计算中的许多随机问题, 精确解在随机参数空间会产生难以预测的强间断, 使得 gPC 方法变得不可行。一些学者针对这些问题采取了一些新的尝试, 比如考虑使用小波基函数作为基底 [144], 或者采用分片的多项式逼近 [145], 但这些方法都有自身的局限性, 可以说, 对于光滑性的缺失的随机问题的计算, 仍然是目前 UQ 研究中的一个难题。

认知的不确定性 (Epistemic Uncertainty) 我们的所有讨论基于事先了解随机参数的分布信息。如果失去这个信息, 就是通常所说的认知的不确定性, 即由于我们对于模型缺乏了解而产生的不确定性, 这种问题常见于工程领域, 相关的研究并没有大规模展开 (参见 [146-148] 及其中的参考文献), 这也将是一个重要的研究方向。

最后, 我们再次强调, 由于篇幅限制, 我们只提到了 UQ 研究的一部分核心问题, 大部分实际应用问题, 比如随机区域问题, 数据同化, 天气预测, 贝耶斯分析等, 本文都未涉及。

9 致谢

本文的撰写受到了国家自然科学基金 (基金号: 91130003, 11201461)、香港研究基金会 (RGC)、香港浸会大学研究基金, 以及国家自然科学基金委与香港研究基金会 (NSFC-RGC) 联合资助项目资助。山东大学赵卫东教授以及中科院数学与系统科学研究院许志强教授对本文撰写提供了有益的建议, 在此表示感谢。

参考文献

- 1 G.S. Fishman. Monte Carlo: Concepts, Algorithms, and Applications. Springer-Verlag, New York, Inc., 1996.
- 2 W. Loh, On Latin hypercube sampling, *Ann. Stat.*, 24 (1996), pp. 2058-2080.
- 3 M. Stein, Large sample properties of simulations using Latin Hypercube Sampling, *Technometrics*, 29 (1987), pp. 143-151.
- 4 H. Niederreiter, Random number generation and Quasi-Monte Carlo methods, SIAM, 1992.
- 5 H. Niederreiter, P. Hellekalek, G. Larcher, and P. Zinterhof, Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo methods 1996, Springer-Verlag, 1998.
- 6 W. Liu, T. Belytschko, and A. Mani, Probabilistic finite elements for nonlinear structural dynamics, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 56 (1986), pp. 61-81.
- 7 W. Liu, T. Belytschko, and A. Mani, Random field finite elements, *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 23 (1986), pp. 1831-1845.
- 8 D. Zhang, Stochastic methods for flow in porous media, Academic Press, 2002.
- 9 N. Wiener, The homogeneous chaos, *Amer. J. Math.*, 60 (1938), pp. 897-936.
- 10 R. Ghanem and P. Spanos, Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach, Springer-Verlag, New York, 1991.
- 11 D. Xiu and G.E. Karniadakis, The Wiener-Askey polynomial chaos for stochastic differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 24, No. 2, pp. 619-644.
- 12 I. Babuška, F. Nobile, and R. Tempone, A stochastic collocation method for elliptic partial differential equations with random input data, *SIAM J. Numer. Anal.*, 45 (2007), pp. 1005-1034.
- 13 S. Smolyak (1963), Quadrature and interpolation formulas for tensor products of certain classes of functions, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 4, 240 - 243.
- 14 H.-J. Bungartz and M. Griebel, Sparse grids. *Acta Numerica*, Vol. 13, Cambridge University Press, pp. 1-123, 2004.
- 15 D. Xiu and J.S. Hesthaven, High-order collocation methods for differential equations with random inputs, *SIAM J. Sci. Comput.*, 27 (2005), pp. 1118-1139.
- 16 D. Xiu, Efficient collocational approach for parametric uncertainty analysis, *Commun. Comput. Phys.*, 2 (2007), 293-309.
- 17 F. Nobile, R. Tempone and C. Webster, A sparse grid stochastic collocation method for partial differential equations with random input data, *SIAM J. Numer. Anal.*, 2008, vol. 46/5, pp. 2309-2345

- 18 F. Nobile, R. Tempone and C. Webster, An anisotropic sparse grid stochastic collocation method for partial differential equations with random input data, *SIAM J. Numer. Anal.*, 2008, vol. 46/5, pp. 2411-2442.
- 19 I. Babuška, B. Andersson, P. J. Smith, and K. Levin, Damage analysis of fiber composites. I. Statistical analysis on fiber scale, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 172 (1999), pp. 1-4.
- 20 J. Sólnes, *Stochastic Processes and Random Vibrations*, Wiley, New York, 1997.
- 21 I. Elishakoff, ed., *Whys and Hows in Uncertainty Modelling*, Springer - Verlag, Vienna, 1999.
- 22 I. Elishakoff and Y. Ren, The bird's eye view on finite element method for structures with large stochastic variations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 168 (1999), pp. 51-61
- 23 H. Holden, B. Øksendal, J. UbØe, and T. Zhang, *Stochastic Partial Differential Equations*, Birkhäuser Boston, Boston, MA, 1996.
- 24 J. L. Jensen, L. W. Lake, P. W. Corbett, and D. Logan, *Statistics for Petroleum Engineers and Geoscientists*, Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, 1997.
- 25 M. Loève, *Probability theory. Vol. II, 4th ed. Graduate Texts in Mathematics 46*. Springer-Verlag, 1978.
- 26 C. Schwab and R. A. Todor, Karhunen-Loève approximation of random fields by generalized fast multipole methods, *J. Comput. Phys.*, 217 (2006), 100-122.
- 27 J. Beck, F. Nobile, L. Tamellini and R. Tempone. A quasi-optimal sparse grids procedure for groundwater flows. International Conference on Spectral and High-Order Methods 2012 (ICOSAHOM'12), Gammarth, Tunisia, Lecture Notes in computational Science and Engineering, 2012.
- 28 I. Babuška, F. Nobile, and R. Tempone, Worst-case scenario analysis for elliptic problems with uncertainty, *Numer. Math.*, 101 (2005), pp. 185 - 219.
- 29 M. Gunzburger, C. G. Webster, and G. Zhang, Stochastic finite element methods for partial differential equations with random input data, *Acta Numerica*, 23 (2014), pp. 521-650.
- 30 J. Charrier. Strong and weak error estimates for elliptic partial differential equations with random coefficients. *SIAM J. Numer. Anal.*, 50(1), pp.216 - 246, 2012.
- 31 J. Beck, F. Nobile, L. Tamellini, and R. Tempone. On the optimal polynomial approximation of stochastic PDEs by Galerkin and collocation methods. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 22(09), 2012.
- 32 H. G. Matthies and A. Keese, Galerkin methods for linear and nonlinear elliptic stochastic partial differential equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 194, 1295-1331, 2005.
- 33 C. Schwab and R. A. Todor, Sparse finite elements for elliptic problems with stochastic loading, *Numer. Math.* 95, 707-734, 2003.
- 34 I. Babuška, R. Tempone, and G. E. Zouraris, Galerkin finite element approximations of stochastic elliptic partial differential equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, 42 (2004), pp. 800-825.
- 35 A. Cohen, R. DeVore and C. Schwab, Convergence rates of best N -term Galerkin approximations for a class of elliptic sPDEs, *J. FoCM* 10, 615-646, 2010.
- 36 A. Cohen, R. DeVore and C. Schwab, Analytic regularity and polynomial approximation of parametric and stochastic PDEs, *Analysis and Applications* 9, 11-47, 2011
- 37 T. Tang and T. Zhou. Convergence analysis for stochastic collocation methods to scalar hyperbolic equations with a random wave speed. *Commun. Comput. Phys.*, 8(2010), pp.226-248.
- 38 T. Zhou and T. Tang, Galerkin methods for stochastic hyperbolic problems using bi-orthogonal polynomials, *J. Sci. Comput.*, 51(2012), pp.274-292.
- 39 M. Motamed, F. Nobile, and R. Tempone. A stochastic collocation method for the secon wave equation with a discontinuous random speed. *Numer. Math.*, 123(2013), pp.493-536.
- 40 Per Pettersson, Gianluca Iaccarino and Jan Nordström, Numerical analysis of the Burgers' equation in the presence of uncertainty, *J. Comput Phys*, 228 (2009), pp.8394-8412.
- 41 Gaël Poëtte, Bruno Després and Didier Lucor, Uncertainty quantification for systems of conservation laws, *J. Comput Phys*, 228 (2009) 2443-2467
- 42 D. Xiu, *Numerical Methods for Stochastic Computations: A Spectral Method Approach*, Princeton University Press, 2010.
- 43 D. Xiu, Fast numerical methods for stochastic computations: A review, *Commun. Comput. Phys*, 5 (2009), pp. 242-272.
- 44 G. Migliorati, Polynomial approximation by means of the random discrete L^2 projection and application to inverse problems for PDE's with stochastic data, PhD thesis, Politecnico di Milano and Centre de Mathématiques Appliquées, École Polytechnique, 2013.
- 45 F. Nobile and R. Tempone, Analysis and implementation issues for the numerical approximation of parabolic equations

- with random coefficients, *Internat. J. Numer. Methods Engrg* 80, 979-1006, 2009.
- 46 D. Xiu and J. Shen, Efficient stochastic Galerkin methods for random diffusion equations, *J. Comput. Phys.*, 228(2009), pp.266-281.
 - 47 T. Zhou and T. Tang, Note on coefficient matrices from stochastic Galerkin methods for random diffusion equations, *J. Comput. Phys.*, 229 (2010), pp. 8225-8230.
 - 48 D. Xiu and G.E. Karniadakis, Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos. *Journal of Computational Physics*, 187 (2003), pp.137-167.
 - 49 D. Gottlieb and D. Xiu, Galerkin method for wave equations with uncertain coefficients, *Commun. Comput. Phys.*, 3(2008), pp.505-518.
 - 50 D. Xiu, Efficient collocational approach for parametric uncertainty analysis, *Commun. Comput. Phys.*, 2(2007), pp.293-309.
 - 51 S. Hosder, R.W. Walters, and M. Balch, Efficient Sampling for non-intrusive polynomial chaos applications with multiple uncertain input variables, *Proceedings of the 48th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference*, No. AIAA-2007-1939, Honolulu, HI, April 23-26, 2007.
 - 52 M.S. Eldred. Recent advances in non-intrusive polynomial chaos and stochastic collocation methods for uncertainty analysis and design. In *AIAA*, 2009.
 - 53 O.P. Le Maitre and O.M. Knio. *Spectral Methods for Uncertainty Quantification*. Springer, 2010.
 - 54 X. Wan, G.E. Karniadakis, Long-term behavior of polynomial chaos in stochastic flow simulations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 195 (2006), pp.5582-5596.
 - 55 T. P. Sapsis and P. F.J. Lermusiaux, Dynamically orthogonal field equations for continuous stochastic dynamical systems, *Physica D*, 238(2009), pp.2347-2360.
 - 56 T. P. Sapsis, and P.F.J. Lermusiaux, Dynamical criteria for the evolution of the stochastic dimensionality in flows with uncertainty, *Physica D*, 241(2012), pp.60-76.
 - 57 Ueckermann, M.P., P.F.J. Lermusiaux and T.P. Sapsis, Numerical schemes for dynamically orthogonal equations of stochastic fluid and ocean flows. *J. Comput. Phys.*, (233)2013, pp.272-294.
 - 58 M. Cheng, T. Y. Hou, Z. Zhang, A dynamically bi-orthogonal method for time-dependent stochastic partial differential equations I: Derivation and algorithms, *J. Comput. Phys.*, 242 (2013), pp.843-868.
 - 59 M. Cheng, T. Y. Hou, Z. Zhang, A dynamically bi-orthogonal method for time-dependent stochastic partial differential equations II: Adaptivity and generalizations, *J. Comput. Phys.*, 242 (2013), pp.753-776.
 - 60 M. Choia, T. P. Sapsis, G. E. Karniadakis, A convergence study for SPDEs using combined Polynomial Chaos and Dynamically-Orthogonal schemes, *J. Comput. Phys.*, 242 (2013), pp.281-301.
 - 61 T. Sapsis, A. Majda, Statistically Accurate Low Order Models for Uncertainty Quantification in Turbulent Dynamical Systems, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 110 (2013), pp.13705-13710.
 - 62 E. Musharbash, F. Nobile and T. Zhou, On the dynamically orthogonal approximation of time dependent random PDEs, EPFL MATHICSE Report 19-2014, submitted to *SIAM J. Sci. Comput.*, 2014.
 - 63 O. Koch, C. Lubich, Regularity of the multi-configuration time-dependent Hartree approximation in quantum molecular dynamics, *ESAIM: M2AN*, Vol.41, No.2(2007), pp.315-331.
 - 64 D. Conte C. Lubich, An error analysis of the multi-configuration time-dependent Hartree method of quantum dynamics, *ESAIM: M2AN*, Vol.44, 2010, pp.759-780.
 - 65 M. Tatang, Direct incorporation of uncertainty in chemical and environmental engineering systems. PhD thesis, MIT, 1995.
 - 66 E. Novak and K. Ritter, High dimensional integration of smooth functions over cubes, *Numer. Math.*, 75 (1996), pp. 79-97.
 - 67 E. Novak and K. Ritter, Simple cubature formulas with high polynomial exactness, *Constructive Approx.*, 15 (1999), pp. 499-522.
 - 68 X. Ma and N. Zabarar, An efficient data-driven Bayesian inference approach to inverse problems based on adaptive sparse grid collocation method, *Inverse Problems*, Vol. 25, 035013 (27pp), 2009.
 - 69 X. Ma and N. Zabarar, "An adaptive hierarchical sparse grid collocation algorithm for the solution of stochastic differential equations", *J. Comput. Phys.*, 228(2009), pp. 3084-3113.
 - 70 G. Zhang, D. Lu, M. Ye, M. Gunzburger and C. Webster, An adaptive sparse-grid high-order stochastic collocation method for bayesian inference in groundwater reactive transport modeling, *Water Resources Research*, Vol. 49(2013), pp. 6871-6892.
 - 71 P. Binev, A. Cohen, W. Dahmen, and R. DeVore. Universal algorithms for learning theory. i. piecewise constant functions. *J. Mach. Learn. Res.*, 6(2005), pp.1297-1321.

- 72 P. Binev, A. Cohen, W. Dahmen, and R. DeVore. Universal algorithms for learning theory. ii. piecewise polynomial functions. *Constr. Approx.*, 26(2007), pp.127-152.
- 73 A. Cohen, M. A. Davenport, and D. Leviatan. On the stability and accuracy of least squares approximations. *Foundations of Computational Mathematics*, 13(5):819-834, 2013.
- 74 S. Hosder, R. W. Walters, and M. Balch. Point-collocation nonintrusive polynomial chaos method for stochastic computational fluid dynamics. *AIAA Journal*, (48):2721-2730, 2010.
- 75 G. Migliorati, F. Nobile, E. Schwerin, and R. Tempone. Analysis of the discrete L^2 projection on polynomial spaces with random evaluations. *Foundations of Computational Mathematics*, doi:10.1007/s10208-013-9186-4, 2014.
- 76 T. Zhou, A. Narayan and Z. Xu, Multivariate discrete least-squares approximations with a new type of collocation grid, in press, *SIAM J. Sci. Comput.*, 36(5), pp. A2401 - A2422, 2014.
- 77 T. Tang, The Hermite spectral method for Gaussian type functions, *SIAM J. Sci. Comput.*, 14 (1993), pp.594-606.
- 78 G. Blatman and B. Sudret. Adaptive sparse polynomial chaos expansion based on least angle regression. *Journal of Computational Physics*, (230):2345-2367, 2011.
- 79 A. Chkifa, A. Cohen, G. Migliorati, F. Nobile, and R. Tempone. Discrete least squares polynomial approximation with random evaluations-application to parametric and stochastic elliptic PDEs. EPFL, MATHICSE Technical Report, 35/2013.
- 80 T. Tang and T. Zhou. On discrete least square projection in unbounded domain with random evaluations and its application to parametric uncertainty quantification, *SIAM J. Sci. Comput.*, 36(2014), A2272 - A2295.
- 81 Z. Xu and T. Zhou. On sparse interpolation and the design of deterministic interpolation points, *SIAM J. Sci. Comput.*, 36(2014), pp. A1752-A1769.
- 82 A. Weil. On some exponential sums. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 34(5):204 - 207, May 1948. PMID: 16578290 PMID: PMC1079093.
- 83 R. Srinivasan. *Importance Sampling: Applications in Communications and Detection*. Springer, August 2002.
- 84 G. Migliorati and F. Nobile, Analysis of discrete least squares on multivariate polynomial spaces with evaluations in low-discrepancy point sets, EPFL, MATHICSE Technical Report, 25/2014.
- 85 Z. Gao and T. Zhou, On the choice of design points for least square polynomial approximations with application to uncertainty quantification, *Commun. Comput. Phys.*, 16 (2014), pp. 365-381.
- 86 S.K. Choi, R.V. Grandhi, R.A. Canfield, and C.L. Pettit. Polynomial chaos expansion with Latin hypercube sampling for estimating response variability, *AIAA J.*, (45):1191-1198, 2004.
- 87 T. Zhou, A. Narayan, and D. Xiu, Weighted discrete least-squares polynomial approximation using randomized quadratures, submitted to *J. Comput. Phys.*, 2014.
- 88 E. Candès, J. Romberg, and T. Tao. Stable signal recovery from incomplete and inaccurate measurements. *Comm. Pure Appl. Math.*, 8(59):1207-1223, 2006.
- 89 E. Candès and T. Tao. Stable signal recovery from incomplete and inaccurate measurements. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 12(51):4203-4215, 2005.
- 90 E. Candès and T. Tao. Near-optimal signal recovery from random projections: universal encoding strategies? *IEEE Trans. Inform. Theory*, 12(52):5406-5425, 2006.
- 91 A. Cohen, W. Dahmen, and R. A. DeVore. Compressed sensing and best k-term approximation. *J. Amer. Math. Soc.*, 22(2009), pp.211-231.
- 92 D.L. Donoho. Compressed sensing. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 52(2006), pp.1289-1306.
- 93 R.A. Todor and C. Schwab. Convergence rates for sparse chaos approximations of elliptic problems with stochastic coefficients. *IMA J. Numer. Anal.*, 2(27):232-261, 2007.
- 94 H. Rauhut, Compressive sensing and structured random matrices, in *Theoretical Foundations and Numerical Methods for Sparse Recovery*, Fornasier, M. (Ed.) Berlin, New York (DE GRUYTER), pages 1-92, 2010.
- 95 A. Doostan and H. Owhadi. A non-adapted sparse approximation of pdes with stochastic inputs. *J. Comput. Phys.*, 230(2011), pp.3015-3034.
- 96 L. Mathelin and K. A. Gallivan. A compressed sensing approach for partial differential equations with random input data. *Commun. Comput. Phys.*, 12(2012), pp.919-954.
- 97 H. Rauhut and R. Ward. Sparse Legendre expansions via ℓ^1 -minimization. *Journal of Approximation Theory*, 164(2012), pp.517-533.
- 98 G. Szegő. *Orthogonal Polynomials*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1975.
- 99 L. Yan, L. Guo, and D. Xiu. Stochastic collocation algorithms using ℓ^1 -minimization. *International Journal for Uncertainty Quantification*, 2(2012), pp.279-293.
- 100 J. Shen, L.-L. Wang and T. Tang, *Spectral Methods: Algorithms, Analysis and Applications*, Springer, 2011.

-
- 101 X. Yang and G. E. Karniadakis. Reweighted ℓ^1 -minimization method for stochastic elliptic differential equations. *Journal of Computational Physics*, 248(2013), pp.87-108.
- 102 M. A. Iwen. Simple deterministically constructible rip matrices with sublinear fourier sampling requirements. 43rd Annual Conference on Information Sciences and Systems (CISS), Baltimore, MD, 2009.
- 103 M. A. Iwen. Combinatorial sublinear-time fourier algorithms. *Foundations of Computational Mathematics*, 3(10):303-338, 2010.
- 104 Z. Xu. Deterministic sampling of sparse trigonometric polynomials. *J. Complexity*, 27(2011), pp.133-140.
- 105 R. A. DeVore. Deterministic constructions of compressed sensing matrices. *J. Complexity*, (23):918-925, 2007.
- 106 L. Guo, D. Xiu and T. Zhou, Stochastic collocation via ℓ^1 -minimization using randomized quadratures, submitted for publication, 2014.
- 107 E. van den Berg and M. Friedlander. Spgl1: A solver for large-scale sparse reconstruction. <http://www.cs.ubc.ca/labs/scl/spgl1>, 2007.
- 108 C. de Boor and A. Ron, On multivariate polynomial interpolation, *Constr. Approx.*, 6 (1990), pp. 287-302.
- 109 C. de Boor and A. Ron, Computational aspects of polynomial interpolation in several variables, *Math. Comp.*, 58 (1992), pp. 705-727.
- 110 A. Narayan and D. Xiu. Stochastic collocation methods on unstructured grids in high dimensions via interpolation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 34(3), A1729-A1752, 2012.
- 111 A. Narayan and D. Xiu, Constructing nested nodal sets for multivariate polynomial interpolation, *SIAM J. Sci. Comput.*, 35(5), A2293-A2315, 2013.
- 112 J.M. Bismut, Linear quadratic optimal stochastic control with random coefficients, *SIAM J. Control*, 14(1976), pp. 419-444.
- 113 E. Pardoux and S. Peng, Adapted solution of a backward stochastic differential equation, *Systems Control Lett.*, 14(1990), 55-61.
- 114 S. Peng, A general stochastic maximum principle for optimal control problems, *SIAM J. Control Optim.*, 28(1990), pp. 966-979.
- 115 S. Peng, Stochastic Hamilton-Jacobi-Bellman equations, *SIAM J. Control Optim.*, 30(1992), pp. 284-304.
- 116 S. Peng, BSDE and stochastic optimizations, in *Topic in Stochastic Analysis*, Sh.2, Science Press. Beijing, 1997.
- 117 R. Buckdahn, Y. Hu, and J. Li, Stochastic representation for solutions of Isaacs' type integral-partial differential equations, *Stochastic Process. Appl.*, 121(2011), pp. 2715-2750.
- 118 S. Hamadene, J.P. Lepeltier, and S. Peng, BSDEs with continuous coefficients and applications to Markovian non-zero-sum stochastic differential games, in *Backward Stochastic Differential Equation*, Pitman Research Notes in Math. Series, El Karoui and Mazliak eds., 364(1997), pp. 161-175.
- 119 E. Pardoux and S. Tang, Forward-backward stochastic differential equations and quasilinear parabolic PDEs, *Prob. Theory Relat. Fields*, 114(1999), pp. 123-150.
- 120 S. Peng, Probabilistic interpretation for systems of quasilinear parabolic partial differential equations, *Stochastics and Stochastics Rep.*, 37(1991), pp. 61-74.
- 121 N. Karoui, S. Peng, and M. Quenez, Backward stochastic differential equations in finance, *Mathematical Finance*, 7(1997), pp. 1-71.
- 122 C. Bender and J. Zhang, Time discretization and Markovian iteration for coupled FBSDEs, *Ann. Appl. Probab.*, 18(2008), pp. 143-177.
- 123 B. Bouchard and N. Touzi, Discrete-time approximation and Monte-Carlo simulation of backward stochastic differential equations, *Stochastic Process. Appl.*, 111(2004), pp. 175-206.
- 124 J.F. Chassagneux and D. Crisen, Runge-kutta schemes for backward stochastic differential equations, *Ann. Appl. Probab.*, 24(2014), pp. 679 - 720.
- 125 E. Gobet, J.P. Lemmor, and X. Warin, A regression-based Monte Carlo method to solve backward stochastic differential equations, *Ann. Appl. Probab.*, 15(2005), pp. 2172-2202.
- 126 G.N. Milstein, and M.V. Tretyakov, Numerical algorithms for forward-backward stochastic differential equations, *SIAM J. Sci. Comput.*, 28(2006), pp. 561-582.
- 127 G.N. Milstein, and M.V. Tretyakov, Discretization of forward-backward stochastic differential equations and related quasi-linear parabolic equations, *IMA J. Numer. Anal.*, 27(2007), pp. 24-44.
- 128 W. Zhao, L. Chen, and S. Peng, A new kind of accurate numerical method for backward stochastic differential equations, *SIAM J. Sci. Comput.*, 28(2006), pp. 1563-1581.
- 129 W. Zhao, J. Wang, and S. Peng, Error estimates of the θ -scheme for backward stochastic differential equations, *Dis. Cont. Dyn. Sys. B*, 12(2009), pp. 905-924.

- 130 W. Zhao, G. Zhang, and L. Ju, A stable multistep scheme for solving backward stochastic differential equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, 48(2010), pp. 1369-1394.
- 131 W. Zhao, W. Zhang, and L. Ju, A numerical method and its error estimates for the decoupled forward-backward stochastic differential equations, *Commun Comput Phys*, 15(2014), pp. 618-646.
- 132 W. Zhao, Y. Fu, and T. Zhou, New kinds of high-order multi-step schemes for coupled forward backward stochastic differential equations, *SIAM J. Sci. Comput.*, 36(2014), A1731 - A1751.
- 133 W. Zhao, Y. Fu, and T. Zhou, Efficient sparse grid methods for multi-dimensional coupled forward backward stochastic differential equations, Preprint, 2014.
- 134 G. Zhang, W. Zhao, M. Gunzburger and C. Webster, A numerical method for nonlocal diffusion problems via backward stochastic differential equations with jumps, submitted 2014.
- 135 Feng Bao, Yanzhao Cao, A. J. Mier, and Weidong Zhao, A first order scheme for backward doubly stochastic differential Equations, submitted 2014.
- 136 Buhmann, Martin D., *Radial Basis Functions: Theory and Implementations*, Cambridge University Press, ISBN 978-0-521-63338-3, 2003.
- 137 G.J.A. Loeven, J.A.S. Witteveen, and H. Bijl, A Probabilistic Radial Basis Function Approach for Uncertainty Quantification. In *Computational Uncertainty in Military Vehicle Design. Meeting Proceedings RTO-MP-AVT-147*, Paper 35. Neuilly-sur-Seine, France: RTO, 2007.
- 138 R. Vershynin. Introduction to the non-asymptotic analysis of random matrices. <http://arxiv.org/abs/1011.3027>, 2011.
- 139 J. Shen and T. Tang, *Spectral and High-Order Methods with Applications*, Science Press, Beijing, 2006.
- 140 G. Golub, C. van Loan, *Matrix Computation*, 3rd Edition, The John Hopkins University Press, 1996.
- 141 I. Sobol', Theorems and examples on high dimensional model representation, *Reliab. Eng. Syst. Saf.*, 79, pp. 187 - 193, 2003.
- 142 A. Labovsky and M. Gunzburger, An efficient and accurate method for the identification of the most influential random parameters appearing in the input data for PDEs, *SIAM/ASA J. Uncertainty Quantification*, 2(2014), pp. 82-105.
- 143 G.T. Buzzard and D. Xiu, Variance-based global sensitivity analysis via sparse-grid interpolation and cubature, *Comm. Comput. Phys.*, 9(2011), pp. 542-567.
- 144 O. P. Le Maitre, O. M. Knio, H. N. Najm and R. G. Ghanem Uncertainty propagation using Wiener-haar expansions, *J. Comput. Phys.*, 197(2004), pp. 28-57.
- 145 X. Wan and G.E. Karniadakis, Multi-element generalized polynomial chaos for arbitrary probability measures, *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 28(2006), pp. 901-928.
- 146 J. Jakeman, M. Eldred and D. Xiu, Numerical approach for quantification of epistemic uncertainty, *J. Comput. Phys.*, 229(2010), pp. 4648-4663.
- 147 M. Eldred, L. Swilder, and G. Tang. Mixed aleatory-epistemic uncertainty quantification with stochastic expansions and optimization-based interval estimation. *Reliability Eng. Sys. Safety*, 96(2011), pp. 1092-1113.
- 148 J. Li, X. Qi and D. Xiu, On upper and lower bounds for quantity of interest in problems subject to epistemic uncertainty, *SIAM J. Sci. Comput.*, 36(2014), A363-A376.

Recent developments in high order numerical methods for uncertainty quantification

Tao Tang & Tao Zhou

Abstract Uncertainty quantification (UQ) has been a hot research topic recently. UQ has a variety of applications, including hydrology, fluid mechanics, data assimilation, and weather forecasting. Among a large number of approaches, the high order numerical methods have become one of the important tools; and the relevant computational techniques and their mathematical theory have attracted great attention in recent years. This paper begins with a brief introduction of recent developments of high order numerical methods including Galerkin projection methods and stochastic collocation methods. The emphasis will be sample-based stochastic collocation methods, including random sampling, deterministic sampling and structured random sampling. The paper will review the recent progress on the discrete projection method and the compressed sensing approximation for the UQ research. In particular, we will discuss the relationship between the sample size M and the degree of freedom N for the

basis function in the approximation space, by considering the stability and optimal convergence of the algorithms. Moreover, we will also discuss the interpolation method with arbitrary points in high dimensional spaces. A topic relevant to UQ computations, i.e., numerical methods for the forward backward stochastic differential equations, will be briefly introduced. To close this article, some challenging and open problems for the UQ research will be briefly discussed.

Keywords Uncertainty Quantification, polynomial approximation, stochastic collocation, discrete least-squares projection, compressed sensing, least interpolation, forward backward stochastic differential equations

MSC(2010) 41A10, 60H35, 65C30, 65C50

doi: 10.1360/012011-XXX