Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Χημικών Μηχανικών

Τομέας ΙΙ: Ανάλυσης, Σχεδιασμού και Ανάπτυξης Διεργασιών και Συστημάτων

Διπλωματική Εργασία

Μείωση τάξης μοντέλων μη γραμμικών δυναμικών συστημάτων με τεχνικές μηχανικής μάθησης: από την POD στα Diffusion Maps

Νίκας Αθανάσιος

Επιβλέπων Καθηγητής

Ανδρέας Γ. Μπουντουβής

Αθήνα, 2019

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες i

Περίληψη iii

Abstract v

1. Εισαγωγή 1

2. Η μέθοδος POD-Galerkin 4

2.1 Διατύπωση του προβλήματος 4

2.2 Η μέθοδος Galerkin 4

2.3 Ανάλυση Κυρίων Συνιστοσών 7

2.3.1 Γενικά 7

2.3.2 Κατασκευή Βάσης και ορθής προβολής 8

2.3.3 Επιλογή διάστασης βάσης 9

2.4 Η μέθοδος των στιγμιοτύπων 10

2.5 Αξιολόγηση μείωσης τάξης – Σφάλματα 11

2.6 Εφαρμογές 12

2.6.1 Εφαρμογή 1: Παραμετροποιημένη μη ιξώδης εξίσωση Burgers 12

Σενάριο 1 15

Σενάριο 2 22

Σενάριο 3 25

2.6.2 Εφαρμογή 2: Brusselator 28

Σενάριο 1 32

Σενάριο 2 39

Σενάριο 3 44

3. Διεύρυνση της βάσης POD 48

3.1 Εισαγωγή 48

3.2 Μηχανισμός διεύρυνσης της βάσης με διαμερισμό 49
3.2.1 Δενδρική Δομή 49
3.2.2 Διαμερισμός της βάσης 51
3.2.3 Κατασκευή του δέντρου 53
3.3 Προσδιορισμός συσχετισμένων μεταβλητών 54
3.4 Εφαρμογές 55
3.4.1 Εφαρμογή 1: Παραμετροποιημένη μη ιξώδης εξίσωση Burgers 56
Σενάριο 1 57
Σενάριο 2 60
Σενάριο 3 68
3.4.2 Εφαρμογή 2: Brusselator 71
Σενάριο 1 71
Σενάρια 2 και 3 72
4. Δυναμική σε μη γραμμικές πολλαπλότητες 76
4.1 Εισαγωγή 76
4.2 Diffusion Maps 77
4.3 Επιλογή διάστασης και τιμής παραμέτρου ε 81
4.4 Δυναμική στο χώρο DMAP 83
4.4.1 Επέκταση Nyström 84
4.4.2 Παρεμβολή με συναρτήσεις ακτινικής βάσης 84
4.4.3 Μείωση τάξης 85
4.5 Εφαρμογές 86
4.5.1 Εφαρμογή 1: Εξίσωση Chafee – Infante 87
4.5.2 Εφαρμογή 2: Παραμετροποιημένη μη ιξώδης εξίσωση Burgers 95
5. Συμπεράσματα 104

6. Προτάσεις.....107

7. Βιβλιογραφία.....108

Ευχαριστίες

Με την ολοκλήρωση της παρούσας διπλωματικής εργασίας δεν μπορώ παρά να αισθάνομαι τυχερός. Μέσω αυτής, ανοίχθηκε μπροστά μου ένα πολύ ενδιαφέρον και σύγχρονο επιστημονικό πεδίο και μου δόθηκε η ευκαιρία να αποκτήσω γνώσεις, τις οποίες ποτέ δεν περίμενα ότι θα αποκτήσω κατά τα φοιτητικά μου χρόνια. Ο κύκλος των προπτυχιακών σπουδών, κλείνει για μένα με ιδιαίτερη χαρά και ενθουσιασμό και δεν μπορώ παρά να ευχαριστήσω θερμά τους ανθρώπους, οι οποίοι έκαναν το γεγονός αυτό πραγματικότητα.

Πρώτα απ' όλα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή κ. Ανδρέα Μπουντουβή. Πέραν της ευκαιρίας που μου έδωσε να εκπονήσω τη διπλωματική μου εργασία υπό την επίβλεψη του ίδιου και της ερευνητικής του ομάδας, η συνεισφορά του κατά τα φοιτητικά μου χρόνια ήταν για μένα ιδιαίτερα σημαντική. Ο ενθουσιασμός μου για τους υπολογισμούς πηγάζει από τα δικά του μαθήματα, ενώ οι συμβουλές και οδηγίες του συνέβαλαν σημαντικά στην ακαδημαϊκή μου πορεία και στον τρόπο σκέψης μου. Τέλος, θέλω να τον ευχαριστήσω ιδιαίτερα για τις πολλές ευκαιρίες που μου έδωσε κατά τη διάρκεια των σπουδών μου, όπως η δυνατότητα να εκπονήσω τη διπλωματική μου, αλλά και κάποιο διδακτορικό στο Μόναχο και ας αποφάσισα τελικά ο ίδιος το αντίθετο.

Εξίσου θερμά θα ήθελα να ευχαριστήσω την Δρα Ελένη Κορωνάκη, η οποία πίστεψε σε μένα και συχνά περισσότερο από ότι πίστευα εγώ ο ίδιος. Νιώθω πολύ τυχερός που είχα την ευκαιρία να συνεργαστώ μαζί της. Χάρη στην εμπιστοσύνη που μου έδειξε, η εργασία αυτή πήρε μια διαφορετική τροχιά και άγγιξε νέες πτυχές, οι οποίες δεν υπήρχαν στο αρχικό πλάνο. Λόγω της εμπιστοσύνης αυτής, απέκτησα γνώσεις που δεν περίμενα ποτέ ότι θα αποκτήσω. Οι συζητήσεις μου μαζί της και οι συμβουλές της, με επηρέασαν τόσο ως άνθρωπο όσο και ως επιστήμονα. Επίσης θέλω να την ευχαριστήσω ιδιαίτερα για την στήριξη και την επιμονή της να ακολουθήσω κάποιο διδακτορικό, ακόμα και αν εγώ αποφάσισα διαφορετικά. Της εύχομαι τα καλύτερα για την ακαδημαϊκή της πορεία και τη ζωή της στο Λουξεμβούργο.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω τη φίλη μου Αναστασία και τους φίλους μου, οι οποίοι έκαναν αυτά τα πέντε χρόνια τα πιο ευχάριστα της ζωής μου, πίστευαν πάντα σε μένα και ήταν εκεί να με ακούσουν και να με στηρίξουν σε κάθε δυσκολία.

Τέλος, το μεγαλύτερο ευχαριστώ το οφείλω στην οικογένεια μου, οι οποίοι με στηρίζουν ανελλιπώς όλα αυτά τα χρόνια, πιστεύουν σε μένα, φρόντισαν να μην μου λείψει απολύτως τίποτα και με έκαναν τον άνθρωπο που είμαι σήμερα.

Περίληψη

Τα υπολογιστικά μοντέλα διεργασιών αποτελούν σήμερα ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο, λόγω της ακρίβειας και της αξιοπιστίας που προσφέρουν. Τα μοντέλα αυτά, συνήθως χαρακτηρίζονται από πολλούς βαθμούς ελευθερίας και σημαντική πολυπλοκότητα, λόγω της εγγενούς μη γραμμικότητας των περισσότερων ρεαλιστικών διεργασιών. Κατά συνέπεια, η δυναμική προσομοίωση τους απαιτεί πολύ χρόνο και υπολογιστικούς πόρους. Το γεγονός αυτό δημιουργεί ένα υπολογιστικό «φράγμα», καθιστώντας τα μη αξιοποιήσιμα σε εφαρμογές που οι υπολογισμοί απαιτούνται σε πραγματικό χρόνο ή πρέπει να γίνουν πολλές φορές.

Στο πλαίσιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας μελετήθηκε η μείωση τάξης μοντέλου μη γραμμικών δυναμικών συστημάτων, η οποία αποτελεί μια πολλά υποσχόμενη λύση σε αυτό το υπολογιστικό πρόβλημα. Κατά τη διαδικασία μείωσης τάξης ακολουθούνται τρία βασικά διακριτά στάδια: 1) προσομοίωση του πλήρους μοντέλου και συλλογή δεδομένων, 2) εφαρμογή κάποιου αλγόριθμου μηχανικής μάθησης στα δεδομένα για τον υπολογισμό ενός μικρής διάστασης υπόχωρου ή μιας μη γραμμικής πολλαπλότητας που μπορεί να τα παράγει με ακρίβεια, 3) μείωση τάξης του συστήματος αξιοποιώντας το αποτέλεσμα της διαδικασίας μηχανικής μάθησης.

Αρχικά παρουσιάζεται και εφαρμόζεται η μέθοδος POD-Galerkin, η οποία αποτελεί τη βασική μέθοδο μείωσης τάξης μη γραμμικών συστημάτων. Η POD-Galerkin χρησιμοποιεί την Ανάλυση Κυρίων Συνιστωσών κατά το στάδιο μηχανικής μάθησης και την προβολή Galerkin για τη μείωση τάξης του συστήματος. Κατά την εφαρμογή της σε δυο μη γραμμικά προβλήματα, προκύπτουν δυο βασικοί περιορισμοί της μεθόδου: 1) η ακρίβεια και η αξιοπιστία του μοντέλου μειωμένης τάξης εξαρτώνται σε σημαντικό βαθμό από το στάδιο συλλογής δεδομένων, 2) ο υπολογισμός ενός γραμμικού υπόχωρου μέσω της Ανάλυσης Κυρίων Συνιστωσών δεν επαρκεί για τη δραστική μείωση τάξης του συστήματος.

Στη συνέχεια, για την αντιμετώπιση του πρώτου περιορισμού, προτείνεται και εφαρμόζεται μια φθηνή μεθοδολογία, υπό την έννοια ότι δεν απαιτούνται νέες ακριβείς

και συνεπώς ακριβές προσομοιώσεις του πλήρους συστήματος, εκ των υστέρων βελτίωσης του μοντέλου μειωμένης τάξης. Η μεθοδολογία αυτή απαιτεί μόνο ορισμένες απλές «διεργασίες» στα διανύσματα βάσης που προκύπτουν από την Ανάλυση Κυρίων Συνιστωσών. Για την αντιμετώπιση του δεύτερου περιορισμού προτείνεται και εφαρμόζεται μια εναλλακτική μεθοδολογία μείωσης τάξης, η οποία χρησιμοποιεί απεικονίσεις τύπου διάχυσης (Diffusion Maps) κατά το στάδιο μηχανικής μάθησης, για τον υπολογισμό μιας μικρής διάστασης μη γραμμικής πολλαπλότητας, και την επέκταση Nyström για τη μείωση τάξης του συστήματος.

Από την εργασία προκύπτουν σημαντικά συμπεράσματα και για τις τρεις μεθοδολογίες όσον αφορά τη μείωση τάξης, τη μείωση σε υπολογιστικό κόστος και την ακρίβεια.

Abstract

Computational models of processes have become an important tool across many applications, due to their high accuracy and reliability. However, they are often high dimensional and so complex that their simulation consumes a significant amount of time and computational resources. This computational barrier precludes the integration of such models in important scenarios that are real time or many query in nature.

In this Diploma Thesis, the model order reduction of nonlinear dynamical systems was studied, as a promising solution to this computational barrier. The model order reduction process follows three discrete steps: 1) simulation of the full order model and data collection, 2) machine learning on the data to compute a low dimensional subspace or nonlinear manifold, 3) reduction utilizing the results of machine learning.

Initially, POD-Galerkin is presented and applied, as the basic nonlinear model reduction method. POD-Galerkin uses the Principal Components Analysis during the machine learning step and a Galerkin projection to reduce the order of the system. Through its application, two major shortcomings of the method are highlighted: 1) the accuracy and reliability of the model is strongly dependent on the data collection step, 2) computing a linear subspace through Principal Components Analysis is often inadequate for a drastic reduction of the system's dimension.

Subsequently, to address the first shortcoming, a cheap - in the sense that no expensive simulations of the large scale model are required - a posteriori refinemenet method is applied. The method requires only a few simple operations on the Principal Components basis vectors. To address the second shortcoming, an alternative method is utilized, using Diffusion Maps at the second step to compute a low dimensional nonlinear manifold, and the Nyström extension to reduce the system's order.

Throughout this Thesis, several conclusions are drawn regarding the proposed methods, with respect to the reduction in dimension, computational cost and the accomplished accuracy.

Keywords: Model order reduction, machine learning, POD-Galerking, h-adaptive refinement, Diffusion Maps

1. Εισαγωγή

Τα τελευταία χρόνια, σε πολλά πεδία της μηχανικής και της επιστήμης, η προσομοίωση συστημάτων μεγάλης κλίμακας αποτελεί σημαντικό εργαλείο για μια πληθώρα εφαρμογών. Η ανάπτυξη προηγμένων και εύχρηστων αριθμητικών εργαλείων (εμπορικοί CFD κώδικες κ.α.) παρέχει τη δυνατότητα μοντελοποίησης και προσομοίωσης τέτοιων συστημάτων με μεγάλη ακρίβεια και αξιοπιστία. Παρά την ραγδαία εξέλιξη της τεχνολογίας και της ισχύος των ηλεκτρονικών υπολογιστών, η επίλυση μεγάλων και πολύπλοκων προβλήματων απαιτεί, ακόμα και σήμερα, περιοριστικά πολύ χρόνο και υπολογιστικούς πόρους. Για αυτό τέτοια μοντέλα δεν μπορούν να αξιοποιηθούν σε εφαρμογές που είτε απαιτούν υπολογισμούς σε πραγματικό χρόνο (π.χ. ρύθμιση) είτε οι υπολογισμοί πρέπει να γίνουν πολλές φορές (π.χ. βέλτιστος σχεδιασμός ή ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας) [1].

Οι τεχνικές μείωσης τάξης μοντέλου (Model Order Reduction) έχουν αναδειχθεί ως μια πολλά υποσχόμενη λύση στην υπέρβαση αυτού του υπολογιστικού «φράγματος». Στόχος τους είναι η κατασκευή ενός μικρής διάστασης και πολυπλοκότητας υπολογιστικού μοντέλου (reduced order model - ROM, surrogate model), το οποίο παράλληλα θα μπορεί να αποτυπώνει, όσο το δυνατόν καλύτερα, τη συμπεριφορά εισόδου – εξόδου του μοντέλου πλήρους τάξης (Full Order Model - FOM). Η μείωση τάξης μοντέλου υπερτερεί άλλων στρατηγικών surrogate modeling, όπως απλοποίηση της φυσικής ή data fitting, καθώς βασίζεται στη φυσική του προβλήματος και μπορεί να αποδίδει επιταχύνσεις ταυτόχρονα [2].

Έχει φανεί ότι τέτοιες μεθοδολογίες παράγουν γρήγορες και ακριβείς προβλέψεις όταν εφαρμόζονται σε προβλήματα όπως τα γραμμικά χρονικά αμετάβλητα συστήματα (Linear Time Invariant Systems). Στη γενική περίπτωση των μη γραμμικών συστημάτων όμως, η εφαρμογή τους αποδεικνύεται σημαντικά δυσκολότερη και συχνά μη αποδοτική τόσο σε επίπεδο ακρίβειας όσο και σε επίπεδο μείωσης του υπολογιστικού κόστους [2]. Τη βασική μεθοδολογία μείωσης τάξης μη γραμμικών συστημάτων αποτελεί η POD-Galerkin. Η μέθοδος ακολουθεί τρία βασικά διακριτά στάδια:

1) **Συλλογή δεδομένων:** προσομοίωση του πλήρους μοντέλου για διάφορες αρχικές συνθήκες και τιμές παραμέτρων.
2) **Μηχανική μάθηση:** ανίχνευση δομών στα δεδομένα, υπό την έννοια κάποιου μικρής διάστασης υπόχωρου, ο οποίος προσεγγίζει με ικανοποιητική ακρίβεια τα δεδομένα, μέσω της ανάλυσης κυρίων συνιστωσών.
3) **Μείωση τάξης:** Μείωση του κόστους επίλυσης του συστήματος, μέσω προβολής των εξισώσεων σε αυτό τον χαμηλής διάστασης υπόχωρο.

Κατά την εφαρμογή της μεθόδου POD-Galerkin αναδεικνύονται δυο βασικοί περιορισμοί:

1) Η ακρίβεια του μοντέλου μειωμένης τάξης εξαρτάται ισχυρά από το στάδιο συλλογής δεδομένων. Αν η συλλογή δεδομένων δεν έχει γίνει κατάλληλα ώστε να αποκαλύψει όλες τις πτυχές της δυναμικής του πλήρους συστήματος, τότε η ακρίβεια του μοντέλου μειωμένης τάξης περιορίζεται στη «γειτονιά» των τιμών παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή του. Το γεγονός αυτό εισάγει αβεβαιότητα στις προβλέψεις του μοντέλου, καθιστώντας το συχνά μη αξιόπιστο [3].
2) Η POD-Galerkin υποθέτει ότι τα δεδομένα μπορούν να παράγονται με ακρίβεια από κάποιο γραμμικό υπόχωρο. Σε πολλές περιπτώσεις η υπόθεση αυτή δεν επαρκεί για την κατασκευή μοντέλων δραστικά μικρότερης τάξης. Η διάσταση του μοντέλου πρέπει να δατηρηθεί αρκετά μεγάλη, ώστε να παράγονται ικανοποιητικές προβλέψεις [1].

Στόχος της παρούσας διπλωματικής είναι η μεθοδολογική παρουσίαση, εφαρμογή, διερεύνηση και ανάδειξη των περιορισμών της μεθόδου POD-Galerkin, μέσα από ενδιαφέροντα και χαρακτηριστικά, από δυναμικής σκοπιάς, μη γραμμικά πρβλήματα. Στη συνέχεια προτείνονται και εφαρμόζονται δυο μέθοδοι για την αντιμετώπιση αυτών των περιορισμών. Η πρώτη μεθοδολογία εφαρμόζεται συμπληρωματικά με την POD-Galerkin, ως μια φθηνή εκ των υστέρων βελτίωση του μοντέλου μειωμένης τάξης μέσω διαμερισμού της βάσης, όταν οι προβλέψεις του κρίνονται ανακριβείς [3]. Η δεύτερη μεθοδολογία αποτελεί μια εναλλακτική, μη γραμμική μέθοδο μείωσης τάξης μοντέλου. Αντί για έναν γραμμικό υπόχωρο, αναζητείται μια μικρής διάστασης και μη γραμμική πολλαπλότητα

(manifold) και διατυπώνονται οι εξισώσεις του συστήματος πάνω σε αυτή με σκοπό την δραστικότερη μείωση της τάξης του συστήματος [4].

Η διπλωματική εργασία διαρθρώνεται ως εξής: Αρχικά αναπτύσσεται το θεωρητικό υπόβαρθο της μεθοδολογίας POD-Galerkin και παρουσιάζονται εφαρμογές της σε δυο μη γραμμικά προβλήματα (Κεφάλαιο 2). Μέσω των εφαρμογών αυτών αναδεικνύονται οι περιορισμοί που αναφέρθηκαν. Στα επόμενα δυο κεφάλαια παρουσιάζονται οι δυο μεθοδολογίες προς αντιμετώπιση αυτών των περιορισμών, καθώς και εφαρμογές και σύγκριση/αξιολόγηση αποτελεσμάτων (Κεφάλαια 3 και 4). Τέλος, συνοψίζονται τα βασικά συμπεράσματα που προκύπτουν κατά τη μήκος της εργασίας (Κεφάλαιο 5) και γίνονται προτάσεις για περαιτέρω έρευνα (Κεφάλαιο 6).

2. Η μέθοδος POD-Galerkin

2.1 Διατύπωση του προβλήματος

Έστω το δυναμικό σύστημα:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\mu}) \tag{2.1}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}) \tag{2.2}$$

όπου $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ είναι το διάνυσμα μεταβλητών κατάστασης, $\boldsymbol{\mu} \in D$ είναι οι παράμετροι/είσοδοι του συστήματος, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n_y}$ το διάνυσμα μεταβλητών εξόδου και $\mathbf{f}: \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ και $\mathbf{g}: \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^{n_y}$ τελεστές, όπου ο $\mathbf{f}$ μπορεί να περιλαμβάνει γραμμικούς και μη γραμμικούς όρους και $\mathbf{g}$ είναι ο τελεστής εισόδου-εξόδου του συστήματος. Τέτοια συστήματα μπορούν να προκύψουν για παράδειγμα, από τη χωρική διακριτοποίηση παραμετροποιημένων μερικών διαφορικών εξισώσεων (parameterized PDEs). Οι παράμετροι $\boldsymbol{\mu}$ μπορεί να αφορούν συνοριακές συνθήκες, να είναι γεωμετρικές παράμετροι, ιδιότητες υλικών κ.α. [3]. Στόχος της μείωσης τάξης είναι η μείωση της διάστασης του διανύσματος κατάστασης, δηλαδή η εύρεση ενός νέου δυναμικού συστήματος:

$$\frac{d\hat{\mathbf{x}}}{dt} = \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}}, t, \boldsymbol{\mu}) \tag{2.3}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{z}(\hat{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\mu}) \tag{2.4}$$

όπου $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^d$ - με την διάσταση d να είναι ιδανικά πολύ μικρότερη από την αρχική διάσταση N - και τους τελεστές $\mathbf{f}$ και $\mathbf{g}$ να προσεγγίζονται από τους $\mathbf{h}: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ και $\boldsymbol{z}: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{n_y}$, αντίστοιχα, ώστε το σφάλμα προσέγγισης να είναι μικρό και να διατηρούνται οι ιδιότητες του πλήρους συστήματος, όπως η ευστάθεια και η συμπεριφορά ειδόδου – εξόδου [5].

2.2 Η μέθοδος Galerkin

Έστω ότι το σύστημα περιγράφεται από τη μερική διαφορική εξίσωση:

$$\frac{\partial u(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - N(u(\mathbf{r}, t)) = 0 \quad u \in V, \quad \mathbf{r} \in \Omega, \quad t > 0 \tag{2.5}$$

με κατάλληλες αρχική και συνοριακές συνθήκες, όπου ο $N(\cdot)$ αποτελεί έναν μη γραμμικό διαφορικό τελεστή στο χώρο, Ω ο χώρος και t ο χρόνος [6]. Έστω η προσεγγιστική λύση της Εξίσωσης 2.5:

$$\mathrm{u}(\mathbf{r},\mathrm{t}) \approx \tilde{\mathrm{u}}(\mathbf{r},\mathrm{t}) = \sum_{j=1}^{\mathrm{d}} \varphi_{\mathrm{j}}(\mathbf{r})\alpha_{\mathrm{j}}(\mathrm{t}) \tag{2.6}$$

όπου η εξάρτηση της λύσης από τη θέση καθορίζεται από τις συναρτήσεις βάσης $\varphi_{\mathrm{j}}(\mathbf{r})$, οι οποίες σχηματίζουν τη βάση ενός d-διάστατου συναρτησιακού υπόχωρου $\mathrm{V_d} \subset \mathrm{V}$, με τον οποίο προσεγγίζεται το πλήρες, απείρων διαστάσεων σύστημα, ενώ η εξάρτηση από το χρόνο καθορίζεται από τους συντελεστές $\alpha_{\mathrm{j}}(\mathrm{t})$ [5]. Τα υπόλοιπα,

$$\mathrm{R}(\tilde{\mathrm{u}}) = \frac{\partial \tilde{\mathrm{u}}(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial \mathrm{t}} - N(\tilde{\mathrm{u}}(\mathbf{r},\mathrm{t})) \tag{2.7}$$

$$\mathrm{R_0}(\tilde{\mathrm{u}}) = \mathrm{u}(\mathbf{r},\mathrm{t}) - \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{d}} \varphi_{\mathrm{j}}(\mathbf{r})\alpha_{\mathrm{j}}(0) \tag{2.8}$$

αποτελούν μέτρο του κατά πόσο η προσεγγιστική λύση ũ ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση και την αρχική συνθήκη αντίστοιχα. Όσο το πλήθος d των συναρτήσεων βάσης αυξάνει, κανείς ελπίζει ότι τα υπόλοιπα αυτά θα γίνονται όλο και μικρότερα· η ακριβής λύση λαμβάνεται όταν και τα δυο υπόλοιπα μηδενίζονται [6]. Η μέθοδος Galerkin αναζητά τη λύση του (2.1) που μηδενίζει καθένα από τα σταθμισμένα υπόλοιπα [7],

$$\mathrm{R_i} \equiv \int_{\Omega} \left[\frac{\partial \mathrm{u}(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial \mathrm{t}} - N(\mathrm{u}(\mathbf{r},\mathrm{t}))\right] \varphi_{\mathrm{i}}(\mathbf{r})\mathrm{d}\Omega, \quad \text{δηλαδή } \mathrm{R_i} = 0, \mathrm{i} = 1,2,\dots,\mathrm{d} \tag{2.9}$$

Η μέθοδος Galerkin δηλαδή, επιβάλει το υπόλοιπο R να είναι ορθογώνιο ως προς τον υπόχωρο $\mathrm{V_d}$ που σχηματίζουν οι συναρτήσεις φ_{j}. Βασική ιδιότητα της προσέγγισης Galerkin είναι ότι το σφάλμα $\varepsilon = \mathrm{u} - \tilde{\mathrm{u}}$ είναι ορθογώνιο προς τον επιλεγμένο υπόχωρο. Κατά συνέπεια, η ũ είναι η βέλτιση προσέγγιση της u στον V_d. [8]

Αντικαθιστώντας όπου $\mathrm{u} \approx \tilde{\mathrm{u}}$ και έπειτα από κατάλληλες πράξεις προκύπτει το παρακάτω σύστημα d συνήθων διαφορικών εξισώσεων ως προς τους συντελεστές $\alpha_{\mathrm{j}}(\mathrm{t})$ [5],

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = \int_{\Omega} \left[N\left(\sum_{j=1}^{d} \varphi_j(\mathbf{r})\alpha_j(t) \right) \right] \varphi_i(\mathbf{r}) d\Omega, \qquad i = 1,2,\dots,d \tag{2.10}$$

με αρχική συνθήκη,

$$\alpha_i(0) = \int_{\Omega} u(\mathbf{r},0)\, \varphi_i(\mathbf{r}) d\Omega, \qquad i = 1,2,\dots,d \tag{2.11}$$

Κατά αναλογία, για το πρότυπο μη γραμμικό πρόβλημα (2.1) και σε μορφή πινάκων η διαδικασία έχει ώς εξής:

1) Προσέγγιση της λύσης

$$\mathbf{x} \approx \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{\Phi}\hat{\mathbf{x}} \tag{2.12}$$

$$\mathbf{\Phi}\frac{d\hat{\mathbf{x}}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{\Phi}\hat{\mathbf{x}}, t, \boldsymbol{\mu}) \tag{2.13}$$

2) Προβολή Galerkin

$$\mathbf{\Phi}^T\mathbf{\Phi}\frac{d\hat{\mathbf{x}}}{dt} = \mathbf{\Phi}^T\mathbf{f}(\mathbf{\Phi}\hat{\mathbf{x}}, t, \boldsymbol{\mu}) \tag{2.14}$$

Οι συναρτήσεις βάσης εκ κατασκευής είναι ορθοκανονικές μεταξύ τους, δηλαδή $\mathbf{\Phi}^T\mathbf{\Phi} = \mathbf{I}$. Έτσι προκύπτει το σύστημα μειωμένης τάξης

$$\frac{d\hat{\mathbf{x}}}{dt} = \mathbf{\Phi}^T\mathbf{f}(\mathbf{\Phi}\hat{\mathbf{x}}, t, \boldsymbol{\mu}) \tag{2.15}$$

με αρχική συνθήκη

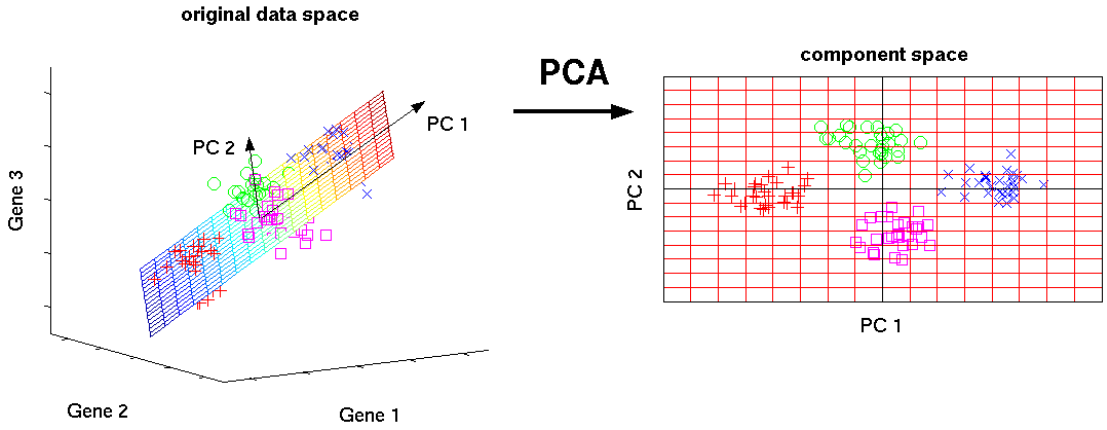
$$\hat{\mathbf{x}}(0) = \mathbf{\Phi}^T\mathbf{x}(0, \boldsymbol{\mu}) \tag{2.16}$$

Από τα παραπάνω φαίνεται ότι καθοριστική σημασία στη μέθοδο παίζει η επιλογή των συναρτήσεων βάσης, η οποία βεβαίως δεν είναι μοναδική. Η μέθοδος POD-Galerkin παίρνει το όνομά της, από την μεθοδολογία εκ των οποίων αυτές κατασκευάζονται.

2.3 Ανάλυση Κυρίων Συνιστοσών

2.3.1 Γενικά

Η ανάλυση κυρίων συνιστοσών (Principal Component Analysis – PCA) αποτελεί μια ευρέως διαδεδομένη, γραμμική μέθοδο μείωσης διάστασης (dimensionality reduction), από τα πεδία της στατιστικής και της μηχανικής μάθησης. Στόχος της είναι η κατασκευή μια ορθοκανονικής βάσης για έναν μικρής διάστασης υπόχωρο, στον οποίο το σφάλμα της ορθής προβολής ενός συνόλου δεδομένων, υπό την έννοια των ελαχίστων τετραγώνων, ελαχιστοποιείται. Η προβολή αυτή διατηρεί διατηρεί τη μεγαλύτερη διακύμανση των δεδομένων. Λόγω της ισχυρής σύνδεσης της με τις μεθόδους μείωσης τάξης SVD (Singular Value Decomposition) και POD (Proper Orthogonal Decomposition), οι μεθοδολογίες αυτές στην πράξη είναι ταυτόσημες [5].



Εικόνα 2.1: Δεδομένα στις 3 διαστάσεις τα οποία κατά κύριο λόγο περιέχονται σε έναν υπόχωρο 2 διαστάσεων.

Στο πλαίσο των τεχνικών μείωσης τάξης, η ανάλυση κυρίων συνιστωσών χρησιμοποιείται για την κατασκευή της βάσης Φ, αξιοποιώντας δεδομένα προσομοιώσεων του πλήρους συστήματος. Σημαντικά οφέλη της μεθόδου είναι [5]:

- Δεν απαιτείται πρότερη γνώση του συστήματος, καθώς αποτελεί μέθοδο επεξεργασίας αποτελεσμάτων (πειραματικών ή προσομοιώσεων)
- Οι συναρτήσεις βάσης διατηρούν τα ειδικά χαρακτηριστικά του πλήρους συστήματος
- Απαιτούνται μόνο πράξεις μεταξύ πινάκων

Σημειώνεται ότι, ακριβώς επειδή αποτελεί μέθοδο εκ των υστέρων επεξεργασίας αποτελεσμάτων, η βάση που παράγεται από την POD περιορίζεται σε μια στενή «γειτονιά» των δεδομένων εκ των οποίων κατασκευάζεται. Εκτός αυτής, όπως θα συζητηθεί και παρακάτω, δεν είναι εγγυημένο ότι περιέχει την απαραίτητη πληροφορία, ώστε να μπορεί περιγράψει την πραγματική συμπεριφορά του συστήματος [3].

2.3.2 Κατασκευή Βάσης και ορθής προβολής

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

$$\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1(t)\ \mathbf{x}_2(t) \cdots\ \mathbf{x}_M(t)\} \tag{2.17}$$

όπου $\mathbf{x}_i(t) \in V,\ i = 1, 2, \dots, M$ και $t \in [0, T_i]$. Ως τροχιά ορίζεται το σύνολο των χρονικά διαδοχικών καταστάσεων του συστήματος, ξεκινώντας από μια αρχική συνθήκη, στο διάστημα $[0, T]$.

Στόχος είναι η εύρεση ενός d-διάστατου υπόχωρου $V_d \subset V$, ο οποίος ελαχιστοποιεί, υπό την έννοια των ελαχίστων τετραγώνων, το σφάλμα της ορθής προβολής $\Pi_d: V \to V_d$,

$$\|\mathbf{X} - \Pi_d\mathbf{X}\|^2 \equiv \sum_{i=1}^{M} \int_0^{T_i} \|\mathbf{x}_i(t) - \Pi_d\mathbf{x}_i(t)\|^2 dt \tag{2.18}$$

Η λύση του προβλήματος αυτού βασίζεται στην εισαγωγή του πίνακα συσχέτισης (correlation matrix) [5]:

$$\mathbf{K} = \sum_{i=1}^{M} \int_0^{T_i} \mathbf{x}_i(t)\mathbf{x}_i(t)^T dt\ \in \mathbb{R}^{N\times N} \tag{2.19}$$

Εξ' ορισμού, ο πίνακας **K** είναι συμμετρικός, θετικά ημι-ορισμένος με πραγματικές και μη αρνητικές ιδιοτιμές $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_N \geq 0$. Έστω ότι $\mathbf{u}_j$ είναι τα αντίστοιχα μη μηδενικά ιδιοδιανύσματα:

$$\mathbf{K}\mathbf{u}_j = \lambda_j\mathbf{u}_j \tag{2.20}$$

Επειδή ο **K** είναι συμμετρικός, τα ιδιοδιανύσματα είναι ορθοκανικά, δηλαδή ικανοποιούν τη σχέση:

$$\mathbf{u}_i{}^T\mathbf{u}_j = \begin{cases} 1 \; i = j \\ 0 \; i \neq j \end{cases} \tag{2.21}$$

Λόγω της ειδικής δομής του πίνακα K, τα ιδιοδιανύσματα του μπορουν να τα επιλεγούν ως μια ορθοκανονική βάση του V. Έστω $\mathbf{\Phi} = [\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_d]$ τα πρώτα d ιδιοδιανύσματα του πίνακα συσχέτισης. Το κύριο αποτέλεσμα της POD είναι ότι ο βέλτιστος υπόχωρος V_d, διάστασης d, δίνεται από [5]:

$$V_d = span\{\mathbf{\Phi}\} = span\{\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_d\} \tag{2.22}$$

Επιπλέον η βέλτιστη ορθή προβολή $\Pi_d: V \to V_d$, με $\Pi_d\Pi_d{}^T = I$ δίνεται από τη σχέση [5]:

$$\Pi_d = \sum_{j=1}^{d} \mathbf{u}_j\mathbf{u}_j{}^T = \mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T \tag{2.23}$$

Τότε η ορθή προβολή κάθε διανύσματος $\mathbf{x}_i(t, \boldsymbol{\mu}^i) \in V$ στον V_d μπορεί να γραφτεί ως:

$$\mathrm{Proj}_{V_d}\{\mathbf{x}_i(t)\} = \Pi_d\mathbf{x}_i(t) = \mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T\mathbf{x}_i(t) \tag{2.24}$$

2.3.3 Επιλογή διάστασης βάσης

Ένα σημαντικό ερώτημα το οποίο προκύπτει είνα η επιλογή της διάστασης της ορθοκανονικής βάσης d. Θα πρέπει αυτή να είναι αρκούντως μικρή, ώστε να επιτυγχάνεται μείωση στο υπολογιστικό κόστος, ενώ ταυτόχρονα να μπορεί να αποδίδει ικανοποιητικές προβλέψεις. Με βάση την ανάλυση κυρίων συνιστωσών ισχύει η παρακάτω σχέση [5]:

$$\min_{V_d} \|\mathbf{X} - \Pi_d\mathbf{X}\|^2 = \sum_{j=N-d+1}^{N} \lambda_j \tag{2.25}$$

Δηλαδή το σφάλμα της ορθής προβολής $\Pi_d: V \to V_d$, ισούται με το άθροισμα των ιδιοτιμών των ιδιοδιανυσμάτων, τα οποία δεν αξιοποιούνται για την κατασκευή της βάσης $\mathbf{\Phi}$. Η επιλογή της διάστασης d μπορεί να γίνει, με βάση το κριτήριο [5],

$$d = \mathrm{argmin}\left\{I(d):\; I(d) \geq \frac{p}{100}\right\} \tag{2.26}$$

όπου I(d) ορίζεται ως το σχετικό πληροφοριακό περιεχόμενο για τη βάση του V_d ως,

$$I(d) = \frac{\sum_{j=1}^{d} \lambda_j}{\sum_{j=1}^{N} \lambda_j} \tag{2.27}$$

Και p το ποσοστό πληροφορίας του V που θα πρέπει να περιλαμβάνει ο V_d με μια τυπική τιμή στο 99%.

Αν και αυτή είναι μια καλή πρακτική για μια αρχική επιλογή της διάστασης d, συχνά απαιτούνται περισσότερα διανύσματα βάσης για την επίτευξη ικανοποιητική ακρίβειας. Εν τέλει, η διάσταση επιλέγεται σε συνδυασμό με κάποιο κριτήριο ελαχίστου σφάλματος πρόβλεψης, για κάποιες ήδη γνωστές τροχιάς του συστήματος.

2.4 Η μέθοδος των στιγμιοτύπων

Η μέθοδος των στιγμιοτύπων (method of snapshots), η οποία προτάθηκε από τον L. Sirovich [9], είναι μια αποδοτική μεθοδολογία - παραλλαγή της PCA - για την κατασκευή της βάσης Φ, από στιγμιότυπα του συστήματος πολύ μεγάλης διάστασης N. Με τον όρο στιγμιότυπα εννοούνται στιγμιαίες/διακριτές αποτυπώσεις του συστήματος, καθώς αυτό μεταβαίνει από μια μόνιμη κατάσταση σε μια άλλη, συνθέτοντας έτσι μια τροχιά. Αν χρησιμοποιηθεί η PCA, στην περίπτωση που η διάσταση N είναι πολύ μεγάλη, το πρόβλημα υπολογισμού των ιδιοτιμών/ιδιοδιανυσμάτων του πίνακα συσχέτισης **K** γίνεται υπολογιστικά πολύ δύσκολο ή και αδύνατο [5].

Όπως αναφέρθηκε, στη μέθοδο στιγμιοτύπων, αξιοποιούνται στιγμιότυπα και όχι συνεχείς χρονικά τροχιές. Έτσι το σύνολο (2.17) μετατρέπεται στον πίνακα:

$$\mathbf{X} = [\mathbf{X}_1(\boldsymbol{\mu}^1)\ \mathbf{X}_2(\boldsymbol{\mu}^2) \cdots\ \mathbf{X}_M(\boldsymbol{\mu}^M)] \tag{2.28}$$

όπου $\mathbf{X}_i(\boldsymbol{\mu}^i) \in \mathbb{R}^{N \times m_i}, i = 1, \dots, M$ είναι ο πίνακας που περιέχει την τροχιά i και M ο αριθμός του συνόλου των τροχιών, με κάθε τροχιά να αποτελείται από m_i στιγμιότυπα. Τότε το σύνολο των στιγμιοτύπων θα είναι:

$$m = \sum_{i=1}^{M} m_i \tag{2.29}$$

Τέτοιες τροχιές μπορούν να προκύψουν από την προσομοίωση του πλήρους μοντέλου για διάφορες αρχικές συνθήκες και/ή σετ των τιμών παραμέτρων $\boldsymbol{\mu} \in D$.

Ο πίνακας συσχέτισης ορίζεται τότε:

$$\mathbf{K} = \mathbf{X}\mathbf{X}^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{\mathrm{N}\times\mathrm{N}} \tag{2.30}$$

Στη μέθοδο τον στιγμιοτύπων αξιοποιείται, αντί αυτού, ανάστροφος πίνακας:

$$\mathbf{K}^{\mathrm{T}} = \mathbf{X}^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{\mathrm{m}\times\mathrm{m}} \tag{2.31}$$

του οποίου οι ιδιοτιμές είναι ίδιες με αυτές του $\mathbf{K}$ κάνοντας το πρόβλημα υπολογισμού ιδιοτιμών/ιδιοδιανυσμάτων πιο εύκολο υπολογιστικά, καθώς συνήθως $\mathrm{m} \ll \mathrm{N}$ [5].

Έστω ότι $\boldsymbol{\upsilon}_{\mathrm{j}}$, $\mathrm{j} = 1, \dots, \mathrm{m}$ είναι τα ιδιοδιανύσματα του $\mathbf{K}^{\mathrm{T}}$. Τα d πρώτα αποτελούν μια ορθοκανονική βάση ιδιοδιανυσμάτων $\{\boldsymbol{\upsilon}_1, \dots, \boldsymbol{\upsilon}_{\mathrm{d}}\}$. Τα διανύσματα βάσης για την POD υπολογίζονται ως:

$$\mathbf{u}_{\mathrm{j}} = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\lambda_{\mathrm{j}}}}\mathbf{X}\boldsymbol{\upsilon}_{\mathrm{j}}, \qquad \mathrm{j} = 1, \dots, \mathrm{d} \tag{2.32}$$

2.5 Αξιολόγηση μείωσης τάξης – Σφάλματα

Για την αξιολόγηση του μοντέλου μειωμένης τάξης ορίζεται το επι τοις % σχετικό σφάλμα πρόβλεψης σε κάθε υπολογιστικό βήμα $\mathrm{t_n}$ ως:

$$\mathrm{error}(\mathrm{t_n})\ \% = \frac{\|\mathrm{u_{FOM}}(\mathrm{t_n}) - \mathrm{u_{ROM}}(\mathrm{t_n})\|}{\|\mathrm{u_{FOM}}(\mathrm{t_n})\|}100\% \tag{2.33}$$

και το μέσο σφάλμα επί τοις % ως:

$$\text{mean error}\ \% = \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{error}(\mathrm{t_n})\ \% \tag{2.34}$$

όπου $\mathrm{u_{FOM}}$ η λύση του πλήρους μοντέλου και $\mathrm{u_{ROM}}$ η λύση του μοντέλου μειωμένης τάξης αντίστοιχα.

2.6 Εφαρμογές

Η μέθοδος POD-Galerkin εφαρμόζεται και αξιολογείται σε δυο παραμετροποιημένα μη γραμμικά προβλήματα, διαφορετικής μεταξύ τους φυσιογνωμίας, τα οποία παρουσιάζουν ενδιαφέρουσα δυναμική συμπεριφορά. Η μελέτη κατευθύνεται σε 3 κύριους άξονες:

1) Προβλεπτική ικανότητα
2) Ικανότητα επαρκούς μείωσης τάξης
3) Ικανότητα μείωσης του υπολογιστικού κόστους

Σημειώνεται ότι τα στοιχεία 2 και 3 δεν είναι απαραίτητα συνυφασμένα, ιδιαίτερα στην περίπτωση των μη γραμμικών προβλημάτων, καθώς ο υπολογισμός της μη γραμμικής συνάρτησης σε κάθε υπολογιστικό βήμα συνεχίζει να κλιμακώνεται με τη διάσταση N του πλήρους μοντέλου. Αν και η μείωση τάξης προσφέρει στη μείωση του υπολογιστικού κόστους, κάνοντας για παράδειγμα την επίλυση του συστήματος αλγεβρικών εξισώσεων σε κάθε επανάληψη Newton ταχύτερη, συχνά δεν επαρκεί για να αποδώσει μια ουσιώδη μείωση του. Σε τέτοιες περιπτώσεις αξιοποιούνται μέθοδοι υπερ-μείωσης τάξης, όπως η μέθοδος GNAT [10]. Μια εναλλακτική μέθοδο αποτελεί η αξιοποίηση νευρωνικών δικτύων για την χρονική εξέλιξη του δυναμικού προβλήματος, αποφεύγοντας πλήρως τον υπολογισμό της μη γραμμικής συνάρτησης και δίνοντας έτσι μια black-box λύση στο πρόβλημα, ενώ παράλληλα είναι εφαρμόσιμη και σε περιπτώσεις που οι εξισώσεις που περιγράφουν το σύστημα δεν είναι γνωστές [11].

2.6.1 Εφαρμογή 1: Παραμετροποιημένη μη ιξώδης εξίσωση Burgers

Το πρώτο πρόβλημα που μελετάται είναι από την περιοχή της μηχανικής των ρευστών [12]. Συγκεκριμένα, αποτελεί ένα παράδειγμα κίνησης σοκ (shock) σε ένα ρευστό, το οποίο είναι ένα εγγενώς μη γραμμικό φαινόμενο. Το συγκεκριμένο πρόβλημα, αν και σχετικά απλό, αποτελεί μια ιδιαίτερη πρόκληση για τα μοντέλα μειωμένης τάξης. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι προσεγγίζουν την λύση ως έναν γραμμικό συνδυασμό χωρικά σταθερών συναρτήσεων βάσης. Κατα συνέπεια, αποδίδουν καλά όταν η δυναμική είναι σταθερή σε σχέση με το πλέγμα διακριτοποίησης. Ωστόσο, όταν η δυναμική παρουσιάζει κίνηση σε σχέση με το πλέγμα (π.χ. κινούμενα σοκ), τα μοντέλα μειωμένης τάξης γενικά

αποτυγχάνουν να καταγράψουν το κρίσιμο φαινόμενο για κάθε χρονική στιγμή και σετ παραμέτρων. Έστω το πρόβλημα αρχικών-συνοριακών τιμών:

$$\frac{\partial u(z,t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial(u^2(z,t))}{\partial z} = 0.02e^{-\mu_2 z}$$

$$u(z,0) = 1, \forall\, z \in [0,100]$$

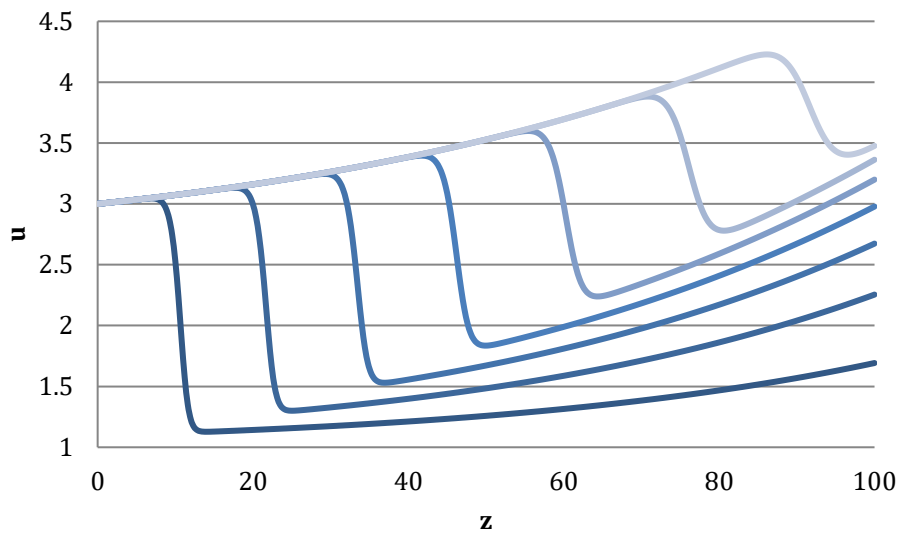
$$u(0,t) = \mu_1, t > 0$$

όπου μ_1 και μ_2 οι δυο παράμετροι/είσοδοι του προβλήματος. Η εξίσωση διακριτοποιείται χωρικά χρησιμοποιώντας το σχήμα Godunov, το οποίο οδηγεί σε μια έκφραση πεπερασμένων όγκων. Το μονο-διάστατο χωρίο διακριτοποιείται χρησιμοποιώντας 251 κόμβους, οι οποίοι αντιστοιχούν στις θέσεις με συνστεταγμένες $z_i = i \times \left(\frac{100}{250}\right), i = 0, 1, \dots, 250$. Το πλήρες μοντέλο, επομένως, είναι διάστασης 251.

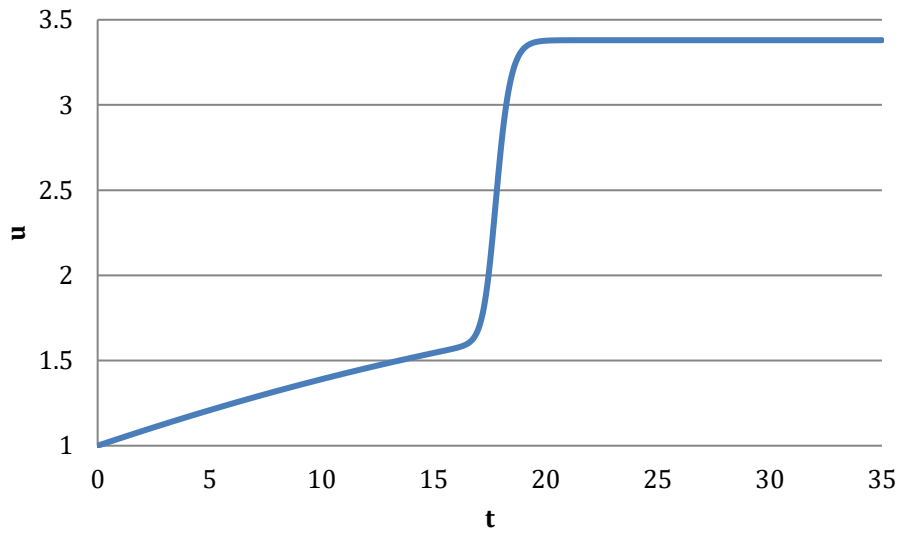
Το πρόβλημα επιλύεται στο χρονικό διάστημα $t \in [0,35]$ με ένα εννιαίο υπολογιστικό βήμα $\Delta t = 0.07$. Για τη χρονική ολοκλήρωση του συστήματος διαφορικών εξισώσεων, χρησιμοποιείται η πεπλεγμένη μέθοδος Euler. Σημειώνεται ότι δε χρησιμοποιήθηκε κάποια άμεση μέθοδος, καθώς το σύστημα παρουσιάζει ακαμψία (stiffness) και απαιτεί πολύ μικρό υπολογιστικό βήμα, ώστε το σχήμα ολοκλήρωσης να είναι αριθμητικά ευσταθές.

<u>Σημείωση</u>: Από εδώ και κάτω, για λόγους συντομίας, το σύνολο των παραμέτρων που χρησιμοποιείται για την κατασκευή της βάσης μέσω της POD θα αναφέρεται ως training set και το κάθε ζεύγος (μ_1, μ_2) ως training point.

Η λύση του πλήρους μοντέλου για το σύνολο παραμέτρων $(\mu_1, \mu_2) = (3, 0.02)$, φαίνεται στα Σχήματα 2.1 και 2.2:



Σχήμα 2.1 Στιγμιότυπα της λύσης του πλήρους μοντέλου για διάφορες χρονικές στιγμές στο διάστημα [0,35]



Σχήμα 2.2 Το σοκ περνά από τη θέση z = 40. Μεταβολή της λύσης σε αυτή τη θέση ως συνάρτηση του χρόνου

Για να αξιολογηθεί η εφαρμογή της μεθόδου POD-Galerkin στο παραπάνω σύστημα ως προς την προβλεπτικότητα του, θα δοκιμαστεί υπό τα εξής σενάρια:

1) Προβλεπτικότητα ως προς το χώρο παραμέτρων (δοκιμές για σετ παραμέτρων κοντά και μακριά από το training set)
2) Προβλεπτικότητα ως προς το χώρο παραμέτρων και το χρόνο (κατασκευή βάσης μέσω μόνο λίγων αρχικών στιγμιότυπων για κάποια ζεύγη παραμέτρων)

3) Προβλεπτικότητα ως προς το χρόνο (πρόβλεψη της πλήρους δυναμικής συμπεριφοράς για ένα ζεύγος παραμέτρων με λίγα μόνο αρχικά στιγμιότυπα)

Με βάση τις παραπάνω αριθμητικές δοκιμές θα προκύψουν και συμπεράσματα για τη μείωση τάξης και τα υπολογιστικά οφέλη της μεθοδολογίας.

Σενάριο 1

Για την κατασκευή του μοντέλου μειωμένης τάξης χρησιμοποιούνται τρεις τροχιές του πλήρους μοντέλου για $t \in [0,35]$ για τα σετ παραμέτρων του Πίνακα 2.1.

Πίνακας 2.1 Σετ παραμέτρων (μ_1,μ_2) για την κατασκευή του μοντέλου μειωμένης τάξης

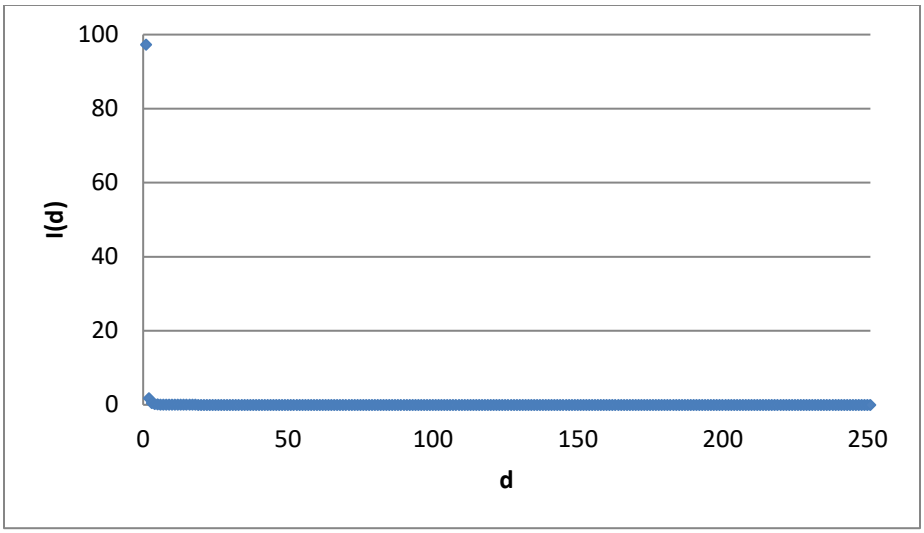
Παράμετρος	Σετ παραμέτρων 1	Σετ παραμέτρων 2	Σετ παραμέτρων 3
μ_1	3	6	9
μ_2	0.02	0.05	0.075

Η φθίνουσα τάση των ιδιοτιμών του πίνακα συσχέτισης υποδηλώνει ότι οι πρώτες τρεις ιδιοτιμές επαρκούν γιατί περιέχουν το 99.5 % της συνολικής πληροφορίας, όπως παρουσιάζεται στον Πίνακα 2.

Πίνακας 2.2 Σχετικό πληροφοριακό περιεχόμενο προσεγγίσεων POD για διαφορετικής διάστασης βάσεις

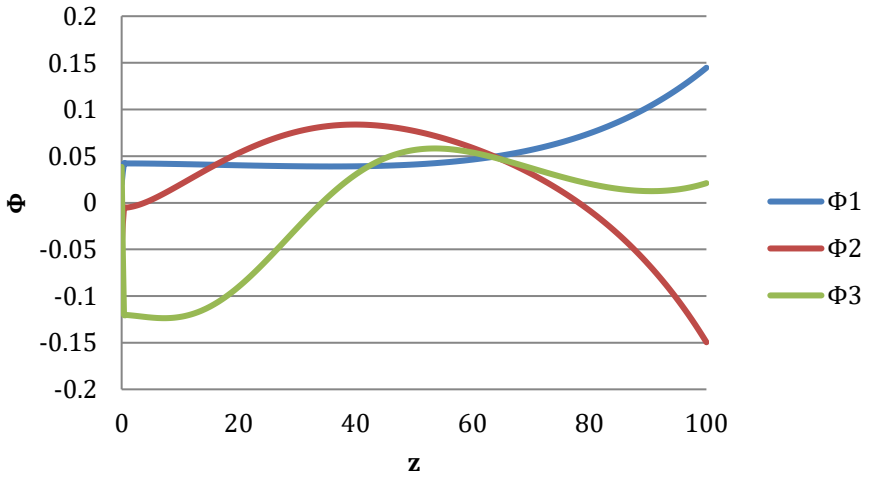
Διάσταση βάσης d	1	2	3
% I(d)	97.2	98.9	99.5

Η απότομη μείωση των ιδιοτιμών του πίνακα συσχέτισης φαίνεται και στο Σχήμα 2.3, προτείνοντας ότι τρία ιδιοδιανύσματα είναι επαρκή για τη διαδικασία μείωσης τάξης.



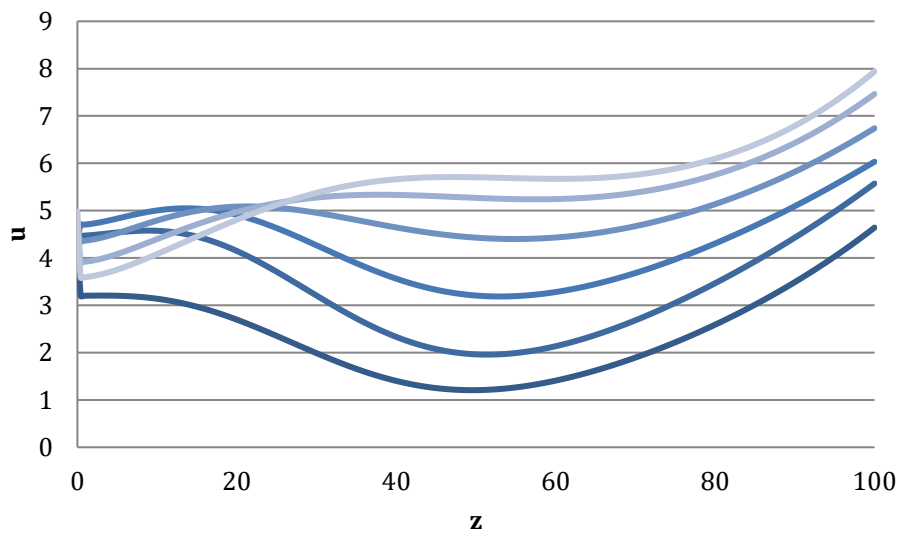
Σχήμα 2.3 Η επιλογή των πρώτων τριών είναι επαρκής, γιατί περιλαμβάνει το 99.5% της συνολικής πληροφορίας.

Τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα παρουσιάζονται στο Σχήμα 2.4.

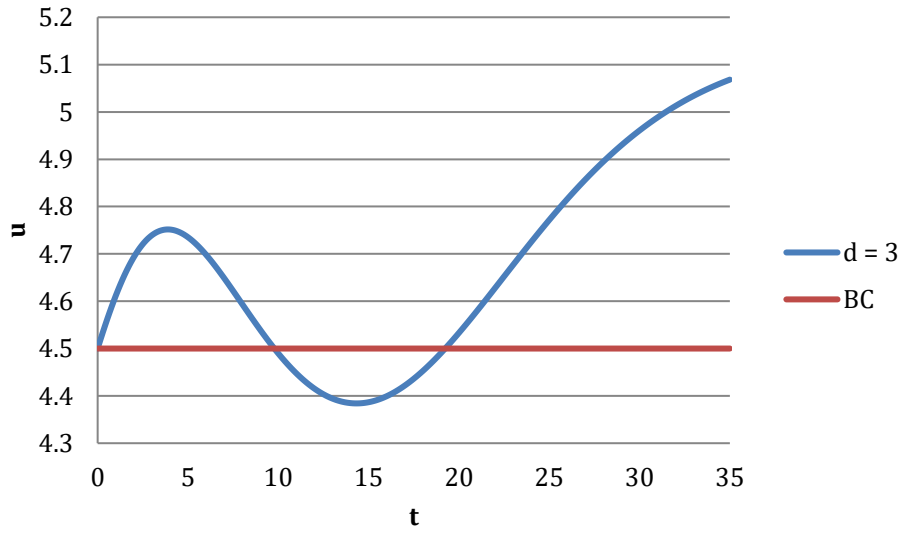


Σχήμα 2.4 Τα πρώτα τρία ιδιοδιανύσματα του πίνακα συσχέτισης, όπως προκύπτουν από την POD. Τα διανύσματα αυτά αποτελούν χαρακτηριστικές χωρικές κατανομές των μεταβλητών κατάστασης, των οποίων ο γραμμικός συνδυασμός, θεωρητικά, μπορεί να αποδώσει οποιαδήποτε κατάσταση του συστήματος.

Κατασκευάζοντας ένα μοντέλο μειωμένης τάξης με τα τρία μόνο πρώτα διανύσματα, γίνεται μια πρώτη δοκιμή για το σετ $(\mu_1, \mu_2) = (4.5, 0.038)$, λαμβάνεται η λύση του Σχήματος 2.5.



Σχήμα 2.5 Πρόβλεψη του μοντέλου μειωμένης τάξης, χρησιμοποιώντας τρία διανύσματα βάσης, για το σετ $(\mu_1, \mu_2) = (4.5, 0.038)$



Σχήμα 2.6 Χρονική εξέλιξη της μεταβλητής που αντιστοιχεί στο σύνορο z = 0, όπου αντιστοιχεί σε συνοριακή συνθήκη τύπου Dirichlet.

Όπως φαίνεται από τα Σχήματα 2.5 και 2.6, αξιοποιώντας μόνο τα πρώτα τρία ιδιοδιανύσματα, το μοντέλο δεν είναι σε θέση να διατηρήσει τη συνοριακή συνθήκη-παράμετρο, καθώς επίσης δεν αποδίδει λύση που να διατηρεί σε κάποιο βαθμό τη μορφή αυτής του πλήρους μοντέλου. Για αυτό στην προκειμένη περίπτωση δεν έχει νόημα να

υπολογιστεί κάποιο σφάλμα πρόβλεψης. Αμέσως προκύπτουν δυο σημαντικά συμπεράσματα για τη μείωση τάξης με τη μέθοδο POD-Galerkin:

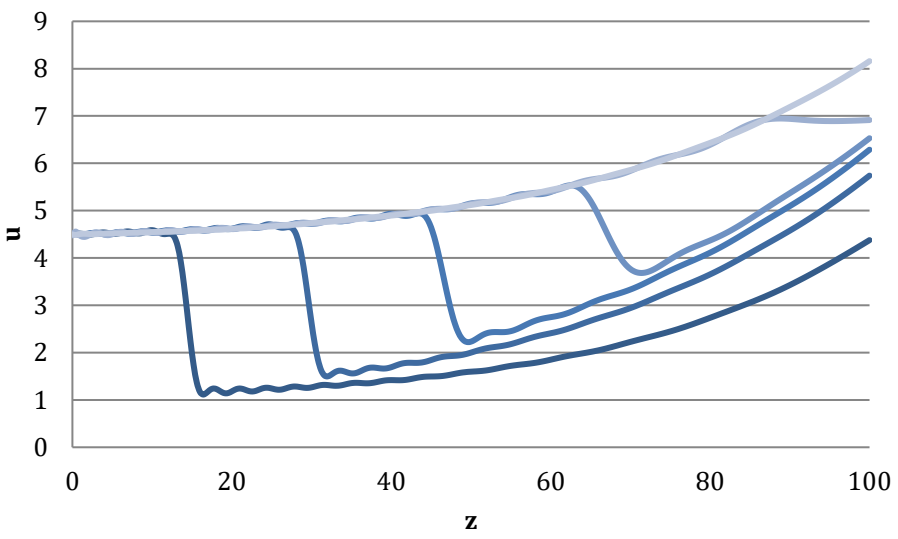
1) Για την επιλογή της διάστασης της βάσης δεν επαρκεί απαραίτητα ο κανόνας για τη διατήρηση του 99% του πληροφοριακού περιεχομένου
2) Το μοντέλο μειωμένης τάξης δεν μπορεί να εκφράσει απαραίτητα τη συνοριακή συνθήκη, ιδιαίτερα αν αυτή αποτελεί παράμετρο του προβλήματος

Η επιλογή της διάστασης της βάσης, επομένως θα πρέπει να γίνει με βάση κάποιο κριτήριο σφάλματος. Θα πρέπει να αυξηθεί τόσο, ώστε το σφάλμα πρόβλεψης να είναι κάτω από επιθυμητό όριο (π.χ. < 1%), αλλά και να μπορεί να εκφράσει τη συνοριακή συνθήκη. Αυξάνοντας σταδιακά τη διάσταση της βάσης d υπολογίζονται τα αντίστοιχα μέσα σχετικά σφάλματα, όπως φαίνεται στον Πίνακα 2.3.

Πίνακας 2.3: Μέσο σφάλμα πρόβλεψης για βάσεις διαφόρων διαστάσεων που προκύπτουν από την POD.

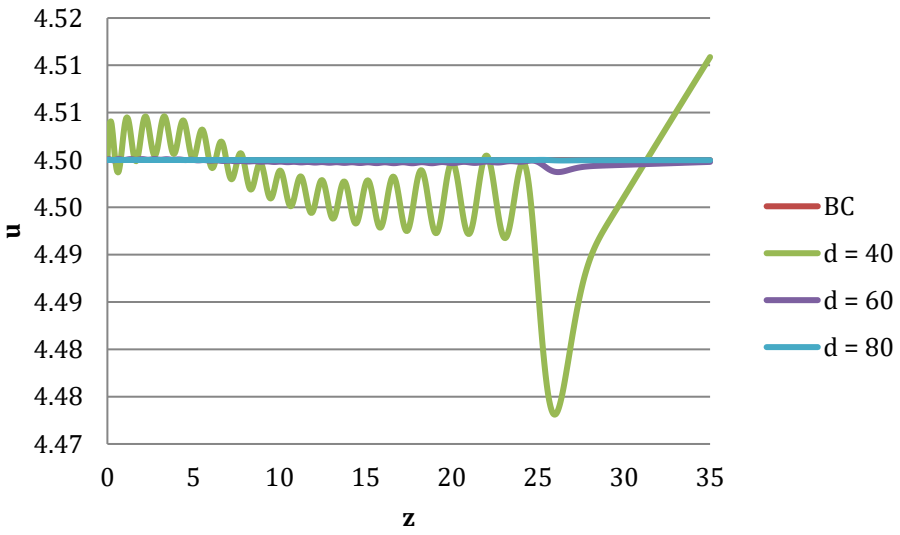
d	10	20	30	40	50	60
% Μέσο σφάλμα	6.64	4.83	1.26	0.50	0.22	0.12

Για να πέσει το μέσο σφάλμα πρόβλεψης κάτω από το 1%, θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν περισσότερα από 30 ιδιοδιανύσματα για την κατασκευή της βάσης. Η πρόβλεψη του μοντέλου μειωμένης τάξης τότε, προσεγγίζει αρκετά καλά τη λύση του πλήρους μοντέλου, αν και παρατηρούνται κάποιες μικρές ταλαντώσεις για d = 40 (Σχήμα 2.7).

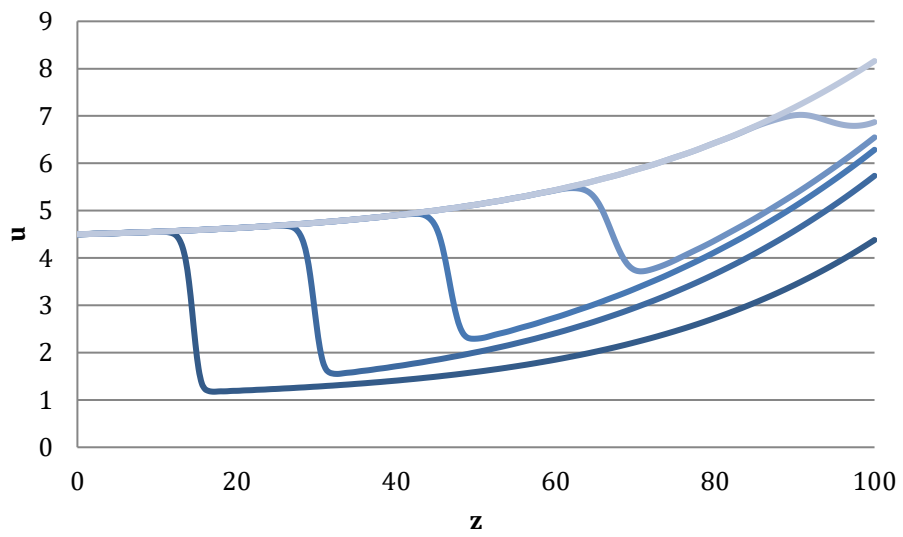


Σχήμα 2.7 Στιγμιότυπα των προβλέψεων του μοντέλου μειωμένης τάξης με διάσταση d = 40. Η μορφή της λύσης αποτυπώνεται σωστά αν και παρατηρούνται ορισμένες ταλαντώσεις

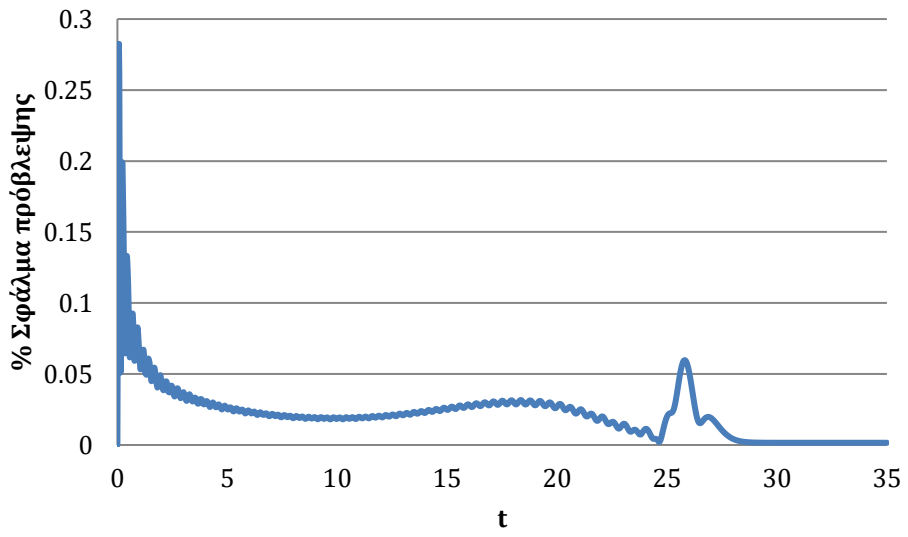
Ακόμα και σε αυτή την περίπτωση όμως, το μοντέλο μειωμένης τάξης δεν είναι σε θέση να εκφράσει με ακρίβεια τη συνοριακή συνθήκη. Για να ικανοποιείται τόσο αυτή όσο και να μην παρουσιάζονται αυτές οι μικρές ταλαντώσεις στη μορφή της λύσης απαιτήθηκαν τουλάχιστον 80 διανύσματα βάσης, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.8.



Σχήμα 2.8 Χρονική εξέλιξη της μεταβλητής που αντιστοιχεί στο σύνορο z = 0. Η διάσταση της βάσης πρέπει να αυξηθεί σημαντικά για να διατηρείται σταθερή η τιμή στο σύνορο.



Σχήμα 2.9 Στιγμιότυπα των προβλέψεων του μοντέλου μειωμένης τάξης με διάσταση d = 80.



Σχήμα 2.2 Σχετικό σφάλμα πρόβέψης για διάσταση βάσης d = 80. Το μοντέλο μειωμένης τάξης πλεον παράγει ικανοποιητικές προβλέψεις.

Αποτελέσματα για το μοντέλο μειωμένης τάξεις με 80 διανύσματα βάσεις φαίνονται στα Σχήματα 2.9 και 2.10. Θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν περισσότερα από 80 διανύσματα, ώστε να επιτυγχάνεται ακόμα μεγαλύτερη ακρίβεια. Σε τέτοιου τύπου σενάρια θα πρέπει να διατηρείται μια ισορροπία μεταξύ μείωσης τάξης και ακρίβειας πρόβλεψης, έτσι ώστε το μοντέλο μειωμένης τάξης να μπορεί να είναι γρήγορο. Στη

συγκεκριμένη περίπτωση, η επιλογή περισσότερων διανυσμάτων βάσης δε θα παρείχε κάποια επιπλέον πληροφορία για την διερεύνηση που πρόκειται να ακολουθήσει. Στη συγκεκριμένη περίπτωση επιλέγονται 80 διανύσματα, καθώς το σφάλμα πρόβλεψης προκύπτει κάτω από 1%, ενώ ταυτόχρονα η συνοριακή συνθήκη εκφράζεται με ακρίβεια.

Έχοντας κατασκευάσει το μοντέλο μειωμένης τάξης, γίνονται δοκιμές για δυο σημεία «μακριά» και δυο σημεία «κοντά» στα training points. Τα σημεία αυτά και τα αποτελέσματα των δοκιμών συνοψίζονται στους Πίνακες 2.4 και 2.5 ανστίστοιχα.

Πίνακας 2.4: Σημεία του χώρου παραμέτρων D στα οποία θα δοκιμαστεί η προβλεπτική ικανότητα.

Παράμετρος	Σετ παραμέτρων 1	Σετ παραμέτρων 2	Σετ παραμέτρων 3	Σετ παραμέτρων 4
μ_1	4.5	7.5	1.5	10
μ_2	0.038	0.06	0.013	0.08

Πίνακας 2.5: Αποτελέσματα δοκιμών.

	Σετ 1	Σετ 2	Σετ 3	Σετ 4
% Μέσο σφάλμα	0.023	0.014	0.002	0.007

Το μοντέλο μειωμένης τάξης ανταποκρίθηκε πολύ ικανοποιητικά αποδίδοντας προβλέψεις με μια μέση ακρίβεια της τάξης του 10^{-2} με 10^{-3}. Η μείωση τάξης κρίνεται αρκετά ικανοποιητική, καθώς οι βαθμοί ελευθερίας μειώθηκαν κατά 68%, αν και δεν ήταν όσο δραστική όσο θα ήταν αναμενόμενο με βάση το κριτήριο του πληροφοριακού περιεχομένου I(d). Από τη σκοπιά της μείωσης του υπολογιστικού κόστους, ο χρόνος επίλυσης δεν μπορεί να αξιολογηθεί, καθώς πρόκειται για ένα πολύ μικρό πρόβλημα και οι χρόνοι δεν είναι συγκρίσιμοι. Υπολογίζοντας τις απαιτούμενες επαναλήψεις Newton για την επίλυση του πλήρους και του μειωμένου μοντέλου, προκύπτει ότι από μικρό μοντέλο απαιτήθηκαν ίσες ή και λιγότερες επαναλήψεις, όπως φαίνεται στον Πίνακα 2.6.

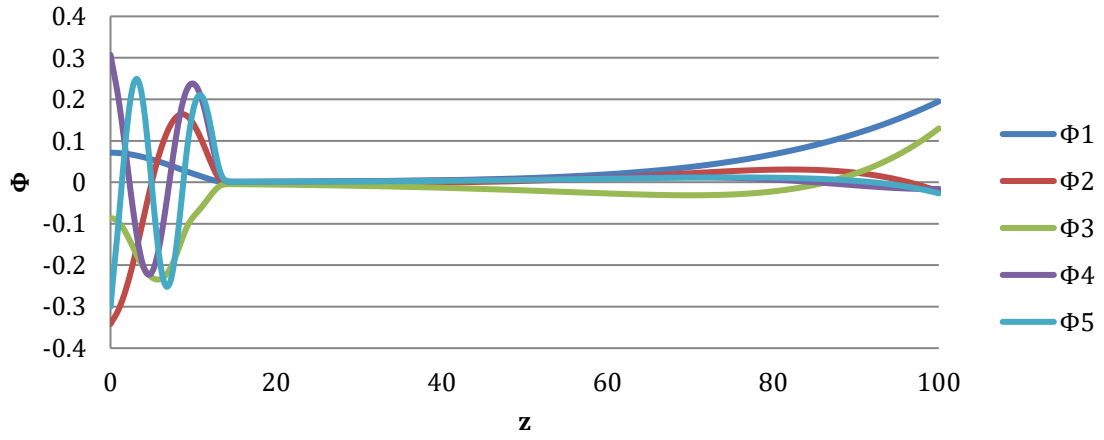
Πίνακας 2.6: Συνολικές επαναλήψεις Newton που απαιτήθηκαν για την επίλυση των δυο μοντέλων.

	Σετ 1	Σετ 2	Σετ 3	Σετ 4
Πλήρες μοντέλο	698	476	500	374
Μοντέλο μειωμένης τάξης	695	476	500	350

Το σύστημα που επιλύεται σε κάθε επανάληψη Newton είναι σημαντικά μικρότερο, λόγω της μείωσης τάξης, το οποίο είναι ένδειξη εξοικονόμησης υπολογιστικών πόρων και μπορεί να είναι ουσιαστική σε μεγαλύτερης κλίμακας προβλήματα.

Σενάριο 2

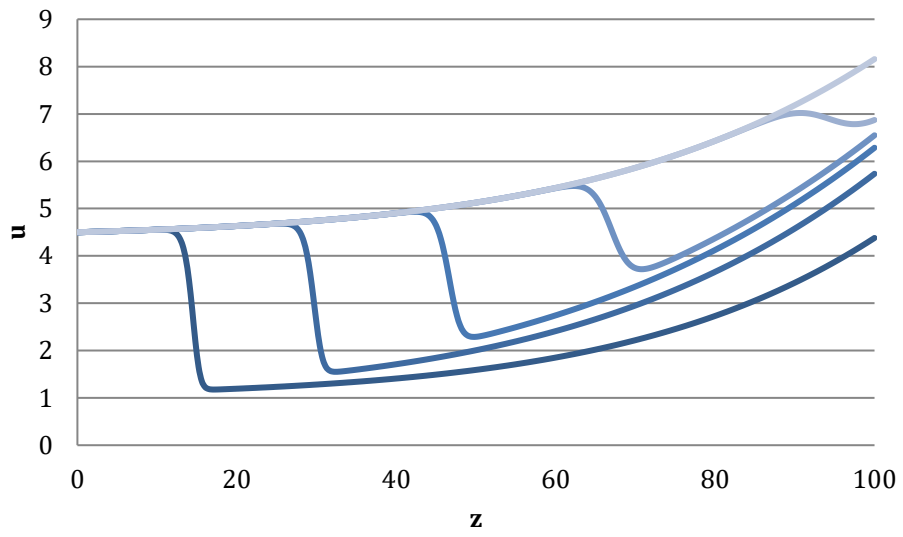
Για την κατασκευή του μοντέλου μειωμένης τάξης χρησιμοποιούνται οι ίδιες τρεις τροχιές με το προηγούμενο σενάριο, αλλά χρησιμοποιούνται μόνο τα στιγμιότυπα στο χρονικό διάστημα $t \in [0,3.5]$ (150 συνολικά). Το γεγονός αυτό επιβάλει μια επιπλέον πρόκληση στο μοντέλο μειωμένης τάξης. Θα πρέπει να μπορεί να προβλέψει καταστάσεις του συστήματος για χρονικές στιγμές εκτός των στιγμιοτύπων που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή της βάσης.



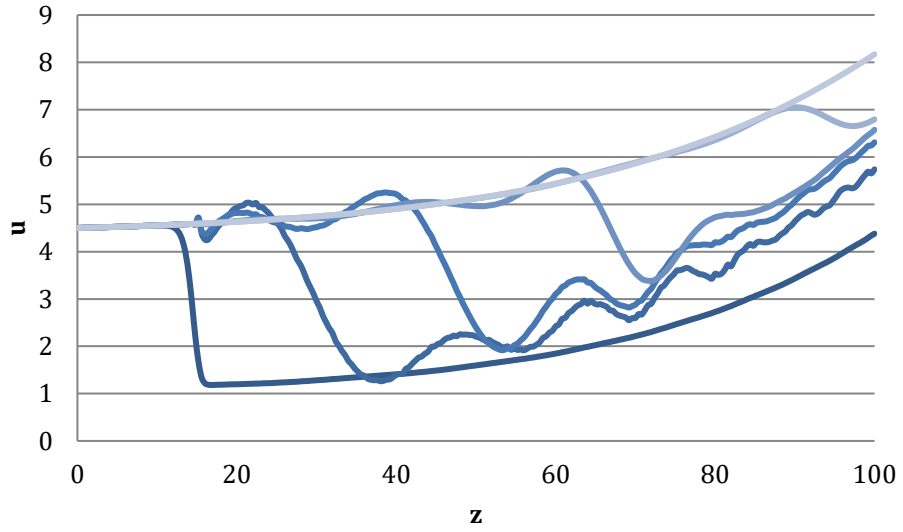
Σχήμα 2.3 Τα πρώτα πέντε ιδιοδιανύσματα του πίνακα συσχέτισης, όπως προκύπτουν από την POD. Από τα ιδιοδιανύσματα αυτά φαίνεται ότι η πληροφορία μετά το z = 20 είναι πολύ φτωχή.

Όπως φαίνεται από τις πέντε πρώτες συναρτήσεις βάσης στο Σχήμα 2.11, το σοκ δεν έχει προλάβει να περάσει από το σημείο z = 20. Πρακτικά το μοντέλο μειωμένης τάξης, δεν έχει

καλή «εικόνα» για τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα από αυτή τη θέση και μετά, καθώς περνά ο χρόνος. Χρησιμοποιώντας 80 διανύσματα βάσης ως σημείο εκκίνησης, όπως στο προηγούμενο σενάριο και δοκιμάζοντας το σετ $(\mu_1, \mu_2) = (4.5, 0.038)$. Οι λύσεις του μοντέλου πλήρους και του μειωμένης τάξης φαίνονται στα Σχήματα 2.12 και 2.13 αντίστοιχα.



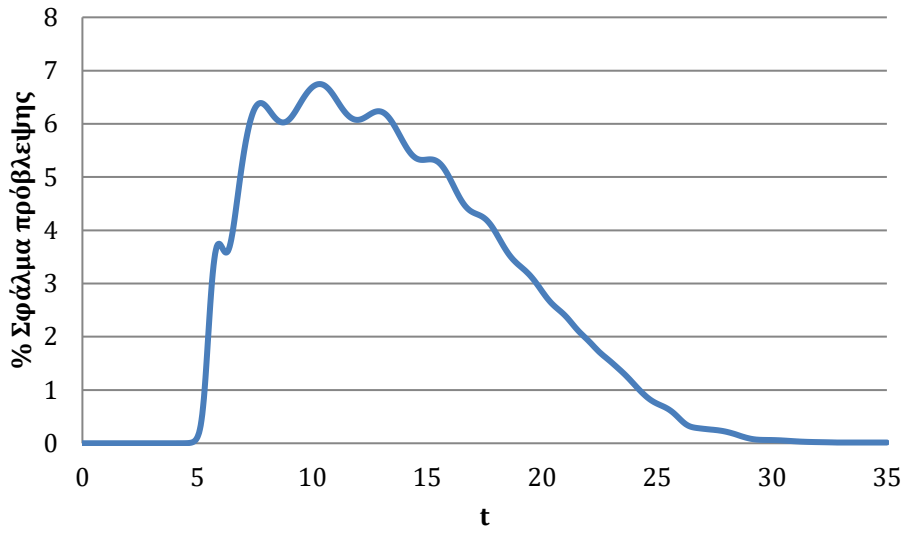
Σχήμα 2.4 Στιγμιότυπα της λύσης όπως προκύπτουν από το πλήρες μοντέλο για $(\mu_1, \mu_2) = (4.5, 0.038)$.



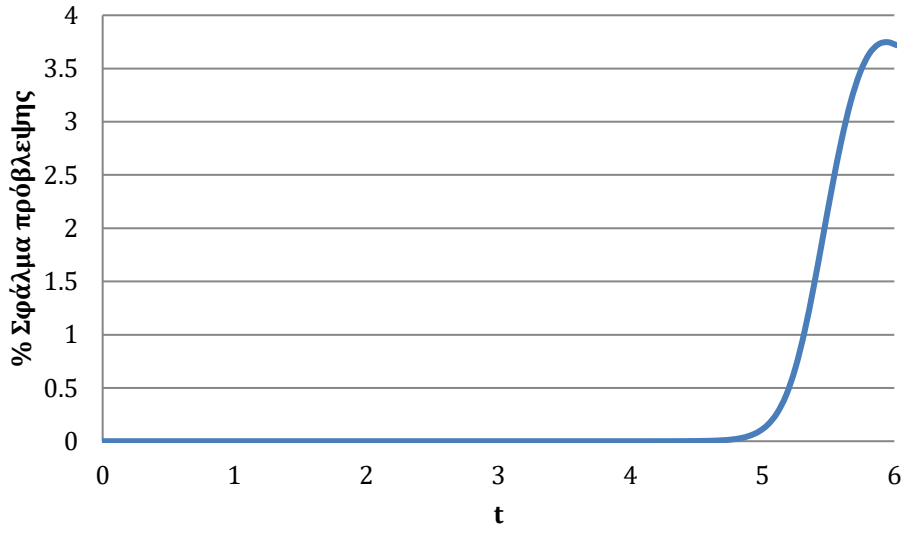
Σχήμα 2.5 Πρόβλεψη του μοντέλου μειωμένης τάξης με διάσταση d = 50.

Το μοντέλο μειωμένης τάξης:

- Ικανοποιεί τη συνοριακή συνθήκη
- Προσεγγίζει πολύ ικανοποιητικά τη λύση μόνιμης κατάστασης (t → 35)
- Ανεμενόμενα αποδίδει πολύ ικανοποιητικές προβλέψεις στο διάστημα [0,3.5], ενώ στη συνέχεια το σφάλμα αυξάνει σημαντικά (Σχήματα 2.14 και 2.15)

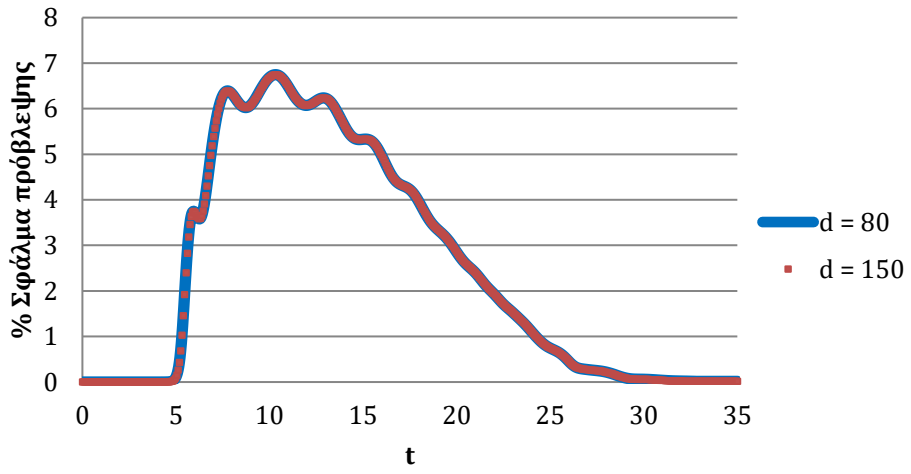


Σχήμα 2.6 % Σχετικό σφάλμα πρόβέψης για διάσταση βάσης d = 80. Το μοντέλο μειωμένης τάξης δεν αποδίδει πλέον ικανοποιητικές προβλέψεις.



Σχήμα 2.7 Χαρακτηριστική αύξηση του σφάλματος μετά από τη χρονική στιγμή t = 3.5.

Στην προκειμένη περίπτωση η μείωση τάξης κρίνεται αναποτελεσματική και επομένως θα πρέπει η διάσταση να αυξηθεί. Χρησιμοποιώντας όμως, ακόμα και τα 150 διαθέσιμα διανύσματα βάσης, δεν παρατηρείται απολύτως καμία μείωση στο σφάλμα πρόβλεψης (Σχήμα 2.16).



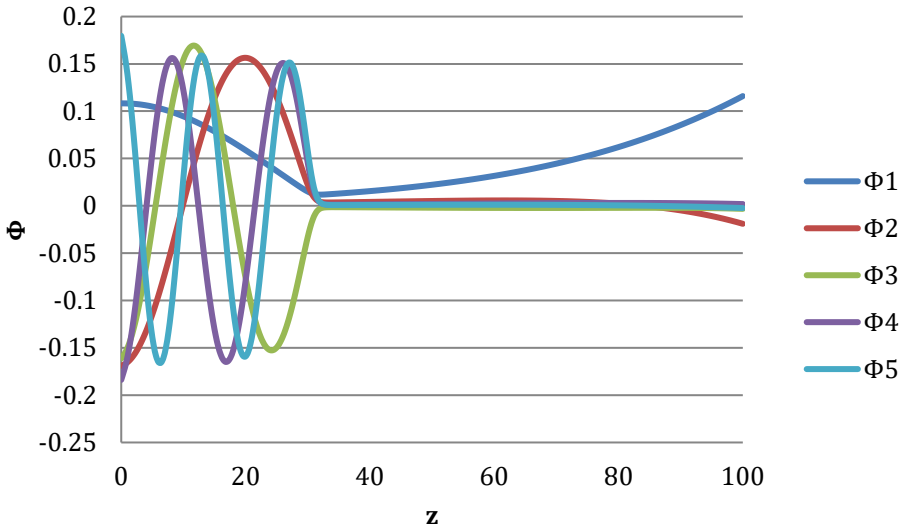
Σχήμα 2.8 % Σχετικό σφάλμα πρόβέψης για διάσταση βάσης d = 80 και d = 150. Δεν παρατηρείται μείωση του σφάλματος μέσω αύξησης της διάστασης της βάσης.

Το γεγονός αυτό αναδεικνύει την σημαντική εξάρτηση της ακρίβειας πρόβλεψης από την πληροφορία που περιέχεται στη βάση. Συγκεκριμένα, ενώ το μοντέλο μειωμένης τάξης απέδιδε πολύ ικανοποιητικά, στερώντας του πληροφορία αίρεται η ικανότητα του να κάνει καλές προβλέψεις, ακόμη και αν η διάσταση του αυξηθεί δραματικά (εδώ σχεδόν διπλασιάστηκε). Μια αύξηση στη διάσταση του συνεπώς, δεν επαρκεί για να κάνει εξισορροπήσει την έλλειψη σε πληροφορία.

Σενάριο 3

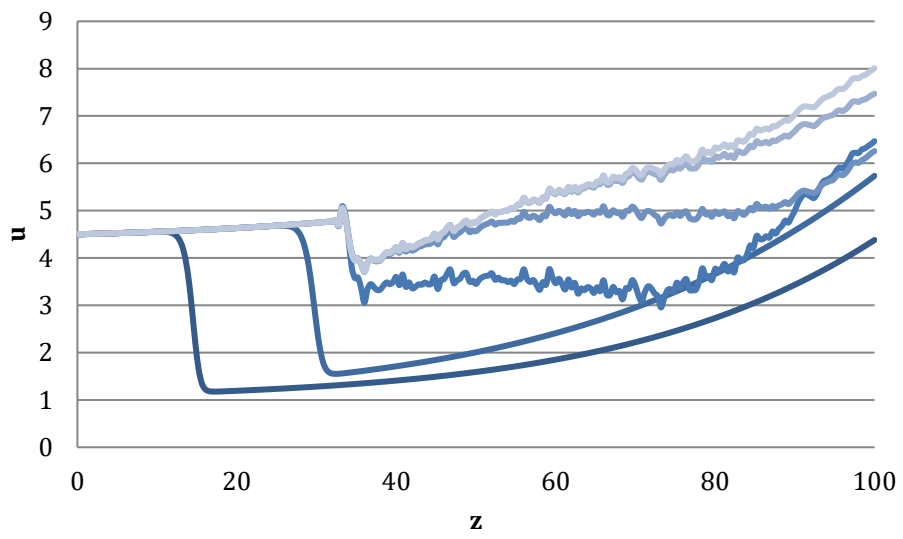
Για την κατασκευή του μοντέλου μειωμένης τάξης θα χρησιμοποιηθεί μια τροχιά και συγκεκριμένα μόνο λίγα αρχικά στιγμιότυπα από το διάστημα $t \in [0,7.5]$ (150 συνολικά). Το συγκεκριμένο σενάριο μπορεί να θεωρηθεί προβλεπτικό, καθώς δοκιμάζει την ικανότητα του μοντέλου μειωμένης τάξης να προβλέψει καταστάσεις του συστήματος εκτός του χρονικού διαστήματος που «γνωρίζει» και να προχωρήσει το σύστημα μπροστά

στο χρόνο. Αυτό φαίνεται και από τις συναρτήσεις βάσης που κατασκευάζονται από την POD (Σχημα 2.17): το σοκ δεν έχει περάσει από τη θέση z = 40,

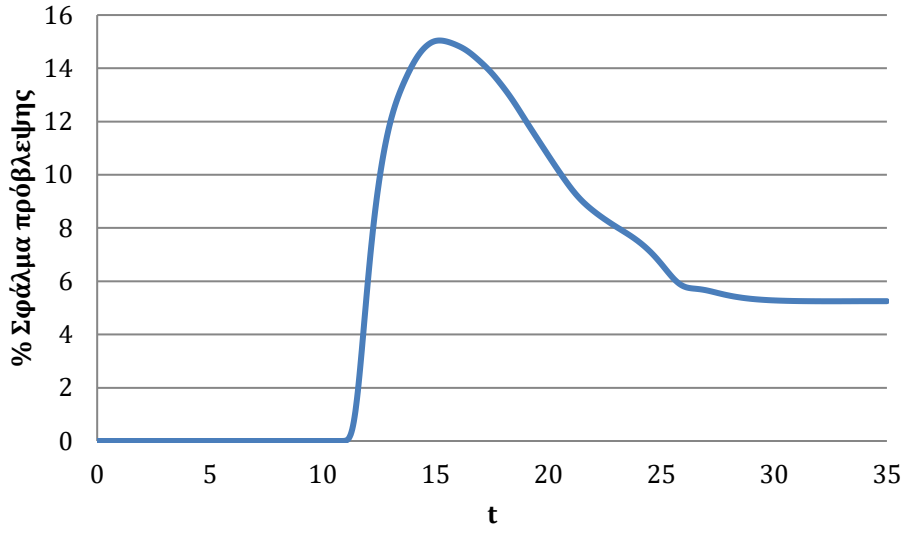


Σχήμα 2.9 Τα πρώτα πέντε ιδιοδιανύσματα του πίνακα συσχέτισης, όπως προκύπτουν από την POD. Από τα ιδιοδιανύσματα αυτά φαίνεται ότι η πληροφορία μετά το z = 40 είναι πολύ φτωχή.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η Φ_1 η οποία διατηρεί τη χαρακτηριστική μορφή της λύσης για αυτό το χρονικό διάστημα. Η δοκιμή έγινε για $(\mu_1, \mu_2) = (4.5, 0.038)$. Και σε αυτή την περίπτωση, ακόμα και αν χρησιμοποιηθούν όλα τα διανύσματα βάσης (150 στο σύνολο), το μοντέλο μειωμένης τάξης δεν μπορεί να δώσει ικανοποιητικές προβλέψεις μετά τη χρονική στιγμή $t = 7.5$.



Σχήμα 2.10 Πρόβλεψη του μοντέλου μειωμένης τάξης διάστασης d = 150.



Σχήμα 2.19 % Σχετικό σφάλμα πρόβέψης για διάσταση βάσης d = 150. Το μοντέλο μειωμένης τάξης αποτυγχάνει να προβλέψει με ακρίβεια καταστάσεις του συτήματος μετά τη χρονική στιγμή t = 10.

Όπως φαίνεται από τα Σχήματα 2.18 και 2.19, οι προβλέψεις που παράγει το μοντέλο είναι λιγότερο ακριβείς από το προηγούμενο σενάριο:

- Δεν προσεγγίζει σωστά τη λύση μόνιμης κατάστασης
- Το σφάλμα πρόβλεψης γίνεται μέχρι και διπλάσιο για ορισμένες χρονικές στιγμές

Αυτό είναι αναμενόμενο, καθώς η πληροφορία που περιέχεται στη βάση είναι ακόμα λιγότερη στην προκειμένη περίπτωση. Αναδεικνύει όμως, ακόμα περισσότερο, την αβεβαιότητα και τον περιορισμό σε ακρίβεια που προσδίδει στις προβλέψεις η πληροφορία που περιέχεται στη βάση.

2.6.2 Εφαρμογή 2: Brusselator

Το δεύτερο πρόβλημα που μελετάται είναι από την περιοχή της χημικής κινητικής [13]. Ο μηχανισμός αντίδρασης που πρόκειται να μελετηθεί, ο Brusselator, είναι ένα παράδειγμα αυτοκαταλυτικής χημικής αντίδρασης που παρουσιάζει ταλαντώσεις. Σε πολλά αυτοκαταλυτικά συστήματα παρατηρείται ενδιαφέρουσα και πολύπλοκη δυναμική συμπεριφορά, συμπεριλαμβανομένων πολλαπλών μονίμων καταστάσεων ή/και περιοδικών λύσεων. Το συγκεκριμένο πρόβλημα, το οποίο προκύπτει από ένα υποθετικό σύστημα αντιδράσεων, αποτελείται από ένα σύστημα συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{D_x}{L^2}\frac{\partial^2 X}{\partial z^2} + X^2Y - (B+1)X + A$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = \frac{D_y}{L^2}\frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} - X^2Y + BX$$

όπου X και Y οι συγκεντρώσεις τον προϊόντων ενδιαφέροντος, οι οποίες εξαρτώνται τόσο από το χρόνο όσο και από τη θέση. Οι τιμές των παραμέτρων του προβλήματος συνοψίζονται στον Πίνακα 2.7:

Πίνακας 2.7: Τιμές παραμέτρων του συστήματος Brusselator.

A	B	D_x	D_y
2.00	5.45	0.008	0.004

Το χαρακτηριστικό μήκος του αντιδραστήρα L, αποτελεί την μοναδική παράμετρο/είσοδο του συστήματος. Οι συνοριακές συνθήκες είναι:

$$X(0,t) = X(1,t) = A, t > 0$$

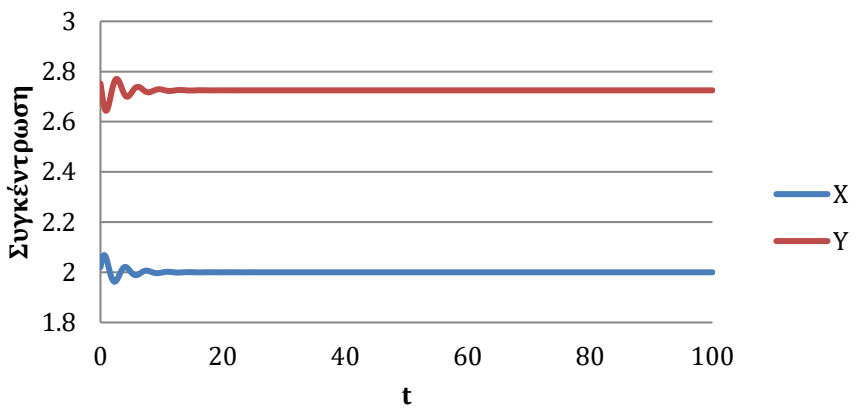
$$Y(0,t) = Y(1,t) = \frac{B}{A}, t > 0$$

Μια λύση μόνιμης κατάστασης του προβλήματος δίνεται από $X = A$ και $Y = B/A$. Στην ουσία πρόκειται για έναν κλάδο τετριμμένων λύσεων από τον οποίο αναδύεται ένας κλάδος περιοδικών λύσεων, από ένα σημείο Hopf. Η διακλάδωση Hopf εμφανίζεται σε τιμές παραμέτρου L=0.5130 k, k=1,2,… [13]. Ως αρχική συνθήκη για το πρόβλημα χρησιμοποιείται μια μικρή διαταραχή ε (εδώ ε = 0.01) από τη λύση μόνιμης κατάστασης:

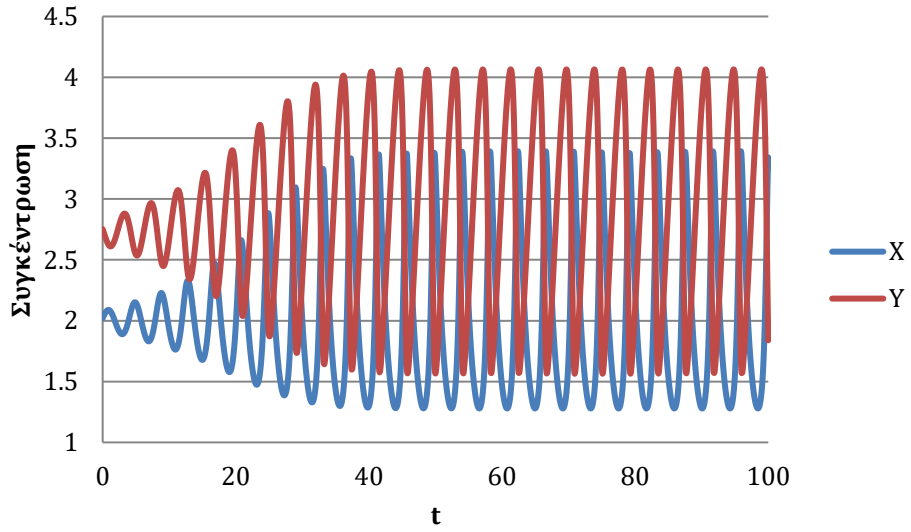
$$X(z,0) = 1.01A, \forall\, z \in [0,1]$$
$$Y(z,0) = 1.01\frac{B}{A}, \forall\, z \in [0,1]$$

Η εξίσωση διακριτοποιείται χωρικά με πεπερασμένες διαφορές. Το μονο-διάστατο χωρίο διακριτοποιείται χρησιμοποιώντας 101 κόμβους οι οποίοι αντιστοιχούν στις θέσεις με συντεταγμένες $z_i = i \times \left(\frac{1}{100}\right), i = 0, 1, \dots, 100$. Το πλήρες μοντέλο, επομένως, είναι διάστασης 202. Το πρόβλημα επιλύεται στο χρονικό διάστημα $t \in [0,100]$ με ένα εννιαίο υπολογιστικό βήμα $\Delta t = 0.1$. Για τη χρονική ολοκλήρωση του συστήματος διαφορικών εξισώσεων χρησιμοποιείται η πεπλεγμένη μέθοδος Euler. Σημειώνεται ότι και σε αυτή την περίπτωση δε χρησιμοποιήθηκε κάποια άμεση μέθοδος, καθώς το σύστημα παρουσιάζει ακαμψία που επιβάλλει πολύ μικρό υπολογιστικό βήμα, ώστε το σχήμα ολοκλήρωσης να είναι αριθμητικά ευσταθές.

Η λύσεις του πλήρους μοντέλου για L = 0.3 και L = 1, που παρουσιάζονται στα Σχήματα 2.20 και 2.21 αντίστοιχα, δείχνουν μια λύσης μόνιμης κατάστασης και μια περιοδική λύση του προβλήματος.

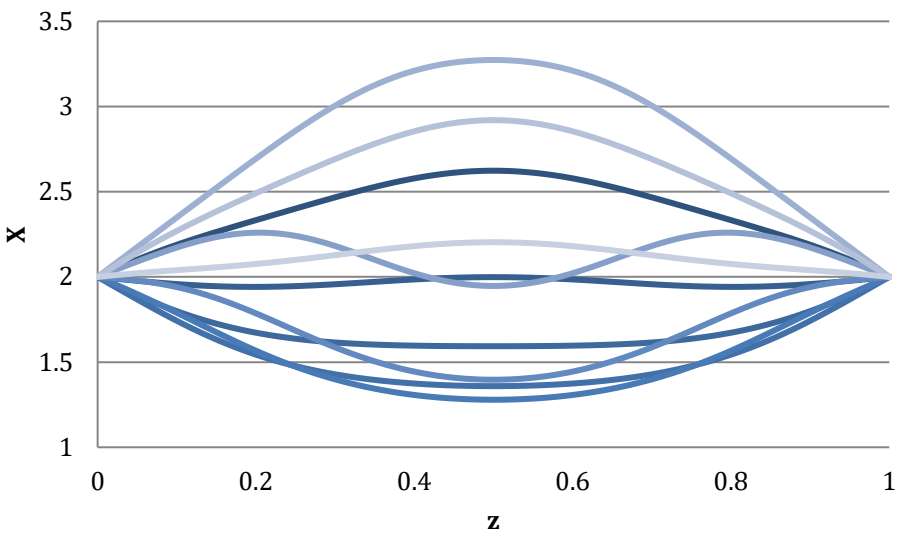


Σχήμα 2.11 Λύση μόνιμης κατάστασης (L =0.3). Μεταβολή της συγκέντρωσης στο σημείο z = 0.5 ως συνάρτηση του χρόνου.

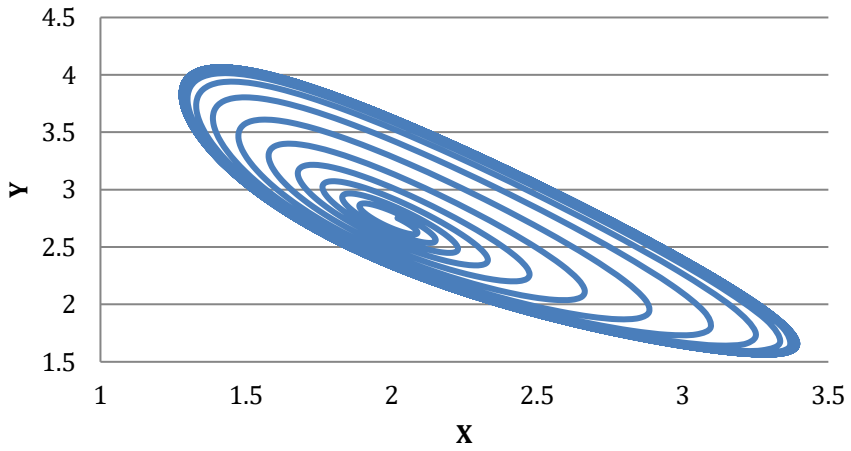


Σχήμα 2.12 Περιοδική λύση (L =1). Μεταβολή της συγκέντρωσης στο σημείο z = 0.5 ως συνάρτηση του χρόνου.

Για την περιοδική λύση παρουσιάζονται και κάποια στιγμιότυπα της κατανομής της συγκέντρωσης του X στον αντιδραστήρα (Σχήμα 2.22), καθώς και ένα πορτρέτο φάσεων που επιβεβαιώνει την περιοδικότητα της λύσης (Σχήμα 2.23).



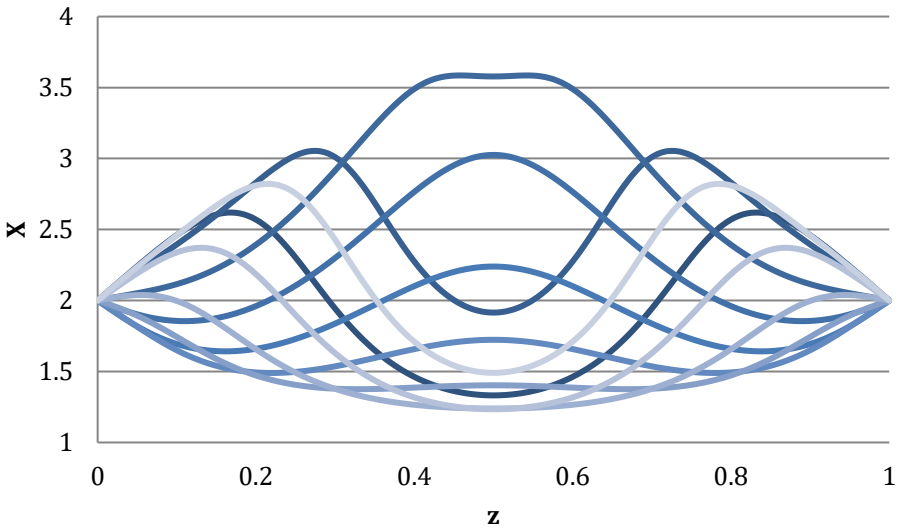
Σχήμα 2.13 Στιγμιότυπα της κατανομής της συγκέντρωσης του X στον αντιδραστήρα για διάφορες χρονικές στιγμές. Χαρακτηριστικά φαίνεται η περιοδική μεταβολή της συγκέντρωσης σε κάθε σημείο ως συνάρτηση του χρόνου.



Σχήμα 2.14 Πορτρέτο φάσεων τον συγκεντρώσεων X και Y σε ένα σημείο του αντιδραστήρα.

Με βάση τα παραπάνω, φαίνεται χαρακτηριστικά το πώς η συγκέντρωση σε κάθε θέση παρουσιάζει ταλαντωτική συμπεριφορά ως συνάρτηση του χρόνου. Η μορφή που αποκτά η κατανομή της συγκέντρωσης αποκτά όλο και πιο ενδιαφέρον σχήμα, καθώς η παράμετρος L αυξάνει, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.24. Αυτό αποτελεί μια πρόκληση για το μοντέλο μειωμένης τάξης και την ικανότητα του να προβλέπει με ακρίβεια καταστάσεις

του συστήματος, υπό τα ίδια σενάρια/περιορισμούς που τέθηκαν και στην προηγούμενη εφαρμογή.



Σχήμα 2.15 Στιγμιότυπα της κατανομής της συγκέντρωσης του X στον αντιδραστήρα για διάφορες χρονικές στιγμές. Η δυναμική συμπεριφορά του συστήματος «εμπλουτίζεται» αυξάνοντας την τιμή της παραμέτρου L.

Η αξιολόγηση της εφαρμογή της μεθόδου POD-Galerkin στο παραπάνω σύστημα θα γίνει υπό τα ίδια τρία βασικά σενάρια που εξετάστηκαν και στην προηγούμενη εφαρμογή:

1) Προβλεπτικότητα ως προς το χώρο παραμέτρων
2) Προβλεπτικότητα ως προς το χώρο παραμέτρων και το χρόνο
3) Προβλεπτικότητα ως προς το χρόνο

Σημειώνεται ότι το σφάλμα πρόβλεψεις θα υπολογίζεται τόσο για τη συγκέντρωση του X όσο και για τη συγκέντρωση του Y.

Σενάριο 1

Για την κατασκευή του μοντέλου μειωμένης τάξης χρησιμοποιούνται πέντε τροχιές του πλήρους μοντέλου για $t \in [0,100]$ για τα σετ παραμέτρων του Πίνακα 2.8:

Πίνακας 2.8: Τιμές της παραμέτρου L για την κατασκευή του μοντέλου μειωμένης τάξης.

Παράμετρος	Σετ παραμέτρων 1	Σετ παραμέτρων 2	Σετ παραμέτρων 3	Σετ παραμέτρων 4	Σετ παραμέτρων 5
L	0.2	0.5	1	1.3	1.6

Τα σετ αυτά ανήκουν τόσο στην περιοχή των περιοδικών όσο και στην περιοχή των λύσεων μόνιμης κατάστασης. Σκοπός είναι το μοντέλο μειωμένης τάξης να μπορεί να κάνει προβλέψεις και για τις δυο περιοχές ανάλογα με την τιμή παραμέτρου/εισόδου. Σημειώνεται ότι στο συγκεκριμένο πρόβλημα, επειδή πρόκεται για σύστημα εξισώσεων, κατασκευάζονται δυο βάσεις Φ_X και Φ_Y και οι λύσεις προσεγγίζονται ως:

$$X \approx \tilde{X} = \Phi_X \hat{x}$$

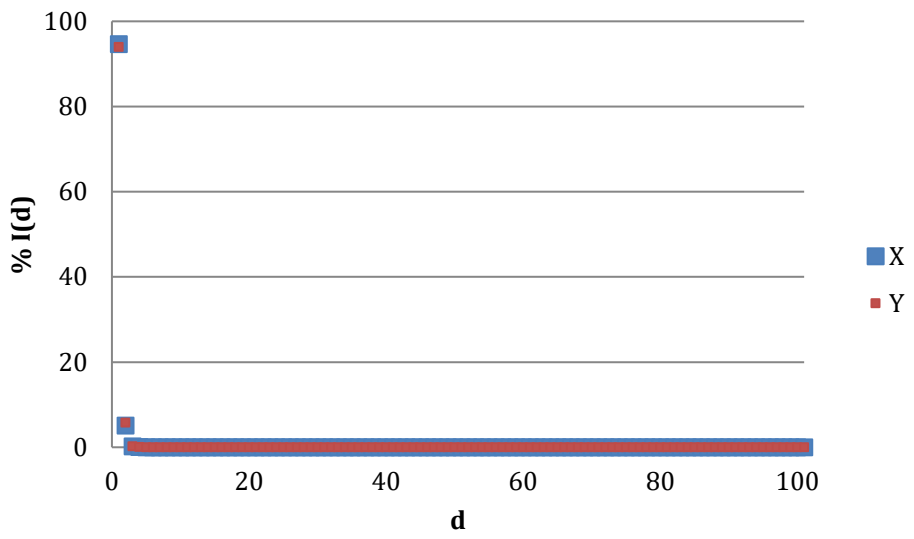
$$Y \approx \tilde{Y} = \Phi_Y \hat{y}$$

Οι πρώτες τρεις ιδιοτιμές των πινάκων συχέτισης των στιγμιοτύπων του X και του Y επαρκούν για να περιλάβουν το 99.9 % της συνολικής πληροφορίας, όπως παρουσιάζεται στον Πίνακα 2.9.

Πίνακας 2.9: Σχετικό πληροφοριακό περιεχόμενο προσεγγίσεων POD για διαφορετικής διάστασης βάσεις

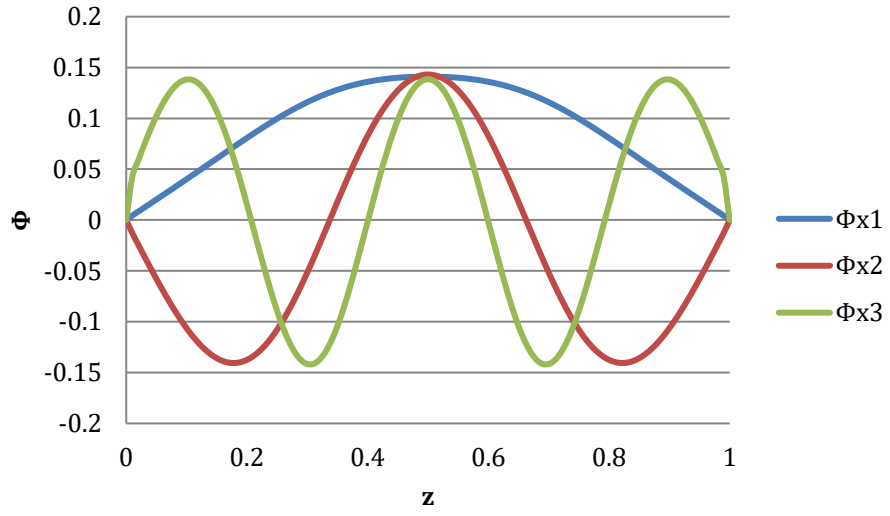
Διάσταση βάσης POD	1	2	3
% I(d) της Φ_X	94.6	99.7	99.9
% I(d) της Φ_Y	94.0	99.7	99.9

Η απότομη μείωση των ιδιοτιμών του πίνακα συσχέτισης φαίνεται και στο Σχήμα 2.25, υποδηλώνοντας ότι τρία ιδιοδιανύσματα για κάθε βάση είναι επαρκή για τη διαδικασία μείωσης τάξης.

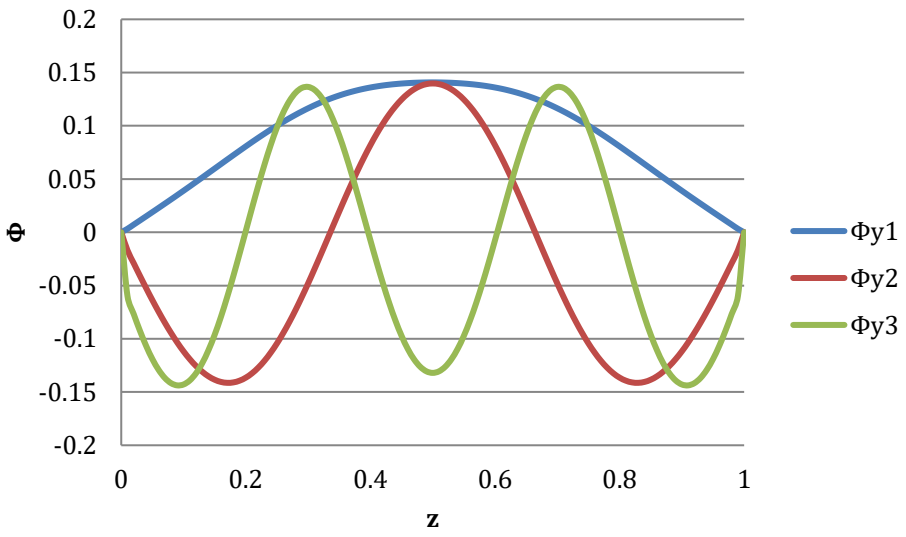


Σχήμα 2.16 Το ποσοστό επί τοις εκτατό του συνολικού πληροφοριακού περιεχομένου που περιλαμβάνει το κάθε διάνυσμα βάσης. Η επιλογή των πρώτων τριών είναι επαρκής για να περιεχθεί το 99.5% της συνολικής πληροφορίας.

Επιλέγοντας τα τρία πρώτα ιδιοδιανύσματα για την κατασκευή των βάσεων τότε προκύπτει ένα μοντέλο μειωμένης τάξης συνολικής διάστασης d = 6. Οι συναρτήσεις βάσης που προκύπτουν από την POD φαίνονται στα Σχήματα 2.26 και 2.27.

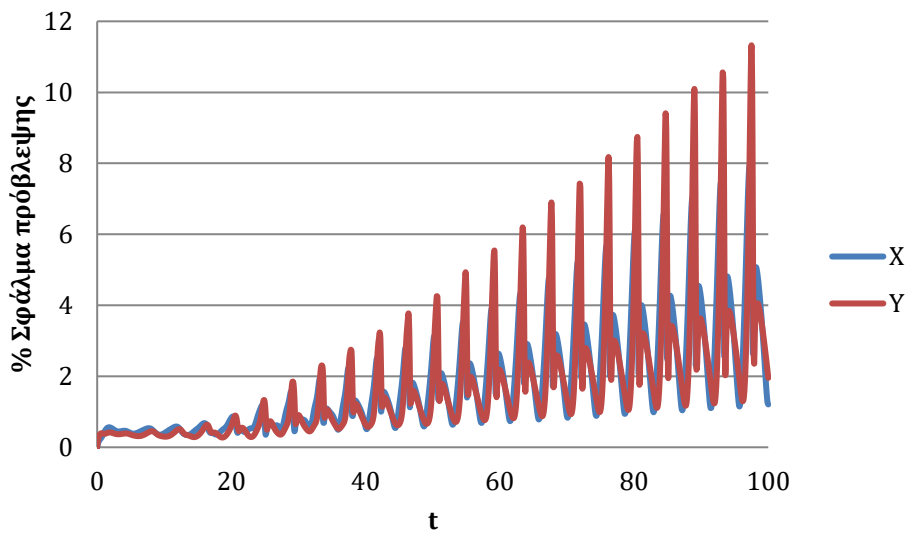


Σχήμα 2.17 Τα πρώτα τρία ιδιοδιανύσματα του πίνακα συσχέτισης των στιγμιοτύπων του X, όπως προκύπτουν από την POD.



Σχήμα 2.18 Τα πρώτα τρία ιδιοδιανύσματα του πίνακα συσχέτισης των στιγμιοτύπων του Y, όπως προκύπτουν από την POD.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει το γεγονός ότι οι πρώτες δυο συναρτήσεις βάσης είναι πανομοιότυπες, ενώ οι τρίτες φαίνονται να έχουν αντίθετο πρόσημο μεταξύ τους εκφράζοντας αυτήν ακριβώς την ταλαντωτική αλληλεπίδραση μεταξύ των συγκεντρώσεων των συστατικών X και Y. Παρατηρείται επίσης ότι οι συναρτήσεις βάσης διατηρούν, με πολύ χαρακτηριστικό τρόπο τη μορφή της λύσης σε αντίθεση με την περίπτωση της εξίσωσης Burgers. Κατά συνέπεια, αναμένεται ότι ένα μοντέλο μειωμένης τάξης για αυτό το σύστημα θα μπορεί να αποδώσει καλύτερες προβλέψεις, με συγκριτικά λιγότερες συναρτήσεις βάσεις. Δοκιμάζοντας το μοντέλο αυτό για μια άγνωστή τροχιά (L = 1.45) η υπόθεση αυτή επιβεβαιώνεται, όπως φαίνεται από το Σχήμα 2.28.



Σχήμα 2.19 % Σχετικό σφάλμα πρόβέψης για συνολική διάσταση d = 6. Το σφάλμα είναι σε πολύ μικρότερα επίπεδα σε σχέση με την αντίστοιχη δοκιμή στην εξίσωση Burgers.

Το σφάλμα πρόβλεψης προκύπτει σημαντικά μικρότερο, αν και παραμένει μεγάλο και ιδιαίτερα για την συγκέντρωση του Y. Σημειώνεται επίσης ότι το μοντέλο, ακόμα και με τρεις συναρτήσεις βάσης, είναι σε θέση να εκφράσει την συνοριακή συνθήκη. Αυτό αναδεικνύει την δυσκολία που επέβαλε η συνοριακή συνθήκη ως παράμετρο στην εξίσωση Burgers'. Αυξάνοντας σταδιακά τη διάσταση της βάσης προκύπτει σταδιακή μείωση του μέσου σφάλματος (Πίνακας 2.10).

Πίνακας 2.10: Μέσο σφάλμα πρόβλεψης για βάσεις διαφόρων διαστάσεων που προκύπτουν από την POD.

d	3	5	10
% Μέσο σφάλμα X	1.87	0.089	0.0004
% Μέσο σφάλμα Y	1.79	0.082	0.0003

Το σφάλμα μειώνεται ραγδαία στο συγκεκριμένο πρόβλημα σε σχέση με την αντίστοιχη αύξηση διάστασης της βάσης. Το σημείο που χρησιμοποιήθηκες για την παραπάνω αξιολόγηση (L = 1.45) ήταν σχετικά κοντά σε κάποιο από τα training points. Για λόγους πρόληψης σημαντικής αύξησης του σφάλματος για πιο «μακρινά» σημεία, θα χρησιμοποιηθούν 10 διανύσματα για κάθε βάση για την διερεύνηση που θα ακολουθήσει.

Η διάσταση του μοντέλου μειωμένης τάξης θα μειωθεί από 202 σε 20. Για την αξιολόγηση του μοντέλου που κατασκευάστηκε, θα δοκιμαστεί η προβλεπτική του ικανότητα για διάφορες τιμές της παραμέτρου L, όπως συνοψίζονται στον Πίνακα 2.11.

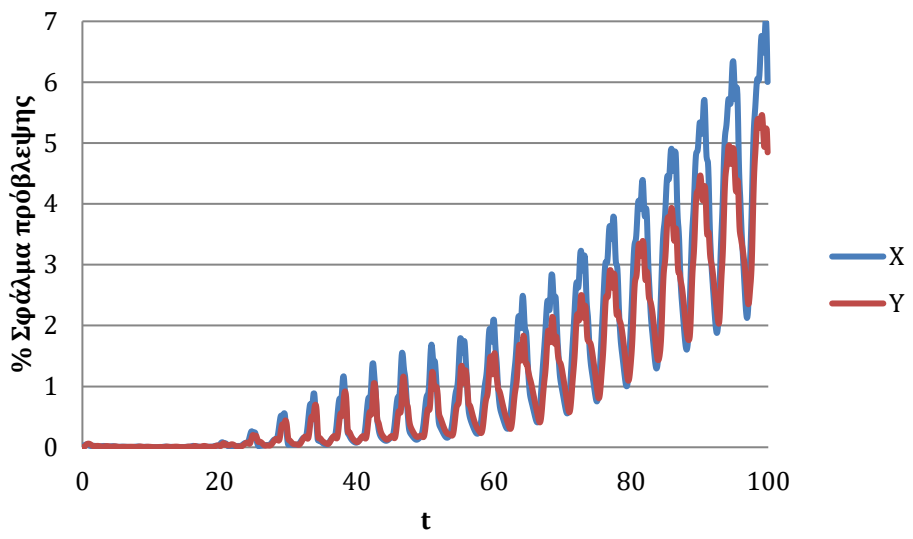
Πίνακας 2.11: Σημεία του χώρου παραμέτρων D στα οποία θα δοκιμαστεί η προβλεπτική ικανότητα.

Παράμετρος	Σετ παραμέτρων 1	Σετ παραμέτρων 2	Σετ παραμέτρων 3	Σετ παραμέτρων 4	Σετ παραμέτρων 5
L	0.1	0.4	1.5	2	3

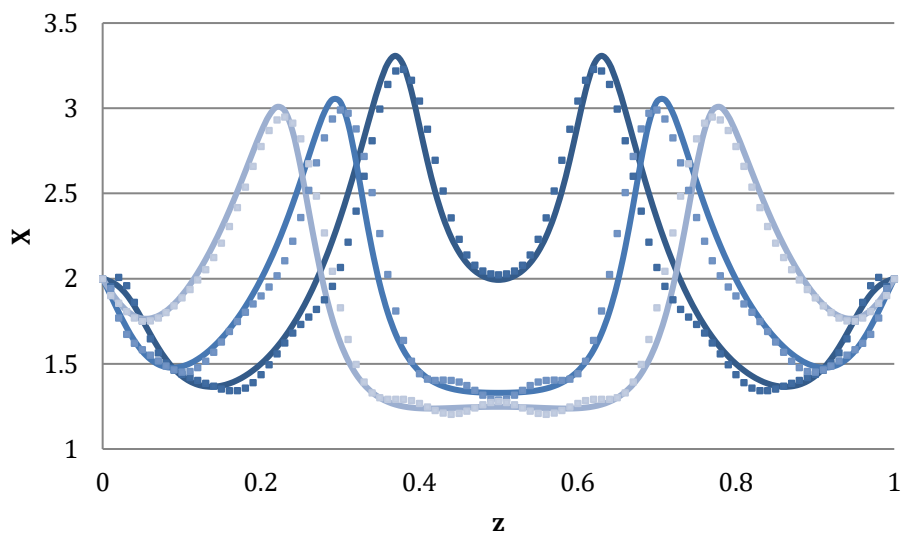
Πίνακας 2.12: Αποτελέσματα δοκιμών

L	0.1	0.4	1.5	2	3
% Μέσο σφάλμα X	0.00005	0.00005	0.0004	0.0049	0.08
% Μέσο σφάλμα Y	0.00001	0.00002	0.0003	0.0047	0.07

Σύμωνα με τον Πίνακα 2.12, όσο η τιμή της παραμέτρου L απομακρύνεται από το training set, το σφάλμα πρόβλεψης αυξάνει. Παρά το γεγονός αυτό, το σφάλμα παραμένει της τάξης του 10^{-2} το οποίο είναι πολύ ικανοποιητικό. Αυξάνοντας όμως ακόμη περισσότερο την τιμή της παραμέτρου (L = 5), το σφάλμα πρόβλεψης πλέον γίνεται σημαντικό όπως και αναμένεται (Σχήματα 2.29 και 2.30).



Σχήμα 2.20 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης για συνολική διάσταση d = 20 για την τιμή παραμέτρου L = 5.



Σχήμα 2.21 Ορισμένα στιγμιότυπα της λύσης (με συνεχή γραμμή) και οι αντίστοιχες προβλέψεις του μοντελου μειωμένης τάξης (με ασυνεχή σημεία). Το μοντέλο δεν αποδίδει καλές προβλεψεις για τιμή παραμέτρου L = 5.

Το μοντέλο μειωμένης τάξης ανταποκρίθηκε πολύ ικανοποιητικά στις περισσότερες δοκιμές, αποδίδοντας προβλέψεις με πολύ μεγάλη ακρίβεια έως και της τάξης του 10^{-5}. Η μείωση τάξης κρίνεται ιδιαίτερα ικανοποιητική, καθώς οι βαθμοί ελευθερίας υποδεκαπλασιάζονται, παραμένοντας σχετικά κοντά στο κριτήριο του πληροφοριακού περιεχομένου I(d), ιδιαίτερα σε σχέση με την περίπτωση της εξίσωσης Burgers. Επίσης

ήταν σε θέση να περιγράψει και τη λύση μόνιμης κατάστασης, αλλά και τις περιοδικές λύσεις. Τέλος επιβεβαιώνεται η επίδραση της πληροφορίας που περιέχεται στη βάση στην προβλεπτική ικανότητα, καθώς οι προβλέψεις για σημεία «μακριά» από το training set δεν ήταν εξίσου καλές.

Από τη σκοπιά της μείωσης του υπολογιστικού κόστους, ο χρόνος επίλυσης μειώθηκε ουσιαστικά σε αυτό το πρόβλημα (σε όρους πραγματικού χρόνου). Οι χρόνοι επίλυσης φαίνονται στον Πίνακα 2.13.

Πίνακας 2.13: Χρόνος επίλυσης

	Πλήρες μοντέλο	Μοντέλο μειωμένης τάξης
Χρόνος Επίλυσης (s)	11.2	1.8

Στη συγκεκριμένη εφαρμογή φαίνεται ότι μια δραστική μείωση της τάξης μπορεί να έχει σημαντικά υπολογιστικά οφέλη, ακόμα και αν συνεχίζει να απαιτείται ο υπολογισμός της μη γραμμικής συνάρτησης σε κάθε υπολογιστικό βήμα.

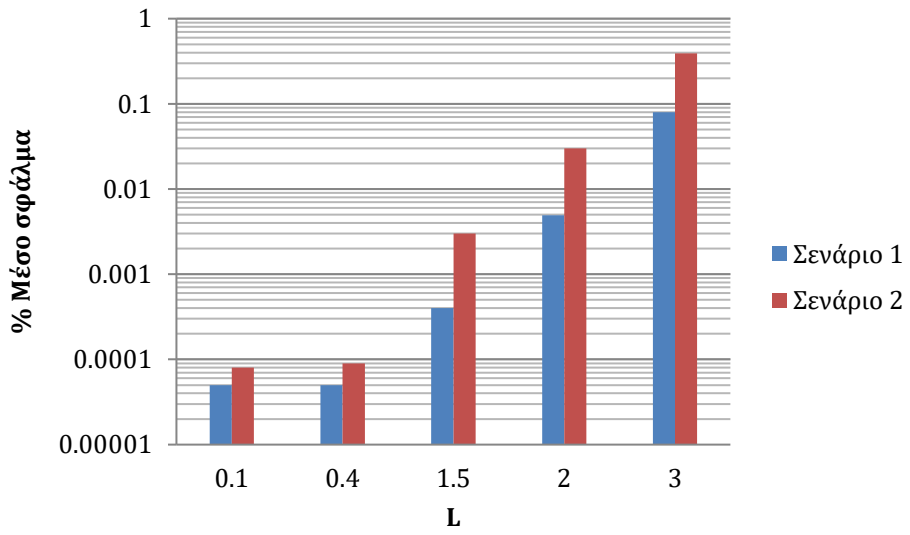
Σενάριο 2

Για την κατασκευή του μοντέλου μειωμένης τάξης χρησιμοποιούνται οι ίδιες τρεις τροχιές με το προηγούμενο σενάριο, αλλά αξιοποιώντας μόνο τα στιγμιότυπα στο χρονικό διάστημα $t \in [0,10]$ (100 συνολικά για κάθε τροχιά), πριν δηλαδή το σύστημα φτάσει σε περιοδική λύση. Το γεγονός αυτό επιβάλει μια επιπλέον πρόκληση στο μοντέλο μειωμένης τάξης. Θα πρέπει να είναι σε θέση προβλέψει καταστάσεις του συστήματος για χρονικές στιγμές που εμφανίζεται η μόνιμη περιοδικότητα, ενώ τέτοια στιγμιότυπα δεν χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή του. Ως εκκίνηση σε αυτή τη διερεύνηση θα χρησιμοποιηθούν, όπως και στο προηγούμενο σενάριο, δέκα διανύσματα για κάθε βάση. Τα αποτελέσματα των δοκιμών συνοψίζονται στον Πίνακα 2.14.

Πίνακας 2.14: Αποτελέσματα δοκιμών

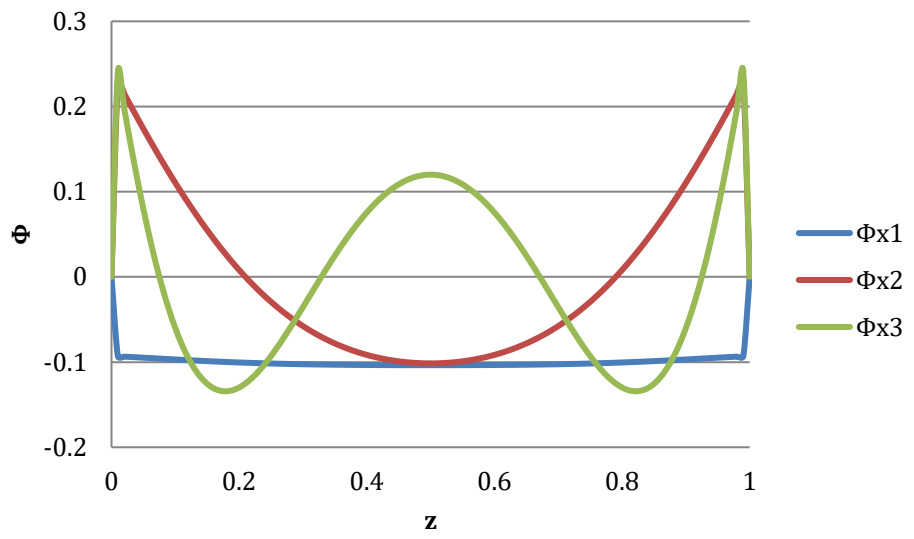
L	0.1	0.4	1.5	2	3
% Μέσο σφάλμα X	0.00008	0.00009	0.003	0.03	0.39
% Μέσο σφάλμα Y	0.00003	0.00007	0.004	0.04	0.36

Το μέσο σφάλμα πρόβλεψης, σύμφωνα με το Σχήμα 2.31, αυξήθηκε περίπου κατά μια τάξη μεγέθους συγκριτικά με το σενάριο 1, αλλά παραμένει ικανοποιητικό με μια πρώτη ματιά, καθώς παραμένει κάτω από το 1%.



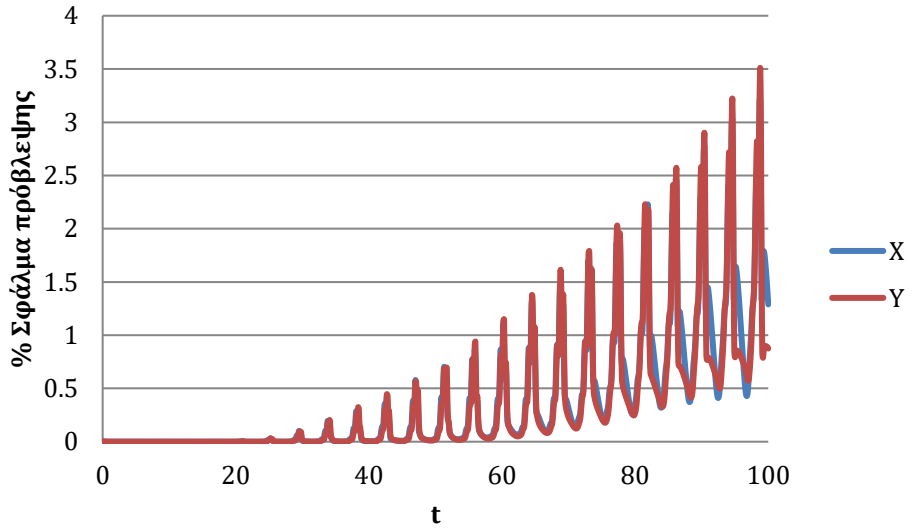
Σχήμα 2.22 Αύξηση του μέσου σφάλματος κατά περίπου μια τάξη μεγέθους σε σχέση με το Σενάριο 1. Η ικανότητα πρόβλεψης, εκ πρώτης όψεως, παραμένει ικανοποιητική.

Αυτό μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός ότι η χωρική κατανομή της λύσης δεν αλλάζει σημαντικά πριν και αφού η λύση γίνει περιοδική. Αυτό φαίνεται από τα διανύσματα βάσης που υπολογίζονται από την POD (Σχήμα 2.32). Αυτά διατηρούν παρόμοια μορφή με εκείνα του Σχήματος 2.26.



Σχήμα 2.23 Τα πρώτα τρία διανύσματα της βάσης Φx. Τα διανύσματα αυτά διατηρούν τη φυσιογνωμία της λύσης, ακόμη και όταν αυτή γίνει περιοδική.

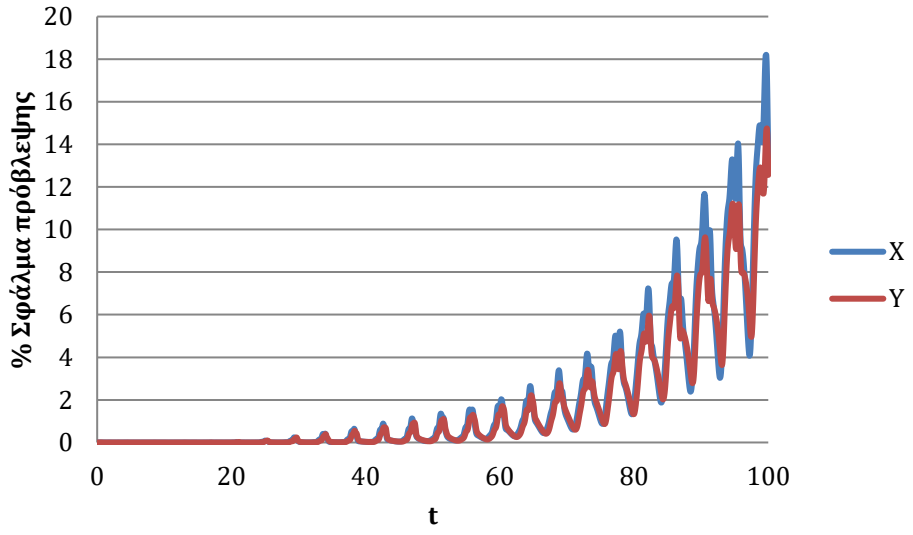
Η γραφική παράσταση του σχετικού σφάλματος πρόβλεψης ανά υπολογιστικό βήμα, για την τιμή παραμέτρου L = 3, παρέχει μια επιπλέον πληροφορία για την ακρίβεια του μοντέλου, σύμφωνα με το Σχήμα 2.33.



Σχήμα 2.24 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης για την τιμή παραμέτρου L = 3.

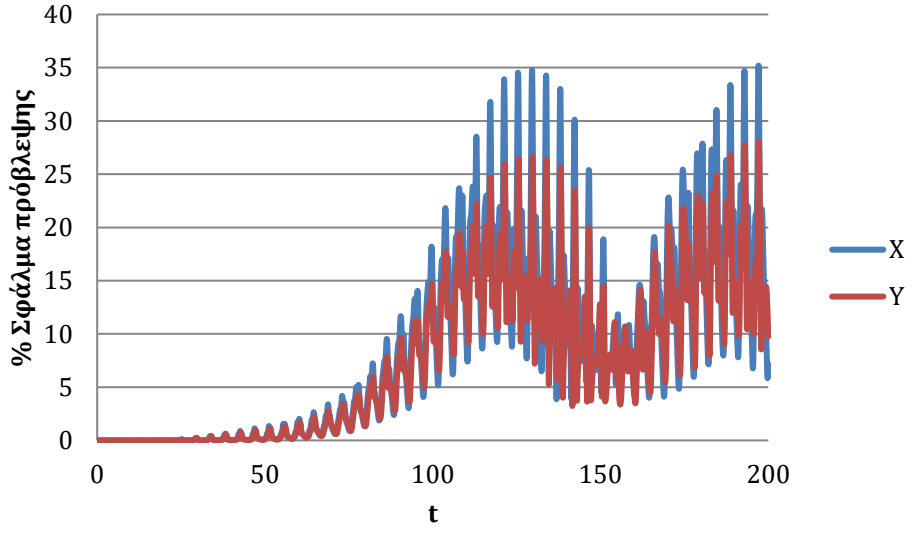
Το σφάλμα είναι πολύ μικρό για το πρώτο χρονικό διάστημα, όπου η βάση διαθέτει την απαραίτητη πληροφορία, αλλά σταδιακά αυξάνει και συγκεκριμένα στην περιοχή όπου

ξεκινά η λύση να γίνεται περιοδική. Για την τιμή παραμέτρου L = 5 το σφάλμα αυξάνει ακόμα περισσότερο (Σχήμα 2.34).

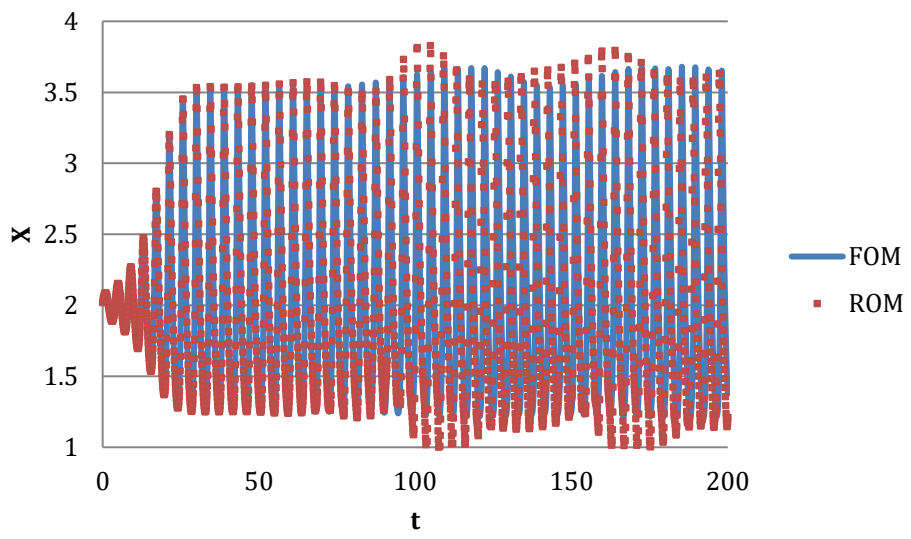


Σχήμα 2.25 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης για την τιμή παραμέτρου L = 3.

Αυξάνοντας το χρόνο επίλυσης στο διάστημα t ∈ [0,200] φαίνεται σαφώς, ότι το μοντέλο μειωμένης τάξης δεν είναι σε θέση να διατηρήσει την περιοδική λύση, με το σφάλμα να αυξάνει ακόμα περισσότερο (Σχήματα 2.35 και 2.36).

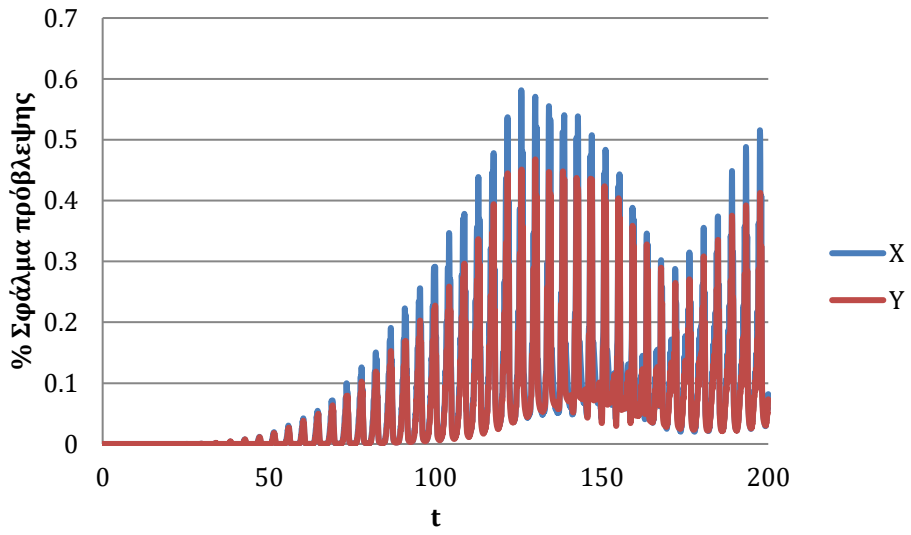


Σχήμα 2.26 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης για την τιμή παραμέτρου L = 5 στο διάστημα [0,200].



Σχήμα 2.27 Μεταβολή της συγκέντρωσης του X στο σημείο z = 0.5 ως συνάρτηση του χρόνου. Το μοντέλο μειωμένης τάξης δεν είναι σε θέση να διατηρήσει την περιοδικότητα της λύσης.

Σε αντίθεση με την περίπτωση της εξίσωσης Burgers, αυξάνοντας τον αριθμό των διανυσμάτων κάθε βάσης επιτυγχάνεται σημαντική μείωση του σφάλματος. Συγκεκριμένα αυξάνοντας από 10 σε 23 διανύσματα το σφάλμα μειώνεται σε επίπεδα κάτω του 1% (Σχήμα 2.37).



Σχήμα 2.28 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης για την τιμή παραμέτρου L = 5. Η αύξηση της διάστασης της βάσης μείωσε σημαντικά το σφάλμα πρόβλεψης.

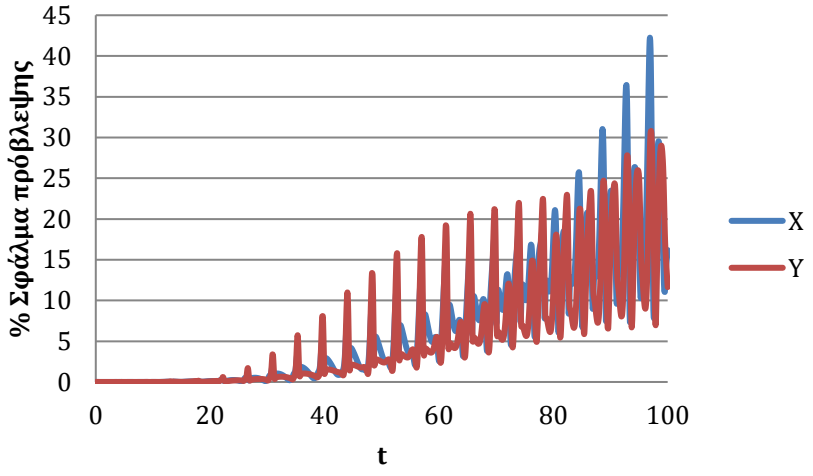
Αν και εκ πρώτης όψεως το αποτέλεσμα φαίνεται ικανοποιητικό, ο αριθμός των βαθμών ελευθερίας πρακτικά διπλασιάστηκε. Σε ένα μεγάλης κλίμακας πρόβλημα, αυτό θα μπορούσε να σημάνει ιδιαίτερα σημαντική αύξηση στο υπολογιστικό κόστος. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα ο χρόνος επίλυσης αυξήθηκε περίπου τρεις φορές (Πίνακας 2.15).

Πίνακας 2.15: Χρόνος επίλυσης

	Πλήρες μοντέλο	Μοντέλο μειωμένης τάξης
Χρόνος Επίλυσης (s)	11.2	5.1

Σενάριο 3

Για την κατασκευή του μοντέλου μειωμένης τάξης θα χρησιμοποιηθεί μια τροχιά αξιοποιώντας μόνο λίγα αρχικά στιγμιότυπα από το διάστημα $t \in [0,10]$ (100 συνολικά). Το συγκεκριμένο σενάριο μπορεί να θεωρηθεί ως προβλεπτικό, καθώς δοκιμάζει την ικανότητα του μοντέλου μειωμένη τάξης να υπολογίσει καταστάσεις του συστήματος εκτός του χρονικού διαστήματος που «γνωρίζει», καθώς η περιοδικότητα της λύσης τη χρονική στιγμή t = 10 δεν έχει αποκατασταθεί πλήρως. Συγκεκριμένα η πρώτη δοκιμή γίνεται για τιμή της παραμέτρου L = 3 και 10 διανύσματα βάσης. Τα αποτελέσματα φαίνονται στο Σχήμα 2.38.

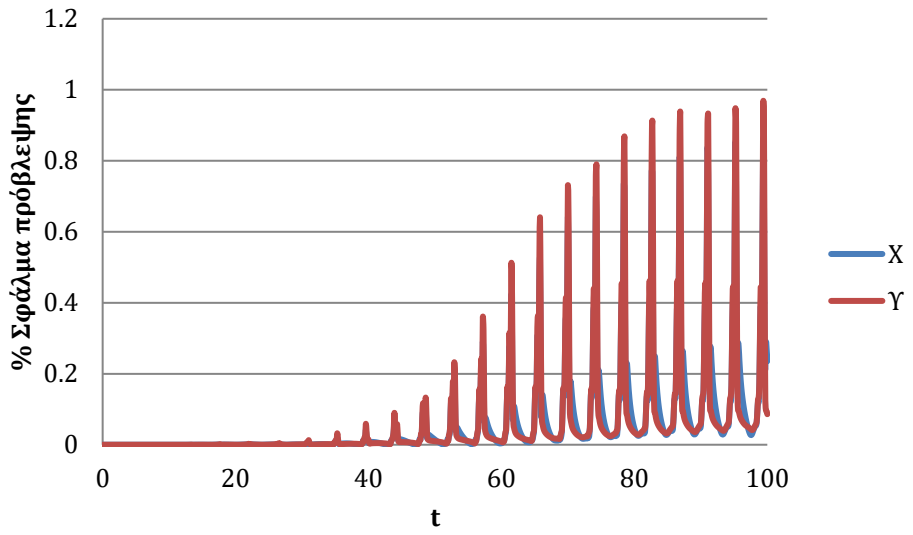


Σχήμα 2.29 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης για την τιμή παραμέτρου L = 3 και d = 10. Το σφάλμα είναι αρχικά μικρό, στην περιοχή που η βάση έχει πληροφορία, ενώ στη συνέχεια αυξάνει σημαντικά.

Το σφάλμα πρόβλεψης:

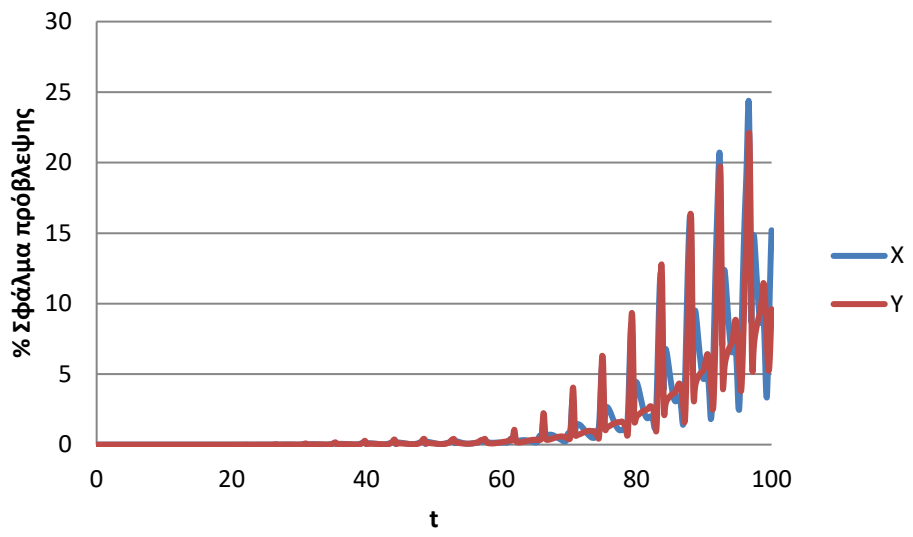
1) Παραμένει χαμηλό για το χρονικό διάστημα όπου η περιοδικότητα δεν έχει αποκατασταθεί ακόμη
2) Από εκεί και μετά αυξάνει ραγδαία, ως αναμένεται, καθώς η βάση δεν διαθέτει την απαραίτητη πληροφορία για αυτό το φαινόμενο

Αυξάνοντας των αριθμό των διανυσμάτων κάθε βάσης από 10 σε 20 επιτυγχάνεται και σε αυτή την περίπτωση σημαντική μείωση του σφάλματος (Σχήμα 2.39). Το σφάλμα συνεχίζει να διατηρεί τα χαρακτηριστικά που αναφέρονται παραπάνω: παρουσιάζει αυξητική τάση εκτός της περιοχής που «γνωρίζει».

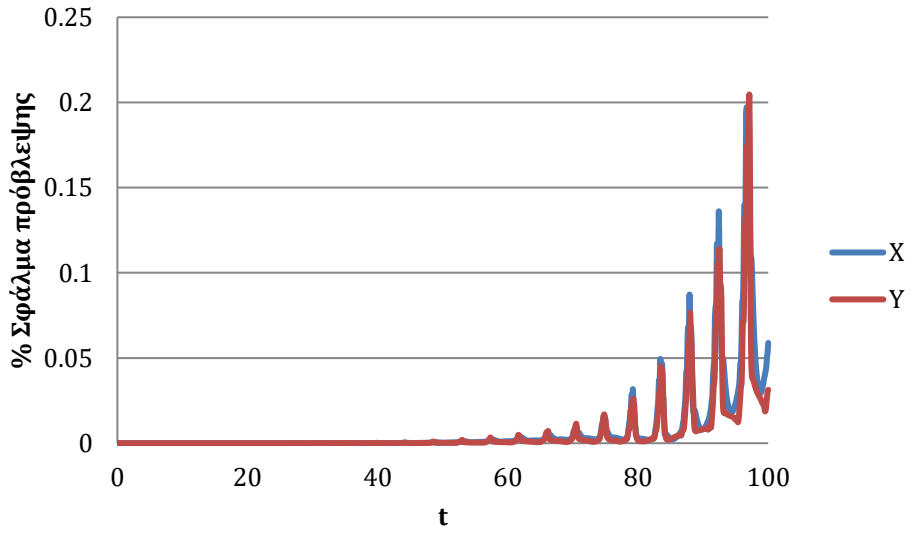


Σχήμα 2.39 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης για L = 3 και d = 20. Μια αύξηση στη διάσταση έδωσε πιο ικανοποιητικές προβλέψεις.

Για την τιμή παραμέτρου L = 5, για την οποία η δυναμική συμπεριφορά του συστήματος γίνεται ακόμα πιο σύνθετη, δεν ισχύουν οι ίδιες παρατηρήσεις. Το σφάλμα πρόβλεψης παραμένει υψηλό (Σχήμα 2.40), εκτός και αν η διάσταση της βάσης φτάσει μέχρι και 50 (συνολικά 100 βαθμοί ελευθερίας), όπου πλέον όμως η μείωση τάξης του μοντέλου κρίνεται μη ικανοποιητική (Σχήμα 2.41).



Σχήμα 2.30 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης τιμή παραμέτρου L =5 και d = 20. Το σφάλμα παραμένει υψηλό παρά την αρχική διάσταση της βάσης.



Σχήμα 2.31 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης τιμή παραμέτρου L =5 και d = 50. Το σφάλμα μειώθηκε σημαντικά εις βάρος όμως της ζητούμενης μείωσης τάξης του μοντέλου.

Συνοψίζοντας, με βάση την ανάλυση που έγινε στις δυο παραπάνω εφαρμογές, προκύπτουν δυο βασικά συμπεράσματα για μείωση τάξης με τη μέθοδο POD-Galerkin:

1) Η πληροφορία που περιέχεται στην POD βάση, περιορίζει σε σημαντικό βαθμό τις προβλέψεις του μοντέλου μειωμένης τάξης, ιδιαίτερα για σημεία μακριά από το

training set. Μια αύξηση της διάστασης της βάσης δεν μπορεί απαραίτητα να μειώσει το σφάλμα πρόβλεψης, όπως φάνηκε στην πρώτη εφαρμογή. Αν μπορεί είναι εις βάρος της μείωσης τάξης του πλήρους μοντέλου, αναιρώντας τα πιθανά υπολογιστικά οφέλη.

2) Ο περιορισμός της εξέλιξης των μεταβλητών κατάστασης σε κάποιο γραμμικό υπόχωρο του αρχικού χώρου κατάστασης, συχνά δεν επαρκεί για μια δραστική μείωση τάξης του πλήρους μοντέλου. Συγκεκριμένα, και στις δυο εφαρμογές, οι βαθμοί ελευθερίας που απαιτήθηκαν για την παραγωγή ικανοποιητικών προβλέψεων, ήταν σημαντικά μεγαλύτερες από ότι αρχικά υποδείκνυε το κριτήριο του πληροφοριακού περιεχομένου.

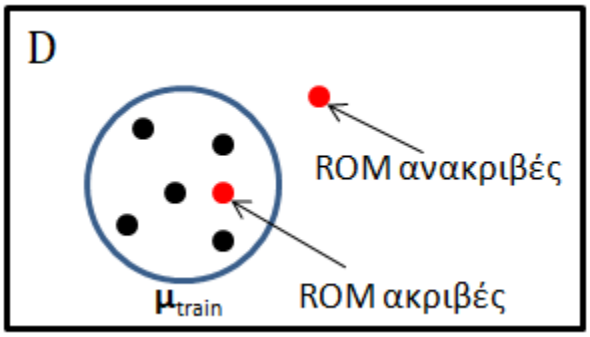
Στα παρακάτω κεφάλαια παρουσιάζονται δυο μεθοδολογίες που αποσκοπούν στην αντιμετώπιση αυτών των προβλημάτων/shortcomings:

1) Μια μεθοδολογία εκ των υστέρων βελτίωσης ενός μοντέλου POD-Galerkin, η οποία αντιμετωπίζει, με υπολογιστικά οικονομικό τρόπο, την πιθανή έλλειψη πληροφορίας της βάσης POD [3].
2) Μια εναλλακτική μεθοδολογία μείωσης τάξης, η οποία προβάλει τις εξισώσεις σε μια μη γραμμική πολλαπλότητα (nonlinear manifold) αντί για κάποιο γραμμικό υπόχωρο, με στόχο τη δραστικότερη μείωση της τάξης του πλήρους μοντέλου [4].

3. Διεύρυνση της βάσης POD

3.1 Εισαγωγή

Ενώ τα μοντέλα μειωμένης τάξης (Reduced Order Models, ROMs) – σε πολλές περιπτώσεις – είναι σε θέση να κάνουν γρήγορες προβλέψεις, δεν είναι εγγυμένο ότι οι προβλέψεις αυτές θα είναι και ακριβείς. Η ακρίβεια των προβλέψεων καθορίζεται σημαντικά από τη συνάφεια του online προβλήματος με τα στιγμιότυπα – και κατά συνέπεια το σετ των παραμέτρων $\boldsymbol{\mu}_{train}$ - που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή της βάσης POD. Εάν ένα φαινόμενο δεν παρατηρήθηκε σε αυτά τα στιγμιότυπα, τότε αυτό θα λείπει και από τις προβλέψεις. Κατά συνέπεια τα μοντέλα μειωμένης τάξης μπορούν να είναι ακριβή σε σημεία $\boldsymbol{\mu}$ που βρίσκονται σε μια λογική «γειτονιά» του σετ παραμέτρων $\boldsymbol{\mu}_{train}$, αλλά είναι γενικά ανακριβή για σημεία μακριά από αυτό το σετ [3].



Εικόνα 3.1 Το μοντέλο μειωμένης τάξης είναι ακριβές για σημεία σε μια στενή γειτονιά των σημείων μ_{train}

Η έλλειψη ελέγχου σφάλματος αποκλείει τη χρήση των μοντέλων μειωμένης τάξης σε αρκετές εφαρμογές. Για παράδειγμα στην ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας, αν η αβεβαιότητα που οφείλεται στο σφάλμα της λύσης του μοντέλου κυριαρχεί σε σχέση με άλλες πηγές αβεβαιότητας, τότε αυτό δεν μπορεί να αξιοποιηθεί με χρήσιμο τρόπο. Τέτοια προβλήματα δημιουργούν την ανάγκη για έναν αποτελεσματικό μηχανισμό βελτίωσης του μοντέλου μειωμένης τάξης, ώστε να επιτυγχάνονται ακριβείς προβλέψεις[3].

Η πιο κοινή προσέγγιση για την βελτίωση ενός μοντέλου μειωμένης τάξης, όταν αυτό κρίνεται ανακριβές, ακολουθεί την εξής διαδικασία:

1) Επίλυση του πλήρους μοντέλου για το τρέχον υπολογιστικό βήμα ή για κάποιο νέο σετ παραμέτρων μ
2) Προσθήκη της λύσης στη βάση POD
3) Αξιοποίηση του νέου – εμπλουτισμένου μοντέλου μειωμένης τάξης

Αν και η παραπάνω μέθοδος είναι αξιόπιστη και απλή στην εφαρμογή απαιτεί υπολογισμούς μεγάλης κλίμακας. Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται μια φθηνή μεθοδολογία, υπό την έννοια ότι δεν απαιτεί επιπλέον ακριβές προσομοιώσεις του πλήρους μοντέλου, εκ των υστέρων βελτίωσης ενός μοντέλου μειωμένης τάξης, μέσω κατάλληλου διαμερισμού της βάσης [3].

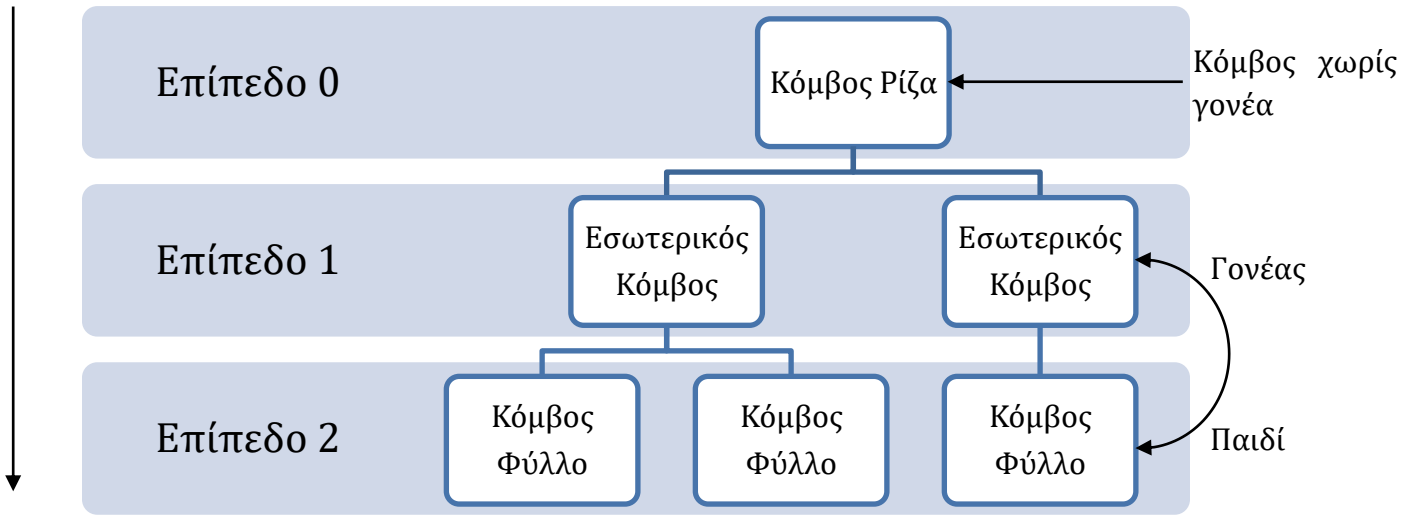
3.2 Μηχανισμός διεύρυνσης της βάσης με διαμερισμό

Έστω μια αρχική βάση $\mathbf{V}^{(0)} = \Phi \in \mathbb{R}^{N\times p}$ και $\mathbf{X}$ ο πίνακας των στιγμιοτύπων που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή της. Σκοπός είναι ο διαμερισμός των διανυσμάτων της βάσης με κατάλληλο τρόπο, ώστε το μοντέλο μειωμενης τάξης να παράγει πιο ακριβείς προβλέψεις, ακόμη και εκτός της στενής γειτονιάς των σημείων $\boldsymbol{\mu}_{\text{train}}$. Ο μηχανισμός διαμερισμού περιγράφεται στις παρακάτω υποενότητες.

Σημείωση: Από εδώ και κάτω ορίζεται: $\mathbb{N}(k) = \{1, \dots, k\}$ και $\text{card}[\mathbb{N}(k)] = k$

3.2.1 Δενδρική Δομή

Αρχικά ορίζεται η δενδρική δομή (tree data structure) που περιγράφει το μηχανισμό διαμερισμού.



Κόμβοι φύλλα → Κόμβοι χωρίς παιδιά

Το δέντρο χαρακτηρίζεται από δυο συναρτήσεις:

1) την $C: \mathbb{N}(\mathrm{m}) \to \mathcal{P}(\mathbb{N}(\mathrm{m}))$ που περιγράφει την τοπολογία του δέντρου (κόμβος γονέας – κόμβος παιδί)
2) την $E: \mathbb{N}(\mathrm{m}) \to \mathcal{P}(\mathbb{N}(\mathrm{N}))$ που περιγράφει το σετ των στοιχείων που ανήκουν σε κάθε κόμβο. Ως m ορίζεται ο αριθμός των κόμβων στο δέντρο και $\mathcal{P}$ το powerset.

Στη συγκεκριμένη εφαρμογή, κάθε διάνυσμα βάσης $\mathbf{u}_\mathrm{i}$, $\mathrm{i} \in \mathbb{N}(\mathrm{p})$ χαρακτηρίζεται από:

- έναν κόμβο στο δέντρο $d_i \in \mathbb{N}(\mathrm{m})$
- ένα σετ $E(d_i)$ που περιέχει τις θέσεις των μη μηδενικών στοιχείων του
- πιθανούς διαμερισμούς $C(d_i)$

Άν ένα διάνυσμα βάσης $\mathbf{u}_\mathrm{i}$ διαμεριστεί, τότε αντικαθίσταται στη βάση από $\mathrm{q_i} := \mathrm{card}(C(d_i))$ αριθμό διανυσμάτων «παιδιά», των οποίων οι θέσεις των μη μηδενικών στοιχείων τους ορίζονται από την E ως $E(\mathrm{k})$, $\mathrm{k} \in C(d_i)$. Οι τιμές αυτών των μη μηδενικών στοιχείων είναι ίδιες με αυτές του αρχικού διανύσματς βάσης $\mathbf{u}_\mathrm{i}$.

Στη συνέχεια επιβάλλονται οι εξής περιορισμοί στο δέντρο:

1) ο κόμβος ρίζα περιέχει όλα τα στοιχεία:

$$E(1) = \mathbb{N}(\mathrm{N}) \tag{3.1}$$

2) οι κόμβοι παιδιά κάθε κόμβου γονέα, περιέχουν όλα τα στοιχεία του γονέα, ενώ δεν μοιράζονται κοινά στοιχεία μεταξύ τους. Δηλαδή για κάθε $\mathrm{i} \in \mathbb{N}(\mathrm{m})$ ισχύει,

$$E(\mathrm{j}) \cap E(\mathrm{k}) = \emptyset \quad \forall\, \mathrm{j}, \mathrm{k} \in C(\mathrm{i}), \mathrm{j} \neq \mathrm{k} \tag{3.2}$$

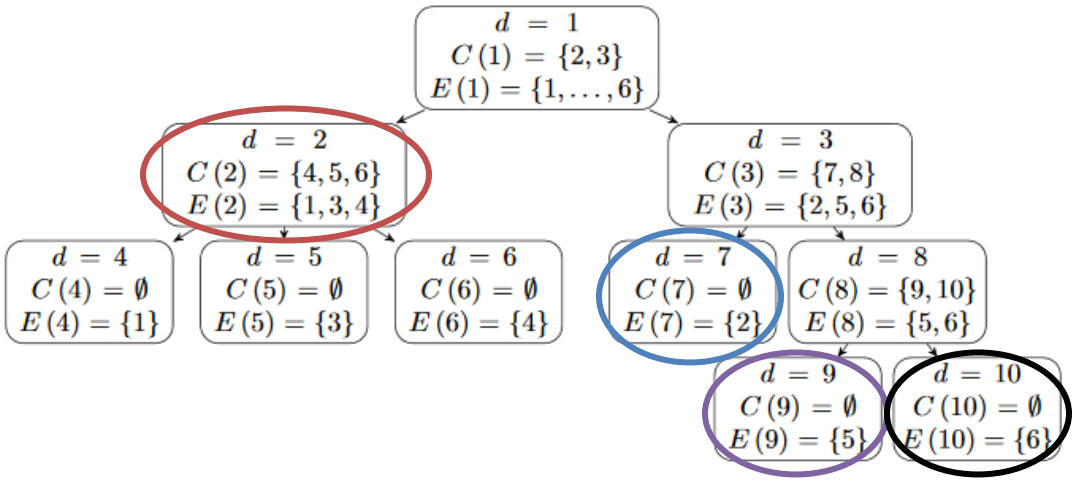
$$\cup_{\mathrm{j} \in C(\mathrm{i})} E(\mathrm{j}) = E(\mathrm{i}) \tag{3.3}$$

3) Κάθε στοιχείο συσχετίζεται με έναν μόνο κόμβο φύλλο,

$$\forall\, \mathrm{k} \in \mathbb{N}(\mathrm{N}), \exists\, \mathrm{i} \in \mathbb{N}(\mathrm{m}) \mid E(\mathrm{i}) = \mathrm{k}, C(\mathrm{i}) = \emptyset \tag{3.4}$$

Όπως θα φανεί παρακάτω, οι περιορισμοί αυτοί καθορίζουν κρίσιμες ιδιότητες της μεθόδου. Για λόγους επεξήγησης δίνεται ένα παράδειγμα διαμερισμού με βάση τη δομή ενός τέτοιου δέντρου.

<u>Παράδειγμα</u>: Έστω η αρχική βάση $\mathbf{V}^{(0)} = \mathbf{u}_1{}^{(0)} \in \mathbb{R}^{6\times 1}$. Στην Εικόνα 3.2 φαίνεται ένα παράδειγμα δέντρου για αυτή την περίπτωση:



Εικόνα 3.2: Παράδειγμα δέντρου

Έστω ότι η αρχική βάση έχει διαμεριστεί σε p = 4 διανύσματα, σύμφωνα με το παραπάνω δέντρο, με $\mathrm{d}_1 = 2, \mathrm{d}_2 = 7, \mathrm{d}_3 = 9$ και $\mathrm{d}_4 = 10$. Η διαμερισμένη βάση θα έχει ως εξής:

$$V = \begin{bmatrix} u_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_{12} & 0 & 0 \\ u_{13} & 0 & 0 & 0 \\ u_{14} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_{16} \end{bmatrix}$$

Από δω και κάτω οι συναρτήσεις C και E εμπλουτίζονται με δυο ορίσματα i και j:

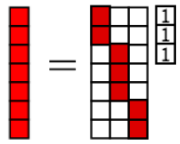
- $C(i,j)$ το j κόμβο παιδί του κόμβου γονέα i
- $E(i,j)$ το j στοιχείο του κόμβου i

3.2.2 Διαμερισμός της βάσης

Έστω μια «αραιή» βάση $\mathbf{V}^H \in \mathbb{R}^{\mathrm{N}\times \mathrm{p}}$ η οποία, σε πρώτο στάδιο, είναι ίση με την αρχική $\mathbf{V}^{(0)} = \Phi$. Η βάση αυτή περιγράφεται από τον κόμβο ρίζα του δέντρου που κατασκευάστηκε. Έστω και μια «πυκνή» βάση $\mathbf{V}^h \in \mathbb{R}^{\mathrm{N}\times q}$ η οποία αντιστοιχεί στην αραιή

βάση, με τα διανύσματά της διαμερισμένα σύμφωνα με τα παιδιά του τρέχοντος κόμβου γονέα. Η σχέση μεταξύ των δυο βάσεων ορίζεται ως:

$$\mathbf{V}^H = \mathbf{V}^h \mathbf{I}_H^h \tag{3.5}$$



Όπου $\mathrm{I}_\mathrm{H}^\mathrm{h} \in \{0,1\}^{\mathrm{q}\times\mathrm{p}}$ ο τελεστής επιμήκυνσης. Στη συνέχεια, για κάθε σετ συντεταγμένων που σχετίζονται με την αραιή βάση, μπορούν να υπολογιστούν οι αντίστοιχες που σχετίζονται με την πυκνή ως:

$$\hat{\mathbf{x}}_H^h = \mathbf{I}_H^h \mathbf{x}_h^H \tag{3.6}$$

Χρησιμοποιώντας τη δομή δέντρου, όπως περιγράφηκε παραπάνω, οι ποσότητες αυτές μπορούν να οριστούν με ακρίβεια. Αρχικά ορίζεται η συνάρτηση $f: (\mathrm{i},\mathrm{j}) \to \mathrm{k}$ η οποία παρέχει τους απαραίτητους δείκτες, οι οποίοι κατευθύνουν το διαμερισμό ενός διανύσματος της πυκνής βάσης στα αντίστοιχα της αραιής.

$$f(\mathrm{i},\mathrm{j}) = \sum_{\mathrm{k}<i} \mathrm{q_k} + \mathrm{j}, \;\; \mathrm{j} \in \mathbb{N}(\mathrm{q_i}), \;\; \mathrm{i} \in \mathbb{N}(\mathrm{p}), \;\; \mathrm{q_i} = \mathrm{card}[C(d_i)] \tag{3.7}$$

Ο αριθμός των διανυσμάτων στη βάση μετά το διαμερισμό θα είναι:

$$\mathrm{q} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{p}} \mathrm{q_i} \tag{3.8}$$

Σύμφωνα με την f ορίζονται η πυκνή βάση και ο τελεστής επιμήκυνσης αντίστοιχα ως:

$$\mathrm{u}_\mathrm{ij}^h = \begin{cases} \mathrm{u}_\mathrm{ij}^H, & \exists\, \mathrm{k} \mid \mathrm{j} = f(\mathrm{l},\mathrm{k}), \;\; \mathrm{i} \in E(C(\mathrm{d_l},\mathrm{k})) \\ 0, & \text{σε άλλη περίπτωση} \end{cases} \tag{3.9}$$

$$\left[I_H^h\right]_{ij} = \begin{cases} 1, & \exists\, \mathrm{k} \mid \mathrm{i} = f(\mathrm{j},\mathrm{k}) \\ 0, & \text{σε άλλη περίπτωση} \end{cases} \tag{3.10}$$

Με βάση τους περιορισμούς που επιβάλονται στο δέντρο προκύπτουν οι παρακάτω ιδιότητες [3]:

1) Η μεθοδολογία δημιουργεί μια ιεραρχία υπόχωρων, τέτοια ώστε $\mathrm{range}(\mathbf{V}^H) \subseteq \mathrm{range}(\mathbf{V}^h)$

2) Αν το μοντέλο μειωμένης τάξης συνέκλινε πριν το διαμερισμό, τότε θα συγκλίνει μονοτονικά και μετά το διαμερισμό
3) Μια πλήρως διαμερισμένη βάση αποδίδει ένα μοντέλο μειωμένης τάξης ισοδύναμο με το πλήρες μοντέλο

Η προτεινόμενη μέθοδος δηλαδή δημιουργεί μια ακολουθία ιεραρχικών υπόχωρων για το μοντέλο μειωμένης τάξης, που υπό συνθήκες συγκλίνει στο μοντέλο πλήρους τάξης, επιτρέποντας του να υπολογίζει όλο και πιο ακριβείς λύσεις. Παρά το γεγονός αυτό, ο ρυθμός σύγκλισης είναι άγνωστος, πράγμα που αποκλείει κάποια εκ των προτέρων εγγύηση ότι το μοντέλο μειωμένης τάξης θα παραμείνει πραγματικά χαμηλής διαστάσης, ιδιαίτερα για ισχυρές απαιτήσεις σε ακρίβεια [3].

Σημείωση: Μετά τον διαμερισμό, ώστε να αποφεύγεται η πιθανότητα κατασκευής μιας βάσης ελλιπούς τάξης, υπολογίζεται μια QR παραγοντοποίηση της.

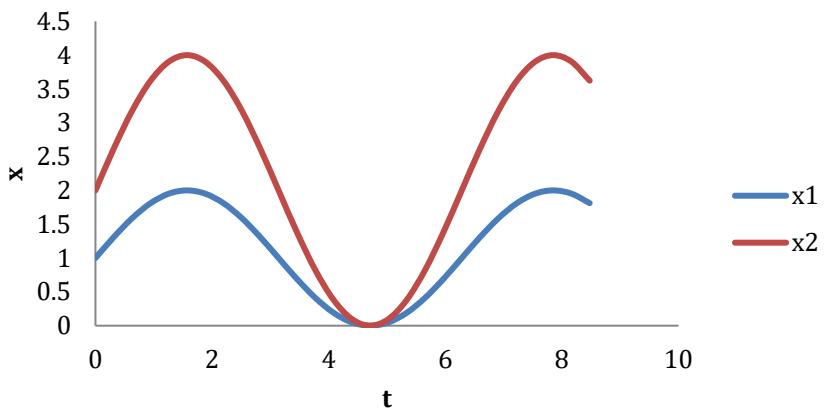
3.2.3 Κατασκευή του δέντρου

Οποιοδήποτε δέντρο που ικανοποιεί τους περιορισμούς 1-3 θα περιέχει αυτές τις κρίσιμες ιδιότητες. Μια προσέγγιση για την κατασκευή ενός τέτοιου δέντρου βασίζεται στον παρακάτω ευρετικό κανόνα:

> *Ισχυρά συσχετισμένες μεταβλητές κατάστασης x_i, μπορούν να περιγράφονται με ακρίβεια από τις ίδιες γενικευμένες συντεταγμένες $\hat{x}$ και για αυτό θα πρέπει να ανήκουν στον ίδιο βρόγχο του δέντρου.*

Προς αιτιολόγηση/παρουσίαση του ευρετικού κανόνα παρουσιάζεται το παρακάτω παράδειγμα.

Παράδειγμα: Έστω το διάνυσμα μεταβλητών κατάστασης $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{4\times1}$, η βάση $\Phi \in \mathbb{R}^{4\times1}$και ($x_1$, x_2) και (x_3, x_4) δυο ζεύγη ισχυρά συσχετισμένων μεταβλητών κατάστασης.



Σχήμα 3.1 Παράδειγμα δυο συσχετισμένων μεταβλητών κατάστασης.

Έστω ότι το πρώτο ζεύγος (x_1, x_2) υπολογίστηκε ως:

$$x_1 = \sin(t) + 1 \text{ και } x_2 = 2 \cdot (\sin(t) + 1)$$

που αιτιολογεί τη συσχέτισή τους. Οι δυο μεταβλητές φαίνεται ότι θα μπορούσαν να περιγραφούν από την ίδια γενικευμένη συντεταγμένη $\hat{x} = \sin(t) + 1$ ως:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \hat{x}$$

Έτσι φαίνεται το αποτέλεσμα ενός διαμερισμού με βάση τον ευρετικό κανόνα και το πώς οι συσχετισμένες μεταβλητές κατάστασης θα περιγράφονται από τις ίδιες γενικευμένες συντεταγμένες.

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{bmatrix} [\hat{x}] \xrightarrow[\text{Διαμερισμός}]{} x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} \Phi_1 & 0 \\ \Phi_2 & 0 \\ 0 & \Phi_3 \\ 0 & \Phi_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{matrix} (x_1, x_2) \sim \hat{x}_1 \\ (x_3, x_4) \sim \hat{x}_2 \end{matrix}$$

3.3 Προσδιορισμός συσχετισμένων μεταβλητών

Ένας τρόπος προσδιορισμού των συσχετισμένων μεταβλητών είναι η χρήση του αλγορίθμου ταξινόμησης k-means (k-means clustering) στον πίνακα των στιγμιοτύπων **X**.

Η k-means είναι μια από τις πλέον γνωστές και αξιοποιημένες μεθόδου μηχανικής μάθησης, λόγω της απλότητας και της ταχύτητάς της. Σκοπός της είναι, δεδομένου ενός

συνόλου **n** παρατηρήσεων, η αναγνώριση και ο σχηματισμός **k** ομάδων (clusters) οι οποίες θα περιέχουν παρατηρήσεις παρόμοιες μεταξύ τους, υπό μια σαφώς ορισμένη έννοια (π.χ. Ευκλείδεια απόσταση), έναντι των παρατηρήσεων που θα ανήκουν στις υπόλοιπες ομάδες [14].

Πριν την χρήση της k-means στον πίνακα των στιγμιοτύπων γίνεται η εξής προεπεξεργασία του:

1) κανονικοποίηση των παρατηρήσεων κάθε μεταβλητής κατάστασης ως:

$$\mathbf{X}(\mathrm{i},\cdot) = \frac{\mathbf{X}(\mathrm{i},\cdot)}{\|\mathbf{X}(\mathrm{i},\cdot)\|} \quad \mathrm{i} = 1, \dots, \mathrm{N} \tag{3.11}$$

2) εάν η πρώτη παρατήρηση της μεταβλητής κατάστασης είναι αρνητική (για να είναι δυνατή η ανίχνευση αρνητικής συσχέτισης), οι παρατηρήσεις της αντικαθίστανται με:

$$\mathbf{X}(\mathrm{i},\cdot) = -\mathbf{X}(\mathrm{i},\cdot) \tag{3.12}$$

Μετά από αυτήν την επεξεργασία οι συσχετισμένες - είτε θετικά είτε αρνητικά - μεταβλητές κατάστασης θα έχουν μικρή Ευκλείδεια απόσταση μεταξύ τους, επιτρέποντας στην k-means να τις αναγνωρίζει ως ομάδα [3].

Η μεθοδολογία διαμερισμού της βάσης μπορεί να αξιοποιηθεί σε ένα πλαίσιο με συνεχή διαμερισμό που θα γίνεται τοπικά για κάποια διανύσματα βάσης, κατά τη διάρκεια της επίλυσης, σύμφωνα με κάποιο δείκτη σφάλματος [3]. Στην συγκεκριμένη εργασία ο διαμερισμός γίνεται μια φορά - στο πρώτο επίπεδο του δέντρου - και διερευνάται η απόδοση της, με σκοπό να αξιοποιηθεί μελλοντικά στο πλαίσιο POD με τεχνητά νευρωνικά δίκτυα, όπου τέτοιοι δείκτες δε θα είναι διαθέσιμοι και επομένως δεν μπορει να υλοποιηθεί κάποιος προσαρμοστικός αλγόριθμος.

3.4 Εφαρμογές

Η μέθοδολογία διαμερισμού της βάσης εφαρμόζεται στα δυο μη γραμμικά προβλήματα: 1) εξίσωση Burgers και 2) Brusselator. Σκοπός της εφαρμογής είναι η διερεύνηση του κατά πόσο ο διαμερισμός της βάσης, σε ένα πρώτο επίπεδο, μπορεί να μειώσει το σφάλμα πρόβλεψης και ιδιαίτερα για σετ παραμέτρων που βρίσκονται μακριά από το training set.

Υπενθυμίζεται ότι για σημεία του χώρου παραμέτρων μακριά από αυτό το σετ, η POD βάση πιθανόν δεν διαθέτει την απαραίτητη πληροφορία για να τα περιγράψει και κατά συνέπεια να παράξει ακριβείς προβλέψεις. Μια πιθανή μείωση του σφάλματος μέσω αυτής της μεθοδολογίας μπορεί να αποδώσει σημαντικά υπολογιστικά οφέλη, καθώς αίρει την ανάγκη για εμπλουτισμό της POD βάσης με νέα στιγμιότυπα, τα οποία πρκύπτουν από ακριβές προσομοιώσεις του πλήρους μοντέλου. Η εφαρμογή της μεθόδου θα αξιολογηθεί με βάση τους εξής κύριους άξονες:

1) Μείωση του σφάλματος πρόβλεψης σε σχέση με την απλή εφαρμογή της μεθόδου POD-Galerkin
2) Σχέση μεταξύ τελικής διάστασης μοντέλου μειωμένης τάξης και ακρίβεια πρόβλεψης

3.4.1 Εφαρμογή 1: Παραμετροποιημένη μη ιξώδης εξίσωση Burgers

Για λόγους σύγκρισης, συνοψίζονται τα τρία σενάρια υπό τα οποία δοκιμάστηκε η μέθοδος POD-Galerkin μαζί με κάποια βασικά συμπεράσματα:

<u>Σενάριο 1</u>: Προβλεπτικότητα ως προς το χώρο παραμέτρων

- Μείωση τάξης από 251 σε 80 βαθμούς ελευθερίας
- Ικανοποίηση της συνοριακής συνθήκης-παραμέτρου
- Ικανοποιητική ακρίβεια για όλες τις δοκιμές
- Πιθανή μείωση και του υπολογιστικού κόστους

<u>Σενάριο 2</u>: Προβλεπτικότητα ως προς το χώρο παραμέτρων και το χρόνο

- Αξιοποίηση και των 151 διαθέσιμων διανυσμάτων βάσης
- Ικανοποίηση συνοριακής συνθήκης και λύσης μόνιμης κατάστασης
- Σφάλμα πρόβλεψης υψηλό για πολλές χρονικές στιγμές → ανεπιτυχής εφαρμογή

<u>Σενάριο 3</u>: Προβλεπτικότητα ως προς το χρόνο

- Αξιοποίηση και των 151 διαθέσιμων διανυσμάτων βάσης
- Ικανοποίηση συνοριακής συνθήκης, αλλά όχι της λύσης μόνιμης κατάστασης

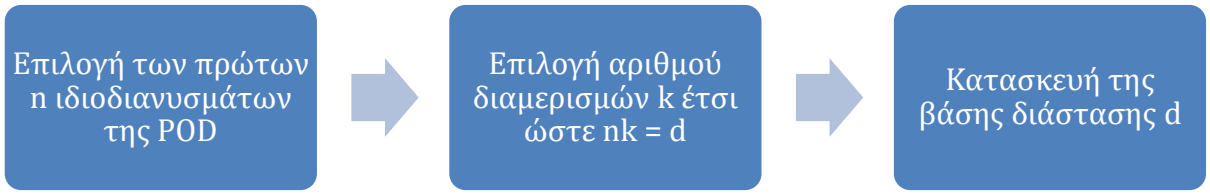
- Σφάλμα πρόβλεψης ακόμα υψηλότερο σε αυτή το σενάριο για πολλές χρονικές στιγμές → ανεπιτυχής εφαρμογή

Οι παραπάνω δοκιμές, με τα αντίστοιχα αποτελέσματα, θα αποτελέσουν τη βάση ως προς την οποία θα αξιολογηθούν τα αποτελέσματα της μεθοδολογίας διαμερισμού. Πιθανά ζητούμενα είναι:

1) Η επίτευξη της ίδιας ακρίβειας χρησιμοποιώντας λιγότερα διανύσματα βάσης
2) Η μείωση του σφάλματος χρησιμοποιώντας τον ίδιο αριθμό διανυσμάτων βάσης
3) Η μείωση του σφάλματος χρησιμοποιώντας λιγότερα διανύσματα βάσης

Σενάριο 1

Μια «αραιή» βάση που αποτελείται από 80 διανύσματα μπορεί να προκύψει με αρκετούς τρόπους από τα διανύσματα της αρχικής, «πυκνής» βάσης. Σχηματικά η μεθοδολογία που εφαρμόζεται φαίνεται στην Εικόνα 3.3.



Εικόνα 3.3: Εναλλακτικοί τρόποι διαμερισμού σε ένα επίπεδο

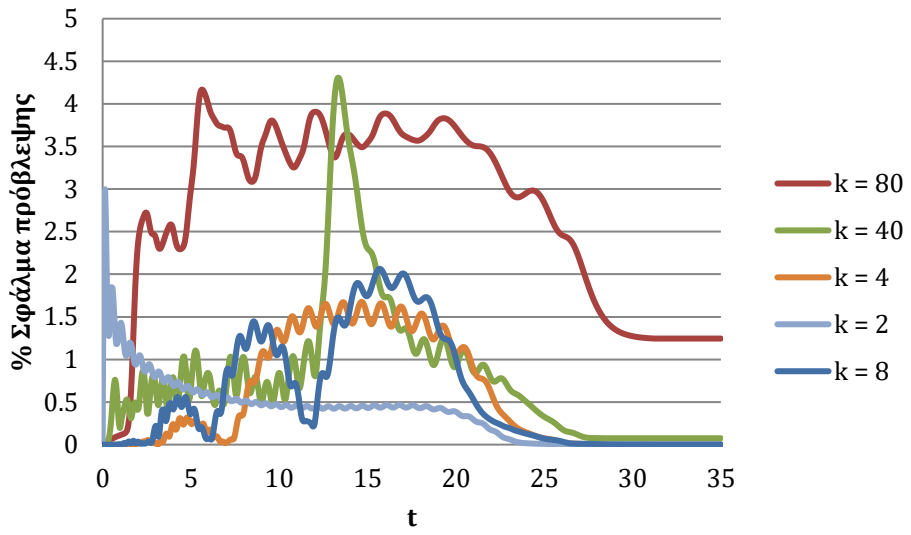
Εναλλακτικοί τρόποι διαμερισμού σε ένα επίπεδο ενδέχεται να παράγουν περισσότερο ή λιγότερο ακριβείς προβλέψεις. Αρχικά εξετάζεται ποιά στρατηγική διαμερισμού αποδίδει τα μικρότερα σφάλματα:

1) Πολλά διανύσματα βάσης – μικρός αριθμός διαμερισμών
2) Λίγα διανύσματα βάσης – μεγάλος αριθμός διαμερισμών

Οι δοκιμές που παρουσιάζονται έγιναν για το σετ $(\mu_1, \mu_2) = (4.5, 0.038)$, όπου κατά την εφαρμογή της POD-Galerkin είχε παρατηρθεί και το μεγαλύτερο σφάλμα. Οι συνδυασμοί που εξετάζονται, ενδεικτικά για τις δυο στρατηγικές, παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.1.

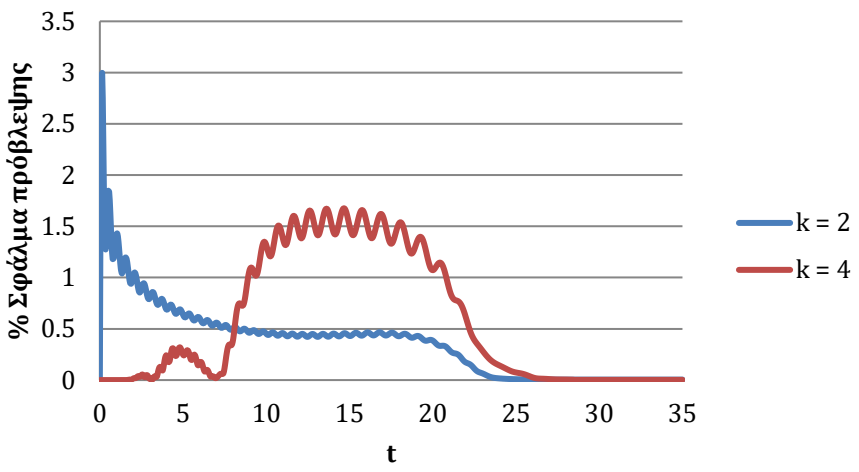
Πίνακας 3.1: Ενδεικτικοί συνδυασμοί για την κατασκευή μιας βάσης 80 διανυσμάτων

Αριθμός διανυσμάτων βάσης n	1	2	10	20	40
Αριθμός διαμερισμών k	80	40	8	4	2



Σχήμα 3.2 Το σφάλμα πρόβλεψης είναι μικρότερο για επιλογή πολλών διανυσμάτων και μικρό αριθμό διαμερισμών.

Σύμφωνα με το Σχήμα 3.2, η επιλογή πολλών διανυσμάτων βάσης με μικρό αριθμό διαμερισμών φαίνεται να παράγει καλύτερες προβλέψεις. Ενδιαφέρον παρουσιάζει το γεγονός ότι, για εναλλακτικούς διαμερισμούς που προκύπτουν μέσω αυτής της στρατηγικής, το σφάλμα πρόβλεψης μεταβάλλεται με διαφορετικό τρόπο ως συνάρτηση του χρόνου. Αυτό φαίνεται χαρακτηριστικά στο Σχήμα 3.3.



Σχήμα 3.3 Τα κύρια σφάλματα πρόβλεψης παρατηρούνται σε διαφορές χρονικές στιγμές για τους δυο εναλλακτικούς διαμερισμούς.

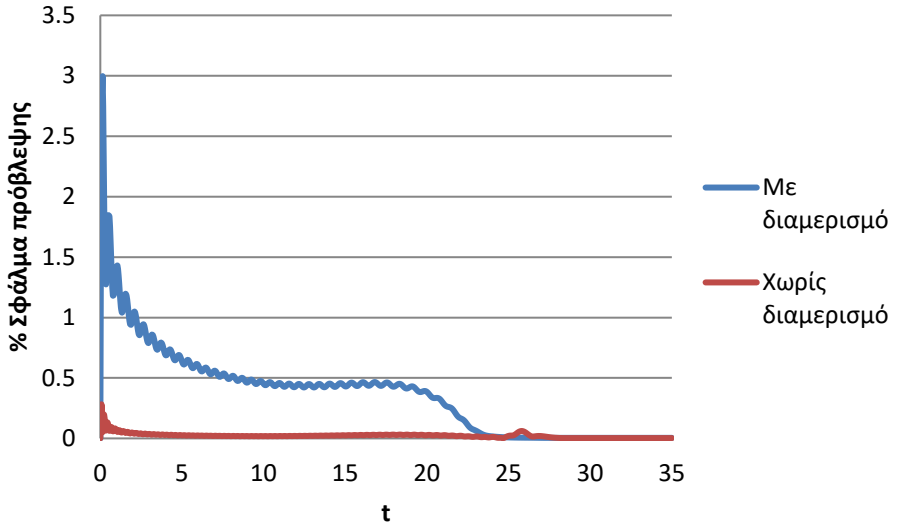
Συγκεκριμένα για k = 2 τα σφάλματα παρουσιάζονται κυρίως τις πρώτες χρονικές στιγμές. Αντίθετα για k = 4 το σφάλμα είναι ιδιαίτερα χαμηλό αρχικά, ενώ αυξάνει για τις ενδιάμεσες χρονικές στιγμές. Το μέσο σφάλμα πρόβλεψης, όπως φαίνεται στον Πίνακα 3.2, προκύπτει χαμηλότερο για k = 2. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός ότι τα περισσότερα διανύσματα βάσης θα περιέχουν και περισσότερη πληροφορία για το σύστημα.

Πίνακας 3.2: Μέσο σφάλμα πρόβλεψεις για τους δυο εναλλακτικούς διαμερισμούς

Αριθμός διαμερισμών k	2	4
% Μέσο σφάλμα	0.37	0.57

Το συμπέρασμα αυτό ενισχύεται και από το γεγονός ότι το σφάλμα πρόβλεψης παραμένει χαμηλότερο στην περίπτωση που χρησιμοποιηθούν 80 διανύσματα απευθείας από τη βάση POD (Σχήμα 3.4). Η βάση που προκύπτει από την POD άλλωστε, είναι η βέλτιστη ορθοκανονική βάση για σημεία κοντά στο training set. Αν η επιλογή των στιγμιοτύπων για την κατασκευή της έχει γίνει με κατάλληλο τρόπο, τότε αυτή θα είναι επαρκής για να περιγράψει τη δυναμική συμπεριφορά του συστήματος για ένα αρκετά μεγάλος εύρος των σημείων του χώρου παραμέτρων D. Επομένως, η εφαρμογή της μεθόδου δεν έχει κάποιο

όφελος, όταν το μοντέλο είναι ήδη σε θέση να κάνει ακριβείς προβλέψεις. Δεν φαίνεται δηλαδή ότι μπορεί να επιτευχθεί μεγαλύτερη ακρίβεια χρησιμοποιώντας λιγότερα συνολικά διανύσματα βάσης (στη συγκεκριμένη περίπτωση λιγότερα από 80 μέσω διαμερισμού).

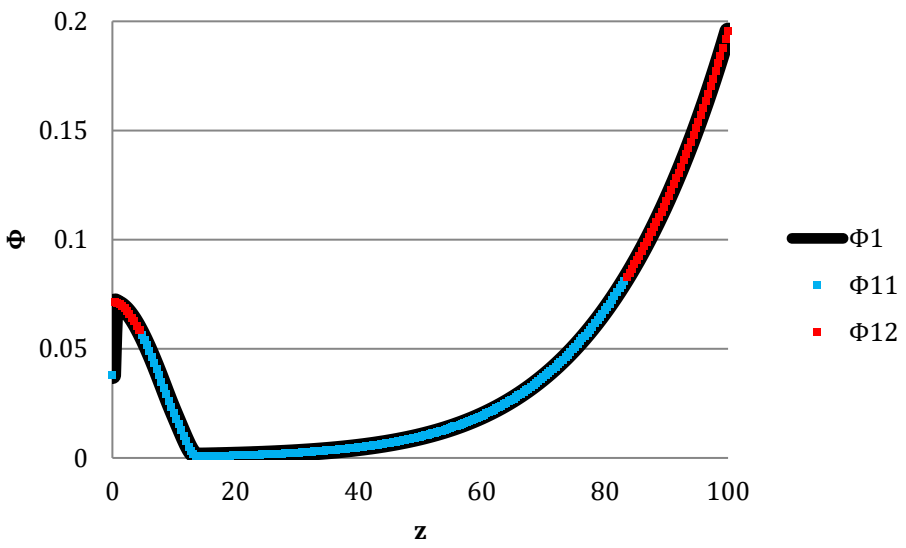


Σχήμα 3.4 Το σφάλμα πρόβλεψης παραμένει μικρότερο αν χρησιμοποιηθούν 80 διανύσματα απευθειάς από την POD

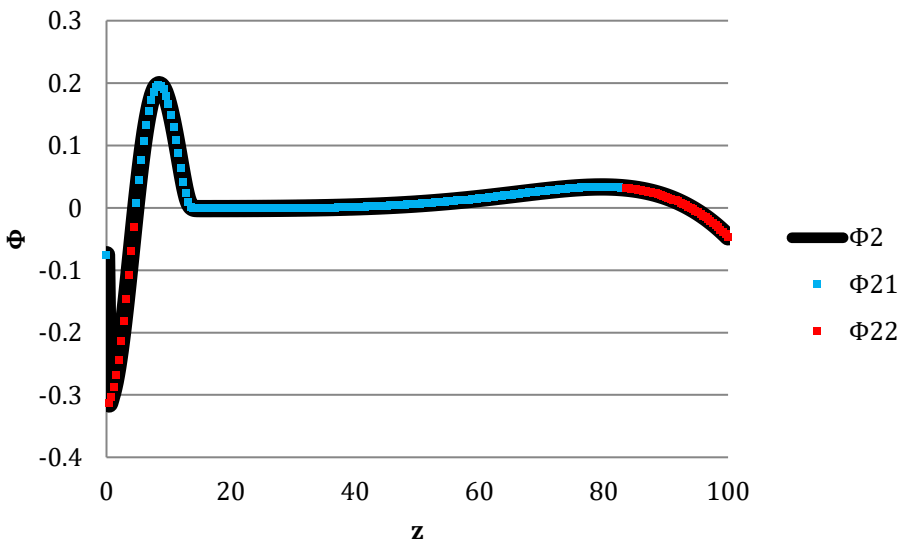
Σενάριο 2

Η ίδια διαδικασία ακολουθείται και σε αυτό το σενάριο. Ο διαμερισμός γίνεται σε ένα επίπεδο και οι δοκιμές γίνονται για το σετ παραμέτρων $(\mu_1, \mu_2) = (4.5, 0.038)$. Υπενθυμίζεται ότι η προβλεπτικότητα ως προς το χρόνο επιβάλει μια επιπλέον δυσκολία στο μοντέλο μειωμένης τάξης. Η αξιοποίηση και των 150 διαθέσιμων διανυσμάτων βάσης κατά την εφαρμογή της POD-Galerkin, δεν ήταν επαρκής για την παραγωγή ικανοποιητικών προβλέψεων.

Η πρώτη δοκιμή γίνεται ακολουθώντας την στρατηγική διαμερισμού που απέδωσε καλύτερα στο Σενάριο 1. Ο διαμερισμός γίνεται για k = 2, δηλαδή 75 διανύσματα με το κάθε ένα να διαμερίζεται σε 2. Στα Σχήματα 3.5 και 3.6 παρουσιάζεται ενδεικτικά το αποτέλεσμα του διαμερισμού των πρώτων δυο διανυσμάτων.



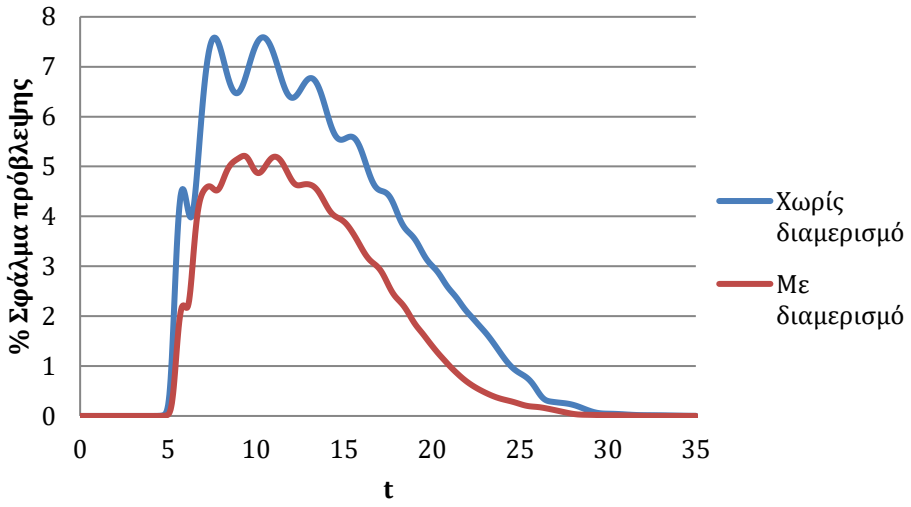
Σχήμα 3.5 Το πρώτο διάνυσμα της POD με μαύρη συνεχή γραμμή. Μετά το διαμερισμό, τα δυο διανύσματα που προκύπτουν (με γαλάζια και κόκκινη ασυνεχή γραμμή αντίστοιχα), διατηρούν τη μορφή του πρώτου αλλά μπορούν χρονικά να μεταβάλλονται ανεξάρτητα.



Σχήμα 3.6 Το πρώτο διάνυσμα της POD με μαύρη συνεχή γραμμή. Αυτό διαμερίζεται σε δυο όπως φαίνεται από τη γαλάζια και την κόκκινη ασυνεχή γραμμή αντίστοιχα

Μετά το διαμερισμό τα διανύσματα βάσης διατηρούν την μορφή των αρχικών διανυσμάτων της POD, και κατά συνέπεια των χαρακτηριστικών καταστάσεων του συστήματος, αλλά μπορούν πλέον χρονικά να μεταβάλλονται ανεξάρτητα. Η χρονική τους

εξέλιξη μπορεί να γίνεται με μεγαλύτερη ακρίβεια, καθώς ο διαμερισμός έγινε με βάση το ποιές μεταβλητές κατάστασης είναι δυναμικά συσχετιζόμενες. Κατά συνέπεια αυτές οι μεταβλητές, ως ομάδα, μπορούν να περιγράφονται με ακρίβεια από τις ίδιες γενικευμένες συντεταγμένες – χρονικούς συντελεστές. Πράγματι, χρησιμοποιώντας μια βάση αντίστοιχης διάστασης (nk = d = 150) μέσω διαμερισμού, παρατηρείται μια σημαντική μείωση στο σφάλμα πρόβλεψης (Σχήμα 3.7).

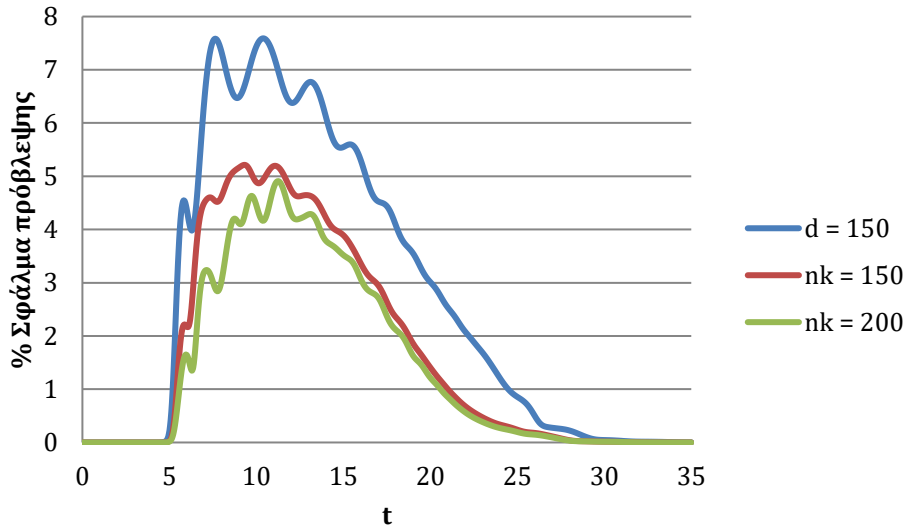


Σχήμα 3.7 Το σφάλμα πρόβλεψης μειώνεται μετά το διαμερισμό.

Το μέσο σφάλμα μειώθηκε από 2.7% σε 1.7%. Παρ' όλα αυτά παραμένει μη ικανοποιητικό, καθώς για πολλές χρονικές στιγμές, το σφάλμα πρόβλεψης παραμένει σημαντικά μεγαλύτερο από 1%.

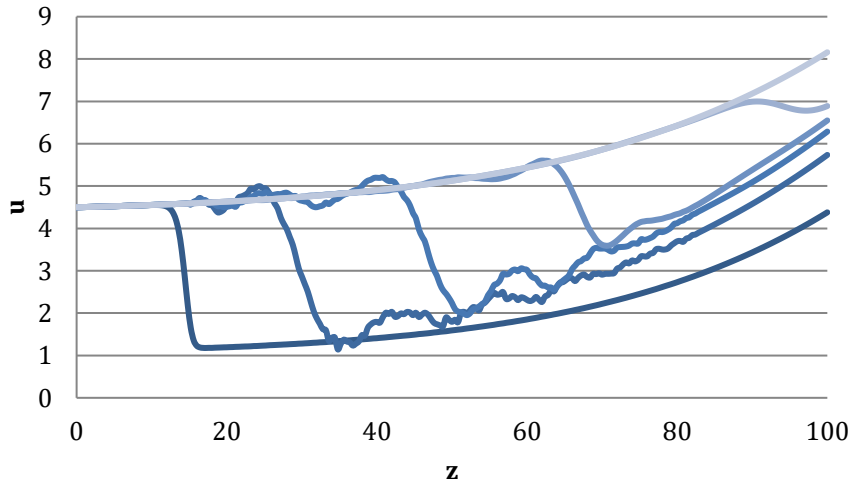
Κατά την εφαρμογή της POD-Galerkin στο Σενάριο 2 ήταν διαθέσιμα μόνο 150 διανύσματα βάσης (όσα και τα στιγμιότυπα που χρησιμοποιήθηκαν). Η μεθοδολογία διαμερισμού παρέχει την ευελιξία να μπορεί να κατασκευαστεί μια μεγαλύτερης διάστασης βάση, αν η προβλεπτική ικανότητα του μοντέλου παραμένει μη ικανοποιητική, με την ανάλογη όμως επίπτωση στο υπολογιστικό κόστος. Η διάσταση του μοντέλου μειωμένης τάξης μπορεί δηλαδή να αυξηθεί ακόμη περισσότερο. Σύμφωνα με το Σχήμα 3.8, κατασκευάζοντας μια βάση με 200 διανύσματα, το σφάλμα μειώνεται ξανά αλλά σε μικρότερο βαθμό. Φαίνεται

επομένως, ότι ο διαμερισμός σε ένα επίπεδο δεν επαρκεί για να μειώσει το σφάλμα σε τέτοιο βαθμό, ώστε το μοντέλο να μπορεί να παράγει εκ νέου ακριβείς προβλέψεις.



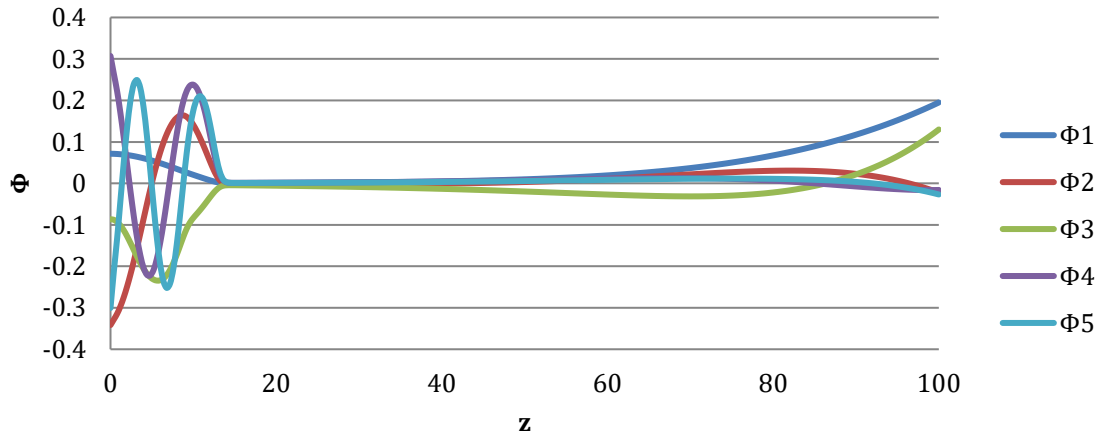
Σχήμα 3.8 Η αύξηση του αριθμού διανυσμάτων βάσης μειώνει περεταίρω, αλλά όχι επαρκώς το σφάλμα πρόβλεψης.

Αυτό φαίνεται και από τα στιγμιότυπα που παρουσιάζονται στο Σχήμα 3.9. Οι προβλέψεις του μοντέλου μειωμένης τάξης διαφέρουν σημαντικά, τόσο ποσοτικά όσο και ποιοτικά, από την πραγματική λύση.



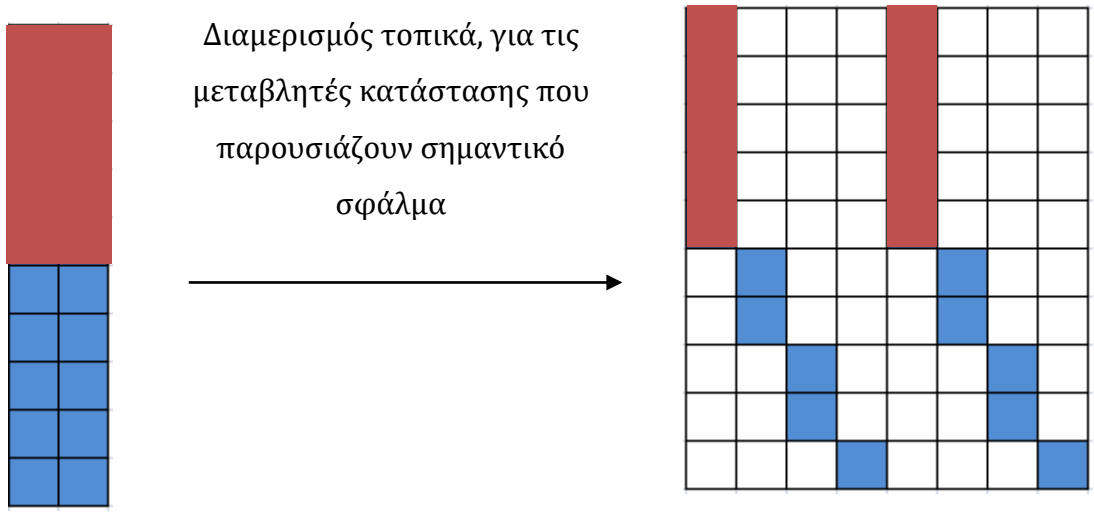
Σχήμα 3.9 Το μοντέλο με τον διαμερισμό σε ένα επίπεδο συνεχίζει να μην παράγει ικανοποιητικές προβλέψεις.

Ο διαμερισμός σε έναν προσαρμοστικό αλγόριθμο θα γινόταν τοπικά για συγκεκριμένα διανύσματα βάσης με στόχο την μείωση κάποιων κριτηρίων σφάλματος. Τα διανύσματα βάσης της POD (Σχήμα 3.10), καθώς και η μορφή των λύσεων στο Σχήμα 3.9, παρέχουν κάποιες ενδιαφέρουσες πληροφορίες. Τα διανύσματα βάσης περιέχουν σημαντική πληροφορία για το σύστημα, μέχρι περίπου τη θέση z = 20. Το σοκ δεν έχει προλάβει να περάσει από αυτό το σημείο. Επομένως από κει και κάτω τα διανύσματα βάσης δεν έχουν «εικόνα» για τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα. Αντίστοιχα, στο Σχήμα 3.9, τα σφάλματα παρατηρούνται κυρίως για τις μεταβλητές που αντιστοιχούν σε σημεία τα οποία βρίσκονται στη μέση και προς το τέλος του υπολογιστικού χωρίου.



Σχήμα 3.10 Τα πρώτα 5 διανύσματα POD.

Με βάση την ιδέα του τοπικού διαμερισμού και των παραπάνω παρατηρήσεων, γίνεται απόπειρα διαμερισμού των διανυσμάτων τοπικά σε αυτή την περιοχή, ξανά όμως σε ένα επίπεδο. Επίσης επανεξετάζεται η στρατηγική διαμερισμού, καθώς είναι πιθανό ένας μεγαλύτερος αριθμός διαμερισμών σε αυτή την περίπτωση να αποδώσει καλύτερες προβλέψεις. Για λόγους επεξήγησης δίνεται μια σχηματική απεικόνιση του διαμερισμού με βάση την παραπάνω ιδέα:



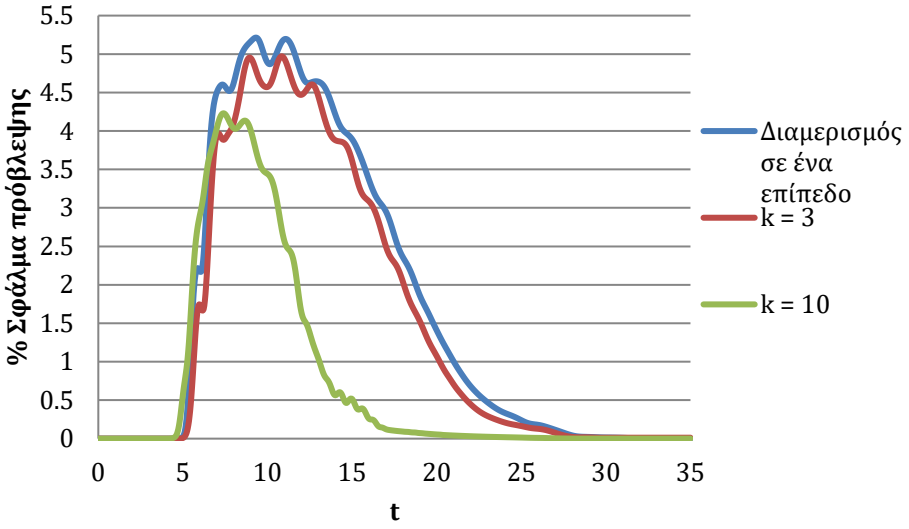
Εικόνα 3.4 Τοπικός Διαμερισμός

Σύμφωνα με το Σχήμα 3.10, τα διανύσματα βάσης δεν διαθέτουν επαρκή πληροφορία περίπου από τη θέση z = 12 και μετά. Η θέση αυτή αντιστοιχεί στη μεταβλητή κατάστασης x_{30}. Επομένως ο διαμερισμός για κάθε διάνυσμα θα γίνεται μόνο για τα στοιχεία 30 εώς 251, κατ' αναλογία με την Εικόνα 3.4.

Επανεξετάζοντας την στρατηγική διαμερισμού, σύμφωνα με τον Πίνακα 3.3, η επιλογή λιγότερων διανυσμάτων και μεγαλύτερου αριθμού διαμερισμών αποδίδει καλύτερα. Επίσης, σύμφωνα με το Σχήμα 3.11, το σφάλμα πρόβλεψης για τον τοπικό διαμερισμό είναι σε κάθε περίπτωση μικρότερο από τον διαμερισμό των διανυσμάτων εξ' ολοκλήρου και όχι τοπικά. Παρ' όλα αυτά το σφάλμα πρόβλεψης παραμένει μεγάλο στο χρονικό διάστημα (5,15).

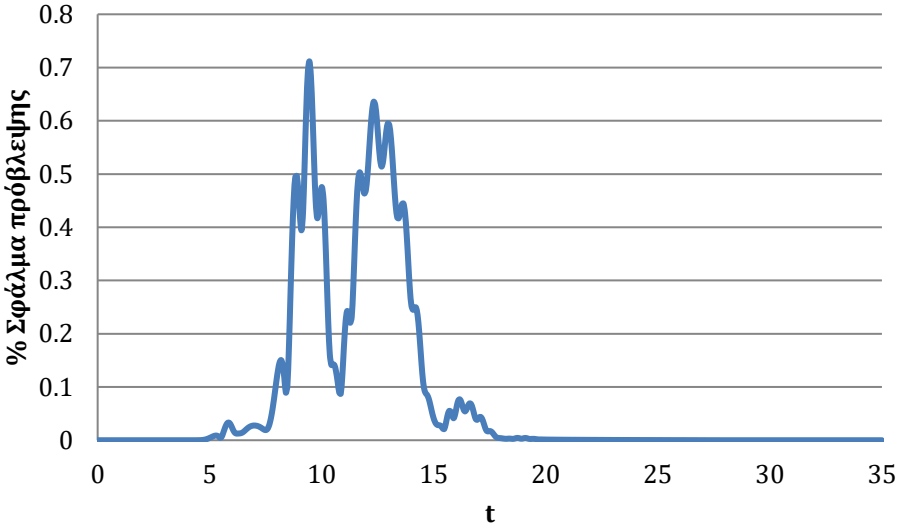
Πίνακας 3.3: Μέσο σφάλμα πρόβλεψεις για εναλλακτικό αριθμό διαμερισμών τοπικά.

Αριθμός διαμερισμών k	3	5	8	10
% Μέσο σφάλμα	1.5	1.02	0.93	0.73

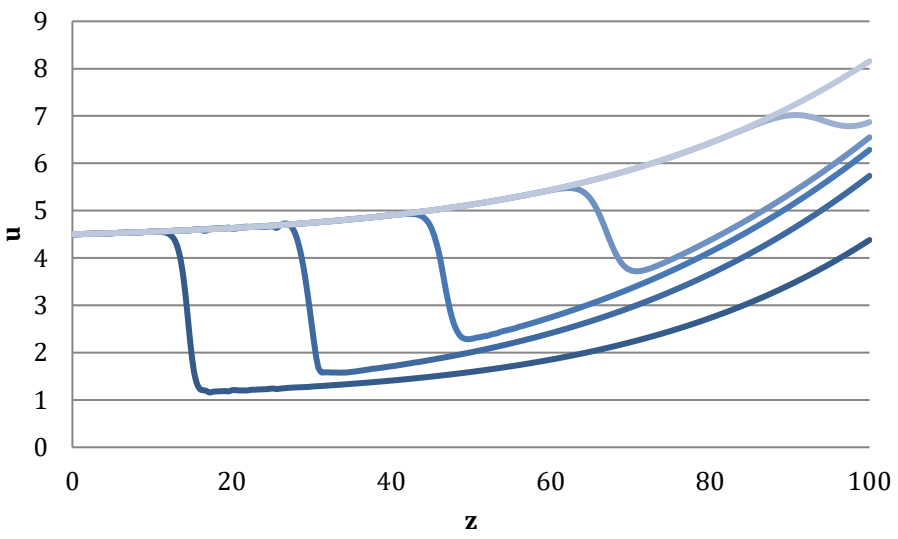


Σχήμα 3.11 Το σφάλμα πρόβλεψης για τον τοπικό διαμερισμό είναι μικρότερο από ότι στην περίπτωση του διαμερισμού ολόκληρων των διανυσμάτων βάσης .

Αυξάνοντας τη διάσταση της βάσης σε 195 διανύσματα, το σφάλμα πρόβλεψης πλέον πέφτει σε έναν πολύ ικανοποιητικό βαθμό όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.12. Η τελική βάση προέκυψε από τον τοπικό διαμερισμό των 15 αρχικών διανυσμάτων βάσης της POD (το κάθε ένα διαμερίστηκε σε 13). Στο Σχήμα 3.13 παρουσιάζονται επίσης, οι προβλέψεις που είναι σε θέση να παράγει πλέον το μοντέλο μειωμένης τάξης.

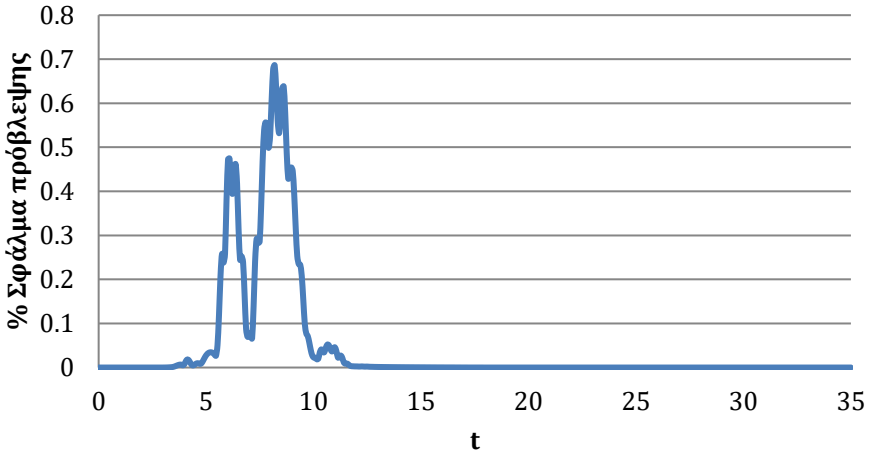


Σχήμα 3.12 Το σφάλμα πρόβλεψης για d = 195 μειώνεται σε έναν πολύ ικανοποιητικό βαθμό.



Σχήμα 3.13 Οι προβλέψεις του μοντέλου μειωμένης τάξης για διάφορες χρονικές στιγμές

Δοκιμάζοντας για ένα νέο σημείο $(\mu_1, \mu_2) = (7.5, 0.06)$ το σφάλμα πρόβλεψης παραμένει μικρό, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.14.



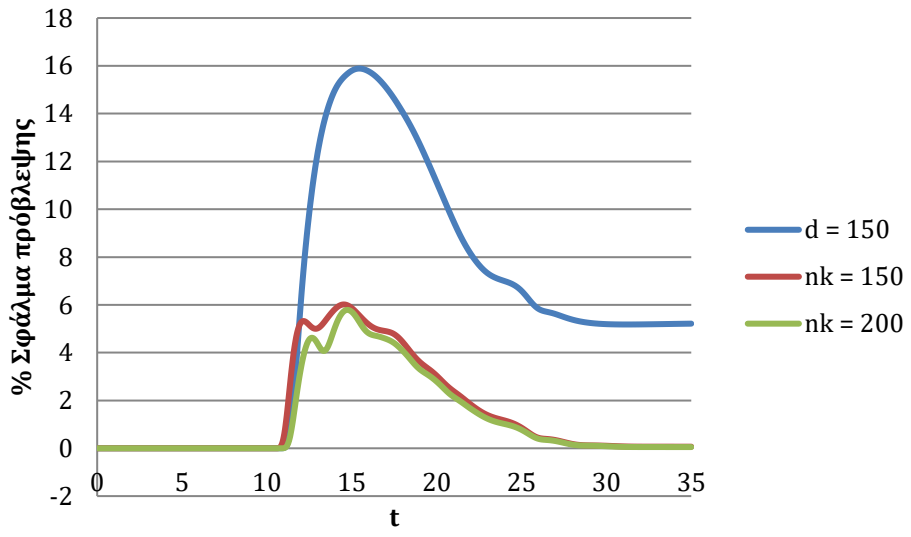
Σχήμα 3.14 Το σφάλμα πρόβλεψης για $(\mu_1, \mu_2) = (7.5, 0.06)$

Το μοντέλο μειωμένης τάξης είναι πλέον σε θέση να προβλέπει με ακρίβεια «άγνωστες» καταστάσεις του συστήματος, χωρίς να απαιτούνται νέοι ακριβοί υπολογισμοί για τον εμπλουτισμό της βάσης. Το μόνο που απαιτήθηκε ήταν κατάλληλες «διεργασίες» πάνω στα ήδη υπάρχοντα διανύσματα. Η επίτευξη μεγαλύτερης ακρίβειας ήρθε όμως εις βάρος της διάστασης του τελικού μοντέλου. Η χρήση συνεχούς διαμερισμού σε ένα

προσαρμοστικό πλαίσιο (adaptive refinement) υπόσχεται την διατήρηση της κατά το δυνατόν μικρότερης διάστασης του μοντέλου, μετριάζοντας έτσι την αύξηση της διάστασης λόγω του διαμερισμού σε ένα επίπεδο μόνο.

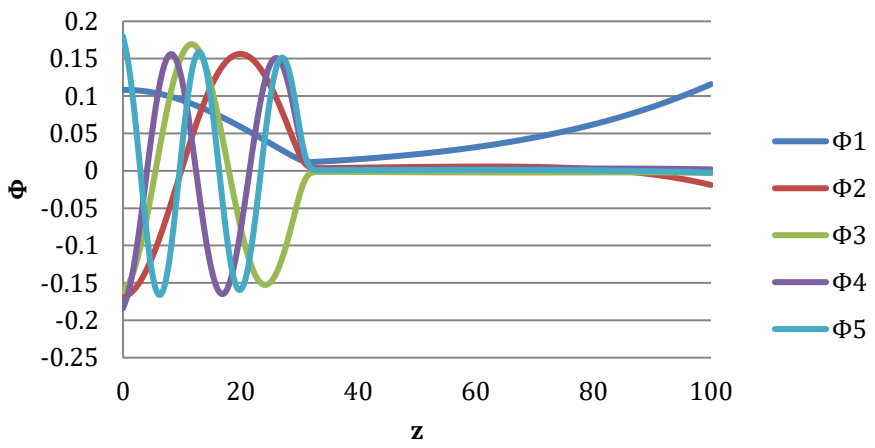
Σενάριο 3

Οι δυο τρόποι διαμερισμού δοκιμάζονται και σε αυτό το σενάριο για το σετ παραμέτρων $(\mu_1, \mu_2) = (4.5, 0.038)$. Στο Σχήμα 3.15 παρουσιάζεται το σφάλμα πρόβλεψης, χωρίς διαμερισμό για 150 διανύσματα βάσης (όσα ήταν διαθέσιμα), καθώς και για δυο μοντέλα μειωμένης τάξης διάστασης nk = 150 και nk = 200, που προέκυψαν με διαμερισμό της βάσης σε ένα επίπεδο.

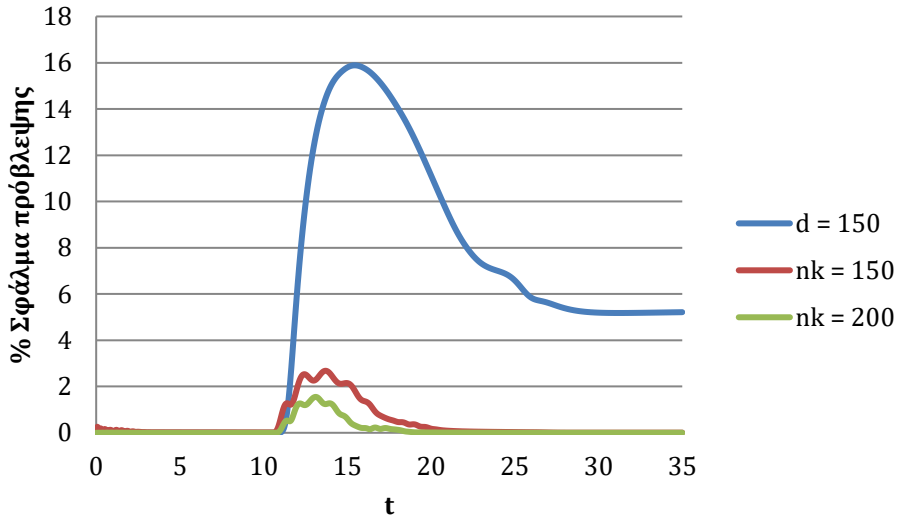


Σχήμα 3.15 Το σφάλμα πρόβλεψης για εξ' ολοκλήρου διαμερισμό των διανυσμάτων βάσης.

Παρατηρείται ότι το σφάλμα πρόβλεψης μειώνεται σε πολύ σημαντικό βαθμό, ενώ παράλληλα το μοντέλο μειωμένης τάξης είναι σε θέση να προβλέπει με ακρίβεια τη λύση μόνιμης κατάστασης. Παρ' όλα αυτά, ακόμη και με 200 διανύσματα βάσης, δεν είναι σε θέση να μειώσει επαρκώς το σφάλμα πρόβλεψης μεταξύ των χρονικών στιγμών t = 10 και t = 25. Εφαρμόζοντας τον διαμερισμό τοπικά, με οδηγό τα διανύσματα βάσης που φαίνονται στο Σχήμα 3.16, γίνεται η αντίστοιχη δοκιμή και συγκρίνονται τα σφάλματα για 150 διανύσματα βάσης χωρίς διαμερισμό και για βάσεις με αριθμό διανυσμάτων nk = 150 και nk = 200, που προέκυψαν με διαμερισμό της βάσης τοπικά αυτή τη φορά.

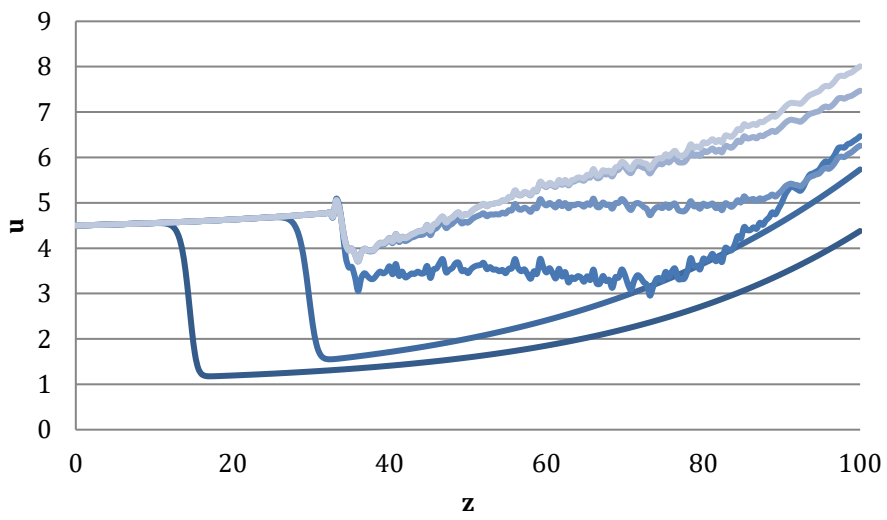


Σχήμα 3.16 Τα πρώτα 5 διανύσματα της POD.

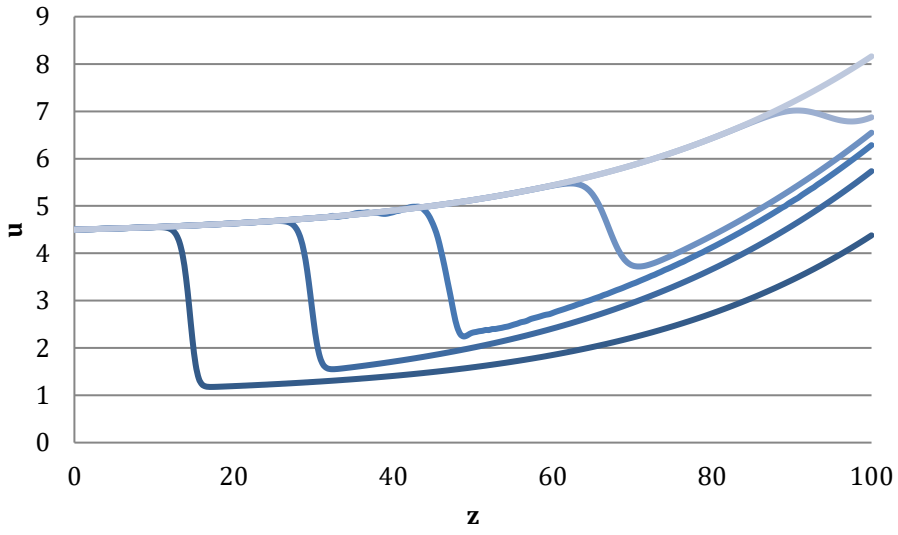


Σχήμα 3.17 Το σφάλμα πρόβλεψης με τον διαμερισμό των διανυσμάτων βάσης να γίνεται τοπικά.

Στο Σχήμα 3.17 φαίνεται χαρακτηριστικά ότι μέσω του τοπικού διαμερισμού το σφάλμα των προβλέψεων μειώνεται πολύ περισσότερο. Μάλιστα για αριθμό διανυσμάτων nk = 200 το μοντέλο πλέον είναι σε θέση να κάνει πολύ ικανοποιητικές προβλέψεις, με εξαίρεση ίσως κάποιες χρονικές στιγμές που το σφάλμα παραμένει κοντά στο 1 με 2 τοις εκατό. Οι αντίστοιχες προβλέψεις των μοντέλων χωρίς και με διαμερισμό παρουσιάζονται στα Σχήματα 3.18 και 3.19.



Σχήμα 3.18 Προβέψεις του μοντέλου μειωμένης τάξης που χρησιμοποιεί 150 διανύσματα βάσης χωρίς διαμερισμό.



Σχήμα 3.19 Προβέψεις του μοντέλου μειωμένης τάξης που χρησιμοποιεί 195 διανύσματα βάσης με διαμερισμό τοπικά.

3.4.2 Εφαρμογή 2: Brusselator

Για λόγους σύγκρισης, συνοψίζονται κάποια βασικά συμπεράσματα από τα τρία σενάρια υπό τα οποία δοκιμάστηκε η μέθοδος POD-Galerkin:

Σενάριο 1: Προβλεπτικότητα ως προς το χώρο παραμέτρων

- Μείωση τάξης από 202 σε 20 βαθμούς ελευθερίας
- Ικανοποιητική ακρίβεια για όλες τις δοκιμές
- Σημαντική μείωση και του υπολογιστικού κόστους (ο χρόνο επίλυσης υποδεκαπλασιάστηκε)

Σενάριο 2: Προβλεπτικότητα ως προς το χώρο παραμέτρων και το χρόνο

- Μείωση τάξης από 202 σε 20 βαθμούς ελευθερίας
- Πολύ μικρή αύξηση του σφάλματος πρόβλεψης για όλες τις δοκιμές.
- Για την πιο «μακρινή» τιμή παραμέτρου L = 5 το σφάλμα ήταν σημαντικά μεγαλύτερο, αλλά μπόρεσε να μειωθεί σε ικανοποιητικό βαθμό με μια απλή αύξηση των διανυσμάτων βάσης που χρησιμοποιούνται.
- Λόγω της αύξησης της διάστασης, αυξήθηκε και ο χρόνος επίλυσης.

Σενάριο 3: Προβλεπτικότητα ως προς το χρόνο

- Μείωση βαθμών ελευθερίας από 202 σε 40
- Ικανοποιητικά σφάλματα πρόβλεψης για τη δοκιμή που έγινε (L =3).
- Για την πιο «μακρινή» τιμή παραμέτρου L = 5 το σφάλμα ήταν σημαντικά μεγαλύτερο, αλλά μπόρεσε ξανά να μειωθεί σε ικανοποιητικό βαθμό με μια απλή αύξηση των διανυσμάτων βάσης που χρησιμοποιούνται.

Σενάριο 1

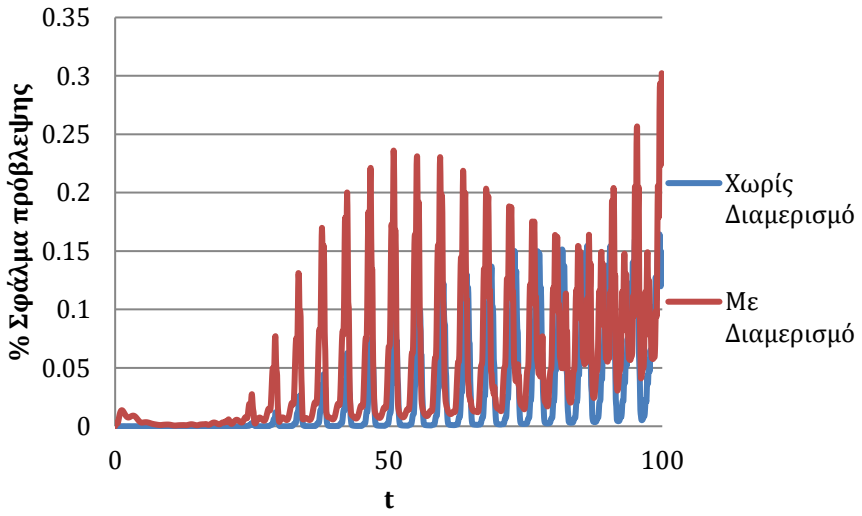
Με βάση τις δοκιμές που έγιναν στο Κεφάλαιο τάδε, δεν εντοπίστηκαν μεταβλητές κατάστασης οι οποίες να παρουσιάζουν συστηματικά σφάλμα κατά τους υπολογισμούς. Για αυτό το λόγο, ο διαμερισμός της βάσης τοπικά δεν χρησιμοποιείται σε αυτή την εφαρμογή. Θα χρησιμοποιηθεί μόνο ο εξ' ολοκλήρου διαμερισμός των διανυσμάτων βάσης. Αρχικά, επανεξετάζεται η στρατηγική διαμερισμού και η επίδραση που έχει στην ακρίβεια

των προβλέψεων. Οι δοκιμές γίνονται για L = 3, χρησιμοποιώντας 10 διανύσματα για κάθε βάση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.4.

Πίνακας 3.4: Το μέσο σφάλμα για διάφορους αριθμούς διαμερισμών k

Αριθμός διαμερισμών k	2	5	10	Χωρίς διαμερισμό
% Μέσο σφάλμα	0.43	1.42	19.1	0.081

Η επιλογή πολλών διανυσμάτων με μικρό αριθμό διαμερισμών αποδίδει καλύτερες προβλέψεις και σε αυτή την εφαρμογή. Συγκεκριμένα, για k = 2 οι προβλέψεις που αποδίδει το μοντέλο μειωμένες τάξης είναι αρκετά ικανοποιητικές. Παρ' όλα αυτά η χρήση 10 διανυσμάτων κατευθείαν από την POD αποδίδει ακόμα καλύτερα. Δοκιμάζοντας για μια μεγαλύτερη τιμή παραμέτρου L = 5, και χρησιμοποιώντας 20 διανύσματα για κάθε βάση (μια με και μια χωρίς διαμερισμό), προκύπτει το ίδιο συμπέρασμα (Σχήμα 3.20). Η βάση χωρίς διαμερισμό παράγει πάντα καλύτερες προβλέψεις.



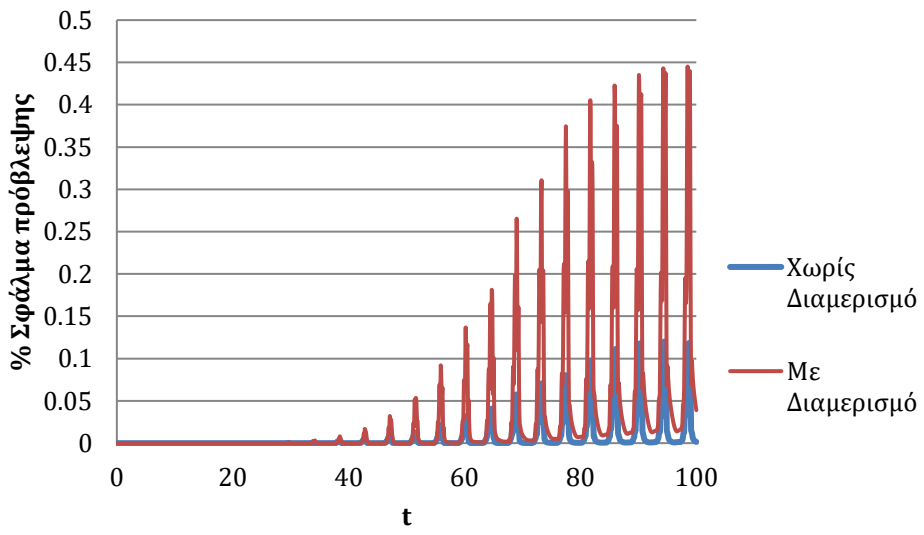
Σχήμα 3.20 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης της κατανομής της συγκέντρωσης του X, για βάσεις που προέκυψαν χωρίς (μπλε) και με διαμερισμό (κόκκινο).

Σενάρια 2 και 3

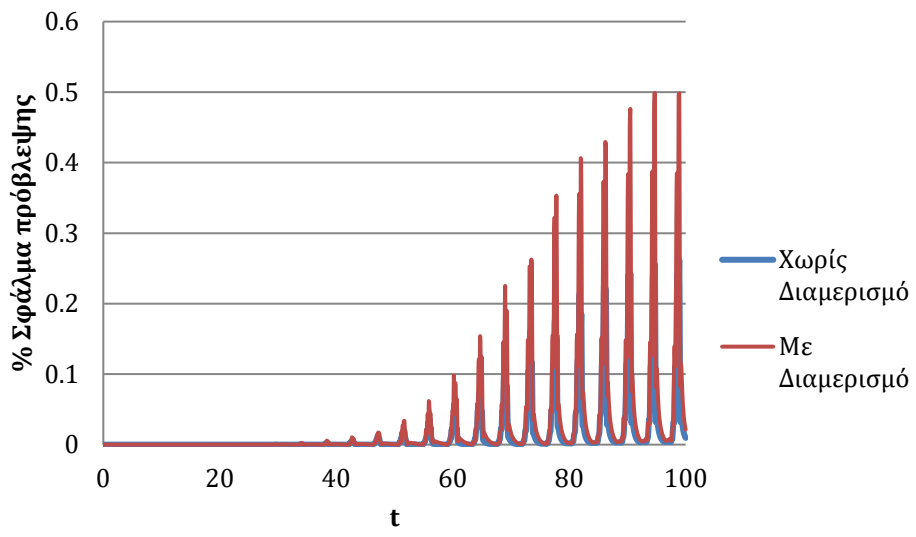
Κατά την εφαρμογή της μεθοδολογίας διαμερισμού της βάσης και στα δυο αυτά σενάρια, προέκυψαν ξανά τα ακόλουθα συμπεράσματα:

1) Μια βάση μέσω διαμερισμού των πρώτων POD διανυσμάτων – με μικρό αριθμό διαμερισμών – μπορεί να αποδώσει ένα μοντέλο μειωμένης τάξης το οποίο κάνει ικανοποιητικές προβλέψεις.
2) Μια βάση ίδιας διάστασης, απευθείας από τα διανύσματα της POD, σε παράγει καλύτερες προβλέψεις από ότι μια βάση που προκύπτει μέσω της μεθοδολογίας διαμερισμού.

Ενδεικτικά αποτελέσματα για τα Σενάρια 1 και 2 παρουσιάζονται στα Σχήματα 3.21 και 3.22 αντίστοιχα.

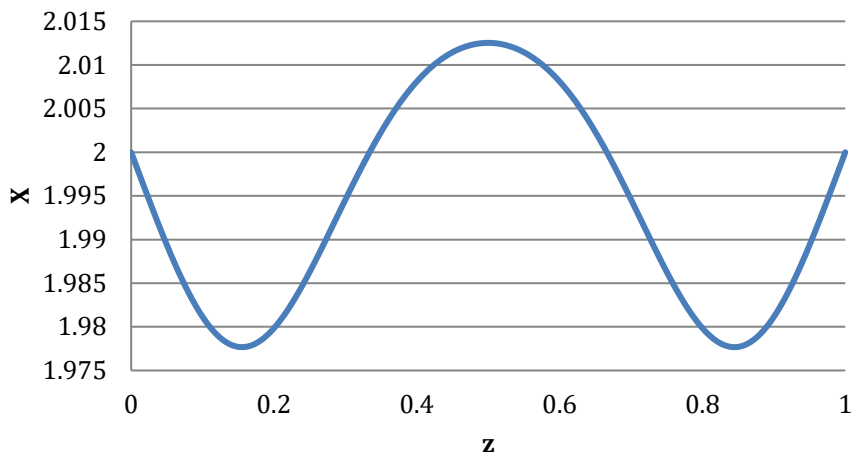


Σχήμα 3.21 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης της κατανομής της συγκέντρωσης του X για την τιμή παραμέτρου L = 3 και d = 20 (Σενάριο 2). Το μοντέλο χωρίς διαμερισμό αποδίδει καλύτερα.

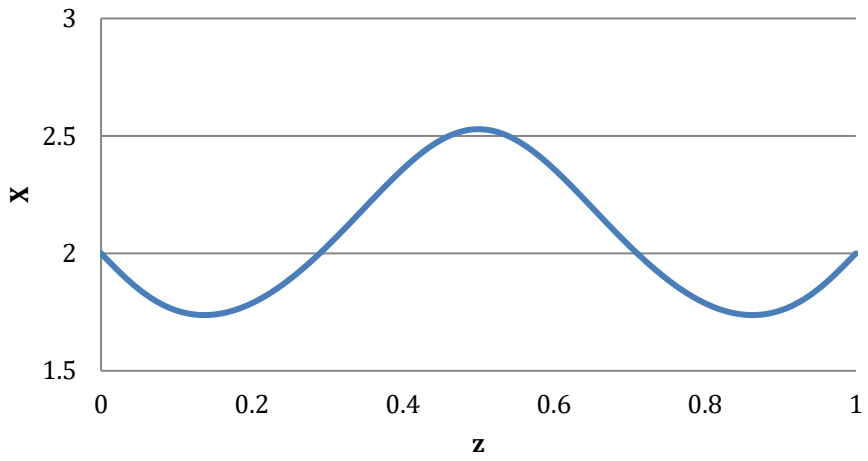


Σχήμα 3.22 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης της κατανομής της συγκέντρωσης του X για την τιμή παραμέτρου L = 3 και d = 20 (Σενάριο 3). Το μοντέλο χωρίς διαμερισμό αποδίδει καλύτερα.

Συνολικά φάνηκε ότι η βάση POD είχε την απαραίτητη πληροφορία για να περιγράψει τη δυναμική συμπεριφορά του συστήματος, ακόμα και όταν για την κατασκευή της χρησιμοποιήθηκαν μόνο λίγα αρχικά στιγμιότυπα. Ήταν σε θέση να περιγράψει τόσο τη λύση μόνιμης κατάστασης όσο και την περιοδική λύση του προβλήματος. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός, ότι η μορφή της λύσης δεν αλλάζει σημαντικά πριν και αφού το σύστημα φτάσει σε περιοδική λύση. Αυτό φάνηκε και από την ομοιότητα των διανυσμάτων της POD, όπως υπολογίστηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο για τα Σενάρια 1 και 2 (Σχήμα 2.27). Ως συνέχεια αυτού του επιχειρήματος, παρουσιάζονται ακόμα, δυο στιγμιότυπα του συστήματος στα Σχήματα 3.21 και 3.22. Τα δυο στιγμιότυπα έχουν την ίδια μορφή, με το πρώτο όμως να αντιστοιχεί σε χρονική στιγμή πριν την πλήρη αποκατάσταση της περιοδικής λύσης, ενώ το δεύτερο αφού η περιοδική λύση αποκατασταθεί.



Σχήμα 3.23 Στιγμιότυπο της κατανομής της συγκέντρωσης του X στον αντιδραστήρα για χρονική στιγμή πριν την αποκατάσταση της περιοδικής λύσης.



Σχήμα 3.24 Στιγμιότυπο της κατανομής της συγκέντρωσης του X στον αντιδραστήρα για χρονική στιγμή αφού η περιοδική λύση έχει αποκατασταθεί πλήρως.

Με βάση αυτές τις παρατηρήσεις, διαμερισμός της βάσης δεν θα αποδώσει κάποιο όφελος στην προβλεπτική ικανότητα του μοντέλου μειωμένης τάξης. Τα διανύσματα της POD περιείχαν όλη την απαραίτητη πληροφορία για να περιγράψουν το σύστημα.

4. Δυναμική σε μη γραμμικές πολλαπλότητες

4.1 Εισαγωγή

Οι περισσότερες τεχνικές μείωσης τάξης προβάλλουν τις εξισώσεις του συστήματος σε κάποιο γραμμικό υπόχωρο του αρχικού χώρου κατάστασης. Μέθοδοι όπως η POD κατασκευάζουν τέτοιους υπόχωρους, χρησιμοποιώντας μόνο στιγμιότυπα της δυναμικής συμπεριφοράς του συστήματος [1].

Υποθέτοντας ότι το σύστημα έχει μια μοναδική τροχιά για κάθε παράμετρο $\boldsymbol{\mu} \in D$, η εγγενής διάσταση του χώρου λύσεων (solution manifold) $\{\mathbf{x}(t; \mu) \mid t \in [0, T], \boldsymbol{\mu} \in D\}$ είναι (το πολύ) $p = n_\mu + 1$ (όπου + 1 ο χρόνος), καθώς το map $(t, \boldsymbol{\mu}) \rightarrow \mathbf{x}$ είναι μοναδικό σε αυτή την περίπτωση. Αυτό παρέχει μια προσέγγιση στην διάσταση μιας μη γραμμικής πολλαπλότητας (manifold) για την ακριβή αναπαράσταση της κατάστασης ενός δυναμικού συστήματος [1].

Ο περιορισμός της χρονικής εξέλιξης των μεταβλητών κατάστασης σε γραμμικούς υπόχωρους διάστασης ίσης με την εγγενή διάσταση του χώρου λύσεων, δεν επαρκεί για την παραγωγή ικανοποιητικών προβλέψεων στις περισσότερες των περιπτώσεων. Για να μπορεί το μοντέλο μειωμένης τάξης να είναι ακριβές, πρέπει η διάσταση του να αυξηθεί και συχνά σε τέτοιο βαθμό, ώστε η μείωση τάξης να κρίνεται μη επαρκής και μη αποδοτική [1]. Η αντιμετώπιση της απόκλισης μεταξύ της βέλτιστης διάστασης γραμμικού υπόχωρου και της εγγενούς διάστασης του χώρου αποτελεί σημαντικό πεδίο έρευνας τα τελευταία χρόνια. Οι περισσότερες προσεγγίσεις στο πρόβλημα θα μπορούσαν να χαρακτηριστούν ως μη γραμμικές «επεκτάστεις» της μεθόδου POD-Galerkin [4] υπό την έννοια ότι:

1) Χρησιμοποιούν τα ίδια στιγμιότυπα με την POD
2) Τα αξιοποιοποιούν μέσω κάποιας μεθοδολογίας μείωσης τάξης, μη γραμμικής σε αυτή την περίπτωση, για την κατασκευή ενός μικρής διάστασης μη γραμμικής πολλαπλότητας (manifold) που περιέχει τα δεδομένα
3) Προβάλλουν το σετ των εξισώσεων πάνω σε αυτή την πολλαπλότητα

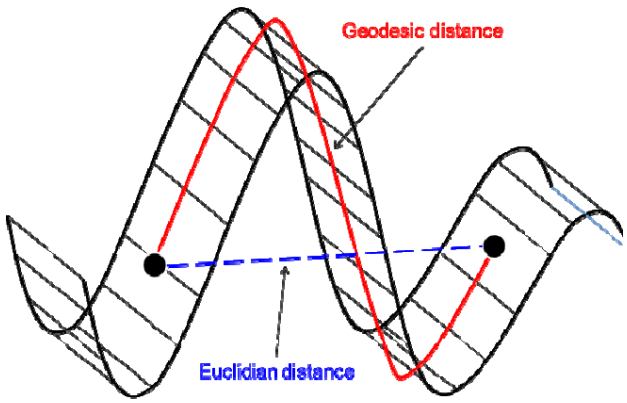
Σε αυτή την εργασία χρησιμοποιούνται απεικονίσεις τύπου διάχυσης (Diffusion Maps) [15] για την κατασκευή της μη γραμμικής πολλαπλότητας από τον πίνακα των στιγμιοτύπων **X** και η επέκταση Nyström για την διατύπωση των εξισώσεων πάνω σε αυτή τη γεωμετρία [4]. Στο πλαίσιο της μεθοδολογίας είναι απαραίτητη επίσης, κάποιου τύπου παρεμβολή υπό την μορφή της «αντίστροφης» επέκτασης Nyström, αλλά αυτή πραγματοποιείται στον μικρής διάστασης υπόχωρο. Εν τέλει η διάσταση καθώς και η πιθανή ακαμψία που χαρακτηρίζει το σύστημα μειώνονται, κάνοντας τη χρήση τόσο έμμεσων όσο και άμεσων μεθόδων χρονικής ολοκλήρωσης υπολογιστικά πιο οικονομικές σε σχέση με την προσομοίωση του πλήρους μοντέλου [4].

4.2 Diffusion Maps

Η μέθοδος της απεικόνισης τύπου διάχυσης (Diffusion Maps) έχει αναδειχθεί ως ένα ισχυρό εργαλείο στη μείωση τάξης και στην ανάλυση δεδομένων [4]. Η ονομασία της προκύπτει από το γεγονός ότι χρησιμοποιεί «διεργασίες διάχυσης» (diffusion processes) στα δεδομένα, με σκοπό την εύρεση μιας χαμηλής διάστασης γεωμετρικής περιγραφής τους. Για λόγους συντομίας, στο κείμενο θα αναφέρεται ως Diffusion Maps. Στόχος της μεθόδου είναι:

1) να προσδιορίσει εάν τα δεδομένα μπορούν να ενταχθούν σε έναν μικρότερης διάστασης υπόχωρο
2) να κατασκευάσει, εαν υπάρχει, αυτή η μικρής διάστασης και πιθανώς μη γραμμική πολλαπλότητα, η οποία τα περιέχει

Έστω $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N\times m}$ ο πίνακας των στιγμιοτύπων και $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^{N\times 1}$ ένα στιγμιότυπο. Η μοναδική είσοδος που απαιτεί ο αλγόριθμος είναι ένα μέτρο ομοιότητας (similarity measure) μεταξύ τον στιγμιοτύπων που εμπεριέχονται στον **X**. Το μέτρο ομοιότητας θα πρέπει να είναι αμελητέο για όλα τα σημεία, εκτός από μια στενή «γειτονιά» του κάθε στιγμιοτύπου. Αυτό συνδέεται ισχυρά το ότι, μεγάλες Ευκλείδειες απόστασεις μπορεί να μην προσεγγίζουν αξιόπιστα γεωδαισιακές αποστάσεις πάνω σε μια πολλαπλότητα γενικής δομής [4] (Εικόνα 4.1).



Εικόνα 4.1: Χαρακτηριστικό παράδειγμα για το οποίο η Ευκλείδεια απόσταση μεταξύ δυο σημείων διαφέρει σημαντικά από την πραγματική – γεωδαισιακή τους απόσταση πάνω στην πολλαπλότητα

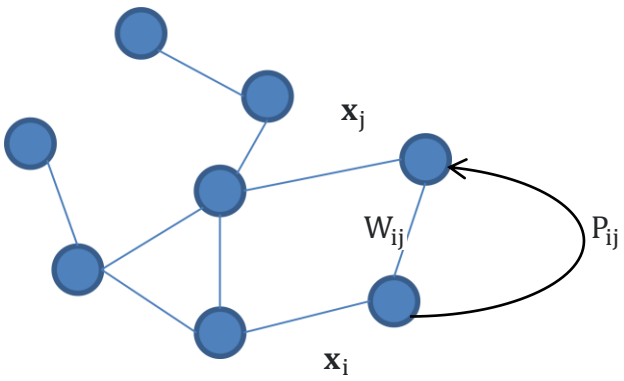
Το μέτρο ομοιότητας μεταξύ δυο στιγμιοτύπων $\mathbf{x}_i$ και $\mathbf{x}_j$ θα πρέπει να είναι [15]:

- συμμετρικό: $W(i,j) = W(j,i)$
- μη αρνητικό: $W(i,j) \geq 0$

Η επιλογή του εξαρτάται σημαντικά από την εφαρμογή. Για δεδομένα που προέρχονται από προσομοιώσεις δυναμικών συστημάτων, συνήθως χρησιμοποιείται το Gaussian kernel:

$$W_{ij} = W(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left[-\left(\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}{\varepsilon}\right)^2\right] \in \mathbb{R}^{m\times m} \tag{4.1}$$

όπου παράμετρος ε ορίζει μια χαρακτηριστική κλίμακα για την τοπική γεωμετρία της πολλαπλότητας. Προσδιορίζει ακριβώς τη στενή γειτονιά γύρω από κάθε σημείο, εκτός της οποίας το μέτρο ομοιότητας είναι αμελητέο. Με βάση τους παραπάνω ορισμούς, μπορεί κανείς να φανταστεί τα δεδομένα ως κόμβους ενός συμμετρικού γράφου, του οποίου η συνάρτηση βάρους ορίζεται από το W [15] (Εικόνα 4.2).



Εικόνα 4.2: Τα δεδομένα ως κόμβοι ενός γράφου. Οι συναρτήσεις βάρους δίνονται από το μέτρο ομοιότητας W. Οι πιθανότητες μεταβέσων δίνονται από τον P.

Από τον γράφο που ορίζεται από τα (**X**, W), μπορεί να κατασκευαστεί μια αναστρεπτή αλυσίδα Markov στον **X** ως:

$$D_{ii} = \sum_{k=1}^{m} W_{ik} \tag{4.2}$$

$$P = D^{-1}W \tag{4.35}$$

Ο πίνακας μετάβασης (transition matrix) P, κατά αναλογία με έναν τυχαίο περίπατο (random walk), περιέχει τις πιθανότητες για τη μετάβαση μέσω ενός βήματος από το i στο j, δηλαδή $P_{ij} = p(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$. Η μελέτη του μπορεί να αποδώσει σημαντικές πληροφορίες για την γεωμετρία στην οποία περιέχονται τα στιγμιότυπα **X**. Συγκεκριμένα, οι δυνάμεις P^t περιέχουν τις πιθανότητες για τη μετάβαση από το i στο j σε t διακριτά βήματα. Η βασική ιδέα είναι ότι, προχωρώντας τη διεργασία Markov προς τα εμπρός στο χρόνο, αποκαλύπτεται η γεωμετρία της πολλαπλότητας, καθώς μεταβάσεις κατά μήκος της είναι πιο πιθανές, επειδή εκεί τα σημεία βρίσκονται πιο κοντά μεταξύ τους [15] (Εικόνα 4.3).

Εικόνα 4.3: Το κόκκινο μονοπάτι γίνεται όλο και πιο πιθανό, καθώς ο αριθμός των βημάτων αυξάνεται, επειδή αποτελείται από σύντομα/πιθανά άλματα. Το πράσινο μονοπάτι διατηρεί την ίδια, χαμηλή πιθανότητα, ανεξάρτητα από την τιμή του t, καθώς απαιτεί μεγάλα/απίθανα άλματα.

Για τον χαρακτηρισμό της γεωμετρίας των δεδομένων **X** ορίζεται αρχικά η απόσταση διάχυσης [15] D_t ως:

$$D_t(\mathbf{x}_\mathrm{i}, \mathbf{x}_\mathrm{j})^2 = \sum_{\boldsymbol{u}\in \boldsymbol{X}} \|\mathrm{p_t}(\mathbf{x}_\mathrm{i}, \mathbf{u}) - \mathrm{p_t}(\mathbf{x}_\mathrm{i}, \mathbf{u})\|^2 = \sum_{k=1}^{m} \left\|\mathrm{P^t}_{\mathrm{ik}} - \mathrm{P^t}_{\mathrm{kj}}\right\|^2 \tag{4.36}$$

Για μια σταθερή τιμή του t, η D_t ορίζει μια απόσταση στο σύνολο **X**. Η έννοια της εγγύτητας ή απόστασης που ορίζει αντανακλά τη συνδεσιμότητα του γράφου των δεδομένων. Το $D_t(\mathbf{x}_\mathrm{i}, \mathbf{x}_\mathrm{j})$ θα είναι μικρό εάν υπάρχει ένας μεγάλος αριθμός μικρών μονοπατιών που συνδέουν τα $\mathbf{x}_\mathrm{i}$ και $\mathbf{x}_\mathrm{j}$, δηλαδή εάν υπάρχει μεγάλη πιθανότητα μετάβασης από το $\mathbf{x}_\mathrm{i}$ στο $\mathbf{x}_\mathrm{j}$ και αντίστροφα.

Ο P έχει έχει μια σειρά από ιδιοτιμές λ_i που φθίνουν προς το μηδέν $1 = \lambda_0 > |\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots$ και αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα ψ_i τέτοια ώστε:

$$\mathrm{P}\psi_i = \lambda_i \psi_i \tag{4.5}$$

<u>Σημείωση</u>: Από δω και κάτω ως $\psi_\mathrm{j}^{(\mathrm{i})}$ θα συμβολίζεται η i συνιστόσα του j ιδιοδιανύσματος

Η $D_t(\mathbf{x}_\mathrm{i}, \mathbf{x}_\mathrm{j})$ μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας τα ιδιοδιανύσματα και τις ιδιοτιμές του P [15] ως:

$$D_t(\mathbf{x}_\mathrm{i}, \mathbf{x}_\mathrm{j}) = \left(\sum_{k=1}^{m} \lambda_k^{2t} \left[\psi_k(\mathbf{x}_\mathrm{i}) - \psi_k(\mathbf{x}_\mathrm{j})\right]\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{k=1}^{m} \lambda_k^{2t} \left[\psi_k^{(i)} - \psi_k^{(j)}\right]\right)^{\frac{1}{2}} \tag{4.6}$$

Σημειώνεται ότι, επειδή ο P είναι στοχαστικός, το πρώτο ιδιοδιάνυσμα ψ_0 είναι σταθερό και επομένως παραλείπεται από τον παραπάνω υπολογισμό. Επειδή οι ιδιοτιμές τείνουν στο 0 και έχουν ένα μέτρο αυστηρά μικρότερο του 1, η $D_t(\mathbf{x}_\mathrm{i}, \mathbf{x}_\mathrm{j})$ μπορεί να υπολογιστεί, με μια προκαθορισμένη ακρίβεια δ > 0, με έναν πεπερασμένο αριθμό όρων [15]. Έτσι για p όρους:

$$D_t(\mathbf{x}_\mathrm{i}, \mathbf{x}_\mathrm{j}) = \left(\sum_{k=1}^{p} \lambda_k^{2t} \left[\psi_k(\mathbf{x}_\mathrm{i}) - \psi_k(\mathbf{x}_\mathrm{j})\right]\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{k=1}^{p} \lambda_k^{2t} \left[\psi_k^{(i)} - \psi_k^{(j)}\right]\right)^{\frac{1}{2}} \tag{4.37}$$

Με βάση τα παραπάνω εισάγεται το Diffusion Map $\Psi_t: \mathbf{X} \rightarrow \mathbb{R}^\mathrm{p}$

$$\Psi_t(\mathbf{x}_\mathrm{i}) := \begin{bmatrix} \lambda_1^t \psi_1^{(i)} \\ \lambda_2^t \psi_2^{(i)} \\ \vdots \\ \lambda_p^t \psi_p^{(i)} \end{bmatrix} \tag{4.38}$$

το οποίο ενσωματώνει το σύνολο των δεδομένων **X** σε έναν Ευκλείδειο χώρο διάστασης p (χώρος DMAP), έτσι ώστε σε αυτό το χώρο η Ευκλείδεια απόσταση να είναι ίση με την απόσταση διάχυσης [15]:

$$D_t(\mathbf{x}_\mathrm{i}, \mathbf{x}_\mathrm{j}) = \left\|\Psi_t(\mathbf{x}_\mathrm{i}) - \Psi_t(\mathbf{x}_\mathrm{j})\right\| \tag{4.39}$$

<u>Σημείωση</u>: Από δω και κάτω οι υπολογισμοί θα γίνονται για t = 1.

4.3 Επιλογή διάστασης και τιμής παραμέτρου ε

Κατά την εφαρμογή της μεθοδολογίας Diffusion Maps, δεν είναι απαραίτητα γνωστή εκ των προτέρων η εγγενής διάσταση της πολλαπλότητας. Επίσης η κατάλληλη επιλογή της παραμέτρου ε είναι σημαντική για την σωστή παραμετροποίηση της γεωμετρίας της πολλαπλότητας. Για την επιλογή τόσο της διάστασης της πολλαπλότητας όσο και της παραμέτρου ε χρησιμοποιείται η διάσταση συσχέτισης (correlation dimension) [16].

Η διάσταση συσχέτισης ν, είναι ένα μέτρο της διάστασης του χώρου που καταλαμβάνεται από ένα σύνολο τυχαίων σημείων. Για παράδειγμα, για ένα σύνολο τυχαίων σημείων στη γραμμή των πραγματικών αριθμών, η διάσταση συσχέτισης θα είναι ν = 1. Αντίστοιχα εάν τα σημεία αυτά ανήκουν σε ένα τρίγωνο ενσωματωμένο στον τρι-διάστατο χώρο, η

διάσταση συσχέτισης θα είναι ν = 2. Τέτοια σημεία μπορεί να προκύψουν από τροχιές ενός δυναμικού συστήματος για διάφορες αρχικές συνθήκες ή/και τιμές παραμέτρων. Με την πάροδο του χρόνου οι τροχιές αυτές έλκονται σε μια μικρής διάστασης πολλαπλότητα. Η διάσταση συσχέτισης αποτελεί, προσεγγιστικά, ένα μέτρο αυτής της διάστασης. Για οποιδήποτε σύνολο m σημείων στο N-διάστατο χώρο:

$$\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{x}_m],\ \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^{N\times 1} \tag{4.40}$$

ορίζεται το ολοκλήρωμα C (ε):

$$C(\varepsilon) = \lim_{N\to\infty} \frac{g}{N^2} \tag{4.41}$$

όπου g είναι ο συνολικός αριθμός σημείων, των οποίων η μεταξύ τους απόσταση είναι μικρότερη από ε. Καθώς ο αριθμός των σημείων τείνει στο άπειρο και η απόσταση μεταξύ τους τείνει στο μηδέν, το ολοκλήρωμα συσχέτισης, για τις μικρές τιμές του ε, θα έχει τη μορφή [16]:

$$C(\varepsilon) \sim \varepsilon^{\nu} \tag{4.42}$$

Αν ο αριθμός των σημείων είναι επαρκώς μεγάλος και ομοιόμορφα κατανεμημένος, ένα λογαριθμικό διάγραμμα του ολοκληρώματος συσχέτισης έναντι του ε μπορεί να αποδώσει μια εκτίμηση της διάστασης ν.

Για την εκτίμηση του ολοκληρώματος συσχέτισης, για πεπερασμένο αριθμό σημείων, χρησιμοποιείται το άθροισμα συσχέτισης:

$$C(\varepsilon) = \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i\neq j}}^{N} \Theta\left(\varepsilon - \left\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\right\|\right) \tag{4.43}$$

όπου Θ η βηματική συνάρτηση Heaviside:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases} \tag{2.44}$$

Οποιαδήποτε τιμή του ε στο γραμμικό τμήμα αυτού του λογαριθμικού διαγράμματος είναι κατάλληλο για τους υπολογισμούς των Diffusion Maps [4], με σχετικά μεγάλες τιμές του ε να αποδίδουν καλύτερη παραμετροποίηση κοντά στο σύνορο της πολλαπλότητας [17].

Σημειώνεται ότι μερικές φορές, διαδοχικά ιδιοδιανύσματα ψ_i και ψ_j περιέχουν περιττές πληροφορίες. Για παράδειγμα, έστω ένα δι-διάστατο ορθογώνιο μεγάλου μήκους και μικρού πλάτους, το οποίο περιέχεται σε έναν χώρο μεγάλης διάστασης. Για το ορθογώνιο αυτό επιθυμείται μια δι-διάστατη παραμετροποίηση μέσω των Diffusion Maps και επομένως δυο ιδιοδιανύσματα, με το ένα να αντιστοιχεί στην κατεύθυνση του πλάτους και το άλλο στην κατεύθυνση του μήκους. Ωστόσο, πολλές από τις υπολογιζόμενες ιδιοτιμές που αντιστοιχούν στην «μακρά» κατεύθυνση του μήκους μπορεί να είναι μεγαλύτερες από την πρώτη ιδιοτιμή που αντιστοιχεί κατεύθυνση του πλάτους. Σε αυτή την περίπτωση είναι πιθανό πολλά από τα ιδιοδιανύσματα να πρέπει αγνοηθούν [4]. Για τον εντοπισμό των ανεξάρτητων ιδιοδιανυσμάτων – κατευθύνσεων ακολουθείται η εξής διαδικασία [17]:

1) Το πρώτο, ιδιοδιάνυσμα αποτελεί πάντα την πρώτη DMAP κατεύθυνση
2) Διαδοχικά, τα επόμενα ιδιοδιανύσματα παρίστανται γραφικά ως προς το πρώτο. Τα ιδιοδιανύσματα θα είναι «ανεξάρτητα» (υπό την έννοια ότι το επόμενο ιδιοδιάνυσμα προσθέτει πληροφορία) αν το γράφημα «απλώνεται» στο χώρο, δηλαδή δεν σχηματίζει μια γραμμή ή καμπύλη
3) Αφού βρεθεί η δεύτερη κατεύθυνση η τρίτη αναζητείται με ανάλογο τρόπο, αλλά σε τρι-διάστατο γράφημα. Για περισσότερες εκ των τριών διαστάσεων προτείνεται κάποιο μέτρο, όπως για παράδειγμα Mutual Information.

4.4 Δυναμική στο χώρο DMAP

Έχοντας ανακαλύψει και παραμετροποιήσει τη γεωμετρία της πολλαπλότητας, σκοπός είναι η ανάπτυξη ενός μοντέλου μειωμένης τάξης που περιγράφει τη δυναμική του συστήματος πάνω σε αυτό. Στην ιδανική περίπτωση, η διάσταση του μοντέλου μειωμένης τάξης θα είναι η «εγγενής» (intrinsic) διάσταση της μακροπρόθεσμης δυναμικής του συστήματος. Οι «συναρτήσεις βάσης» που παρέχονται από τα Diffusion Maps μπορούν να είναι (μερικές φορές σημαντικά) λιγότερες σε αριθμό από τις συναρτήσεις που παρέχονται από μεθόδους όπως η POD, ακριβώς επειδή αντιπροσωπεύουν την πραγματική διάσταση της δυναμικής [4].

Προκειμένου να αξιοποιηθεί ο μηχανισμός μείωσης τάξης που παρέχεται από τα Diffusion Maps, πρέπει να είναι δυνατή η χαρτογράφηση μεταξύ του αρχικού χώρου $\mathbb{R}^N$ (ambient

χώρος) και του χώρου DMAP. Από τον ambient χώρο στο χώρο DMAP, υπάρχει μια μαθηματικά κομψή προσέγγιση γνωστή ως επέκταση Nyström. Ο αντίστροφος χάρτης, ωστόσο, είναι πιο δύσκολος [4].

4.4.1 Επέκταση Nyström

Ο υπολογισμός των συντεταγμένων στον χώρο DMAP, ενός σημείου $\mathbf{x}_{\mathrm{new}}$ το οποίο δεν ανήκε στον πίνακα των στιγμιοτύπων **X,** γίνεται μέσω της επέκτασης Nyström Ψ: $\mathbb{R}^{\mathrm{N}} \rightarrow \mathbb{R}^{\mathrm{p}}$ [4] ως εξής:

1) Υπολογισμός του μέτρου ομοιότητας για το νέο σημείο

$$\mathrm{W}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{new}} = \mathrm{W}(\mathbf{x}_{\mathrm{i}}, \mathbf{x}_{\mathrm{new}}) = \exp\left[-\left(\frac{\|\mathbf{x}_{\mathrm{new}} - \mathbf{x}_{\mathrm{i}}\|}{\varepsilon}\right)^2\right] \in \mathbb{R}^{1\times \mathrm{m}} \tag{4.45}$$

2) Υπολογισμός των πιθανοτήτων μετάβασης για το νέο σημείο

$$\mathrm{K} = \sum_{\mathrm{k}=1}^{\mathrm{m}} \mathrm{W}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{new}} \tag{4.46}$$

$$\mathrm{P}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{new}} = \frac{\mathrm{W}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{new}}}{\mathrm{K}} \in \mathbb{R}^{1\times \mathrm{m}} \tag{4.47}$$

Η συντεταγμένη j - εκ των p στο σύνολο - στον χώρο DMAP θα δίνεται από τη σχέση:

$$\psi_j^{new} = \frac{1}{\lambda_j} \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{m}} \mathrm{P}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{new}} \psi_j^{(i)} \tag{4.48}$$

Η επέκταση Nyström, αφού πολλαπλασιαστούν οι συντεταγμένες με τις αντίστοιχες ιδιοτιμές, αποδίδει τελικά:

$$\Psi(\mathbf{x}^{\mathrm{new}}) = \begin{bmatrix} \lambda_1 \psi_1^{new} \\ \lambda_2 \psi_2^{new} \\ \vdots \\ \lambda_p \psi_p^{new} \end{bmatrix} \tag{4.49}$$

4.4.2 Παρεμβολή με συναρτήσεις ακτινικής βάσης

Έστω **u** ένα σημείο στον χώρο DMAP. Σκοπός είναι ο υπολογισμός των συντεταγμένων του αντίστοιχου σημείου στον Ambient χώρο. Δεδομένου ότι αυτό το map είναι ανάλογο με ένα «αντίστροφο» Diffusion Map θα συμβολίζεται ως Ψ^{-1}: $\mathbb{R}^{\mathrm{p}} \rightarrow \mathbb{R}^{\mathrm{N}}$. Το πρόβλημα

κατασκευής του αντίστροφου map μπορεί να οριστεί ως N συναρτήσεις στο χώρο DMAP, όπου κάθε μια αντιστοιχεί σε μια συντεταγμένη στον Ambient χώρο. Μια προσέγγιση για την επίλυση του παραπάνω προβλήματος είναι παρεμβολή με συναρτήσεις ακτινικής βάσης. Αρχικά υπολογίζονται τα k κοντινότερα σημεία του u στον χώρο DMAP, καθώς και τα αντίστοιχα τους στον ambient χώρο [17]. Οι συντεταγμένες του σημείου $\mathbf{x}_{\text{new}} = \Psi^{-1}(u)$ μπορούν να υπολογιστούν ως:

$$\mathbf{x}_{new}^{(i)} = \sum_{j=1}^{k} \alpha_{ji} \|u - u_j\|, \qquad i = 1, \dots, N \tag{4.50}$$

$$\begin{bmatrix} \alpha_{1i} \\ \vdots \\ \alpha_{ki} \end{bmatrix} = \mathbf{\Lambda}^{-1} \begin{bmatrix} \mathrm{x}_{1i} \\ \vdots \\ \mathrm{x}_{ki} \end{bmatrix}, \qquad \Lambda_{mn} = \|u_m - u_n\|, \qquad m, n = 1, \dots, k \tag{4.51}$$

Πρέπει να γίνουν δηλαδή N παρεμβολές στον χώρο DMAP, το οποίο μπορεί να είναι υπολογιστικά γρήγορο εφόσον έχει υποτεθεί ότι η διάσταση p είναι πολύ μικρή [4].

4.4.3 Μείωση τάξης

Έστω ξανά το μη γραμμικό δυναμικό σύστημα:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{dt}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathrm{t}, \boldsymbol{\mu}) \tag{4.52}$$

Έχοντας ορίσει ως: $\hat{\mathbf{x}} = \Psi(\mathbf{x})$ και $\mathbf{x} = \Psi^{-1}(\hat{\mathbf{x}})$ το μοντέλο μειωμένης τάξης μπορεί να κατασκευαστεί ως:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{x}}}{\mathrm{dt}} = \frac{\mathrm{d}[\Psi(\mathbf{x})]}{\mathrm{dt}} \tag{4.53}$$

Εφαρμόζοντας τον κανόνα της αλυσίδας προκύπτει ότι:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{x}}}{\mathrm{dt}} = \frac{\partial \Psi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{dt}} = \frac{\partial \Psi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathrm{t}, \boldsymbol{\mu}) \tag{4.54}$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση με $\mathbf{x} = \Psi^{-1}(\hat{\mathbf{x}})$ προκύπτει τελικά το μοντέλο μειωμένης τάξης διατυπωμένο στο DMAP χώρο:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{x}}}{\mathrm{dt}} = \frac{\partial \Psi(\Psi^{-1}(\hat{\mathbf{x}}))}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\Psi^{-1}(\hat{\mathbf{x}}), \mathrm{t}, \boldsymbol{\mu}) \tag{4.55}$$

Η πίνακας $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{p \times \mathrm{N}}$ υπολογίζεται ως:

$$\frac{\partial \Psi^{(a)}}{\partial \mathbf{x}^{(\beta)}} = \frac{1}{\lambda_\alpha} \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{m}} \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{m}} \mathrm{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_\mathrm{j}) \frac{\partial \mathrm{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_\mathrm{i})}{\partial \mathbf{x}^{(\beta)}} [\psi_i^{(a)} - \psi_j^{(a)}] \tag{4.56}$$

$$\frac{\partial \mathrm{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_\mathrm{i})}{\partial \mathbf{x}^{(\beta)}} = \frac{2}{\varepsilon^2} \mathrm{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_\mathrm{i}) [\mathbf{x}_\mathrm{i}^{(\beta)} - \mathbf{x}^{(\beta)}] \tag{4.57}$$

Το $\mathrm{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_\mathrm{i})$ απαιτείται να υπολογιστεί μόνο για τα $\mathbf{x}_i$ που βρίσκονται σε απόσταση μικρότερη του ε από το $\mathbf{x}$, αφού οι συνεισφορές σημείων με απόσταση μεγαλύτερη από αυτή είναι αμελητέες [4].

4.5 Εφαρμογές

Η μεθοδολογία που παρουσιάστηκε, εφαρμόζεται σε δυο μη γραμμικά προβλήματα: 1) την εξίσωση Chafee – Infante και 2) την εξίσωση Burgers. Για την εξίσωση Chafee – Infante είναι γνωστό ότι, για ορισμένες τιμές παραμέτρων, υπάρχει μια δι-διάστατη πολλαπλότητα προς την οποία έλκονται οι λύσεις [18]. Με βάση αυτή την εφαρμογή, παρουσιάζονται βήμα – βήμα τα επί μέρους στάδια της διαδικασίας μείωσης τάξης, ενώ ταυτόχρονα παρέχει ένα μέτρο σύγκρισης, λόγω της ήδη γνωστής διάστασης της πολλαπλότηταw. Στη συνέχεια, η μεθοδολογία εφαρμόζεται και στην εξίσωση Burgers και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με τα αντίστοιχα της γραμμικής POD-Galerkin με κύριους άξονες:

1) Τη μείωση τάξης
2) Τη μείωση του υπολογιστικού κόστους

Σημειώνεται ότι η μεθοδολογία μπορεί να αξιοποιηθεί, ακόμα και όταν οι εξισώσεις που διέπουν το σύστημα δεν είναι γνωστές και οι καταστάσεις του συστήματος προσεγγίζονται από κάποια black-box συνάρτηση, όπως ένα κατάλληλα εκπαιδευμένο νευρωνικό δίκτυο [17].

4.5.1 Εφαρμογή 1: Εξίσωση Chafee – Infante

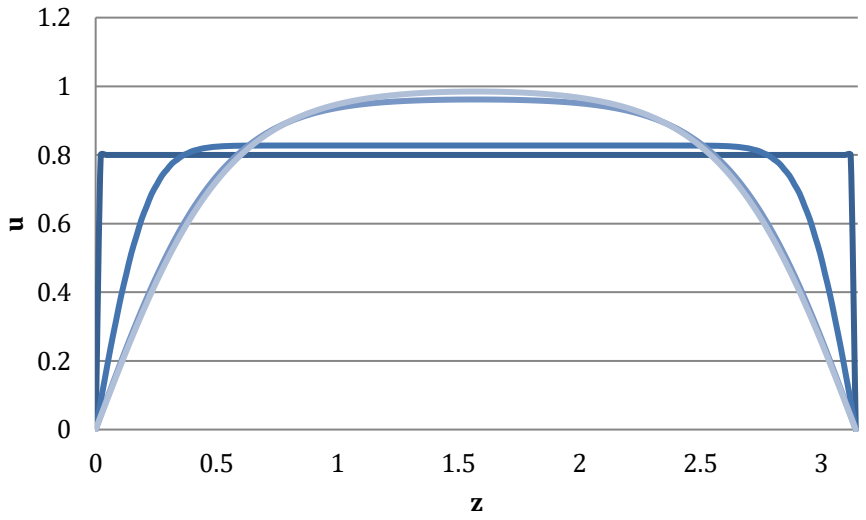
Το πρώτο πρόβλημα που μελετάται είναι από την περιοχή της χημικής κινητικής. Η εξίσωση διάχυσης – αντίδρασης που θα μελετηθεί είναι [18]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + u^3 - u = 0$$

$$u(z,0) = u_0, \forall\, z \in [0,\pi]$$

$$u(0,t) = u(\pi,t) = 0, t > 0$$

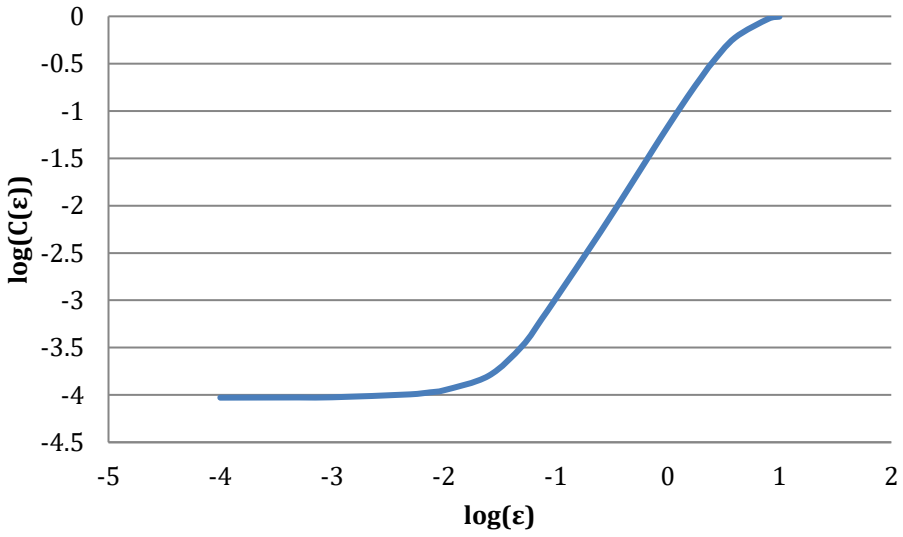
όπου μ η μοναδική παράμετρος/είσοδος του προβλήματος. Η εξίσωση διακριτοποιείται χωρικά με πεπερασμένες διαφορές. Το μονο-διάστατο χωρίο διακριτοποιείται χρησιμοποιώντας 150 κόμβους οι οποίοι αντιστοιχούν στις θέσεις με συντεταγμένες $z_i = i \times \left(\frac{\pi}{100}\right), i = 1, 2, \dots, 150$. Το πλήρες μοντέλο, επομένως, είναι διάστασης 150. Το πρόβλημα επιλύεται στο χρονικό διάστημα $t \in [0,1]$. Για τη χρονική ολοκλήρωση του συστήματος διαφορικών εξισώσεων χρησιμοποιείται η ode15s του MATLAB [19], καθώς το σύστημα παρουσιάζει ακαμψία. Ενδεικτικά αποτελέσματα παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.1.



Σχήμα 4.1 Στιγμιότυπα της λύσης του πλήρους μοντέλου για διάφορες χρονικές στιγμές.

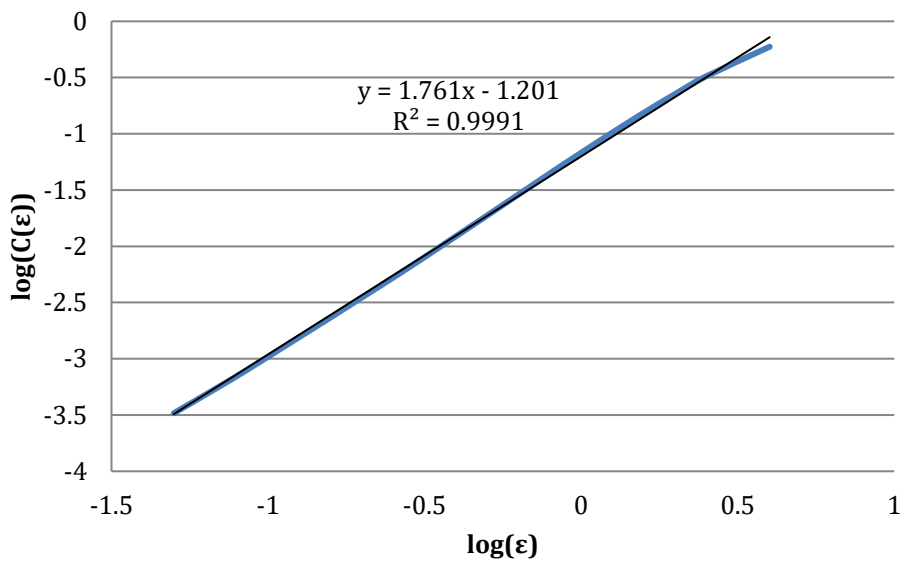
Σημειώνεται ότι ακόμα και αν τα δυο μοντέλα (το πλήρες και το μειωμένης τάξης) ολοκληρωθούν στο χρόνο με μεγάλη ακρίβεια και ανεξαρτήτως κόστους, οι δυο τροχιές θα διαφέρουν πάντα λόγω της παρεμβολής στην εξίσωση τάδε (το αντίστροφο map Ψ^{-1}είναι προσεγγιστικό).

Για την παραμετροποίηση της δι-διάστατης πολλαπλότητας, γίνονται προσομοιώσεις του πλήρους συστήματος και συλλέγονται τροχιές, επιλέγοντας ομοιόμορφα τις αρχικές συνθήκες u_0 από το σύνολο (0.5, 1.5) και την παράμετρο μ από το [0.05,0.25]. Έτσι κατασκευάζεται ο πίνακας των στιγμιοτύπων **X,** όπως και κατά την μεθοδολογία POD-Galerkin. Για την εκτίμηση και επαλήθευση της διάστασης της πολλαπλότητας στην οποία ζουν τα στιγμιότυπα, υπολογίζεται το άθροισμα συσχέτισης για διάφορες τιμές της παραμέτρου ε. Τα αποτελέσματα αυτού του υπολογισμού παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.2.



Σχήμα 4.2 Λογαριθμικό διάγραμμα του ολοκληρώματος συσχέτισης ως συνάρτηση της παραμέτρου ε.

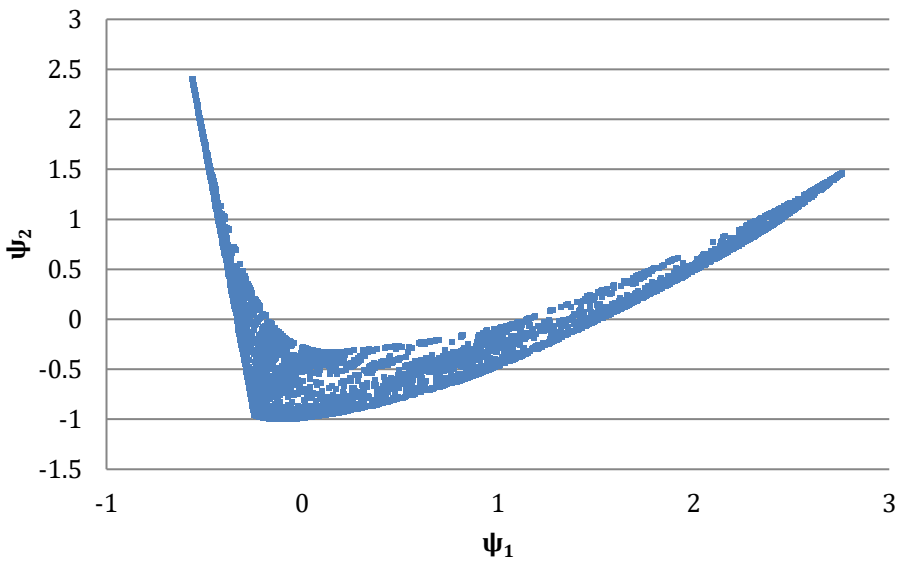
Μια εκτίμηση για τη διάσταση της πολλαπλότητας θα προκύψει από την κλίση του γραμμικού τμήματος του Σχήματος 4.1. Στο Σχήμα 4.3 παρουσιάζεται το τμήμα αυτό, καθώς και η κλίση της ευθείας.



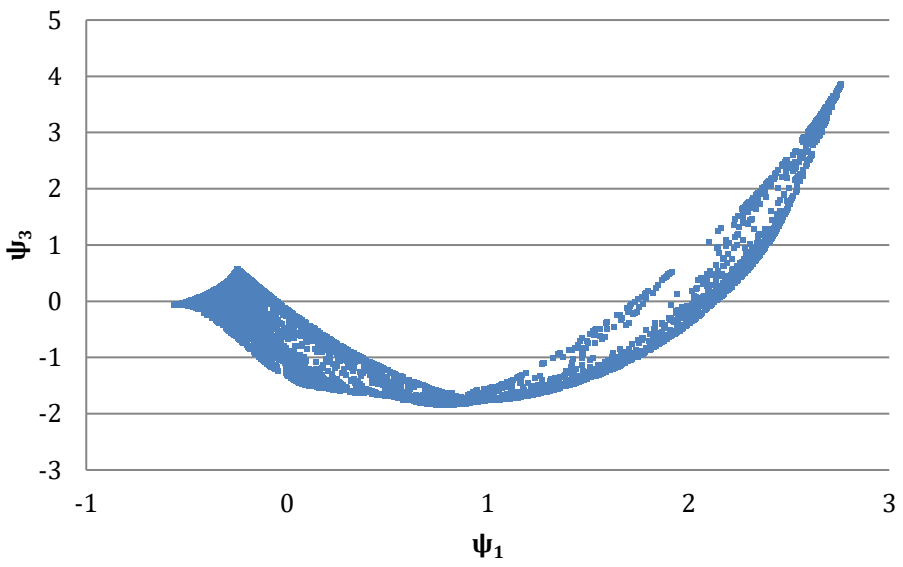
Σχήμα 4.3 Από την κλίση του διαγράμματος προκύπτει μια εκτίμηση για την εγγενή διάσταση της πολλαπλότητας.

Η διάσταση συσχέτισης υπολογίζεται ν = 1.761. Όπως αναφέρθηκε, το μέγεθος αυτό αποτελεί ένα μέτρο της διάστασης της πολλαπλότητας και όχι η διάσταση της αυτή κάθ' αυτή. Για αυτό το λόγο μπορεί να μην είναι ακέραιος αριθμός. Η τιμή που υπολογίστηκε αποτελεί ένδειξη ότι η διάσταση είναι d = 2, το οποίο συμφωνεί με την πραγματική διάσταση. Στη γενική περίπτωση όμως, η εγγενής διάσταση της πολλαπλότητας δεν είναι γνωστή εκ των προτέρων, κάνοντας έτσι την διάσταση συσχέτισης ένα χρήσιμο εργαλείο για την ανίχνευσή της.

Η τιμή της παραμέτρου ε μπορεί να επιλεχθεί ως οποιοδήποτε σημείο πάνω σε αυτή την ευθεία. Για τους υπολογισμούς από εδώ και κάτω επιλέγεται η τιμή ε = 0.4. Έχοντας επιλέξει την παράμετρο ε, αναζητείται μια παραμετροποίηση της διάστατης πολλαπλότητας από τα ιδιοδιανύσματα και τις ιδιοτιμές του πίνακα μετάβασης **P**. Σε κάθε ένα από τα ακόλουθα σχήματα (Σχήματα 4.4, 4.5 και 4.6), παρίστανται γραφικά το πρώτο ιδιοδιάνυσμα ψ_1με τα διαδοχικά του (2, 3 και 4).

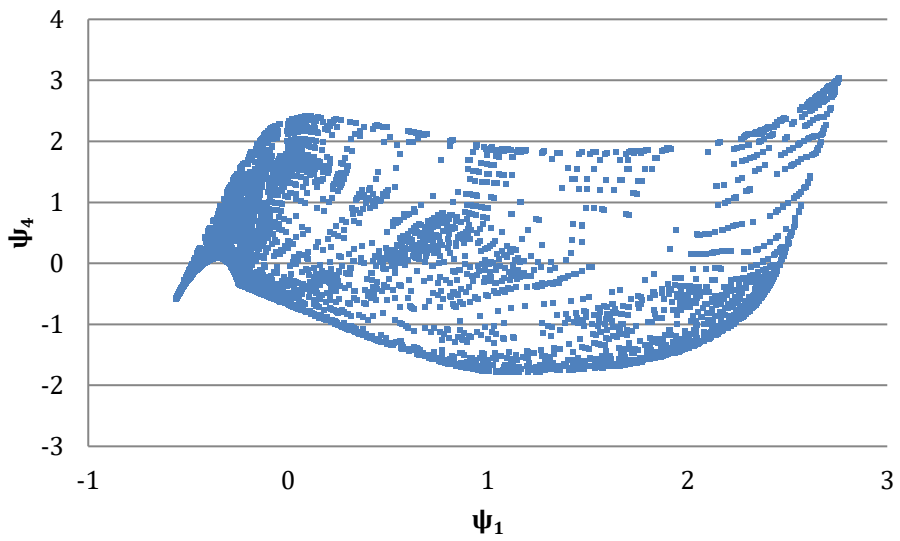


Σχήμα 4.4 Το πρώτο και το δεύτερο ιδιοδιάνυσμα του P.



Σχήμα 4.5 Το πρώτο και το τρίτο ιδιοδιάνυσμα του P.

Η οιονεί γραμμική (quasi-linear) μορφή των Σχημάτων 4.4 και 4.5 δείχνει ότι τα διανύσματα αυτά δεν είναι κατάλληλα για την παραμετροποίηση της πολλαπλότητας. Αντίθετα στο Σχήμα 4.6, το ξεκάθαρα δι-διάστατο γράφημα αποδεικνύει ότι η δεύτερη διάσταση της πολλαπλότητας παραμετροποιείται από το τέταρτο ιδιοδιάνυσμα.



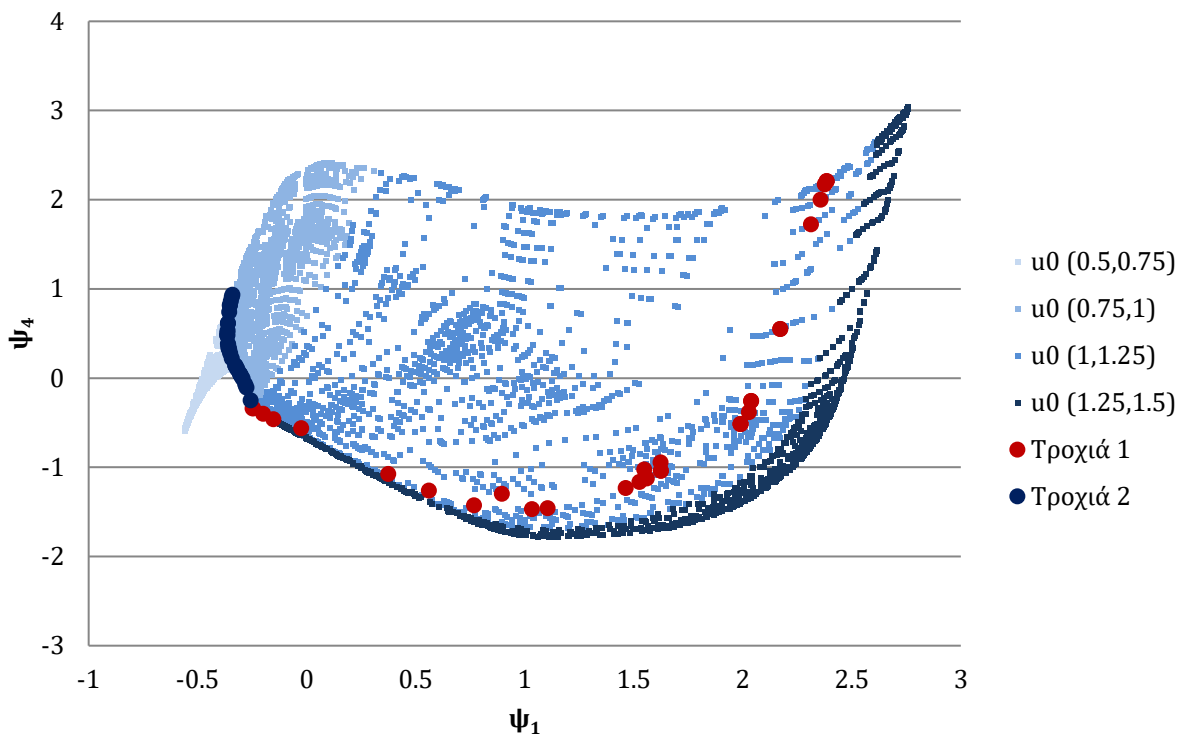
Σχήμα 4.6 Το πρώτο και το τέταρτο ιδιοδιάνυσμα του P.

Το σύνολο από το οποίο επιλέγονται αρχικές συνθήκες χωρίζεται σε 4 υποσύνολα, στο κάθε ένα από τα οποία αντιστοιχίζεται ένα χρώμα όπως φαίνεται στον Πίνακα 4.1.

Πίνακας 4.1: Τα υποσύνολα από τα οποία επιλέγονται αρχικές συνθήκες.

Αρχικές Συνθήκες	(0.5,0.75)	(0.75,1)	(1,1.25)	(1.25,1.5)

Αυτό γίνεται για λόγος οπτικοποίησης των τροχιών στον χώρο DMAP, κατά την παραμετροποίηση που δίνεται από τα ιδιοδιανύσματα ψ_1και ψ_4. Οι τροχιές αυτές ως σύνολα, καθώς και δυο ξεχωριστές με αρχικές συνθήκες από τα σύνολα (0.5,0.75) και (1,1.25) παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.7.



Σχήμα 4.7 Τα τέσσερα σύνολα τροχιών του συστήματος στο χώρο DMAP . Με κόκκινη ασυνεχή γραμμή φαίνεται μια τροχιά του συστήματος για αρχική συνθήκη από το υποσύνολο (1.25,1.5). Με μπλε ασυνεχή γραμμή φαίνεται μια τροχιά του συστήματος για αρχική συνθήκη από το υποσύνολο (0.75,1).

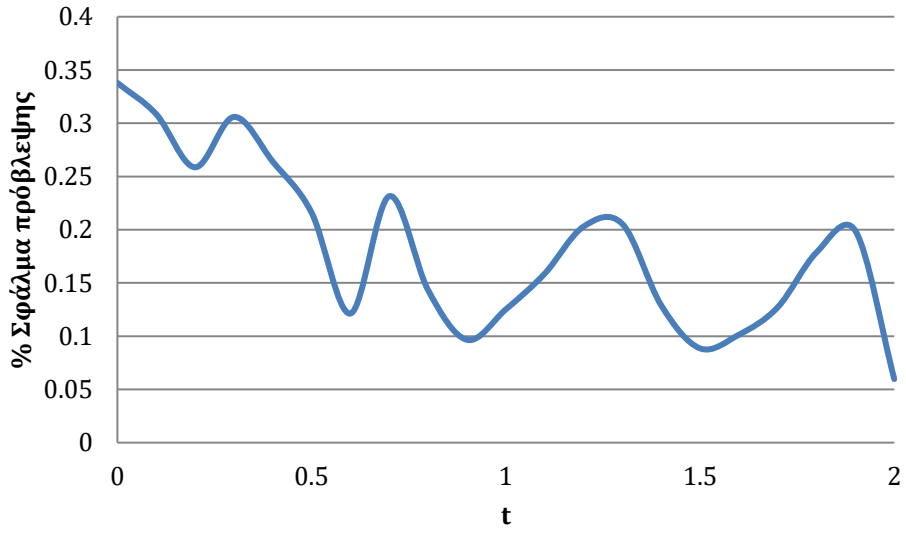
Στο Σχήμα 6 φαίνεται χαρακτηριστικά πώς όλες τροχιές, για τις διαφορετικές αρχικές συνθήκες, συγκλίνουν προς ένα σημείο, τη λύση μόνιμης κατάστασης. Επίσης από το σχήμα φαίνεται ότι για το υποσύνολο (1,1.25), η συλλογή στιγμιοτύπων δε έχει γίνει εξίσου καλά με τις άλλες περιοχές. Ιδανικά θα έπρεπε τα σημεία να είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα σε όλο το χώρο DMAP, ώστε να λαμβάνεται η βέλτιστη δυνατή παραμετροποίηση.

Έχοντας παραμετροποιήσει την πολλαπλότητα, στη συνέχεια οι εξισώσεις του συστήματος προβάλλονται σε αυτή, μειώνοντας τους βαθμούς ελευθερίας από 150 σε 2. Το μοντέλο μειωμένης τάξης που προκύπτει, δοκιμάζεται για τις συνθήκες που φαίνονται στον Πίνακα 4.2. Για τον αντίστροφο χάρτη Ψ χρησιμοποιούνται K = 10 σημεία.

Πίνακας 4.2: Αρχική συνθήκη και παράμετρος μ, για τα οποία δοκιμάζεται το μοντέλο μειωμένης τάξης.

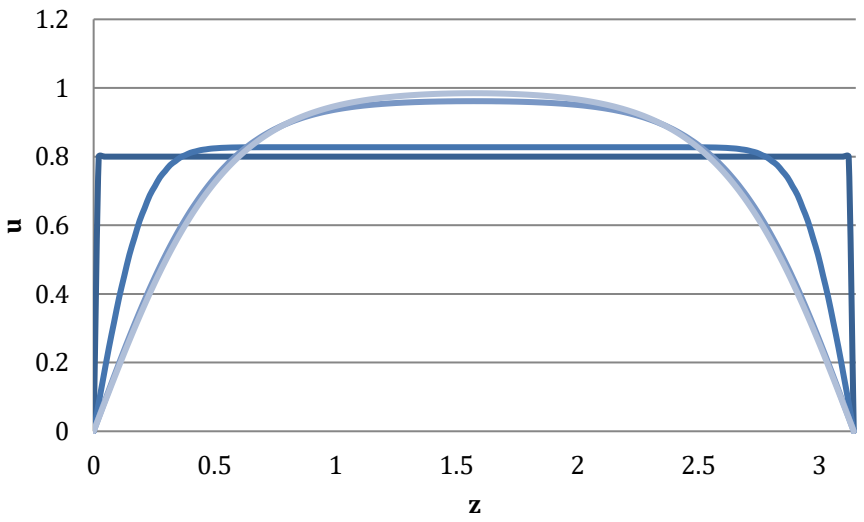
Αρχική συνθήκη u_0	0.8
Παράμετρος μ	0.15

Για την προσομοίωση τόσο του μοντέλου μειωμένης τάξης όσο και του πλήρους μοντέλου, χρησιμοποιείται η μέθοδος Runge-Kutta (MATLAB ode45). Στην προκειμένη περίπτωση χρησιμοποιείται η ode45 και όχι η ode15s, με σκοπό να αξιολογηθεί το αν όντως η μείωση τάξης συνδυάζεται και με άρση της ακαμψίας τους συστήματος. Στο Σχήμα 4.8 παρουσιάζεται το σφάλμα των προβλέψεων που παράγονται.

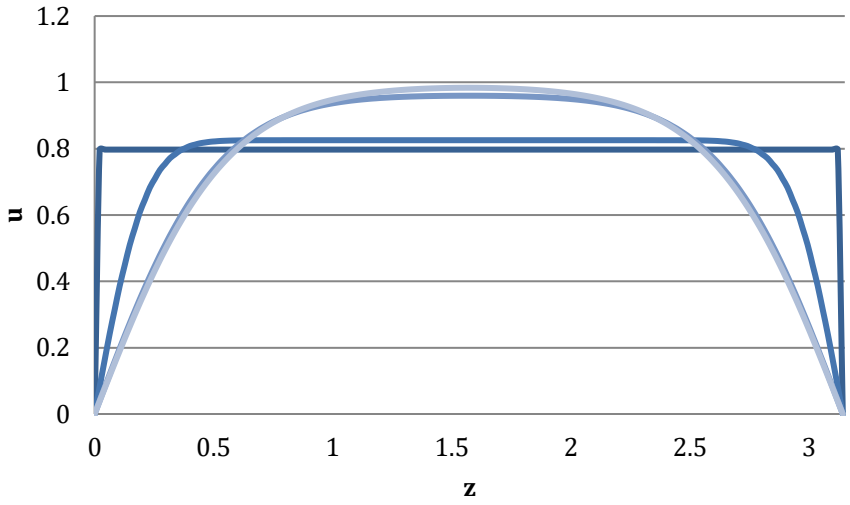


Σχήμα 4.8 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης ως συνάρτηση του χρόνου.

Η ακρίβεια που επιτυγχάνεται κρίνεται ικανοποιητική, καθώς είναι κάτω του 1%, ενώ παράλληλα η μείωση τάξης που επιτυγχάνεται είναι ραγδαία. Μόνο δυο μεταβλητές επαρκούν για την ακριβή περιγραφεί της κατάστασης του συστήματος για κάθε χρονική στιγμή. Ορισμένα στιγμιότυπα του συτήματος και οι αντίστοιχες προβλέψεις του μοντέλου μειωμένης τάξης παρουσιάζονται στα Σχήματα 4.9 και 4.10.



Σχήμα 4.9 Ορισμένα στιγμιότυπα του συστήματος, όπως υπολογίζονται από το πλήρες μοντέλο.



Σχήμα 4.10 Ορισμένα στιγμιότυπα των προβλέψεων του μικρού μοντέλου. Οι προβέψεις προσεγγίζουν πολύ ικανοποιητικά την πραγματική λύση.

Για την επίλυση του πλήρους μοντέλου με την ode45 απαιτήθηκαν 421 χρονικά βήματα. Χρησιμοποιώντας την ode15s, η οποία είναι κατάλληλη για συστήματα που παρουσιάζουν ακαμψία, τα βήματα που απαιτήθηκαν ήταν μόλις 63. Για την επίλυση του μοντέλου μειωμένης τάξης με την ode45 απαιτήθηκαν 64 υπολογιστικά βήματα, δηλαδή ένα περισσότερο από την ode15s. Αυτό αποδεικνύει την σημαντική μείωση της ακαμψίας που

επιτυγχάνεται, μέσω της προβολής των εξισώσεων του συστήματος στον χώρο DMAP. Τα αποτελέσματα αυτά συνοψίζονται στον Πίνακα 4.3.

Πίνακας 4.3: Αριθμός υπολογιστικών βημάτων που απαιτήθηκαν σε κάθε επίλυση.

	Μικρό μοντέλο με ode45	Πλήρες ομοντέλο με ode45	Πλήρες μοντέλο με ode15s
Αριθμός υπολογιστικών βημάτων	64	421	63

Σημειώνεται ότι από άποψη ταχύτητας στην όλη διαδικασία, το πιο αργό βήμα ήταν ο υπολογισμός της ποσότητας $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}}$ και όχι το κομμάτι της παρεμβολής. Το γεγονός αυτό μπορεί να αποδοθεί στο ότι οι απαράιτητες παρεμβολές γίνονταν σε δυο μόνο διαστάσης, ενώ ο υπολογισμός του $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}}$ κλιμακώνεται με την διάσταση του αρχικού προβλήματος.

4.5.2 Εφαρμογή 2: Παραμετροποιημένη μη ιξώδης εξίσωση Burgers

Το πρόβλημα διακριτοποιείται και επιλύεται όπως ακριβώς περιγράφεται στην Εφαρμογή 2.6.1.

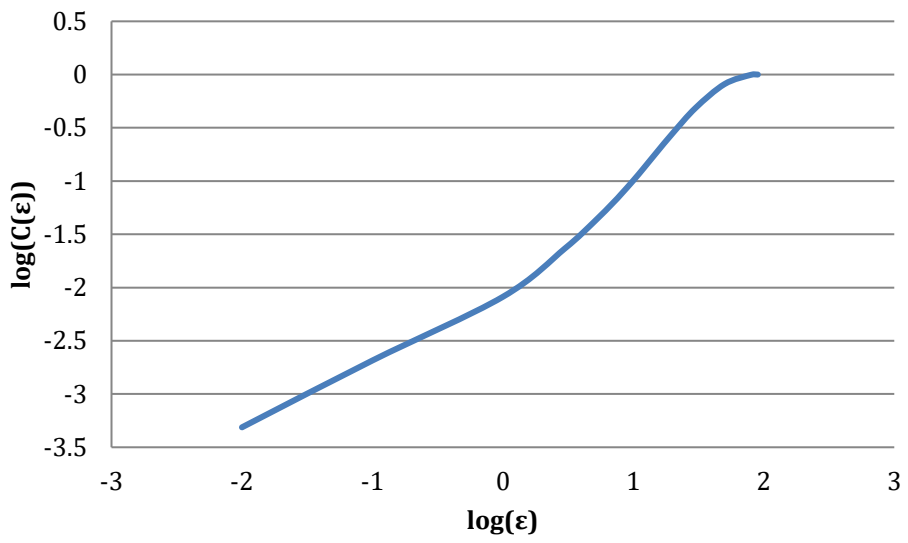
$$\frac{\partial u(z,t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial (u^2(z,t))}{\partial z} = 0.02e^{-\mu_2 z}$$

$$u(z,0) = u_0, \forall\, z \in [0,100]$$

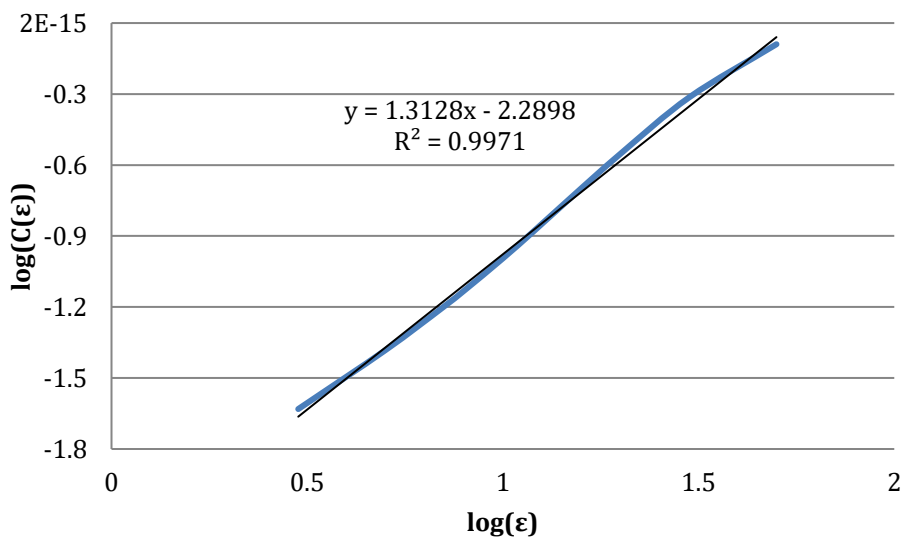
$$u(0,t) = 4.5, t > 0$$

Για την παραμετροποίηση της πολλαπλότητας συλλέγονται στιγμιότυπα της δυναμικής του συστήματος για αρχικές συνθήκες στο διάστημα $u_0 \in [0.5,1.5]$ και τιμή παραμέτρου $\mu_2 \in [0.028,0.04]$.

Αρχικά, για την εκτίμηση της διάστασης χρησιμοποιείται η διάσταση συσχέτισης. Τα αποτελέσματα του υπολογισμού παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.11. Η εκτίμηση της διάστασης θα προκύψει από την κλίση του ευθύγραμμου τμήματος της καμπύλης. Το τμήμα αυτό, καθώς και ο υπολογισμός της κλίσης φαίνονται στο Σχήμα 4.12.



Σχήμα 4.11 Λογαριθμικό διάγραμμα του ολοκληρώματος συσχέτισης ως συνάρτηση της παραμέτρου ε.

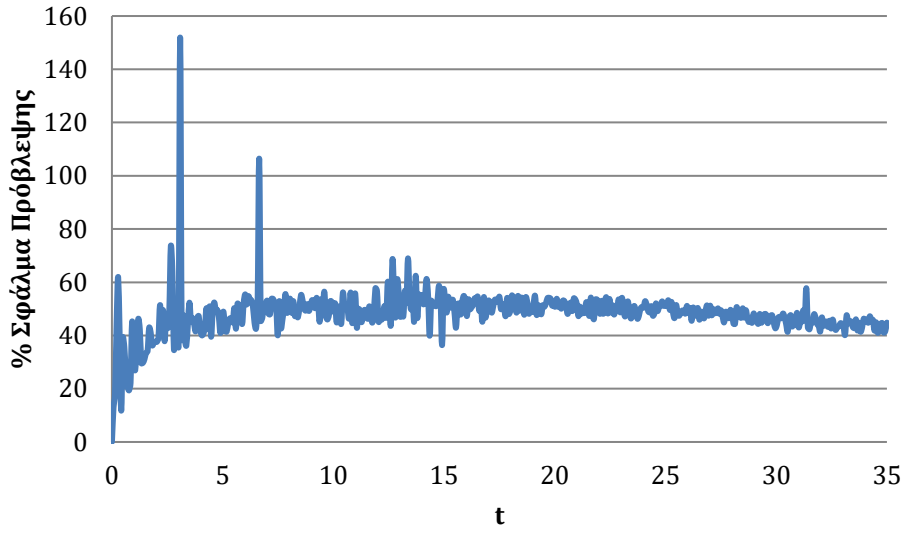


Σχήμα 4.12 Από την κλίση της ευθείας προκύπτει η εκτίμηση της εγγενούς διάστασης της πολλπαπλότητας.

Από τη διάσταση συσχέτισης ν = 1.3128, προκύπτει ότι για το σύνολο των αρχικών συνθηκών και παραμέτρων για τα οποία έγιναν προσομοιώσεις, τα στιγμιότυπα που συλλέχθηκαν ζουν σε μια μονο-διάστατη μη γραμμική πολλαπλότητα. Θεωρητικά δηλαδή, μια μεταβλητή αρκεί για την πλήρη περιγραφή της δυναμικής συμπεριφοράς του

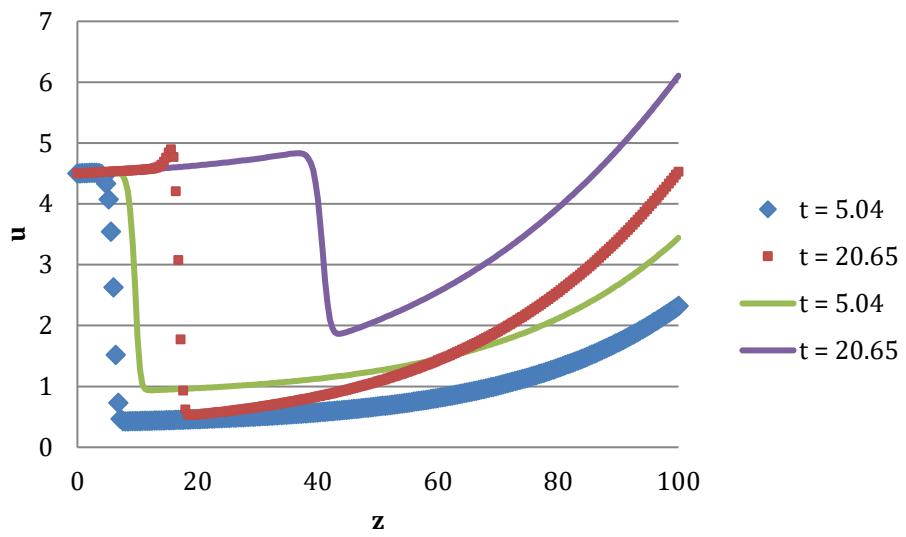
συστήματος για αυτό το σύνολο. Για τη διαδικασία μείωσης τάξης χρησιμοποιείται η τιμή της παραμέτρου ε = 6.

Το μοντέλο μειωμένης τάξης, δοκιμάζεται για το σετ $(u_0, \mu_2) = (0.833, 0.0388)$. Για την παρεμβολή χρησιμοποιούνται K = 6 σημεία. Η εφαρμογή της μεθόδου ήταν ανεπιτυχής, με τα σφάλματα πρόβλεψης να παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.13.



Σχήμα 4.13 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης του μοντέλου μειωμένης τάξης.

Ο χαρακτήρας των σφαλμάτων αυτών γίνεται σαφέστερος από κάποια ενδεικτικά στιγμιότυπα που υπολογίζονται από το μοντέλο μειωμένης τάξης, όπως φαίνεται στο Σχήμα 4.14. Στο σχήμα αυτό, με συνεχή γραμμή απεικονίζονται λύσεις του πλήρους μοντέλου, ενώ με ασυνεχή γραμμή προβλέψεις του μοντέλου μειωμένης τάξης.



Σχήμα 4.14 Στιγμιότυπα του πλήρους μοντέλου και οι αντίστοιχες προβλέψεις του μοντέλου μειωμένης τάξης.

Από το Σχήμα 4.14 φαίνεται σαφώς ότι το μοντέλο μειωμένης τάξης δεν έχει έχει «προχωρήσει» στο χρόνο. Αυτό μπορεί να οφείλεται σε αρκετούς παράγοντες, εκ των οποίων κάποιοι θα διερευνηθούν διεξοδικά:

1) Μη βέλτιστη παραμετροποίηση της πολλαπλότητας, είτε λόγω της μη ομοιόμορφης συλλογής στιγμιοτύπων είτε λανθασμένης εκτίμησης της διάστασής της.
2) Ακρίβεια υπολογισμού της ποσότητας $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}}$. Όπως αναφέρθηκε ο υπολογισμός αυτός απαιτείται να γίνει μόνο για τα $\mathbf{x}_i$ που βρίσκονται σε απόσταση μικρότερη του ε από το $\mathbf{x}$, αφού οι συνεισφορές σημείων με απόσταση μεγαλύτερη από αυτή είναι αμελητέες. Μια αύξηση του αρθμού των σημείων για τα οποία υπολογίζεται μπορεί πιθανόν να αυξήσει την ακρίβεια των προβλέψεων.
3) Ο αριθμός των σημείων K που χρησιμοποιούνται για την παρεμβολή.

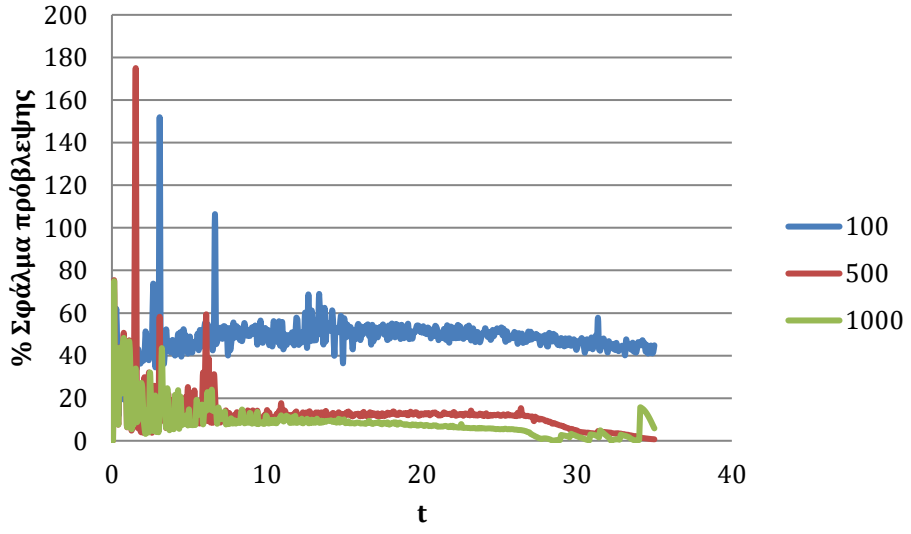
Όσον αφορά τον πρώτο παράγοντα, τα στιγμιότυπα θα πρέπει, ιδανικα, να είναι όσο το δυνατόν πιο ομοιόμορφα κατανεμημένα, διότι με αυτόν τον τρόπο επιτυγχάνεται καλύτερη παραμετροποίηση της πολλαπλότητας. Ωστόσο, αυτή η συνθήκη δεν προκύπτει με φυσικό τρόπο από τη χρονική ολοκλήρωση δυναμικών συστημάτων: οι τροχιές έχουν συχνά την τάση να συγκεντρώνονται σε στενές περιοχές, ιδίως προς τη λύση μόνιμης κατάστασης [17]. Στη διερεύνυση που θα ακολουθήσει, έμφαση θα δοθεί κυρίως στα

σημεία 2 και 3. Αν η βελτιστοποίηση τους δεν επαρκεί για την βελτίωση της προβλεπτικής ικανότητας του μοντέλου, τότε θα πρέπει να επανεξεταστεί η παραμετροποίηση της πολλαπλότητας.

Αρχικά θα διερευνυθεί η επίδραση του αριθμού των σημείων για το οποίο υπολογίζεται το $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}}$. Κατά την πρώτη προσομοίωση είχαν χρησιμοποιηθεί 100 σημεία. Στον Πίνακα 4.4 συνοψίζονται οι αριθμοί των σημείων, ενώ στο Σχήμα 4.15 παρουσιάζονται τα σφάλματα πρόβλεψης για κάθε αριθμό.

Πίνακας 4.4: Αριθμός σημείων για τον υπολογισμό του $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}}$.

Αριθμός σημείων για τον υπολογισμό $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}}$	100	500	1000

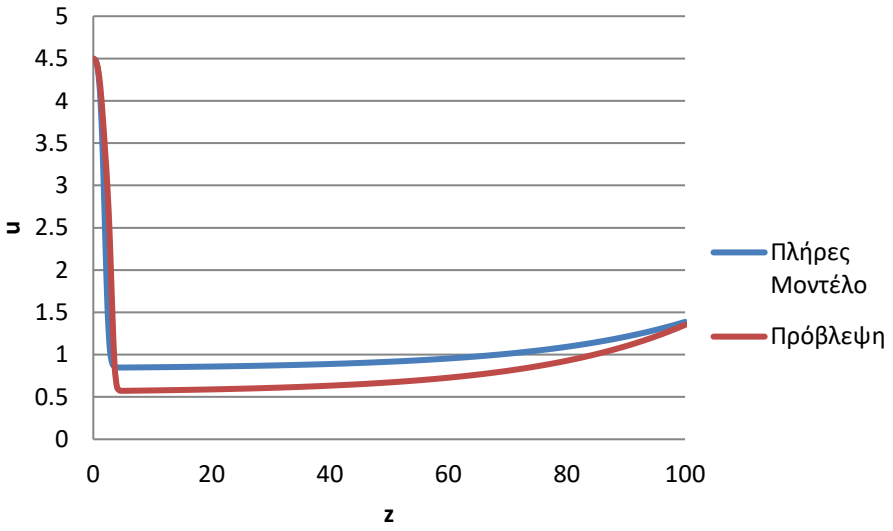


Σχήμα 4.15 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης του μοντέλου μειωμένης τάξης.

Ο πιο ακριβής υπολογισμός του $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}}$ είχε ως αποτέλεσμα τη δραστική μείωση του σφάλματος πρόβλεψης. Ο υπολογισμός αυτός, όπως αναφέρθηκε και κατά την Εφαρμογή 4.5.1, εμπεριέχει και το μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος. Επομένως, θα πρέπει να

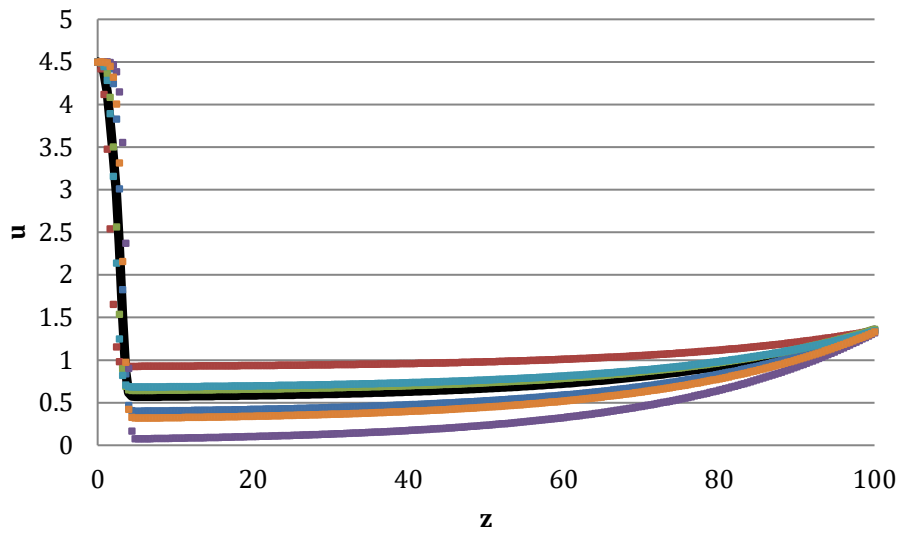
βελτιστοποιείται ο αριθμός των σημείων για τον οποίο υπολογίζεται, έτσι ώστε και ο υπολογισμός να είναι ακριβής, ενώ παράλληλα να διατηρείται χαμηλό το κόστος υπολογισμού.

Παρά τον ακριβή υπολογισμό του $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}}$, τα σφάλματα πρόβλεψης παραμένουν υψηλά ιδιαίτερα για τις πρώτες χρονικές στιγμές της εξέλιξης του φαινομένου. Για να διερευνηθεί αυτό, παρουσιάζονται αρχικά στο Σχήμα 4.16, ένα στιγμιότυπο του πλήρους μοντέλου και η αντίστοιχη πρόβλεψη του μοντέλου μειωμένης τάξης.



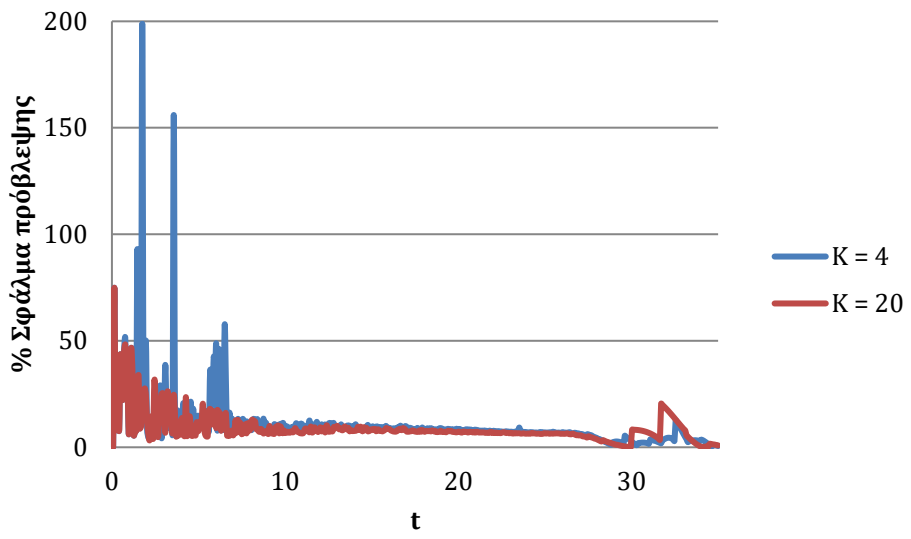
Σχήμα 4.16 Λύση του πλήρου μοντέλου και πρόβλεψη για τη χρονική στιγμή t = 0.63.

Η πρόβλεψη του μοντέλου μειωμένης τάξης προσεγγίζει σωστά την μορφή της πραγματικής λύσης. Παρά το γεγονός αυτό, η πρόβλεψη φαίνεται να υστερεί χρονικά της πραγματικής λύσης, το οποίο μπορεί να οφείλεται στον αντίστροφο χάρτη Nyström. Στο Σχήμα 4.17 παρουσιάζονται τα στιγμιότυπα, των οποίων η παρεμβολή παρήγαγε την παραπάνω προσέγγιση.



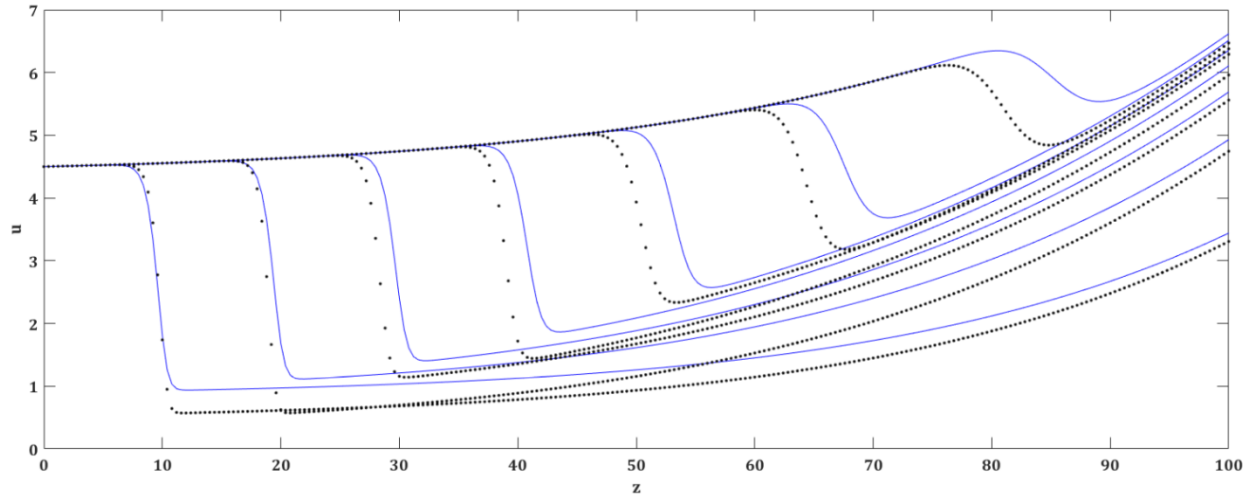
Σχήμα 4.17 Με μαύρη συνεχή γραμμή, φαίνεται η πρόβλεψη του μοντέλου μειωμένης τάξης. Η πρόβλεψη αυτή προέκυψε ως παρεμβολή μεταξύ των στιγμιοτύπων που φαίνοναι με ασυνεχείς γραμμές.

Με βάση το Σχήμα 4.17 προκύπτει ένα πολύ βασικό συμπέρασμα για την ακρίβεια της μεθόδου. Η πρόβλεψη προέκυψε ως παρεμβολή μεταξύ κοντινών σημείων στον χώρο DMAP, εκ των οποίων ορισμένα σημεία αντιστοιχούσαν σε νωρίτερες και ορισμένα σε μεταγενέστερες χρονικές στιγμές, από τη δεδομένη χρονική στιγμή t = 0.63. Η παρεμβολή εισάγει σημαντικό σφάλμα στη συγκεκριμένη εφαρμογή, το οποίο μεταδίδεται σε κάθε βήμα χρονικής ολοκλήρωσης, καθώς σε κάθε βήμα απαιτείται ο υπολογισμός της μη γραμμικής συνάρτησης για αυτό το σημείο. Για την στάθμιση αυτού του σφάλματος επιχειρείται η ίδια δοκιμή, χρησιμοποιώντας όμως περισσότερα, αλλά και λιγότερα σημεία για την παρεμβολή (K = 20 και K = 4). Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.18. Από το σχήμα φαίνεται ότι το το σφάλμα είναι ελαφρώς μικρότερο, όταν για την παρεμβολή χρησιμοποιούνται περισσότερα σημεία. Το μοντέλο μειωμένης τάξης όμως παραμένει ανακριβές σε απαγορευτικό βαθμό.



Σχήμα 4.18 % Σχετικό σφάλμα πρόβλεψης για διαφορετικό αριθμό που χρησιμοποιούνται κατά την παρεμβολή.

Με βάση την παραπάνω διερεύνηση, οι βέλτιστες προβλέψεις που επιτεύχθηκαν από το μοντέλο μειωμένης τάξης παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.19.



Σχήμα 4.19 Η λύση του πλήρους μοντέλου φαίνονται με μπλε συνεχή γραμμή. Οι προβλέψεις του μοντέλου μειωμένης τάξης φαίνονται με μαύρη ασυνεχή γραμμή.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, η εφαρμογή της μεθόδου κρίνεται ανεπιτυχής. Κύριοι παράγοντες ήταν η μη ιδανική παραμετροποίηση της πολλαπλότητας, λόγω της μη

βέλτιστης επιλογής των στιγμιοτύπων, καθώς και το σφάλμα που υπεισέρχεται στη μέθοδο λόγω της προσσεγιστικής αντίστροφης επέκτασης Nyström.

5. Συμπεράσματα

Η μοντελοποίηση και η προσομοίωση αποτελούν πλέον αναπόσπαστο εργαλείο για τη μηχανική και την επιστήμη. Παρά την ραγδαία εξέλιξη της τεχνολογίας, η προσομοίωση συστημάτων μεγάλης κλίμακας απαιτεί πολύ χρόνο, ακόμα και όταν γίνεται σε κάποιον υπερυπολογιστή. Εφαρμογές που απαιτούν τα αποτελέσματα τέτοιων προσομοιώσεων σε πραγματικό χρόνο, δημιουργούν την ανάγκη για μεθοδολογίες που θα μειώνουν το υπολογιστικό κόστος και θα παράγουν γρήγορες και ακριβείς προβλέψεις. Η μείωση τάξης μοντέλου είναι μια πολλά υποσχόμενη προσέγγιση για την επίτευξη αυτού του στόχου. Η παρούσα διπλωματική εργασία εστίασε στη μείωση τάξης μη γραμμικών δυναμικών προβλημάτων, η οποία παρουσιάζει σημαντικές δυσκολίες και αποτελεί ιδιαίτερα ενεργό πεδίο έρευνας.

Πρώτος στόχος ήταν η μεθοδολογική παρουσίαση, εφαρμογή, διερεύνηση και ανάδειξη πιθανών περιορισμών της POD-Galerkin, η οποία αποτελεί την κύρια μέθοδο μείωσης τάξης μη γραμμικών προβλημάτων στη βιβλιογραφία. Κύριοι άξονες διερεύνησης ήταν η ικανότητα παραγωγής ικανοποιητικών προβλέψεων, μείωσης τάξης και μείωσης του υπολογιστικού κόστους. Η εφαρμογή έγινε με επιτυχία σε δυο μη γραμμικά προβλήματα (εξίσωση Burgers και Brusselator) και ανέδειξε τόσο θετικά στοιχεία όσο και περιορισμούς της μεθόδου. Συγκεκριμένα, παρατηρήθηκε ικανοποιητική μείωση τάξης και προβλεπτική ικανότητα, όταν τα στιγμιότυπα που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή της βάσης POD ήταν περιεκτικά τόσο ως προς το χώρο παραμέτρων όσο και ως προς το χρόνο. Ο περιορισμός όμως της βάσης σε πληροφορία, περιόρισε δραματικά την προβλεπτική ικανότητα του μοντέλου και ιδιαίτερα στην περίπτωση της εξίσωσης Burgers. Το γεγονός αυτό εισάγει αβεβαιότητα στις προβλέψεις ενός μοντέλου μειωμένης τάξης, καθιστώντας το έτσι μη αξιόπιστο, παρά μόνο εντός της στενής «γειτονιάς» παραμέτρων και χρονικών στιγμών εκ των οποίων κατασκευάστηκε. Επιπλέον, ακόμα και στην περίπτωση που η πληροφορία στη βάση ήταν επαρκής, η μείωση τάξης δεν ήταν τόσο δραστική όσο θα αναμενόταν. Αυτό οφείλεται στην βασική υπόθεση της POD-Galerkin: η λύση αναζητείται σε έναν γραμμικό υπόχωρο.

Ως δεύτερος στόχος, τέθηκε η αντιμετώπιση των δυο αυτών περιορισμών με κατάλληλες μεθοδολογίες. Συγκεκριμένα, προς αντιμετώπιση του περιορισμού που επιβάλλει η πληροφορία της βάσης POD, επιχειρείται ο συνδυασμός της POD-Galerkin με μια μεθοδολογία εκ των υστέρων βελτίωσης του μοντέλου μειωμένης τάξης, η οποία βασίζεται στην κατασκευή ιεραρχικών γραμμικών υπόχωρων μέσω διαμερισμού των διανυσμάτων βάσης. Η μέθοδος αυτή υπόσχεται αύξηση της προβλεπτικής ικανότητας του μοντέλου, χωρίς να απαιτούνται ακριβοί υπολογισμοί του πλήρους μοντέλου για τον εμπλουτισμό της βάσης. Προς την αντιμετώπιση της μείωσης τάξης, προτείνεται και επιχειρείται η εφαρμογή μιας νεας μεθοδολογίας μείωσης τάξης, η οποία βασίζεται στην ανίχνευση μιας μικρής διάστασης μη γραμμικής πολλαπλότητας που «ζουν» τα στιγμιότυπα και στην προβολή των εξισώσεων πάνω σε αυτή. Για την ανίχνευση και πραμετροποίηση της πολλαπλότητας χρησιμοποιούνται τα Diffusion Maps και για την διατύπωση των εξισώσεων η επέκταση Nyström. Σκοπός είναι η αντιμετώπιση της απόκλισης μεταξύ της βέλτιστης διάστασης γραμμικού υπόχωρου και της εγγενούς διάστασης του χώρου λύσεων.

Η μεθοδολογία διαμερισμού της βάσης εφαρμόστηκε με επιτυχία στα δυο μη γραμμικά προβλήματα (Burgers και Brusselator). Στην περίπτωση της εξίσωσης Burgers, μπόρεσε να επιτευχθεί δραστική μείωση του σφάλματος πρόβλεψης, ακόμα και στην περίπτωση που χρησιμοποιούνται μόνο λίγα στιγμιότυπα για την κατασκευή της βάσης POD. Παρ΄όλα αυτά, αυτό πραγματοποιήθηκε εις βάρος της διάστασης του μικρού μοντέλου, το οποίο όμως μπορεί να αποδωθεί εν μέρει στο γεγονός ότι ο διαμερισμός έγινε σε ένα επίπεδο και όχι προσαρμοστικά. Στην περίπτωση του Brusselator, ο διαμερισμός της βάσης ήταν σε θέση να κάνει επίσης ικανοποιητικές προβλέψεις, αλλά δε φάνηκε να είναι απαραίτητος, καθώς το σφάλμα πρόβλεψεις μπορούσε να μειωθεί απλά χρησιμοποιώντας περισσότερα διανύσματα βάσης. Έν τέλει, η μεθοδολογία του διαμερισμού σε ένα επίπεδο προτείνεται όταν η απλή αύξηση της διάστασης της βάσης δεν επαρκεί για τον περιορισμό των σφαλμάτων πρόβλεψης.

Η μη γραμμική μέθοδος μείωσης τάξης εφαρμόστηκε επίσης σε δυο μη γραμμικά προβλήματα. Στο πρώτο πρόβλημα (εξίσωση Chafee-Infante) η ανίχνευση της εγγενούς διάστασης του συστήματος, καθώς και η παραμετροποίηση της πολλαπλότητας έγινε με

επιτυχία. Η διάσταση του συστήματος μειώθηκε ραγδαία, ενώ παράλληλα το μοντέλο μειωμένης τάξης ήταν σε θέση να κάνει πολύ ικανοποιητικές προβλέψεις. Στη συνέχεια επιχειρήθηκε η εφαρμογή της μεθόδου στην εξίσωση Burgers. Η εφαρμογή της δεν έγινε με επιτυχία, υπό την έννοια της κατασκευής ενός ακριβούς μοντέλου, αλλά προέκυψαν σημαντικά συμπεράσματα για τα επι μέρους στάδια της μεθόδου. Συγκεκριμένα, προέκυψε η ιδιαίτερη σημασία της συλλογής δεδομένων για την καλή παραμετροποίηση της πολλαπλότητας. Επίσης προσδιορίστηκε η σημασία του ακριβούς υπολογισμού της ιακωβιανής του συστήματος, καθώς και η ανάγκη για μια ακριβής «αντίστροφη» επέκταση Nyström.

6. Προτάσεις

Με την ολοκλήρωση της παρούσας εργασίας, πορκύπτουν αρκετές ενδιαφέρουσες ιδέες για περαιτέρω έρευνα, ως προέκταση των αποτελεσμάτων που παρουσιάζονται.

Κατ' αρχάς, προτείνεται η εφαρμογή της μεθόδου POD-Galerkin σε ένα πιο ενδιαφέρον από φυσικής σκοπιάς πρόβλημα, όπως για παράδειγμα ροή με αντίδραση σε δυο διαστάσεις. Λόγω της σημαντικά μεγαλύτερης διάστασης ενός τέτοιου προβλήματος, σε σχέση με αυτά που μελετήθηκαν εδώ, θα μπορούσαν να προκύψουν ποσοτικά αποτελέσματα τόσο για την μείωση τάξης όσο και για την μείωση του υπολογιστικού κόστους. Ακόμη, θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί μια εναλλακτική μέθοδος προβολής των εξισώσεων στον υπόχωρο που γεννάται από τα διανύσματα της βάσης POD, όπως για παράδειγμα η μέθοδος Least-Squares Petrov-Galerkin (LSPG) [20], και να συγκριθούν οι δυο μεθοδολογίες ως προς την ακρίβεια.

Ενδιαφέρον θα είχε επίσης, η εφαρμογή του προσαρμοστικού διαμερισμού της βάσης POD (adaptive refinement) [3], είτε στην εξίσωση Burgers είτε σε ένα μεγαλύτερο πρόβλημα, και να αξιολογηθεί η ακρίβεια και η μείωση τάξης που επιτυγχάνονεται. Τα αποτελέσματα θα μπορούσαν να συγκριθούν ακόμη, με αυτά που επιτυγχάνονται με τον διαμερισμό σε ένα επίπεδο. Εναλλακτικά, ο διαμερισμός της βάσης θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί στο πλάισιο POD με τεχνητά νευρωνικά δίκτυα [11] και να αξιολογηθεί η ακρίβεια που επιτυγχάνεται με και χωρίς διαμερισμό, αξιοποιώντας μόνο αποτελέσματα προσομοιώσεων του πλήρους συστήματος.

Τέλος, προτείνεται η περαιτέρω διερεύνηση της μη γραμμικής μείωσης τάξης μέσω Diffusion Maps. Συγκεκριμένα, προτείνεται να χρησιμοποιηθούν εναλλακτικές μέθοδοι για την κατασκευή του αντίστροφου χάρτη Nyström και η σύγκριση της ακρίβειας που επιτυγχάνεται. Ορισμένες μέθοδοι που θα μπορούσαν να αξιοποιηθούν είναι τα Geometric Harmonics και η παρεμβολή Kriging [17]. Ακόμη εφαρμογή θα μπορούσε να γίνει σε ένα πρόβλημα, όπως για παράδειγμα η ροή με αντίδραση σε δυο διαστάσεις, και να συγκριθούν τα αποτελέσματα (ακρίβεια – μείωση τάξης) με την POD-Galerkin.

7. Βιβλιογραφία

[1] K. Lee, K. T. Carlberg "Model reduction of dynamical systems on nonlinear manifolds using deep convolutional autoencoders", arXiv:1812.08373v3, (2019)

[2] K. T. Carlberg "Model reduction of nonlinear mechanical systems via optimal projection and tensor approximation", PhD thesis, Standford University, (2011)

[3] K. T. Carlberg "Adaptive h-refinement for reduced-order models", *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **102**, 1192 (2015)

[4] B. E. Sonday, A. Singer, C. W. Gear, I. G. Kevrekidis "Manifold learning techniques and model reduction applied to dissipative PDEs", arXiv:1011.5197v1, (2010)

[5] W. H. A. Schilders, H. A. van der Vorst, J. Rommes "Model Order Reduction: Theory, Research Aspects and Applications", Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2008)

[6] B. A. Finlayson, L. E. Scriven "The method of weighted residuals – A review", *Applied Mechanics Reviews* **19**, 735 (1966)

[7] Α. Γ. Μπουντουβής "Υπολογιστική ανάλυση με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων – Εισαγωγικές σημειώσεις", Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Αθήνα (1992)

[8] A. Logg, K. A. Mardal, Lectures on the Finite Element Method, http://folk.uio.no/kent-and/book.pdf

[9] L. Sirovich, J. D. Rodriguez "Coherent structures and chaos: a model problem", *Physics Letters A* **120**, 211 (1987)

[10] K. T. Carlberg., C. Farhat, J. Cortial, D. Amsallem "The GNAT method for nonlinear model reduction: effective implementation and application to computational fluid dynamics and turbulent flows", *Journal of Computational Physics* **243**, 623 (2013)

[11] W. Xie, I. Bonis, C. Theodoropoulos "Data-driven model reduction-based nonlinear MPC for large-scale distributed parameter systems", *Journal of Process Control* **35**, 50 (2015)

[12] M. J. Rewienski "A Trajectory Piecewise-Linear Approach to Model Order Reduction of Nonlinear Dynamical Systems", PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology (2003)

[13] K. Lust, D. Roose, A. Spence, A. R. Champneys "An adaptive Newton – Picard algorithm with subspace iteration for computing periodic solutions", *SIAM Journal on Scientific Computing* **19**, 1188 (1998)

[14] D. Arthur, S. Vassilvitskii "k-means++: the advantages of careful seeding", *Proceedings of the eighteenth annual ACM-SIAM symposium on Discrete algorithms*, 1027, Society for Industrial and Applied Mathematics Philadelphia, PA, USA, (2007)

[15] R. R. Coiffman, S. Lafon "Diffusion Maps", *Applied and Computational Harmonic Analysis* **21**, 5 (2006)

[16] P. Grassberger, I. Procaccia "Measuring the strangeness of strange attractors", *Physica D: Nonlinear Phenomena* **9**, 183 (1983)

[17] E. Chiavazzo, C. W. Gear, C. J. Dsilva, N. Rabin, I. G. Kevrekidis "Reduced models in chemical kinetics via nonlinear data-mining", *Processes* **2**, 112 (2014)

[18] M. S. Jolly "Explicit construction of an inertial manifold for a reaction diffusion equation", *Journal of Differential Equations* **78**, 220 (1989)

[19] Matlab R2014a: http://www.mathworks.com/products/matlab/

[20] K. T. Carlberg, M. Barone, H. Antil "Galerkin v. least-squares Petrov-Galerkin projection in nonlinear model reduction", *Journal of Computational Physics* **330,** 693 (2017)