

# Επιτάχυνση Ανάλυσης Monte Carlo με μεθόδους μείωσης διαστάσεων

Δυναμικό πρόβλημα

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο  
Σχολή Πολιτικών Μηχανικών



Έξεταζόμενος Φοιτ. : Κωνσταντίνος Ατζαράκης  
Έπιβλέπων Καθηγ. : Βησσαρίων Παπαδόπουλος

10 Νοεμβρίου 2020





Εισαγωγή

Μέθοδος PCA

Μέθοδος DMAPs

Έποπτικό Παράδειγμα

Άριθμητικές Έφαρμογές



# Είσαγωγή



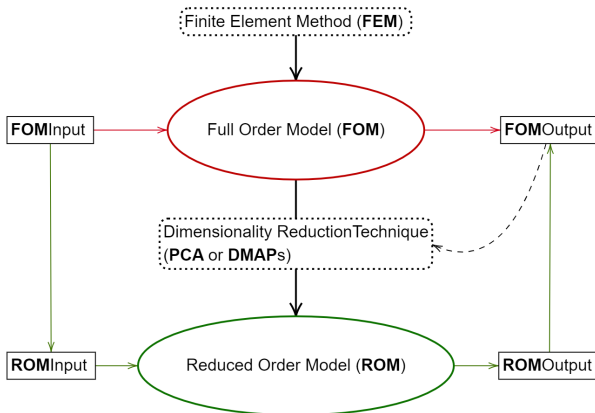
**Υποκατάστατο Μοντέλο (Surrogate Model):** προσεγγιστικό μοντέλο τό όποιο μιμείται κατά τό δυνατόν τήν συμπεριφορά μιᾶς προσομοίωσης μέ τό ελάχιστο δυνατό υπολογιστικό κόστος.



**Μείωση Διαστατικότητας** (*Dimensionality Reduction*): μετασχηματισμός δεδομένων από χώρο μεγάλων διαστάσεων σε χώρο μικρότερων διαστάσεων έτσι ώστε η αναπαράσταση στον τελευταίο να διατηρεί κάποια από τα αρχικά χαρακτηριστικά του αρχικού δείγματος.



**Μοντέλο Μειωμένης Τάξης** (*Reduced Order Model*): υποκατάστατο μοντέλο που χρησιμοποιεί τεχνικές μείωσης διαστάσεων.



**Σχήμα 2:** Διάγραμμα κατασκευής του υποκατάστατου μοντέλου. Με κόκκινο χρώμα σημειώνεται η συνήθης πορεία υπολογισμού των αποτελεσμάτων, ενώ με πράσινο η πορεία μέσω της χρήσης υποκατάστατου μοντέλου.

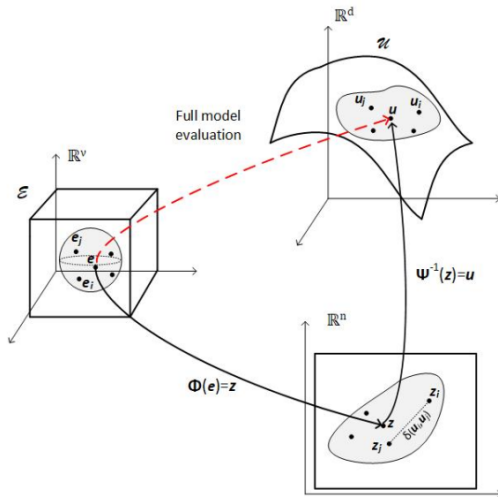


$$\mathbf{M}(\mathbf{e})\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{e}) + \mathbf{C}(\mathbf{e})\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{e}) + \mathbf{K}(\mathbf{e})\mathbf{u}(\mathbf{e}) = \mathbf{f}(\mathbf{e}), \quad (1)$$

όπου

- ▶  $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^{\nu}$  διάνυσμα που περιγράφει κάθε τυχαία παράμετρο του συστήματος,
- ▶  $\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \ddot{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^d$  τὰ διανύσματα τῆς μετακίνησης, ταχύτητας και επιταχύνσεως αντίστοιχα,
- ▶  $\mathbf{M}, \mathbf{C}, \mathbf{K} \in \mathbb{R}^{d \times d}$  τὸ μητρώο μάζας, τὸ μητρώο ἀποσβέσεως καὶ τὸ μητρώο στιβαρότητας,
- ▶  $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^d$  τὸ διάνυσμα τῶν ἐξωτερικῶν δράσεων.





Σχήμα 3: Μετασχηματισμοί μεταξύ του  $\mathcal{E} \in \mathbb{R}^v$  και του χώρου μειωμένων διαστάσεων και μεταξύ του χώρου μειωμένων διαστάσεων και του  $\mathcal{U} \in \mathbb{R}^d$ .



Για γραμμικό μετασχηματισμό  $\Psi^{-1}$ , δηλαδή  $\mathbf{u} = \Psi^{-1}\mathbf{z}$  και παραλείποντας την εξάρτηση από το  $\mathbf{e}$  για συντομία ή  $\mathbf{1}$  γίνεται

$$\begin{aligned} \mathbf{M}\Psi^{-1}\ddot{\mathbf{z}} + \mathbf{C}\Psi^{-1}\dot{\mathbf{z}} + \mathbf{K}\Psi^{-1}\mathbf{z} &= \mathbf{f} \\ \Rightarrow (\Psi^{-1})^T \mathbf{M}\Psi^{-1}\ddot{\mathbf{z}} + (\Psi^{-1})^T \mathbf{C}\Psi^{-1}\dot{\mathbf{z}} + (\Psi^{-1})^T \mathbf{K}\Psi^{-1}\mathbf{z} &= (\Psi^{-1})^T \mathbf{f} \\ \Rightarrow \mathbf{M}_r\ddot{\mathbf{z}} + \mathbf{C}_r\dot{\mathbf{z}} + \mathbf{K}_r\mathbf{z} &= \mathbf{f}_r, \end{aligned} \quad (2)$$

όπου

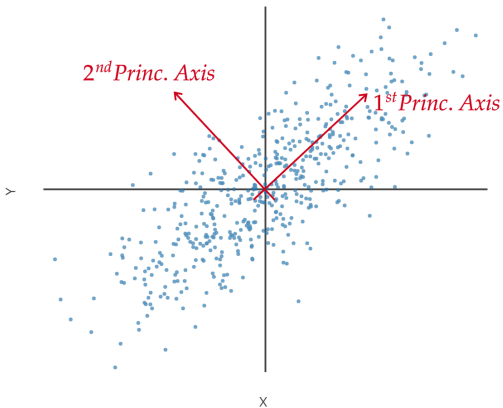
- ▶  $\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}, \ddot{\mathbf{z}} \in \mathbb{R}^n$  τὰ διανύσματα μειωμένων διαστάσεων τῆς μετακίνησης, ταχύτητας καὶ ἐπιταχύνσεως ἀντίστοιχα,
- ▶  $\mathbf{M}_r, \mathbf{C}_r, \mathbf{K}_r \in \mathbb{R}^{n \times n}$  τὸ μητρώο μάζας, τὸ μητρώο ἀποσβέσεως καὶ τὸ μητρώο στιβαρότητας στὶς μειωμένες διαστάσεις,
- ▶  $\mathbf{f}_r \in \mathbb{R}^n$  τὸ ἀντίστοιχο διάνυσμα τῶν ἐξωτερικῶν δράσεων.



# Μέθοδος PCA



**Principal Component Analysis:** γραμμική μέθοδος μείωσης διαστάσεων που πρόέρχεται από την Στατιστική.



**Σχήμα 4:** Τὸ σημεία ἑνὸς συνόλου δεδομένων καὶ τὰ δύο συστήματα συντεταγμένων, τὸ ἀρχικό σύστημα (μαῦρο) καὶ τὸ κύριο σύστημα (κόκκινο).



Έστω ένα σύνολο δεδομένων (*dataset*)

$$\mathbf{U} = \{\mathbf{u}_i \in \mathbb{R}^d, i = 1, 2, \dots, N \mid \mathbb{E}(\mathbf{u}) = 0\}$$

διατεταγμένο στον πίνακα  $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{d \times N}$ . Ο έμπειρικός πίνακας συνδιακύμανσης είναι

$$\mathbf{C} = \frac{\mathbf{U}\mathbf{U}^T}{N - 1} \quad (3)$$

Ο  $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{d \times d}$  είναι συμμετρικός και θετικά ήμιορισμένος.



# Ίδιομορφική ανάλυση του $\mathbf{C}$

Άν  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_d$  οί ιδιοτιμές του  $\mathbf{C}$  σέ φθίνουσα ακολουθία και  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_d$  τὰ αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα, τότε ό μετασχηματισμός

$$\mathbf{z} = \Psi \mathbf{u}$$

μεταφέρει τὰ δεδομένα στο κύριο σύστημα. Λόγω όρθογωνιότητας

$$\mathbf{u} = \Psi^{-1} \mathbf{z} = \Psi^T \mathbf{z}$$

όπου

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_d \end{pmatrix}$$



Άν κρατήσουμε τις  $n$  κύριες συνιστώσες έπιτυγχάνεται ή μείωση τής διάστασης

$$\mathbf{u} = \mathbf{\Psi}^{-1} \mathbf{z} = \mathbf{\Psi}^T \mathbf{z}$$

όπου πλέον  $\mathbf{\Psi}^{-1} \in \mathbb{R}^{d \times n}$ .





# Μέθοδος τών Diffusion Maps



Οι Άπεικονίσεις Διάχυσης (*Diffusion Maps* ή εν συντομία *DMAPs*) ανήκουν στις μη γραμμικές μεθόδους μείωσης διαστάσεων, καθώς προσπαθούν να προσεγγίσουν την τοπική γεωμετρία του συνόλου δεδομένων.



Έστω ένα σύνολο δεδομένων (*dataset*)

$$\mathbf{U} = \{\mathbf{u}_i \in \mathbb{R}^d, i = 1, 2, \dots, N \mid \mathbb{E}(\mathbf{u}) = 0\}$$

διατεταγμένο στον πίνακα  $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{d \times N}$ .

Δίδεται πυρήνας (*kernel*):

$$k : \mathbb{U} \times \mathbb{U} \rightarrow \mathbb{R}$$

μὲ τὶς ἑξῆς ιδιότητες:

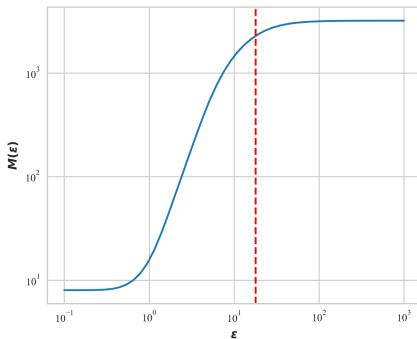
- ▶ Συμμετρία:  $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$
- ▶ Μη αρνητικότητα:  $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq 0, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{U}$

Σύνηθες παράδειγμα εἶναι ὁ Γκαουσιανός πυρήνας (*gaussian kernel*):

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = e^{-\left(\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|}{\epsilon}\right)^2} \quad (4)$$

Μία απλή μέθοδος που έχει προταθεί για τόν προσδιορισμό του  $\epsilon$  χρησιμοποιεί την συνάρτηση:

$$M(\epsilon) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N k(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)(\epsilon) \quad (5)$$



**Σχήμα 5:** Η παράμετρος  $\epsilon$  επιλέγεται μακριά από τα άκρα που αποτελούν έκφυλισμένες περιπτώσεις με υπερβολικά μεγάλα ή μικρά βάρη στο αντίστοιχο μητρώο.



Αρχικά, ορίζεται το συμμετρικό μητρώο  $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  μέσω των στοιχείων του:

$$W_{ij} = k(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j), \quad i, j \in \{1, \dots, N\} \quad (6)$$

το οποίο έν συνεχεία μετασχηματίζεται ως έξής:

$$\mathbf{W}^{(\alpha)} = \mathbf{D}^{-\alpha} \mathbf{W} \mathbf{D}^{-\alpha} \quad (7)$$

όπου  $\mathbf{D}$  το διαγώνιο μητρώο που προκύπτει από το άθροισμα των γραμμών του  $\mathbf{W}$ :

$$D_{ij} = \begin{cases} d_i, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (8)$$

και

$$d_i = \sum_{r=1}^N W_{ir} \quad (9)$$



Κανονικοποιεῖται, τὸ  $\mathbf{W}^{(\alpha)}$  ὡς πρὸς τὶς γραμμὲς του καὶ προκύπτει ὁ στοχαστικὸς πίνακας:

$$\mathbf{P} = \left(\mathbf{D}^{(a)}\right)^{-1} \mathbf{W}^{(\alpha)} \quad (10)$$

ὅπου  $\mathbf{D}^{(\alpha)}$  τὸ διαγώνιο μητρώο πὸν προκύπτει ἀπὸ τὸ ἄθροισμα τῶν γραμμῶν τοῦ  $\mathbf{W}^{(\alpha)}$ :

$$D_{ij}^{(\alpha)} = \begin{cases} d_i^{(a)}, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (11)$$

καὶ

$$d_i^{(a)} = \sum_{r=1}^N W_{ir}^{(a)} \quad (12)$$





Σχήμα 6: Μονοπάτια κατά την γεωμετρική δομή των δεδομένων εμφανίζονται με μεγαλύτερη πιθανότητα.

Έστω  $\{\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_n\}$  οι πρώτες  $n < d$  ιδιοτιμές του  $\mathbf{P}$  κατά φθίνουσα σειρά και  $\{\phi^0, \phi^1, \dots, \phi^n\}$  τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα. Ορίζουμε την συνάρτηση  $\Psi^t : \mathbb{U} \rightarrow \mathbb{R}^n$  ως

$$\Psi^t(\mathbf{u}_i) = \begin{pmatrix} \lambda_1^t \phi^1(\mathbf{u}_i) \\ \lambda_2^t \phi^2(\mathbf{u}_i) \\ \vdots \\ \lambda_n^t \phi^n(\mathbf{u}_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1^t \phi_i^1 \\ \lambda_2^t \phi_i^2 \\ \vdots \\ \lambda_n^t \phi_i^n \end{pmatrix} = \psi_i^t. \quad (13)$$

Με την οργάνωση σε ένα ένιαιο μητρώο όλων τών συντεταγμένων, όλων τών δεδομένων κατασκευάζεται η βάση του χώρου διάχυσης

$$\Psi^t \in \mathbb{R}^{n \times N}$$

$$\Psi^t(\mathbf{U}) = \Psi_U^t = (\psi_1^t \quad \psi_2^t \quad \dots \quad \psi_N^t) = \begin{pmatrix} \lambda_1^t \phi^1 \\ \lambda_2^t \phi^2 \\ \vdots \\ \lambda_n^t \phi^n \end{pmatrix}. \quad (14)$$



# Άντίστροφη Άπεικόνιση

Ζητείται ή εύρεση μητρῶου  $\Psi^{-1} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^d$ ,  $n < d$ , τέτοιου ὥστε κατὰ τὸ δυνατόν νὰ ἰσχύει

$$\mathbf{u}_i \approx \Psi^{-1} \psi_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (15)$$

Ἐπερορισμένα σύστημα πὸ μὲ τὴν μέθοδο ἐλαχίστων τετραγῶνων δίνει

$$\Psi^{-1} \approx \mathbf{U} \Psi_U^T (\Psi_U \Psi_U^T)^{-1} \quad (16)$$

Ἐτσι, κάθε νέο διάνυσμα στὸν ἀρχικό χῶρο, μπορεῖ νὰ γραφτεῖ

$$\mathbf{u} \approx \Psi^{-1} \psi \quad (17)$$

ὅπου

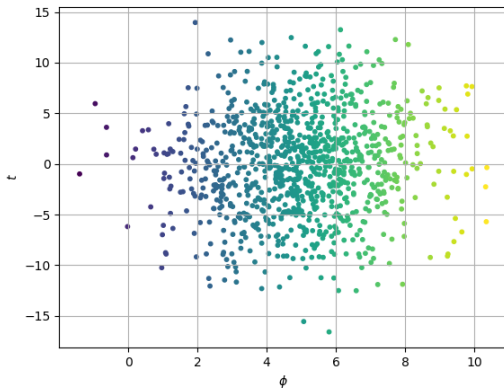
- ▶  $\mathbf{U} = (\mathbf{u}_1 \quad \mathbf{u}_2 \quad \dots \quad \mathbf{u}_N) \in \mathbb{R}^{d \times N}$  ὁ πίνακας πὸν προκύπτει ἀπὸ τὸ ἀρχικό σύνολο δεδομένων
- ▶  $\Psi_U^{-1} \in \mathbb{R}^{n \times N}$  ὁ μὴ ἀντιστρέψιμος πίνακας τῆς 14.

---

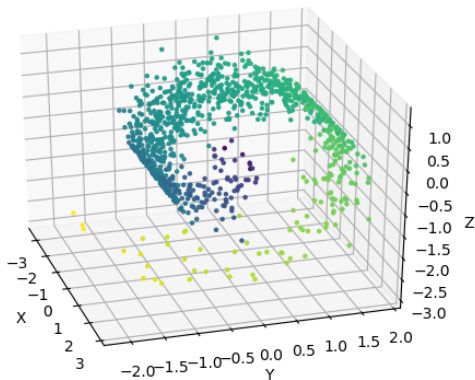
<sup>1</sup>Γιὰ νὰ εἶναι εὐανάγνωστες οἱ ἐξισώσεις, παραλείπεται τὸ  $t$  στὸν ἐκθέτη:



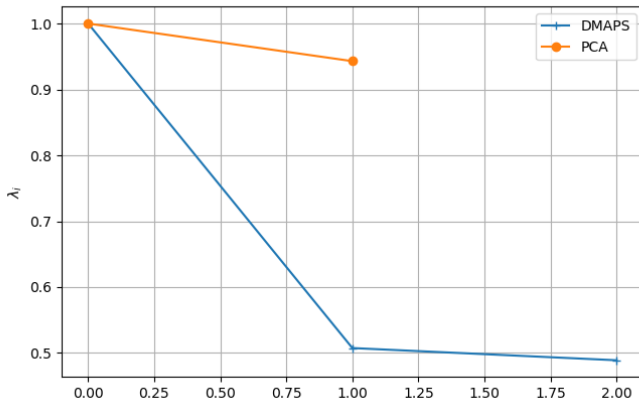
# Παράδειγμα χρήσης τών μεθόδων



Σχήμα 7: Αρχικό σύνολο μεταβλητών  $(\phi, t)$  σε 2Δ.

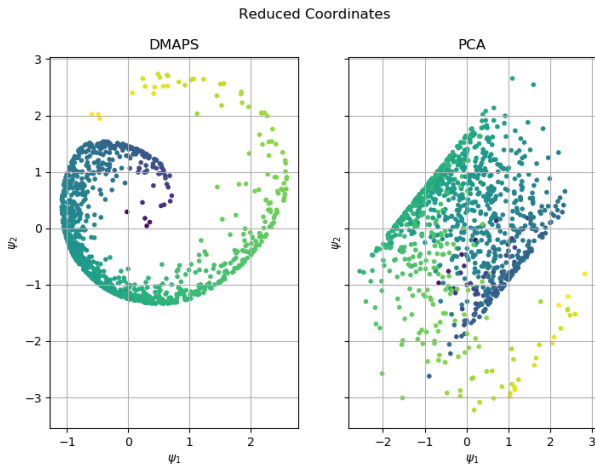


Σχήμα 8: Σύνολο δεδομένων "swiss roll" σε 3Δ σύμφωνα με την εξίσωση  $(t, \phi \sin(\phi), \phi \cos(\phi))$ .

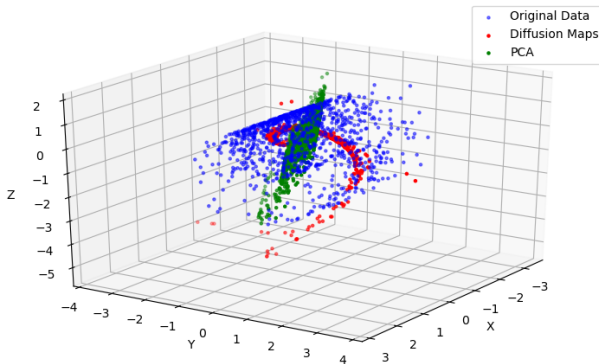


Σχήμα 9: Ίδιοτιμές: κανονικοποιημένη για την PCA, ενώ για τα DMAPS ή πρώτη δεν δίνει πληροφορία όντας πάντα ίση με την μονάδα.





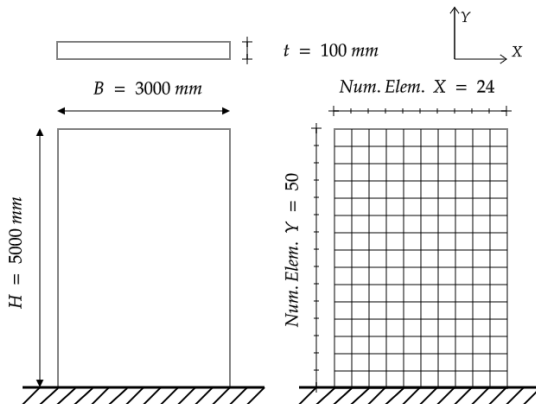
Σχήμα 10: Το σύνολο δεδομένων στις 2Δ, όπως υλοποιείται από κάθε τεχνική.



Σχήμα 11: Το σύνολο δεδομένων ξανά στις 3Δ, όπως υλοποιείται από κάθε τεχνική με γραμμικό μετασχηματισμό.



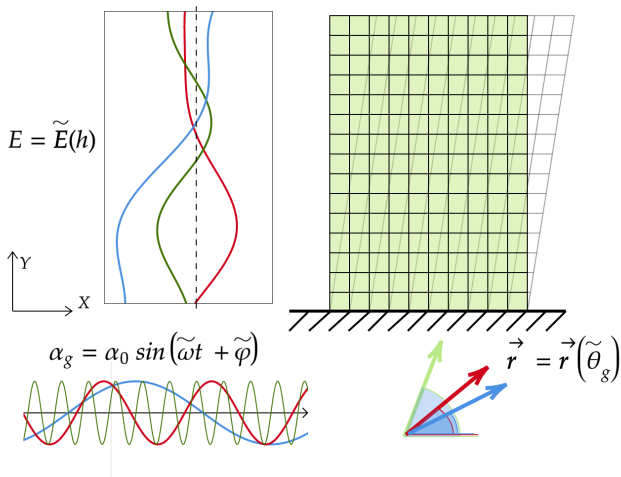
# Άριθμητική Έφαρμογή



Σχήμα 12: Οι διαστάσεις, οι συνοριακές συνθήκες και το πλέγμα του προβλήματος.



Ο φορέας προσομοιώνεται από διδιάστατα, τετρακομβικά πεπ. στ. επίπεδης έντασης. Συνολικά, ο φορέας αποτελείται από  $N_{elX} \cdot N_{elY} = 24 \cdot 50 = 1200$  στοιχεία και, συνεπώς οι συνολικοί βαθμοί έλευθερίας του μοντέλου είναι  $N_{dofs} = 2 \cdot 50 \cdot (24 + 1) = 2500$ , δηλαδή οι λύσεις του συστήματος  $\mathbf{u}_i \in \mathbb{R}^{2500}$ .

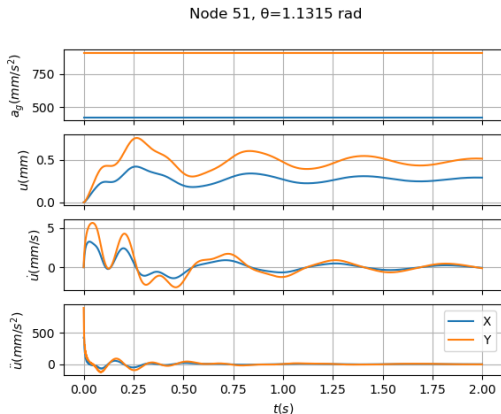


Σχήμα 13: Στοχαστικά πεδία του μέτρου ελαστικότητας ( $E$ ) και της σεισμικής διέγερσης ( $\vec{\alpha}_g$ ).



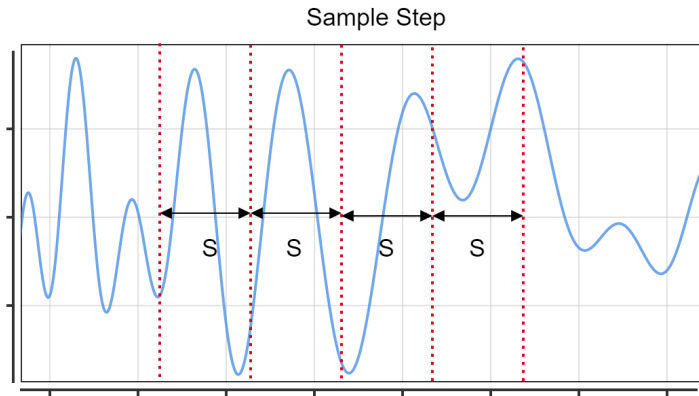
Πίνακας 1: Παράμετροι τῶν τυχαίων μεταβλητῶν.

Μεταβλητή	Κατανομή	Μονάδες
$\tilde{E}(h)$	$\mathcal{N}(30, 6^2)$	GPa
$\tilde{\omega}$	$\mathcal{U}(0, 50)$	Hz
$\tilde{\varphi}$	$\mathcal{U}(0, 2\pi)$	rad
$\tilde{\theta}$	$\mathcal{U}(0, \pi/2)$	rad



Σχήμα 14: Φόρτιση με σταθερή επιτάχυνση εδάφους  $a_g$  και η αντίστοιχη απόκριση κόμβου όπως προκύπτει από το πλήρες μοντέλο (Full Order Model).





Σχήμα 15: Από κάθε χρονοσειρά επιλέγονται  $N_S = \frac{N_{\text{timesteps}}}{S}$  λύσεις, όπου  $S$  το χρονικό βήμα.

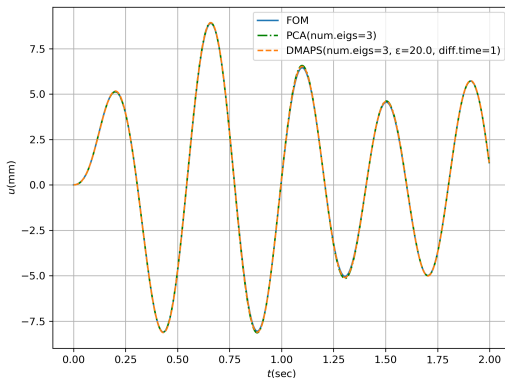


$$N_{\text{training}} = N_{\text{train}} \dot{N}_S = N_{\text{train}} \frac{N_{\text{timesteps}}}{S} \quad (18)$$

και τὸ σύνολο

$$\begin{aligned} \mathbb{U}_{\text{training}} &= \{\mathbf{u}_{11}, \dots, \mathbf{u}_{1N_S}, \dots, \mathbf{u}_{N_{\text{train}}1}, \dots, \mathbf{u}_{N_{\text{train}}N_S}\} \\ &= \{\mathbf{u}_{ij} : i = 1, \dots, N_{\text{train}}, j = 1, \dots, N_S\} \end{aligned} \quad (19)$$

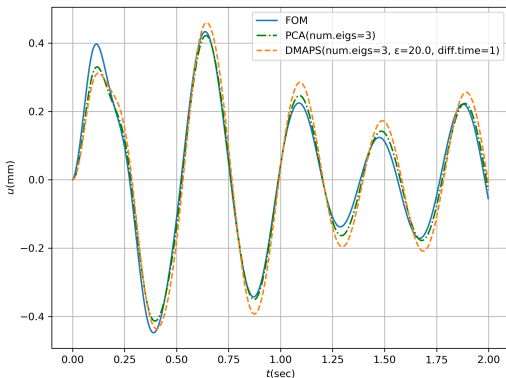
Ntrain = 60, Sample step = 10, dof=2498



**Σχήμα 16:** Σύγκριση φορτίσεων για τὸν βαθμὸ ἐλευθερίας 2498— στὸ ἐλεύθερο ἄκρο τοῦ προβόλου — με χρήση  $k = 3$  ιδιοτιμῶν στὰ ὑποκατάστατα μοντέλα (ROM)

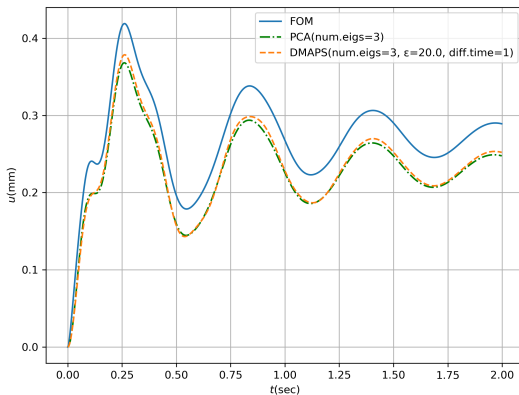


Ntrain = 60, Sample step = 10, dof=101



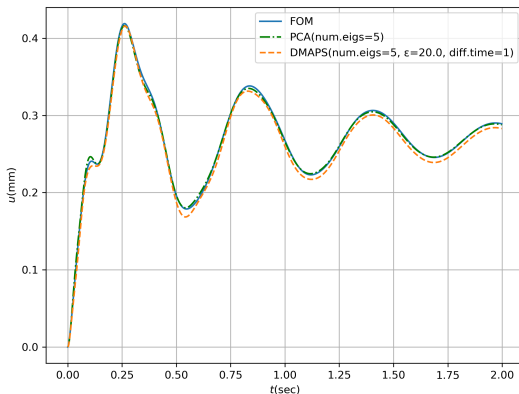
Σχήμα 17: Σύγκριση φορτίσεων για τόν βαθμό έλευθερίας 101 – στην βάση του πρόβολου – με χρήση  $k = 3$  ιδιοτιμών στα υποκατάστατα μοντέλα (Reduced Order Models).

Ntrain = 60, Sample step = 10, dof=100

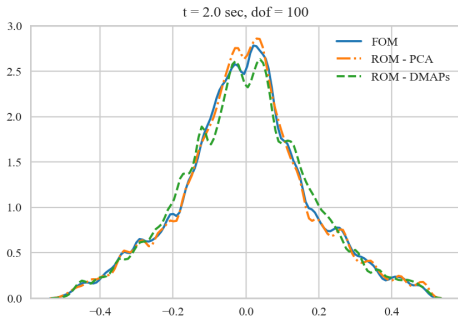


Σχῆμα 18: Σύγκριση ἀποκρίσεων γιὰ τὸν βαθμὸ ἐλευθερίας 100 μὲ χρήση  $k = 3$  ἰδιοτιμῶν στὰ ὑποκατάστατα μοντέλα.

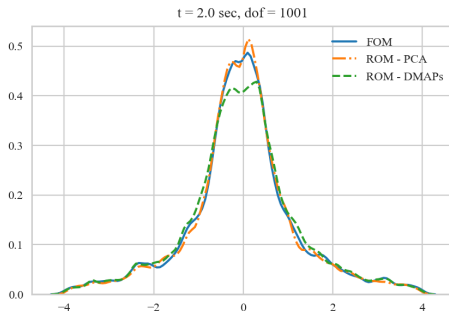
Ntrain = 60, Sample step = 10, dof=100



Σχήμα 19: Σύγκριση ἀποκρίσεων γιὰ τὸν βαθμὸ ἐλευθερίας 100 μὲ χρήση  $k = 5$  ιδιοτιμῶν στὰ ὑποκατάστατα μοντέλα.



**Σχήμα 20:** Συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας (pdf) για τον βαθμό ελευθερίας 100 όπως προκύπτει από την πλήρη Monte Carlo ανάλυση (FOM) και τα υποκατάστατα μοντέλα (ROM-DMAPs, ROM-PCA).



**Σχήμα 21:** Συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας (pdf) για τον βαθμό ελευθερίας 1001 όπως προκύπτει από την πλήρη Monte Carlo ανάλυση (FOM) και τα υποκατάστατα μοντέλα (ROM-DMAPs, ROM-PCA).



Πίνακας 2: Χρόνοι εκτέλεσης για τὸ πλήρες καὶ τὰ ὑποκατάστατα μοντέλα.

Μοντέλο	Διάσταση πινάκων	Συνολικός Χρόνος	Μέσος χρόνος
FOM	2500	103.29 min	2066 ms
ROM	5	30.78 min	659 ms

Τὰ ὑποκατάστατα μοντέλα εἶναι  $\frac{2066}{659} = 3.14$  φορές ταχύτερα.



- ▶ Παρά την γραμμικότητα τῶν τεχνικῶν καὶ τὰ δύο ὑποκατάστατα μοντέλα κατάφεραν νὰ προσεγγίσουν ἱκανοποιητικὰ τὶς λύσεις τοῦ πλήρους μοντέλου σὲ ἓνα μὴ γραμμικὸ πρόβλημα.
- ▶ Οἱ δύο μέθοδοι παρήγαγαν μοντέλα μὲ παραπλήσια ἀκρίβεια.
- ▶ Ἡ μείωση τοῦ χρόνου ἐπίλυσης τῆς ἀνάλυσης βρίσκεται στὰ ἐπιθυμητὰ ὅρια γιὰ ὑποκατάστατα μοντέλα.
- ▶ Σὲ βαθμούς ἐλευθερίας κοντὰ στὸ ἐλεύθερο ἄκρο, ὅπου οἱ μετακινήσεις ἦταν μεγαλύτερες κατὰ ἀπόλυτη τιμὴ, τὰ ὑποκατάστατα μοντέλα προσαρμόζονταν γρηγορότερα ἀπὸ ὅ,τι σε βαθμούς ἐλευθερίας κοντὰ στὴν βάση

