DTGO

aula 12 / Otimização em estratégias generativas

190924

Sumário (TP+P)

Natureza dos problemas

Análise de sensibilidade

Otimização em estratégias generativas

Superfície de resposta
Parametrização e exploração do espaço de soluções

RSM para software não-automático

Análise de ruído e propagação de erro

https://forms.office.com/e/fR29HVDxs2

Natureza dos problemas: classificações

Classificações:

- Restrições (com ou sem);
- Natureza das equações e expressões envolvidas;
- Natureza das variáveis (contínua, inteira, discreta);
- Natureza determinística ou estocástica (das variáveis);
- Dimensões;
- Etc.

Natureza dos problemas: classificações

Classificações:

- Natureza das equações e expressões envolvidas;

Problemas de programação:

- Linear,
- Não-linear,
- Geométrica,
- Quadrática
- Etc.

Útil devido à existência de métodos especiais para encontrar eficientemente a solução de cada problema

Natureza dos problemas: classificações

Problemas de programação não-linear

Caso geral

Requer cálculo iterativo

Problemas de programação quadrática

Programação não-linear com função-objetivo quadrática e restrições lineares

Procurar $\mathbf{x}$ de modo a

$$\text{minimizar} \quad f(\mathbf{x}) = c + \sum_{i=1}^{n} q_i x_i + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} Q_{ij} x_i x_j,$$

$$\text{sujeito a} \quad g_j(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} a_{ij} x_i \leq b_j, \quad j = 1, 2, \ldots, m.$$

Natureza dos problemas

Problemas de programação linear

função-objetivo e restrições lineares (em relação
às variáveis de projeto

Procurar $\mathbf{x}$ de modo a

$$
\begin{aligned}
\text{minimizar} \quad & f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} a_i x_i, \\
\text{sujeito a} \quad & h_j(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} b_{ij} x_i - c_j = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, m, \\
& g_k(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} d_{ik} x_i - e_k \leq 0, \quad k = 1{,}2, \ldots, q, \\
& x_i \leq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n,
\end{aligned}
$$

Natureza dos problemas

Problemas de otimização contínua ou discreta

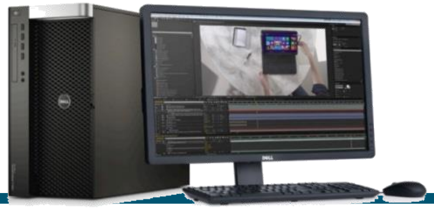
Natureza das variáveis

Os problemas de **programação inteira** estão dentro dos de otimização discreta

$$
\begin{aligned}
\text{maximizar} \quad & f(\mathbf{x}) = 5x_1 + 6x_2 + 3x_3, \\
\text{sujeito a} \quad & g_1(\mathbf{x}) = 4x_1 + 3x_2 + 5x_3 - 1500 \leq 0, \\
& g_2(\mathbf{x}) = 8x_2 + 3x_2 + 7x_3 - 1400 \leq 0, \\
& x_i \geq 0 \text{ e inteiro}, \;\; i = 1, 2, 3.
\end{aligned}
$$

Natureza dos problemas: dimensão

Dimensão dos problemas

Problemas de	Variáveis	Recursos necessários
Pequena escala	5 ou menos	
Escala intermédia	5 a 1000	
Grande escala	1000 a milhões	

Requerem algoritmos soficisticados que exploram a estrutura do problema

Conceitos gerais e boas práticas

A procura da solução ótima → **encontrada através de métodos numéricos iterativos**

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k, \ \ k = 0, 1, \ldots,$$

Convergência: capacidade aproximar-se da solução iterativamente

Caraterísticas gerais dos algoritmos:

- Robustez: é a capacidade de o algoritmo produzir bons resultados em problemas cuja classe difere daquela para o qual foi desenvolvido, independentemente dos valores iniciais das variáveis;
- Eficiência: é a característica de o algoritmo chegar à solução ótima com o menor esforço computacional (CPU[26] e memória) possível;
- Precisão: é a característica de o algoritmo identificar a solução com precisão, sem ser excessivamente sensível a erros de informação ou erros de vírgula flutuante, que ocorrem devido à natureza computacional da sua implementação.

[26] Do inglês *Central Processing Unit*.

Conceitos gerais e boas práticas

A procura da solução ótima → encontrada através de métodos numéricos iterativos

$$
\begin{aligned}
\text{iteração } 0: \;& \text{escolha de } \mathbf{x}^0, \\
\text{iteração } k: \;& \text{identificação de } \mathbf{d}^k, \\
& \text{determinação de } \alpha_k, \\
& \Delta\mathbf{x} = \alpha_k \mathbf{d}^k, \\
& \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \Delta\mathbf{x}^k, \\
& \mathbf{x}^k \leftarrow \mathbf{x}^{k+1}, \\
& \text{ir para iteração } k+1.
\end{aligned}
$$

Conceitos gerais e boas práticas

Na maioria das vezes é impossível garantir que o ótimo foi encontrado!

Para aumentar a confiança no resultado, sugere-se:

- O resultado utilizando **um só método de otimização não deve ser aceite**. O mínimo obtido deve ser testado utilizando, pelo menos, outro método com diferentes características;

- As **variáveis de projeto obtidas no final do processo de otimização sem restrições não devem localizar-se nas fronteiras do espaço** de procura. Neste caso, o processo específico deve ser posto de parte, pois o mínimo permanece fora do espaço de procura ou o processo de minimização não alcançou o mínimo;

- É importante que **o projetista tenha sensibilidade aos valores da função-objetivo**. Para isso, ele deve conhecer algumas das soluções (não-ótimas) admissíveis;

- A **solução deve ser procurada para diferentes valores iniciais**. Caso a solução final encontrada para diferentes valores iniciais seja a mesma, a solução encontrada pode ser considerada estável;

- Caso seja possível, o **valor mínimo encontrado deve ser verificado com recurso a ferramentas gráficas**.

Condições de ótimo

Servem para garantir que se encontrou o ótimo.
Contudo, muitas vezes é impraticável utiliziar estas condições.

Condições

- **Necessárias**: Condições para que a solução seja ponto estacionário (mínimo e máximo local, ponto de sela)
- **Suficientes**: Permite saber se o ponto estacionário é mínimo

Condições de ótimo e necessárias

Servem para garantir que se encontrou o ótimo
Contudo, muitas vezes é impraticável utiliziar estas condições.

Condições

Necessárias

Condições para que a solução seja ponto estacionário (mínimo e máximo local, ponto de sela)

Condição necessária de 1ª ordem:

Para um problema sem restrições (ou com restrições não-ativas)

Se $\mathbf{x}^*$ é um ponto de mínimo local da função-objetivo $f(\mathbf{x})$, então

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = 0,\ i = 1, \ldots, n.$$

Condições de ótimo e condições necessárias

Servem para garantir que se encontrou o ótimo
Contudo, muitas vezes é impraticável utiliziar estas condições.

Condições

Necessárias

Condições para que a solução seja ponto estacionário (mínimo e máximo local, ponto de sela)

Condição necessária de 2ª ordem:

Para um problema sem restrições

Se $\mathbf{x}^*$ é um ponto de mínimo local da função-objetivo $f(\mathbf{x})$, então a sua matriz hessiana,

$$\mathbf{H} = \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\right], \tag{3.70}$$

é positiva semidefinida[28] em $\mathbf{x}^*$.

[28] Uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ diz-se semidefinida positiva se $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \backslash \{\mathbf{0}\}$, $\mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0$, sendo todos os seus valores próprios não-negativos.

Condições de ótimo e condições KKT

Servem para garantir que se encontrou o ótimo
Contudo, muitas vezes é impraticável utiliziar estas condições.

Condições

Necessárias

Condições para que a solução seja ponto estacionário (mínimo e máximo local, ponto de sela)

Condição necessária de 1ª ordem:

Para um problema com restrições

Condições KKT

Karush-Kuhn-Tucker

Condições KKT

Karush-Kuhn-Tucker

Seja o lagrangeano do problema

$$\mathcal{L}(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{g}(\mathbf{x}) \,,$$

Multiplicador de Lagrange para as restrições **g**

Então, existem únicos λ_i^* ıis que

$$\nabla\mathcal{L}(\mathbf{x}^*) = \nabla f(\mathbf{x}^*) + \boldsymbol{\lambda}^{*\mathrm{T}}\nabla\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \,,$$

$$\lambda_i^* g_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = (p+1), \cdots, m$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad i = (p+1), \cdots, m \,.$$

Sistema de equações com *n*+*m* incógnitas e *m*+*n* equações

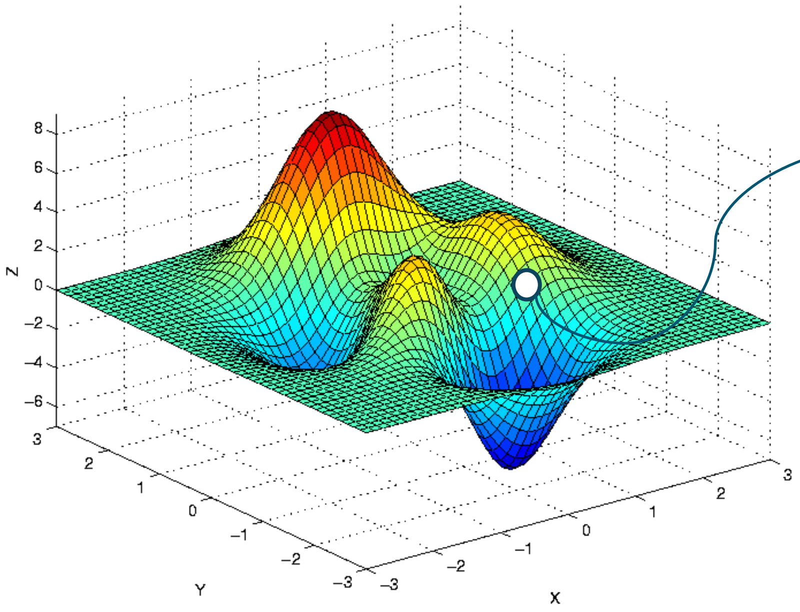
Note que: $-\nabla f(\mathbf{x}^*) = \boldsymbol{\lambda}^{*\mathrm{T}}\nabla\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) \,.$

Análise de sensibilidade

...para avaliação numérica das matrizes gradiente e hessiana!

Análise de sensibilidade: introdução

A **análise de sensibilidade** procura determinar o efeito de uma variação de um determinado item no seu valor total. Pode ser um instrumento útil em diferentes áreas para determinar a importância de uma variável sobre o resultado final de outra.



A **análise de sensibilidade** permite conhecer como se comporta a função num determinado ponto

Permite calcular os gradientes

Análise de sensibilidade: introdução

O processo de recálculo dos resultados sob premissas alternativas para determinar o impacto de uma variável sob análise de sensibilidade **pode ser útil** para uma variedade de propósitos, incluindo:

- Avaliar a robustez dos resultados de um modelo ou sistema na presença de incerteza.
- Maior compreensão das relações entre variáveis de entrada e saída num sistema ou modelo.
- Redução da incerteza, através da identificação de entradas de modelo que causam incerteza significativa na produção e, portanto, deve ser o foco de atenção para aumentar a robustez.
- Procurando por erros no modelo (encontrando relações inesperadas entre entradas e saídas).
- Simplificação do modelo - fixação de entradas do modelo que não têm efeito na saída ou na identificação e remoção de partes redundantes da estrutura do modelo.
- Melhorar a comunicação de modelos de apoio à decisão (por exemplo, tornando as recomendações mais fiáveis, compreensíveis, convincentes ou persuasivas).
- Encontrar regiões no espaço de fatores de entrada para os quais a saída do modelo é máxima ou mínima ou atende a algum critério ótimo (ver Otimização e Filtragem de Monte Carlo).
- No caso de calibração de modelos com grande número de parâmetros, um teste de sensibilidade primário pode facilitar o estágio de calibração, concentrando-se nos parâmetros sensíveis. Não conhecer a sensibilidade dos parâmetros pode resultar em tempo gasto inutilmente em itens não sensíveis.
- Procurar identificar ligações importantes entre observações, entradas de modelos e previsões ou previsões, levando ao desenvolvimento de modelos melhores.

Análise de sensibilidade: introdução

Metodologias disponíveis:

- Um-de-cada-vez (*One-at-a-time* - OAT/OFAT);
- Métodos locais;
- Gráficos de dispersão;
- Análises de regressão;
- Métodos de variância;
- Por regiões (*Screening*);
- Emuladores;
- Representações de modelos de dimensões elevadas (*High-Dimensional Model Representations* - HDMR);
- Teste de sensibilidade de Fourier (*Fourier Amplitude Sensitivity Test* - FAST);
- Etc.

Análise de sensibilidade: método das diferenças finitas

Método das diferenças finitas

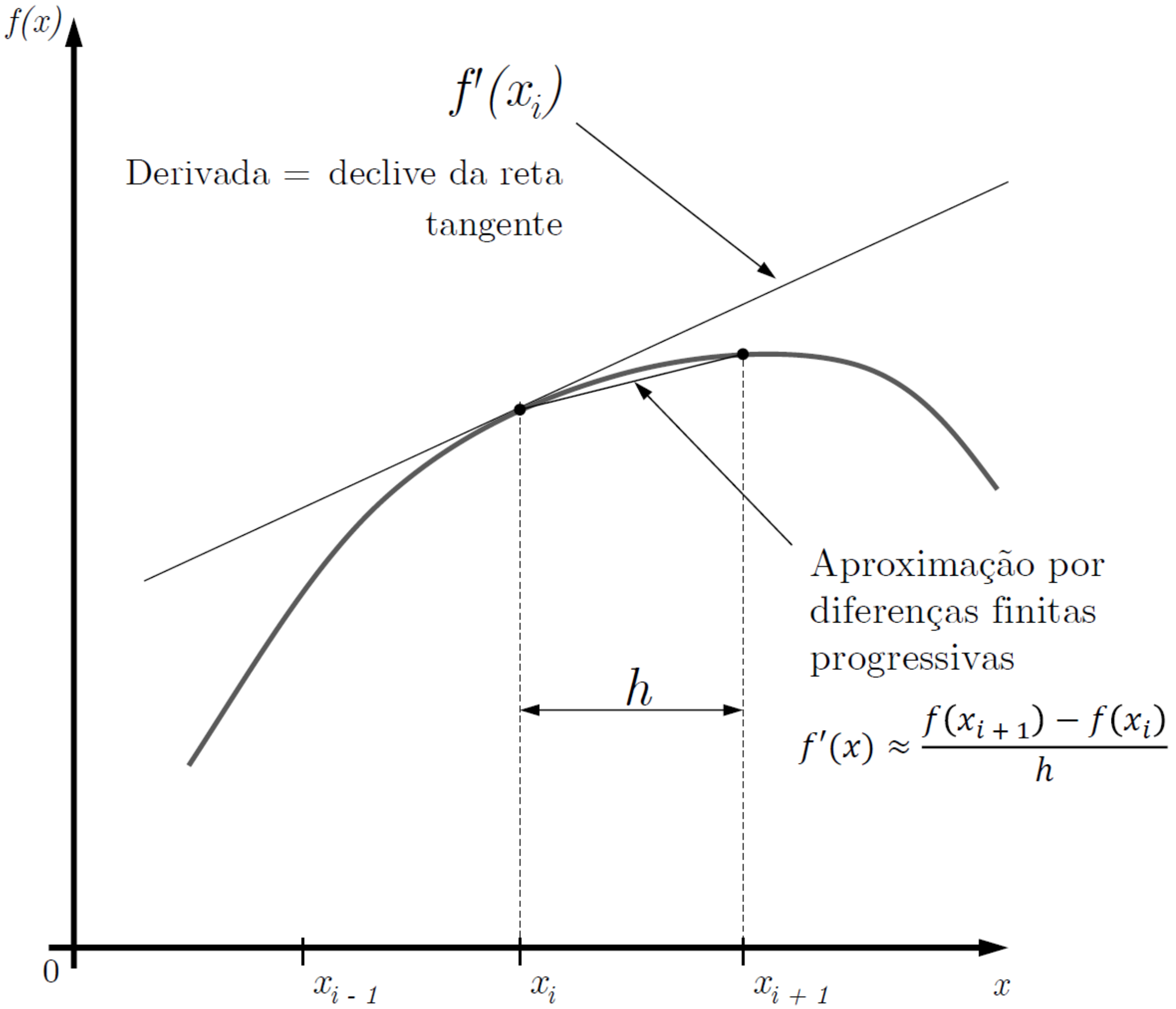
Método aproximado

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} + o(x_{i+1} - x_i) = \frac{\Delta f_i}{h} + o(x_{i+1} - x_i)$$

Diferenças finitas progressivas

Análise de sensibilidade: método das diferenças finitas

Método das diferenças finitas



Análise de sensibilidade: método das diferenças finitas

Método das diferenças finitas

Método aproximado

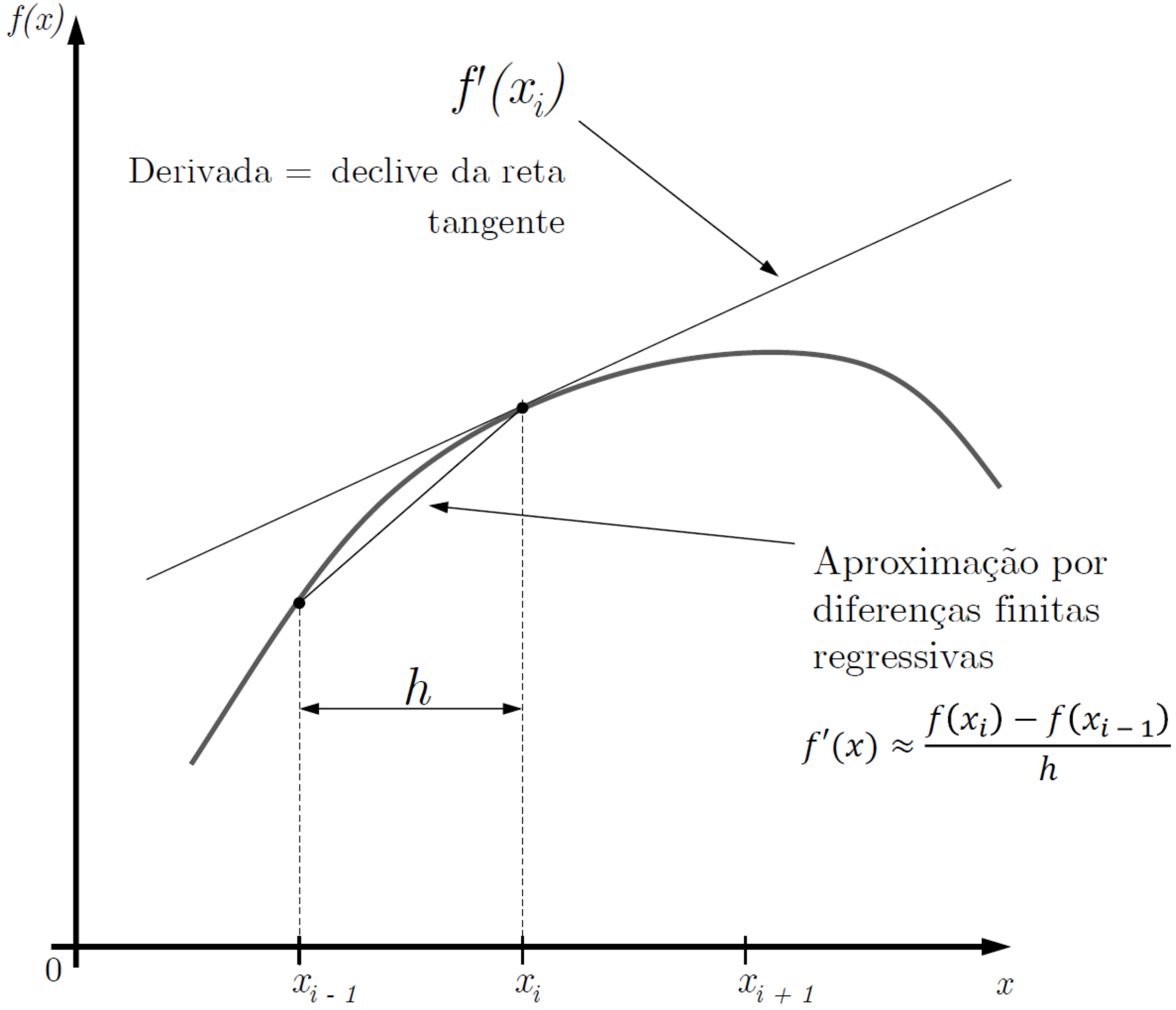
$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} + o(x_{i+1} - x_i) = \frac{\Delta f_i}{h} + o(x_{i+1} - x_i)$$

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} = \frac{\Delta f_i}{h}$$

Diferenças finitas regressivas

Análise de sensibilidade: método das diferenças finitas

Método das diferenças finitas



Análise de sensibilidade: método das diferenças finitas

Método das diferenças finitas

Método aproximado

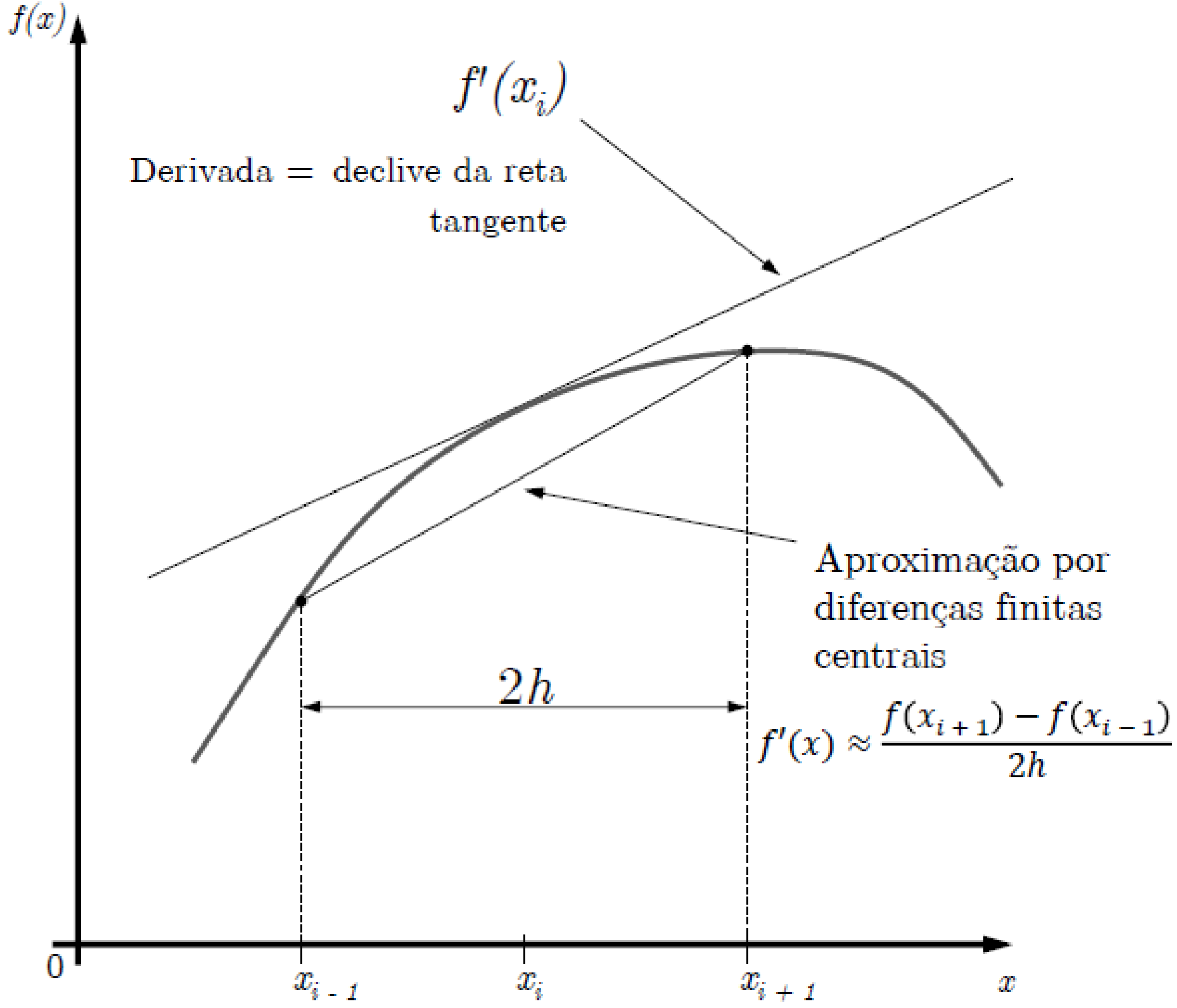
$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{\Delta f_i}{2h}$$

Diferenças finitas centrais

Apesar de maior precisão, necessita do dobro de avaliações)

Análise de sensibilidade: método das diferenças finitas

Método das diferenças finitas



Análise de sensibilidade: método das diferenças finitas

Método das diferenças finitas, para o caso *n*-dimensional:

Diferenças finitas progressivas

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} \approx \frac{f(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_i^0 + h, \ldots, x_n^0) - f(\mathbf{x}^0)}{h}, i = 1, \ldots, n,$$

Diferenças finitas centrais

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} \approx \frac{f(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_i^0 + \frac{h}{2}, \ldots, x_n^0) - f(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_i^0 - \frac{h}{2}, \ldots, x_n^0)}{h}, i = 1, \ldots, n.$$

Tamanho do passo (perturbação)

Complicado de estimar!!!! Sugestão: $h = 0{,}01 x_i^0$

Análise de sensibilidade: método das diferenças finitas

Método das diferenças finitas

- Método aproximado
- Obriga a muitas avaliações da função-objectivo
- Não pode ser feito em simultâneo com o processo
- ...

Análise de sensibilidade: diferenciação automática

Diferenciação automática

Diferenciação algorítmica

Conjunto de técnicas numéricas para cálculo da derivada de uma função descrita num programa computacional

Tomando $f(x) = g\left[h(x)\right]$, pela regra da cadeia

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}h}\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}x}$$

Base da diferenciação automática

Diferenciação automática

Tomando $f(x) = g\left[h(x)\right]$, pela regra da cadeia

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}h}\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}x}$$

Se as funções *g* e *h* puderem ser codificadas e a sua de... enquanto operação elem... ...el ca... ...is

Não há erros de arredondamentos ou de truncatura
Não depende de parâmetros (como o de perturbação das DF)

No c... ...mais de uma variável, o cálculo das derivadas parciais considera as outras variáveis independentes como constantes.

Diferenciação automática: exemplo

$$f(x_1, x_2) = x_1 x_2 + \sin(x_1)$$

Computacionalmente, pode ser escrita como

$$\mathtt{F} = \mathtt{X1} * \mathtt{X2} + \mathtt{SIN}(\mathtt{X1})$$

Ou então,

$$\mathtt{T1} = \mathtt{X1} * \mathtt{X2}$$

$$\mathtt{T2} = \mathtt{SIN}(\mathtt{X1})$$

$$\mathtt{F} = \boxed{\mathtt{T1} + \mathtt{T2}}$$

Variáveis auxiliares

Diferenciação automática: exemplo

$$f(x_1, x_2) = x_1 x_2 + \sin(x_1) \Rightarrow \left| \begin{aligned} \mathtt{T1} &= \mathtt{X1} * \mathtt{X2} \\ \mathtt{T2} &= \mathtt{SIN}(\mathtt{X1}) \\ \mathtt{F} &= \mathtt{T1} + \mathtt{T2} \end{aligned} \right.$$

Sabendo de uma forma genérica que

$$\begin{aligned} f = gh &\Rightarrow f' = g'h + gh', \\ f = \sin(x) &\Rightarrow f' = \cos(x), \\ f = g + h &\Rightarrow f' = g' + h', \end{aligned}$$

as expressões computacionais para o cálculo da derivada são

$$\begin{aligned} \mathtt{DT1} &= \mathtt{DX1} * \mathtt{X2} + \mathtt{X1} * \mathtt{DX2} \\ \mathtt{DT2} &= \mathtt{COS}(\mathtt{X1}) \\ \mathtt{DF} &= \boxed{\mathtt{DT1} + \mathtt{DT2}}, \end{aligned}$$

Variáveis auxiliares

Diferenciação automática: exemplo

$$f(x_1, x_2) = x_1 x_2 + \sin(x_1) \Rightarrow \begin{aligned} \mathtt{T1} &= \mathtt{X1} * \mathtt{X2} \\ \mathtt{T2} &= \mathtt{SIN}(\mathtt{X1}) \\ \mathtt{F} &= \mathtt{T1} + \mathtt{T2} \end{aligned}$$

As expressões computacionais para o cálculo da derivada são

$$\begin{aligned} \mathtt{DT1} &= \mathtt{DX1} * \mathtt{X2} + \mathtt{X1} * \mathtt{DX2} \\ \mathtt{DT2} &= \mathtt{COS}(\mathtt{X1}) \\ \mathtt{DF} &= \mathtt{DT1} + \mathtt{DT2}, \end{aligned}$$

Para calcular a derivada parcial $\partial f / \partial x_1$ um ponto $(x_1, x_2) = (x_1^0, x_2^0)$

- Definem-se os valores de $\mathtt{X1}$ e $\mathtt{X2}$
- Definem-se os valores de $\mathtt{DX1} = 1$, $\mathtt{DX2} = 0$

$$\Rightarrow \frac{\partial f}{\partial x_1} = x_2 + \cos(x_1)$$

Obtém-se o valor igual à derivada analítica

Análise de sensibilidade: diferenciação automática

Diferenciação automática

Na prática, usa-se software dedicado:

- ADIFOR (Fortran);
- TAPENADE (C++ e Fortran);
- http://www.autodiff.org/
- Etc.

www.
autodiff.org

Diferenciação automática

...e o cálculo de derivadas!

Parte prática...

Diferenciação automática: desafio

$$f(x,y) = (xy + \sin(x) + 4)\left(3y^2 + 6\right)$$

Qual a linguagem de código para diferenciação automática?

Análise de sensibilidade: diferenciação automática

Diferenciação automática: desafio

$$f(x,y) = (xy + \sin(x) + 4)\left(3y^2 + 6\right)$$

Esta função pode ser representada pela seguinte listagem de código:

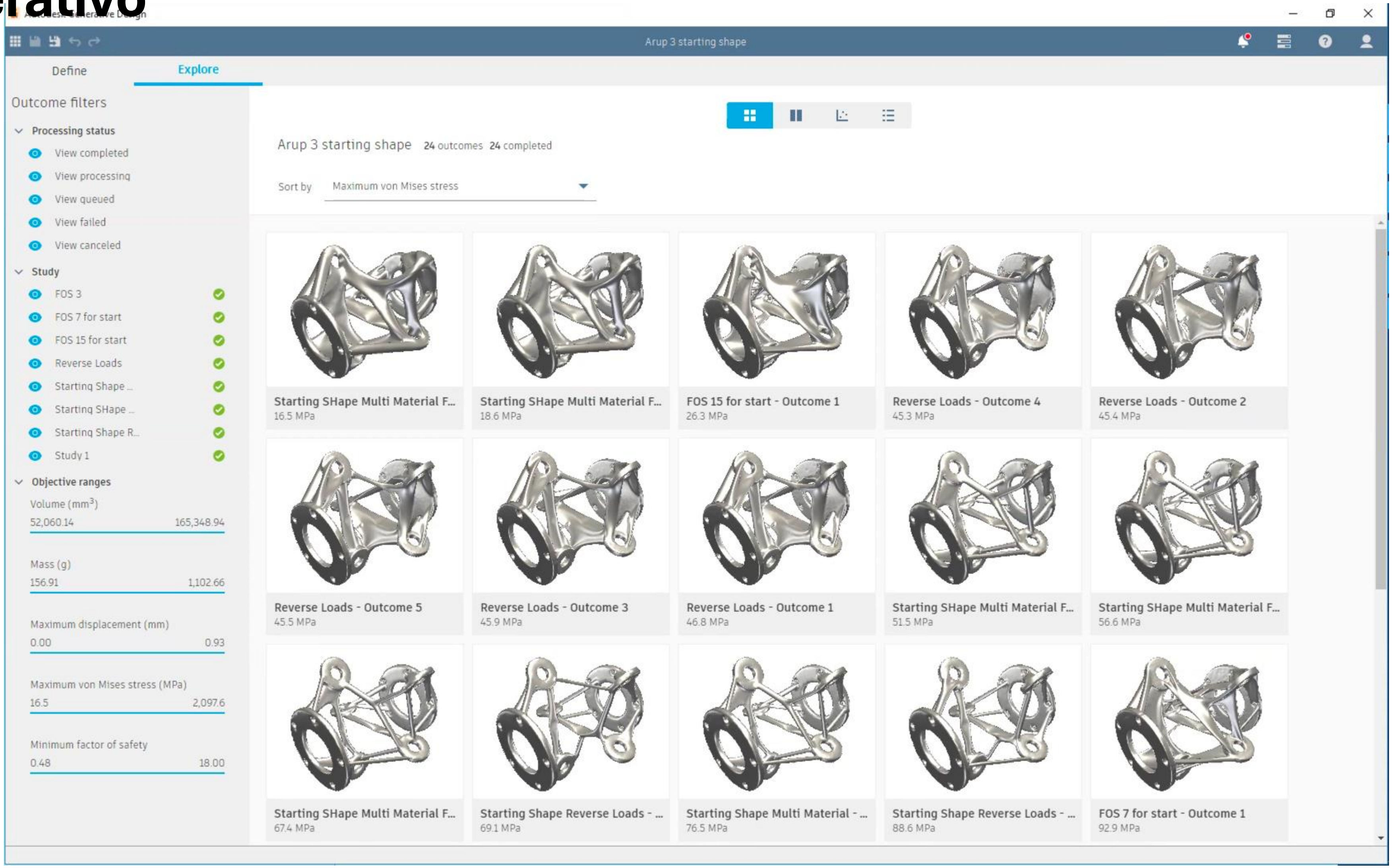
$$
\begin{aligned}
\mathtt{T1} &= \mathtt{X * Y}\\
\mathtt{T2} &= \mathtt{SIN(X)}\\
\mathtt{T3} &= \mathtt{T1 + T2}\\
\mathtt{T4} &= \mathtt{T3 + 4}\\
\mathtt{T5} &= \mathtt{Y * *2}\\
\mathtt{T6} &= \mathtt{3 * T5}\\
\mathtt{T7} &= \mathtt{T6 + 6}\\
\mathtt{F} &= \mathtt{T4 * T7}.
\end{aligned}
$$

E o código para as derivadas parciais é

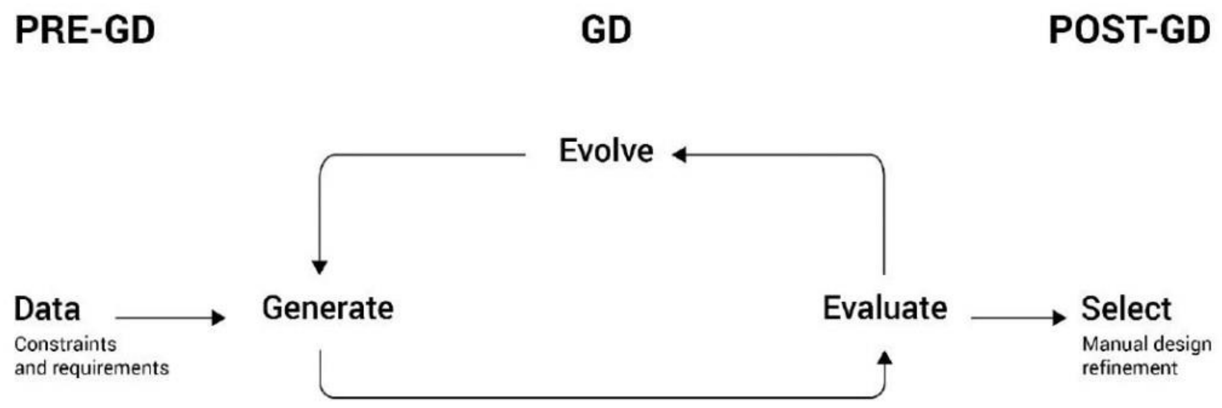
$$
\begin{aligned}
\mathtt{V1} &= \mathtt{Y * DX}\\
\mathtt{V2} &= \mathtt{X * DY}\\
\mathtt{DT1} &= \mathtt{V1 + V2}\\
\mathtt{V3} &= \mathtt{COS(X)}\\
\mathtt{DT2} &= \mathtt{V3 * DX}\\
\mathtt{DT3} &= \mathtt{DT1 + DT2}\\
\mathtt{DT4} &= \mathtt{DT3}\\
\mathtt{V4} &= \mathtt{Y * *1}\\
\mathtt{V5} &= \mathtt{2 * V4}\\
\mathtt{DT5} &= \mathtt{V5 * DY}\\
\mathtt{DT6} &= \mathtt{3 * DT5}\\
\mathtt{DT7} &= \mathtt{DT6}\\
\mathtt{V6} &= \mathtt{T4 * DT7}\\
\mathtt{V7} &= \mathtt{T7 * DT4}
\end{aligned}
$$

DF=V6+V7

Design generativo



Generative design is the use of algorithmic methods to generate feasible designs or outcomes from a set of performance objectives, performance constraints, and design space for specified use cases. Performance objectives and constraints may include factors from multiple areas including operational performance, weight/mass, manufacturing, assembly or construction, usability, aesthetics, ergonomics, and cost.



Generative Design is Doomed to Fail
Daniel Davis – 20 February 2020
https://www.danieldavis.com/generative-design-doomed-to-fail/

Design generativo

design computacional
CA*

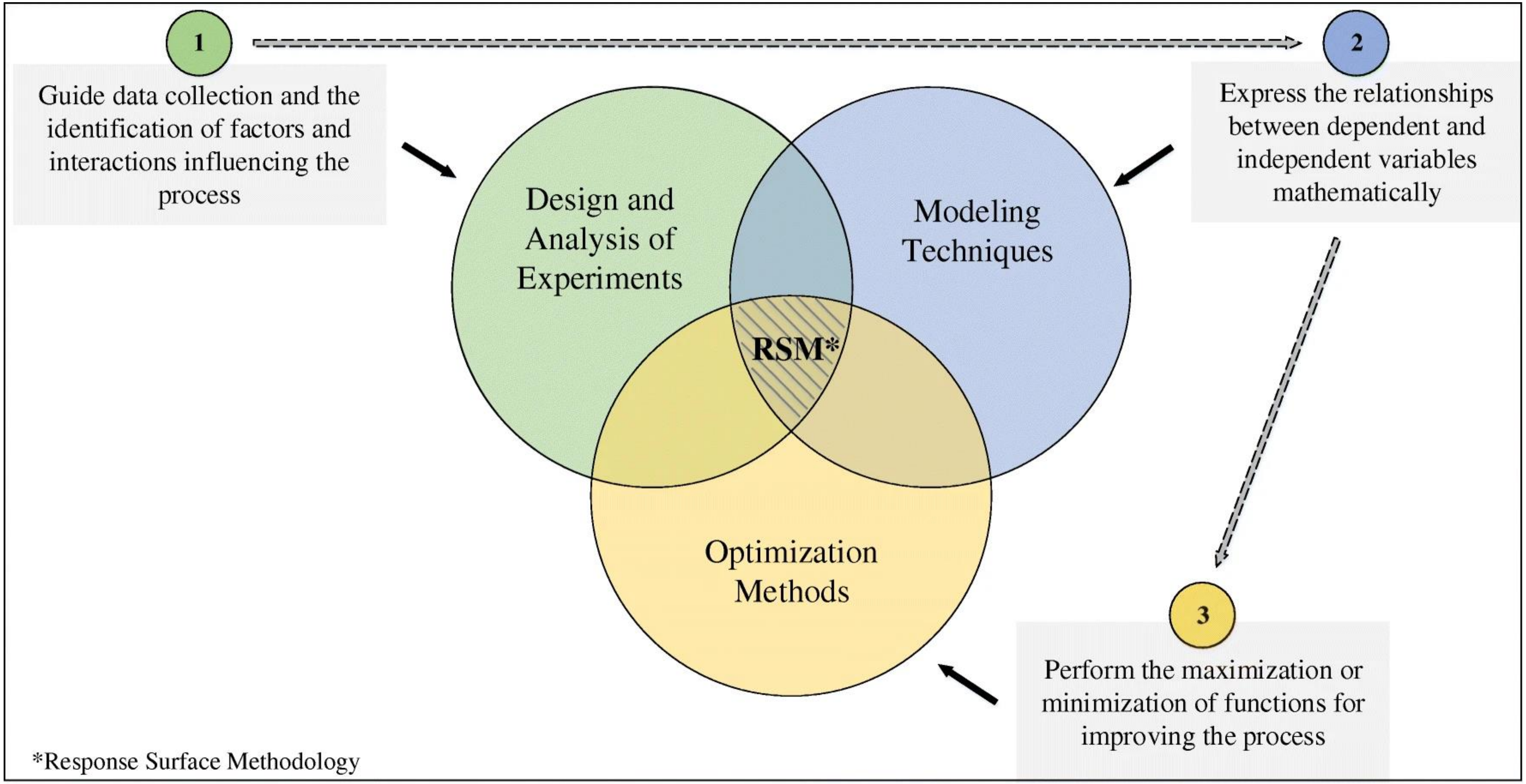
design algorítmico
geração de geometria
a partir de programação

design generativo
geração de alternativas segundo
um conjunto de critérios,
explorando o espaço de soluções

otimização topológica
técnica matemática de otimização
pode ou não ser incluída como
procedimento em estratégias
generativas

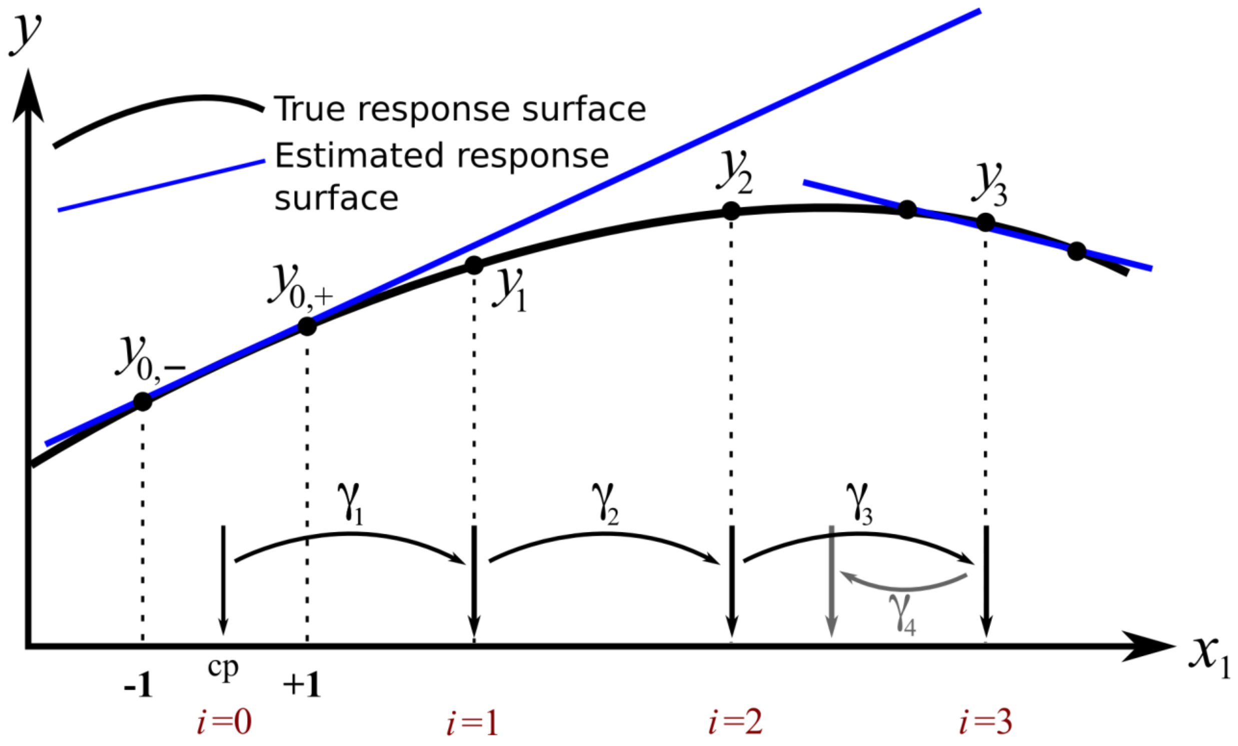
Otimização por Superfície de Resposta (RSM)

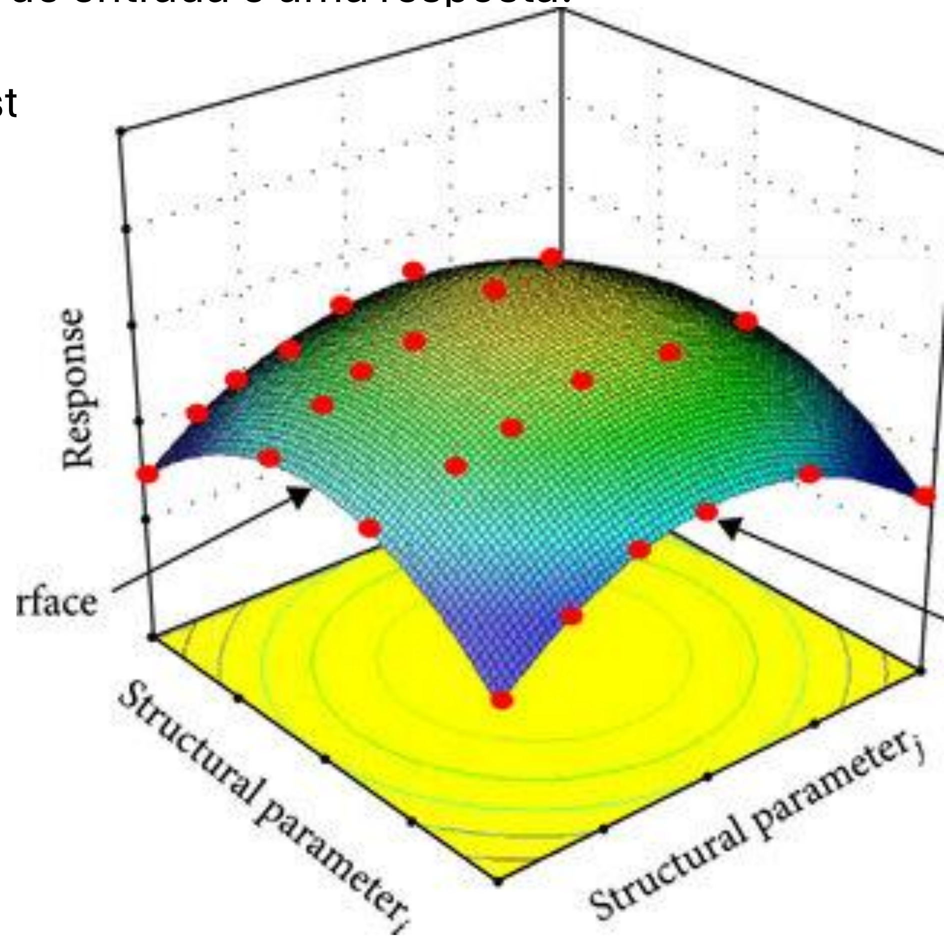
•Aplicação em Otimização Estrutural



O que é Otimização por Superfície de Resposta?

- • Definição: RSM é uma técnica para modelar a relação entre variáveis de entrada e uma resposta.
- • Objetivo: Modelar e otimizar processos em engenharia.
- • Aplicação em Otimização Estrutural: Aproximar o comportamento est

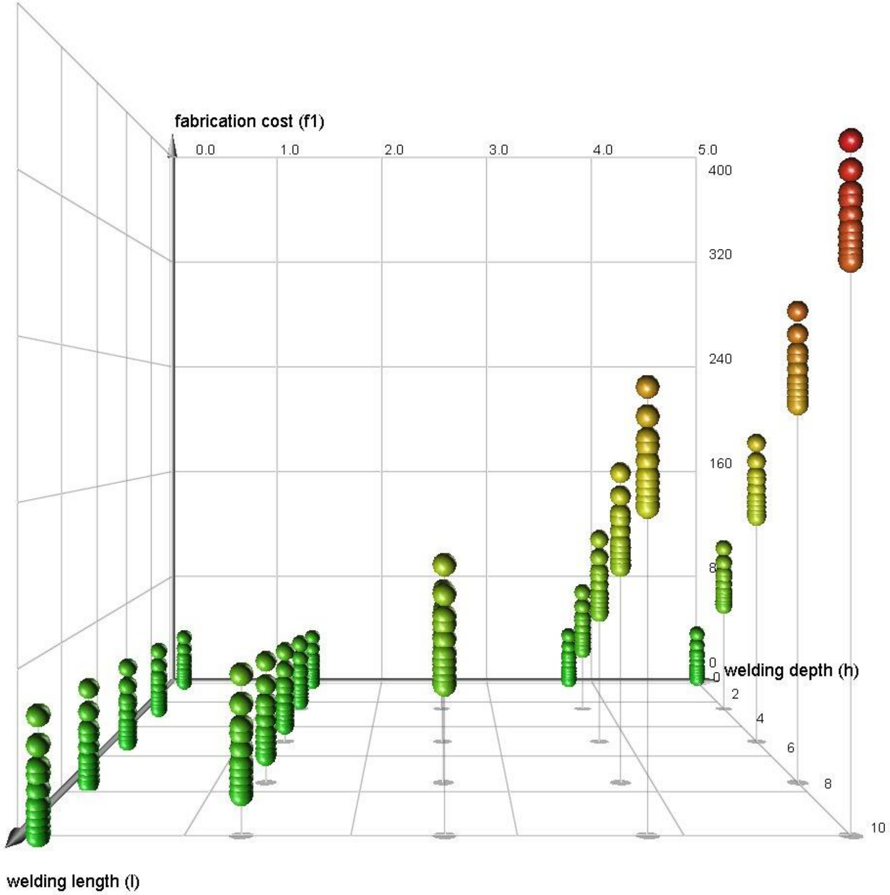


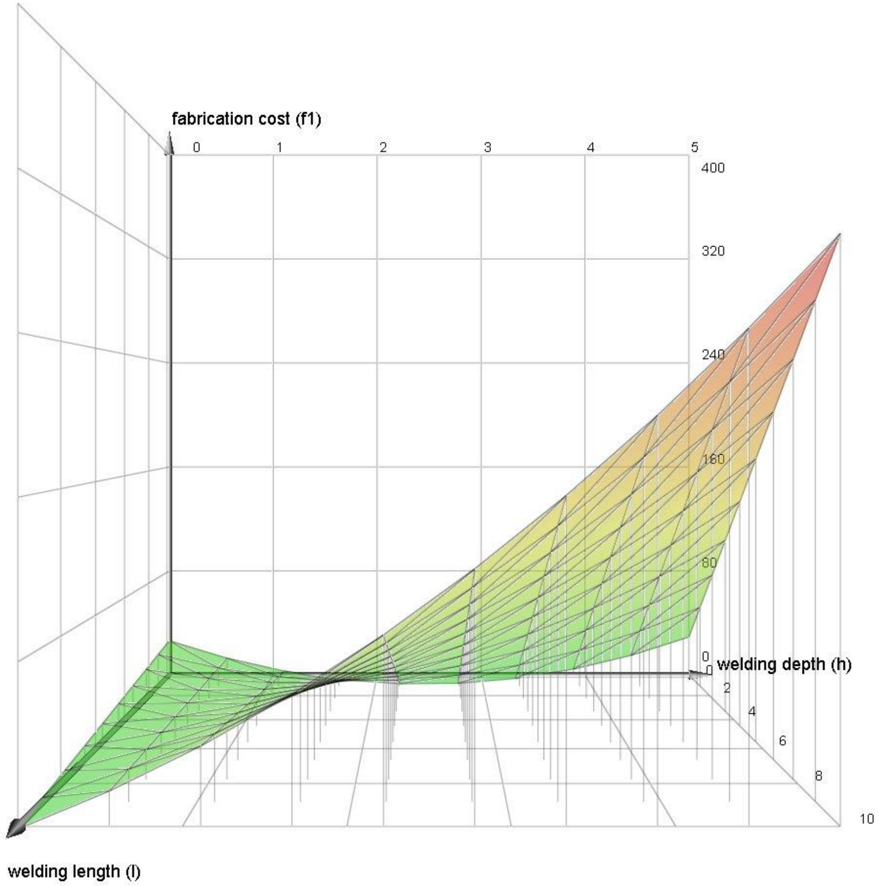


https://learnche.org/pid/design-analysis-experiments/response-surface-methods

O que é Otimização por Superfície de Resposta?

- • Definição: RSM é uma técnica para modelar a relação entre variáveis de entrada e uma resposta.
- • Objetivo: Modelar e otimizar processos em engenharia.
- • Aplicação em Otimização Estrutural: Aproximar o comportamento estrutural.

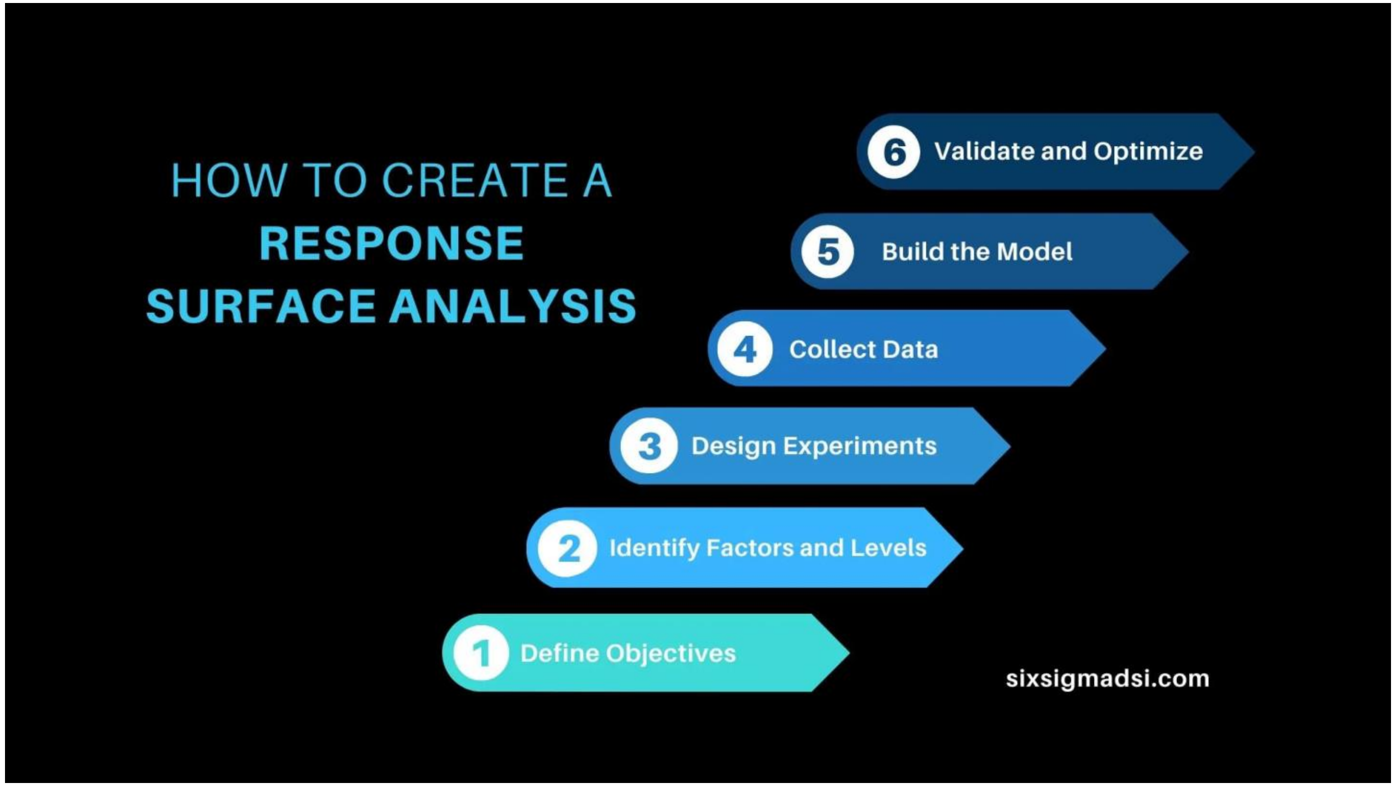


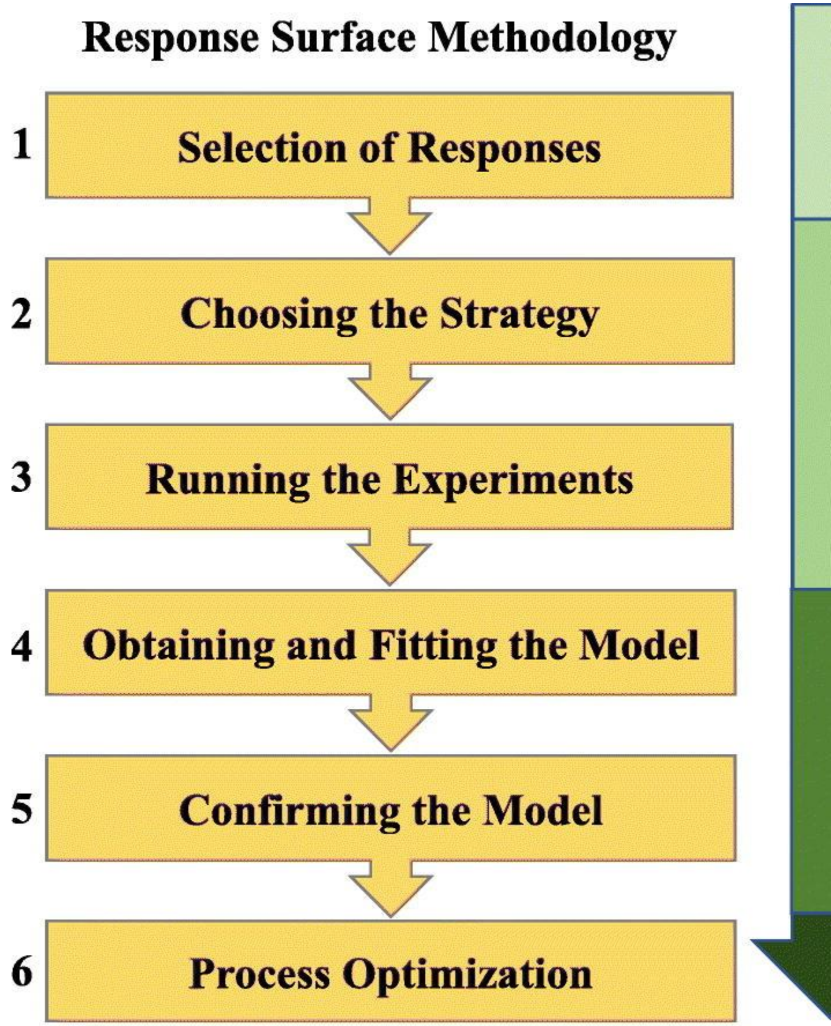


https://en.wikipedia.org/wiki/Response_surface_methodology

Como Funciona a Superfície de Resposta?

- 1. Escolha das Variáveis de Entrada.
- 2. Planejamento Experimental.
- 3. Ajuste do Modelo.
- 4. Otimização do Modelo.

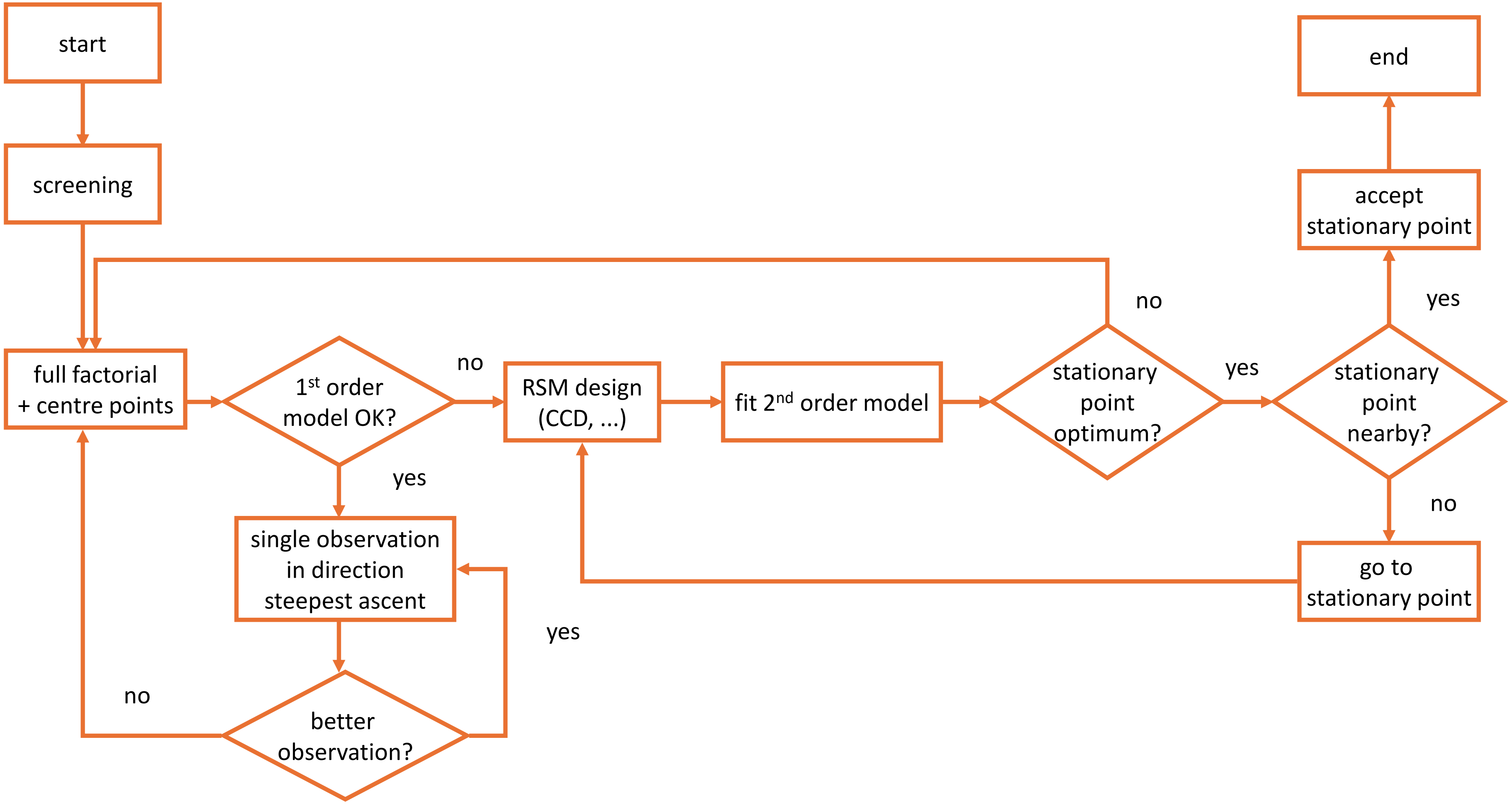




https://sixsigmadsi.com/response-surface-analysis-complete-guide/

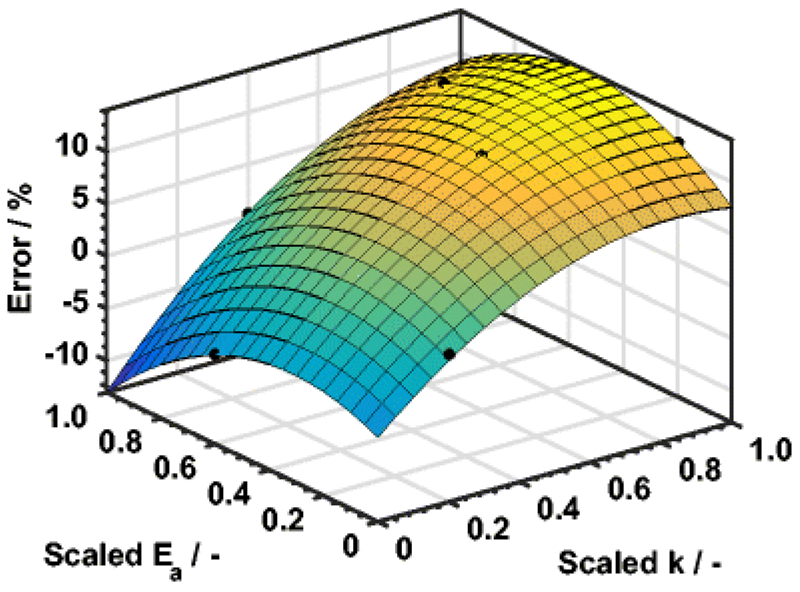
Planeamento Experimental no RSM

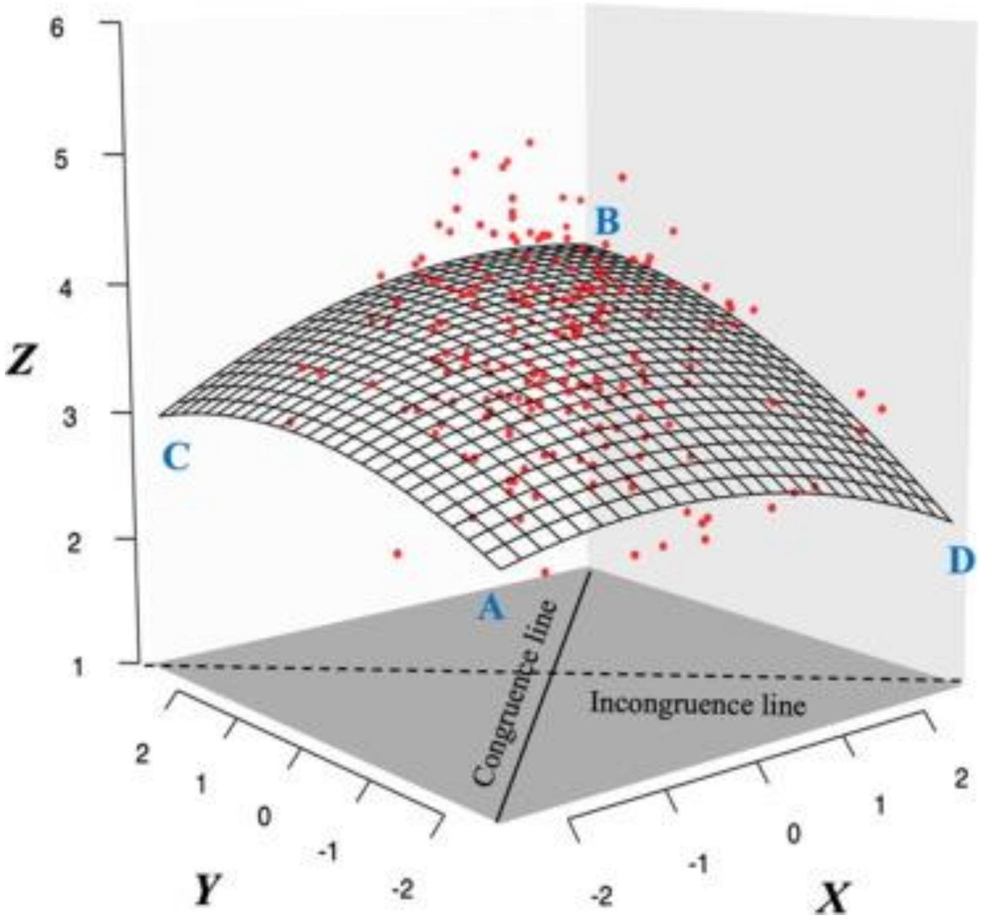
- Objetivo: Obter dados com o mínimo de experimentos.
- Métodos: Fatorial Completo, Fatorial Fracionado, CCD.



Ajuste do Modelo no RSM

- • Modelo Quadrático para aproximação.
- • Função: $Y = \beta_0 + \Sigma\beta_i X_i + \Sigma\beta_{ii} X_i^2 + \Sigma\beta_{ij} X_i X_j$.
- • Coeficientes ajustados por regressão.





The Method of Steepest Ascent

Assume that the first-order model is an adequate approximation to the true surface in a small ragion of the x's.

The method of steepest ascent: A procedure for moving sequentially along the path of steepest ascent.

Based on the first-order model,

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^{k} \hat{\beta}_i x_i$$

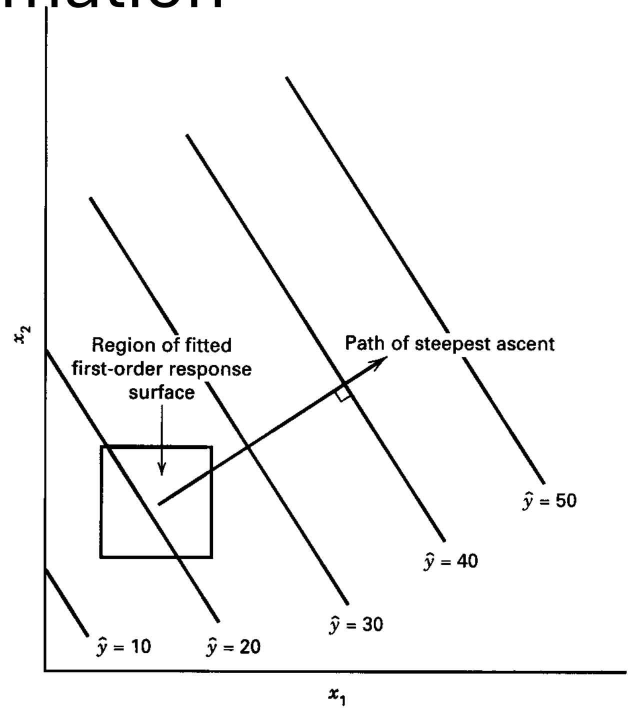


Figure 11-4 First-order response surface and path of steepest ascent.

The path of steepest ascent // the regression coefficients

The actual step size is determined by the experimenter based on process knowledge or other practical considerations

Example

			Factor 1	Factor 2	Response
Std	Run	Block	A:Time	B:Temp	yield
			minutes	degC	percent
1	7	{ 1 }	-1	-1	39.3
2	6	{ 1 }	1	-1	40.9
3	5	{ 1 }	-1	1	40
4	2	{ 1 }	1	1	41.5
5	9	{ 1 }	0	0	40.3
6	4	{ 1 }	0	0	40.5
7	1	{ 1 }	0	0	40.7
8	3	{ 1 }	0	0	40.2
9	8	{ 1 }	0	0	40.6

$$\hat{y} = 40.44 + 0.775x_1 + 0.325x_2$$

Exemple

Table 11-3 Steepest Ascent Experiment for Example 11-1

Steps	Coded Variables x_1	Coded Variables x_2	Natural Variables ξ_1	Natural Variables ξ_2	Response y
Origin	0	0	35	155	
Δ	1.00	0.42	5	2	
Origin + Δ	1.00	0.42	40	157	41.0
Origin + 2Δ	2.00	0.84	45	159	42.9
Origin + 3Δ	3.00	1.26	50	161	47.1
Origin + 4Δ	4.00	1.68	55	163	49.7
Origin + 5Δ	5.00	2.10	60	165	53.8
Origin + 6Δ	6.00	2.52	65	167	59.9
Origin + 7Δ	7.00	2.94	70	169	65.0
Origin + 8Δ	8.00	3.36	75	171	70.4
Origin + 9Δ	9.00	3.78	80	173	77.6
Origin + 10Δ	10.00	4.20	85	175	80.3
Origin + 11Δ	11.00	4.62	90	179	76.2
Origin + 12Δ	12.00	5.04	95	181	75.1

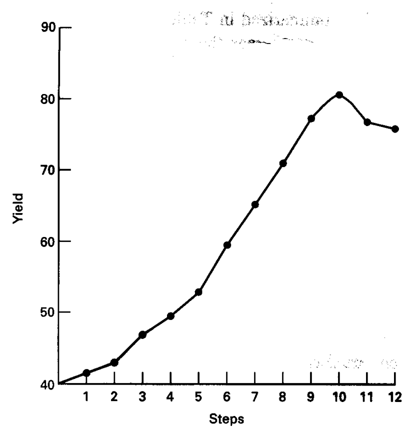


Figure 11-5 Yield versus steps along the path of steepest ascent for Example 11-1.

The step size is 5 minutes of reaction time and 2 degrees F

What happens at the conclusion of steepest ascent?

Example

- Assume the first-order model

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^{k} \hat{\beta}_i x_i$$

1. Choose a step size in one process variable, Δx_j.
2. The step size in the other variable,

$$\Delta x_i = \frac{\hat{\beta}_i}{\hat{\beta}_j / \Delta x_j}$$

3. Convert the Δx_j from coded variables to the natural variable

Analysis of a Second-order Response Surface

When the experimenter is relative closed to the optimum, the second-order model is used to approximate the response.

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \varepsilon$$

Find the stationary point. Maximum response, Minimum response or saddle point.

Determine whether the stationary point is a point of maximum or minimum response or a saddle point.

Example

The second-order model:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x},$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix} \text{ and } \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12}/2 & \cdots & \hat{\beta}_{1k}/2 \\ & \hat{\beta}_{22} & \cdots & \hat{\beta}_{2k}/2 \\ & & \ddots & \\ & & & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x_s} = -\frac{1}{2}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}$$

$$\hat{\mathbf{y}}_\mathbf{s} = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{x}_s^{'}\mathbf{b}$$

- Characterizing the response surface:
  - Contour plot or Canonical analysis
  - Canonical form (see Figure 11.9)

$$\hat{y} = \hat{y}_s + \lambda_1 w_1^2 + \cdots + \lambda_k w_k^2$$

  - Minimum response: λ_i are all positive
  - Maximum response: λ_i are all negative
  - Saddle point: λ_i have different signs

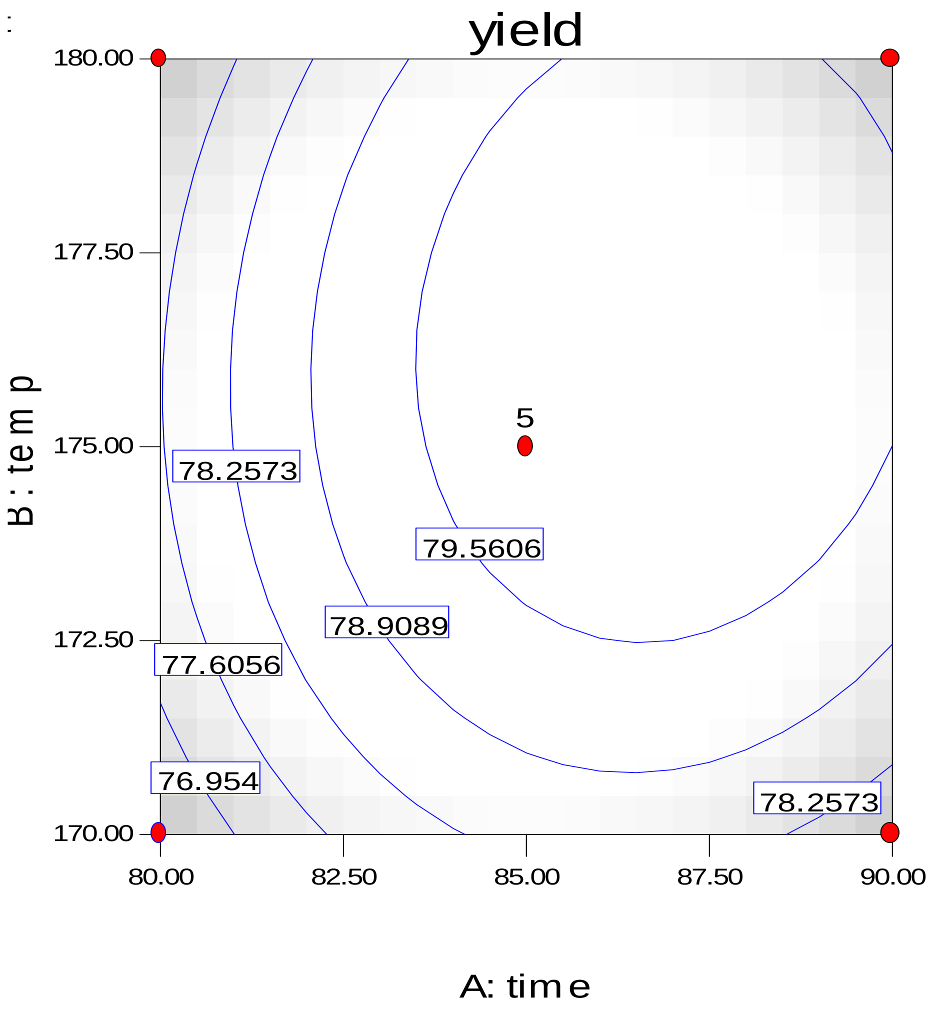
Example

ANOVA for Response Surface Quadratic Model
Analysis of variance table [Partial sum of squares]

Source	Sum of Squares	DF	Mean Square	F Value	Prob > F
Model	28.25	5	5.65	79.85	< 0.0001
A	*7.92*	*1*	*7.92*	*111.93*	*< 0.0001*
B	*2.12*	*1*	*2.12*	*30.01*	*0.0009*
A^2	*13.18*	*1*	*13.18*	*186.22*	*< 0.0001*
B^2	*6.97*	*1*	*6.97*	*98.56*	*< 0.0001*
AB	*0.25*	*1*	*0.25*	*3.53*	*0.1022*
Residual	0.50	7	0.071		
Lack of Fit	*0.28*	*3*	*0.094*	*1.78*	*0.2897*
Pure Error	*0.21*	*4*	*0.053*		
Cor Total	28.74	12			

$$\hat{y} = 79.94 + 0.99x_1 + 0.52x_2 + 0.25x_1x_2$$
$$-1.38x_1^2 + -1.00x_2^2$$

Example



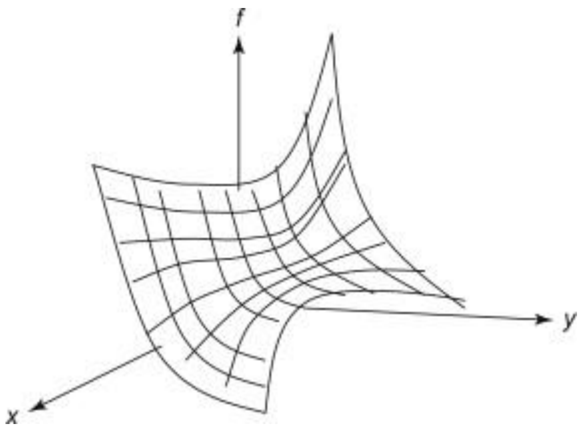
- The contour plot is given in the natural variables (see Figure)
- The optimum is at about 87 minutes and 176.5 degrees

Exemplo Prático - Otimização de uma Viga

- • Problema: Minimizar o peso da viga com restrições.
- • Variáveis: Dimensões da viga.
- • RSM: Aproximação e otimização eficientes.

Vantagens e Desvantagens do RSM

- • Vantagens: Reduz experiências(avaliações), facilita a otimização.
- • Desvantagens: Pode ser impreciso para problemas não-lineares.



Conclusão e Aplicações Futuras do RSM

- • Benefícios: Simplifica a otimização estrutural.
- • Futuro: Integração com machine learning para maior precisão.

Critérios avaliação M2

Critério			Peso	Anotações
Apresentação			0.15	
	Contexto	0.1		Formato livre. Importante introduzir equipa e objeto, discutir estratégias do princípio ao fim, analisar resultados, mostrar espírito crítico e mostrar todo o caminho.
	Apresentação	0.25		
	Formulação e estratégia de otimização	0.25		
	Resultados e pós-processamento	0.2		
	Discussão	0.2		
Entrega			0.85	
	Site (memória descritiva)	0.15		Espírito semelhante ao da apresentação. Mostrar espírito crítico e processo. Visão global e estratégia.
	Forma	0.3		
	Função	0.7		
	Otimização estrutural/multidisciplinar	0.85		Justificação da metodologia tomada e sua pretensão, demonstrar conhecimento do que se está a fazer, resultados analisados de forma crítica, solução oferecida no final para fabrico.
	Abordagem	0.15		
	Formulação	0.2		
	Metodologia/estratégia	0.25		
	Resultados e análise crítica	0.2		
	Pós-processamento	0.2		

Perguntas?

Novembro 2024

dem universidade de aveiro
departamento de engenharia mecânica