

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ
ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ



ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Ανάπτυξη μειωμένης τάξης μοντέλου
αντιδραστήρα Χημικής Απόθεσης
από Ατμό με τη μέθοδο της
ανάλυσης κυρίων συνιστωσών και
τεχνητά νευρωνικά δίκτυα

ΘΕΟΔΩΡΟΣ - ΝΕΣΤΩΡ ΠΑΠΑΠΕΤΡΟΥ

Επιβλέπων Καθηγητής: ΑΝΔΡΕΑΣ ΜΠΟΥΝΤΟΥΒΗΣ

Αθήνα 2016

Ευχαριστίες

Αφού ολοκλήρωσα τη διαδικασία των πανελλαδικών εξετάσεων πριν πέντε χρόνια και κλήθηκα να αποφασίσω σε ποια σχολή επιθυμώ να φοιτήσω, ένα από τα βασικά μου κριτήρια ήταν η σχολή εκείνη να έχει μια –όπως την αντιλαμβανόμουν τότε– πρακτική χροιά, δηλαδή το αντικείμενό της να μην εξαντλείται στη θεωρητική γνώση. Αυτό, σε συνδυασμό με την καλή μου σχέση με τη χημεία, με οδήγησε στη Σχολή Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Τώρα, έπειτα από πέντε χρόνια σπουδών, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της διπλωματικής μου εργασίας, καθηγητή Ανδρέα Μπουντουβή, για την ευκαιρία που μου έδωσε να εργαστώ σε ένα τέτοιο θέμα, που συνδυάζει και σχετίζεται με πολλά από τα θεωρητικά πεδία ενασχόλησης της χημικής μηχανικής, αλλά συνάμα παραμένει προσανατολισμένο ως προς τον στόχο του στην πράξη. Τον ευχαριστώ επίσης για την καθοδήγηση που μου προσέφερε στην εκπόνηση της εργασίας.

Ευχαριστώ επίσης τον καθηγητή Κωνσταντίνο Θεοδωρόπουλο, ο οποίος, παρότι δεν κατάφερα τελικά να βρεθώ στο Μάντσεστερ, είχε ιδιαίτερη συμβολή στην πορεία. Μαζί με τον κ. Μπουντουβή υπήρξαν οι φάροι που πολλές φορές άλλαξαν την πορεία της εργασίας, απελευθερώνοντάς την από τέλματα και αποτρέποντάς εκτροπές.

Δεν θα μπορούσα να μην ευχαριστήσω θερμά την Δρα Ελένη Κορωνάκη, η οποία συνέβαλε τα μέγιστα στην εργασία και βρισκόταν δίπλα μου από την πρώτη έως την τελευταία ημέρα, για περίπου έναν χρόνο. Η καθαρότητα της σκέψης της, η επιμονή και η προσήλωσή της στον στόχο καθώς η μεγάλη της γνώση περί του μελετούμενου συστήματος με βοήθησαν πολύ.

Την ομάδα της εργασίας κλείνει ο Δρ Ιωάννης Μπόνης, τον οποίο ευχαριστώ εξίσου θερμά, για τη συμβολή του σε τεχνικά θέματα επί των εφαρμοζόμενων μεθόδων και όχι μόνο, για τις μακρές μας συζητήσεις και τις συμβουλές, τις προτάσεις και τις ιδέες του. Πολλές από αυτές οδήγησαν σε νέα μονοπάτια την εργασία.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω βαθιά τον Παναγιώτη Πετσαγκουράκη, χημικό μηχανικό και υποψήφιο διδάκτορα στο Μάντσεστερ, για το έμπρακτο ενδιαφέρον του και τις υποδείξεις του σε θέματα νευρωνικών δικτύων και ρύθμισης. Οφείλω επίσης να του πιστώσω την ιδέα της τροποποιημένης συνάρτησης κόστους στο ρυθμιστή.

Με την ευκαιρία της ολοκλήρωσης των προπτυχιακών μου σπουδών, ευχαριστώ όλους τους φίλους που ευτύχησα να κάνω στη σχολή αυτά τα πέντε χρόνια, ιδιαίτερα τη Μαρία, τη Δήμητρα, το Σπύρο, την Κωνσταντίνα, το Θωδωρή και τον Παύλο, για τις ωραίες στιγμές που μου χάρισαν και τη συμπαράσταση που μου παρείχαν.

Τέλος, ένα μεγάλο ευχαριστώ στους γονείς μου, Γιώργο και Φανή, που μου καλλιέργησαν από μικρό την αγάπη για τη γνώση και με στηρίζουν αδιάκοπα μέχρι και σήμερα.

Περίληψη

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε το σύστημα ενός κυλινδρικού, αξονοσυμμετρικού, κατακόρυφου αντιδραστήρα χημικής απόθεσης από ατμό, με ένα ακίνητο οριζόντιο θερμαινόμενο υπόστρωμα απόθεσης και ψυχόμενα τοιχώματα. Για πίεση λειτουργίας 1300 Pa, θερμοκρασία τοιχωμάτων 300 K, θερμοκρασία υποστρώματος 700 K και θερμοκρασία ρεύματος εισόδου 298 K, το σύστημα χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη πολλαπλότητας μονίμων καταστάσεων για παροχές εισόδου μεταξύ $2.3 \cdot 10^{-5}$ kg/s και $5.0 \cdot 10^{-5}$ kg/s, λόγω διαφορετικών πιθανών μηχανισμών ροής. Σκοπός της εργασίας είναι η κατασκευή δυναμικού μοντέλου μειωμένης τάξης για έναν ευσταθή κλάδο καταστάσεων του παραπάνω συστήματος χρησιμοποιώντας μόνο δεδομένα από προσομοιώσεις και η χρήση του μοντέλου για την αυτόματη ρύθμιση του συστήματος. Για το σκοπό αυτό, λήφθηκαν δεδομένα της δυναμικής απόκρισης των πεδίων ροής και θερμοκρασίας για διάφορες επιβολές στην παροχή, στο εύρος $1.5 \cdot 10^{-5}$ kg/s - $6.0 \cdot 10^{-5}$ kg/s, από προσομοιώσεις ενός λεπτομερούς μοντέλου του συστήματος με τη χρήση εμπορικού λογισμικού υπολογιστικής ρευστοδυναμικής. Από την επεξεργασία των δεδομένων με τη μέθοδο της ανάλυσης κυρίων συνιστωσών, και με την εκπαίδευση κατάλληλων τεχνητών νευρωνικών δικτύων, κατασκευάστηκαν καταρχάς δύο υποψήφια μη γραμμικά μοντέλα διαφορετικής τάξης, τα οποία συγκρίθηκαν ως προς την ακρίβεια των προβλέψεών τους. Από τη σύγκριση προέκυψε ότι το ακριβέστερο μοντέλο είναι το χαμηλότερης τάξης, με μόνο μία χρονικά εξαρτώμενη παράμετρο και μέγιστο σχετικό σφάλμα κάτω από 1% σε σχέση με το λεπτομερές μοντέλο για όλες τις προβλέψεις που έγιναν. Το μοντέλο αυτό χρησιμοποιήθηκε στη συνέχεια σε έναν ρυθμιστή προβλεπτικού μοντέλου για την αυτόματη ρύθμιση του συστήματος σε μια σειρά δοκιμών, όπου έγινε σύγκριση με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση, που αποτελεί τη βιομηχανική πρακτική. Προέκυψε ότι για τις περιπτώσεις όπου δεν αλλάζει ο μηχανισμός ροής μεταξύ αρχικού και επιθυμητού σημείου, ο αυτόματος ρυθμιστής έχει συγκρίσιμη ή λίγο χειρότερη απόδοση από τον μη αυτόματο. Αντίθετα, όταν ο μηχανισμός ροής πρέπει να αλλάξει, μόνο ο αυτόματος ρυθμιστής καταφέρνει να οδηγήσει το σύστημα από τον έναν στον άλλο μηχανισμό.

Λέξεις-κλειδιά: χημική απόθεση από ατμό, υπολογιστική ρευστοδυναμική, πολλαπλότητα καταστάσεων, μείωση τάξης μοντέλου, ανάλυση κυρίων συνιστωσών, μέθοδος των στιγμιοτύπων, νευρωνικά δίκτυα, ρύθμιση μη-γραμμικού προβλεπτικού μοντέλου

Abstract

Development of a reduced order model of a chemical vapor deposition reactor with the method of Principal Component Analysis and artificial neural networks

In the present thesis, the system of a cylindrical, axial symmetric, vertical chemical vapor deposition reactor with one unmoving horizontal heated deposition substrate and cooled walls is studied. For operating pressure 1300 Pa, wall temperature 300 K, substrate temperature 700 K and inlet flow temperature 298 K, the system is characterized by a multiplicity of steady states for inlet mass flow rates between $2.3 \cdot 10^{-5}$ kg/s and $5.0 \cdot 10^{-5}$ kg/s, due to the coexistence of competing physical mechanisms. The aim of the thesis is the construction of a dynamic, reduced order model for a stable branch of states of the aforementioned system using solely data from simulations and the use of said model for the automatic control of the system. For this purpose, data of the dynamic response of the flow and temperature fields for various inlet mass flow rate profiles, in the range $1.5 \cdot 10^{-5}$ kg/s - $6.0 \cdot 10^{-5}$ kg/s, were taken from simulations of a detailed model of the system using a commercial computational fluid dynamics software. The implementation of proper orthogonal decomposition assisted by artificial neural networks for the determination of the time-dependent coefficients yields two surrogate nonlinear model candidates of different order. After comparing the accuracy of the prediction of these models, it was found that the one with the lowest order, having only one time dependent parameter and a maximum relative error of less than 1% compared to the detailed model for all predictions performed, was the most accurate. This model was subsequently used in a model predictive controller for the automatic control of the system in a series of trials, and the responses were compared to those of manual control, which is the industrial practice. It was found that in the cases where the flow mechanism between the initial and set point does not change, the automatic controller has comparable or slightly worse performance than the manual one. However, when the flow mechanism has to change, only the automatic controller can successfully lead the system from the one mechanism to the other.

Key words: chemical vapor deposition, computational fluid dynamics, multiplicity of states, model order reduction, proper orthogonal decomposition, method of snapshots, neural networks, nonlinear model predictive control

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες.....	i
Περίληψη.....	iii
Abstract	v
Κατάλογος σχημάτων	ix
Κατάλογος πινάκων.....	xv
1 Εισαγωγή	1
2 Το φυσικό σύστημα.....	3
2.1 Διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό	3
2.2 Περιγραφή του αντιδραστήρα	4
2.3 Μαθηματική διατύπωση του προβλήματος.....	5
2.4 Επίλυση του προβλήματος.....	7
2.5 Πολλαπλότητα των λύσεων	8
3 Μείωση τάξης μοντέλου	13
3.1 Γενικά στοιχεία.....	13
3.2 Μείωση τάξης δυναμικού συστήματος	14
3.3 Η μέθοδος Galerkin	14
3.4 Ανάλυση κυρίων συνιστωσών.....	15
3.4.1 Εισαγωγή	15
3.4.2 Κατασκευή βάσης και προβολής.....	16
3.4.3 Επιλογή της διάστασης της βάσης	17
3.5 Μέθοδος των στιγμιοτύπων	18
3.5.1 Περιγραφή της μεθόδου	18
3.5.2 Κανονικοποίηση δεδομένων.....	19
3.6 Αξιολόγηση της μείωσης τάξης – Σφάλματα	21
3.7 Τελικοί αλγόριθμοι.....	22
4 Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα	23
4.1 Γενικά στοιχεία.....	23
4.2 Ο νευρώνας	23
4.2.1 Ο βιολογικός νευρώνας.....	23
4.2.2 Μαθηματικό μοντέλο νευρώνα	25

4.3	Αρχιτεκτονικές νευρωνικών δικτύων.....	27
4.3.1	Δίκτυα πρόσθιας τροφοδότησης	28
4.3.2	Δίκτυο NARX.....	29
4.4	Καθολική προσέγγιση συναρτήσεων.....	30
4.5	Εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων	31
4.6	Εφαρμογή.....	33
4.7	Αξιολόγηση του νευρωνικού δικτύου – Σφάλματα	35
5	Ρύθμιση προβλεπτικού μοντέλου (MPC).....	37
5.1	Γενικά στοιχεία ρύθμισης.....	37
5.2	Γενικά στοιχεία και πλεονεκτήματα της MPC.....	38
5.3	Μαθηματική διατύπωση της μεθόδου	39
5.4	Εφαρμογή.....	41
5.5	Τελικός αλγόριθμος.....	43
6	Αποτελέσματα.....	45
6.1	Επιβολές	45
6.2	Μείωση τάξης.....	47
6.2.1	Κατασκευή βάσεων	47
6.2.2	Αξιολόγηση και σύγκριση βάσεων	47
6.3	Νευρωνικό δίκτυο	57
6.3.1	Εκπαίδευση	57
6.3.2	Αξιολόγηση και σύγκριση μη γραμμικών μοντέλων.....	58
6.4	Ρυθμιστής προβλεπτικού μοντέλου.....	68
6.4.1	Επιλογή ρυθμιζόμενων μεταβλητών.....	68
6.4.2	Χρονομέτρηση και επιλογή ορίζοντα.....	69
6.4.3	Δοκιμές συστήματος κλειστού βρόχου	71
7	Συμπεράσματα	93
8	Προτάσεις.....	95
9	Βιβλιογραφία.....	99

Κατάλογος σχημάτων

Σχήμα 2.1 Απεικόνιση των φαινομένων που απαρτίζουν τη διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό [Θ1]	3
Σχήμα 2.2 Τρισδιάσταση απεικόνιση κυλινδρικού, αξονοσυμμετρικού, κατακόρυφου αντιδραστήρα CVD με ένα ακίνητο οριζόντιο θερμαινόμενο υπόστρωμα απόθεσης και ψυχόμενα τοιχώματα [Θ1].....	4
Σχήμα 2.3 (α) Τομή του αντιδραστήρα CVD παράλληλη στη ροή [Θ1], (β) Η γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε για τους υπολογισμούς,, με περιστροφή της οποίας γύρω από τον άξονα συμμετρίας προκύπτει ο αντιδραστήρας, με σημειωμένες τις διαστάσεις.....	5
Σχήμα 2.4 Απεικόνιση του συστήματος διακριτού χρόνου, ανοικτού βρόχου	8
Σχήμα 2.5 Οι τρεις κλάδοι των λύσεων, όπου ο αριθμός Reynolds είναι ανάλογος της παροχής ενώ ο αριθμός Nusselt είναι αντιπροσωπευτικός της λύσης x [1].....	8
Σχήμα 2.6 Ισοθερμοκρασιακές καμπύλες (K) στη μόνιμη κατάσταση παροχής $\dot{m} = 3.5 \cdot 10^{-5}$ kg/s (α) στον κάτω ευσταθή κλάδο, (β) στον πάνω ευσταθή κλάδο.....	9
Σχήμα 2.7 Καμπύλες ίσης πυκνότητας (kg/m ³) στη μόνιμη κατάσταση παροχής $\dot{m} = 3.5 \cdot 10^{-5}$ kg/s (α) στον κάτω ευσταθή κλάδο, (β) στον πάνω ευσταθή κλάδο.....	9
Σχήμα 2.8 Καμπύλες ίσης αξονικής ταχύτητας (m/s) στη μόνιμη κατάσταση παροχής $\dot{m} = 3.5 \cdot 10^{-5}$ kg/s (α) στον κάτω ευσταθή κλάδο, (β) στον πάνω ευσταθή κλάδο· το θετικό πρόσημο δείχνει φορά προς τα κάτω.....	10
Σχήμα 2.9 Η πορεία της νόρμας σύγκλισης, $\ \mathbf{x}(t_k) - \mathbf{x}(t_{k-1})\ $, ως συνάρτηση του αριθμού της επανάληψης, k , σε δύο επιβολές στον κάτω κλάδο· ο χρόνος σύγκλισης στη μόνιμη κατάσταση αυξάνεται όσο πιο κοντά αυτή βρίσκεται σε σημείο στροφής	10
Σχήμα 2.10 Η πορεία της νόρμας σύγκλισης, $\ \mathbf{x}(t_k) - \mathbf{x}(t_{k-1})\ $, ως συνάρτηση του αριθμού της επανάληψης, k , σε μια επιβολή από τον κάτω στον πάνω κλάδο· παρατηρείται αρχικά απόκλιση και μετά σύγκλιση.....	10
Σχήμα 2.11 Ρυθμός απόθεσης σχηματιζόμενου υμενίου σε συνάρτηση με τη θέση του υποστρώματος, για την ίδια παροχή (α) στον κάτω ευσταθή κλάδο, (β) στον πάνω ευσταθή κλάδο [1]	11
Σχήμα 4.1 Ένας τυπικός βιολογικός νευρώνας με χημικές συνάψεις	23
Σχήμα 4.2 Απεικόνιση ενός τεχνητού νευρώνα [16].....	25
Σχήμα 4.3 Τεχνητό νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης ενός επιπέδου. Οι κύκλοι δεξιά αναπαριστούν τεχνητούς νευρώνες (επίπεδο εξόδου), οι κύκλοι αριστερά	

αναπαριστούν κόμβους εισόδου (επίπεδο εισόδου). Με χρώμα επισημαίνονται ενδεικτικά ορισμένες συνάψεις και τα αντίστοιχα συναπτικά βάρη.	27
Σχήμα 4.4 Τεχνητό νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης ενός επιπέδου. Το σκιασμένο παραλληλόγραμμο είναι το επίπεδο εισόδου, το λευκό παραλληλόγραμμο είναι επίπεδο νευρώνων. Κάτω από κάθε επίπεδο σημειώνεται ο αριθμός νευρώνων του (ή της διάστασης για το επίπεδο εισόδου). Μεταξύ δύο επιπέδων αναγράφεται ο πίνακας συναπτικών βαρών του επιπέδου-δέκτη. Το σύμβολο εντός του επιπέδου νευρώνων δείχνει ότι οι νευρώνες του επιπέδου έχουν συνάρτηση ενεργοποίησης με σιγμοειδή μορφή [σχέση (4.4)].	28
Σχήμα 4.5 Το χρησιμοποιούμενο δίκτυο NARX. Το σύμβολο στο νευρώνα εξόδου δηλώνει γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης [σχέση (4.3)]. (α) Αρχιτεκτονική εκπαίδευσης (σειριακή-παράλληλη), (β) Αρχιτεκτονική λειτουργίας (παράλληλη)	30
Σχήμα 4.6 Εκτίμηση της συνάρτησης $y = x^2$ από νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης 2 επιπέδων με 2 κρυφούς νευρώνες	33
Σχήμα 4.7 Το χρησιμοποιούμενο δίκτυο NARX σε πραγματικούς όρους. Σε σχέση με το Σχήμα 4.5: $\mathbf{x} = \mathbf{m}$, $\mathbf{y} = \mathbf{a}$, $L_0 = 1$, $L_2 = d$. (α) Αρχιτεκτονική εκπαίδευσης (σειριακή-παράλληλη), (β) Αρχιτεκτονική λειτουργίας (παράλληλη)	33
Σχήμα 5.1 Το σύστημα κλειστού βρόχου [9].....	41
Σχήμα 6.1 Ο συντελεστής α_1 ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας για τους δύο ευσταθείς κλάδους μόνιμων καταστάσεων	48
Σχήμα 6.2 Ο συντελεστής α_2 ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας για τους δύο ευσταθείς κλάδους μόνιμων καταστάσεων.....	48
Σχήμα 6.3 Ο συντελεστής α_3 ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας για τους δύο ευσταθείς κλάδους μόνιμων καταστάσεων.....	49
Σχήμα 6.4 Το σχετικό σφάλμα κάθε βάσης στην περιγραφή των καταστάσεων ισορροπίας στον κάτω κλάδο ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας.....	50
Σχήμα 6.5 Το σχετικό σφάλμα κάθε βάσης στην περιγραφή των καταστάσεων ισορροπίας στον πάνω κλάδο ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας	50
Σχήμα 6.6 Ο συντελεστής α_1 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή B1	51
Σχήμα 6.7 Ο συντελεστής α_2 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή B1	52
Σχήμα 6.8 Ο συντελεστής α_3 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή B1	52
Σχήμα 6.9 Το σχετικό σφάλμα κάθε βάσης ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή B1.	53
Σχήμα 6.10 Η μαζική παροχή ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή M1	54

Σχήμα 6.11 Ο συντελεστής α_1 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή M1.....	54
Σχήμα 6.12 Ο συντελεστής α_2 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή M1.....	55
Σχήμα 6.13 Ο συντελεστής α_3 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή M1.....	55
Σχήμα 6.14 Το σχετικό σφάλμα κάθε βάσης ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή M1	56
Σχήμα 6.15 Η μαζική παροχή ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή (α) M9, (β) M10, (γ) M11, (δ) M12.....	58
Σχήμα 6.16 Η μαζική παροχή ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή (α) M5, (β) M6, (γ) M7, (δ) M8.....	59
Σχήμα 6.17 Οι εκτιμήσεις $\hat{\alpha}_1$ των δύο μοντέλων για την επιβολή B20, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_1 ως συνάρτηση του χρόνου.....	59
Σχήμα 6.18 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_2$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή B20, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_2 ως συνάρτηση του χρόνου	60
Σχήμα 6.19 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_3$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή B20, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_3 ως συνάρτηση του χρόνου	60
Σχήμα 6.20 Οι εκτιμήσεις $\hat{\alpha}_1$ των δύο μοντέλων για την επιβολή B7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_1 ως συνάρτηση του χρόνου.....	61
Σχήμα 6.21 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_2$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή B7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_2 ως συνάρτηση του χρόνου	61
Σχήμα 6.22 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_3$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή B7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_3 ως συνάρτηση του χρόνου	62
Σχήμα 6.23 Οι εκτιμήσεις $\hat{\alpha}_1$ των δύο μοντέλων για την επιβολή M11, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_1 ως συνάρτηση του χρόνου	63
Σχήμα 6.24 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_2$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή M11, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_2 ως συνάρτηση του χρόνου	63
Σχήμα 6.25 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_3$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή M11, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_3 ως συνάρτηση του χρόνου	64
Σχήμα 6.26 Οι εκτιμήσεις $\hat{\alpha}_1$ των δύο μοντέλων για την επιβολή M7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_1 ως συνάρτηση του χρόνου.....	65
Σχήμα 6.27 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_2$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή M7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_2 ως συνάρτηση του χρόνου	65

Σχήμα 6.28 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_3$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή M7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_3 ως συνάρτηση του χρόνου	66
Σχήμα 6.29 Οι τιμές των τριών ρυθμιζόμενων θερμοκρασιών στη μόνιμη κατάσταση ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας για τους δύο ευσταθείς κλάδους	69
Σχήμα 6.30 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2 s και κανονική συνάρτηση κόστους	71
Σχήμα 6.31 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2 s και κανονική συνάρτηση κόστους, με την αντίστοιχη πρόβλεψη του μοντέλου για κάθε βήμα.....	72
Σχήμα 6.32 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2 s και κανονική συνάρτηση κόστους, με την αντίστοιχη πρόβλεψη του μοντέλου για κάθε βήμα.....	72
Σχήμα 6.33 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2 s και κανονική συνάρτηση κόστους, με την αντίστοιχη πρόβλεψη του μοντέλου για κάθε βήμα.....	73
Σχήμα 6.34 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2, 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή.....	74
Σχήμα 6.35 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2, 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	74
Σχήμα 6.36 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2, 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	75
Σχήμα 6.37 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2, 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	75
Σχήμα 6.38 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ2 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή.....	76
Σχήμα 6.39 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ2 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	77
Σχήμα 6.40 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ2 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	77

Σχήμα 6.41 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ2 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	78
Σχήμα 6.42 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ3 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή.....	79
Σχήμα 6.43 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ3 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	79
Σχήμα 6.44 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ3 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	80
Σχήμα 6.45 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ3 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	80
Σχήμα 6.46 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ4 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή.....	81
Σχήμα 6.47 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ4 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	82
Σχήμα 6.48 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ4 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	82
Σχήμα 6.49 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ4 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	83
Σχήμα 6.50 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ5 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή.....	84
Σχήμα 6.51 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ5 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	84
Σχήμα 6.52 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ5 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	85
Σχήμα 6.53 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ5 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	85
Σχήμα 6.54 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ5 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή .	86
Σχήμα 6.55 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ5 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση	87

Σχήμα 6.56 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ5 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση 87

Σχήμα 6.57 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ5 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση 88

Σχήμα 6.58 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ6 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή . 89

Σχήμα 6.59 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ6 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση 89

Σχήμα 6.60 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ6 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση 90

Σχήμα 6.61 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ6 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση 90

Κατάλογος πινάκων

Πίνακας 3.1 Αλγόριθμος κατασκευής βάσης μοντέλου μειωμένης τάξης. Τα αρχικά δεδομένα και τα τελικά αποτελέσματα του αλγορίθμου σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο	22
Πίνακας 3.2 Αλγόριθμος υπολογισμού συντελεστών γνωστής τροχιάς ως προς βάση. Τα αρχικά δεδομένα και τα τελικά αποτελέσματα του αλγορίθμου σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο	22
Πίνακας 6.1 Βηματικές επιβολές στο σύστημα ανοικτού βρόχου. Ο κλάδος σημειώνεται σε παρένθεση αν η αντίστοιχη μόνιμη κατάσταση βρίσκεται εκτός της περιοχής πολλαπλότητας	45
Πίνακας 6.2 Επιβολές μεταβαλλόμενης παροχής στο σύστημα ανοικτού βρόχου.....	46
Πίνακας 6.3 Σχετικό πληροφοριακό περιεχόμενο προσεγγίσεων POD για διαφορετικές διαστάσεις βάσης.....	47
Πίνακας 6.4 Μέσο τετραγωνικό σχετικό σφάλμα [σχέση (3.58)] (%) των δεδομένων αξιολόγησης των βάσεων	56
Πίνακας 6.5 Μέγιστο σχετικό σφάλμα [σχέση (3.59)] (%) των δεδομένων αξιολόγησης των βάσεων	57
Πίνακας 6.6 Σχετικά σφάλματα (%) του μοντέλου της Z1 για τις επιβολές εκπαίδευσης. Οι μέγιστες τιμές κάθε στήλης σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο	66
Πίνακας 6.7 Σχετικά σφάλματα (%) του μοντέλου της Z1 για τις επιβολές ελέγχου. Οι μέγιστες τιμές κάθε στήλης σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο	67
Πίνακας 6.8 Σχετικά σφάλματα (%) του μοντέλου της Z3 για τις επιβολές εκπαίδευσης. Οι μέγιστες τιμές κάθε στήλης σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο	67
Πίνακας 6.9 Σχετικά σφάλματα (%) του μοντέλου της Z3 για τις επιβολές ελέγχου. Οι μέγιστες τιμές κάθε στήλης σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο	67
Πίνακας 6.10 Διάρκεια επίλυσης του προβλήματος αριστοποίησης για διαφορετικές τιμές ορίζοντα πρόβλεψης και ελέγχου και περιόδου δειγματοληψίας.....	70
Πίνακας 6.11 Διάρκεια επίλυσης του πλήρους μοντέλου για τον υπολογισμό της επόμενης κατάστασης του συστήματος.....	70
Πίνακας 6.12 Οι δοκιμές του συστήματος κλειστού βρόχου	71

1 Εισαγωγή

Το υπό μελέτη σύστημα ενός αντιδραστήρα χημικής απόθεσης από ατμό παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον, τόσο πρακτικό όσο και θεωρητικό. Η διεργασία είναι ευρύτατα διαδεδομένη για την παραγωγή μιας μεγάλης ποικιλίας προϊόντων, από εργαλεία μέχρι ημιαγωγούς και από γυάλινες φιάλες για φάρμακα έως διακοσμητικά αντικείμενα. Εμφαση σε αυτήν την εργασία δίνεται στην παραγωγή ημιαγωγών και συγκεκριμένα υμενίου GaN για χρήση σε LEDs. Η συνήθης πρακτική στη βιομηχανία είναι η ρύθμιση της διεργασίας να γίνεται σχεδόν διαισθητικά από το χειριστή παρότι το τελικό προϊόν είναι μεγάλης αξίας, οι πρώτες ύλες ακριβές και η διεργασία εξαιρετικά πολύπλοκη λόγω μη γραμμικών φαινομένων και σύνθετων χημικών μηχανισμών. Έχει διαπιστωθεί ότι σε τέτοιους αντιδραστήρες παρατηρούνται φαινόμενα πολλαπλότητας καταστάσεων, με δύο ευσταθείς και μια ασταθή μόνιμες καταστάσεις για τις ίδιες συνθήκες λειτουργίας, καθιστώντας έτσι τη δυναμική απόκριση του συστήματος ιδιαίτερα πολύπλοκη [1].

Τα τελευταία χρόνια, έχει γίνει σημαντική προσπάθεια για την ανάπτυξη αξιόπιστων εμπορικών λογισμικών για την προσομοίωση με ακρίβεια σύνθετων φυσικών συστημάτων. Τα λογισμικά αυτά λειτουργούν δημιουργώντας ένα πλέγμα που διακριτοποιεί το χώρο ή και το χρόνο και επιλύουν τις κατάλληλες εξισώσεις σε κάθε κόμβο του πλέγματος. Όσο μεγαλύτερη ακρίβεια απαιτείται, τόσο πυκνότερο πρέπει να είναι το πλέγμα, άρα τόσο αυξάνεται η διάσταση της λύσης, δηλαδή το πλήθος των μεταβλητών, του συστήματος, αλλά και ο χρόνος επίλυσης.

Κύριος στόχος της εργασίας είναι η κατασκευή ενός μικρής τάξης δυναμικού μοντέλου για τον έναν ευσταθή κλάδο μόνιμων καταστάσεων του παραπάνω συστήματος, χρησιμοποιώντας αποτελέσματα από ένα μεγάλης τάξης, λεπτομερές μοντέλο, το οποίο επιλύεται από εμπορικό κώδικα υπολογιστικής ρευστοδυναμικής. Έτσι, συνδυάζεται η αξιοπιστία που παρέχουν οι εμπορικοί κώδικες στην ανάλυση και την πρόβλεψη της συμπεριφοράς των συστημάτων, με την ταχύτητα στους υπολογισμούς που είναι απαραίτητη για σκοπούς όπως η ρύθμιση κι η αριστοποίηση σε πραγματικό χρόνο. Για το λόγο αυτό, τίθεται ως στόχος και ο σχεδιασμός ενός ευσταθούς αυτόματου ρυθμιστή που να χρησιμοποιεί το μοντέλο μειωμένης τάξης, καθώς και η διερεύνηση των δυνατοτήτων αυτού του ρυθμιστή, σε σύγκριση με την μη αυτόματη ρύθμιση της διεργασίας.

Το λεπτομερές μοντέλο είναι κατανεμημένο, επομένως τα διαφορά μεγέθη παρουσιάζουν εξάρτηση από το χρόνο αλλά και από τη θέση στο χώρο. Η μεθοδολογία που χρησιμοποιείται για την ανάπτυξη του μοντέλου μειωμένης τάξης αποτελείται από δύο στάδια. Στο πρώτο στάδιο, χρησιμοποιείται η ανάλυση κυρίων συνιστωσών, και ειδικότερα η μέθοδος των στιγμιοτύπων, με τη βοήθεια της οποίας αίρεται η χωρική εξάρτηση και μειώνεται η τάξη του μοντέλου, καθώς υπολογίζεται μικρός αριθμός από χαρακτηριστικές κατανομές των μεγεθών στο χώρο (ιδιοκαταστάσεις), ώστε κάθε πιθανή κατάσταση να μπορεί να αναπαραχθεί ως γραμμικός συνδυασμός των κατανομών αυτών. Στο δεύτερο στάδιο, χρησιμοποιούνται τεχνητά νευρωνικά δίκτυα, με τα οποία αντιμετωπίζεται η χρονική εξάρτηση, αφού προσδιορίζεται μη γραμμικό δυναμικό μοντέλο που προβλέπει την

Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή

εξέλιξη στο χρόνο των συντελεστών του παραπάνω γραμμικού συνδυασμού, ώστε τελικά να μπορεί να προβλεφθεί η δυναμική συμπεριφορά του συστήματος [2][3].

Σημαντικό πλεονέκτημα και των δύο παραπάνω μεθόδων αποτελεί ότι δεν απαιτούν καμιά υπόθεση για το σύστημα, τις εξισώσεις που το περιγράφουν ή τη μορφή της λύσης. Αντίθετα, όλη η ανάπτυξη του μοντέλου μειωμένης τάξης γίνεται με μόνα δεδομένα τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων από τον εμπορικό κώδικα, επομένως η μεθοδολογία μπορεί να επεκταθεί και σε άλλα, περισσότερο ή λιγότερο παρόμοια, συστήματα. Απαραίτητες προϋποθέσεις επιτυχίας της μεθοδολογίας είναι η πραγματοποίηση κατάλληλων προσομοιώσεων ώστε να ενεργοποιηθούν όλες οι σημαντικές πτυχές της δυναμικής, καθώς και η σωστή επιλογή των παραμέτρων του νευρωνικού δικτύου.

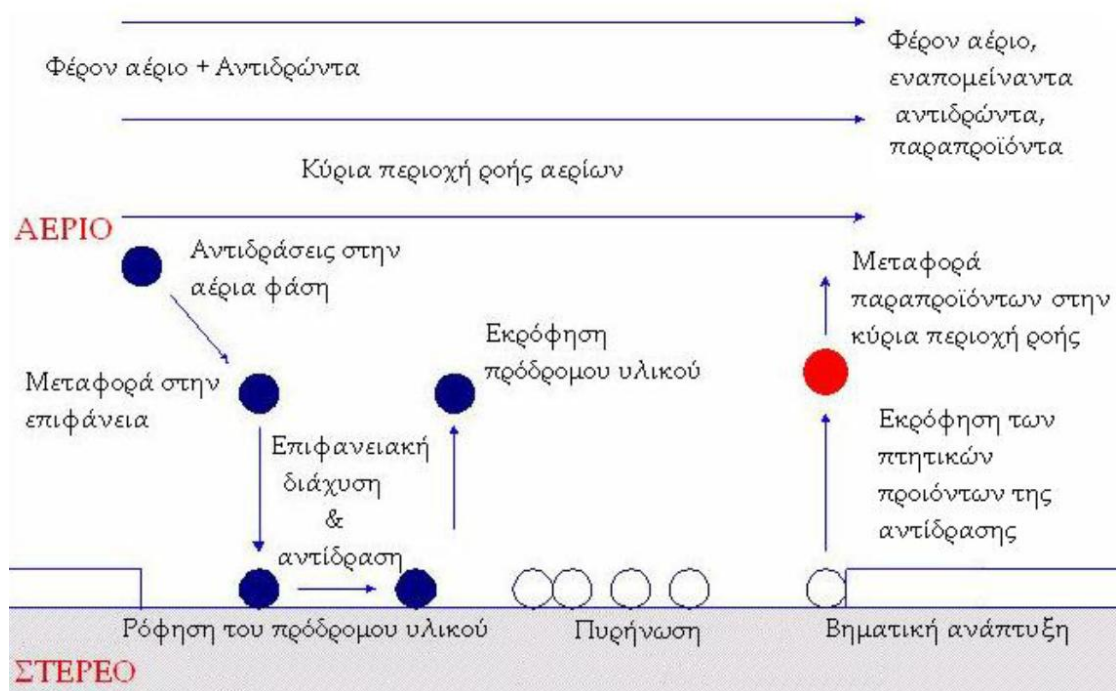
Η αξιοπιστία του μοντέλου ελέγχεται με τη χρήση του σε έναν αυτόματο ρυθμιστή προβλεπτικού μοντέλου. Ο ρυθμιστής καλείται να οδηγήσει το σύστημα σε μια σειρά από καταστάσεις που καλύπτουν μεγάλο εύρος του κλάδου που μοντελοποιείται, ενώ στο τέλος επιχειρείται και αλλαγή κλάδου, δηλαδή το σύστημα αρχικά να ξεκινά από μια κατάσταση του ευσταθούς κλάδου που δεν έχει μοντελοποιηθεί.

Η εργασία διαρθρώνεται ως εξής: αρχικά περιγράφεται το φυσικό σύστημα και ο τρόπος λήψης δεδομένων από το λεπτομερές μοντέλο (Κεφάλαιο 2). Στη συνέχεια αναπτύσσεται το θεωρητικό υπόβαθρο της μεθοδολογίας της κατασκευής του μοντέλου μικρής τάξης, δηλαδή της ανάλυσης κυρίων συνιστωσών (Κεφάλαιο 3) και των τεχνητών νευρωνικών δικτύων (Κεφάλαιο 4), ενώ ακολουθούν θεωρητικά στοιχεία πάνω στη ρύθμιση προβλεπτικού μοντέλου (Κεφάλαιο 5). Στο τέλος καθενός από τα παραπάνω κεφάλαια συνοψίζονται οι απαραίτητες εξισώσεις και οι αλγόριθμοι που χρησιμοποιούνται στους υπολογισμούς. Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογισμών (Κεφάλαιο 6) και η εργασία ολοκληρώνεται με τα συμπεράσματα που προκύπτουν (Κεφάλαιο 7) και προτάσεις για περαιτέρω έρευνα (Κεφάλαιο 8).

2 Το φυσικό σύστημα

2.1 Διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό

Η χημική απόθεση από ατμό (ΧΑΑ) (chemical vapor deposition, CVD) είναι μια διεργασία παραγωγής λεπτών στερεών υμενίων (films) με ευρεία εφαρμογή στην μικροηλεκτρονική, χάρη στην εύκολη προσαρμογή των συνθηκών παραγωγής στις εκάστοτε απαιτήσεις του προϊόντος. Πρόκειται για μια ετερογενή χημική διεργασία που λαμβάνει χώρα στην αέρια και την στερεά φάση μέσα σε αντιδραστήρα (αντιδραστήρας ΧΑΑ). Τα αντιδρώντα περιέχονται στο πρόδρομο υλικό (precursor) και μεταφέρονται με τη βοήθεια ενός φέροντος αερίου από την είσοδο του αντιδραστήρα σε στερεά δισκία (wafers) τα οποία στηρίζονται σε ειδικές επιφάνειες (υποστρώματα, substrates), συχνά κρυσταλλικές, για παράδειγμα από χαλαζία, στο εσωτερικό του αντιδραστήρα. Εκεί τα αντιδρώντα αποτίθενται και αντιδρούν σχηματίζοντας υμένια μετάλλων, ημιαγωγών, μονωτών και επιστρώσεων. Επιπλέον, αντιδράσεις μπορεί να λαμβάνουν χώρα και στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα στην αέρια φάση. Το συνολικό φαινόμενο είναι ιδιαίτερα σύνθετο, καθώς περιλαμβάνει ταυτόχρονα φαινόμενα μεταφοράς ορμής, θερμότητας και μάζας και περίπλοκους μηχανισμούς χημικής κινητικής. Τα παραπάνω απεικονίζονται συνοπτικά στο Σχήμα 2.1 [4].



Σχήμα 2.1 Απεικόνιση των φαινομένων που απαρτίζουν τη διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό [Θ1]

Λειτουργικές παράμετροι που διαφοροποιούν τις διεργασίες CVD μεταξύ τους είναι η πίεση στον αντιδραστήρα, όπου διακρίνονται η χαμηλής πίεσης (0.001 atm) CVD και η ατμοσφαιρικής πίεσης CVD, και ο τρόπος παροχής της ενέργειας ενεργοποίησης στο δισκίο, όπου διακρίνονται η απλή CVD, όπου το δισκίο θερμαίνεται άμεσα, η φωτονιακά

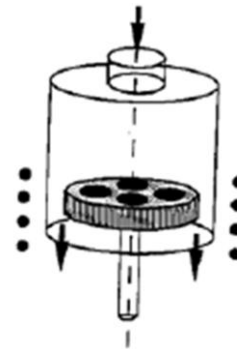
βοηθούμενη CVD, όπου η ενέργεια παρέχεται μέσω laser ή υπεριώδους ακτινοβολίας, και η CVD υποβοηθούμενη από πλάσμα. Τέλος, διαφοροποίηση προκύπτει και από το είδος του προϊόντος, που μπορεί να είναι Si από $\text{Si}_{4-x}\text{Cl}_x$ ή SiH_4 , GaAs από $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ και AsH_3 , InP από $\text{In}(\text{CH}_3)_3$ και PH_3 , κ.ά. [4].

Οι βασικές ιδιότητες που καθορίζουν την ποιότητα των παραγόμενων υμενίων είναι το πάχος, η ομοιομορφία, η μορφολογία της επιφάνειας, η σύσταση και η καθαρότητα. Οι ιδιότητες αυτές πρέπει να είναι ελεγχόμενες και αναπαραγωγίσιμες για τις ίδιες συνθήκες της διεργασίας. Το αποδεκτό εύρος διακύμανσης των ιδιοτήτων αυτών εξαρτάται από το είδος της διεργασίας, το υλικό και την χρήση για την οποία προορίζεται το υμένιο [4].

Οι αντιδραστήρες ΧΑΑ απαρτίζονται από τέσσερα κύρια μέρη: το σύστημα εισόδου, τον κυρίως αντιδραστήρα, την πηγή θέρμανσης και το σύστημα εξαγωγής των αερίων. Έχουν αναπτυχθεί πολλά είδη αντιδραστήρων, για την παραγωγή υμενίων διαφορετικών ιδιοτήτων, οι οποίοι διαφοροποιούνται ως προς το μέγεθος, το σχήμα (κυλινδρικό, επίπεδο), τον προσανατολισμό του ίδιου του αντιδραστήρα και του δισκίου εντός του (οριζόντιος, κατακόρυφος, πλάγιος προσανατολισμός), το πλήθος των υποστρωμάτων εντός του αντιδραστήρα (ένα, περισσότερα), τη δυνατότητα ή όχι περιστροφής του δισκίου, και την ψύξη ή θέρμανση των τοιχωμάτων, η οποία αποτρέπει την απόθεση στα τοιχώματα ή δημιουργεί δευτερεύουσες ροές άνωσης λόγω θερμοκρασιακής βαθμίδας, αντίστοιχα [4].

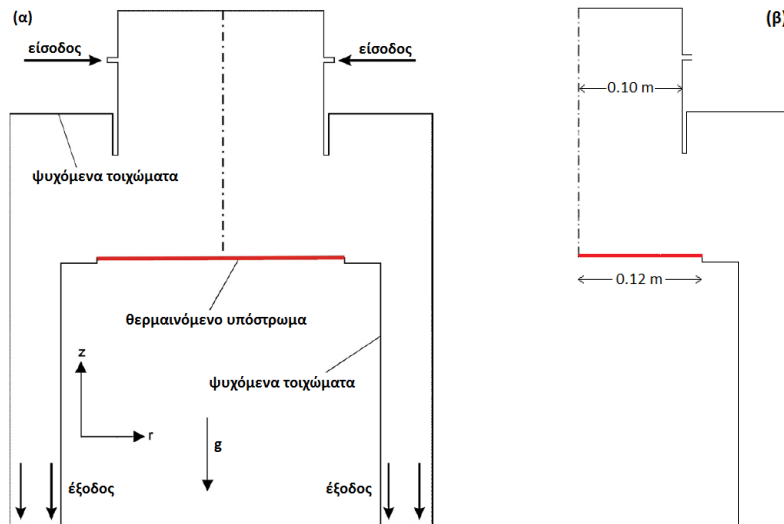
2.2 Περιγραφή του αντιδραστήρα

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται κυλινδρικός, αξονοσυμμετρικός, κατακόρυφος αντιδραστήρας, με ένα ακίνητο οριζόντιο θερμαινόμενο (στους 700 K) υπόστρωμα απόθεσης και ψυχόμενα (στους 300 K) τοιχώματα. Ο αντιδραστήρας αυτός (Σχήμα 2.2) χρησιμοποιείται ευρέως στην έρευνα των διεργασιών χημικής απόθεσης από ατμό αλλά και στην παραγωγή σύνθετων ημιαγωγών και μικροηλεκτρονικών με βάση το πυρίτιο [4].



Σχήμα 2.2 Τρισδιάσταση απεικόνιση κυλινδρικού, αξονοσυμμετρικού, κατακόρυφου αντιδραστήρα CVD με ένα ακίνητο οριζόντιο θερμαινόμενο υπόστρωμα απόθεσης και ψυχόμενα τοιχώματα [Θ1]

Ειδικότερα, το αέριο εισέρχεται ακτινικά υπό μορφή jet από το πάνω μέρος του αντιδραστήρα στο σωλήνα έγχυσης, διαμέτρου 0.20 m, ο οποίος οδηγεί στο υπόστρωμα, διαμέτρου 0.24 m [5]. Εκεί αποτίθενται τα στερεά προϊόντα της αντίδρασης σχηματίζοντας το υμένιο ενώ η ροή κατευθύνεται στην δακτυλιοειδή έξοδο του αντιδραστήρα. Στο Σχήμα 2.3 απεικονίζεται ακριβέστερα η γεωμετρία του αντιδραστήρα με τις παραπάνω διαστάσεις του.



Σχήμα 2.3 (α) Τομή του αντιδραστήρα CVD παράλληλη στη ροή [Θ1], (β) Η γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε για τους υπολογισμούς,, με περιστροφή της οποίας γύρω από τον άξονα συμμετρίας προκύπτει ο αντιδραστήρας, με σημειωμένες τις διαστάσεις

2.3 Μαθηματική διατύπωση του προβλήματος

Στην εργασία αυτή μελετάται η ταυτόχρονη ροή αδρανούς αερίου (N_2) και μεταφορά ενέργειας στον παραπάνω αντιδραστήρα, ενώ δεν λαμβάνονται υπόψη χημικές αντιδράσεις, ούτε στην αέρια φάση ούτε στη στερεά επιφάνεια. Η απλοποίηση αυτή στηρίζεται στο γεγονός ότι στην πράξη εισέρχεται στον αντιδραστήρα πολύ αραιό μίγμα αντιδρώντων στο οποίο το N_2 δρα ως φέρον αέριο, ενώ και όλα τα συστατικά έχουν παρόμοιο μοριακό βάρος. Υπό τις συνθήκες αυτές, έχει αποδειχθεί ότι τα πεδία ροής και θερμοκρασίας που προκύπτουν από την επίλυση των εξισώσεων χωρίς την παρουσία χημικών αντιδράσεων ελάχιστα διαφέρουν από τα αντίστοιχα πεδία που προκύπτουν με παρουσία αντιδράσεων [1].

Η πίεση λειτουργίας είναι 1300 Pa κι έτσι θεωρείται ότι ισχύει η εξίσωση των ιδανικών αερίων και η υπόθεση του συνεχούς μέσου, ενώ η ροή είναι στρωτή [1],[5].

Με δεδομένα τα παραπάνω, οι διαφορικές εξισώσεις που ισχύουν στον όγκο του αντιδραστήρα και περιγράφουν το φαινόμενο είναι, σε διανυσματική μορφή και σε μεταβατική κατάσταση, οι εξής [1],[6]:

(α) Εξίσωση συνέχειας:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.1)$$

όπου t είναι ο χρόνος, ρ είναι η πυκνότητα του αερίου και \mathbf{v} η ταχύτητα.

(β) Εξίσωση ορμής:

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (2.2)$$

όπου p είναι η πίεση και \mathbf{g} η επιτάχυνση της βαρύτητας. Ο τανυστής της τάσης, $\boldsymbol{\tau}$, είναι:

Κεφάλαιο 2: Το φυσικό σύστημα

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left((\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \quad (2.3)$$

όπου μ το ιξώδες και \mathbf{I} ο μοναδιαίος τανυστής.

(γ) Εξίσωση ενέργειας:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}(\rho e + p)) = \nabla \cdot (k \nabla T + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) \quad (2.4)$$

όπου k είναι η θερμική αγωγιμότητα, T η θερμοκρασία και e η ειδική εσωτερική ενέργεια, ίση με:

$$e = h - \frac{p}{\rho} + \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2} \quad (2.5)$$

όπου h είναι η ειδική ενθαλπία, που υπολογίζεται ως εξής:

$$h = \int_{T_{ref}}^T c_p dT \quad (2.6)$$

όπου c_p είναι η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση και $T_{ref} = 298.15$ K, θερμοκρασία αναφοράς.

(δ) Εξίσωση ιδανικών αερίων:

$$\rho = \frac{pM}{RT} \quad (2.7)$$

όπου M είναι το μοριακό βάρος του αζώτου και R η παγκόσμια σταθερά των ιδανικών αερίων.

Οι συνοριακές συνθήκες που απαιτούνται για την επίλυση των παραπάνω μερικών διαφορικών εξισώσεων είναι οι εξής [1],[5]:

(α) Στην είσοδο του αντιδραστήρα, το αέριο εισέρχεται με δεδομένη θερμοκρασία:

$$T = T_{in} = 298 \text{ K} \quad (2.8)$$

και με ομοιόμορφη ταχύτητα κάθετη στην είσοδο, η οποία υπολογίζεται από την μαζική παροχή, η οποία εν γένει μεταβάλλεται με το χρόνο:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = \frac{\dot{m}(t)}{2\pi L_{in}} \text{ και } \mathbf{n} \times \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (2.9)$$

όπου \mathbf{n} είναι το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια, \dot{m} η μαζική παροχή και L_{in} το πάχος (ύψος) του δακτυλιοειδούς στομίου εισόδου. Η μαζική παροχή κυμαίνεται μεταξύ των τιμών $1.5 \cdot 10^{-5}$ kg/s και $6.0 \cdot 10^{-5}$ kg/s.

(β) Στην έξοδο του αντιδραστήρα, επιβάλλεται ταχύτητα κάθετη στην έξοδο, μηδενική βαθμίδα θερμοκρασίας και ροής μάζας και τιμή αναφοράς για την πίεση:

$$\mathbf{n} \cdot (\nabla \rho \mathbf{u}) = 0 \text{ και } \mathbf{n} \times \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (2.10)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla T = 0 \quad (2.11)$$

(γ) Στα τοιχώματα του αντιδραστήρα, για την ταχύτητα ισχύει η συνθήκη μη ολίσθησης:

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (2.12)$$

ενώ η θερμοκρασία διατηρείται στη σταθερή τιμή που έχει προαναφερθεί:

$$T = \begin{cases} T_c = 300 \text{ K} & \text{για τα ψυχόμενα τοιχώματα} \\ T_h = 700 \text{ K} & \text{για το θερμαινόμενο υπόστρωμα} \end{cases} \quad (2.13)$$

(δ) Στον άξονα συμμετρίας, η ταχύτητα έχει μηδενική συνιστώσα κάθετη στον άξονα ενώ και η βαθμίδα κάθε μεταβλητής είναι μηδενική στη διεύθυνση την κάθετη στον άξονα:

$$\mathbf{n} \cdot (\nabla \rho \mathbf{u}) = 0 \text{ και } \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.14)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla T = 0 \quad (2.15)$$

Επισημαίνεται ότι η μοναδική από τις συνοριακές συνθήκες που αλλάζει με τον χρόνο και καθιστά το φαινόμενο μεταβατικό είναι η παροχή $\dot{m}(t)$. Επιπλέον, η παροχή είναι η μοναδική μεταβλητή εισόδου που μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως μεταβλητή χειρισμού σε ένα σύστημα ρύθμισης. Αυτό συμβαίνει διότι οι άλλες μεταβλητές εισόδου, δηλαδή η θερμοκρασία των τοιχωμάτων T_c και η θερμοκρασία του υποστρώματος T_h διατηρούνται σταθερές λόγω περιορισμών που τίθενται από τις χημικές αντιδράσεις.

Εκτός από τις συνοριακές συνθήκες, απαιτούνται και αρχικές συνθήκες, οι οποίες είναι γνωστές κατανομές στο χώρο των πεδίων $\rho(\mathbf{r}, 0)$, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, 0)$ και $T(\mathbf{r}, 0)$ τη στιγμή $t = 0$, οι οποίες έχουν προκύψει συνήθως ως λύση του προβλήματος {(2.1)-(2.15)} σε μόνιμη κατάσταση για κάποια τιμή παροχής $\dot{m}(0)$. Η ζητούμενη λύση του προβλήματος είναι οι κατανομές των παραπάνω πεδίων στο χώρο και τον χρόνο, $\rho(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ και $T(\mathbf{r}, t)$.

2.4 Επίλυση του προβλήματος

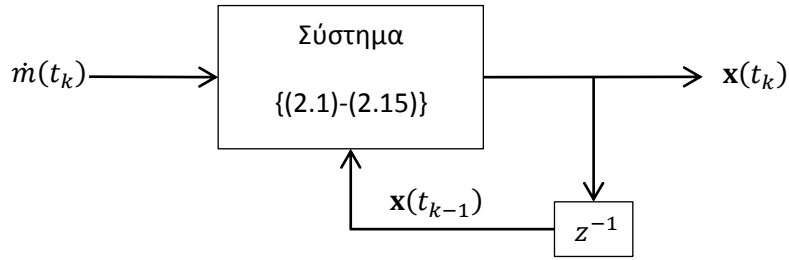
Η επίλυση του προβλήματος γίνεται σε κυλινδρικές συντεταγμένες με χρήση του εμπορικού κώδικα υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (computational fluid dynamics, CFD) Ansys FLUENT (στο εξής Fluent) [7] το οποίο εφαρμόζει τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων [8], ενώ διαθέτει και συσχετίσεις και βάση δεδομένων που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό του ιξώδους και της ειδικής θερμοχωρητικότητας υπό σταθερή πίεση του αζώτου [6]. Για το σκοπό αυτό το χωρίο στο Σχήμα 2.3(β) διαμερίζεται σε 15066 κελιά, σε καθένα από τα οποία υπολογίζονται, για κάθε χρονική στιγμή, οι τιμές πυκνότητας και θερμοκρασίας καθώς και η ακτινική και η αξονική συνιστώσα της ταχύτητας, δημιουργώντας έτσι για κάθε χρονική στιγμή 60264 βαθμούς ελευθερίας, ή ισοδύναμα ένα διάνυσμα κατάστασης $\mathbf{x}(t)$ με 60264 στοιχεία ($\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^N, N = 60264$). Για να ελεγχθεί η ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα, έχει γίνει προσομοίωση και σε πλέγμα 35000 κελιών, με σχετικό σφάλμα μεταξύ των δύο λύσεων μικρότερο από 2% [1]. Επιπλέον, διακριτοποιείται και ο χρόνος, σε χρονικά βήματα διάρκειας $\Delta t = 0.1 \text{ s}$.

Κατά τη διαδικασία της λύσης, ο Fluent δεν αφήνεται να συγκλίνει για κάθε χρονική στιγμή στη λύση της μεταβατικής κατάστασης, αλλά αντίθετα καλείται επανηλειμμένα εξωτερικά μέσω περιβάλλοντος Matlab [9], εισάγοντας στην k επανάληψη τις αρχικές συνθήκες ως διάνυσμα $\mathbf{x}(t_{k-1})$ καθώς και την παροχή $\dot{m}(t_k)$. Κάθε τέτοια εξωτερική κλήση αντιστοιχεί σε εύρεση της λύσης ένα χρονικό βήμα μετά την κατάσταση $\mathbf{x}(t_{k-1})$ κατά τη διάρκεια του οποίου η παροχή είναι $\dot{m}(t_k)$. Κάθε φορά που καλείται ο Fluent, πραγματοποιεί 300 βήματα της επαναληπτικής μεθόδου στο πέρας των οποίων θεωρείται ότι έχει επιτευχθεί σύγκλιση στη λύση $\mathbf{x}(t_k)$. Στην πραγματικότητα, τα υπόλοιπα (residuals) της μεθόδου των πεπερασμένων όγκων είναι, για μεν την εξίσωση συνέχειας (2.1) της τάξης του 10^{-5} , για δε τις άλλες τρεις εξισώσεις (2.2)-(2.4) της τάξης του 10^{-8} το πολύ, οπότε η παραδοχή σύγκλισης θεωρείται εύλογη. Σύμφωνα με την παραπάνω διακριτοποίηση του χρόνου, ισχύουν:

$$t_0 = 0 \text{ s} \quad (2.16)$$

$$t_k = t_{k-1} + \Delta t, k \in \mathbb{N}^* \quad (2.17)$$

Η παροχή $\dot{m}(t)$ είναι η μόνη ανεξάρτητη μεταβλητή, της οποίας την επιβολή καθορίζει ο χρήστης. Επομένως, η $\dot{m}(t)$ δρα ως μεταβλητή εισόδου και η κατάσταση $\mathbf{x}(t)$ ως μεταβλητή εξόδου για το σύστημα διακριτού χρόνου, ανοικτού βρόχου που φαίνεται στο Σχήμα 2.4, όπου το z^{-1} συμβολίζει τη μετατόπιση κατά ένα βήμα στο παρελθόν.



Σχήμα 2.4 Απεικόνιση του συστήματος διακριτού χρόνου, ανοικτού βρόχου

Στο τέλος μιας επιβολής i με διάρκεια m_i χρονικά βήματα ($0 \leq k \leq m_i - 1$) έχουν συγκεντρωθεί m_i διαδοχικά διανύσματα $\mathbf{x}(t_k)$, καθένα από τα οποία αποτελεί ένα στιγμιότυπο (snapshot) του συστήματος, και όλα μαζί απαρτίζουν την τροχιά (trajectory) του συστήματος στο χρόνο. Τα στιγμιότυπα αυτά οργανώνονται στον πίνακα τροχιάς της συγκεκριμένης επιβολής:

$$\mathbf{Y}_i = [\mathbf{x}(t_0) \ \mathbf{x}(t_1) \ \dots \ \mathbf{x}(t_{m_i-1})] \in \mathbb{R}^{N \times m_i} \quad (2.18)$$

Σε περίπτωση που γίνεται βηματική επιβολή στην παροχή:

$$\dot{m}(t_k) = \begin{cases} \dot{m}_0 & k = 0 \\ \dot{m}_f & k > 0 \end{cases} \quad (2.19)$$

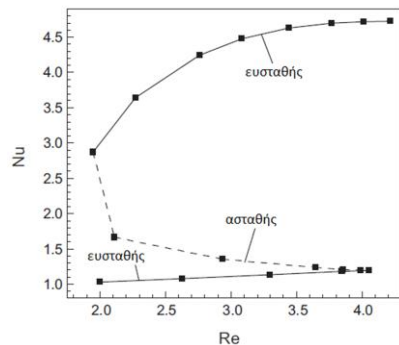
και η επίλυση γίνεται μέχρι σύγκλισης σε μόνιμη κατάσταση, η σύγκλιση αυτή ελέγχεται εξωτερικά του Fluent, μέσω της νόρμας της διαφοράς δύο διαδοχικών στιγμιότυπων, η οποία πρέπει να είναι μικρότερη από μια ανοχή (tolerance, tol):

$$\|\mathbf{x}(t_k) - \mathbf{x}(t_{k-1})\| < tol \quad (2.20)$$

Η ανοχή που χρησιμοποιήθηκε είναι $tol = 10^{-4}$, καθώς μετά από δοκιμές κρίθηκε ότι για την αποτύπωση της δυναμικής απόκρισης του συστήματος αυτή είναι αρκετή. Σημειώνεται ότι σε όλη την εργασία η νόρμα που χρησιμοποιείται είναι η Ευκλείδεια.

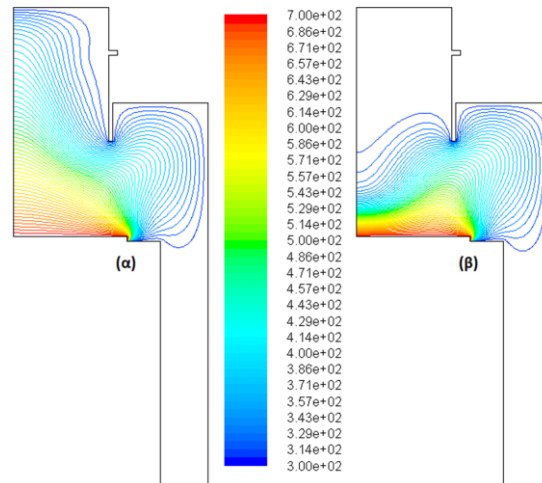
2.5 Πολλαπλότητα των λύσεων

Ένα ενδιαφέρον χαρακτηριστικό του συγκεκριμένου συστήματος είναι η πολλαπλότητα των λύσεων μόνιμης κατάστασης, η οποία μάλιστα διαπιστώθηκε πρόσφατα [1] και οφείλεται, από μαθηματική άποψη, στους μη γραμμικούς όρους των εξισώσεων (2.2) και (2.4). Ειδικότερα, για κάθε τιμή παροχής \dot{m}



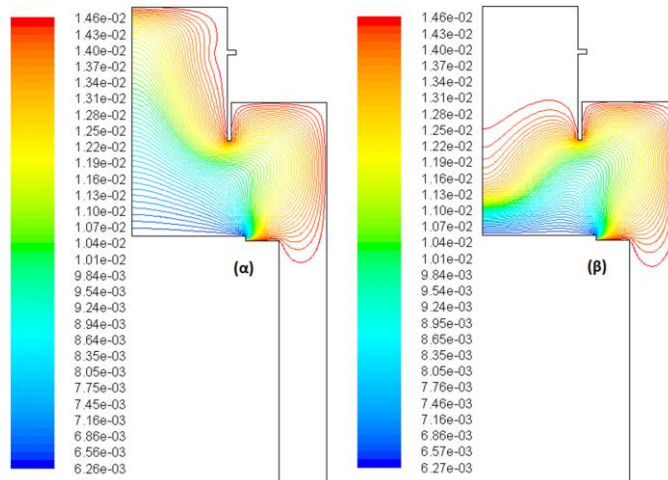
Σχήμα 2.5 Οι τρεις κλάδοι των λύσεων, όπου ο αριθμός Reynolds είναι ανάλογος της παροχής ενώ ο αριθμός Nusselt είναι αντιπροσωπευτικός της λύσης \mathbf{x} [1]

μεταξύ $\dot{m}_{t1} = 2.3 \cdot 10^{-5}$ kg/s και $\dot{m}_{t2} = 5.0 \cdot 10^{-5}$ kg/s, υπάρχουν τρεις μόνιμες καταστάσεις, δύο ευσταθείς και μία ασταθής, στις οποίες μπορεί να συγκλίνει το σύστημα σε μια βηματική επιβολή, ανάλογα με την αρχική του κατάσταση. Έτσι, το σύνολο των λύσεων μόνιμης κατάστασης μπορεί να παρασταθεί γραφικά σε τρεις κλάδους, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.5, όπου η παροχή έχει αντικατασταθεί με έναν αντίστοιχο αριθμό Reynolds και η μόνιμη κατάσταση χαρακτηρίζεται από έναν αντιπροσωπευτικό αριθμό Nusselt, όπως οι αριθμοί αυτοί ορίζονται στο [1].



Σχήμα 2.6 Ισοθερμοκρασιακές καμπύλες (K) στη μόνιμη κατάσταση παροχής $\dot{m} = 3.5 \cdot 10^{-5}$ kg/s (α) στον κάτω ευσταθή κλάδο, (β) στον πάνω ευσταθή κλάδο

Η φυσική σημασία αυτού του μαθηματικού αποτελέσματος είναι ότι στο σύστημα υπάρχουν δύο αντιμαχόμενοι μηχανισμοί: αφενός η φυσική κυκλοφορία, όπου κυριαρχεί η άνωση λόγω της βαθμίδας θερμοκρασίας μεταξύ θερμαινόμενου υποστρώματος και κυρίου όγκου αντιδραστήρα, και αφετέρου η εξαναγκασμένη κυκλοφορία, όπου κυριαρχεί η ορμή του εισερχόμενου ρευστού. Έτσι, στον κάτω ευσταθή κλάδο παρατηρείται φυσική κυκλοφορία (Σχήματα 2.6 - 2.8 (α)), στον πάνω ευσταθή κλάδο εξαναγκασμένη κυκλοφορία (Σχήματα 2.6 - 2.8 (β)), ενώ στον ασταθή κλάδο μια ισορροπία μεταξύ των δύο. Για κάθε παροχή $\dot{m} \leq \dot{m}_{t1}$ υπάρχει μόνο μία μόνιμη κατάσταση όπου παρατηρείται φυσική κυκλοφορία, ενώ για κάθε παροχή $\dot{m} \geq \dot{m}_{t2}$ υπάρχει και πάλι μόνο μία μόνιμη κατάσταση εξαναγκασμένης ροής [1]. Επομένως, ο κάτω κλάδος εκτείνεται για $\dot{m} \leq \dot{m}_{t2}$ και ο πάνω για $\dot{m} \geq \dot{m}_{t1}$.



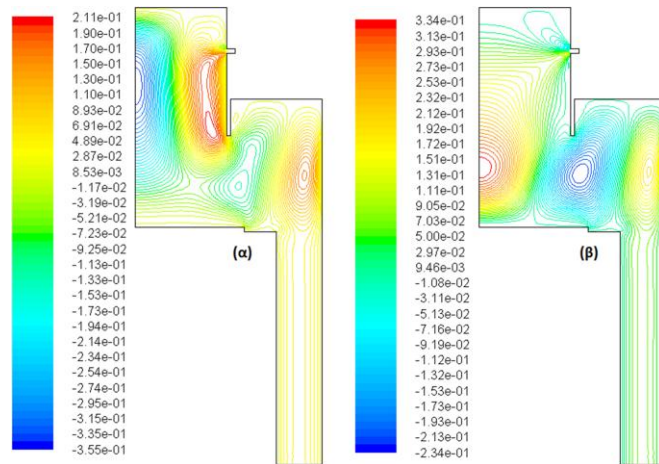
Σχήμα 2.7 Καμπύλες ίσης πυκνότητας (kg/m³) στη μόνιμη κατάσταση παροχής $\dot{m} = 3.5 \cdot 10^{-5}$ kg/s (α) στον κάτω ευσταθή κλάδο, (β) στον πάνω ευσταθή κλάδο

Αν μια βηματική επιβολή (εξίσωση (2.19)) ξεκινήσει από μια μόνιμη κατάσταση στον κάτω κλάδο και $\dot{m}_{t1} \leq \dot{m}_f \leq \dot{m}_{t2}$, τότε το σύστημα συγκλίνει στον κάτω κλάδο. Ομοίως, αν μια βηματική επιβολή ξεκινήσει από μια μόνιμη κατάσταση στον πάνω κλάδο και $\dot{m}_{t1} \leq \dot{m}_f \leq \dot{m}_{t2}$, τότε το σύστημα συγκλίνει στον πάνω κλάδο. Επίσης, αν μια βηματική επιβολή ξεκινήσει από μια τυχαία αρχική κατάσταση εντός του εύρους παροχών όπου εμφανίζεται η πολλαπλότητα και $\dot{m}_{t1} \leq \dot{m}_f \leq \dot{m}_{t2}$, τότε το σύστημα μπορεί να συγκλίνει είτε πάνω είτε κάτω. Τέλος, για να συγκλίνει το σύστημα σε μόνιμη κατάσταση

Κεφάλαιο 2: Το φυσικό σύστημα

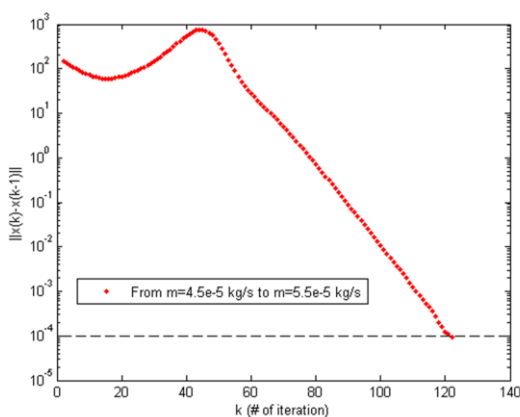
του ασταθούς κλάδου, πρέπει να χρησιμοποιηθούν ειδικές μεθοδολογίες εξωτερικού ελέγχου του Fluent, το οποίο δεν γίνεται σε αυτή την εργασία, έχει γίνει όμως για τον εντοπισμό του ασταθούς κλάδου και την απεικόνισή του στο Σχήμα 2.5 [1].

Αν μια βηματική επιβολή ξεκινήσει από μια μόνιμη κατάσταση στον κάτω κλάδο και $\dot{m}_f > \dot{m}_{t2}$, τότε ο Fluent αρχικά φαίνεται να αποκλίνει, δηλαδή η νόρμα της σχέσης (2.20) αυξάνεται με την πάροδο των επαναλήψεων, αλλά τελικά συγκλίνει στη λύση, η οποία βρίσκεται στον πάνω κλάδο (Σχήμα 2.10). Το ίδιο παρατηρείται αν η βηματική επιβολή ξεκινήσει από μια μόνιμη κατάσταση στον πάνω κλάδο και $\dot{m}_f < \dot{m}_{t1}$ [1]. Αυτό σημαίνει ότι μια μικρή διαταραχή στην παροχή μπορεί να αλλάξει άρδην το πεδίο ροής και θερμοκρασίας, αν αρχικά η παροχή βρίσκεται κοντά στο σημείο στροφής του κλάδου.

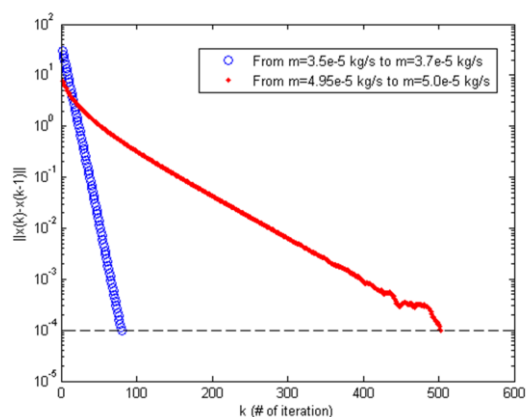


Σχήμα 2.8 Καμπύλες ίσης αξονικής ταχύτητας (m/s) στη μόνιμη κατάσταση παροχής $\dot{m} = 3.5 \cdot 10^{-5}$ kg/s (α) στον κάτω ευσταθή κλάδο, (β) στον πάνω ευσταθή κλάδο· το θετικό πρόσημο δείχνει φορά προς τα κάτω

Επιπλέον, αν μια βηματική επιβολή ξεκινήσει από μια μόνιμη κατάσταση στον κάτω κλάδο και $\dot{m}_f \lesssim \dot{m}_{t2}$, ο αριθμός των επαναλήψεων -και ισοδύναμα ο χρόνος σύγκλισης- αυξάνεται δραματικά, καθώς το σύστημα προσπαθεί να συγκλίνει στο σημείο όπου πραγματοποιείται η στροφή από τον κάτω ευσταθή στον ασταθή κλάδο, το οποίο είναι ιδιάζον (singularity) (Σχήμα 2.9). Ομοίως και αν η βηματική επιβολή ξεκινήσει από μια μόνιμη κατάσταση στον πάνω κλάδο και $\dot{m}_f \gtrsim \dot{m}_{t1}$.



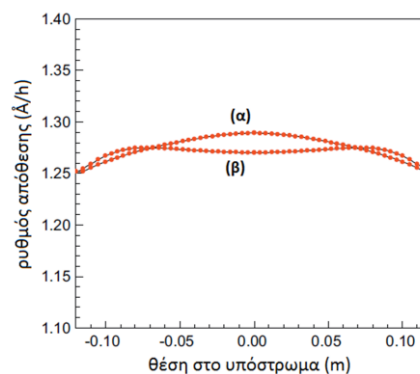
Σχήμα 2.10 Η πορεία της νόρμας σύγκλισης, $\|x(t_k) - x(t_{k-1})\|$, ως συνάρτηση του αριθμού της επανάληψης, k , σε μια επιβολή από τον κάτω στον πάνω κλάδο· παρατηρείται αρχικά απόκλιση και μετά σύγκλιση



Σχήμα 2.9 Η πορεία της νόρμας σύγκλισης, $\|x(t_k) - x(t_{k-1})\|$, ως συνάρτηση του αριθμού της επανάληψης, k , σε δύο επιβολές στον κάτω κλάδο· ο χρόνος σύγκλισης στη μόνιμη κατάσταση αυξάνεται όσο πιο κοντά αυτή βρίσκεται σε σημείο στροφής

Όπως έχει σημειωθεί, τα πεδία ροής και θερμοκρασίας δεν επηρεάζονται από την ύπαρξη

άλλων υλικών στο αέριο μίγμα πέραν του αζώτου, τη διάχυση αυτών και τις μεταξύ τους χημικές αντιδράσεις. Ωστόσο, συμβαίνει το αντίστροφο: ο ρυθμός απόθεσης και η ομοιομορφία του υμενίου επηρεάζονται σε μεγάλο βαθμό από το μηχανισμό της ροής, δηλαδή από τον κλάδο όπου βρίσκεται η λύση, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.11 [1]. Επομένως, ο ρυθμός απόθεσης και η ομοιομορφία δεν καθορίζονται πλήρως από την παροχή, λόγω της πολλαπλότητας των λύσεων. Επιπλέον, αυτές οι κρίσιμες ιδιότητες της διεργασίας είναι ιδιαίτερα ευαίσθητες σε μικρές μεταβολές της παροχής αν ο αντιδραστήρας λειτουργεί κοντά στο σημείο στροφής του κλάδου.



Σχήμα 2.11 Ρυθμός απόθεσης σχηματιζόμενου υμενίου σε συνάρτηση με τη θέση του υποστρώματος, για την ίδια παροχή (α) στον κάτω ευσταθή κλάδο, (β) στον πάνω ευσταθή κλάδο [1]

Με βάση τα παραπάνω, ένα ευσταθές και εύρωστο σύστημα ρύθμισης του αντιδραστήρα θα πρέπει να λαμβάνει υπόψιν την πλήρη δυναμική του συμπεριφορά, την ύπαρξη των πολλαπλών κλάδων και τις συνέπειες στο προϊόν της λειτουργίας στον καθέναν από αυτούς, καθώς επίσης και την ασυνέχεια στα σημεία στροφής, όπου το σύστημα είναι εξαιρετικά ευαίσθητο και μια μικρή μεταβολή της παροχής οδηγεί σε απότομη αλλαγή όλων των χαρακτηριστικών της ροής και του προϊόντος.

3 Μείωση τάξης μοντέλου

3.1 Γενικά στοιχεία

Η μείωση τάξης μοντέλου (model order reduction, MOR) ξεκίνησε στο πλαίσιο της θεωρίας συστημάτων και ρύθμισης ως μια μέθοδος απλοποίησης δυναμικών μοντέλων υψηλής τάξης, που περιγράφονται δηλαδή από μεγάλο αριθμό εξισώσεων και μεταβλητών (από δεκάδες χιλιάδες έως και δισεκατομμύρια). Το αποτέλεσμα της μεθόδου, το μοντέλο μειωμένης τάξης (reduced order model, surrogate model), περιγράφεται από σημαντικά μικρότερο αριθμό εξισώσεων και μεταβλητών, αλλά συγχρόνως πρέπει να διατηρεί όσο κατά το δυνατόν περισσότερο τις βασικές ιδιότητες του αρχικού, πλήρους τάξης μοντέλου (full order model), ως προς τη συμπεριφορά εισόδου – εξόδου [10].

Ο στόχος της μείωσης τάξης είναι να μπορούν να πραγματοποιούνται προσομοιώσεις του πλήρους συστήματος σε σύντομο χρονικό διάστημα και με μειωμένες απαιτήσεις υπολογιστικής μνήμης που να παράγουν όμως αρκούντως αξιόπιστα αποτελέσματα. Πιθανή εφαρμογή της μεθόδου –και ο στόχος της χρήσης της σε αυτή την εργασία– είναι η πρόβλεψη της συμπεριφοράς του συστήματος κατά τη διάρκεια της λειτουργίας του με σκοπό τη ρύθμισή του [10].

Τα πολύπλοκα συστήματα υψηλής τάξης που είναι το αντικείμενο της μείωσης συχνά προέρχονται από υπολογιστική προσομοίωση πραγματικών συστημάτων. Στο παρελθόν, λόγω της δυσκολίας επίλυσης τέτοιου μεγέθους προβλημάτων, ήταν συνήθης πρακτική η προσπάθεια προσδιορισμού των βασικών φαινομένων που καθορίζουν ένα σύστημα και η κατασκευή κατάλληλων συναρτήσεων βάσης, συχνά μέσω της σε βάθος κατανόησης των χαρακτηριστικών του, όπως της φυσικής σημασίας των εξισώσεων που το διέπουν, τυχόν συμμετριών, κ.λπ. [10]. Γνώριμο παράδειγμα αποτελεί η παραδοχή ότι ένα τριδιάστατο φαινόμενο εξελίσσεται είτε σε μία είτε σε δύο διαστάσεις, λόγω μεγάλης ανισότητας μεταξύ των γεωμετρικών χαρακτηριστικών του ώστε κάποιες διαστάσεις να θεωρούνται αμελητέες (π.χ. αγωγή θερμότητας σε μία διάσταση σε άπειρη πλάκα [11]).

Λόγω της ραγδαίας ανάπτυξης των δυνατοτήτων και των ταχυτήτων των υπολογιστών, αλλά και της βελτίωσης των αλγορίθμων επίλυσης, τέτοιου είδους πολύπλοκα μοντέλα μπορούν να λυθούν με ευχέρεια και όσο επιθυμητή ακρίβεια αυτόματα, επαναλαμβανόμενα και χωρίς απλοποιητικές παραδοχές. Θα μπορούσε, επομένως, να ισχυρισθεί κανείς ότι χάρη στη σύγχρονη τεχνολογία δεν υφίσταται ανάγκη για μείωση της τάξης τους. Ωστόσο, η επίλυση των πλήρων μοντέλων, και μάλιστα πολλές φορές, για την πρόβλεψη της δυναμικής απόκρισης του συστήματος είναι τόσο πιο χρονοβόρα όσο αυξάνεται η απαιτούμενη ακρίβεια και άρα δεν ενδείκνυται για σκοπούς ρύθμισης σε πραγματικό χρόνο. Από την άλλη, ο μεγάλος όγκος αποτελεσμάτων που εύκολα μπορούν να παραχθούν από την επίλυση των πλήρων μοντέλων είναι δυνατό να βοηθήσουν στη σφαιρική κατανόηση του φαινομένου, στην εύρεση των λίγων κυρίαρχων μηχανισμών και τελικά στην κατασκευή των κατάλληλων συναρτήσεων βάσης που θα τους απεικονίζουν [10].

3.2 Μείωση τάξης δυναμικού συστήματος

Για δυναμικά συστήματα που περιγράφονται από μερικές διαφορικές εξισώσεις με ανεξάρτητες μεταβλητές τη θέση και το χρόνο, μετά τη διακριτοποίηση στο χώρο προκύπτει ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων ως προς το χρόνο. Έστω ότι αυτό το σύστημα είναι το εξής:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (3.1)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (3.2)$$

όπου \mathbf{x} είναι η μεταβλητή κατάστασης, διάστασης N , \mathbf{u} είναι η είσοδος, διάστασης n_u , \mathbf{y} η έξοδος, διάστασης n_y , και $\mathbf{f}: \mathbb{R}^{N+n_u} \rightarrow \mathbb{R}^N$ και $\mathbf{g}: \mathbb{R}^{N+n_u} \rightarrow \mathbb{R}^{n_y}$ τελεστές, όπου ο \mathbf{f} μπορεί να περιλαμβάνει γραμμικούς και μη γραμμικούς όρους που, στην περίπτωση διεργασιών όπως η ΧΑΑ, αφορούν εν γένει σε διάχυση, συναγωγή και αντίδραση, και \mathbf{g} είναι ο τελεστής εισόδου-εξόδου του συστήματος. Τότε στόχος της μείωσης τάξης είναι η μείωση της διάστασης του διανύσματος κατάστασης, δηλαδή η εύρεση ενός νέου δυναμικού συστήματος:

$$\frac{d\hat{\mathbf{x}}}{dt} = \hat{\mathbf{f}}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}) \quad (3.3)$$

$$\mathbf{y} = \hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}) \quad (3.4)$$

όπου η διάσταση d του $\hat{\mathbf{x}}$ είναι πολύ μικρότερη από N και οι $\hat{\mathbf{f}}$ και $\hat{\mathbf{g}}$ προσεγγίζονται από τις συναρτήσεις $\hat{\mathbf{f}}: \mathbb{R}^{d+n_u} \rightarrow \mathbb{R}^d$ και $\hat{\mathbf{g}}: \mathbb{R}^{d+n_u} \rightarrow \mathbb{R}^{n_y}$, αντίστοιχα, ώστε το σφάλμα της προσέγγισης να είναι μικρό, να διατηρούνται ιδιότητες του αρχικού συστήματος, όπως η ευστάθεια, και η διαδικασία μείωσης τάξης στο σύνολό της να είναι υπολογιστικά αποτελεσματική [10]. Σημειώνεται ότι σύμφωνα με τη συζήτηση στην ενότητα 2.4, η εξίσωση (3.2) απλοποιείται στην:

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} \quad (3.5)$$

ενώ:

$$\mathbf{u} = \dot{\mathbf{m}} \quad (3.6)$$

3.3 Η μέθοδος Galerkin

Η μέθοδος Galerkin είναι ένας τρόπος διακριτοποίησης και μείωσης της τάξης μερικών διαφορικών εξισώσεων που βασίζεται στο χωρισμό των μεταβλητών και την προβολή της πλήρους λύσης σε συναρτήσεις βάσης [12].

Έστω ότι το σύστημα περιγράφεται από τις ακόλουθες μερικές διαφορικές εξισώσεις:

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = D(\chi), \chi: \Omega \times (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R} \quad (3.7)$$

με κατάλληλες αρχικές και συνοριακές συνθήκες, όπου $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ είναι το πεδίο του χώρου και D ένας τελεστής στο χώρο. Η μέθοδος Galerkin προσεγγίζει τη λύση $\chi(\mathbf{r}, t)$, όπου \mathbf{r} είναι η θέση στο χώρο και t ο χρόνος, από την ποσότητα [12]:

$$\hat{\chi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{j=1}^d \alpha_j(t) \phi_j(\mathbf{r}) \quad (3.8)$$

όπου η εξάρτηση από τη θέση καθορίζεται από τις σταθερές ως προς το χρόνο συναρτήσεις $\phi_j(\mathbf{r})$, οι οποίες σχηματίζουν τη βάση ενός d -διάστατου συναρτησιακού χώρου, με τον οποίο προσεγγίζεται το πλήρες, απείρων διαστάσεων, σύστημα, ενώ η εξάρτηση από τον χρόνο καθορίζεται από τους συντελεστές $\alpha_j(t)$ των παραπάνω συναρτήσεων, οι οποίοι επιλέγονται έτσι ώστε ικανοποιείται η (3.7) από την (3.8) με όσο το δυνατόν μικρότερο σφάλμα, δηλαδή να ελαχιστοποιείται το υπόλοιπο [12]:

$$r_G(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial t} - D(\hat{\chi}) \quad (3.9)$$

Αυτό επιτυγχάνεται αν το υπόλοιπο $r_G(\mathbf{r}, t)$ είναι ορθογώνιο ως προς καθεμιά από τις συναρτήσεις βάσης $\phi_j(\mathbf{r})$, οπότε τελικά προκύπτει το ακόλουθο σύστημα d συνήθων διαφορικών εξισώσεων ως προς τους συντελεστές $\alpha_j(t)$ [12]:

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = \int_{\Omega} D \left(\sum_{j=1}^d \alpha_j(t) \phi_j(\mathbf{r}) \right) \phi_i(\mathbf{r}) d^n x, i = 1, \dots, d \quad (3.10)$$

Με αρχικές συνθήκες τις d αλγεβρικές εξισώσεις [12]:

$$\alpha_i(0) = \int_{\Omega} \chi(\mathbf{r}, 0) \phi_i(\mathbf{r}) d^n x, i = 1, \dots, d \quad (3.11)$$

Από τα παραπάνω φαίνεται ότι καθοριστική σημασία στη μέθοδο παίζει η επιλογή των συναρτήσεων βάσης, η οποία βεβαίως δεν είναι μοναδική.

Αν τοποθετηθούν σε ένα διάνυσμα οι τιμές όλων των εξαρτημένων μεταβλητών χ σε όλες τις θέσεις του χώρου, \mathbf{r} , για μια χρονική στιγμή t , προκύπτει το διάνυσμα κατάστασης $\mathbf{x}(t)$ και η εξίσωση (3.8) γράφεται ως:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \sum_{j=1}^d \alpha_j(t) \boldsymbol{\phi}_j \quad (3.12)$$

όπου $\boldsymbol{\phi}_j$ είναι αντίστοιχα τα διανύσματα βάσης, κατασκευασμένα από τις συναρτήσεις βάσης $\phi_j(\mathbf{r})$ με τον ίδιο τρόπο με το $\mathbf{x}(t)$. Αν το πεδίο Ω δεν είναι διακριτοποιημένο, τα διανύσματα αυτά έχουν άπειρο πλήθος στοιχείων.

Σημειώνεται ότι από τη μέθοδο Galerkin στην εργασία αυτή χρησιμοποιείται η σχέση (3.12), αλλά όχι και οι σχέσεις (3.10) και (3.11), καθώς οι εκφράσεις για τη χρονική εξέλιξη των συντελεστών $\alpha_j(t)$ προσδιορίζονται με τη χρήση τεχνητών νευρωνικών δικτύων (Ενότητα 1).

3.4 Ανάλυση κυρίων συνιστωσών

3.4.1 Εισαγωγή

Μία από τις μεθόδους μείωσης τάξης είναι η ανάλυση κυρίων συνιστωσών (principal component analysis, ή ορθή ορθογώνια αποσύζευξη, proper orthogonal decomposition, POD). Η μέθοδος αυτή βρίσκει έναν υπόχωρο στον οποίο προβάλλεται ένα σύνολο δεδομένων διανυσμάτων κατασκευάζοντας μια ορθοκανονική βάση διατεταγμένων με βέλτιστο τρόπο ιδιοδιανυσμάτων που να ελαχιστοποιούν, υπό την έννοια των ελαχίστων τετραγώνων, το σφάλμα της προβολής ενός συνόλου δεδομένων διανυσμάτων [10].

Πλεονέκτημα της μεθόδου αποτελεί το γεγονός ότι ο υπόχωρος που σχηματίζει γεννάται από συναρτήσεις βάσης οι οποίες διατηρούν ειδικά χαρακτηριστικά του πλήρους συστήματος, σε αντίθεση με άλλες μεθόδους (π.χ. πεπερασμένα στοιχεία) όπου οι συναρτήσεις βάσης είναι ανεξάρτητες της δυναμικής του μελετώμενου συστήματος. Επιπλέον, η μέθοδος μπορεί να παραγάγει μειωμένης τάξης μοντέλα για δυναμικά συστήματα μεγάλης ή και άπειρης διάστασης, χρησιμοποιώντας μόνο πράξεις μεταξύ πινάκων, ακόμη κι αν το πλήρες σύστημα είναι μη γραμμικό. Μάλιστα στην περίπτωση αυτή και το μειωμένης τάξης μοντέλο θα είναι μη γραμμικό. Τέλος, σημαντικό πλεονέκτημα είναι και το γεγονός ότι πρόκειται για μέθοδο εκ των υστέρων επεξεργασίας των αποτελεσμάτων πειραμάτων ή προσομοιώσεων, χωρίς πρότερη γνώση του συστήματος. Για το λόγο αυτό, είναι πολύ ελκυστική και έχει χρησιμοποιηθεί σε πεδία όπως η αναγνώριση προτύπων (pattern recognition), ανάλυση τυρβώδους ροής, ανάλυση σημάτων, αλλά και στο σχεδιασμό ρυθμιστή για χρήση σε πραγματικό χρόνο [10].

Ωστόσο, ακριβώς επειδή είναι μέθοδος επεξεργασίας αποτελεσμάτων, τα ιδιοδιανύσματα που παράγονται από την POD, τόσο αυτά καθαυτά όσο και η διάταξή τους, προσεγγίζουν μόνο τη δυναμική του υποσυνόλου του συστήματος από το οποίο ελήφθησαν τα δεδομένα και όχι απαραίτητα όλου του συστήματος [10].

3.4.2 Κατασκευή βάσης και προβολής

Έστω ότι τα δεδομένα διανύσματα προέρχονται από έναν διανυσματικό χώρο $V = \mathbb{R}^N$. Έστω επιπλέον ένα σύνολο δεδομένων από m τροχιές:

$$\mathbf{Y} = \{\mathbf{y}_1(t), \dots, \mathbf{y}_m(t)\} \quad (3.13)$$

όπου $\mathbf{y}_i(t) \in V, i = 1, \dots, m, t \in [0, T]$.

Στόχος είναι η εύρεση μιας ορθής προβολής $\Pi_d: V \rightarrow V_d$, συγκεκριμένης διάστασης d η οποία να ελαχιστοποιεί την ακόλουθη απόσταση ελαχίστων τετραγώνων:

$$\|\mathbf{Y} - \Pi_d \mathbf{Y}\|^2 := \sum_{i=1}^m \int_0^T \|\mathbf{y}_i(t) - \Pi_d \mathbf{y}_i(t)\|^2 dt \quad (3.14)$$

Το πρόβλημα λύνεται μέσω του πίνακα συσχέτισης (correlation matrix) [10]:

$$\mathbf{K} = \sum_{i=1}^m \int_0^T \mathbf{y}_i(t) \mathbf{y}_i(t)^T dt \in \mathbb{R}^{N \times N} \quad (3.15)$$

που είναι εξ ορισμού συμμετρικός θετικά ημιορισμένος, επομένως έχει μη αρνητικές ιδιοτιμές $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_N \geq 0$ οι οποίες ικανοποιούν τη σχέση:

$$\mathbf{K} \mathbf{u}_j = \lambda_j \mathbf{u}_j, j = 1, \dots, N \quad (3.16)$$

για τα αντίστοιχα (μη μηδενικά) διατεταγμένα ιδιοδιανύσματα $\mathbf{u}_j \in \mathbb{R}^N$, τα οποία μπορούν να επιλεγούν να είναι ορθοκανονικά, δηλαδή:

$$\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (3.17)$$

ενώ κάθε διάνυσμα αναλύεται σε συνιστώσες ως:

$$\mathbf{y}_i(t) = \sum_{j=1}^N y_{ij}(t) \mathbf{u}_j \quad (3.18)$$

όπου:

$$y_{ij}(t) = \mathbf{y}_i(t)^T \mathbf{u}_j \quad (3.19)$$

Σύμφωνα με τη μέθοδο POD [10], ο βέλτιστος υπόχωρος διάστασης d για την ελαχιστοποίηση της απόστασης (3.14) είναι το γραμμικό περίβλημα των πρώτων d ιδιοδιανυσμάτων, $\text{span}\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_d\}$, ενώ η βέλτιστη προβολή είναι η:

$$\Pi_d = \sum_{j=1}^d \mathbf{u}_j \mathbf{u}_j^T \in \mathbb{R}^{N \times N} \quad (3.20)$$

Τα ιδιοδιανύσματα αυτά ονομάζονται δεσπόζοντα ή κυρίαρχα διανύσματα (POD modes), καθώς η δράση της προβολής Π_d σε κάθε διάνυσμα $\mathbf{y}_i(t)$, που αποτελεί και την προσέγγιση μειωμένης τάξης του $\mathbf{y}_i(t)$ με τη μέθοδο POD, είναι η εξής [10]:

$$\Pi_d \mathbf{y}_i(t) = \hat{\mathbf{y}}_i(t) = \sum_{j=1}^d y_{ij}(t) \mathbf{u}_j \quad (3.21)$$

Δηλαδή διατηρεί τις πρώτες d από τις συνολικά N συνιστώσες της ακριβούς σχέσης (3.18), οι οποίες φέρουν την κυρίαρχη πληροφορία για τη δομή των διανυσμάτων.

Επομένως, η μέθοδος POD προτείνει ως διανύσματα βάσης για τη μέθοδο Galerkin τα πρώτα d ιδιοδιανύσματα του πίνακα συσχέτισης και ως συντελεστές τις αντίστοιχες προβολές της σχέσης (3.19).

3.4.3 Επιλογή της διάστασης της βάσης

Η επιλογή της διάστασης d του μειωμένης τάξης μοντέλου πρέπει να γίνει έτσι ώστε η προσέγγιση (3.21) να είναι αρκετά καλή. Σε αυτό μπορεί να βοηθήσει και πάλι η μέθοδος POD, καθώς αποδεικνύεται ότι αν επιλεγεί ο παραπάνω ιδιόχωρος, $\text{span}\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_d\}$, η τιμή της απόστασης (3.14), που είναι η μικρότερη δυνατή για δεδομένο d , είναι ίση με [10]:

$$\min_{V_d} \|\mathbf{Y} - \Pi_d \mathbf{Y}\|^2 = \sum_{j=n-d+1}^n \lambda_j \quad (3.22)$$

δηλαδή ίση με το άθροισμα των ιδιοτιμών των ιδιοδιανυσμάτων που δεν χρησιμοποιούνται. Η απόσταση αυτή μπορεί να θεωρηθεί ως το μέρος της «ενέργειας» ή του πληροφοριακού περιεχομένου των δεδομένων που απουσιάζει από την προσέγγιση (3.21) [10][12]. Επομένως, η πληροφορία που περιέχεται στην παραπάνω προσέγγιση μπορεί να ποσοτικοποιηθεί ως:

$$\sum_{j=1}^d \lambda_j \quad (3.23)$$

και προφανώς το σύνολο της πληροφορίας αντιστοιχεί σε $d = N$, οπότε και η απόσταση (3.22) μηδενίζεται. Έτσι, το σχετικό πληροφοριακό περιεχόμενο για κάθε προσέγγιση POD διάστασης d ορίζεται ως [10]:

$$I(d) := \left(\sum_{j=1}^d \lambda_j \right) \left(\sum_{j=1}^N \lambda_j \right)^{-1} \quad (3.24)$$

Η ποσότητα αυτή αρχικά αυξάνεται απότομα, καθώς προστίθενται οι μεγαλύτερες ιδιοτιμές που αντιστοιχούν στα κύρια χαρακτηριστικά της δυναμικής, ενώ στη συνέχεια αυξάνεται με συνεχώς μικρότερο ρυθμό καθώς προστίθενται μικρότερες ιδιοτιμές που αντιστοιχούν σε διαταραχές της δυναμικής [10]. Με βάση τα παραπάνω, ένας τρόπος επιλογής της διάστασης d είναι να προεπιλεγεί ένα κλάσμα p , συνήθως 0.99 ή μεγαλύτερο, της πληροφορίας που είναι επιθυμητό να περιέχει η προσέγγιση. Τότε [13]:

$$d = \min\{d \in \mathbb{N}^* | I(d) \geq p\} \quad (3.25)$$

Σημειώνεται ότι ο παραπάνω είναι ένας καλός τρόπος εκ των προτέρων επιλογής της d ώστε να μην απουσιάζουν σημαντικές παράμετροι της δυναμικής από την επιχειρούμενη προσέγγιση. Όμως, όπως θα φανεί και παρακάτω, υπάρχει η περίπτωση να συμπεριληφθούν περισσότερα ιδιοδιανύσματα από όσα χρειάζεται, τα οποία να οφείλονται σε υπολογιστικό θόρυβο, και άρα να δυσχεραίνουν τη χρήση της προσέγγισης για λήψη περαιτέρω αποτελεσμάτων και να μειώνουν την ακρίβεια των υπολογισμών.

3.5 Μέθοδος των στιγμιοτύπων

3.5.1 Περιγραφή της μεθόδου

Η μέθοδος των στιγμιοτύπων (method of snapshots) που έχει προταθεί από τον L. Sirovich [13] είναι μια παραλλαγή της ανάλυσης κυρίων συνιστωσών που ενδείκνυται για μεγάλες τιμές της αρχικής διάστασης N , οι οποίες μπορεί να είναι αποτέλεσμα της διακριτοποίησης του πεδίου Ω . Στην περίπτωση αυτή, ο πίνακας συσχέτισης (3.15) αποκτά μεγάλο μέγεθος, με αποτέλεσμα το πρόβλημα (3.16) εύρεσης των ιδιοδιανυσμάτων και των ιδιοτιμών του να καθίσταται από υπολογιστικής άποψης δύσκολο ή και αδύνατο [10].

Στην περίπτωση αυτή, σύμφωνα με τη μέθοδο των στιγμιοτύπων, δεν χρησιμοποιούνται πλέον τροχιές $\mathbf{y}_i(t)$ σε ένα συνεχές χρονικό διάστημα, αλλά στιγμιότυπα των τροχιών σε διακριτές χρονικές στιγμές. Έτσι, το σύνολο (3.13) μετατρέπεται στον πίνακα [10]:

$$\mathbf{Y} = [\mathbf{Y}_1 \dots \mathbf{Y}_{N_R}] \in \mathbb{R}^{N \times m} \quad (3.26)$$

όπου $\mathbf{Y}_i \in \mathbb{R}^{N \times m_i}$, $i = 1, \dots, N_R$ είναι ο πίνακας της i τροχιάς όπως ορίζεται στη σχέση (2.18), N_R είναι ο αριθμός των επιβολών-τροχιών και

$$m = \sum_{i=1}^{N_R} m_i \quad (3.27)$$

είναι ο συνολικός αριθμός των στιγμιοτύπων. Κάθε στήλη του πίνακα (3.26) είναι ένα στιγμιότυπο του συστήματος. Ο πίνακας συσχέτισης (3.15) πλέον μπορεί να υπολογισθεί ως [10]:

$$\mathbf{K} = \mathbf{Y}\mathbf{Y}^T \in \mathbb{R}^{N \times N} \quad (3.28)$$

ο οποίος έχει ίσες ιδιοτιμές με τον πίνακα [10]:

$$\mathbf{K}_1 = \mathbf{Y}^T\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{m \times m} \quad (3.29)$$

του οποίου οι ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα είναι πολύ ευκολότερο να υπολογισθούν επειδή συνήθως $m \ll N$:

$$\mathbf{K}_1 \mathbf{v}_j = \lambda_j \mathbf{v}_j, j = 1, \dots, m \quad (3.30)$$

όπου και πάλι οι ιδιοτιμές είναι διατεταγμένες: $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_m \geq 0$ και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα $\mathbf{v}_j \in \mathbb{R}^m$ του \mathbf{K}_1 επιλέγονται να είναι ορθοκανονικά. Από τον υπολογισμό αυτό ανακτώνται τα ιδιοδιανύσματα $\mathbf{u}_j \in \mathbb{R}^N$ του \mathbf{K} , από τα οποία και πάλι επιλέγονται τα d πρώτα ως βάση του μειωμένης τάξης μοντέλου, ως εξής [10]:

$$\mathbf{u}_j = \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} \mathbf{Y} \mathbf{v}_j, j = 1, \dots, m \quad (3.31)$$

Τέλος, κάθε στιγμιότυπο \mathbf{y}_i προσεγγίζεται σύμφωνα με τη σχέση (3.21) ως εξής:

$$\hat{\mathbf{y}}_i = \sum_{j=1}^d \alpha_{ij} \mathbf{u}_j \quad (3.32)$$

όπου οι συντελεστές α_{ij} υπολογίζονται από τη σχέση (3.19) ως εξής:

$$\alpha_{ij} = \mathbf{y}_i^T \mathbf{u}_j \quad (3.33)$$

Αν ορισθεί \mathbf{Z} η ορθοκανονική βάση από ιδιοδιανύσματα:

$$\mathbf{Z} := [\mathbf{u}_1 \dots \mathbf{u}_d] \in \mathbb{R}^{N \times d} \quad (3.34)$$

και $\boldsymbol{\alpha}_i$ το διάνυσμα των συντελεστών που αντιστοιχούν στο στιγμιότυπο i :

$$\boldsymbol{\alpha}_i := [\alpha_{i1} \dots \alpha_{id}]^T \in \mathbb{R}^d \quad (3.35)$$

τότε λόγω της ορθοκανονικότητας των διανυσμάτων βάσης ισχύει:

$$\mathbf{Z}^T \mathbf{Z} = \mathbf{I}_d \quad (3.36)$$

όπου \mathbf{I}_d είναι ο τετραγωνικός μοναδιαίος πίνακας διάστασης d , ενώ οι σχέσεις (3.32) και (3.33) μπορούν να γραφούν πιο συνοπτικά ως:

$$\hat{\mathbf{y}}_i = \mathbf{Z} \boldsymbol{\alpha}_i \quad (3.37)$$

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \mathbf{Z}^T \mathbf{y}_i \quad (3.38)$$

Από τις παραπάνω σχέσεις είναι προφανές ότι το διάνυσμα $\boldsymbol{\alpha}_i \in \mathbb{R}^d$ αποτελεί μια μειωμένης τάξης προσέγγιση του διανύσματος $\mathbf{y}_i \in \mathbb{R}^N$.

Αν επιπλέον ορισθεί \mathbf{A} ο πίνακας των συντελεστών που αντιστοιχούν σε όλα τα στιγμιότυπα:

$$\mathbf{A} := [\boldsymbol{\alpha}_1 \dots \boldsymbol{\alpha}_m] \in \mathbb{R}^{d \times m} \quad (3.39)$$

οι σχέσεις (3.37) και (3.38) επεκτείνονται ως εξής:

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Z} \mathbf{A} \quad (3.40)$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{Z}^T \mathbf{Y} \quad (3.41)$$

Οι παραπάνω σχέσεις (3.39)-(3.41) μπορούν να αναφέρονται είτε σε ολόκληρο τον πίνακα \mathbf{Y} όπως ορίζεται στη σχέση (3.26), είτε στον πίνακα μιας τροχιάς όπως ορίζεται στη σχέση (2.18), όπου πλέον m θα είναι ο αριθμός στιγμιότυπων της τροχιάς.

3.5.2 Κανονικοποίηση δεδομένων

Κατά την εφαρμογή της ανάλυσης κυρίων συνιστωσών, συνηθίζεται η τροποποίηση των δεδομένων (3.26) με τον υπολογισμό της μέσης τιμής για κάθε γραμμή του πίνακα \mathbf{Y} , δηλαδή για την τιμή κάθε μεγέθους σε κάθε θέση [10]:

Κεφάλαιο 3: Μείωση τάξης μοντέλου

$$\bar{x}_i = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (\mathbf{Y})_{ij}, i = 1, \dots, N \quad (3.42)$$

και αφαίρεσής της από κάθε αντίστοιχο στοιχείο κάθε στιγμιοτύπου. Διανυσματικά αυτό ισοδυναμεί με τον υπολογισμό του μέσου στιγμιοτύπου:

$$\bar{\mathbf{x}} := [\bar{x}_1 \dots \bar{x}_N]^T \in \mathbb{R}^N \quad (3.43)$$

και αφαίρεσής του από κάθε στιγμιότυπο του πίνακα \mathbf{Y} .

Στην εργασία αυτή, υπολογίζεται επιπλέον και η δειγματική τυπική απόκλιση για κάθε γραμμή του πίνακα \mathbf{Y} :

$$s_i = \left(\frac{1}{m-1} \sum_{j=1}^m ((\mathbf{Y})_{ij} - \bar{x}_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}}, i = 1, \dots, N \quad (3.44)$$

και κάθε στοιχείο του προηγούμενου διανύσματος διαιρείται με την αντίστοιχη τυπική απόκλιση. Έτσι, οι τροχιές κανονικοποιούνται ώστε κάθε στοιχείο να είναι της μορφής:

$$v_{ij} = \begin{cases} \frac{(\mathbf{Y})_{ij} - \bar{x}_i}{s_i}, & s_i \neq 0 \\ 0, & s_i = 0 \end{cases}, i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, m \quad (3.45)$$

και άρα κάθε γραμμή να προέρχεται από κατανομή με μέση τιμή 0 και τυπική απόκλιση 1. Με την κανονικοποίηση αυτή θεωρείται ότι μειώνεται η πιθανότητα οι ιδιοτιμές να διαφέρουν σε τάξη μεγέθους λόγω αντίστοιχης διαφοράς στα πρωτογενή δεδομένα, η οποία υπάρχει μεταξύ των τιμών θερμοκρασίας και των άλλων τριών μεγεθών, και επομένως η προκύπτουσα βάση να περιγράφει καλά μόνο το πεδίο θερμοκρασίας. Η δεύτερη περίπτωση της σχέσης (3.45) είναι στην πραγματικότητα επέκταση της πρώτης, αφού από τη σχέση (3.44) ισχύει:

$$s_i = 0 \Leftrightarrow (\mathbf{Y})_{ij} = \bar{x}_i, j = 1, \dots, m \quad (3.46)$$

κι επομένως όλα τα στοιχεία της i γραμμής του πίνακα \mathbf{Y} είναι ίσα με \bar{x}_i . Άρα για την κανονικοποίηση της γραμμής αυτής απαιτείται μόνο μετατόπιση των στοιχείων της κατά \bar{x}_i . Η περίπτωση αυτή εμφανίζεται μόνο σε σύνορα του πεδίου, όπου επιβάλλεται σταθερή τιμή κάποιων μεγεθών.

Αν ορισθεί ο πίνακας τυπικών αποκλίσεων:

$$\mathbf{D} := \text{diag}(s_1, \dots, s_N) \in \mathbb{R}^{N \times N} \quad (3.47)$$

ο κανονικοποιημένος πίνακας δεδομένων:

$$\mathbf{Y}_N = [v_{ij}] \in \mathbb{R}^{N \times m} \quad (3.48)$$

σχετίζεται με τον αρχικό πίνακα \mathbf{Y} ως εξής:

$$\mathbf{Y} = \bar{\mathbf{x}} \mathbf{1}_{1 \times m} + \mathbf{D} \mathbf{Y}_N \quad (3.49)$$

όπου $\mathbf{1}_{1 \times m}$ είναι ο πίνακας-γραμμή με m στήλες και όλα του τα στοιχεία ίσα με 1. Η ανάλυση που προηγήθηκε στην περιγραφή της μεθόδου των στιγμιοτύπων γίνεται στον κανονικοποιημένο πίνακα, δηλαδή οι σχέσεις (3.40) και (3.41) αναφέρονται σε αυτόν. Επομένως, η προσέγγιση του πίνακα \mathbf{Y} έχει την τελική μορφή:

$$\hat{\mathbf{Y}} = \bar{\mathbf{x}}\mathbf{1}_{1 \times m} + \mathbf{D}\mathbf{Z}\mathbf{A} \quad (3.50)$$

Η ίδια σχέση (3.50) ισχύει και για τον πίνακα μιας γνωστής τροχιάς, ανεξάρτητα αν αυτή ανήκει στον πίνακα \mathbf{Y} . Στην περίπτωση αυτή, το μέσο στιγμιότυπο $\bar{\mathbf{x}}$ και ο πίνακας \mathbf{D} δεν προκύπτουν από την κανονικοποίηση μόνο της συγκεκριμένης τροχιάς, αλλά από ολόκληρου του πίνακα \mathbf{Y} πριν την κατασκευή της βάσης \mathbf{Z} . Ομοίως, το κανονικοποιημένο διάνυσμα $\mathbf{x}_N(t)$ ενός γνωστού στιγμιότυπου $\mathbf{x}(t)$ ορίζεται από τις σχέσεις (3.45) και (3.48) αν ο πίνακας \mathbf{Y} αντικατασταθεί από το $\mathbf{x}(t)$, και τα δύο διανύσματα σχετίζονται, κατ' αναλογία με την (3.49), ως εξής:

$$\mathbf{x}(t) = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{D}\mathbf{x}_N(t) \quad (3.51)$$

Ενώ η προσέγγιση ενός γνωστού στιγμιότυπου $\mathbf{x}(t)$, ανεξάρτητα αν αυτό ανήκει ή όχι στον πίνακα \mathbf{Y} , έχει την τελική μορφή:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{D}\mathbf{Z}\mathbf{a}(t) \quad (3.52)$$

όπου το διάνυσμα $\mathbf{a}(t)$ υπολογίζεται από τη σχέση (3.38), στην οποία στη θέση του \mathbf{y}_i αντικαθίσταται το $\mathbf{x}_N(t)$.

Τελικά, η μείωση τάξης δίνει την εξής έκφραση για ένα γνωστό στιγμιότυπο $\mathbf{x}(t)$:

$$\mathbf{x}(t) = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{D}(\mathbf{Z}\mathbf{a}(t) + \mathbf{e}_{POD}(t)) \quad (3.53)$$

όπου $\mathbf{e}_{POD}(t) \in \mathbb{R}^N$ το σφάλμα μείωσης τάξης:

$$\mathbf{e}_{POD}(t) = \sum_{j=d+1}^N \alpha_j(t)\mathbf{u}_j \quad (3.54)$$

Και την εξής έκφραση για μια γνωστή τροχιά \mathbf{Y} :

$$\mathbf{Y} = \bar{\mathbf{x}}\mathbf{1}_{1 \times m} + \mathbf{D}(\mathbf{Z}\mathbf{A} + \mathbf{E}_{POD}) \quad (3.55)$$

όπου:

$$\mathbf{E}_{POD} = [\mathbf{e}_{POD}(t_0) \dots \mathbf{e}_{POD}(t_{m-1})] \in \mathbb{R}^{N \times m} \quad (3.56)$$

3.6 Αξιολόγηση της μείωσης τάξης - Σφάλματα

Κατά τη διάρκεια των υπολογισμών, για την αξιολόγηση μιας υποψήφιας βάσης χρησιμοποιείται το σχετικό σφάλμα της εκτίμησης ενός στιγμιότυπου $\mathbf{x}(t)$, που ορίζεται ως εξής:

$$e_r(\mathbf{x}(t)) = \frac{\|\hat{\mathbf{x}}(t) - \mathbf{x}(t)\|}{\|\mathbf{x}(t)\|} \quad (3.57)$$

Η αξιολόγηση της περιγραφής μιας γνωστής τροχιάς από μια βάση, εκτός από την εξέλιξη του $e_r(\mathbf{x}(t))$ σε συνάρτηση με το χρόνο, μπορεί να γίνει και με το μέσο τετραγωνικό σχετικό σφάλμα που ορίζεται ως εξής:

$$mse_r = \left(\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m e_r^2(\mathbf{x}(t_j)) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.58)$$

και με το μέγιστο σχετικό σφάλμα που ορίζεται ως εξής:

$$me_r = \max_{j=1, \dots, m} (e_r(\mathbf{x}(t_j))) \quad (3.59)$$

Κεφάλαιο 3: Μείωση τάξης μοντέλου

Η σχέση (3.57) ισχύει και για στιγμιότυπα που δεν ανήκουν σε τροχιά, αλλά είναι καταστάσεις ισορροπίας (όταν δηλαδή $t \rightarrow \infty$). Στην περίπτωση αυτή οι σχέσεις (3.58) και (3.59) μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την αξιολόγηση της περιγραφής ενός συνόλου καταστάσεων ισορροπίας από μια βάση, με τη διαφορά ότι ο δείκτης j μετρά καταστάσεις ισορροπίας αντί για διαδοχικές στιγμές, ενώ m είναι πλέον το πλήθος των καταστάσεων ισορροπίας.

3.7 Τελικοί αλγόριθμοι

Στο σημείο αυτό συνοψίζονται οι αλγόριθμοι που αναπτύχθηκαν στην παρούσα ενότητα και χρησιμοποιούνται στη συνέχεια.

Πίνακας 3.1 Αλγόριθμος κατασκευής βάσης μοντέλου μειωμένης τάξης. Τα αρχικά δεδομένα και τα τελικά αποτελέσματα του αλγορίθμου σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο

Βήμα	Περιγραφή	Δεδομένα	Σχέσεις	Αποτέλεσμα
1	Ομαδοποίηση τροχιών	Τροχιές Y_i	(3.26)	Y
2	Κανονικοποίηση	Y	(3.42)-(3.45) (3.48)	\bar{x}
				D
3	Κατασκευή πίνακα K_1	Y_N	(3.29)	K_1
4	Εύρεση ιδιοδιανυσμάτων και ιδιοτιμών K_1	K_1	(3.30)	λ_j
				u_j
5	Εύρεση διάστασης μοντέλου μειωμένης τάξης	p	(3.25)	d
		λ_j		$I(d)$
6	Κατασκευή βάσης	d	(3.31)	Z
		λ_j		
		u_j	(3.34)	
		Y_N		

Πίνακας 3.2 Αλγόριθμος υπολογισμού συντελεστών γνωστής τροχιάς ως προς βάση. Τα αρχικά δεδομένα και τα τελικά αποτελέσματα του αλγορίθμου σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο

Βήμα	Περιγραφή	Δεδομένα	Σχέσεις	Αποτέλεσμα
1	Κανονικοποίηση τροχιάς	Τροχιά Y_i	(3.45)	Y_N
		\bar{x}	(3.48)	
		D		
2	Υπολογισμός συντελεστών	Z	(3.41)	A
		Y_N		

4 Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα

4.1 Γενικά στοιχεία

Τα νευρωνικά δίκτυα είναι μαθηματικά μοντέλα που προσπαθούν να προσομοιώσουν την βιολογική διαδικασία της επεξεργασίας πληροφοριών από το νευρικό σύστημα. Μέσω της μοντελοποίησης της θεμελιώδους μονάδας του νευρικού συστήματος, του νευρώνα, καθώς και της κατάλληλης διασύνδεσής τους και μεταφοράς πληροφορίας από τον έναν στον άλλο, τα νευρωνικά δίκτυα έχουν καταφέρει να αντιμετωπίσουν επιτυχώς προβλήματα όπως η ταξινόμηση, η αναγνώριση προτύπων, η προσέγγιση συναρτήσεων και η προσομοίωση δυναμικών συστημάτων [14].

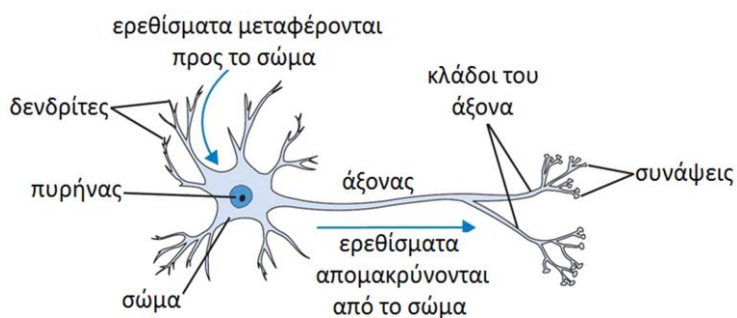
Το νευρικό σύστημα των έμβιων οργανισμών αναπτύσσεται και εκπαιδεύεται συνεχώς λαμβάνοντας ερεθίσματα από το περιβάλλον, ώστε να επεξεργάζεται τις πληροφορίες με τον σωστό τρόπο. Κατ' αντιστοιχία, τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα μαθαίνουν τον τρόπο με τον οποίο πρέπει να επεξεργάζονται τα δεδομένα μέσα από αλγορίθμους εκπαίδευσης, οι οποίοι υπολογίζουν, αξιοποιώντας πρότυπα δεδομένα εκπαίδευσης, κατάλληλες τιμές των παραμέτρων που καθορίζουν τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα.

Επισημαίνεται επίσης ακόμη ένα σημαντικό σημείο, που αποτελεί και σπουδαίο πλεονέκτημα των νευρωνικών δικτύων σε σύγκριση με άλλες μεθόδους προσέγγισης: δεν απαιτείται καμιά εκ των προτέρων γνώση της μορφής των κανόνων-εξισώσεων που περιγράφουν το μελετούμενο σύστημα. Ένα σωστά εκπαιδευμένο δίκτυο αναπαράγει και γενικεύει τη συμπεριφορά του συστήματος, εντός του πεδίου των δεδομένων εκπαίδευσης, μόνο με γνώση αυτών των δεδομένων. Επομένως, η ανάλυση και μοντελοποίηση ενός συστήματος με συνδυασμό της μεθόδου ανάλυσης κυρίων συνιστωσών και των νευρωνικών δικτύων μπορεί να γίνει εξ ολοκλήρου χωρίς καμιά γνώση του συστήματος, παρά μόνο με αποτελέσματα κατάλληλων πειραμάτων ή προσομοιώσεων από το σύστημα.

4.2 Ο νευρώνας

4.2.1 Ο βιολογικός νευρώνας

Το βιολογικό νευρικό κύτταρο ή αλλιώς νευρώνας μεταφέρει πληροφορίες υπό μορφή ηλεκτρικών παλμών που το διατρέχουν.



Σχήμα 4.1 Ένας τυπικός βιολογικός νευρώνας με χημικές συνάψεις

Ανάλογα με το μέσο μεταφοράς της πληροφορίας από κύτταρο σε κύτταρο, οι νευρώνες διακρίνονται σε δύο είδη [15]:

- Στους νευρώνες με χημικές συνάψεις, η πληροφορία διαδίδεται μέσω της ροής συγκεκριμένων χημικών ενώσεων, των νευροδιαβιβαστών (neurotransmitters), οι οποίοι διαχέονται από το κύτταρο-πομπό στο κύτταρο-δέκτη. Έτσι, σε αυτό το είδος

Κεφάλαιο 4: Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα

νευρώνα, η φορά διάδοσης της πληροφορίας είναι μία, συγκεκριμένη και προκαθορισμένη.

- Στους νευρώνες με ηλεκτρικές συνάψεις, η πληροφορία διαδίδεται μέσω της ροής ηλεκτρονίων με σχεδόν απευθείας επαφή των δύο κυττάρων. Στους νευρώνες αυτούς η πληροφορία μπορεί να διαδοθεί και προς τις δύο κατευθύνσεις, δηλαδή οι ρόλοι του κυττάρου-πομπού και του κυττάρου-δέκτη εναλλάσσονται κατά περίπτωση.

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα βασίζονται στη μοντελοποίηση των νευρώνων με χημικές συνάψεις, οι οποίοι, ακολουθώντας την κατεύθυνση μετάδοσης της πληροφορίας, αποτελούνται σε αδρές γραμμές από τα ακόλουθα μέρη [15]:

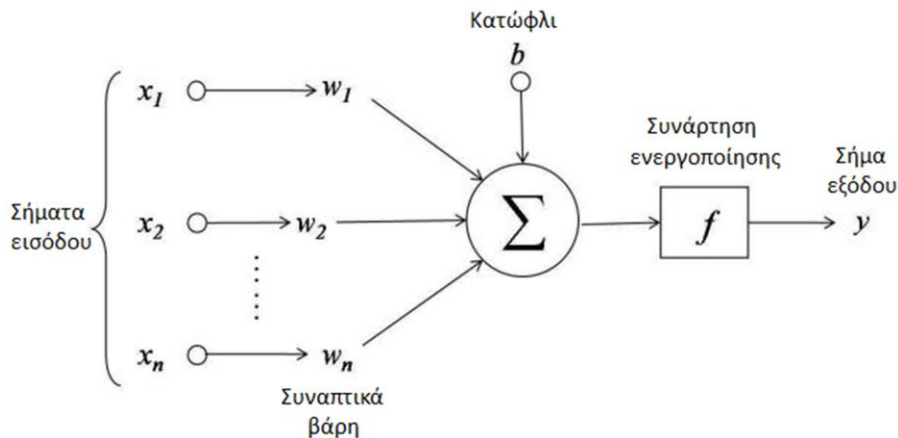
- Δενδρίτες (dendrites): είναι οι θέσεις από τις οποίες το κύτταρο λαμβάνει ερεθίσματα από το εξωτερικό του, δηλαδή από κάποιο αισθητήριο όργανο ή άλλον νευρώνα, μέσω των νευροδιαβιβαστών. Οι δενδρίτες αναπτύσσονται σε περίπλοκες διακλαδωμένες δομές που ονομάζονται δενδριτικά δένδρα, ενώ κάθε δενδρίτης λαμβάνει ερέθισμα από διαφορετική πηγή, επομένως κάθε νευρώνας λαμβάνει ερεθίσματα από πολλές πηγές συγχρόνως. Το ερέθισμα μπορεί να είναι είτε ενισχυτικό (excitatory), οπότε αυξάνει το ηλεκτρικό δυναμικό στο εσωτερικό του κυττάρου σε σχέση με το περιβάλλον του και τείνει να ενεργοποιήσει το νευρώνα, είτε παρεμποδιστικό (inhibitory), οπότε ελαττώνει το ηλεκτρικό δυναμικό στο εσωτερικό του κυττάρου και τείνει να αποτρέψει την ενεργοποίηση του νευρώνα. Το ερέθισμα (μεταβολή δυναμικού) που δέχεται ο νευρώνας δεν είναι απαραίτητα ίσο με τη μεταβολή δυναμικού που συμβαίνει στο κύτταρο-πομπό και ενεργοποιεί την αποστολή των νευροδιαβιβαστών, επομένως στους δενδρίτες μπορεί να θεωρηθεί ότι το ερέθισμα που λαμβάνεται πολλαπλασιάζεται επιπλέον και με έναν συντελεστή.
- Σώμα: είναι το κύριο μέρος του κυττάρου, που περιέχει τον πυρήνα και όλα τα οργανίδια που έχουν και τα άλλα κύτταρα. Όλα τα δενδριτικά δένδρα καταλήγουν στο σώμα, όπου τα ερεθίσματα συγκεντρώνονται και αθροίζονται, δημιουργώντας την τελική τάση του νευρώνα, η τιμή της οποίας καθορίζει αν θα ενεργοποιηθεί ή όχι ο νευρώνας. Συγκεκριμένα, σε κατάσταση αδράνειας, η τάση αυτή είναι αρνητική, οπότε εκπέμπονται ασθενείς ηλεκτρικοί παλμοί, ανάλογοι της τάσης, που δεν περιέχουν πληροφορία. Το ίδιο συμβαίνει και αν η τάση αυξηθεί λίγο. Όμως, αν η τάση ξεπεράσει μια συγκεκριμένη θετική τιμή-κατώφλι (threshold), διαφορετική για κάθε νευρώνα, τότε εκπέμπεται ένας ισχυρός παλμός, ανεξάρτητος από την ακριβή τιμή της τάσης, οπότε λέγεται ότι ο νευρώνας πυροδοτείται. Η ύπαρξη του κατωφλίου εξασφαλίζει ότι ο νευρώνας πυροδοτείται μόνο αν υπάρχει πραγματικά πληροφορία και όχι λόγω τυχαίων διακυμάνσεων του κυτταρικού δυναμικού.
- Άξονας: είναι μια λεπτή, κυλινδρική απόφυση που ξεκινάει από το σώμα και στο τέλος της διακλαδίζεται σε ένα πλέγμα απολήξεων, τις συνάψεις. Μέσω του άξονα και χάρη στη δομή του, οι ισχυροί παλμοί μεταδίδονται διατηρώντας αναλλοίωτο το πλάτος τους ως τις συνάψεις, ενώ οι ασθενείς παλμοί μεταδίδονται με ελαττούμενο πλάτος κατά μήκος του άξονα, ώστε τελικά στις συνάψεις δεν φθάνει παλμός.

- **Συνάψεις:** είναι οι δομές που βρίσκονται στις απολήξεις του άξονα¹ και ευθύνονται για τη μετάδοση της πληροφορίας από το ένα κύτταρο στο άλλο. Κάθε σύναψη συνδέεται, μέσω ενός μικρού διακυτταρικού χώρου, με έναν δενδρίτη κάποιου άλλου νευρώνα ή με κάποιο όργανο απόκρισης, δηλαδή έναν μυ που αντιδρά στο αρχικό ερέθισμα από το αισθητήριο όργανο. Στη σύναψη υπάρχουν κυστίδια με αποθηκευμένους νευροδιαβιβαστές, οι οποίοι απελευθερώνονται μόλις φθάσει στη σύναψη ένας ισχυρός παλμός και προσδένονται στον επόμενο δενδρίτη ή στο όργανο απόκρισης. Με τον τρόπο αυτό η πληροφορία μεταφέρεται από ένα κύτταρο σε πολλά άλλα.

4.2.2 Μαθηματικό μοντέλο νευρώνα

Σε αντιστοιχία με τον βιολογικό νευρώνα, ο τεχνητός νευρώνας είναι ένα μαθηματικό μοντέλο που περιγράφεται από τη σχέση [14]:

$$y(t) = f\left(\sum_{j=1}^n w_j x_j(t) + b\right) \quad (4.1)$$



Σχήμα 4.2 Απεικόνιση ενός τεχνητού νευρώνα [16]

Στη σχέση (4.1) υπάρχουν όλα τα βασικά χαρακτηριστικά ενός βιολογικού νευρώνα [14]:

- $x_j(t)$: είναι τα σήματα εισόδου, n το πλήθος, και προέρχονται είτε από το εξωτερικό περιβάλλον είτε ως σήματα εξόδου άλλων νευρώνων. Μπορούν να πάρουν οποιαδήποτε πραγματική τιμή, αλλά συνήθως κανονικοποιούνται στο διάστημα $[0,1]$ ή στο $[-1,1]$.
- w_j : είναι οι συντελεστές με τους οποίους πολλαπλασιάζονται τα σήματα εισόδου στους δενδρίτες και ονομάζονται συναπτικά βάρη. Όσο πιο μεγάλη απόλυτη τιμή έχουν, τόσο σημαντικότερο είναι στη διαμόρφωση του αποτελέσματος του νευρώνα το σήμα το οποίο πολλαπλασιάζουν. Θετική τιμή ενός συναπτικού βάρους αντιστοιχεί σε ενισχυτικό σήμα, ενώ αρνητική σε παρεμποδιστικό.
- $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$: είναι μια, εν γένει μη γραμμική, συνάρτηση, μέσω της οποίας το συνδυασμένο σήμα εισόδου μετατρέπεται στο σήμα εξόδου, $y(t)$. Στην περίπτωση

¹ Στην πραγματικότητα, συνάψεις υπάρχουν πρακτικά σε όλη την επιφάνεια της κυτταρικής μεμβράνης και μάλιστα ορισμένοι δενδρίτες λειτουργούν και ως συνάψεις [Θ13].

των βιολογικών νευρώνων, το σήμα εξόδου είναι δυαδικό (πυροδότηση ή μη του νευρώνα), επομένως η συνάρτηση είναι η βηματική:

$$f(u) = \begin{cases} 0 & u \leq 0 \\ 1 & u > 0 \end{cases} \quad (4.2)$$

Καθώς η συγκεκριμένη συνάρτηση καθορίζει αν ενεργοποιείται ο νευρώνας, η συνάρτηση f ονομάζεται συνάρτηση ενεργοποίησης (activation function). Ωστόσο, στους τεχνητούς νευρώνες χρησιμοποιούνται και άλλες συναρτήσεις ενεργοποίησης εκτός από τη βηματική, ανάλογα με την εφαρμογή. Δύο ακόμη συνηθισμένες συναρτήσεις ενεργοποίησης είναι η γραμμική (4.3) και η υπερβολική εφαιπτομένη (4.4) που έχει γραφική παράσταση σιγμοειδούς καμπύλης:

$$f(u) = \begin{cases} 0 & u < 0 \\ u & 0 \leq u \leq 1 \\ 1 & u > 1 \end{cases} \quad (4.3)$$

$$f(u) = \tanh(u) = \frac{e^u - e^{-u}}{e^u + e^{-u}} \quad (4.4)$$

- b : ο σταθερός όρος στο όρισμα της f είναι το αντίθετο από το κατώφλι των βιολογικών νευρώνων, καθώς η βηματική συνάρτηση ενεργοποίησης μπορεί να γραφεί ισοδύναμα ως εξής:

$$f(u) = \begin{cases} 0 & \sum_{j=1}^n w_j x_j(t) \leq -b \\ 1 & \sum_{j=1}^n w_j x_j(t) > -b \end{cases} \quad (4.5)$$

Ο συντελεστής b ονομάζεται και παράμετρος μεροληψίας (bias) του νευρώνα.

- $y(t)$: αποτελεί το σήμα εξόδου του νευρώνα, το οποίο κανονικοποιείται μέσω της f στο ίδιο εύρος με τα σήματα εισόδου. Η τιμή του σήματος εξόδου είναι το αποτέλεσμα της επεξεργασίας όλων των σημάτων εισόδου από το νευρώνα και αντιπροσωπεύει μια απλή απόφαση που λαμβάνει ο νευρώνας με βάση αυτά, την οποία και μεταδίδει σε όλους τους επόμενους του νευρώνες.

Ο όρος b μπορεί να θεωρηθεί ως το συναπτικό βάρος ενός επιπλέον, υποθετικού, σταθερού σήματος εισόδου $x_0(t) = 1$. Με βάση αυτό, τα σήματα εισόδου μπορούν να εκφραστούν ως ένα διάνυσμα του \mathbb{R}^{n+1} :

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} x_0(t) \\ x_1(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ x_1(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

και η σχέση (4.1) γράφεται σε διανυσματική μορφή ως [14]:

$$y(t) = f(\mathbf{w}^T \mathbf{x}(t)) \quad (4.7)$$

όπου \mathbf{w} είναι το διάνυσμα των συναπτικών βαρών:

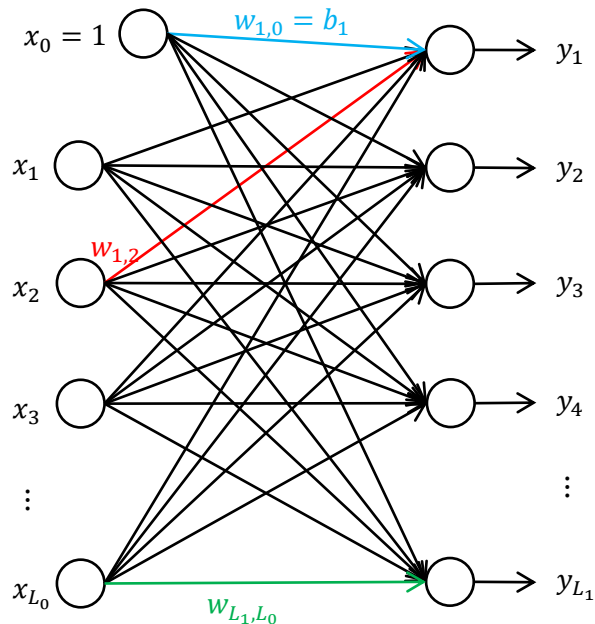
$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1} \quad (4.8)$$

4.3 Αρχιτεκτονικές νευρωνικών δικτύων

Οι νευρώνες συνδέονται μεταξύ τους σχηματίζοντας τα νευρωνικά δίκτυα. Στον εγκέφαλο ενός ενήλικου άνδρα υπάρχουν περίπου $8.6 \cdot 10^{10}$ νευρώνες και $3.5 \cdot 10^{15}$ συνάψεις, και παρόμοιας τάξης μεγέθους αριθμοί ισχύουν για τις γυναίκες [17][18]. Γίνεται φανερό ότι τα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα είναι εξαιρετικά πολύπλοκα, με αποτέλεσμα οι άνθρωποι ακόμη και σε μικρή ηλικία να έχουν τη δυνατότητα να εκτελούν ταχύτατα δύσκολες λειτουργίες, όπως η αναγνώριση προσώπων [19].

Τέτοιας πολυπλοκότητας δίκτυα δεν μπορούν να υποστηριχθούν από τους υπολογιστές, λόγω του μεγάλου αριθμού των νευρώνων και των επακόλουθων απαιτήσεων σε υπολογιστική ισχύ. Αντίθετα, τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα που χρησιμοποιούνται είναι σχετικά απλά στη δομή τους, η οποία μπορεί να αναπαρασταθεί ως δενδροδιάγραμμα, αποτελούνται από πολύ λιγότερους νευρώνες και στηρίζονται στην έννοια του επιπέδου νευρώνων (layer). Ένα επίπεδο νευρώνων είναι ένα σύνολο παράλληλων νευρώνων που δέχονται ως είσοδο τα ίδια δεδομένα και εξάγουν ο καθένας ένα (εν γένει διαφορετικό) αποτέλεσμα, δηλαδή συνολικά ένα διάνυσμα εξόδου. Σημαντικό ρόλο παίζει ο αριθμός των επιπέδων που περιλαμβάνει το δίκτυο, αλλά και ο αριθμός νευρώνων στο κάθε επίπεδο [14][19].

Επιπλέον, διακρίνονται δύο ευρείες κατηγορίες τεχνητών νευρωνικών δικτύων με βάση τη δομή, εκείνα της πρόσθιας τροφοδότησης (feed-forward networks), όπου όλες οι πληροφορίες κατευθύνονται από την είσοδο προς την έξοδο του δικτύου, και τα αναδρομικά (recurrent) ή δίκτυα με ανατροφοδότηση (feedback networks), όπου ορισμένες πληροφορίες ακολουθούν την αντίθετη πορεία. Τα πρώτα είναι στατικά και χωρίς μνήμη, δηλαδή η απόκριση σε ένα διάνυσμα εισόδου εξαρτάται αποκλειστικά από αυτό και είναι ανεξάρτητη από προηγούμενα διανύσματα εισόδου. Έτσι, κάθε διάνυσμα εισόδου παράγει μονοσήμαντα ένα διάνυσμα απόκρισης. Αντίθετα, τα δεύτερα είναι δυναμικά συστήματα, αφού η απόκριση επηρεάζεται, εκτός από τα δεδομένα εισόδου, και από ένα ή περισσότερα προηγούμενα ενδιάμεσα αποτελέσματα ή διανύσματα εξόδου. Έτσι, ένα δεδομένο διάνυσμα εισόδου



Σχήμα 4.3 Τεχνητό νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης ενός επιπέδου. Οι κύκλοι δεξιά αναπαριστούν τεχνητούς νευρώνες (επίπεδο εξόδου), οι κύκλοι αριστερά αναπαριστούν κόμβους εισόδου (επίπεδο εισόδου). Με χρώμα επισημαίνονται ενδεικτικά ορισμένες συνάψεις και τα αντίστοιχα συναπτικά βάρη.

δεν αντιστοιχεί σε συγκεκριμένη απόκριση, αλλά μια ολόκληρη ακολουθία διαδοχικών διανυσμάτων εισόδου, μαζί με τα απαραίτητα αρχικά διανύσματα απόκρισης (αρχικές συνθήκες), παράγουν μονοσήμαντα μια ακολουθία διαδοχικών διανυσμάτων απόκρισης [19].

4.3.1 Δίκτυα πρόσθιας τροφοδότησης

Το απλούστερο τεχνητό νευρωνικό δίκτυο είναι αυτό της πρόσθιας τροφοδότησης με ένα επίπεδο νευρώνων. Αν το επίπεδο αποτελείται από L_1 νευρώνες, το νευρωνικό δίκτυο είναι μια συνάρτηση $\mathbf{F}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{L_1}$ που μετατρέπει σύμφωνα με τη σχέση (4.1) τα σήματα εισόδου σε L_1 διαφορετικά σήματα εξόδου $y_1(t), \dots, y_{L_1}(t)$, όπου [14]:

$$y_k(t) = f\left(\sum_{j=1}^n w_{k,j}x_j(t) + b_k\right), k = 1, \dots, L_1 \quad (4.9)$$

Στη σχέση (4.9) $w_{k,j}$ είναι το συναπτικό βάρος της σύναψης που οδηγεί το j σήμα εισόδου στον k νευρώνα και $b_k = w_{k,0}$ είναι η παράμετρος μεροληψίας του k νευρώνα. Στο Σχήμα 4.3 απεικονίζεται αναλυτικά η δομή ενός τέτοιου δικτύου.

Συχνά τα δεδομένα εισόδου θεωρείται ότι αποτελούν ένα ακόμη επίπεδο, το επίπεδο εισόδου (input layer), ακόμη κι αν δεν υπάρχουν νευρώνες στο επίπεδο αυτό. Για ομοιομορφία του συμβολισμού, ορίζεται $L_0 = n$ η διάσταση του επιπέδου εισόδου.

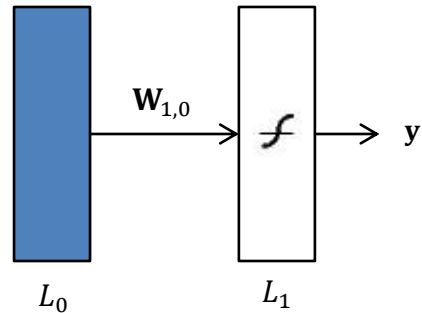
Γίνεται φανερό ότι η μετατροπή των σημάτων εισόδου σε σήματα εξόδου καθορίζεται πλήρως από τον πίνακα των συναπτικών βαρών [14]:

$$\mathbf{W}_{1,0} = \begin{bmatrix} w_{1,0} & w_{2,0} & \dots & w_{L_1,0} \\ w_{1,1} & w_{2,1} & \dots & w_{L_1,1} \\ w_{1,2} & w_{2,2} & \dots & w_{L_1,2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1,L_0} & w_{2,L_0} & \dots & w_{L_1,L_0} \end{bmatrix} = [\mathbf{w}_1 \ \mathbf{w}_2 \ \dots \ \mathbf{w}_{L_1}] \in \mathbb{R}^{(L_0+1) \times L_1} \quad (4.10)$$

κάθε στήλη του οποίου είναι το διάνυσμα συναπτικών βαρών ενός νευρώνα, σύμφωνα με τη σχέση (4.8). Με βάση την παρατήρηση αυτή, το δίκτυο μπορεί να αναπαρασταθεί και με έναν πιο συνοπτικό τρόπο που φαίνεται στο Σχήμα 4.4.

Με σύνδεση περισσότερων του ενός δικτύων πρόσθιας τροφοδότησης ενός επιπέδου σε σειρά δημιουργούνται τα δίκτυα πρόσθιας τροφοδότησης πολλαπλών επιπέδων. Στην περίπτωση αυτή, το τελευταίο επίπεδο, του οποίου η έξοδος είναι και η απόκριση του δικτύου, ονομάζεται επίπεδο εξόδου (output layer), ενώ τα ενδιάμεσα επίπεδα, των οποίων οι έξοδοι είναι είσοδοι επόμενου δικτύου, ονομάζονται κρυφά επίπεδα (hidden layers) [14].

Θεωρητικά, ένα δίκτυο μπορεί να έχει οσοδήποτε μεγάλο πλήθος κρυφών επιπέδων. Ωστόσο, στις



Σχήμα 4.4 Τεχνητό νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης ενός επιπέδου. Το σκιασμένο παραλληλόγραμμο είναι το επίπεδο εισόδου, το λευκό παραλληλόγραμμο είναι επίπεδο νευρώνων. Κάτω από κάθε επίπεδο σημειώνεται ο αριθμός νευρώνων του (ή της διάστασης για το επίπεδο εισόδου). Μεταξύ δύο επιπέδων αναγράφεται ο πίνακας συναπτικών βαρών του επιπέδου-δέκτη. Το σύμβολο εντός του επιπέδου νευρώνων δείχνει ότι οι νευρώνες του επιπέδου έχουν συνάρτηση ενεργοποίησης με σιγμοειδή μορφή [σχέση (4.4)].

εφαρμογές συνήθως αρκεί ένα κρυφό επίπεδο (δηλαδή συνολικά δύο επίπεδα νευρώνων) (Ενότητα 4.4) [14].

4.3.2 Δίκτυο NARX

Από τα δίκτυα με ανατροφοδότηση, παρουσιάζεται μόνο αυτό που χρησιμοποιείται στη συνέχεια, που είναι το μη γραμμικό αυτοπαλίνδρομο δίκτυο με εξωγενή δεδομένα εισόδου (nonlinear autoregressive network with exogenous inputs, NARX). Το συγκεκριμένο δίκτυο είναι πολύ ισχυρό, καθώς έχει απλούστερη δομή από άλλα δίκτυα με ανατροφοδότηση, αλλά συγκλίνει γρηγορότερα και κάνει καλύτερη γενίκευση από αυτά [20].

Το δίκτυο NARX μοντελοποιεί σχέσεις της μορφής:

$$\mathbf{y}(t_k) = \mathbf{F}\left(\mathbf{x}(t_{k-n_x}), \dots, \mathbf{x}(t_{k-1}), \mathbf{x}(t_k), \mathbf{y}(t_{k-n_y}), \dots, \mathbf{y}(t_{k-1})\right) \quad (4.11)$$

όπου \mathbf{F} οποιαδήποτε μη γραμμική συνάρτηση που μπορεί να προσεγγισθεί από ένα δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης πολλαπλών επιπέδων [20].

Δηλαδή, το δίκτυο υπολογίζει μια εκτίμηση $\hat{\mathbf{y}}(t_k)$ της τιμής της ακολουθίας απόκρισης \mathbf{y} τη στιγμή t_k χρησιμοποιώντας το διάνυσμα εισόδου τη στιγμή t_k , αλλά και τα διανύσματα εισόδου τις προηγούμενες n_x στιγμές και τα διανύσματα απόκρισης τις προηγούμενες n_y στιγμές.

Το δίκτυο υλοποιείται μέσω της εργαλειοθήκης νευρωνικών δικτύων του Matlab, όπου χρησιμοποιείται μια παραλλαγμένη σχέση ορισμού [9]:

$$\mathbf{y}(t_k) = \mathbf{F}\left(\mathbf{x}(t_{k-n_x}), \dots, \mathbf{x}(t_{k-1}), \mathbf{y}(t_{k-n_y}), \dots, \mathbf{y}(t_{k-1})\right) \quad (4.12)$$

από την οποία απουσιάζει ο όρος $\mathbf{x}(t_k)$. Ωστόσο, οι δύο σχέσεις δεν διαφέρουν ουσιαστικά, αφού η (4.12) προκύπτει από την (4.11) με τις παρακάτω αντικαταστάσεις, που μετατοπίζουν την ακολουθία $\mathbf{x}(t_k)$ κατά μία χρονική στιγμή στο παρελθόν:

$$\tilde{\mathbf{x}}(t_k) = \mathbf{x}(t_{k+1}) \quad (4.13)$$

$$\tilde{n}_x = n_x + 1 \quad (4.14)$$

Το δίκτυο NARX επιτρέπει, σε σχέση με άλλα δίκτυα, καλύτερη προσέγγιση σχέσεων με μακροπρόθεσμη εξάρτηση, όπου δηλαδή η απόκριση εξαρτάται από διανύσματα εισόδου και απόκρισεις πολλές στιγμές στο παρελθόν [21]. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα, όμως, η μορφή των εξισώσεων που το διέπουν [(2.1), (2.2), (2.4)] και η διακριτοποίηση στο χρόνο με την οποία επιλύονται υποδεικνύουν ότι δεν υπάρχει τέτοιου είδους εξάρτηση. Για το λόγο αυτό επιλέγεται $n_x = n_y = 1$, οπότε:

$$\mathbf{y}(t_k) = \mathbf{F}\left(\mathbf{x}(t_{k-1}), \mathbf{y}(t_{k-1})\right) \quad (4.15)$$

Επομένως, κάθε διάνυσμα απόκρισης εξαρτάται μόνο από τα δύο διανύσματα, εισόδου και απόκρισης, την ακριβώς προηγούμενη στιγμή.

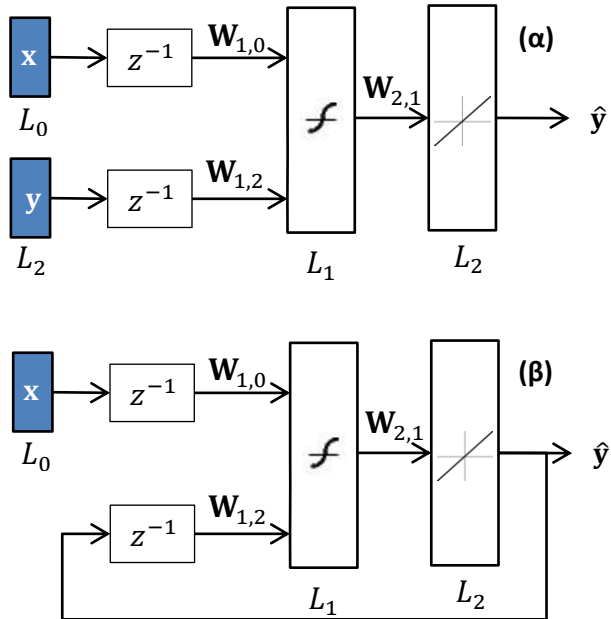
Η αρχιτεκτονική του δικτύου έχει δύο εκδοχές [9]:

- Στη σειριακή-παράλληλη αρχιτεκτονική, που χρησιμοποιείται κατά την εκπαίδευση του δικτύου (βλ. κεφάλαιο 4.5), στο πρώτο επίπεδο νευρώνων τροφοδοτούνται γνωστές τιμές της ακολουθίας απόκρισης, \mathbf{y} , και στην έξοδο υπολογίζονται εκτιμήσεις της ίδιας σειράς, $\hat{\mathbf{y}}$. Με χρήση της συγκεκριμένης αρχιτεκτονικής μπορεί

να γίνει πρόβλεψη μόνο της ακριβώς επόμενης τιμής της ακολουθίας y . Επισημαίνεται ότι η συγκεκριμένη αρχιτεκτονική είναι στην πραγματικότητα δικτύου πρόσθιας τροφοδότησης [Σχήμα 4.5 (α)].

- Στην παράλληλη αρχιτεκτονική, που χρησιμοποιείται κατά τη λειτουργία του δικτύου, όταν δεν υπάρχουν γνωστές τιμές της ακολουθίας απόκρισης, στο πρώτο επίπεδο νευρώνων τροφοδοτείται η εκτίμηση των τιμών της ακολουθίας απόκρισης, \hat{y} , που υπολογίσθηκε στο προηγούμενο χρονικό βήμα. Αυτό επιτρέπει την πρόβλεψη τιμών της ακολουθίας y σε βάθος χρόνου μεγαλύτερο του ενός βήματος. Ωστόσο, όπως φαίνεται από τη σχέση (4.15), η διαδικασία αυτή εγκυμονεί τον κίνδυνο συσσώρευσης

του σφάλματος της εκτίμησης \hat{y} από βήμα σε βήμα, αφού στον υπολογισμό που πραγματοποιείται στο k -στό βήμα μετά την τελευταία γνωστή τιμή της ακολουθίας y υπεισέρχεται k φορές το σφάλμα στην εκτίμηση της αληθούς συνάρτησης F από το δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης. Για το λόγο αυτό είναι πολύ σημαντικό η εκτίμηση της F να γίνει με όσο το δυνατόν μικρότερο σφάλμα, το οποίο εξασφαλίζεται με τη διαδικασία εκπαίδευσης του δικτύου [Σχήμα 4.5 (β)].



Σχήμα 4.5 Το χρησιμοποιούμενο δίκτυο NARX. Το σύμβολο στο νευρώνα εξόδου δηλώνει γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης [σχέση (4.3)]. (α) Αρχιτεκτονική εκπαίδευσης (σειριακή-παράλληλη), (β) Αρχιτεκτονική λειτουργίας (παράλληλη)

4.4 Καθολική προσέγγιση συναρτήσεων

Μια πολύ σημαντική θεωρητική ιδιότητα των νευρωνικών δικτύων που δικαιολογεί, μαζί με άλλα χαρακτηριστικά τους, τη διαδεδομένη χρήση τους είναι η ιδιότητα της καθολικής προσέγγισης συναρτήσεων. Την ιδιότητα αυτή την εμφανίζουν τα δίκτυα τουλάχιστον δύο επιπέδων, όπου οι νευρώνες των κρυφών επιπέδων δεν είναι γραμμικοί [14]. Είναι προφανές ότι το δίκτυο στο Σχήμα 4.5 πληροί τις παραπάνω προϋποθέσεις. Αυτός είναι ο λόγος για τον οποίο δεν είναι απαραίτητη η χρήση δικτύου με περισσότερα από δύο επίπεδα. Σε όλα τα νευρωνικά δίκτυα που χρησιμοποιούνται στην εργασία αυτή οι κρυφοί νευρώνες είναι σιγμοειδείς, ενώ οι νευρώνες εξόδου γραμμικοί.

Σύμφωνα με την ιδιότητα, οποιαδήποτε ομαλή συνάρτηση μπορεί να προσεγγισθεί με οποδήποτε ικανοποιητική ακρίβεια σε ένα συμπαγές σύνολο από ένα νευρωνικό δίκτυο δύο επιπέδων. Πιο συγκεκριμένα, αν $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ είναι μια ομαλή συνάρτηση, τότε για δεδομένο συμπαγές σύνολο $S \subset \mathbb{R}^n$ και δεδομένο θετικό αριθμό ϵ_N , υπάρχει ένα

νευρωνικό δίκτυο δύο επιπέδων με L μη γραμμικούς κρυφούς νευρώνες και m γραμμικούς νευρώνες εξόδου τέτοιο ώστε:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}_N(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \quad (4.16)$$

όπου $\mathbf{F}_N(\mathbf{x})$ η συνάρτηση που υλοποιεί το νευρωνικό δίκτυο και $\|\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})\| < \varepsilon_N$ για κάθε $\mathbf{x} \in S$ και για κάποιο, επαρκώς μεγάλο, αριθμό κρυφών νευρώνων L [14].

Σημειώνεται ότι η παραπάνω ιδιότητα κάνει λόγο μόνο για την ύπαρξη ενός κατάλληλου δικτύου, αλλά τίποτα σχετικά με τον προσδιορισμό του κατάλληλου αριθμού κρυφών νευρώνων L και των συναπτικών βαρών. Γενικά, το σφάλμα της προσέγγισης, $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$, μειώνεται όσο αυξάνεται ο L , ενώ όσο μεγαλύτερο είναι το σύνολο S , τόσο μεγαλύτερος είναι και ο απαραίτητος αριθμός κρυφών νευρώνων. Τέλος, ο προσδιορισμός των συναπτικών βαρών γίνεται με τη διαδικασία της εκπαίδευσης του δικτύου, με χρήση κάποιου αλγόριθμου εκπαίδευσης [14].

Η ιδιότητα της καθολικής προσέγγισης συναρτήσεων εξασφαλίζει ότι η προσέγγιση της συνάρτησης \mathbf{F} της σχέσης (4.15) είναι επαρκής, ώστε να αποφευχθεί η συσσώρευση σφάλματος. Πράγματι, με δοκιμή διαφορετικών, αυξανόμενων τιμών L , εντοπίζεται μια τιμή L για την οποία η εκπαίδευση έχει ικανοποιητικό αποτέλεσμα.

4.5 Εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων

Ο υπολογισμός των πινάκων συναπτικών βαρών $\mathbf{W}_{i,j}$ μεταξύ όλων των επιπέδων ενός νευρωνικού δικτύου, ώστε αυτό να προσεγγίζει την επιθυμητή σχέση, μπορεί να γίνει είτε με απευθείας υπολογισμό είτε με χρήση κάποιου επαναληπτικού αλγόριθμου εκπαίδευσης. Στην πλειοψηφία των περιπτώσεων, όπως και στη παρούσα εργασία, εφαρμόζεται ο δεύτερος τρόπος [14].

Μια ευρεία κατηγορία αλγορίθμων εκπαίδευσης είναι αυτοί της επιβλεπόμενης μάθησης, όπου στο προς εκπαίδευση δίκτυο παρέχεται ένα σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης, όπου είναι γνωστές εκ των προτέρων οι ακολουθίες εισόδου και οι αντίστοιχες ακολουθίες απόκρισης. Σε κάθε βήμα του αλγορίθμου τα συναπτικά βάρη αλλάζουν, με στόχο την ελαχιστοποίηση μιας συνάρτησης κόστους, που σχετίζεται με τη διαφορά μεταξύ των επιθυμητών αποκρίσεων \mathbf{y} και των πραγματικών εκτιμήσεών τους $\hat{\mathbf{y}}$ [14].

Ο αλγόριθμος Levenberg-Marquardt, που χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία μέσω του αυτόματου εργαλείου εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων του Matlab [9], είναι ένας ευρετικός αλγόριθμος αριστοποίησης που συνδυάζει στοιχεία του αλγορίθμου Gauss-Newton και του αλγορίθμου «πλέον απότομης καθόδου» (steepest descent) [22]. Ανήκει στην κατηγορία αλγορίθμων επιβλεπόμενης μάθησης και χρησιμοποιεί ως συνάρτηση κόστους το άθροισμα τετραγώνων των σφαλμάτων των αποκρίσεων:

$$V(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = \|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2 \quad (4.17)$$

και στη συγκεκριμένη περίπτωση, η εκτίμηση $\hat{\mathbf{y}}$ προκύπτει από τη σχέση (4.15):

$$\hat{\mathbf{y}}(t_k) = \mathbf{F}_N(\mathbf{x}(t_{k-1}), \mathbf{y}(t_{k-1})) \quad (4.18)$$

Παράμετροι που επηρεάζουν τη διαδικασία και την ποιότητα της εκπαίδευσης είναι οι ακόλουθες:

Κεφάλαιο 4: Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα

- Το εύρος του πεδίου ορισμού S της επιθυμητής συνάρτησης: όπως έχει προαναφερθεί, όσο πιο μεγάλο είναι αυτό, τόσο περισσότερα δεδομένα εκπαίδευσης απαιτούνται από διάφορες περιοχές του εύρους. Η ποιότητα της προσέγγισης είναι καλύτερη στις περιοχές του πεδίου ορισμού κοντά στις οποίες έχουν ληφθεί τα δεδομένα εκπαίδευσης.
- Η μορφή της επιθυμητής συνάρτησης: όσο πιο πολύπλοκη είναι, τόσο περισσότερα δεδομένα εκπαίδευσης απαιτούνται, ιδιαίτερα σε «δύσκολες» περιοχές (λ.χ. σημεία ασυνέχειας), προκειμένου να διασφαλισθεί ότι και στα σημεία εκείνα η μορφή της συνάρτησης θα διδαχθεί σωστά στο δίκτυο.
- Η ποιότητα των δεδομένων εκπαίδευσης: όσο πιο πολλά πειραματικά σφάλματα ή θόρυβο εμπριέχουν, τόσο αλλοιώνουν την πληροφορία της επιθυμητής συνάρτησης που διδάσκεται στο δίκτυο.

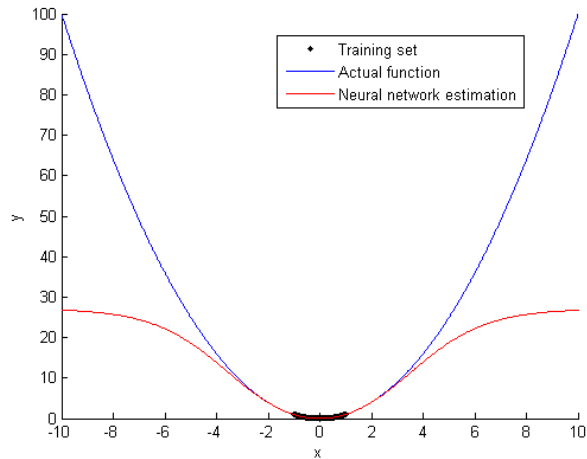
Αξίζει να τονισθεί ότι, χάρη στο γεγονός ότι στην παρούσα εργασία τα δεδομένα λαμβάνονται όχι με πραγματικό πείραμα αλλά με προσομοίωση πειράματος, είναι αρκετά πιο εύκολο να συλλεχθεί μεγάλη ποσότητα δεδομένων εκπαίδευσης, αφού οι προσομοιώσεις μπορούν να πραγματοποιούνται επαναλαμβανόμενα χωρίς επιτήρηση και να λαμβάνονται μετρήσεις με πολύ συντομότερο χρονικό βήμα, ενώ εξαλείφεται κάθε πειραματικό σφάλμα λόγω αστοχίας του εξοπλισμού, ανθρώπινου λάθους και άλλων παραγόντων που υπεισέρχονται στα πειράματα. Βέβαια, δεν πρέπει να παραβλέπονται πιθανά σφάλματα οφειλόμενα στην ίδια την προσομοίωση, όπως η επίτευξη ή μη σύγκλισης και η επάρκεια του πλέγματος. Θεωρείται, όμως, ότι τα σφάλματα αυτά είναι πιο μικρά και μπορούν να περιορισθούν ευκολότερα από τις διάφορες αιτίες πειραματικής αβεβαιότητας.

Ο αριθμός νευρώνων του κρυφού επιπέδου, L , έχει άμεση σχέση με το πλήθος των δεδομένων εκπαίδευσης και το πόσο διαφορετικά είναι μεταξύ τους. Από κάθε ακολουθία των δεδομένων εκπαίδευσης, προκύπτει μια σειρά εξισώσεων της μορφής (4.18). Στο σύστημα εξισώσεων που προκύπτει από όλα τα δεδομένα εκπαίδευσης, οι μόνοι άγνωστοι είναι τα συναπτικά βάρη που πρέπει να προσδιορισθούν. Όσο περισσότεροι είναι οι κρυφοί νευρώνες, τόσο περισσότερες είναι και οι συνάψεις και τα συναπτικά βάρη. Επομένως [9]:

- Αν οι κρυφοί νευρώνες (L) είναι πολύ λίγοι, τότε ο αριθμός των συναπτικών βαρών δεν επαρκεί για την περιγραφή της επιθυμητής συνάρτησης
- Αν οι κρυφοί νευρώνες είναι υπερβολικά πολλοί, τότε το σύστημα εξισώσεων είναι ακριβώς ορισμένο ή υποορισμένο (υπάρχουν ίσες ή περισσότερες εξισώσεις από συναπτικά βάρη), επομένως το δίκτυο εκπαιδεύεται ώστε να περιγράψει απόλυτα σωστά τη συμπεριφορά των δεδομένων εκπαίδευσης, αλλά οι προβλέψεις του είναι εντελώς λάθος. Το φαινόμενο αυτό αντιστοιχεί στην προσπάθεια προσαρμογής πολυωνύμου μεγάλης βαθμού από γραμμικά δεδομένα και είναι γνωστό ως υπερπροσαρμογή (overfitting) του δικτύου.
- Η ιδανική κατάσταση επιτυγχάνεται όταν ο αριθμός κρυφών νευρώνων είναι μεταξύ των δύο παραπάνω άκρων. Στην περίπτωση αυτή, τα δεδομένα εκπαίδευσης περιγράφονται ικανοποιητικά, ενώ και οι προβλέψεις του δικτύου ακολουθούν την επιθυμητή συνάρτηση, δηλαδή το δίκτυο έχει γενικεύσει επιτυχώς τα δεδομένα εκπαίδευσης.

Από τα παραπάνω γίνεται φανερή η ανάγκη ύπαρξης δεδομένων εκπαίδευσης που δεν χρησιμοποιούνται απευθείας στην εκπαίδευση του δικτύου, αλλά μετά από αυτή για να ελεγχθεί αν το δίκτυο έχει εκπαιδευθεί σωστά ή αν έχει συμβεί υπερπροσαρμογή. Τα δεδομένα αυτά ονομάζονται δεδομένα ελέγχου [14].

Πρέπει να τονισθεί ότι, επειδή το νευρωνικό δίκτυο δεν έχει καμιά γνώση της ίδιας της επιθυμητής συνάρτησης, η γενίκευση ισχύει μόνο εντός του πεδίου των δεδομένων εκπαίδευσης αλλά όχι εκτός. Το γεγονός αυτό ελέγχθηκε σε ένα δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης, 2 επιπέδων με 2 κρυφούς νευρώνες που εκπαιδεύθηκε με 101 σημεία της συνάρτησης $y = x^2$ στο διάστημα $[-1,1]$. Η εκτίμηση του δικτύου είναι άριστη στο διάστημα εκπαίδευσης, όμως όσο η ανεξάρτητη μεταβλητή απομακρύνεται από αυτό η εκτίμηση χειροτερεύει (Σχήμα 4.6).

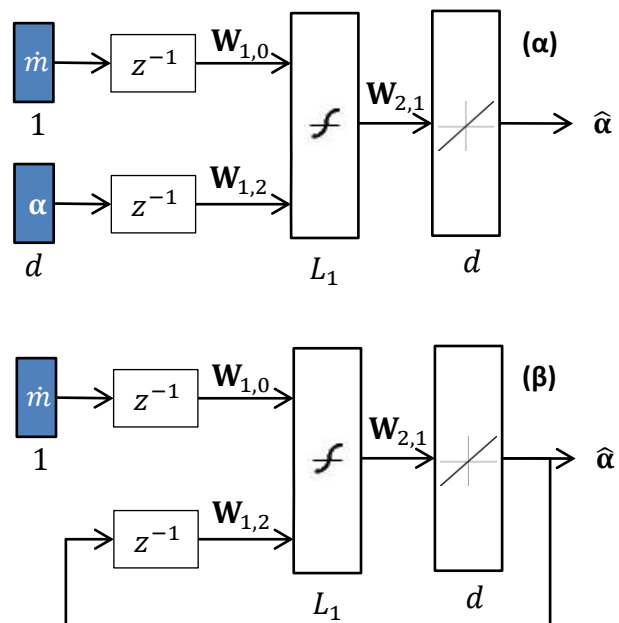


Σχήμα 4.6 Εκτίμηση της συνάρτησης $y = x^2$ από νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης 2 επιπέδων με 2 κρυφούς νευρώνες

Στην παρούσα εργασία, όπως έχει σημειωθεί, το δίκτυο NARX εκπαιδεύεται στη σειριακή-παράλληλη αρχιτεκτονική και λειτουργεί στην παράλληλη. Επομένως, και ο έλεγχος για τυχόν υπερπροσαρμογή με τα δεδομένα ελέγχου πραγματοποιείται στην παράλληλη αρχιτεκτονική, τροφοδοτώντας μόνο τις ακολουθίες εισόδου (x) και συγκρίνοντας την εκτίμηση των ακολουθιών εξόδου \hat{y} με τις γνωστές ακολουθίες y .

4.6 Εφαρμογή

Όπως έχει αναφερθεί (Ενότητα 3.3), το νευρωνικό δίκτυο χρησιμοποιείται για την προσέγγιση της σχέσης της χρονικής εξέλιξης των συντελεστών $\alpha(t)$ του μοντέλου μειωμένης τάξης.



Σχήμα 4.7 Το χρησιμοποιούμενο δίκτυο NARX σε πραγματικούς όρους. Σε σχέση με το Σχήμα 4.5: $x = \dot{m}$, $y = \alpha$, $L_0 = 1$, $L_2 = d$. (α) Αρχιτεκτονική εκπαίδευσης (σειριακή-παράλληλη), (β) Αρχιτεκτονική λειτουργίας (παράλληλη)

Επιπλέον (Ενότητα 2.4, Σχήμα 2.4), η παροχή $\dot{m}(t)$ δρα ως ανεξάρτητη μεταβλητή εισόδου και η κατάσταση $x(t)$ ως εξαρτημένη μεταβλητή εξόδου. Αφού μέσω της μείωσης τάξης (Ενότητα 3.5) η χρονική εξέλιξη της κατάστασης $x(t)$ προσεγγίζεται από τη χρονική εξέλιξη

Κεφάλαιο 4: Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα

των συντελεστών $\alpha(t)$, στο δίκτυο NARX η ανεξάρτητη ακολουθία είναι αυτή της παροχής $\dot{m}(t)$ και η εξαρτημένη ακολουθία, την οποία το δίκτυο καλείται να προβλέπει σε βάθος χρόνου, είναι αυτή των συντελεστών $\alpha(t)$. Επομένως, η διάσταση του επιπέδου εισόδου είναι 1, καθώς η παροχή δεν είναι διάνυσμα, ενώ το επίπεδο εξόδου έχει διάσταση d , ίση δηλαδή με τον αριθμό των συντελεστών και τη διάσταση της βάσης \mathbf{Z} . Τα παραπάνω απεικονίζονται στο Σχήμα 4.7.

Σύμφωνα με τα προηγούμενα, η εκτίμηση $\hat{\mathbf{Y}} \in \mathbb{R}^{N \times m}$ του μοντέλου, το οποίο αποτελείται πλέον από το μοντέλο μειωμένης τάξης και το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο, για μια άγνωστη τροχιά $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times m}$ διάρκειας m χρονικών στιγμών, για την οποία είναι γνωστά μόνο η αρχική κατάσταση $\mathbf{x}(t_0)$ (άρα και οι αρχικοί συντελεστές $\alpha(t_0)$) και η ακολουθία της παροχής $\dot{m}(t)$ για κάθε στιγμή t , είναι, με επέκταση της σχέσης (3.50):

$$\hat{\mathbf{Y}} = \bar{\mathbf{x}}\mathbf{1}_{1 \times m} + \mathbf{DZ}\hat{\mathbf{A}} \quad (4.19)$$

όπου $\hat{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}^{d \times m}$ είναι η ακολουθία εξόδου του νευρωνικού δικτύου:

$$\hat{\mathbf{A}} := [\hat{\alpha}(t_0) \dots \hat{\alpha}(t_{m-1})] \in \mathbb{R}^{d \times m} \quad (4.20)$$

Κάθε στήλη του πίνακα $\hat{\mathbf{A}}$ υπολογίζεται από το νευρωνικό δίκτυο στο Σχήμα 4.7 (β) που μαθηματικά μοντελοποιείται από το εξής δυναμικό μοντέλο διακριτού χρόνου:

$$\tilde{\alpha}(t_k) := \begin{bmatrix} 1 \\ \hat{\alpha}(t_k) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{d+1} \quad (4.21)$$

$$\tilde{\mathbf{m}}(t_k) := \begin{bmatrix} 1 \\ \dot{m}(t_k) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2 \quad (4.22)$$

$$\mathbf{v}(t_{k+1}) = \tanh\left(\mathbf{W}_{1,0}^T \tilde{\mathbf{m}}(t_k) + \mathbf{W}_{1,2}^T \tilde{\alpha}(t_k)\right) \in \mathbb{R}^{L_1} \quad (4.23)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}(t_k) := \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{v}(t_k) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{L_1+1} \quad (4.24)$$

$$\hat{\alpha}(t_k) = \mathbf{W}_{2,1}^T \tilde{\mathbf{v}}(t_k) \in \mathbb{R}^d \quad (4.25)$$

όπου η συνάρτηση $\tanh(\mathbf{u})$ δρα ξεχωριστά σε κάθε στοιχείο του ορίσματός της $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{L_1}$. Η αρχική συνθήκη του μοντέλου αυτού, $\hat{\alpha}(t_0)$, είναι το αποτέλεσμα του αλγορίθμου του Πίνακα 3.2 όπου τροχιά είναι μόνο η αρχική κατάσταση $\mathbf{x}(t_0)$.

Σύμφωνα με τη σχέση (4.16), η πλήρης έκφραση που προκύπτει από το νευρωνικό δίκτυο για το διάνυσμα των συντελεστών σε μια τροχιά κάποια χρονική στιγμή t είναι η εξής:

$$\alpha(t) = \hat{\alpha}(t) + \mathbf{e}_{NN}(t) \quad (4.26)$$

όπου $\mathbf{e}_{NN}(t) \in \mathbb{R}^d$ το σφάλμα του νευρωνικού δικτύου.

Επομένως, η πλήρης έκφραση για ένα στιγμιότυπο μιας άγνωστης τροχιάς τη στιγμή t , σύμφωνα με τις σχέσεις (3.53) και (4.26), είναι:

$$\mathbf{x}(t) = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{D}\left(\mathbf{Z}(\hat{\alpha}(t) + \mathbf{e}_{NN}(t)) + \mathbf{e}_{POD}(t)\right) \quad (4.27)$$

Η εκτίμηση $\hat{\mathbf{x}}(t) \in \mathbb{R}^N$ του μοντέλου για ένα στιγμιότυπο μιας άγνωστης τροχιάς τη στιγμή t είναι, κατ' αναλογία με τη σχέση (3.52), αλλά και σύμφωνα με τη σχέση (4.27):

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{DZ}\hat{\alpha}(t) \quad (4.28)$$

Τέλος, η πλήρης έκφραση για μια άγνωστη τροχιά είναι, με επέκταση της σχέσης (3.55):

$$\mathbf{Y} = \bar{\mathbf{x}}\mathbf{1}_{1 \times m} + \mathbf{D}[\mathbf{Z}(\hat{\mathbf{A}} + \mathbf{E}_{NN}) + \mathbf{E}_{POD}] \quad (4.29)$$

όπου:

$$\mathbf{E}_{NN} = [\mathbf{e}_{NN}(t_0) \dots \mathbf{e}_{NN}(t_{m-1})] \in \mathbb{R}^{d \times m} \quad (4.30)$$

Επισημαίνεται ότι τα δεδομένα (τροχιές) εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου μπορεί να είναι διαφορετικά, και δη περισσότερα, από τις τροχιές με τις οποίες κατασκευάζεται η βάση \mathbf{Z} στη μέθοδο των στιγμιοτύπων (Ενότητα 3.5).

4.7 Αξιολόγηση του νευρωνικού δικτύου – Σφάλματα

Στο στάδιο της εκπαίδευσης του δικτύου, όπου υπάρχουν γνωστά δεδομένα εκπαίδευσης από το μοντέλο πλήρους τάξης, οι εκτιμήσεις-προβλέψεις του νευρωνικού δικτύου μπορούν να συγκριθούν τόσο με το μοντέλο πλήρους τάξης όσο και με αυτό της μειωμένης τάξης. Τελικός στόχος βέβαια είναι το δίκτυο να παράγει σωστές εκτιμήσεις του μοντέλου πλήρους τάξης.

Σύμφωνα με αυτά, ορίζεται το σχετικό σφάλμα της πρόβλεψης του νευρωνικού δικτύου για ένα στιγμιότυπο τη στιγμή t ως προς την εκτίμηση του μοντέλου μειωμένης τάξης:

$$e_{r,POD}(t) = \frac{\|\hat{\mathbf{x}}(t) - \hat{\mathbf{x}}(t)\|}{\|\hat{\mathbf{x}}(t)\|} \quad (4.31)$$

και το σχετικό σφάλμα της πρόβλεψης του νευρωνικού δικτύου για ένα στιγμιότυπο τη στιγμή t ως προς το μοντέλο πλήρους τάξης:

$$e_{r,full}(t) = \frac{\|\hat{\mathbf{x}}(t) - \mathbf{x}(t)\|}{\|\mathbf{x}(t)\|} \quad (4.32)$$

Η αξιολόγηση της εκτίμησης μιας γνωστής τροχιάς από μια βάση και ένα νευρωνικό δίκτυο, εκτός από την εξέλιξη των δύο πιο πάνω σφαλμάτων σε συνάρτηση με το χρόνο, μπορεί να γίνει και με το μέσο τετραγωνικό σχετικό σφάλμα ως προς το μοντέλο μειωμένης τάξης που ορίζεται ως εξής:

$$mse_{r,POD} = \left(\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m e_{r,POD}^2(t) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.33)$$

με το μέγιστο σχετικό σφάλμα ως προς το μοντέλο μειωμένης τάξης που ορίζεται ως εξής:

$$me_{r,POD} = \max_{j=1, \dots, m} (e_{r,POD}(t)) \quad (4.34)$$

με το μέσο τετραγωνικό σχετικό σφάλμα ως προς το πλήρες μοντέλο που ορίζεται ως εξής:

$$mse_{r,full} = \left(\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m e_{r,full}^2(t) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.35)$$

και τέλος με το μέγιστο σχετικό σφάλμα ως προς το πλήρες μοντέλο που ορίζεται ως εξής:

$$me_{r,full} = \max_{j=1, \dots, m} (e_{r,full}(t)) \quad (4.36)$$

Καθώς τα νευρωνικά δίκτυα NARX κάνουν προβλέψεις τροχιών και όχι μεμονωμένων καταστάσεων, οι σχέσεις (4.31)-(4.36) δεν έχουν νόημα για καταστάσεις ισορροπίας.

5 Ρύθμιση προβλεπτικού μοντέλου (MPC)

Στα δύο προηγούμενα κεφάλαια περιγράφεται η κατασκευή του μη γραμμικού μοντέλου μειωμένης τάξης της διεργασίας. Τώρα, εξηγείται πώς χρησιμοποιείται το μοντέλο αυτό για την αυτόματη ρύθμιση της διεργασίας με τη μέθοδο MPC.

5.1 Γενικά στοιχεία ρύθμισης

Η ρύθμιση μπορεί να ορισθεί ως η επιλογή αρχιτεκτονικής, μηχανισμών και αλγορίθμων που να εξασφαλίζουν ότι η πραγματική τιμή ορισμένων μεταβλητών (ρυθμιζόμενες μεταβλητές) σε ένα σύστημα πλησιάζει όσο το δυνατόν πιο πολύ στις επιθυμητές τιμές τους (set points), κάτω από συνθήκες ευστάθειας και ευρωστίας [23]. Για το σκοπό αυτό μεταβάλλονται με ελεγχόμενο τρόπο ορισμένες από τις μεταβλητές εισόδου του συστήματος (μεταβλητές χειρισμού) που επηρεάζουν τις τιμές των ρυθμιζόμενων.

Τα χαρακτηριστικά που πρέπει να ικανοποιεί ένα σύστημα ρύθμισης είναι τα εξής [23]:

- Ευστάθεια: είναι το πιο βασικό χαρακτηριστικό που πρέπει να εξασφαλίζεται, και αφορά στο σημείο ισορροπίας $\mathbf{x}_e \in \mathbb{R}^n$ του δυναμικού συστήματος που προκύπτει από τη χρήση του ρυθμιστή, το οποίο ταυτίζεται με την επιθυμητή κατάσταση. Υπάρχουν πολλά είδη ευστάθειας. Ένα σημείο ισορροπίας μπορεί να είναι [14]:
 - ασυμπτωτικά ευσταθές, αν η κατάσταση $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ του συστήματος συγκλίνει (σε θεωρητικά άπειρο χρόνο) σε αυτό από κάθε αρχική κατάσταση που βρίσκεται σε ένα συμπαγές σύνολο $S \subseteq \mathbb{R}^n$ που περιλαμβάνει και το σημείο ισορροπίας,
 - ευσταθές, αν η κατάσταση $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ του συστήματος μπορεί να είναι κάθε χρονική στιγμή οσοδήποτε κοντά στο σημείο ισορροπίας, αρκεί η αρχική κατάσταση να βρίσκεται επαρκώς κοντά σε αυτό,
 - φραγμένο, αν η κατάσταση $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ του συστήματος, απέχει από την κατάσταση ισορροπίας το πολύ μια συγκεκριμένη απόσταση (φράγμα) $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ μετά από ορισμένο χρόνο από την αρχική κατάσταση, για κάθε αρχική κατάσταση που βρίσκεται σε ένα συμπαγές σύνολο $S \subseteq \mathbb{R}^n$ που περιλαμβάνει και το σημείο ισορροπίας.

Οι παραπάνω έννοιες είναι η καθεμιά λιγότερο ισχυρή από την προηγούμενη. Ως αποτέλεσμα των παραπάνω, η ευστάθεια ενός δυναμικού συστήματος εγγυάται ότι, αν στο σημείο ισορροπίας γίνει κάποια παροδική επιβολή εντός ορίων, τότε το σύστημα θα ισορροπήσει και πάλι στο ίδιο σημείο ισορροπίας, ενώ αν γίνει κάποια φραγμένη επιβολή εντός ορίων, η απόκριση του συστήματος θα είναι επίσης φραγμένη, σε καμιά δηλαδή από τις δύο παραπάνω περιπτώσεις το σύστημα δεν θα εκτραπεί ούτε η απόκριση θα απειριστεί. Πρακτικά, αυτό επιτυγχάνεται ακόμη και με την ασθενέστερη απαίτηση το σημείο ισορροπίας να είναι φραγμένο, αρκεί το φράγμα $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ να είναι αρκετά μικρό [14].

- Ικανότητα σταθεροποιητικού ελέγχου: πρέπει το σύστημα να λειτουργεί στην επιθυμητή κατάσταση, παρά την ύπαρξη μη ελεγχόμενων μεταβλητών εισόδου (διαταραχών) που μεταβάλλονται εν γένει με άγνωστο τρόπο [23].

- Ικανότητα καθοδηγητικού ελέγχου: πρέπει οι ρυθμιζόμενες μεταβλητές να ακολουθούν την επιθυμητή τροχιά με την πάροδο του χρόνου, για παράδειγμα να μεταβεί το σύστημα από μια μόνιμη κατάσταση σε μια άλλη [23].
- Ευρωστία: πρέπει το σύστημα ρύθμισης να συμπεριφέρεται ικανοποιητικά, ακόμη κι αν το μοντέλο που χρησιμοποιεί δεν είναι πλήρως γνωστό ή αν οι παράμετροι του μοντέλου μεταβάλλονται με το χρόνο εντός εύλογων ορίων [23].
- Ομαλή λειτουργία: πρέπει η ρύθμιση να γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε να μην τίθεται σε κίνδυνο ο εξοπλισμός και να περιορίζονται κατά το δυνατόν οι φθορές, για παράδειγμα να αποφεύγονται συνεχείς και απότομες μεταβολές των παροχών που προξενούν φθορές στις βάνες [23].

Τα συστήματα αυτόματης ρύθμισης αποτελούν αναπόσπαστο στοιχείο πολλών χημικών διεργασιών σε βιομηχανικό επίπεδο. Ωστόσο, στην περίπτωση της χημικής απόθεσης από ατμό, η ρύθμιση, που είναι απαραίτητη για να διασφαλισθεί ότι πληρούνται οι προδιαγραφές της διεργασίας και του προϊόντος (Ενότητα 2.1) γίνεται με μη αυτόματο τρόπο. Ειδικότερα, αξιοποιώντας δεδομένα από πειράματα ή τις πραγματικές συνθήκες παραγωγής, έχουν συνταχθεί πίνακες (look-up tables) που συνδέουν τις μεταβλητές εισόδου, στη συγκεκριμένη περίπτωση την μαζική παροχή \dot{m} , με τις ρυθμιζόμενες μεταβλητές, για παράδειγμα το ρυθμό απόθεσης και την ομοιομορφία του υμενίου. Από τις επιθυμητές τιμές των ρυθμιζόμενων μεταβλητών, εντοπίζεται στον πίνακα η κατάλληλη τιμή παροχής, στην οποία ορίζεται να λειτουργεί το σύστημα σε μόνιμη κατάσταση, ενώ στη διαδικασία σημαντικό ρόλο παίζει και η εμπειρία του χειριστή. Είναι σαφές ότι οποιοδήποτε σχεδιαζόμενο σύστημα αυτόματης ρύθμισης της διεργασίας πρέπει να είναι οπωσδήποτε εξίσου καλό σε όλους τους παραπάνω τομείς με το αναφερθέν μη αυτόματο, και τουλάχιστον σε έναν τομέα να εμφανίζει βελτιωμένη συμπεριφορά.

5.2 Γενικά στοιχεία και πλεονεκτήματα της MPC

Μια από τους δημοφιλέστερες στην πράξη μεθοδολογίες αυτόματης ρύθμισης, ίσως η ευρύτερα εφαρμοσμένη πέραν του κλασικού PID ρυθμιστή, είναι η ρύθμιση προβλεπτικού μοντέλου (model predictive control, MPC) [24]. Αρχικά επινοήθηκε και εφαρμόστηκε σε ηλεκτρικά εργοστάσια και διυλιστήρια, αλλά πλέον έχει επεκταθεί σε βιομηχανίες όπως χημικών, τροφίμων, αυτοκινήτων και αεροσκαφών [25].

Σύμφωνα με τη μέθοδο, ο έλεγχος του συστήματος γίνεται ασυνεχώς, ενώ δύο διαδοχικές ρυθμιστικές δράσεις απέχουν ένα ορισμένο χρονικό διάστημα T_p , την περίοδο δειγματοληψίας του ρυθμιστή. Έστω ότι το σύστημα έχει μ το πλήθος μεταβλητές χειρισμού. Σε κάθε βήμα του ελέγχου, λαμβάνονται δεδομένα από το σύστημα και κατόπιν υπολογίζεται μια βέλτιστη χρονική ακολουθία N_c το πλήθος μ -άδων μεταβλητών χειρισμού, δηλαδή σε βάθος χρόνου N_c περιόδων δειγματοληψίας, τέτοια ώστε να αριστοποιείται η συμπεριφορά του συστήματος, όπως αυτή προβλέπεται από το δυναμικό του μοντέλο, σε βάθος χρόνου N_p περιόδων δειγματοληψίας. Ο αριθμός N_c είναι ο ορίζοντας ελέγχου και είναι μικρότερος ή ίσος από τον ορίζοντα πρόβλεψης, N_p . Μετά το πέρας του ορίζοντα ελέγχου θεωρείται ότι οι μεταβλητές χειρισμού διατηρούν σταθερή τιμή. Από την βέλτιστη αυτή ακολουθία, εφαρμόζεται ως ρυθμιστική δράση η πρώτη χρονικά μ -άδα και η όλη

διαδικασία επαναλαμβάνεται μετά από χρόνο T_p , με ορίζοντες πρόβλεψης και ελέγχου ίσης διάρκειας αλλά μετατοπισμένους κατά ένα βήμα στο μέλλον [24][25].

Βασική αρχή και συνάμα σημαντικό πλεονέκτημα της μεθόδου είναι ότι για τη λήψη της απόφασης της ρυθμιστικής δράσης χρησιμοποιείται μοντέλο της διεργασίας, το οποίο περιλαμβάνει όλες τις μεταβλητές και παραμέτρους που θεωρούνται σημαντικές και τις μεταξύ τους αλληλεπιδράσεις στο εσωτερικό της διεργασίας. Άλλο πλεονέκτημα και χαρακτηριστική διαφορά από άλλους τρόπους ρύθμισης αποτελεί η δυνατότητα της μεθόδου να λαμβάνει με άμεσο τρόπο υπόψη τους περιορισμούς στις μεταβλητές εισόδου, κατάστασης και εξόδου, που προκύπτουν από ζητήματα ασφάλειας, ποιότητας και απόδοσης. Επίσης, η απόφαση για κάθε ρυθμιστική δράση λαμβάνεται εξετάζοντας τη μελλοντική συμπεριφορά του συστήματος σε βάθος χρόνου, επομένως προβλέπονται και λαμβάνονται εκ των προτέρων υπόψη στην απόφαση και οι μεταβολές στο σύστημα λόγω της ανατροφοδότησης. Επιπλέον, δεν είναι απαραίτητο οι μεταβλητές χειρισμού να είναι ίσες σε πλήθος με τις ρυθμιζόμενες. Τέλος, η αρχή λειτουργίας της μεθόδου είναι απλή και κατανοητή, γεγονός που συνετέλεσε στην ευρεία διάδοσή της στη βιομηχανία [24] [25].

Η MPC μπορεί να είναι γραμμική ή μη γραμμική, αντανακλώντας το είδος του μοντέλου που χρησιμοποιείται. Η μεγάλη πλειοψηφία των εφαρμογών της μεθόδου χρησιμοποιεί γραμμικά μοντέλα ή γραμμικοποιήσεις μη γραμμικών, καθώς παρέχουν ταχύτητα και συχνά μοναδική λύση στο προκύπτον πρόβλημα αριστοποίησης που καλείται να λύσει ο ρυθμιστής σε κάθε βήμα. Αν και οι βιομηχανικές διεργασίες είναι εγγενώς μη γραμμικές, η παραπάνω προσέγγιση είναι αρκετή και αποτελεσματική στην περίπτωση που στόχος είναι η διατήρηση του συστήματος σε μια επιθυμητή μόνιμη κατάσταση. Ωστόσο, αν η διεργασία είναι έντονα μη γραμμική με συχνές και μεγάλες διακυμάνσεις, ή αν στόχος είναι η κατάσταση του συστήματος να αλλάζει συχνά, ακολουθώντας μια τροχιά καταστάσεων με μεγάλο εύρος όπου αναπτύσσεται μη γραμμική δυναμική συμπεριφορά, δικαιολογείται η χρήση μη γραμμικής MPC (NMPC) [25].

5.3 Μαθηματική διατύπωση της μεθόδου

Όπως έχει αναφερθεί, ένας ρυθμιστής προβλεπτικού μοντέλου δρα ασυνεχώς, δηλαδή η ρυθμιστική δράση λαμβάνεται σε όλες τις χρονικές στιγμές:

$$t_k := t_0 + kT_p, k \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \quad (5.1)$$

που ονομάζονται στιγμές δειγματοληψίας. Μεταξύ δύο διαδοχικών στιγμών δειγματοληψίας, οι τιμές των μεταβλητών χειρισμού παραμένουν σταθερές. Για τη λειτουργία της μεθόδου, απαιτείται ένα δυναμικό μοντέλο του προς ρύθμιση συστήματος από το οποίο να μπορούν να γίνουν προβλέψεις των μελλοντικών μεταβλητών εξόδου από όλα τα υπόλοιπα δεδομένα, καθώς και ένα υποθετικό μοντέλο για τις διαταραχές. Επίσης πρέπει να είναι γνωστοί οι περιορισμοί στους οποίους πιθανώς υπόκεινται οι μεταβλητές εισόδου και εξόδου. Σε κάθε στιγμή δειγματοληψίας t_k , μετρώνται όλες οι τιμές των ρυθμιζόμενων μεταβλητών εξόδου $\mathbf{y}(t_k) \in \mathbb{R}^{n_y}$, ενώ είναι γνωστές και όλες οι προηγούμενες τιμές τους $\mathbf{y}(t_i), 0 \leq i \leq k-1$, όπως και οι προηγούμενες τιμές των μεταβλητών χειρισμού $\mathbf{u}(t_i) \in \mathbb{R}^{n_u}, 0 \leq i \leq k-1$. Τέλος, πρέπει να είναι γνωστές εκ των προτέρων ή να υπολογίζονται σε κάθε βήμα οι μελλοντικές επιθυμητές τιμές των ρυθμιζόμενων μεταβλητών για τις επόμενες N_p στιγμές δειγματοληψίας, $\mathbf{y}(t_i)$ [24].

Εισάγεται ο ακόλουθος συμβολισμός:

- Με $\mathbf{u}(t_i|t_k), k \leq i$ συμβολίζεται το διάνυσμα των μεταβλητών χειρισμού τη μελλοντική στιγμή t_i όπως προβλέπεται την παρούσα στιγμή t_k ,
- Με $\mathbf{y}(t_i|t_k), k \leq i$ συμβολίζεται η εκτίμηση του μοντέλου την παρούσα στιγμή t_k για την τιμή που θα έχει τη μελλοντική στιγμή t_i το διάνυσμα των ρυθμιζόμενων μεταβλητών, με δεδομένα όλες τις γνωστές (μετρημένες) τιμές μέχρι και τη στιγμή t_k καθώς και τις υποθετικές τιμές των μεταβλητών χειρισμού $\mathbf{u}(t_j|t_k), k \leq j < i$,
- Με $\mathbf{y}^{sp}(t_i|t_k), k \leq i$ συμβολίζεται η επιθυμητή τιμή του διανύσματος των ρυθμιζόμενων μεταβλητών τη μελλοντική στιγμή t_i όπως προβλέπεται την παρούσα στιγμή t_k , ενώ αν αυτή δεν εξαρτάται από την παρούσα κατάσταση συμβολίζεται απλούστερα ως $\mathbf{y}^{sp}(t_i)$.

Με βάση τα παραπάνω, κάθε στιγμή δειγματοληψίας t_k προσδιορίζεται μια ακολουθία N_c μελλοντικών διανυσμάτων μεταβλητών χειρισμού, που μπορούν να οργανωθούν στον ακόλουθο πίνακα $\mathbf{U}(t_k)$:

$$\mathbf{U}(t_k) = [\mathbf{u}(t_k|t_k) \ \mathbf{u}(t_{k+1}|t_k) \ \dots \ \mathbf{u}(t_{k+N_c-1}|t_k)] \in \mathbb{R}^{n_u \times N_c} \quad (5.2)$$

τέτοια ώστε να ελαχιστοποιούνται οι ρυθμιστικές αποκλίσεις $\Delta \mathbf{y}(t_{k+i}|t_k)$:

$$\Delta \mathbf{y}(t_{k+i}|t_k) := \mathbf{y}(t_{k+i}|t_k) - \mathbf{y}^{sp}(t_{k+i}|t_k), 1 \leq i \leq N_p \quad (5.3)$$

και πιθανώς και οι ρυθμιστικές δράσεις $\Delta \mathbf{u}(t_{k+i}|t_k)$:

$$\Delta \mathbf{u}(t_{k+i}|t_k) := \mathbf{u}(t_{k+i}|t_k) - \mathbf{u}(t_{k+i-1}|t_k), 0 \leq i \leq N_c - 1 \quad (5.4)$$

Ένας απλός τρόπος μαθηματικής διατύπωσης του παραπάνω στόχου είναι η ελαχιστοποίηση της ακόλουθης συνάρτησης κόστους [24]:

$$J(t_k) = \sum_{i=1}^{N_p} \|\Delta \mathbf{y}(t_{k+i}|t_k)\|^2 + \lambda \sum_{i=0}^{N_c-1} \|\Delta \mathbf{u}(t_{k+i}|t_k)\|^2 \quad (5.5)$$

υπό τους περιορισμούς:

$$\mathbf{u}(t_{k+i}|t_k) = \mathbf{u}(t_{k+N_c-1}|t_k), N_c \leq i \leq N_p \quad (5.6)$$

και τυχόν επιπλέον περιορισμούς που έχουν εξαρχής τεθεί για τις ρυθμιζόμενες μεταβλητές και τις μεταβλητές χειρισμού [24].

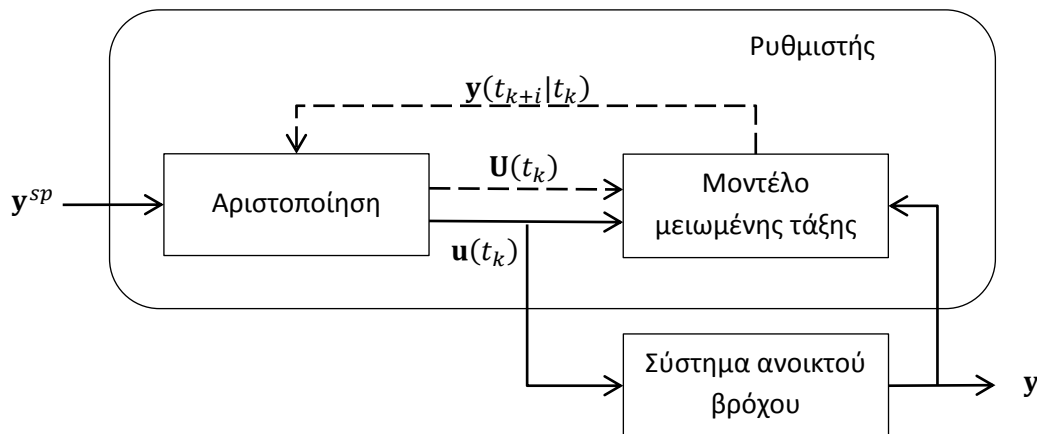
Στη σχέση (5.5), ο συντελεστής $\lambda \geq 0$ καθορίζει τη βαρύτητα που έχει η ομαλή λειτουργία του ρυθμιστή, που εκφράζεται από την ελαχιστοποίηση των ρυθμιστικών δράσεων, ως προς τον κύριο στόχο του ρυθμιστή, δηλαδή την ελαχιστοποίηση των ρυθμιστικών σφαλμάτων [24]. Επιπλέον, η απουσία συντελεστών στάθμισης μεταξύ των όρων του κάθε αθροίσματος της σχέσης (5.5) υποδεικνύει ότι όλες οι ρυθμιζόμενες μεταβλητές πρέπει να είναι της ίδιας τάξης μεγέθους, όπως και όλες οι μεταβλητές χειρισμού.

Αφού το παραπάνω πρόβλημα αριστοποίησης λυθεί και προσδιορισθεί ο πίνακας $\mathbf{U}(t_k)$, μόνο η πρώτη στήλη του εφαρμόζεται ως διάνυσμα μεταβλητών χειρισμού στο σύστημα:

$$\mathbf{u}(t_k) := \mathbf{u}(t_k|t_k) \quad (5.7)$$

και η όλη διαδικασία επαναλαμβάνεται την επόμενη στιγμή δειγματοληψίας, t_{k+1} [24]. Γίνεται επομένως σαφές ότι ο χρόνος που απαιτείται για την επίλυση του προβλήματος

αριστοποίησης σε κάθε στιγμή δειγματοληψίας πρέπει να είναι πρακτικά αμελητέος σε σχέση με την περίοδο δειγματοληψίας T_p , το οποίο μεταφράζεται σε δέκατα του δευτερολέπτου για βιομηχανική εφαρμογή [25]. Αυτός είναι ο λόγος που δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως προβλεπτικό μοντέλο σε πραγματικό χρόνο το πλήρες μοντέλο. Το σχεδιαζόμενο σύστημα ρύθμισης απεικονίζεται στο Σχήμα 5.1.



Σχήμα 5.1 Το σύστημα κλειστού βρόχου [9]

5.4 Εφαρμογή

Σε αυτή την εργασία, ως μοναδική μεταβλητή χειρισμού χρησιμοποιείται η μαζική παροχή $\dot{m}(t)$, η οποία είναι και η μοναδική μεταβλητή εισόδου του συστήματος. Έτσι, ο πίνακας $\mathbf{U}(t_k)$ της σχέσης (5.2) μετατρέπεται στον πίνακα-γραμμή παροχών, $\mathbf{M}(t_k)$:

$$\mathbf{M}(t_k) = [\dot{m}(t_k|t_k) \dot{m}(t_{k+1}|t_k) \dots \dot{m}(t_{k+N_c-1}|t_k)] \in \mathbb{R}^{1 \times N_c} \quad (5.8)$$

Επιπλέον, στο σύστημα δεν υπάρχουν διαταραχές, αφού έχει θεωρηθεί ότι οι θερμοκρασίες των τοιχωμάτων και του υποστρώματος είναι σταθερές (Ενότητα 2.3). Έτσι, δεν έχει νόημα να εξεταστεί η δυνατότητα σταθεροποιητικού ελέγχου του ρυθμιστή· εξετάζεται μόνο η δυνατότητα καθοδηγητικού ελέγχου. Επιπλέον, επιλέγεται $\lambda = 0$, και αντ' αυτού εισάγεται ρητός περιορισμός στις τιμές της παροχής, μεταξύ $1.5 \cdot 10^{-5}$ kg/s και $6.0 \cdot 10^{-5}$ kg/s (Ενότητα 2.3). Η επιλογή $\lambda = 0$ γίνεται, παρότι μια τέτοια επιλογή οδηγεί θεωρητικά σε μη ευσταθή ρυθμιστή, καθώς αντίστοιχη επιλογή με ταυτόχρονο περιορισμό στις τιμές των μεταβλητών εισόδου αναφέρεται στη βιβλιογραφία [24]. Σε κάθε περίπτωση, τα αποτελέσματα που λαμβάνονται με την επιλογή αυτή αποτελούν μια πρώτη προσέγγιση στο σχεδιασμό ενός ιδανικού ρυθμιστή της διεργασίας.

Το μοντέλο που χρησιμοποιείται είναι διακριτού χρόνου, επομένως η περίοδος δειγματοληψίας του ρυθμιστή πρέπει να είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του χρονικού βήματος που χρησιμοποιείται στο μοντέλο, το οποίο υπενθυμίζεται ότι είναι $\Delta t = 0.1$ s (Ενότητα 2.4). Ως προς την τιμή της, θα πρέπει να είναι:

- σημαντικά μικρότερη από τον χρόνο που απαιτείται για να φθάσει το σύστημα σε κατάσταση ισορροπίας με το μη αυτόματο σύστημα ρύθμισης, δηλαδή με μία βηματική επιβολή την αρχική στιγμή, ώστε να έχει νόημα η χρήση αυτόματου ρυθμιστή, και συγχρόνως

- αρκετά μεγάλη, ώστε να προλαβαίνει να λυθεί το πρόβλημα αριστοποίησης σε χρόνο πολύ μικρότερο από αυτή.

Στην πράξη, είναι λογικό να χρησιμοποιηθούν ως ρυθμιζόμενες μεταβλητές του ρυθμιστή ενός αντιδραστήρα CVD ο ρυθμός απόθεσης και η ομοιομορφία του υμενίου, όμως το πλήρες μοντέλο δεν περιλαμβάνει χημικές αντιδράσεις, άρα ούτε και τις τιμές των ιδιοτήτων αυτών. Ωστόσο, αφού οι ιδιότητες αυτές εξαρτώνται άμεσα από το πεδίο ροής και θερμοκρασίας (Ενότητα 2.5), χρησιμοποιείται η θερμοκρασία ως ρυθμιζόμενη μεταβλητή. Με ρύθμιση της τιμής της θερμοκρασίας σε ορισμένα σημεία του αντιδραστήρα, σκοπός είναι το σύστημα να οδηγηθεί στην επιθυμητή κατάσταση. Η επιλογή της θερμοκρασίας έναντι των άλλων μεγεθών που παρέχει το πλήρες μοντέλο (ταχύτητα, πυκνότητα) έγινε λόγω της ευκολίας μέτρησης της θερμοκρασίας στην πράξη και της μικρότερης ακρίβειας που απαιτείται στη μέτρησή της.

Επομένως, ως ρυθμιζόμενες μεταβλητές –και άρα μετρήσιμες– θεωρούνται n_y από τα συνολικά N στοιχεία του διανύσματος κατάστασης του συστήματος, $\mathbf{x}(t)$, έστω στις θέσεις $c_j, 1 \leq j \leq n_y$, όπου $1 \leq c_j \leq N$ για κάθε j . Ατυχώς, το λογισμικό Fluent δεν παρέχει τη δυνατότητα αντιστοιχίας μεταξύ των θέσεων c_j στο διάνυσμα \mathbf{x} και των συντεταγμένων στο σύστημα, για παράδειγμα στο Σχήμα 2.3(β), των οποίων οι θερμοκρασίες αντιστοιχούν στις πιο πάνω θέσεις του διανύσματος \mathbf{x} .

Εντούτοις, το μοντέλο απαιτεί τη γνώση ολόκληρου του αρχικού διανύσματος κατάστασης $\mathbf{x}(t_0)$ (Ενότητα 4.6). Σε μια πραγματική εφαρμογή, αυτό απαιτεί το σχεδιασμό συστήματος παρατηρητή, ώστε από τις πειραματικά μετρήσιμες τιμές του διανύσματος $\mathbf{x}(t_0)$ να μπορεί να γίνει εκτίμηση του ίδιου του $\mathbf{x}(t_0)$, η οποία να τροφοδοτείται στο μοντέλο. Στην περίπτωση αυτή, κρίσιμη σημασία έχουν οι θέσεις όπου πρέπει να τοποθετηθούν οι αισθητήρες (θερμοστοιχεία στην παρούσα περίπτωση) ώστε η εκτίμηση να είναι βέλτιστη. Έχουν προταθεί πολλές λύσεις για το πρόβλημα, σε μία από τις οποίες μάλιστα οι θέσεις προκύπτουν απευθείας από τη μείωση τάξης του συστήματος με τη μέθοδο POD [26]. Μια τέτοια προσέγγιση απαντά ταυτόχρονα στα ερωτήματα πόσες και ποιες, δηλαδή σε ποιες θέσεις, πρέπει να είναι οι ρυθμιζόμενες μεταβλητές.

Στα πλαίσια αυτής της εργασίας, θεωρείται ότι το προς ρύθμιση σύστημα είναι το πλήρες μοντέλο του Fluent. Επομένως, λαμβάνεται απευθείας το διάνυσμα $\mathbf{x}(t_0)$ όποτε είναι απαραίτητο, το οποίο ισοδυναμεί με την παραδοχή ότι έχει σχεδιασθεί ένας τέλειος παρατηρητής. Αυτή η αντιμετώπιση αφήνει ανοικτά τα ζητήματα του πλήθους n_y και των θέσεων των ρυθμιζόμενων μεταβλητών \mathbf{y} , το οποίο αντιμετωπίζεται με μια διερεύνηση που παρουσιάζεται στα Αποτελέσματα (Ενότητα 6.4.1).

Λαμβάνεται, τέλος, η απόφαση ο ορίζοντας πρόβλεψης να ταυτίζεται με τον ορίζοντα ελέγχου ($N_c = N_p$), και άρα δεν έχουν νόημα οι περιορισμοί (5.6).

Με βάση τα παραπάνω, η συνάρτηση κόστους λαμβάνει τη μορφή:

$$J(t_k) = \sum_{i=1}^{N_p} \|\Delta \mathbf{y}(t_{k+i}|t_k)\|^2 \quad (5.9)$$

Ωστόσο, η συνάρτηση αυτή μπορεί να τροποποιηθεί, λαμβάνοντας υπόψη και το σφάλμα της πρόβλεψης του μοντέλου, δηλαδή την απόκλιση μεταξύ της πραγματικής τιμής των ρυθμιζόμενων μεταβλητών και την πρόβλεψη της τιμής τους την προηγούμενη στιγμή δειγματοληψίας:

$$\mathbf{e}_{pr}(t_k) = \begin{cases} \mathbf{y}(t_k) - \mathbf{y}(t_k|t_{k-1}) & k > 0 \\ \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_y} & k = 0 \end{cases} \quad (5.10)$$

Η τροποποιημένη συνάρτηση κόστους βασίζεται στην παραδοχή ότι το σφάλμα του μοντέλου στο προηγούμενο βήμα θα είναι ίσο με το σφάλμα στο παρόν βήμα, οπότε λαμβάνει τη μορφή:

$$J(t_k) = \sum_{i=1}^{N_p} \|\Delta \mathbf{y}(t_{k+i}|t_k) + \mathbf{e}_{pr}(t_k)\|^2 \quad (5.11)$$

Το πρόβλημα αριστοποίησης υπό περιορισμούς επιλύεται με τη συνάρτηση `fmincon` του Matlab, η οποία χρησιμοποιεί έναν αλγόριθμο εσωτερικού σημείου (interior point algorithm) [9][27]. Ως αρχική τιμή του πίνακα $\dot{\mathbf{M}}(t_k)$ για την επαναληπτική διαδικασία της αριστοποίησης, την μεν αρχική στιγμή t_0 δίνεται ένας πίνακας που περιέχει μόνο την αρχική παροχή:

$$\dot{\mathbf{M}}(t_0)_0 = \dot{m}_0 \mathbf{1}_{1 \times N_c} \quad (5.12)$$

τις δε υπόλοιπες στιγμές δίνεται ο πίνακας $\dot{\mathbf{M}}(t_{k-1})$ που έχει προκύψει από την αριστοποίηση στο προηγούμενο βήμα, αλλά με τις τιμές του μετατοπισμένες κατά μια θέση αριστερά και την τελευταία ίση με την προτελευταία:

$$\dot{\mathbf{M}}(t_k)_0 = \dot{\mathbf{M}}(t_{k-1}) \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{1 \times (N_c-2)} & \mathbf{0}_{1 \times 2} \\ \mathbf{I}_{N_c-2} & \mathbf{0}_{(N_c-2) \times 2} \\ \mathbf{0}_{1 \times (N_c-2)} & \mathbf{1}_{1 \times 2} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{1 \times N_c}, k > 0 \quad (5.13)$$

όπου \mathbf{I}_n μοναδιαίος $n \times n$ πίνακας και $\mathbf{0}_{m \times n}$ μηδενικός $m \times n$ πίνακας. Σε όλες τις περιπτώσεις χρησιμοποιείται ορίζοντας πρόβλεψης και ελέγχου μεγαλύτερος από 2, άρα ο πίνακας στη σχέση (5.13) ορίζεται πάντα.

5.5 Τελικός αλγόριθμος

Ο NMPC ρυθμιστής εφαρμόζεται με τον εξής αλγόριθμο:

1. Επιλέγονται οι παράμετροι του ρυθμιστή (περίοδος δειγματοληψίας T_p , ορίζοντας πρόβλεψης και ελέγχου N_c , αριθμός ρυθμιστικών δράσεων N_a) από όπου προκύπτει η συνολική διάρκεια του φαινομένου:

$$t_{tot} = N_a T_p \quad (5.14)$$

καθώς και η συνάρτηση κόστους που θα χρησιμοποιηθεί [(5.9) ή (5.11)]

2. Επιλέγεται η τελική επιθυμητή μαζική παροχή \dot{m}_f και ο τελικός επιθυμητός κλάδος, από όπου προκύπτει η τελική επιθυμητή μόνιμη κατάσταση \mathbf{x}_{eq} και οι επιθυμητές τιμές των ρυθμιζόμενων μεταβλητών \mathbf{y}^{sp} [σχέση (6.1)], ανεξάρτητες του χρόνου
3. Επιλέγεται η αρχική μαζική παροχή $\dot{m}(t_0)$ και ο αρχικός κλάδος, από όπου προκύπτει η αρχική μόνιμη κατάσταση $\mathbf{x}(t_0)$
4. Για κάθε χρονική στιγμή t_k [σχέση (5.1)] με $0 \leq k \leq N_a - 1$:

- 4.1. Υπολογίζονται οι τρέχουσες τιμές των ρυθμιζόμενων μεταβλητών $\mathbf{y}(t_k)$ [σχέση (6.1)]
- 4.2. Ελαχιστοποιείται ως προς $\dot{\mathbf{M}}(t_k)$ η επιλεγμένη συνάρτηση κόστους υπό τους περιορισμούς:

$$\dot{m}_{min} \leq \dot{m}(t_{k+i}) \leq \dot{m}_{max}, 0 \leq i \leq N_p - 1 \quad (5.15)$$

και (4.19)-(4.25), στις οποίες χρησιμοποιείται ο δείκτης k' , όπου $t_{k'=0} = t_k$ και $\Delta t(t_{k+1} - t_k) = T_p(t_{k'+1} - t_{k'})$

- 4.3. Επιλύεται το πλήρες σύστημα για διάρκεια T_p με αρχικές συνθήκες $\mathbf{x}(t_k)$ και συνοριακή συνθήκη την παροχή $\dot{m}(t_k)$ που προκύπτει από την αριστοποίηση
- 4.4. Αυξάνεται ο k κατά 1 και η τελική κατάσταση από το προηγούμενο βήμα είναι η νέα $\mathbf{x}(t_k)$

6 Αποτελέσματα

6.1 Επιβολές

Αρχικά, από την επίλυση του συστήματος σε μόνιμη κατάσταση, ελήφθησαν οι μόνιμες καταστάσεις για κάθε τιμή παροχής στο εύρος $1.5 - 6 \cdot 10^{-5}$ kg/s με βήμα $0.1 \cdot 10^{-5}$ kg/s για τους δύο ευσταθείς κλάδους.

Κατά τη διάρκεια της εργασίας, πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις επιβολών στο σύστημα ανοικτού βρόχου (Σχήμα 2.4). Οι επιβολές δεν πραγματοποιήθηκαν όλες εξαρχής, ενώ δεν χρησιμοποιήθηκαν όλες και για τον ίδιο σκοπό. Άλλες αξιοποιήθηκαν για την εύρεση των ιδιοδιανυσμάτων με τη μέθοδο των στιγμιотύπων (Ενότητα 3.5), άλλες για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων (Ενότητα 4.5), άλλες ως «άγνωστα» δεδομένα για την αξιολόγηση των παραπάνω, ενώ τέλος άλλες ως ρυθμιστικές δράσεις του μη αυτόματου συστήματος ρύθμισης, για σύγκριση με τον σχεδιαζόμενο NMPC ρυθμιστή. Εκτός αυτών, άλλες χρησιμοποιήθηκαν σε δοκιμές που τελικά δεν παρουσιάζονται. Στις επιβολές που χρησιμοποιήθηκαν για την εξαγωγή του μοντέλου, ιδιαίτερη έμφαση δόθηκε κοντά στα σημεία στροφής, όπου ο χρόνος σύγκλισης στη μόνιμη κατάσταση αυξάνεται (Ενότητα 2.5). Όλες οι επιβολές έχουν ως αρχική κατάσταση μια κατάσταση ισορροπίας, που αντιστοιχεί σε μια αρχική παροχή και σε έναν κλάδο, αν η παροχή αυτή είναι εντός της περιοχής πολλαπλότητας. Υπενθυμίζεται ότι ο κάτω κλάδος αντιστοιχεί σε φυσική ροή, ενώ ο πάνω σε εξαναγκασμένη (Ενότητα 2.5).

Στη συνέχεια καταγράφονται συγκεντρωτικά όλες οι επιβολές που πραγματοποιήθηκαν, οι οποίες είναι δύο ειδών:

- Βηματικές [σχέση (2.19)], μέχρι επίτευξης της νέας μόνιμης κατάστασης, οι οποίες καταγράφονται στον Πίνακα 6.1. Επαληθεύεται από τα δεδομένα διάρκειας του πίνακα ότι κοντά στα σημεία στροφής ο χρόνος σύγκλισης αυξάνεται δραματικά, όπως και στις επιβολές όπου η κατάσταση του συστήματος κάνει «άλμα» από τον έναν κλάδο στον άλλο.

Πίνακας 6.1 Βηματικές επιβολές στο σύστημα ανοικτού βρόχου. Ο κλάδος σημειώνεται σε παρένθεση αν η αντίστοιχη μόνιμη κατάσταση βρίσκεται εκτός της περιοχής πολλαπλότητας

A/A	Αρχική κατάσταση		Παροχή \dot{m}_f (10^{-5} kg/s)	Τελικός κλάδος	Διάρκεια (s)
	Παροχή \dot{m}_0 (10^{-5} kg/s)	Κλάδος			
B1	2.0	(κάτω)	3.0	κάτω	9.2
B2	2.0	(κάτω)	4.0	κάτω	9.1
B3	4.0	κάτω	4.5	κάτω	8.0
B4	2.0	(κάτω)	1.5	(κάτω)	8.0
B5	4.5	κάτω	4.9	κάτω	15.1
B6	4.9	κάτω	4.95	κάτω	20.9
B7	4.95	κάτω	5.0	κάτω	50.2
B8	4.5	πάνω	3.5	πάνω	9.3

Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα

B9	3.5	πάνω	3.0	πάνω	10.3
B10	3.0	πάνω	2.5	πάνω	15.9
B11	2.5	πάνω	2.35	πάνω	24.4
B12	5.0	κάτω	5.1	(πάνω)	16.9
B13	2.3	πάνω	2.2	(κάτω)	16.2
B14	4.5	κάτω	5.5	(πάνω)	12.1
B15	3.5	πάνω	1.9	(κάτω)	13.9
B16	4.0	κάτω	5.5	(πάνω)	12.3
B17	2.2	(κάτω)	2.4	κάτω	8.0
B18	3.5	κάτω	3.2	κάτω	8.3
B19	3.5	κάτω	3.7	κάτω	7.9
B20	4.0	κάτω	4.3	κάτω	7.3
B21	2.4	κάτω	2.7	κάτω	8.3
B22	3.5	κάτω	2.9	κάτω	8.8
B23	4.8	κάτω	1.8	(κάτω)	9.5
B24	1.8	(κάτω)	4.8	κάτω	10.4
B25	1.8	(κάτω)	5.0	κάτω	10.0 ¹

- Μεταβαλλόμενης παροχής, όπου η παροχή μεταβαλλόταν με το χρόνο για συγκεκριμένο χρονικό διάστημα, χωρίς σε καμιά περίπτωση η κατάσταση του συστήματος να αλλάζει κλάδο. Από αυτές τις επιβολές, σε άλλες η παροχή αυξανόταν ή μειωνόταν σταδιακά, δηλαδή πρόκειται για διαδοχικές βηματικές επιβολές χωρίς επίτευξη νέας μόνιμης κατάστασης για κάθε τιμή παροχής, ενώ σε άλλες η παροχή μεταβαλλόταν με τυχαίο, γρήγορο και απότομο τρόπο. Οι επιβολές αυτές καταγράφονται στον Πίνακα 6.2.

Πίνακας 6.2 Επιβολές μεταβαλλόμενης παροχής στο σύστημα ανοικτού βρόχου

A/A	Αρχική παροχή \dot{m}_0 (10^{-5} kg/s)	Κλάδος	Μεταβολή παροχής	Τελική παροχή \dot{m}_f (10^{-5} kg/s)	Διάρκεια (s)
M1	1.5	κάτω	Σταδιακή αύξηση	5.0	32.5
M2	5.0	κάτω	Σταδιακή μείωση	1.5	32.5
M3	5.8	πάνω	Σταδιακή μείωση	2.3	32.5
M4	2.3	πάνω	Σταδιακή αύξηση	5.8	32.5
M5	3.0	κάτω	Τυχαία	-	25.0
M6	2.0	κάτω	Τυχαία	-	25.0
M7	4.5	κάτω	Τυχαία	-	25.0
M8	3.5	κάτω	Τυχαία	-	25.0
M9	1.5	κάτω	Σταδιακή αύξηση	4.95	25.0
M10	3.0	κάτω	Σταδιακή αύξηση	5.0	25.0
M11	5.0	κάτω	Σταδιακή μείωση	3.0	25.0
M12	4.9	κάτω	Σταδιακή μείωση	1.5	25.0

¹ Η επιβολή αυτή δεν έγινε μέχρι μόνιμης κατάστασης, αλλά με προκαθορισμένη διάρκεια 10 s.

6.2 Μείωση τάξης

6.2.1 Κατασκευή βάσεων

Μετά από δοκιμές, επελέγησαν οι επιβολές B2, B3, B4 και B6 για την κατασκευή της βάσης με τη μέθοδο των στιγμιοτύπων. Χρησιμοποιώντας επομένως ως τροχιές τις δυναμικές αποκρίσεις στις επιβολές αυτές, εφαρμόζοντας τον αλγόριθμο του Πίνακα 3.1 και επιλέγοντας κλάσμα περιεχόμενης πληροφορίας $p = 0.99$, κατασκευάστηκε μια βάση από ιδιοδιανύσματα. Επισημαίνεται ότι και οι τέσσερις επιβολές που χρησιμοποιήθηκαν είναι από τον κάτω στον κάτω κλάδο, άρα και με βάση τους περιορισμούς της μεθόδου POD (Ενότητα 3.4.1) το μοντέλο αναμένεται να περιγράψει καλά μόνο τον κλάδο αυτό.

Από τον πιο πάνω αλγόριθμο προκύπτει ότι η βάση αποτελείται από $d = 3$ ιδιοσυναρτήσεις και περιέχει πάνω από το 99.7% της πληροφορίας των τεσσάρων επιβολών. Η βάση αυτή θα καλείται \mathbf{Z}_3 . Στον Πίνακα 6.3 σημειώνεται το σχετικό πληροφοριακό περιεχόμενο για κάθε προσέγγιση POD των πιο πάνω δυναμικών δεδομένων μέχρι τη βάση \mathbf{Z}_3 .

Πίνακας 6.3 Σχετικό πληροφοριακό περιεχόμενο προσεγγίσεων POD για διαφορετικές διαστάσεις βάσης

Διάσταση προσέγγισης POD, d	1	2	3
Σχετικό πληροφοριακό περιεχόμενο, $I(d)$ (3.24)	0.9338	0.9852	0.9972

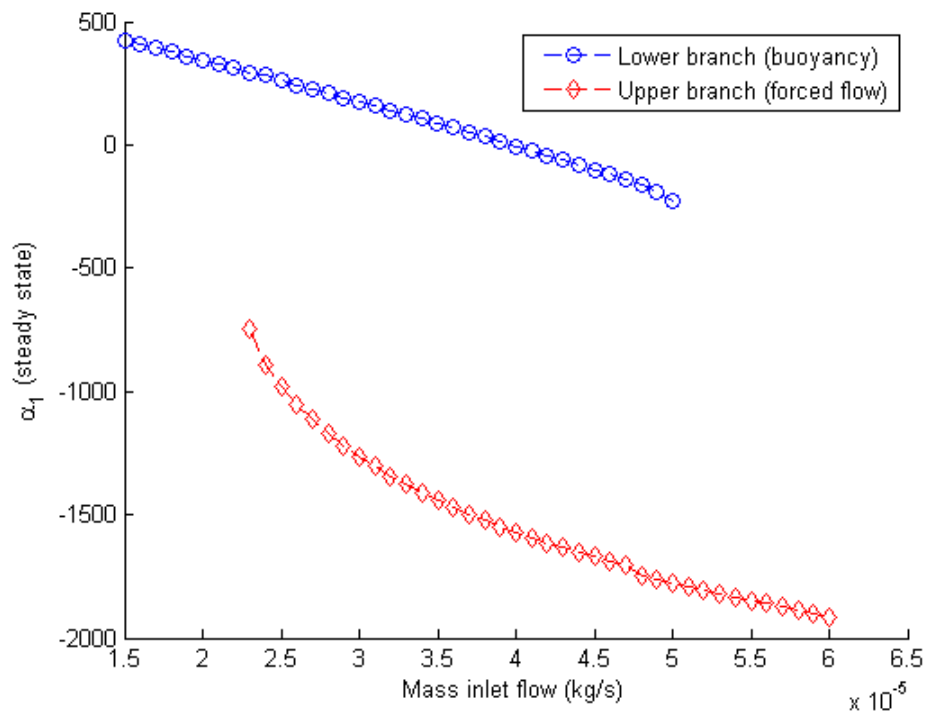
Παρατηρείται ότι το πρώτο ιδιοδιάνυσμα περιέχει ήδη πάνω από το 93% της πληροφορίας των τεσσάρων επιβολών. Η βάση που αποτελείται από το ένα αυτό ιδιοδιάνυσμα θα καλείται \mathbf{Z}_1 . Αντίστοιχα, η βάση \mathbf{Z}_2 αποτελείται από τα δύο πρώτα ιδιοδιανύσματα και περιέχει πάνω από το 98.5% της πληροφορίας των τεσσάρων επιβολών.

6.2.2 Αξιολόγηση και σύγκριση βάσεων

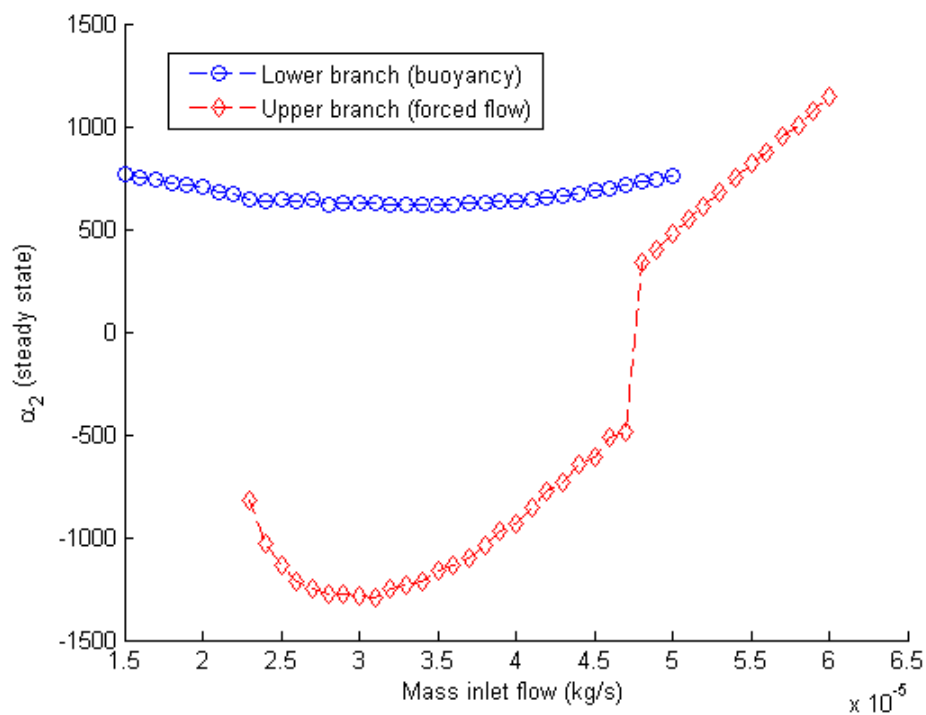
Στη συνέχεια αξιολογούνται οι τρεις πιο πάνω βάσεις ως προς την προσέγγιση γνωστών δεδομένων, διαφορετικών όμως από τις τέσσερις επιβολές. Η αξιολόγηση γίνεται υπολογίζοντας για κάθε σύνολο δεδομένων τους συντελεστές $\alpha \in \mathbb{R}^3$ της βάσης \mathbf{Z}_3 , εφόσον σε αυτούς περιλαμβάνονται και οι συντελεστές των δύο άλλων βάσεων, εφαρμόζοντας τον αλγόριθμο του Πίνακα 3.2, και κατόπιν μέσω των σφαλμάτων στην Ενότητα 3.6.

Αρχικά αξιολογείται η περιγραφή των δύο κλάδων των καταστάσεων ισορροπίας. Στα Σχήματα 6.1 - 6.3 απεικονίζονται οι συντελεστές α για τους δύο ευσταθείς κλάδους.

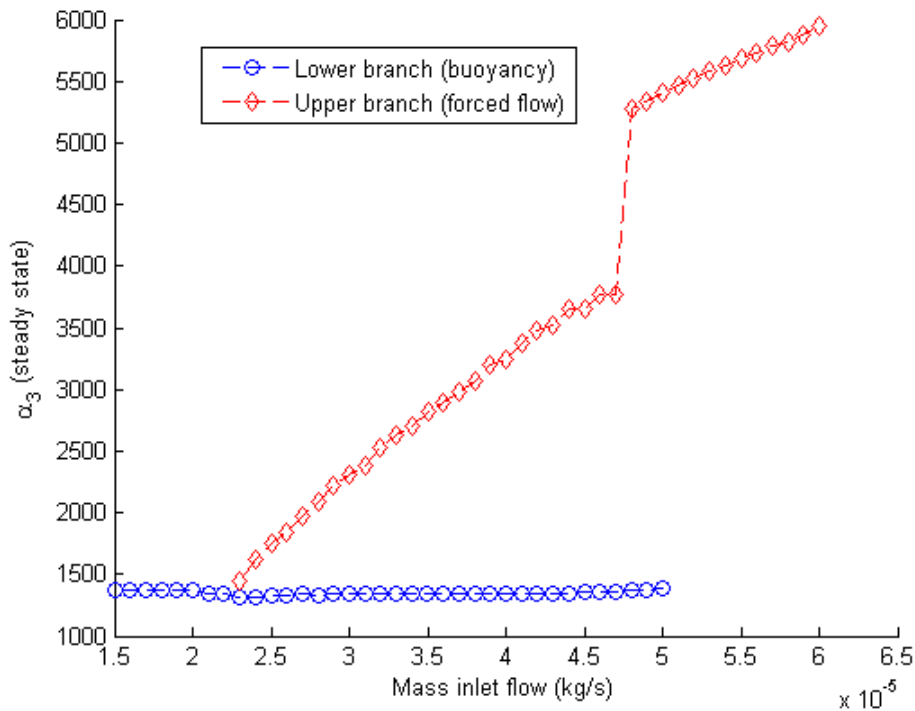
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



Σχήμα 6.1 Ο συντελεστής α_1 ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας για τους δύο ευσταθείς κλάδους μόνιμων καταστάσεων



Σχήμα 6.2 Ο συντελεστής α_2 ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας για τους δύο ευσταθείς κλάδους μόνιμων καταστάσεων



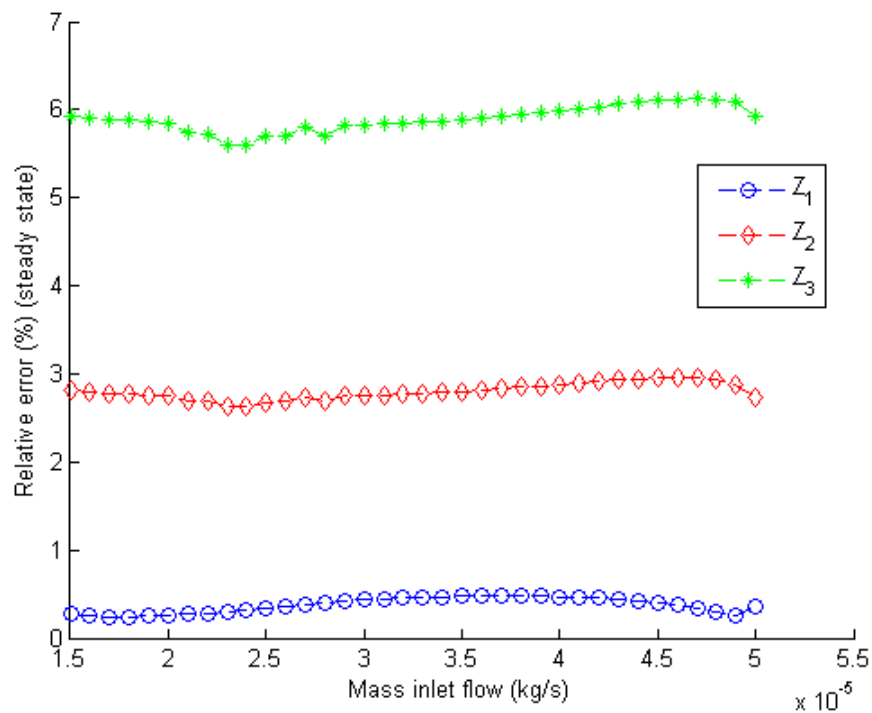
Σχήμα 6.3 Ο συντελεστής α_3 ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας για τους δύο ευσταθείς κλάδους μόνιμων καταστάσεων

Οι καμπύλες στο Σχήμα 6.1 μοιάζουν με τις καμπύλες των ευσταθών κλάδων στο Σχήμα 2.5, φαίνεται δηλαδή ο συντελεστής α_1 να σχηματίζει δύο σαφείς κλάδους ευσταθών μόνιμων καταστάσεων, παρότι οι βάσεις κατασκευάστηκαν με δεδομένα μη μόνιμης κατάστασης και μόνο από τον ένα κλάδο. Παρατηρείται ότι ο πάνω κλάδος του Σχήματος 2.5 αντιστοιχεί στον κάτω στο Σχήμα 6.1 και αντίστροφα, γεγονός όμως που δεν έχει ιδιαίτερη σημασία καθώς μπορεί να διορθωθεί αν ως βάση χρησιμοποιηθεί η αντίθετη αυτής που υπολογίσθηκε. Επειδή οι κλάδοι στο Σχήμα 2.5 αναφέρονται σε πραγματικούς αδιάστατους αριθμούς του συστήματος, διατηρείται η ίδια σύμβαση και η βάση που υπολογίσθηκε δεν αλλάζει.

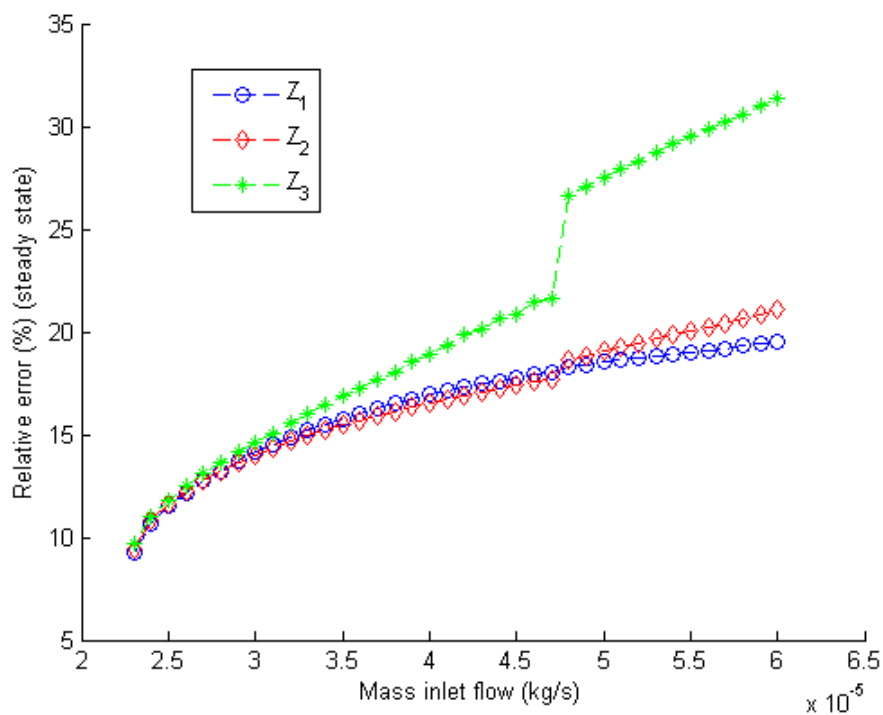
Οι δύο διακριτοί κλάδοι εξακολουθούν να υπάρχουν και στα Σχήματα 6.2 και 6.3, αλλά και στις δύο περιπτώσεις παρατηρείται μια ασυνέχεια στον πάνω κλάδο. Η ασυνέχεια αυτή, που δεν εμφανίζεται στον πρώτο συντελεστή, δεν δικαιολογείται από τη φυσική συμπεριφορά του συστήματος, αφού στο σημείο αυτό, που αντιστοιχεί σε παροχές μεταξύ 4.7 και $4.8 \cdot 10^{-5}$ kg/s, δεν αλλάζει ο μηχανισμός της ροής. Θεωρείται, επομένως, η ασυνέχεια αυτή ως μια ένδειξη ότι από το πρώτο κίόλας ιδιοδιάνυσμα περιγράφεται επαρκώς η βασική ροϊκή συμπεριφορά του συστήματος, και πως τα άλλα δύο ιδιοδιανύσματα περιγράφουν μικρότερης σημασίας φαινόμενα. Αυτό είναι πιθανόν να μην ισχύει αν για την κατασκευή της βάσης χρησιμοποιηθούν περισσότερα δεδομένα ή επιβολές και από τους δύο κλάδους.

Ακολουθούν στα Σχήματα 6.4 και 6.5 τα σχετικά σφάλματα [σχέση (3.57)] της εκτίμησης των καταστάσεων ισορροπίας ξεχωριστά για κάθε κλάδο και για κάθε βάση.

Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



Σχήμα 6.4 Το σχετικό σφάλμα κάθε βάσης στην περιγραφή των καταστάσεων ισορροπίας στον κάτω κλάδο ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας



Σχήμα 6.5 Το σχετικό σφάλμα κάθε βάσης στην περιγραφή των καταστάσεων ισορροπίας στον πάνω κλάδο ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας

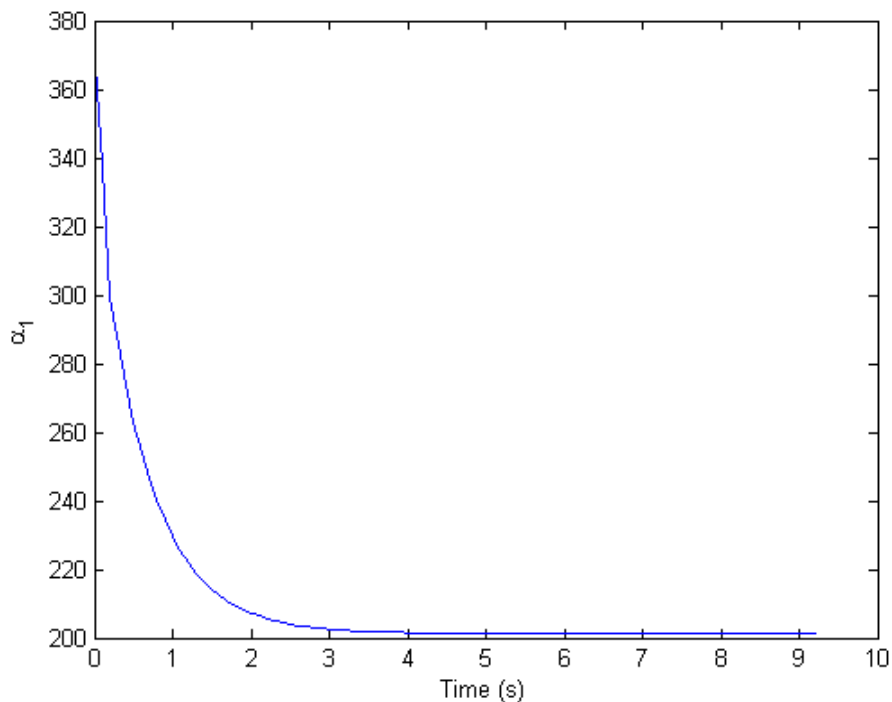
Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει το Σχήμα 6.4, όπου φαίνεται πως η διαδοχική προσθήκη ιδιοδιανυσμάτων χειροτερεύει αντί να βελτιώνει την ποιότητα της προσέγγισης στον κάτω

κλάδο. Επίσης, το σχετικό σφάλμα της προσέγγισης στον κάτω κλάδο είναι σχεδόν σταθερό για κάθε τιμή παροχής και για τις τρεις βάσεις. Μόνο όμως για την Z_1 αυτό είναι μικρότερο από 2%, δηλαδή το όριο του σφάλματος που καλύπτει το πλέγμα (Ενότητα 2.4), ενώ για την Z_3 φθάνει το 6%.

Όσον αφορά στον πάνω κλάδο, σύμφωνα με το Σχήμα 6.5 το σχετικό σφάλμα αυξάνεται με την παροχή και για τις τρεις βάσεις, αλλά στην καλύτερη περίπτωση είναι λίγο μικρότερο από 10%. Αυτό βρίσκεται σε συμφωνία με το γεγονός ότι για την κατασκευή των βάσεων δεν χρησιμοποιήθηκαν δεδομένα από τον πάνω κλάδο. Επιπλέον, στο σημείο της ασυνέχειας των συντελεστών α_2 και α_3 εμφανίζεται αντίστοιχη απότομη αύξηση του σχετικού σφάλματος, μικρότερη στην Z_2 και πιο έντονη στην Z_3 . Δηλαδή, η ασυνέχεια δεν αντικατοπτρίζει κάποια μικρή αλλαγή στο σύστημα, αλλά πρόκειται για λάθος.

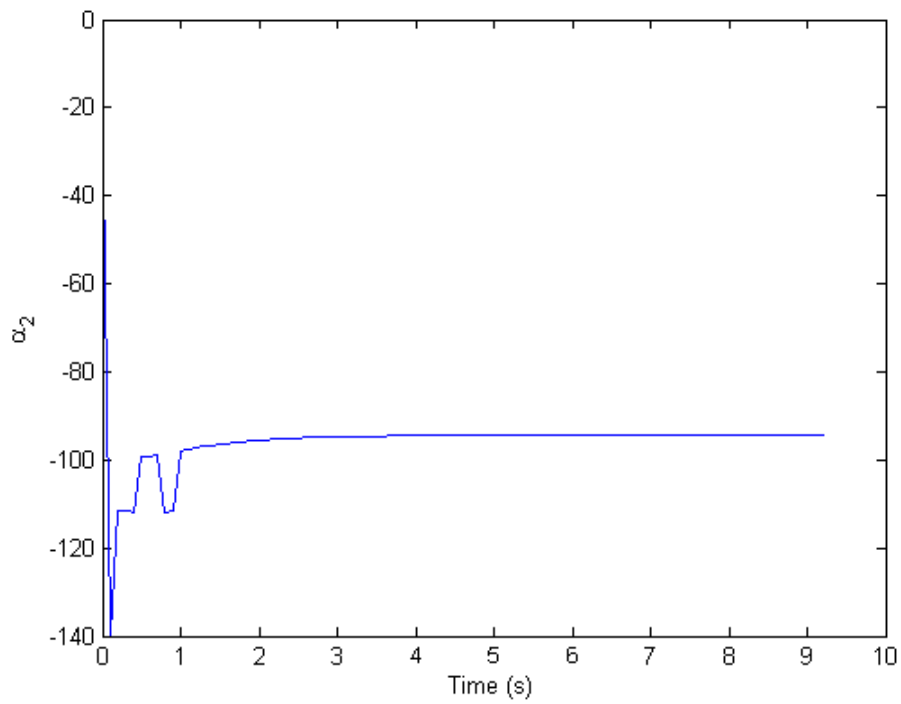
Τα Σχήματα 6.4 και 6.5 συνηγορούν υπέρ της Z_1 ως καλύτερης βάσης. Ωστόσο, καθώς πρόκειται για δυναμικό μοντέλο, εξετάζονται και δύο δυναμικές επιβολές, αμφότερες από τον κάτω κλάδο, η B1 και η M1.

Στα Σχήματα 6.6 έως 6.9 απεικονίζονται οι συντελεστές α καθώς και το σχετικό σφάλμα σε συνάρτηση με το χρόνο για την επιβολή B1.

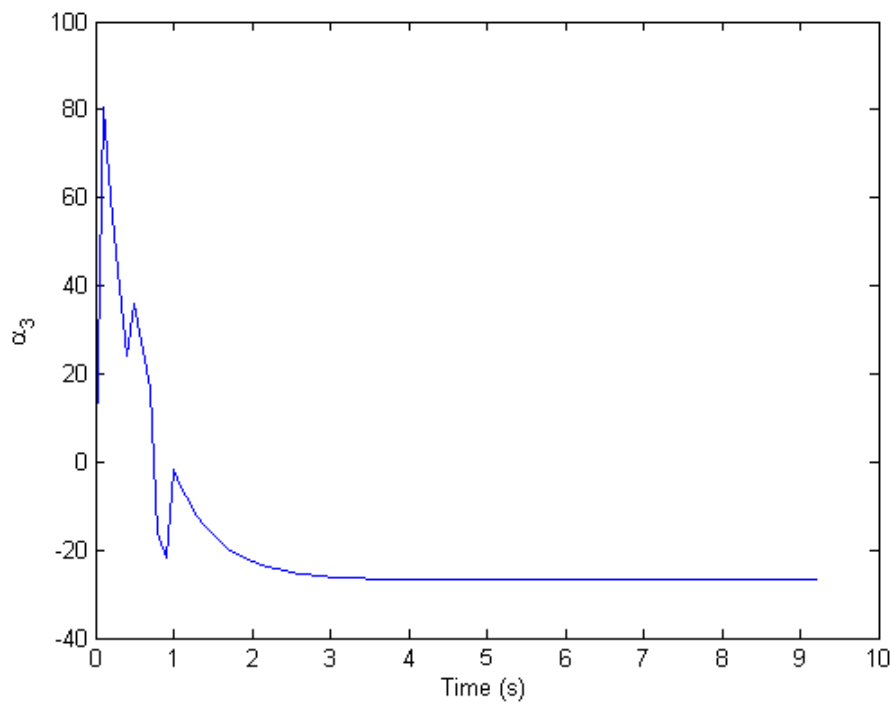


Σχήμα 6.6 Ο συντελεστής α_1 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή B1

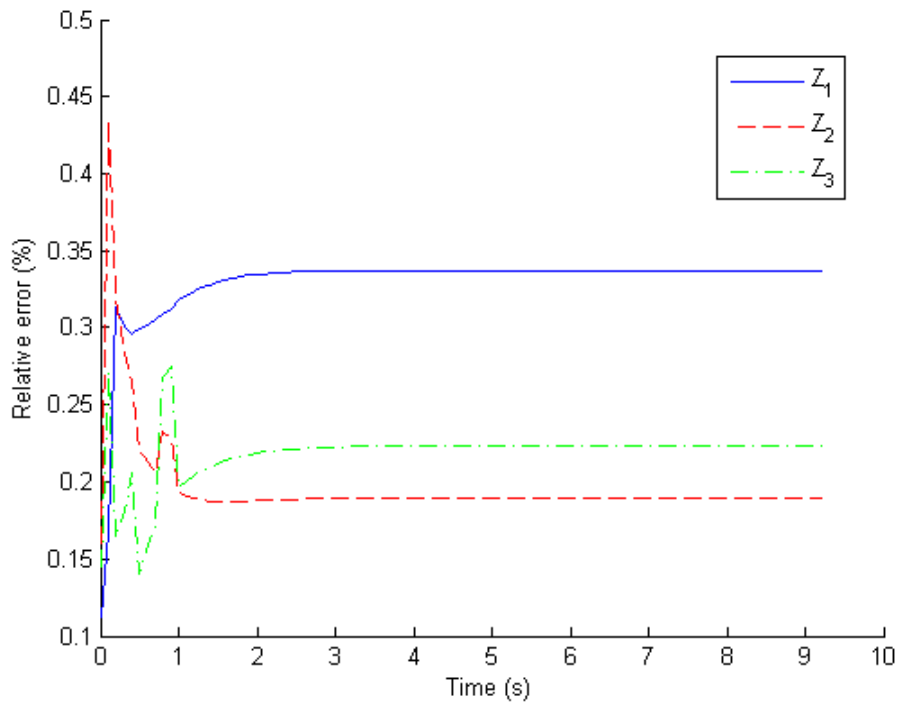
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



Σχήμα 6.7 Ο συντελεστής α_2 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή B1



Σχήμα 6.8 Ο συντελεστής α_3 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή B1

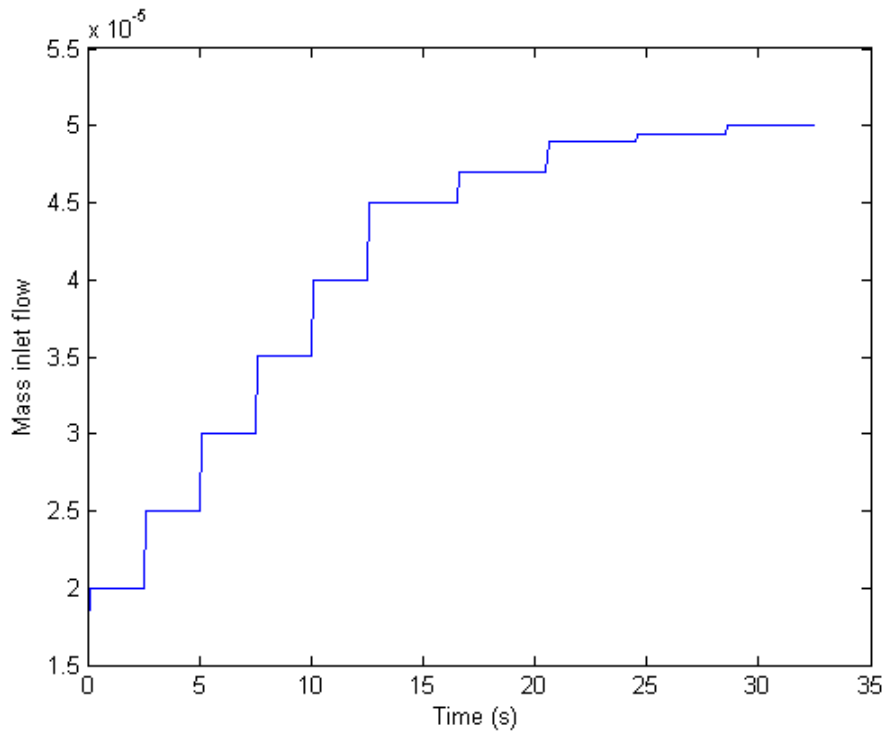


Σχήμα 6.9 Το σχετικό σφάλμα κάθε βάσης ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή B1

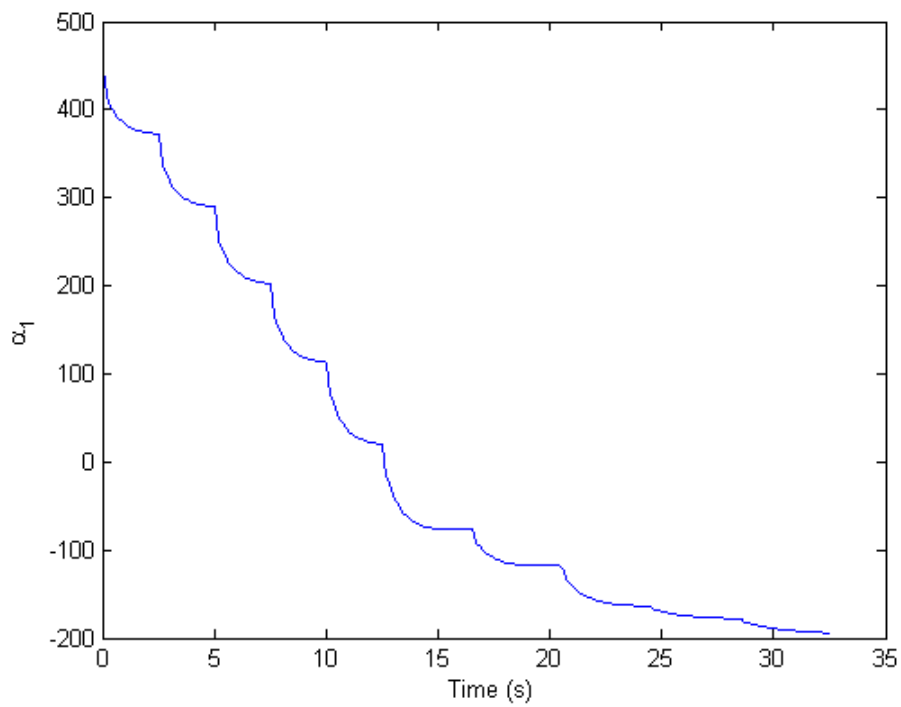
Από τα Σχήματα 6.6 έως 6.8 φαίνεται ότι αφενός μεν ο συντελεστής α_1 ακολουθεί ομαλή πορεία στη μετάβαση από τη μια μόνιμη κατάσταση στην άλλη, η οποία θυμίζει απόκριση δυναμικού συστήματος πρώτης τάξης (εκθετική καμπύλη), αφετέρου δε οι συντελεστές α_2 και α_3 αρχικά ακολουθούν μια ταλαντωτική πορεία με κορυφές πριν σταθεροποιηθούν. Οι κορυφές αυτές αποτελούν ένδειξη υπολογιστικού θορύβου που εμφανίζεται στα πρώτα βήματα της επίλυσης. Τέλος, στο Σχήμα 6.9 φαίνεται ότι το σχετικό σφάλμα, σε αντίθεση με την περίπτωση των καταστάσεων ισορροπίας, είναι μεγαλύτερο για τη Z_1 , αλλά και για τις τρεις βάσεις είναι πολύ μικρότερο από 2%

Στα Σχήματα 6.10 έως 6.14 απεικονίζονται η παροχή \dot{m} , οι συντελεστές α καθώς και το σχετικό σφάλμα σε συνάρτηση με το χρόνο για την επιβολή M1.

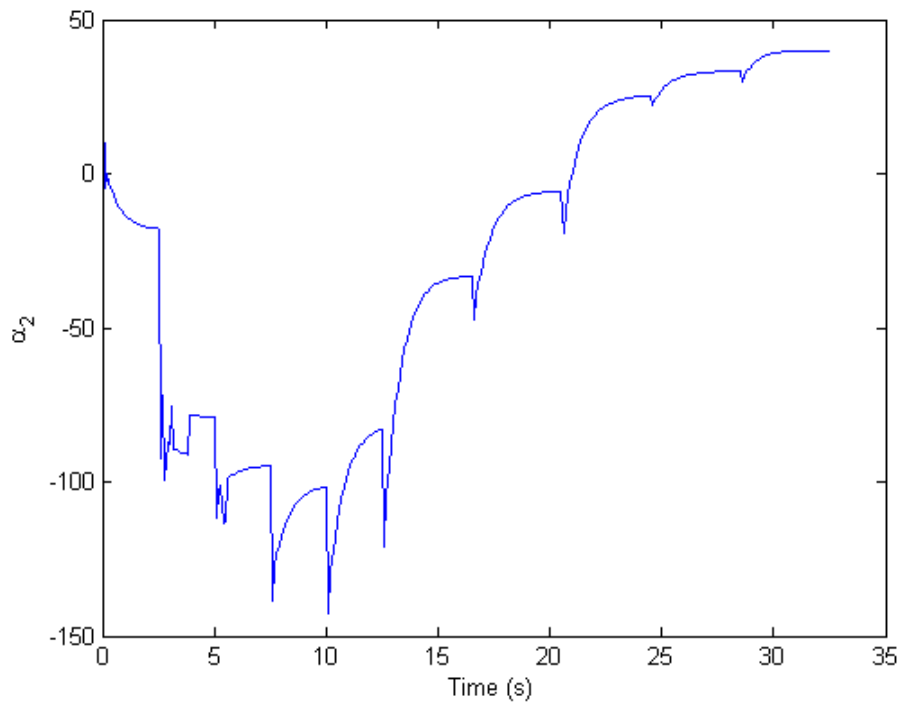
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



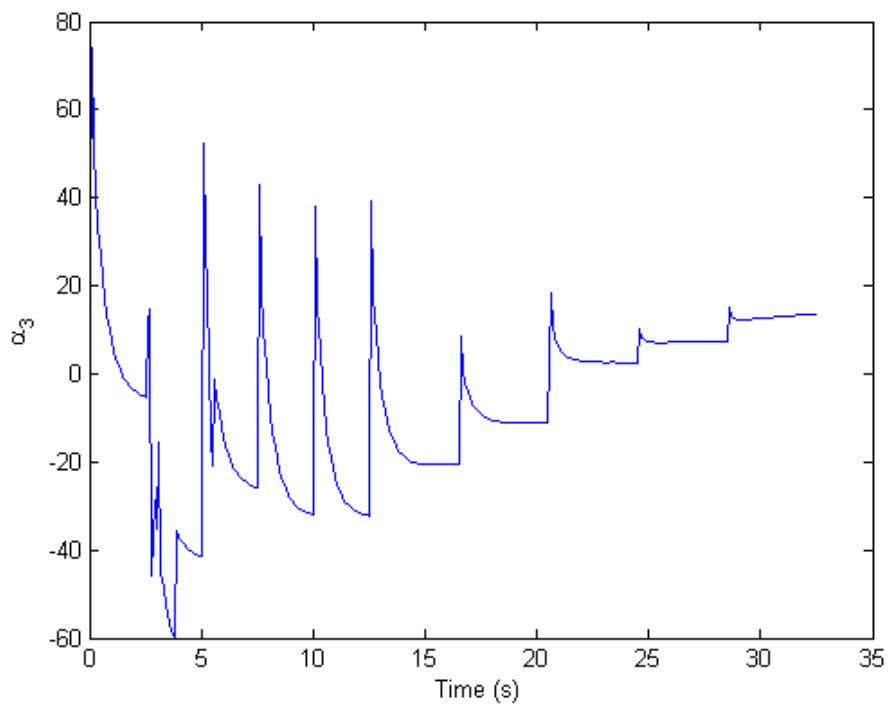
Σχήμα 6.10 Η μαζική παροχή ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή M1



Σχήμα 6.11 Ο συντελεστής α_1 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή M1

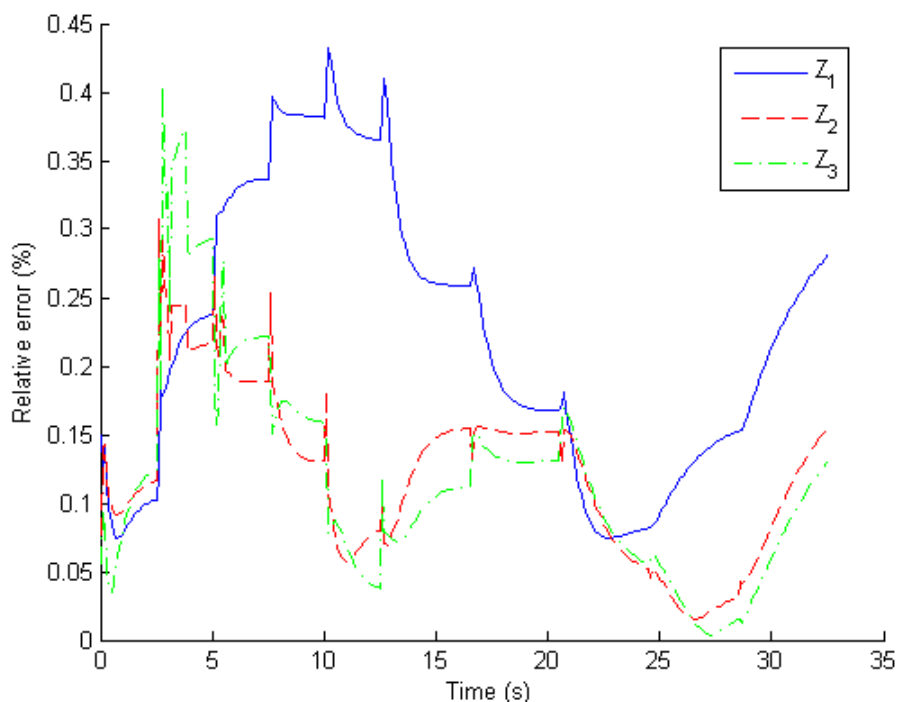


Σχήμα 6.12 Ο συντελεστής α_2 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή M1



Σχήμα 6.13 Ο συντελεστής α_3 ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή M1

Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



Σχήμα 6.14 Το σχετικό σφάλμα κάθε βάσης ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή M1

Η εξέταση της συμπεριφοράς της επιβολής M1 έχει ενδιαφέρον, καθώς και στο σχεδιαζόμενο ρυθμιστή θα γίνονται διαδοχικές βηματικές επιβολές (Ενότητα 5.3). Στα Σχήματα 6.11 έως 6.13 παρατηρείται συμπεριφορά αντίστοιχη με της επιβολής B1, δηλαδή διαδοχικές ομαλές μεταβολές του συντελεστή α_1 και απότομες κορυφές στην έναρξη κάθε επιβολής για τους άλλους δύο συντελεστές. Εξάλλου, το Σχήμα 6.14, σε συμφωνία με το Σχήμα 6.9, δίνει λίγο μεγαλύτερο σχετικό σφάλμα για τη Z_1 από ότι για τις άλλες δύο βάσεις, αλλά και πάλι πολύ μικρότερο από 2%.

Επισημαίνεται ότι και στις δύο επιβολές, η τάξη μεγέθους των τιμών του συντελεστή α_1 είναι κατ' απόλυτη τιμή μεγαλύτερη από του α_2 , που είναι με τη σειρά της μεγαλύτερη από του α_3 . Το γεγονός αυτό συμφωνεί με τη θεωρία της ανάλυσης κυρίων συνιστωσών σχετικά με την ελαττούμενη συνεισφορά των προστιθέμενων ιδιοδιανυσμάτων στην περιγραφή του φαινομένου (Ενότητα 3.4).

Στους Πίνακες 6.4 και 6.5 καταγράφονται τα αντιπροσωπευτικά σφάλματα των δεδομένων αξιολόγησης για τις τρεις βάσεις.

Πίνακας 6.4 Μέσο τετραγωνικό σχετικό σφάλμα [σχέση (3.58)] (%) των δεδομένων αξιολόγησης των βάσεων

	Z_1	Z_2	Z_3
Κάτω κλάδος	0.38	2.80	5.90
Πάνω κλάδος	16.65	16.88	21.87
B1	0.33	0.20	0.22
M1	0.24	0.13	0.14

Πίνακας 6.5 Μέγιστο σχετικό σφάλμα [σχέση (3.59)] (%) των δεδομένων αξιολόγησης των βάσεων

	Z_1	Z_2	Z_3
Κάτω κλάδος	0.48	2.96	6.12
Πάνω κλάδος	19.51	21.06	31.40
B1	0.34	0.44	0.27
M1	0.43	0.31	0.41

Από τις τιμές των σφαλμάτων, προκύπτει ότι η προσέγγιση και των τριών βάσεων στις δύο δυναμικές επιβολές είναι πρακτικά ισοδύναμη, σε σύγκριση με τη σημαντική διαφορά υπέρ της Z_1 στις καταστάσεις ισορροπίας του κάτω κλάδου. Παρόλα αυτά, στο επόμενο στάδιο επιδιώκεται η εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου τόσο για τη Z_1 όσο και για την Z_3 , ακριβώς επειδή στόχος είναι η κατασκευή δυναμικού μοντέλου και όχι μοντέλου μόνιμης κατάστασης.

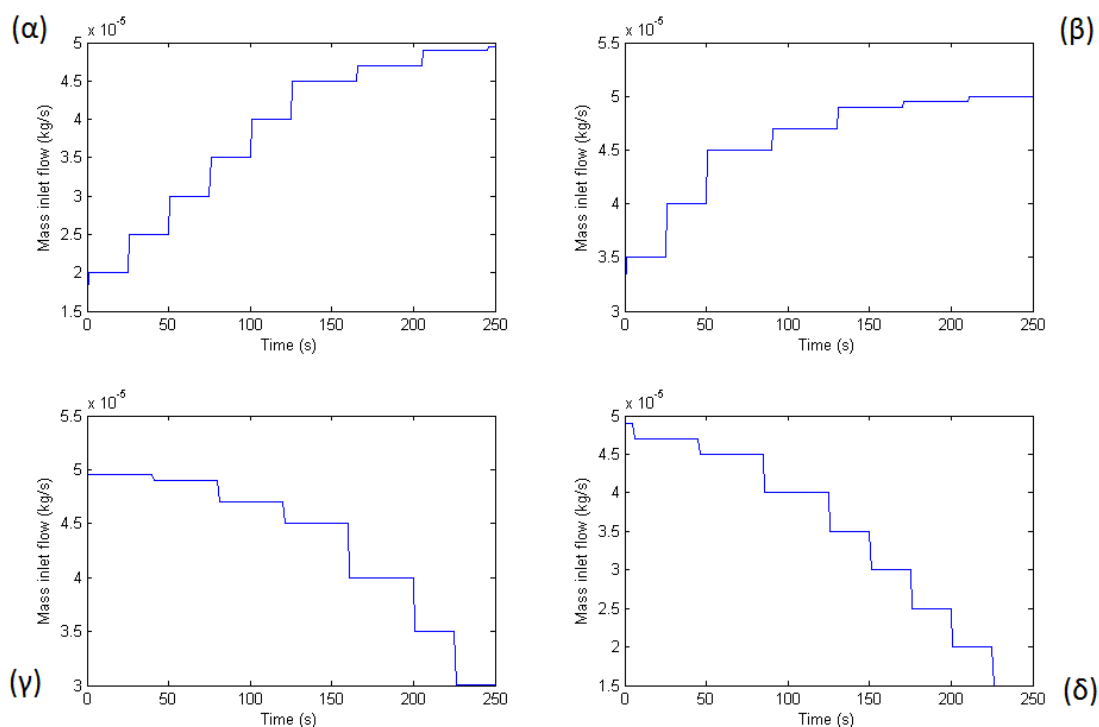
6.3 Νευρωνικό δίκτυο

6.3.1 Εκπαίδευση

Για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων έγιναν πολλές δοκιμές, τόσο ως προς το πλήθος και το είδος των δεδομένων εκπαίδευσης, όσο και ως προς τον αριθμό L_1 των νευρώνων του κρυφού επιπέδου (Σχήμα 4.7). Μετά τις δοκιμές, κρίθηκε απαραίτητο τα δεδομένα εκπαίδευσης να περιέχουν βηματικές και διαδοχικές βηματικές, αλλά όχι τυχαίες επιβολές, οι οποίες να εκτείνονται σε μεγάλο εύρος του κάτω κλάδου, προκειμένου να αποκαλυφθεί όσο το δυνατόν μεγαλύτερο μέρος της δυναμικής και να τη διδαχθεί το δίκτυο. Οι τυχαίες επιβολές φάνηκε ότι ήταν πολύ απότομες και παρήγαγαν υπερπροσαρμοσμένα δίκτυα (Ενότητα 4.5), χρησιμοποιούνται όμως στην αξιολόγηση των δικτύων.

Παρουσιάζονται τα δύο καλύτερα δίκτυα που εκπαιδεύθηκαν, ένα για $d = 1$ με $L_1 = 3$ κρυφούς νευρώνες και ένα για $d = 3$ με $L_1 = 20$ κρυφούς νευρώνες, τα οποία χρησιμοποιούνται μαζί με τις βάσεις Z_1 και Z_3 αντίστοιχα. Το κάθε ζεύγος βάσης – νευρωνικού δικτύου αποτελεί ένα από τα δύο υποψήφια μη γραμμικά μοντέλα για χρήση στον NMPC ρυθμιστή. Τα δεδομένα εκπαίδευσης και στις δύο περιπτώσεις ήταν οι επιβολές B4, B6, B17, B18, B19, M9, M10, M11 και M12. Στο Σχήμα 6.15 απεικονίζεται η μαζική παροχή συναρτήσεως του χρόνου για τις τελευταίες τέσσερις επιβολές.

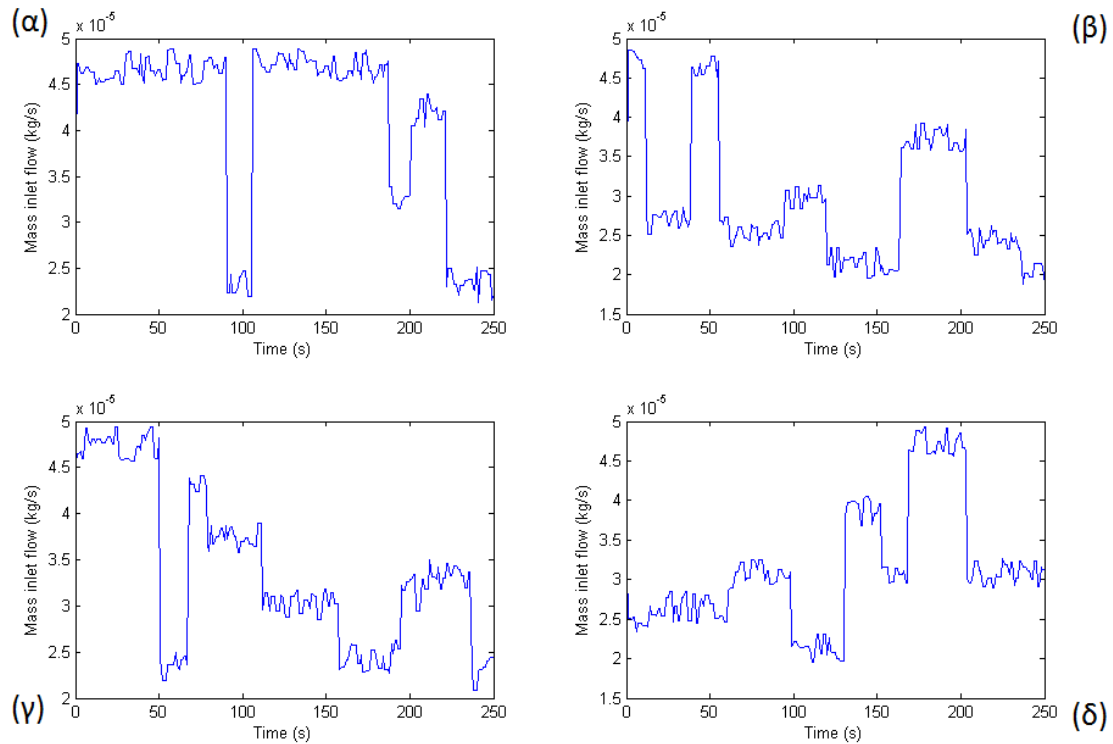
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



Σχήμα 6.15 Η μαζική παροχή ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή (α) M9, (β) M10, (γ) M11, (δ) M12

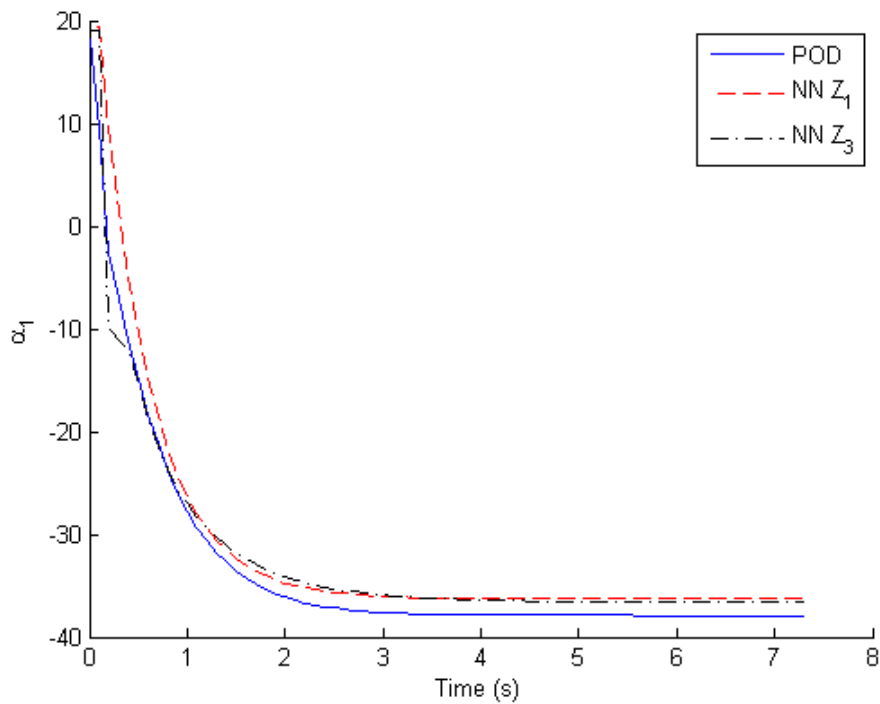
6.3.2 Αξιολόγηση και σύγκριση μη γραμμικών μοντέλων

Τα μη γραμμικά μοντέλα που προκύπτουν ως αποτέλεσμα της εκπαίδευσης των δικτύων αξιολογούνται τόσο ως προς τη δυνατότητα περιγραφής των γνωστών επιβολών από τις οποίες εκπαιδεύτηκαν, όσο και επιβολών ελέγχου (Ενότητα 4.5). Αυτές είναι οι B1, B2, B3, B5, B7, B20, B21, M5, M6, M7 και M8. Σημειώνεται ότι όλες αυτές οι επιβολές, όπως και των δεδομένων εκπαίδευσης, προέρχονται μόνο από τον κάτω κλάδο. Στο Σχήμα 6.16 απεικονίζεται η μαζική παροχή συναρτήσει του χρόνου για τις τελευταίες τέσσερις επιβολές.



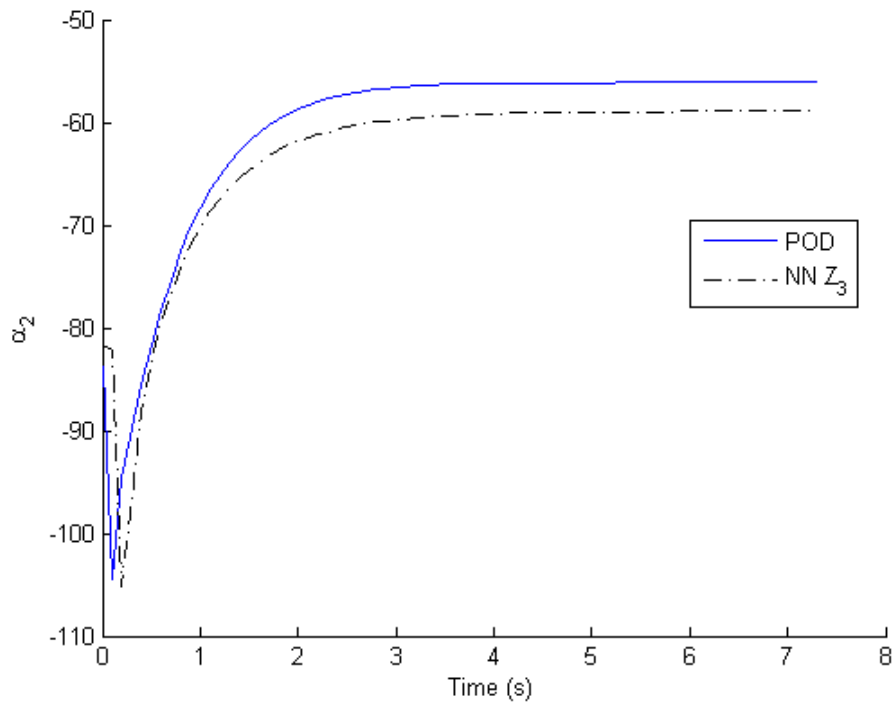
Σχήμα 6.16 Η μαζική παροχή ως συνάρτηση του χρόνου για την επιβολή (α) M5, (β) M6, (γ) M7, (δ) M8

Στη συνέχεια αναπαρίστανται γραφικά οι προβλέψεις των δύο μοντέλων σε ορισμένες ενδιαφέρουσες και αντιπροσωπευτικές από τις πιο πάνω επιβολές, ξεκινώντας από την επιβολή ελέγχου B20 (Σχήματα 6.17 - 6.19).

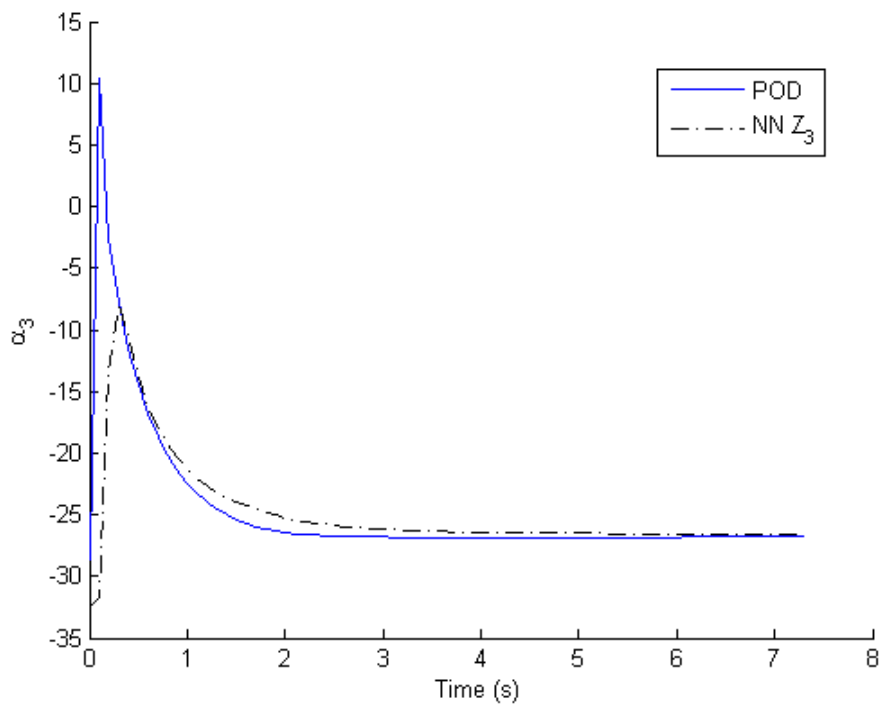


Σχήμα 6.17 Οι εκτιμήσεις $\hat{\alpha}_1$ των δύο μοντέλων για την επιβολή B20, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_1 ως συνάρτηση του χρόνου

Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



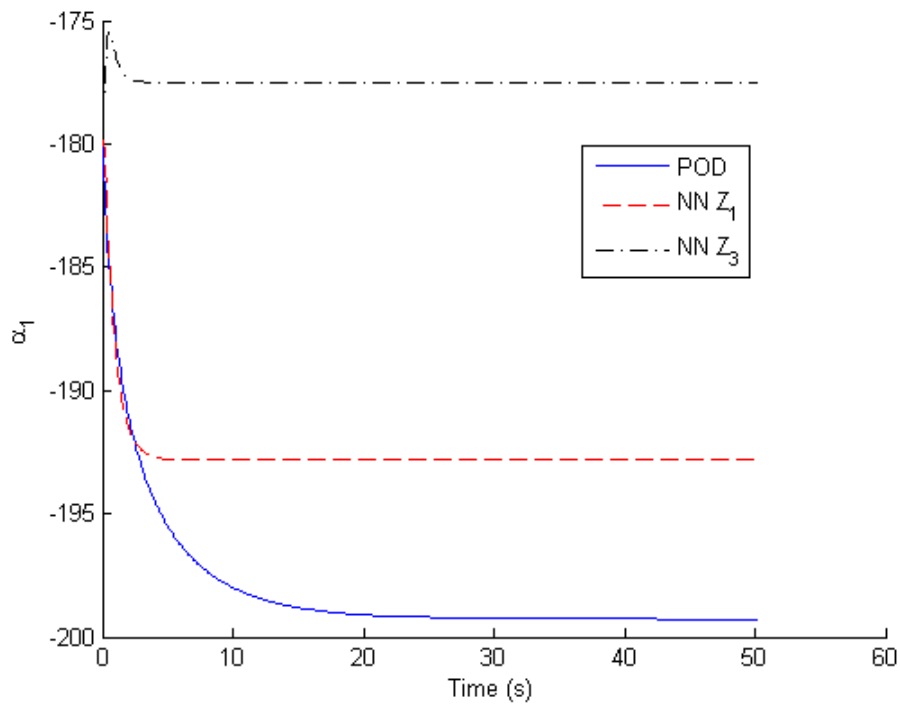
Σχήμα 6.18 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_2$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή B20, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_2 ως συνάρτηση του χρόνου



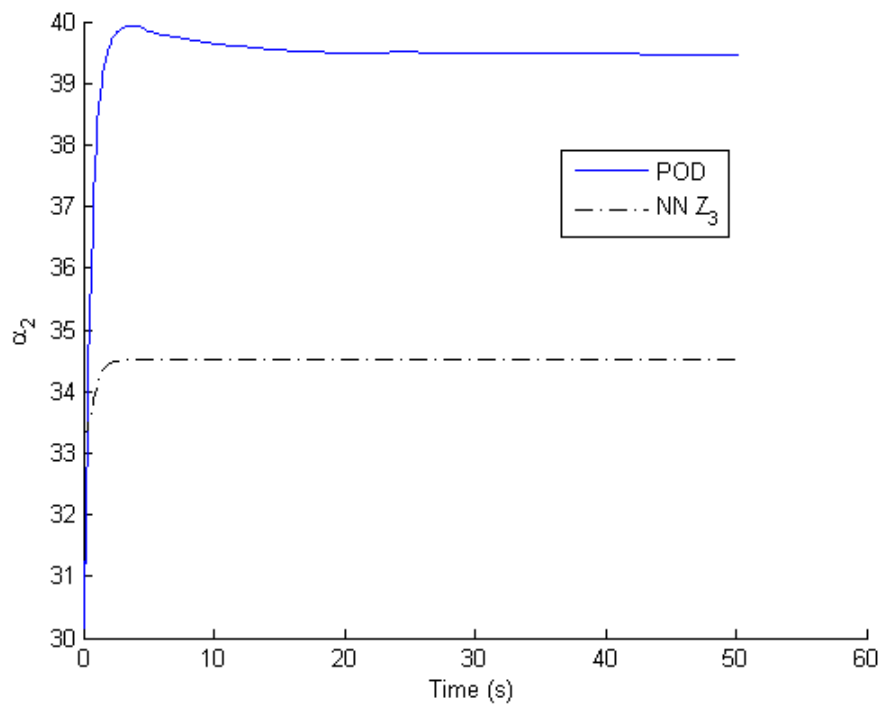
Σχήμα 6.19 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_3$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή B20, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_3 ως συνάρτηση του χρόνου

Στα Σχήματα 6.17 - 6.19 φαίνεται ότι και τα δύο μοντέλα προβλέπουν ικανοποιητικά τους συντελεστές.

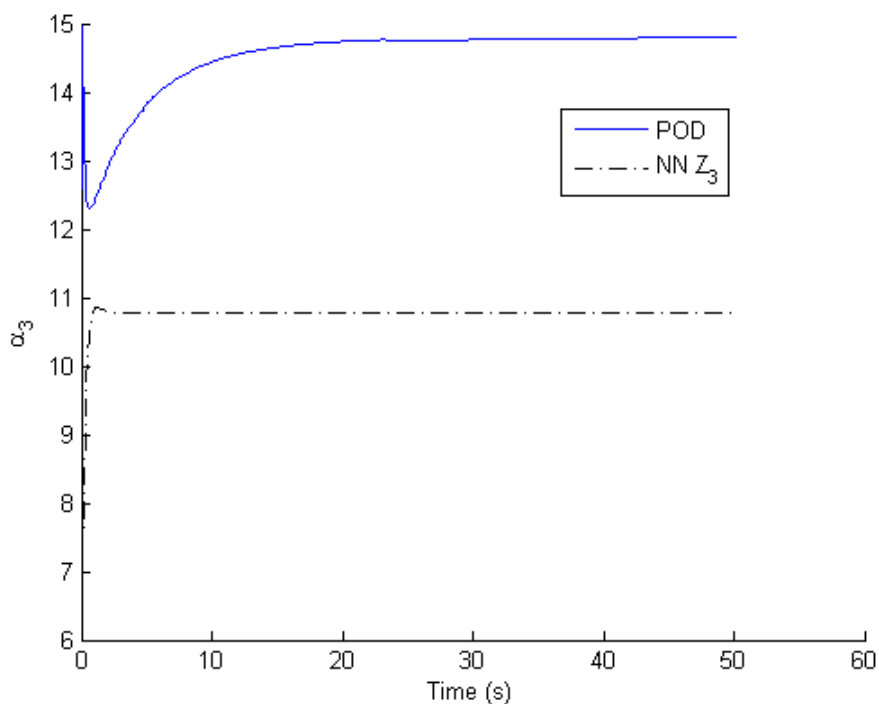
Ακολουθεί η επιβολή ελέγχου B7, η οποία έχει ως τελική κατάσταση το σημείο στροφής (Σχήματα 6.20 - 6.22).



Σχήμα 6.20 Οι εκτιμήσεις $\hat{\alpha}_1$ των δύο μοντέλων για την επιβολή B7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_1 ως συνάρτηση του χρόνου



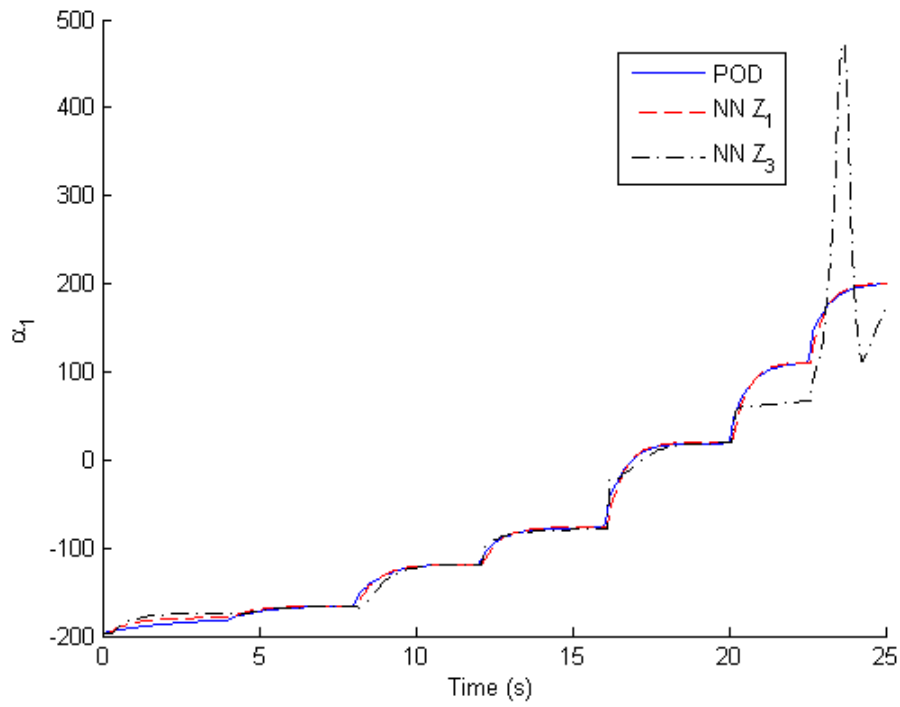
Σχήμα 6.21 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_2$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή B7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_2 ως συνάρτηση του χρόνου



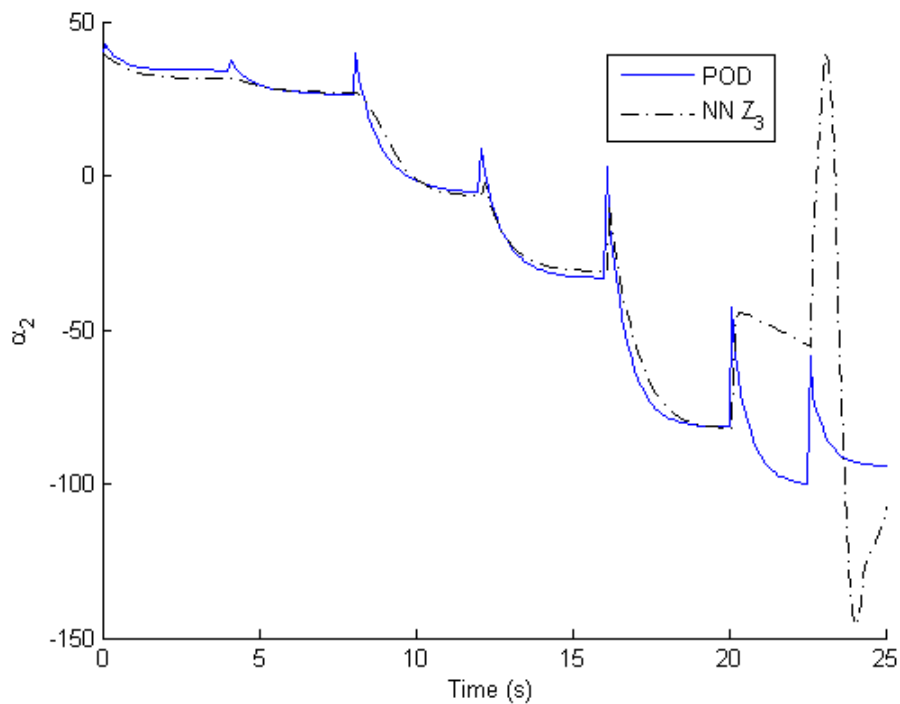
Σχήμα 6.22 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_3$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή B7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_3 ως συνάρτηση του χρόνου

Στα Σχήματα 6.20 - 6.22 φαίνεται ότι και τα δύο νευρωνικά δίκτυα αποτυγχάνουν να προβλέψουν σωστά τους συντελεστές. Η αποτυχία αυτή οφείλεται στη μη ύπαρξη εκπαίδευσης τόσο κοντά στο σημείο στροφής, όπου η συμπεριφορά του φυσικού συστήματος αλλάζει σε σύγκριση ακόμη και με τον ίδιο κλάδο, σε συνδυασμό με την αδυναμία των νευρωνικών δικτύων να γενικεύουν εκτός του πεδίου εκπαίδευσης. Από την άλλη, το μοντέλο της Z_1 ακολουθεί τη σωστή πορεία για περίπου 3 s, επομένως υπάρχει πιθανότητα το μοντέλο αυτό, παρά την αστοχία πρόβλεψης της κατάστασης ισορροπίας, να λειτουργήσει σωστά ως προβλεπτικό μοντέλο του NMPC ρυθμιστή αν η περίοδος δειγματοληψίας είναι μικρότερη από 3 s.

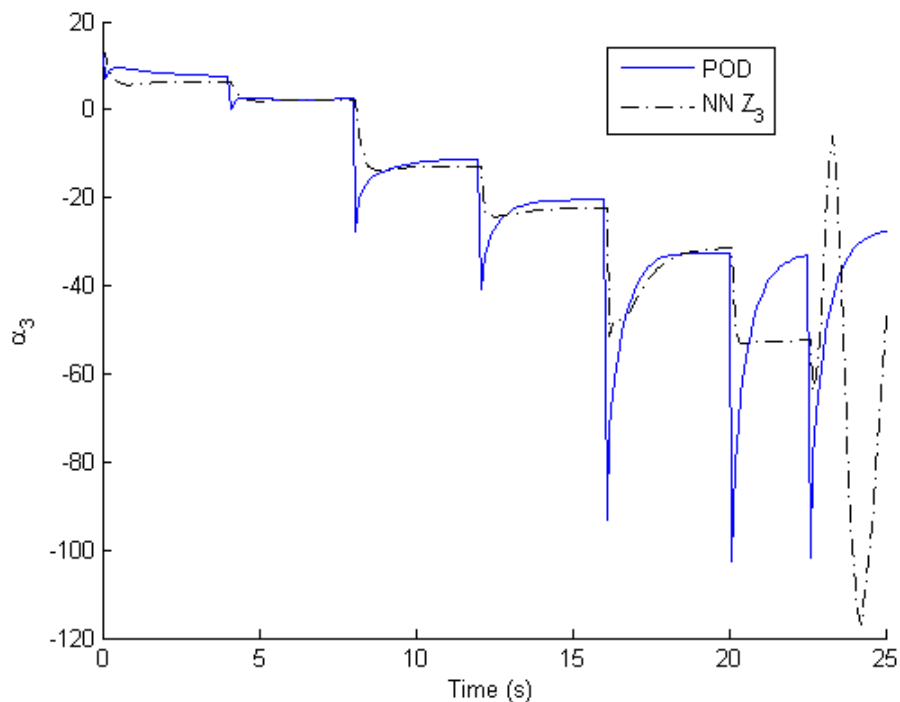
Ακολουθεί η επιβολή εκπαίδευσης M11 (Σχήματα 6.23 - 6.25).



Σχήμα 6.23 Οι εκτιμήσεις $\hat{\alpha}_1$ των δύο μοντέλων για την επιβολή M11, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_1 ως συνάρτηση του χρόνου



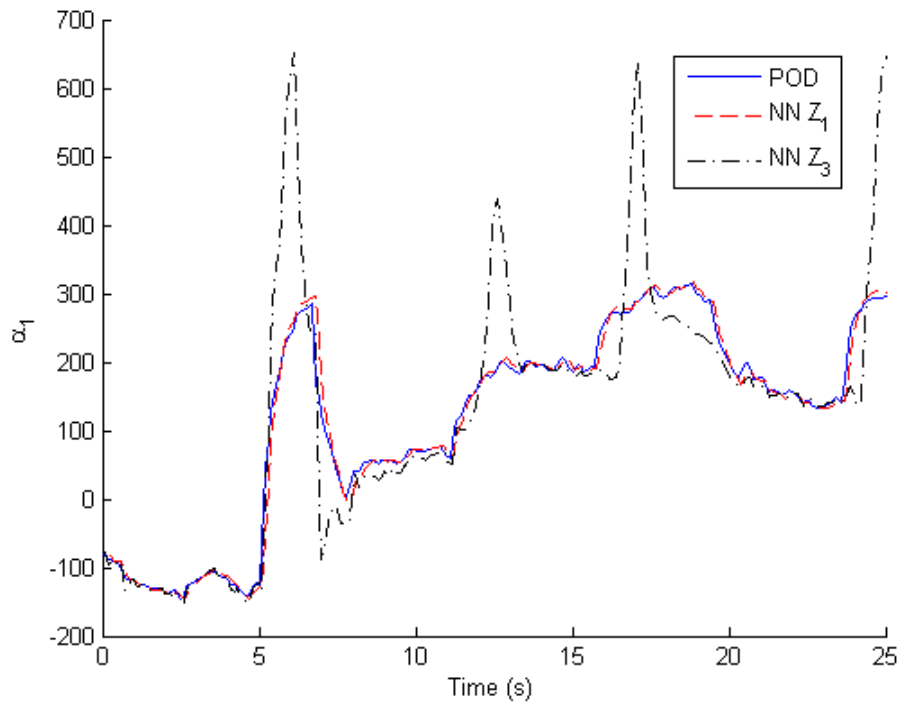
Σχήμα 6.24 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_2$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή M11, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_2 ως συνάρτηση του χρόνου



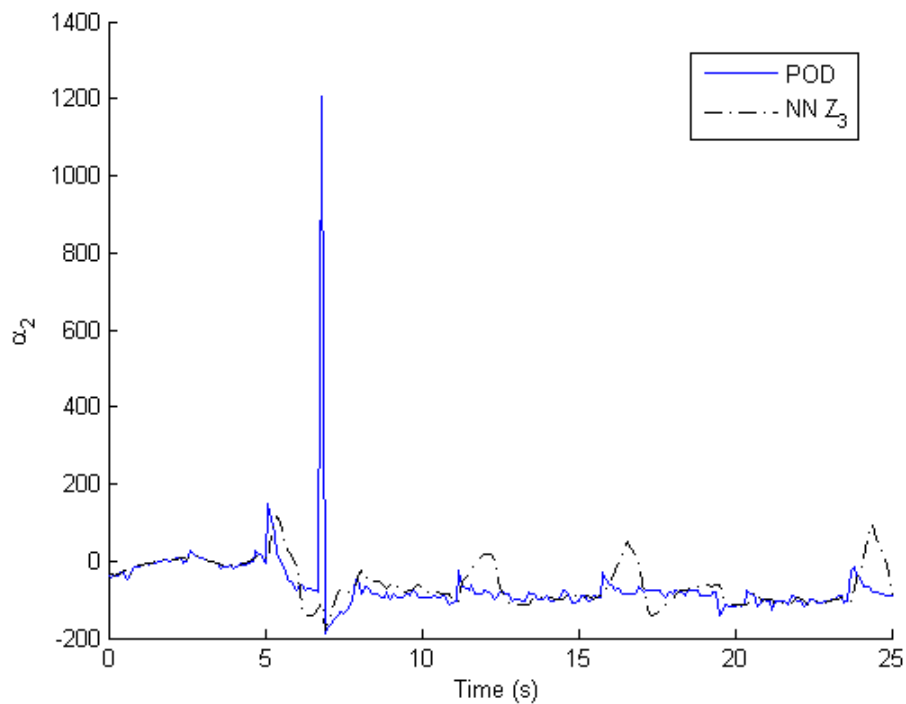
Σχήμα 6.25 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_3$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή M11, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_3 ως συνάρτηση του χρόνου

Στα Σχήματα 6.23 - 6.25 φαίνεται ότι το μοντέλο της Z_1 ταυτίζεται σχεδόν με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_1 , ενώ το μοντέλο της Z_3 ακολουθεί σε μεγάλο βαθμό τις πραγματικές καμπύλες, αλλά δεν προβλέπει καλά τις κορυφές του τρίτου συντελεστή, ενώ παρουσιάζει και μια έντονη απόκλιση στο τέλος της επιβολής. Αξίζει να τονισθεί ότι η επιβολή M11 ανήκει στα δεδομένα εκπαίδευσης, επομένως τα νευρωνικά δίκτυα αναμενόταν να κάνουν πολύ καλές προβλέψεις.

Τελευταία παρουσιάζεται η επιβολή M7, η οποία θεωρείται δύσκολη να προβλεφθεί λόγω των πολλών απότομων μεταβολών της παροχής (Σχήματα 6.26 - 6.28).

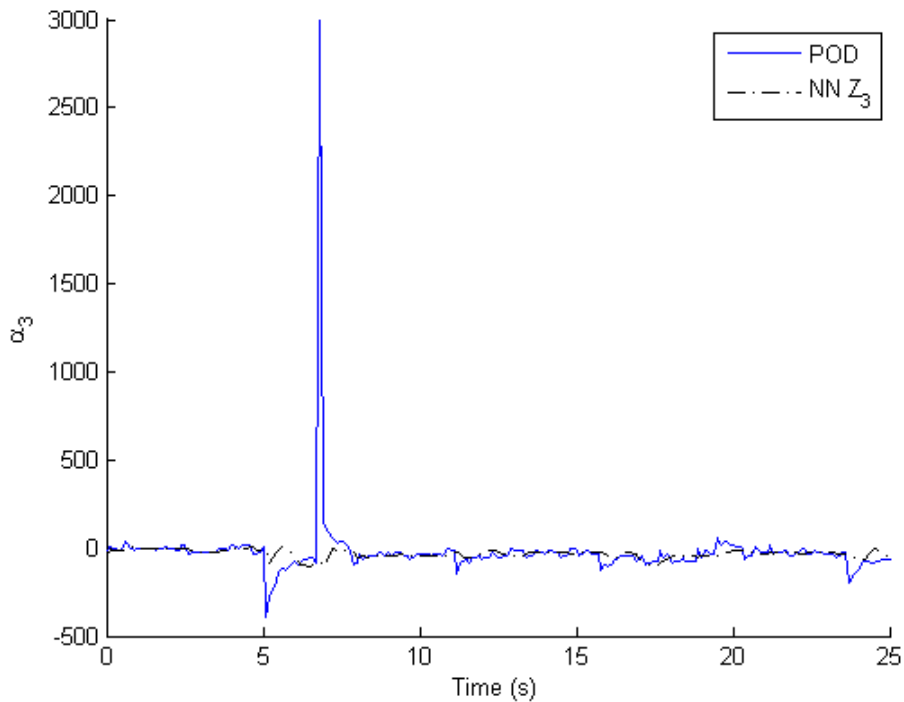


Σχήμα 6.26 Οι εκτιμήσεις $\hat{\alpha}_1$ των δύο μοντέλων για την επιβολή M7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_1 ως συνάρτηση του χρόνου



Σχήμα 6.27 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_2$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή M7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_2 ως συνάρτηση του χρόνου

Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



Σχήμα 6.28 Η εκτίμηση $\hat{\alpha}_3$ του μοντέλου της Z_3 για την επιβολή M7, σε αντιδιαστολή με τις πραγματικές τιμές του συντελεστή α_3 ως συνάρτηση του χρόνου

Στα Σχήματα 6.26 - 6.28 φαίνεται ότι το μοντέλο της Z_1 προβλέπει με εξαιρετική ακρίβεια την πραγματική πορεία των τιμών του συντελεστή α_1 , δεδομένης μάλιστα και της πολυπλοκότητας της καμπύλης αυτής. Αντίθετα, το μοντέλο της Z_3 , αν και ακολουθεί σε γενικές γραμμές την πορεία της πραγματικής καμπύλης του α_1 , εμφανίζει τις κορυφές με πολύ μεγαλύτερη ένταση. Επιπλέον, εμφανίζει κορυφές που δεν υπάρχουν στις πραγματικές τιμές του α_2 και αδυνατεί να προβλέψει τις έντονες κορυφές των συντελεστών α_2 και α_3 .

Οι παραπάνω παρατηρήσεις, καθώς και οι προβλέψεις των δύο μοντέλων για τις υπόλοιπες επιβολές συνοψίζονται στα συνολικά σφάλματα των μοντέλων για κάθε επιβολή (Ενότητα 4.7), που καταγράφονται στους Πίνακες 6.6 - 6.9.

Πίνακας 6.6 Σχετικά σφάλματα (%) του μοντέλου της Z_1 για τις επιβολές εκπαίδευσης. Οι μέγιστες τιμές κάθε στήλης σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο

	$mse_{r,POD}$ (4.33)	$me_{r,POD}$ (4.34)	$mse_{r,full}$ (4.35)	$me_{r,full}$ (4.36)
B4	0.03	0.18	0.16	0.16
B6	0.01	0.02	0.16	0.16
B17	0.01	0.07	0.21	0.21
B18	0.06	0.31	0.37	0.48
B19	0.03	0.14	0.39	0.47
M9	0.05	0.20	0.26	0.41
M10	0.04	0.20	0.25	0.41
M11	0.04	0.19	0.27	0.39
M12	0.05	0.19	0.27	0.39
Μέση τιμή	0.036	0.168	0.260	0.344

Πίνακας 6.7 Σχετικά σφάλματα (%) του μοντέλου της Z_1 για τις επιβολές ελέγχου. Οι μέγιστες τιμές κάθε στήλης σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο

	$mse_{r,POD}$ (4.33)	$me_{r,POD}$ (4.34)	$mse_{r,full}$ (4.35)	$me_{r,full}$ (4.36)
B1	0.06	0.37	0.33	0.34
B2	0.11	0.75	0.37	0.55
B3	0.04	0.20	0.27	0.38
B5	0.03	0.16	0.10	0.27
B7	0.06	0.06	0.36	0.38
B20	0.03	0.12	0.32	0.37
B21	0.02	0.12	0.28	0.28
M5	0.21	1.49	0.28	0.91
M6	0.23	1.49	0.32	0.77
M7	0.16	1.27	0.32	0.71
M8	0.16	1.07	0.32	0.61
Μέση τιμή	0.101	0.646	0.297	0.507

Πίνακας 6.8 Σχετικά σφάλματα (%) του μοντέλου της Z_3 για τις επιβολές εκπαίδευσης. Οι μέγιστες τιμές κάθε στήλης σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο

	$mse_{r,POD}$ (4.33)	$me_{r,POD}$ (4.34)	$mse_{r,full}$ (4.35)	$me_{r,full}$ (4.36)
B4	0.71	3.12	0.70	3.09
B6	0.05	0.05	0.06	0.07
B17	0.37	1.05	0.49	0.99
B18	0.27	0.40	0.70	5.89
B19	0.01	0.07	0.67	5.89
M9	0.48	2.93	0.52	2.94
M10	0.07	0.24	0.13	0.27
M11	0.40	2.79	0.42	2.89
M12	0.86	3.47	0.87	3.57
Μέση τιμή	0.359	1.569	0.508	2.844

Πίνακας 6.9 Σχετικά σφάλματα (%) του μοντέλου της Z_3 για τις επιβολές ελέγχου. Οι μέγιστες τιμές κάθε στήλης σημειώνονται σε έγχρωμο πλαίσιο

	$mse_{r,POD}$ (4.33)	$me_{r,POD}$ (4.34)	$mse_{r,full}$ (4.35)	$me_{r,full}$ (4.36)
B1	0.57	1.79	0.61	1.88
B2	0.31	1.64	0.31	1.45
B3	0.03	0.19	0.11	0.21
B5	0.04	0.22	0.09	0.32
B7	0.21	0.22	0.35	0.37
B20	0.02	0.09	0.06	0.10
B21	0.73	3.22	0.77	3.31
M5	1.46	12.62	0.89	4.08
M6	1.74	12.71	1.26	4.11
M7	1.22	12.39	0.98	4.10
M8	1.35	12.31	1.20	5.89
Μέση τιμή	0.699	5.219	0.602	2.346

Συγκρίνοντας τις μέσες και μέγιστες τιμές των ίδιων στηλών για τους Πίνακες 6.6 και 6.8, καθώς και για τους Πίνακες 6.7 και 6.9, συνάγεται, σε συμφωνία με τις παρατηρήσεις από τα Σχήματα 6.17 - 6.28, ότι το μοντέλο της \mathbf{Z}_1 με ένα ιδιοδιάνυσμα υπερτερεί σαφώς έναντι εκείνου της \mathbf{Z}_3 με τρία ιδιοδιανύσματα. Ο λόγος που συμβαίνει αυτό εικάζεται πως είναι ότι τα δύο παραπάνω ιδιοδιανύσματα περιγράφουν περισσότερο τον υπολογιστικό θόρυβο παρά την πραγματική συμπεριφορά του συστήματος. Θεωρείται πολύ πιθανό να είναι απαραίτητα περισσότερα από ένα ιδιοδιανύσματα για την περιγραφή ολόκληρου του συστήματος, δηλαδή και του πάνω κλάδου καθώς και μεταβολών από τον έναν κλάδο στον άλλο. Επιπρόσθετα, ίσως μπορούν να ευρεθούν ιδιοδιανύσματα καλύτερης ποιότητας αν διατίθενται περισσότερα ιστορικά δεδομένα του πεδίου ροής, παραδείγματος χάρη από εκτεταμένες προσομοιώσεις σε περιοχή παροχών μικρού εύρους λόγω βιομηχανικού ενδιαφέροντος.

Στη συνέχεια, ως προβλεπτικό μοντέλο για τον ρυθμιστή χρησιμοποιείται μόνο αυτό της \mathbf{Z}_1 .

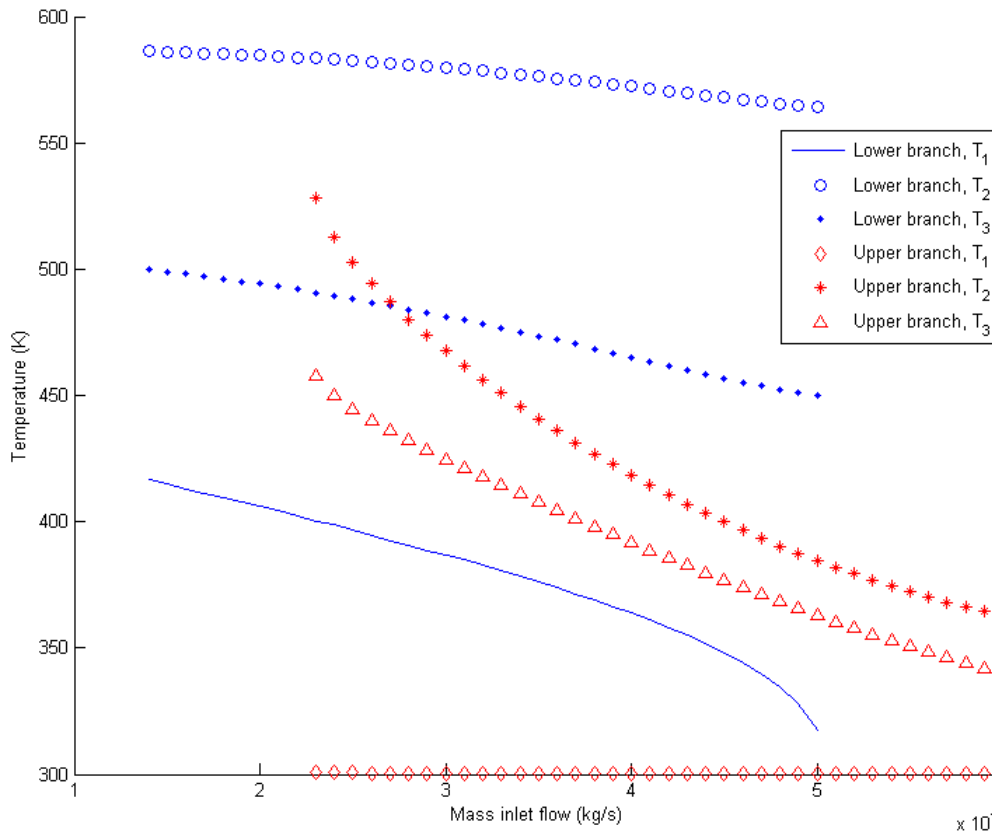
6.4 Ρυθμιστής προβλεπτικού μοντέλου

6.4.1 Επιλογή ρυθμιζόμενων μεταβλητών

Πριν την εφαρμογή του ρυθμιστή, εκκρεμεί η απόφαση για το πλήθος και τη θέση των ρυθμιζόμενων θερμοκρασιών. Σχετικά με το πλήθος, λαμβάνεται η απόφαση αυτές να είναι τρεις ($n_y = 3$), με το σκεπτικό η μία να είναι χαρακτηριστική του κάτω κλάδου, ή άλλη του πάνω και η τρίτη του συστήματος συνολικά. Με βάση το κριτήριο αυτό, υπολογίσθηκαν, για κάθε σταθερή παροχή \dot{m} εντός του επιτρεπτού εύρους και με βήμα $0.1 \cdot 10^{-5}$ kg/s, οι καταστάσεις ισορροπίας του συστήματος και στους δύο κλάδους. Ακολούθως, βρέθηκε ποια θερμοκρασία –ως στοιχείο του διανύσματος κατάστασης ισορροπίας– εμφανίζει την μεγαλύτερη τυπική απόκλιση στον κάτω κλάδο, ποια στον πάνω κλάδο και ποια και στους δύο κλάδους, και αυτές είναι αντίστοιχα οι T_1 , T_2 και T_3 , οι τρεις ρυθμιζόμενες μεταβλητές, οι οποίες αντιστοιχούν στις θέσεις $c_1 = 45241$, $c_2 = 54530$ και $c_3 = 53791$ στο διάνυσμα \mathbf{x} :

$$\mathbf{y}(t_k) = [T_1(t_k) \ T_2(t_k) \ T_3(t_k)]^T = \left[(\mathbf{x}(t_k))_{c_1} \ (\mathbf{x}(t_k))_{c_2} \ (\mathbf{x}(t_k))_{c_3} \right]^T \in \mathbb{R}^3 \quad (6.1)$$

Στο Σχήμα 6.29 απεικονίζεται η εξάρτηση των τριών ρυθμιζόμενων μεταβλητών στη μόνιμη κατάσταση από την παροχή και τον κλάδο.



Σχήμα 6.29 Οι τιμές των τριών ρυθμιζόμενων θερμοκρασιών στη μόνιμη κατάσταση ως συνάρτηση της παροχής ισορροπίας για τους δύο ευσταθείς κλάδους

Από το Σχήμα 6.29 επιβεβαιώνεται ότι από τις τρεις θερμοκρασίες, η T_1 έχει το μεγαλύτερο εύρος τιμών στον κάτω κλάδο και η T_2 στον πάνω. Επιπλέον, η T_1 έχει πρακτικά σταθερή τιμή 300 K σε όλον τον πάνω κλάδο.

6.4.2 Χρονομέτρηση και επιλογή ορίζοντα

Αφού οριστικοποιήθηκαν οι ρυθμιζόμενες μεταβλητές, μετρήθηκε ο χρόνος που απαιτείται για την επίλυση του προβλήματος αριστοποίησης (Ενότητα 5.4) μία φορά, δηλαδή του βήματος 4.2 του αλγορίθμου στην Ενότητα 5.5. Η μέτρηση έγινε για τρεις τιμές περιόδου δειγματοληψίας T_p και τρεις τιμές ορίζοντα πρόβλεψης και ελέγχου N_c , διατηρώντας τις υπόλοιπες παραμέτρους σταθερές. Ειδικότερα, όλες οι μετρήσεις πραγματοποιήθηκαν στις τρεις πρώτες επαναλήψεις του βήματος 4 του πιο πάνω αλγορίθμου, χρησιμοποιώντας την κανονική συνάρτηση κόστους [σχέση (5.9)], με αρχική και επιθυμητή κατάσταση την αρχική και τελική κατάσταση αντίστοιχα της επιβολής B22, στον ίδιο υπολογιστή και επανεκκινώντας το Matlab σε κάθε αλλαγή παραμέτρου. Οι μετρήσεις καταγράφονται στον Πίνακα 6.10.

Πίνακας 6.10 Διάρκεια επίλυσης του προβλήματος αριστοποίησης για διαφορετικές τιμές ορίζοντα πρόβλεψης και ελέγχου και περιόδου δειγματοληψίας

N_c	T_p (s)	Διάρκεια υπολογισμού (s)		
		1 ^η μέτρηση	2 ^η μέτρηση	3 ^η μέτρηση
3	0.5	7.7	7.7	7.6
	1.0	6.6	6.6	6.6
	2.0	5.8	6.1	5.8
5	0.5	12.6	12.6	12.6
	1.0	7.8	7.8	7.9
	2.0	6.2	6.1	6.1
10	0.5	26.2	26.5	26.0
	1.0	14.2	14.1	14.1
	2.0	18.4	18.3	18.5

Για λόγους σύγκρισης, έγινε χρονομέτρηση της επίλυσης του πλήρους μοντέλου από τον Fluent για ένα χρονικό βήμα του Σχήματος 2.4, δηλαδή για τον υπολογισμό της κατάστασης του συστήματος 0.1 s μετά τη δεδομένη. Έγιναν τέσσερις μετρήσεις υπό τις ίδιες συνθήκες με πριν, που καταγράφονται στον Πίνακα 6.11.

Πίνακας 6.11 Διάρκεια επίλυσης του πλήρους μοντέλου για τον υπολογισμό της επόμενης κατάστασης του συστήματος

	Διάρκεια υπολογισμού (s)
1 ^η μέτρηση	96.1
2 ^η μέτρηση	95.2
3 ^η μέτρηση	94.4
4 ^η μέτρηση	93.9

Λαμβάνοντας υπόψη ότι καθένας από τους υπολογισμούς του Πίνακα 6.10

Πίνακας 6.10 αποτελείται από επανηλειμμένες προβλέψεις πολλών μελλοντικών καταστάσεων για διαφορετικούς πίνακες $\mathbf{M}(t_k)$ ώσπου να βρεθεί ο βέλτιστος, γίνεται σαφές από τις τιμές του Πίνακα 6.11 ότι το πλήρες μοντέλο ως έχει δεν θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί ως προβλεπτικό μοντέλο στο ρυθμιστή (Ενότητα 5.3). Συγκρίνοντας τις τιμές των δύο Πινάκων, διαπιστώνεται ότι η χρήση του μοντέλου μειωμένης τάξης έχει μειώσει σημαντικά την τάξη μεγέθους της διάρκειας των υπολογισμών, κι έτσι ένα τέτοιο μοντέλο θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί σε πραγματική εφαρμογή.

Επιπλέον, από τον Πίνακα 6.10 φαίνεται ότι ο απαιτούμενος χρόνος για την επίλυση του προβλήματος αριστοποίησης αυξάνεται με αύξηση του ορίζοντα πρόβλεψης και ελέγχου και με μείωση της περιόδου δειγματοληψίας. Για το λόγο αυτό, επιλέγεται για τις δοκιμές που ακολουθούν η μικρότερη τιμή του ορίζοντα:

$$N_c = 3 \quad (6.2)$$

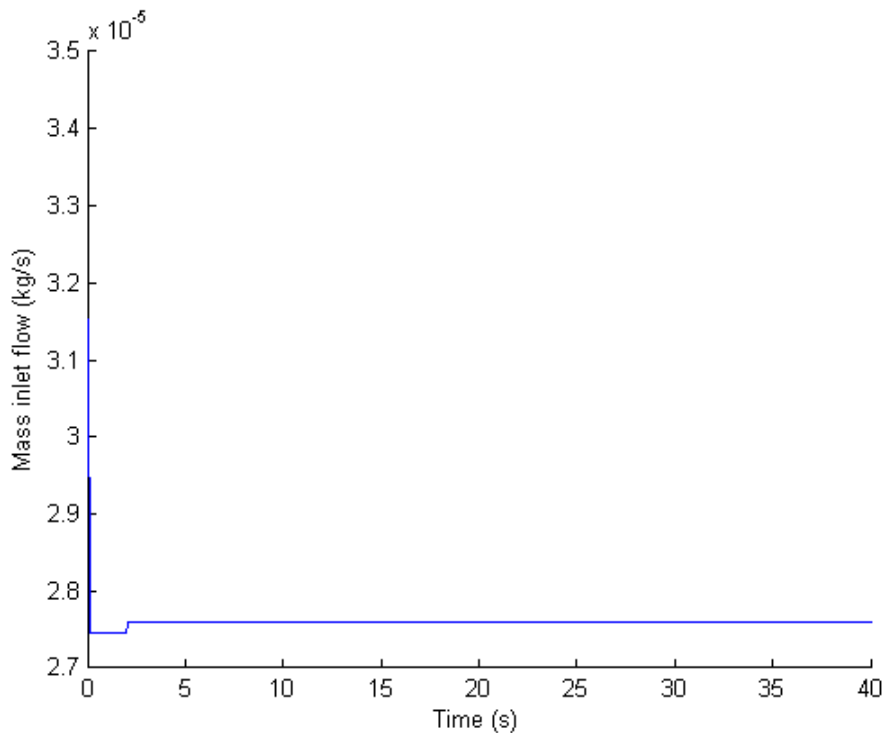
6.4.3 Δοκιμές συστήματος κλειστού βρόχου

Με βάση τα προηγούμενα αποτελέσματα, το σύστημα κλειστού βρόχου υποβάλλεται σε έξι δοκιμές, αυξανόμενης δυσκολίας, των οποίων τα χαρακτηριστικά καταγράφονται στον Πίνακα 6.12. Υπενθυμίζεται ότι όλες οι δοκιμές αφορούν σε καθοδηγητικό έλεγχο (Ενότητα 5.4).

Πίνακας 6.12 Οι δοκιμές του συστήματος κλειστού βρόχου

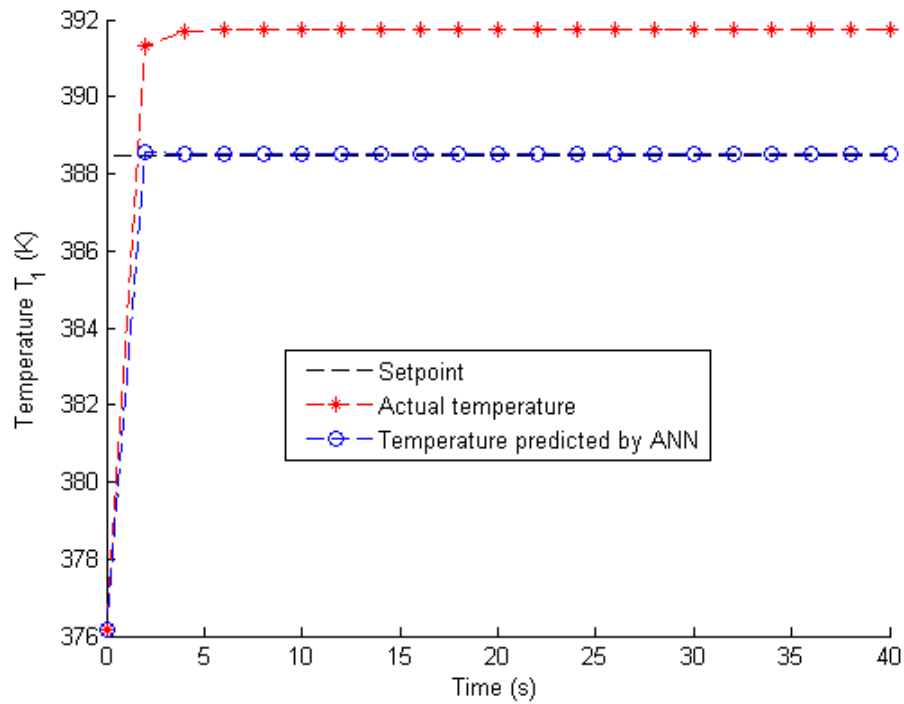
A/A	Αρχική κατάσταση		Επιθυμητή κατάσταση		T_p (s)	$J(t_k)$	Διάρκεια (s)	Αντίστοιχη επιβολή
	Παροχή \dot{m}_0 (10^{-5} kg/s)	Κλάδος	Παροχή \dot{m}_{sp} (10^{-5} kg/s)	Κλάδος				
Δ1	3.5	κάτω	2.9	κάτω	0.5,1.0,2.0	(5.9),(5.11)	(πολλές)	B22
Δ2	4.8	κάτω	1.8	(κάτω)	0.5,1.0	(5.11)	10.0	B23
Δ3	1.8	(κάτω)	4.8	κάτω	0.5,1.0	(5.11)	10.0	B24
Δ4	1.8	(κάτω)	5.0	κάτω	0.5,1.0	(5.11)	10.0	B25
Δ5	3.5	πάνω	1.9	(κάτω)	0.5,1.0	(5.9),(5.11)	10.0	B15
Δ6	3.5	πάνω	3.0	κάτω	0.5,1.0	(5.9),(5.11)	10.0	B9

Η πρώτη δοκιμή είχε κυρίως διερευνητικό χαρακτήρα. Έτσι, αρχικά ελέγχθηκε η περίπτωση $T_p = 2$ s με την κανονική συνάρτηση κόστους [σχέση (5.9)] (Σχήματα 6.30 - 6.33):

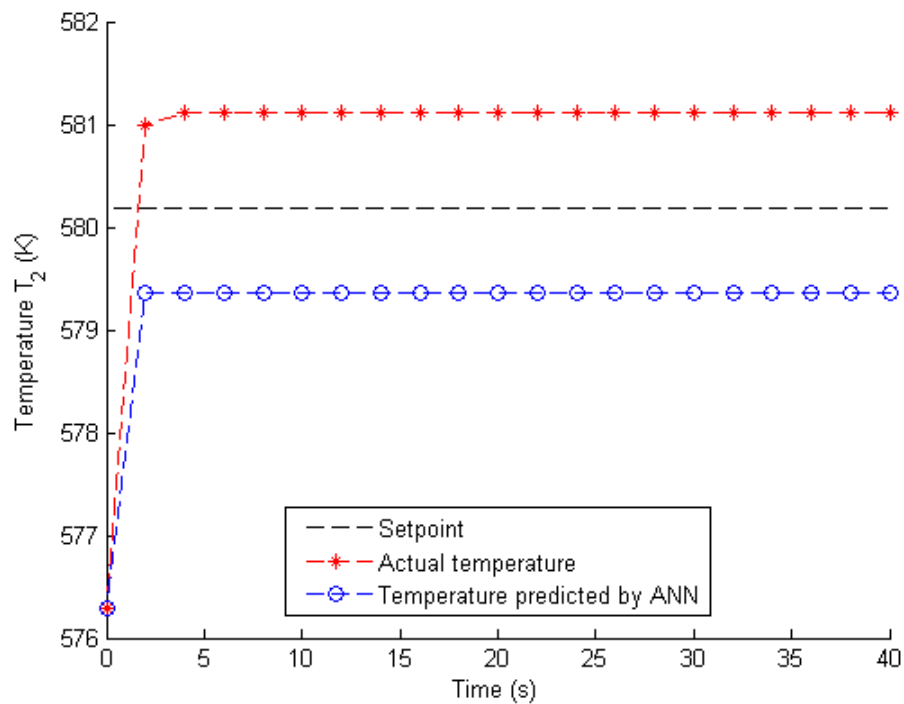


Σχήμα 6.30 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2 s και κανονική συνάρτηση κόστους

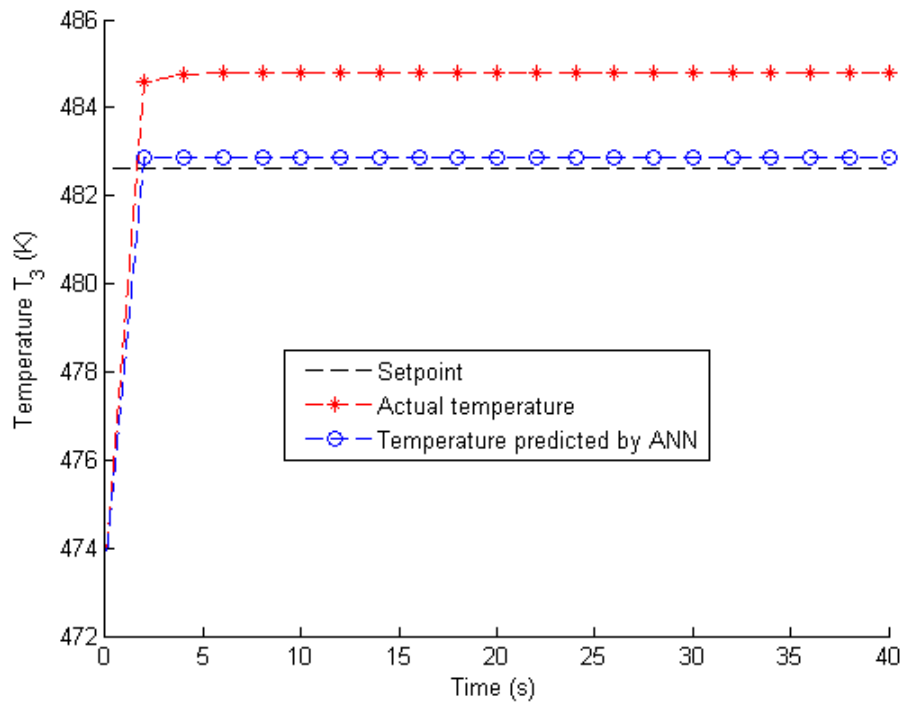
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



Σχήμα 6.31 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2 s και κανονική συνάρτηση κόστους, με την αντίστοιχη πρόβλεψη του μοντέλου για κάθε βήμα



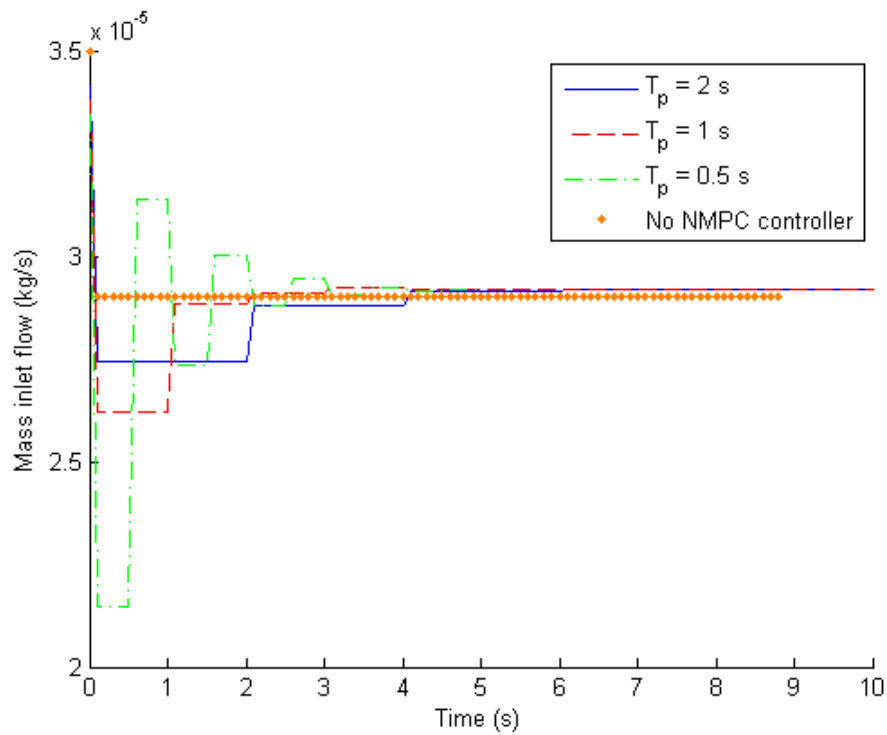
Σχήμα 6.32 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2 s και κανονική συνάρτηση κόστους, με την αντίστοιχη πρόβλεψη του μοντέλου για κάθε βήμα



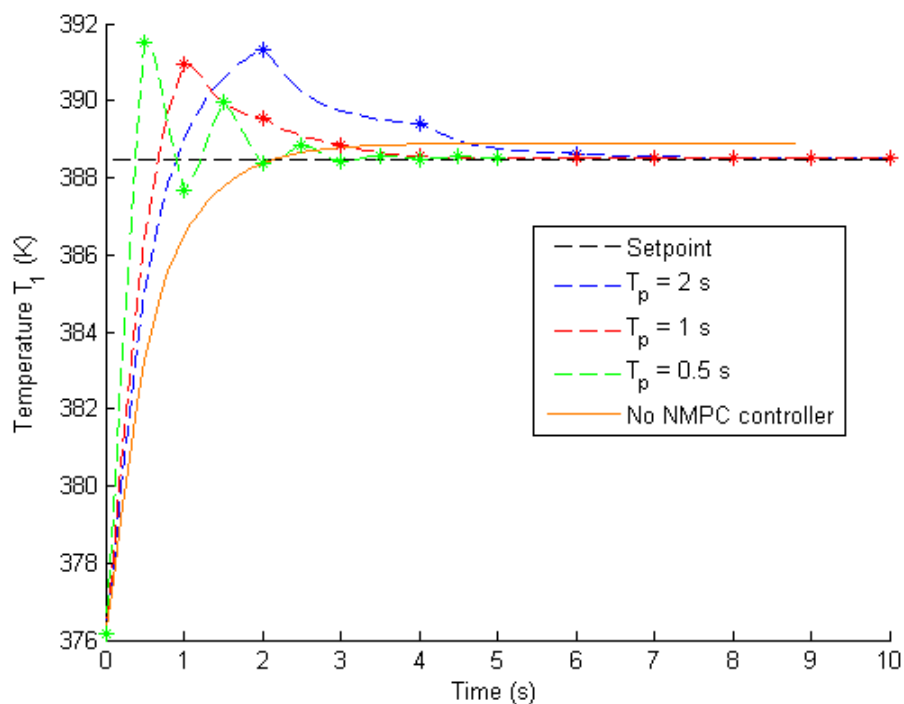
Σχήμα 6.33 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2 s και κανονική συνάρτηση κόστους, με την αντίστοιχη πρόβλεψη του μοντέλου για κάθε βήμα

Από τα Σχήματα 6.30 - 6.33 φαίνεται ότι υπάρχει διαφορά (gain mismatch) μεταξύ των τιμών στη μόνιμη κατάσταση που προβλέπει το μοντέλο και αυτών όπου σταθεροποιεί ο ρυθμιστής το σύστημα. Η ίδια διαφορά εμφανίζεται και στη ρυθμιστική δράση στην τελική κατάσταση σε σχέση με την επιθυμητή. Γι' αυτό χρησιμοποιείται η τροποποιημένη συνάρτηση κόστους [σχέση (5.11)] και δοκιμάζονται περίοδοι δειγματοληψίας 0.5, 1 και 2 s με διάρκεια της δοκιμής 5, 10 και 10 s αντίστοιχα (Σχήματα 6.34 - 6.37). Σε όλες τις δοκιμές που ακολουθούν, γίνεται ταυτόχρονα σύγκριση και με την περίπτωση της μη αυτόματης ρύθμισης, όπου θεωρείται ότι η ρυθμιστική δράση είναι η αντίστοιχη βηματική επιβολή του Πίνακα 6.12.

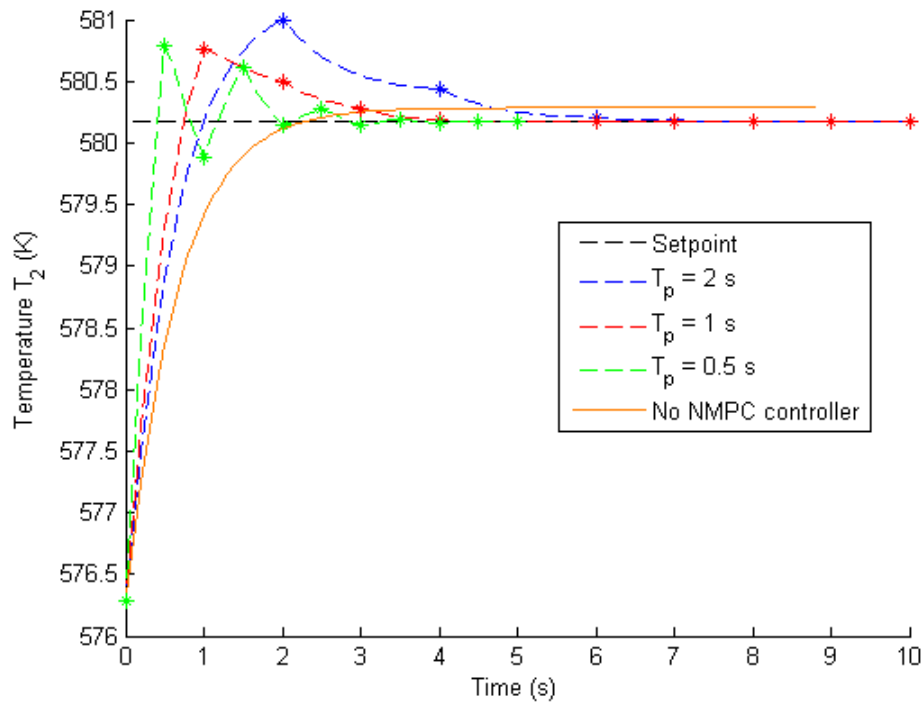
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



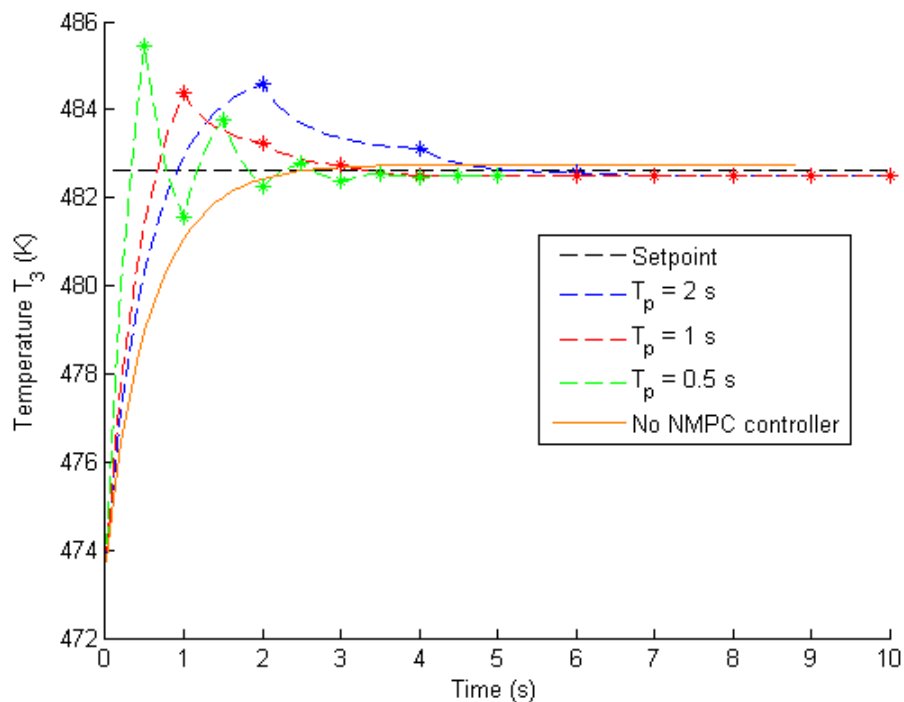
Σχήμα 6.34 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2, 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή



Σχήμα 6.35 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ1 με περίοδο δειγματοληψίας 2, 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση



Σχήμα 6.36 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή $\Delta 1$ με περίοδο δειγματοληψίας 2, 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση



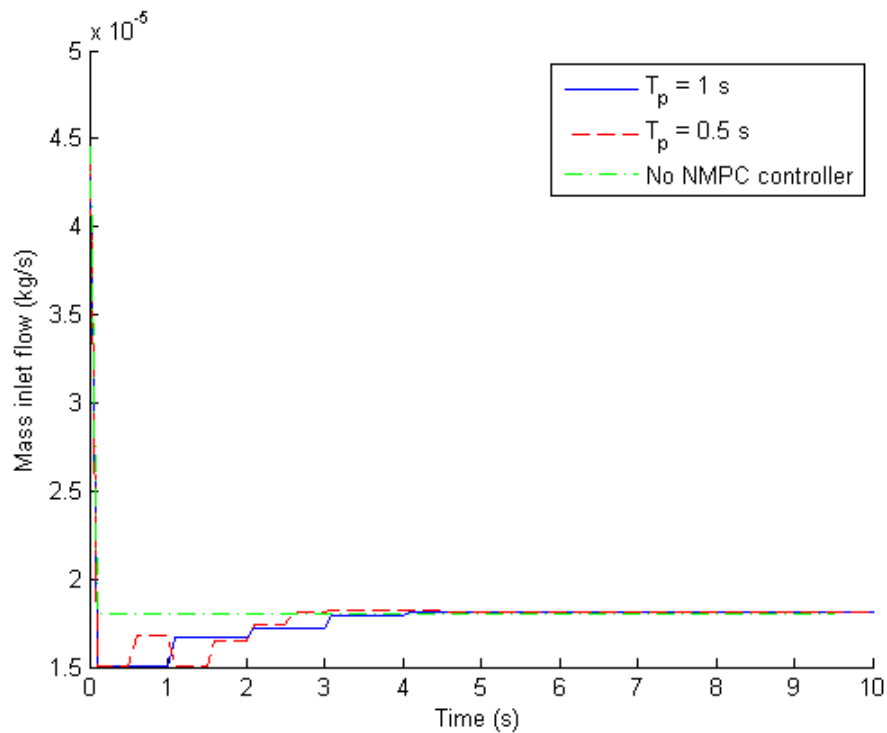
Σχήμα 6.37 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή $\Delta 1$ με περίοδο δειγματοληψίας 2, 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

Από τα Σχήματα 6.34 - 6.37 φαίνεται ότι αυτή τη φορά το σύστημα κλειστού βρόχου σταθεροποιείται στο επιθυμητό σημείο, επομένως στη συνέχεια χρησιμοποιείται η

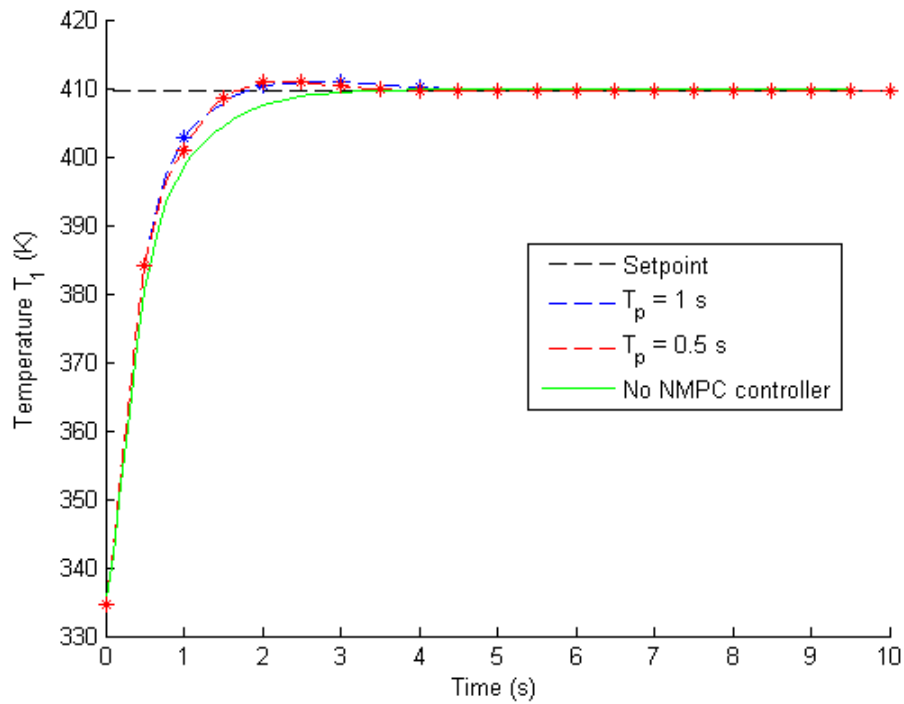
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα

τροποποιημένη συνάρτηση κόστους. Επίσης, φαίνεται ότι η τιμή $T_p = 2$ s είναι πολύ μεγάλη, καθώς με αυτή το σύστημα ισορροπεί σε μεγαλύτερο χρονικό διάστημα από το σύστημα ανοικτού βρόχου. Επομένως, στη συνέχεια εξετάζονται μόνο οι τιμές $T_p = 1$ s και $T_p = 0.5$ s για την περίοδο δειγματοληψίας. Επιπλέον, από εδώ και στο εξής όλες οι δοκιμές έχουν διάρκεια 10 s.

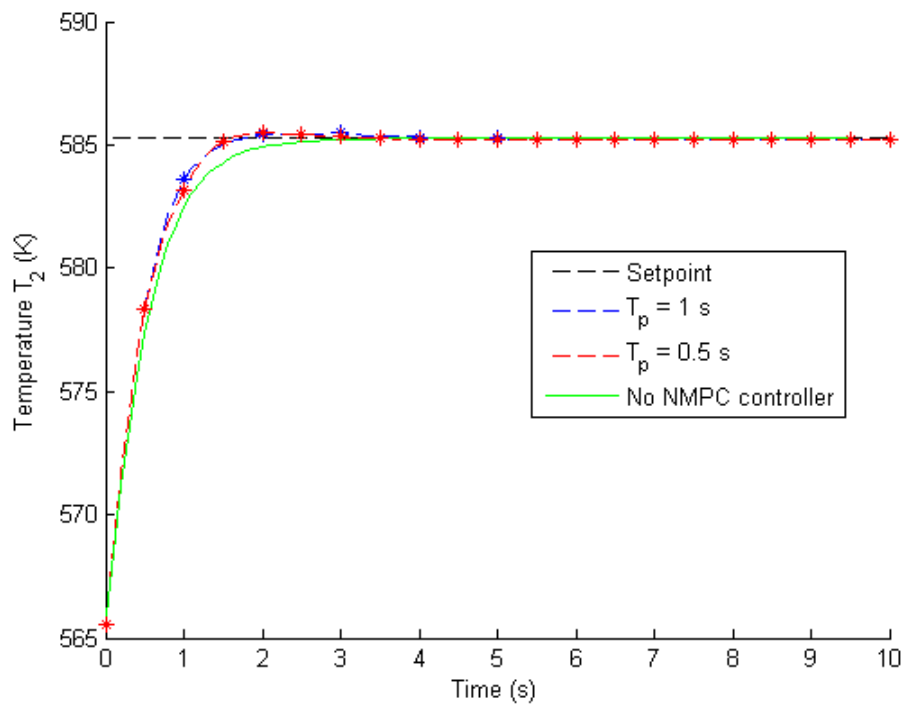
Ακολουθεί η δοκιμή Δ2 (Σχήματα 6.38 - 6.41), που έχει επιθυμητή κατάσταση μακριά από το σημείο στροφής και εκτός της περιοχής της πολλαπλότητας:



Σχήμα 6.38 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ2 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή

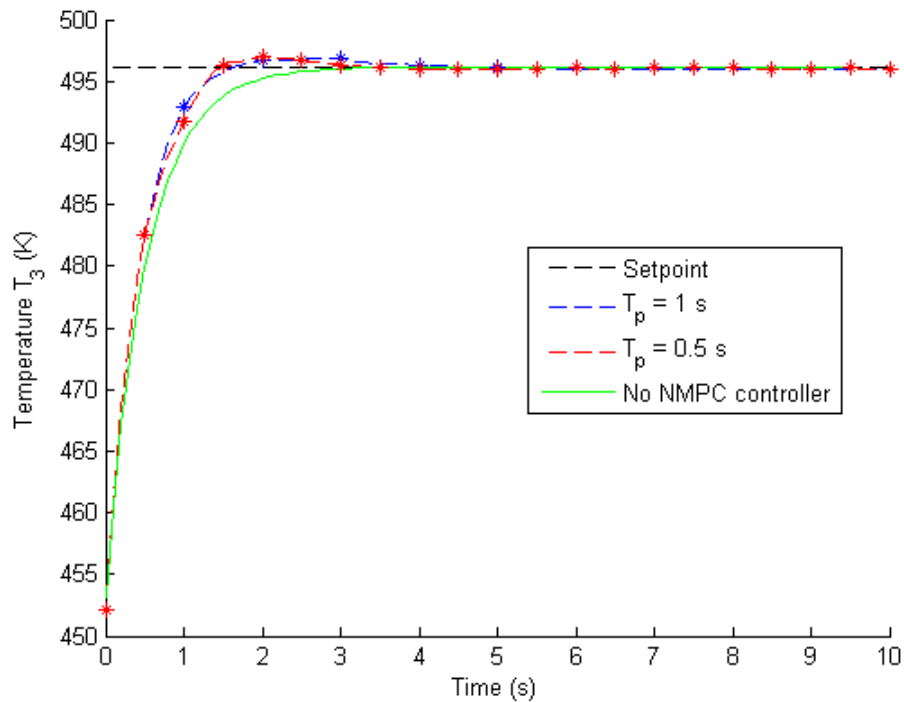


Σχήμα 6.39 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ2 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση



Σχήμα 6.40 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ2 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

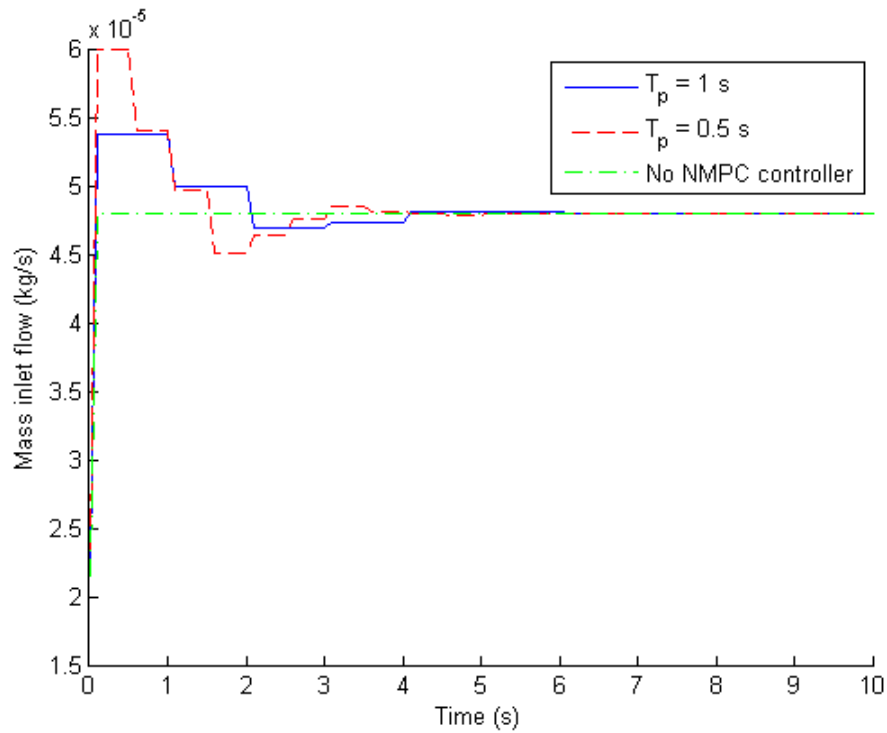
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



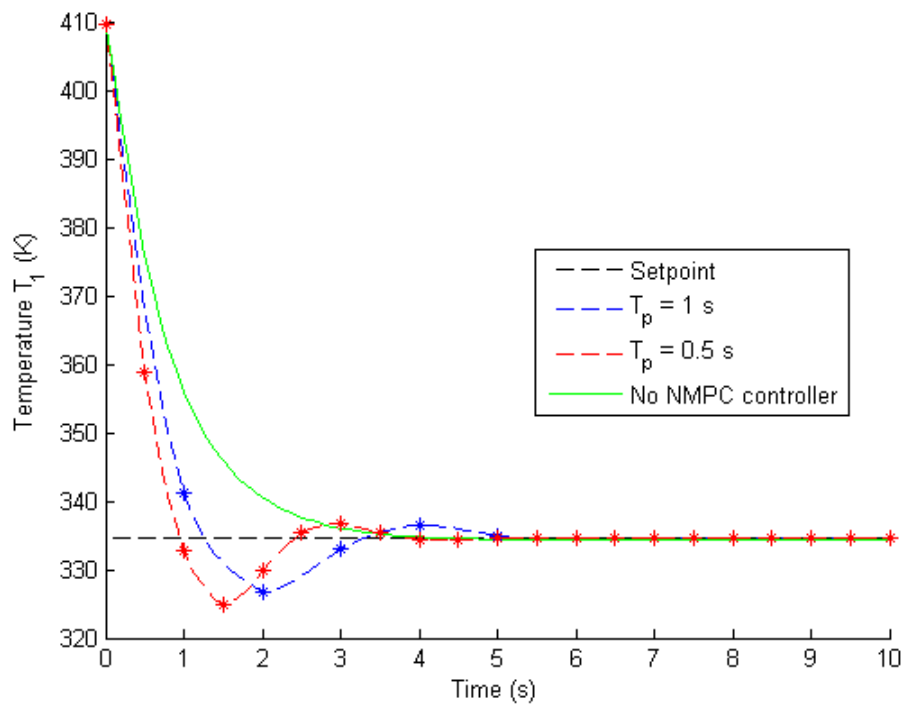
Σχήμα 6.41 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ2 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

Από τα Σχήματα 6.38 - 6.41 φαίνεται ότι η αυτόματη και η μη αυτόματη ρύθμιση έχουν σχεδόν το ίδιο αποτέλεσμα, αφού οι επιθυμητές τιμές επιτυγχάνονται σχεδόν στον ίδιο χρόνο.

Ακολουθεί η δοκιμή Δ3 (Σχήματα 6.42 - 6.45), η οποία έχει επιθυμητή κατάσταση εντός της περιοχής πολλαπλότητας:

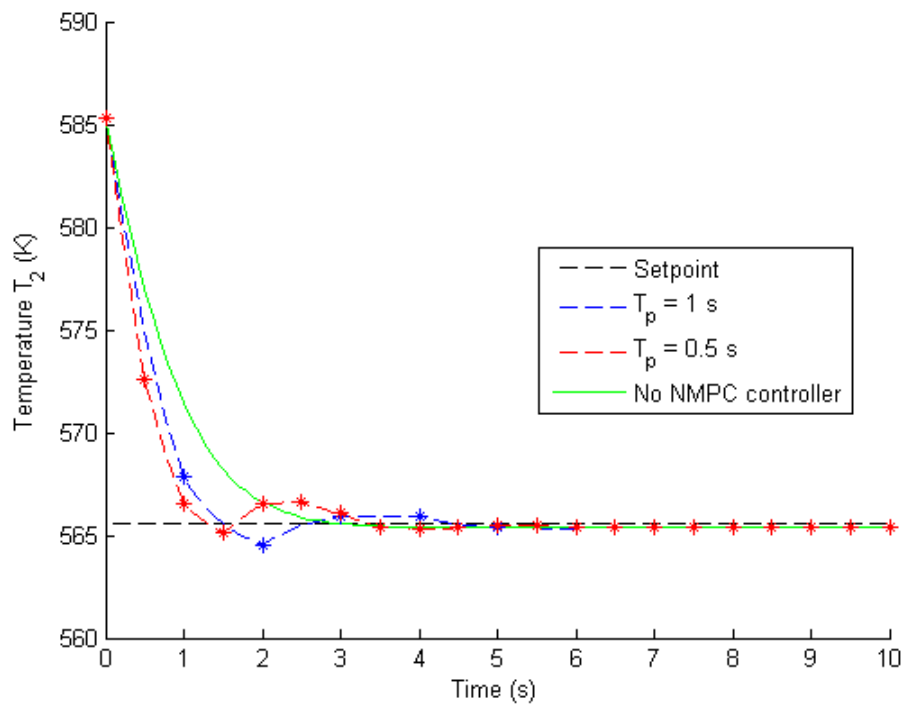


Σχήμα 6.42 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ3 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή

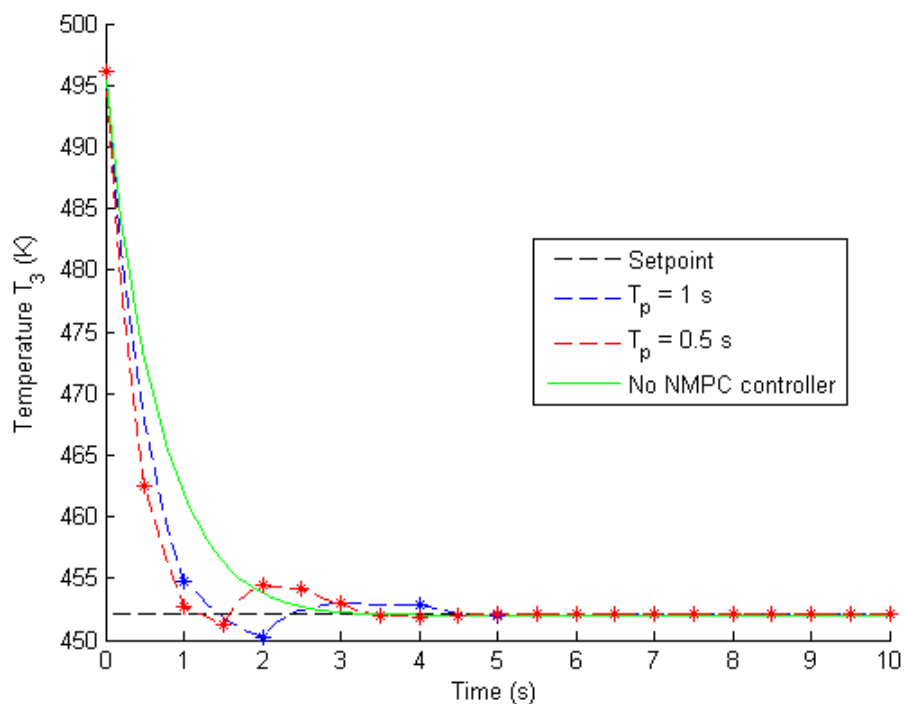


Σχήμα 6.43 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ3 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



Σχήμα 6.44 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ3 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

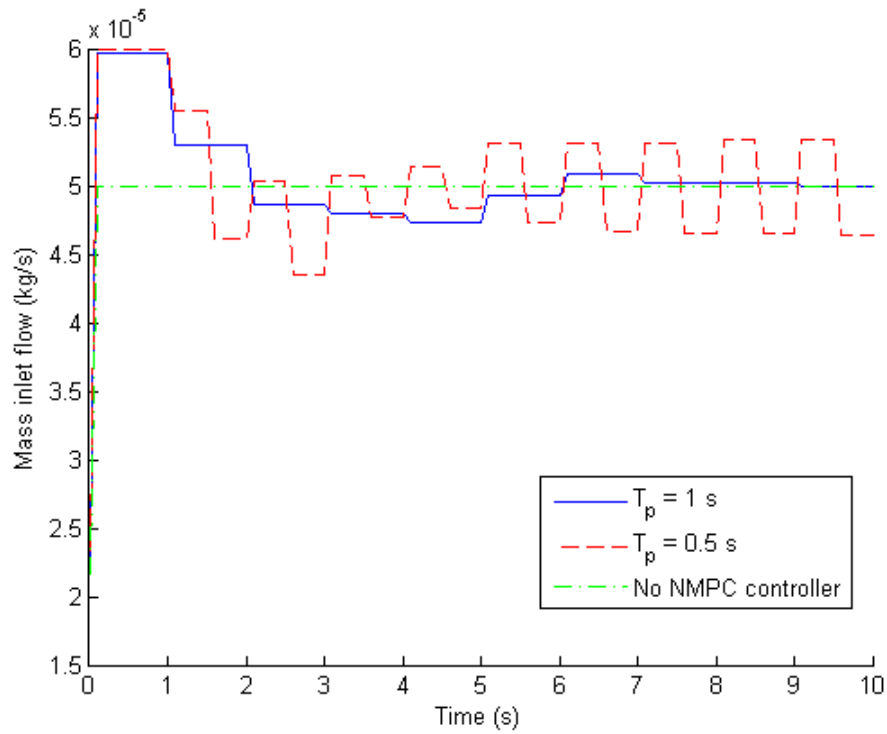


Σχήμα 6.45 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ3 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

Από τα Σχήματα 6.42 - 6.45 φαίνεται ότι και σε αυτή την πιο δύσκολη περίπτωση το σύστημα φθάνει στην επιθυμητή κατάσταση, αν και με ταλαντώσεις γύρω από αυτήν που

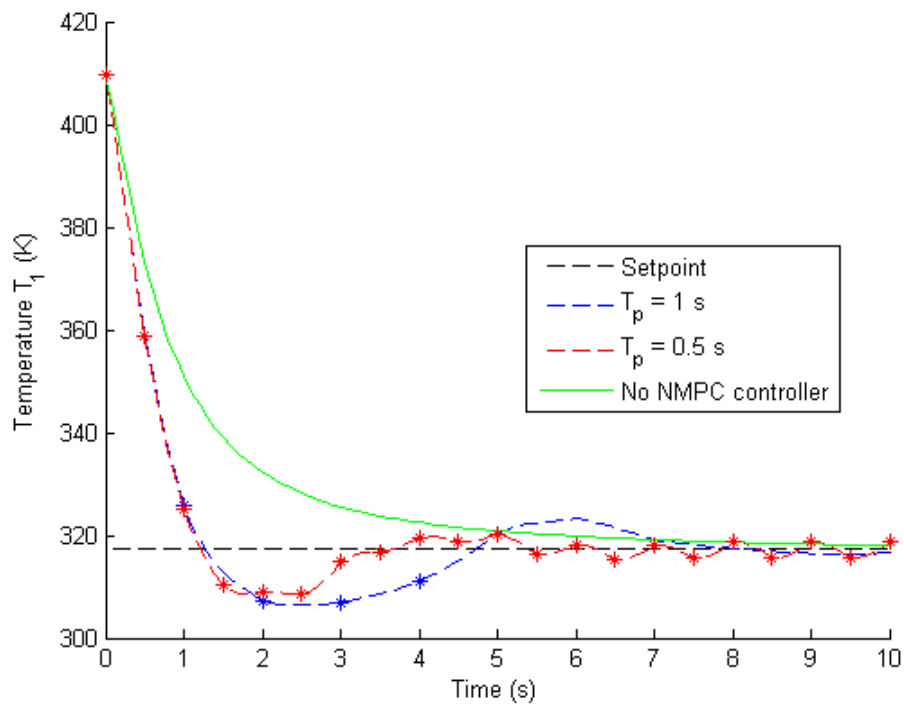
δεν εμφανίζονται στο σύστημα ανοικτού βρόχου, το οποίο επιπλέον είναι ταχύτερο σε αυτή τη δοκιμή.

Ακολουθεί η δοκιμή Δ4 (Σχήματα 6.46 - 6.49), η δυσκολία της οποίας έγκειται στο γεγονός ότι η επιθυμητή κατάσταση είναι στο σημείο στροφής:

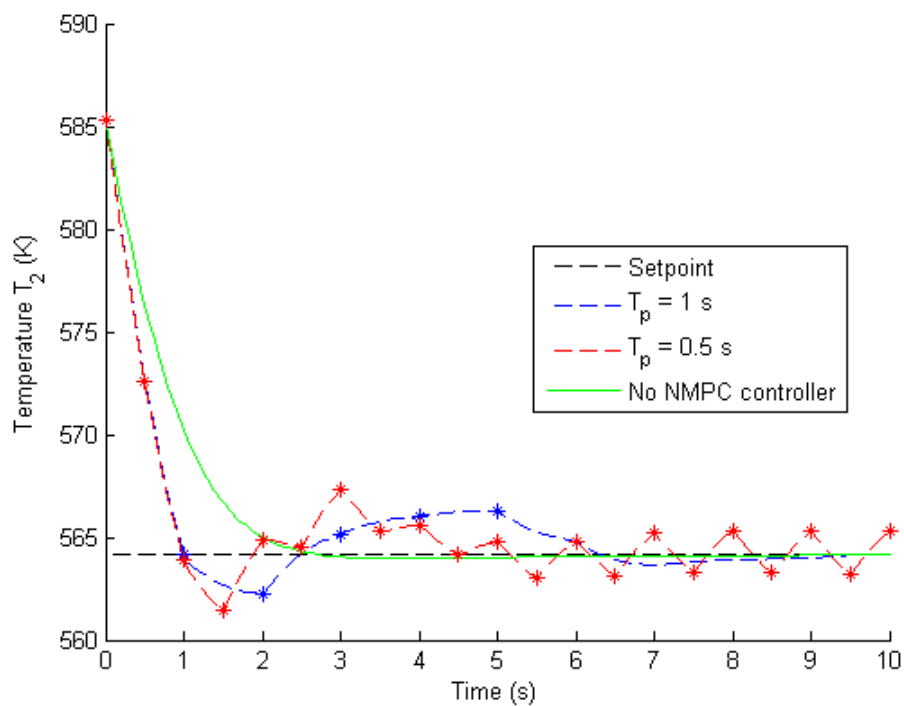


Σχήμα 6.46 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ4 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή

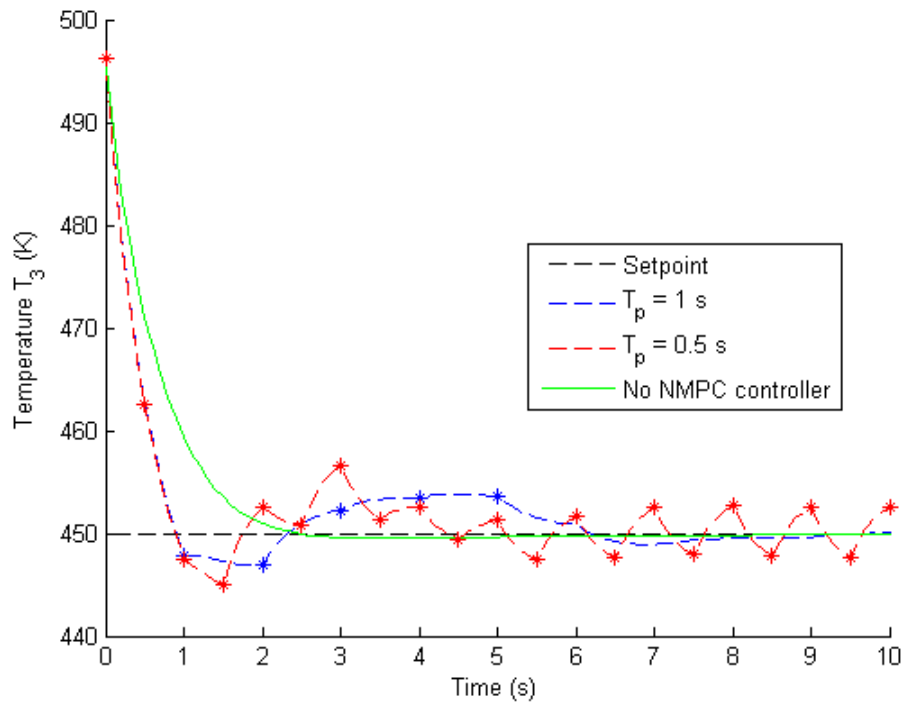
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



Σχήμα 6.47 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ4 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση



Σχήμα 6.48 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ4 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

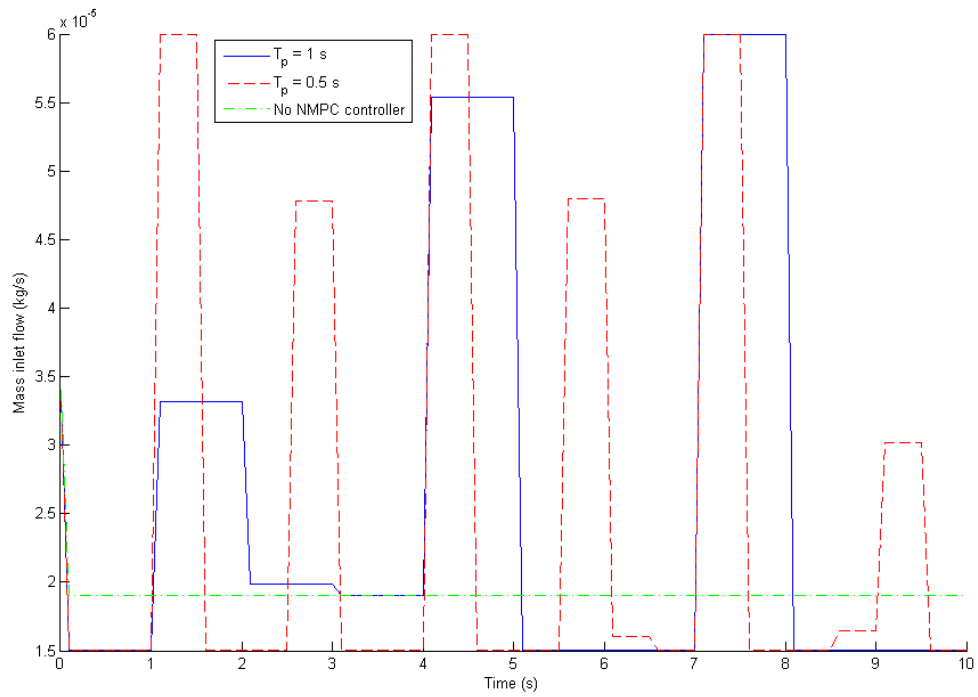


Σχήμα 6.49 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ4 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

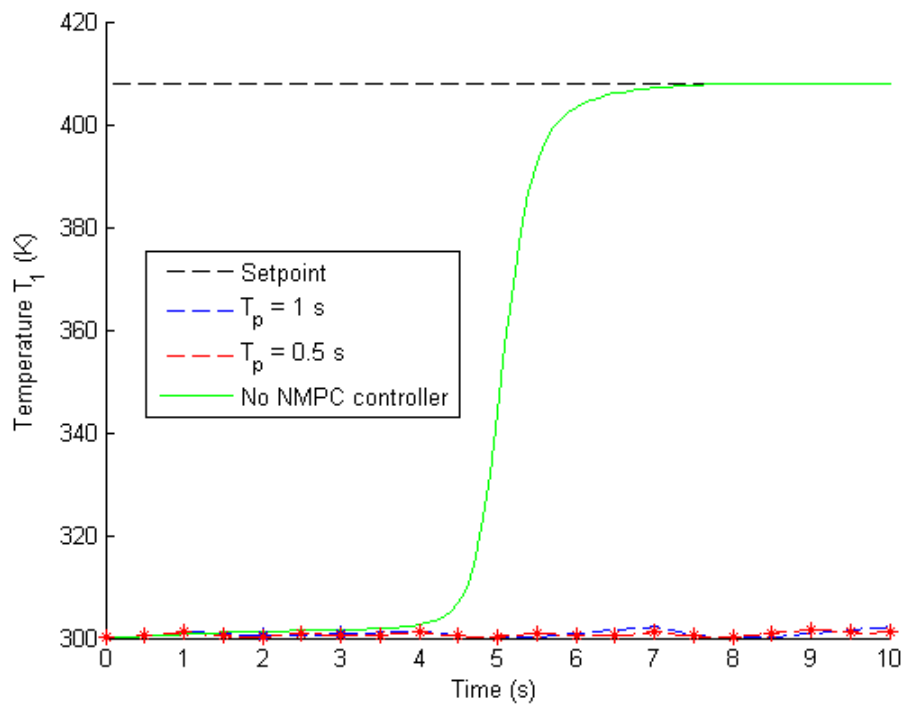
Από τα Σχήματα 6.46 - 6.49 διαπιστώνεται ότι αυτή τη φορά η βηματική επιβολή είναι σαφώς υπέρτερη και των δύο προσπαθειών του ρυθμιστή. Συγκεκριμένα, στο σύστημα χωρίς αυτόματη ρύθμιση η T_1 , που είναι η θερμοκρασία που εμφανίζει τη μεγαλύτερη διακύμανση στον πάνω κλάδο (Ενότητα 6.4.1), είναι αυτή που καθυστερεί περισσότερο να φθάσει στην επιθυμητή τιμή της, την οποία όμως φθάνει στο τέλος των 10 δευτερολέπτων. Στο ίδιο διάστημα, το σύστημα κλειστού βρόχου με $T_p = 1$ s φθάνει επίσης στο επιθυμητό σημείο, αλλά μετά από αργές ταλαντώσεις, ενώ το σύστημα κλειστού βρόχου με $T_p = 0.5$ s εμφανίζει αστάθεια, καθώς ταλαντώνεται γρήγορα με σταθερό, ίσως και αυξανόμενο, πλάτος γύρω από το σημείο ισορροπίας χωρίς να καταφέρει να ισορροπήσει σε αυτό. Παρόλα αυτά, γεγονός είναι ότι και στις δύο περιπτώσεις το σύστημα κλειστού βρόχου καταφέρνει να εντοπίσει τουλάχιστον το επιθυμητό σημείο, παρά την κακή πρόβλεψη του δυναμικού συστήματος στο σημείο στροφής (Σχήμα 6.20).

Ακολουθεί η δοκιμή Δ5 (Σχήματα 6.50 - 6.53), στην οποία επιδιώκεται η καθοδήγηση του συστήματος από ένα σημείο του πάνω κλάδου σε ένα σημείο του κάτω, εκτός της περιοχής της πολλαπλότητας:

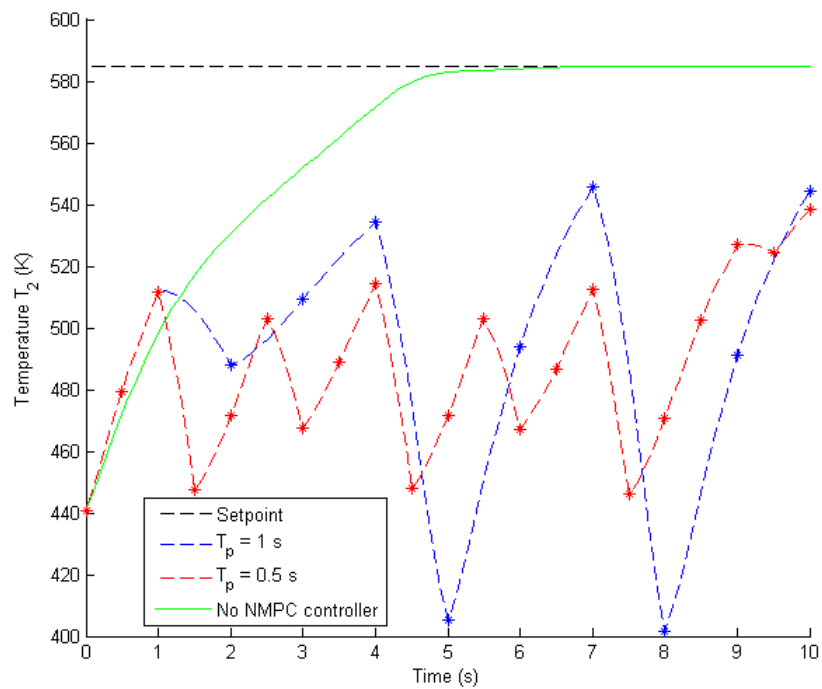
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



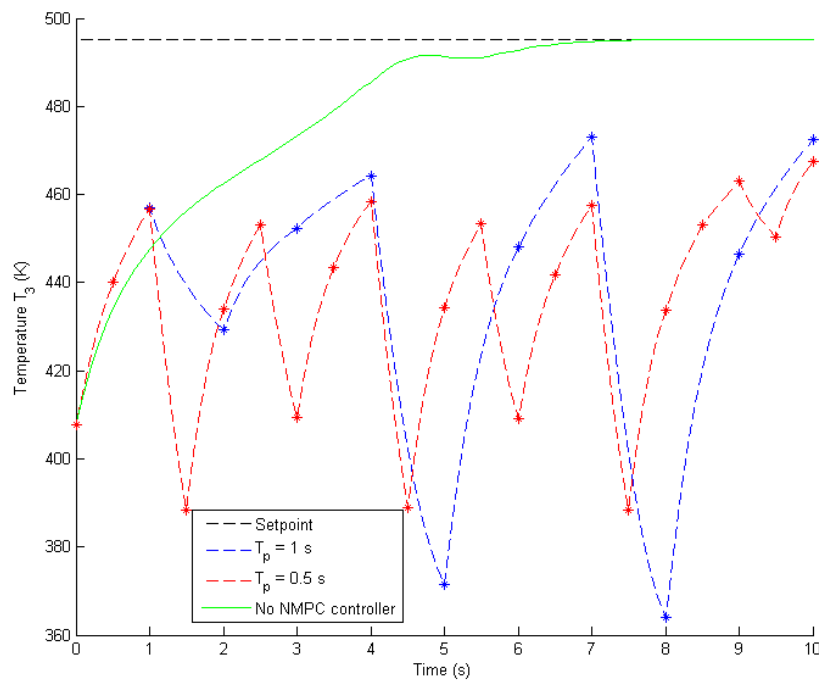
Σχήμα 6.50 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ5 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή



Σχήμα 6.51 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ5 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση



Σχήμα 6.52 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ5 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση



Σχήμα 6.53 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ5 με τροποποιημένη συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

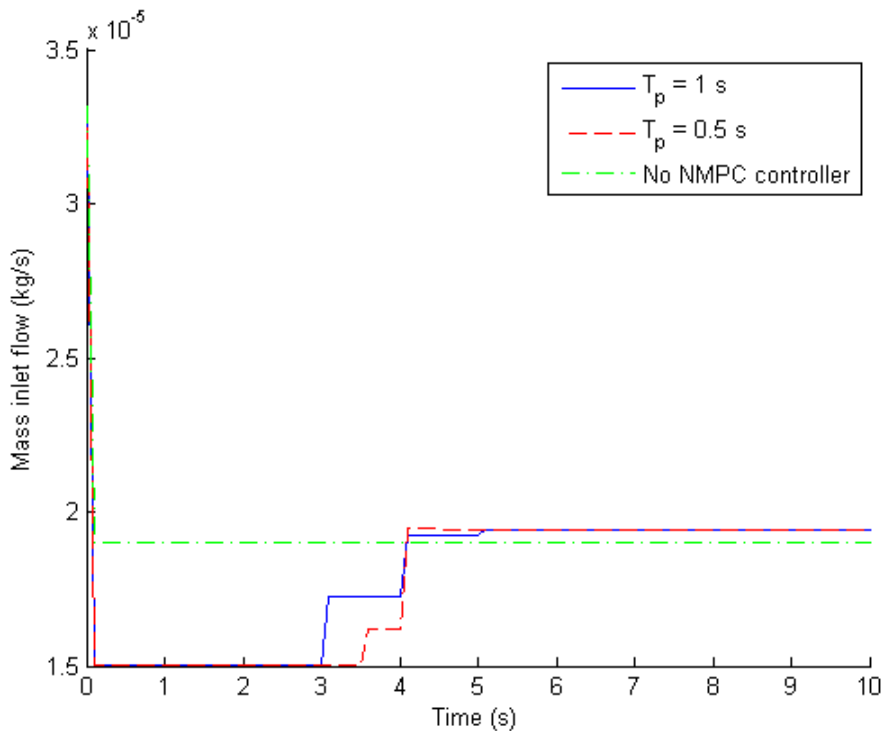
Από τα Σχήματα 6.50 - 6.53 φαίνεται καθαρά ότι η αυτόματη ρύθμιση αποτυγχάνει. Η παραμονή της T_1 στην περιοχή των 300 K δείχνει ότι το σύστημα παραμένει στον πάνω

Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα

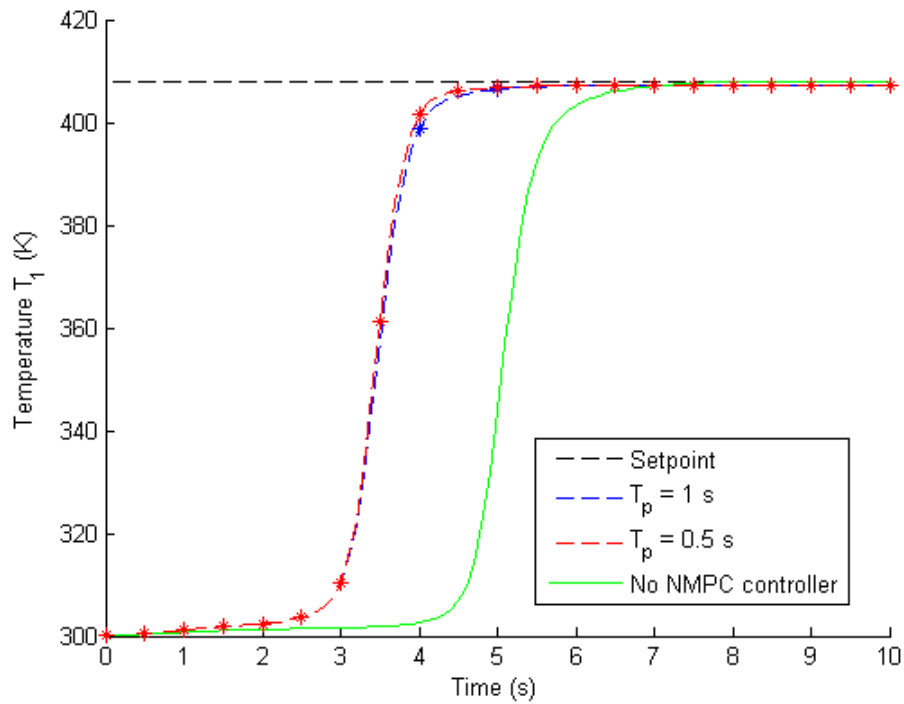
κλάδο, ενώ οι απότομες μεταβολές των T_2 και T_3 αντικατοπτρίζουν την απότομη ρυθμιστική δράση, η οποία ως επί το πλείστον παίρνει τιμές στα δύο επιτρεπτά όρια. Αντίθετα, το σύστημα ανοικτού βρόχου σε χρόνο 8 s φθάνει στην επιθυμητή κατάσταση.

Στο σημείο αυτό έγινε η υπόθεση ότι η αποτυχία της ρύθμισης ίσως να οφείλεται στην τροποποίηση της συνάρτησης κόστους: σε αντίθεση με τις προηγούμενες δοκιμές, που παρέμεναν στον κάτω κλάδο, τώρα το προβλεπτικό μοντέλο καλείται να εκτιμήσει τον πάνω κλάδο, αλλά όπως έχει αναδειχθεί δεν έχει αυτή τη δυνατότητα (Ενότητα 6.2.2). Αντ' αυτού, και λόγω της πολλαπλότητας, ίσως κάνει πρόβλεψη αντίστοιχη εκείνης που θα έκανε αν βρισκόταν στο σημείο του κάτω κλάδου με ίση παροχή. Όμως τότε το σφάλμα $e_{pr}(t_k)$ [σχέση (5.10)] είναι πολύ μεγάλο, πιθανώς μεγαλύτερο από τον όρο $\Delta y(t_{k+i}|t_k)$, και έτσι η αριστοποίηση οδηγεί την ρυθμιστική δράση σε υπερβολικά μεγάλες ή μικρές τιμές, οι οποίες δεν επιβάλλονται μόνο λόγω των περιορισμών που έχουν τεθεί στην παροχή.

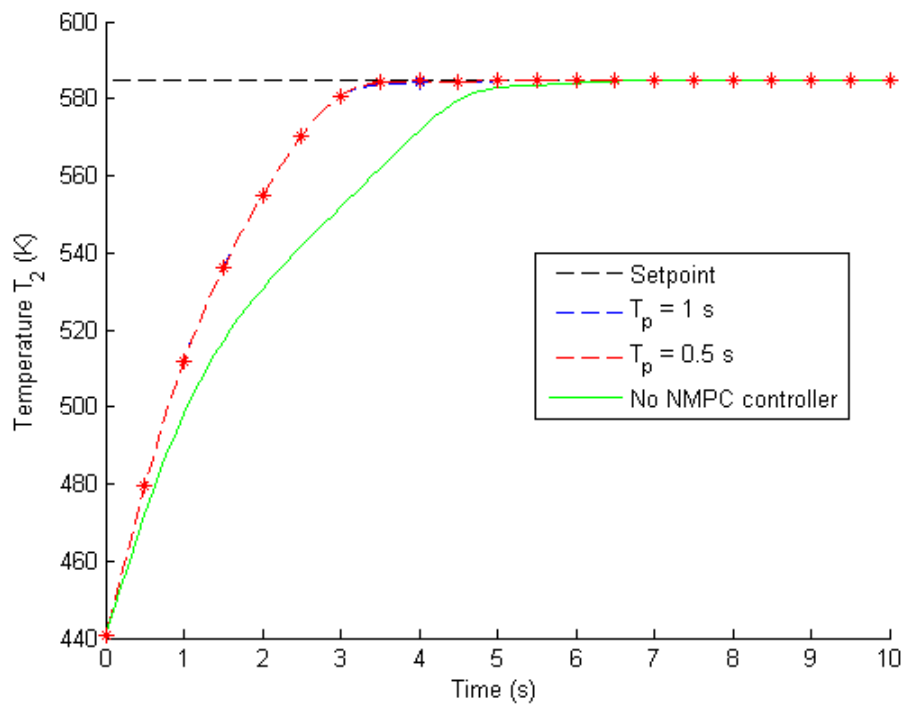
Έτσι, η δοκιμή Δ5 επαναλαμβάνεται (Σχήματα 6.54 - 6.57), αυτή τη φορά με την κανονική συνάρτηση κόστους:



Σχήμα 6.54 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ5 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή

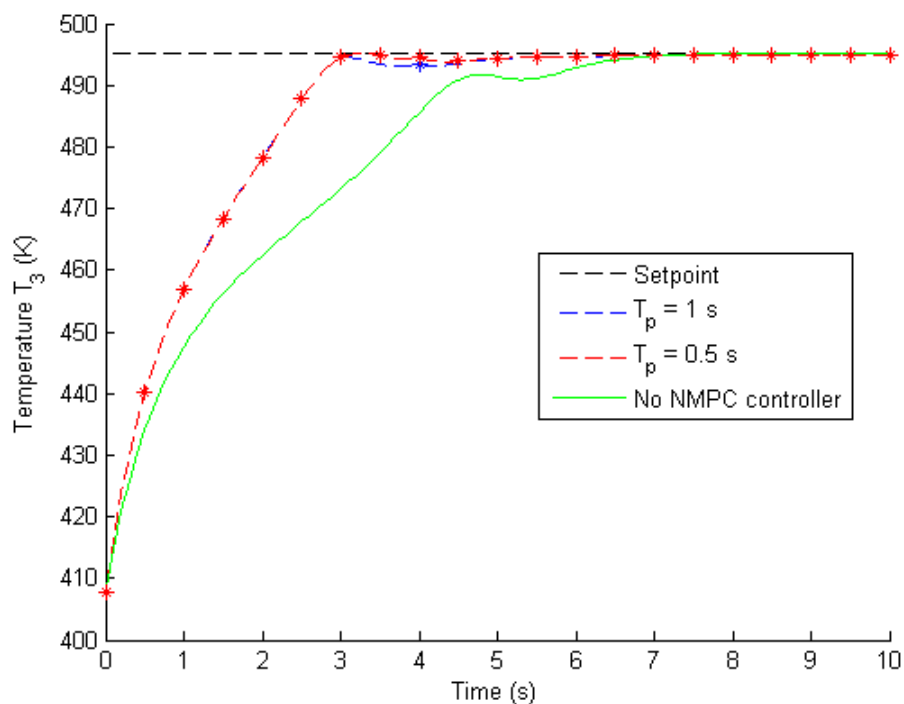


Σχήμα 6.55 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ5 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση



Σχήμα 6.56 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ5 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

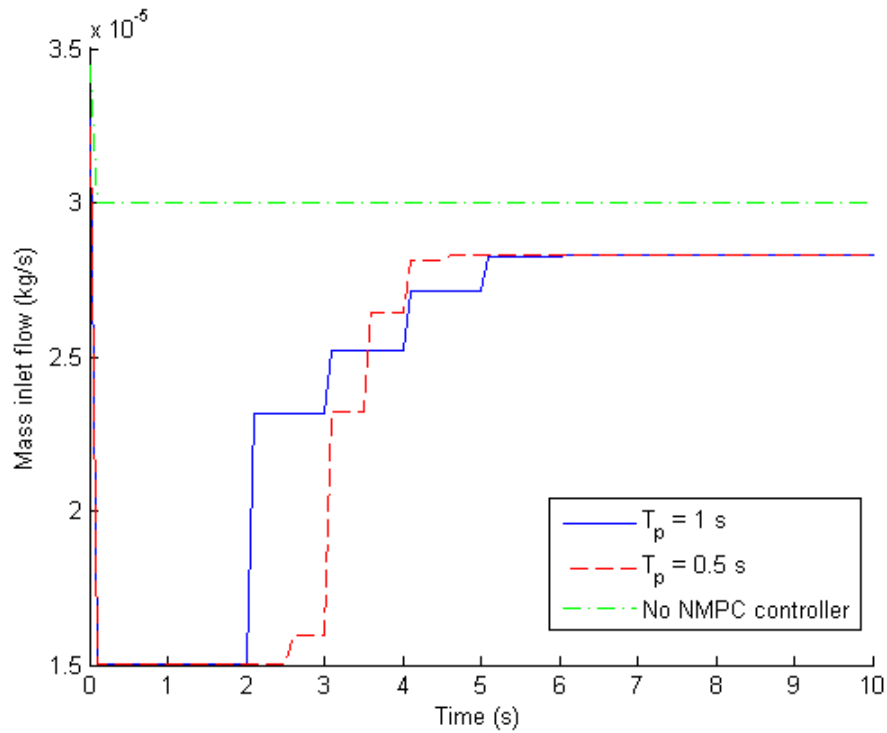
Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



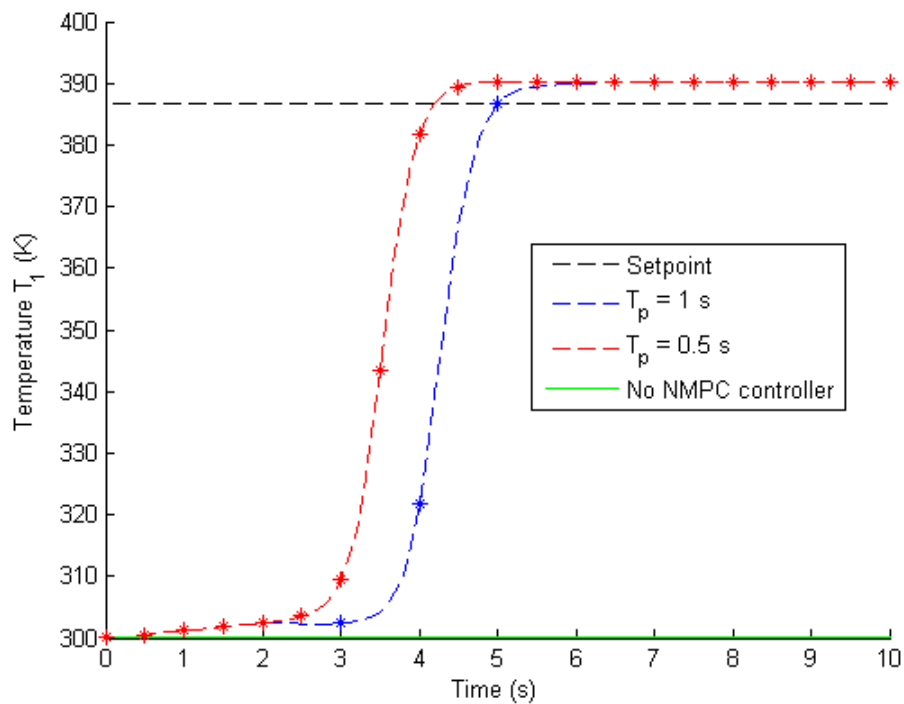
Σχήμα 6.57 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ5 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

Από τα Σχήματα 6.54 - 6.57 φαίνεται ότι η υπόθεση που έγινε ήταν σωστή, καθώς με χρήση της κανονικής συνάρτησης αριστοποίησης η αυτόματη ρύθμιση όχι απλά επιτυγχάνει, αλλά είναι και γρηγορότερη από τη μη αυτόματη τουλάχιστον κατά 2 s. Αυτό οφείλεται στην ορθή απόφαση του αυτόματου ρυθμιστή να επιβάλλει τη χαμηλότερη δυνατή παροχή, ώστε το σύστημα γρήγορα να αλλάξει κλάδο και από εκεί να συνεχισθεί η ρύθμιση όπως στις προηγούμενες δοκιμές. Τέλος, οι αποκρίσεις για τις δύο περιόδους δειγματοληψίας είναι πολύ κοντά η μια στην άλλη.

Η τελευταία δοκιμή που γίνεται είναι η Δ6 (Σχήματα 6.58 - 6.61), που στόχο έχει την οδήγηση του συστήματος από ένα σημείο του πάνω κλάδου σε ένα του κάτω, αυτή τη φορά εντός της περιοχής πολλαπλότητας. Και αυτή τη φορά χρησιμοποιείται η κανονική συνάρτηση κόστους.

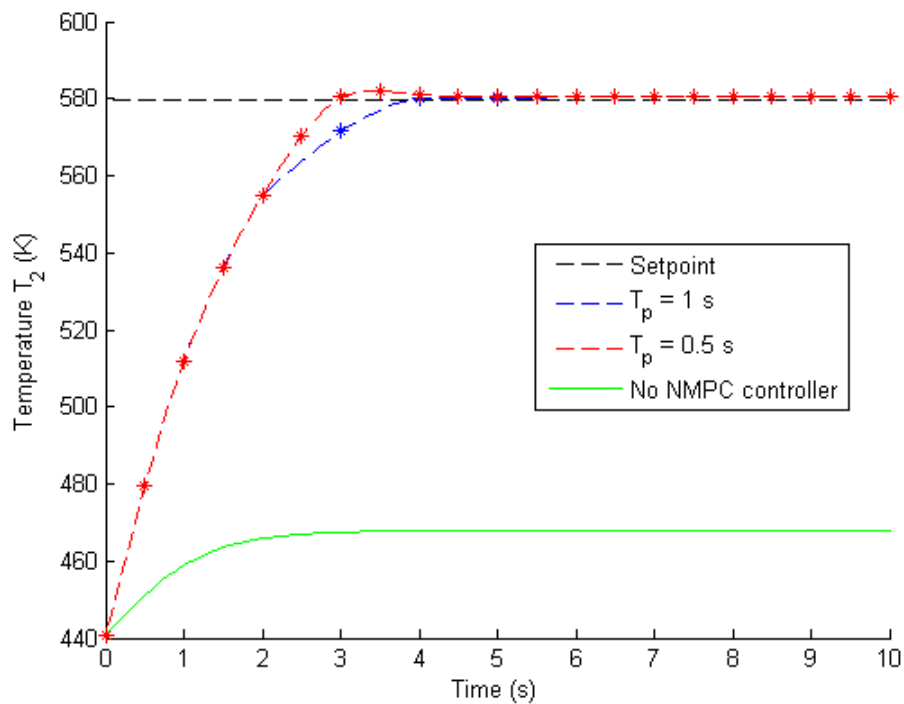


Σχήμα 6.58 Η ρυθμιστική δράση στη δοκιμή Δ6 με περίοδο δειγματοληψίας 1 και 0.5 s και κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την αντίστοιχη βηματική επιβολή

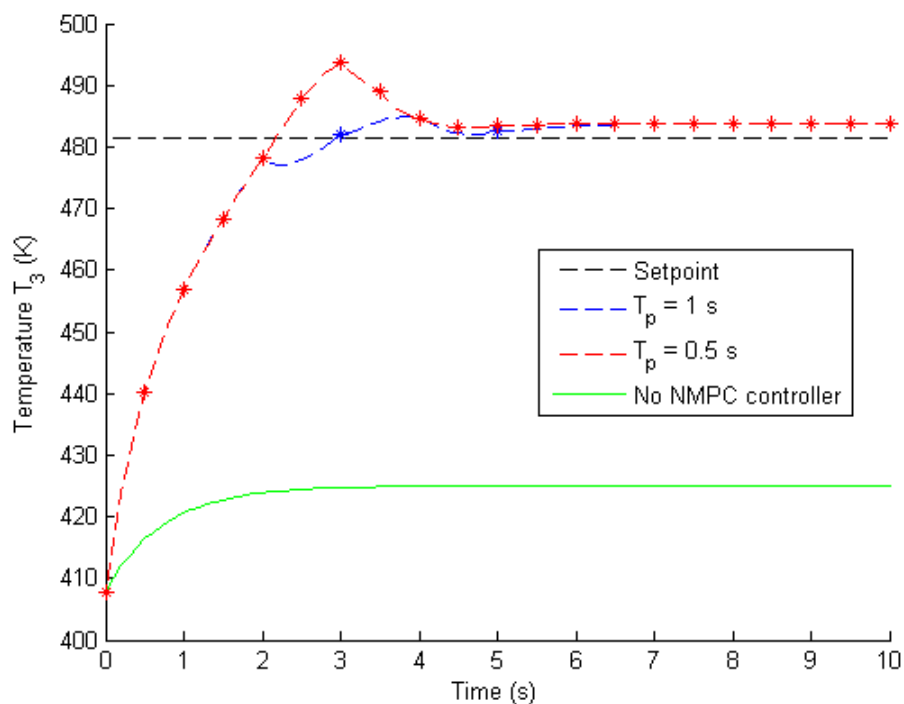


Σχήμα 6.59 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_1 στη δοκιμή Δ6 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

Κεφάλαιο 6: Αποτελέσματα



Σχήμα 6.60 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_2 στη δοκιμή Δ6 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση



Σχήμα 6.61 Η απόκριση της ρυθμιζόμενης μεταβλητής T_3 στη δοκιμή Δ6 με κανονική συνάρτηση κόστους, αντιπαραβαλλόμενη με την απόκριση σε μη αυτόματη ρύθμιση

Η δοκιμή Δ6 είναι αυτή που αναδεικνύει τη χρησιμότητα του σχεδιαζόμενου ρυθμιστή και το πλεονέκτημά του έναντι του μη αυτόματου στο συγκεκριμένο σύστημα. Από τα Σχήματα

6.58 - 6.61 γίνεται εμφανές ότι στην περίπτωση αυτή αποτυγχάνει ο μη αυτόματος ρυθμιστής, και η αιτία που συμβαίνει αυτό δεν είναι άλλη από την πολλαπλότητα: αφού η επιθυμητή κατάσταση βρίσκεται στην περιοχή της πολλαπλότητας, η βηματική επιβολή θα οδηγήσει σε τελική κατάσταση στον ίδιο κλάδο με τον αρχικό (Ενότητα 2.5). Αντίθετα, ο NMPC ρυθμιστής συμπεριφέρεται όπως και στη δοκιμή Δ5 και καταφέρνει να οδηγήσει το σύστημα στον κάτω κλάδο. Αξιοσημείωτο είναι ότι αυτό επιτυγχάνεται δίχως το προβλεπτικό μοντέλο του ρυθμιστή να έχει καμιά γνώση του πάνω κλάδου. Στη δοκιμή αυτή οι αποκρίσεις για τις δύο τιμές T_p έχουν μεγαλύτερες αποκλίσεις από ότι στη Δ5, αλλά το σύστημα οδηγείται και στις δύο περιπτώσεις στην ίδια τελική κατάσταση, η οποία εμφανίζει απόκλιση από την επιθυμητή, όπως στην πρώτη Δ1 δοκιμή, όπου ελήφθη η απόφαση χρήσης της τροποποιημένης συνάρτησης κόστους. Συμπεραίνεται λοιπόν ότι η κανονική συνάρτηση κόστους πρέπει να χρησιμοποιείται για να επιτευχθεί η αλλαγή κλάδου, ενώ η τροποποιημένη όταν το σύστημα ήδη βρίσκεται στον κάτω κλάδο, προκειμένου να μηδενισθεί η απόκλιση μεταξύ τελικής και επιθυμητής κατάστασης.

7 Συμπεράσματα

Στα πλαίσια της εργασίας, έγιναν εκτεταμένες προσομοιώσεις της δυναμικής συμπεριφοράς του συστήματος χημικής απόθεσης από ατμό. Χρησιμοποιώντας ορισμένα από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων αυτών και εφαρμόζοντας την τροποποιημένη μέθοδο των στιγμιοτύπων, όπως παρουσιάστηκε, και την εκπαίδευση κατάλληλου νευρωνικού δικτύου ανατροφοδότησης, κατασκευάστηκαν δύο μη-γραμμικά δυναμικά μοντέλα μειωμένης τάξης για τον κάτω ευσταθή κλάδο της διεργασίας. Από τη σύγκριση των προβλέψεών τους προέκυψε ότι, αντίθετα από ό,τι αναμενόταν, το μοντέλο με μία ιδιοκατάσταση είναι εκείνο που περιγράφει ακριβέστερα το λεπτομερές μοντέλο, και όχι εκείνο με τρεις. Η διαπίστωση αυτή αποδίδεται σε ένα βαθμό στον υπολογιστικό θόρυβο, ενώ εκτιμάται ότι έπαιξε ρόλο και η τροποποίηση της μεθόδου των στιγμιοτύπων. Πλεονέκτημα της μεθόδου με πρακτικό ενδιαφέρον αποτελεί ότι το μοντέλο μπορεί εύκολα να κατασκευασθεί αν διατίθενται ιστορικά δεδομένα δυναμικής συμπεριφοράς, αφού η μέθοδος δεν απαιτεί τίποτε άλλο.

Έπειτα, το μοντέλο που κατασκευάστηκε χρησιμοποιήθηκε για την αυτόματη ρύθμιση της διεργασίας με την τεχνική της ρύθμισης προβλεπτικού μοντέλου. Αρχικά εξετάστηκε η επίδραση των παραμέτρων του ρυθμιστή στο χρόνο λήψης της απόφασης της ρυθμιστικής δράσης, και φάνηκε ότι υπάρχουν περιθώρια για εφαρμογή του συστήματος σε πραγματικό χρόνο.

Στη συνέχεια, πραγματοποιήθηκαν, για δύο τιμές της περιόδου δειγματοληψίας και δύο περιπτώσεις συνάρτησης κόστους, έξι δοκιμές στις οποίες το σημείο λειτουργίας του συστήματος έπρεπε να οδηγηθεί από μια ευσταθή σε μια άλλη ευσταθή μόνιμη κατάσταση. Εξετάστηκε η επίδραση των δύο αυτών χαρακτηριστικών του ρυθμιστή στην ρυθμιστική δράση και την απόκριση του συστήματος, ενώ έγινε σύγκριση με την απόκριση σε αντίστοιχη μη αυτόματη ρύθμιση. Προέκυψε ότι, για περίοδο 1 s, ο αυτόματος ρυθμιστής με την κατάλληλη συνάρτηση κόστους είναι ευσταθής με ομαλή δράση, ακόμη και όταν το μοντέλο δεν περιγράφει καλά το επιθυμητό σημείο λειτουργίας. Στις δοκιμές όπου δεν επιχειρήθηκε αλλαγή κλάδου, η τροποποιημένη συνάρτηση κόστους οδήγησε το σύστημα στην επιθυμητή κατάσταση σε παρόμοιο χρονικό διάστημα με την μη αυτόματη ρύθμιση. Ωστόσο, στις δοκιμές όπου επιχειρήθηκε αλλαγή κλάδου, η κανονική συνάρτηση κόστους οδήγησε επιτυχώς το σύστημα από τον έναν κλάδο στον άλλο, αν και όχι ακριβώς στο επιθυμητό σημείο, την στιγμή που η μη αυτόματη ρύθμιση είτε χρειάστηκε περισσότερο χρόνο, είτε απέτυχε να πραγματοποιήσει την αλλαγή κλάδου.

Ειδικά η τελευταία παρατήρηση θεωρείται πολύ σημαντική, διότι φαίνεται ότι με την κατασκευή μοντέλου μειωμένης τάξης μόνο για την περιοχή ή τον ευσταθή κλάδο επιθυμητής λειτουργίας, ο ρυθμιστής που χρησιμοποιεί το μοντέλο αυτό έχει τη δυνατότητα να επαναφέρει το σύστημα στην επιθυμητή περιοχή λειτουργίας ακόμη κι αν αυτό, λόγω κάποιας διαταραχής, μεταβεί στον μη επιθυμητό ευσταθή κλάδο, από όπου ο τρόπος επιστροφής δεν είναι προφανής, λαμβανομένης υπόψη της πολλαπλότητας καταστάσεων. Με τον τρόπο αυτό, μπορεί να αποτραπεί η μακρά παραμονή του συστήματος σε δυσμενείς, για την ποιότητα του τελικού προϊόντος της διεργασίας,

Κεφάλαιο 7: Συμπεράσματα

συνθήκες λειτουργίας, όπου το υμένιο παράγεται με ρυθμό μικρότερο του βέλτιστου και με αυξημένη ανομοιομορφία.

8 Προτάσεις

Με την ολοκλήρωση της παρούσας εργασίας, αναδεικνύονται πολλαπλές προκλήσεις για μελλοντική δραστηριότητα σε συνέχεια των αποτελεσμάτων που παρουσιάζονται.

Κατ' αρχάς, όπως επισημάνθηκε, το μοντέλο μειωμένης τάξης που κατασκευάστηκε περιγράφει τον κάτω κλάδο του συστήματος, αλλά υπάρχουν περιοχές όπου η πρόβλεψη που επιτυγχάνεται από το νευρωνικό δίκτυο για την δυναμική απόκριση αποκλίνει έντονα από την πραγματικότητα, όπως φάνηκε στην περιοχή του σημείου στροφής. Προτείνεται επομένως να εξεταστούν τρόποι βελτίωσης της πρόβλεψης σε όλες τις περιοχές του κάτω κλάδου, πιθανώς με χρήση περισσότερων δεδομένων από την προβληματική περιοχή για την κατασκευή της βάσης ή την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου.

Ακολούθως, προτείνεται η διαδικασία να επαναληφθεί και για τον πάνω ευσταθή κλάδο. Ενδιαφέρον θα έχει να συγκριθεί το πλήθος των απαιτούμενων ιδιοδιανυσμάτων στους δύο κλάδους, αλλά και η σχέση μεταξύ των κυρίαρχων ιδιοδιανυσμάτων κάθε κλάδου, ώστε να αποκαλυφθεί κατά πόσο διαφέρουν. Ήδη από τα αποτελέσματα έχει φανεί ότι η περιγραφή του πάνω κλάδου από τα ιδιοδιανύσματα του κάτω ενέχει μεγάλο σφάλμα, άρα αναμένεται μεγάλη διαφορά μεταξύ των ιδιοδιανυσμάτων, που θα αντικατοπτρίζει και τη διαφορά στα πεδία ροής και θερμοκρασίας.

Στη συνέχεια, αφού υπάρχουν μοντέλα και για τους δύο κλάδους, εκτιμάται ότι αξίζει να ερευνηθεί εάν οι βάσεις των δύο κλάδων είναι σε θέση από κοινού να περιγράψουν τις μεταβολές όπου το σύστημα αλλάζει κλάδο. Από την έρευνα αυτή μπορεί να φανεί αν, από φυσικής σκοπιάς, η αλλαγή κλάδου είναι μια ομαλή μετάβαση από τα χαρακτηριστικά του ενός κλάδου σε εκείνα του άλλου, ή αν ακολουθείται κάποια περισσότερο σύνθετη τροχιά. Σε κάθε περίπτωση, προτείνεται να κατασκευαστεί αντίστοιχα βάση και μοντέλο και για τις δύο περιπτώσεις αλλαγής κλάδου, δηλαδή από τον πάνω στον κάτω και αντίστροφα.

αν ακολουθείται κάποια περισσότερο σύνθετη τροχιά. Σε κάθε περίπτωση,

Από τη στιγμή που θα υπάρχουν ξεχωριστές βάσεις για τις τέσσερις περιπτώσεις δυναμικής απόκρισης του συστήματος, θεωρείται ενδιαφέρον να γίνει προσπάθεια κατασκευής μοντέλου πρόβλεψης των συντελεστών, πιθανώς με εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου, το οποίο να καλύπτει ενιαία όλες τις περιπτώσεις. Αν αυτό επιτευχθεί, θα σημαίνει την ύπαρξη ενός μοντέλου μειωμένης τάξης που θα περιγράφει ικανοποιητικά όλες τις πτυχές της δυναμικής του συστήματος.

Επιπλέον, προτείνεται για την κατασκευή των πιο πάνω βάσεων να χρησιμοποιηθεί ένα επαυξημένο λεπτομερές μοντέλο, όπου να περιλαμβάνονται και οι χημικές αντιδράσεις, το οποίο θεωρείται εύκολο με βάση τη βιβλιογραφία [1][4][5]. Με τον τρόπο αυτό, οι προβλέψεις του λεπτομερούς και του μειωμένης τάξης μοντέλου θα περιλαμβάνουν και πληροφορίες για τις ποιοτικές προδιαγραφές της διεργασίας, δηλαδή το ρυθμό απόθεσης και την ομοιομορφία του προϊόντος. Αυτή η επαύξηση θα έχει πολλαπλά οφέλη, όπως το σχεδιασμό ενός πιο ρεαλιστικού συστήματος ρύθμισης από αυτό που παρουσιάστηκε, από

την άποψη ότι θα υπάρχει δυνατότητα να ρυθμίζονται άμεσα οι πιο πάνω προδιαγραφές και όχι έμμεσα από τις θερμοκρασίες, αλλά και την αριστοποίηση των συνθηκών λειτουργίας για βελτιστοποίηση των προδιαγραφών.

Ένα ακόμη βήμα που θα έκανε το λεπτομερές μοντέλο πιο ρεαλιστικό θα ήταν η δυνατότητα να μεταβάλλονται με το χρόνο ορισμένες παράμετροι που εδώ θεωρήθηκαν σταθερές, όπως οι θερμοκρασίες των τοιχωμάτων και του υποστρώματος, η θερμοκρασία εισόδου και η πίεση λειτουργίας. Έτσι, αφενός μπορεί να μελετηθεί η επίδραση και αυτών των παραγόντων στα πεδία ροής και θερμοκρασίας και στην ποιότητα του προϊόντος, αφετέρου μπορεί να ελεγχθεί ο ρυθμιστής που σχεδιάστηκε, ή και ο κάθε ρυθμιστής που τυχόν σχεδιασθεί στο μέλλον, ως προς την ικανότητα σταθεροποιητικού ελέγχου και την ευρωστία του.

Όσον αφορά το ρυθμιστή, στην παρούσα εργασία αποδείχθηκε ότι μπορεί να σχεδιασθεί αυτόματος ρυθμιστής που να λειτουργεί εξίσου ικανοποιητικά με τον μη αυτόματο για επιβολές στον ίδιο κλάδο και σαφώς καλύτερα από αυτόν για επιβολές που περιλαμβάνουν αλλαγή κλάδου. Έγινε μια ανάλυση επίδρασης των παραμέτρων του ρυθμιστή στα χαρακτηριστικά του, η οποία ωστόσο σε καμία περίπτωση δεν ήταν εξαντλητική, με συνέπεια ο ρυθμιστής να μην μπορεί να χαρακτηριστεί ως ο βέλτιστος που θα μπορούσε να σχεδιασθεί με την τεχνική του προβλεπτικού μοντέλου. Ως εκ τούτου, περαιτέρω διερεύνηση θα μπορούσε να γίνει στην κατεύθυνση αυτή, πραγματοποιώντας μάλιστα και δοκιμές με μεταβολή παραμέτρων των οποίων οι τιμές εδώ θεωρήθηκαν παντού σταθερές, όπως του ορίζοντα πρόβλεψης και ελέγχου, ή ακόμη χρησιμοποιώντας διαφορετικές τιμές για τους δύο ορίζοντες και μη μηδενικές τιμές για το συντελεστή λ του όρου ομαλότητας στη συνάρτηση κόστους.

Ιδιαίτερα για τη συνάρτηση κόστους, χρησιμοποιήθηκαν δύο εκδοχές της οι οποίες φάνηκε ότι ενδείκνυνται για διαφορετικές σκοπούς κατά την εφαρμογή του ρυθμιστή. Προτείνεται επομένως είτε να συγχωνευθούν οι δύο συναρτήσεις σε μία, είτε να αναπτυχθεί κάποιο αυτόματο κριτήριο που θα επιβάλει ανά περίπτωση τη χρήση της σωστής συνάρτησης, ώστε μετά την επιτυχή αλλαγή κλάδου το σύστημα να οδηγείται και στο επιθυμητό σημείο λειτουργίας χωρίς απόκλιση. Θεωρείται, εξάλλου, κομβική η χρήση της τροποποιημένης συνάρτησης κόστους, ακόμη κι αν αναπτυσσόταν πιο ακριβές μοντέλο του συστήματος, για λόγους ευρωστίας του ρυθμιστή.

Τέλος, είναι φανερό ότι όσο κι αν τελειοποιηθούν η λεπτομερής μοντελοποίηση του συστήματος, το μοντέλο μειωμένης τάξης και ο ρυθμιστής, τελικός κριτής κάθε προσπάθειας που βασίζεται σε θεωρητική ανάλυση και προσομοιώσεις είναι το πείραμα. Στη βάση αυτή, κρίνεται απαραίτητο ο ρυθμιστής που σχεδιάστηκε, ή άλλος που θα σχεδιασθεί με την μεθοδολογία που αναπτύχθηκε στην παρούσα εργασία αλλά θα στηρίζεται στη ρύθμιση των προδιαγραφών, να εφαρμοσθεί σε έναν πραγματικό αντιδραστήρα χημικής απόθεσης από ατμό και να επαληθευθούν –ή όχι– στην πράξη οι παρατηρήσεις τουλάχιστον της τελευταίας δοκιμής. Τυχόν ασυνέπειες σε σχέση με την προσομοίωση θα μπορούσαν να οδηγήσουν σε αναθεώρηση στοιχείων στη ακολουθούμενη μεθοδολογία ή και τη μοντελοποίηση του συστήματος, ενώ αντίθετα

συμφωνία με την προσομοίωση θα ήταν ένα πρώτο βήμα για την ενσωμάτωση της μεθοδολογίας στη βιομηχανική πρακτική.

Σε σχέση με τα παραπάνω, αξίζει να τονισθεί emphaticά ότι σε καμιά περίπτωση η μοντελοποίηση και η προσομοίωση δεν θεωρούνται από τον γράφοντα ως υποδεέστερες από το πείραμα. Αντιθέτως, χάρη στην προσομοίωση, που δεν είναι παρά η μαζική και ταχύτατη πραγματοποίηση θεωρητικών υπολογισμών, μπορούν να λαμβάνονται δεδομένα για τα διάφορα συστήματα που δεν θα ήταν δυνατό να ληφθούν μέσω πειράματος, όπως τα κατανεμημένα πεδία ροής και θερμοκρασίας, και μάλιστα σε σύντομο χρονικό διάστημα. Ιδιαίτερα δε όσον αφορά το μελετούμενο στην εργασία σύστημα, χάρη σε προσομοιώσεις έγινε δυνατό να εντοπισθεί και να αποδειχθεί η πολλαπλότητα των καταστάσεων, και μέσω αυτής να ερμηνευθούν μέχρι τότε αντιφατικές και ακατανόητες πειραματικές παρατηρήσεις.

9 Βιβλιογραφία

- [1] Cheimarios, N., Koronaki, E.D., Boudouvis, A.G., “Enabling a commercial computational fluid dynamics code to perform certain nonlinear analysis tasks.” *Computers and Chemical Engineering* **35**, 2632-2645 (2011)
- [2] Xie, W., Bonis, I., Theodoropoulos, C., “Linear MPC based on data-driven Artificial Neural Networks for large-scale nonlinear distributed parameter systems.” Proceedings of the 22nd European Symposium on Computer Aided Process Engineering, London, 2012
- [3] Xie, W., Bonis, I., Theodoropoulos, C., “Data-driven model reduction-based nonlinear MPC for large-scale distributed parameter systems.” *Journal of Process Control* **35**, 50-58 (2015)
- [4] Χειμαριός, Ν., Προσομοίωση πολλαπλών χωρικών κλιμάκων και συστημική ανάλυση διεργασιών χημικής απόθεσης από ατμό. Διδακτορική διατριβή, Σχολή Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π., Αθήνα, 2012
- [5] Kleijn, C. R., “A mathematical model of the hydrodynamics and gas-phase reactions in silicon LPCVD in a single-wafer reactor.” *Journal of the Electrochemical Society* **138**, 2190-2200 (1991)
- [6] Ansys FLUENT 12.0/12.1 Documentation, ANSYS Inc., 2009
- [7] Ansys v13.0, 2010: <http://www.ansys.com/>
- [8] Versteeg, H. K., Malalasekera, W., An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method (2nd ed.). New York: Pearson, 2007
- [9] Matlab R2014a: <http://www.mathworks.com/products/matlab/>
- [10] Schilders, W.H.A., van der Vorst, H.A., Rommes, J., Model Order Reduction. Theory, Research Aspects and Applications, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008
- [11] Ασημακόπουλος, Δ.Κ., Λυγερού, Β.Ι., Αραμπατζής, Γ.Α., Μεταφορά Θερμότητας και Μάζας, Παπασωτηρίου, Αθήνα, 2012
- [12] Newman, A.J., Model Reduction via the Karhunen-Loeve Expansion Part II: Some Elementary Examples. Technical Report T.R. 96-33, Inst. Systems Research, April 1996
- [13] Sirovich, L., “Turbulence and the dynamics of coherent structures. Parts I—III.” *Quarterly of Applied Mathematics* **45**(3), 561–590 (1987)
- [14] Lewis, F.L., Jagannathan, S., Yeşildirek, A., Neural Network Control of Robot Manipulators and Nonlinear Systems, Taylor & Francis, 1999
- [15] Levitan, I.B., Kaczmarek, L.K., The Neuron. Cell and Molecular Biology, 4th edition, Oxford University Press, 2015

Κεφάλαιο 9: Βιβλιογραφία

[16] Cornell University Course Blog for INFO 2040:

<https://blogs.cornell.edu/info2040/2015/09/08/neural-networks-and-machine-learning/>

Accessed: 22/7/2016

[17] Azevedo, F.A.C., Carvalho, L.R.B., Grinberg, L.T., Farfel, J.M., Ferretti, R.E.L., Leite, R.E.P., Filho, W.J., Lent, R., Herculano-Houzel, S., "Equal numbers of neuronal and nonneuronal cells make the human brain an isometrically scaled-up primate brain." *The Journal of Comparative Neurology* **513**(5), 532–541 (2009)

[18] Alonso-Nanclares, L., Gonzalez-Soriano, J., Rodriguez, J.R., DeFelipe, J., "Gender differences in human cortical synaptic density." *Proceedings of the National Academy of Sciences* **105**(38), 14615–14619 (2008)

[19] Jain, A.K., Mao, J., Mohiuddin, K.M., "Artificial Neural Networks: A Tutorial." *Computer* **29**(3), 31-44 (1996)

[20] Siegelmann, H.T., Horne, B.G., Lee Giles, C., "Computational Capabilities of Recurrent NARX Neural Networks." *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics – Part B: Cybernetics* **27**(2), 208-215 (1997)

[21] Lin T., Horne, B.G., Tiño, P., Lee Giles, C. "Learning Long-Term Dependencies in NARX Recurrent Neural Networks." *IEEE Transactions on Neural Networks* **7**(6), 1329-1338 (1996)

[22] Hagan, M.T., Menhaj, M.B., "Training Feedforward Networks with the Marquardt Algorithm." *IEEE Transactions on Neural Networks* **5**(6), 989-993 (1994)

[23] Νταουτίδης, Π., Μαστρογεωργόπουλος, Σ., Παπαδοπούλου, Σ., Έλεγχος Διεργασιών, Εκδόσεις Τζιόλα, Θεσσαλονίκη, 2015

[24] Tatjewski, P., Advanced Control of Industrial Processes – Structures and Algorithms, Springer-Verlag London Limited, 2007

[25] Qin, S.J., Badgwell, T.A., "An Overview of Nonlinear Model Predictive Control Applications." *Progress in Systems and Control Theory* **26**, 369-392 (2000)

[26] Alaña, J.E., Theodoropoulos, C., "Optimal location of measurements for parameter estimation of distributed parameter systems." *Computers and Chemical Engineering* **35**, 106-120 (2011)

[27] Nocedal, J., Wright, S.J., Numerical Optimization, Springer, 2006

