

Parametrische Modellreduktion durch impliziten Momentenabgleich

Lihong Feng Peter Benner

Mathematik in Industrie und Technik
Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz
D-09107 Chemnitz

benner@mathematik.tu-chemnitz.de

GMA FA 1.30 Workshop
Anif/Salzburg, 26.–28. September 2007



Gliederung

- 1 Parametrische Systeme und parametrische Modellordnungsreduktion (PMOR)
- 2 PMOR durch expliziten Momentenabgleich nach [Daniel et al., 2004]
- 3 PMOR durch impliziten Momentenabgleich
- 4 Simulationsergebnisse

Parametrische Systeme und parametrische Modellordnungsreduktion (PMOR)

Modellhierarchie:

Nicht-parametrische lineare Systeme:

$$\begin{aligned} \mathbf{C} \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} &= \mathbf{G}\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}u(t), \\ y(t) &= \mathbf{L}^T \mathbf{x}(t), \end{aligned} \quad (1)$$

Nicht-parametrische nichtlineare Systeme:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{g}(\mathbf{x}(t))}{dt} &= \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + \mathbf{B}u(t), \\ y(t) &= \mathbf{L}^T \mathbf{x}(t), \end{aligned} \quad (2)$$

Parametrische Systeme:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{g}(\mathbf{x}(t), s_1, s_2, \dots, s_{\mu-1})}{dt} &= \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), s_1, s_2, \dots, s_{\mu-1}) + \mathbf{B}u(t), \\ y(t) &= \mathbf{L}^T \mathbf{x}(t, s_1, s_2, \dots, s_{\mu-1}). \end{aligned}$$

- \mathbf{x} — Zustand; $u(t)$ — Eingang; $y(t)$ — Ausgang; $s_1, \dots, s_{\mu-1}$ — Parameter.

Parametrische Systeme erlauben eine detailliertere Modellierung physikalischer Systeme als (1), (2), aber Erhaltung der Parameter im reduzierten Modell schwierig!

Einige Grundlagen:

Lineare parametrische System im Zeitbereich:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}(s_1, s_2, \dots, s_{\mu-1}) \frac{dx(t)}{dt} &= \mathbf{G}(s_1, s_2, \dots, s_{\mu-1})\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}u(t), \\ y(t) &= \mathbf{L}^T \mathbf{x}(t). \end{aligned}$$

Lineare parametrische Systeme im Frequenzbereich: ($t \rightarrow s_{\mu}$):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(s_1, \dots, s_{\mu})\mathbf{x} &= \mathbf{B}u, \\ y &= \mathbf{L}^T \mathbf{x}. \end{aligned}$$

Modellreduktion durch einseitige Projektion:

$$\begin{aligned} \mathbf{C} \frac{dx(t)}{dt} &= \mathbf{G}\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}u(t), \\ y(t) &= \mathbf{L}^T \mathbf{x}(t). \end{aligned}$$

$$\Downarrow \quad \mathbf{x} \approx \mathbf{V}\mathbf{z}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{V}^T \mathbf{C} \mathbf{V} \frac{dz(t)}{dt} &= \mathbf{V}^T \mathbf{G} \mathbf{V} \mathbf{z}(t) + \mathbf{V}^T \mathbf{B} u(t), \\ y(t) &= \mathbf{L}^T \mathbf{V} \mathbf{z}(t). \end{aligned}$$

PMOR durch expliziten Momentenabgleich nach [Daniel et al., 2004]

[Daniel et al., 2004]: Expliziter Momentenabgleich basierend auf Multi-Momenten, analog zu AWE [Pillage und Rohrer, 1990].

Parametrisches Originalsystem:

$$\begin{aligned} E(s_1, \dots, s_\mu)x &= Bu \\ y &= L^T x \end{aligned}$$

Taylor-Reihenentwicklung von $E(s_1, \dots, s_\mu)$ um $\bar{s}_1, \bar{s}_2, \dots, \bar{s}_\mu$:

$$\begin{aligned} E(s_1, \dots, s_\mu) &= \tilde{M}_0 + \sum_j (s_j - \bar{s}_j) \tilde{M}_j + (1/2) \sum_{h,k} (s_h - \bar{s}_h)(s_k - \bar{s}_k) \tilde{M}_{h,k} + \\ &\quad (1/3!) \sum_{h,k,l} (s_h - \bar{s}_h)(s_k - \bar{s}_k)(s_l - \bar{s}_l) \tilde{M}_{h,k,l} + \dots, \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{M}_0 &= E(\bar{s}_1, \bar{s}_2, \dots, \bar{s}_\mu), & \tilde{M}_j &= \frac{\partial}{\partial s_j} E(\bar{s}_1, \bar{s}_2, \dots, \bar{s}_\mu), \\ \tilde{M}_{h,k} &= \frac{\partial^2}{\partial s_h \partial s_k} E(\bar{s}_1, \bar{s}_2, \dots, \bar{s}_\mu), & \dots & \end{aligned}$$

Definiere:

$$E_i := \begin{cases} \tilde{M}_j & j = 0, \dots, \mu \\ \tilde{M}_{h,k}, & h = 1, \dots, \mu, k = 1, \dots, \mu \\ \tilde{M}_{h,k,l} & h = 1, \dots, \mu, k = 1, \dots, \mu, l = 1, \dots, \mu \\ \dots & \end{cases}$$

$$\tilde{s}_i := \begin{cases} (s - \bar{s}_j) & j = 0, \dots, \mu \\ (s - \bar{s}_h)(s - \bar{s}_k), & h = 1, \dots, \mu, k = 1, \dots, \mu \\ (s - \bar{s}_h)(s - \bar{s}_k)(s - \bar{s}_l) & h = 1, \dots, \mu, k = 1, \dots, \mu, l = 1, \dots, \mu \\ \dots & \end{cases}$$

Erhalte approximierendes lineares parametrisches System durch Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung:

$$\begin{aligned} (E_0 + \tilde{s}_1 E_1 + \tilde{s}_2 E_2 + \dots + \tilde{s}_p E_p) x &= Bu \\ y &= L^T x \end{aligned}$$

Konstruktion der Projektionsmatrix V :

$$\begin{aligned} (E_0 + \tilde{s}_1 E_1 + \tilde{s}_2 E_2 + \dots + \tilde{s}_p E_p)x &= Bu \\ y &= L^T x \end{aligned}$$

$$\Downarrow (\hat{s}_i := -\tilde{s}_i)$$

$$\begin{aligned} x &= [I - (\hat{s}_1 E_0^{-1} E_1 + \dots + \hat{s}_p E_0^{-1} E_p)]^{-1} E_0^{-1} B u \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} [\underbrace{\hat{s}_1 E_0^{-1} E_1}_{=: M_1} + \dots + \hat{s}_p \underbrace{E_0^{-1} E_p}_{=: M_p}]^j \underbrace{E_0^{-1} B}_{=: B_M} u \\ &= \{ B_M + [M_1 B_M \hat{s}_1 + M_2 B_M \hat{s}_2 + \dots + M_p B_M \hat{s}_p] \\ &\quad + [(M_1)^2 B_M \hat{s}_1^2 + (M_1 M_2 + M_2 M_1) B_M \hat{s}_1 \hat{s}_2 + \\ &\quad + \dots + (M_1 M_p + M_p M_1) B_M \hat{s}_1 \hat{s}_p \\ &\quad + (M_2)^2 B_M \hat{s}_2^2 + (M_2 M_3 + M_3 M_2) B_M \hat{s}_2 \hat{s}_3 + \\ &\quad + \dots + (M_2 M_p + M_p M_2) B_M \hat{s}_2 \hat{s}_p + (M_p)^2 B_M \hat{s}_p^2 + \dots] \\ &\quad + [(M_1)^3 B_M \hat{s}_1^3 + (M_1^2 M_2 + M_2 M_1^2) B_M \hat{s}_1^2 \hat{s}_2 + \dots + (M_p)^p B_M \hat{s}_p^3] \\ &\quad + \dots \} u \end{aligned}$$

Konstruktion der Projektionsmatrix V , fortgesetzt:

$$\begin{aligned}
 x = & \{ B_M + [M_1 B_M \hat{s}_1 + M_2 B_M \hat{s}_2 + \dots + M_p B_M \hat{s}_p] \\
 & + [(M_1)^2 B_M \hat{s}_1^2 + (M_1 M_2 + M_2 M_1) B_M \hat{s}_1 \hat{s}_2 + \dots + (M_1 M_p + M_p M_1) B_M \hat{s}_1 \hat{s}_p \\
 & + (M_2)^2 B_M \hat{s}_2^2 + (M_2 M_3 + M_3 M_2) B_M \hat{s}_2 \hat{s}_3 + \\
 & + \dots + (M_2 M_p + M_p M_2) B_M \hat{s}_2 \hat{s}_p + (M_p)^2 B_M \hat{s}_p^2 + \dots] \\
 & + [(M_1)^3 B_M \hat{s}_1^3 + (M_1^2 M_2 + M_2 M_1^2) B_M \hat{s}_1^2 \hat{s}_2 + \dots + (M_p)^p B_M \hat{s}_p^3] \\
 & + \dots \} u
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 & \text{range}\{V\} \\
 = & \text{span}\{ B_M, \underbrace{M_1 B_M, M_2 B_M, \dots, M_p B_M}_{\text{Momente 1. Ordnung}}, \underbrace{(M_1)^2 B_M, (M_1 M_2 + M_2 M_1) B_M, \dots, (M_1 M_p + M_p M_1) B_M, (M_2)^2 B_M, (M_2 M_3 + M_3 M_2) B_M, \dots, (M_p)^2 B_M, (M_1)^3 B_M, \dots}_{\text{Momente 2. Ordnung}} \}
 \end{aligned}$$

Berechnung des reduzierten Modells:

$$\begin{aligned}(E_0 + \hat{s}_1 E_1 + \hat{s}_2 E_2 + \dots + \hat{s}_p E_p)x &= Bu \\ y &= L^T x\end{aligned}$$

$$\Downarrow x \approx Vz$$

$$\begin{aligned}(\hat{E}_0 + \hat{s}_1 \hat{E}_1 + \hat{s}_2 \hat{E}_2 + \dots + \hat{s}_p \hat{E}_p)z &= \hat{B}u, \\ \hat{y} &= \hat{L}^T z,\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}\hat{E}_i &:= V^T E_i V, \quad i = 0, 1, 2, \dots, p, \\ \hat{B} &:= V^T B, \\ \hat{L} &:= V^T L.\end{aligned}$$

Zur Berechnung von V :

Direkte Berechnung von V durch expliziten Momentenabgleich:

$$V := [B_M, M_1 B_M, M_2 B_M, \dots, M_p B_M, (M_1)^2 B_M, (M_1 M_2 + M_2 M_1) B_M, \dots, (M_1 M_p + M_p M_1) B_M, (M_2)^2 B_M, (M_2 M_3 + M_3 M_2) B_M, \dots, (M_p)^q B_M].$$

Theoretisch führt das zu einem reduzierten Modell, bei welchem die Multi-Momente mindestens bis zur Ordnung q mit denen des Originalmodells übereinstimmen.¹

Problem

Bei numerischer Rechnung stellen sich sehr schnell lineare Abhängigkeiten ein, die dazu führen, daß V zu wenige linear unabhängige Spalten enthält, so daß die Projektion auf den gewünschten Unterraum nicht durchgeführt werden kann.

¹Für SISO Systeme; für symmetrische Systeme erhält man analog zum nicht-parametrischen Fall Übereinstimmung bis zur Ordnung $2q + 1$.

Analog zur Analyse des AWE-Verfahrens [Pillage und Rohrer, 1990], die zur Entwicklung Padé-via-Lanczos (PVL) Verfahrens [Feldmann und Freund, 1995, Gallivan et al., 1994] führte, ergeben sich folgende Beobachtungen für die nicht gemischten Momente:

$$\begin{array}{rcl}
 M_1 B_M, M_1^2 B_M, \dots, M_1^j B_M & \xrightarrow{j \rightarrow \infty} & \xi^{(1)}, \quad M_1 \xi^{(1)} = \lambda_{\max}^{(1)} \xi^{(1)}, \\
 M_2 B_M, M_2^2 B_M, \dots, M_2^j B_M & \xrightarrow{j \rightarrow \infty} & \xi^{(2)}, \quad M_2 \xi^{(2)} = \lambda_{\max}^{(2)} \xi^{(2)}, \\
 \vdots & & \vdots \\
 M_p B_M, M_p^2 B_M, \dots, M_p^j B_M & \xrightarrow{j \rightarrow \infty} & \xi^{(p)}, \quad M_p \xi^{(p)} = \lambda_{\max}^{(p)} \xi^{(p)}.
 \end{array}$$

\implies Es laufen p Potenziterationen für M_1, M_2, \dots, M_p parallel ab.

Ziel

Numerisch stabiler Algorithmus zur Berechnung von V , d.h. einer orthonormalen Basis von

$$\text{span}\{B_M, M_1 B_M, \dots, (M_1 M_2 + M_2 M_1) B_M, \dots, \\
 (M_1 M_p + M_p M_1) B_M, (M_2)^2 B_M, (M_2 M_3 + M_3 M_2) B_M, \dots, (M_p)^q B_M\}$$

ohne explizite Momentenberechnung.

PMOR durch impliziten Momentenabgleich

Beobachtung: Umordnung der Reihenentwicklung liefert

$$\begin{aligned} X &= \sum_{m=0}^{\infty} [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p]^m B_M \\ &= B_M + [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p] B_M + [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p]^2 B_M + \dots \\ &\quad + [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p]^j B_M + \dots \end{aligned}$$

Definiere:

$$\begin{array}{ll} X_0 = B_M & X_0 = B_M \\ X_1 = [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p] B_M, & X_1 = [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p] X_0, \\ X_2 = [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p]^2 B_M, & X_2 = [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p] X_1, \\ \vdots & \Rightarrow \vdots \\ X_j = [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p]^j B_M, & X_j = [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p] X_{j-1}, \\ \vdots & \vdots \end{array}$$

Damit erhalte: $X = X_0 + X_1 + X_2 + \dots + X_j + \dots$

$$\begin{aligned} X_0 &= B_M & R_0 &= B_M, \\ X_1 &= [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p] X_0, & R_1 &= [M_1 R_0, M_2 R_0, \dots, M_p R_0], \\ X_2 &= [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p] X_1, & R_2 &= [M_1 R_1, M_2 R_1, \dots, M_p R_1], \\ &\vdots & &\vdots \\ X_j &= [\hat{s}_1 M_1 + \dots + \hat{s}_p M_p] X_{j-1}, & R_j &= [M_1 R_{j-1}, M_2 R_{j-1}, \dots, M_p R_{j-1}], \\ &\vdots & &\vdots \end{aligned}$$

$$X \approx X_0 + X_1 + X_2 + \dots + X_q \in \text{range}(V) = \text{span}\{R_0, R_1, \dots, R_q\}$$

Beachte auch: $\text{span}\{R_0, R_1, \dots, R_q\}$ kann als multivariater Krylovraum aufgefaßt werden. Diese Beobachtung führt ebenfalls zu robusten Algorithmen, die impliziten Momentenabgleich realisieren, siehe [Farle et al., 2006, Farle et al., 2007, Moosmann und Korvink, 2006].

Ein numerisch robuster PMOR Algorithmus

Der folgende Algorithmus berechnet eine orthogonale Basis für $\text{span}\{R_0, \dots, R_q\}$ und die zugehörige Projektionsmatrix $V = [v_1, v_2, \dots, v_{n_r}]$. Die Orthogonalisierung (im Folgenden `orth` genannt) erfolgt dabei durch den modifizierten Gram-Schmidt (MGS) Algorithmus. Linear abhängige Vektoren werden dabei abgespalten (**Deflation**). Dabei gilt $n_r \leq (p \cdot q + 1) \cdot m$, falls $B \in \mathbb{R}^{n,m}$.

- 1 Berechne die ersten Spalten von V :

$$V_0 \leftarrow \text{orth}\{R_0\} = \text{orth}\{B_M\}$$

- 2 FOR $k = 1, \dots, q$,

$$V_k \leftarrow [] \quad \% (n \times 0\text{-Matrix})$$

FOR $j = 1, \dots, p$,

$$V_k \leftarrow \text{orth}\{V_k, M_j V_{k-1}\}$$

END FOR j

END FOR k

- 3 $V \leftarrow \text{orth}\{V_0, V_1, \dots, V_q\}$

Simulationsergebnisse

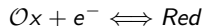
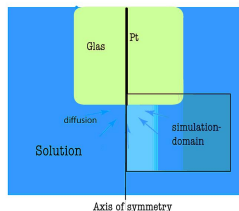
Beispiel 1: Elektro-chemische Reaktion

- Modellgleichungen:

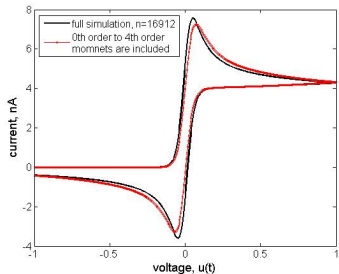
$$E \frac{d}{dt} c + Gc + (s_1 D_1 + s_2 D_2) c = bu(t), \quad y = l^T c,$$

wobei $c \in \mathbb{R}^n$ ($n = 16912$) die zu berechnenden Konzentrationen enthält und das System je einen Ein- und Ausgang besitzt.

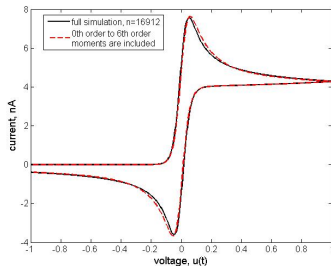
- Der Ausgang y mißt die Änderung der Stromstärke bei Änderung der Eingangsspannung u .
- s_1, s_2 sind Funktionen eines Parameters α , die interessanten Werte für α liegen in $[0.0005, 0.5]$.
- Die chemische Reaktion findet an der Elektrode statt.



Beispiel 1, zyklische Voltammogramme für $\alpha = 0.5$:

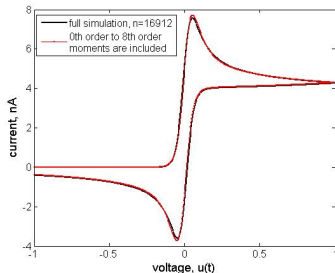


Abgleich der Multi-Momente bis zur Ordnung 4, $n_r = 26$.



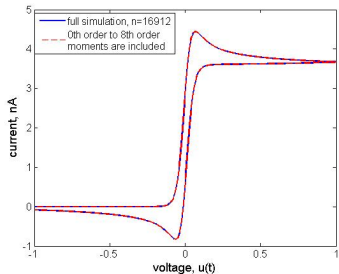
Abgleich der Multi-Momente bis zur Ordnung 6, $n_r = 50$.

Beispiel 1, zyklische Voltammogramme für $\alpha = 0.5$:

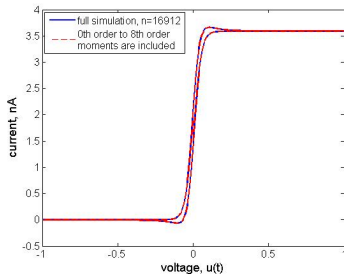


Abgleich der Multi-Momente bis zur
Ordnung 8, $n_r = 84$.

Beispiel 1, zyklische Voltammogramme für variierendes α :



Abgleich der Multi-Momente bis zur Ordnung 8, $\alpha = 0.05$, $n_r = 84$.



Abgleich der Multi-Momente bis zur Ordnung 8, $\alpha = 0.005$, $n_r = 84$.

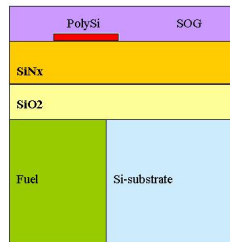
Beispiel 2: Thermodynamisches Modell einer Mikroschubdüse²

- Modellgleichungen:

$$C \frac{d}{dt} x(t) + (G + kD)x(t) = bu(t), \quad y = l^T x(t),$$

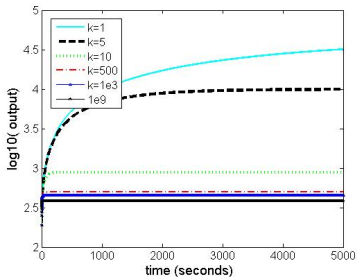
wobei $x \in \mathbb{R}^n$ ($n = 4725$) die unbekannte Temperaturverteilung im Querschnitt der Mikroschubdüse bezeichnet und das System je einen Ein- und Ausgang besitzt.

- Als Ausgang y wird die Temperatur in der Mitte des Heizers verwendet.
- Der Parameter k enthält den Filmkoeffizienten, der in die Randbedingungen des thermodynamischen Modells eingeht. Interessante Werte für k variieren zwischen 1 und 10^9 .

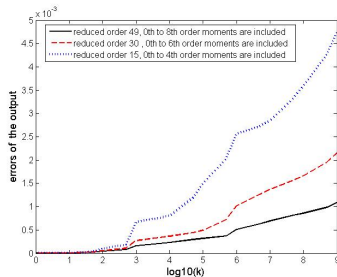


²Siehe <http://www.imtek.de/simulation/benchmark/wb/38865/>.

Beispiel 2, Simulationsergebnisse im Zeitbereich:



Ausgänge des Originalmodells und der reduzierten Modelle für verschiedene k .









Relativer Fehler im Ausgang y .

Zusammenfassung und Ausblick

- Es wurde ein numerisch robuster PMOR Algorithmus vorgestellt. Dieser basiert auf [Daniel et al., 2004] sowie der Idee eines impliziten Momentenabgleichs ähnlich zu PVL.
Ähnliche Verfahren werden in [Farle et al., 2006, Farle et al., 2007] und [Moosmann und Korvink, 2006] vorgeschlagen.
- Der Algorithmus funktioniert prinzipiell für beliebige Anzahlen von Parametern sowie Ein- und Ausgängen.
- Die Simulationsergebnisse zeigen die Robustheit des Algorithmus, für einen Vergleich zu PMOR durch expliziten Momentenabgleich siehe auch [Feng und Benner, 2007].
- Zweiseitige Projektion analog zum dualen Arnoldi-Algorithmus ist ebenfalls möglich, damit erhält man einen Abgleich der Multi-Momente bis zur doppelten Ordnung (siehe auch [Weile et al., 1999]).
- Nächster Schritt: Interpolatorische Verfahren, bei denen Interpolationsbedingungen für mehrere Parameterkonstellationen sowie Parametersensitivitäten erfüllt werden, siehe [Beattie et al.].

Literatur

-  Beattie, C.; Benner, P.; Gugercin, S.: Interpolatory Projection Methods for Parameterized Model Reduction, in Vorbereitung.
-  Bond, B.; Daniel, L.: Parameterized Model Order Reduction of Nonlinear Dynamical Systems. Proc. International Conference on Computer-Aided Design, S. 487–494, 2005.
-  Daniel, L.; Siong, O.C.; Chay, L.S.; Lee, K.H.; White, J.: A Multiparameter Moment-Matching Model-Reduction Approach for Generating Geometrically Parameterized Interconnect Performance Models, IEEE Trans. Comput.-Aided Des. Integr. Circuits Syst., Vol. 22, Nr 5, S. 678–693, 2004.
-  Farle, O.; Hill, V.; Ingelström, P.; Dyczij-Edlinger, R.: Ordnungsreduktion linearer zeitinvarianter Finite-Elemente-Modelle mit multivariater polynomieller Parametrierung, at–Automatisierungstechnik, Vol. 54(4), S. 161–169, 2006.
-  Farle, O.; Hill, V.; Ingelström, P.; Dyczij-Edlinger, R.: Multi-Parameter Polynomial Order Reduction of Linear Finite Element Models, erscheint in Math. Comput. Model. Dyn. Syst., 2007.
-  Feldmann, P.; Freund, R.W.: Efficient Linear Circuit Analysis by Padé Approximation via the Lanczos Process, IEEE Trans. Comput.-Aided Des. Integr. Circuits Syst., Vol. 14, S. 639–649, 1995.

Literatur, fortgesetzt



Feng, L.; Benner, P.: Parametric Model Reduction Using Implicit Moment Matching, in Vorbereitung.



Feng, L.; Rudnyi, E.B.; Korvink, J.G.: Preserving the Film Coefficient as a Parameter in the Compact Thermal Model for fast Electro-thermal Simulation, IEEE Trans. Comput.-Aided Des. Integr. Circuits Syst., Vol. 24, Nr. 12, S. 1838–1847, 2005.



Gallivan, K.; Grimme, E.; Van Dooren, P.: Asymptotic Waveform Evaluation via a Lanczos Method, Appl. Math. Lett., Vol. 7, Nr. 5, S. 75–80. 1994.



Moosmann, K.; Korvink, J.G.: Automatic Parametric MOR for MEMS Design, Tagungsband GMA-FA 1.30 "Modellbildung, Identifikation und Simulation in der Automatisierungstechnik", Workshop am Bostalsee, 27.-29.9.2006, S. 89–99, 2006.



Pillage, L.T. ; Rohrer, R.A.: Asymptotic Waveform Evaluation for Timing Analysis, IEEE Trans. Comput.-Aided Design, Vol. 9, S. 325–366, 1990.



Weile, D.S.; Michielssen, E.; Grimme, E.; Gallivan, K.A.: A Method for Generating Rational Interpolant Reduced Order Models of Two-Parameter Linear Systems, Appl. Math. Lett., Vol. 12(5), S. 93–102, 1999.