

Metody i Narzędzia Programowe w Akustyce wykład 2

Ireneusz Czajka

Katedra Systemów Energetycznych i Urządzeń Ochrony Środowiska

Rok 2023/24

Namiastka literatury

- Czajka I., Gołaś A.: *Inżynierskie metody analizy numerycznej i planowanie eksperymentu*, Wydawnictwa AGH, Kraków 2017
- Gołaś A.: *Metody komputerowe w akustyce wnętrza i środowiska*, Wydawnictwa AGH, Kraków 1995
- Snakowska A.: *Teoria pola akustycznego zastosowana do badania układów o symetrii cylindrycznej*, Wydawnictwa AGH, Kraków 2018
- Rienstra S.W., Hirschberg A.: *An Introduction to Acoustics*, Eindhoven University of Technology, 2019;
url:<https://www.win.tue.nl/~sjoerdr/papers/boek.pdf>
- Instrukcja do Elmer-a

Pole akustyczne

Pole akustyczne

Obszar ośrodka materialnego, w którym rozchodzi się zaburzenie akustyczne.

Jak to pole opisać?

Równanie ciągłości

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

gdzie:

ρ – gęstość płynu, t – czas, u_i – i -ta składowa prędkości płynu,
 x_i – współrzędne kartezjańskiego układu współrzędnych.

Równanie Naviera-Stokesa

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-p \delta_{ij} - \tau_{ij}) - \rho f_i = 0 \quad (2)$$

gdzie: p – ciśnienie, τ_{ij} – tensor naprężeń lepkościowych

$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}$, f – gęstość sił masowych działających na przepływający płyn.

Równanie energii

$$\frac{\partial e_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i (e_m + p)) = 0 \quad (3)$$

gdzie:

$e_m = \rho e_0 + 1/2 \rho |u|^2$ – gęstość energii płynu, e_0 – właściwa energia wewnętrzna płynu, p – ciśnienie płynu, u_i – i -ta składowa prędkości płynu.

Podsumowanie

Opis matematyczny

Opis ruchu ośrodka jest realizowany za pomocą układu równań:

- ciągłości (zasada zachowania masy),
- zasady zachowania pędu (równania Naviera-Stokesa),
- zasady zachowania energii (wykorzystanie przemiany izentropowej – odwracalnej adiabaty),

Przy

- założeniu niewielkich fluktuacji wokół wartości średniej,
- z przybliżeniem pochodnych substancjalnych przez pochodne cząstkowe.

Równania akustyki

Równanie Eulera

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j + p \delta_{ij}) = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho e_0}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho h_0 u_j) = 0 \quad (6)$$

gdzie: ρ – gęstość ośrodka, ρu_i – i -ta składowa wektora pędu, ρe_0 – całkowita energia wewnętrzna na jednostkę objętości, ρh_0 – całkowita entalpia na jednostkę objętości, δ_{ij} – delta Kroneckera.

Równanie falowe

$$\nabla^2 p = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2}, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Uproszczenia

Równania akustyki liniowej wynikają z następujących uproszczeń:

- płyn nielepki,
- małe amplitudy,
- nie ma przepływu ciepła między elementami płynu,
- nie ma ruchu ośrodka.

Rozwiązanie

Przy rozwiązywaniu równania falowego metodą rozdzielania zmiennych uzyskuje się równanie opisujące przestrzenne zmiany amplitud i faz drgań ośrodka zwane równaniem Helmholtza.

Rozwiązanie równania falowego

Równanie falowe

$$\nabla^2 p = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2}, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Postać rozwiązania

$$p(x, y, z, t) = P(x, y, z) \cdot T(t)$$

Rozwiązaniem są równania

$$k^2 P + \nabla^2 P = 0$$

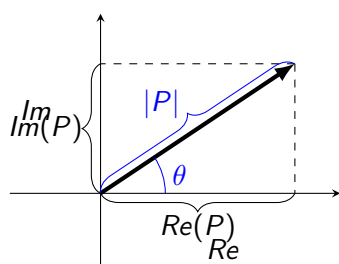
$$T(t) = e^{i\omega t}$$

Równanie Helmholtza

Równanie Helmholtza

$$k^2 P + \nabla^2 P = 0 \quad (7)$$

P jest zespolonym ciśnieniem, $k = \omega/c$ jest liczbą falową



Ciśnienie akustyczne wylicza się jako

$$p(t) = \operatorname{Re}(P e^{i\omega t})$$

lub

$$p(t) = \operatorname{Re}(P) \cos(\omega t) - \operatorname{Im}(P) \sin(\omega t)$$

Warunki brzegowe

$$k^2 P + \nabla^2 P = 0$$

Jakie jest rozwiązanie tego równania?

Warunki brzegowe

Aby równanie różniczkowe można było jednoznacznie rozwiązać, potrzebne są warunki brzegowe.

- Warunki Dirichleta, pierwszego rodzaju – **wartość ciśnienia akustycznego**;
- warunki Neumanna, drugiego rodzaju – **wartość pochodnej normalnej**;
- warunki Robina, trzeciego rodzaju, mieszane – wartości funkcji i pochodnej dane na brzegu.

Co to jest MES?

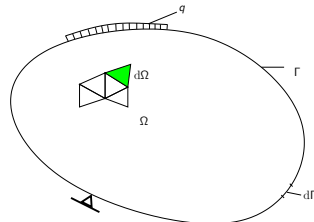
Metoda elementów skończonych

jest metodą przybliżoną rozwiązywania równań różniczkowych

Zatem musi być równanie i muszą być dla niego zdefiniowane warunki brzegowe.

Jak to się robi

Obszar dzieli się na niewielkie podobszary o kształtach pozwalających na łatwe przeprowadzanie całkowania po tym obszarze. Zatem najczęściej są to trójkąty i prostokąty.



Siatka

Węzły, krawędzie, elementy

- Elementy stykają się tylko krawędziami,
- węzły są wspólne dla sąsiednich elementów,
- musi zachodzić zgodność wartości zmiennej na krawędziach elementów.

Siatka

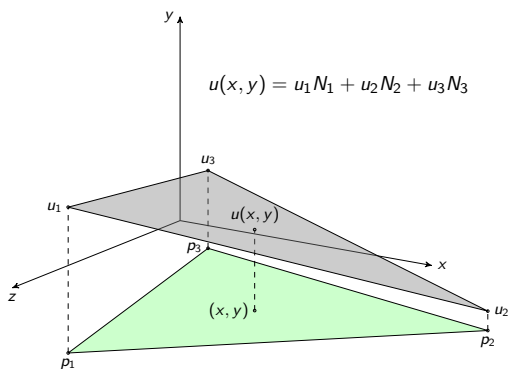
O jakości rozwiązania decyduje jakość siatki – zasada GIGO.

- kształty elementów powinny być możliwie bliskie figurom czy bryłom foremnym
- stosunki długości poszczególnych krawędzi nie powinny przekraczać wartości 10
- rozmiary sąsiednich elementów nie powinny się różnić o więcej niż 20%

Wartości poszukiwanego rozwiązania wyznacza się tylko w węzłach.

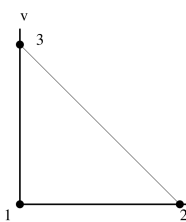
Funkcje kształtu

stanowią funkcje interpolacyjne, opisujące założony rozkład analizowanej zmiennej wewnątrz elementu.

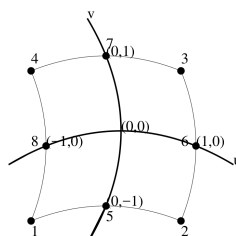
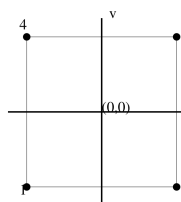
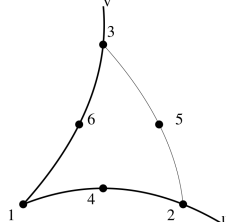


Wyznaczanie wartości wewnątrz elementu

Liniowe



Paraboliczne



Teraz nieco matematyki

Metoda Galerkina

- ułóż przybliżone rozwiązanie (jakaś interpolacja),
- wstaw do równania,
- to co zostanie to jest reziduum,
- pomnóż reziduum przez funkcję interpolującą,
- znajdź wartość parametrów, dla których całka z tego iloczynu po całym obszarze jest zerem.

Na przykład równanie

$$\frac{d^2 p(x)}{dx^2} + k^2 p(x) = 0$$

Przybliżone rozwiązanie

$$p(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x)p_i = \begin{bmatrix} N_1 & N_2 & \cdots & N_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix} = \mathbf{Np} \quad (8)$$

$$N_i = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Rezydua

$$R(x, p) = \frac{d^2 p(x)}{dx^2} + k^2 p(x)$$

Galerkin

Dla jednej funkcji próbnej (funkcji kształtu)

$$\int_{x_1}^{x_n} N_i R(x, p) dx = 0 \Rightarrow \int_{x_1}^{x_n} N_i \left(\frac{d^2 p(x)}{dx^2} + k^2 p(x) \right) dx = 0$$

zatem

$$\int_{x_1}^{x_n} N_i \frac{d^2 p(x)}{dx^2} dx + \int_{x_1}^{x_n} N_i k^2 p(x) dx = 0$$

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^{x_n} N_i \frac{d^2 p(x)}{dx^2} dx &= \left[N_i \frac{dp(x)}{dx} \right]_{x_1}^{x_n} - \int_{x_1}^{x_n} \frac{dN_i}{dx} \frac{dp(x)}{dx} dx = \\ &= N_i(x_n) \frac{dp(x_n)}{dx} - N_i(x_1) \frac{dp(x_1)}{dx} - \int_{x_1}^{x_n} \frac{dN_i}{dx} \frac{dp(x)}{dx} dx \quad (9) \end{aligned}$$

Galerkin

Pojedyncze równanie

$$N_i(x_n) \frac{dp(x_n)}{dx} - N_i(x_1) \frac{dp(x_1)}{dx} - \int_{x_1}^{x_n} \frac{dN_i}{dx} \frac{dp(x)}{dx} dx + \int_{x_1}^{x_n} N_i k^2 p(x) dx = 0$$

Warunki brzegowe Neumanna

$$-\frac{dp(x_1)}{dx} = \alpha_1 p(x_1) + \beta_1 \quad \text{oraz} \quad \frac{dp(x_n)}{dx} = \alpha_n p(x_n) + \beta_n \quad (10)$$

Wstawiamy

Znak minus w punkcie x_1 wynika ze zwrotu normalnej zewnętrznej.

$$N_i(x_n)(\alpha_n p(x_n) + \beta_n) - N_i(x_1)(-\alpha_1 p(x_1) - \beta_1) - \int_{x_1}^{x_n} \frac{dN_i}{dx} \frac{dp(x)}{dx} dx + \int_{x_1}^{x_n} N_i k^2 p(x) dx = 0 \quad (11)$$

Układ równań

Można teraz uwzględnić zastosowaną interpolację Lagrange'a i kompletny układ równań zapisać w następującej postaci

$$(\alpha_n p(x_n) + \beta_n) \begin{bmatrix} N_1(x_n) \\ N_2(x_n) \\ \vdots \\ N_n(x_n) \end{bmatrix} + (\alpha_1 p(x_1) + \beta_1) \begin{bmatrix} N_1(x_n) \\ N_2(x_n) \\ \vdots \\ N_n(x_n) \end{bmatrix} - \int_{x_1}^{x_n} \frac{d}{dx} \begin{bmatrix} N_1(x_n) \\ N_2(x_n) \\ \vdots \\ N_n(x_n) \end{bmatrix} \frac{dp(x)}{dx} dx + \int_{x_1}^{x_n} \begin{bmatrix} N_1(x_n) \\ N_2(x_n) \\ \vdots \\ N_n(x_n) \end{bmatrix} k^2 p(x) dx = 0 \quad (12)$$

Warunki brzegowe

Ponieważ wielomiany Lagrange'a przyjmują wartość jeden w węzle odpowiadającym numerowi wielomianu, fragment odpowiadający warunkom brzegowym przyjmuje postać

$$(\alpha_n p(x_n) + \beta_n) \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} + (\alpha_1 p(x_1) + \beta_1) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 p(x_1) + \beta_1 \\ 0 \\ \vdots \\ \alpha_n p(x_n) + \beta_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 p(x_1) \\ 0 \\ \vdots \\ \alpha_n p(x_n) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \beta_1 \\ 0 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \alpha_n \end{bmatrix}}_{\alpha} \underbrace{\begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix}}_p + \underbrace{\begin{bmatrix} \beta_1 \\ 0 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix}}_{\beta} \quad (13)$$

$$\begin{aligned}
 & - \int_{x_1}^{x_n} \frac{d}{dx} \begin{bmatrix} N_1(x_n) \\ N_2(x_n) \\ \vdots \\ N_n(x_n) \end{bmatrix} \frac{d}{dx} \begin{bmatrix} N_1 & N_2 & \dots & N_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix} dx + \\
 & + \int_{x_1}^{x_n} \begin{bmatrix} N_1(x_n) \\ N_2(x_n) \\ \vdots \\ N_n(x_n) \end{bmatrix} k^2 \begin{bmatrix} N_1 & N_2 & \dots & N_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix} dx = 0 \quad (14)
 \end{aligned}$$

Postać macierzowa

$$\alpha \mathbf{p} + \beta - \underbrace{\int_{x_1}^{x_n} \frac{d\mathbf{N}^T}{dx} \frac{d\mathbf{N}}{dx} dx}_{\mathbf{K}} \mathbf{p} + k^2 \underbrace{\int_{x_1}^{x_n} \mathbf{N}^T \mathbf{N} dx}_{\mathbf{M}} \mathbf{p} = 0 \quad (15)$$

Uporządkowanie

Równanie wygląda tak

$$\left[\alpha - \int_{x_1}^{x_n} \frac{d\mathbf{N}^T}{dx} \frac{d\mathbf{N}}{dx} dx + k^2 \int_{x_1}^{x_n} \mathbf{N}^T \mathbf{N} dx \right] \mathbf{p} = -\beta \quad (16)$$

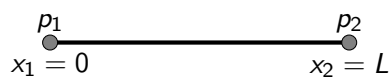
lub

W wersji skróconej

$$\left[\alpha - \mathbf{K} + k^2 \mathbf{M} \right] \mathbf{p} = -\beta \quad (17)$$

Poszczególne składniki tego równania można wyliczyć po przyjęciu dyskretyzacji analizowanego obszaru.

Elementy liniowe (dwuwęzłowe)



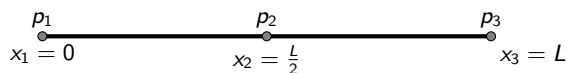
$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} \frac{x-x_2}{x_1-x_2} & \frac{x-x_1}{x_2-x_1} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} -\frac{x-L}{L} & \frac{x}{L} \end{bmatrix}$$

$$\frac{d\mathbf{N}}{dx} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{L} & \frac{1}{L} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \frac{1}{L} & -\frac{1}{L} \\ -\frac{1}{L} & \frac{1}{L} \end{bmatrix} = \frac{1}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \frac{L}{3} & \frac{L}{6} \\ \frac{L}{6} & \frac{L}{3} \end{bmatrix} = \frac{L}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$



$$\mathbf{N} = \left[\begin{array}{ccc} \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} & \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} & \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} \end{array} \right]$$

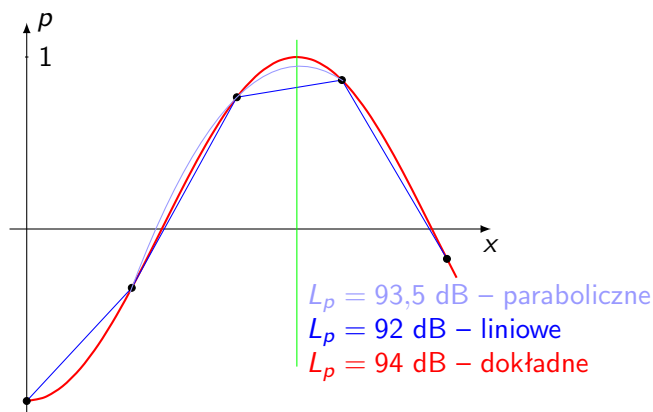
$$\mathbf{N} = \left[\begin{array}{ccc} \frac{2(x-L)(x-\frac{L}{2})}{L^2} & -\frac{4x(x-L)}{L^2} & \frac{2x(x-\frac{L}{2})}{L^2} \end{array} \right]$$

$$\frac{d\mathbf{N}}{dx} = \left[\begin{array}{ccc} \frac{2(x-\frac{L}{2})+2(x-L)}{L^2} & -\frac{4(x-L)-4x}{L^2} & \frac{2(x-\frac{L}{2})+2x}{L^2} \end{array} \right]$$

$$\mathbf{K} = \left[\begin{array}{ccc} \frac{7}{3L} & -\frac{8}{3L} & \frac{1}{3L} \\ -\frac{8}{3L} & \frac{16}{3L} & -\frac{8}{3L} \\ \frac{1}{3L} & -\frac{8}{3L} & \frac{7}{3L} \end{array} \right] = \frac{1}{3L} \left[\begin{array}{ccc} 7 & -8 & 1 \\ -8 & 16 & -8 \\ 1 & -8 & 7 \end{array} \right]$$

$$\mathbf{M} = \left[\begin{array}{ccc} \frac{2L}{15} & \frac{L}{15} & -\frac{L}{30} \\ \frac{L}{15} & \frac{8L}{15} & \frac{L}{15} \\ -\frac{L}{30} & \frac{L}{15} & \frac{2L}{15} \end{array} \right] = \frac{L}{30} \left[\begin{array}{ccc} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{array} \right]$$

Funkcja kształtu a rozwiązanie



Dokładne rozwiązanie w węzłach

Bez dodawania dodatkowych węzłów, tylko zmiana stopnia funkcji kształtu i liczby elementów, tak by liczba węzłów pozostała stała.

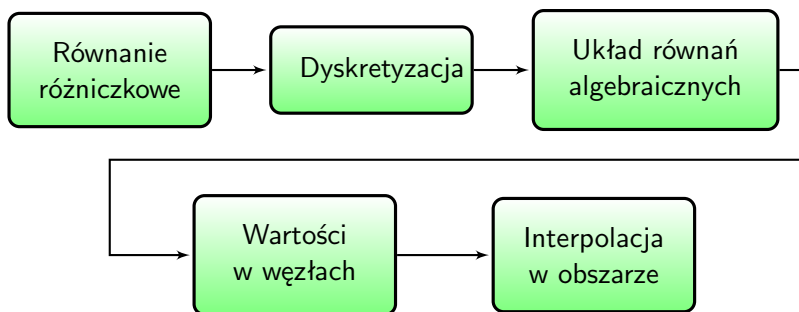
O elementach

Elementy liniowe

- Mała liczba węzłów – małe rozmiary macierzy.
- Wrażliwe na liczbę elementów – wymagają wielu elementów do dokładnego odwzorowania szybkich zmian ciśnienia.

Elementy paraboliczne

- Znacznie większe macierze niż przy elementach liniowych (przy tej samej liczbie elementów).
- Znacznie dokładniejsze odwzorowanie przy tych samych rozmiarach elementów.
- Przy zachowaniu tej samej dokładności można użyć znacznie mniejszej liczby elementów.
- Przy zachowaniu tej samej liczby węzłów dokładniejsze wyniki.



Uwagi dotyczące macierzy współczynników

- Zależy od dyskretyzacji.
- Powinna być rzadka i najlepiej symetryczna.
- Ważna jest szerokość pasma w macierzy – im węższe, tym lepiej – zależy od numeracji węzłów.

Metody rozwiązywania układów równań

$$Ax = b$$

Poznane na metodach numerycznych

- bezpośrednie – pochodzące od eliminacji Gaussa, rozkłady LU, QR
- iteracyjne: Gaussa–Seidla, i te minimalizujące potencjał – metody Kryłowa (najszybszego spadku, gradientów sprzężonych itp.).

Ważna uwaga

Metody iteracyjne są zdecydowanie wydajniejsze dla dużych układów równań. Do około 100 000 niewiadomych wydajniejsze są metody bezpośrednie, o ile jest dostępna wystarczająca ilość pamięci.

Podsumowanie

Co daje MES

Metoda elementów skończonych prowadzi do przekształcenia problemu z analizy matematycznej do problemu algebraicznego.

MES

pozwała rozwiązać problem dla:

- jednej wartości częstotliwości,
- jednego rozkładu parametrów,
- jednego kształtu,
- jednego układu warunków brzegowych i wymuszeń.

Czego nie daje

Informacji o tym, co się dzieje w okolicy tego rozwiązania.

Skoro brak dobrych modeli analitycznych, to pozostaje...

Proteza

Modele zastępcze w postaci wielomianów opisujących tzw. **powierzchnie odpowiedzi**

Wielomian

Niech będą dwie zmienne (czynniki) x_1 i x_2 . Chcemy zbudować model, który będzie dobrze działał w pewnym zakresie obu zmiennych.

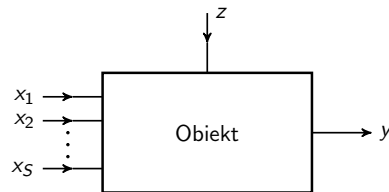
Czyli szukamy arbitralnie przyjętej, np. takiej funkcji

$$\hat{y} = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2$$

Zróbmy eksperyment

- wybrać wartości poszczególnych zmiennych tak, by pokryć dobrze przestrzeń eksperymentu,
- wyznaczyć „prawdziwe” wyniki dla wybranych wartości zmiennych,

Próbkowanie przestrzeni eksperymentu



Równanie opisujące obiekt

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_5, z)$$

szukamy funkcji w postaci

$$\hat{y} = \hat{f}(\mathbf{x}, \mathbf{b}) = b_0 + \sum_{i=1}^K b_i f_i(\mathbf{x})$$

Nie znam f , szukam \hat{f} ale wiem, że $y = \hat{y} + \varepsilon$, czyli $f(\mathbf{x}) = \hat{f}(\mathbf{x}, \mathbf{b}) + \varepsilon$.

Analiza regresji

Wykonajmy doświadczenia dla N zestawów wartości wejściowych $\mathbf{x}_i = [x_1, x_2, \dots, x_5]_i$ i zapiszmy w macierzy eksperymentu

$$\mathbb{X} = \begin{bmatrix} f_0(\mathbf{x}_1) & f_1(\mathbf{x}_1) & f_2(\mathbf{x}_1) & \dots & f_K(\mathbf{x}_1) \\ f_0(\mathbf{x}_2) & f_1(\mathbf{x}_2) & f_2(\mathbf{x}_2) & \dots & f_K(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_0(\mathbf{x}_N) & f_1(\mathbf{x}_N) & f_2(\mathbf{x}_N) & \dots & f_K(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix}$$

$f_0(\mathbf{x}) \equiv 1$

oraz

$$\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_N]^T \quad \hat{\mathbf{y}} = [\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_N]^T$$

teraz wartości funkcji regresji $\hat{\mathbf{y}}$ można zapisać

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbb{X}\mathbf{b}$$

Błąd

Minimalizacja różnicy $y - \hat{y}$ może zostać zapisana jako

$$S_R = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = (\mathbf{y} - \mathbb{X}\mathbf{b})^T (\mathbf{y} - \mathbb{X}\mathbf{b}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\mathbf{b}^T \mathbb{X}^T \mathbf{y} + \mathbf{b}^T \mathbb{X}^T \mathbb{X} \mathbf{b}$$

Minimalizacja sumy kwadratów błędów

$$\frac{\partial S_R}{\partial \mathbf{b}} = 0$$

daje układ równań normalnych Gaussa

$$\mathbb{X}^T \mathbb{X} \mathbf{b} = \mathbb{X}^T \mathbf{y}$$

który można rozwiązać tak

$$\mathbf{b} = (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^T \mathbf{y}$$

Planowanie eksperymentu

Dlaczego planowanie?

Przy minimalnym koszcie wyznaczyć model obiektu, który będzie dobrze odwzorowywał lokalne zachowanie obiektu.

Poziomy zmiennych

Przyjmujemy, że każda zmienna wejściowa (zwana czynnikiem) będzie przyjmowała P różnych wartości z dozwolonego zakresu. Mówimy, że czynnik występuje na P poziomach, a zatem plan jest P -poziomowy. Od liczby poziomów zależy stopień modelu, który można zbudować.

Modele

Metodyka powierzchni odpowiedzi zakłada najczęściej modele kwadratowe. Dla dwóch zmiennych wejściowych to np.

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2$$

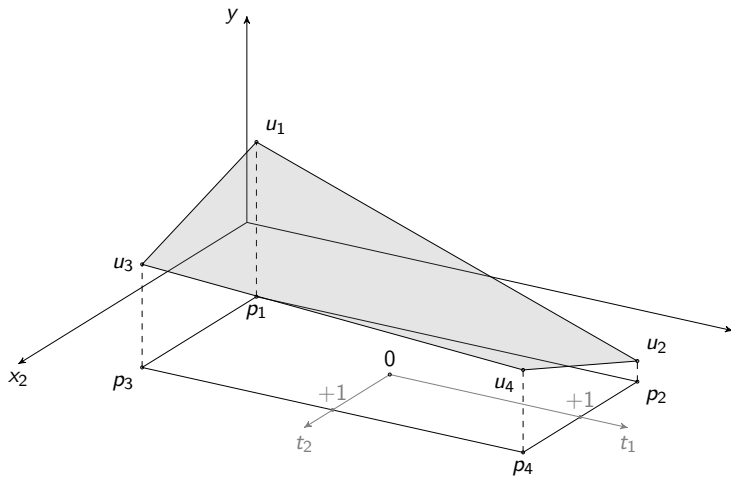
Standaryzacja i plany

Standaryzacja zmiennych wejściowych

- plan dwupoziomowy $t \in \langle 0, 1 \rangle$
- plan z większą liczbą poziomów $t \in \langle -1, 1 \rangle$

Plan dwupoziomowy dla dwóch czynników

Doświadczenie	Czynnik 1 (t_1)	Czynnik 2 (t_2)	Pkt	Kod
1	-1	-1	p_1	(1)
2	+1	-1	p_2	a
3	-1	+1	p_3	b
4	+1	+1	p_4	ab



Plany kompozycyjne

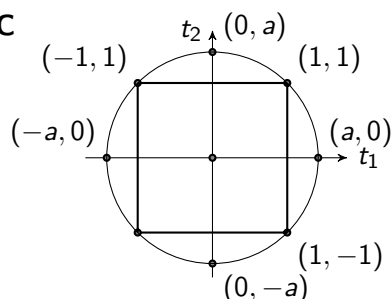
Budowa planów centralnych kompozycyjnych

Składają się z:

- planów dwupoziomowych całkowitych lub ułamkowych
- doświadczeń gwiazdnych
- doświadczeń centralnych

Mogą być trójpoziomowe lub pięciopoziomowe

Plan CCC



Plan CCC

Macierz eksperymentu planu CCC dla dwóch czynników

Nr	t_0	t_1	t_2	t_1^2	t_2^2	$t_1 t_2$	y
1	+1	-1	-1	+1	+1	+1	y_1
2	+1	+1	-1	+1	+1	-1	y_2
3	+1	-1	+1	+1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_4
5	+1	-a	0	a^2	0	0	y_5
6	+1	+a	0	a^2	0	0	y_6
7	+1	0	-a	0	a^2	0	y_7
8	+1	0	+a	0	a^2	0	y_8
9	+1	0	0	0	0	0	y_9

$$y = b_0 + b_1 t_1 + b_2 t_2 + b_{11} t_1^2 + b_{22} t_2^2 + b_{12} t_1 t_2$$

a jest promieniem gwiazdnym (dla dwóch zmiennych $a = \sqrt{2}$)

CCC – 5 poziomów

Pozwala na uzyskanie wysokiej jakości dopasowania powierzchni odpowiedzi w całym badanym obszarze, niestety wymaga wartości parametrów spoza zakresu przyjmowanego przez czynnikową część planu.

CCI – 5 poziomów

Wykorzystuje tylko punkty wewnątrz obszaru przyjętego początkowo dla części czynnikowej planu. Zapewnia mniejszą dokładność estymacji parametrów w całym badanym obszarze niż CCC.

CCF – 3 poziomy

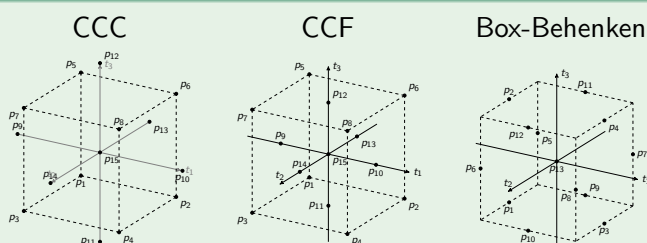
Stosunkowo wysoka jakość estymacji w całym badanym obszarze, nie wymaga doświadczeń poza zakresem badań, daje kiepskie oszacowania czysto kwadratowych zależności.

Cechy planów c.d.

Box–Behenken – 3 poziomy

Wymaga mniej doświadczeń niż plany centralne kompozycyjne dla przypadków z liczbą czynników mniejszą lub równą 4. Rotabilny, ale jak CCI, w narożach daje kiepskie oszacowania współczynników modelu, brak eksperymentów w narożach planu jest użyteczny, gdy badany obiekt źle znosi równoczesne przyjmowanie wartości ekstremalnych przez kilka czynników.

Plany dla 3 czynników



Przykład

Zadanie

Zbudować model zastępczy obiektu z dwoma wejściami dla danego zakresu zmiennych wejściowych.

Zakres zmiennych

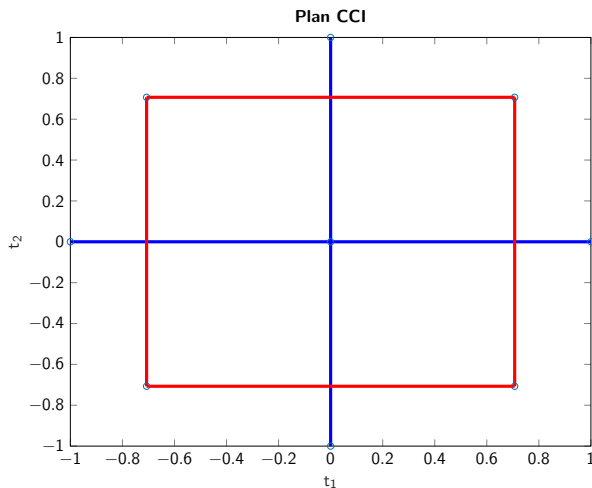
$$x_1 \in \langle 3.3, 21.7 \rangle$$

$$x_2 \in \langle 1705.5, 1804.5 \rangle$$

Założenia

- Nie można wyjść poza zakres zmiennych.
- Model musi uwzględniać składniki kwadratowe.
- Model musi uwzględniać interakcję między wejściami.

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2$$



Rysunek: Plan CCI

Przygotowanie eksperymentu

Standaryzacja

$$t_1 = \frac{x_{1,max} + x_{1,min}}{2} + \frac{x_{1,max} - x_{1,min}}{2} x_{1,i}$$

$$t_2 = \frac{x_{2,max} + x_{2,min}}{2} + \frac{x_{2,max} - x_{2,min}}{2} x_{2,i}$$

L.p.	x_1	x_2	t_1	t_2
1.	12.500	1755.0	0.0000	0.0000
2.	12.500	1705.5	0.0000	-1.0000
3.	12.500	1804.5	0.0000	1.0000
4.	3.3076	1755.0	-1.0000	0.0000
5.	21.692	1755.0	1.0000	0.0000
6.	6.0000	1720.0	-0.70711	-0.70711
7.	6.0000	1790.0	-0.70711	0.70711
8.	19.000	1720.0	0.70711	-0.70711
9.	19.000	1790.0	0.70711	0.70711

Eksperyment

Przeprowadzono obliczenia dla każdego punktu planu

L.p.	x_1	x_2	y
1.	12.500	1755.0	10058
2.	12.500	1705.5	10160
3.	12.500	1804.5	9959
4.	3.3076	1755.0	10968
5.	21.692	1755.0	12400
6.	6.0000	1720.0	10957
7.	6.0000	1790.0	10619
8.	19.000	1720.0	12379
9.	19.000	1790.0	12135

L.p.	t_1	t_2	y
1.	0.0000	0.0000	10058
2.	0.0000	-1.0000	10160
3.	0.0000	1.0000	9959
4.	-1.0000	0.0000	10968
5.	1.0000	0.0000	12400
6.	-0.70711	-0.70711	10957
7.	-0.70711	0.70711	10619
8.	0.70711	-0.70711	12379
9.	0.70711	0.70711	12135

Model

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2$$

lub

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = b_0 + b_1t_1 + b_2t_2 + b_{12}t_1t_2 + b_{11}t_1^2 + b_{22}t_2^2$$

Układ równań – współrzędne ustandaryzowane

1	t_1	t_2	t_1t_2	t_1^2	t_2^2
1	0	0	0	0	0
1	0	-1	-0	0	1
1	0	1	0	0	1
1	-1	0	-0	1	0
1	1	0	0	1	0
1	-0.70711	-0.70711	0.5	0.5	0.5
1	-0.70711	0.70711	-0.5	0.5	0.5
1	0.70711	-0.70711	-0.5	0.5	0.5
1	0.70711	0.70711	0.5	0.5	0.5

Układ równań

Macierz \mathbb{X}

$$\mathbb{X} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & -0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & -0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -0.70711 & -0.70711 & 0.5 & 0.5 & 0.5 \\ 1 & -0.70711 & 0.70711 & -0.5 & 0.5 & 0.5 \\ 1 & 0.70711 & -0.70711 & -0.5 & 0.5 & 0.5 \\ 1 & 0.70711 & 0.70711 & 0.5 & 0.5 & 0.5 \end{bmatrix}$$

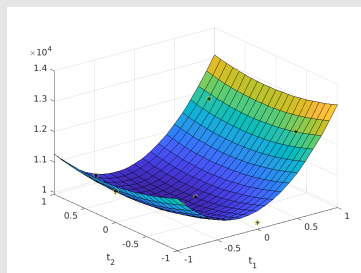
Rozwiązanie

$$\mathbf{A} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}$$

Rozwiązanie

Wyniki

- $b_0 = 10058.$
- $b_1 = 877.41$
- $b_2 = -153.02$
- $b_{12} = 46.462$
- $b_{11} = 1951.7$
- $b_{22} = 326.75$



Ważne

W tym przykładzie nie przeprowadzono badania adekwatności powierzchni odpowiedzi. Warto to zrobić, by mieć jakieś poparcie dla przekonania, że jest poprawna.

W wersji podstawowej można wyznaczyć współczynnik determinacji R^2 .

Optymalizacja

Definicja intuicyjna

Optymalizacja polega na poszukiwaniu minimum funkcji zwanej funkcją celu z uwzględnieniem istniejących ograniczeń

Metody optymalizacji mogą być wykorzystywane w następujący sposób

- Optymalizacja produktów
- Dostrajanie modeli

Metody optymalizacji

Zasadniczo dwie rodziny metod

- gradientowe – potrzebna informacja o wartościach pochodnych
- bezgradientowe – wystarczą same wartości funkcji

Optymalizacja a modele zastępcze

Bez modelu zastępczego

Konieczne jest wykonanie wielu doświadczeń, by wyznaczyć kolejne punkty i ocenić położenie minimum

Z modelem zastępczym

Model ma wygodną postać, nawet student da radę bez problemu wyznaczyć ekstremum hiperpowierzchni drugiego stopnia

Praktycznie jak to zbadać

- Zbudować model zastępczy.
- Wybrać lub wylosować dodatkowe punkty wewnątrz przestrzeni zmiennych wejściowych.
- Sprawdzić na ile odległe są wyniki doświadczenia w nowych punktach i wartości modelu.

Iteracja

W razie potrzeby zmodyfikować model i zacząć jeszcze raz. Czasem modyfikacja wymaga zmniejszenia zakresu zmiennych wejściowych.

Wreszcie

Koniec. Dziękuję za uwagę