

O ŹLE I DOBRZE POSTAWIONYCH PROBLEMACH IDENTYFIKACJI MODELI ROŚLINNYCH MATERIAŁÓW LEPKOSPREŻYSTYCH

Anna Stankiewicz

Katedra Podstaw Techniki, Uniwersytet Przyrodniczy w Lublinie
ul. Doświadczalna 50A, 20-282 Lublin
e-mail: anna.stankiewicz@up.lublin.pl

Streszczenie. W pracy zaakcentowano niebezpieczeństwa związane ze złym uwarunkowaniem klasycznych problemów modelowania matematycznego materiałów lepkospreżytych: zadań wyznaczania modeli Maxwella i Kelvina oraz zadań identyfikacji spektr relaksacji i retardacji tych materiałów. W problemach tych nawet niewielka zmiana danych zadania (np. danych doświadczalnych) może powodować drastyczną zmianę uzyskanego rozwiązania. Oprócz niezbędnych przykładów numerycznych rozważania zilustrowano przykładami identyfikacji modeli próbki rzeczywistego materiału roślinnego - buraka cukrowego odmiany Janus badanego w stanie jednoosiowego odkształcenia w warunkach obciążeń udarowych. Przedstawiono także remedium jakim może być ograniczenie zbioru rozwiązań dopuszczalnych lub odpowiednia regularyzacja problemu oryginalnego. Zastosowanie tego remedium do identyfikacji modelu Maxwella i spektrum relaksacji będzie przedmiotem kolejnych prac.

Słowa kluczowe: lepkospreżystość, model Maxwella, spektrum relaksacji, problem źle postawiony

WSTĘP

Dobór odpowiedniej reprezentacji matematycznej - modelu matematycznego – ma zasadnicze znaczenie w analizie systemów fizycznych. Wybór modelu zależy od dwu podstawowych kryteriów: od jego przeznaczenia co determinuje typ i postać modelu oraz, co prawdopodobnie zazwyczaj jest istotniejsze, od możliwości jego wyznaczenia w postaci ilościowej. Wyznaczenie modelu matematycznego systemu (procesu) na podstawie danych pomiarowych to jego identyfikacja. Aby znaleźć taki model, który dobrze (najlepiej) opisuje system (proces) należy opracować odpowiednią metodę identyfikacji (Ljung 1999).

Dążeniem każdego badacza jest, aby jego problem naukowy posiadał rozwiązanie, rozwiązanie to było jednoznaczne, a niewielka zmiana danych zadania (np. danych doświadczalnych) nie powodowała drastycznej zmiany uzyskanego rozwiązania – czyli problem dobrze postawiony w sensie Hadamarda (Gutenbaum 2003). Jednak bardzo wiele rzeczywistych problemów modelowania matematycznego nie spełnia tych warunków – są to problemy źle postawione. Są one wszechobecne we współczesnej nauce i technice. Powstają przykładowo na gruncie identyfikacji i modelowania systemów oraz sygnałów w: automatyce (Goethals i in. 2003, Van Gestel i in. 2001), wielu dziedzinach fizyki (Glasko 1988, Osipov i in. 2005), biochemii (Dash i in. 2005), biologii, (Padron 1998), medycynie (Ioannides 2002, Galka i in. 2004).

Problemami źle postawionymi są także klasyczne problemy modelowania matematycznego materiałów o własnościach lepkosprężystych: zadania wyznaczania modeli Maxwella i Kelvina oraz zadania identyfikacji spektr relaksacji i retardacji tych materiałów. Zadania te są źle postawionymi problemami odwrotnymi. Ilustrują to podane niżej przykłady.

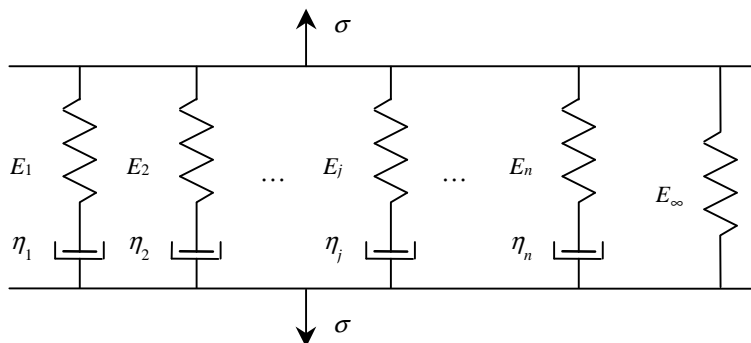
Celem tej pracy jest zwrócenie uwagi na zagrożenia związane ze złym uwarunkowaniem zadań wyznaczania modeli matematycznych materiałów biologicznych o własnościach liniowo-lepkosprężystych. Oprócz przykładów numerycznych rozważania zilustrowano przykładami identyfikacji modelu Maxwella i spektrum relaksacji próbki rzeczywistego materiału roślinnego - buraka cukrowego odmiany Janus. Przedstawienie remedium, jakim jest zastosowanie techniki regularyzacji oryginalnego problemu, jest przedmiotem następnych prac.

IDENTYFIKACJA MODELU MAXWELLA – PROBLEM ŹLE POSTAWIONY

Klasycznym sposobem opisu zjawiska relaksacji naprężeń zachodzącego w liniowych stacjonarnych materiałach lepkosprężystych jest sumacyjny model Maxwella o strukturze przedstawionej na rysunku 1 złożony z elementów sprężystych o modułach sprężystości E_j i elementów lepkich o współczynnikach lepkości dynamicznej η_j . Moduł relaksacji $G(t)$ (jednoosiowa funkcja relaksacji naprężeń) modelu Maxwella jest postaci:

$$G(t) = \sum_{j=1}^n E_j e^{-t\nu_j} + E_\infty, \quad (1)$$

gdzie stałe $\nu_j = E_j/\eta_j$ to częstotliwości relaksacji poszczególnych gałęzi modelu, E_∞ jest wartością ustaloną modułu relaksacji (ang. *long-term modulus*), a k oznacza liczbę gałęzi modelu.



Rys. 1. Uogólniony sumacyjny model Maxwella z elementem sprężystym E_∞

Fig. 1. Generalized discrete Maxwell model with additional elastic element E_∞

Problem identyfikacji modelu Maxwella na podstawie dyskretnych pomiarów modułu relaksacji zgromadzonych w teście relaksacji naprężeń sprowadza się do wyznaczenia jego parametrów, tak aby model ten jak najlepiej przybliżał dane pomiarowe, z reguły optymalnie w sensie najmniejszej sumy kwadratów. Zadanie identyfikacji modelu Maxwella jest więc znanym w teorii identyfikacji i intensywnie badanym od połowy lat siedemdziesiątych XX wieku, nieliniowym problemem aproksymacji danych skończoną sumą funkcji eksponentialnych (Holmström i Petersson 2002). Wiadomo od kilkudziesięciu lat, że problem ten jest zadaniem skomplikowanym i stosunkowo trudnym numerycznie (Kammler 1979, Varah 1985, Holmström i Petersson 2002). Już Lanczos (1956), a następnie Kammler (1979) oraz Varah (1985) pokazali, iż nawet w zadaniu aproksymacji ciągu monotonicznie malejącego sumą dwu funkcji eksponentialnych, może istnieć kilka modeli optymalnych. Lanczos wskazał także na skrajną wrażliwość wykładników ν na nawet bardzo małe zaburzenia danych. Niektóre problemy związane z identyfikacją modelu Maxwella ilustruje następujący prosty przykład. **Przykład 1.** Rozważmy materiał liniowo lepkosprężysty, którego moduł relaksacji $G(t)$ opisany jest funkcją

$$G(t) = Ee^{-t\nu} + E_\infty, \quad (2)$$

wartości jego parametrów podano w tabeli 1. Moduł relaksacji $\bar{G}(t) = G(t) + z(t)$ z zakłóceniami pomiarowymi $z(t)$ o rozkładzie jednostajnym w przedziale $[-0,4, 0,4]$ MPa próbkowano w $N = 40$ punktach pomiarowych ze stałym okresem próbkowania $\Delta t = 3$ s; pomiary $\{\bar{G}(t_i)\}$ zaznaczono na rysunku 2. Przyjęto model Maxwella postaci:

$$G_M(t) = E_M e^{-t\nu_M} + E_{M,\infty} \quad (3)$$

i zastosowano kwadratowy wskaźnik jakości modelu:

$$Q(E_M, E_{M,\infty}, \nu_M) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\bar{G}(t_i) - G_M(t_i)]^2. \quad (4)$$

Problem optymalnej w sensie wskaźnika (4) identyfikacji

$$\min_{E_M > 0, E_{M,\infty} \geq 0, \nu_M > 0} Q(E_M, E_{M,\infty}, \nu_M) \quad (5)$$

posiada rozwiązanie jednoznaczne, wartości parametrów optymalnego modelu podano w tabeli 1. W tabeli podano także odpowiednie wartości czasów relaksacji $\tau = \eta/E$, $\tau_M = \eta_M/E_M$ i współczynników lepkości dynamicznej oraz względne błędy estymacji parametrów materiału (2). Informację o zakłóceniach pomiarowych niesie stosunek norm $\|z\|_2 / \|\bar{G}\|_2 \cdot 100\% = 2,59\%$, gdzie $\|\cdot\|_2$ oznacza normę kwadratową w odpowiedniej przestrzeni euklidesowej, a wektory pomiarów modułu relaksacji i wartości zakłóceń w chwilach czasu $t_i = i\Delta t$, $i=1, \dots, N$, zdefiniowane są następująco:

$$\bar{G} = [\bar{G}(t_1) \ \dots \ \bar{G}(t_N)]^T, \quad z = [z(t_1) \ \dots \ z(t_N)]^T. \quad (6)$$

Najmniejszy z błędów oszacowania parametrów materiału (2) jest równy prawie 6%, pozostałe istotnie przekraczają 10%. Wobec tego niewielkie zakłócenia powodują znaczenie większe błędy oszacowania parametrów modelu, mimo że względny wskaźnik jakości

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\bar{G}(t_i) - E_M e^{-\nu_M t} - E_{M,\infty} \right]^2 / \bar{G}(t_i)^2 = 3,357 \cdot 10^{-4}.$$

Tabela 1. Parametry materiału (2) i jego optymalnego modelu Maxwella (3)

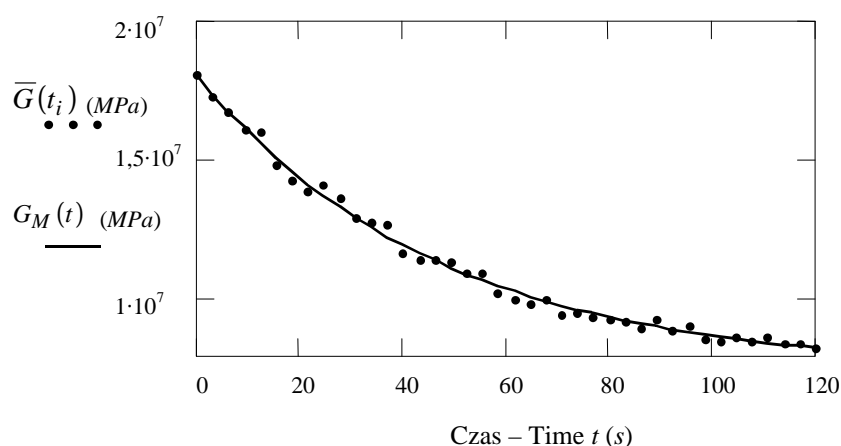
Table 1. The parameters of the material (2) and the optimal Maxwell model (3)

Parametry materiału The material parameters	Parametry modelu optymalnego The optimal model parameters	Błędy estymacji parametrów The parameter estimation errors
$E = 10 \text{ MPa}$	$E_M = 10,5777 \text{ MPa}$	$(E_M - E)/E \cdot 100\% = 5,78\%$
$E_\infty = 8 \text{ MPa}$	$E_{M,\infty} = 7,5168 \text{ MPa}$	$(E_\infty - E_{M,\infty})/E_\infty \cdot 100\% = 24,8\%$
$\nu = 0,025 \text{ s}^{-1}$	$\nu_M = 0,0215 \text{ s}^{-1}$	$(\nu - \nu_M)/\nu \cdot 100\% = 14\%$
$\tau = 40 \text{ s}$	$\tau_M = 46,512 \text{ s}$	$(\tau_M - \tau)/\tau \cdot 100\% = 16,28\%$
$\eta = E/\nu = 400 \text{ MPa} \cdot \text{s}$	$\eta_M = E_M/\nu_M = 487,0983 \text{ MPa} \cdot \text{s}$	$(\eta_M - \eta)/\eta \cdot 100\% = 21,78\%$

Bardzo dobre dopasowanie optymalnego modelu do wyników eksperymentu ilustruje też rysunek 2. W zadaniu tym rozwiązanie istnieje i jest jednoznaczne, a mimo to zaburzenia danych doświadczalnych powodują wielokrotnie silniejsze zaburzenia oszacowań. Spowodowane jest to złym uwarunkowaniem hesjanu $\mathcal{H}(E_M, E_{M,\infty}, \nu_M) = \mathcal{H}$ wskaźnika $Q(E_M, E_{M,\infty}, \nu_M)$ (Varah 1990). Spektralny wskaźnik uwarunkowania hesjanu zdefiniowany jest stosunkiem największej wartości szczególnej $\sigma_1(\mathcal{H})$ macierzy \mathcal{H} do jej najmniejszej niezerowej wartości szczególnej $\sigma_r(\mathcal{H})$ (Kiełbasiński i Schwetlick 1994), czyli

$$\kappa(\mathcal{H}) = \frac{\sigma_1(\mathcal{H})}{\sigma_r(\mathcal{H})}. \quad (7)$$

Dla rzeczywistych parametrów materiału przyjmuje on wartość $\kappa(\mathcal{H}(E, E_\infty, \nu)) = 1,056 \cdot 10^{17}$, a więc wielokrotnie przekracza numerycznie akceptowaną wartość $1,0 \cdot 10^4$ (Kiełbasiński i Schwetlick 1994).



Rys. 2. Pomiary modułu relaksacji $\bar{G}(t_i)$ (punkty) oraz jego modelu optymalnego $G_M(t)$ (linia ciągła)

Fig. 2. The relaxation modulus measurements $\bar{G}(t_i)$ (points) and the best model $G_M(t)$ (solid line)

Ten prosty przykład o jednoznacznym rozwiązaniu wskazuje, że nawet doskonałe dopasowanie modelu do danych doświadczalnych może nie gwarantować dobrego oszacowania jego parametrów, jeśli problem jest źle uwarunkowany. Znajomość współczynników sprężystości E_i i współczynników lepkości dynamicznej badanego materiału jest zaś istotna w wielu zastosowaniach, przykładowo w analizie stanów naprężeń i odkształceń metodą elementów skończonych.

Przykład 2. W tym przykładzie wyznaczmy czteroparametrowy model Maxwella opisujący zjawisko relaksacji naprężeń próbki rzeczywistego materiału roślinnego – buraka cukrowego odmiany Janus badanego przez Gołackiego i jego współpracowników (Gołacki i in. 2003). Przyjęcie modelu liniowo lepkosprężystego do opisu mechanicznych własności próbek badanego materiału uzasadniają wyniki badań prezentowane w wielu pracach, np. (Bzowska-Bakalarz 1994, Gołacki 2002). Walcową próbkę o średnicy i wysokości 20 mm poddano złożonemu z dwu faz testowi relaksacji naprężeń w warunkach stanu jednoosiowego odkształcenia - próbkę umieszczono w stalowym cylindrze uniemożliwiającym jej boczne odkształcenie i odkształcano w pierwszej fazie testu poprzez przesuwanie tłoka z prędkością $0,5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, aż do osiągnięcia założonej stałej wartości odkształcenia $\varepsilon_0 = 0,04$ utrzymywanego w drugiej fazie testu. Zmienną w czasie siłę reakcji próbki rejestrowano przez 100 s w 40000 punktach pomiarowych ze stałym okresem próbkowania $\Delta t = 0,0025 \text{ s}$. Do identyfikacji wybrano 958 punktów z okresem próbkowania $\Delta t_1 = 0,1 \text{ s}$ na odcinku czasu $0,5 \leq t \leq 96,2 \text{ s}$. Dane pomiarowe poddano wstępnej filtracji metodą Savitzky'ego-Golay'a.

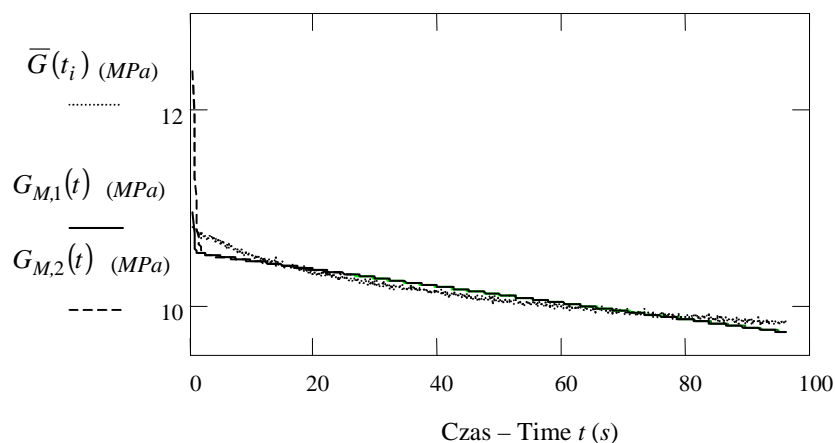
Na podstawie przefiltrowanych pomiarów siły reakcji badanej próbki wyznaczono pomiary modułu relaksacji $\{\bar{G}(t_i)\}$. W literaturze znanych jest kilka algorytmów wyznaczania modułu relaksacji na podstawie pomiarów naprężenia. Tu zastosowano zmodyfikowany w rozprawie (Stankiewicz 2007) algorytm Zapasa i Crafta (Zapas i Phillips 1971). Pomiary modułu relaksacji przedstawia rysunek 3. Dane pomiarowe $\{\bar{G}(t_i)\}$ aproksymowano czteroparametrowym modelem Maxwella postaci

$$G_M(t) = E_{M,1} e^{-tV_{M,1}} + E_{M,2} e^{-tV_{M,2}}. \quad (8)$$

Parametry modelu optymalnego w sensie najmniejszej sumy kwadratów błędów modelu podano w kolumnie pierwszej tabeli 2. Do ich wyznaczenia zastosowano metodę Marquardta-Levenberga. Następnie ze zbioru danych usunięto pięć pierwszych punktów pomiarowych i ponownie wyznaczono optymalne parametry modelu Maxwella (8) – podano je w kolumnie drugiej tabeli 2. Podobnie jak poprzednio w tabeli 2 zestawiono także odpowiednie wartości czasów relaksacji i współczynników lepkości dynamicznej oraz względne błędy estymacji parametrów modelu. Przebieg modułu relaksacji modeli optymalnych ilustrują linie: ciągła i przerywana na rysunku 3.

Tabela 2. Parametry optymalnego modelu Maxwella (8)
Table 2. The parameters of the optimal Maxwell model (8)

Parametry modelu dla pierwszego zbioru danych The model parameters for the first set of data	Parametry modelu dla drugiego zbioru danych The model parameters for the second set of data	Błędy oszacowania parametrów The parameter estimation errors
$E_{M,1} = 10,559814 \text{ MPa}$	$\bar{E}_{M,1} = 10,552693 \text{ MPa}$	$(E_{M,1} - \bar{E}_{M,1}) / \bar{E}_{M,1} \cdot 100\% = 0,068\%$
$E_{M,2} = 16,552239 \text{ MPa}$	$\bar{E}_{M,2} = 7,810581 \text{ MPa}$	$(E_{M,2} - \bar{E}_{M,2}) / \bar{E}_{M,2} \cdot 100\% = 111,9\%$
$\nu_{M,1} = 0,000843 \text{ s}^{-1}$	$\bar{\nu}_{M,1} = 0,000832 \text{ s}^{-1}$	$(\nu_{M,1} - \bar{\nu}_{M,1}) / \bar{\nu}_{M,1} \cdot 100\% = 1,322\%$
$\nu_{M,2} = 7,466922 \text{ s}^{-1}$	$\bar{\nu}_{M,2} = 2,901472 \text{ s}^{-1}$	$(\nu_{M,2} - \bar{\nu}_{M,2}) / \bar{\nu}_{M,2} \cdot 100\% = 157,3\%$
$\tau_{M,1} = 1186,23962 \text{ s}$	$\bar{\tau}_{M,1} = 1201,923077 \text{ s}$	$(\bar{\tau}_{M,1} - \tau_{M,1}) / \bar{\tau}_{M,1} \cdot 100\% = 1,322\%$
$\tau_{M,2} = 0,133924 \text{ s}$	$\bar{\tau}_{M,2} = 0,344653 \text{ s}$	$(\bar{\tau}_{M,2} - \tau_{M,2}) / \bar{\tau}_{M,2} \cdot 100\% = 157,3\%$
$\eta_{M,1} = 12526,469 \text{ MPa} \cdot \text{s}$	$\bar{\eta}_{M,1} = 12683,53 \text{ MPa} \cdot \text{s}$	$(\bar{\eta}_{M,1} - \eta_{M,1}) / \bar{\eta}_{M,1} \cdot 100\% = 1,254\%$
$\eta_{M,2} = 2,21674 \text{ MPa} \cdot \text{s}$	$\bar{\eta}_{M,2} = 2,691937 \text{ MPa} \cdot \text{s}$	$(\bar{\eta}_{M,2} - \eta_{M,2}) / \bar{\eta}_{M,2} \cdot 100\% = 21,44\%$



Rys. 3. Pomiary modułu relaksacji $\bar{G}(t_i)$ próbki buraka cukrowego (punkty) oraz optymalne modele wyznaczone dla pierwszego (linia ciągła) i drugiego (linia przerywana) zbioru danych
Fig. 3. Relaxation modulus measurements $\bar{G}(t_i)$ of a sample of sugar beet root (points) and the optimal models determined for the first (solid line) and second (dot line) set of measurement data

Średniokwadratowy wskaźnik jakości modelu optymalnego dla pierwszego zbioru danych pomiarowych $Q = 4,28 \cdot 10^{-3}$, dla drugiego zbioru danych jego wartość optymalna to $Q = 3,823 \cdot 10^{-3}$. Wskaźnik uwarunkowania hesjanu wskaźnika jakości dla optymalnych parametrów modelu wyznaczonych dla pierwszego zbioru punktów pomiarowych $\kappa(\mathcal{H}) = 2,749 \cdot 10^{13}$, dla modelu optymalnego dla drugiego zbioru pomiarów $\kappa(\mathcal{H}) = 1,902 \cdot 10^{12}$. W przykładzie tym usunięcie pięciu spośród prawie tysiąca punktów pomiarowych spowodowało istotną (ponad 100%) zmianę oszacowania niektórych parametrów modelu.

Znacznie drastyczniej ilustruje konsekwencje złego uwarunkowania zadania przedstawiony poniżej przykład identyfikacji spektrum relaksacji. Wielu autorów (Christensen 1971, Hellebrand 1995, Anderssen i Loy 2002) zwraca uwagę na to, iż spektrum relaksacji niesie pełną informację o własnościach mechanicznych materiałów lepkosprężystych. Znając spektrum relaksacji można wyznaczyć inne, stosowane w obliczeniach inżynierskich, charakterystyki materiałowe.

SPEKTRUM RELAKSACJI

W reologii powszechnie przyjmuje się, że moduł relaksacji $G(t)$ posiada całkowitą reprezentację postaci (Christensen 1971, Anderssen i Loy 2002)

$$G(t) = \int_0^{\infty} H(\nu) e^{-t\nu} d\nu, \quad (9)$$

gdzie nieujemna funkcja $H(\nu)$ nazywana jest spektrum częstotliwości relaksacji, zaś ν oznacza częstotliwość relaksacji. Ciągłe spektrum relaksacji $H(\nu)$ charakteryzuje frakcję elementów całkowitego modelu Maxwella (9) o częstotliwościach relaksacji zawierających się pomiędzy ν a $\nu + d\nu$.

Spektrum relaksacji nie jest wprost dostępne pomiarowo, musi więc być wyznaczane w oparciu o charakterystyki pomiarowo dostępne, np. na podstawie pomiarów modułu relaksacji. Jest to jeden z klasycznych problemów reologii.

IDENTYFIKACJA SPEKTRUM RELAKSACJI – ŹLE POSTAWIONY PROBLEM ODWROTNY

Założmy, że dysponujemy pomiarami modułu relaksacji $\bar{G}(t_i) = G(t_i) + z(t_i)$ w chwilach czasu $t_i \geq 0$, $i = 1, \dots, N$, gdzie $z(t_i)$ jest addytywnym błędem pomiarowym. Dla każdego t_i model (9) przyjmuje postać

$$G(t_i) = \int_0^{\infty} H(v) e^{-t_i v} dv. \quad (10)$$

Niech $v_k = k\Delta v$, $k=0, \dots, K$, gdzie krok próbkowania częstotliwości relaksacji $\Delta v > 0$. Całkę z prawej strony modelu (10) można dla $i=1, \dots, N$ przybliżyć sumą

$$G(t_i) \cong \sum_{k=0}^K H(v_k) e^{-t_i v_k} \Delta v, \quad (11)$$

a definiując macierz

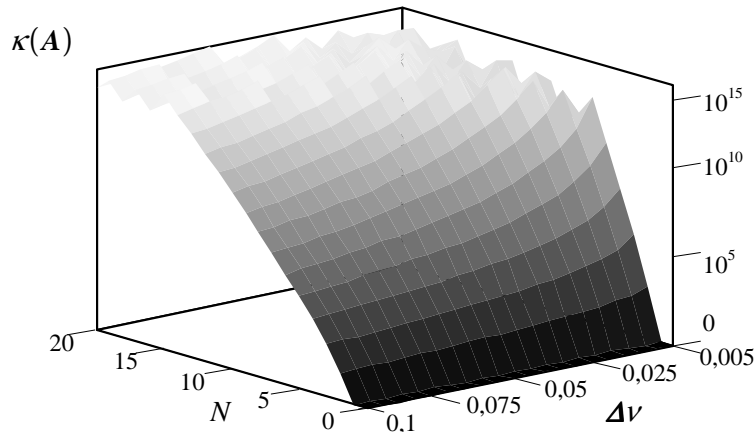
$$A = \Delta v \begin{bmatrix} e^{-t_1 v_0} & \dots & e^{-t_1 v_K} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{-t_N v_0} & \dots & e^{-t_N v_K} \end{bmatrix} \quad (12)$$

i zastępując moduł $G(t_i)$ pomiarem $\bar{G}(t_i)$ otrzymujemy układ równań postaci

$$\bar{G} \cong AH, \quad (13)$$

w którym niewiadomą jest wektor $H = [H(v_0) \dots H(v_K)]^T$ wartości spektrum relaksacji dla częstotliwości relaksacji $v_k = k\Delta v$, a wektor \bar{G} jest zdefiniowany wzorem (6). Istnienie i własności rozwiązania układu (13) zależą od własności macierzy A (12). Macierz ta, nawet jeśli jest teoretycznie nieosobliwa (co jest możliwe, gdy $N = K$) lub pełnego rzędu kolumnowego (dla $N > K$), w praktyce ze względu na własności funkcji eksponentialnej, która bardzo szybko zanika do zera oraz błędy zaokrągleń powstające przy obliczaniu jej elementów, w szczególności tych bliskich zeru, jest macierzą niepełnego rzędu. Wobec tego część wartości szczególnych macierzy A jest równa zeru, a to oznacza, że rozwiązanie problemu (13) – jeśli istnieje – jest niejednoznaczne. Własności rozwiązania problemu (13) zależą w szczególności od spektralnego wskaźnika uwarunkowania $\kappa(A)$ macierzy A zdefiniowanego wzorem (7). W tym liniowym zadaniu wskaźnik $\kappa(A)$ wskazuje o ile razy może zwiększyć się błąd względny rozwiązania układu (13) $\|\Delta H\|_2 / \|H\|_2$ w zależności od względnej zmiany danych, w szczególności spowodowanej zakłóceniami i mierzonej stosunkiem norm $\|z\|_2 / \|\bar{G}\|_2$, wektory pomiarów modułu relaksacji i wartości zakłóceń zdefinio-

wane są wzorem (6). Zależność spektralnego wskaźnika uwarunkowania macierzy A od liczby punktów próbkowania modułu relaksacji N oraz długości kroku próbkowania $\Delta\nu$ dla $2 \leq N \leq 20$ i $0,005 \leq \Delta\nu \leq 0,1$ oraz $t_i = i$ ilustruje rysunek 4; przy sporządzaniu wykresu założono dla uproszczenia, że $N = K$.

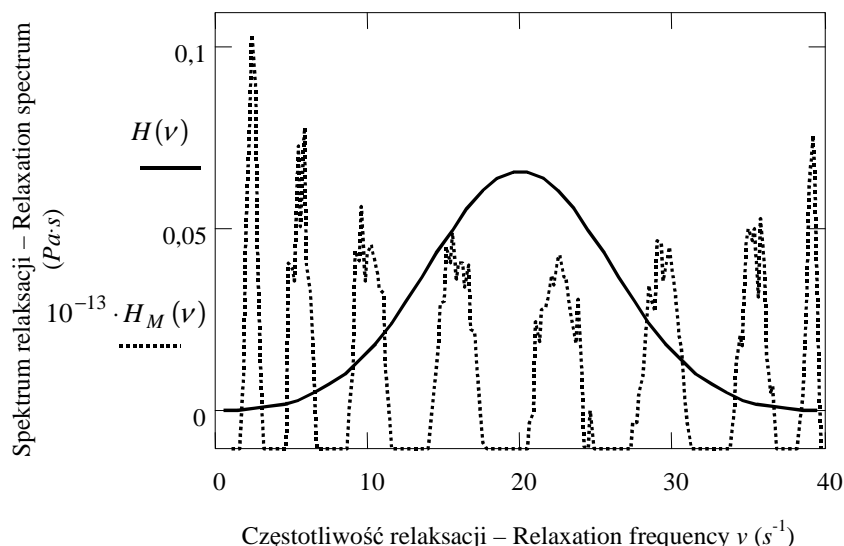


Rys. 4. Spektralny wskaźnik uwarunkowania $\kappa(A)$ macierzy A w funkcji kroku próbkowania $\Delta\nu$ oraz: liczby punktów próbkowania N , $N = K$

Fig. 4. The spectral condition ratio $\kappa(A)$ of the matrix A as a function of sampling period $\Delta\nu$ and the number of sampling points N , $N = K$

Już dla $N \geq 10$ wskaźnik $\kappa(A) \geq 10^{10}$, a to oznacza, że jeśli błąd względny od zakłóceń $\|z\|_2 / \|\bar{G}\|_2 \approx 10^{-6}$, to błąd względny rozwiązania układu (13) $\|\Delta H\|_2 / \|H\|_2 \approx 10^4$. Łatwo także zauważyć, że już dla $N = 4$ wskaźnik $\kappa(A)$ przekracza numerycznie akceptowalną wartość równą 10^4 (Kielbasiński i Schwetlick 1994, str. 141) oraz, że dla ustalonego N wartość wskaźnika $\kappa(A)$ jest tym większa, im mniejszy jest krok próbkowania $\Delta\nu$, czyli im dokładniej całka (10) przybliżana jest sumą (11).

Problem liniowo-kwadratowy (13) generalnie nie posiada jednoznacznego rozwiązania, a silnie złe uwarunkowanie macierzy A (12) powoduje, że każde z jego rozwiązań jest nieciągłe względem danych zadania, co oznacza, że nawet bardzo małe wahania danych zadania (w tym niewielkie zakłócenia) mogą powodować bardzo duże fluktuacje rozwiązania. Ilustruje to kolejny przykład.



Rys. 5. Spektrum relaksacji $H(\nu)$ (14) (linia ciągła) oraz jego model $H_M(\nu)$ (linia przerywana)
Fig. 5. Relaxation spectrum $H(\nu)$ (14) (solid line) and the normal model $H_M(\nu)$ (dash line)

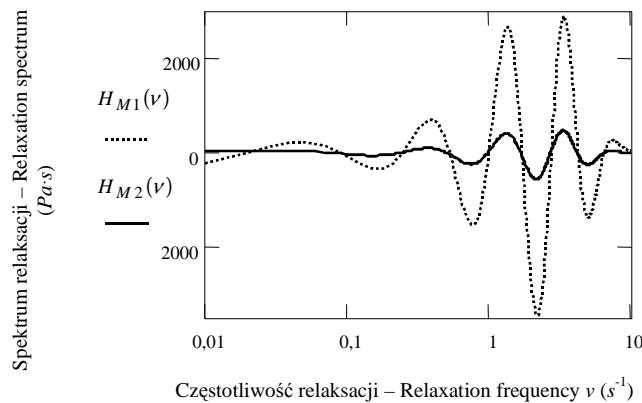
Przykład 3. Dany jest materiał liniowo lepkosprężysty, którego spektrum częstotliwości relaksacji opisuje rozkład Gaussa

$$H(\nu) = \frac{1}{6\sqrt{2\pi}} e^{-(\nu-20)^2/72}. \quad (14)$$

Jego moduł relaksacji $G(t)$ spróbkowano z zakłóceniami pomiarowymi $z(t)$ o rozkładzie jednostajnym w przedziale $[-0,025, 0,025] Pa$ w $N=200$ punktach ze stałym okresem próbkowania $\Delta t = 0,0025 s$ gromadząc pomiary $\bar{G}(t_i) = G(t_i) + z(t_i)$. Przyjęto $K=200$ i krok próbkowania częstotliwości relaksacji $\Delta \nu = 0,2$. Wskaźnik uwarunkowania macierzy A jest wówczas równy $\kappa(A) = 1,125 \cdot 10^{14}$, a $rank(A) = 17$. Rozwiązanie układu równań (13) jest niejednoznaczne; wyznaczono jego rozwiązanie normalne, czyli rozwiązanie o najmniejszej normie euklidesowej H_M . Już wartość jego normy $\|H_M\|_2 = 6,519 \cdot 10^{12}$ sygnalizuje bardzo duże fluktuacje rozwiązania, lepiej ilustruje to rysunek 5, na którym przedstawiono spektrum relaksacji $H(\nu)$ (14) oraz rozwiązanie normalne H_M , dla którego zastosowano mnożnik 10^{-13} .

Przykład 4. Rozważmy ponownie próbkę buraka cukrowego odmiany Janus omawianą w przykładzie 2. Tu do identyfikacji wybrano 1164 punkty pomiarowe, pierwsze 200 co $\Delta t = 2,5 \cdot 10^{-3} s$ na odcinku czasu $0 \leq t \leq 0,5 s$, kolejne 964 punktów z okresem próbkowania $\Delta t_1 = 0,1 s$ na odcinku czasu $0,5 \leq t \leq 97 s$. Modelu spektrum relaksacji poszukiwano w podprzestrzeni liniowej generowanej przez układ $K = 10$ funkcji bazowych Laguerre'a, co zredukowało oryginalny problem optymalizacji dynamicznej do statycznego zadania liniowo-kwadratowego (Stankiewicz 2007). Rozwiązanie tego zadania jest jednak nadal niejednoznaczne, spośród jego nieskończenie wielu rozwiązań wybrano rozwiązanie normalne. Na podstawie pomiarów modułu relaksacji poddanych wstępnej filtracji wyznaczono dwa modele: model pierwszy $H_{M1}(\nu)$ o normie $\|H_{M1}\|_2 = 4117,6$ na bazie 1164 pomiarów, model drugi $H_{M2}(\nu)$ dla 1159 pomiarów otrzymanych po odrzuceniu pięciu pierwszych punktów pomiarowych, $\|H_{M2}\|_2 = 666,31$. Fluktuacje obu modeli ilustruje rysunek 6. Równocześnie dopasowanie odpowiednich modeli modułu relaksacji jest bardzo dobre, o czym świadczą wskaźniki:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{[\bar{G}(t_i) - G_{M1}(t_i)]^2}{\bar{G}(t_i)^2} = 1,39 \cdot 10^{-3} \quad i \quad \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{[\bar{G}(t_i) - G_{M2}(t_i)]^2}{\bar{G}(t_i)^2} = 3,17 \cdot 10^{-5}.$$



Rys. 6. Modele $H_{M1}(\nu)$ i $H_{M2}(\nu)$ spektrum relaksacji próbki buraka cukrowego w przykładzie 4

Fig. 6. Relaxation spectrum models $H_{M1}(\nu)$ and $H_{M2}(\nu)$ of the sample of sugar beet root; example 4

Zadania identyfikacji spektrum relaksacji bądź modelu Maxwella – jak pokazały to powyższe przykłady – to problemy źle postawione. Ich poprawne rozwiązanie wymaga więc znajomości metod teorii problemów źle postawionych.

PROBLEMY ŹLE I DOBRZE POSTAWIONE

Koncepcję problemów dobrze postawionych (ang. *Well-Posed Problems*) sformalizował już na początku XX wieku Jacques Hadamard (1902, 1932), żądając, aby problem dobrze postawiony posiadał rozwiązanie, rozwiązanie to było jednoznaczne i przynajmniej ciągle względem danych zadania. Ciągłość rozwiązania względem danych gwarantuje, iż małym zaburzeniom danych odpowiadają małe zmiany rozwiązania (Gutenbaum 2003), a to zapewnia lokalną stabilność algorytmu wyznaczania rozwiązania. Obecnie z reguły formułuje się żądanie silniejsze – jest to warunek ciągłości w sensie Lipschitza. Poniżej sformułujemy warunki dobrego postawienia problemu precyzyjnie z tym właśnie wymaganiem.

Dany jest problem polegający na wyznaczeniu elementu x przestrzeni \mathcal{X} takiego, że

$$y = Mx, \quad (15)$$

gdzie M jest danym operatorem $M: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, a y danym elementem przestrzeni \mathcal{Y} . Problem jest dobrze postawiony w sensie Hadamarda jeśli spełnione są następujące warunki:

- (i) operator M jest odwracalny, czyli istnieje operator odwrotny M^{-1} – oznacza to, że problem (15) posiada jednoznaczne rozwiązanie $M^{-1}y$,
- (ii) M^{-1} jest operatorem ograniczonym, tzn. istnieje stała α , taka że

$$\|M^{-1}u - M^{-1}w\|_{\mathcal{Y}} \leq \alpha \|u - w\|_{\mathcal{X}}$$

dla dowolnych $u \in \mathcal{X}$ i $w \in \mathcal{X}$.

W problemie identyfikacji modelu Maxwella operator M jest nieliniowy i generalnie nieodwracalny – nie spełnia więc pierwszego z postulatów Hadamarda. W zadaniu wyznaczenia spektrum relaksacji operator M jest liniowy, istnieje – także liniowy – operator odwrotny M^{-1} . Operator M^{-1} jest tu jednak nieograniczony, jednoznaczne rozwiązanie zależy więc w sposób nieciągły od danych zadania.

W praktyce, z reguły dysponujemy zakłóconymi pomiarami elementu y , czyli elementem $\bar{y} = y + z$, gdzie z oznacza zakłócenia. Jeśli przestrzeń \mathcal{Y} jest przestrzenią Hilberta z normą $\|\cdot\|_{\mathcal{Y}}$, to zadanie wyznaczenia elementu x spełniającego (1) sprowadza się do problemu najmniejszej sumy kwadratów (ang. *Least Squares*) postaci

$$\min_{x \in \mathcal{X}} \|\bar{y} - Mx\|_{\mathcal{Y}}^2. \quad (16)$$

Istnienie i własności rozwiązania zadania (16) zależą w szczególności od własno-

ści operatora M . W przypadku, gdy operator M jest liniowy, jego rozwiązanie istnieje, o jego jednoznaczności i ciągłości decydują jednak własności operatora M^*M , gdzie M^* jest operatorem sprzężonym do M ¹. Jeśli operator M^*M nie jest odwracalny, to zadanie (16) może posiadać nieskończenie wiele rozwiązań. Jeśli jest on nieciągły i nieograniczony, to rozwiązanie zadania (16) jest także nieciągłe względem danych zadania, a to oznacza, że zadanie najmniejszych kwadratów jest w tym przypadku źle postawione.

REMEDIUUM

W zadaniach źle postawionych praktyczna trudność w identyfikacji ma źródło w problemie teoretycznym. To zaś oznacza, że rozwiązanie zadań identyfikacji modelu Maxwella oraz spektrum relaksacji wymaga stosowania specjalnych metod.

Remedium może być ograniczenie zbioru rozwiązań dopuszczalnych lub taka modyfikacja funkcji celu w zadaniu (16), która bez zmiany dziedziny zadania prowadzi do zadania dobrze postawionego o rozwiązaniu bliskim rozwiązaniu zadania oryginalnego, czyli jego regularyzacja.

W przypadku, gdy również przestrzeń \mathcal{X} jest przestrzenią Hilberta można zastosować zaproponowaną przez Tichonowa (1963) metodę regularyzacji polegającą na stabilizacji rozwiązania zadania (16) poprzez rozwiązanie zmodyfikowanego zadania postaci

$$\min_{x \in \mathcal{X}} \|\bar{y} - Mx\|_{\mathcal{Y}}^2 + \lambda \|Lx\|_{\mathcal{V}}^2, \quad (17)$$

w którym drugi kwadratowy składnik wskaźnika jakości spełnia rolę funkcji kary, a $\lambda > 0$ jest parametrem regularyzacji. Operator $L: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{V}$ w problemie (17), gdzie \mathcal{V} jest przestrzenią Hilberta z normą $\|\cdot\|_{\mathcal{V}}$, jest operatorem regularyzacji tak dobranym, aby uzyskać rozwiązanie o pożądanych własnościach. Zastosowanie jako L skończonego przybliżenia operatora różniczkowania zapewnia dobre wygładzenie rozwiązania (Tikhonov i Arsenin 1977). Jeśli operator $L = I$, gdzie $I: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$ jest operatorem jednostkowym, czyli $Ix = x$ dla każdego $x \in \mathcal{X}$, to zadanie (17) przyjmuje standardową postać

$$\min_{x \in \mathcal{X}} \|\bar{y} - Mx\|_{\mathcal{Y}}^2 + \lambda \|x\|_{\mathcal{X}}^2 \quad (18)$$

¹Operator sprzężony M^* zdefiniowany jest równością $\langle y, Mx \rangle = \langle M^*y, x \rangle$ dla każdego $y \in \mathcal{Y}^*$ i każdego $x \in \mathcal{X}$, gdzie \mathcal{Y}^* jest przestrzenią sprzężoną do \mathcal{Y} , czyli zbiorem funkcjonalów liniowych i ciągłych na \mathcal{Y} (Kurcysz 1982).

i zapewnia wyznaczenie rozwiązania o najmniejszej normie.

Istnienie i jednoznaczność rozwiązań zadań (17) i (18) zależą od własności operatorów M i L oraz doboru współczynnika regularyzacji.

Jeśli operatory M i L są liniowe, a operator $M^*M + \lambda L^*L$ jest odwracalny dla dowolnego $\lambda > 0$, to zadanie (17) jest dobrze postawione, a jego jednoznaczne rozwiązanie dane jest wzorem

$$x^\lambda = (M^*M + \lambda L^*L)^{-1} M^* \bar{y}$$

i jest ciągle względem wektora \bar{y} ; M^* i L^* to operatory sprzężone, odpowiednio, do M i L .

W przypadku szczególnym, gdy operator $L = I$, gdzie $I: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$ jest operatorem tożsamościowym, przestrzeń \mathcal{X} jest przestrzenią Hilberta, a operator $M^*M + \lambda I$ jest odwracalny dla każdego $\lambda > 0$, to jedyne rozwiązanie zadania (17) dane jest znanym wzorem

$$x^\lambda = (M^*M + \lambda I)^{-1} M^* \bar{y} \quad (19)$$

i jest to rozwiązanie o najmniejszej normie.

Jeśli operator M jest nieliniowy – a tak jest w zadaniu identyfikacji modelu Maxwella – to istnienie rozwiązania i jego własności należy rozstrzygać dla każdego problemu identyfikacji indywidualnie.

UWAGI KOŃCOWE I WNIOSKI

Spośród trzech postulatów Hadamarda w zadaniach identyfikacji modeli lepko-sprężystych często, paradoksalnie, najłatwiej zweryfikować pytanie o istnienie rozwiązania. Z reguły bowiem modele i miary ich jakości są funkcjami ciągłymi względem parametrów, a ponieważ parametry modeli, posiadając pewną interpretację fizyczną, przyjmują wartości nieujemne i ograniczone, pytanie o istnienie rozwiązania jest pytaniem o minimum funkcjonału ciągłego na zwartym zbiorze parametrów dopuszczalnych. A tę kwestię rozstrzyga pozytywnie klasyczne twierdzenie Weierstrassa o ekstremum funkcjonału ciągłego na zbiorze zwartym (Zangwill 1974, Twierdzenie 7.1).

Znacznie trudniej rozstrzygnąć jednoznaczność rozwiązania. Tę kwestię należy rozstrzygać dla każdego zadania indywidualnie, uwzględniając własności przyjętej klasy modeli, zbioru parametrów dopuszczalnych, a także zastosowanej miary jakości. I tak przykładowo w najczęściej prawdopodobnie rozwiązywanym przy badaniu reologicznych własności materiałów roślinnych zadaniu wyznacza-

nia modelu Maxwella na podstawie dyskretnych pomiarów modułu relaksacji optymalnego w sensie najmniejszej sumy kwadratów, można sformułować dość ogólne warunki istnienia i jednoznaczności rozwiązania dla modelu trójparametrowego (warunki konieczne i dostateczne istnienia trójparametrowego modelu Maxwella podał Jukić (2004), nie uwzględnił on jednak niezbędnego w kontekście modelowania zjawiska relaksacji naprężeń założenia dodatnich wartości parametrów modelu). Natomiast już dla modelu czteroparametrowego zadanie to z reguły nie posiada jednoznacznego rozwiązania (Kammler 1979, Varah 1985).

Kwestię ciągłości rozwiązania łatwo rozstrzygnąć wówczas, gdy modele i wskaźniki ich jakości są ciągłe względem parametrów, zbiór parametrów dopuszczalnych jest zwarty, a rozwiązanie zadania optymalnej identyfikacji jest jednoznaczne. Ciągłość tego rozwiązania można wówczas pokazać wykorzystując własności funkcjonałów ciągłych na zbiorach zwartych.

Większość rzeczywistych problemów to jednak problemy źle postawione. A tu uniwersalnym antidotum jest odpowiednia regularyzacja oryginalnego zadania.

Modele Maxwella i Kelvina oraz spektra relaksacji i retardacji odgrywają fundamentalną rolę w opisie zjawisk relaksacji naprężeń i pełzania, niezbędne są także dla wyznaczenia wielu innych charakterystyk materiałów lepkosprężystych. Błędy w oszacowaniu parametrów tych modeli mogą powodować nawet katastrofalne błędy wyznaczenia innych charakterystyk materiałów. W kolejnych pracach pokazano jak stosując metody teorii problemów źle i dobrze postawionych można skutecznie rozwiązać zadania identyfikacji tych modeli. W zadaniu identyfikacji modelu Maxwella zastosowano regularyzację problemu oryginalnego. W zadaniu identyfikacji spektrum relaksacji jako antidotum zastosowano równocześnie regularyzację i ograniczenie zbioru rozwiązań dopuszczalnych.

PIŚMIENNICTWO

- Anderssen R. S., Loy R. J., 2002. Rheological implications of completely monotone fading memory. *J. Rheol.*, 46(6), 1459- 1472.
- Bzowska-Bakalarz M., 1994. Właściwości mechaniczne korzeni buraków cukrowych. *Rozprawy Naukowe Akademii Rolniczej w Lublinie*, 166.
- Christensen R. M., 1971. *Theory of Viscoelasticity. An Introduction*. Academic Press, New York.
- Dash R. K., Bell B. M., Kushmerick M. J., Vicini P., 2005. Estimating *in Vitro* mitochondrial oxygen consumption during muscle contraction and recovery: A Novel Approach that Accounts for Diffusion. *Annals of Biomedical Engineering*, 33(3), 343-355.
- Galka A., Yamashita O., Ozaki T., Biscay R., Valde´s-Sosa P., 2004. A solution to the dynamical inverse problem of EEG generation using spatiotemporal Kalman filtering. *NeuroImage*, 23, 435-453.
- Glasko V.G., 1988. *Inverse Problems of Mathematical Physics*. American Institute of Physics, New York.
- Goethals I., Van Gestel T., Suykens J., Van Dooren P., De Moor B., 2003. Identification of positive

- real models in subspace identification by using regularization. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 48(10), 1843-1847.
- Gołacki K., 2002. Lepkosprężyste charakterystyki korzeni buraków cukrowych. *Acta Agrophysica*, 78, 37-49.
- Gołacki K., Kołodziej P., Stankiewicz A., Stropek Z., 2003. Sprawozdanie merytoryczne z realizacji projektu KBN nr 5P06F00619 pt. Charakterystyka odporności mechanicznej buraków cukrowych w aspekcie spotykanych w praktyce obciążeń mechanicznych, s. 214.
- Gutenbaum J., 2003. Modelowanie matematyczne systemów. EXIT, Warszawa.
- Hadamard J., 1902. Sur les problemes aux derivees partielles et leur signification physique. *Bull. Univ. Princeton*, 13, 49.
- Hadamard J., 1932. Le probleme de Cauchy et les equations aux derivees partielles lineaires hyperbolique. Hermann Press, Paris.
- Hellebrand H. J., 1995. Comparison of Models for Evaluation of Stress Relaxation. *Proc. of Int. Workshop Stress Relaxation in Solids and Biological Origin*, 3-10, Prague.
- Holmström K., Petersson J., 2002. A review of parameter estimation problem of fitting positive exponential sums to empirical data. *Applied Mathematics and Computation*, 126, 31-61.
- Ioannides A. A., 2002. Magnetic Field Tomography: theory, applications and examples from the visual system. *International Congress Series 1232*, 261-270.
- Jukić D., 2004. A necessary and sufficient criteria for the existence of the least squares estimate for a 3-parametric exponential function. *Applied Mathematics and Computation*, 147, 1-17.
- Kammler D. W., 1979. Least squares approximation of completely monotonic functions by sums of Exponentials. *SIAM J. Numer. Anal.*, 16(5), 801-818.
- Kielbasiński A., Schwetlick H., 1994. Numeryczna algebra liniowa. Wprowadzenie do obliczeń zautomatyzowanych. WNT, Warszawa.
- Kurcysz S., 1982. Matematyczne podstawy teorii optymalizacji. PWN, Warszawa.
- Lanczos C., 1956. *Applied Analysis*. Prentice Hall Englewood Cliffs.
- Ljung L., 1999. *System Identification: Theory for the User*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs New Jersey.
- Osipov A. I., Shelepin L. A., Shelepin S. L., 2005. Inverse problem method in laser physics. *Journal of Russian Laser Research*, 26(2), 116-136.
- Padron V., 1998. Sobolev regularization of a nonlinear ill-posed parabolic problem as a model for aggregating populations. *Commun. Partial Differ. Equat.* 23(3/4), 457-486.
- Stankiewicz A., 2007. Identyfikacja spektrum relaksacji lepkosprężystych materiałów roślinnych. Rozprawa doktorska, Akademia Rolnicza w Lublinie.
- Tikhonov A.N., 1963. On solutions to ill-posed problems. *Reports of the Academy of Sciences of USSR*, 153, 49-52 (in Russian).
- Tikhonov A. N., Arsenin V. Y., 1977. *Solutions of Ill-Posed Problems*. Wiley, New York.
- Van Gestel T., Suykens J., Van Dooren P., De Moor B., 2001. Identification of stable models in subspace identification by using regularization. *IEEE Trans. Automat. Contr.*, 46, 1416-1420.
- Varah J. M., 1985. On fitting exponentials by nonlinear least squares. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 6 (1), 30-44.
- Varah J.M., 1990. Relative size of the Hessian terms in nonlinear parameter estimation, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* 11, 174-179.
- Zangwill W.I., 1974. Programowanie nieliniowe. WNT, Warszawa.
- Zapas L. J., Phillips J. C., 1971. Simple shearing flows in polyisobutylene solutions. *J. Res. Nat. Bur. Stds.*, 75A (1), 33-40.

ON ILL-POSED AND WELL-POSED PROBLEMS OF IDENTIFICATION
OF MATHEMATICAL MODELS OF VISCOELASTIC PLANT MATERIALS

Anna Stankiewicz

Department of Technical Science, University of Life Sciences
ul. Doświadczalna 50A, 20-280 Lublin
e-mail: anna.stankiewicz@up.lublin.pl

Abstract. The selection of an appropriate mathematical representation is of central importance in the analysis of a physical system. Often the choice of the respective model depends on essentially two criteria: the particular characteristics to be abstracted and, perhaps more importantly, our ability to specify the representation quantitatively. A complication for determining the standard material functions of viscoelastic plants, such as the Maxwell and Kelvin models or the relaxation and retardation spectra, is that these problems are undetermined and ill-conditioned. Due to the noise or truncation of the experimental data, many models may fit the relaxation modulus experimental data adequately, but small errors in the data may lead to large changes in the models determined. Four motivating examples are given. Thus the practical difficulty in the identification of these models is rooted in a theoretical difficulty. The mathematical difficulties can be overcome by the reduction of the set of admissible solutions or by the respective regularization of the original problem. The remedy is a subject of the two next papers.

Keywords: viscoelasticity, Maxwell model, relaxation spectrum, ill-posed problem