



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών

Μείωση τάξης φυσικών μοντέλων με μεθόδους δεδομένων

Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία

Δημήτριος Χατζηγεωργίου

Επιβλέπων: Ευμορφόπουλος Νέστωρ

Βόλος 2023



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών

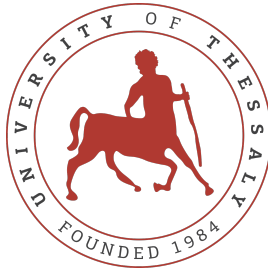
Μείωση τάξης φυσικών μοντέλων με μεθόδους δεδομένων

Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία

Δημήτριος Χατζηγεωργίου

Επιβλέπων: Ευμορφόπουλος Νέστωρ

Βόλος 2023



UNIVERSITY OF THESSALY
SCHOOL OF ENGINEERING
DEPARTMENT OF ELECTRICAL AND COMPUTER ENGINEERING
Programme of MSc Studies

**Order reduction of physical models with data-driven
methods**

Master's Thesis

Dimitrios Chatzigeorgiou

Supervisor: Nestor Evmorfopoulos

Volos 2023

Εγκρίνεται από την Επιτροπή Εξέτασης:

Επιβλέπων **Ευμορφόπουλος Νέστωρ**

Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και
Μηχανικών Υπολογιστών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Μέλος **Σταμούλης Γεώργιος**

Καθηγητής, Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπο-
λογιστών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Μέλος **Ποταμιάνος Γεράσιμος**

Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και
Μηχανικών Υπολογιστών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Ευχαριστίες

Με την περάτωση της παρούσας μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας θα ήθελα να ευχαριστήσω αρχικά τον επιβλέποντα καθηγητή μου, αναπληρωτή καθηγητή κ.Νέστορα Ευμορφόπουλο, για την συνεχή καθοδήγηση του και την εμπιστοσύνη που έδειξε καθ' όλη τη διάρκεια αυτής της εργασίας στο πρόσωπό μου. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τα μέλη της επιτροπής, και συγκεκριμένα τον καθηγητή κ.Γιώργο Σταμούλη και τον αναπληρωτή καθηγητή κ.Γεράσιμο Ποταμιάνο, για τις υποδείξεις και την υποστήριξη τους στην εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

Εξαιρετικά σημαντική ήταν η συμβολή του διδακτορικού φοιτητή και αδερφού μου Χρυσόστομου Χατζηγεωργίου, ο οποίος με καθοδήγησε σε όλα τα στάδια της παρούσας εργασίας και η συνεισφορά του έδρασε καταλυτικά στην έκβαση της διπλωματικής μου εργασίας.

Τέλος, το μεγαλύτερο ευχαριστώ θα ήθελα να το πω στην οικογένεια μου, στους γονείς μου Αναστάσιο και Μαρία, τα αδέρφια μου Χρυσόστομο, Γιάννη, Ευθυμία, Δέσποινα, καθώς και την γυναίκα μου Ζωή, που ο καθένας πίστευε σε μένα όλα αυτά τα χρόνια δείχνοντας υπομονή και τη συμπαράστασή του με κάθε τρόπο.

Δημήτριος Χατζηγεωργίου

Βόλος 2023

ΥΠΕΥΘΥΝΗ ΔΗΛΩΣΗ ΠΕΡΙ ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΗΣ ΔΕΟΝΤΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΠΝΕΥΜΑΤΙΚΩΝ ΔΙΚΑΙΩΜΑΤΩΝ

«Με πλήρη επίγνωση των συνεπειών του νόμου περί πνευματικών δικαιωμάτων, δηλώνω ρητά ότι η παρούσα διπλωματική εργασία, καθώς και τα ηλεκτρονικά αρχεία και πηγαίοι κώδικες που αναπτύχθηκαν ή τροποποιήθηκαν στα πλαίσια αυτής της εργασίας, αποτελεί αποκλειστικά προϊόν προσωπικής μου εργασίας, δεν προσβάλλει κάθε μορφής δικαιώματα διανοητικής ιδιοκτησίας, προσωπικότητας και προσωπικών δεδομένων τρίτων, δεν περιέχει έργα/εισφορές τρίτων για τα οποία απαιτείται άδεια των δημιουργών/δικαιούχων και δεν είναι προϊόν μερικής ή ολικής αντιγραφής, οι πηγές δε που χρησιμοποιήθηκαν περιορίζονται στις βιβλιογραφικές αναφορές και μόνον και πληρούν τους κανόνες της επιστημονικής παράθεσης. Τα σημεία όπου έχω χρησιμοποιήσει ιδέες, κείμενο, αρχεία ή/και πηγές άλλων συγγραφέων, αναφέρονται ευδιάκριτα στο κείμενο με την κατάλληλη παραπομπή και η σχετική αναφορά περιλαμβάνεται στο τμήμα των βιβλιογραφικών αναφορών με πλήρη περιγραφή. Δηλώνω επίσης ότι τα αποτελέσματα της εργασίας δεν έχουν χρησιμοποιηθεί για την απόκτηση άλλου πτυχίου. Αναλαμβάνω πλήρως, ατομικά και προσωπικά, όλες τις νομικές και διοικητικές συνέπειες που δύναται να προκύψουν στην περίπτωση κατά την οποία αποδειχθεί, διαχρονικά, ότι η εργασία αυτή ή τμήμα της δεν μου ανήκει διότι είναι προϊόν λογοκλοπής».

Ο Δηλών

Δημήτριος Χατζηγεωργίου

Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία

Μείωση τάξης φυσικών μοντέλων με μεθόδους δεδομένων

Δημήτριος Χατζηγεωργίου

Περίληψη

Η Παραμετρική Μείωση Τάξης Μοντέλου με βάση τα δεδομένα (pMOR) είναι μια σύγχρονη προσέγγιση στον τομέα της υπολογιστικής επιστήμης και της μηχανικής που αποσκοπεί στη μείωση της πολυπλοκότητας των παραμετρικά μεταβαλλόμενων συστημάτων. Σε πολλά σενάρια του πραγματικού κόσμου, οι πλήρεις προσομοιώσεις μπορεί να είναι υπολογιστικά εντατικές, ιδίως όταν μεταβάλλονται οι παράμετροι του συστήματος. Οι τεχνικές μείωσης παραμετρικής τάξης μοντέλου (pMOR) προσπαθούν να εξάγουν ένα μοντέλο μειωμένης τάξης (ROM) που προσεγγίζει τη συμπεριφορά του αρχικού συστήματος για διάφορες τιμές παραμέτρων, αλλά με ένα κλάσμα του υπολογιστικού κόστους.

Η μείωση της τάξης είναι η διαδικασία μείωσης της πολυπλοκότητας ενός μαθηματικού ή φυσικού μοντέλου, διατηρώντας παράλληλα τα βασικά χαρακτηριστικά του. Η μείωση της τάξης μπορεί να οδηγήσει σε εξοικονόμηση υπολογιστικών πόρων και σε ταχύτερες προσομοιώσεις ή προβλέψεις.

Η παρούσα διατριβή, εξετάζει τις μεθόδους που βασίζονται σε δεδομένα και μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε συνδυασμό με τις παραδοσιακές τεχνικές μείωσης μοντέλου για την εξαγωγή χαμηλής διάστασης μοντέλα απευθείας από τα δεδομένα.

Αυτές οι μέθοδοι μπορούν να παρέχουν ακριβή και αποτελεσματικά μοντέλα χαμηλής διάστασης που αποτυπώνουν τα βασικά χαρακτηριστικά των φυσικών συστημάτων, θέτοντας τις βάσεις για μελλοντικές εξελίξεις σε αυτόν τον διεπιστημονικό τομέα.

Ο στόχος είναι να αποκτηθεί ένα μοντέλο μειωμένης τάξης που να καταγράφει με ακρίβεια τα βασικά χαρακτηριστικά του συστήματος και να μπορεί να χρησιμοποιηθεί για σκοπούς ελέγχου, πρόβλεψης ή βελτιστοποίησης.

Λέξεις-κλειδιά:

Νόμοι του Kirchhoff, Τροποποιημένη Ανάλυση Κόμβων, Μέθοδοι υποβιβασμού τάξης μοντέλου(MOR), Reduced basis και POD μέθοδοι, Eigenvalue based MOR μέθοδοι, Gramian based MOR μέθοδοι, Moment matching μέθοδοι, υπόχωρος Krylov, επαναληπτική μέθοδος Arnoldi, Παραμετρικές μέθοδοι υποβιβασμού τάξης μοντέλου (PMOR), μέθοδος balanced truncation, αλγόριθμος SVD, Ανάλυση παλινδρόμησης

Master's Thesis

Order reduction of physical models with data-driven methods

Dimitrios Chatzigeorgiou

Abstract

Parametric Model Order Reduction based on Data (pMOR) is a modern approach in the field of computer science and engineering that aims to reduce the complexity of parametrically varying systems. In many real-world scenarios, full simulations can be computationally intensive, especially when the system parameters change. Parametric model order reduction (pMOR) techniques attempt to derive a model of reduced order order (ROM) that approximates the behaviour of the original system for various parameter values, but with a fraction of the computational cost.

Order reduction is the process of reducing the complexity of a mathematical or physical model while maintaining its basic characteristics. Order reduction can lead to savings in computational resources and faster simulations or predictions.

In this thesis, we review data-driven methods that can be used in conjunction with traditional reduction techniques model extraction techniques to extract low-dimensional models directly from data.

These methods can provide accurate and efficient low-dimensional models that capture the basic characteristics of physical systems, setting the stage for future developments in this interdisciplinary field.

The goal is to obtain a reduced-order model that accurately captures the basic characteristics of the system and can be used for control, prediction, or optimization purposes.

Keywords:

Kirchhoff's Laws, Modified Node Analysis (MNA), Model Order Reduction Methods (MOR), Reduced basis and POD methods, Eigenvalue based MOR methods, Gramian based MOR methods, Moment matching methods, Krylov subspace, Arnoldi repetitive method, balanced truncation method, SVD algorithm, Regression Analysis

Πίνακας περιεχομένων

Ευχαριστίες	ix
Περίληψη	xii
Abstract	xiv
Πίνακας περιεχομένων	xvii
Κατάλογος σχημάτων	xxi
Κατάλογος πινάκων	xxiii
Συντομογραφίες	xxv
1 Εισαγωγή	1
1.1 Σκοπός της εργασίας	3
1.2 Διάρθρωση της διπλωματικής Εργασίας	4
2 Μαθηματικό Υπόβαθρο	7
2.1 Βασικές έννοιες ηλεκτρικών κυκλωμάτων	7
2.1.1 Γραμμικά κυκλωματικά στοιχεία	7
2.1.2 Μελέτη ενός ηλεκτρικού κυκλώματος	9
2.1.3 Νόμοι του Kirchhoff	10
2.2 Γραμμικά συστήματα	11
2.2.1 Συνάρτησης μεταφοράς από δυναμικές εξισώσεις	12
2.2.2 Πόλοι και Μηδενικά	13
2.3 Ορθοκανονικές βάσεις	14

3	Μέθοδοι υποβιβασμού τάξης μοντέλου (MOR)	17
3.1	Το πρόβλημα μείωσης του μοντέλου	17
3.2	Μέθοδος Moment Matching	21
3.3	Μέθοδος Proper Orthogonal Decomposition (POD)	25
3.3.1	Εισαγωγή στην ορθή ορθογώνια αποσύνθεση (POD)	25
3.3.2	Μαθηματική βάση	26
4	Παραμετρικές μέθοδοι υποβιβασμού τάξης μοντέλου (PMOR)	33
4.1	Παραμετρική μέθοδος υποβιβασμού τάξης μοντέλου (PMOR) με βάση τη μέθοδο moment-matching	34
4.2	Κατασκευή του παραμετροποιημένου μειωμένου μοντέλου	36
4.2.1	Δειγματοληψία παραμέτρων	36
4.2.2	Συνένωση της Βάσης	37
5	Μέθοδοι Data-driven	39
5.1	Μέθοδοι με βάση τα δεδομένα στην επιστήμη και τη μηχανική	39
5.2	Η άνοδος των προσεγγίσεων με γνώμονα τα δεδομένα	40
5.2.1	Πλεονεκτήματα έναντι των παραδοσιακών μεθόδων	41
5.3	Βασικές τεχνικές και μέθοδοι	41
5.3.1	Μηχανική μάθηση(Machine Learning)	41
5.3.2	Μείωση διαστάσεων (Dimensionality Reduction)	41
5.4	Προκλήσεις στα μοντέλα που βασίζονται σε δεδομένα	42
5.5	Συνδυασμός μοντέλων βασισμένων στη φυσική και στα δεδομένα	43
5.6	Μείωση παραμετρικής τάξης μοντέλου με βάση τα δεδομένα (Data-driven pMOR)	44
5.6.1	Βασικές έννοιες	44
5.6.2	Αναγκαιότητα προσεγγίσεων με γνώμονα τα δεδομένα	45
5.7	Μηχανική μάθηση στο pMOR	45
5.7.1	Δυνατότητες και προκλήσεις της μηχανική μάθησης στο pMOR	46
5.7.2	Εφαρμογές της Μηχανικής μάθησης στο pMOR	47
5.7.3	Μέθοδοι και τεχνικές pMOR με βάση τα δεδομένα	48
5.8	Ανάλυση παλινδρόμησης (Regression Analysis)	50
5.8.1	Τύποι ανάλυσης παλινδρόμησης	50

5.8.2	Βασικά στοιχεία ανάλυσης παλινδρόμησης	54
5.8.3	Εφαρμογές με χρήση της ανάλυσης παλινδρόμησης	54
5.8.4	Περιορισμοί στη χρήση της ανάλυσης παλινδρόμησης	55
6	Πειραματική διαδικασία	57
6.1	Περιγραφή του προβλήματος και της πειραματικής διαδικασίας	57
6.2	Ενδεικτικά αποτελέσματα προσομοίωσης	59
6.3	Παρατηρήσεις	65
7	Επίλογος και Συμπεράσματα	67
7.1	Σύνοψη και συμπεράσματα	67
7.2	Μελλοντικές επεκτάσεις	69
	Βιβλιογραφία	71

Κατάλογος σχημάτων

1.1	Τρία βασικά στοιχεία του πλαισίου με γνώμονα τα δεδομένα στο οποίο μπορεί να ενσωματωθεί η φυσική και η γνώση.	2
2.1	Γραμμικό κυκλωματικό στοιχείο αντίστασης	8
2.2	Γραμμικό κυκλωματικό στοιχείο πυκνωτή	9
2.3	Γραμμικό κυκλωματικό στοιχείο πηνίου	9
2.4	Σχηματική περιγραφή συστήματος με είσοδο και έξοδο	11
2.5	Συνάρτηση μεταφοράς	12
2.6	Αναπαράσταση Μετασχηματισμού Laplace στο μιγαδικό επίπεδο	14
3.1	Αρχική κατάσταση πριν τη διαδικασία του Model Order Reduction ενός LTI συστήματος	18
3.2	Τελική κατάσταση μετά τη διαδικασία του Model Order Reduction ενός LTI συστήματος	19
3.3	Υλοποίηση του αλγορίθμου Arndoli	24
3.4	Μέθοδος ορθής ορθογώνιας αποσύνθεσης (POD).	26
3.5	POD με τη μέθοδο του snapshot.	29
3.6	POD με τη μέθοδο του snapshot.	30
5.1	Αλλαγή του περιβάλλοντος με τη χρήση μεθόδων με βάση τα δεδομένα. . .	40
5.2	Διάγραμμα Venn της υβριδικής μοντελοποίησης, που δείχνει σχηματικά τις απαιτήσεις της γνώσης των εμπειρογνομόνων και των δεδομένων, την ερμηνευσιμότητα και τη δομή του μοντέλου.	42
5.3	Σχηματική απεικόνιση τριών αρχιτεκτονικών μοντέλων που χρησιμοποιούν συνδυασμός των παραδοσιακών ντετερμινιστικών μοντέλων με τις μεθόδους που βασίζονται στα δεδομένα.	43

5.4	Καταγραφή των ηλεκτροχημικών και φυσικών δεδομένων ενός κυττάρου για πρόβλεψη βάσει δεδομένων και φυσικές ερμηνείες.	47
6.1	Διάγραμμα σύγκρισης των πραγματικών εξόδων με τις προβλέψεις.	59
6.2	Διάγραμμα σύγκρισης των πραγματικών με τις προβλεπόμενες τιμές για το νευρωνικό δίκτυο.	60
6.3	Διάγραμμα υπολοίπων για το νευρωνικό δίκτυο.	61
6.4	Ιστόγραμμα υπολοίπων για το νευρωνικό δίκτυο.	62
6.5	Καμπύλη μάθησης για το νευρωνικό δίκτυο	63
6.6	Πραγματική vs Προβλεπόμενη για κάθε μοντέλο (Neural Network and Polynomial Regression)	64

Κατάλογος πινάκων

3.1	Διαφορές Gramian based MOR και Moment Matching	21
6.1	Χαρακτηριστικά του νευρωνικού δικτύου.	59
6.2	Μετρικές σφάλματος μοντέλου ως συγκριτικός πίνακας.	65
6.3	Χαρακτηριστικά του συστήματος	65

Συντομογραφίες

KCL	Kirchoff's Current Low
KVL	Kirchoff's Voltage Low
LTl	Linear Time Invariant
MIMO	Multiple-input Multiple-output
M.M.M.	Moment Matching Method
MNA	Modified Nodal Analysis
MOR	Model Order Reduction
ML	Machine Learning
NN	Neural Network
PRIMA	Passive Reduced-Order Interconnect Macromodelling Algorithm
PMOR	Parametric Model Order Reduction
ROM	Reduced Order Model

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Η Παραμετρική Μείωση Τάξης Μοντέλου με βάση τα δεδομένα (pMOR) είναι μια σύγχρονη προσέγγιση στον τομέα της υπολογιστικής επιστήμης και της μηχανικής που αποσκοπεί στη μείωση της πολυπλοκότητας των παραμετρικά μεταβαλλόμενων συστημάτων. Σε πολλά σενάρια του πραγματικού κόσμου, οι πλήρεις προσομοιώσεις μπορεί να είναι υπολογιστικά εντατικές, ιδίως όταν μεταβάλλονται οι παράμετροι του συστήματος. Οι τεχνικές μείωσης παραμετρικής τάξης μοντέλου (pMOR) προσπαθούν να εξάγουν ένα μοντέλο μειωμένης τάξης (ROM) που προσεγγίζει τη συμπεριφορά του αρχικού συστήματος για διάφορες τιμές παραμέτρων, αλλά με ένα κλάσμα του υπολογιστικού κόστους.

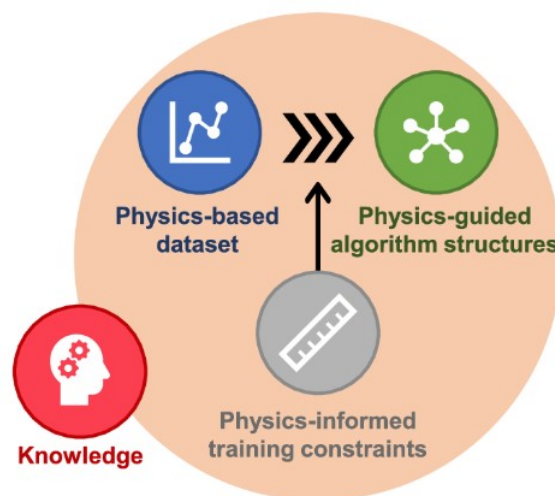
Οι μεθοδολογίες με γνώμονα τα δεδομένα, δεδομένα που συχνά είναι αποτελέσματα προσομοίωσης για διάφορες τιμές παραμέτρων, ενισχύονται από την έξαρση των αισθητήρων και τις βελτιωμένες δυνατότητες αποθήκευσης και επεξεργασίας δεδομένων, γίνονται όλο και πιο διαδεδομένες σε διάφορα επιστημονικά και μηχανολογικά πεδία.

Ο σχεδιασμός ηλεκτρικών κυκλωμάτων, ακρογωνιαίος λίθος των σύγχρονων ηλεκτρονικών και επικοινωνιακών συστημάτων, έχει εξελιχθεί σε ένα περίπλοκο πεδίο, που απαιτεί ακριβείς προσομοιώσεις για να διασφαλιστεί η βέλτιστη απόδοση. Η πρωταρχική πρόκληση έγκειται στην ταχεία προσομοίωση ολοκληρωμένων κυκλωμάτων που κατακλύζονται από ποικίλα εξαρτήματα, όπως αντιστάσεις, πυκνωτές και πηγές τάσης. Οι παραδοσιακές μέθοδοι συχνά υπολείπονται από άποψη ταχύτητας και αποδοτικότητας. Παράλληλα με τον πολυπλασιασμό των αισθητήρων και τη δυνατότητα αποθήκευσης και επεξεργασίας μεγάλων συνόλων δεδομένων, υπάρχει μια στροφή προς τη χρήση μεθόδων με γνώμονα τα δεδομένα σε πολλούς τομείς της επιστήμης και της μηχανικής.[1]

Αυτές οι μέθοδοι μπορούν να αποκαλύψουν γνώσεις που δεν είναι άμεσα εμφανείς από

την παραδοσιακή μοντελοποίηση, ιδίως σε πολύπλοκα συστήματα όπου οι αλληλεπιδράσεις μπορεί να μην είναι πλήρως κατανοητές. Έτσι, αυτή η υβριδική προσέγγιση του συνδυασμός μοντέλων που βασίζονται στη φυσική με μεθόδους που βασίζονται σε δεδομένα, μπορεί να προσφέρει το καλύτερο και από τους δύο κόσμους. Τα στερεά θεμέλια της μοντελοποίησης που βασίζεται στη φυσική και την ευελιξία και προσαρμοστικότητα των τεχνικών που βασίζονται σε δεδομένα.

Χρησιμοποιώντας ένα σύνολο δεδομένων που βασίζεται στο πλαίσιο Modified Nodal Analysis (MNA), η παρούσα έρευνα χρησιμοποιεί την ορθή ορθογώνια αποσύνθεση (Proper Orthogonal Decomposition - POD) για να αναλύσει τις υψηλής διάστασης εξόδους, απομονώνοντας τα πιο κρίσιμα μοτίβα. Μετά την προετοιμασία των δεδομένων, εκπαιδεύονται πολλαπλά μοντέλα μηχανικής μάθησης και αξιολογούνται με βάση την προβλεπτική τους ακρίβεια. Ο πρωταρχικός στόχος δεν είναι μόνο η προσομοίωση της συμπεριφοράς των ηλεκτρικών κυκλωμάτων, αλλά η προσφορά ενός εργαλείου που μπορεί να επεκταθεί και σε άλλα πεδία, από τη μοντελοποίηση του κλίματος έως τη συντήρηση βιομηχανικών μηχανημάτων.



Σχήμα 1.1: Τρία βασικά στοιχεία του πλαισίου με γνώμονα τα δεδομένα στο οποίο μπορεί να ενσωματωθεί η φυσική και η γνώση.

Η μείωση της τάξης είναι η διαδικασία μείωσης της πολυπλοκότητας ενός μαθηματικού ή φυσικού μοντέλου, διατηρώντας παράλληλα τα βασικά χαρακτηριστικά του. Η μείωση της τάξης μπορεί να οδηγήσει σε εξοικονόμηση υπολογιστικών πόρων και σε ταχύτερες προσομοιώσεις ή προβλέψεις. Οι μέθοδοι που βασίζονται σε δεδομένα μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε συνδυασμό με τις παραδοσιακές τεχνικές μείωσης μοντέλου για την εξαγωγή

χαμηλής διάστασης μοντέλα απευθείας από τα δεδομένα.

Μια δημοφιλής μέθοδος με γνώμονα τα δεδομένα για τη μείωση της τάξης είναι η ορθή ορθογώνια αποσύνθεση (Proper Orthogonal Decomposition) (POD), επίσης γνωστή ως ανάλυση κύριων συνιστωσών (PCA). Η POD είναι μια μαθηματική τεχνική που εξάγει κυρίαρχους τρόπους ή πρότυπα από ένα σύνολο δεδομένων, μειώνοντας τη διαστατικότητα των δεδομένων, διατηρώντας παράλληλα τις πιο σημαντικές πληροφορίες.

Συνοψίζοντας, οι μέθοδοι με βάση τα δεδομένα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να συμπληρώσουν τις παραδοσιακές τεχνικές μείωσης μοντέλων για τη μείωση της τάξης των φυσικών μοντέλων. Αυτές οι μέθοδοι μπορούν να παρέχουν ακριβή και αποτελεσματικά μοντέλα χαμηλής διάστασης που αποτυπώνουν τα βασικά χαρακτηριστικά των φυσικών συστημάτων, θέτοντας τις βάσεις για μελλοντικές εξελίξεις σε αυτόν τον διεπιστημονικό τομέα.

1.1 Σκοπός της εργασίας

Σκοπός της παρούσας μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας είναι, να διερευνηθούν οι δυνατότητες και η αποτελεσματικότητα της παραμετρικής μείωσης της τάξης μοντέλου με βάση τα δεδομένα (pMOR) στην υπολογιστική επιστήμη και τη μηχανική. Αυτή η σύγχρονη τεχνική προσανατολίζεται στην απλούστευση πολύπλοκων, παραμετρικά μεταβαλλόμενων συστημάτων, τα οποία σε εφαρμογές του πραγματικού κόσμου συχνά απαιτούν μεγάλους υπολογιστικούς πόρους, ιδίως όταν οι παράμετροι αυξομειώνονται. Μέσω της εφαρμογής του pMOR, η εργασία αυτή αποσκοπεί στην ανάπτυξη ενός μοντέλου μειωμένης τάξης (ROM) που μπορεί να αντικατοπτρίζει με ακρίβεια τη συμπεριφορά του πρωτογενούς συστήματος υπό ποικίλες τιμές παραμέτρων, ενώ παράλληλα μειώνει σημαντικά τις υπολογιστικές απαιτήσεις.

Υπογραμμίζεται, επίσης, η αυξανόμενη σημασία των μεθοδολογιών που βασίζονται στα δεδομένα σε επιστημονικούς και μηχανολογικούς τομείς. Αυτές οι μεθοδολογίες, που προωθούνται από τις εξελίξεις στην τεχνολογία αισθητήρων και τις δυνατότητες επεξεργασίας δεδομένων, χρησιμοποιούν αλγορίθμους μηχανικής μάθησης, όπως νευρωνικά δίκτυα, παλινδρόμηση και δέντρα αποφάσεων, για να διακρίνουν αυτόνομα μοτίβα και σχέσεις στα δεδομένα, παρακάμπτοντας την ανάγκη για ρητό προγραμματισμό βάσει κανόνων. Έμφαση δίνεται επίσης σε τεχνικές όπως η ορθή ορθογώνια αποσύνθεση (POD) που μετατρέπουν τα δεδομένα υψηλής διάστασης σε μια πιο αναλυτική μορφή χαμηλότερης διάστασης.

Παράλληλα, φαίνεται η ικανότητα της μεθόδου pMOR να επιτυγχάνει μείωση της τάξης του μοντέλου, εξασφαλίζοντας ότι το νέο σύστημα μοιάζει πολύ με τη συμπεριφορά του αρχικού. Τα πειράματά, που έχουν πραγματοποιηθεί για την παρούσα εργασία, αποκαλύπτουν περαιτέρω ότι ορισμένες τεχνικές μπορούν να αποδώσουν αποτελέσματα σχεδόν πανομοιότυπα με τα αρχικά κυκλώματα, ανεξάρτητα από τον αριθμό των θυρών.

Έτσι, η συγχώνευση της παραδοσιακής μοντελοποίησης με τις τεχνικές που βασίζονται σε δεδομένα, τονίζει τις συνδυασμένες δυνατότητές τους στην πρόβλεψη περίπλοκων φυσικών φαινομένων και τη βελτίωση των μηχανολογικών σχεδίων. Καθώς η ψηφιακή εποχή εξελίσσεται, με την αυξανόμενη διαθεσιμότητα δεδομένων και τις υπολογιστικές ικανότητες, η αρμονική ενσωμάτωση ανθεκτικών μοντέλων που βασίζονται στη φυσική με ευέλικτες προσεγγίσεις που βασίζονται στα δεδομένα, προσφέρουν μια ολιστική λύση στις προκλήσεις αυτής της εποχής με την αφθονία δεδομένων.

1.2 Διάρθρωση της διπλωματικής Εργασίας

Στο κεφάλαιο 2 παρουσιάζεται το θεωρητικό υπόβαθρο, που είναι απαραίτητο για την κατανόηση των εργαλείων που εφαρμόζονται στα επόμενα κεφάλαια. Γίνεται λόγος για γραμμικά κυκλώματα στοιχεία, διάφορες έννοιες που μας βοηθούν στην αποτύπωση και μελέτη ενός ηλεκτρικού κυκλώματος, τον τρόπο παραγωγής μία συνάρτηση μεταφοράς από δυναμικές εξισώσεις καθώς και τι είναι ορθοκανονικές βάσεις.

Στο Κεφάλαιο 3 γίνεται αναφορά γενικά στις μεθόδους υποβιβασμού τάξης μοντέλου MOR, τη μέθοδο αντιστοίχισης ροπών moment matching, καθώς και λεπτομερή αναφορά στη μέθοδο ορθής ορθογώνιας αποσύνθεσης (POD).

Στο Κεφάλαιο 4 περιγράφονται οι παραμετρικές μέθοδοι υποβιβασμού τάξης μοντέλου PMOR.

Στο Κεφάλαιο 5 περιγράφονται οι Μέθοδοι με βάση τα δεδομένα, καθώς και λεπτομερής αναφορά στη μείωση παραμετρικής τάξης μοντέλου με βάση τα δεδομένα. Επίσης, γίνεται αναφορά στην ανάλυση παλινδρόμησης (Regression Analysis).

Στο Κεφάλαιο 6 περιγράφεται η πειραματική διαδικασία και δίνονται ενδεικτικά αποτελέσματα της προσομοίωσης.

Τέλος, στο κεφάλαιο 7 συνοψίζεται στον επίλογο, τα συμπεράσματα και τις μελλοντικές επεκτάσεις της παρούσας εργασίας.

Κεφάλαιο 2

Μαθηματικό Υπόβαθρο

2.1 Βασικές έννοιες ηλεκτρικών κυκλωμάτων

2.1.1 Γραμμικά κυκλωματικά στοιχεία

Αρχικά θα ορίσουμε την έννοια του ηλεκτρικού κυκλώματος, που είναι μια κλειστή διαδρομή, αγωγή από το ηλεκτρικό ρεύμα. Σε αυτό το κύκλωμα τα στοιχεία τα οποία συμμετέχουν ονομάζονται ηλεκτρικά στοιχεία.[2] [3]

Αυτά τα ηλεκτρικά στοιχεία ονομάζονται με τη σειρά τους, ηλεκτρικά στοιχεία δύο ακροδεκτών ή κυκλωματικά στοιχεία και χαρακτηρίζονται από:

- Ρεύμα κλάδου, όπου είναι το ρεύμα που το διαρρέει
- Τάση κλάδου, όπου είναι η τάση που αναπτύσσεται στα άκρα του

Συναρτήσεις του χρόνου αποτελεί τόσο το ρεύμα, όσο και η τάση κλάδου και η σχέση που ενώνει το ρεύμα και την τάση κλάδου εξαρτάται από τη φύση του ηλεκτρικού στοιχείου. Η σχέση αυτή ονομάζεται, σχέση $v - i$ ή χαρακτηριστική $v - i$ του στοιχείου δύο ακροδεκτών. Αυτά τα ηλεκτρικά στοιχεία που συναντάμε στα ηλεκτρικά κυκλώματα μπορούμε να τα κατατάξουμε σε δύο βασικές κατηγορίες:

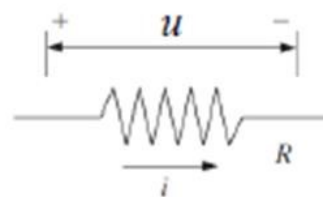
- Ενεργά ηλεκτρικά στοιχεία: είναι τα στοιχεία του κυκλώματος που παρέχουν ηλεκτρική ενέργεια στο κύκλωμα και πολλές φορές αναφέρονται και ως πηγές ηλεκτρικής ενέργειας. Αυτές οι πηγές χωρίζονται με τη σειρά τους, σε:
 1. Πηγές συνεχούς τάσης

2. Πηγές εναλλασσόμενης τάσης
 3. Πηγές συνεχούς ρεύματος
 4. Πηγές εναλλασσόμενου ρεύματος
 5. Εξαρτώμενες πηγές
- Παθητικά ηλεκτρικά στοιχεία: είναι τα στοιχεία εκείνα τα οποία καταναλώνουν ή αποθηκεύουν ενέργεια, αλλά δεν παράγουν ενέργεια. Η ενέργεια που καταναλώνεται αποθηκεύεται σε ηλεκτρική ενέργεια ή σε ενέργεια μαγνητικού πεδίου ή ακόμα μπορεί να μετατραπεί σε άλλη μορφή ενέργειας, όπως είναι η θερμική ενέργεια (φαινόμενο joule) χωρίς βέβαια να ενισχύεται η ισχύς της εξόδου των στοιχείων αυτών. Οι εξισώσεις των παθητικών ηλεκτρικών στοιχείων μπορούν να γραφούν υπό τη μορφή:

$$i_k(t) = g_k u(t) + C_k \frac{du_k(t)}{dt} + S_k(t) \quad (2.1)$$

Τα κυριότερα γραμμικά κυκλωματικά στοιχεία είναι τα ακόλουθα με τα κύρια τρία να είναι:

Αντιστάτης ή στοιχείο αντίστασης Ο αντιστάτης ή πιο συνηθισμένα αντίσταση είναι το ηλεκτρικό στοιχείο, το οποίο κατά τη διέλευση ηλεκτρικού ρεύματος, έχει την τάση να μετατρέπει την ηλεκτρική ενέργεια σε θερμότητα.

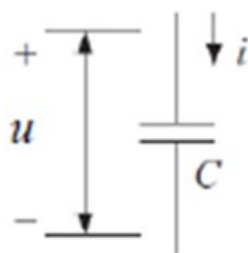


$$u(t) = ri(t)$$

$$i(t) = gu(t) \quad (g = 1/r)$$

Σχήμα 2.1: Γραμμικό κυκλωματικό στοιχείο αντίστασης

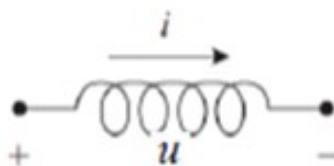
Πυκνωτής ή στοιχείο χωρητικότητας Ο πυκνωτής ή αλλιώς στοιχείο χωρητικότητας, είναι ένα στοιχείο του κυκλώματος, το οποίο συντελεί στην αποθήκευση ηλεκτρικής ενέργειας με τη βοήθεια του ηλεκτρικού φορτίου το οποίο συσσωρεύεται στις αγωγικές επιφάνειες του.



$$i(t) = C \frac{du(t)}{dt}$$

Σχήμα 2.2: Γραμμικό κυκλωματικό στοιχείο πυκνωτή

Πηνίο ή στοιχείο επαγωγής Ο επαγωγέας ή στοιχείο αυτεπαγωγής είναι το χαρακτηριστικό στοιχείο του κυκλώματος, το οποίο επιτρέπει την αποθήκευση μαγνητικής ενέργειας με τη βοήθεια μαγνητικής ροής, που εμπλέκει το αγωγίμο τύλιγμα του πηνίου.



$$u(t) = L \frac{di(t)}{dt}$$

Σχήμα 2.3: Γραμμικό κυκλωματικό στοιχείο πηνίου

2.1.2 Μελέτη ενός ηλεκτρικού κυκλώματος

Για την κατανόηση των εννοιών που περιγράφονται στην παρούσα διπλωματική εργασία, θα ορίσουμε κάποια βασικά προσδιοριστικά χαρακτηριστικά που συναντάμε σε κάθε ηλεκτρικό κύκλωμα και μας βοηθούν στην μελέτη τους. Αυτά είναι:

Κλάδος (branch): Κάθε στοιχείο δύο ακροδεκτών ονομάζεται κλάδος (branch) του κυκλώματος, με κάθε κλάδο να διαρρέεται από ένα ηλεκτρικό ρεύμα.

Κόμβος (node): Το σημείο τομής δύο ή περισσότερων κλάδων ονομάζεται κόμβος (node). Κάθε κόμβος βρίσκεται σε κάποιο δυναμικό, με τα δυναμικά των κόμβων να μετρούνται ως προς

τον ίδιο κόμβο, που λέγεται κόμβος αναφοράς ή κοινός κόμβος. Ο κόμβος αναφοράς σημειώνεται με το σύμβολο της γείωσης. Από τα παραπάνω γίνεται φανερό ότι το δυναμικό του κόμβου είναι στην ουσία η διαφορά δυναμικού του κόμβου από το δυναμικό του κόμβου αναφοράς. Έτσι, δεν έχουμε να κάνουμε με το απόλυτο δυναμικό του κόμβου, αλλά με την τάση του κόμβου. Σημειώνουμε ότι η επιλογή του κόμβου αναφοράς είναι αυθαίρετη. Η διαφορά δυναμικού ανά μέσα στους δύο κόμβους των κλάδων λέγεται τάση κλάδου. Τα ρεύματα κλάδων και οι τάσεις κλάδων είναι οι βασικές μεταβλητές των ηλεκτρικών κυκλωμάτων.

Βρόχος (mesh): Οι κλειστές τροχιές που σχηματίζουν οι κλάδοι ενός κυκλώματος ονομάζονται βρόχοι (θηλιές). Ένας βρόχος που δεν έχει στο εσωτερικό του άλλους κλάδους λέγεται απλός βρόχος (mesh). Ο βρόχος που περιέχει και άλλους κλάδους στο εσωτερικό του λέγεται σύνθετος βρόχος (loop).

2.1.3 Νόμοι του Kirchhoff

Με βάση τα στοιχεία που προαναφέραμε, καθορίζονται οι σχέσεις τάσης – ρεύματος μεταξύ τους. Η ανάλυση και η σχεδίαση των ηλεκτρονικών κυκλωμάτων κάνουν συνεχή χρήση ενός πλήθους σημαντικών τεχνικών από τη βασική θεωρία δικτυωμάτων. Με τα κυκλώματα να αναλύονται τις περισσότερες φορές με χρήση ενός συνδυασμού:

1. **του Νόμου Τάσης του Kirchhoff, (Kirchhoff Voltage Law, KVL):** Ο οποίος αναφέρει ότι το αλγεβρικό άθροισμα των ηλεκτρεγερτικών δυνάμεων (ΗΕΔ) σε κάθε κλειστό βρόγχο ενός κυκλώματος, είναι ίσο με το αλγεβρικό άθροισμα των πτώσεων τάσης (διάφορα δυναμικού) στους επιμέρους κλάδους που απαρτίζουν τον βρόχο, δηλαδή πως η τάση κατά μήκος κάθε κλάδου είναι ίση με τη διαφορά δυναμικού των άκρων του κόμβου.
2. **του Νόμου Ρεύματος του Kirchhoff, (Kirchhoff Current Law, KCL):** Ο οποίος αναφέρει ότι το άθροισμα όλων των εντάσεων που εισέρχονται σε ένα κόμβο, ισούται με το άθροισμα των εντάσεων που εξέρχονται από τον κόμβο, δηλαδή πως το αλγεβρικό άθροισμα των ρευμάτων που προσπίπτουν είναι 0.

Εαν θεωρήσουμε τι ακόλουθες σχέσεις:

$$\underline{u}(t) = \left[u_1(t) \quad , \dots , \quad u_m(t) \right]^T \quad (2.2)$$

$$\underline{V}(t) = \begin{bmatrix} V_1(t) & , \dots , & V_m(t) \end{bmatrix}^T \quad (2.3)$$

$$\underline{i}(t) = \begin{bmatrix} i_1(t) & , \dots , & i_m(t) \end{bmatrix}^T \quad (2.4)$$

Τότε από το νόμο τάσεων του Kirchhoff (Kirchhoff Voltage Law ή KVL) έχουμε:

$$\sum_{k=1}^m u_k(t) = 0 \Leftrightarrow \underline{u}(t) = A^T \underline{V}(t)$$

Τότε από το νόμο ρευμάτων του Kirchhoff (Kirchhoff Current Law ή KCL) έχουμε:

$$\sum_{k=1}^n i_k(t) = 0 \Leftrightarrow A \underline{i}(t) = 0$$

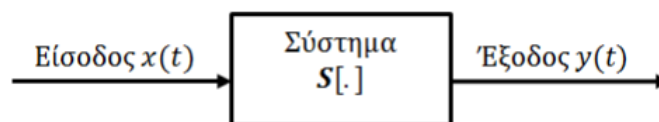
2.2 Γραμμικά συστήματα

Σύστημα ονομάζεται κάθε οντότητα που επενεργεί σε κάποιο σήμα $x(t)$ και ως αποτέλεσμα παράγει ένα (νέο) σήμα $y(t)$. Στο μαθηματικό κομμάτι, ένα σύστημα θεωρείται ως ένας μετασχηματισμός $S[\cdot]$ που μετασχηματίζει ένα σήμα $x(t)$ ένα άλλο σήμα $y(t)$ σύμφωνα με τη σχέση :

$$y(t) = S[x(t)]$$

Η προσέγγιση αυτή ονομάζεται σχέση εισόδου – εξόδου και περιγράφει ένα σύστημα στο πεδίο του χρόνου (time domain) με βάση την είσοδο και την έξοδό του, αγνοώντας πλήρως την εσωτερική δομή και περιγραφή του συστήματος.

Στο σχήμα 2.4, απεικονίζεται η έξοδος του $y(t)$ στη γενική της μορφή.



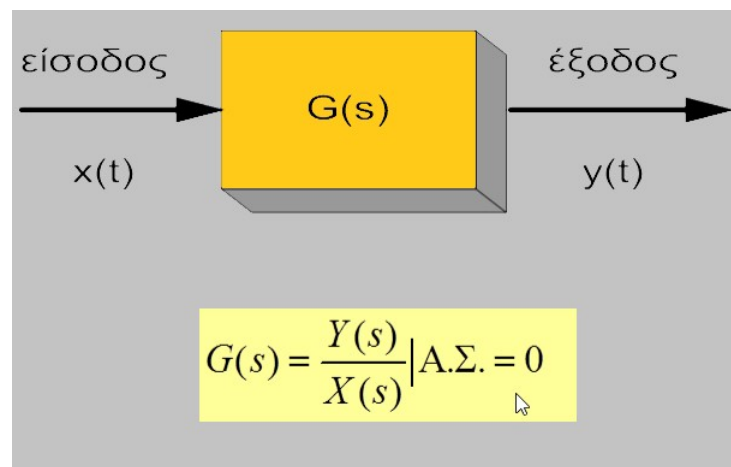
Σχήμα 2.4: Σχηματική περιγραφή συστήματος με είσοδο και έξοδο

Ένα σύστημα το οποίο βρίσκεται σε κατάσταση ηρεμίας χαρακτηρίζεται γραμμικό, αν και μόνο αν για δύο οποιαδήποτε δοθέντα σήματα $x_1(t)$ και $x_2(t)$ ισχύει:

$$F[\alpha_1 x_1(t) + \alpha_2 x_2(t)] = \alpha_1 F[x_1(t)] + \alpha_2 F[x_2(t)]$$

2.2.1 Συνάρτησης μεταφοράς από δυναμικές εξισώσεις

Συνάρτηση μεταφοράς (transfer function) $H(s)$ ορίζεται το πηλίκο του μετασχηματισμού Laplace της εξόδου ενός γραμμικού αμετάβλητου συστήματος προς το μετασχηματισμό Laplace της εισόδου του στο πεδίο της συχνότητας, όταν οι αρχικές συνθήκες είναι μηδενικές και αντιστοιχεί σε μία σχέση με την οποία περιγράφεται η δυναμική του συστήματος υπό εξέταση.



Σχήμα 2.5: Συνάρτηση μεταφοράς

Έχοντας αρχικά τις παρακάτω εξισώσεις, όπου η είσοδος συμβολίζεται με $x(t)$ και η έξοδος συμβολίζεται με $u(t)$:

$$E \frac{dx(t)}{dt} = Ax(t) + Bu(t) \quad (2.5)$$

$$y(t) = Cx(t) + Du(t) \quad (2.6)$$

Και παίρνουμε τον μετασχηματισμό Laplace σε κάθε μια από αυτές τις σχέσεις προκύπτει:

$$sX(s) - X(0) = AX(s) + BU(s) \quad (2.7)$$

$$y(t) = Cx(t) + Du(t) \quad (2.8)$$

Υποθέτοντας ότι έχουμε μηδενικές αρχικές συνθήκες, όταν δηλαδή έχει νόημα η συνάρτηση μεταφοράς, δηλαδή $X(0) = 0$, το παραπάνω σύστημα εξισώσεων γίνεται:

$$(sI - A)X(s) = B \quad (2.9)$$

$$Y(s) = CX(s) + DU(s) \quad (2.10)$$

Για να υπολογίσουμε τη συνάρτηση μεταφοράς ενός γραμμικού και χρονικά αμετάβλητου συστήματος λύνοντας την πρώτη εξίσωση 2.9 ως προς $X(s)$, έχουμε:

$$sX(s) - AX(s) = BU(s) \Rightarrow$$

$$(sI - A)X(s) = BU(s) \Rightarrow$$

$$X(s) = (sI - A)^{-1}BU(s)$$

και κάνοντας αντικατάσταση στη εξίσωση 2.10 ως προς $X(s)$, έχουμε:

$$Y(s) = C(sI - A)^{-1}BU(s) + DU(s) \Rightarrow$$

$$Y(s) = (C(sI - A)^{-1}B + D)U(s)$$

και τελικά προκύπτει η συνάρτηση μεταφοράς:

$$H(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = C(sI - A)^{-1}B + D \quad (2.11)$$

Συστήματα με βαθμό αριθμητή μεγαλύτερο από αυτόν του παρανομαστή, δε μπορούν να περιγραφούν από δυναμικές εξισώσεις στο χώρο κατάστασης, επομένως δεν έχουν λύση.

2.2.2 Πόλοι και Μηδενικά

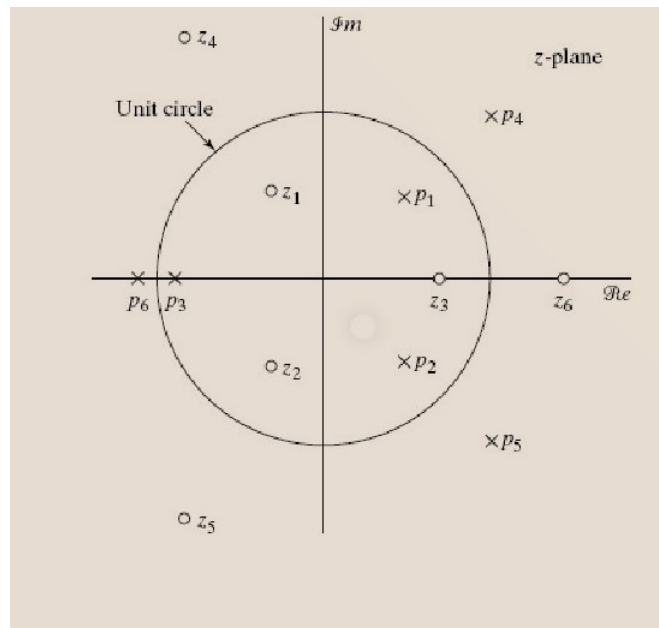
Ο μετασχηματισμός laplace σε συστήματα που περιγράφονται από διαφορικές εξισώσεις ορίζεται ως η ρητή συνάρτηση του s , δηλαδή είναι ο λόγος των πολυωνύμων του s :

$$H(s) = \frac{N(s)}{D(s)}$$

Θα ορίσουμε δυο έννοιες, οι οποίες θα μας βοηθήσουν στην αναπαράσταση των μετασχηματισμών laplace στο μιγαδικό επίπεδο.

- **Πόλοι της συνάρτησης μεταφοράς:** ορίζονται οι τιμές εκείνες, για τις οποίες μηδενίζεται το πολυώνυμο του παρανομαστή της συνάρτησης, δηλαδή $D(s) = 0$.
- **Μηδενικά μιας συνάρτησης μεταφοράς:** ορίζονται οι τιμές εκείνες για τις οποίες το πολυώνυμο του αριθμητή έχει μηδενική τιμή, δηλαδή $N(s) = 0$.

Η αναπαράσταση του μετασχηματισμού Laplace μπορεί να γίνει στο μιγαδικό επίπεδο, με τη χρήση των μηδενικών και των πόλων.



Σχήμα 2.6: Αναπαράσταση Μετασχηματισμού Laplace στο μιγαδικό επίπεδο

Ο yy' άξονας απεικονίζει το φανταστικό κομμάτι (Im) και ο xx' άξονας απεικονίζεται το πραγματικό κομμάτι (Re). Επίσης με $\times$ συμβολίζονται οι πόλοι και με $\circ$ τα μηδενικά.

2.3 Ορθοκανονικές βάσεις

Αρχικά, βάση του διανυσματικού χώρου, ονομάζουμε ένα σύνολο διανυσμάτων, το οποίο είναι γραμμικώς ανεξάρτητο αλλά ταυτόχρονα παράγει και τον χώρο.[4] Εάν σε μία βάση $\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ ενός υποχώρου V του R^n , κάθε διάνυσμά της είναι κάθετο σε κάθε άλλο διάνυσμα της βάσης αλλά και ανά δύο κάθετα μεταξύ τους, εάν δηλαδή το εσωτερικό τους γινόμενο είναι ίσο με μηδέν, τότε αυτή η βάση καλείται ορθογώνια βάση.

$$e_i e_j = 0, i \neq j$$

Εάν τα διανύσματα $e_1, e_2, \dots, e_k$ είναι επιπλέον μοναδιαία, τότε η βάση ονομάζεται ορθοκανονική ενός διανυσματικού χώρου, της οποίας κάθε διάνυσμα έχει μέτρο ίσο με τη μονάδα.

$$||e_i|| = 1$$

Επομένως, ξεκινώντας από οποιαδήποτε βάση μπορεί να κατασκευαστεί μια ορθογώνια βάση και έπειτα με μια διαδικασία ορθοκανονικοποίησης να γίνει Ορθοκανονική.

Η διαδικασία με την οποία θα κάνουμε τη βάση ορθογώνια ονομάζεται διαδικασία ορθογώνιοποίησης *Gramm – Schmidt*.

Έστω ο υποχώρος V του $\mathbb{R}^n$ και η βάση του $\{u_1, u_2, \dots, u_k\}$, θεωρούμε τα διανύσματα:

$$e_1 = u_1$$

$$e_j = u_j - \sum_{i=1}^{j-1} pr_{e_i} u_j, j = 2, 3, \dots, k$$

Στη συνέχεια εφόσον έχει προκύψει ότι το σύνολο $\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ αποτελεί ορθογώνια βάση του V , το σύνολο $s^* = \left\{ \frac{e_1}{|e_1|}, \frac{e_2}{|e_2|}, \dots, \frac{e_k}{|e_k|} \right\}$ θα αποτελεί τελικά την ορθοκανονική βάση

Κεφάλαιο 3

Μέθοδοι υποβιβασμού τάξης μοντέλου (MOR)

3.1 Το πρόβλημα μείωσης του μοντέλου

Όπως αναφέρθηκε και στην εισαγωγή της παρούσας διπλωματικής εργασίας, τα κυκλώματα που συναντάμε στην καθημερινότητά μας σε διάφορες εφαρμογές, αποτελούνται από εκατομμύρια στοιχεία. Τα μαθηματικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή αυτών των κυκλωμάτων αυξάνονται συνεχώς, με σκοπό τον ακριβή προσδιορισμό του αποτελέσματος [5] [4]. Ωστόσο αυτό έχει ως αποτέλεσμα, λόγω των πολύ μεγάλων διαστάσεων που έχουν τα μοντέλα αυτά, η επίλυση των γραμμικών συστημάτων που προκύπτουν από τέτοιας κλίμακας κυκλώματα να είναι ιδιαίτερα δύσκολη και σε κάποιες περιπτώσεις αδύνατη. Η χρήση τεχνικών μείωσης της τάξης μεγέθους των μοντέλων αυτών (Model Order Reduction (MOR)) να καθίσταται μία από τις πιο διαδεδομένες τεχνικές που αποσκοπούν στη μείωση της πολυπλοκότητας των γραμμικών κυκλωμάτων. [3] [6] [7].

Με την παραγωγή μικρότερων μοντέλων, που θα προσεγγίζουν σε μεγάλο βαθμό τις ιδιότητες των αρχικών μοντέλων, επιτυγχάνεται μείωση των απαιτούμενων υπολογισμών και η απλοποίηση των μαθηματικών μοντέλων, καθώς είναι πιο εύκολο και οικονομικό να προσομοιώσουν αυτά τα μοντέλα σε σχέση με τα αρχικά[8] [9] [10]

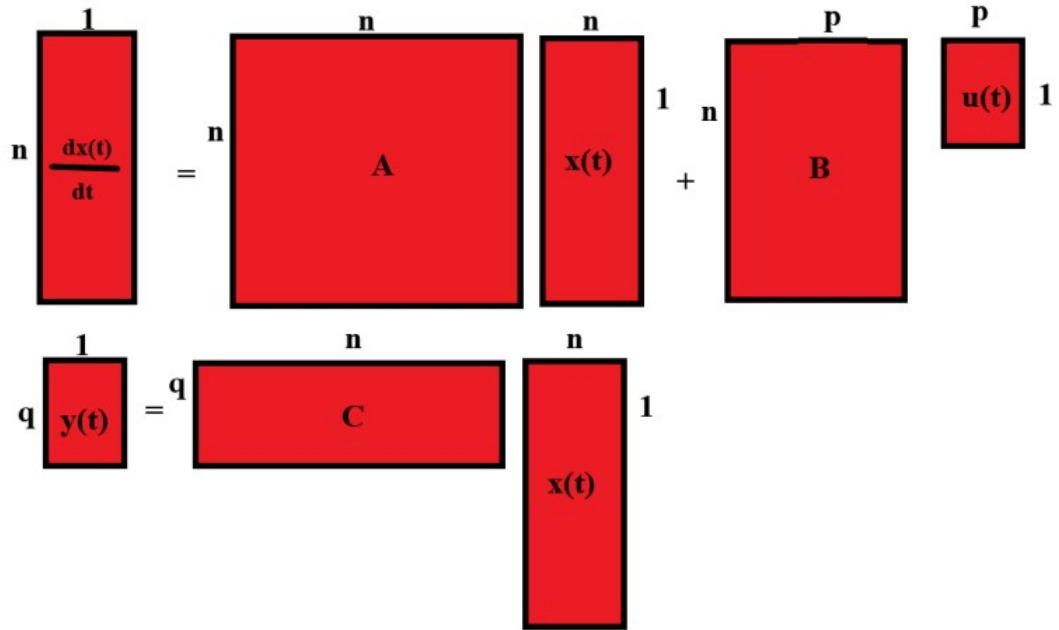
Οι τεχνικές μείωσης της τάξης μεγέθους των μοντέλων αυτών (Model Order Reduction (MOR)), είναι βασισμένες στη προβολή Projection-based Linear MOR[11] [12].

Αρχικά, θεωρώντας το γραμμικά μεταβλητό σύστημα χρόνου:

$$E \frac{dx(t)}{dt} = Ax(t) + Bu(t) \quad (3.1)$$

$$y(t) = Cx(t) \quad (3.2)$$

, όπου οι διαστάσεις τους είναι: $E, A \in R^{n \times n}$, $B \in R^{n \times m}$, $C \in R^{p \times n}$, $u \in R^m$, $y \in R^p$, $x \in R^n$ και n να είναι αρκετά μεγάλο.



Σχήμα 3.1: Αρχική κατάσταση πριν τη διαδικασία του Model Order Reduction ενός LTI συστήματος

Όλες οι υπάρχουσες τεχνικές μείωσης της τάξης μεγέθους των μοντέλων, Model Order Reduction (MOR), είναι βασισμένες στο MOR με βάση την προβολή [13] [14]. Δηλαδή, αυτό σημαίνει πρακτικά, το να βρεθεί ένας υποχώρος S_1 που προσεγγίζει την πολυπλοκότητα που βρίσκεται το διάνυσμα κατάστασης $x(t)$. Συνέχεια της διαδικασίας αποτελεί, η προσέγγιση του $x(t)$ από την προβολή του $\tilde{x}(t)$ στον υποχώρο S_1 .

Υποθέτοντας ότι έχει βρεθεί μια ορθοκανονική βάση $V = \{v_1, v_2, \dots, v_q\}$ του υποχώρου S_1 , τότε η προσέγγιση του $\tilde{x}(t)$ στον υποχώρο S_1 μπορεί να αναπαρασταθεί από τη βάση ως εξής:

$$E \frac{dx(t)}{dt} = Ax(t) + Bu(t) + e \quad (3.3)$$

$$\tilde{y}(t) = C\tilde{x}(t) \quad (3.4)$$

Και στη συνέχεια, εάν το σφάλμα e είναι ίσο με μηδέν ($e=0$) και η προβολή $W^T e = 0$ στον υποχώρο S_2 , όπου οι στήλες του W αποτελούν βάση του υποχώρου S_2 , προκύπτει:

$$W^T E \frac{dx(t)}{dt} = W^T A x(t) + W^T B u(t)$$

και

$$\tilde{y}(t) = C \tilde{x}(t)$$

Στο τέλος, εάν κάνουμε αντικατάσταση

$$\tilde{E} = W^T E V$$

$$\tilde{A} = W^T A V$$

$$\tilde{B} = W^T B$$

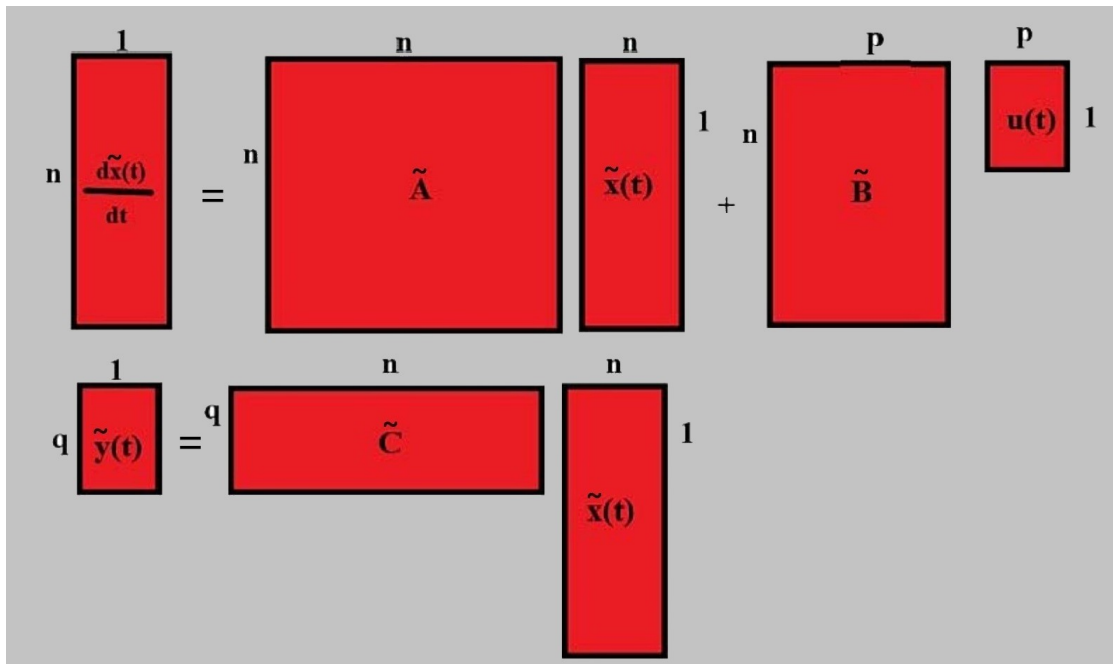
$$\tilde{C} = C V$$

προκύπτει το μειωμένο μοντέλο:

$$\tilde{E} \frac{d\tilde{x}(t)}{dt} = \tilde{A} \tilde{x}(t) + \tilde{B} u(t) \quad (3.5)$$

$$\tilde{y}(t) = \tilde{C} \tilde{x}(t) \quad (3.6)$$

όπου $\tilde{E}, \tilde{A} \in R^{q \times q}$, $\tilde{B} \in R^{q \times m}$, $\tilde{C} \in R^{p \times q}$, $u \in R^m$, $\tilde{y} \in R^p$, $\tilde{x} \in R^q$ και $q \ll n$.



Σχήμα 3.2: Τελική κατάσταση μετά τη διαδικασία του Model Order Reduction ενός LTI συστήματος

Το τελικό σύστημα, που περιγράφει η τελευταία εξίσωση, είναι πολύ μικρότερο σε σύγκριση με το αρχικό σύστημα, με την έννοια ότι υπάρχουν πολύ λιγότερες εξισώσεις στο δεύτερο από ότι στο πρώτο σύστημα και είναι ευκολότερο να λυθεί. Παράλληλα, μειώνεται και ο χρόνος προσομοίωσής της επίλυσης του συστήματος.

Όσον αφορά το σφάλμα μεταξύ των δύο συστημάτων θα πρέπει να είναι εντός αποδεκτής ανοχής. Το σφάλμα μπορεί να μετρηθεί μέσω του σφάλματος μεταξύ των διανυσμάτων κατάστασης $x(t)$, $\tilde{x}(t)$ ή μεταξύ των αποκρίσεων εξόδου $y(t)$, $\tilde{y}(t)$ ή μεταξύ των συναρτήσεων μεταφοράς των δύο συστημάτων.

Οι τεχνικές MOR έχουν ως κοινό σκοπό τη συμπεριφορά του μειωμένου μοντέλου που θα παράξουν, η οποία πρέπει να είναι επαρκώς κοντά με αυτήν του αρχικού μοντέλου στα πλαίσια της μέτρησης του σφάλματος. Το σημείο που διαφέρουν οι τεχνικές αυτές, είναι ο υπολογισμός των W και V .

Μερικές τεχνικές MOR που αξίζει να αναφέρουμε, είναι:

- **Reduced basis και POD μέθοδοι:** Υπολογίζουν τους πίνακες προβολής $W \in R^{rxn}$, $V \in R^{rxn}$ από τα στιγμιότυπα του διανύσματος κατάστασης $x(t)$ σε διάφορες χρονικές στιγμές.
- **Eigenvalue based MOR μέθοδοι:** Τα $W \in R^{rxn}$, $V \in R^{rxn}$ είναι ιδιοδιανύσματα ή αμετάβλητοι υποχώροι που αντιστοιχούν σε ιδιοτιμές των πινάκων (A, E) .
- **Gramian based MOR μέθοδοι:** Υπολογίζουν τους πίνακες προβολής $W \in R^{rxn}$, $V \in R^{rxn}$ από την ελεγχσιμότητα και παρατηρησιμότητα των Gramians.
- **Moment matching μέθοδοι:** Υπολογίζουν τους πίνακες προβολής $W \in R^{rxn}$, $V \in R^{rxn}$ από τα στιγμιότυπα της συνάρτησης μεταφοράς.

Διαδικασίες υποβιβασμού τάξης μοντέλου (MOR), καθώς προσεγγίσεις και προτάσεις που έχουν προταθεί τα τελευταία χρόνια είναι:

1. Μέθοδοι node elimination
2. Μέθοδοι Gramian based
3. Μέθοδοι Moment matching

Οι μέθοδοι Gramian based και Moment matching αποτελούν και τις πιο σημαντικές μεθόδους. Γίνεται μια μικρή σύγκριση μεταξύ των δύο αυτών μεθόδων, όπου παρατίθεται στον παρακάτω πίνακα 3.1.

Χαρακτηριστικά	Gramian based MOR	Moment Matching
Είναι κατάλληλες για συστήματα	Μικρής κλίμακας	Μεγάλης κλίμακας
Συγκεκριμένο όριο σφάλματος	Παρέχουν	Δεν Παρέχουν
Ιδιαιτερότητα	Διατηρούν την παθητικότητα του αρχικού συστήματος	Είναι υπολογιστικά αποδοτικές

Πίνακας 3.1: Διαφορές Gramian based MOR και Moment Matching

Τελικά, οι μέθοδοι αντιστοίχισης ροπών (Moment Matching Method) είναι πιο κλιμακωτές μέθοδοι και έτσι προτιμούνται περισσότερο για την μείωση τάξης μοντέλων ηλεκτρικών κυκλωμάτων.

3.2 Μέθοδος Moment Matching

Μία από τις πιο σημαντικές και επιτυχημένες μεθόδους MOR για γραμμικά συστήματα, βασίζεται στους υποχώρους Krylov. Αυτή, συνήθως ονομάζονται μέθοδος αντιστοίχισης ροπών (Moment Matching Method) ή Krylov subspace και είναι πολύ αποτελεσματικές σε προβλήματα προσομοίωσης κυκλώματων, καθώς τα μεγάλα παρασιτικά συστήματα αποτελούνται από πολύ μεγάλο αριθμό στοιχείων, θυρών και κόμβων που χρήζουν μείωσης τάξης μεγέθους. Μέθοδοι που βασίζονται στην αντιστοίχιση ροπών, Moment Matching, διατυπώνονται για να έχουν άμεση εφαρμογή στο γραμμικό μοντέλο που περιγράψαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, με τη μέθοδο μείωσης τάξης μεγέθους Model Order Reduction (MOR).

Εφαρμόζοντας τον μετασχηματισμό Laplace στις MNA εξισώσεις, που είδαμε στο κεφάλαιο 3, λαμβάνουμε το παρακάτω σύστημα:

$$Gx(s) + sCx(s) = Bu_{in}(s) \quad (3.7)$$

$$u_{out}(s) = L^T x(s) \quad (3.8)$$

Η συνάρτηση μεταφοράς του παραπάνω συστήματος είναι:

$$H(s) = L^T (G + sC)^{-1} B \quad (3.9)$$

Στόχος των συγκεκριμένων μεθόδων είναι η προσέγγιση το παραπάνω συστήματος με ένα μοντέλο χαμηλότερης τάξης μεγέθους $n \ll m$

$$G'x(s) + sC'x'(s) = B'u_{in}(s) \quad (3.10)$$

$$u'_{out}(s) = L'^T x'(s) \quad (3.11)$$

όπου οι $C', G' \in R^{n \times n}$, $X'(s) \in R^n$, $B' \in R^{n \times p}$.

Και τελικά προκύπτει ότι η συνάρτηση μεταφοράς του παραπάνω συστήματος θα είναι:

$$H'(s) = L'^T (G' + sC')^{-1} B' \quad (3.12)$$

και αν θεωρήσουμε $A = -G^{-1}C$ και $R = G^{-1}B$ η σχέση 5.6 προκύπτει:

$$H(s) = L^T (I - sA)^{-1} R \quad (3.13)$$

όπου ο $I \in R^{m \times m}$ είναι ο μοναδιαίος πίνακας.

Αξίζει να σημειωθεί ότι οι ιδιοτιμές του πίνακα A αναπαριστούν το σύνολο των πόλων της $H(s)$ και επεκτείνοντας το ανάπτυγμα τη σειρά Taylor της $H(s)$ στο $s = 0$, έχουμε:

$$H(s) = (M_0 + M_1 s + M_2 s^2 + \dots) \quad (3.14)$$

Οι συντελεστές $M_k \in R^{p \times p}$, ονομάζονται στιγμιότυπα της $H(s)$.

Η σχέση που υπολογίζει αυτά τις ροπές (moments) της $H(s)$ προκύπτει ως εξής:

$$(sI - A)(x_0 + x_1 s + x_2 s^2 + \dots) = B \quad (3.15)$$

$$x_0 = A^{-1}B, m_0 = Lx_0$$

$$x_1 = A^{-1}x_0, m_1 = Lx_1$$

$$x_2 = A^{-1}x_1, m_2 = Lx_2$$

...

και τελικά:

$$m_i = L(A^{-1})^i A^{-1}B$$

επομένως,

$$M_k = L^T (-G^{-1}C)^k G^{-1}B$$

$$M_k = L^T A^k R, k = 0, 1, 2, \dots$$

Και στόχος αποτελεί, το επιτυχημένο ταίριασμα των ροπών (moments):

$$M_k = M'_k A^k R, k = 0, 1, 2, \dots, 2q - 1$$

Στον αλγόριθμο της PRIMA η διαδικασία της αντιστοίχισης ροπών (moment matching) επιτυγχάνεται με τον μετασχηματισμό των πινάκων του αρχικού συστήματος, ως εξής:

$$G' = V^T G V$$

$$C' = V^T C V$$

$$B' = V^T B V$$

, όπου $V \in R^{m \times p}$.

Οι στήλες του V τέμνουν τον υποχώρο *krylov*:

$$K_r(A, R, q) = \text{span}(R, AR, A^2, \dots, A^{2q-1}R)$$

- $A \in R^{n \times n}$ και $R \in R^n$: Είναι τα αρχικά τα διανύσματα
- q : Είναι κάποιος δεδομένος θετικός ακέραιος, όπου ονομάζεται δείκτης της ακολουθίας *krylov*
- R, AR : Είναι τα διανύσματα που κατασκευάζουν τον υπόχωρο *krylov* και ονομάζονται βασικοί φορείς της ακολουθίας

Για τη δημιουργία μιας βάσης σε έναν πίνακα, κάνουμε χρήση της ακολουθίας *Krylov*[15] [16]. Ωστόσο η ακολουθία *Krylov* δεν είναι ορθοκανονική, και αυτό έχει ως αποτέλεσμα να χρειαζόμαστε μία κατάλληλη μέθοδο έτσι ώστε η ακολουθία μας να μετατραπεί σε ορθοκανονική. Μία τέτοια διαδικασία, για την υλοποίηση του υποχώρου *Krylov*, είναι η επαναληπτική μέθοδος *Arnoldi*.

Στη συνέχεια παρατίθεται ένα ενδεικτικό κομμάτι ψευδοκώδικα, με την υλοποίηση της *Arnoldi*.

```

Arnoldi Algorithm
1: procedure ARNOLDI( $A, V, m$ )
2:  $q_1 = \frac{v}{\|v\|}$ ;
3: for  $j = 0; j < m; j++$  do
4:    $z = Aq_j$ ;
5:   for  $i = 0; i < j; i++$  do
6:      $h_{i,j} = q_i^T z$ ;
7:      $z = z - h_{i,j}q_i$ ;
8:   end for
9:    $h_{j+1,j} = \|z\|$ ;
10:  if  $h_{j+1,j} == 0$  then
11:    quit;
12:  end if
13:   $q_{j+1} = \frac{z}{h_{j+1,j}}$ ;
14: end for
15: end procedure

```

Σχήμα 3.3: Υλοποίηση του αλγορίθμου Arnoldi

Έτσι έχουμε τη δημιουργία των πινάκων:

- Q_m , με τις διαστάσεις του πίνακα να είναι:

$$Q_m \rightarrow n \times m$$

και είναι της μορφής:

$$Q_m = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_m \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

- H_m , με τις διαστάσεις του πίνακα να είναι:

$$H_m \rightarrow (m+1) \times m$$

και είναι της μορφής:

$$H_m = \begin{bmatrix} h_{1,1} & \cdots & h_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \cdots \\ 0 & \cdots & h_{m+1,m} \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

Από τους πίνακες Q_m και H_m , βλέπουμε πως ισχύει η σχέση:

$$AQ_m = Q_{m+1}H_m \quad (3.18)$$

Τέλος, αυτό που παρατηρείται είναι ο πίνακας Q_m έχει ως στήλες ορθοκανονικά διανύσματα και οι ιδιοτιμές του πίνακα H_m είναι προσεγγίσεις των ιδιοτιμών του πίνακα A .

3.3 Μέθοδος Proper Orthogonal Decomposition (POD)

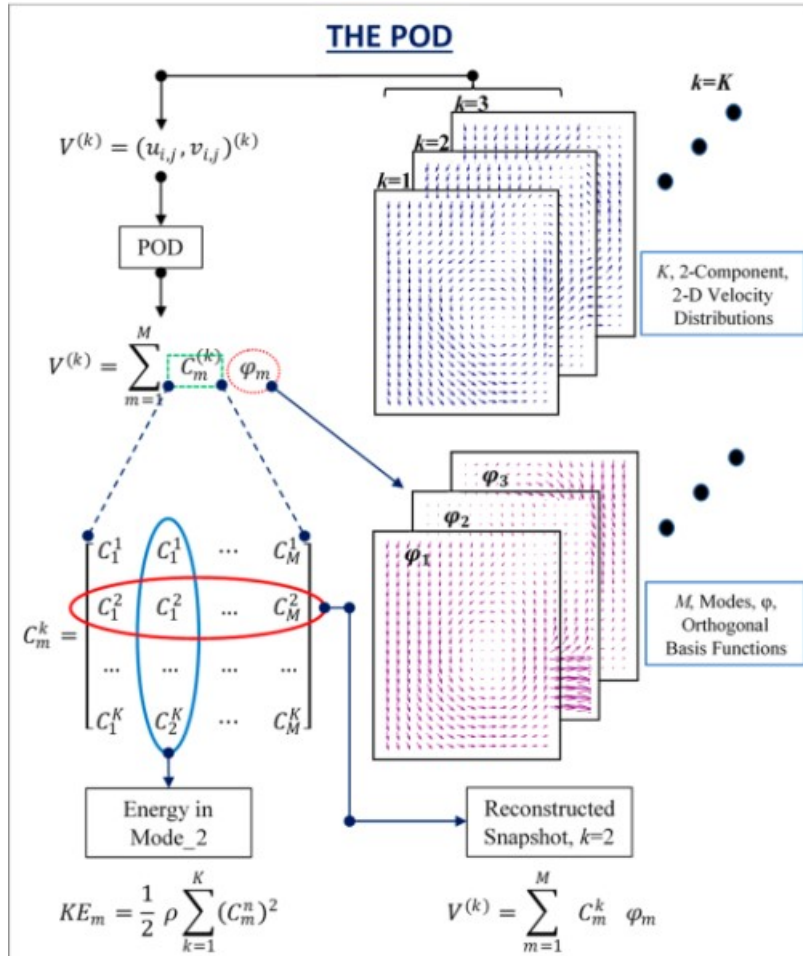
3.3.1 Εισαγωγή στην ορθή ορθογώνια αποσύνθεση (POD)

Μια δημοφιλής μέθοδος με γνώμονα τα δεδομένα για τη μείωση της τάξης είναι η ορθή ορθογώνια αποσύνθεση (Proper Orthogonal Decomposition) (POD), επίσης γνωστή ως ανάλυση κύριων συνιστωσών (PCA) ή ως επέκταση Karhunen-Loève (KL). Η POD είναι μια μαθηματική τεχνική που εξάγει κυρίαρχους τρόπους ή πρότυπα από ένα σύνολο δεδομένων, μειώνοντας τη διαστατικότητα των δεδομένων διατηρώντας παράλληλα τις πιο σημαντικές πληροφορίες. Η POD είναι ιδιαίτερα χρήσιμη όταν τα δεδομένα έχουν δομή χαμηλού βαθμού, πράγμα που σημαίνει ότι μπορούν να προσεγγιστούν από ένα γραμμικό συνδυασμό ενός μικρού αριθμού διανυσμάτων βάσης. [17] [18] [19] [20] [21] [11]

Μια άλλη μέθοδος που βασίζεται στα δεδομένα για τη μείωση της τάξης είναι η δυναμική αποσύνθεση τρόπου λειτουργίας (DMD). Η DMD είναι μια τεχνική που χρησιμοποιεί δεδομένα στιγμιότυπων για την εξαγωγή κυρίαρχων τρόπων και των αντίστοιχων ρυθμούς ανάπτυξης και τις αντίστοιχες συχνότητες. Η DMD είναι ιδιαίτερα χρήσιμη όταν τα δεδομένα παρουσιάζουν μη γραμμικές δυναμική ή όταν οι κυβερνητικές εξισώσεις είναι άγνωστες. Η DMD μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την κατασκευή ενός χαμηλής διάστασης μοντέλου που αποτυπώνει τα βασικά χαρακτηριστικά του συστήματος.

Η μέθοδος ορθής ορθογώνιας αποσύνθεσης (POD), σε ορισμένα πλαίσια, είναι ένα από τα πιο ισχυρά μαθηματικά εργαλεία για τη μείωση της διαστατικότητας, την ανάλυση δεδομένων και τη μείωση της τάξης του μοντέλου.

Προερχόμενη από τα πεδία της στατιστικής μηχανικής, έχει βρει εφαρμογές σε διάφορους κλάδους, όπως η δυναμική των ρευστών, η δομική μηχανική, ακόμη και η χρηματοοικονομική. Η ευελιξία της πηγάζει από την εγγενή ικανότητά της να εξάγει κυρίαρχα μοτίβα από πολύπλοκα σύνολα δεδομένων, καθιστώντας την καθοριστική για την εξαγωγή σημαντικών συμπερασμάτων από μια τεράστια δεξαμενή δεδομένων.



Σχήμα 3.4: Μέθοδος ορθής ορθογώνιας αποσύνθεσης (POD).

3.3.2 Μαθηματική βάση

Η μέθοδος POD επιδιώκει να βρει ένα σύνολο ορθογώνιων συναρτήσεων βάσης (modes) που αναπαριστούν βέλτιστα τη διακύμανση σε ένα σύνολο δεδομένων. Αυτό επιτυγχάνεται με την επίλυση ενός προβλήματος ιδιοτιμών που προκύπτει από τον πίνακα συνδιακύμανσης των δεδομένων. Ο πρώτος τρόπος αντιπροσωπεύει την κατεύθυνση της μέγιστης διακύμανσης, ο δεύτερος τρόπος (ορθογώνιος προς τον πρώτο) αντιπροσωπεύει την κατεύθυνση της δεύτερης μεγαλύτερης διακύμανσης κ.ο.κ.

Πίνακας στιγμιότυπων(snapshot matrix): Δεδομένου ενός συνόλου λύσεων (στιγμιότυπα) $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_M$ ενός συστήματος, με κάθε $\mathbf{u}_i \in \mathbb{R}^N$, αυτά τα στιγμιότυπα μπορούν να συγκεντρωθούν σε έναν πίνακα στιγμιότυπων:

$$\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_M] \in \mathbb{R}^{N \times M}$$

Πίνακας συνδιακύμανσης (Covariance Matrix): Ο πίνακας συνδιακύμανσης των στιγμιότυπων είναι:

$$\mathbf{C} = \frac{1}{M} \mathbf{U} \mathbf{U}^T$$

Πρόβλημα ιδιοτιμών (Eigenvalue Problem): Οι τρόποι POD προκύπτουν από την επίλυση του προβλήματος ιδιοτιμών για τον πίνακα συνδιακύμανσης:

$$\mathbf{C} \phi_i = \lambda_i \phi_i$$

εδώ, λ_i είναι οι ιδιοτιμές (ταξινομημένες κατά φθίνουσα σειρά) και ϕ_i είναι τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα (ή τρόποι POD).

Προβολή σε POD Modes (Projection onto POD Modes): Οι συντελεστές για την αναπαράσταση των στιγμιότυπων στη βάση POD είναι:

$$\mathbf{a}_i(t) = \phi_i^T \mathbf{u}(t)$$

Αποκοπή και συλλαμβανόμενη ενέργεια (Truncation and Energy Captured): Συνήθως, μόνο το πρώτο r διατηρούνται οι τρόποι, οι οποίοι συλλαμβάνουν σημαντικό μέρος της ενέργειας των δεδομένων. Η ενέργεια που συλλαμβάνεται από αυτούς τους τρόπους μπορεί να ποσοτικοποιηθεί ως εξής:

$$\text{Energy Captured} = \frac{\sum_{i=1}^r \lambda_i}{\sum_{i=1}^N \lambda_i}$$

Αυτό παρέχει μια συνοπτική μαθηματική περιγραφή του POD. Η ομορφιά της POD έγκειται στην ικανότητά της να παρέχει μια βέλτιστη αναπαράσταση των δεδομένων στο L^2 νόρμα με ένα μειωμένο σύνολο συναρτήσεων βάσης.

Για τον υπολογισμό της βάσης POD, ξεκινάμε με τον πίνακα συνδιακύμανσης $\mathbf{C}$ των δεδομένων:

$$\mathbf{C} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^T$$

Τα ιδιοδιανύσματα του $\mathbf{C}$ είναι οι τρόποι POD και οι αντίστοιχες ιδιοτιμές αντιπροσωπεύουν το ενεργειακό περιεχόμενο κάθε τρόπου.

Δεδομένου ενός συνόλου διανυσμάτων δεδομένων $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N\}$, στόχος είναι να προσδιοριστεί ένα σύνολο ορθογώνιων συναρτήσεων βάσης $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M\}$ έτσι ώστε

οποιοδήποτε διάνυσμα δεδομένων $\mathbf{u}_i$ να μπορεί να προσεγγιστεί ως:

$$\mathbf{u}_i \approx \sum_{j=1}^M a_{ij} \phi_j$$

όπου a_{ij} είναι οι συντελεστές της προβολής του $\mathbf{u}_i$ πάνω στο ϕ_j .

Η τεχνική της ορθής ορθογωνίας αποσύνθεσης (Proper Orthogonal Decomposition - POD) αποσκοπεί στην εξαγωγή των κυρίαρχων τρόπων ενός συνόλου δεδομένων. Δεδομένου ενός συνόλου διανυσμάτων δεδομένων $\mathbf{u}_i$, ο στόχος είναι να βρεθεί ένα ορθογώνιο σύνολο βάσεων ϕ_j που μπορούν να αναπαραστήσουν αυτά τα δεδομένα με ελάχιστο σφάλμα.

Τα φυσικά φαινόμενα ακολουθούν εγγενώς πρότυπα που περιγράφονται από τις εξισώσεις που τα διέπουν. Στη δυναμική των ρευστών, οι εξισώσεις Navier-Stokes διέπουν τη συμπεριφορά:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}$$

όπου $\mathbf{u}$ είναι το πεδίο ταχύτητας, p είναι η πίεση, και ν είναι το κινηματικό ιξώδες.

Οι αριθμητικές μέθοδοι παρέχουν διακριτές προσεγγίσεις των συνεχών πεδίων. Για παράδειγμα, η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών μπορεί να αποδώσει:

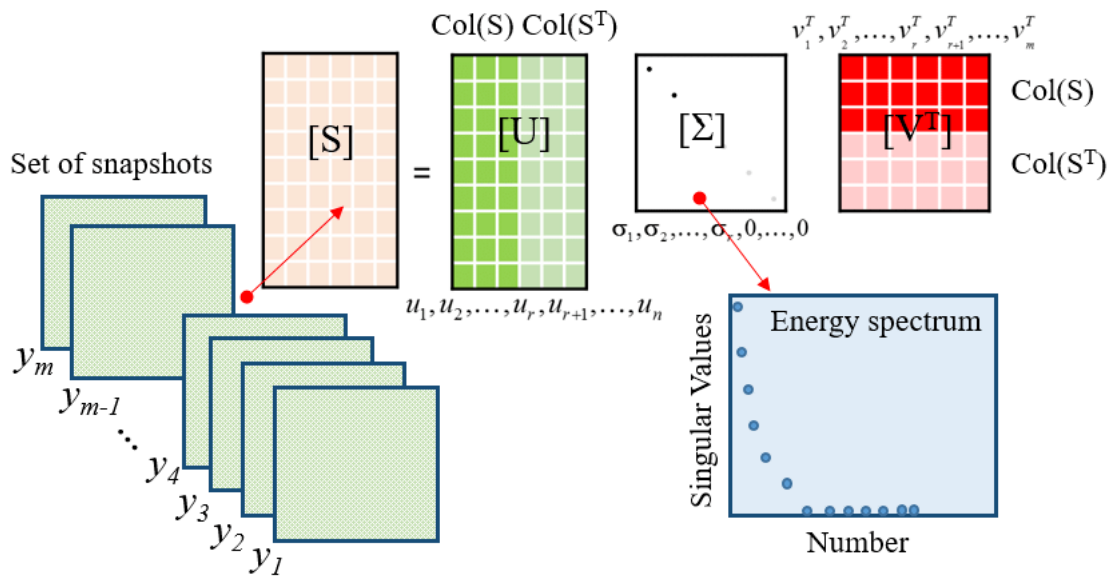
$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \mathbf{F}(\mathbf{u}^n)$$

όπου $\mathbf{F}$ αντιπροσωπεύει τη χωρική διακριτοποίηση των κυβερνητικών εξισώσεων.

Για να εξασφαλιστεί η τήρηση των νόμων διατήρησης, θα μπορούσε κανείς να χρησιμοποιήσει μια προβολή Galerkin, η οποία αποδίδει:

$$\int \phi_i \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} dV = \int \phi_i \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}) dV$$

για όλα τα i .



Σχήμα 3.5: POD με τη μέθοδο του snapshot.

Μερικές από τις εφαρμογές που εμφανίζεται είναι, στην υπολογιστική ρευστοδυναμική (CFD), με τη μέθοδος POD να χρησιμοποιείται για τη μείωση της τάξης του μοντέλου, όπου το πεδίο ροής υψηλής διάστασης αναπαρίσταται με βάση λίγους τρόπους POD. Αυτή η μειωμένη αναπαράσταση μπορεί να επιταχύνει σημαντικά τις προσομοιώσεις.

Επίσης στη συμπίεση δεδομένων, με την επεξεργασία εικόνας και σήματος, η POD μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη συμπίεση δεδομένων διατηρώντας μόνο τους πιο σημαντικούς τρόπους.

Και τέλος στην εξαγωγή χαρακτηριστικών, με τη μηχανική μάθηση και την αναγνώριση προτύπων, η μέθοδος POD ή και η PCA μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εξαγωγή χαρακτηριστικών που συλλαμβάνουν τα πιο σημαντικά πρότυπα στα δεδομένα.

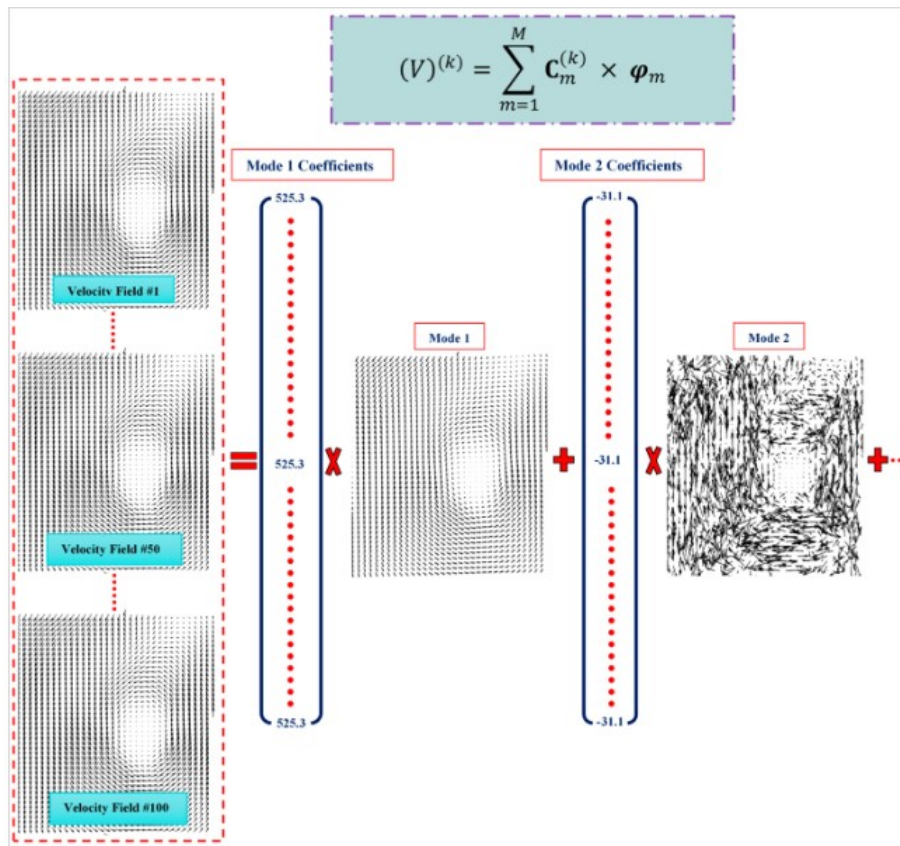
Σε σχέση με άλλες τεχνικές, η POD είναι στενά συνδεδεμένη με την PCA. Στην πραγματικότητα, όταν εφαρμόζεται σε κεντραρισμένα δεδομένα, η PCA και η POD είναι ισοδύναμες. Η αποσύνθεση μοναδικών τιμών (SVD) είναι μια συναφής μαθηματική τεχνική. Όταν εφαρμόζεται σε έναν πίνακα δεδομένων, τα αριστερά μοναδιαία διανύσματα της SVD είναι οι τρόποι POD.

Περιορισμοί

1. **Γραμμικότητα:** Η μέθοδος POD υποθέτει ότι τα δεδομένα βρίσκονται σε γραμμικό υποχώρο του αρχικού χώρου. Αυτό σημαίνει ότι ενδέχεται να μην καταγράφει αποτελεσματικά τις μη γραμμικές σχέσεις.

2. **Βασίζεται στη διακύμανση:** Δεδομένου ότι η POD επιδιώκει να συλλάβει τη μέγιστη διακύμανση, ενδέχεται να χάσει χαρακτηριστικά στα δεδομένα που έχουν χαμηλή διακύμανση αλλά εξακολουθούν να είναι σημαντικά.
3. **Ευαισθησία στις ακραίες τιμές:** Οι ακραίες τιμές ή οι ακραίες τιμές μπορούν να επηρεάσουν σημαντικά τους τρόπους που προκύπτουν από την POD, οδηγώντας ενδεχομένως σε παραπλανητικά αποτελέσματα.
4. **Η μέθοδος POD είναι μια θεμελιώδης τεχνική με ευρύ φάσμα εφαρμογών στη μηχανική, τη φυσική και την επιστήμη των δεδομένων.** Παρέχει έναν συστηματικό τρόπο για τη μείωση της πολυπλοκότητας των δεδομένων, διατηρώντας παράλληλα τα βασικότερα χαρακτηριστικά τους.

Σε πολλές φυσικές εφαρμογές, τα υποκείμενα πεδία παρουσιάζουν μοτίβα ή δομές που διέπονται από τους νόμους της φυσικής. Για παράδειγμα, στη δυναμική των ρευστών, συνεκτικές δομές όπως δίνες ή οριακά στρώματα σχηματίζονται λόγω των εξισώσεων Navier-Stokes που διέπουν. Το POD επιδιώκει να συλλάβει αυτές τις δομές προσδιορίζοντας τους πιο "ενεργητικούς" τρόπους στα δεδομένα.



Σχήμα 3.6: POD με τη μέθοδο του snapshot.

Τα φυσικά πεδία, όπως η ταχύτητα ή η θερμοκρασία στη δυναμική των ρευστών, συχνά αναπαρίστανται σε διακριτή μορφή με τη χρήση αριθμητικών μεθόδων όπως οι πεπερασμένες διαφορές, τα πεπερασμένα στοιχεία ή οι φασματικές μέθοδοι. Αυτές οι διακριτές αναπαραστάσεις οδηγούν σε δεδομένα υψηλών διαστάσεων, ειδικά σε τρισδιάστατες προσομοιώσεις ή όταν απαιτείται υψηλή πιστότητα. Το POD μπορεί να μειώσει τη διαστατικότητα αυτών των δεδομένων προβάλλοντάς τα σε ένα σύνολο συναρτήσεων βάσης που αποτυπώνουν τα βασικά χαρακτηριστικά του φυσικού πεδίου.

Έτσι, ένα παράδειγμα για την κατανόηση για ροή διαμέσου ενός κυλίνδρου και παρατηρώντας το πεδίο ταχύτητας u , οι πρώτοι λίγοι τρόποι POD μπορεί να αντιπροσωπεύουν την πρωτογενή αποβολή στροβίλων, ενώ οι υψηλότεροι τρόποι καταγράφουν την τύρβη. Η μαθηματική αναπαράσταση μπορεί να μοιάζει με την άθροιση που δίνεται στην ενότητα "Παραμετροποίηση φυσικών πεδίων στη βάση POD".

Κεφάλαιο 4

Παραμετρικές μέθοδοι υποβιβασμού τάξης μοντέλου (PMOR)

Σε αυτό το σημείο θα επεκτείνουμε το πρόβλημα του υποβιβασμού τάξης μοντέλου MOR, προσθέτοντας το θέμα των παραμέτρων. [3] [22] [23]

Οι τυπικές μέθοδοι υποβιβασμού τάξης μοντέλου (MOR) δεν είναι συνήθως ισχυρές όταν υπάρχει ένα παραμετρικό μοντέλο που πρέπει να μειωθεί. Έτσι προκύπτει η αναγκαιότητα τεχνικών, που λαμβάνουν υπόψη την μεταβλητότητα τέτοιων παραμέτρων. Η μεταβλητότητα των παραμέτρων φαίνεται έντονα στο σχεδιασμό των μικρο- και νάνο- ηλεκτρονικών συστημάτων, σε περιπτώσεις συζευγμένων ηλεκτροθερμικών προβλημάτων, καθώς και σε πολλές αναλύσεις βελτιστοποίησης. Με τη μοντελοποίηση και τη προσομοίωση σε πολλές τιμές των παραμέτρων να είναι αναπόφευκτες. Για πολλά εργαλεία σχεδίασης και ανάλυσης, η μοντελοποίηση και η προσομοίωση πρέπει να γίνονται σε κάθε περίπτωση της παραμέτρου από την αρχή.[24] [25]

Η προσέγγιση είναι ιδιαίτερα κατάλληλη για την ηλεκτρική ανάλυση νανοηλεκτρονικών δομές, καθώς οι παράμετροι εκεί εμφανίζονται συχνά σε γραμμική μορφή, όπου απαιτείται από αυτό εξαγωγή για ένα παραμετρικό μοντέλο. Ωστόσο, η προσομοίωση του επακόλουθου παραμετρικού συστήματος εξακολουθεί να είναι πολύ χρονοβόρα, λόγω της μεγάλης διάστασης του συστήματος.[26] [27] [28]

Για αυτούς ακριβώς τους λόγους, έχει καθιερωθεί η χρήση της μεθόδου της μείωσης τάξης παραμετρικού μοντέλου (PMOR) για τον υπολογισμό ενός μοντέλου μειωμένης τάξης (ROM), που δεν είναι μόνο πολύ χαμηλότερης διάστασης, αλλά και ακριβής για όλες τις τιμές των παραμέτρων, εντός ενός καθορισμένου εύρους.[29]

Επομένως, η χρήση της παραμετρικής ROM για την αντικατάσταση του μοντέλου πλήρους τάξης στην προσομοίωση και άλλες αναλύσεις βελτιστοποίησης, οδηγεί σε σημαντικά επιτάχυνση και υψηλή ακρίβεια. Πολλές μέθοδοι μείωσης τάξης παραμετρικού μοντέλου (PMOR) έχουν προταθεί μέχρι στιγμής. Στην παρούσα εργασία, γίνεται χρήση της μεθόδου αντιστοίχισης αντιστοίχισης ροπών (moment matching). Μία μέθοδο, η οποία είναι ιδιαίτερα δημοφιλής σε πρακτικές εφαρμογές. Αυτό συμβαίνει, γιατί είναι εύκολο να εφαρμοστεί, χρειάζεται λιγότερους υπολογισμούς από τις περισσότερες των άλλων μεθόδων, και επομένως είναι κατάλληλη για τη μείωση των υψηλών διαστάσεων συστημάτων που προκύπτουν συνήθως στο σχεδιασμό και την ανάλυση κυκλωμάτων VLSI.

4.1 Παραμετρική μέθοδος υποβιβασμού τάξης μοντέλου (PMOR) με βάση τη μέθοδο moment-matching

Το γραμμικό σύστημα που είχαμε περιγράψει στο προηγούμενο κεφάλαιο, συναρτήση των παραμέτρων $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, [11] [25][30] μπορεί να εκφραστεί ως:

$$C(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \frac{dx(t)}{dt} + G(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)x(t) = Bu_p(t) \quad (4.1)$$

$$i_p(t) = B^T x(t) \quad (4.2)$$

- $x(t, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \in R^N$: Είναι το διάνυσμα των αγνώστων στο σύστημα
- $C(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n), G(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \in R^{N \times N}$: Είναι πίνακες που περιγράφουν την αθροιστική μνήμη και τα στοιχεία χωρίς μνήμη του το δίκτυο που εξαρτάται από $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$
- i_p : Είναι τα ρεύματα των ports
- u_p : Είναι οι τάσεις των ports
- p : Είναι ο αριθμός των ports
- B : Είναι ένας πίνακας επιλογέα που αντιστοιχίζει τις τάσεις των ports στο κόμβο του δικτύου
- N : Είναι ο συνολικός αριθμός των μεταβλητών στη διατύπωση των MNA εξισώσεων

- n : Είναι ο αριθμός των παραμέτρων στο δίκτυο

Από το σύστημα που είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, με τις εξισώσεις

$$\tilde{E} \frac{d\tilde{x}(t)}{dt} = \tilde{A}x(t) + \tilde{B}u(t) \quad (4.3)$$

$$\tilde{y}(t) = \tilde{C}\tilde{x}(t) \quad (4.4)$$

, η παραμετρική συνάρτηση μεταφοράς του αρχικού μοντέλου υπολογίζεται ως εξής:

$$H(s, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) = L(sC(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) - G(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n))^{-1}B \quad (4.5)$$

Την παραπάνω σχέση 5.5, επιδιώκουμε σε αυτό το σημείο να δημιουργήσουμε μια προσέγγιση ενός υποβιβασμένης τάξης μοντέλου (ROM), η οποία θα είναι σε θέση να αποτυπώσει με ακρίβεια τη συμπεριφορά εισόδου και εξόδου του συστήματος, για οποιονδήποτε πιθανό συνδυασμό στο χώρο παραμέτρων:

$$\tilde{H}(s, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) = \tilde{L}(s\tilde{C}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) - \tilde{G}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n))^{-1}\tilde{B} \quad (4.6)$$

Γενικά, οι παραμετρικοί μέθοδοι υποβιβασμού τάξης μοντέλου (PMOR) προσπαθούν να δημιουργήσουν ένα υποβιβασμένης τάξης μοντέλο (ROM), της οποίας η δομή είναι παρόμοια με την αρχική και ταυτόχρονα εμφανίζει παρόμοια παραμετρική εξάρτηση. Η πιο απλή μέθοδος για που αντιπροσωπεύει ένα παραμετρικό σύστημα βασίζεται σε μια επέκταση της σειράς Taylor, συναρτήση των παραμέτρων $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$:

$$(s(C_0 + C_1\lambda_1 + \dots + C_n\lambda_n) - (G_0 + G_1\lambda_1 + \dots + G_n\lambda_n))x(s, \lambda) = Bu(s) \quad (4.7)$$

$$y(s, \lambda) = Lx(s, \lambda) \quad (4.8)$$

, όπου τα C_0 και G_0 περιέχουν τις τιμές χωρητικότητας και αγωγιμότητας που αντιστοιχούν στα μη παραμετρικά μέρη, ενώ τα C_i και G_i περιλαμβάνουν τις τιμές χωρητικότητας και αγωγιμότητας που έχουν κλιμακωθεί σε σχέση με τις παραμέτρους. Η χρήση αυτού του είδους αναπαράστασης, με ρητή εξάρτηση παραμέτρων, μας επιτρέπει να αποκτήσουμε ένα υποβιβασμένης τάξης μοντέλο (ROM), με παρόμοια αναπαράσταση όταν εφαρμόζεται ο πίνακας προβολής:

$$(s(\tilde{C}_0 + \tilde{C}_1\lambda_1 + \dots + \tilde{C}_n\lambda_n) - (\tilde{G}_0 + \tilde{G}_1\lambda_1 + \dots + \tilde{G}_n\lambda_n))x(s, \lambda) = \tilde{B}u(s) \quad (4.9)$$

$$y(s, \lambda) = \tilde{L}x(s, \lambda) \quad (4.10)$$

, όπου $\tilde{C}_0, \tilde{C}_1, \dots, \tilde{C}_n \in R^{r \times r}$, $\tilde{G}_0, \tilde{G}_1, \dots, \tilde{G}_n \in R^{r \times r}$, $\tilde{B} \in R^{r \times p}$ και $\tilde{L} \in R^{q \times r}$. είναι οι υποβιβασμένης τάξης μοντέλου (ROM) πίνακες, με $r \ll N$

4.2 Κατασκευή του παραμετροποιημένου μειωμένου μοντέλου

Άλλο ένα σημείο που θα πρέπει να γίνει αναφορά, είναι η κατασκευή του παραμετροποιημένου μειωμένου μοντέλου (Parameterized Reduced Model Generation). Πολλές από αυτές τις επιλογές κατασκευής είναι ευρέως εφαρμόσιμες, καθώς μπορούν να χρησιμοποιηθούν με οποιοδήποτε από τις βασικές μέθοδοι υπολογισμού της βάσης (Moment-Matching, Balanced Truncation, Time Domain POD, Frequency Domain POD, grid-based sampling, Latin hypercube sampling). [11]

Όλες οι προσεγγίσεις που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή των ενιαίων γενικών πινάκων βάσης που θα αναφέρουμε, κάνουν χρήση της παραμέτρου p , η οποία ανήκει σε ένα μόνο πεδίο $\Omega \subset \mathbb{R}^d$.

4.2.1 Δειγματοληψία παραμέτρων

Σε αυτό το σημείο θα γίνει μια αναφορά στην δειγματοληψία των παραμέτρων (Parameter Sampling). Η επιλογή των σημείων δειγματοληψίας παραμέτρων, είναι σημαντικό ζητούμενο που προκύπτει σε όλες τις μεθόδους υπολογισμού της βάσης. Στη μέθοδο αντιστοίχισης ροπών (Moment matching), πρέπει κανείς να επιλέξει δείγματα παραμέτρων τα οποία βρίσκονται σε κατάλληλες ροπές (moments). Στην περίπτωση τώρα του balanced truncation, πρέπει κανείς να επιλέξει δείγματα παραμέτρων για τη δημιουργία του τοπικού συστήματος LTI στα οποία εφαρμόζεται η μέθοδος balanced truncation. Στην περίπτωση πάλι του Proper Orthogonal Decomposition (POD), πρέπει να γίνει η επιλογή των δειγμάτων παραμέτρων στα οποία υπολογίζονται οι ροπές (moments). [11]

Για προβλήματα με μικρό αριθμός παραμέτρων, μια δομημένη ή τυχαία μέθοδος δειγματοληψίας (grid-based sampling ή Latin hypercube sampling) είναι η απλούστερη προσέγγιση, και σε συνδυασμό με τον επαρκή υψηλό αριθμό δειγμάτων, θα δημιουργήσει ένα πλούσιο σύνολο δεδομένων που καλύπτει το χώρο παραμέτρων.

Για μέτριο αριθμό παραμέτρων, η γρήγορη δειγματοληψία πλήρους πλέγματος (full grid sampling) είναι ιδιαίτερα ακριβή, αφού ο αριθμός των σημείων στο πλέγμα αυξάνεται εκθετικά με τη διάσταση d . Η δειγματοληψία με Latin hypercube sampling παραμένει σε χρήση, αν και βρίσκεται μεγάλος αριθμός από δείγματα από σημεία, ενδέχεται να χρειαστεί επιπλέον δείγματα από σημεία για να εξασφαλιστεί η επαρκής κάλυψη.

Για μέτριες διαστάσεις προβλήματα που παρουσιάζουν δομή (π.χ. ομαλότητα), μια προσέγγιση δειγματοληψίας αραιού πλέγματος (sparse grid sampling) θα είναι πιθανότατα άλλη μια αποτελεσματική λύση. Ωστόσο, όταν η διάσταση της παραμέτρου του χώρου είναι μεγάλη ($d > 10$), καθίσταται ιδιαίτερα δύσκολο να εξισορροπηθεί το κόστος δειγματοληψίας με την κάλυψη του χώρου παραμέτρων. Αυτές οι περιπτώσεις απαιτούν πιο εξελιγμένες προσεγγίσεις δειγματοληψίας, όπως μια προσαρμοστική αναζήτηση (problem-aware adaptive search) με επίγνωση του προβλήματος του χώρου παραμέτρων.

Στην παρούσα διπλωματική εργασία η υλοποίηση γίνεται με τη μέθοδο της τυχαίας δειγματοληψίας (random sampling method)

4.2.2 Συνένωση της Βάσης

Μία από τις κοινές προσεγγίσεις για την δημιουργία των γενικών πινάκων βάσης V και W , είναι η συνένωση των τοπικών πινάκων βάσης (Concatenation of Basis) που λαμβάνονται για αρκετά δείγματα παραμέτρων $p_1, \dots, p_K$. Ας υποθέσουμε ότι το $V_1, V_2, \dots, V_K$ και $W_1, W_2, \dots, W_K$ είναι ο συμβολισμός από τους πίνακες τοπικής βάσης που αντιστοιχούν στο $p_1, \dots, p_K$. Τότε μπορεί κανείς να κατασκευάσει τους ενιαίους γενικούς πίνακες βάσης V και W χρησιμοποιώντας:

$$V = [V_1, V_2, \dots, V_K] \quad (4.11)$$

$$W = [W_1, W_2, \dots, W_K] \quad (4.12)$$

Ωστόσο, είναι πολύ πιθανό οι τοπικοί πίνακες να έχουν κοινά στοιχεία μεταξύ τους το ένα το άλλο, οδηγώντας σε δυνητικά ανεπαρκείς ενιαίους γενικούς πίνακες βάσης V και W . Για την αποφυγή αυτής της κατάστασης, το βήμα της συνένωσης των τοπικών πινάκων βάσης συνήθως ακολουθείται από έναν αλγόριθμο SVD ή μια rank-revealing QR παραγοντοποίηση, με στόχο την αφαίρεση αυτών των στοιχείων από τους ενιαίους γενικούς πίνακες βάσης V και W . Η ενέργεια αυτή οδηγεί τελικά, σε σφαιρικούς πίνακες βάσης, με ορθοκανονικές στήλες.

Αξίζει να σημειωθεί, ότι στο θεωρητικό επίπεδο δεν θα είχε σημασία αν οι τοπικοί πίνακες V_i και W_i είναι ορθογώνιοι πριν από το βήμα συνένωσης. Αυτό συμβαίνει, γιατί το μειωμένο μοντέλο καθορίζεται από το εύρος και όχι από μια συγκεκριμένη βάση. Όπως φαίνεται και στην περίπτωση των υποχώρων Krylov, όπου η βάση ισχύος $[b, Ab, \dots, A^{k-1}b]$ αντικαθίσταται από μια ορθογώνια βάση που υπολογίζεται μέσω μιας διαδικασίας Arnoldi.

Οι πίνακες τοπικής βάσης μπορούν να ληφθούν χρησιμοποιώντας οποιαδήποτε από τις βασικές μέθοδοι υπολογισμού (Moment-Matching, Balanced Truncation, Time Domain

POD, Frequency Domain POD, grid-based sampling, Latin hypercube sampling). Ωστόσο, η μέθοδος επιλογής έχει ως αποτέλεσμα διαφορετικές ιδιότητες στο μειωμένο μοντέλο.

Η προσέγγιση συνένωσης είναι ιδιαίτερα κατάλληλη, όταν οι τοπικοί βασικοί πίνακες λαμβάνονται με τη μέθοδο αντιστοίχισης ροπών (Moment matching).

Μετά τη συνένωση, το τελικό μειωμένο παραμετροποιημένο μοντέλο, που λαμβάνεται από τους γενικούς πίνακες βάσης, θα εξακολουθεί να παρεμβάλλει το αρχικό μοντέλο σε κάθε συνδυασμό σημείων παρεμβολής συχνότητας και παραμέτρων, που χρησιμοποιείται στην κατασκευή κάθε πίνακα τοπικής βάσης.

Υποθέτοντας ότι ο αλγόριθμος SVD εκτελέστηκε στους συνδυασμένους πίνακες και αφαίρεσε μόνο τις μηδενικές τιμές, τότε στην περίπτωση που ο αλγόριθμος SVD αφαιρεί κάποια μικρή μη μηδενική και μοναδική τιμή, κάτω από μια αριθμητική ανοχή, η παρεμβολή αυτή θα είναι κατά προσέγγιση.

Αυτό έρχεται σε αντίθεση με την προσέγγιση της μεθόδου balanced truncation, όπου οι πίνακες V_i και W_i είναι οι πίνακες βάσης της μεθόδου balanced truncation στις τιμές των παραμέτρων p_i .

Στη συνέχεια, πραγματοποιείται μία φορά συνένωση και το μειωμένο μοντέλο που προκύπτει δεν είναι πλέον βέβαιο ότι θα είναι ισορροπημένο, ακόμη και στην τιμή της παραμέτρου p_i . Παρόλα αυτά, η συνένωση των τοπικών balanced truncation βάσεων, μπορεί να αποφέρει ένα καλό μειωμένο παραμετρικό μοντέλο, δεδομένου ότι ο υποχώρος μείωσης φέρει τις σημαντικές πληροφορίες βάσης για μεμονωμένες παραμέτρους.

Κεφάλαιο 5

Μέθοδοι Data-driven

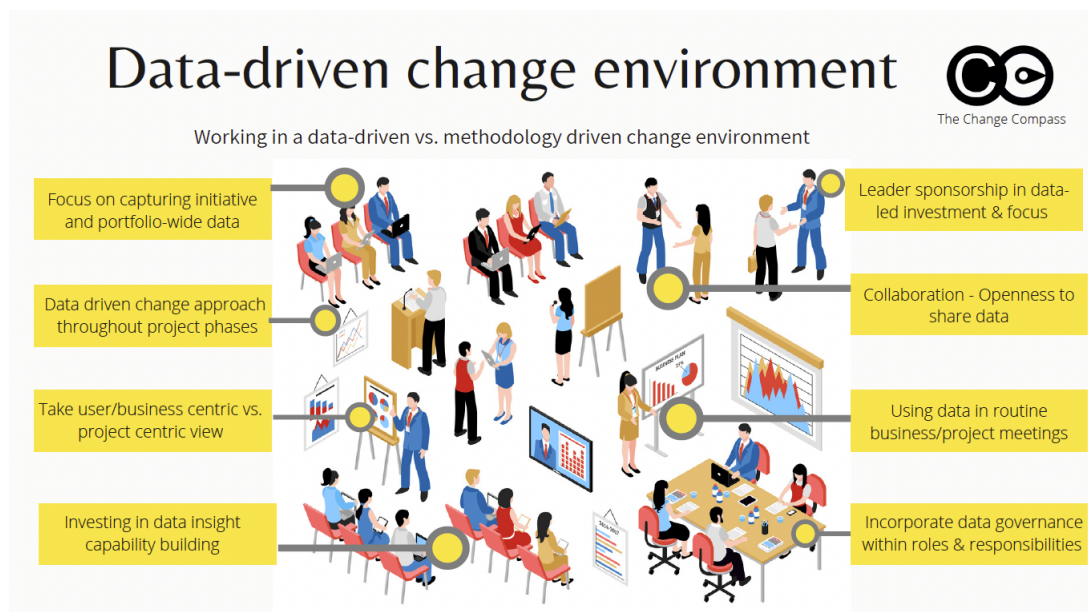
5.1 Μέθοδοι με βάση τα δεδομένα στην επιστήμη και τη μηχανική

Οι μέθοδοι με γνώμονα τα δεδομένα έχουν φέρει επανάσταση στον τρόπο με τον οποίο προσεγγίζουμε την επίλυση προβλημάτων στη σύγχρονη εποχή. Με ρίζες στην ικανότητα επεξεργασίας τεράστιων ποσοτήτων δεδομένων, οι τεχνικές αυτές εξάγουν μοτίβα, σχέσεις και μοντέλα απευθείας από τις παρατηρήσεις αντί να βασίζονται αποκλειστικά σε καθιερωμένες θεωρίες ή μοντέλα.

Με τον πολλαπλασιασμό των αισθητήρων και τη δυνατότητα αποθήκευσης και επεξεργασίας μεγάλων συνόλων δεδομένων, υπάρχει μια στροφή προς τη χρήση μεθόδων με γνώμονα τα δεδομένα σε πολλούς τομείς της επιστήμης και της μηχανικής.

Αυτές οι μέθοδοι μπορούν να αποκαλύψουν γνώσεις που δεν είναι άμεσα εμφανείς από την παραδοσιακή μοντελοποίηση, ιδίως σε πολύπλοκα συστήματα όπου οι αλληλεπιδράσεις μπορεί να μην είναι πλήρως κατανοητές.

Ειδικά στις επιστήμες και τη μηχανική, ο συνδυασμός των μεθόδων που βασίζονται στα δεδομένα με την παραδοσιακή μοντελοποίηση παρέχει ισχυρά εργαλεία για την αντιμετώπιση πολύπλοκων προκλήσεων.



Σχήμα 5.1: Αλλαγή του περιβάλλοντος με τη χρήση μεθόδων με βάση τα δεδομένα.

Υπάρχουν 8 βασικά στοιχεία:

1. Εστίαση στην καταγραφή δεδομένων σε επίπεδο πρωτοβουλίας και λιμένα.
2. Προσέγγιση της αλλαγής με βάση τα δεδομένα σε όλες τις φάσεις του έργου
3. Προσανατολισμός του χρήστη/επιχείρησης έναντι του έργου
4. Επένδυση στην ανάπτυξη ικανοτήτων κατανόησης δεδομένων
5. Χορηγία του ηγέτη για επενδύσεις και εστίαση στα δεδομένα
6. Συνεργασία/προθυμία για κοινή χρήση δεδομένων
7. Χρήση δεδομένων στις συνήθεις επιχειρηματικές/εργασιακές συναντήσεις
8. Ενσωμάτωση της διακυβέρνησης δεδομένων στους ρόλους και τις αρμοδιότητες

5.2 Η άνοδος των προσεγγίσεων με γνώμονα τα δεδομένα

Παραδοσιακά, η επιστημονική έρευνα και οι λύσεις της μηχανικής βασίζονταν σε ντετερμινιστικά μοντέλα που οικοδομούνταν από φυσικούς νόμους. Ωστόσο, με την έκρηξη της υπολογιστικής ισχύος και της διαθεσιμότητας δεδομένων στα τέλη του 20ού και στις αρχές του 21ου αιώνα, άρχισε η στροφή προς τις μεθόδους που επικεντρώνονται στα δεδομένα.

5.2.1 Πλεονεκτήματα έναντι των παραδοσιακών μεθόδων

1. **Προσαρμοστικότητα:** Τα μοντέλα με γνώμονα τα δεδομένα μπορούν να εξελίσσονται με νέα δεδομένα, καθιστώντας τα κατάλληλα για δυναμικά συστήματα ή για συστήματα με μεταβαλλόμενες παραμέτρους.
2. **Πολύπλοκα συστήματα:** Μπορούν να αποτυπώσουν μη γραμμικές σχέσεις και περίπλοκες αλληλεπιδράσεις σε συστήματα πολύ σύνθετα για ντετερμινιστικά μοντέλα.
3. **Ανακάλυψη νέων γνώσεων:** Αποκάλυψη μοτίβων ή συσχετίσεων που ήταν προηγουμένως άγνωστες ή μη εξεταζόμενες.

5.3 Βασικές τεχνικές και μέθοδοι

5.3.1 Μηχανική μάθηση(Machine Learning)

1. **Νευρωνικά δίκτυα (Neural Networks):** Εμπνευσμένα από βιολογικά νευρωνικά συστήματα, διακρίνονται για την αποτύπωση μη γραμμικών σχέσεων.
2. **Δέντρα Αποφάσεων και Τυχαία Δάση (Decision Trees and Random Forests):** Ιεραρχικά μοντέλα χρήσιμα για εργασίες ταξινόμησης και παλινδρόμησης.
3. **Μηχανές διανυσμάτων υποστήριξης (Support Vector Machines):** Χρησιμοποιούνται για ταξινόμηση και παλινδρόμηση με την εύρεση του υπερεπιπέδου που χωρίζει καλύτερα ένα σύνολο δεδομένων σε κλάσεις.

5.3.2 Μείωση διαστάσεων (Dimensionality Reduction)

1. **Πρόσφορη ορθογώνια αποσύνθεση (Proper Orthogonal Decomposition (POD)):** Μειώνει τα δεδομένα υψηλής διάστασης με τη σύλληψη των πιο σημαντικών τρόπων.
2. **Ανάλυση κύριων συνιστωσών (Principal Component Analysis (PCA)):** Μετατρέπει τα δεδομένα σε ένα νέο σύστημα συντεταγμένων, δίνοντας έμφαση στη διακύμανση.

5.4 Προκλήσεις στα μοντέλα που βασίζονται σε δεδομένα

1. Υπερπροσαρμογή (Overfitting)

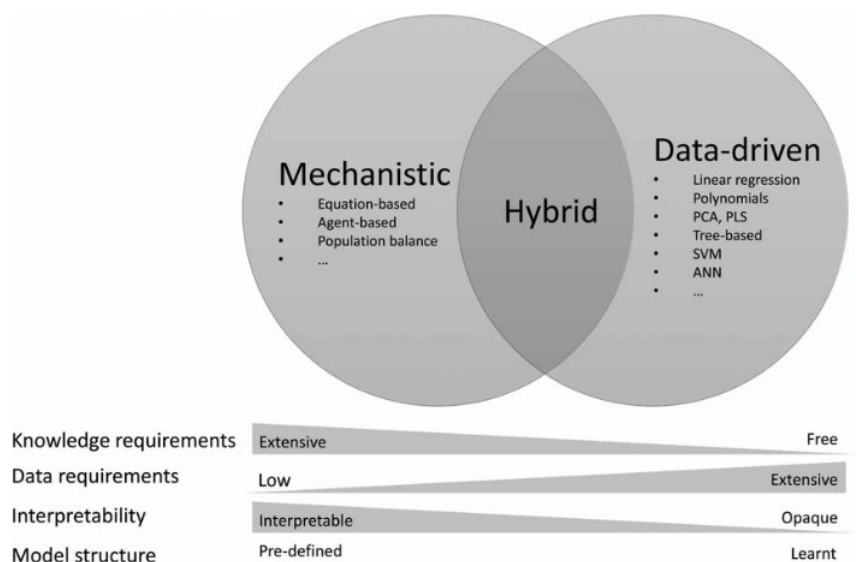
Μία από τις σημαντικότερες προκλήσεις στα μοντέλα που βασίζονται σε δεδομένα. Εμφανίζεται όταν ένα μοντέλο μαθαίνει τα δεδομένα εκπαίδευσης πολύ καλά, συμπεριλαμβανομένου του θορύβου τους, μειώνοντας την ικανότητα γενίκευσής του.

2. Ποιότητα και ποσότητα δεδομένων (Data Quality and Quantity)

Ανεπαρκή ή κακής ποιότητας δεδομένα μπορούν να οδηγήσουν σε ανακριβή μοντέλα.

3. Φυσική αληθοφάνεια (Physical Plausibility)

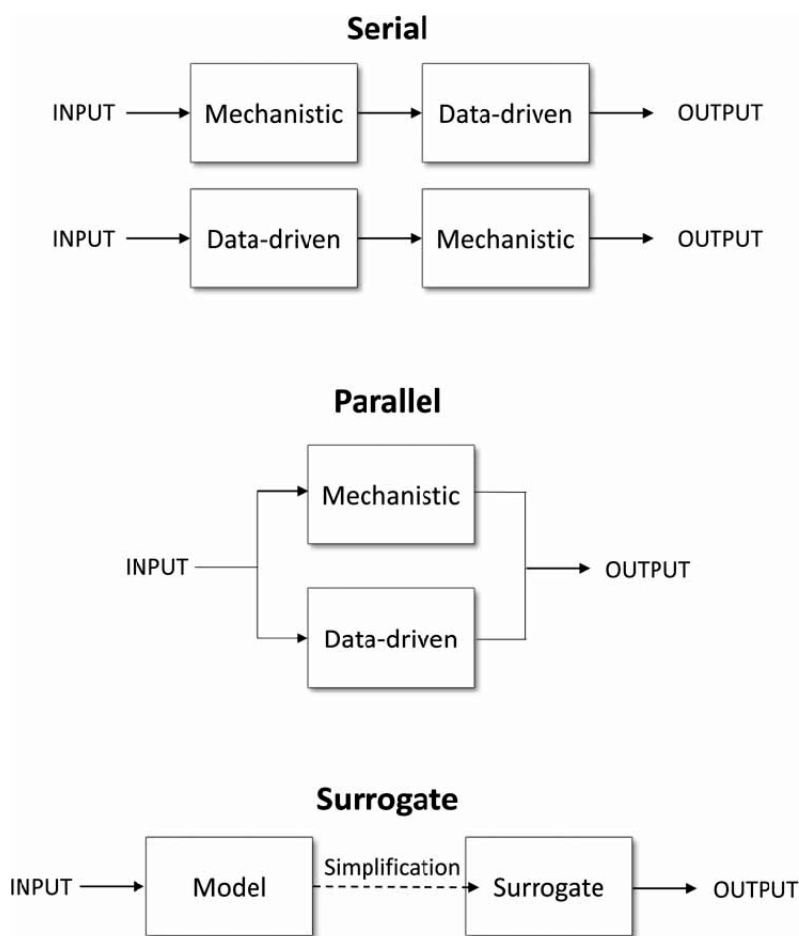
Ειδικά στη μηχανική, τα μοντέλα πρέπει όχι μόνο να ταιριάζουν με τα δεδομένα αλλά και να σέβονται τους φυσικούς νόμους και περιορισμούς.



Σχήμα 5.2: Διάγραμμα Venn της υβριδικής μοντελοποίησης, που δείχνει σχηματικά τις απαιτήσεις της γνώσης των εμπειρογνομόνων και των δεδομένων, την ερμηνευσιμότητα και τη δομή του μοντέλου.

5.5 Συνδυασμός μοντέλων βασισμένων στη φυσική και στα δεδομένα

Ο συνδυασμός των παραδοσιακών ντετερμινιστικών μοντέλων με τις μεθόδους που βασίζονται στα δεδομένα προσφέρει τα καλύτερα και από τους δύο κόσμους. Τέτοια υβριδικά μοντέλα μπορούν να βασίζονται στη φυσική πραγματικότητα, ενώ παράλληλα προσαρμόζονται στα νέα δεδομένα, εξασφαλίζοντας τόσο την ακρίβεια όσο και τη φυσική αληθοφάνεια.



Σχήμα 5.3: Σχηματική απεικόνιση τριών αρχιτεκτονικών μοντέλων που χρησιμοποιούν συνδυασμός των παραδοσιακών ντετερμινιστικών μοντέλων με τις μεθόδους που βασίζονται στα δεδομένα.

Η συγχώνευση των μεθόδων με γνώμονα τα δεδομένα με την παραδοσιακή μοντελοποίηση υπόσχεται ανακαλύψεις σε διάφορους τομείς, από την πρόβλεψη πολύπλοκων φυσικών φαινομένων έως τη βελτιστοποίηση των μηχανολογικών σχεδίων. Καθώς η υπολογιστική ισχύς αυξάνεται και τα δεδομένα γίνονται ακόμη πιο προσιτά, ο ρόλος των μεθόδων με γνώμονα τα δεδομένα στην επιστήμη και τη μηχανική θα επεκταθεί αναμφίβολα.

5.6 Μείωση παραμετρικής τάξης μοντέλου με βάση τα δεδομένα (Data-driven pMOR)

5.6.1 Βασικές έννοιες

Με την έλευση εξελιγμένων εργαλείων προσομοίωσης, οι μηχανικοί και οι επιστήμονες μπορούν να μοντελοποιούν περίπλοκα συστήματα που περιγράφονται από πολύπλοκες μαθηματικές εξισώσεις, ιδίως μερικές διαφορικές εξισώσεις (PDE). Ωστόσο, αυτά τα μοντέλα υψηλής πιστότητας συχνά συνοδεύονται από σημαντικό υπολογιστικό κόστος. Σε αυτό το σημείο, η Μείωση Τάξης Μοντέλου (MOR) και η παραλλαγή της, η Παραμετρική Μείωση Τάξης Μοντέλου (pMOR), διαδραματίζουν καθοριστικό ρόλο. [11] [21] [31] [32] [33] [34] Στόχος της MOR είναι η προσέγγιση της συμπεριφοράς ενός συστήματος χρησιμοποιώντας ένα μοντέλο με λιγότερους βαθμούς ελευθερίας. Ενώ η MOR επικεντρώνεται σε ένα μοναδικό σύστημα, η pMOR εξετάζει μια οικογένεια συστημάτων που διακρίνονται από ορισμένες παραμέτρους.

Η μείωση της τάξης του μοντέλου (MOR) αποσκοπεί στη δημιουργία ενός απλούστερου (μειωμένου) μοντέλου που μπορεί να προβλέψει τη συμπεριφορά ενός πιο σύνθετου συστήματος με καλή ακρίβεια, αλλά με πολύ χαμηλότερο υπολογιστικό κόστος, μειώνοντας τους χρόνους προσομοίωσης χωρίς να διακυβεύεται δραστικά η ακρίβεια. Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο για συστήματα που διέπονται από μερικές διαφορικές εξισώσεις (PDEs), όπως στην υπολογιστική ρευστοδυναμική, όπου οι προσομοιώσεις μπορεί να είναι υπολογιστικά δαπανηρές, αλλά και γενικά μοντέλα που επηρεάζονται από μεταβαλλόμενες παραμέτρους.

Ο όρος data-driven σε αυτό το πλαίσιο σημαίνει ότι η διαδικασία αναγωγής ενημερώνεται από δεδομένα, τα οποία προέρχονται είτε απευθείας από μετρήσεις είτε από προσομοιώσεις υψηλής πιστότητας. Μαθαίνοντας από αυτά τα δεδομένα, η διαδικασία μείωσης μπορεί να παράγει ένα μοντέλο που προσεγγίζει κατά πολύ τη συμπεριφορά του αρχικού συστήματος.

Η Παραμετρική Μείωση Τάξης Μοντέλου (pMOR) επεκτείνει την έννοια εξετάζοντας όχι μόνο ένα σύστημα, αλλά μια οικογένεια συστημάτων παραμετροποιημένων με ορισμένες τιμές. Ο στόχος είναι στη συνέχεια να βρεθεί ένα μειωμένο μοντέλο που να είναι έγκυρο σε ένα εύρος αυτών των παραμέτρων.

5.6.2 Αναγκαιότητα προσεγγίσεων με γνώμονα τα δεδομένα

Όταν τα συστήματα είναι παραμετρικά, η επιλογή στιγμιότυπων (συγκεκριμένες λύσεις σε διάφορες τιμές παραμέτρων) καθίσταται κρίσιμη. Επιπλέον, καθώς οι παράμετροι αλλάζουν, η διασφάλιση της σταθερότητας και της ακρίβειας σε όλο το χώρο των παραμέτρων γίνεται πρόκληση. Τα μοντέλα υψηλής πιστότητας παράγουν τεράστιες ποσότητες δεδομένων. Η ανάλυση αυτών των δεδομένων μπορεί να δώσει πληροφορίες για τη συμπεριφορά του συστήματος, ιδίως σε ένα εύρος παραμέτρων. Οι παραδοσιακές μέθοδοι pMOR, αν και αποτελεσματικές, συχνά στερούνται προσαρμοστικότητας. Μπορεί να μην γενικεύουν καλά σε ολόκληρο το χώρο παραμέτρων ή για αθέατες παραμέτρους. Έτσι, μια προσέγγιση βασισμένη στα δεδομένα καθίσταται απαραίτητη. Μαθαίνοντας από τα δεδομένα, είτε από προσομοιώσεις υψηλής πιστότητας είτε από πραγματικές μετρήσεις, η pMOR μπορεί να προσαρμοστεί σε ένα ευρύτερο φάσμα παραμέτρων με μεγαλύτερη ακρίβεια.

Τεχνικές με γνώμονα τα δεδομένα στην pMOR:

1. **Ορθή ορθογώνια αποσύνθεση (POD):** Η POD εντοπίζει τα κυρίαρχα μοτίβα σε ένα σύνολο δεδομένων. Οι τρόποι, ταξινομημένοι με βάση τη σημασία τους, βοηθούν στην ανακατασκευή των δεδομένων. Αυτοί οι τρόποι χρησιμεύουν ως μειωμένη βάση στο pMOR, αποτυπώνοντας τις πιο επιδραστικές συμπεριφορές του συστήματος.
2. **Δυναμική αποσύνθεση τρόπων λειτουργίας (DMD):** Η DMD αποσυνθέτει τα πολύπλοκα συστήματα σε ένα σύνολο δυναμικών τρόπων λειτουργίας, ιδιαίτερα χρήσιμη για μη στάσιμα, χρονικά μεταβαλλόμενα συστήματα.
3. **Μέθοδοι μειωμένης βάσης:** Εδώ, "στιγμιότυπα" της συμπεριφοράς του συστήματος σε διακριτές τιμές παραμέτρων αποτελούν τη μειωμένη βάση. Μέθοδοι όπως ο άπληστος αλγόριθμος μπορούν να βοηθήσουν στην επιλογή αυτών των στιγμιότυπων, εξασφαλίζοντας ένα στιβαρό και ακριβές μειωμένο μοντέλο.

5.7 Μηχανική μάθηση στο pMOR

Η μηχανική μάθηση (ML) αφορά τη δημιουργία αλγορίθμων που βελτιώνουν την απόδοσή τους σε μια εργασία μέσω της εμπειρίας. Κεντρική θέση στην ML κατέχει η έννοια της αναγνώρισης προτύπων στα δεδομένα.

Τύποι ML:

1. Μάθηση με επίβλεψη: Αλγόριθμος εκπαιδεύεται σε δεδομένα με ετικέτες.
2. Μάθηση χωρίς επίβλεψη: Ασχολείται με μη επισημασμένα δεδομένα, ανακαλύπτοντας τα υποκείμενα πρότυπα.
3. Ενισχυτική μάθηση: Ο αλγόριθμος μαθαίνει αλληλεπιδρώντας με ένα περιβάλλον.

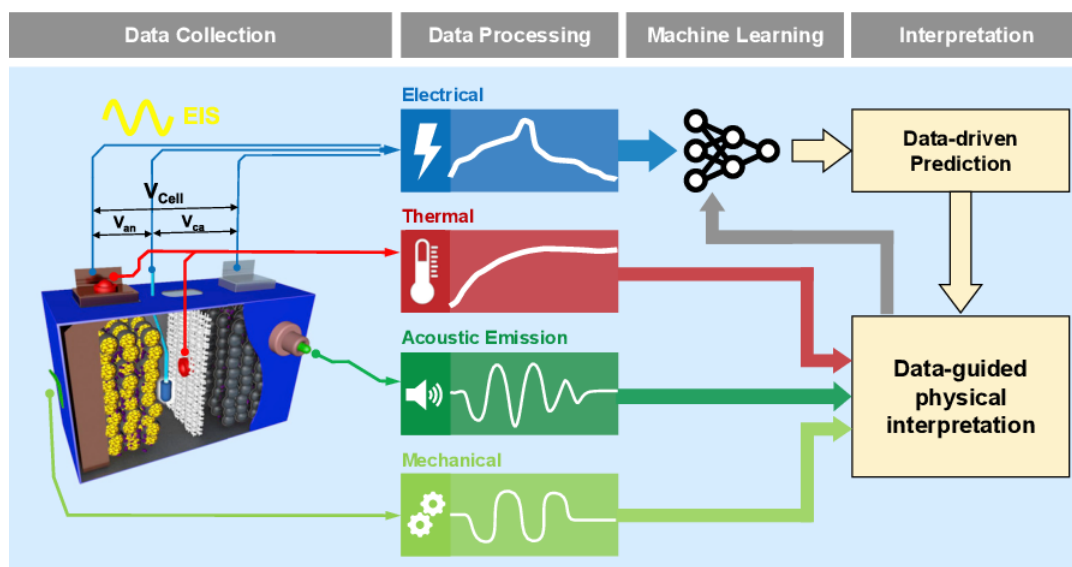
5.7.1 Δυνατότητες και προκλήσεις της μηχανικής μάθησης στο pMOR

1. **Νευρωνικά δίκτυα για παραμετρική χαρτογράφηση:** Τα νευρωνικά δίκτυα μπορούν να αντιστοιχίσουν τις τιμές των παραμέτρων στις αποκρίσεις του συστήματος. Ένα εκπαιδευμένο δίκτυο μπορεί να προβλέψει τη συμπεριφορά του συστήματος για νέες τιμές παραμέτρων, καθιστώντας τις προσομοιώσεις ταχύτερες.
2. **Επιλογή στιγμιότυπων με ML:** Η ML, ιδίως οι αλγόριθμοι ομαδοποίησης, μπορούν να προσδιορίσουν ποια στιγμιότυπα (από μοντέλα υψηλής πιστότητας) είναι πιο αντιπροσωπευτικά για ολόκληρο το χώρο παραμέτρων. Αυτά τα επιλεγμένα στιγμιότυπα μπορούν στη συνέχεια να αποτελέσουν τη μειωμένη βάση.
3. **Πρόβλεψη σφαλμάτων και βελτίωση μοντέλων:** Μόλις προκύψει ένα μειωμένο μοντέλο, το ML μπορεί να προβλέψει πού αυτό το μοντέλο μπορεί να έχει υψηλά σφάλματα, μαθαίνοντας από προηγούμενες ανακρίβειες. Αυτή η συνεχής βελτίωση καθιστά το συνδυασμένο σύστημα pMOR-ML πιο εύρωστο.
4. **Προκλήσεις στο pMOR με υποστήριξη ML:** Ενώ το ML εισάγει προσαρμοστικότητα, δεν μπορούν να αγνοηθούν προκλήσεις όπως η υπερπροσαρμογή (όπου το μοντέλο είναι πολύ προσαρμοσμένο στα δεδομένα εκπαίδευσης) και το υπολογιστικό κόστος της εκπαίδευσης των μοντέλων ML.

5.7.2 Εφαρμογές της Μηχανικής μάθησης στο pMOR

1. **Προσομοίωση αεροδυναμικής:** Στην αεροδιαστημική βιομηχανία, οι προσομοιώσεις σε πραγματικό χρόνο είναι ζωτικής σημασίας. Χρησιμοποιώντας το pMOR με βάση τα δεδομένα σε συνδυασμό με το ML, οι μηχανικοί μπορούν να επιτύχουν ταχύτερες προσομοιώσεις που προσαρμόζονται στις μεταβαλλόμενες συνθήκες πτήσης.
2. **Σχεδιασμός ηλεκτρικών κυκλωμάτων:** Για ολοκληρωμένα κυκλώματα με ποικίλα εξαρτήματα (αντιστάσεις, πυκνωτές), το pMOR με ML μπορεί να προσομοιώσει γρήγορα τη συμπεριφορά του κυκλώματος για διαφορετικές τιμές εξαρτημάτων.
3. **Περιβαλλοντική μοντελοποίηση:** Η προσομοίωση κλιματικών αλλαγών ή ωκεάνιων ρευμάτων περιλαμβάνει πολυάριθμες παραμέτρους. Το pMOR με βάση τα δεδομένα, βελτιωμένο με ML, μπορεί να βοηθήσει τους ερευνητές να αποκτήσουν ταχύτερα και ακριβέστερα μοντέλα.

Η εφαρμογή μεθόδων με βάση τα δεδομένα και η μάθηση με βάση τη φυσική.



Σχήμα 5.4: Καταγραφή των ηλεκτροχημικών και φυσικών δεδομένων ενός κυττάρου για πρόβλεψη βάσει δεδομένων και φυσικές ερμηνείες.

5.7.3 Μέθοδοι και τεχνικές pMOR με βάση τα δεδομένα

1. **Κατάλληλη ορθογώνια αποσύνθεση (POD):** Μια κοινή μέθοδος στην καθοδηγούμενη από δεδομένα MOR είναι η ορθή ορθογώνια αποσύνθεση (Proper Orthogonal Decomposition - POD). Προσδιορίζει τα κυρίαρχα πρότυπα (modes) σε ένα σύνολο δεδομένων. Οι τρόποι ταξινομούνται με βάση τη σπουδαιότητα και μπορείτε να χρησιμοποιήσετε τους πιο σημαντικούς τρόπους για να ανακατασκευάσετε τα αρχικά δεδομένα. Στην pMOR, αυτοί οι τρόποι μπορούν να θεωρηθούν ως βάση για τον μειωμένο χώρο εντός του οποίου λειτουργεί το σύστημα.
2. **Μέθοδοι μειωμένης βάσης:** Στο πλαίσιο του pMOR, η μέθοδος μειωμένης βάσης αποσκοπεί στη δημιουργία ενός μειωμένου χώρου όπου η λύση μπορεί να αναπαρασταθεί με ακρίβεια για διάφορες τιμές παραμέτρων. Περιλαμβάνει την επιλογή ορισμένων λύσεων "στιγμιότυπων" σε διαφορετικές τιμές παραμέτρων και τη χρήση τους για την κατασκευή της μειωμένης βάσης.
3. **Προσεγγίσεις μηχανικής μάθησης:** Με την άνοδο της μηχανικής μάθησης, τεχνικές όπως τα νευρωνικά δίκτυα και οι μηχανές διανυσμάτων υποστήριξης ενσωματώνονται στο πλαίσιο μείωσης της τάξης μοντέλου. Η ιδέα είναι η χρήση αυτών των αλγορίθμων για την εκμάθηση της αντιστοίχισης μεταξύ των τιμών των παραμέτρων και των αποκρίσεων του συστήματος ή μεταξύ διαφορετικών λύσεων του συστήματος.
4. **Άπληστοι αλγόριθμοι (Greedy Algorithms):** Κατά τη δημιουργία μειωμένων μοντέλων, οι άπληστοι αλγόριθμοι μπορούν να βοηθήσουν στην επιλογή των πιο κατατοπιστικών παραμέτρων ή στιγμιότυπων. Εμπλουτίζουν επαναληπτικά τη μειωμένη βάση μέχρι να επιτευχθεί μια ορισμένη ανοχή σφάλματος.

Πλεονεκτήματα του pMOR με βάση τα δεδομένα

1. **Αποδοτικότητα:** Τα μειωμένα μοντέλα μπορούν να αξιολογηθούν πολύ ταχύτερα από τα πλήρη μοντέλα, επιτρέποντας προσομοιώσεις σε πραγματικό χρόνο ή γρήγορους επαναληπτικούς σχεδιασμούς.
2. **Ευελιξία:** Μόλις δημιουργηθεί το μειωμένο μοντέλο, μπορεί να αξιολογηθεί για οποιαδήποτε τιμή παραμέτρου εντός του εξεταζόμενου εύρους χωρίς να χρειάζεται να επιλυθεί ξανά το πλήρες μοντέλο.

3. **Ενσωμάτωση με τη μηχανική μάθηση:** Καθώς τα δεδομένα γίνονται όλο και πιο διαδεδομένα, ο συνδυασμός του pMOR με αλγορίθμους μηχανικής μάθησης μπορεί να οδηγήσει σε εξαιρετικά ακριβή και αποδοτικά μοντέλα.

Περιορισμοί και προκλήσεις

1. **Συμβιβασμός μεταξύ ακρίβειας και πολυπλοκότητας:** Όσο πιο απλό είναι το μοντέλο, τόσο πιο γρήγορο είναι, αλλά υπάρχει πάντα ο κίνδυνος να χαθεί η ακρίβεια.
2. **Σταθερότητα:** Τα μειωμένα μοντέλα, ειδικά για συστήματα που περιγράφονται από PDEs, μπορεί μερικές φορές να υποφέρουν από αριθμητικές αστάθειες.
3. **Κόστος εκτός σύνδεσης:** Η κατασκευή ενός μειωμένου μοντέλου, ιδίως στο pMOR, μπορεί να είναι υπολογιστικά εντατική. Ωστόσο, αυτό είναι συχνά αποδεκτό, καθώς το μειωμένο μοντέλο μπορεί να χρησιμοποιηθεί πολλές φορές αργότερα, αντισταθμίζοντας το αρχικό κόστος.

Επομένως, το pMOR με βάση τα δεδομένα είναι ένα ισχυρό εργαλείο για την αποτελεσματική προσομοίωση πολύπλοκων συστημάτων. Αξιοποιώντας τα δεδομένα και τις προηγμένες τεχνικές μείωσης, μπορεί κανείς να επιτύχει σημαντική εξοικονόμηση υπολογιστικών πόρων, διατηρώντας παράλληλα αποδεκτά επίπεδα ακρίβειας. Καθώς οι υπολογιστικές απαιτήσεις συνεχίζουν να αυξάνονται και τα δεδομένα γίνονται πιο διαθέσιμα, οι τεχνικές pMOR με βάση τα δεδομένα θα διαδραματίζουν πιθανότατα ολοένα και πιο σημαντικό ρόλο σε διάφορες μηχανολογικές και επιστημονικές εφαρμογές.

Παράλληλα, η συγχώνευση του pMOR με βάση τα δεδομένα και της μηχανικής μάθησης αποτελεί απόδειξη της δύναμης της διεπιστημονικής έρευνας. Με την pMOR να παρέχει ένα θεμέλιο και την ML να εισάγει την προσαρμοστικότητα, το συνδυασμένο σύστημα υπόσχεται ταχύτερες και ακριβέστερες προσομοιώσεις. Καθώς οι υπολογιστικές ανάγκες αυξάνονται και καθώς ο κόσμος γίνεται περισσότερο επικεντρωμένος στα δεδομένα, αυτή η συμβολή θα είναι ακόμη πιο καθοριστική για τη διαμόρφωση του μέλλοντος της έρευνας και των εφαρμογών που βασίζονται στην προσομοίωση.

5.8 Ανάλυση παλινδρόμησης (Regression Analysis)

Η ανάλυση παλινδρόμησης είναι μια στατιστική μέθοδος που χρησιμοποιείται για τη μελέτη της σχέσης μεταξύ μιας εξαρτημένης μεταβλητής και μιας (ή περισσότερων) ανεξάρτητων μεταβλητών. Ο πρωταρχικός σκοπός της ανάλυσης παλινδρόμησης είναι να κατανοήσουμε πώς μεταβάλλεται η τυπική τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής όταν μεταβάλλεται οποιαδήποτε από τις ανεξάρτητες μεταβλητές, ενώ οι άλλες ανεξάρτητες μεταβλητές παραμένουν σταθερές. [35] [36] [37] [38] [39] [40] [41] [42]

5.8.1 Τύποι ανάλυσης παλινδρόμησης

1. Απλή γραμμική παλινδρόμηση

Χρησιμοποιείται όταν η σχέση μεταξύ των μεταβλητών είναι γραμμική. Καθιερώνει μια γραμμική σχέση μεταξύ της εξαρτημένης και της ανεξάρτητης μεταβλητής (ή των ανεξάρτητων μεταβλητών).

Η απλή γραμμική παλινδρόμηση μοντελοποιεί τη σχέση μεταξύ της εξαρτημένης μεταβλητής Y και μία ανεξάρτητη μεταβλητή X χρησιμοποιώντας μια γραμμική εξίσωση της μορφής:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \epsilon$$

όπου:

- β_0 είναι η τετμημένη y .
- β_1 είναι η κλίση της ευθείας.
- ϵ αντιπροσωπεύει τον όρο σφάλματος (υπολείμματα).

Η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων χρησιμοποιείται συνήθως για την εκτίμηση β_0 και β_1 . Οι εκτιμήσεις δίνονται από:

$$\beta_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

$$\beta_0 = \bar{y} - \beta_1 \bar{x}$$

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \epsilon$$

2. Multiple Linear Regression

Χρησιμοποιείται όταν υπάρχουν περισσότερες από μία ανεξάρτητες μεταβλητές. Το μοντέλο επεκτείνεται σε:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

όπου:

- p είναι ο αριθμός των ανεξάρτητων μεταβλητών.
- β_i είναι ο συντελεστής του i^{th} ανεξάρτητη μεταβλητή.

Σε συμβολισμό πινάκων, η εξίσωση πολλαπλής γραμμικής παλινδρόμησης μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\beta + \epsilon$$

όπου:

- $\mathbf{y}$ είναι ένα διάνυσμα στήλης της εξαρτημένης μεταβλητής.
- $\mathbf{X}$ είναι ο πίνακας σχεδιασμού. - β είναι ένα διάνυσμα στήλης των συντελεστών.
- ϵ είναι ένα διάνυσμα στήλης των σφαλμάτων.

Οι εκτιμήσεις ελαχίστων τετραγώνων των συντελεστών στην πολλαπλή γραμμική παλινδρόμηση δίνονται από:

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

3. Αξιολόγηση μοντέλου

Συνήθως χρησιμοποιούμενες μετρικές για την αξιολόγηση της απόδοσης των μοντέλων παλινδρόμησης είναι:

- Μέσο τετραγωνικό σφάλμα (MSE):

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- Μέση ρίζα τετραγωνικού σφάλματος (RMSE):

$$RMSE = \sqrt{MSE}$$

- Συντελεστής προσδιορισμού (R^2):

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{tot}}$$

όπου:

- SS_{res} είναι το άθροισμα των τετραγώνων των καταλοίπων.
- SS_{tot} είναι το συνολικό άθροισμα των τετραγώνων.

4. **Πολυωνυμική παλινδρόμηση** Χρησιμοποιείται όταν η σχέση μεταξύ των μεταβλητών είναι καμπυλόγραμμη.

Για ένα πολυώνυμο δευτέρου βαθμού:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2 + \epsilon$$

Για ένα πολυώνυμο τρίτου βαθμού:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2 + \beta_3 X^3 + \epsilon$$

5. Ridge Regression

Η παλινδρόμηση Ridge προσθέτει μια ποινή στον κανονικό στόχο των ελαχίστων τετραγώνων:

$$\hat{\beta}^{ridge} = \arg \min_{\beta} (||\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta||_2^2 + \lambda ||\beta||_2^2)$$

όπου:

- λ είναι η παράμετρος κανονικοποίησης.

6. Παλινδρόμηση Lasso

Χρησιμοποιείται όταν αντιμετωπίζεται η πολυσυγγραμμικότητα στα δεδομένα Lasso regression uses an L_1 penalty:

$$\hat{\beta}^{lasso} = \arg \min_{\beta} (||\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta||_2^2 + \lambda ||\beta||_1)$$

7. Λογιστική παλινδρόμηση

Χρησιμοποιείται όταν η εξαρτημένη μεταβλητή είναι δυαδική ή κατηγορική.

$$p(Y = 1|X = x) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 x}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 x}}$$

Για πολλαπλή λογιστική παλινδρόμηση με p προγνωστικούς παράγοντες:

$$p(Y = 1|X_1 = x_1, \dots, X_p = x_p) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p}}$$

Αυτό καλύπτει ορισμένες από τις θεμελιώδεις μεθόδους παλινδρόμησης και τους βασικούς μαθηματικούς τύπους τους. Υπάρχουν πολλές προηγμένες τεχνικές παλινδρόμησης και παραλλαγές αυτών των μεθόδων, αλλά τα παραπάνω παρέχουν μια ολοκληρωμένη επισκόπηση των θεμελιωδών εννοιών της ανάλυσης παλινδρόμησης.

5.8.2 Βασικά στοιχεία ανάλυσης παλινδρόμησης

1. **Εξαρτημένη μεταβλητή (ή απόκριση):** Ο κύριος παράγοντας που προσπαθείτε να κατανοήσετε ή να προβλέψετε.
2. **Ανεξάρτητη μεταβλητή (ή προβλεπτικός παράγοντας):** Οι μεταβλητές που υποθέτετε ότι επηρεάζουν την εξαρτημένη μεταβλητή.
3. **Συντελεστής:** Αντιπροσωπεύει τη μεταβολή στην εξαρτημένη μεταβλητή για μεταβολή μιας μονάδας στη μεταβλητή πρόβλεψης.
4. **Διακοπή:** Η αναμενόμενη μέση τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής όταν όλες οι ανεξάρτητες μεταβλητές είναι 0.

Υποθέσεις

1. **Γραμμικότητα:** Υπάρχει γραμμική σχέση μεταξύ της εξαρτημένης και της ανεξάρτητης μεταβλητής.
2. **Ανεξαρτησία:** Οι παρατηρήσεις είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους.
3. **Ομοσκεδαστικότητα:** Η διακύμανση των σφαλμάτων είναι συνεπής σε όλα τα επίπεδα των ανεξάρτητων μεταβλητών.
4. **Κανονικότητα:** Τα σφάλματα (ή κατάλοιπα) του μοντέλου κατανέμονται κανονικά.

5.8.3 Εφαρμογές με χρήση της ανάλυσης παλινδρόμησης

1. **Οικονομικά:** Για να κατανοήσετε πώς οι διάφοροι οικονομικοί δείκτες επηρεάζουν την οικονομική ανάπτυξη.
2. **Βιολογία:** Να κατανοήσουν τη σχέση μεταξύ των ειδών σε ένα οικοσύστημα.
3. **Χρηματοοικονομικά:** Να προβλέψετε τις τιμές των μετοχών με βάση διάφορους δείκτες.
4. **Ιατρική:** Να κατανοήσουν την επίδραση των διαφόρων θεραπειών στους χρόνους ανάρρωσης.
5. **Μάρκετινγκ:** Για την πρόβλεψη των πωλήσεων με βάση τη διαφημιστική δαπάνη.

5.8.4 Περιορισμοί στη χρήση της ανάλυσης παλινδρόμησης

1. Μπορεί να μην καταγράφει πολύπλοκες σχέσεις εάν δεν καθοριστεί σωστά.
2. Ευάλωτος σε ακραίες τιμές, οι οποίες μπορεί να επηρεάσουν σημαντικά τα αποτελέσματα.
3. Τα αποτελέσματα μπορεί να είναι παραπλανητικά εάν παραβιάζονται οι υποθέσεις.
4. Στην ουσία, η ανάλυση παλινδρόμησης παρέχει ένα ισχυρό εργαλείο για την πρόβλεψη και την κατανόηση των σχέσεων των δεδομένων, αλλά τα αποτελέσματά της πρέπει να ερμηνεύονται με προσοχή, ιδίως λαμβάνοντας υπόψη τις υποθέσεις στις οποίες βασίζεται η ανάλυση.

Κεφάλαιο 6

Πειραματική διαδικασία

6.1 Περιγραφή του προβλήματος και της πειραματικής διαδικασίας

Στόχος της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η υλοποίηση της δεύτερης κατηγορίας που αναφέρθηκε στην προηγούμενη ενότητα και στο σημείο των εφαρμογών μηχανικής μάθησης με pMOR, τον σχεδιασμό ηλεκτρικών κυκλωμάτων.

Στο κομμάτι του σχεδιασμού ηλεκτρικών κυκλωμάτων, για ολοκληρωμένα κυκλώματα με ποικίλα εξαρτήματα (αντιστάσεις, πυκνωτές), το pMOR με ML μπορεί να προσομοιώσει γρήγορα τη συμπεριφορά του κυκλώματος για διαφορετικές τιμές εξαρτημάτων. Επομένως, το πρόβλημα επικεντρώνεται στη δημιουργία ενός αγωγού μηχανικής μάθησης για την πρόβλεψη ορισμένων εξόδων ενός κυκλώματος, με τη χρήση δεδομένων ορισμένων παραμέτρων εισόδου. Το σύνολο δεδομένων αντιπροσωπεύει διάφορα ηλεκτρικά εξαρτήματα (όπως αντιστάσεις, πυκνωτές, πηγές τάσης κ.λπ.) με τις σχετικές τιμές, κόμβους και ρυθμίσεις ελέγχου.

Θα δέχεται το σύστημα μας ένα dataset, στα παραδείγματα που παρατίθενται είναι της τάξεως των 100 MNA εξισώσεων, που θα ελέγχεται εάν πρόκειται για δεδομένα κυκλώματος και σε οποιαδήποτε άλλη περίπτωση θα βγάζει μήνυμα λάθους. Μετά την εισαγωγή αυτού του συνόλου δεδομένων, ο κώδικας στοχεύει στη χρήση μοντέλων μηχανικής μάθησης (νευρωνικά δίκτυα, πολυωνυμική παλινδρόμηση, k-κοντινότεροι γείτονες και δέντρα αποφάσεων) για την πρόβλεψη "συντελεστών" (οι οποίοι φαίνεται να είναι μειωμένες αναπαραστάσεις εξόδων υψηλής διάστασης) με βάση τις δεδομένες παραμέτρους εισόδου.

Για να γίνει πιο κατανοητή η χρήση του μοντέλου μας, έστω ότι έχουμε ένα πολύπλοκο

σύστημα (π.χ. μια βιομηχανική μηχανή, μια χημική διαδικασία ή ακόμη και φυσικά φαινόμενα) όπου το αποτέλεσμα επηρεάζεται από διάφορους παράγοντες. Στόχος μας είναι να δημιουργήσουμε ένα μοντέλο που να προβλέπει το αποτέλεσμα με βάση τους δεδομένους παράγοντες. Για παράδειγμα, η πρόβλεψη της θερμοκρασίας ενός κινητήρα με βάση παράγοντες όπως ο φόρτος εργασίας, η εξωτερική θερμοκρασία και ο χρόνος λειτουργίας.

Στον κώδικα, οι "παράγοντες" προσαρμόζονται ως συντελεστές ενός πολωνύμου. Το πραγματικό πολωνύμο (το οποίο αντιπροσωπεύει το σύνθετο σύστημά μας) δίδεται μέσω των δεδομένων εισόδου. Η πρόκληση είναι να εκπαιδεύσουμε μοντέλα (NN και πολωνυμική παλινδρόμηση) για να προβλέψουμε τους συντελεστές αυτού του πολωνύμου (το αποτέλεσμα) με βάση τα δεδομένα εισόδου.

Άλλα παραδείγματα από την καθημερινή ζωή, μπορεί να είναι η μοντελοποίηση του κλίματος, η ηλιακή ακτινοβολία και τα ωκεάνια ρεύματα. Έτσι, θα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη μοντελοποίηση της σχέσης μεταξύ αυτών των παραγόντων και της θερμοκρασίας. Οι συντελεστές του πολωνύμου μπορούν να αντιπροσωπεύουν την επιρροή κάθε παράγοντα.

Επίσης στη συντήρηση βιομηχανικών μηχανών, με την πρόβλεψη της θερμοκρασίας ενός εξαρτήματος μηχανής με βάση παράγοντες όπως ο φόρτος εργασίας της μηχανής, η θερμοκρασία περιβάλλοντος και οι ώρες λειτουργίας. Το εκπαιδευμένο μας μοντέλο μπορεί να βοηθήσει στην προληπτική συντήρηση, εξασφαλίζοντας ότι το μηχανήμα συντηρείται ή ψύχεται όταν προβλέπεται χωρίς να ξεπεραστεί ένα συγκεκριμένο όριο θερμοκρασίας.

Περίληπτικά, ο κώδικας προϋποθέτει ένα σύνολο δεδομένων (dataset) με εξισώσεις Modified Nodal Analysis (MNA). Στη συνέχεια χρησιμοποιεί η μέθοδος POD (Proper Orthogonal Decomposition) για την αποσύνθεση των υψηλών διαστάσεων εξόδων. Αυτή η τεχνική χρησιμοποιείται για την εξαγωγή των πιο σημαντικών μοτίβων (ή τρόπων) από τα δεδομένα. Τα δεδομένα χωρίζονται σε δεδομένα εκπαίδευσης και δοκιμών. Τα δεδομένα εισόδου τυποποιούνται (μηδενικός μέσος όρος και μοναδιαία διακύμανση) για καλύτερη απόδοση στα μοντέλα ML. Στη συνέχεια, ορίζεται και εκπαιδεύεται ένα νευρωνικό δίκτυο πολλαπλών επιπέδων, όπου για την πρόβλεψη χρησιμοποιείται πολωνυμική παλινδρόμηση δευτέρου βαθμού. Συνοπτικά, αυτός ο κώδικας στοχεύει στην πρόβλεψη της συμπεριφοράς του κυκλώματος με βάση τα διάφορα στοιχεία και τις ιδιότητές τους. Αξιολογεί πολλαπλά μοντέλα μηχανικής μάθησης ως προς την ακρίβεια πρόβλεψής τους και παρέχει διάφορες οπτικοποιήσεις για την αξιολόγηση της απόδοσης των μοντέλων.

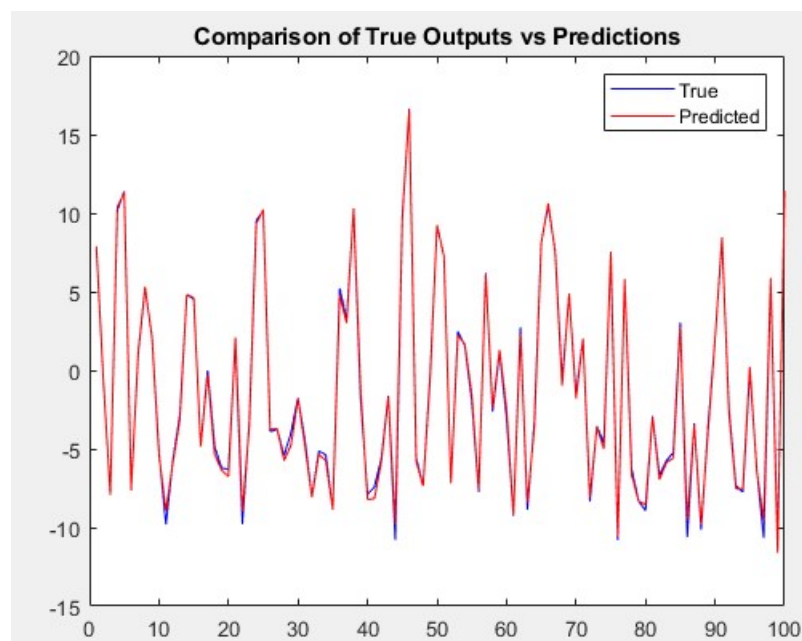
6.2 Ενδεικτικά αποτελέσματα προσομοίωσης

Για να μπορέσουμε να αξιολογήσουμε την πειραματική διαδικασία χρησιμοποιήθηκε ένα σύνολο δεδομένων 100 MNA εξισώσεων και τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά που χρησιμοποιήθηκαν, μπορούν να συνοψιστούν στον παρακάτω πίνακα 7.1:

Σύνολο εξισώσεων MNA	100
Hyperparameters	3 Hidden layers
Μέγεθος Layer	Διαδοχικά 256,128,64
Μέθοδος Training	Βελτιστοποιητής Adam
Ποσοστό benchmark για Training	90%
Ποσοστό benchmark για Testing	10%

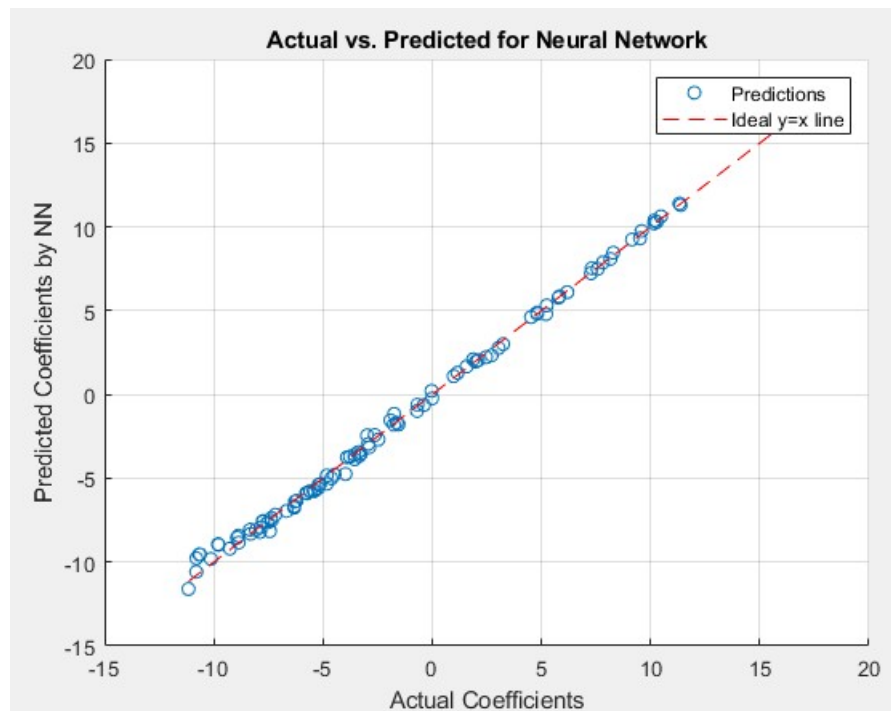
Πίνακας 6.1: Χαρακτηριστικά του νευρωνικού δικτύου.

1. **Διάγραμμα σύγκρισης των πραγματικών εξόδων με τις προβλέψεις:** Το διάγραμμα επικαλύπτει τις πραγματικές τιμές εξόδου (συντελεστές δοκιμής) με τις προβλεπόμενες τιμές του νευρωνικού δικτύου. Αυτό παρέχει μια άμεση οπτική σύγκριση του πόσο καλά οι προβλέψεις του νευρωνικού δικτύου ταιριάζουν με τις πραγματικές τιμές. Βλέποντας πόσο στενά η προβλεπόμενη γραμμή ακολουθεί την πραγματική γραμμή, μπορούμε να έχουμε μια διαισθητική αίσθηση της ακρίβειας του δικτύου.



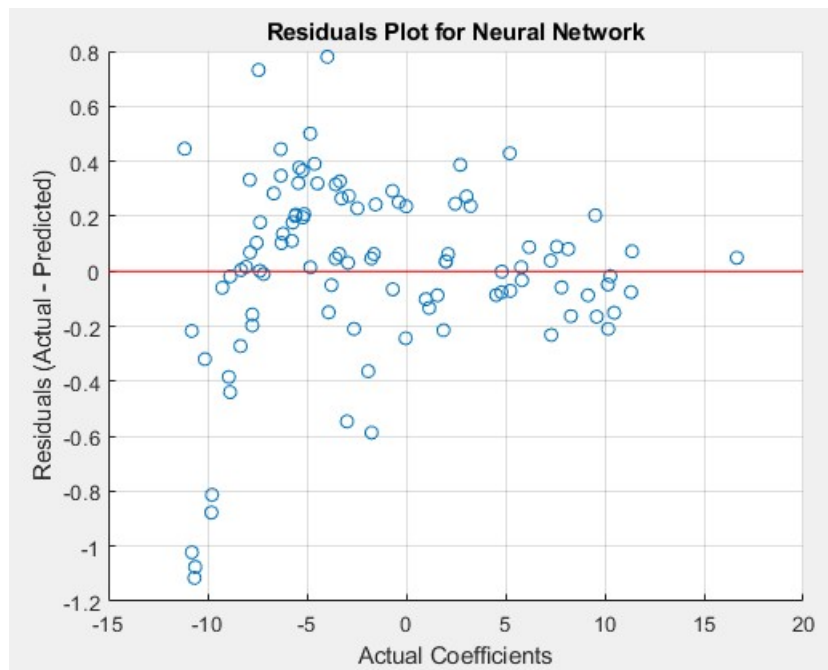
Σχήμα 6.1: Διάγραμμα σύγκρισης των πραγματικών εξόδων με τις προβλέψεις.

2. **Διάγραμμα σύγκρισης των πραγματικών με τις προβλεπόμενες τιμές για το νευρωνικό δίκτυο:** Το διάγραμμα σύγκρισης των πραγματικών με τις προβλεπόμενες τιμές για το νευρωνικό δίκτυο, αναπαριστά τις πραγματικές τιμές στον άξονα x και τις προβλεπόμενες τιμές στον άξονα y. Η ιδανική κόκκινη διακεκομμένη γραμμή $y=x$ υποδηλώνει τέλεια πρόβλεψη. Τα σημεία που βρίσκονται κοντά στην κόκκινη γραμμή υποδεικνύουν ακριβείς προβλέψεις. Οι αποκλίσεις από αυτή τη γραμμή υποδηλώνουν σφάλματα πρόβλεψης. Αυτό το διάγραμμα μπορεί επίσης να βοηθήσει στον εντοπισμό συστηματικών μεροληψιών στο μοντέλο.



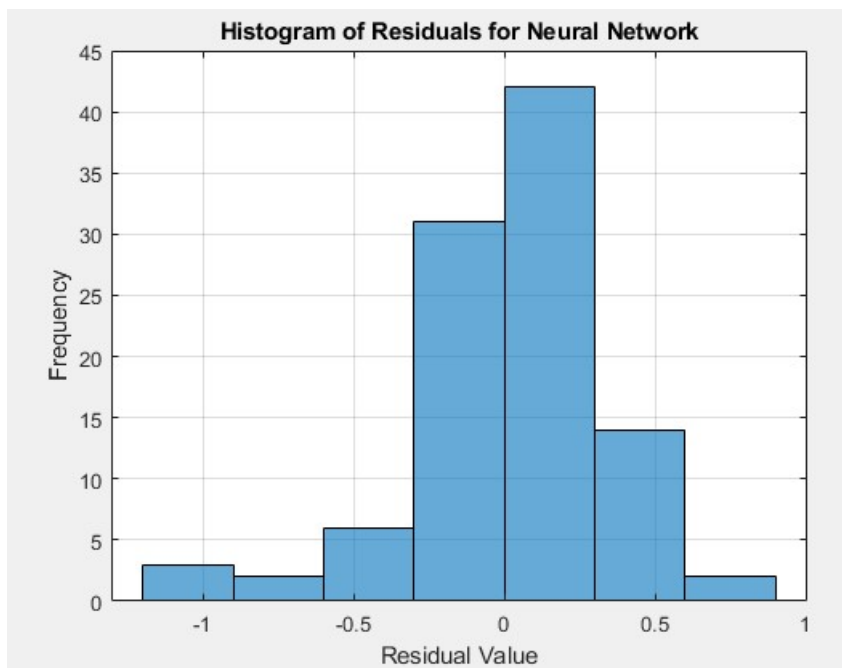
Σχήμα 6.2: Διάγραμμα σύγκρισης των πραγματικών με τις προβλεπόμενες τιμές για το νευρωνικό δίκτυο.

3. **Διάγραμμα υπολοίπων για το νευρωνικό δίκτυο:** Το διάγραμμα υπολοίπων για το νευρωνικό δίκτυο είναι ένα διάγραμμα διασποράς που δείχνει τα κατάλοιπα (διαφορά μεταξύ πραγματικών και προβλεπόμενων τιμών) στον άξονα y και τις πραγματικές τιμές στον άξονα x. Μια οριζόντια γραμμή στο $y=0$ υποδηλώνει μηδενικό σφάλμα. Αυτό μπορεί να βοηθήσει στον εντοπισμό μοτίβων στα κατάλοιπα. Ιδανικά, τα κατάλοιπα θα πρέπει να είναι τυχαία διασκορπισμένα γύρω από το $y=0$. Μοτίβα ή τάσεις υποδηλώνουν ότι το μοντέλο δεν αποτυπώνει κάποια υποκείμενη δομή στα δεδομένα.



Σχήμα 6.3: Διάγραμμα υπολοίπων για το νευρωνικό δίκτυο.

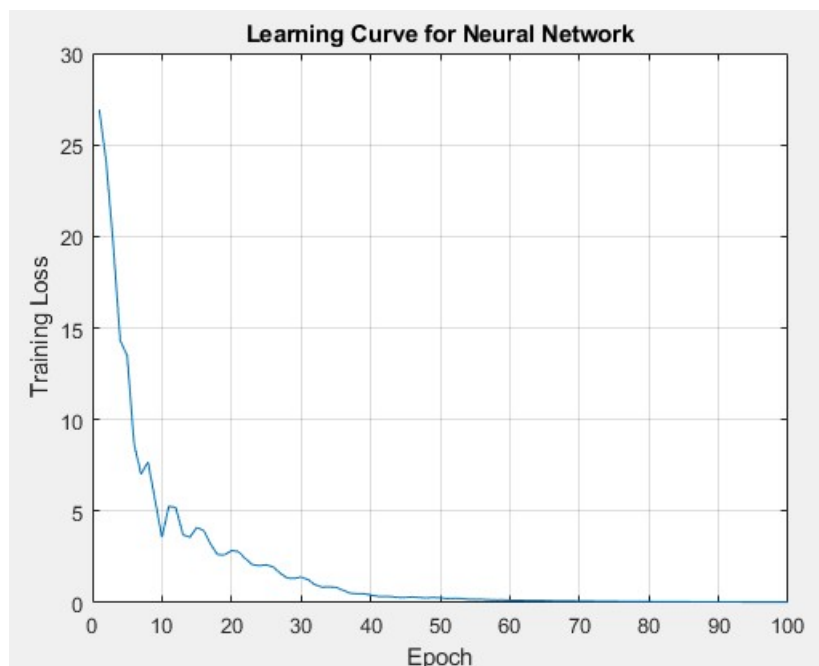
4. **Ιστόγραμμα υπολοίπων για το νευρωνικό δίκτυο:** Η απεικόνιση του ιστογράμματος υπολοίπων για το νευρωνικό δίκτυο, βοηθά στην κατανόηση της κατανομής των υπολοίπων. Ιδανικά, τα κατάλοιπα θα πρέπει να κατανέμονται κανονικά γύρω από το μηδέν, υποδεικνύοντας ότι το μοντέλο είναι εξίσου πιθανό να υπερεκτιμήσει ή να υποεκτιμήσει τη μεταβλητή-στόχο.



Σχήμα 6.4: Ιστόγραμμα υπολοίπων για το νευρωνικό δίκτυο.

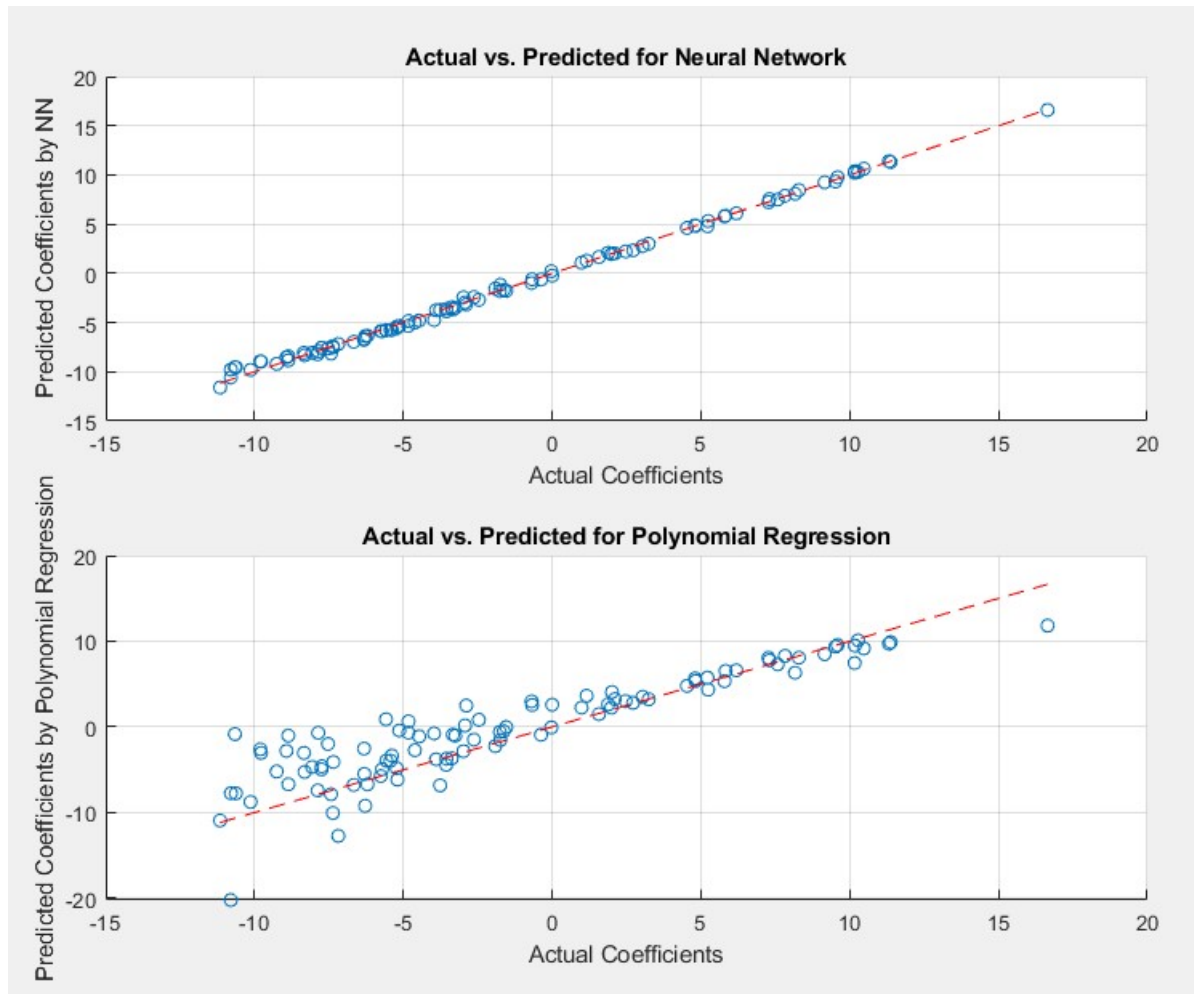
5. **Διάγραμμα καμπύλης μάθησης για το νευρωνικό δίκτυο:** Το διάγραμμα καμπύλης μάθησης για το νευρωνικό δίκτυο, δείχνει την εξέλιξη της απώλειας εκπαίδευσης σε συνάρτηση με τον αριθμό των epochs. Είναι απαραίτητη για τη διάγνωση προβλημάτων κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης. Παραδείγματος χάριν:

- (α') Εάν η απώλεια εκπαίδευσης δεν μειώνεται, το μοντέλο ενδέχεται να μην μαθαίνει.
- (β') Εάν η απώλεια μειώνεται αρχικά και στη συνέχεια σημειώνει οροφή, αυτό μπορεί να υποδεικνύει ότι το μοντέλο έχει φτάσει στη χωρητικότητά του ή ότι ο ρυθμός μάθησης είναι πολύ χαμηλός.
- (γ') Εάν η απώλεια είναι πολύ θορυβώδης, ο ρυθμός μάθησης μπορεί να είναι πολύ υψηλός.



Σχήμα 6.5: Καμπύλη μάθησης για το νευρωνικό δίκτυο

6. **Διάγραμμα σύγκρισης της πραγματικής με την προβλεπόμενη για την απόδοση κάθε μοντέλου, Neural Network and Polynomial Regression:** Το διάγραμμα σύγκρισης της πραγματικής με την προβλεπόμενη για την απόδοση κάθε μοντέλου, Neural Network and Polynomial Regression, βοηθά στην οπτική σύγκριση της απόδοσης διαφορετικών μοντέλων. Όσο πιο κοντά είναι τα σημεία διασποράς στη γραμμή $y=x$, τόσο καλύτερες είναι οι προβλέψεις του μοντέλου.



Σχήμα 6.6: Πραγματική vs Προβλεπόμενη για κάθε μοντέλο (Neural Network and Polynomial Regression)

7. **Μετρικές σφάλματος μοντέλου ως συγκριτικός πίνακας (Model Error Metrics as a comparative table)** Πίνακας: Ένας πίνακας που παρουσιάζει το μέσο τετραγωνικό σφάλμα (MSE) για κάθε εκπαιδευμένο μοντέλο. Σκοπός: Ενώ οι οπτικές συγκρίσεις είναι χρήσιμες, ακριβείς αριθμητικές μετρικές όπως το MSE προσφέρουν ένα ακριβές μέτρο της απόδοσης ενός μοντέλου. Συγκρίνοντας τις τιμές MSE, μπορεί κανείς να κατατάξει τα μοντέλα με βάση την απόδοσή τους.

Model	MSE
Neural Network	0.11015
Polynomial Regression	9.5899
k-NN	7.0337
Decision Trees	1.253

Πίνακας 6.2: Μετρικές σφάλματος μοντέλου ως συγκριτικός πίνακας.

6.3 Παρατηρήσεις

Για την διαδικασία των προσομοιώσεων και την εξαγωγή αποτελεσμάτων χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα Matlab και πιο συγκεκριμένα η έκδοση R2023a, σε συσκευή με προδιαγραφές:

CPU	Intel(R) Core(TM) i5-5200U CPU @ 2.20GHz
Memory(RAM)	8,00 GB
OS	Microsoft Windows 10
Kernel	64-based PC

Πίνακας 6.3: Χαρακτηριστικά του συστήματος

Κεφάλαιο 7

Επίλογος και Συμπεράσματα

7.1 Σύνοψη και συμπεράσματα

Η μείωση της παραμετρικής τάξης μοντέλου με βάση τα δεδομένα (pMOR) είναι μια σύγχρονη τεχνική στην υπολογιστική επιστήμη και τη μηχανική που έχει σχεδιαστεί για να μειώνει την πολυπλοκότητα των παραμετρικά μεταβαλλόμενων συστημάτων. Συχνά σε πραγματικές καταστάσεις, η εκτέλεση πλήρων προσομοιώσεων είναι υπολογιστικά απαιτητική, ιδίως όταν οι παράμετροι του συστήματος μεταβάλλονται. Κατά συνέπεια, οι τεχνικές pMOR αποσκοπούν στη δημιουργία ενός μοντέλου μειωμένης τάξης (ROM) που αντικατοπτρίζει τη συμπεριφορά του πρωτογενούς συστήματος σε διάφορες τιμές παραμέτρων, αλλά απαιτεί ένα κλάσμα των υπολογιστικών πόρων.

Οι μεθοδολογίες με γνώμονα τα δεδομένα, που ενισχύονται από την έξαρση των αισθητήρων και τις βελτιωμένες δυνατότητες αποθήκευσης και επεξεργασίας δεδομένων, γίνονται όλο και πιο διαδεδομένες σε διάφορα επιστημονικά και μηχανολογικά πεδία. Αυτές οι τεχνικές, οι οποίες περιλαμβάνουν αξιοσημείωτους αλγορίθμους μηχανικής μάθησης, όπως τα νευρωνικά δίκτυα, η παλινδρόμηση και τα δέντρα αποφάσεων, μπορούν να ανασύρουν μοτίβα και σχέσεις από τα δεδομένα αυτόνομα, χωρίς την ανάγκη ρητού προγραμματισμού βάσει κανόνων. Επιπλέον, μέθοδοι όπως η ορθή ορθογώνια αποσύνθεση (Proper Orthogonal Decomposition, POD) βοηθούν στη μετατροπή δεδομένων υψηλής διάστασης σε μια πιο εύχρηστη μορφή χαμηλότερης διάστασης.

Η μελέτη που αναδεικνύεται στη διατριβή διευκρινίζει μία από τις πιο πρόσφατες και πρακτικά διαδεδομένες μεθόδους που έχουν συγκεντρώσει σημαντική ερευνητική προσοχή. Η δημοτικότητα της πηγάζει από την ευκολία εφαρμογής της, τις λιγότερες υπολογιστικές

απαιτήσεις σε σύγκριση με εναλλακτικές μεθόδους για την υποβάθμιση παραμετρικών μοντέλων κυκλωμάτων και την καταλληλότητά της για αναγωγές συστημάτων υψηλών διαστάσεων. Η παρούσα έρευνα εμβάθυνε στις ιδιαιτερότητες της εκτέλεσης προσομοίωσης, στα εργαλεία που είναι απαραίτητα για τη διαδικασία και στη μεθοδολογία μοντελοποίησης κυκλωμάτων μέσω ενός αρχείου περιγραφής κυκλώματος. Ένα σημαντικό τμήμα της μελέτης υπογράμμισε την επιτάχυνση των αναλύσεων κυκλωμάτων με παράλληλη ελαχιστοποίηση της χρήσης των πόρων του συστήματος.

Τα αποτελέσματα αυτής της μελέτης για τη μέθοδο pMOR με χρήση δεδομένων έδειξαν ότι μπορεί να επιτευχθεί μείωση της τάξης του μοντέλου, με το παραγόμενο σύστημα να αντικατοπτρίζει τη συμπεριφορά του αρχικού. Τα πειράματα έδειξαν επίσης ότι ορισμένες τεχνικές μπορούν να αποδώσουν αποτελέσματα που ευθυγραμμίζονται στενά με τα αρχικά κυκλώματα, ανεξάρτητα από τον αριθμό των θυρών.

Η συγχώνευση τεχνικών που βασίζονται σε δεδομένα με τη συμβατική μοντελοποίηση έχει τεράστιες δυνατότητες, υποσχόμενη καινοτόμες λύσεις σε διάφορους τομείς που κυμαίνονται από την πρόβλεψη περίπλοκων φυσικών φαινομένων έως τη βελτίωση των μηχανολογικών σχεδίων. Καθώς οι τεχνολογικές εξελίξεις στην πληροφορική συνεχίζονται και η προσβασιμότητα στα δεδομένα αυξάνεται, η εξέχουσα θέση των μεθόδων με γνώμονα τα δεδομένα στην επιστήμη και τη μηχανική είναι έτοιμη να επεκταθεί. Ωστόσο, είναι υψίστης σημασίας να αναγνωρίσουμε ότι αυτές οι μέθοδοι που βασίζονται στα δεδομένα, αν και ισχυρές, συμπληρώνουν και όχι αντικαθιστούν τα παραδοσιακά μοντέλα. Συνδυάζοντας την ευρωστία των μοντέλων που βασίζονται στη φυσική με την προσαρμοστικότητα των προσεγγίσεων που βασίζονται στα δεδομένα, προκύπτει μια συνεργιστική λύση, που υπόσχεται μια ολοκληρωμένη προσέγγιση για την αντιμετώπιση των προκλήσεων στην εποχή μας που είναι πλούσια σε δεδομένα.

7.2 Μελλοντικές επεκτάσεις

Πιθανή μελλοντική προέκταση της παρούσας διπλωματικής εργασίας, θα μπορούσε να είναι η παραλληλοποίηση ορισμένων σταδίων της υλοποίησης, προκειμένου να έχουμε και από εκεί γρηγορότερα αποτελέσματα. Επίσης η ενσωμάτωση με τη βαθιά μάθηση. Η βαθιά μάθηση, ένα υποσύνολο της ML με βαθιά νευρωνικά δίκτυα, μπορεί να συλλάβει περίπλοκα μοτίβα στα δεδομένα, προσφέροντας αυξημένη ακρίβεια για την pMOR. Καθώς τα συστήματα γίνονται όλο και πιο πολύπλοκα, η διασφάλιση της αποτελεσματικής κλιμάκωσης των μεθόδων pMOR και ML με βάση τα δεδομένα είναι ζωτικής σημασίας. Ενώ τα μοντέλα ML, ιδίως τα μοντέλα βαθιάς μάθησης, μπορούν να είναι εξαιρετικά ακριβή, συχνά θεωρούνται ως "μαύρα κουτιά". Η διασφάλιση της ερμηνευσιμότητας αυτών των μοντέλων, ιδίως σε κρίσιμες εφαρμογές, καθίσταται απαραίτητη.

Βιβλιογραφία

- [1] Donal P. Finegan, Juner Zhu, Xuning Feng, Matt Keyser, Marcus Ulmefors, Wei Li, Martin Z. Bazant, and Samuel J. Cooper. The application of data-driven methods and physics-based learning for improving battery safety. 5(2):316–329.
- [2] Νίκος Ι. Μάργαρης. *Ανάλυση ηλεκτρικών κυκλωμάτων*. Τζιόλα, 2009.
- [3] Dimitrios A. Chatzigeorgiou. Parametric methods for order reduction of large-scale models. Master’s thesis, Department of Electrical and Computer Engineering, University of Thessaly, February 2022.
- [4] Ορθοκανονικές βάσεις. [https://eclass.aueb.gr/modules/document/file.php/INF169/mathematics_ii/epeaek_grammiki/LAkef2/linalgkef2\(5\).html](https://eclass.aueb.gr/modules/document/file.php/INF169/mathematics_ii/epeaek_grammiki/LAkef2/linalgkef2(5).html). Ανακτήθηκε: 24-1-2022.
- [5] P. Gunupudi, R. Khazaka, and M. Nakhla. Analysis of transmission line circuits using multi-dimensional model reduction techniques. *IEEE 10th Topical Meeting on Electrical Performance of Electronic Packaging*, pages 43–46, July 2001. DOI:10.1109/EPEP.2001.967607.
- [6] S. Gugercin, A. C. Antoulas, and C. Beattie. Model reduction for large-scale linear dynamical systems. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 30(2):609–638, January 2008. DOI:10.1137/060666123.
- [7] Ngoc Kien Vu and Hong Quang Nguyen. Model order reduction algorithm based on preserving dominant poles. *International Journal of Control, Automation and Systems*, 19(6):2047–2058, June 2021. DOI:10.1007/s12555-019-0990-8.

- [8] Kuan Lu, Kangyu Zhang, Haopeng Zhang, Xiaohui Gu, Yulin Jin, Shibo Zhao, Chao Fu, and Yongfeng Yang. A review of model order reduction methods for large-scale structure systems. *Shock and Vibration*, 2021:19, May 2021. DOI:10.1155/2021/6631180.
- [9] Dmitry Missiuro Vasilyev. *Theoretical and practical aspects of linear and nonlinear model order reduction techniques*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, November 2008.
- [10] Crysostomos A. Chatzigeorgiou. Model order reduction techniques for circuits and systems with large number of ports. Master's thesis, Department of Electrical and Computer Engineering, University of Thessaly, February 2018.
- [11] Peter Benner, Serkan Gugercin, and Karen Willcox. A survey of projection-based model reduction methods for parametric dynamical systems. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, November 2015. DOI:10.1137/130932715.
- [12] Imad M. Jaimoukha and Ebrahim M. Kasenally. Krylov subspace methods for solving large lyapunov equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31(1):227–251, October 1994. DOI:10.1137/0731012.
- [13] Athanasios C. Antoulas. Approximation of large-scale dynamical systems. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, January 2005. DOI:10.1137/1.9780898718713.
- [14] Sani R. Nassif. Power grid analysis benchmarks. In *Proceedings of the 2008 Asia and South Pacific Design Automation Conference, ASP-DAC '08*, pages 376–381, January 2008.
- [15] Mohammad Umar Rehman. *Krylov Subspace Methods in Model Order Reduction*. PhD thesis, Department of Electrical Engineering, IIT Delhi, March 2016.
- [16] Vladimir Druskin and Leonid Knizhnerman. Extended krylov subspaces: Approximation of the matrix square root and related functions. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 19(3):755–771, April 1998. DOI:10.1137/S0895479895292400.
- [17] Turbulence, coherent structures, dynamical systems and symmetry.
- [18] Lawrence Sirovich. Turbulence and the dynamics of coherent structures. i - coherent structures. II - symmetries and transformations. III - dynamics and scaling. 45.

- [19] Approximation of large-scale dynamical systems | SIAM digital library.
- [20] *Principal Component Analysis*. Springer Series in Statistics. Springer-Verlag.
- [21] Alfio Quarteroni, Andrea Manzoni, and Federico Negri. *Reduced Basis Methods for Partial Differential Equations*, volume 92 of *UNITEXT*. Springer International Publishing.
- [22] Lihong Feng and Peter Benner. *A robust algorithm for parametric model order reduction based on implicit moment matching*. Springer, Switzerland, January 2014. DOI:10.1007/978-3-319-02090-7-6.
- [23] D.S. Weile, E. Michielssen, E. Grimme, and K. Gallivan. A method for generating rational interpolant reduced order models of two-parameter linear systems. *Applied Mathematics Letters*, 12(5):93–102, July 1999. DOI:10.1016/S0893-9659(99)00063-4.
- [24] Rudy Eid, Behnam Salimbahrami, Boris Lohmann, Evgenii B Rudnyi, and Jan G Korvink. Parametric order reduction of proportionally damped second-order systems. *Sensors and Materials*, 19(3):149–164, April 2007.
- [25] Lihong Feng, Yao Yue, Nicodemus Banagaaya, Peter Meuris, Wim Schoenmaker, and Peter Benner. Parametric modeling and model order reduction for (electro-)thermal analysis of nanoelectronic structures. *Journal of Mathematics in Industry*, 6(1):10, December 2016. DOI:10.1186/s13362-016-0030-8.
- [26] A. Bentbib, K. Jbilou, and E. M. Sadek. On some krylov subspace based methods for large-scale nonsymmetric algebraic riccati problems. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(10):2555–2565, August 2015. DOI:10.1016/j.camwa.2015.09.025.
- [27] Abid Bazaz, Mashuq Nabi, and Janardhanan Sivaramakrishnan. A review of parametric model order reduction techniques. *IEEE 2012 IEEE International Conference on Signal Processing, Computing and Control (ISPCC)*, November 2012. DOI:10.1109/ISPCC.2012.6224356.
- [28] Timothy A. Davis, Sivasankaran Rajamanickam, and Wissam M. Sid-Lakhdar. A survey of direct methods for sparse linear systems. *Acta Numerica*, 25:383–566, May 2016. DOI:10.1017/S0962492916000076.

- [29] George Floros. *Order reduction of large thermal and electrical models with system-theoretic techniques and matrix equation algorithms*. PhD thesis, Department of Electrical and Computer Engineering, University of Thessaly, November 2019. DOI:10.12681/eadd/46633.
- [30] P.K. Gunupudi, R. Khazaka, M.S. Nakhla, T. Smy, and D. Celo. Passive parameterized time-domain macromodels for high-speed transmission-line networks. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 51(12):2347–2354, September 2003. DOI:10.1109/TMTT.2003.820169.
- [31] Jan S. Hesthaven, Gianluigi Rozza, and Benjamin Stamm. *Certified Reduced Basis Methods for Parametrized Partial Differential Equations*. SpringerBriefs in Mathematics. Springer International Publishing, 2016.
- [32] K. Veroy and A. T. Patera. Certified real-time solution of the parametrized steady incompressible navier–stokes equations: rigorous reduced-basis a posteriori error bounds. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 47(8):773–788, 2005. DOI:10.1002/flid.867.
- [33] Benjamin Peherstorfer, Karen Willcox, and Max Gunzburger. Survey of multifidelity methods in uncertainty propagation, inference, and optimization. *SIAM Review*, 60(3):550–591, 2018. DOI:10.1137/16M1082469.
- [34] Steven L. Brunton and J. Nathan Kutz. Data-driven methods for reduced-order modeling. In *Snapshot-Based Methods and Algorithms*, pages 307–344. De Gruyter, 2020. DOI:10.1515/9783110671490-007.
- [35] Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, and Robert Tibshirani. *An Introduction to Statistical Learning*. Springer, 2013.
- [36] Norman R. Draper and Harry Smith. *Applied Regression Analysis*. Wiley-Interscience, 3 edition, 1998.
- [37] Douglas C. Montgomery, Elizabeth A. Peck, and G. Geoffrey Vining. *Introduction to Linear Regression Analysis*. Wiley, 5 edition, 2012.
- [38] Arthur E. Hoerl and Robert W. Kennard. Ridge regression: Biased estimation for nonorthogonal problems. 12(1):55–67, 1970.

-
- [39] Robert Tibshirani. Regression shrinkage and selection via the lasso. 58(1):267–288, 1996.
- [40] David W. Hosmer Jr, Stanley Lemeshow, and Rodney X. Sturdivant. *Applied Logistic Regression*. Wiley, 3 edition, 2013.
- [41] John Neter, Michael H. Kutner, Christopher J. Nachtsheim, and William Wasserman. *Applied Linear Statistical Models*. Irwin, 4 edition, 1996.
- [42] George A. F. Seber and Alan J. Lee. *Linear Regression Analysis*. Wiley, 2 edition, 2012.