



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

**ΤΟΜΕΑΣ ΙΙ : ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ
ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ**

Μη γραμμική μείωση τάξης βασισμένη σε τεχνικές μάθησης πολλαπλότητας (manifold learning) και εφαρμογή σε προβλήματα μεγάλης κλίμακας

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ του
Ανδρέα Κούνη-Μελά**

Επιβλέπων Καθηγητής

Ανδρέας Γ. Μπουντουβής

Αθήνα, 2021



**What is research but a
blind date with
knowledge?**

Will Harvey

Ευχαριστίες

Με την ολοκλήρωση αυτής της διπλωματικής εργασίας κλείνει ένα μεγάλο κεφάλαιο των σπουδών μου, το βασικότερο και ίσως σπουδαιότερο, αυτό για την απόκτηση του πτυχίου του χημικού μηχανικού από το Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. Με την διπλωματική ανοίγονται νέα επιστημονικά πεδία και εφαρμόζονται οι γνώσεις που αποκτήθηκαν στον πενταετή κύκλο σπουδών.

Για την ολοκλήρωση της διπλωματικής και των προπτυχιακών σπουδών μου νιώθω την ανάγκη να ευχαριστήσω θερμά τον πρύτανη κ. Α. Μπουντουβή που μου έδωσε την ευκαιρία να εκπονήσω αυτήν τη διπλωματική υπό την επίβλεψή του και της δρ. Ε. Κορωνάκη, η οποία διέθεσε, με υπομονή και μάλιστα σε καιρό πανδημίας, άπλετο από το χρόνο της διαδικτυακά από το Λουξεμβούργο. Χωρίς τη βοήθειά της, την καθοδήγηση, τις γνώσεις της, την στήριξη και τις συμβουλές της θα ήταν αδύνατη αυτή η εκπόνηση, και την ευχαριστώ θερμά.

Ο κ. Μπουντουβής, εκτός του ότι η παρουσία του, τα μαθήματα και οι συμβουλές του επέδρασαν καταλυτικά στο να επιλέξω την κατεύθυνση στην επιστήμη του χημικού μηχανικού που θέλω να ακολουθήσω, με ενθάρρυνε επίσης στο να ακολουθήσω διδακτορικές σπουδές στην Αμερική. Μου έδωσε την ευκαιρία να έρθω σε επαφή με τον καθηγητή κ. Γ. Κεβρεκίδη ώστε να βρεθώ στο εργαστήριό του στο Johns Hopkins University, την ομάδα του (Νικόλα Ευαγγέλου σε ευχαριστώ για όλα) και το πεδίο των ερευνών του, που είναι και η βάση της διπλωματικής αυτής, για την οποία είχα και την τιμή να μου δώσει υλικό και καίριες συμβουλές.

Ευχαριστώ ιδιαίτερα τον καθ. Κεβρεκίδη που εκτός από τις γνώσεις που μου προσέφερε και την ευκαιρία να γνωρίσω το εργαστήριό του και τα Αμερικάνικα Πανεπιστήμια από κοντά, μου προσέφερε και θέση στο Johns Hopkins University για διδακτορικό, άσχετα αν εγώ καλώς ή κακώς δεν την αποδέχθηκα.

Ευχαριστώ επίσης τον καθηγητή κ. Δ. Θεοδώρου, που κοσμεί την Σχολή μας, για τις γνώσεις που μας προσέφερε, τις συμβουλές και την στήριξή του κατά την διάρκεια των σπουδών μου όπως και για την ανεύρεση του κατάλληλου Πανεπιστημίου για το διδακτορικό μου.

Ευχαριστώ τους ομότιμους καθηγητές κ. Σ. Τσίμα και κ. Α. Μουτσατάσου που συνετέλεσαν στο να επιλέξω την σχολή των χημικών μηχανικών στο μηχανογραφικό για την εισαγωγή μου στα ΑΕΙ με τις πληροφορίες και συμβουλές που μου παρείχαν, όπως και κατά τη διάρκεια των σπουδών μου.

Ευχαριστώ επίσης την τριμελή επιτροπή για τον χρόνο που αφιέρωσε να την διαβάσει και να την αξιολογήσει.

Τέλος, ευχαριστώ τους φίλους μου και συνοδοιπόρους μου στις σπουδές και κυρίως ευχαριστώ τους γονείς μου, οι οποίοι πιστεύουν πάντα σε μένα και με στηρίζουν από τότε που γεννήθηκα, στα θέματα της μόρφωσης και της διαμόρφωσης του χαρακτήρα μου.

Περιεχόμενα

Περίληψη.....	5
Abstract	6
1. Εισαγωγή.....	7
2. Απεικονίσεις τύπου διάχυσης (Diffusion maps).....	9
2.1 Κατασκευή DMAPS.....	9
2.2 Επιλογή ανεξάρτητων ιδιοδιανυσμάτων.....	11
2.2.1 Παράδειγμα: Swiss roll.....	11
2.2.2 Τοπική γραμμική παλινδρόμηση (Local linear regression).....	12
2.3 Χαρτογράφηση μεταξύ ambient χώρου και χώρου DMAP.....	13
2.3.1 Επέκταση Nyström	13
2.3.2 Γεωμετρικές αρμονικές (Geometric harmonics).....	13
3. Εφαρμογές	16
3.1 Αστάθεια Rosensweig.....	16
3.1.1 Εισαγωγικά στοιχεία.....	16
3.1.2 Εξισώσεις που διέπουν το πρόβλημα.....	17
3.1.3 Πειραματικά αποτελέσματα.....	20
3.2 Εξίσωση Kuramoto-Sivashinsky.....	21
3.2.1 Εισαγωγικά στοιχεία.....	21
3.2.2 Μαθηματική διατύπωση του προβλήματος.....	22
4. Αποτελέσματα	30
4.1 Αστάθεια Rosensweig.....	30
4.1.1 Diffusion maps – Επιλογή ανεξάρτητων ιδιοδιανυσμάτων.....	30
4.1.2 Local linear regression.....	32
4.1.3 Υπολογισμός συντεταγμένων στον ambient χώρο – Geometric harmonics.....	33
4.2 Εξίσωση Kuramoto-Sivashinsky.....	39
4.2.1 Επίλυση της εξίσωσης.....	39
4.2.2 Diffusion maps.....	41
4.2.3 Σχέση μεταξύ κρίσιμων ιδιοδιανυσμάτων και DMAPS.....	43
5. Συμπεράσματα.....	47
Βιβλιογραφία.....	48

Κατάλογος σχημάτων

Σχήμα 2.1: Σύνολο δεδομένων «Swiss roll», $N=2000$ σημεία.

Σχήμα 2.2: Διαγράμματα ιδιοδιανυσμάτων για το σύνολο δεδομένων «Swiss roll»: (a) $\psi_2-\psi_3$, (b) $\psi_2-\psi_4$.

Σχήμα 3.1: Παραμόρφωση της ελεύθερης επιφάνειας μαγνητικού ρευστού σε κυλινδρικά δοχεία

Σχήμα 3.2: Ένα μικρό αξονοσυμμετρικό δοχείο με μαγνητικό ρευστό μέσα σε μαγνητικό πεδίο [8].

Σχήμα 3.3: Παραμορφώσεις της ελεύθερης επιφάνειας μαγνητικού υγρού σε κυλινδρικό δοχείο με ακτίνα $R_0=18$ mm και βάθος $D=10$ mm.

Σχήμα 3.4: Μετάβαση της ελεύθερης επιφάνειας του ρευστού από 3 σε 2 κορυφές (a), από 4 σε 2 κορυφές (b) και από 4 σε 3 κορυφές (c) [14].

Σχήμα 3.5: Σύστημα συντεταγμένων που χρησιμοποιείται για την εξαγωγή της KSE [2].

Σχήμα 3.6: Απεικόνιση της μεταβλητής απόκλισης, $\eta(x,t)$ [2].

Σχήμα 4.1: Διαγράμματα συντεταγμένων DMAP: (a) $\phi_2-\phi_3$, (b) $\phi_2-\phi_4$, (c) $\phi_2-\phi_6$, (d) $\phi_3-\phi_4$, (e) $\phi_3-\phi_6$, (f) $\phi_4-\phi_6$. Φαίνονται οι 4 κλάδοι που αποτελούν το σύνολο των δεδομένων, οι οποίοι αντιστοιχούν σε σχηματισμό δακτυλίου (μαύρο), 2 κορυφών (κόκκινο), 3 κορυφών (πράσινο) και 4 κορυφών (μπλε).

Σχήμα 4.2: Τρισδιάστατα διαγράμματα συντεταγμένων DMAP: (a) $\phi_2-\phi_3-\phi_4$, (b) $\phi_2-\phi_3-\phi_6$, (c) $\phi_2-\phi_4-\phi_6$, (d) $\phi_3-\phi_4-\phi_6$.

Σχήμα 4.3: Διάγραμμα συντεταγμένων DMAP $\phi_2-\phi_5$.

Σχήμα 4.4: LLR residuals για τις 8 πρώτες συντεταγμένες DMAP.

Σχήμα 4.5: Νόρμα του σχετικού σφάλματος για κάθε τιμή της παραμέτρου ε : (a) $\varepsilon=10^{-4}$, (b) $\varepsilon=10^{-3}$, (c) $\varepsilon=10^{-2}$, (d) $\varepsilon=10^{-1}$, (e) $\varepsilon=1$, (f) $\varepsilon=10$.

Σχήμα 4.6: Σχετικό σφάλμα για κάθε τιμή της παραμέτρου ε : (a) $\varepsilon=10^{-4}$, (b) $\varepsilon=10^{-3}$, (c) $\varepsilon=10^{-2}$, (d) $\varepsilon=10^{-1}$, (e) $\varepsilon=1$, (f) $\varepsilon=10$.

Σχήμα 4.7: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{14} και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των geometric harmonics. Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=35$.

Σχήμα 4.8: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{49} και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των geometric harmonics. Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=16$.

Σχήμα 4.9: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{78} και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των geometric harmonics. Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=60$.

Σχήμα 4.10: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{32} και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των geometric harmonics. Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=16$.

Σχήμα 4.11: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{23} και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των geometric harmonics. Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=21$.

Σχήμα 4.12: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{42} και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των geometric harmonics. Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=16$.

Σχήμα 4.13: Στιγμιότυπα της λύσης μόνιμης κατάστασης του συστήματος για ορισμένες τιμές της παραμέτρου α .

Σχήμα 4.14: Διάγραμμα διακλαδώσεων για την KSE. Η επίλυση της εξίσωσης έγινε με 12 όρος του αναπτύγματος Fourier. Τα ανοιχτά τετράγωνα απεικονίζουν διακλαδώσεις μόνιμης κατάστασης, ενώ τα μαύρα τετράγωνα υποδηλώνουν διακλαδώσεις Hopf [9].

Σχήμα 4.15: Διάγραμμα συντεταγμένων DMAP φ_2 - φ_3 . Το χρώμα του κάθε σημείου υποδηλώνει την αντίστοιχη τιμή της παραμέτρου α .

Σχήμα 4.16: Διάγραμμα συντεταγμένων DMAP φ_2 - φ_4 . Το χρώμα του κάθε σημείου υποδηλώνει την αντίστοιχη τιμή της παραμέτρου α .

Σχήμα 4.17: LLR residuals για τις 8 πρώτες συντεταγμένες DMAP.

Σχήμα 4.18: Διάγραμμα της προβολής των λύσεων του συστήματος των 8 διαφορικών εξισώσεων στο κρίσιμο ιδιοδιάνυσμα για τιμή της παραμέτρου $\alpha=4$, συναρτήσει του ιδιοδιανύσματος φ_2 .

Σχήμα 4.19: Διάγραμμα της προβολής των λύσεων του συστήματος των 8 διαφορικών εξισώσεων στο κρίσιμο ιδιοδιάνυσμα για τιμή της παραμέτρου $\alpha=4$, συναρτήσει του ιδιοδιανύσματος φ_3 .

Σχήμα 4.20: Διάγραμμα της προβολής των λύσεων του συστήματος των 8 διαφορικών εξισώσεων στο κρίσιμο ιδιοδιάνυσμα για τιμή της παραμέτρου $\alpha=16$, συναρτήσει του ιδιοδιανύσματος φ_2 .

Σχήμα 4.21: Διάγραμμα της προβολής των λύσεων του συστήματος των 8 διαφορικών εξισώσεων στο κρίσιμο ιδιοδιάνυσμα για τιμή της παραμέτρου $\alpha=16$, συναρτήσει του ιδιοδιανύσματος φ_3 .

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 4.1: LLR residuals για τις 8 πρώτες συντεταγμένες DMAP.

Πίνακας 4.2: Ελάχιστη τιμή της νόρμας του σχετικού σφάλματος για κάθε τιμή της παραμέτρου ε .

Πίνακας 4.3: Ελάχιστο σχετικό σφάλμα για καθένα από τα 6 «άγνωστα» σημεία για κάθε τιμή της παραμέτρου ε .

Πίνακας 4.4: Σημεία διακλάδωσης για το σύστημα των 8 εξισώσεων (BP=branch point, HB=Hopf bifurcation, LP=saddle-node bifurcation).

Πίνακας 4.5: LLR residuals για τις 8 πρώτες συντεταγμένες DMAP.

Περίληψη

Τα υπολογιστικά μοντέλα δυναμικών συστημάτων χαρακτηρίζονται συνήθως από μεγάλο αριθμό βαθμών ελευθερίας και μη γραμμική δυναμική. Κατά συνέπεια, η επίλυσή τους είναι χρονοβόρα και απαιτεί άφθονους υπολογιστικούς πόρους, καθιστώντας τα ακατάλληλα για προβλήματα μεγάλης κλίμακας. Οι μεθοδολογίες μείωσης τάξης αποτελούν μία αποτελεσματική λύση για την υπέρβαση αυτού του φράγματος.

Στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας παρουσιάζεται μία προσέγγιση που βασίζεται σε τεχνικές μάθησης πολλαπλότητας, η οποία εφαρμόζεται σε δύο δυναμικά πολύπλοκα, μη γραμμικά προβλήματα (αστάθεια Rosensweig, εξίσωση Kuramoto-Sivashinsky). Η βασική υπόθεση είναι ότι οι λύσεις ενός μη γραμμικού συστήματος ανήκουν σε μία πολλαπλότητα χαμηλής διάστασης και ο προσδιορισμός της γεωμετρίας της έχει ως αποτέλεσμα την πιο αποδοτική διερεύνηση του συστήματος. Η διαδικασία μείωσης τάξης αποτελείται από τρία βασικά στάδια. Πρώτον, συλλέγονται δεδομένα μέσω της επίλυσης του συστήματος για ένα σύνολο αρχικών συνθηκών. Δεύτερον, λαμβάνεται μία παραμετροποίηση της πολλαπλότητας χαμηλής διάστασης από την τεχνική απεικόνισης τύπου διάχυσης (diffusion maps). Τέλος, επιτυγχάνεται η μείωση τάξης του συστήματος με βάση τις συντεταγμένες που παρέχονται από τα diffusion maps.

Εφόσον η παραμετροποίηση γίνει γνωστή, είναι δυνατή η μετάβαση μεταξύ του χώρου υψηλής διάστασης του αρχικού συνόλου των δεδομένων και του μειωμένου χώρου χαμηλής διάστασης. Αυτή η χαρτογράφηση επιτυγχάνεται με μεθόδους παρεμβολής, όπως η επέκταση Nyström και οι γεωμετρικές αρμονικές (geometric harmonics). Αυτό είναι ένα βασικό βήμα σε αυτή την προσέγγιση, καθώς επιτρέπει την πρόβλεψη νέων, άγνωστων καταστάσεων με δεδομένες συντεταγμένες στο χώρο χαμηλής διάστασης, χωρίς να απαιτείται η επίλυση του λεπτομερούς μοντέλου. Η ακρίβεια των προβλέψεων κρίνεται αρκετά ικανοποιητική, καθώς το σχετικό σφάλμα παραμένει μικρότερο από 1%.

Λέξεις-κλειδιά: μείωση τάξης, μάθηση πολλαπλότητας, diffusion maps, geometric harmonics, αστάθεια Rosensweig, εξίσωση Kuramoto-Sivashinsky

Nonlinear order reduction based on manifold learning and application in large scale problems

Andreas Kounis-Melas

Supervisor: *Andreas Boudouvis*

Abstract

Computational models of dynamical systems are usually characterized by a large number of degrees of freedom, as well as nonlinear dynamics. Consequently, solving them is time consuming and requires considerable computational resources, rendering them unsuitable for large-scale problems. Order reduction methods are an effective solution to overcome this barrier.

In this thesis, an approach based on manifold learning techniques is presented, which is applied to two dynamically complex, nonlinear problems (Rosensweig instability, Kuramoto-Sivashinsky equation). The main premise is that the solutions of a nonlinear system lie on a low dimensional manifold and finding its geometry can result in a more efficient investigation of the system. The order reduction process consists of three main steps. Firstly, data are collected by solving the system for a set of initial conditions. Secondly, a parametrization of the low dimensional manifold is obtained through the diffusion maps technique. Finally, order reduction is achieved based on the coordinates provided by diffusion maps.

Once this parametrization is known, mapping between the high dimensional space of the original dataset and the low dimensional reduced space becomes possible. This mapping is achieved through interpolation methods, such as Nyström extension and geometric harmonics. This is a key step in this approach, as it can result in predicting new, unknown states with given coordinates in the low dimensional space, with no requirement to solve the detailed model. The accuracy of the predictions is satisfactory, since the relative error remains less than 1%.

Keywords: order reduction, manifold learning, diffusion maps, geometric harmonics, Rosensweig instability, Kuramoto-Sivashinsky equation

1. Εισαγωγή

Η μοντελοποίηση διεργασιών και συστημάτων στη μηχανική και γενικότερα βασίζεται σε θεμελιώδεις αρχές, όπως οι νόμοι διατήρησης. Η μαθηματική διατύπωση των νόμων οδηγεί συνήθως σε μη γραμμικές διαφορικές εξισώσεις με μερικές παραγώγους, με την επίλυση των οποίων επιτυγχάνονται θεωρητικές προβλέψεις για τη χωρο-χρονική συμπεριφορά του συστήματος. Ωστόσο, το μεγάλο μέγεθος των προβλημάτων καθιστά απαγορευτική την αναλυτική επίλυση. Επομένως, προκύπτει η ανάγκη για προσεγγιστική επίλυση με μεθόδους υπολογιστικής ανάλυσης.

Τα τελευταία χρόνια, οι αλγόριθμοι εξόρυξης δεδομένων (data mining) έχουν αποδειχθεί χρήσιμοι για την αντιμετώπιση αυτού του υπολογιστικού προβλήματος. Πιο συγκεκριμένα για δυναμικά συστήματα, οι μεθοδολογίες που βασίζονται σε δεδομένα είναι απαραίτητες για τη μείωση της τάξης (order reduction) των μοντέλων, όταν λόγω της πολυπλοκότητας του συστήματος δεν είναι δυνατή η κατασκευή απλών μακροσκοπικών μοντέλων. Για προσομοιώσεις ή πειραματικές παρατηρήσεις τέτοιων συστημάτων, η λεπτομερής κατάσταση του συστήματος είναι πολυδιάστατη και η μείωση σε δυναμική στη μακροκλίμακα δεν είναι προφανής. Σε αυτή την περίπτωση, μπορεί να εφαρμοστεί κάποιος αλγόριθμος μηχανικής μάθησης στα δεδομένα που λαμβάνονται από προσομοιώσεις ή παρατηρήσεις του συστήματος για την εξαγωγή μίας περιγραφής χαμηλότερης διάστασης, η οποία χρησιμοποιεί μικρότερο αριθμό ελεύθερων παραμέτρων. Η νέα αναπαράσταση πρέπει να παρέχει μία εικόνα των δεδομένων διατηρώντας ορισμένες ποσότητες, όπως τις τοπικές αποστάσεις [7], [4].

Για την επίτευξη αυτού του στόχου, διάφορες τεχνικές μηχανικής μάθησης αξιοποιούν αλγορίθμους που βασίζονται σε γράφους (graph-based algorithms). Οι γράφοι χρησιμοποιούνται συνήθως για την αναπαράσταση μίας γεωμετρίας που βασίζεται στην τοπική ομοιότητα μεταξύ των σημείων. Σε πολλές περιπτώσεις, κάθε δείγμα αντιπροσωπεύεται από ένα σύνολο αριθμητικών χαρακτηριστικών, και η συνθήκη για τη σύνδεση δύο κόμβων βασίζεται στην απόσταση των αντίστοιχων σημείων στο χώρο. Οι μέθοδοι που βασίζονται σε γράφους είναι ιδιαίτερα αποδοτικές σε συνδυασμό με τεχνικές αλυσίδας Markov. Συγκεκριμένα, οι τυχαίοι περίπατοι σε γράφους αποδεικνύονται αποτελεσματικοί στην εύρεση δομών σε πολύπλοκες γεωμετρίες. Στον τομέα της φασματικής ομαδοποίησης (spectral clustering), κατασκευάζεται μία αλυσίδα Markov στο γράφο των δεδομένων και το πρώτο μη σταθερό ιδιοδιάνυσμα του αντίστοιχου πίνακα μετάβασης χρησιμοποιείται για την εύρεση ομάδων [4].

Αυτή η προσέγγιση μπορεί να γενικευτεί σε ιδιοδιανύσματα υψηλότερης τάξης. Η χρήση περισσότερων ιδιοδιανυσμάτων επιτρέπει την παραμετροποίηση του συνόλου δεδομένων. Πρόσφατα, έχει αναδειχθεί η ιδέα ότι τα ιδιοδιανύσματα ενός πίνακα Markov μπορούν να θεωρηθούν ως συντεταγμένες στο σύνολο δεδομένων. Κατά συνέπεια, τα δεδομένα μπορούν να αναπαρασταθούν ως σημεία στον Ευκλείδειο χώρο. Αυτή η αναπαράσταση μπορεί να συλλάβει τις κύριες δομές των δεδομένων σε λίγες διαστάσεις, επιτυγχάνοντας έτσι μείωση τάξης. Αυτοί οι αλγόριθμοι παρουσιάζουν δύο πλεονεκτήματα έναντι των κλασικών μεθόδων μείωσης τάξης, όπως η ανάλυση κύριων συνιστωσών (PCA): είναι μη γραμμικοί και διατηρούν τις τοπικές δομές. Η πρώτη ιδιότητα είναι συνήθως απαραίτητη, καθώς τα δεδομένα δεν βρίσκονται σε γραμμικές πολλαπλότητες, ενώ η δεύτερη εκφράζει το γεγονός ότι σε πολλές εφαρμογές, οι αποστάσεις μεταξύ σημείων που απέχουν πολύ δεν έχουν νόημα και δεν χρειάζεται να διατηρηθούν [4].

Στόχος της παρούσας εργασίας είναι η παρουσίαση της μεθόδου απεικόνισης τύπου διάχυσης (diffusion maps), η οποία χρησιμοποιείται για τη μάθηση μίας μη γραμμικής πολλαπλότητας χαμηλής διάστασης, και η εφαρμογή της σε δύο πολύπλοκα από δυναμική άποψη, μη γραμμικά προβλήματα. Στη συνέχεια εφαρμόζεται μία μέθοδος για τη μετάβαση από τον αρχικό χώρο

υψηλής διάστασης των δεδομένων στο χώρο χαμηλής διάστασης και αντίστροφα. Με αυτό τον τρόπο, θα είναι δυνατή η πρόβλεψη νέων καταστάσεων με δεδομένες τις συντεταγμένες στον χαμηλότερης διάστασης χώρο DMAP.

Στο κεφάλαιο 2 παρουσιάζεται το θεωρητικό υπόβαθρο της μεθόδου diffusion maps, καθώς και η μετάβαση μεταξύ των χώρων υψηλής και χαμηλής διάστασης μέσω των γεωμετρικών αρμονικών (geometric harmonics). Στο κεφάλαιο 3 παρουσιάζονται τα δύο μη γραμμικά προβλήματα στα οποία θα εφαρμοστεί η μεθοδολογία που αναφέρθηκε. Τα αποτελέσματα της μεθόδου παρουσιάζονται στο κεφάλαιο 4. Τέλος, τα συμπεράσματα που προκύπτουν από την εργασία συνοψίζονται στο κεφάλαιο 5.

2. Απεικονίσεις τύπου διάχυσης (Diffusion maps)

Η μέθοδος απεικόνισης τύπου διάχυσης (diffusion maps-DMAPS) αποτελεί μία τεχνική μάθησης πολλαπλότητας η οποία έχει αναδειχθεί ως ένα γρήγορο μη γραμμικό εργαλείο μείωσης τάξης. Στόχος της μεθόδου είναι, ξεκινώντας από ένα σύνολο δεδομένων σε χώρο υψηλής διάστασης (ambient space), να προσδιορίσει αν τα δεδομένα μπορούν να ενσωματωθούν σε έναν χώρο χαμηλότερης διάστασης (reduced space), καθώς και να παραμετροποιήσει τη βέλτιστη, και πιθανώς μη γραμμική, πολλαπλότητα (low dimensional manifold) η οποία τα περιέχει [13].

2.1 Κατασκευή DMAPS

Έστω ότι το σύνολο δεδομένων αποτελείται από σημεία $\mathbf{X}_i \in \mathbb{R}^d$. Η μοναδική είσοδος που απαιτεί ο αλγόριθμος είναι ένα μέτρο ομοιότητας (similarity measure), $W(i,j)$ μεταξύ των σημείων, το οποίο πρέπει να είναι [4], [5]:

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

Το μέτρο ομοιότητας περιγράφει τη σχέση μεταξύ ζευγών σημείων του συνόλου και γίνεται αμελητέο εκτός της «γειτονιάς» του κάθε σημείου. Αυτό συνδέεται με το γεγονός ότι σε μία μη γραμμική πολλαπλότητα, οι μεγάλες Ευκλείδειες αποστάσεις δεν προσεγγίζουν με ακρίβεια τις γεωδαισικές αποστάσεις. Τα μέτρα ομοιότητας για κάθε ζεύγος σημείων χρησιμοποιούνται στον αλγόριθμο DMAP για την κατασκευή ενός πίνακα, του οποίου τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν στις μεγαλύτερες ιδιοτιμές ενσωματώνουν το σύνολο των δεδομένων στον χώρο χαμηλότερης διάστασης. [13] Με βάση τα παραπάνω, τα σημεία μπορούν να θεωρηθούν ως κόμβοι ενός συμμετρικού γράφου, του οποίου η συνάρτηση βάρους καθορίζεται από το W [4], [5].

Για την κατασκευή της ενσωμάτωσης ενός συνόλου δεδομένων που αποτελείται από M σημεία, τα οποία αντιπροσωπεύονται από διανύσματα διάστασης d , $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_M$, αρχικά επιλέγεται το μέτρο ομοιότητας για κάθε ζεύγος διανυσμάτων $\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j$. Συνήθως χρησιμοποιείται το μέτρο ομοιότητας Gauss:

$$W_{ij} = \exp \left[- \left(\frac{\|\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j\|}{\varepsilon} \right)^2 \right] \quad (2.1)$$

όπου η παράμετρος ε ορίζει μία χαρακτηριστική κλίμακα της «γειτονιάς» εντός της οποίας η Ευκλείδεια απόσταση μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως βάση για το μέτρο ομοιότητας [13].

Από το γράφο που ορίζεται από τα (\mathbf{X}, W) μπορεί να κατασκευαστεί μία αντιστρεπτή αλυσίδα Markov στο \mathbf{X} :

$$D_{ii} = \sum_{j=1}^M W_{ij} \quad (2.2)$$

$$K = D^{-1}W \quad (2.3)$$

Ο πίνακας K έχει ένα σύνολο ιδιοτιμών, λ_i , με $\lambda_0 \geq \lambda_1 \geq \dots \geq 0$, και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα, ψ_i . Ο K είναι στοχαστικός, άρα $\lambda_0=1$ και $\psi_1=[1 \ 1 \ 1 \dots 1]^T$. Η αναπαράσταση σε n διαστάσεις ενός d -διάστατου διανύσματος \mathbf{X}_i δίνεται από το diffusion map $\Psi_n: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^n$

$$\Psi_n(\mathbf{X}_i) = [\lambda_1^t \psi_1^{(i)} \ \lambda_2^t \psi_2^{(i)} \ \dots \ \lambda_n^t \psi_n^{(i)}] \quad (2.4)$$

όπου $\psi_j^{(i)}$ είναι η i συνιστώσα του ιδιοδιανύσματος ψ_j , ενώ το t αντιπροσωπεύει το «χρόνο διάχυσης» (diffusion time) [13].

Ο πίνακας K περιέχει γεωμετρικές πληροφορίες για το σύνολο δεδομένων \mathbf{X} . Συγκεκριμένα, το $K(i,j)$ εκφράζει την πιθανότητα μετάβασης από τον κόμβο i στον κόμβο j σε ένα χρονικό βήμα. Αυτές οι μεταβάσεις φανερώνουν άμεσα την τοπική γεωμετρία που ορίζεται από τα γειτονικά σημεία κάθε κόμβου στο γράφο των δεδομένων. Για $t \geq 0$, η πιθανότητα μετάβασης από τον κόμβο x στον y σε t βήματα δίνεται από την δύναμη K^t . Μία από τις βασικές ιδέες των diffusion maps είναι ότι προχωρώντας την αλυσίδα Markov στο χρόνο, δηλαδή υπολογίζοντας μεγαλύτερες δυνάμεις του K , αποκαλύπτεται η τοπική γεωμετρία της πολλαπλότητας και γεωμετρικές δομές του \mathbf{X} σε διάφορες κλίμακες [4].

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, ο πίνακας μετάβασης (transition matrix) K καθορίζει την τοπική γεωμετρία του συνόλου δεδομένων. Η αλυσίδα Markov προσδιορίζει τις γρήγορες και αργές κατευθύνσεις διάδοσης με βάση τις τιμές που λαμβάνει ο πίνακας μετάβασης και οι πληροφορίες της τοπικής γεωμετρίας διαδίδονται καθώς η αλυσίδα προχωρά προς τα εμπρός στο χρόνο. Η κίνηση της αλυσίδας στο χρόνο ισοδυναμεί με τον υπολογισμό των δυνάμεων του K . Για τον υπολογισμό αυτό μπορούν να χρησιμοποιηθούν τα ιδιοδιανύσματα και οι ιδιοτιμές του πίνακα. Αντί για αυτό, χρησιμοποιούνται άμεσα για τον εντοπισμό της γεωμετρίας του συνόλου δεδομένων [4].

Αρχικά ορίζεται η απόσταση διάχυσης (diffusion distance) D_t :

$$D_t(i,j)^2 = \sum_{k=1}^M (K^t_{ik} - K^t_{jk})^2 \quad (2.5)$$

Για μία σταθερή τιμή του t , η D_t ορίζει μία απόσταση στο σύνολο δεδομένων \mathbf{X} η οποία εκφράζει τη συνδεσιμότητα στο γράφο των δεδομένων. Αν η πιθανότητα μετάβασης από το \mathbf{X}_i στο \mathbf{X}_j είναι μεγάλη, δηλαδή αν υπάρχει μεγάλος αριθμός μονοπατιών που τα συνδέουν, η τιμή του $D_t(i,j)$ θα είναι χαμηλή και αντίστροφα [4].

Το $D_t(i,j)$ μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα K ως εξής:

$$D_t(i,j) = \left(\sum_{k \geq 1} \lambda_k^{2t} (\psi_k^{(i)} - \psi_k^{(j)})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.6)$$

Το ιδιοδιάνυσμα ψ_0 παραλείπεται από τον υπολογισμό επειδή είναι σταθερό, ενώ οι ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ τείνουν στο 0 και έχουν μέτρο μικρότερο του 1. Συνεπώς, το $D_t(i,j)$ μπορεί να υπολογιστεί με ακρίβεια $\delta > 0$ χρησιμοποιώντας έναν πεπερασμένο αριθμό, N , όρων [4]:

$$D_t(i,j) = \left(\sum_{k=1}^N \lambda_k^{2t} (\psi_k^{(i)} - \psi_k^{(j)})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.7)$$

Επομένως, εισάγεται το diffusion map $\Psi_t: \mathbf{X} \rightarrow \mathbb{R}^N$:

$$\Psi_t(i) = \begin{bmatrix} \lambda_1^t \psi_1^{(i)} \\ \lambda_2^t \psi_2^{(i)} \\ \vdots \\ \lambda_N^t \psi_N^{(i)} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

Κάθε συνιστώσα του Ψ_t ονομάζεται συντεταγμένη διάχυσης (diffusion coordinate).

Το diffusion map Ψ_t ενσωματώνει το σύνολο δεδομένων \mathbf{X} σε έναν χώρο διάστασης N , στον οποίο η απόσταση διάχυσης D_t είναι ίση με την Ευκλείδεια απόσταση (με σχετική ακρίβεια δ) [4]:

$$D_t(i, j) = \|\Psi_t(i) - \Psi_t(j)\| \quad (2.9)$$

Για την απλοποίηση των υπολογισμών επιλέγεται $t=1$.

2.2 Επιλογή ανεξάρτητων ιδιοδιανυσμάτων

Στα περισσότερα σύνολα δεδομένων, οι συντεταγμένες της πολλαπλότητας χαμηλής διάστασης είναι άγνωστες και δεν μπορούν να ληφθούν άμεσα από τις συντεταγμένες των αρχικών δεδομένων. Επομένως, είναι απαραίτητος ο προσδιορισμός των ιδιοδιανυσμάτων που αντιστοιχούν σε μοναδικές κατευθύνσεις [7].

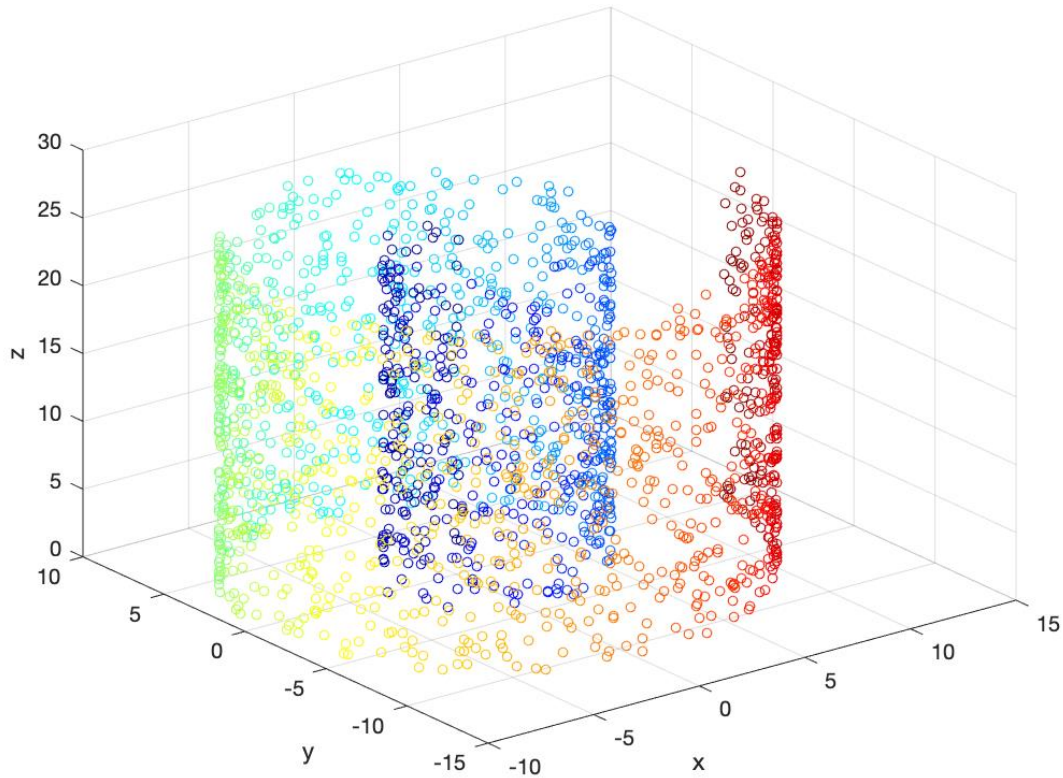
Μία συνήθης πρακτική είναι η ταξινόμηση των ιδιοδιανυσμάτων με βάση το μέτρο των αντίστοιχων ιδιοτιμών, σύμφωνα με την υπόθεση ότι τα πρώτα ιδιοδιανύσματα παραμετροποιούν την πολλαπλότητα χαμηλής διάστασης. Ενώ το πρώτο μη σταθερό ιδιοδιάνυσμα, ψ_1 , εκφράζει την κύρια κατεύθυνση της πολλαπλότητας, κάποια ιδιοδιανύσματα στην εξίσωση (2.8) είναι εξαρτημένα, δηλαδή δεν περιγράφουν νέες κατευθύνσεις στο σύνολο δεδομένων, καθώς αποτελούν υψηλότερες αρμονικές άλλων ιδιοδιανυσμάτων [7], [3].

2.2.1 Παράδειγμα: Swiss roll

Έστω ένα σύνολο δεδομένων «Swiss roll», τα δεδομένα του οποίου λαμβάνονται ως εξής:

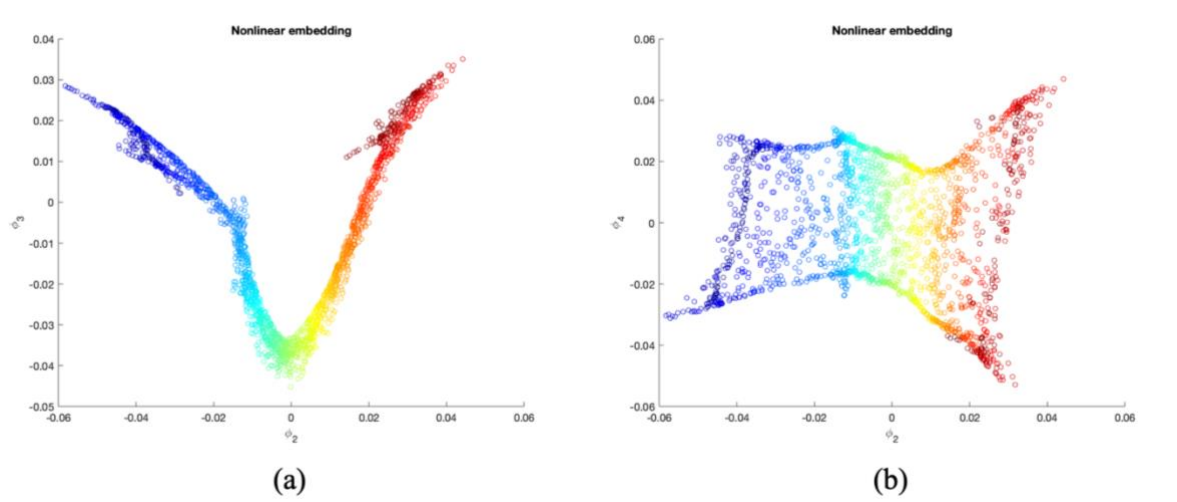
$$(x, y, z) = (t \cos t, t \sin t, 8\pi h) \quad (2.10)$$

όπου το t λαμβάνεται έτσι ώστε τα x και y να κατανέμονται ομοιόμορφα κατά μήκος του swiss roll, ενώ το h κατανέμεται ομοιόμορφα στο διάστημα $[0,1]$. Το ύψος του swiss roll είναι 8π , ενώ το σύνολο δεδομένων αποτελείται από $N=2000$ σημεία, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.1.



Σχήμα 2.1: Σύνολο δεδομένων «Swiss roll», $N=2000$ σημεία.

Στο Σχήμα 2.2(a), το πρώτο μη σταθερό ιδιοδιάνυσμα, ψ_2 , απεικονίζεται σε σχέση με το ψ_3 , το οποίο αντιστοιχεί στην αμέσως μικρότερη ιδιοτιμή. Το διάγραμμα είναι μία μονοδιάστατη καμπύλη, η οποία υποδηλώνει μία ισχυρή συσχέτιση μεταξύ των δύο ιδιοδιανυσμάτων. Επομένως, το ψ_3 δεν αντιπροσωπεύει μία νέα κατεύθυνση στην πολλαπλότητα χαμηλής διάστασης. Αντίθετα, στο Σχήμα 2.2(b), το εμφανώς διδιάστατο διάγραμμα του ιδιοδιανύσματος ψ_4 συναρτήσει του ψ_2 δείχνει ότι είναι ανεξάρτητα. Το ψ_4 αντιπροσωπεύει μία νέα, ανεξάρτητη κατεύθυνση στην πολλαπλότητα και αποτελεί τη δεύτερη συντεταγμένη στο χώρο χαμηλής διάστασης.



Σχήμα 2.2: Διαγράμματα ιδιοδιανυσμάτων για το σύνολο δεδομένων «Swiss roll»: (a) ψ_2 - ψ_3 , (b) ψ_2 - ψ_4 .

Ο έλεγχος ανεξαρτησίας σε υψηλότερες διαστάσεις γίνεται δυσκολότερος οπτικά, καθώς τα ακόλουθα ιδιοδιανύσματα θα πρέπει να απεικονιστούν σε σχέση με τα προηγούμενα

ανεξάρτητα (ψ_2 και ψ_4 στο παράδειγμα που εξετάστηκε παραπάνω) και να εκτιμηθεί η διάσταση του διαγράμματος [3].

2.2.2 Τοπική γραμμική παλινδρόμηση (Local linear regression)

Είναι σαφές ότι η εύρεση των ιδιοδιανυσμάτων που είναι αρμονικές άλλων είναι χρήσιμη, καθώς τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε διαφορετικές κατευθύνσεις δίνουν την πιο αποτελεσματική αναπαράσταση των δεδομένων. Με δεδομένα τα ιδιοδιανύσματα, $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{M-1} \in \mathbb{R}^M$, για την ανίχνευση αυτών που καταγράφουν νέες κατευθύνσεις στο σύνολο δεδομένων και αυτών που αποτελούν επαναλαμβανόμενες κατευθύνσεις μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο αλγόριθμος τοπικής γραμμικής παλινδρόμησης (local linear regression). Σκοπός του αλγορίθμου είναι η προσαρμογή μίας συνάρτησης $f(\psi_1, \dots, \psi_{k-1})$ ως προς το ψ_k . Αν η ακρίβεια της προσαρμογής είναι μεγάλη, το ψ_k θεωρείται ότι εκφράζει μία επαναλαμβανόμενη κατεύθυνση. Χρησιμοποιείται μία τοπική γραμμική συνάρτηση (local linear function) [7]:

$$\psi_k^{(i)} = \alpha_k(i) + \beta_k^T(i) \Psi_{k-1}(i) \quad (2.11)$$

όπου $\Psi_{k-1}(i) = [\psi_1^{(i)} \dots \psi_{k-1}^{(i)}]^T$, $\alpha_k(i) \in \mathbb{R}$ και $\beta_k(i) \in \mathbb{R}^{k-1}$. Οι συντελεστές $\alpha_k(i)$ και $\beta_k(i)$ δεν είναι σταθεροί επειδή χρησιμοποιείται μία τοπική γραμμική προσαρμογή στο χώρο διάστασης $k-1$ Ψ_{k-1} , επομένως αλλάζουν ως συνάρτηση του πεδίου ορισμού.

Σε κάθε σημείο $\Psi_{k-1}(i)$, προσεγγίζεται το $\psi_k^{(i)}$ χρησιμοποιώντας τα υπόλοιπα $M-1$ σημεία των δεδομένων. Επιλύεται το εξής πρόβλημα βελτιστοποίησης:

$$\hat{\alpha}_k(i), \hat{\beta}_k(i) = \underset{\alpha, \beta}{\operatorname{argmin}} \sum_{j \neq i} K(\Psi_{k-1}(i), \Psi_{k-1}(j)) (\psi_k^{(j)} - (\alpha + \beta^T \Psi_{k-1}(j)))^2 \quad (2.12)$$

όπου K είναι μία συνάρτηση Gauss (Gaussian kernel):

$$K(\Psi_{k-1}(i), \Psi_{k-1}(j)) = \exp\left(-\frac{\|\Psi_{k-1}(i) - \Psi_{k-1}(j)\|^2}{\epsilon_{reg}^2}\right) \quad (2.13)$$

Στη συνέχεια ορίζεται το κανονικοποιημένο σφάλμα (residual) της τοπικής γραμμικής παλινδρόμησης:

$$r_k = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^M (\psi_k^{(i)} - (\hat{\alpha}_k(i) + \hat{\beta}_k^T(i) \Psi_{k-1}(i)))^2}{\sum_{i=1}^M (\psi_k^{(i)})^2}} \quad (2.14)$$

Σημειώνεται ότι μικρή τιμή του r_k υποδηλώνει ότι το ψ_k μπορεί να προσεγγιστεί με ακρίβεια από τα $\psi_1, \dots, \psi_{k-1}$, και επομένως είναι επαναλαμβανόμενη κατεύθυνση στα δεδομένα. Αντίθετα, μεγάλη τιμή του r_k δείχνει ότι το ψ_k παραμετροποιεί μία νέα κατεύθυνση στα δεδομένα. Επιλέγεται το $r_1=1$. Για την πιο αποτελεσματική αναπαράσταση των δεδομένων, προτείνεται η χρήση μόνο των ιδιοδιανυσμάτων για τα οποία το r_k είναι μεγάλο [7].

2.3 Χαρτογράφηση μεταξύ περιβάλλοντα (ambient) χώρου και χώρου DMAP

Για να επιτευχθεί η μείωση τάξης μέσω των diffusion maps, πρέπει να είναι δυνατή η μετάβαση από τον αρχικό χώρο υψηλής διάστασης στο χώρο χαμηλής διάστασης (χώρος DMAP) και αντίστροφα. Από τον αρχικό χώρο στο χώρο DMAP, μπορεί να χρησιμοποιηθεί μία μαθηματική προσέγγιση που είναι γνωστή ως επέκταση Nyström, ωστόσο η αντίστροφη χαρτογράφηση είναι πιο δύσκολη [13].

2.3.1 Επέκταση Nyström

Η επέκταση Nyström επιλύει το πρόβλημα της εύρεσης των συντεταγμένων στο χώρο DMAP ενός νέου d -διάστατου διανύσματος, \mathbf{X}_{new} , που δεν ανήκει στο αρχικό σύνολο δεδομένων. Αρχικά υπολογίζονται οι αποστάσεις, $[d_{i,new}]_{i=1}^M$, μεταξύ του \mathbf{X}_{new} και των M διανυσμάτων στο σύνολο δεδομένων, και υπολογίζεται το μέτρο ομοιότητας για το νέο σημείο:

$$W_{i,new} = \exp \left[- \left(\frac{d_{i,new}}{\varepsilon} \right)^2 \right] \quad (2.15)$$

Στη συνέχεια υπολογίζονται οι πιθανότητες μετάβασης για το νέο σημείο:

$$K_{i,new} = \left(\sum_{j=1}^M W_{j,new} \right)^{-1} W_{i,new} \quad (2.16)$$

Η συντεταγμένη j στο χώρο DMAP (από n συνολικά) του \mathbf{X}_{new} δίνεται από τη σχέση:

$$\psi_j^{(new)} = \frac{1}{\lambda_j} \sum_{i=1}^M K_{i,new} \psi_j^{(i)} \quad (2.17)$$

2.3.2 Γεωμετρικές αρμονικές (Geometric harmonics)

Μία σημαντική προϋπόθεση για τους υπολογισμούς στο χώρο χαμηλής διάστασης είναι η δυνατότητα μετάβασης από το χώρο DMAP στον περιβάλλοντα (ambient) χώρο υψηλότερης διάστασης, δηλαδή για δεδομένες τιμές των συντεταγμένων DMAP, η εύρεση του αντίστοιχου σημείου στον Ευκλείδειο χώρο υψηλής διάστασης στον οποίο βρίσκεται το αρχικό σύνολο δεδομένων. Οι προσεγγίσεις που έχουν προταθεί για αυτό το σκοπό περιλαμβάνουν επανάληψη Newton, πολυωνυμική παρεμβολή, παρεμβολή με ακτινικές συναρτήσεις βάσης και γεωμετρικές αρμονικές (geometric harmonics) [13].

Η επέκταση geometric harmonics είναι μία μέθοδος, εμπνευσμένη από την επέκταση Nyström, για την επέκταση συναρτήσεων που ορίζονται σε ένα σύνολο, X , σε ένα μεγαλύτερο, \bar{X} . Αυτό είναι ακριβώς το πρόβλημα της κατασκευής του αντίστροφου χάρτη Nyström. Για κάθε σημείο στο σύνολο δεδομένων, είναι γνωστές οι συντεταγμένες στο χώρο DMAP και στον ambient χώρο. Αυτές οι συντεταγμένες μπορούν να θεωρηθούν ως d συναρτήσεις από το χώρο DMAP σε κάθε συντεταγμένη στον ambient χώρο, ενώ σκοπός είναι ο υπολογισμός αυτής της συνάρτησης για νέες τιμές των συντεταγμένων DMAP. Η συνάρτηση που πρέπει να επεκταθεί από το σύνολο X στο \bar{X} θα συμβολίζεται με f [13].

Έστω W ο συμμετρικός $M \times M$ πίνακας τα στοιχεία του οποίου ορίζονται ως εξής:

$$W(i,j) = \exp \left[- \frac{d_{ij}^2}{\varepsilon} \right] \quad (2.18)$$

ο οποίος έχει M ιδιοδιανύσματα, ψ_1, \dots, ψ_M , ταξινομημένα σύμφωνα με τις αντίστοιχες ιδιοτιμές, $\lambda_1, \dots, \lambda_M$, σε φθίνουσα σειρά. Η παράμετρος ε ποσοτικοποιεί την απόσταση από το σύνολο δεδομένων στην οποία είναι επιθυμητή η επέκταση της f [13].

Τα geometric harmonics ορίζονται ως εξής:

$$\Psi_i(y) = \frac{1}{\lambda_i} \sum_{j=1}^M \exp \left[- \left(\frac{\|y_j - y\|}{\varepsilon} \right)^2 \right] \psi_j^{(i)}, j \in S_\delta \quad (2.19)$$

με $y \in \bar{X}$ και $\lambda_i \neq 0$. Είναι σαφές ότι τα Ψ_i και ψ_i συμπίπτουν στο X , επομένως το Ψ_i είναι η επέκταση του ψ_i στο \bar{X} . Τα ιδιοδιανύσματα επεκτείνονται στο \bar{X} ως ο μέσος όρος των τιμών τους στο X , και κατά συνέπεια τα Ψ_i ονομάζονται *geometric harmonics*. [12]

Επειδή $\lambda_i \rightarrow 0$ καθώς $i \rightarrow \infty$, η διαδικασία επέκτασης έχει κακή κατάσταση (ill-conditioned) αριθμητικά. Για $\delta > 0$, ορίζεται το σύνολο των δεικτών $S_\delta = \{i \text{ έτσι ώστε } \lambda_i \geq \delta \lambda_0\}$. Ο δείκτης κατάστασης (condition number) της επέκτασης θα είναι $1/\delta$ [12], [6]. Η επέκταση της συνάρτησης f σε ένα νέο σημείο y στο \bar{X} επιτυγχάνεται ως εξής [13], [3]:

1. Η f προβάλλεται στα αποδεκτά ιδιοδιανύσματα:

$$f \rightarrow P_\delta f = \sum_{i \in S_\delta} \langle f, \psi_i \rangle \psi_i \quad (2.20)$$

2. Η $P_\delta f$ επεκτείνεται στο \bar{X} χρησιμοποιώντας τα *geometric harmonics*, Ψ_i :

$$Ef = \sum_{i \in S_\delta} \langle f, \psi_i \rangle \Psi_i(y) \quad (2.21)$$

όπου $\langle \rangle$ δηλώνει το εσωτερικό γινόμενο.

Με μικρή τιμή του ε , το σφάλμα στην προβολή της f (σχέση 2.19) είναι αμελητέο, καθώς η μείωση των ιδιοτιμών είναι αρκετά αργή, επομένως χρησιμοποιούνται τα περισσότερα ιδιοδιανύσματα, δηλαδή $\lambda_i \geq \delta \lambda_0$ για τα περισσότερα i . Ωστόσο, τα $\Psi_i(y)$ προσεγγίζουν γρήγορα το 0 για κάθε y αρκετά μακριά από το αρχικό σύνολο δεδομένων X . Με μεγάλη τιμή του ε , παρατηρείται μεγαλύτερο σφάλμα στην προβολή της f , επειδή τα περισσότερα ιδιοδιανύσματα αγνοούνται, όμως η συνάρτηση μπορεί να επεκταθεί σε μεγαλύτερο σύνολο. Για αυτό το λόγο μπορεί να πραγματοποιηθεί επέκταση της f σε πολλές κλίμακες. Σε ένα τέτοιο σχήμα, η f αρχικά προβάλλεται με μεγάλη τιμή του ε , και στη συνέχεια το σφάλμα της αρχικής προβολής προβάλλεται σε μικρότερη κλίμακα (μικρότερη τιμή του ε). Το σφάλμα της δεύτερης προβολής προβάλλεται σε ακόμα μικρότερη κλίμακα και η διαδικασία συνεχίζεται έως ότου το συνολικό σφάλμα γίνει μικρότερο από το επιθυμητό όριο. Το άθροισμα των προβολών αποδίδει την επέκταση της f . Συχνά επιλέγεται μία αρχική τιμή $\varepsilon = \varepsilon_0$ και η προβολή i γίνεται με $\varepsilon = 2^{-(i-1)}\varepsilon_0$ [13].

3. Εφαρμογές

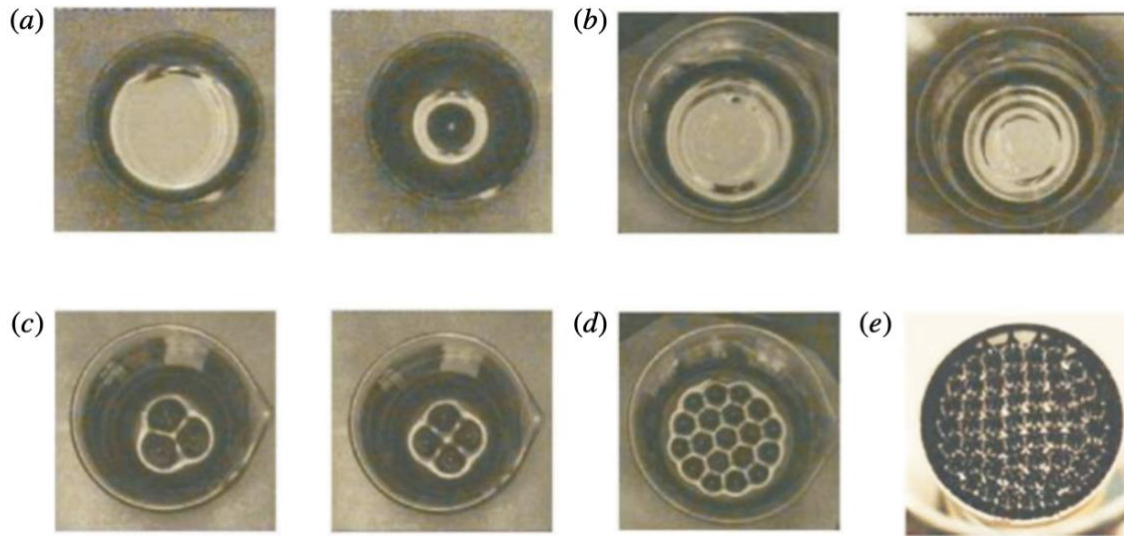
Η μεθοδολογία diffusion maps που παρουσιάστηκε παραπάνω εφαρμόζεται σε δύο μη γραμμικά προβλήματα, την αστάθεια Rosensweig και την εξίσωση Kuramoto-Sivashinsky.

3.1 Αστάθεια Rosensweig

3.1.1 Εισαγωγικά στοιχεία

Ένα ομοιόμορφο μαγνητικό πεδίο κάθετο σε μία διεπιφάνεια μεταξύ ενός μαγνητικού και ενός μη μαγνητικού ρευστού μπορεί να αποσταθεροποιήσει τη διεπιφάνεια. Η διαφορά στη μαγνήτιση μεταξύ των δύο μέσων δημιουργεί δύναμη που ευνοεί την παραμόρφωση της διεπιφάνειας προς την κατεύθυνση του πεδίου και ανταγωνίζεται τις αντίθετες δυνάμεις. Η επιφανειακή τάση αποτελεί σταθεροποιητική δύναμη, ενώ το ίδιο ισχύει και για τη βαρυντική δύναμη αν η διεπιφάνεια είναι οριζόντια με το πυκνότερο ρευστό στο κάτω μέρος της. Εφόσον η ισχύς του μαγνητικού πεδίου είναι μικρότερη από μία κρίσιμη τιμή, η ελεύθερη επιφάνεια παραμένει επίπεδη λόγω της δράσης της βαρύτητας και της επιφανειακής τάσης. Πέρα από την κρίσιμη τιμή, η μαγνητική δύναμη ανατρέπει την επιπεδότητα της διεπιφάνειας. Η αστάθεια κάθετου πεδίου, ή αστάθεια Rosensweig, συνοδεύεται από απότομη παραμόρφωση της ελεύθερης επιφάνειας και δημιουργία κορυφών στην κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου. Το σχήμα της παραμόρφωσης που προκύπτει εξαρτάται από τις συνθήκες, όπως το μέγεθος και το σχήμα του δοχείου, η ισχύς του μαγνητικού πεδίου και ο ρυθμός μεταβολής του, ή οι ιδιότητες του ρευστού, όπως η μαγνητική διαπερατότητα και η επιφανειακή τάση. Η παραμόρφωση μπορεί να είναι αξονοσυμμετρική ή δισδιάστατη, συνήθως σε εξαγωνική, ή σπανιότερα τετραγωνική διαμόρφωση [1], [14].

Στο σχήμα 3.1 φαίνονται ορισμένες από τις πιθανές παραμορφώσεις της ελεύθερης επιφάνειας του υγρού. Συγκεκριμένα, στο σχήμα 3.1(a) φαίνεται μία κορυφή, με μέγιστο ύψος στο κέντρο του δοχείου, ενώ στο σχήμα 3.1(b) η παραμόρφωση έχει μορφή δακτυλίων, με τοπικό ελάχιστο στο κέντρο. Οι δύο διαμορφώσεις που αναφέρθηκαν εμφανίζουν αξονική συμμετρία. Στα σχήματα 3.1(c-e) προτιμώνται δισδιάστατες διαμορφώσεις. Σημειώνεται ότι τα δοχεία στα σχήματα 3.1(a) και 3.1(c) έχουν την ίδια διάμετρο, αλλά τα σχήματα της παραμόρφωσης έχουν διαφορετικό μήκος κύματος λόγω των διαφορετικών φυσικών ιδιοτήτων του μαγνητικού ρευστού. Σε κάθε περίπτωση, το ρευστό κάτω από την ελεύθερη επιφάνεια παραμένει στατικό [14].

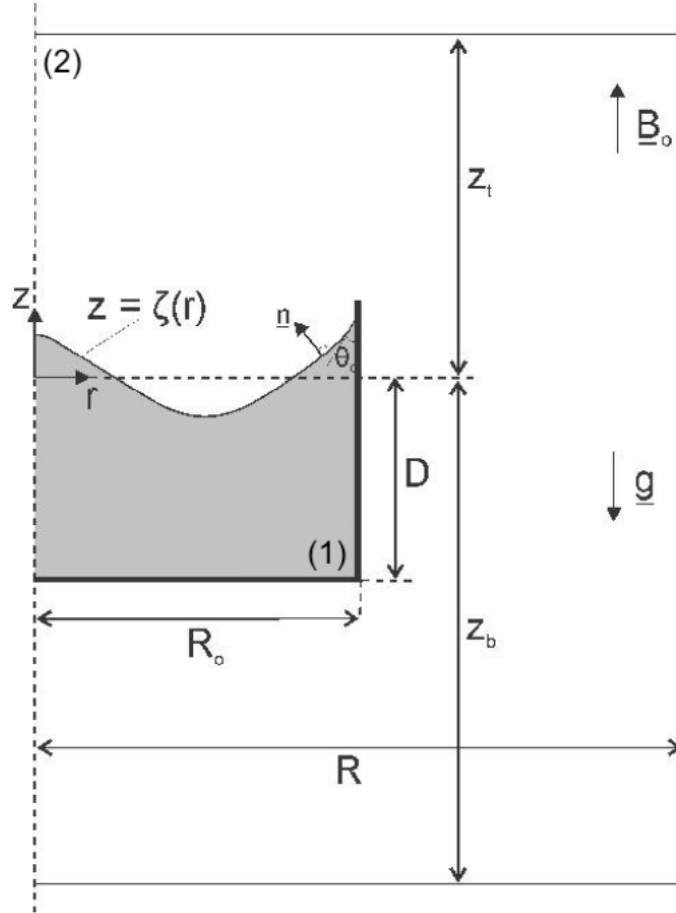


Σχήμα 3.1: Παραμόρφωση της ελεύθερης επιφάνειας μαγνητικού ρευστού σε κυλινδρικά δοχεία. (a) Μία κορυφή (ένταση μαγνητικού πεδίου 17.8 mT, ακτίνα δοχείου $R_0=18$ mm). (b) Δακτύλιοι (14 mT και 16.1 mT, $R_0=30$ mm). (c) 3 ή 4 κορυφές (16.7 mT και 17.2 mT, $R_0=18$ mm). (d) Εξαγωνική διαμόρφωση (19.3 mT, $R_0=30$ mm). (e) Τετραγωνική διαμόρφωση (18 mT, $R_0=52$ mm). Σημειώνεται ότι στο σχήμα (a) ο τριχοειδής κυματαριθμός είναι $k_c=0.533$ mm⁻¹, ενώ στα (b-e) $k_c=0.616$ mm⁻¹, με

$$k_c = \sqrt{\frac{\rho g}{\sigma}}, \text{ όπου } \rho \text{ είναι η πυκνότητα του ρευστού και } \sigma \text{ η επιφανειακή του τάση [14].}$$

3.1.2 Εξισώσεις που διέπουν το πρόβλημα

Στο σχήμα 3.2 φαίνεται ένα μικρό κυλινδρικό δοχείο με μαγνητικό ρευστό που βρίσκεται μέσα σε κατακόρυφο μαγνητικό πεδίο. Το ρευστό και ο αέρας που το περιβάλλει συμβολίζονται με (1) και (2) αντίστοιχα. Το πεδίο είναι ομοιόμορφο στην περιοχή γύρω από το δοχείο, όμως η ομοιομορφία διαταράσσεται στην περιοχή του δοχείου λόγω απομαγνητισμού από το ίδιο το ρευστό. Επομένως, το πεδίο μπορεί να θεωρηθεί ομοιόμορφο μόνο μακριά από το δοχείο [8], [14].



Σχήμα 3.2: Ένα μικρό αξονοσυμμετρικό δοχείο με μαγνητικό ρευστό μέσα σε μαγνητικό πεδίο [8].

Το στατικό μαγνητικό πεδίο, \mathbf{H} , είναι αστρόβιλο, επομένως μπορεί να παραχθεί από ένα μαγνητοστατικό δυναμικό, $\mathbf{H} = \nabla u$, εντός και εκτός του ρευστού. Σύμφωνα με το νόμο Gauss:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.1)$$

όπου \mathbf{B} είναι η μαγνητική επαγωγή και εφόσον τα υλικά είναι ισότροπα, είναι παράλληλη στο \mathbf{H} , όπως και η μαγνήτιση, \mathbf{M} :

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) \quad (3.2)$$

Η μαγνητική διαπερατότητα, μ , είναι σταθερή σε μη μαγνητικά μέσα, συγκεκριμένα $\mu_2 = \mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H m}^{-1}$, ενώ μέσα στο ρευστό εξαρτάται από το πεδίο. Επομένως, λαμβάνοντας υπόψη την εξίσωση (3.2), η εξίσωση (3.1) γράφεται ως προς το δυναμικό στα μέσα (1) και (2) [8]:

$$\nabla \cdot \mu \nabla u_1 = 0, \nabla^2 u_2 = 0 \quad (3.3a, b)$$

Η ισορροπία των δυνάμεων κατά μήκος της ελεύθερης επιφάνειας του ρευστού εκφράζεται από την μαγνητικά επαυξημένη εξίσωση Young-Laplace:

$$-g \Delta \rho z + \frac{1}{2} \mu_0 \int_0^{H_1} M(H') dH' + \sigma C = K, z = \zeta(r), 0 \leq r \leq R_0 \quad (3.4)$$

όπου g είναι η επιτάχυνση της βαρύτητας, $\Delta \rho$ η διαφορά των πυκνοτήτων του ρευστού και του αέρα, σ η επιφανειακή τάση και $\zeta = \zeta(r)$ η κατακόρυφη μετατόπιση της ελεύθερης επιφάνειας

συναρτήσει της ακτινικής συντεταγμένης. Το άνω όριο του ολοκληρώματος στον όρο της μαγνήτισης, H_1 , είναι η ένταση του πεδίου στην ελεύθερη επιφάνεια, δηλαδή για $z=\zeta(r)$. Η πίεση αναφοράς, K , είναι σταθερή στην ελεύθερη επιφάνεια [8].

Το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην ελεύθερη επιφάνεια, \mathbf{n} , και η μέση καμπυλότητα της επιφάνειας, C , είναι:

$$\mathbf{n} = \frac{-\zeta_r \mathbf{e}_r + \mathbf{e}_z}{\sqrt{1 + \zeta_r^2}} \quad (3.5)$$

$$C = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{r\zeta_r}{\sqrt{1 + \zeta_r^2}} \right) \quad (3.6)$$

όπου \mathbf{e}_r και \mathbf{e}_z είναι μοναδιαία διανύσματα στην κατεύθυνση r και z αντίστοιχα και $\zeta_r = d\zeta/dr$.

Η πίεση αναφοράς στην εξίσωση (3.4) καθορίζεται από τον περιορισμό της ασυμπίεστότητας του ρευστού:

$$2\pi \int_0^{R_0} \zeta r dr = C = const \quad (3.7)$$

Το σύστημα συντεταγμένων, δηλαδή η θέση του $z=0$, επιλέγεται έτσι ώστε $C=0$ [8].

Οι εξισώσεις (3.3), (3.4) και (3.7) πρέπει να επιλυθούν ως προς το μαγνητοστατικό δυναμικό, $u_a(r,z)$ και $u_b(r,z)$, το ύψος της ελεύθερης επιφάνειας, $\zeta(r)$ και την πίεση αναφοράς, K , με τις εξής συνοριακές συνθήκες:

$$\frac{\partial u_1}{\partial r} = \frac{\partial u_2}{\partial r} = 0, \zeta_r = 0, \text{για } r = 0 \quad (3.8a, b)$$

$$u_1 = u_2, \mu \mathbf{n} \cdot \nabla u_1 = \mu_0 \mathbf{n} \cdot \nabla u_2, \text{για } z = \zeta(r) \text{ και } 0 \leq r \leq R_0 \quad (3.9a, b)$$

$$u_1 = u_2, \mu \frac{\partial u_1}{\partial r} = \mu_0 \frac{\partial u_2}{\partial r}, \text{για } r = R_0 \text{ και } -D \leq z \leq \zeta(R_0) \quad (3.10a, b)$$

$$u_1 = u_2, \mu \frac{\partial u_1}{\partial z} = \mu_0 \frac{\partial u_2}{\partial z}, \text{για } z = -D \text{ και } 0 \leq r \leq R_0 \quad (3.11a, b)$$

$$u_2 = 0, \text{για } z = -z_b \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial z} = \frac{B_0}{\mu_0} \text{για } z = z_t, \quad \frac{\partial u_2}{\partial r} = 0 \text{για } r = R \quad (3.13a, b)$$

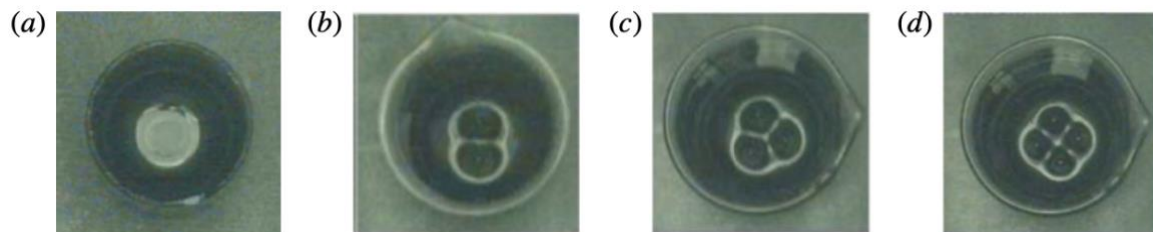
$$\zeta_r = \cot \theta_c, \text{για } r = R_0 \quad (3.14)$$

Οι εξισώσεις (3.9) αποτελούν τις συνθήκες ότι το δυναμικό και το σχήμα της ελεύθερης επιφάνειας παρουσιάζουν αξονική συμμετρία. Οι εξισώσεις (3.9-3.11) δηλώνουν τη συνέχεια του δυναμικού και της κάθετης συνιστώσας της επαγωγής σε διεπιφάνειες μεταξύ δύο μέσων με διαφορετικές μαγνητικές διαπερατότητες. Το βάθος του δοχείου, D , είναι το μέσο βάθος, το οποίο υπολογίζεται διαιρώντας τον όγκο του ρευστού με τη διατομή του δοχείου. Το δυναμικό αναφοράς ορίζεται από την εξίσωση (3.12). Οι εξισώσεις (3.13) είναι συνθήκες ότι το μαγνητικό πεδίο είναι ομοιόμορφο μακριά από το δοχείο. Η γωνία επαφής, θ_c , ορίζεται από την εξίσωση (3.14) και αντανακλά τις ιδιότητες διαβροχής του ρευστού σε επαφή με τα τοιχώματα του δοχείου [8].

Οι εξισώσεις δημιουργούν ένα μη γραμμικό πρόβλημα ελεύθερου συνόρου, λόγω της παρουσίας της ελεύθερης επιφάνειας του υγρού, η θέση της οποίας εισάγεται στις εξισώσεις και δεν είναι γνωστή εκ των προτέρων.

3.1.3 Πειραματικά αποτελέσματα

Το ρευστό τοποθετείται σε κυλινδρικό δοχείο με ακτίνα $R_0=18\text{ mm}$ και βάθος $D=10\text{ mm}$. Πριν από την εμφάνιση της αστάθειας, παρατηρείται μία παραμόρφωση με αξονική συμμετρία, σε σχήμα δακτύλιου (Σχήμα 3.3a). Μετά την εμφάνιση της αστάθειας, αυτή η παραμόρφωση αντικαθίσταται από παραμορφώσεις με 2, 3 ή 4 κορυφές (Σχήμα 3.3b-d). Μία αργή αύξηση της ισχύος του μαγνητικού πεδίου (0.1 mT s^{-1}) προκαλεί παραμόρφωση με 2 κορυφές, ενώ μία απότομη βηματική αύξηση ευνοεί την εμφάνιση 3 ($0\text{ mT}\rightarrow 16.7\text{ mT}$) ή 4 κορυφών ($0\text{ mT}\rightarrow 17.4\text{ mT}$) [14].

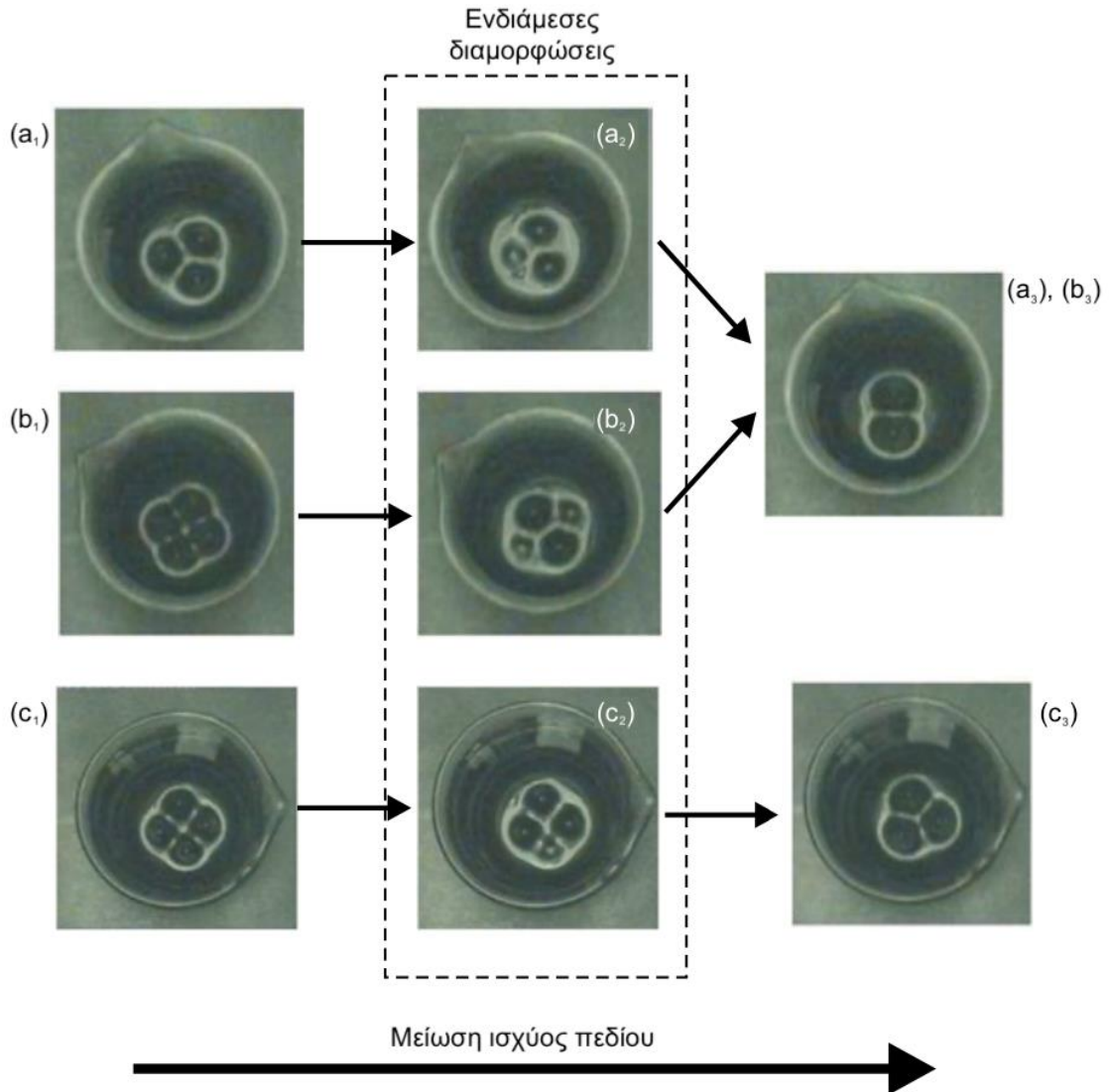


Σχήμα 3.3: Παραμορφώσεις της ελεύθερης επιφάνειας μαγνητικού υγρού σε κυλινδρικό δοχείο με ακτίνα $R_0=18\text{ mm}$ και βάθος $D=10\text{ mm}$. Παρατηρείται ένας δακτύλιος (a) πριν από την εμφάνιση της αστάθειας και 2 (b), 3 (c) και 4 κορυφές (d) μετά την εμφάνιση της αστάθειας [14].

Με αργή μείωση της ισχύος του πεδίου, οι 4 κορυφές υποχωρούν και σε μία κρίσιμη τιμή του πεδίου μετατρέπονται σε 2 κορυφές. Περαιτέρω μείωση της ισχύος προκαλεί την κατάρρευση των 2 κορυφών και το σχηματισμό δακτυλίων. Αυτή η σειρά μεταβάσεων επηρεάζεται και από το βάθος του δοχείου. Για μεγάλο βάθος, 3 από τις 4 κορυφές παραμένουν με αργή μείωση του πεδίου, ενώ μεγαλύτερη μείωση οδηγεί σε 2 κορυφές και στη συνέχεια σε δακτυλίους.

Επομένως, οι 2 κορυφές προτιμώνται με αργή αύξηση του πεδίου μετά την εμφάνιση της αστάθειας, ή με αργή μείωση σε διαμόρφωση με 3 ή 4 κορυφές, ενώ περαιτέρω αύξηση μεταβάλλει μόνο το ύψος των κορυφών. Έχει παρατηρηθεί ότι μόνο μία απότομη αύξηση της ισχύος οδηγεί σε 3 ή 4 κορυφές, ξεπερνώντας τη διαμόρφωση των 2 κορυφών [14].

Η διαμόρφωση 3 κορυφών παραμένει σταθερή με αργή μείωση της ισχύος μέχρι μία κρίσιμη τιμή και σε εκείνο το σημείο, εμφανίζεται διαμόρφωση 2 κορυφών (Σχήμα 3.4a). Στην περίπτωση των 4 κορυφών, η μείωση του πεδίου οδηγεί στην εμφάνιση 2 ή 3 κορυφών (Σχήμα 3.4b,c). Οι παρατηρούμενες μεταβάσεις που φαίνονται στο σχήμα 3.4 είναι ευαίσθητες στην ταχύτητα μεταβολής του μαγνητικού πεδίου, ενώ οι ενδιάμεσες διαμορφώσεις (Σχήμα 3.4a₂,b₂,c₂) είναι ασταθείς και δεν διατηρούνται ακόμα και αν η ισχύς του πεδίου είναι σταθερή [14].



Σχήμα 3.4: Μετάβαση της ελεύθερης επιφάνειας του ρευστού από 3 σε 2 κορυφές (a), από 4 σε 2 κορυφές (b) και από 4 σε 3 κορυφές (c) [14].

3.2 Εξίσωση Kuramoto-Sivashinsky

3.2.1 Εισαγωγικά στοιχεία

Η εξίσωση Kuramoto-Sivashinsky (KSE):

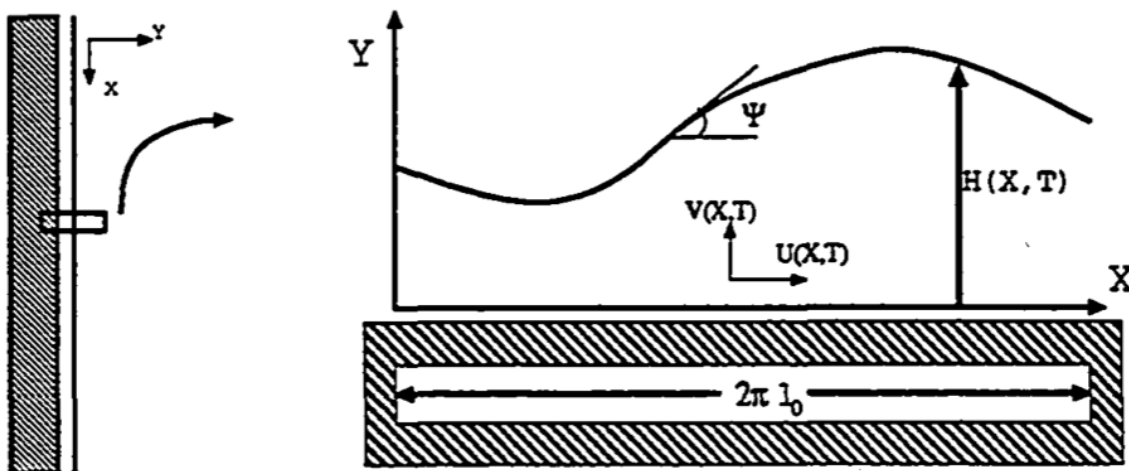
$$u_t + 4u_{xxxx} + \alpha(uu_x + u_{xx}) = 0 \quad (3.15)$$

προκύπτει ως εξίσωση πλάτους για διεπιφανειακές αστάθειες σε μία μεγάλη ποικιλία φυσικών πλαισίων, όπως σε συστήματα εξισώσεων αντίδρασης-διάχυσης ή αστάθειες θερμικής διάχυσης σε στρωτά μέτωπα φλόγας [10]. Η KSE μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της θέσης της διεπιφάνειας σε μία λεπτή μεμβράνη υγρού που ρέει σε κεκλιμένο επίπεδο. Σε αυτή την περίπτωση, το $U(x,t)$ αντιπροσωπεύει το ύψος της διεπιφάνειας (εκφραζόμενο ως απόκλιση από τη λύση επίπεδης μεμβράνης), ενώ η παράμετρος α μπορεί να θεωρηθεί ως το τετράγωνο ενός χαρακτηριστικού μήκους ή το αντίστροφο της επιφανειακής τάσης [2].

Τόσο η KSE, όσο και τα φυσικά συστήματα που αναφέρθηκαν εμφανίζουν πληθώρα σημαντικών δυναμικών συμπεριφορών, όπως περιοδικές ή χαοτικές λύσεις. Επομένως, η KSE έχει χρησιμοποιηθεί εκτενώς στην προσπάθεια κατανόησης της πολύπλοκης δυναμικής συμπεριφοράς που σχετίζεται με αυτά τα συστήματα [10], [2].

3.2.2 Μαθηματική διατύπωση του προβλήματος

Από τις εξισώσεις συνέχειας και Navier-Stokes, προκύπτει ότι η KSE περιγράφει την εξέλιξη μονοδιάστατων κυμάτων στην επιφάνεια μίας λεπτής μεμβράνης υγρού που ρέει σε κεκλιμένο επίπεδο. Το πεδίο λύσεων ορίζεται ως το διάστημα $X \in [0, 2\pi l_0]$, ενώ το σύστημα συντεταγμένων απεικονίζεται στο σχήμα 3.5. Οι συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιούνται είναι περιοδικές και όλες οι ιδιότητες του ρευστού θεωρούνται ίδιες για $X=0$ και $X=2\pi l_0$. Για την απλοποίηση του προβλήματος, θεωρείται ότι υπάρχει συμμετρία στην κατεύθυνση Z και όλα τα κύματα θεωρούνται μονοδιάστατα [2].



Σχήμα 3.5: Σύστημα συντεταγμένων που χρησιμοποιείται για την εξαγωγή της KSE [2].

Αναζητούνται εξισώσεις που περιγράφουν τη θέση της διεπιφάνειας, $H(X, T)$. Οι εξισώσεις που διέπουν το πρόβλημα είναι οι εξισώσεις συνέχειας και Navier-Stokes σε 2 διαστάσεις:

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0 \quad (3.16)$$

$$\rho \left(\frac{\partial U}{\partial T} + U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} \right) = -\frac{\partial P}{\partial X} + \rho g + \mu \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \right) \quad (3.17)$$

$$\rho \left(\frac{\partial V}{\partial T} + U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} \right) = -\frac{\partial P}{\partial Y} + \mu \left(\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} \right) \quad (3.18)$$

όπου:

U: ταχύτητα στην κατεύθυνση X

V: ταχύτητα στην κατεύθυνση Y

P: πίεση

P: πυκνότητα ρευστού

μ: ιξώδες ρευστού

g: επιτάχυνση βαρύτητας

Για $Y=0$ εφαρμόζεται συνοριακή συνθήκη μη ολίσθησης:

$$Y = 0: U = V = 0$$

Για $Y=H(X,T)$ οι κάθετες και διατμητικές τάσεις ισορροπούν στη διεπιφάνεια:

$$Y = H: \tau_{n,l} = \tau_{n,g} - \frac{G \frac{\partial^2 H}{\partial X^2}}{\left(1 + \left(\frac{\partial H}{\partial X}\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}} \quad (3.19)$$

$$\tau_{s,l} = \tau_{s,g} \quad (3.20)$$

όπου τ_n και τ_s είναι οι κάθετες και οι διατμητικές τάσεις, οι δείκτες l και g υποδηλώνουν την υγρή και την αέρια φάση αντίστοιχα και G είναι η επιφανειακή τάση του ρευστού.

Οι τάσεις στην υγρή φάση είναι ίσες με:

$$\begin{aligned} \tau_{n,l} &= \left(-P + 2\mu \frac{\partial V}{\partial Y}\right) \cos^2 \Psi + \left(-P + 2\mu \frac{\partial U}{\partial X}\right) \sin^2 \Psi - \mu \left(\frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X}\right) \sin 2\Psi \\ \tau_{s,l} &= \mu \left(\frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X}\right) \cos 2\Psi + \mu \left(\frac{\partial V}{\partial Y} - \frac{\partial U}{\partial X}\right) \sin 2\Psi \end{aligned}$$

όπου Ψ είναι η γωνία της διεπιφάνειας, με $\tan \Psi = \frac{\partial H}{\partial X}$.

Η κάθετη και η διατμητική τάση στην αέρια φάση θεωρούνται αμελητέες, άρα οι σχέσεις (3.19) και (3.20) γίνονται:

$$\begin{aligned} &\left(-P + 2\mu \frac{\partial V}{\partial Y}\right) \cos^2 \Psi + \left(-P + 2\mu \frac{\partial U}{\partial X}\right) \sin^2 \Psi - \mu \left(\frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X}\right) \sin 2\Psi \\ &= -\frac{G \frac{\partial^2 H}{\partial X^2}}{\left(1 + \left(\frac{\partial H}{\partial X}\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}} \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\mu \left(\frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X}\right) \cos 2\Psi + \mu \left(\frac{\partial V}{\partial Y} - \frac{\partial U}{\partial X}\right) \sin 2\Psi = 0 \quad (3.22)$$

Στη θέση $Y=H$, η ταχύτητα του ρευστού είναι ίση με το ρυθμό μεταβολής της θέσης της διεπιφάνειας, $H(X,T)$. Αυτό εκφράζεται στην κινηματική συνοριακή συνθήκη:

$$V(Y = H) = \frac{D}{DT} H(X, T) = \left[\frac{\partial H}{\partial T} + U \frac{\partial H}{\partial X}\right]_{Y=H} \quad (3.23)$$

Η ανάλυση περιορίζεται σε ορισμένες φυσικές καταστάσεις, ώστε να είναι δυνατή η αδιαστατοποίηση των εξισώσεων:

1. Η μεμβράνη του ρευστού είναι λεπτή
2. Το μήκος των κυμάτων είναι μεγάλο ($\frac{\partial H}{\partial X} \ll 1$)
3. Το μέσο ύψος της μεμβράνης είναι πολύ μεγαλύτερο από την απόκλιση από αυτό.

Εφόσον λαμβάνονται υπόψη μόνο τα κύματα με μεγάλο μήκος, η επίλυση των εξισώσεων (3.16-3.23) στην οριακή περίπτωση της επίπεδης μεμβράνης ($\frac{\partial H}{\partial X} = 0$) παρέχει χρήσιμες χαρακτηριστικές ποσότητες για την αδιαστατοποίηση των εξισώσεων. Η επίλυση αποδίδει τις ιδιότητες επίπεδης μεμβράνης, $\hat{U}(Q, Y)$ και $\hat{H}(Q)$, όπου Q είναι η ογκομετρική παροχή ανά μονάδα πλάτους. Το \hat{H} επιλέγεται για την αδιαστατοποίηση των Y και H, ενώ το U

αδιαστατοποιείται με το μέσο $\hat{U} = \frac{Q}{\hat{H}}$. Επειδή η ανάλυση αφορά διεπιφανειακά κύματα, το X αδιαστατοποιείται με το μήκος κύματος, l_0 . Για το χρόνο, T, χρησιμοποιείται ο χρόνος παραμονής, $\frac{l_0 \hat{H}}{Q}$, ο οποίος προκύπτει από τη διαίρεση του χαρακτηριστικού μήκους στην κατεύθυνση X με τη χαρακτηριστική ταχύτητα U. Η ταχύτητα V αδιαστατοποιείται με το $\frac{Q}{l_0}$ (διαίρεση χαρακτηριστικού μήκους στην κατεύθυνση Y με χαρακτηριστικό χρόνο). Τέλος, η πίεση, P, αδιαστατοποιείται με το $\rho g l_0$.

Οι αδιάστατες μεταβλητές προκύπτουν από τη διαίρεση των διαστατικών μεταβλητών με τις αντίστοιχες χαρακτηριστικές ποσότητες:

$$\begin{aligned}x &= \frac{X}{l_0} \\y &= \frac{Y}{\hat{H}} \\t &= \frac{T}{l_0 \hat{H} / Q} \\u &= \frac{U}{Q / \hat{H}} \\v &= \frac{V}{Q / l_0} \\p &= \frac{P}{\rho g l_0} \\h &= \frac{H}{\hat{H}}\end{aligned}$$

Με αντικατάσταση των αδιάστατων μεταβλητών στις εξισώσεις (3.16-3.23):

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.24)$$

$$Re \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -F \frac{\partial p}{\partial x} + F + (\varepsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}) \quad (3.25)$$

$$Re^3 \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -F \frac{\partial p}{\partial y} + \varepsilon^2 (\varepsilon^2 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}) \quad (3.26)$$

με συνοριακές συνθήκες:

$$y = 0: u = v = 0 \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned}y = h: -p + \frac{2\varepsilon^2}{F} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \cos^2 \Psi + \frac{\partial u}{\partial x} \sin^2 \Psi \right) - \frac{\varepsilon}{F} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \varepsilon^2 \frac{\partial v}{\partial x} \right) \sin 2\Psi \\= \frac{\varepsilon^2 W h_{xx}}{(1 + \varepsilon^2 (h_x)^2)^{\frac{3}{2}}}\end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \varepsilon^2 \frac{\partial v}{\partial x} \right) \cos 2\Psi + \varepsilon \left(\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) \sin 2\Psi = 0 \quad (3.29)$$

όπου:

$$R = \frac{\rho Q}{\mu}$$

$$F = \frac{\rho g \hat{H}^3}{\mu Q}$$

$$W = \frac{G}{\rho g \hat{H}^2}$$

$$\varepsilon = \frac{\hat{H}}{l_0}$$

Η κινηματική συνοριακή συνθήκη (3.23) γίνεται:

$$v(y = h) = h_t + h_x u(y = h) \quad (3.30)$$

Η αδιαστατοποίηση των εξισώσεων εισήγαγε μία παράμετρο ε , η οποία είναι μικρή για μεγάλα κύματα και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για το ασυμπτωτικό ανάπτυγμα των εξαρτημένων μεταβλητών:

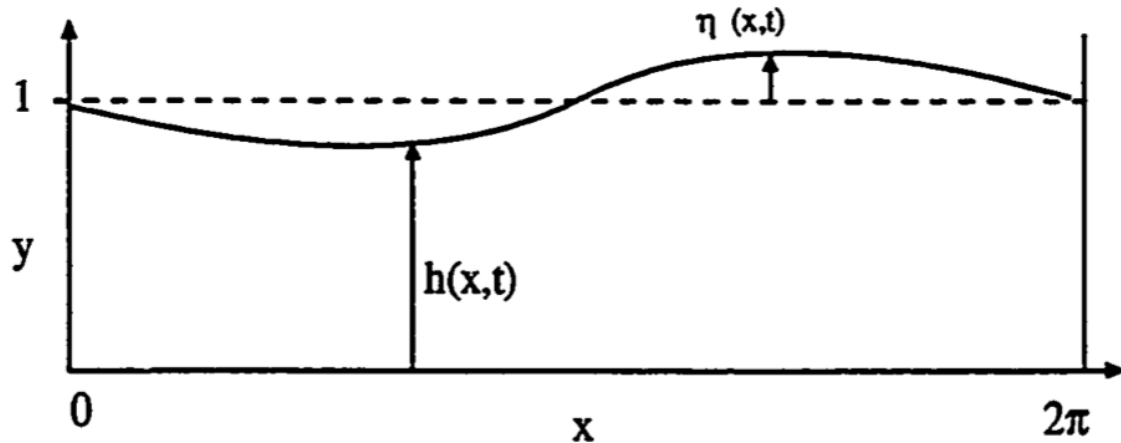
$$u \approx u_0(x, y, t) + \varepsilon u_1(x, y, t) + \varepsilon^2 u_2(x, y, t) + \dots$$

$$v \approx v_0(x, y, t) + \varepsilon v_1(x, y, t) + \varepsilon^2 v_2(x, y, t) + \dots$$

$$p \approx p_0(x, y, t) + \varepsilon p_1(x, y, t) + \varepsilon^2 p_2(x, y, t) + \dots$$

Ορίζεται μία νέα μεταβλητή απόκλισης, $\eta(x, t)$, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.6:

$$h \approx 1 + \varepsilon \eta(x, t) + O(\varepsilon^2)$$



Σχήμα 3.6: Απεικόνιση της μεταβλητής απόκλισης, $\eta(x, t)$ [2].

Αναπτύσσονται οι τριγωνομετρικοί όροι:

$$\tan \Psi \approx 0 + \Psi = \frac{\partial H}{\partial X} = \varepsilon \frac{\partial h}{\partial x} = \varepsilon^2 \frac{\partial \eta}{\partial x} \Rightarrow \Psi \approx O(\varepsilon^2)$$

Επομένως:

$$\cos 2\Psi \approx 1 + O(\Psi) = \frac{\partial H}{\partial X} = \varepsilon \frac{\partial h}{\partial x} = \varepsilon^2 \frac{\partial \eta}{\partial x} \Rightarrow \Psi \approx O(\varepsilon^2)$$

$$\cos^2 \Psi \approx 1 + O(\Psi^2) = \frac{\partial H}{\partial X} = \varepsilon \frac{\partial h}{\partial x} = \varepsilon^2 \frac{\partial \eta}{\partial x} \Rightarrow \Psi \approx O(\varepsilon^2)$$

$$\sin 2\Psi \approx 0 + O(\Psi) = \frac{\partial H}{\partial X} = \varepsilon \frac{\partial h}{\partial x} = \varepsilon^2 \frac{\partial \eta}{\partial x} \Rightarrow \Psi \approx O(\varepsilon^2)$$

$$\sin^2 \Psi \approx 0 + O(\Psi^2) = \frac{\partial H}{\partial X} = \varepsilon \frac{\partial h}{\partial x} = \varepsilon^2 \frac{\partial \eta}{\partial x} \Rightarrow \Psi \approx O(\varepsilon^2)$$

Με αντικατάσταση στις εξισώσεις (3.24-3.30) προκύπτει:

$$\frac{\partial u_0}{\partial x} + \frac{\partial v_0}{\partial y} + \varepsilon \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial v_1}{\partial y} \right) + O(\varepsilon^2) = 0 \quad (3.31)$$

$$\left(F - F \frac{\partial p_0}{\partial x} + \frac{\partial^2 u_0}{\partial y^2} \right) + \varepsilon \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} - F \frac{\partial p_1}{\partial x} - R \left(\frac{\partial u_0}{\partial t} + u_0 \frac{\partial u_0}{\partial x} + v_0 \frac{\partial u_0}{\partial y} \right) \right) + O(\varepsilon^2) = 0 \quad (3.32)$$

$$F \frac{\partial p_0}{\partial y} + \varepsilon F \frac{\partial p_1}{\partial y} + O(\varepsilon^2) = 0 \quad (3.33)$$

$$y = 0: \quad u_0 + \varepsilon u_1 + O(\varepsilon^2) = v_0 + \varepsilon v_1 + O(\varepsilon^2) = 0 \quad (3.34)$$

$$y = 1 + \varepsilon \eta(x): p_0 + \varepsilon \left(p_1 + \frac{\varepsilon^2 W \varepsilon \eta_{xx}}{(1 + \varepsilon^4 (\eta_x)^2)^{\frac{3}{2}}} \right) + O(\varepsilon^2) = 0 \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial u_0}{\partial y} + \varepsilon \frac{\partial u_1}{\partial x} + O(\varepsilon^2) = 0 \quad (3.36)$$

Η κινηματική συνοριακή συνθήκη γίνεται:

$$\varepsilon \eta_t + (u_0 \varepsilon \eta_x - v_0) + \varepsilon (u_1 \varepsilon \eta_x - v_1) + O(\varepsilon^3) = 0 \quad (3.37)$$

Συλλέγοντας τους όρους για κάθε δύναμη του ε στις εξισώσεις (3.31-3.36) προκύπτουν οι εξισώσεις μηδενικής και πρώτης τάξης:

$$\frac{\partial u_0}{\partial x} = -\frac{\partial v_0}{\partial y}$$

$$\frac{\partial^2 u_0}{\partial y^2} = F \frac{\partial p_0}{\partial x} - F$$

$$\frac{\partial p_0}{\partial y} = 0$$

$$y = 0: \quad u_0 = v_0 = 0$$

$$y = 1 + \varepsilon \eta(x): \quad p_0 = 0$$

$$\frac{\partial u_0}{\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x} = -\frac{\partial v_1}{\partial y}$$

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} = F \frac{\partial p_1}{\partial x} + R \left(\frac{\partial u_0}{\partial t} + u_0 \frac{\partial u_0}{\partial x} + v_0 \frac{\partial u_0}{\partial y} \right)$$

$$\frac{\partial p_1}{\partial y} = 0$$

$$\begin{aligned}
y = 0: & \quad u_1 = v_1 = 0 \\
y = 1 + \varepsilon\eta(x): & \quad p_1 = -\frac{\varepsilon^2 W \varepsilon \eta_{xx}}{(1 + \varepsilon^4 (\eta_x)^2)^{\frac{3}{2}}} \\
& \quad \frac{\partial u_1}{\partial y} = 0
\end{aligned}$$

Οι λύσεις για τα u_0 , v_0 , u_1 και v_1 αντικαθίστανται στην κινηματική συνοριακή συνθήκη, ώστε να ληφθεί η εξίσωση πλάτους για το $h(x,t)$.

$$\begin{aligned}
p_0 &= 0 \\
u_0 &= F(y(1 + \varepsilon\eta) - \frac{y^2}{2}) \\
v_0 &= \frac{-Fy^2}{2} \varepsilon \eta_x \\
p_1 &= -\frac{\varepsilon^2 W \varepsilon \eta_{xx}}{(1 + \varepsilon^4 (\eta_x)^2)^{\frac{3}{2}}} \\
u_1 &= \varepsilon \left[\frac{F \varepsilon^2 W \varepsilon \eta_{xx}}{(1 + \varepsilon^4 (\eta_x)^2)^{\frac{3}{2}}} \right]_x \left(y - \frac{y^2}{2} \right) - \frac{RF\varepsilon}{2} \left(\eta_t \left(\frac{y - y^3}{3} \right) + \frac{F\eta_x}{6} \left(y - \frac{y^4}{4} \right) \right) + O(\varepsilon^2) \\
-v_1 &= \frac{\varepsilon}{2} \left[\frac{F \varepsilon^2 W \varepsilon \eta_{xx}}{(1 + \varepsilon^4 (\eta_x)^2)^{\frac{3}{2}}} \right]_{xx} \left(y^2 - \frac{y^3}{3} \right) - \frac{RF\varepsilon}{4} \left(\eta_{xt} \left(y^2 - \frac{y^4}{6} \right) + \frac{F\eta_{xx}}{12} \left(y^2 - \frac{y^5}{10} \right) \right) \\
& \quad + O(\varepsilon^2)
\end{aligned}$$

Τα u_0 , v_0 , u_1 και v_1 υπολογίζονται στο $y=1+\varepsilon\eta(x,t)$. Αρχικά αντικαθίσταται το:

$$v_0(y = 1 + \varepsilon\eta) = \frac{-F\varepsilon\eta_x}{2} (1 + 2\varepsilon\eta + O(\varepsilon^2))$$

στην κινηματική συνοριακή συνθήκη, οπότε προκύπτει:

$$\begin{aligned}
\varepsilon(\eta_t + u_0\eta_x + \frac{\varepsilon\eta_x}{2} + F\varepsilon\eta\eta_x - v_1 + \varepsilon\eta_x u_1) + O(\varepsilon^3) &= 0 \Rightarrow \\
\eta_t + u_0\eta_x + \frac{\varepsilon\eta_x}{2} + F\varepsilon\eta\eta_x - v_1 + \varepsilon\eta_x u_1 + O(\varepsilon^2) &= 0 \tag{3.38}
\end{aligned}$$

Για τα u_0 και v_1 διατηρούνται οι όροι τάξης μέχρι $O(\varepsilon)$, ενώ για το u_1 μέχρι $O(1)$, καθώς πολλαπλασιάζεται ήδη με ε . Λαμβάνοντας υπόψη ότι:

$$y^n = (1 + \varepsilon\eta)^n = 1 + n\varepsilon\eta + O(\varepsilon^2)$$

προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned}
u_0(y = 1 + \varepsilon\eta) &= \frac{F}{2} (1 + \varepsilon\eta)^2 = \frac{F}{2} + F\varepsilon\eta + O(\varepsilon^2) \\
u_1(y = 1 + \varepsilon\eta) &= O(\varepsilon)
\end{aligned}$$

$$v_1(y = 1 + \varepsilon\eta) = -\varepsilon \left(\left[\frac{F\varepsilon^2 W\varepsilon\eta_{xx}}{(1 + \varepsilon^4(\eta_x)^2)^{\frac{3}{2}}} \right]_{xx} - RF \left(\frac{5\eta_{xt}}{24} + \frac{3F\eta_{xx}}{40} \right) \right) + O(\varepsilon^2)$$

Επομένως η εξίσωση (3.38) γίνεται:

$$\eta_t + F\eta_x + 2F\varepsilon\eta\eta_x + \varepsilon F \left(\left[\frac{\varepsilon^2 W\varepsilon\eta_{xx}}{3(1 + \varepsilon^4(\eta_x)^2)^{\frac{3}{2}}} \right]_{xx} - R \left(\frac{5\eta_{xt}}{24} + \frac{3F\eta_{xx}}{40} \right) \right) + O(\varepsilon^2) = 0 \quad (3.39)$$

Με παραγώγιση της εξίσωσης (3.39) προκύπτει ότι:

$$\eta_{xt} = -F\eta_{xx} + O(\varepsilon)$$

Επομένως η εξίσωση (3.39) γίνεται:

$$\eta_t + F\eta_x + \varepsilon F \left(2\eta\eta_x + \frac{2RF\eta_{xx}}{15} + \frac{\varepsilon^2 W}{3} \left[\frac{\eta_{xx}}{(1 + \varepsilon^4(\eta_x)^2)^{\frac{3}{2}}} \right]_{xx} \right) + O(\varepsilon^2) = 0 \quad (3.40)$$

Αναμένεται ότι η επιφάνεια του υγρού θα έχει κινούμενα κύματα με πλάτος που μεταβάλλεται με το χρόνο. Για την απομόνωση του μεταβαλλόμενου πλάτους, είναι επιθυμητή η απαλοιφή της κυρίαρχης μεταφορικής κίνησης με αλλαγή του συστήματος αναφοράς. Διατηρώντας μόνο τους όρους τάξης $O(1)$, η εξίσωση (3.40) γίνεται:

$$\eta_t + F\eta_x = 0$$

η οποία έχει ως λύση κύματα που κινούνται με ταχύτητα F :

$$\eta_t + F\eta_x = 0$$

Η λύση $\eta(x,t)=0$ διαταράσσεται με ένα μικρό περιοδικό κύμα που κινείται με ταχύτητα C :

$$\eta(x, t) = 0 + \varepsilon a(t)e^{ik(x-ct)}$$

και η εξίσωση (3.40) γίνεται:

$$\dot{a} + \varepsilon F \left(\frac{-2RFk^2}{15} + \frac{\varepsilon^2 Wk^4}{3} \right) a + ika(F - C) = 0$$

Το πραγματικό και το φανταστικό τμήμα πρέπει να είναι ίσα με 0, άρα:

$$C = F$$

$$a(t) = a(t=0)e^{\varepsilon b(k)t}$$

$$b(k) = \frac{-2RFk^2}{15} + \frac{\varepsilon^2 Wk^4}{3}$$

Για μικρό t :

$$a(t) = a(t=0)(1 + \varepsilon h(k)t + O(\varepsilon^2))$$

Το πλάτος του κύματος μεταβάλλεται αργά ($O(\varepsilon)$) σε σχέση με τη μεταφορική κίνηση ($O(1)$). Επομένως, γίνεται αλλαγή σε νέο σύστημα αναφοράς που κινείται με ταχύτητα F , ενώ η μεταβλητή του χρόνου αλλάζει ώστε το πλάτος να μεταβάλλεται με ρυθμό $O(1)$:

$$\eta(x, t) = \frac{RF}{15} \varphi(x - Ft, \varepsilon t) = \frac{RF}{15} \varphi(\xi, \bar{t})$$

Η εξίσωση πλάτους γίνεται:

$$\varphi_{\bar{t}} + \frac{2RF^2}{15}(\varphi\varphi_{\xi} + \varphi_{\xi\xi}) + \frac{\varepsilon^2 WF}{3} \left[\frac{\varphi_{\xi\xi}}{\left(1 + \varepsilon^4 \left(\frac{2RF^2}{15}\right)^2 \varphi_{\xi}^2\right)^{\frac{3}{2}}} \right]_{\xi\xi} + O(\varepsilon) = 0$$

Το F είναι ίσο με 3 επειδή $\hat{H} = \left(\frac{3Q\mu}{\rho g}\right)^{\frac{1}{3}}$, ενώ η μεταβλητή του χρόνου τροποποιείται για την απλοποίηση της εξίσωσης:

$$\tau = \frac{\varepsilon^2 WF}{12} \bar{t}$$

Επομένως, η εξίσωση πλάτους γίνεται:

$$\varphi_{\tau} + \alpha(\varphi\varphi_{\xi} + \varphi_{\xi\xi}) + 4 \left[\frac{\varphi_{\xi\xi}}{\left(1 + \varepsilon^4 \beta \varphi_{\xi}^2\right)^{\frac{3}{2}}} \right]_{\xi\xi} = 0$$

όπου:

$$\alpha = \frac{24\rho^2 g Q l_0^2}{\mu G}$$

$$\beta = \frac{36\rho^2 Q^2}{25\mu^2}$$

Ο όρος $\left(1 + \varepsilon^4 \beta \varphi_{\xi}^2\right)^{\frac{3}{2}}$ αναπτύσσεται ως εξής:

$$\left(1 + \varepsilon^4 \beta \varphi_{\xi}^2\right)^{\frac{3}{2}} \approx 1 + O(\varepsilon^4)$$

Επομένως προκύπτει η KSE [2]:

$$\varphi_{\tau} + \alpha(\varphi\varphi_{\xi} + \varphi_{\xi\xi}) + 4\varphi_{\xi\xi\xi\xi} = 0 \quad (3.41)$$

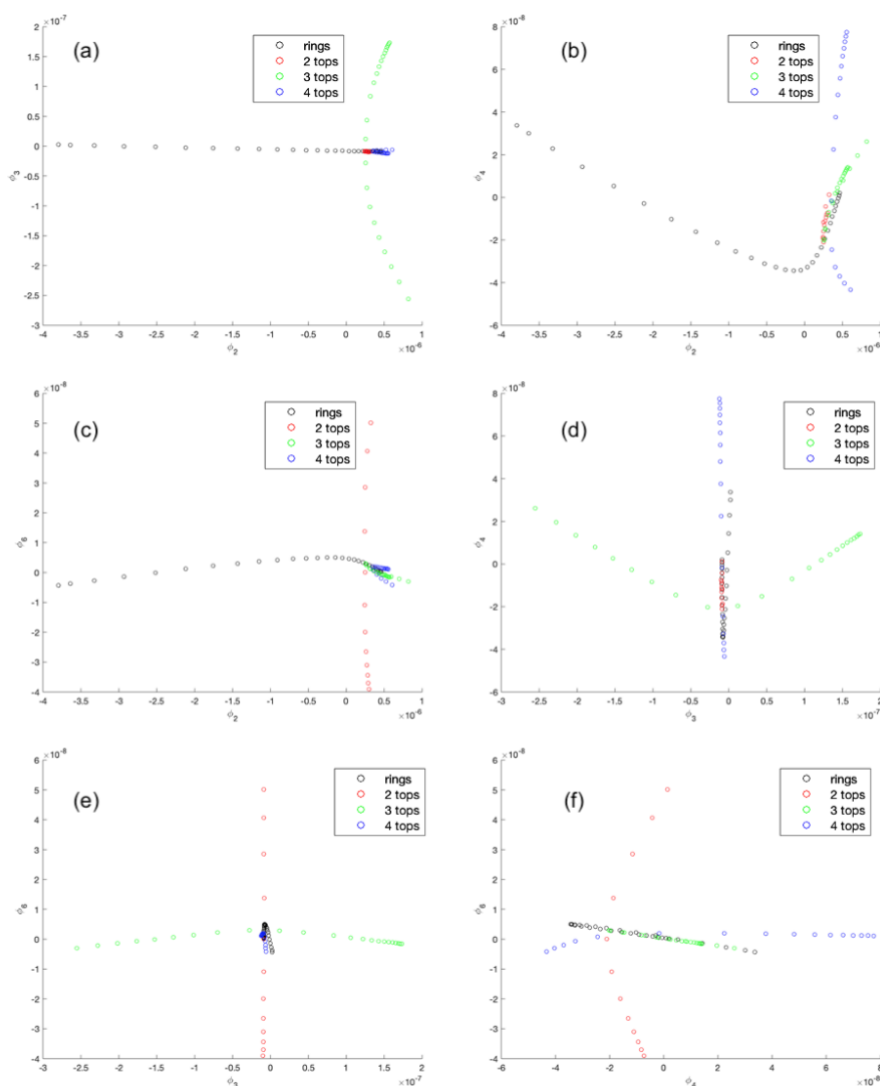
4. Αποτελέσματα

4.1 Αστάθεια Rosensweig

Η μεθοδολογία που παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 2 εφαρμόζεται στο πρόβλημα της αστάθειας Rosensweig. Το σύνολο δεδομένων που χρησιμοποιείται αποτελείται από $M=81$ σημεία που προέκυψαν από προσομοιώσεις του συστήματος για διαφορετικές συνθήκες. Το σύνολο των δεδομένων αποτελείται από 4 κλάδους, οι οποίοι αντιστοιχούν στον σχηματισμό δακτυλίου (30 σημεία), 2 κορυφών (12 σημεία), 3 κορυφών (23 σημεία) και 4 κορυφών (16 σημεία) στην ελεύθερη επιφάνεια του ρευστού. Ο αριθμός των συντεταγμένων είναι $N=296622$ (293301 για το μαγνητικό πεδίο και 3321 για την ελεύθερη επιφάνεια).

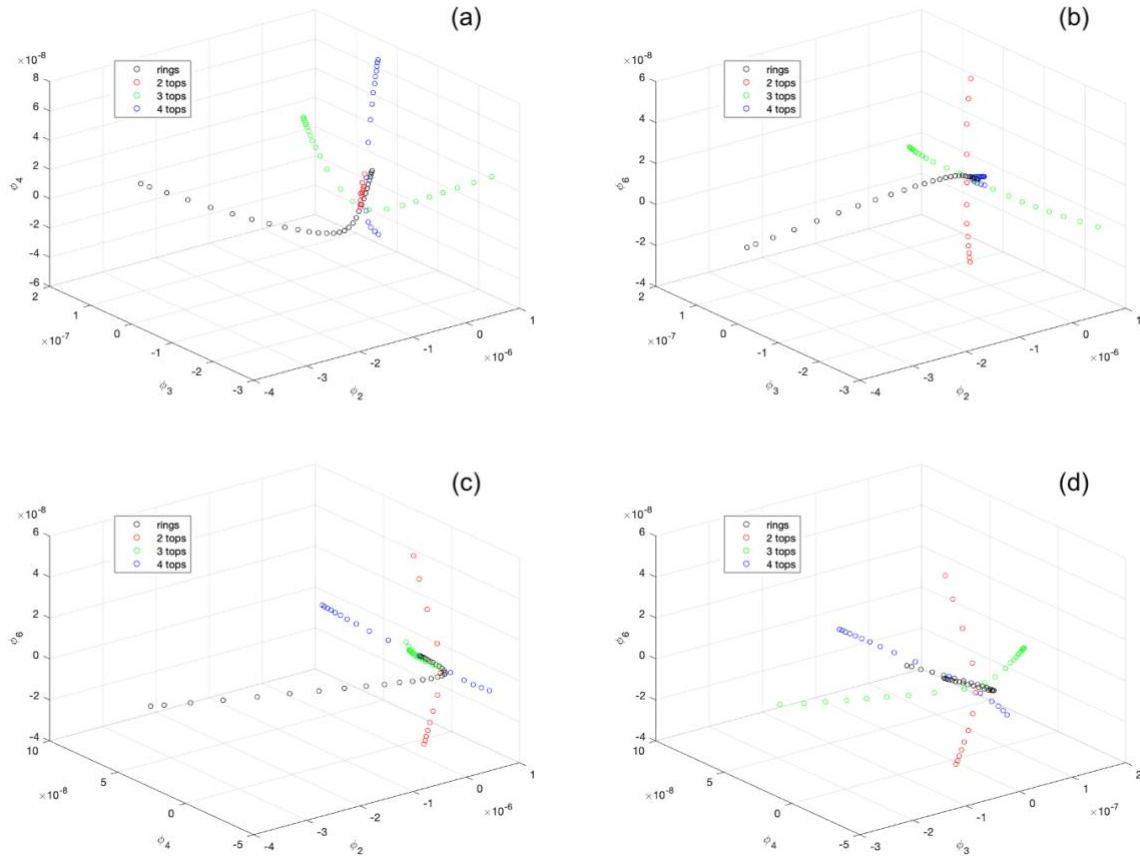
4.1.1 Diffusion maps – Επιλογή ανεξάρτητων ιδιοδιανυσμάτων

Μέσω των εξισώσεων (2.1-2.4) υπολογίζονται οι συντεταγμένες των diffusion maps, ϕ_i , από τις οποίες παραμετροποιείται η τετραδιάστατη πολλαπλότητα στην οποία ανήκουν τα σημεία. Η παράμετρος ϵ μπορεί να επιλεγεί από το εύρος 10^3-10^7 . Σε αυτή την περίπτωση επιλέγεται $\epsilon=10^4$. Από τα σχήματα 4.1(a-f) φαίνεται ότι οι συντεταγμένες ϕ_2 , ϕ_3 , ϕ_4 και ϕ_6 είναι κατάλληλες για την παραμετροποίηση.



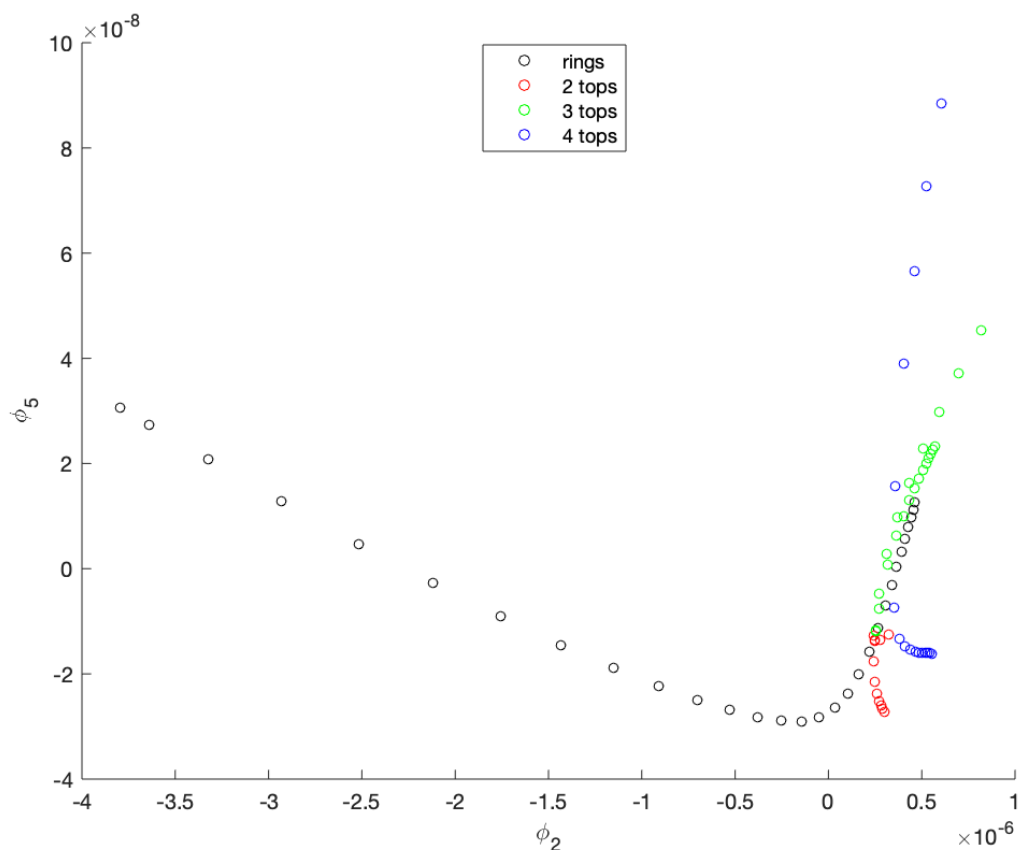
Σχήμα 4.1: Διαγράμματα συντεταγμένων DMAP: (a) ϕ_2 - ϕ_3 , (b) ϕ_2 - ϕ_4 , (c) ϕ_2 - ϕ_6 , (d) ϕ_3 - ϕ_4 , (e) ϕ_3 - ϕ_6 , (f) ϕ_4 - ϕ_6 . Φαίνονται οι 4 κλάδοι που αποτελούν το σύνολο των δεδομένων, οι οποίοι αντιστοιχούν σε σχηματισμό δακτυλίου (μαύρο), 2 κορυφών (κόκκινο), 3 κορυφών (πράσινο) και 4 κορυφών (μπλε).

Τα διδιάστατα διαγράμματα αποδεικνύουν ότι αυτές οι 4 συντεταγμένες αντιπροσωπεύουν νέες κατευθύνσεις στην πολλαπλότητα χαμηλής διάστασης. Στα σχήματα 4.2(a-d) παρίστανται γραφικά τα ίδια 4 ιδιοδιανύσματα σε τρισδιάστατη μορφή. Τα διαγράμματα σχηματίζουν τρισδιάστατες επιφάνειες, επομένως οι αντίστοιχες συντεταγμένες αντιπροσωπεύουν διαφορετικές κατευθύνσεις.



Σχήμα 4.2: Τρισδιάστατα διαγράμματα συντεταγμένων DMAP: (a) ϕ_2 - ϕ_3 - ϕ_4 , (b) ϕ_2 - ϕ_3 - ϕ_6 , (c) ϕ_2 - ϕ_4 - ϕ_6 , (d) ϕ_3 - ϕ_4 - ϕ_6 .

Αντίθετα, στο σχήμα 4.3 απεικονίζεται μία μονοδιάστατη καμπύλη, η οποία δείχνει ότι η συντεταγμένη ϕ_5 δεν είναι κατάλληλη για την παραμετροποίηση της πολλαπλότητας, καθώς τα ϕ_2 και ϕ_5 είναι εξαρτημένα.



Σχήμα 4.3: Διάγραμμα συντεταγμένων DMAP φ_2 - φ_5 .

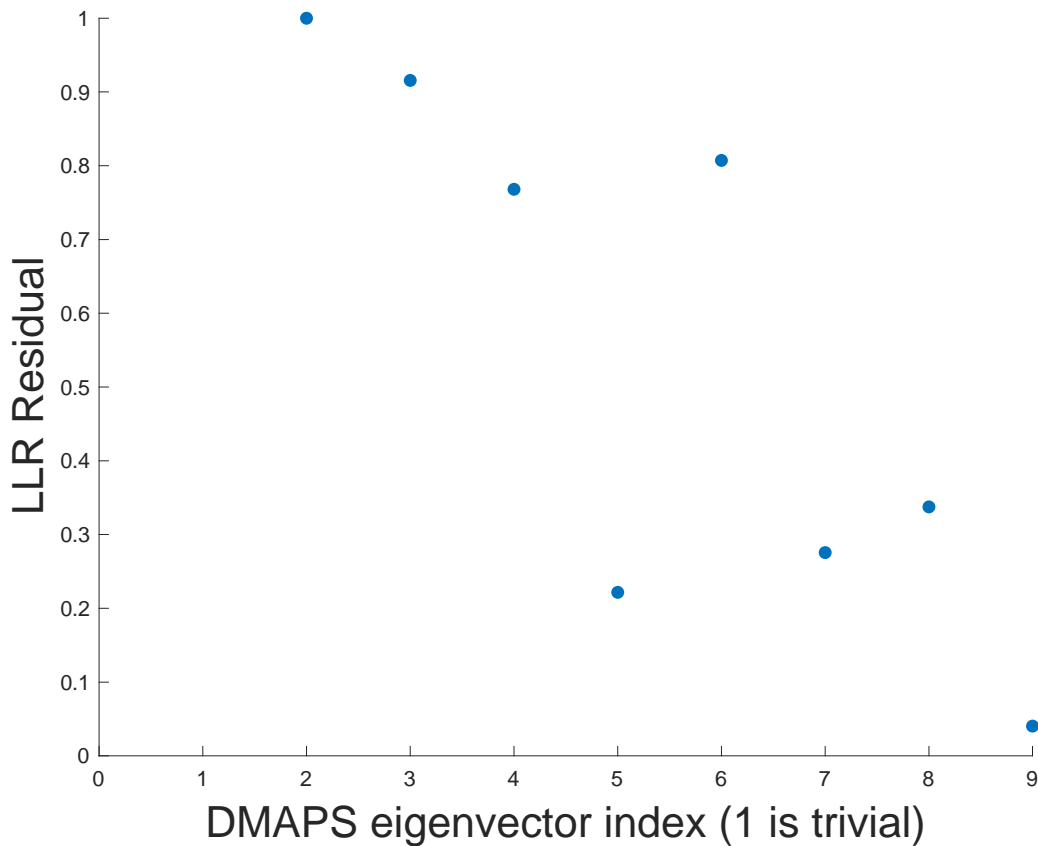
Επομένως, από τα παραπάνω σχήματα φαίνεται ότι τα σημεία του συνόλου δεδομένων ανήκουν σε μία τετραδιάστατη πολλαπλότητα, η οποία παραμετροποιείται από τα ιδιοδιανύσματα φ_2 , φ_3 , φ_4 και φ_6 του πίνακα μετάβασης.

4.1.2 Local linear regression

Για την επαλήθευση των ανεξάρτητων συντεταγμένων DMAP χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος local linear regression, όπως περιγράφεται στο κεφάλαιο 2.2.2. Επιλέγεται η τιμή της παραμέτρου $\varepsilon_{reg}=1.5$ και υπολογίζονται τα residuals για τα 8 πρώτα μη σταθερά ιδιοδιανύσματα, $\varphi_2, \dots, \varphi_9$, τα οποία φαίνονται στον πίνακα 4.1 και στο σχήμα 4.4. Το residual που αντιστοιχεί στο φ_2 είναι εξ ορισμού ίσο με 1.

Πίνακας 4.1: LLR residuals για τις 8 πρώτες συντεταγμένες DMAP.

Ιδιοδιάνυσμα	LLR Residual
φ_2	1
φ_3	0.9155
φ_4	0.7680
φ_5	0.2217
φ_6	0.8072
φ_7	0.2755
φ_8	0.3375
φ_9	0.0402



Σχήμα 4.4: LLR residuals για τις 8 πρώτες συντεταγμένες DMAP.

Παρατηρείται ότι η τιμή του residual για τις συντεταγμένες φ_2 , φ_3 , φ_4 και φ_6 είναι μεγάλη σε σχέση με τις υπόλοιπες συντεταγμένες. Επομένως, αυτές οι συντεταγμένες αντιστοιχούν σε διαφορετικές κατευθύνσεις και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την πιο αποτελεσματική αναπαράσταση των δεδομένων.

4.1.3 Υπολογισμός συντεταγμένων στον ambient χώρο – Geometric harmonics

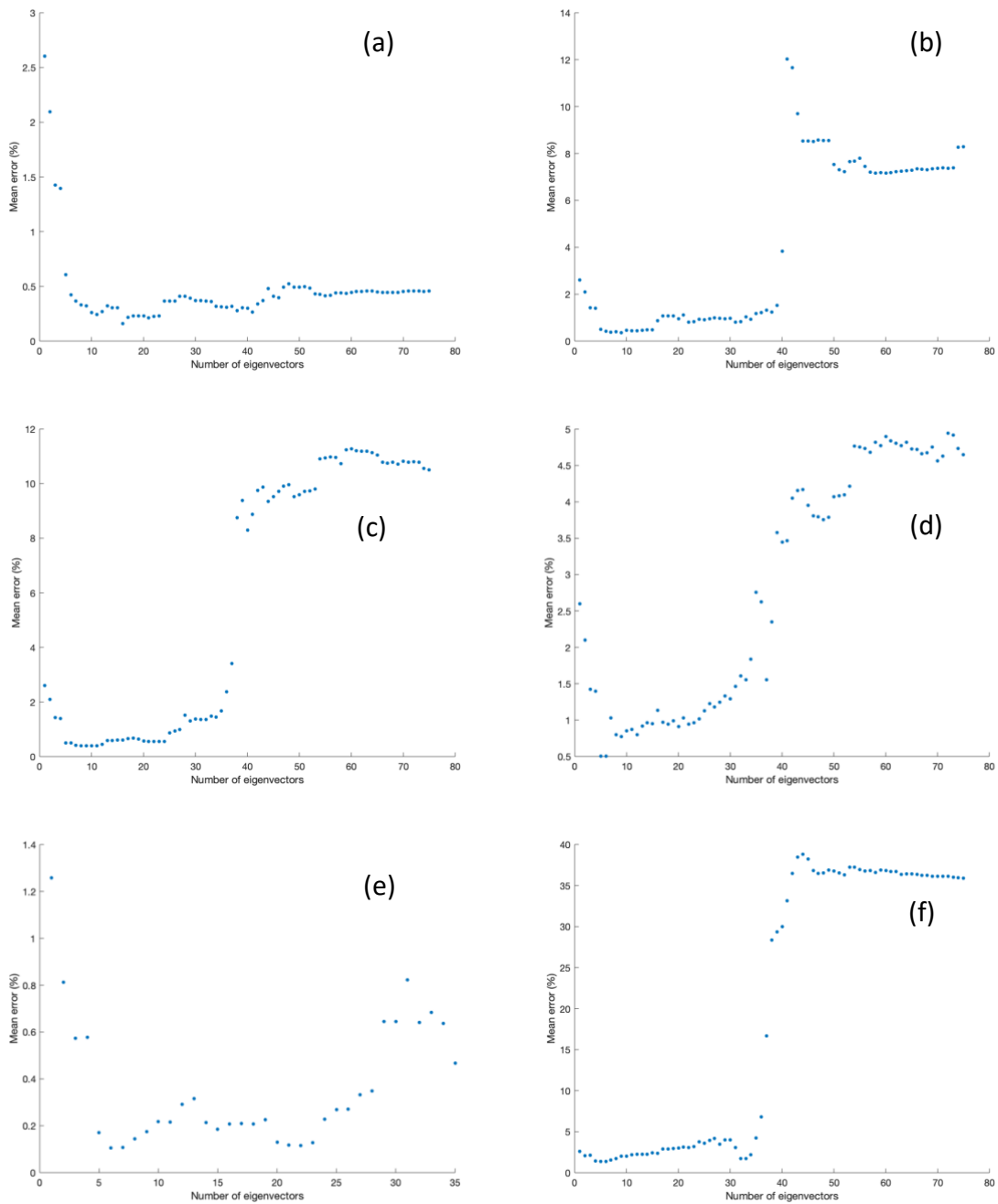
Γνωρίζοντας τις συντεταγμένες των σημείων στο χώρο DMAP, εφαρμόζεται η μέθοδος geometric harmonics για τον υπολογισμό των συντεταγμένων στον ambient χώρο. Τα 81 σημεία του συνόλου δεδομένων χωρίζονται σε 75 σημεία που αποτελούν το training set και 6 σημεία που χρησιμοποιούνται για την αξιολόγηση της μεθόδου, των οποίων οι συντεταγμένες στον ambient χώρο θα θεωρηθούν άγνωστες. Τα σημεία αυτά επιλέγονται τυχαία από το σύνολο των δεδομένων.

Οι συναρτήσεις των 296622 συντεταγμένων στον ambient χώρο ως προς τις 4 συντεταγμένες DMAP επεκτείνονται από το training set στα 6 «άγνωστα» σημεία, μέσω των εξισώσεων (2.18-2.21). Ακολουθώντας, υπολογίζεται το μέσο σχετικό σφάλμα για κάθε σημείο για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου ϵ και για διαφορετικούς αριθμούς χρησιμοποιούμενων ιδιοδιανυσμάτων στις εξισώσεις (2.20) και (2.21). Στον πίνακα 4.2 φαίνεται η ελάχιστη τιμή της νόρμας του σχετικού σφάλματος και ο αντίστοιχος αριθμός, α , των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων για κάθε τιμή του ϵ . Σημειώνεται ότι για τον υπολογισμό του σφάλματος δεν λαμβάνονται υπόψη 7742 συντεταγμένες στον ambient χώρο οι οποίες είναι ίσες με 0, καθώς το σχετικό σφάλμα δεν ορίζεται σε αυτές.

Πίνακας 4.2: Ελάχιστη τιμή της νόρμας του σχετικού σφάλματος για κάθε τιμή της παραμέτρου ε .

ε	$\ \%error\ $	α
10^{-4}	0.1588	16
10^{-3}	0.3609	9
10^{-2}	0.3903	10
10^{-1}	0.5011	5
1	0.4554	7
10	1.3550	6

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζεται η νόρμα του σχετικού σφάλματος σε σχέση με τον αριθμό των χρησιμοποιούμενων ιδιοδιανυσμάτων για κάθε τιμή του ε .



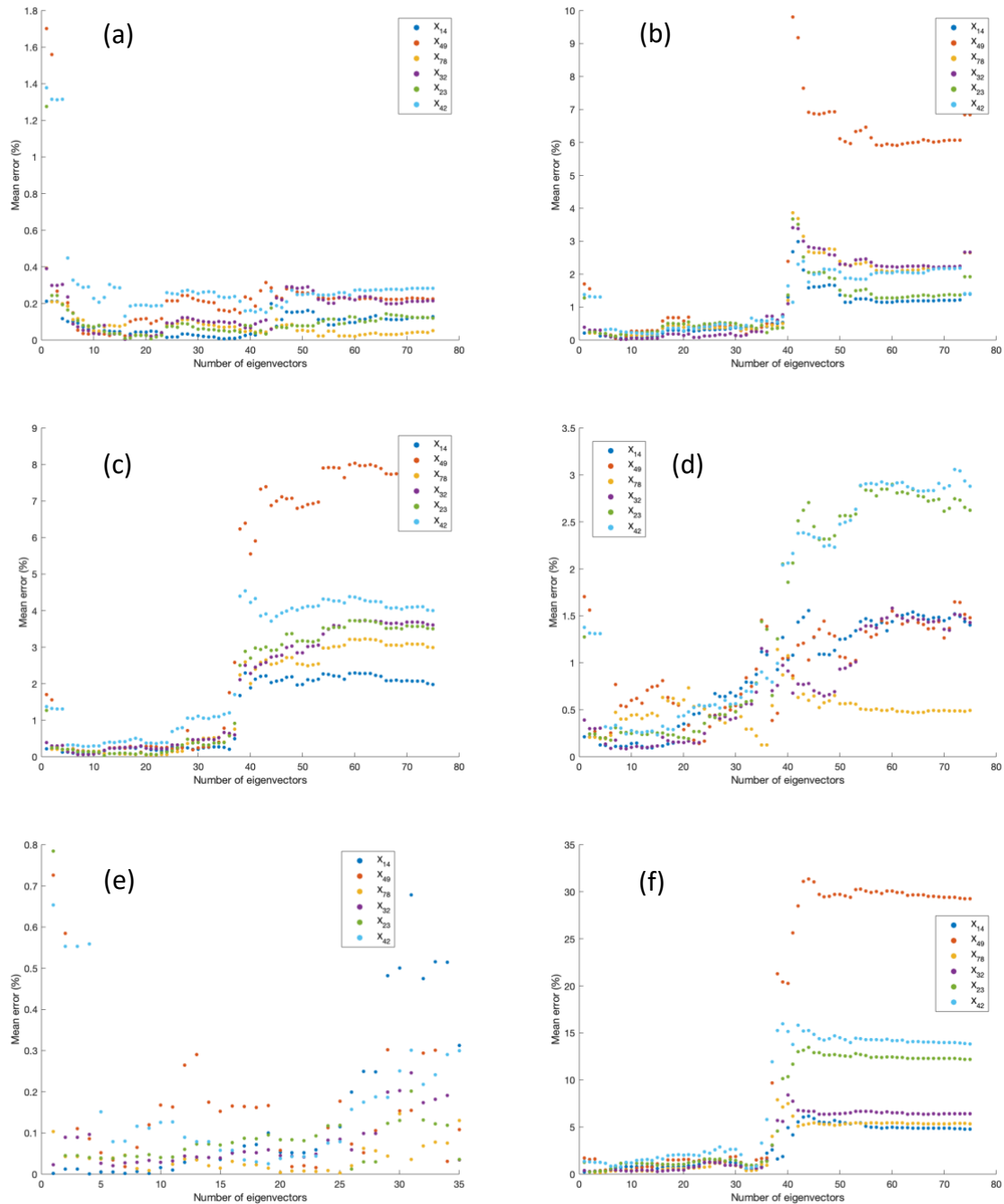
Σχήμα 4.5: Νόρμα του σχετικού σφάλματος για κάθε τιμή της παραμέτρου ε : (a) $\varepsilon=10^{-4}$, (b) $\varepsilon=10^{-3}$, (c) $\varepsilon=10^{-2}$, (d) $\varepsilon=10^{-1}$, (e) $\varepsilon=1$, (f) $\varepsilon=10$.

Στον πίνακα 4.3 φαίνεται το ελάχιστο σχετικό σφάλμα για καθένα από τα 6 σημεία για τα οποία υπολογίζεται η επέκταση της συνάρτησης (X_{14} , X_{49} , X_{78} , X_{32} , X_{23} , X_{42}) και ο αντίστοιχος αριθμός, α , των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων για κάθε τιμή του ε . Σημειώνεται ότι τα σημεία X_{14} και X_{23} ανήκουν στον κλάδο των δακτυλίων, τα X_{32} και X_{42} στον κλάδο των 2 κορυφών, το X_{49} στον κλάδο των 3 κορυφών και το X_{78} στον κλάδο των 4 κορυφών.

Πίνακας 4.3: Ελάχιστο σχετικό σφάλμα για καθένα από τα 6 «άγνωστα» σημεία για κάθε τιμή της παραμέτρου ε .

ε	Σημείο	%error	α
10^{-4}	X_{14}	0.00662325814056784	35
	X_{49}	0.0221468932232472	16
	X_{78}	0.0203684277827069	60
	X_{32}	0.00475055961776400	16
	X_{23}	0.00649087606960383	21
	X_{42}	0.131136183639055	16
10^{-3}	X_{14}	0.0487194791764680	9
	X_{49}	0.0530867017908813	7
	X_{78}	0.110557308476125	6
	X_{32}	0.0242008592633870	8
	X_{23}	0.113263588776710	7
	X_{42}	0.177560890458596	15
10^{-2}	X_{14}	0.0885392996655179	9
	X_{49}	0.0795303638048353	12
	X_{78}	0.0443609323266492	21
	X_{32}	0.0598941689273463	8
	X_{23}	0.0346839673072753	12
	X_{42}	0.276654756064336	9
10^{-1}	X_{14}	0.0885869480751250	6
	X_{49}	0.141258976086940	23
	X_{78}	0.126867255906804	35
	X_{32}	0.0841168519244658	9
	X_{23}	0.174372635683126	6
	X_{42}	0.232432998255222	15
1	X_{14}	0.110598359514489	6
	X_{49}	0.124087692268652	8
	X_{78}	0.0776361633935920	9
	X_{32}	0.124589391566745	5
	X_{23}	0.200906623162624	6
	X_{42}	0.222985557785439	7
10	X_{14}	0.211144382621432	1
	X_{49}	0.376202406252416	7
	X_{78}	0.192012571683404	4
	X_{32}	0.287789735391127	15
	X_{23}	0.242333149406001	2
	X_{42}	0.635237163659997	32

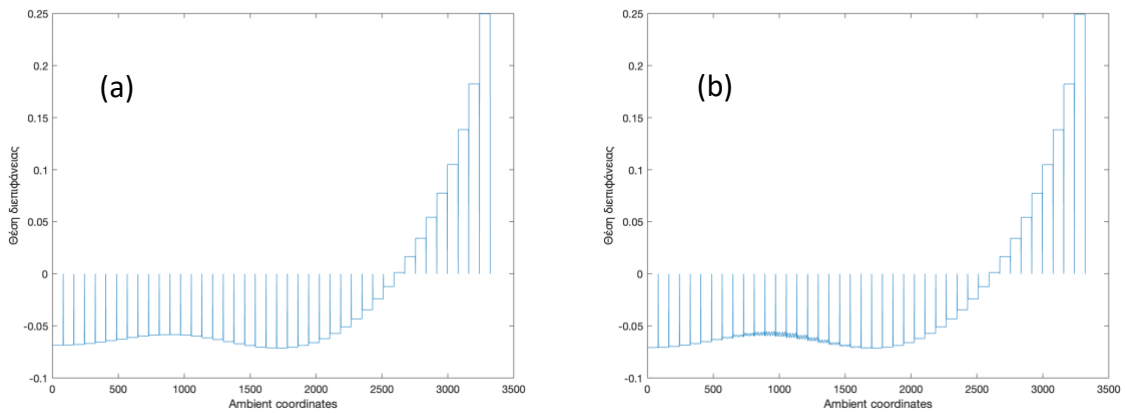
Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζεται το σχετικό σφάλμα για καθένα από τα 6 σημεία για τα οποία υπολογίζεται η επέκταση της συνάρτησης σε σχέση με τον αριθμό των χρησιμοποιούμενων ιδιοδιανυσμάτων, για κάθε τιμή του ε .



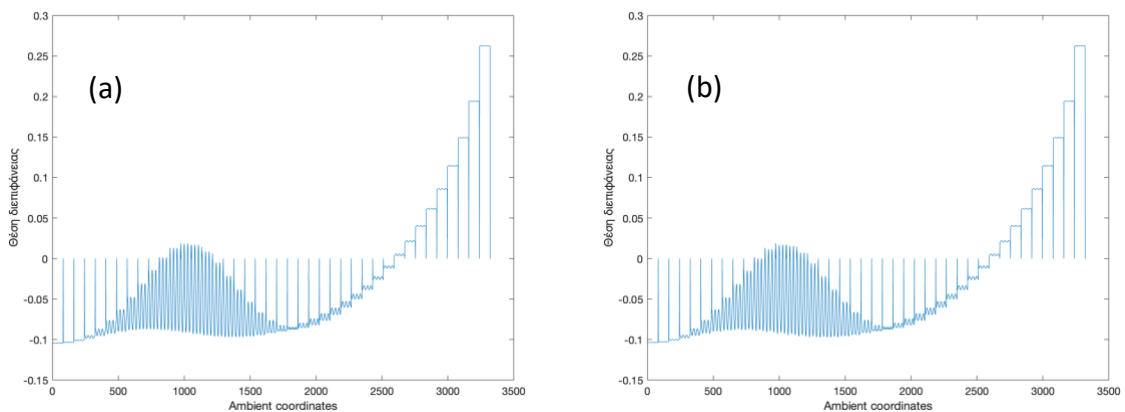
Σχήμα 4.6: Σχετικό σφάλμα για κάθε τιμή της παραμέτρου ε : (a) $\varepsilon=10^4$, (b) $\varepsilon=10^{-3}$, (c) $\varepsilon=10^{-2}$, (d) $\varepsilon=10^{-1}$, (e) $\varepsilon=1$, (f) $\varepsilon=10$.

Η ακρίβεια της επέκτασης των συναρτήσεων κρίνεται ικανοποιητική, καθώς το σχετικό σφάλμα για αριθμό αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha < 35$ είναι μικρότερο από 1%. Η μείωση τάξης που επιτυγχάνεται είναι δραστική, καθώς οι συντεταγμένες που απαιτούνται για την περιγραφή της κατάστασης του συστήματος μειώνονται από 296622 σε 4.

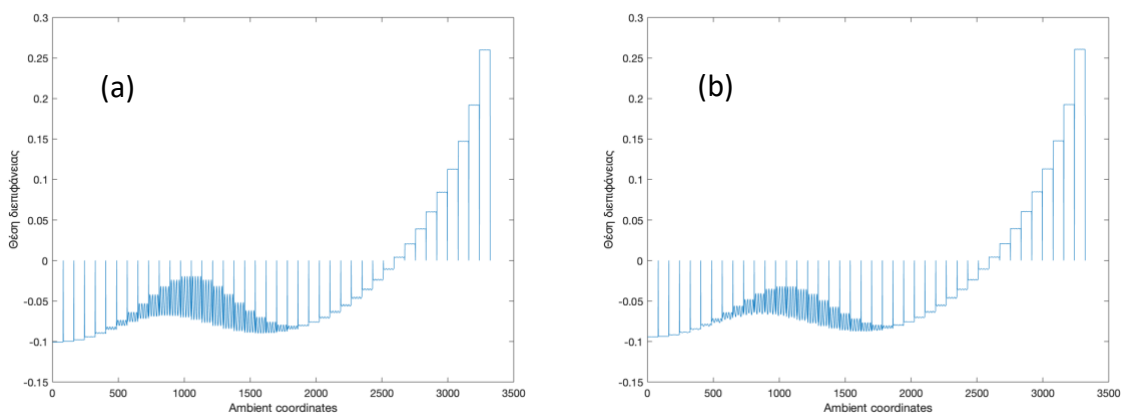
Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα στιγμιότυπα του συστήματος για τα 6 «άγνωστα» σημεία, καθώς και οι αντίστοιχες προβλέψεις που λαμβάνονται μέσω των *geometric harmonics*.



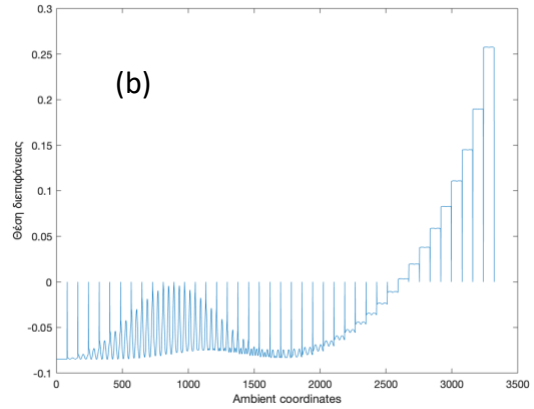
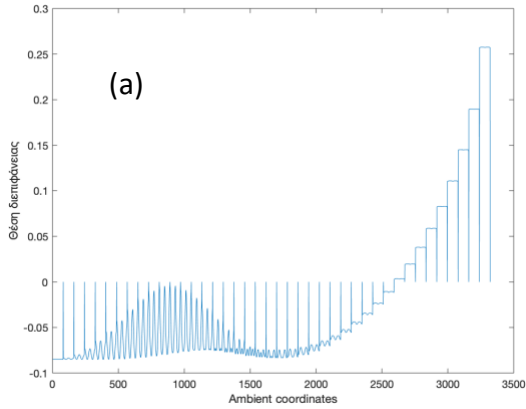
Σχήμα 4.7: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{14} (a) και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των *geometric harmonics* (b). Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=35$.



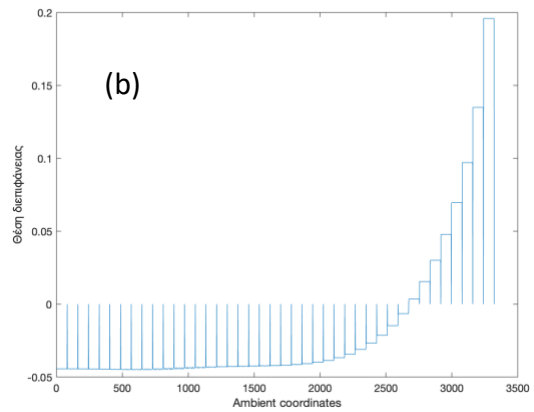
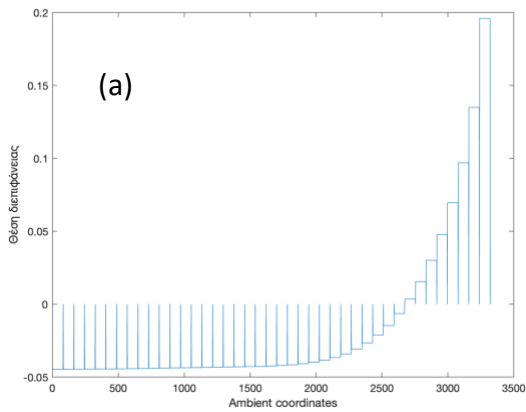
Σχήμα 4.8: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{49} (a) και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των *geometric harmonics* (b). Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=16$.



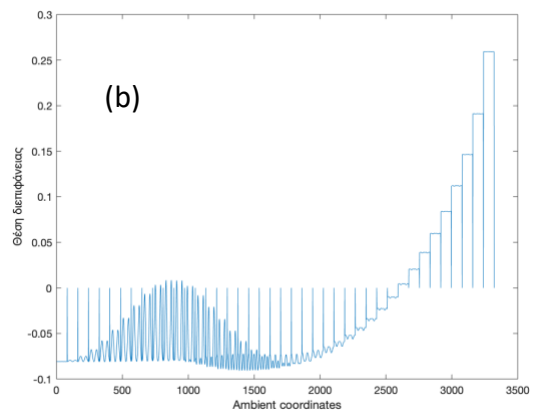
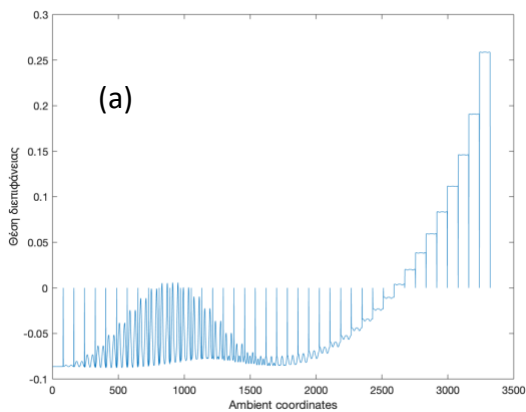
Σχήμα 4.9: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{78} (a) και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των *geometric harmonics* (b). Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=60$.



Σχήμα 4.10: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{32} (a) και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των *geometric harmonics* (b). Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=16$.



Σχήμα 4.11: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{23} (a) και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των *geometric harmonics* (b). Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=21$.



Σχήμα 4.12: Στιγμιότυπο για το σημείο X_{42} (a) και η αντίστοιχη πρόβλεψη μέσω των *geometric harmonics* (b). Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιήθηκε είναι $\varepsilon=10^{-4}$, ενώ ο αριθμός των αποδεκτών ιδιοδιανυσμάτων $\alpha=16$.

4.2 Εξίσωση Kuramoto-Sivashinsky

4.2.1 Επίλυση της εξίσωσης

Η μέθοδος diffusion maps εφαρμόζεται στην εξίσωση Kuramoto-Sivashinsky (3.15), στο διάστημα $x \in [0, 2\pi]$. Για την επίλυση της εξίσωσης γίνεται ανάπτυγμα σε σειρά Fourier [11] και λαμβάνεται ένα σύνολο από συνήθεις διαφορικές εξισώσεις. Συγκεκριμένα, διατηρούνται οι πρώτοι 8 όροι της σειράς.

$$u(x, t) \approx a_0(t) + \sum_{k=1}^8 (a_k(t) \cos(kx) + b_k(t) \sin(kx)) \quad (4.1)$$

Ο πρώτος συντελεστής, $a_0(t)$, από τους όρους των συνημιτόνων θεωρείται ίσος με 0. Με αντικατάσταση του αναπτύγματος Fourier στην KSE, η μερική διαφορική εξίσωση μετατρέπεται σε ένα σύνολο από φασματικές συνήθεις διαφορικές εξισώσεις. Χρησιμοποιείται το ανάπτυγμα των ημιτόνων [9], επομένως οι συντελεστές των όρων των συνημιτόνων, $a_k(t)$, θεωρούνται ίσοι με 0. Έτσι, προκύπτουν 8 συνήθεις διαφορικές εξισώσεις, οι οποίες χρησιμοποιούνται για την επίλυση της KSE.

$$\dot{b}_1 = (-4 \cdot 1^4 + \alpha \cdot 1^2)b_1 + \frac{1}{2}\alpha(b_1b_2 + b_2b_3 + b_3b_4 + b_4b_5 + b_5b_6 + b_6b_7 + b_7b_8)$$

$$\dot{b}_2 = (-4 \cdot 2^4 + \alpha \cdot 2^2)b_2 + \alpha\left(-\frac{1}{2}b_1^2 + b_1b_3 + b_2b_4 + b_3b_5 + b_4b_6 + b_5b_7 + b_6b_8\right)$$

$$\dot{b}_3 = (-4 \cdot 3^4 + \alpha \cdot 3^2)b_3 + \frac{3}{2}\alpha(-b_1b_2 + b_1b_4 + b_2b_5 + b_3b_6 + b_4b_7 + b_5b_8)$$

$$\dot{b}_4 = (-4 \cdot 4^4 + \alpha \cdot 4^2)b_4 + 2\alpha\left(-\frac{1}{2}b_2^2 - b_1b_3 + b_1b_5 + b_2b_6 + b_3b_7 + b_4b_8\right)$$

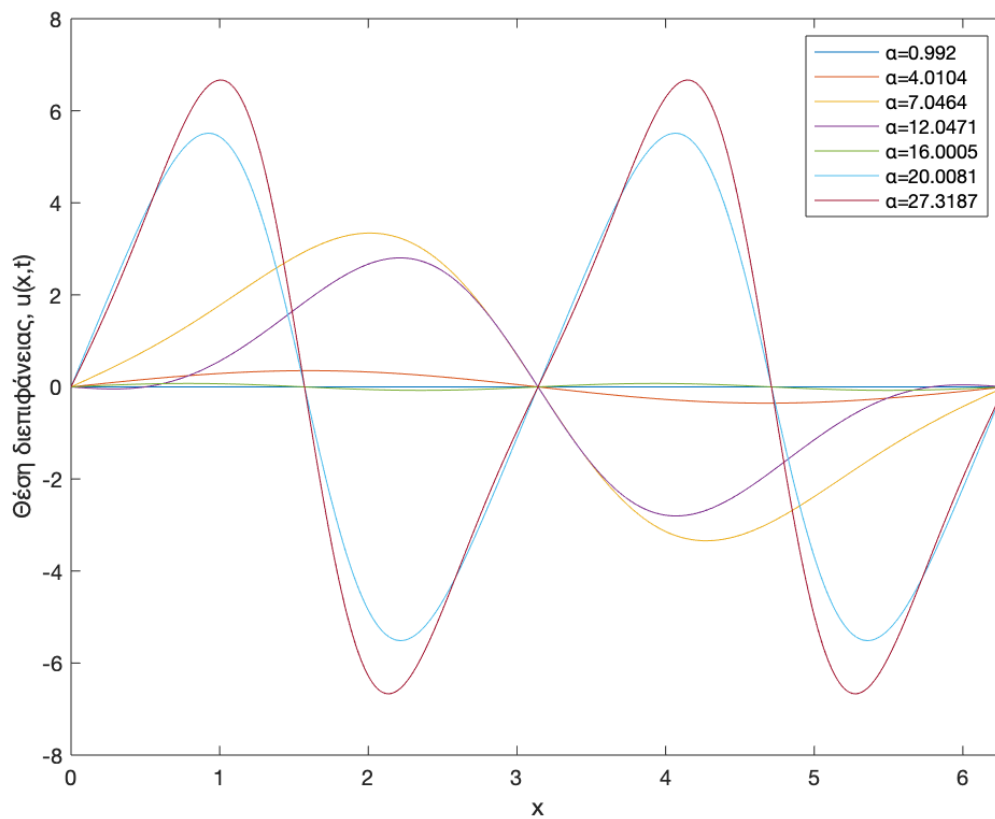
$$\dot{b}_5 = (-4 \cdot 5^4 + \alpha \cdot 5^2)b_5 + \frac{5}{2}\alpha(-b_2b_3 - b_1b_4 + b_1b_6 + b_2b_7 + b_3b_8)$$

$$\dot{b}_6 = (-4 \cdot 6^4 + \alpha \cdot 6^2)b_6 + 3\alpha\left(-\frac{1}{2}b_3^2 - b_2b_4 - b_1b_5 + b_1b_7 + b_2b_8\right)$$

$$\dot{b}_7 = (-4 \cdot 7^4 + \alpha \cdot 7^2)b_7 + \frac{7}{2}\alpha(-b_3b_4 - b_2b_5 - b_1b_6 + b_1b_8)$$

$$\dot{b}_8 = (-4 \cdot 8^4 + \alpha \cdot 8^2)b_8 + 4\alpha\left(-\frac{1}{2}b_4^2 - b_3b_5 - b_2b_6 - b_1b_7\right)$$

Το σύστημα των παραπάνω συνήθων διαφορικών εξισώσεων εισάγεται στο λογισμικό βηματισμού AUTO και υπολογίζεται η τιμή των 8 συντελεστών της σειράς Fourier. Στη συνέχεια, από την εξίσωση (4.1) υπολογίζεται το $u(x, t)$ για κάθε τιμή της παραμέτρου α . Η λύση μόνιμης κατάστασης υπολογίζεται σε 1001 σημεία, τα οποία αντιστοιχούν στις θέσεις με συντεταγμένες $x_i = i \cdot \frac{2\pi}{1000}$, $i = 0, 1, \dots, 1000$. Στο ακόλουθο σχήμα παρουσιάζονται στιγμιότυπα του συστήματος για ορισμένες τιμές του α .



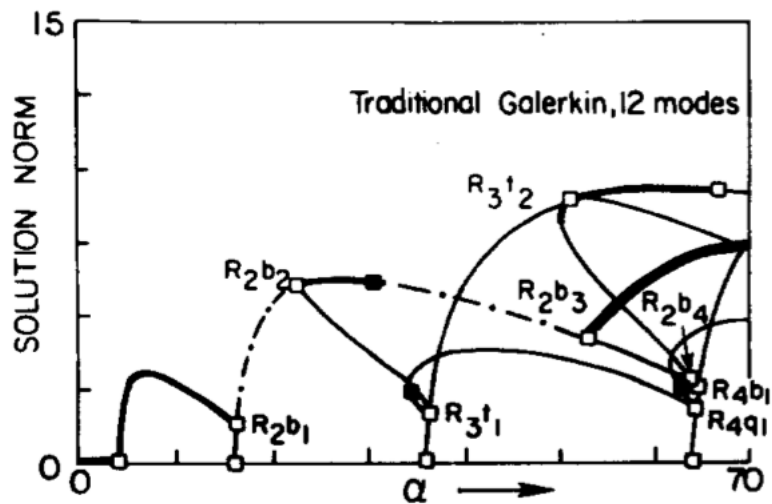
Σχήμα 4.13: Στιγμιότυπα της λύσης μόνιμης κατάστασης του συστήματος για ορισμένες τιμές της παραμέτρου α .

Μέσω του AUTO προσδιορίζονται οι διακλαδώσεις για το σύστημα των 8 διαφορικών εξισώσεων που προέκυψαν από το ανάπτυγμα Fourier. Στον πίνακα 4.4 φαίνονται τα σημεία διακλάδωσης, το είδος τους και οι τιμές του α στις οποίες εμφανίζονται.

Πίνακας 4.4: Σημεία διακλάδωσης για το σύστημα των 8 εξισώσεων (BP=branch point, HB=Hopf bifurcation, LP=saddle-node bifurcation).

Είδος διακλάδωσης	α	$\ L^2\ $
BP	4	0
BP	16	0
BP	25.5122	6.25902
HB	27.3187	6.28362
LP	36.1045	1.67682
BP	36.1042	1.67155
HB	35.0367	2.15925
LP	34.8588	2.52667
BP	46.3331	12.5037

Τα σημεία που λαμβάνονται από το AUTO είναι παρόμοια με αυτά που υπολογίζονται στο [9] (Σχήμα 4.14). Σημειώνεται ότι για την εύρεση των διακλαδώσεων στο [9] χρησιμοποιήθηκαν 12 όροι της σειράς Fourier.

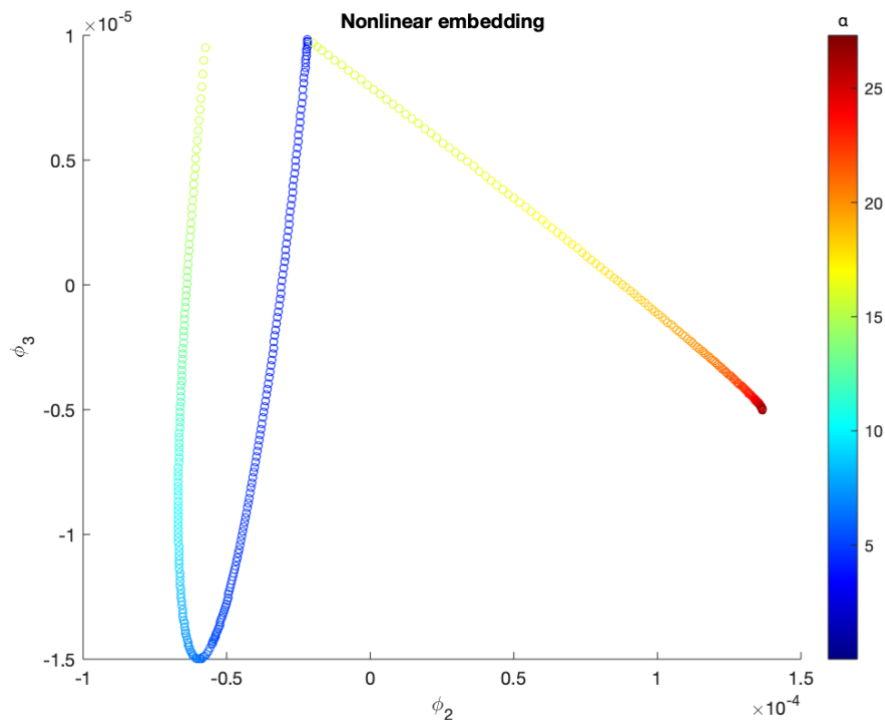


Σχήμα 4.14: Διάγραμμα διακλαδώσεων για την KSE. Η επίλυση της εξίσωσης έγινε με 12 όρους του αναπτύγματος Fourier. Τα ανοιχτά τετράγωνα απεικονίζουν διακλαδώσεις μόνιμης κατάστασης, ενώ τα μαύρα τετράγωνα υποδηλώνουν διακλαδώσεις Hopf [9].

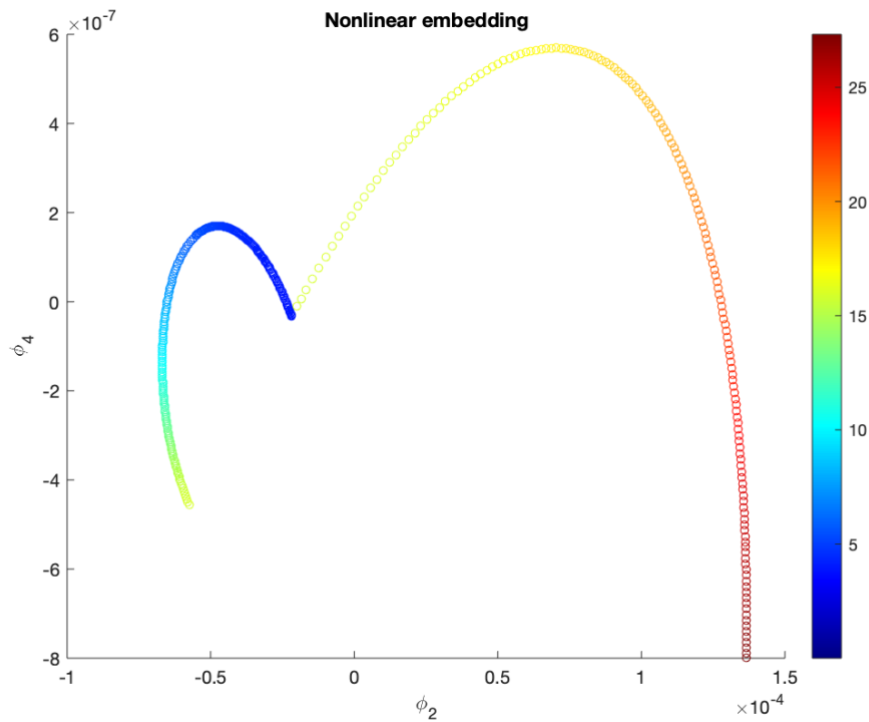
4.2.2 Diffusion maps

Για την παραμετροποίηση της πολλαπλότητας, συλλέγονται $M=551$ στιγμιότυπα της λύσης της KSE για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου α . Οι τιμές της παραμέτρου επιλέγονται από το σύνολο $[0, 27.3187]$. Η εξίσωση επιλύεται σε $N=1001$ σημεία που επιλέγονται ομοιόμορφα στο διάστημα $x \in [0, 2\pi]$, επομένως ο ambient χώρος έχει διάσταση 1001.

Υπολογίζονται οι συντεταγμένες των diffusion maps, ϕ_i . Η παράμετρος ε μπορεί να επιλεγεί από το εύρος 10^2-10^6 . Σε αυτή την περίπτωση επιλέγεται $\varepsilon=10^4$.



Σχήμα 4.15: Διάγραμμα συντεταγμένων DMAP $\phi_2-\phi_3$. Το χρώμα του κάθε σημείου υποδηλώνει την αντίστοιχη τιμή της παραμέτρου α .

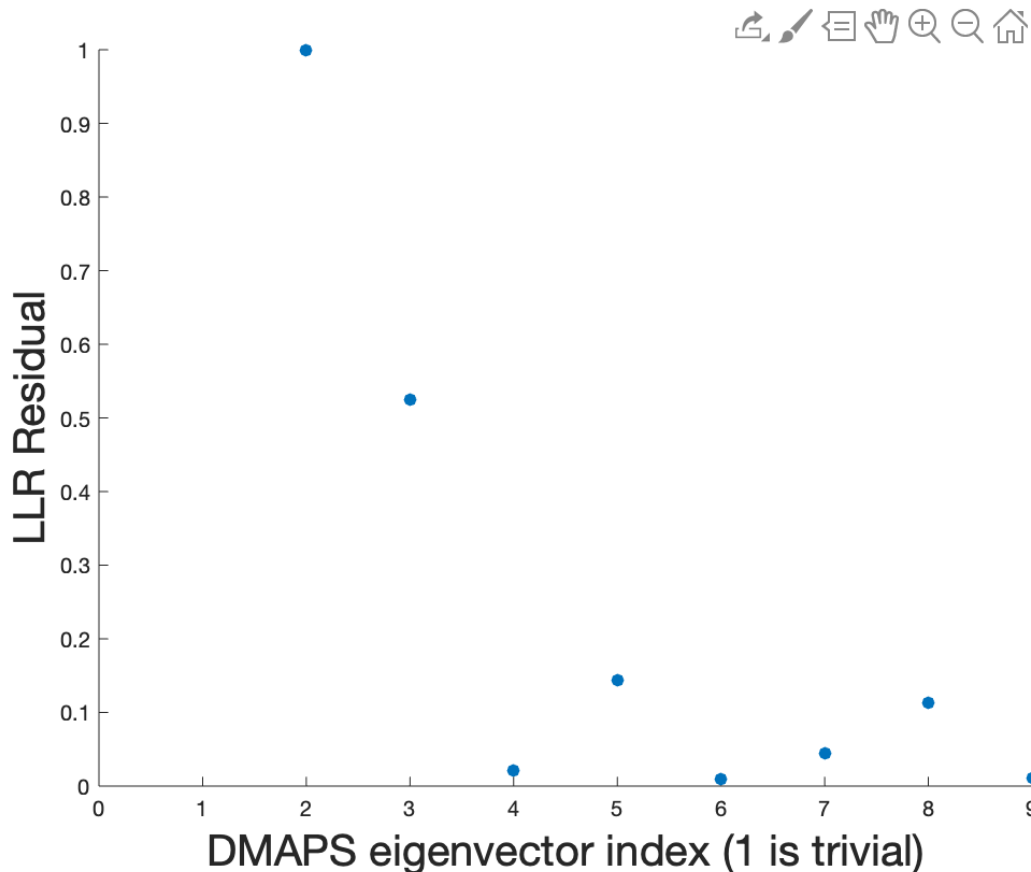


Σχήμα 4.16: Διάγραμμα συντεταγμένων DMAP ϕ_2 - ϕ_4 . Το χρώμα του κάθε σημείου υποδηλώνει την αντίστοιχη τιμή της παραμέτρου a .

Στη συνέχεια εφαρμόζεται ο αλγόριθμος local linear regression για τα 8 πρώτα μη σταθερά ιδιοδιανύσματα, ϕ_2, \dots, ϕ_9 . Η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιείται είναι $\epsilon_{\text{reg}}=2$. Τα residuals που υπολογίζονται φαίνονται στον πίνακα 4.5 και στο σχήμα 4.17.

Πίνακας 4.5: LLR residuals για τις 8 πρώτες συντεταγμένες DMAP.

Ιδιοδιάνυσμα	LLR Residual
ϕ_2	1
ϕ_3	0.5254
ϕ_4	0.0207
ϕ_5	0.1439
ϕ_6	0.0090
ϕ_7	0.0444
ϕ_8	0.1134
ϕ_9	0.0117

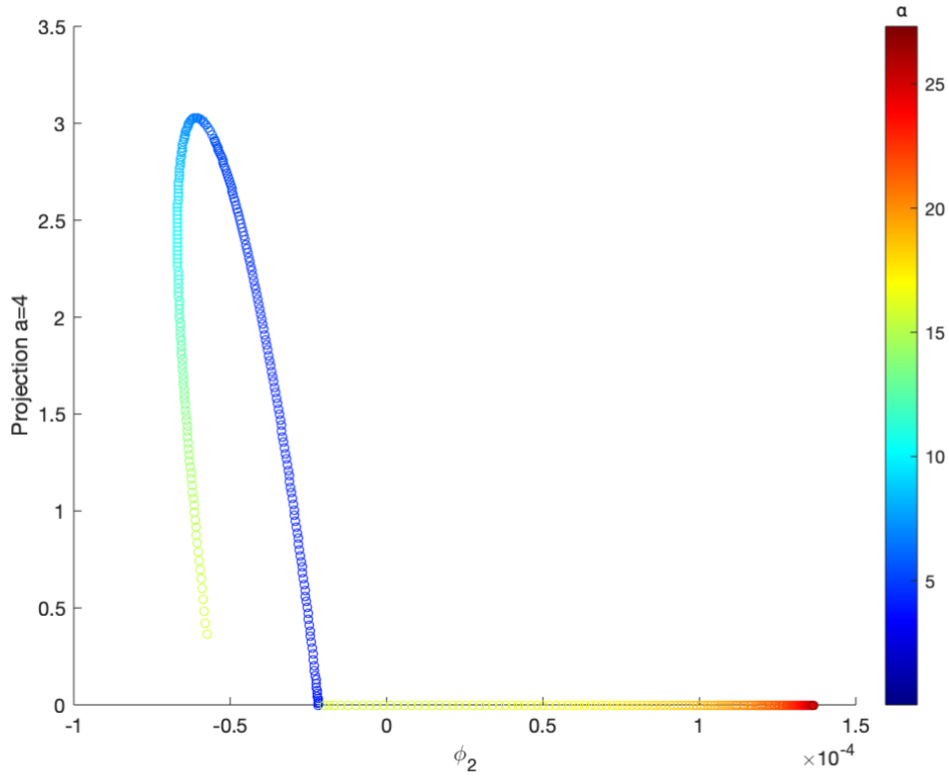


Σχήμα 4.17: LLR residuals για τις 8 πρώτες συντεταγμένες DMAP.

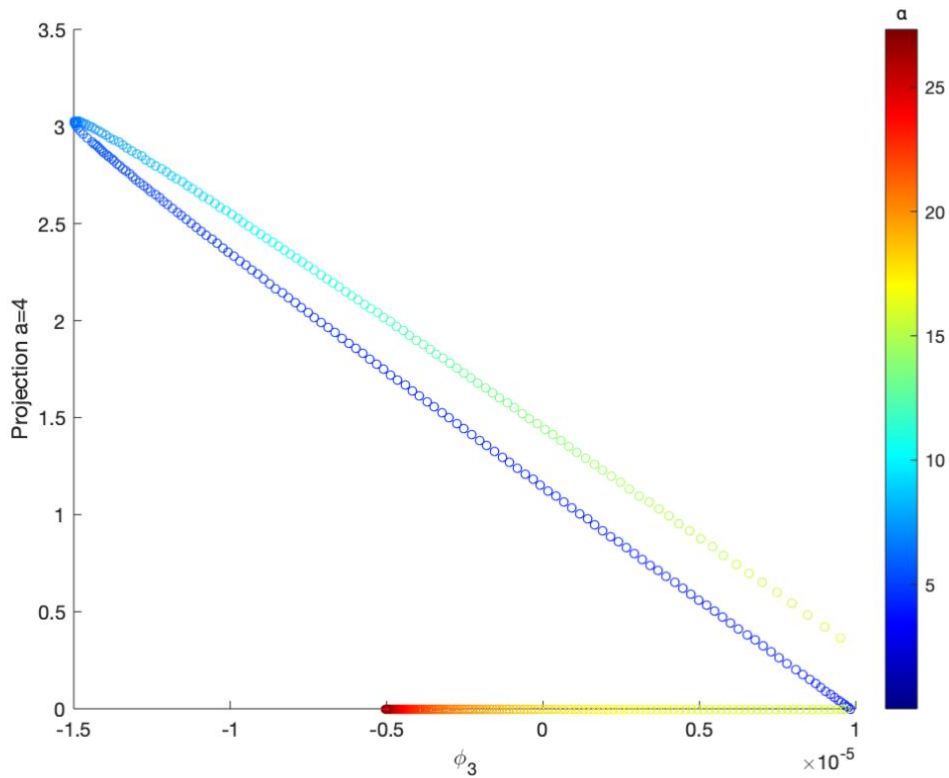
Με βάση τα residuals που υπολογίζονται, οι λύσεις που συλλέχθηκαν ανήκουν σε μία δισδιάστατη πολλαπλότητα, η οποία παραμετροποιείται από τα ιδιοδιανύσματα φ_2 και φ_3 του πίνακα μετάβασης.

4.2.3 Σχέση μεταξύ κρίσιμων ιδιοδιανυσμάτων και DMAPS

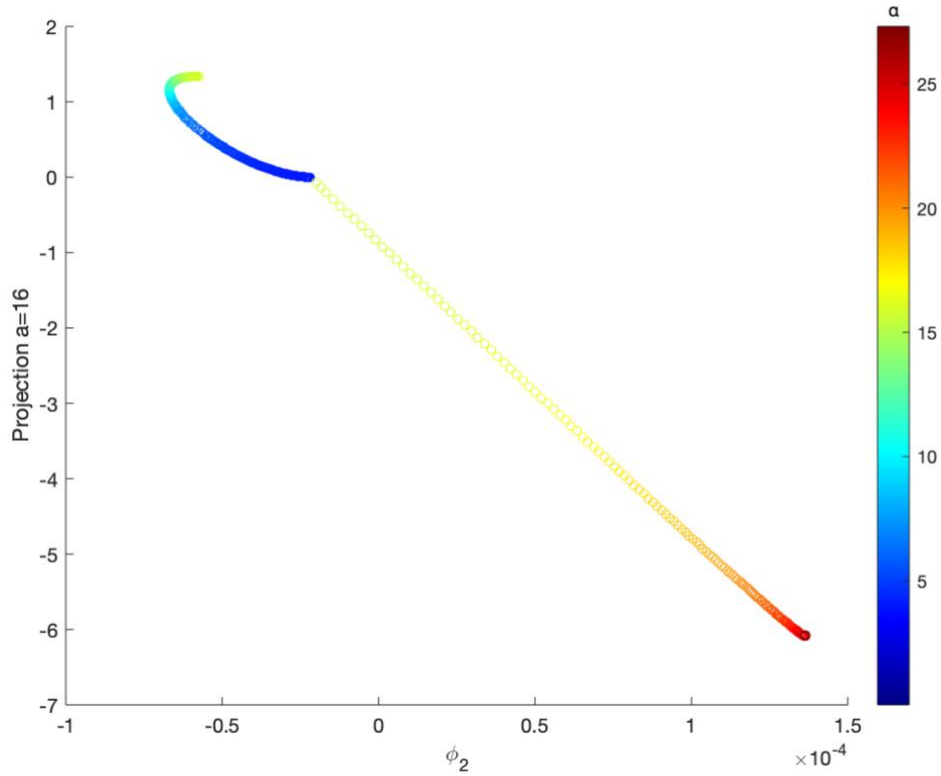
Μέσω του AUTO υπολογίζονται οι ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του συστήματος στη μόνιμη κατάσταση για κάθε τιμή του α . Ακολούθως, οι συντελεστές της σειράς Fourier που υπολογίστηκαν προβάλλονται στα κρίσιμα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε ιδιοτιμές ίσες με 0 για τις τιμές της παραμέτρου $\alpha=4$ και $\alpha=16$, οι οποίες αποτελούν σημεία διακλάδωσης του συστήματος, όπως φαίνεται στον πίνακα 4.4. Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα διαγράμματα της προβολής των λύσεων στα κρίσιμα ιδιοδιανύσματα συναρτήσει των ανεξάρτητων συντεταγμένων DMAP, φ_2 και φ_3 , που βρέθηκαν παραπάνω.



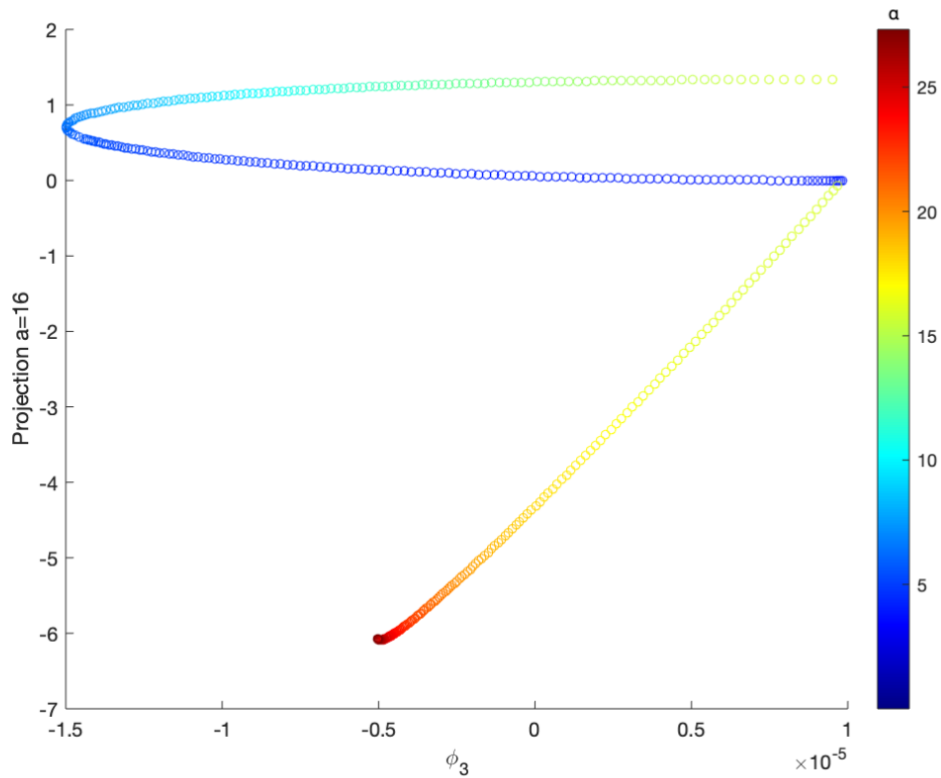
Σχήμα 4.18: Διάγραμμα της προβολής των λύσεων του συστήματος των 8 διαφορικών εξισώσεων στο κρίσιμο ιδιοδιάνυσμα για τιμή της παραμέτρου $\alpha=4$, συναρτήσει του ιδιοδιανύσματος ϕ_2 .



Σχήμα 4.19: Διάγραμμα της προβολής των λύσεων του συστήματος των 8 διαφορικών εξισώσεων στο κρίσιμο ιδιοδιάνυσμα για τιμή της παραμέτρου $\alpha=4$, συναρτήσει του ιδιοδιανύσματος ϕ_3 .



Σχήμα 4.20: Διάγραμμα της προβολής των λύσεων του συστήματος των 8 διαφορικών εξισώσεων στο κρίσιμο ιδιοδιάνυσμα για τιμή της παραμέτρου $a=16$, συναρτήσει του ιδιοδιανύσματος ϕ_2 .



Σχήμα 4.21: Διάγραμμα της προβολής των λύσεων του συστήματος των 8 διαφορικών εξισώσεων στο κρίσιμο ιδιοδιάνυσμα για τιμή της παραμέτρου $a=16$, συναρτήσει του ιδιοδιανύσματος ϕ_3 .

Από τα παραπάνω διαγράμματα είναι εμφανές ότι υπάρχει συσχέτιση μεταξύ της προβολής των λύσεων στο κρίσιμο ιδιοδιάνυσμα για $\alpha=4$ και της συντεταγμένης φ_3 , καθώς και μεταξύ της προβολής των λύσεων στο κρίσιμο ιδιοδιάνυσμα για $\alpha=16$ και της συντεταγμένης φ_2 . Επομένως, προκύπτει ένα σημαντικό συμπέρασμα για τη φυσική υπόσταση των diffusion maps: οι συντεταγμένες DMAP αποτελούν την προβολή των λύσεων του συστήματος στα κρίσιμα ιδιοδιανύσματα στα σημεία όπου το σύστημα χάνει την ευστάθειά του.

5. Συμπεράσματα

Η μοντελοποίηση δυναμικών συστημάτων αποτελεί αναπόσπαστο εργαλείο στη μηχανική και γενικότερα, όμως παρά την ταχύτατη εξέλιξη της τεχνολογίας και των υπολογιστών, μπορεί να είναι χρονοβόρα, ιδιαίτερα σε προβλήματα μεγάλης κλίμακας. Κατά συνέπεια, δημιουργείται η ανάγκη για μείωση του υπολογιστικού κόστους της επίλυσής τους. Η μείωση τάξης των μοντέλων μέσω τεχνικών μάθησης πολλαπλότητας αποτελεί μία αποτελεσματική προσέγγιση για την επίτευξη αυτού του σκοπού.

Στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας εφαρμόστηκε η μέθοδος diffusion maps για τη μάθηση των πολλαπλοτήτων που προκύπτουν σε δύο μη γραμμικά προβλήματα (αστάθεια Rosensweig, εξίσωση Kuramoto-Sivashinsky). Η ανίχνευση και η παραμετροποίηση της πολλαπλότητας χαμηλής διάστασης πραγματοποιήθηκε με επιτυχία στα δύο συστήματα, ενώ η διάσταση μειώθηκε σημαντικά. Κατά την εφαρμογή των diffusion maps, ο εντοπισμός των ιδιοδιανυσμάτων που αντιστοιχούν σε μοναδικές κατευθύνσεις στη γεωμετρία των δεδομένων αποτελεί κρίσιμο ζήτημα. Ο αλγόριθμος local linear regression επιτρέπει την πιο αποτελεσματική εξαγωγή των συντεταγμένων στο χώρο χαμηλής διάστασης που προκύπτει μέσω των diffusion maps.

Με βάση τις συντεταγμένες DMAP που προσδιορίστηκαν από αυτή τη διαδικασία, μπορεί να ληφθεί ένα μειωμένο σύστημα. Στο επίκεντρο μίας τέτοιας προσέγγισης βρίσκεται η μετάβαση από οποιοδήποτε σημείο στο χώρο χαμηλής διάστασης στο αντίστοιχο σημείο στον ambient χώρο και αντίστροφα. Αυτή η χαρτογράφηση πραγματοποιήθηκε για το πρόβλημα της αστάθειας Rosensweig με την επέκταση Nyström και τα geometric harmonics. Με αυτό τον τρόπο υπολογίστηκαν οι συντεταγμένες του συστήματος στον ambient χώρο για δεδομένα σημεία στο χώρο DMAP. Η εφαρμογή των geometric harmonics έγινε με επιτυχία, καθώς το σχετικό σφάλμα των συντεταγμένων που υπολογίστηκαν ήταν μικρότερο του 1%.

Επιπλέον, από το πρόβλημα της εξίσωσης Kuramoto-Sivashinsky γίνεται εμφανής η φυσική σημασία των diffusion maps. Με την προβολή των λύσεων της εξίσωσης στα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε μηδενικές ιδιοτιμές, παρατηρείται συσχέτιση μεταξύ των προβολών και των συντεταγμένων στο χώρο DMAP που υπολογίστηκαν. Επομένως, προκύπτει ότι οι συντεταγμένες DMAP αποτελούν την προβολή των λύσεων στα κρίσιμα ιδιοδιανύσματα στα σημεία όπου χάνεται η ευστάθεια του συστήματος.

Βιβλιογραφία

- [1] A. G. Boudouvis, J. L. Puchalla, L. E. Scriven, R. E. Rosensweig, “Normal Field Instability in Patterns and Pools of Ferrofluid.” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **65** (1987), 307-310.
- [2] H. S. Brown, “A computer-assisted, nonlinear dynamic study of instabilities and pattern formation for interfacial waves.” Dissertation, Princeton University (1992).
- [3] E. Chiavazzo, C. W. Gear, C. J. Dsilva, N. Rabin, I. G. Kevrekidis, “Reduced Models in Chemical Kinetics via Nonlinear Data-Mining.” *Processes* **2** (2014), 112-140.
- [4] R. R. Coifman, S. Lafon, “Diffusion maps.” *Appl. Comput. Harmon. Anal.* **21** (2006), 5–30.
- [5] R. R. Coifman, S. Lafon, A. B. Lee, M. Maggioni, B. Nadler, F. Warner, S. W. Zucker, “Geometric diffusions as a tool for harmonic analysis and structure definition of data: Diffusion maps.” *PNAS* **102** (2005), 7426–7431.
- [6] R. R. Coifman, S. Lafon, “Geometric harmonics: A novel tool for multiscale out-of-sample extension of empirical functions.” *Appl. Comput. Harmon. Anal.* **21** (2006), 31–52.
- [7] C. J. Dsilva, R. Talmon, R. R. Coifman, I. G. Kevrekidis, “Parsimonious representation of nonlinear dynamical systems through manifold learning: A chemotaxis case study.” *Appl. Comput. Harmon. Anal.* **44** (2018), 759–773.
- [8] C. Gollwitzer, A. N. Spyropoulos, A. G. Papathanasiou, A. G. Boudouvis, R. Richter, “The normal field instability under side-wall effects: comparison of experiments and computations.” *New Journal of Physics* **11** (2009), 053016.
- [9] M. S. Jolly, I. G. Kevrekidis, E. S. Titi, “Approximate inertial manifolds for the Kuramoto-Sivashinsky equation: Analysis and computations.” *Physica D* **44** (1990), 38-60.
- [10] I. G. Kevrekidis, B. Nicolaenko, J. C. Scovel, “Back in the saddle again: A computer assisted study of the Kuramoto-Sivashinsky Equation.” *SIAM J. Appl. Math.* **50** (1990), 760-790.
- [11] E. Kreyszig, H. Kreyszig, E. J. Norminton, “Advanced Engineering Mathematics.” 10th edition, Hoboken, NJ: Wiley (2011).
- [12] S. S. Lafon, “Diffusion Maps and Geometric Harmonics.” Dissertation, Yale University (2004).
- [13] B. E. Sonday, A. Singer, C. W. Gear, I. G. Kevrekidis, “Manifold learning techniques and model reduction applied to dissipative PDEs.” (2010)
- [14] A. N. Spyropoulos, A. G. Papathanasiou, A. G. Boudouvis, “The 2-3-4 spike competition in the Rosensweig instability.” *J. Fluid Mech.* **870** (2019), 389-404.

A scenic landscape featuring a calm lake in the foreground, reflecting the sky and the surrounding mountains. The mountains are dark and rugged, with some snow patches. The sky is filled with dramatic, dark clouds, suggesting a storm or late afternoon light. The overall mood is somber and contemplative.

**Science never solves a
problem without creating ten
more.**

George Bernard Shaw