



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE TECNOLOGIA (CT)**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ESTRUTURAL E CONSTRUÇÃO CIVIL**  
**CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL**

**LEONARDO GONÇALVES RIBEIRO**

**OTIMIZAÇÃO SEQUENCIAL APROXIMADA DE ESTRUTURAS DE MATERIAL**  
**COM GRADAÇÃO FUNCIONAL**

**FORTALEZA**

**2019**

LEONARDO GONÇALVES RIBEIRO

OTIMIZAÇÃO SEQUENCIAL APROXIMADA DE ESTRUTURAS DE MATERIAL COM  
GRADAÇÃO FUNCIONAL

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Civil do Centro de Tecnologia (CT) da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Engenharia Civil.

Orientador: Prof. Dr. Evandro Parente Júnior

FORTALEZA

2019

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca Universitária  
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

- R369o Ribeiro, Leonardo Gonçalves.  
Otimização Sequencial Aproximada de Estruturas de Material com Gradação Funcional / Leonardo Gonçalves Ribeiro. – 2019.  
109 f. : il. color.
- Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Curso de Engenharia Civil, Fortaleza, 2019.  
Orientação: Prof. Dr. Evandro Parente Junior.
1. Materiais com Gradação Funcional. 2. Otimização Estrutural. 3. Modelos Substitutos. 4. Otimização Sequencial Aproximada. I. Título.

CDD 620

---

LEONARDO GONÇALVES RIBEIRO

OTIMIZAÇÃO SEQUENCIAL APROXIMADA DE ESTRUTURAS DE MATERIAL COM  
GRADAÇÃO FUNCIONAL

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Civil do Centro de Tecnologia (CT) da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Engenharia Civil.

Aprovada em: 28/11/2019

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Evandro Parente Júnior (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Antônio Macário Cartaxo de Melo  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Anselmo Ramalho Pitombeira Neto  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

À minha família, pela confiança depositada em mim, e por serem os meus maiores exemplos de vida.

## **AGRADECIMENTOS**

Dizem que somos uma média ponderada das pessoas que nos cercam.

A meus pais, Ricardo e Solange Ribeiro, e minha irmã, Ana Beatriz, pela confiança, dedicação e compreensão mesmo nos momentos em que eu estou tão absorto no meu mundo que esqueço de falar o quanto eu gosto deles.

À Carolina Trompieri, por me acompanhar nesse caminho que traçamos juntos. Que eu possa continuar aprendendo contigo por muito tempo ainda. Obrigado por tudo.

Aos colegas do Laboratório de Mecânica Computacional e Visualização da UFC, em especial à mestranda Marina Maia e ao doutorando Elias Barroso, pela amizade e pelos contínuos ensinamentos ofertados, que possibilitaram que esse Projeto de Graduação se consolidasse.

Ao professor Evandro Parente Junior, pela orientação impecável e a constante disponibilidade para retirar minhas dúvidas (quase diárias) sobre o tema.

Aos meus amigos Arthur, Bárbara, Lara, Racine, Sofia, Tallys, Thaís e Victor que andaram junto comigo durante quase toda a graduação. Obrigado pelos momentos, risadas e estudos antes de toda prova.

Ao CNPQ, UFC, DEECC e ao LMCV pelo aporte financeiro ofertado durante a graduação e ao apoio à pesquisa acadêmica brasileira.

## RESUMO

Os Materiais com Gradação Funcional representam uma classe de materiais compósitos que, devido à possibilidade de controlar de forma gradativa as frações de volume de cada material na estrutura, vêm recebendo cada vez mais atenção da literatura e são usados em diversas áreas, desde medicina à indústria aeroespacial. Dado esse crescente enfoque, a otimização de estruturas compostas por esse tipo de material é uma prática desejada, de forma que uma dada função objetivo seja otimizada, ao mesmo tempo que respeitando certas restrições. No entanto, raras são as propostas analíticas que estimam certos parâmetros para esse tipo de estrutura, e usualmente é necessário o uso de uma análise numérica possivelmente onerosa. Em otimização estrutural é usual que sejam utilizados métodos de otimização heurísticos que, por necessitarem de um alto número de análises de alta fidelidade, não combinam com esse tipo de avaliação de alto custo computacional, ocasionando em processos muito demorados. Com isso em mente, o presente trabalho propõe o uso de Modelo Substitutos, em específico as Funções de Base Radial, de forma a prover uma superfície estimada, de análise rápida, para tais funções de alto custo computacional. Esse modelo promove, a partir de uma amostra avaliada previamente, uma combinação linear de funções de *kernel* radialmente simétricas, cujos centros usualmente são localizados nos pontos amostrais. A partir dessa construção, estimativas rápidas da função modelada podem ser realizadas. Nesse trabalho, a função de base utilizada será a função Gaussiana. Ainda, um modelo substituto estático geralmente não é suficiente para promover uma boa estimativa na região do ótimo global da função. Assim, o presente trabalho fará uso da Otimização Sequencial Aproximada de forma a continuamente melhorar a estimativa do modelo para que se possa garantir a eficácia da abordagem. Nos resultados, alguns tipos diferentes de métodos de inserção de pontos são utilizados, assim como são realizadas análises de sensibilidade com diferentes métodos de definição do parâmetro da largura da função Gaussiana. Os resultados encontrados ao final do projeto são excelentes, e o processo é capaz de apresentar uma eficácia muito elevada ao mesmo tempo demonstrando uma acentuada diminuição no tempo gasto e no número de avaliações de alta fidelidade necessárias.

**Palavras-chave:** Materiais com Gradação Funcional. Otimização estrutural. Modelos Substitutos. Otimização Sequencial Aproximada

## ABSTRACT

Functionally Graded Materials (FGMs) are a class of composite materials that, due to the capability of gradually controlling the volume fraction of each material in the structure, have been receiving more and more attention in the last few years by the literature. FGMs applications can be found in a variety of areas, such as medicine and aerospace industry. Thus, the optimization of functionally graded structures is an area of great interest, especially to the design of engineering structures, where several constraints are typically considered to ensure stability and safety. However, there are few analytical formulations to estimate the structural response of these structures, leading to the usage of numerical methods. On the other hand, this may result in a high computational cost. In addition to that, in structural optimization, heuristic methods are usually used, in spite of its need of a high number of evaluations of the objective function and constraints. Thus, processes can become very time-consuming. With that in mind, this work proposes the use of Surrogate Models, specifically the Radial Basis Functions (RBFs), as a way to provide an approximate surface based on an easy and fast analysis. RBFs are built based on sampling points previously evaluated by the High Fidelity Model (HFM). With these data, this surrogate model uses a linear combination of radially symmetric kernel functions, whose centers are usually located in the sampling points. Then, the surrogate model can be used to predict the surface response. In this work, the basis functions are interpolated using the Gaussian function. In addition to that, static surrogate models are usually not good enough to provide a good prediction in regions close to the function's optimum. Thus, the Sequential Approximate Optimization will be used to continuously improve on the current surrogate model to ensure the effectiveness of the proposed approach. Finally, different methods for defining new points for the sample will be tested, as well as different methods for defining the width parameter for the Gaussian function. The results show excellent results, and the proposed approach is capable of showing great effectiveness while maintaining a sharp decrease in the time spent and on the number of high fidelity evaluations needed.

**Keywords:** Functionally Graded Materials. Structural optimization. Surrogate models. Sequential Approximate Optimization.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Possíveis abordagens para a gradação de volume de FGM . . . . .	20
Figura 2 – Gradação de volume dada pela <i>Power law function</i> . . . . .	21
Figura 3 – Gradação de volume por interpolação cúbica . . . . .	22
Figura 4 – Fluxograma relativo ao funcionamento do GA . . . . .	28
Figura 5 – Processo de manipulação das restrições laterais . . . . .	29
Figura 6 – Tipos de topologias . . . . .	30
Figura 7 – Fluxograma relativo ao funcionamento do PSO . . . . .	31
Figura 8 – Diferenças entre os projetos de DoE clássicos e atuais . . . . .	36
Figura 9 – Exemplo de Simples Amostragem Aleatória . . . . .	39
Figura 10 – Exemplo de Hipercubo Latino . . . . .	40
Figura 11 – Exemplo de Sequência de Hammersley . . . . .	41
Figura 12 – Exemplo de Sequência de Sobol . . . . .	42
Figura 13 – Superfícies exata e estimada para uma função bidimensional . . . . .	44
Figura 14 – Função Gaussiana para valores diferentes de $\sigma$ . . . . .	44
Figura 15 – Estimativas do modelo substituto com diferentes valores de $\sigma$ . . . . .	45
Figura 16 – Fluxograma da LOOCV . . . . .	48
Figura 17 – Fluxograma da $k$ -FCV . . . . .	49
Figura 18 – Inserção do melhor indivíduo . . . . .	55
Figura 19 – Inserção de novo ponto através da Função Densidade . . . . .	56
Figura 20 – Fluxograma explicativo do algoritmo proposto por Kitayama <i>et al.</i> (2010) . . . . .	57
Figura 21 – Melhoria da estimativa com a aplicação da abordagem de Kitayama . . . . .	57
Figura 22 – Comportamento da função erro de Gauss . . . . .	59
Figura 23 – Inserção de novo ponto através da Melhoria Esperada . . . . .	60
Figura 24 – Comportamento de $F(\mathbf{x})$ como definido por Tutum <i>et al.</i> (2014) . . . . .	61
Figura 25 – Fluxograma explicativo do algoritmo utilizando a Melhoria Esperada . . . . .	62
Figura 26 – Melhoria da estimativa com a maximização da EI . . . . .	62
Figura 27 – Melhoria da estimativa com a aplicação da abordagem WEI . . . . .	64
Figura 28 – Resultados obtidos para FT1 por diferentes abordagens SAO . . . . .	72
Figura 29 – Resultados obtidos para FT2 por diferentes abordagens SAO . . . . .	73
Figura 30 – Resultados obtidos para FT3 por diferentes abordagens SAO . . . . .	74
Figura 31 – Resultados obtidos para FT4 por diferentes abordagens SAO . . . . .	75

Figura 32 – Vaso de pressão cilíndrico . . . . .	78
Figura 33 – Resultados obtidos para FT5 por diferentes abordagens SAO . . . . .	81
Figura 34 – Resultados obtidos para FT6 por diferentes abordagens SAO . . . . .	82
Figura 35 – Resultados obtidos para FT7 por diferentes abordagens SAO . . . . .	83
Figura 36 – Malha utilizada para a análise do Problema 01 . . . . .	87
Figura 37 – Variação da fração de volume de cerâmica ao longo da espessura - Problema 01 . . . . .	88
Figura 38 – Resultados obtidos para o Problema 01 . . . . .	90
Figura 39 – Variação da fração de volume de cerâmica ao longo da espessura - Problema 02 . . . . .	92
Figura 40 – Resultados obtidos para o Problema 02 . . . . .	93
Figura 41 – Malha utilizada para a análise do Problema 03 . . . . .	95
Figura 42 – Variação da fração de volume de cerâmica ao longo da espessura - Problema 03 . . . . .	95
Figura 43 – Resultados obtidos para o Problema 03 . . . . .	97

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Apresentação das funções teste sem restrição utilizadas . . . . .	68
Tabela 2 – Métricas de erro obtidas para a FT1 . . . . .	70
Tabela 3 – Métricas de erro obtidas para a FT2 . . . . .	70
Tabela 4 – Métricas de erro obtidas para a FT3 . . . . .	71
Tabela 5 – Métricas de erro obtidas para a FT4 . . . . .	71
Tabela 6 – Apresentação das funções teste com restrição utilizadas . . . . .	77
Tabela 7 – Métricas de erro obtidas para a FT5 . . . . .	79
Tabela 8 – Métricas de erro obtidas para a FT6 . . . . .	80
Tabela 9 – Métricas de erro obtidas para a FT7 . . . . .	80
Tabela 10 – Materiais utilizados e suas respectivas propriedades . . . . .	84
Tabela 11 – Carga de flambagem para diferentes $N$ na placa quadrada de lado 2 m . . . .	84
Tabela 12 – Carga de flambagem para diferentes $N$ na placa quadrada de lado 10 m . . .	85
Tabela 13 – Frequência natural para diferentes $N$ e espessuras na placa quadrada de lado 0.5 m . . . . .	85
Tabela 14 – Frequência natural para diferentes $N$ na placa quadrada de lado 10 m . . . .	86
Tabela 15 – Resultados da otimização convencional para o Problema 01 . . . . .	87
Tabela 16 – Métricas de erro obtidas para o Problema 01 . . . . .	89
Tabela 17 – Resultados da otimização convencional para o Problema 02 . . . . .	91
Tabela 18 – Métricas de erro obtidas para o Problema 02 . . . . .	92
Tabela 19 – Resultados da otimização convencional para o Problema 03 . . . . .	95
Tabela 20 – Métricas de erro obtidas para o Problema 03 . . . . .	96

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<i>k</i> -FCV	<i>k-fold Cross-Validation</i> (Validação Cruzada em <i>k</i> Grupos)
BIOS	<i>Biologically Inspired Optimization System</i>
DoE	<i>Design of Experiments</i> (Projeto de Experimentos)
EI	<i>Expected Improvement</i> (Melhoria Esperada)
FAST	<i>Finite Analysis Tool</i>
FGM	<i>Functionally Graded Material</i> (Material com Gradação Funcional)
GA	<i>Genetic Algorithm</i> (Algoritmo Genético)
HSS	<i>Hammersley Sequence Sampling</i> (Sequência de Hammersley)
IGA	<i>Isogeometric Analysis</i> (Análise Isogeométrica)
ILHS	<i>Improved Latin Hypersquare</i> (Hipercubo Latino Melhorado)
LHS	<i>Latin Hypersquare</i> (Hipercubo Latino)
LMCV	Laboratório de Mecânica Computacional e Visualização
LOOCV	<i>Leave-One-Out Cross Validation</i> (Validação Cruzada sem Uma Amostra)
NRMSE	<i>Normalized Root Mean Squared Error</i> (Raiz do Erro Quadrático Médio Normalizado)
OLHS	<i>Optimized Latin Hypersquare</i> (Hipercubo Latino Otimizado)
OOP	<i>Object Oriented Programming</i> (Programação Orientada a Objetos)
PF	<i>Probability of Feasibility</i> (Probabilidade de Viabilidade)
PSO	<i>Particle Swarm Optimization</i> (Otimização por Nuvem de Partículas)
RBF	<i>Radial Basis Functions</i> (Função de Base Radial)
RMSE	<i>Root Mean Squared Error</i> (Raiz do Erro Quadrático Médio)
SAO	<i>Sequential Approximate Optimization</i> (Otimização Sequencial Aproximada)
SRS	<i>Simple Random Sampling</i> (Simples Amostragem Aleatória)
SSS	<i>Sobol Sequence Sampling</i> (Sequência de Sobol)
SVR	<i>Support Vector Regression</i> (Regressão de Vetor Suporte)
WEI	<i>Weighted Expected Improvement</i> (Melhoria Esperada Ponderada)

## SUMÁRIO

1	<b>INTRODUÇÃO</b>	14
1.1	<b>Objetivos</b>	16
1.2	<b>Organização do Texto</b>	17
2	<b>MATERIAIS COM GRADAÇÃO FUNCIONAL</b>	18
2.1	<b>Variação das frações de volume</b>	20
2.2	<b>Propriedades efetivas</b>	23
3	<b>ALGORITMOS HEURÍSTICOS DE OTIMIZAÇÃO</b>	25
3.1	<b>Algoritmo Genético</b>	26
3.2	<b>Otimização por Nuvem de Partículas</b>	27
4	<b>MODELOS SUBSTITUTOS</b>	32
4.1	<b>Técnicas de Amostragem</b>	35
4.1.1	<i>Simple Amostragem Aleatória</i>	38
4.1.2	<i>Hipercubo Latino</i>	39
4.1.3	<i>Sequência de Hammersley</i>	40
4.1.4	<i>Sequência de Sobol</i>	41
4.2	<b>Funções de Base Radial</b>	42
4.2.1	<i>Cálculo do vetor de larguras</i>	44
4.2.2	<i>Cálculo do vetor de pesos</i>	50
5	<b>OTIMIZAÇÃO SEQUENCIAL APROXIMADA</b>	51
5.1	<b>Critérios de inserção de pontos</b>	54
5.1.1	<i>Kitayama et al. (2010)</i>	54
5.1.2	<i>Melhoria Esperada</i>	57
5.1.3	<i>Melhoria Esperada Ponderada</i>	62
6	<b>METODOLOGIA</b>	65
7	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	68
7.1	<b>Funções Teste</b>	68
7.1.1	<i>Problemas sem restrição</i>	68
7.1.2	<i>Problemas com restrição</i>	76
7.2	<b>Otimização de FGM</b>	84
7.2.1	<i>Maximização da carga de flambagem</i>	86

7.2.2	<i>Maximização da frequência natural</i> . . . . .	89
7.2.3	<i>Maximização da carga de flambagem, com uso da frequência natural como restrição</i> . . . . .	94
8	<b>CONCLUSÃO</b> . . . . .	99
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	102

## 1 INTRODUÇÃO

Materiais compósitos são aqueles os quais dois ou mais materiais atuam em conjunto de forma a aproveitar características e vantagens de cada um. Assim, com a combinação destes, busca-se criar um novo material, com propriedades melhoradas em relação a seus constituintes (JONES, 1999). O caso mais conhecido é o próprio concreto armado, no qual aproveita-se, em conjunto, a ótima resistência à compressão do concreto com a alta resistência à tração do aço. A viabilidade dessa prática decorre ainda da similaridade entre algumas propriedades desses materiais, como o coeficiente de dilatação, assim como da capacidade de promover a aderência entre os dois materiais de forma a possibilitar a transferência de esforços.

Os Materiais com Gradação Funcional (FGM, *Functionally Graded Materials*) representam uma classe de materiais compósitos que vem recebendo atenção devido ao alto controle que o projetista possui em relação às propriedades desejadas. A gradação permite que as propriedades desses materiais possam ser modificadas de forma contínua através do controle das frações de volume de cada material em cada seção do elemento estrutural, o que elimina problemas presentes na interface entre duas lâminas, muito comuns em compósitos laminados.

Segundo Shen (2009), a capacidade dos FGM trabalharem bem sob altíssimas temperaturas é inigualável quando comparados com os materiais tradicionais. Graças a essas propriedades, essa classe de materiais é frequentemente aplicada como solução estrutural em usos que variam desde a indústria aeroespacial à medicina (CHENG *et al.*, 2018; NIKBAKHT *et al.*, 2019). Mesmo assim, Udupa *et al.* (2014) comentam que, dentre as desvantagens no uso do material, estão o ainda alto custo de produção e o baixo número de pesquisas na área como um todo.

Introduzidos na década de 1980 por um grupo de cientistas japoneses, somente com o avanço dos processadores e da tecnologia estes elementos voltaram a ser estudados e, desde então, vêm recebendo atenção crescente de pesquisadores na área (NABIAN; AHMADIAN, 2011; KOU *et al.*, 2012; LOJA, 2014; TAATI; SINA, 2018). A escassez de soluções analíticas simplificadas representou um empecilho computacional por muito tempo, visto que usualmente se faz necessária a aplicação de modelos de alta fidelidade, como o Método dos Elementos Finitos, que são complexos e demandam um forte poder de processamento.

O presente trabalho foca na otimização de elementos estruturais compostos por esse tipo de material. Esta será realizada por meio de algoritmos heurísticos, como o Algoritmo Genético (GA, *Genetic Algorithm*) e a Otimização por Nuvem de Partículas (PSO, *Particle*

*Swarm Optimization*). Esses métodos, enquanto de fácil uso e entendimento devido às analogias com a natureza, se mostram ferramentas muito poderosas para alcançar ótimos globais com uma alta confiabilidade.

Um empecilho deste tipo de algoritmo é justamente o grande número de iterações necessárias que, somado ao alto custo computacional das análises de alta fidelidade promovidas, inviabilizariam a otimização dos FGM. Para contornar esse problema, o presente trabalho utilizará uma técnica conhecida como Modelagem Substituta. No contexto proposto, essa abordagem estatística faz uso de um conjunto de dados amostrais, obtidos através de avaliações da função real em pontos pré-definidos, de forma a gerar uma superfície que estime a superfície real da função. A construção do modelo é promovida a partir da estimativa dos parâmetros necessários, seguido pelo treinamento do mesmo. Construído o modelo, esse está pronto para ser avaliado, provendo estimativas com relativa confiabilidade e acarretando em um custo computacional muito inferior.

A amostra inicial é usualmente definida através do espalhamento de pontos no espaço de projeto por meio do Projeto de Experimentos (DoE, *Design of Experiments*). Este é utilizado de forma a definir que dados devem ser coletados para gerar tanto uma maior precisão estatística quanto um menor custo com experimentos. Existem várias técnicas com essa finalidade, e os pontos devem ser definidos de forma que o modelo represente de forma adequada o efeito de cada variável na função objetivo a ser aproximada (FORRESTER *et al.*, 2008). No entanto, como ainda não se possui nenhum conhecimento a respeito de áreas de interesse ou do comportamento da função, uma distribuição uniforme muitas vezes não é suficiente para promover uma boa predição (SOBESTER *et al.*, 2005). Dessa forma, a superfície de resposta será aprimorada a cada geração do algoritmo em uma abordagem conhecida como Otimização Sequencial Aproximada (SAO, *Sequential Approximate Optimization*).

Segundo Jones *et al.* (1998), os modelos substitutos buscam proporcionar uma aproximação rápida e fiel, reduzindo difíceis e custosos procedimentos a uma formulação mais simples, algumas vezes com alguns parâmetros de entrada. Os mesmos autores comentam ainda que essa metodologia é capaz de identificar as variáveis mais importantes do problema, além de promover um melhor entendimento do espaço de projeto. Exemplos de modelos substitutos já largamente testados e corroborados pela literatura são o Kriging (SUN *et al.*, 2013), a Regressão de Vetor Suporte (SVR, *Support Vector Regression*) (YAN *et al.*, 2019) e as Funções de Base Radial (RBF, *Radial Basis Functions*) (KITAYAMA; YAMAZAKI, 2011). Em trabalhos

relativos à comparação destes, é comum o comentário sobre a maior simplicidade e facilidade de implementação do RBF (WANG; SHAN, 2007; FORRESTER *et al.*, 2008). Ainda assim, a capacidade deste promover boas estimativas é atestada, especialmente em problemas de maior ordem (SIMPSON *et al.*, 2002; GAN; GU, 2018).

Desse modo, o presente trabalho focará no uso do modelo RBF com a finalidade de facilitar e viabilizar a otimização de FGM por algoritmos heurísticos. Além disso, diferentes metodologias relativas à inserção de novos pontos na amostra serão estudadas, de forma a comparar a eficiência e eficácia de cada uma.

## 1.1 Objetivos

Este trabalho possui como objetivo o estudo e análise dos FGM com enfoque na otimização dos mesmos com uso de modelos substitutos, comparando diversas metodologias presentes na literatura a fim de facilitar a escolha da abordagem correta para cada tipo de problema.

Com esse fim, os seguintes objetivos específicos serão admitidos:

- (a) Apresentar as formulações propostas para otimização de estruturas de FGM;
- (b) Definir e apresentar os algoritmos heurísticos a serem utilizados;
- (c) Apresentar e discorrer sobre as particularidades do modelo substituto escolhido, o RBF, e conhecer quais as melhores técnicas para determinação de parâmetros do modelo;
- (d) Apresentar a abordagem SAO e as diferentes metodologias de inserção de pontos, estudando qual destas melhor lidam com os problemas a serem implementados;
- (e) Realizar comparações entre as diversas metodologias aplicadas relativas à abordagem utilizada para promover a inserção de novos pontos na amostra, assim como em relação à abordagem utilizada para definição de parâmetros do modelo utilizado;
- (f) Apresentar problemas envolvendo FGM a serem otimizados e discutir resultados obtidos com as metodologias propostas, realizando comparações objetivas;
- (g) Realizar comparações entre otimizações com e sem o uso de modelos substitutos em relação à sua precisão e custo computacional.

## 1.2 Organização do Texto

O projeto será organizado da seguinte forma: no Capítulo 2 os FGM são melhor explanados, sendo apontadas suas particularidades. No Capítulo 3 os algoritmos heurísticos utilizados no projeto são definidos e abordados, diferenciando cada um deles. No Capítulo 4 os modelos substitutos recebem o enfoque, e o RBF é apresentado e detalhado. No Capítulo 5 é feita uma discussão a cerca da abordagem SAO, exemplificando diferentes metodologias e atestando a melhoria alcançada com o uso da abordagem. Por fim, nos Capítulos 7 e 8 são apresentados os exemplos a serem utilizados juntamente com os resultados e a conclusão do projeto, respectivamente.

## 2 MATERIAIS COM GRADAÇÃO FUNCIONAL

Os Materiais com Gradação Funcional (FGM) foram desenvolvidos por um grupo de cientistas japoneses com a finalidade de proporcionar uma proteção contra as altíssimas cargas de temperatura sofridas por aeronaves espaciais (HUSSEIN; MULANI, 2017a). Devido a sua gradação, essa classe de materiais pode combinar benefícios de diferentes materiais, provendo uma maior compatibilidade entre eles e acomodação às diferentes condições (KOU *et al.*, 2012). Udupa *et al.* (2014) comentam que esse tipo de material consegue conciliar propriedades como maior resistência e menor condutividade térmica em um mesmo componente. Ainda, os FGM são muito eficazes por não possuírem os mesmos problemas de interface apresentados no caso dos compósitos laminados (THAI; KIM, 2015).

Diversos trabalhos atestam a eficácia promovida por esse tipo de material, especialmente em problemas nos quais a variação de temperatura se apresenta de forma mais relevante. Shen (2009), Choi e Cho (2008) apresentam uma pesquisa feita com cascas cilíndricas, comprovando a diminuição da tensão causada pelo acréscimo de temperatura em projetos que utilizaram FGM. Jin *et al.* (2003) realizam um estudo comparando FGM com diferentes frações de volume de cada componente, inclusive em relação a projetos feitos com uso de somente um dos materiais. Percebem-se os benefícios no uso da técnica, apontando, por exemplo, como a junção de materiais como cerâmica e metal pode ser proveitosa devido ao aproveitamento da alta resistência térmica de materiais cerâmicos e da alta resistência mecânica de metais.

Já Cheng *et al.* (2018) apresentam a otimização, com uso de um modelo de Kriging, de um projeto de implante dentário composto por FGM com vários componentes, estudando a compatibilização da peça de Zircônio com a estrutura óssea e encontrando resultados muito satisfatórios. Loja *et al.* (2015) também aplicam um modelo de Kriging a análises de FGM, mas dessa vez relativo a vigas com gradação em "sanduíche". Os autores comentam que os resultados encontrados estão de acordo com o esperado, e o uso do modelo substituto proporcionou uma boa performance e eficiência ao processo de otimização.

Nikbakht *et al.* (2019) apontam alguns tipos diferentes de estruturas de FGM que a literatura comumente utiliza. Entre eles estão, por exemplo, as vigas (NGUYEN; LEE, 2017), as placas (SHEN; WANG, 2012; JHA *et al.*, 2013) e as cascas (CHOI; CHO, 2008) graduadas funcionalmente. Ainda, uma etapa importante do processo de análise é a escolha de como a gradação se dará ao longo do material. Esta geralmente se dá no sentido axial (ŞİMŞEK, 2015), longitudinal (AKGOZ; CIVALEK, 2013) ou em formato de "sanduíche" (SHI; SHIMODA, 2015).

Os FGM também fornecem uma metodologia interessante de trabalhar com a porosidade do material (JAMSHIDI; ARGHAVANI, 2017), característica que possibilita o uso de estruturas leves e de alta resistência.

O presente trabalho focará na otimização de placas formadas por FGMs. Nesse contexto, Correia *et al.* (2019) promovem uma otimização multi-objetivo de elementos de placa, graduados funcionalmente, com a finalidade de minimizar custo, massa, o critério de falha de Tsai-Hill e maximizar a frequência fundamental. Os autores utilizam cargas termais na análise, considerando como variáveis de projeto a variação de volume de cada material ao longo do volume e a espessura da estrutura. Moita *et al.* (2018) promovem um estudo similar, mas dessa vez com uso de cargas estáticas, axial e transversalmente à placa.

Wang *et al.* (2019) implementam uma metodologia de otimização multi-objetivo de placas de FGM utilizando um algoritmo PSO modificado com a finalidade de otimizar a massa e a frequência fundamental. As análises são promovidas através de Análise Isogeométrica (IGA, *Isogeometric Analysis*), e a variação de volume de cada material que compõe o FGM é regulada através de uma *B-Spline*, formulação que proporciona maior flexibilidade. A abordagem adotada permite que os autores implementem exemplos complexos, como placas redondas furadas ou engrenagens.

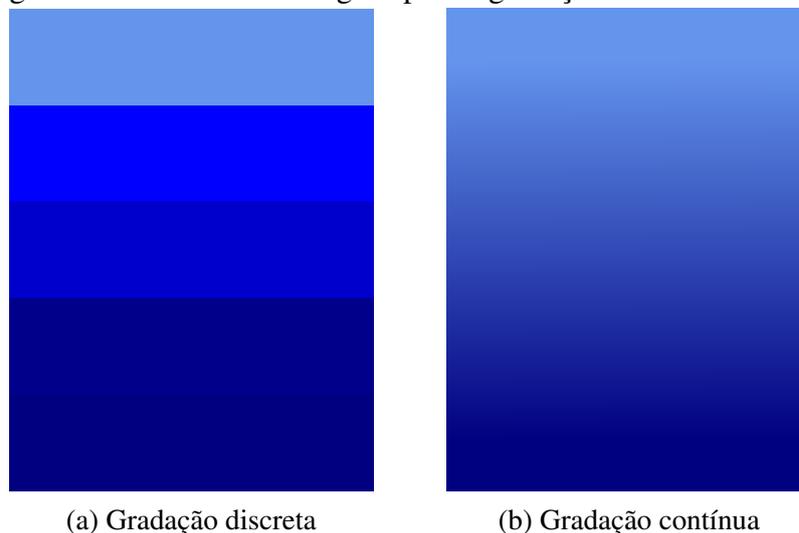
Do *et al.* (2019) utilizam uma *Deep Neural Network* (DNN) de forma a prover mais eficiência ao processo de análise utilizando IGA. Assim, os autores promovem otimizações tanto da carga de flambagem quanto da frequência fundamental em diferentes disposições de pontos de controle, utilizados para formar as *B-Splines*. São encontrados erros muito pequenos quando comparados às análises de alta fidelidade, enquanto que a um tempo muito menor.

Em relação aos aspectos práticos, Naebe e Shirvanimoghaddam (2016) promovem uma extensa revisão sobre as formas de se manufacturar diferentes tipos de FGM, discutindo sobre abordagens mais utilizadas ou promissoras. Os autores comentam ainda sobre as diferentes junções de materiais empregadas nesses processos. Enquanto que compósitos feitos por metal e cerâmica são os mais comuns, há uma variedade enorme de possibilidades, provendo flexibilidade ao uso do material. No caso de placas de FGM, composições usualmente utilizadas são Nitreto de Silício e Aço Inoxidável ( $\text{Si}_3\text{N}_4$  e SUS304), Óxido de Alumínio e Aço Inoxidável ( $\text{Al}_2\text{O}_3$  e SUS304), e Alumínio e Óxido de Alumínio (Al e  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ). As subseções seguintes tratarão de diferentes abordagens utilizadas pela literatura com a finalidade de tratar certas particularidades desse tipo de material.

## 2.1 Variação das frações de volume

O projeto de FGM se inicia com a definição de como a fração de volume irá variar ao longo do material (BIRMAN, 2014). Em relação a isso, Shen (2009) aponta que, para esses materiais, existem duas propostas principais. A primeira trabalha com uma variação de volume dita discreta, de forma que cada seção do material possua um percentual constante de cada elemento. Assim, o material se assemelha a um laminado no qual cada lâmina possui uma fração de volume fixa. A segunda promove uma variação de volume contínua, na qual a gradação do material se torna similar a um gradiente, com propriedades variando suavemente ao longo do material. A Figura 1 exemplifica essas propostas.

Figura 1 – Possíveis abordagens para a gradação de volume de FGM



Fonte: elaborado pelo autor

O mesmo autor comenta ainda que esse último tipo de gradação pode ser definido por:

$$V_{01} = V_b + (V_t - V_b) \left( \frac{2Z + h}{2h} \right)^N \quad (2.1a)$$

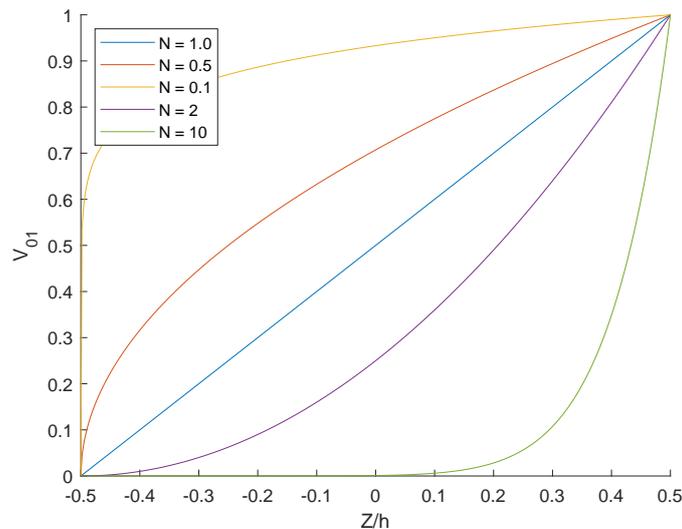
$$V_{02} = 1 - V_{01} \quad (2.1b)$$

em que  $V_{01}$  é a fração de volume do Material 01 na coordenada  $Z$  (na direção da espessura), variando de  $-h/2$  até  $h/2$ ,  $h$  é a espessura do objeto na qual se dará a gradação e  $N$  é um expoente controlado pelo usuário relativo à variação de volume.  $V_b$  e  $V_t$  representam frações fixas de volume existentes na base e no topo, respectivamente. No caso particular em que  $V_b = 0$  e  $V_t = 1$ , essa equação se torna a *Power law function* (MOITA *et al.*, 2018; CORREIA *et al.*,

2018), ou Lei da Potência, muito conhecida na literatura. De forma complementar, em FGMs compostos por dois materiais, a fração de volume do Material 02 é então obtida simplesmente pela Equação (2.1b).

Nessa formulação, a variável de otimização mais importante seria o expoente  $N$ . A Figura 2 apresenta como a gradação de volume ocorre para o Material 01 dependendo da escolha desta variável.

Figura 2 – Gradação de volume dada pela *Power law function*



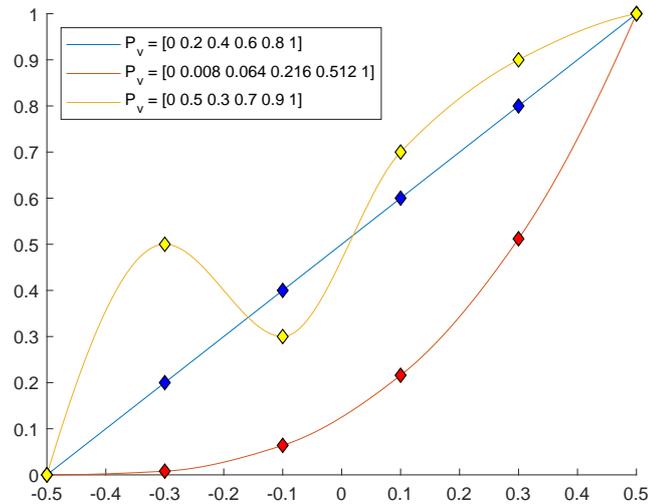
Fonte: elaborado pelo autor

Outra formulação usualmente utilizada na literatura é conhecida como interpolação cúbica peça por peça (NABIAN; AHMADIAN, 2011; ASHJARI; KHOSHRAVAN, 2014; NGUYEN; LEE, 2017), que utiliza pontos já definidos de frações de volume, normalmente igualmente espaçados, para gerar uma curva que promova a interpolação destes pontos. Fica clara a maior flexibilidade dessa metodologia em comparação com a anterior.

Assim, nesse caso, as variáveis seriam cada uma das frações de volume, localizadas em certos pontos de controle, definidas previamente. Essa formulação, embora forneça um maior controle da graduação e do projeto final por parte do usuário, possui um número bem maior de variáveis, aumentando exponencialmente o número de projetos possíveis. A Figura 3 apresenta como a graduação de volume ocorre para o Material 01 dependendo de alguns conjuntos de frações de volume  $P_v$  definidos. Estes estão marcados sobre cada uma das curvas e são apontados na legenda.

Outra abordagem interessante que também utiliza pontos de controle é o uso de *B-Splines* para aproximar as frações de volume através do posicionamento de pontos de controle

Figura 3 – Gradação de volume por interpolação cúbica



Fonte: elaborado pelo autor

ao longo da espessura de uma placa. Essa abordagem é utilizada por alguns autores (DO *et al.*, 2019; WANG *et al.*, 2019) e, diferente da interpolação cúbica, possui a vantagem de gerar curvas com aspectos bem suaves.

Hussein e Mulani (2017a) apresentam uma formulação para FGMs que possuem variação das frações em duas direções em que a função que representa a variação na fração de volume possui ordem  $i$ , definida pelo usuário, de forma que os coeficientes da função são as variáveis de projeto. Assim, com a variação ocorrendo nos eixos referentes ao plano da placa ( $x$  e  $y$ ), o número de variáveis de projeto é igual a  $2i$ , supondo que a ordem da função é igual para os dois eixos. Em alguns de seus trabalhos, os autores comparam a abordagem em problemas diferentes, atestando uma diminuição considerável do custo e do peso em projetos otimizados (HUSSEIN; MULANI, 2017a; HUSSEIN; MULANI, 2017b; HUSSEIN; MULANI, 2018). Os mesmos apontam ainda que essa abordagem promove uma maior flexibilidade, ainda que utilize um número menor de variáveis.

Além destas, a literatura utiliza outras abordagens (MEDEIROS JR. *et al.*, 2019; NIKBAKHT *et al.*, 2019), como a Sigmóide e a Exponencial, respectivamente representadas por:

$$V_{01} = \begin{cases} V_b + (V_t - V_b) \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{h-2z}{h}\right)^N\right), & 0 \leq z \leq \frac{h}{2} \\ V_b + (V_t - V_b) \left(\frac{1}{2} \left(\frac{h-2z}{h}\right)^N\right), & -\frac{h}{2} \leq z \leq 0 \end{cases} \quad (2.2a)$$

$$V_{01} = V_t \exp \left( \ln \left( \frac{V_t}{V_b} \right) \left( \frac{2Z+h}{2h} \right)^N \right) \quad (2.2b)$$

Algumas são ainda promovidas de forma a tratar de FGMs com alguma característica específica. Por exemplo, Loja (2014) apresenta uma formulação própria para gradações sanduíche.

## 2.2 Propriedades efetivas

Outro aspecto importante nos FGMs é a metodologia que será utilizada a fim de caracterizar as propriedades do material. Nesse escopo, a consideração do efeito da temperatura sobre cada propriedade é importante, visto que os materiais muitas vezes são utilizados em condições de alta temperatura (CORREIA *et al.*, 2019). Assim, para estimar esses valores para diferentes temperaturas  $T$  em Kelvin, utiliza-se (TOULOUKIAN, 1974):

$$P_j = P_0 (P_{-1}T^{-1} + 1 + P_1T + P_2T^2 + P_3T^3) \quad (2.3)$$

na qual os coeficientes  $P$  dependem do material e de qual propriedade se quer estimar, como o Módulo de Elasticidade ( $E$ ), o Coeficiente de Poisson ( $\nu$ ) ou a densidade ( $\rho$ ).

Além disso, muitas vezes é necessário definir como as propriedades conjuntas serão estimadas, com a finalidade aplicar formulações gerais. Essa prática é chamada de homogeneização. A mais utilizada pela literatura é o Modelo de Voigt, ou "Regra das Misturas" (*Rule of Mixtures*) (ROQUE; MARTINS, 2015; NGUYEN; LEE, 2017). Este é também o modelo mais simples, e é dado por uma simples média ponderada entre as propriedades de cada componente, como apontado em:

$$P_f = \sum_{j=1}^{N_c} P_j V_j \quad (2.4)$$

Outra proposta utilizada é o Modelo de Mori-Tanaka, que possui uma formulação mais complexa. Segundo Shen (2009), a aplicação desta, para FGMs, é feita em regiões da microestrutura que possuem uma matriz contínua bem definida composta por material particulado, onde a proposta fornece uma estimativa precisa das propriedades. Nesse tipo de material, no

caso do Módulo Volumétrico  $K(z)$  e o Módulo de Cisalhamento  $G(z)$ , o cálculo das propriedades efetivas pode ser feito por:

$$K(z) = K_m + \frac{V_c}{\frac{1}{K_c - K_m} + \frac{V_m}{K_m + \frac{4G_m}{3}}} \quad (2.5a)$$

$$G(z) = G_m + \frac{V_c}{\frac{1}{G_c - G_m} + \frac{V_m}{G_m + f_m}} \quad (2.5b)$$

em que  $K_m$  e  $G_m$  se referem aos parâmetros para o metal considerado, e o parâmetro  $f_m$  pode ser calculado por:

$$f_m = \frac{G_m(9K_m + 8G_m)}{6(K_m + 2G_m)} \quad (2.6)$$

Com base nesses, pode-se então estimar o Módulo de Elasticidade ( $E$ ) e o Coeficiente de Poisson ( $\nu$ ) por:

$$E(z) = \frac{9K(z)G(z)}{3K(z) + G(z)} \quad (2.7a)$$

$$\nu(z) = \frac{3K(z) - 2G(z)}{2(3K(z) + G(z))} \quad (2.7b)$$

Shen e Wang (2012) apresentam uma comparação entre estas duas formulações para uma análise de vibração de placas compostas por FGM, constatando uma diferença muito pequena e indicando o uso da metodologia mais simples, o Modelo de Voigt. Contrapondo esse estudo, Medeiros Jr. *et al.* (2019) apresentam uma comparação entre os dois modelos para uma análise de cilindros de parede espessa, atestando altas discrepâncias no uso da Regra das Misturas, desaconselhando o uso desta.

Um dos objetivos do projeto é entender qual formulação deve ser utilizada para representar os FGM. Esta será escolhida com base em características do problema a ser utilizado e em análises quantitativas e qualitativas dos resultados encontrados.

### 3 ALGORITMOS HEURÍSTICOS DE OTIMIZAÇÃO

Por muito tempo, engenheiros buscavam simplesmente um projeto que atendesse a todas as restrições estabelecidas e às necessidades do usuário. No entanto, com o avanço da tecnologia presente nos computadores, a criação de projetos otimizados começou a ser possível, se tornando um requisito da excelência.

A otimização de estruturas deve buscar encontrar o melhor resultado de uma determinada operação, ao mesmo tempo que satisfazendo certas restrições (HAFTKA; GÜRDAL, 1992). Este é atingido pela minimização ou maximização de uma ou mais funções objetivo. Em trabalhos que tratam da otimização FGM, funções objetivo muito utilizadas são, por exemplo, a maximização da frequência fundamental, da tensão admissível, da carga de flambagem ou a minimização do peso e do custo. Assim, usualmente é necessária a aplicação de análises estáticas, de vibração ou de estabilidade (CORREIA *et al.*, 2019).

Ainda, um algoritmo de otimização deve ser de fácil uso e implementação, se mantendo confiável e com alto poder de processamento (PRICE *et al.*, 2005). Existe uma variedade de algoritmos de otimização que podem atender a esses requisitos. Arora (2017) subdivide esses em quatro tipos de métodos: os baseados em derivadas, os de busca direta, os "livres" de derivadas e os métodos heurísticos.

Os métodos heurísticos, ou bio-inspirados, são comumente adotados para os problemas presentes na área de engenharia estrutural devido a sua facilidade de uso e implementação, mantendo ainda uma alta eficácia devido a sua capacidade de conseguirem escapar de mínimos locais. Além disso, o grande benefício destes algoritmos é que eles não necessitam que as funções sejam contínuas ou diferenciáveis, sendo somente necessário que a função objetivo possa ser avaliada ao longo de todo espaço de projeto (ARORA, 2017). No presente trabalho essa metodologia será escolhida para realizar as otimizações, como já apontado.

Existem dois tipos principais de algoritmos heurísticos: os de base evolutiva e os baseados na chamada *swarm intelligence*, ou inteligência de enxame (ARORA, 2017). Os primeiros se referem aos algoritmos que tentam retratar a Teoria Evolucionista de Darwin, possuindo operadores similares à recombinação ou mutação (PRICE *et al.*, 2005). Um bom exemplo desta classe são os Algoritmos Genéticos (GA). Já os algoritmos baseados na inteligência de enxame tentam retratar o comportamento de animais na busca por suprimentos, de forma geral. Exemplo deste é a Otimização por Nuvem de Partículas (PSO).

Outra característica importante da maioria dos problemas existentes na engenharia

civil é a existência de restrições. Em engenharia estrutural, não é desejável um projeto que não suporte determinada tensão admissível ou que promova deslocamentos maiores que os máximos, por exemplo. No entanto, alguns desses projetos inadequados podem possuir variáveis importantes para a otimização e não é interessante que estas sejam simplesmente descartadas. Assim, o presente trabalho fará uso de métodos de penalidade (HAFTKA; GÜRDAL, 1992), nos quais as restrições são substituídas por fatores de penalidade. Com essa abordagem, o problema será lido pelo algoritmo como um problema sem restrições. Essas penalidades devem ser altas o suficiente para que possam, indiretamente, inviabilizar um projeto que não seja interessante, sem descartá-lo de fato.

A formulação comum para problemas de otimização é demonstrada por (HAFTKA; GÜRDAL, 1992):

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & f(x) \\ \text{de forma que} \quad & g_j(x) \geq 0, \quad j = 1, \dots, n_g \\ & h_k(x) = 0, \quad k = 1, \dots, n_h \end{aligned} \tag{3.1}$$

em que  $f(x)$  representa a função objetivo, enquanto  $g_j(x)$  e  $h_k(x)$  representam as restrições presentes.

O presente trabalho fará uso desses métodos heurísticos para promover as otimizações necessárias em ocasiões diferentes. Alguns dos tipos mais utilizados serão explanados nas subseções a seguir.

### 3.1 Algoritmo Genético

O Algoritmo Genético (GA) é um dos mais populares e difundidos métodos de otimização bio-inspirada. Este se apresenta como uma alternativa poderosa e de fácil aplicação, gerando excelentes resultados em problemas de difícil otimização por metodologias usuais (GEN; CHENG, 2000; KRAMER, 2017). Por representar uma metodologia estocástica, o processo de otimização pode sempre resultar em projetos diferentes, mesmo que utilizando as mesmas condições iniciais (ARORA, 2017). Devido a capacidade de trabalhar com os mais variados tipos de funções, desde que a avaliação destas seja possível dentro do espaço de projeto, o GA é usualmente aplicado em vários problemas de otimização estrutural (KOGISO *et al.*, 1994; TANIGAWA, 2000; BALREIRA, 2018).

Sendo uma metodologia de base evolutiva, o GA possui fortes ligações e analogias

com a Teoria Evolutiva de Darwin, a partir de sua conhecida publicação *On the Origin of Species* (KRAMER, 2017). Assim, a abordagem possui operadores como seleção, cruzamento e mutação de forma a continuamente evoluir os indivíduos de uma determinada população. Price *et al.* (2005) comenta que, devido ao caráter recombinatório de seus operadores, o GA é um algoritmo que geralmente funciona melhor para variáveis discretas.

De forma simples, o processo de otimização se inicia com a geração prévia de  $N$  indivíduos aleatórios, distribuídos ao longo do espaço de projeto, que são avaliados logo em seguida. Com isso, é selecionada uma parcela dos indivíduos que farão parte da próxima geração, assim como os que irão compor a *mating pool*, ou o grupo de cruzamento. Usualmente, essa seleção é promovida através da metodologia de *Ranking*, em que indivíduos melhores possuem uma maior chance de serem selecionados.

Esse grupo representa vários indivíduos "pais" que, a partir da aplicação do operador de cruzamento, irão gerar indivíduos "filhos", cujos genes, ou variáveis, são uma combinação dos paternos. Essa combinação usualmente ocorre de duas formas: por recombinação linear das variáveis ou da maneira clássica, na qual existe uma chance de o filho herdar a variável de um dos dois pais.

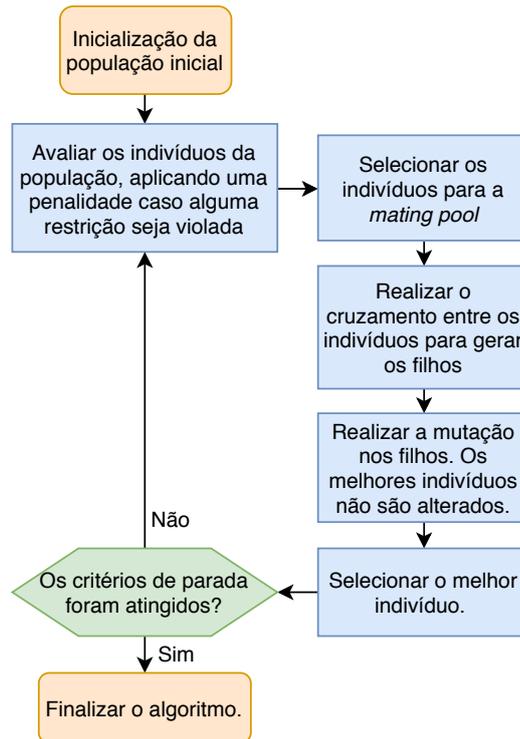
Por fim, é aplicado o operador de mutação o qual estabelece uma probabilidade de alterar algumas variáveis de uma parcela da população de forma a prover uma maior busca global ao algoritmo. Após a aplicação desses operadores, os "filhos" são avaliados, dando início a próxima geração e reiniciando a sequência de operadores. O algoritmo deve parar quando um critério de parada for atingido, que pode ser simplesmente um número máximo de gerações.

A Figura 4 apresenta um fluxograma de forma a tornar mais clara a sequência de funcionamento da metodologia.

### **3.2 Otimização por Nuvem de Partículas**

A Otimização por Nuvem de Partículas (PSO) é uma metodologia heurística muito conhecida que possui o propósito de otimizar, de forma eficaz, funções não-lineares e contínuas (KENNEDY; EBERHART, 1995; ASHJARI; KHOSHRAVAN, 2014). Inspirados na modelagem matemática do comportamento apresentado por enxames de animais, Kennedy e Eberhart (1995) propuseram a metodologia, apontando que a abordagem, por conter somente operadores matemáticos primitivos, se traduz como uma alternativa poderosa tanto em termos de memória computacional quanto de velocidade.

Figura 4 – Fluxograma relativo ao funcionamento do GA



Fonte: Adaptado de Barroso (2015)

Assim, ao longo dos anos, a PSO vem sendo aplicada a uma variedade de problemas nas áreas de otimização estrutural e mecânica (ARORA, 2017). Devido ao grande número de trabalhos na área, alterações foram feitas em relação à proposta inicial de Kennedy e Eberhart (1995) de forma a realizar melhorias no algoritmo (BRATTON; KENNEDY, 2007). A versão do algoritmo a ser utilizada e descrita a seguir deriva da versão utilizada por Barroso *et al.* (2016).

O algoritmo trata o espaço de projeto como uma região ao longo da qual um número  $N$  de indivíduos procurará por alimento. O vetor de variáveis é entendido com sendo a posição da partícula  $i$  nessa região, e este é inicialmente gerado de forma aleatória. Cada um destes é avaliado pela função objetivo, de forma que os melhores projetos, ou, de forma análoga, os indivíduos mais próximos das fontes de alimento, sejam definidos.

Com isso, as partículas começam a se movimentar, de forma que estas tendem a se aproximar dos projetos mais bem avaliados em cada geração. Esse movimento depende tanto da experiência cognitiva da partícula quanto da interação entre as partículas do enxame (ASHJARI; KHOSHRAVAN, 2014). A distância percorrida pela partícula  $i$ , de uma geração para a outra, é definida pela velocidade, atualizada conforme:

$$\mathbf{v}^{(i)} = w\mathbf{v}^{(i)} + c_1r_1(\mathbf{x}_p^{(i)} - \mathbf{x}^{(i)}) + c_2r_2(\mathbf{x}_g^{(i)} - \mathbf{x}^{(i)}) \quad (3.2)$$

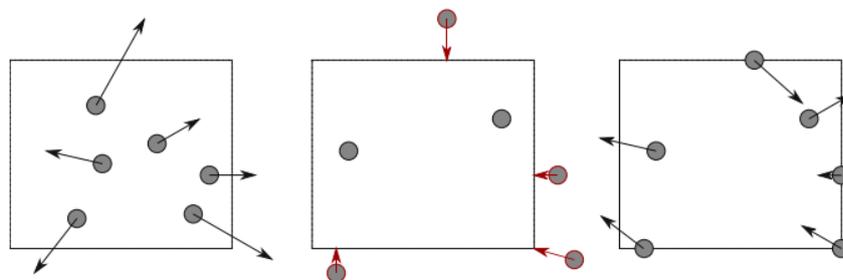
em que  $w$  é a inércia da partícula,  $r_1$  e  $r_2$  são números aleatórios entre 0 e 1,  $c_1$  e  $c_2$  são, respectivamente, o fator cognitivo e social,  $\mathbf{x}_p^{(i)}$  é representada a melhor posição da partícula  $i$  durante o processo e  $\mathbf{x}_g^{(i)}$  representa a melhor posição na vizinhança da partícula  $\mathbf{x}^{(i)}$ . A nova posição da partícula é então definida por:

$$\mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{x}^{(i)} + \mathbf{v}^{(i)} \quad (3.3)$$

Na Equação (3.2), o primeiro termo se refere ao movimento atual. Assim, a inércia  $w$  representaria o impacto que a velocidade anterior da partícula afetará a atual. Essa variável possui certa influência em relação à exploração do algoritmo: enquanto valores baixos favorecem a exploração local, valores altos estimulam a exploração global. O segundo termo representa a influência da memória da partícula  $i$ , de forma que o parâmetro  $c_1$  indica a confiança que a partícula possui em relação à sua experiência. Por fim, o último termo representa a influência da vizinhança dessa partícula  $i$ , no qual o parâmetro  $c_2$  indica a confiança da partícula em relação à sua vizinhança (BRATTON; KENNEDY, 2007). Kennedy e Eberhart (1995) apontam que decorre dessa formulação a rapidez do algoritmo em encontrar pontos ótimos da função.

Nota-se que, com a aplicação desse processo, as partículas violem as restrições laterais do problema: uma partícula, próxima do limite do espaço de projeto, pode assumir uma velocidade tal que a faça violar esse limite. Uma velocidade máxima  $v_{max}$  será considerada para dificultar esse deslocamento abrupto das partículas. Além disso, as partículas que violarem o espaço de busca serão "rebatidas" de volta para o espaço de busca, de forma que, ao encontrarem o limite da variável  $k$ , a componente  $k$  da velocidade seja invertida. Esse procedimento segue o que foi aplicado em (BARROSO *et al.*, 2016).

Figura 5 – Processo de manipulação das restrições laterais

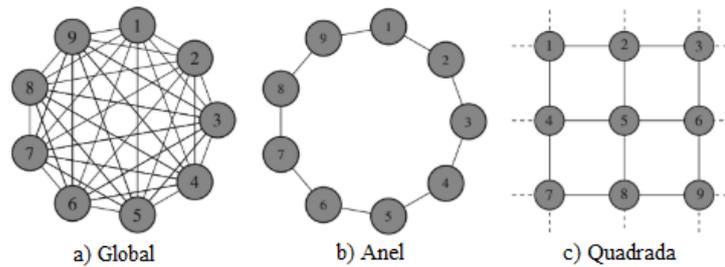


Fonte: Barroso (2015)

A definição da vizinhança de uma partícula é importante para a performance do algoritmo. Em sua formulação inicial, Kennedy e Eberhart (1995) consideravam todas as partículas como parte da vizinhança de cada partícula  $i$ . Essa formulação é conhecida atualmente

como Topologia Global. Embora muito utilizada no início, esta frequentemente promove uma convergência prematura, na qual o algoritmo se prende a um ótimo local.

Figura 6 – Tipos de topologias

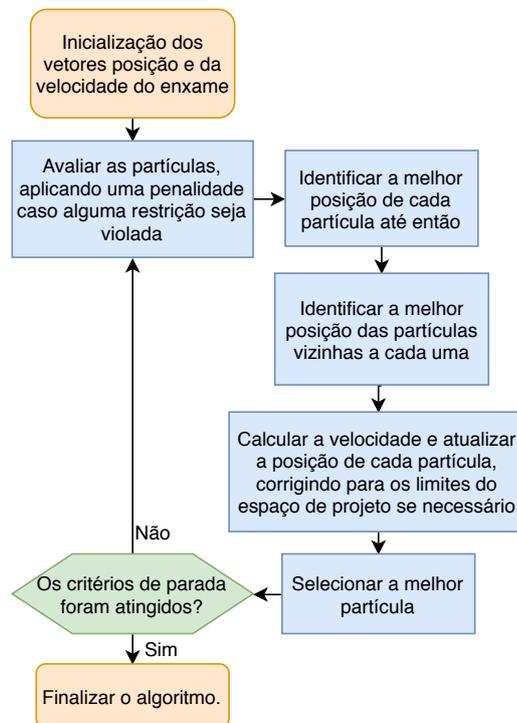


Fonte: Barroso *et al.* (2016)

Assim, novas formulações surgiram para a definição da vizinhança. A Topologia Local, ou Topologia de Anel (*Ring Topology*), considera que a vizinhança de uma partícula é composta pelas outras duas partículas mais próximas a esta. Bratton e Kennedy (2007) apontam que essa metodologia geralmente apresenta os melhores resultados, muito embora, em alguns casos, a maior rapidez da Topologia Global possa favorecer o uso desta para problemas mais simples. Ainda, pode se utilizar a Topologia Quadrada, ou de von Neumann, na qual as partículas dentro de um hipercubo com centro na partícula  $i$  são consideradas como a vizinhança. A Figura 6 apresenta as sugestões de topologias discutidas até então.

A Figura 7 apresenta um fluxograma de forma a tornar mais clara a sequência de funcionamento da metodologia.

Figura 7 – Fluxograma relativo ao funcionamento do PSO



Fonte: Adaptado de Barroso (2015)

## 4 MODELOS SUBSTITUTOS

O uso de modelos substitutos é, na atualidade, uma das abordagens mais populares no sentido de alcançar uma diminuição no custo computacional de otimizações recursivas (SOBESTER *et al.*, 2005). Esses modelos utilizam amostras obtidas da função original para construir uma superfície de resposta que aproxime o comportamento de funções mais caras de modo a prover maior eficiência ao processo de otimização. Essa superfície criada, o modelo substituto propriamente dito, será então utilizada para que se possa encontrar os ótimos globais no espaço de projeto em um tempo de processamento muito inferior (VU *et al.*, 2016).

Essa metodologia representa ainda uma maneira de identificar as variáveis mais importantes e sua natureza, servindo ainda como uma forma de melhorar o entendimento do usuário sobre determinada função. Na engenharia, as funções trabalhadas geralmente possuem uma formulação na qual é relativamente fácil o uso de interpolações ao longo do espaço de projeto, justificando o uso de métodos como Kriging ou das Funções de Base Radial (RBF), que proporcionam uma rápida aproximação da função real (JONES *et al.*, 1998).

Song *et al.* (2019) comentam que existem quatro tipos diferentes de abordagens utilizando modelos substitutos: os de "fidelidade única" (*single fidelity*), híbridos, de multi-fidelidade e os modelos baseados em amostragem adaptativa. Enquanto que os modelos de fidelidade única representam a categoria mais básica, os outros oferecem alternativas para melhorar a eficiência ou a precisão do mesmo.

Goel *et al.* (2006) propõem o uso de um modelo híbrido, denominado de *Ensemble of Surrogates*, no qual uma média ponderada é feita entre três diferentes tipos de modelos, o RBF, o Kriging e a Aproximação de Superfície de Resposta Polinomial. O mesmo aponta que essa metodologia remove a necessidade de definir o modelo a ser usado, a um custo computacional maior por requisitar a construção e avaliação de vários modelos em paralelo. Já Song *et al.* (2019) propõem o uso de um modelo de multi-fidelidade no qual as amostras são avaliadas utilizando modelos de alta e baixa fidelidade. Os autores estudam diversos aspectos, como a correlação entre as análises aplicadas, o efeito de diferentes proporções entre os dados considerados e a relevância do uso de diferentes funções de base.

O presente trabalho focará no uso de modelos de amostragem adaptativa, uma variante da modelagem substituta usual na qual uma melhora gradual da superfície de resposta é obtida pela contínua adição de novos pontos em regiões de interesse. Esse aspecto será melhor explorado no Capítulo 5.

Bhosekar e Ierapetritou (2018) realizam uma revisão geral a cerca de avanços recentes na prática, incluindo métodos utilizados, técnicas de amostragem e implementação em software. Os autores comentam ainda sobre a técnica de amostragem adaptativa, que oferta uma maior precisão mesmo que utilizando um menor número de amostras.

Segundo Forrester *et al.* (2008), o método possui três etapas principais em aplicações práticas. A primeira é composta pela análise inicial das variáveis a serem trabalhadas, a consequente obtenção de amostras de pontos no espaço de projeto e a escolha do modelo substituto. Esses pontos são representados por pares amostrais formados por um vetor de pontos amostrais  $\mathbf{x}$  e um vetor de funções objetivo  $\mathbf{y}$ , referente a cada ponto amostral. A eficiência do modelo está diretamente relacionada com a distribuição dos pontos amostrais no espaço de projeto.

A segunda etapa consiste na determinação dos parâmetros do modelo e na construção do mesmo. Por exemplo, no RBF a escolha dos parâmetros pode ser realizada através de formulações analíticas propostas, como as de Nakayama *et al.* (2002), de Kitayama *et al.* (2010) e de Haykin (1994), ou através de metodologias de validação cruzada. Estas serão discutidas de forma mais abrangente na Seção 4.2.1. A construção do modelo depende do tipo escolhido, e a complexidade dessa etapa pode ser um fator determinante na escolha do método a ser utilizado.

Por fim, a terceira etapa é relativa ao teste do modelo, no qual uma quantidade de pares amostrais é utilizada para a validação da superfície de respostas. A avaliação é feita a partir do cálculo da Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE, *Root Mean Squared Error*), conforme:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{n_t} (y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2}{n_t}} \quad (4.1)$$

O erro admitido para aprovação do modelo deve variar conforme o tamanho da amostra utilizada para construção do mesmo. Forrester *et al.* (2008) propõem valores de 10% para amostras com mais de 10 pontos. O autor comenta ainda que, embora essa etapa seja importante para a avaliação do erro do modelo, ela pode ser ignorada no caso de formulações iniciais de modelos a serem melhorados futuramente.

A literatura apresenta diversos modelos substitutos a serem utilizados, e a escolha do mesmo depende de fatores como a precisão almejada, a diminuição de custo requerida e a própria *expertise* do usuário. Assim, métodos como Kriging (KRIGE, 1951), funções quadráticas (GUNST *et al.*, 1996), RBF (HARDY, 1971) e SVR (CORTES; VAPNIK, 1995) são muito utilizados atualmente. É muito difícil definir com antecedência qual o melhor modelo para uma certa ocasião, e diversos fatores contribuem para a precisão de cada abordagem, desde o tipo de

problema até o refinamento do tipo de amostragem utilizado (GOEL *et al.*, 2006).

Com relação ao seu uso, Wang e Shan (2007) comentam a maior eficácia no uso de Kriging em funções não-lineares, mas citam que o RBF possui uma formulação bem mais simples e fácil de utilizar, apresentando resultados também satisfatórios. Kim *et al.* (2009) apresentam estudos comparativos com uma variedade de funções, demonstrando a maior precisão atingida com uso de Kriging.

Já Gan e Gu (2018) apontam que o modelo de RBF trabalha melhor com funções não-lineares de maior ordem, enquanto que o Kriging é um modelo melhor para funções de menor ordem, sendo o uso de funções quadráticas uma alternativa mais simples a este último. Simpson *et al.* (2002) também realizaram estudos comparativos, apontando resultados similares. Em geral, os modelos de RBF e Kriging obtiveram os melhores resultados entre os modelos testados e, novamente, enquanto o primeiro apresenta resultados melhores para funções não-lineares de maior ordem, o último retorna melhores aproximações em funções de menor ordem. O mesmo aspecto é corroborado por Jin *et al.* (2001), que apontam ainda que, considerando uma performance geral, o RBF se comportou melhor que o Kriging. Hussain *et al.* (2002) promovem uma comparação entre o RBF e modelos polinomiais, apontando que o primeiro apresentou uma melhor estimativa geral em todas as funções testadas.

No contexto da otimização por meio de algoritmos heurísticos, Díaz-Manríquez *et al.* (2011) compararam quatro modelos substitutos diferentes, a Aproximação Polinomial, o RBF, o SVR e o Kriging, em seis funções matemáticas diferentes com número de variáveis variando de 2 a 50. A comparação se deu sob diversas métricas. O autor comenta que os modelos de RBF e SVR apresentaram as maiores eficiências, apesar da maior simplicidade da Aproximação Polinomial. Além disso, enquanto que o Kriging apresentou uma maior acurácia em problemas de baixa dimensionalidade, o RBF superou o mesmo na grande maioria dos casos quando o número de variáveis aumentava. Ainda, na maioria dos casos, esse modelo apresentou o ponto ótimo mais próximo do ótimo real da função. O autor sugere, então, o uso do RBF em casos gerais.

Forrester *et al.* (2008) comentam que, devido ao processo de otimização dos parâmetros, o Kriging perde sua reprodutibilidade em problemas com um maior número de variáveis, sendo o RBF uma melhor alternativa para esse caso. Bhosekar e Ierapetritou (2018) apontam que isso se deve à maior dificuldade de obtenção dos parâmetros do modelo de Kriging em maiores dimensionalidades, pois esta é promovida a partir da otimização de uma função que, por ser

pouco convexa, exige um alto número de avaliações.

Forrester *et al.* (2008) atestam ainda que o uso de modelos que se ancoram em bases Gaussianas, como o Kriging e alguns dos tipos mais utilizados de RBF, possuem a enorme vantagem de serem capazes de utilizar métodos estatísticos para o aprimoramento da superfície, como a Probabilidade de Melhoria, a Melhoria Esperada e o Limite Inferior Estatístico.

Dessa forma, o presente trabalho fará uso do modelo RBF de forma a promover a modelagem substituta das funções a serem trabalhadas. Nas seções seguintes serão explanadas as particularidades a cerca do processo de definição da amostra inicial assim como o de construção desse modelo específico.

#### **4.1 Técnicas de Amostragem**

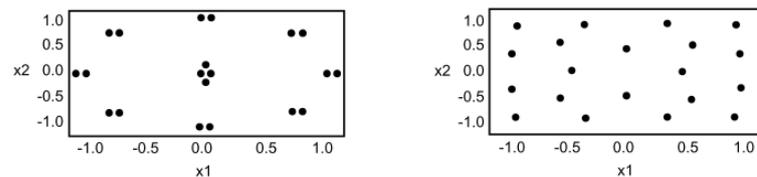
A escolha das amostras utilizadas para gerar os modelos substitutos possui completa relação com a eficiência deste. Como a simulação computacional não possui os mesmos empecilhos relativos à construção de amostras de simulações físicas, geralmente métodos que promovam uma distribuição uniforme no espaço de projeto são escolhidos (JONES *et al.*, 1998). No entanto, ainda que bem distribuídos, um modelo pode falhar em prever pontos em regiões com menor densidade amostral (FORRESTER *et al.*, 2008). Assim, como cada função se comporta de maneira singular, é importante que, ao longo da simulação, pontos de interesse sejam identificados e adicionados à amostra (SOBESTER *et al.*, 2005).

O uso de técnicas de amostragem é muito comum na engenharia, de forma a aumentar o conhecimento do usuário acerca de cada parâmetro em uma simulação através de um Projeto de Experimentos (DoE) (TENNE, 2014). Em casos nos quais simulações físicas devam ser utilizadas, essas técnicas são promovidas com a finalidade principal de diminuir efeitos que provoquem uma estimativa errônea de certo parâmetro, visto que esse tipo de simulação está sujeita a muitas variáveis não quantificadas (JONES *et al.*, 1998). Assim, é comumente indicada a simulação de pontos divididos em certos agrupamentos dentro do espaço de projeto (SIMPSON *et al.*, 2002). Além disso, as simulações físicas estão presas a diversas restrições características de experimentos no mundo real (KLEIJNEN *et al.*, 2005).

No caso de simulações computacionais, isso não ocorre. Em verdade, devido ao maior controle das situações de teste, uma melhor distribuição de pontos ao longo do espaço de projeto é uma propriedade muito desejada (SIMPSON *et al.*, 2002; KLEIJNEN *et al.*, 2005; RENNEN, 2008; TENNE, 2014). No caso do uso em modelos substitutos, essa

característica é facilmente explicada, visto que o erro do modelo é mínimo nas proximidades dos pontos amostrais (FORRESTER *et al.*, 2008). Ainda que alguns trabalhos mostrem que não há relação direta entre uma maior uniformidade da amostragem e uma maior eficácia do modelo (BEACHKOFSKI; GRANDHI, 2002; LIU; WAKELAND, 2005; DETTE; PEPELYSHEV, 2010), é consenso que uma amostra mal distribuída deve ser evitada. A Figura 8 ilustra essa diferença entre as abordagens antiga e atual para o DoE.

Figura 8 – Diferenças entre os projetos de DoE clássicos e atuais



Fonte: Simpson *et al.* (2002)

Para prover uma melhor distribuição, dois parâmetros podem ser levados em consideração: o preenchimento do espaço amostral, quantificando a distribuição dos pontos ao longo do espaço de projeto, e a propriedade de projeção, quantificando a uniformidade da projeção de cada vetor amostral nos eixos cartesianos considerados (CHO *et al.*, 2016). Dessa forma, as táticas utilizadas usualmente focam em um desses parâmetros ou no balanceamento deles de forma a prover amostras bem distribuídas.

Yao *et al.* (2013) apontam que existem duas abordagens principais: com um estágio ou com dois estágios. A primeira destas se preocuparia somente com a inserção de pontos iniciais, sendo a avaliação destes auxiliada pela estimativa da verossimilhança do modelo gerado pela amostra de treinamento. Nessa metodologia, diversos ótimos hipotéticos devem ser testados a fim de gerar um resultado confiável, tornando a metodologia cara computacionalmente (FORRESTER; KEANE, 2009). A segunda trata de, com a otimização do modelo inicial, localizar pontos em regiões de interesse e adicionar esses à amostra. Isso é feito através de critérios pré-estabelecidos, que podem se basear em uma exploração local ou global: a primeira tende a estudar pontos próximos ao ótimo encontrado, enquanto a segunda tende a buscar pontos em áreas até então pouco estudadas.

Dessa forma, no presente trabalho será promovida a construção de uma amostra inicial pelo Projeto de Experimentos (DoE), unido a uma futura adição de novos pontos de forma sequencial que se dará através da aplicação da técnica conhecida como Otimização Sequencial Aproximada (SAO). A presente seção focará na geração da amostragem inicial, enquanto que a

adição de novos pontos será melhor discutida no Capítulo 5.

Importante notar que, quanto mais amostras são utilizadas, mais custoso o modelo substituto se torna e menos indicado é seu uso em relação ao modelo de alta fidelidade. Assim, é uma tarefa valiosa a escolha acertada dos pontos amostrais. Além disso, o número necessário de amostras é diretamente correlacionado com o número de variáveis de otimização, visto que, quanto maior este, maior o tamanho do espaço do projeto. Essa é uma preocupação muito comum para a construção de modelos substitutos, sendo a problemática usualmente conhecida como *Curse of Dimensionality*, ou "Maldição da Dimensionalidade". É vital, então, a correta escolha das variáveis a serem trabalhadas, de forma a não gerar dispêndios desnecessários (FORRESTER *et al.*, 2008).

Dito isso, é muito difícil relatar com propriedade o melhor tamanho exato de uma amostra com antecedência, especialmente em funções *black box* nas quais não são conhecidos aspectos relativos ao comportamento e ao formato da função com antecedência. Uma vantagem do uso de uma abordagem sequencial é justamente a menor relevância que a amostragem inicial possui, visto que a superfície será melhorada continuamente com novos pontos em regiões de interesse (WANG; SHAN, 2007). Nesse caso, Sobester *et al.* (2005) aconselham que a amostra inicial possua aproximadamente um terço do tamanho da amostra ao final da simulação, após a adição de todos os pontos necessários.

Muitos autores propõem formas arbitrárias para estimar uma quantidade suficiente de amostras que promova uma boa estimativa do modelo, como a multiplicação do número de variáveis de projeto por um escalar (JIN *et al.*, 2001; CHO *et al.*, 2016). Amouzgar e Strömberg (2016) sugeriram a definição do número de amostras de acordo com um parâmetro  $K$ , calculado por:

$$K = \frac{(m+1)(m+2)}{2} \quad (4.2)$$

em que  $m$  é o número de variáveis. Assim, segundo os autores, as amostras podem ser pequenas, médias ou grandes, sendo estas definidas como uma função de  $K$ . Sendo  $n_p$  o tamanho da amostra, para problemas com poucas variáveis:

- Para amostras pequenas,  $n_p = 1.5K$ ;
- Para amostras médias,  $n_p = 3.5K$ ;
- Para amostras grandes,  $n_p = 6.0K$ ;

e para problemas com muitas variáveis:

- Para amostras pequenas,  $n_p = 1.5K$ ;

- Para amostras médias,  $n_p = 2.5K$ ;
- Para amostras grandes,  $n_p = 5.0K$ .

Forrester *et al.* (2008) comentam ainda que é indicada a normalização dos pontos amostrais antes da construção dos modelos substitutos, de forma que os limites estabelecidos para cada função não alterem parâmetros do modelo substituto. A mesma normalização deve ser feita a um ponto  $\mathbf{x}$  a ser estimado por esse modelo substituto.

As metodologias que serão discutidas podem ser tanto estocásticas quanto determinísticas. A primeira categoria busca prover aleatoriedade à geração de amostras, gerando pontos diferentes, nem sempre uniformemente distribuídos, a cada iteração. Exemplos desse tipo são a Simples Amostragem Aleatória e o Hipercubo Latino. A segunda gerará, geralmente através de uma formulação analítica, sempre os mesmos pontos em um espaço de projeto (TENNE, 2014). Exemplos deste tipo são a Sequência de Hammersley e a Sequência de Sobol. A seguir, serão descritas e exemplificadas algumas das abordagens encontradas na literatura.

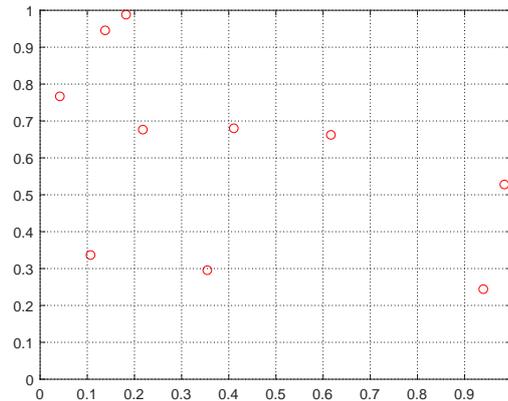
#### 4.1.1 *Simples Amostragem Aleatória*

A Simples Amostragem Aleatória (SRS, *Simple Random Sampling*) é uma metodologia básica, ancorando-se na base estatística de que cada ponto possui probabilidade igual de ser adicionado à amostra, gerando, teoricamente, uma amostra uniforme ao final do processo. No entanto, devido ao baixo número de amostras a serem geradas em vários casos, muitas vezes essa uniformidade não é atingida (AMOUZGAR; STRÖMBERG, 2016).

A Figura 9 apresenta um exemplo dessa abordagem, apontando os dez pontos gerados em um espaço normalizado com duas dimensões. Nota-se como certas regiões se mantêm inexploradas, ao mesmo tempo que alguns pontos ficam muito próximos entre si.

Apesar da menor confiabilidade, esse método é ainda utilizado devido a sua facilidade de implementação (STEPONAVIČĚ *et al.*, 2016). Tenne (2014) obteve performances similares quando comparando este com métodos muito mais robustos. SteponavičĚ *et al.* (2016) promoveram uma comparação entre uma vasta gama de metodologias, inferindo que, para problemas de menor dimensionalidade, não existe uma diferença significativa no uso destas. Assim, a melhor alternativa seria a SRS, devido a sua maior facilidade de uso e menor custo computacional.

Figura 9 – Exemplo de Simples Amostragem Aleatória



Fonte: elaborado pelo autor

#### 4.1.2 Hipercubo Latino

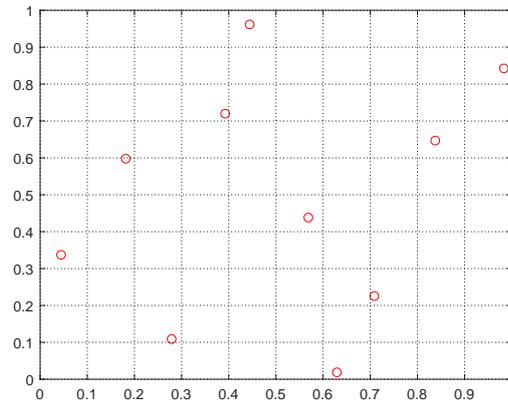
O Hipercubo Latino (LHS, *Latin Hypersquare*) é um método que se inicia com a estratificação do espaço de projeto em  $n_p$  divisões, visando uma posterior definição aleatória dos pontos de projeto dentro de cada espaço estratificado. Na abordagem, cada estrato possuirá uma amostra, de forma que estes possuem igual probabilidade  $\frac{1}{n}$  de serem escolhidos. Enquanto essa abordagem gera amostras relativamente uniformes em cada dimensão, estas são aleatoriamente distribuídas entre as dimensões (AMOUZGAR; STRÖMBERG, 2016). Assim, o LHS não pode garantir que a amostra fique uniforme ao longo de todo o espaço de projeto e, em certos casos, grandes regiões podem se manter inexploradas (STEPONAVIČĖ *et al.*, 2016).

A Figura 10 apresenta um exemplo dessa abordagem, apontando os dez pontos gerados em um espaço normalizado com duas dimensões. Em comparação com o método passado, a estratificação do espaço de projeto realmente provoca uma melhora na uniformidade da amostra.

Essa abordagem é a mais utilizada atualmente (KITAYAMA *et al.*, 2012; KITAYAMA *et al.*, 2013; LI *et al.*, 2017). Apesar disso, Steponavičė *et al.* (2016) comentam que não se pode verificar a maior eficácia desta, mesmo quando comparado com técnicas muito básicas, como a Simples Amostragem Aleatória (SRS).

Alguns trabalhos utilizam ainda variações desta, tentando prover e garantir maior uniformidade à amostra, como o Hipercubo Latino Otimizado (OLHS, *Optimized Latin Hypersquare*) (TENNE, 2014) e o Hipercubo Latino Melhorado (ILHS, *Improved Latin Hypersquare*) (BEACHKOFSKI; GRANDHI, 2002). Outra prática eficaz é a geração de  $n$  distribuições diferentes, selecionando então aquela que apresentar a maior uniformidade. A quantificação da

Figura 10 – Exemplo de Hipercubo Latino



Fonte: elaborado pelo autor

uniformidade é geralmente feita através de um parâmetro pré-definido. Um exemplo é o *maximin* (YAN *et al.*, 2019):

$$d_p(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}) = \left( \sum_{k=1}^m |x_k^{(i)} - x_k^{(j)}|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (4.3)$$

em que  $\mathbf{x}^{(i)}$  e  $\mathbf{x}^{(j)}$  representam os pontos amostrais  $i$  e  $j$ , e a distância entre os pontos é calculada através da norma  $p$ , em que  $p$  é um valor arbitrário: para  $p = 1$ , trata-se da "distância retangular", enquanto que para  $p = 2$  trata-se da norma Euclidiana (FORRESTER *et al.*, 2008).

Goel *et al.* (2006) utilizam essa abordagem, gerando 20 seqüências diferentes e selecionando a que apresentar o maior *maximin* dentre elas.

#### 4.1.3 Sequência de Hammersley

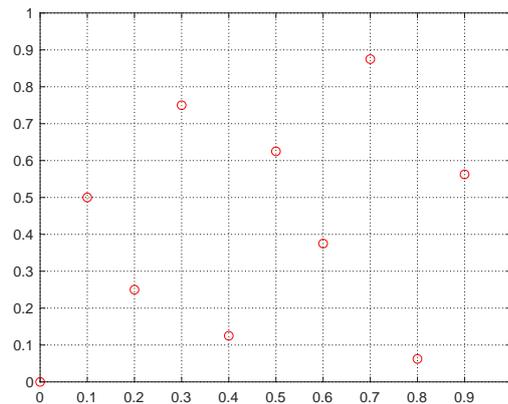
A Sequência de Hammersley (HSS, *Hammersley Sequence Sampling*) é uma metodologia determinística que produz um vetor amostral com um menor agrupamento de pontos que o Hipercubo Latino (AMOUZGAR; STRÖMBERG, 2016). Derivada da Sequência de Halton, a implementação é feita através de operações com números primos. Muito embora a abordagem se baseie na projeção dos vetores amostrais nos eixos cartesianos (CHOI; CHO, 2008), a amostra proposta é geralmente uniforme ao longo do espaço de projeto.

Amouzgar e Strömberg (2016) apresentam resultados que apontam um menor erro encontrado com uso desta metodologia de amostragem, seguido pelo LHS. Simpson *et al.* (2002) apontam que o uso desse método apresenta bons resultados para funções com um pequeno número de variáveis, mas a uniformidade deixa de ser garantida quando o problema atinge uma maior dimensionalidade. Steponavičė *et al.* (2016) também tecem o mesmo comentário sobre a

metodologia. Cho *et al.* (2016) comentam que, para um número de variáveis maior que 6, a HSS passa a proporcionar uma distribuição menos uniforme que outras abordagens como a Sequência de Sobol.

A Figura 11 apresenta um exemplo dessa abordagem, apontando os dez pontos gerados em um espaço normalizado com duas dimensões. Percebe-se que, de fato, ao menos para o exemplo bidimensional, a amostra apresenta uma distribuição bastante uniforme.

Figura 11 – Exemplo de Sequência de Hammersley



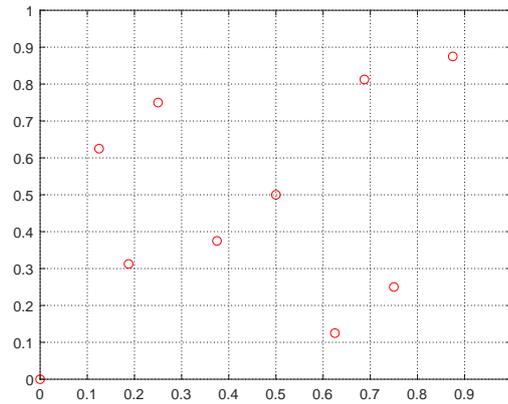
Fonte: elaborado pelo autor

#### 4.1.4 Sequência de Sobol

A Sequência de Sobol (SSS, *Sobol Sequence Sampling*) é uma variante da Sequência de Hammersley com uma formulação que permite representar bem espaços uniformes com uma maior dimensionalidade (ZHANG *et al.*, 2013; CHO *et al.*, 2016). Apesar de haver algumas formas diferentes de implementação, essa tática é determinística assim como a HSS. Steponavičė *et al.* (2016) comentam que, mesmo possuindo uma implementação complexa, esta ainda mantém um baixo custo computacional. Forrester *et al.* (2008) comentam ainda que um aspecto interessante dessa metodologia é que, para um problema de  $m$  variáveis, o vetor de  $n_p - 1$  pontos amostrais é sempre um subconjunto do vetor de  $n_p$  pontos amostrais. Assim, sendo necessário realizar um aumento da amostra, não é preciso avaliar novamente todos os pontos.

A Figura 12 apresenta um exemplo dessa abordagem, apontando os dez pontos gerados em um espaço normalizado com duas dimensões. Em comparação com a abordagem passada, a amostra não parece ser tão uniforme. No entanto, espera-se que, para problemas de maior dimensionalidade, a Sequência de Sobol resulte em melhores espaços amostrais.

Figura 12 – Exemplo de Sequência de Sobol



Fonte: elaborado pelo autor

Zhang *et al.* (2013) apresentam estudos relativos à comparação entre a HSS, o LHS e Sobol, atestando que as duas últimas apresentaram melhores resultados em problemas com um maior número de dimensões, enquanto que a primeira apresentou resultados melhores para problemas de menor dimensionalidade. Wang *et al.* (2017) também fazem uso desta abordagem sob essa mesma justificativa.

## 4.2 Funções de Base Radial

Introduzido por Hardy (1971), as Funções de Base Radial (RBF), juntamente com o Kriging, representa hoje um dos modelos substitutos mais utilizados e explorados pela comunidade científica (XIANG *et al.*, 2011; DURANTIN *et al.*, 2017; XING *et al.*, 2017; SONG *et al.*, 2019), e muitas publicações tratam da tentativa de melhorar sua aproximação pela aplicação de metodologias diferenciadas (ROQUE; FERREIRA, 2009; ACAR, 2013; SHI *et al.*, 2019). Embora inicialmente tenha sido criado com a finalidade de solucionar problemas em áreas como meteorologia e topografia, desde então o modelo de RBF é utilizado para os mais diversos fins (MONGILLO, 2011).

O método consiste na tentativa de gerar um modelo substituto a partir da combinação linear de funções de características já conhecidas, gerando uma maior facilidade de análise da superfície de resposta. Essas funções são conhecidas como *funções de base*. O modelo descrito é regido por:

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^{nb} w_i \psi_i(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_i\|) \quad (4.4)$$

em que  $n_b$  é o número de bases, o subscrito  $i$  representa o número da base em questão,  $c_i$  denota

o centro da base  $i$ ,  $w_i$  representa o peso dado a esta e  $\psi$  simula a função escolhida para interpolar o modelo. Uma formulação vetorial pode ser dada a essa função, demonstrada em:

$$\hat{y}^{(i)} = \mathbf{w}^T \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) \quad (4.5)$$

na qual  $\mathbf{w}$  representa o vetor contendo o peso de cada base e  $\boldsymbol{\psi}$  representa o vetor contendo o valor de cada uma das funções de base radial.

A variável  $r$  representa o resultado da norma entre o ponto  $\mathbf{x}$  sendo estimado e a base  $i$ , sendo calculado como em:

$$r_i(\mathbf{x}) = \sqrt{(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i)^T (\mathbf{x} - \mathbf{c}_i)} \quad (4.6)$$

Existem vários tipos de funções que podem ser escolhidas para conduzir a interpolação. Forrester *et al.* (2008) citam formulações lineares, cúbicas, *thin plate splines*, Gaussianas, multiquadráticas, entre outras. Na maioria dos casos, se adota a função Gaussiana (AMOUZGAR; STRÖMBERG, 2016). Como apontado anteriormente, esta possui a vantagem de permitir o uso de metodologias interessantes de melhoria da superfície de resposta, devido à possibilidade de realizar a estimativa do erro de cada ponto amostral (FORRESTER *et al.*, 2008). O presente trabalho fará uso desse tipo de função de base. A função Gaussiana é definida por:

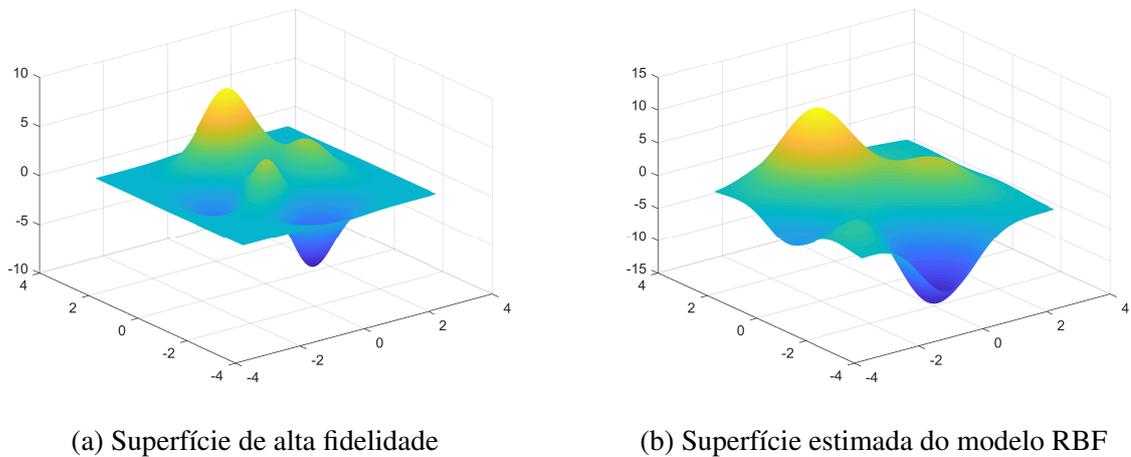
$$\psi_i(r) = \exp\left(-\frac{r^2}{\sigma_i^2}\right) \quad (4.7)$$

em que  $\sigma_i$  denota um parâmetro importante, conhecido como largura. Esta pode ser entendida como referente à área ao redor da base  $i$  a ser influenciada por esta, e será mais largamente discutida na Seção 4.2.1.

Como exemplo da abordagem, a Figura 13b apresenta uma superfície aproximada por um modelo RBF com uso de bases Gaussianas e largura definida pelo método de Nakayama (explanado na Seção 4.2.1), estimando a função de duas variáveis cuja superfície real é apresentada na Figura 13a. Foram utilizados nove pontos amostrais, definidos através da Sequência de Hammersley. Nota-se que o modelo consegue captar bem o comportamento geral da função, ainda que necessitando somente de nove avaliações de alta fidelidade.

Nessa configuração, a concepção do modelo substituto possui dois conjuntos de variáveis principais: o vetor de larguras  $\boldsymbol{\sigma}$  e o vetor de pesos  $\mathbf{w}$ . As subseções seguintes tratarão do cálculo e definição desses parâmetros.

Figura 13 – Superfícies exata e estimada para uma função bidimensional

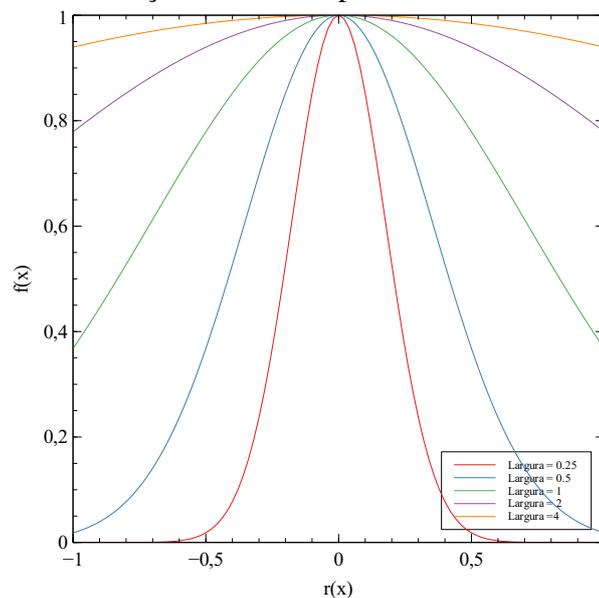


Fonte: elaborado pelo autor

#### 4.2.1 Cálculo do vetor de larguras

Para modelos de RBF com bases Gaussianas, o cálculo da largura é um problema à parte. Apesar deste possuir uma importância significativa na precisão da estimativa da função objetivo (SOBESTER *et al.*, 2005), não existe uma metodologia clara para o cálculo e definição deste parâmetro. Como o valor ótimo varia de acordo com o tipo de problema, é comum que se otimize essa variável. Chen *et al.* (2014) utilizam um GA com objetivo único de otimizar os parâmetros do modelo RBF para um problema de FGM. No entanto, esse processo nem sempre é viável, pois o tempo demandado pode se tornar muito alto (KITAYAMA; YAMAZAKI, 2011).

Figura 14 – Função Gaussiana para valores diferentes de  $\sigma$

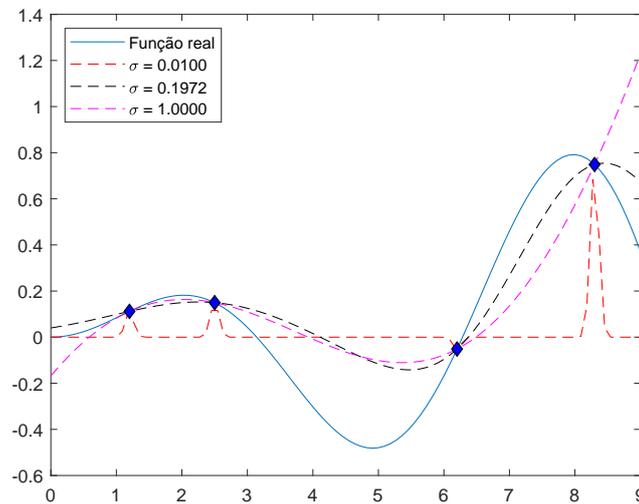


Fonte: elaborado pelo autor

Assim, o parâmetro é representado por um vetor  $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{n_b}\}$  no qual  $n_b$  é o número de bases consideradas. Esse parâmetro pode ser entendido como uma maneira de regular o espaço de influência de cada base  $i$  (SOBESTER *et al.*, 2005; FORRESTER *et al.*, 2008). A Figura 14 apresenta como a função Gaussiana se comporta para diferentes valores de  $\sigma$ .

Para ilustrar essa problemática com relação ao RBF, a Figura 15 apresenta diversos modelos substitutos promovidos para uma função real unidimensional  $f(x) = x \sin x / 10$  (HOLSCLAW *et al.*, 2012). O valor de 0,1972 foi alcançado com uso de uma das metodologias analíticas a serem discutidas a seguir, de Nakayama *et al.* (2002). É perceptível como a função se torna cada vez mais plana e suave a medida que o valor dado a  $\sigma$  aumenta.

Figura 15 – Estimativas do modelo substituto com diferentes valores de  $\sigma$



Fonte: elaborado pelo autor

Neste exemplo, o vetor de larguras é construído de forma que todas as bases possuem o mesmo valor para o parâmetro. No entanto, essa abordagem é mais viável quando as amostras estão distribuídas uniformemente pelo espaço de projeto (KITAYAMA; YAMAZAKI, 2011). Quando isso não ocorre, o mais indicado é definir a largura referente à cada base do modelo. Dito isso, serão discutidos métodos utilizados pela comunidade para o cálculo desse parâmetro de forma a melhorar a estimativa do modelo.

O primeiro deles, sugerido por Haykin (1994), leva em consideração basicamente a distância máxima entre pontos amostrais  $d_{max}$  e o número de bases do modelo  $n_b$ , gerando assim um vetor de larguras em que estas possuem o mesmo valor. Essa proposta é definida por:

$$\sigma = \frac{d_{max}}{\sqrt{2n_b}} \quad (4.8)$$

Nakayama *et al.* (2002) propuseram uma alternativa a esse método, levando em consideração, dessa vez, o número de variáveis a serem otimizadas  $m$ . Essa formulação é dada por:

$$\sigma = \frac{d_{max}}{\sqrt[m]{mn_b}} \quad (4.9)$$

Pode-se perceber que, para o caso de um espaço de projeto com duas variáveis, ambas as formulações apresentadas até então retornam o mesmo vetor de larguras, enquanto que para problemas de maior dimensionalidade a abordagem proposta sugere valores de largura menores.

Ainda, Kitayama *et al.* (2010) propuseram duas formulações. A primeira é similar a de Nakayama *et al.* (2002), mas coloca um peso maior no número de variáveis  $m$ . Assim, as larguras definidas são menores em casos nos quais o número de variáveis é maior que 2. A segunda é uma generalização desta última, a fim de definir o vetor de forma a gerar valores diferentes para cada base Gaussiana. Essa foi feita levando em consideração a distância máxima entre a base  $j$  e outra base qualquer no espaço de projeto. Essas formulação são definidas, respectivamente, por:

$$\sigma_j = \frac{d_{max}}{\sqrt{m} \sqrt[m]{n_b}} \quad (4.10a)$$

$$\sigma_j = \frac{d_{j,max}}{\sqrt{m} \sqrt[m]{n_b - 1}} \quad (4.10b)$$

Estes propuseram ainda o uso de uma técnica que os mesmos denominam de *Adaptive Scaling*, ou Escala Adaptativa. Nesta, o vetor de larguras deve ser continuamente multiplicado por um escalar  $\delta$  até que a menor das larguras seja maior que 1.0. Os autores sugerem valores como 1.1 ou 1.2 para  $\delta$ . Os mesmos autores utilizam essa formulação em alguns de seus outros trabalhos, obtendo resultados satisfatórios com a metodologia (KITAYAMA; YAMAZAKI, 2011; KITAYAMA *et al.*, 2012; KITAYAMA *et al.*, 2013).

Por fim, como dito anteriormente, alguns autores preferem realizar a otimização do parâmetro. Esta geralmente ocorre com a aplicação de um método conhecido como Validação Cruzada sem Uma Amostra (LOOCV, *Leave-One-Out Cross Validation*). Nessa abordagem, para cada base  $j$ , geram-se  $n_w$  modelos substitutos sem esta base  $j$ , cada um com um valor diferente para a largura. A base  $j$  é então usada como validação, e cada um destes modelos compara o valor estimado  $\hat{y}_j$  com o valor real  $y_j$ . O vetor de larguras que ocasionar o menor erro é escolhido, em que o erro é o somatório dos erros de todos os modelos substitutos gerados utilizando o

mesmo valor para a largura. Em Sobester *et al.* (2005), o vetor de larguras a ser testado pelo método é composto por  $n_w = 20$  valores no domínio  $[10^{-2}, 10^1]$ , espaçados logaritmicamente. Mehmani *et al.* (2017) promovem uma otimização convencional do parâmetro, utilizando um domínio de  $[10^{-2}, 3]$  para buscar o valor ótimo do parâmetro. Nesse trabalho, a proposta de Sobester *et al.* (2005) será utilizada. Nota-se que, nesta, o autor utiliza uma formulação um pouco diferente para a função Gaussiana. Para tornar os valores iguais, esse trabalho multiplicará cada valor de largura da lista a ser testada por  $\sqrt{2}$ .

A Figura 16 ilustra detalhadamente como esse processo ocorre, de forma a escolher o melhor valor de largura possível entre os valores buscados. Nesta, o MSE se refere ao Erro Quadrático Médio, calculado como demonstrado em:

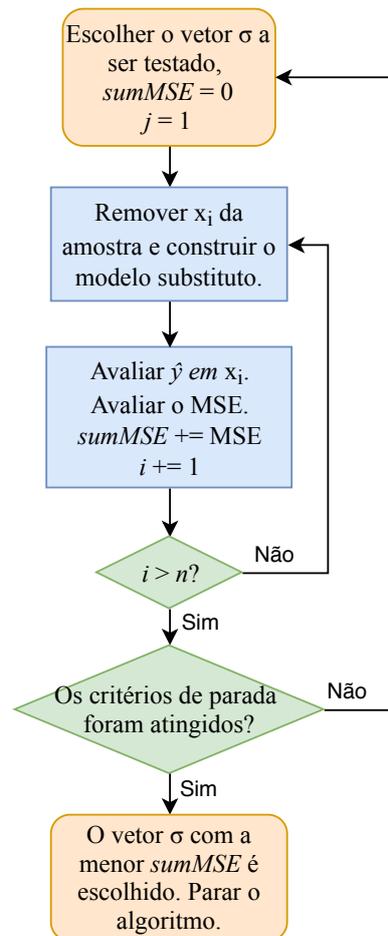
$$MSE = \frac{(y_i - \hat{y}_i)^2}{n_v} \quad (4.11)$$

em que  $n_v$  se refere ao número de pontos de validação utilizados. Resumidamente, cada valor de largura, retirado de um conjunto pré-definido, é utilizado para construir um modelo a cada iteração, sendo este validado com um dos pontos da amostra. Assim, durante esse processo,  $n_p \cdot n_w$  modelos devem ser construídos. O processo de construção do modelo se refere à definição do vetor de larguras e do vetor de pesos, como apresentado na subseção seguinte, para cada base.

Pela explanação dessa metodologia, percebe-se o quão custoso o mesmo é, especialmente se considerado que cada base pode possuir valores diferentes para a largura ou em casos nos quais o número de pontos amostrais  $n_p$  é muito alto. Com a finalidade de diminuir o custo computacional, uma alternativa a esse método é conhecida como Validação Cruzada em  $k$  Grupos ( $k$ -FCV,  $k$ -fold Cross-Validation). Esta trata de agrupar as bases em  $k$  grupos distintos, de forma aleatória. Assim, as comparações em relação à largura são feitas de forma similar ao método anterior, embora desta vez para cada grupo ao invés de para cada base. Com essa abordagem, é possível reduzir bastante a quantidade de modelos substitutos construídos, principalmente em espaços com muitos pontos amostrais, sendo necessárias somente  $k \cdot n_w$  construções do modelo. Müller e Shoemaker (2014) apresentam ainda uma abordagem mista, na qual, até 50 pontos amostrais, o processo utilizará a LOOCV, enquanto que, a partir daí, o método faz uso da  $k$ -FCV, abordagem que reduz bastante o custo computacional. O autor define o número de grupos  $k$  como uma função do número de amostras.

A Figura 17 ilustra como ocorre o processo de validação da abordagem, de forma a escolher o melhor valor de largura possível entre os valores buscados.

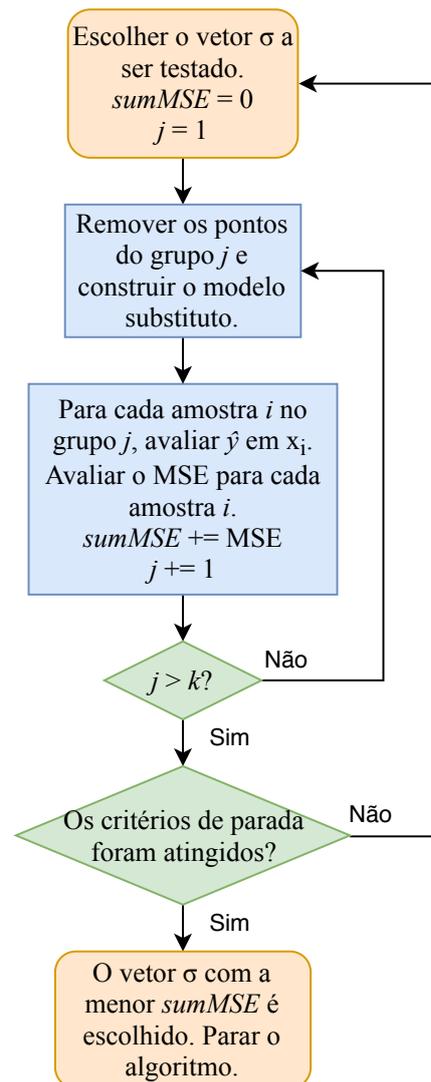
Figura 16 – Fluxograma da LOOCV



Fonte: elaborado pelo autor

Interessante notar que a LOOCV é um caso particular da  $k$ -FCV, no qual  $k = n$ , em que  $n_p$  é o número de pontos amostrais considerados. Dito isso, alguns comentários devem ser feitos em relação a esses métodos de validação cruzada. Em geral, essas abordagens possuem um baixo *bias*, ou viés. Isso ocorre devido ao treinamento do modelo com uma parcela considerável da amostra completa, fazendo com que a diferença entre o erro calculado e o erro real é pequena. Ainda, essas abordagens apresentam geralmente uma alta variância, ou seja, uma grande variação nos resultados obtidos (BENGIO; GRANDVALET, 2003).

A LOOCV é o caso em que o viés é o menor: como a amostra treinada e testada é muito parecida com a amostra real, o erro calculado também é similar ao desta. No entanto, a variância desta também é a maior (ELISSEEFF; PONTIL, 2002). Em verdade, Kohavi (1995) apresenta exemplos nos quais a abordagem falha completamente devido à instabilidade do algoritmo. Além disso, o maior problema desta é ainda o tempo demandado para o treinamento de  $n_p$  modelos, como dito anteriormente. Com a diminuição de  $k$ , a variância diminui, mas o viés aumenta. Isso ocorre pois, dessa vez, uma parcela menor da amostra está sendo treinada, não tão

Figura 17 – Fluxograma da  $k$ -FCV

Fonte: elaborado pelo autor

similar à amostra real quanto anteriormente. No entanto, utilizando um valor muito pequeno para este pode gerar um aumento da variância, devido à maior instabilidade das amostras de treinamento (KOHAVI, 1995).

Em Ribeiro *et al.* (2019) é apresentado um estudo comparativo entre diferentes metodologias de definição de largura, aplicados a uma metodologia SAO. Os autores sugerem, de forma geral, o uso da  $k$ -FCV, com  $k = 5$ . Em situações nas quais o custo desta ainda é um fator muito prejudicial, a abordagem analítica proposta por Nakayama *et al.* (2002) também apresentou bons resultados na maioria dos casos. A abordagem proposta por Kitayama *et al.* (2010), com uso da Escala Adaptativa, também apresentou bons resultados em certos casos, mas deve ser utilizada com cautela, visto que a performance desta aparenta depender muito da dimensionalidade e da forma da função a ser aproximada. O presente trabalho procurará realizar

uma extensão desse estudo de forma a ajudar futuros pesquisadores a escolher a metodologia de definição de largura mais adequada para cada situação.

#### 4.2.2 Cálculo do vetor de pesos

Definido o vetor de larguras, o modelo de RBF possui uma metodologia muito simples para a obtenção do vetor de pesos. Esta se ancora na ideia de que, nos pontos amostrais, a estimativa do modelo substituto deve ser igual à resposta da função estudada, ou seja,  $\hat{y}_i = y_i$ . Com essa consideração, podemos realizar a metodologia de interpolação por:

$$\Psi \mathbf{w} = \mathbf{y} \quad (4.12)$$

em que  $\Psi$  denota uma matriz quadrada conhecida como Matriz de Gram, definida por:

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi_1(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1\|) & \dots & \psi_b(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_b\|) \\ \psi_1(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|) & \dots & \psi_b(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_b\|) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(\|\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_1\|) & \dots & \psi_b(\|\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_b\|) \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

Um problema que pode ocorrer é que a matriz pode se tornar mal condicionada caso os pontos amostrais fiquem muito próximos entre si (HAYKIN, 2012). Além disso, Forrester *et al.* (2008) citam que, em caso de uma amostra muito grande, o método pode levar ao *overfitting*, em que o modelo representa bem somente os pontos amostrais. Kitayama e Yamazaki (2011) propuseram uma alternativa para contornar esses problemas através do uso de um parâmetro de regularização  $\lambda$  para o cálculo do erro quadrático. Esse formulação é dada por:

$$E = \sum_{i=1}^{n_p} (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum_{j=1}^{n_b} \lambda w_j^2 \quad (4.14)$$

em que  $n_p$  é a quantidade de pontos amostrais e  $n_b$ , o número de bases radiais, sendo estas geralmente iguais. O autor comenta ainda que o parâmetro  $\lambda$  deve assumir um valor pequeno, de forma a não afetar tanto o procedimento, mas ao menos tempo deve ser grande o suficiente para corrigir um possível mal condicionamento da matriz. Neste trabalho, foi considerado  $\lambda = 10^{-3}$ . O vetor de pesos que minimiza essa função é dado pela equação:

$$\mathbf{w} = (\Psi^T \Psi + \mathbf{I} \lambda)^{-1} \Psi^T \mathbf{y} \quad (4.15)$$

na qual  $\mathbf{I}$  é uma matriz identidade.

## 5 OTIMIZAÇÃO SEQUENCIAL APROXIMADA

A Otimização Sequencial Aproximada (*Sequential Approximate Optimization*) (SAO) é uma técnica proposta inicialmente por Schmit e Farshi (1974). Nesse trabalho, os autores utilizam a técnica de forma a continuamente melhorar a região de confiança na qual a otimização é realizada até que o ótimo global seja encontrado.

Em geral, a estratégia é utilizada de forma a sucessivamente definir sub regiões dentro do espaço de projeto que possuem características importantes para o problema, incorporando informações destas ao refinamento do problema. O processo é finalizado quando algum critério de parada é atingido, usualmente relativo a uma métrica de erro ou simplesmente a um número máximo de iterações ou pontos adicionados (JACOBS *et al.*, 2004). Com essa técnica é possível minimizar a quantidade de pontos amostrais necessários para que o modelo promova boas previsões (KHALFALLAH; GHENAIET, 2014).

Yi e Cheng (2007) estudam o uso dessa abordagem aplicada em problemas estruturais em que a análise é feita considerando incertezas inerentes à prática, metodologia conhecida como *Probabilistic Structural Design Optimization* (PSDO), provendo um aumento de eficiência a partir da diminuição no número de análises numéricas necessárias. Zhou *et al.* (2018) propõem uma abordagem sequencial de forma a prover tanto rapidez quanto eficácia a um processo iterativo de *Reliability Based Design Optimization* (RBDO), tipo de análise que tenta garantir um nível mínimo de confiabilidade para o projeto estrutural e que possui um custo computacional muito caro.

No presente trabalho, a abordagem será utilizada com a finalidade de melhorar gradativamente a superfície de resposta estimada em algoritmos que fazem uso de modelos substitutos (HAVINGA *et al.*, 2016; CHUNG *et al.*, 2018; BALREIRA, 2018). Nesse contexto, a abordagem é representada pela metodologia escolhida de inserção de pontos, que promoverá a contínua melhora da previsão do modelo em regiões específicas.

Um exemplo simples é a adição do ponto ótimo encontrado em cada otimização, de forma a promover uma melhoria da estimativa na região em que este se encontra. Normalmente, isso é feito até que o erro encontrado nesse ponto seja suficientemente pequeno. Dang *et al.* (2018) utilizam essa abordagem para realizar uma otimização relativa à retração do metal após o processo de formação de um componente. Essa é feita até que o erro encontrado no modelo de Kriging seja menor que 1%. Khalfallah e Ghenaiet (2014) fazem uso de uma abordagem similar em que, em uma otimização multi-objetivo de um compressor centrífugo, é adicionado o ponto

que, pertencente à frente de Pareto, apresentar a maior distância mínima a algum dos pontos amostrais considerados. A abordagem, aliada a um modelo RBF, diminui em 98,7% o número de análises de alta fidelidade promovidas, atingindo um erro menor que 2%.

Kitayama *et al.* (2010) propõem o uso dessa tática aliada ao uso da Função Densidade, validando a abordagem através de exemplos numéricos com e sem restrições. Em sua proposta, a cada iteração do algoritmo, além do ponto ótimo, são adicionados ainda  $m/2$  pontos por meio da Função Densidade, em que  $m$  é o número de variáveis de projeto. Balreira (2018) utiliza uma tática similar para realizar a otimização de placas e cascas laminadas, alcançando uma excelente eficácia.

Pan *et al.* (2014) também apresentam uma tática similar, mas a adição do ótimo é substituída pela adição de todos os extremos da função. A otimização é promovida em exemplos numéricos, assim como em um problema de engenharia frequentemente estudado relativo à minimização do custo de fabricação de um vaso de pressão. O autor utiliza, como critério de parada, o número máximo de avaliações de alta fidelidade realizadas.

Nakayama *et al.* (2003) propõem uma abordagem que também adiciona pontos relativos a uma busca global e uma busca local, a partir de critérios geométricos relacionados ao ponto ótimo atual e aos pontos amostrais. Os autores aplicam a proposta em um exemplo numérico e na otimização de um vaso de pressão, demonstrando resultados promissores.

Kitayama *et al.* (2015) fazem uso unicamente da Função Densidade de forma a promover uma otimização multi-objetivo de um processo de confecção de folhas metálicas, comentando que a metodologia sozinha consegue de fato construir uma superfície muito precisa.

Luk-Cyr *et al.* (2016) promovem uma otimização tanto da geometria de um martelo industrial quanto do processo no qual este é aplicado: a melhora da resistência à fadiga de certas estruturas. Utilizando abordagens estatísticas, os autores promovem uma otimização multi-objetivo utilizando um modelo de Kriging no qual, a cada iteração, os pontos que apresentarem a maior estimativa do erro quadrático médio para cada função objetivo são adicionados à amostra. Ainda, são adicionados os pontos que minimizam cada uma das funções objetivo consideradas. Dessa forma, o número de análises pelo Método dos Elementos Finitos é diminuído substancialmente, com erros menores de 5% após somente 7 iterações do algoritmo.

Sobester *et al.* (2005) propõem o uso de um tipo diferente de Melhoria Esperada, chamada pelo autor de Melhoria Esperada Ponderada (WEI, *Weighted Expected Improvement*). Os autores realizam vários testes relativos ao peso utilizado na proposta, discutindo o uso e

a validade da técnica. Parte dessa discussão será apresentada na Seção 5.1.2. Além disso, é sugerido que o número de pontos utilizados na amostra inicial deve ser cerca de um terço dos utilizados na amostra final.

Xiang *et al.* (2016) utilizam um modelo de SVR para otimizar o efeito protetor de quebra-ventos em ferrovias. Nesse trabalho, o autor promove ainda a comparação entre três propostas diferentes: a maximização da estimativa do erro quadrático médio, a maximização da Função de Verossimilhança Concentrada e a Melhoria Esperada. Os autores comentam que, enquanto as duas primeiras são metodologias similares, que priorizam a exploração global, a última trata de balancear a busca local e global como discorrido anteriormente.

Pelas comparações promovidas, é concluído que a Melhoria Esperada funcionaria melhor para problemas em que existe uma menor densidade amostral ao longo do espaço de projeto, enquanto as outras ofertariam melhores resultados com uma maior densidade amostral. Por fim, os autores sugerem que, para modelos de SVR, os pontos amostrais a serem adicionados devem compor de 40% a 50% do tamanho final da amostra, valor diferente do indicado por Sobester *et al.* (2005) para modelos RBF.

Jacobs *et al.* (2004) propõem uma estrutura computacional montada em Python que promove a SAO, facilitando a implementação de problemas futuros. Nesta, é adicionado, a cada iteração, o ótimo global obtido. Para validar a estrutura, a mesma é aplicada, com sucesso, em um problema de otimização conhecido, referente à minimização da massa de uma treliça de dez barras considerando tipos de cargas diferentes.

Maia *et al.* (2019) comparam algumas abordagens SAO com diferentes critérios de inserção considerando os modelos de Kriging e RBF. Inicialmente, os autores promoveram otimizações considerando exemplos numéricos, comparando inclusive com algoritmos propostos por outros autores. Nessa etapa, o modelo de Kriging apresentou os melhores resultados, especialmente com uso da Melhoria Esperada.

Já na otimização de uma placa laminada com um furo central, todas as abordagens testadas ofertaram boas aproximações. O modelo RBF com aplicação da Melhoria Esperada em cada iteração obteve os menores erros ao final do algoritmo, com um erro de 0,64%. Além disso, é notada uma diminuição de 92% a 94% do número de análises de alta fidelidade promovidas, a depender do método escolhido.

O presente trabalho fará uso da Otimização Sequencial Aproximada (SAO) de forma a alcançar um maior proveito no processo de amostragem. Selecionando pontos de forma

inteligente ao longo do espaço de projeto é possível diminuir o número de análises numéricas necessárias para alcançar a eficácia desejada e, assim, aumentar ainda mais a eficiência do modelo substituto. A seguir será promovida uma maior discussão a cerca da inserção de pontos na amostra, e será realizada uma melhor explanação sobre certas abordagens específicas.

## 5.1 Critérios de inserção de pontos

A inserção dos pontos deve promover uma melhoria da superfície a ser atingida com foco em duas buscas principais: a exploração local e a exploração global. Forrester *et al.* (2008) comentam ainda que podem existir dois tipos: critérios de fase única, os quais combinam ambas as explorações em um ponto só que será adicionado à amostra, ou critérios de múltiplas fases, que funcionarão com a adição de dois ou mais pontos distintos a fim de representar cada uma das buscas separadamente. Chung *et al.* (2018) propõem ainda uma metodologia na qual o algoritmo realiza a escolha entre promover uma metodologia de busca local ou de busca global, de acordo com certos parâmetros estabelecidos.

Sobester *et al.* (2005) comentam que, em problemas simples e unimodais, critérios baseados em busca local, como a adição do ótimo encontrado até então à amostra, geralmente promovem uma convergência mais rápida. Já em funções extremamente multimodais, a inserção de pontos em locais inexplorados pode ser mais eficaz. Em outros casos, critérios combinados tendem a promover uma melhoria mais eficiente da superfície, como a Melhoria Esperada.

Nas subseções seguintes são descritos alguns dos critérios de inserção de pontos encontrados na literatura que serão implementados no projeto.

### 5.1.1 Kitayama *et al.* (2010)

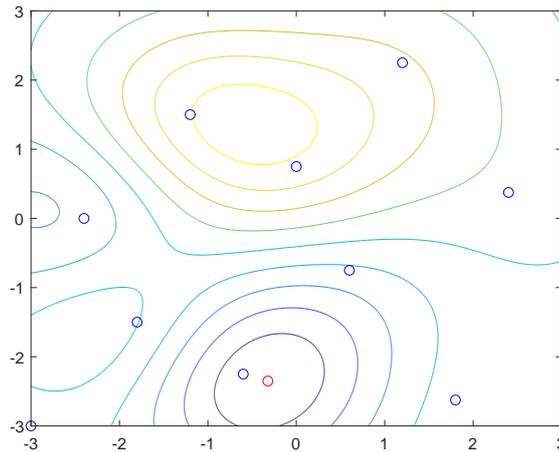
Essa metodologia, proposta por Kitayama *et al.* (2010), é um critério de duas fases, uma preocupada com a busca local e outra com a busca global. Assim, pelo menos dois pontos serão inseridos na amostra ao fim da geração com o intuito de realizar a melhoria da superfície de resposta.

O primeiro critério é representado pela simples inserção do melhor indivíduo até então na amostra. Kitayama *et al.* (2010) apontam que estratégias como essa promovem uma aproximação local muito precisa, muito embora exista um número máximo de pontos adicionados na região que sature o modelo. No presente trabalho, a metodologia se preocupará em inserir o

ótimo não repetido, de forma a não desperdiçar uma inserção muito próxima de outra já existente.

Como exemplo, a Figura 18 demonstra o ponto a ser adicionado à amostra inicial da função apresentada na Figura 13b através dessa metodologia. Os pontos amostrais estão marcados em azul, enquanto que o ponto a ser adicionado está marcado em vermelho.

Figura 18 – Inserção do melhor indivíduo



Fonte: elaborado pelo autor

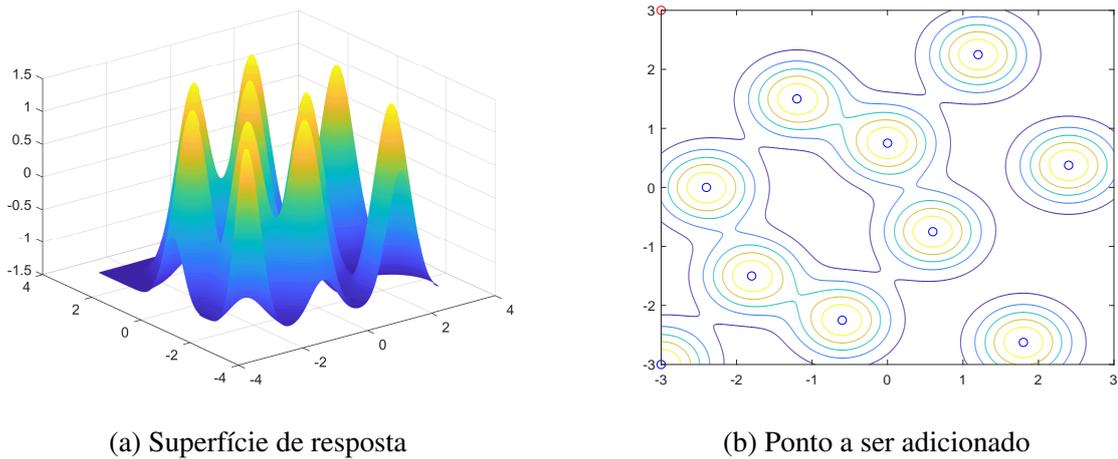
Embora esta seja uma metodologia muito intuitiva, existem contrapontos. Como este método promove uma exploração local muito direcionada, o mesmo está sujeita a algumas falhas inerentes. Forrester *et al.* (2008) apontam que essas abordagens tendem a se prender em mínimos locais se utilizada exclusivamente. Nakayama *et al.* (2003) fazem uma crítica similar ao método. Devido a isso, o uso dessa técnica deve ser feito com cuidado, especialmente em funções multimodais.

Para promover a necessária exploração global, Kitayama *et al.* (2010) propõem então o uso da Função Densidade. Esta deve estimar uma superfície que represente a distância entre um ponto qualquer do espaço de projeto e os pontos amostrais. Isso é realizada utilizando a mesma formulação do RBF, através de combinação linear de pontos amostrais, interpolando-os por funções de base definidas. A diferença é que, no caso desta, o vetor de respostas  $\mathbf{y}$  é definido como um vetor unitário. A proposta aplica todo o procedimento comum ao RBF: o vetor de pesos é calculado e realiza-se a definição da largura, seguido pela minimização do modelo substituto. O ponto encontrado nesse processo é então adicionado à amostra. Os autores propõem que  $m/2$  pontos sejam adicionados por essa abordagem a cada iteração do algoritmo, em que  $m$  é o número de variáveis de projeto.

Como exemplo, a Figura 19a apresenta a superfície da Função Densidade para a

função apresentada na Figura 13b. Para essa mesma função, a Figura 19b apresenta o primeiro ponto a ser adicionado através dessa metodologia. Os pontos amostrais estão marcados em azul, enquanto que o ponto adicionado está marcado em vermelho. Interessante notar que, em geral, os primeiros pontos adicionados nessa metodologia tendem a ser os extremos do espaço de projeto.

Figura 19 – Inserção de novo ponto através da Função Densidade



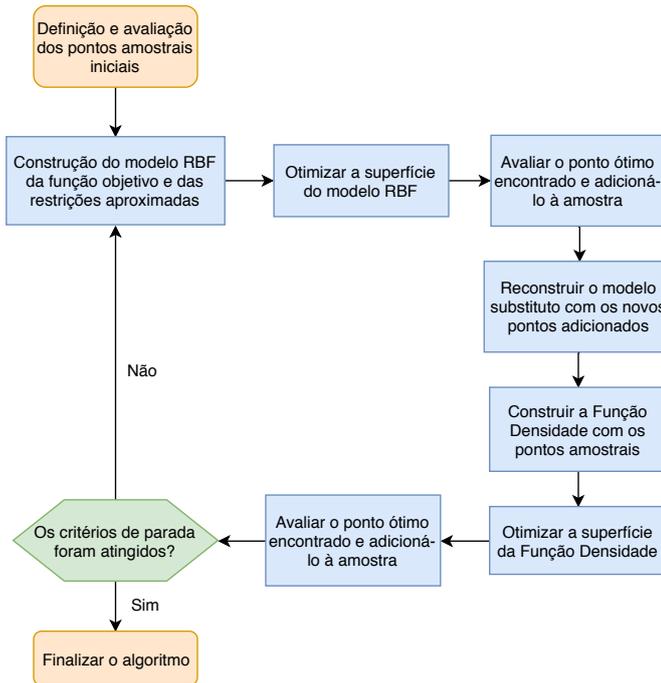
Fonte: elaborado pelo autor

Uma das vantagens no uso dessa metodologia é a simplicidade no tratamento dado a problemas com restrição. Estas podem ser tanto exatas ou, no caso de também possuírem um alto custo de avaliação, aproximadas por modelos substitutos. Independente do tipo, essas são passadas ao algoritmo, que aplica sobre estas os métodos de penalidade usuais no caso destas violarem algum dos limites estabelecidos. No caso da Função Densidade, as restrições não são consideradas, de forma que se consiga promover a exploração ao longo de todo o espaço de projeto.

A Figura 20 apresenta o fluxograma de funcionamento desse algoritmo, como proposto por Kitayama *et al.* (2010). Os critérios de parada indicados podem ser relativos tanto a um erro mínimo encontrado em relação ao modelo de alta fidelidade quanto a um número máximo de gerações ou de avaliações do modelo de alta fidelidade atingido.

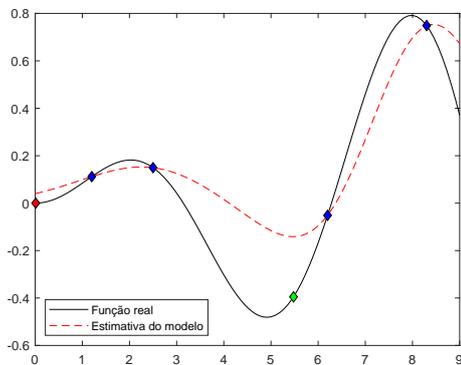
A Figura 21 ilustra a melhoria ocorrida pela inserção desses dois pontos em uma função unidimensional. Os pontos amostrais considerados estão definidos em azul, enquanto que os pontos inseridos, para a busca local e global respectivamente, estão em verde e vermelho. Percebe-se uma clara melhoria tanto na estimativa global quanto nas proximidades do ponto ótimo da função com a adição dos dois pontos em regiões de interesse.

Figura 20 – Fluxograma explicativo do algoritmo proposto por Kitayama *et al.* (2010)

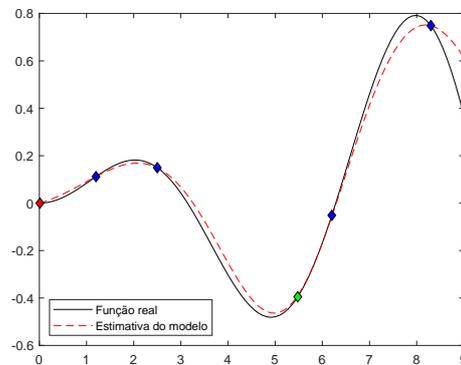


Fonte: elaborado pelo autor

Figura 21 – Melhoria da estimativa com a aplicação da abordagem de Kitayama



(a) Estimativa inicial e pontos definidos



(b) Estimativa após abordagem de Kitayama

Fonte: elaborado pelo autor

### 5.1.2 Melhoria Esperada

Muitas vezes, autores preferem se utilizar de abordagens estatísticas para estimar quais pontos possuem melhores propriedades de forma a aumentar a eficiência de um processo. Essas metodologias, embora inicialmente propostas para serem utilizadas em conjunto com o modelo de Kriging, em geral podem ser aplicadas em quaisquer processos de base Gaussiana, como certos tipos de SVR e RBF (XIANG *et al.*, 2016). Uma das mais utilizadas é a Melhoria Esperada (EI, *Expected Improvement*), aplicada por uma vasta gama de pesquisadores (SOBES-

TER *et al.*, 2005; XIANG *et al.*, 2016; REHMAN; LANGELAAR, 2017; MAIA *et al.*, 2019), inclusive na conhecida abordagem *Efficient Global Optimization* (EGO) proposta por Jones *et al.* (1998), que utiliza o modelo de Kriging. Esse é um método de fase única e apresenta uma tentativa de balancear busca global e local, o que ocasiona a inserção de menos pontos na amostra. Como discutido anteriormente, existem vantagens e desvantagens na escolha desse tipo de abordagem.

O método é baseado na estimativa do erro e pode ser aplicado para quaisquer processos com base Gaussiana (FORRESTER *et al.*, 2008). Alguns trabalhos buscam generalizar a metodologia a fim de aplicá-la em outros casos (YAO *et al.*, 2013). O cálculo da estimativa do erro é feito estatisticamente, e os detalhes matemáticos podem encontradas em Sacks *et al.* (1989). O cálculo da estimativa do erro do modelo ao longo do espaço de projeto é promovido por:

$$\hat{\sigma}^2(\mathbf{x}) = \sigma^2 \left[ 1 - \boldsymbol{\psi}^T \boldsymbol{\Psi}^{-1} \boldsymbol{\psi} + \frac{1 - \mathbf{1}^T \boldsymbol{\Psi}^{-1} \boldsymbol{\psi}}{\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Psi}^{-1} \mathbf{1}} \right] \quad (5.1)$$

em que o terceiro termo é geralmente desconsiderado, pois o mesmo é muito pequeno, e  $\sigma^2$  denota a variância do processo. Essa pode ser presumida através da estimativa da máxima verossimilhança para a variância, calculada por:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{1}\mu)^T \boldsymbol{\Psi}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{1}\mu)}{n} \quad (5.2)$$

que, por sua vez, depende da estimativa da média  $\mu$ , definida por:

$$\hat{\mu} = \frac{\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Psi}^{-1} \mathbf{y}}{\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Psi}^{-1} \mathbf{1}} \quad (5.3)$$

Examinando a Equação (5.1), no caso de calcularmos os erro nos pontos amostrais, o vetor  $\boldsymbol{\psi}$  seria uma coluna da matriz  $\boldsymbol{\Psi}$ . Assim, ambas as parcelas  $\boldsymbol{\psi}^T \boldsymbol{\Psi}^{-1} \boldsymbol{\psi}$  e  $\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Psi}^{-1} \boldsymbol{\psi}$  seriam iguais a 1, resultando em um erro nulo nos pontos amostrais, como esperado. Além disso, a estimativa do erro aumenta para pontos mais distantes destes. Importante notar que, devido a isso, os pesos devem ser definidos por interpolação, como definido na Equação (4.12), e não por minimização do erro quadrático, como definido na Equação (4.15). Além disso, enquanto que os estimadores  $\hat{\mu}$  e  $\hat{\sigma}^2$  não dependem do ponto  $\mathbf{x}$  sendo estimado, o vetor  $\boldsymbol{\psi}$ , na Equação (5.1), depende deste.

A possibilidade de estimar o erro de processos Gaussianos é uma característica muito importante para esse tipo de base, e se dá justamente devido à analogia entre a função Gaussiana e a distribuição normal. Considerando a incerteza como um processo estocástico, derivado da

variável  $y$ , de média  $\hat{y}(x)$  e variância  $\hat{s}^2(x)$ , é possível elaborar um critério de inserção de pontos derivado da relação entre esses dois (FORRESTER *et al.*, 2008). A EI é o mais utilizado desses critérios e, para um ponto  $\mathbf{x}$  qualquer, pode ser calculada como demonstrado em:

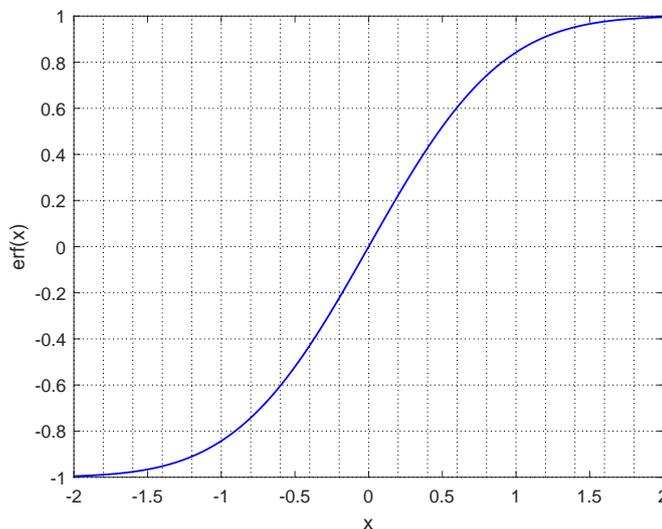
$$E[I(\mathbf{x})] = (y_{min} - \hat{y}(\mathbf{x})) \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left( \frac{y_{min} - \hat{y}(\mathbf{x})}{\hat{s}\sqrt{2}} \right) \right] + \frac{\hat{s}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ \frac{-(y_{min} - \hat{y}(\mathbf{x}))^2}{2\hat{s}^2} \right] \quad (5.4)$$

em que  $y_{min}$  é o menor valor da função objetivo em um ponto viável na amostra atual,  $\hat{y}(x)$  é a estimativa feita para  $y$ , calculada utilizando o modelo substituto, e  $\hat{s}$  é estimado através da Equação (5.1). A função erro de Gauss (erf), aplicada nessa formulação, é uma função especial muito utilizada em estatística que denota a integral:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^x e^{-t^2} dt \quad (5.5)$$

Para certa variável aleatória  $y$ , que respeita uma distribuição normal de média 0 e variância 1/2, a função erro calcula a probabilidade de  $y$  estar no intervalo  $[-x, x]$ . O comportamento dessa função é ilustrado pela Figura 22. A função é ímpar, e, para valores de  $x$  maiores que 2, esta apresenta uma assíntota horizontal tendendo à 1.

Figura 22 – Comportamento da função erro de Gauss



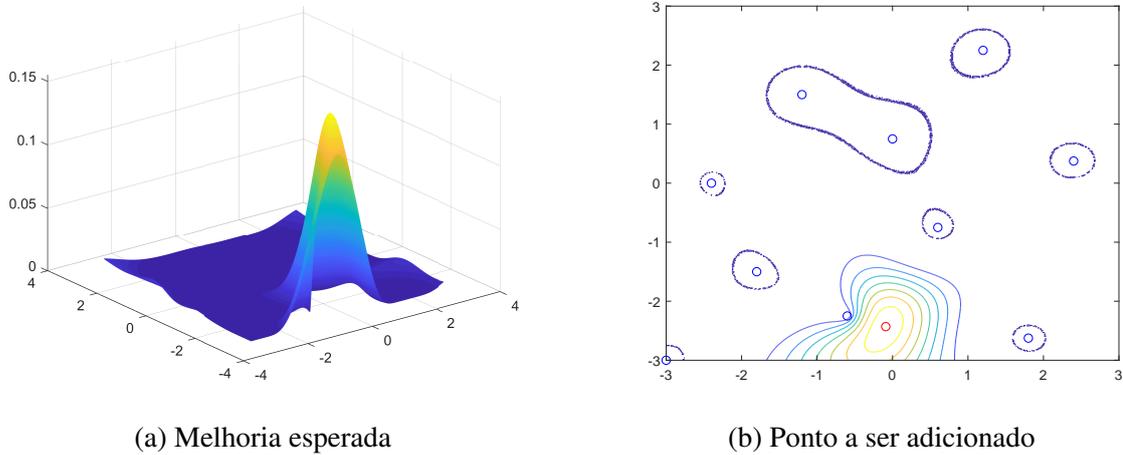
Fonte: elaborado pelo autor

Na Equação (5.4), pode ser entendido que o primeiro termo da equação se refere à busca local, enquanto o segundo termo se refere à busca global (SOBESTER *et al.*, 2005). O ponto  $\mathbf{x}$  que possuir a maior melhoria esperada é adicionado à amostra.

Para exemplificar a proposta, a Figura 23a apresenta a superfície da Melhoria Esperada para a função apresentada na Figura 13b. Para essa mesma função, a Figura 23b apresenta o

ponto a ser adicionado através dessa metodologia. Os pontos amostrais estão marcados em azul, enquanto que o ponto adicionado está marcado em vermelho.

Figura 23 – Inserção de novo ponto através da Melhoria Esperada



Fonte: elaborado pelo autor

Nessa modalidade, o tratamento dado a restrições é mais complexo. Sobester *et al.* (2005) comenta que, independente de a restrição ser aproximada ou exata, caso alguma destas seja violada, a melhoria esperada do ponto deve ser igual a 0. No entanto, nos casos em que esta é aproximada, essa prática pode impedir a exploração de regiões importantes do espaço de projeto que estejam perto do limiar de viabilidade. Nesse caso, uma saída é considerar uma certa tolerância, em que se dá certa margem à restrição antes de descartá-la totalmente. Forrester *et al.* (2008) comenta uma outra opção, em que, para restrições aproximadas, é calculada uma outra métrica estatística, chamada de Probabilidade de Viabilidade (PF, *Probability of Feasibility*). Essa pode ser calculada por:

$$P[F(\mathbf{x})] = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left( \frac{g_{min} - \hat{g}(\mathbf{x})}{\hat{s}\sqrt{2}} \right) \quad (5.6)$$

Nessa formulação,  $g_{min}$  se refere ao limite dado à restrição, enquanto que  $\hat{g}(x)$  é o valor estimado pelo modelo substituto para ela. Por fim, como são análises independentes, multiplica-se  $P[F(x)]$  por  $E[I(x)]$  para considerar os dois aspectos em um mesmo ponto no cálculo da melhoria esperada com restrições, como em:

$$E[I(\mathbf{x}) \cap F(\mathbf{x})] = E[I(\mathbf{x})]P[F(\mathbf{x})] \quad (5.7)$$

Tutum *et al.* (2014) aplicam uma abordagem um pouco diferente. Esta realiza uma consideração a mais em relação à incerteza da região explorada, priorizando pontos no limiar de

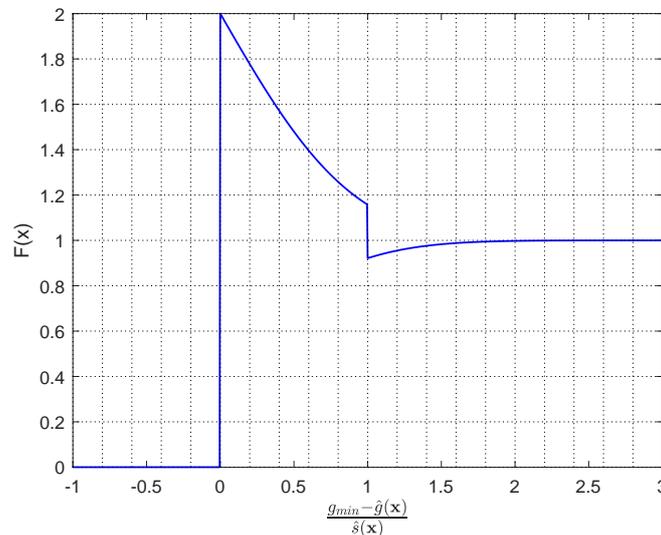
viabilidade no espaço de projeto. Assim, a EI pode ser calculada por:

$$E[I(\mathbf{x}) \cap F(\mathbf{x})] = E[I(\mathbf{x})]F(\mathbf{x}) \quad (5.8a)$$

$$F(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{g_{\min} - \hat{g}(\mathbf{x})}{\hat{s}(\mathbf{x})}\right) & , \text{ se } \operatorname{erf}\left(\frac{g_{\min} - \hat{g}(\mathbf{x})}{\hat{s}(\mathbf{x})}\right) = 1 \\ 2 - \operatorname{erf}\left(\frac{g_{\min} - \hat{g}(\mathbf{x})}{\hat{s}(\mathbf{x})}\right) & , \text{ se } 0 < \operatorname{erf}\left(\frac{g_{\min} - \hat{g}(\mathbf{x})}{\hat{s}(\mathbf{x})}\right) < 1 \\ 0 & , \text{ em outros casos} \end{cases} \quad (5.8b)$$

em que  $F(\mathbf{x})$  deve ser calculado para cada restrição. Tutum *et al.* (2014) tece alguns comentários sobre o método. Se todas as restrições forem satisfeitas e  $\hat{s}(\mathbf{x})$  for pequeno, ou seja, se a incerteza for baixa,  $P[F(\mathbf{x})] = 1$ . Esse é o primeiro dos casos apresentados. Se todas as restrições forem, novamente, satisfeitas, com pelo menos uma muito próxima do limite de viabilidade ou  $\hat{s}(\mathbf{x})$  for maior,  $P[F(\mathbf{x})] > 1$ . Assim, esse ponto é favorecido em relação aos demais. Em outros casos,  $P[F(\mathbf{x})] = 0$ . No atual projeto, essa abordagem será adotada. A Figura 24 denota como o  $F(\mathbf{x})$  varia para diferentes valores de  $\frac{g_{\min} - \hat{g}(\mathbf{x})}{\hat{s}(\mathbf{x})}$ .

Figura 24 – Comportamento de  $F(\mathbf{x})$  como definido por Tutum *et al.* (2014)

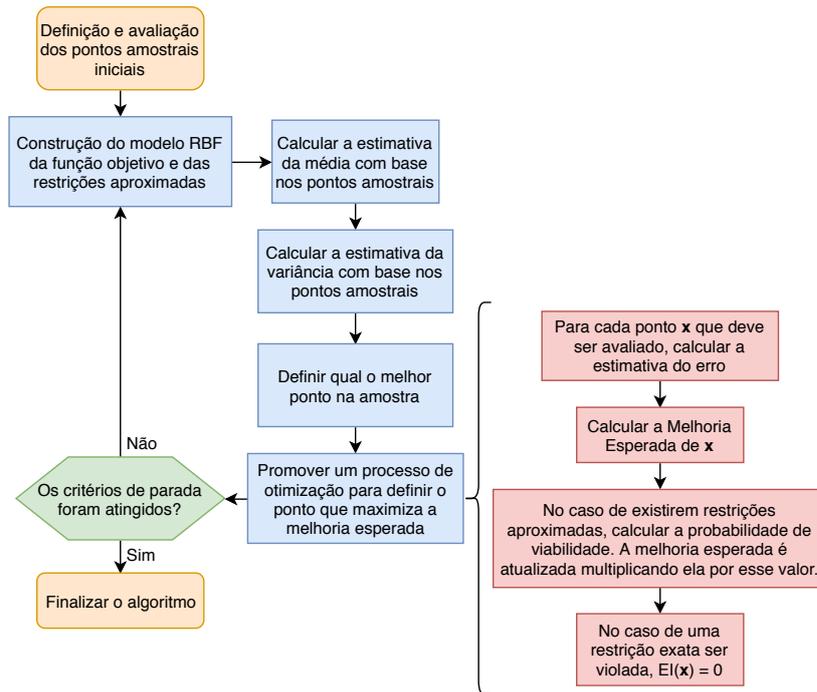


Fonte: elaborado pelo autor

A Figura 25 apresenta o fluxograma de funcionamento desse algoritmo, muito similar ao proposto em Sobester *et al.* (2005), apresentando de forma resumida e generalizada como é feito o cálculo da EI. Os critérios de parada indicados podem ser relativos tanto a um erro mínimo encontrado em relação ao modelo de alta fidelidade quanto a um número máximo de gerações ou de avaliações do modelo de alta fidelidade atingido.

A Figura 26 ilustra a melhoria ocorrida pela inserção do ponto em uma função

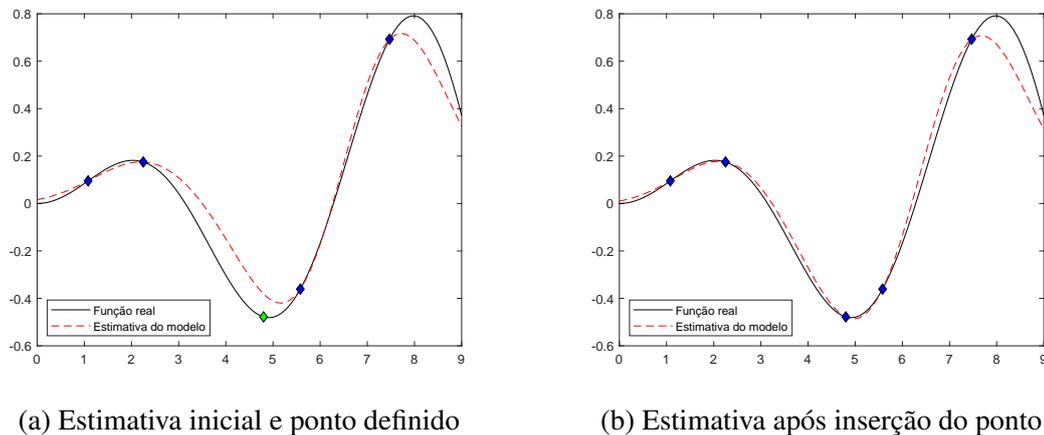
Figura 25 – Fluxograma explicativo do algoritmo utilizando a Melhoria Esperada



Fonte: elaborado pelo autor

unidimensional. Em azul estão definidos os pontos amostrais considerados, enquanto que o ponto verde faz referência ao ponto que promove a maximização da melhoria esperada.

Figura 26 – Melhoria da estimativa com a maximização da EI



Fonte: elaborado pelo autor

### 5.1.3 Melhoria Esperada Ponderada

De forma alternativa, Sobester *et al.* (2005) propuseram uma metodologia um pouco diferente, na qual são aplicados pesos diferentes para os critérios de busca local e global a fim de dar mais flexibilidade ao usuário. Essa foi denominada de Melhoria Esperada Ponderada

(WEI). Assim, os autores adicionam um parâmetro  $w$  que representa o peso que este vai dar ao termo referente à busca local, em que  $w$  deve ser definido como um valor entre 0 e 1. A seguinte equação denota a formulação proposta:

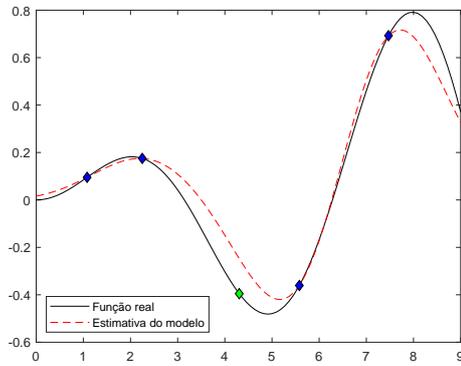
$$WE[I(\mathbf{x})] = w(y_{min} - \hat{y}(\mathbf{x})) \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left( \frac{(y_{min} - \hat{y}(\mathbf{x}))}{\hat{s}\sqrt{2}} \right) \right] + (1 - w) \frac{\hat{s}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ \frac{-(y_{min} - \hat{y}(\mathbf{x}))^2}{2\hat{s}^2} \right] \quad (5.9)$$

Sobester *et al.* (2005) comentam que as buscas local e global adquirem a mesma importância quando  $w = 0.35$ . No entanto, a Equação (5.4) resulta em valores encontrados quando  $w = 0.5$ , provendo uma maior importância à busca local. A existência deste parâmetro oferta ao usuário uma flexibilidade muito maior em relação ao tipo de busca desejado.

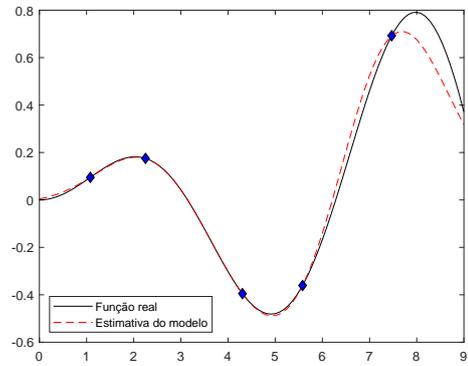
Ainda, os autores propõem que valores de  $w$  no domínio  $[0.2, 0.5]$  são boas escolhas quando o usuário está relativamente confiante quanto à estimativa inicial. Escolhas por valores extremos devem ser feitas com mais cuidado. Funções multimodais promovem melhores estimativas com valores menores, no domínio  $[0, 0.3]$ , priorizando uma maior busca global. No entanto, se o usuário está certo que o problema é muito unimodal, valores acima de 0.5 geram melhores previsões. Por fim, os autores comentam ainda que uma postura generalizada pode ser adotada, considerando que a resposta das funções segue uma superfície desconhecida, ou seja, o projetista não sabe, de antemão, como esta se comporta. Assim, o valor de  $w$  se alterna de forma cíclica a cada geração, assumindo os valores de 0.1, 0.3, 0.5 e 0.7. Essa será a modalidade adotada por esse trabalho.

A Figura 27 ilustra a melhoria ocorrida pela inserção do ponto em uma função unidimensional. Em azul estão definidos os pontos amostrais considerados, enquanto que o ponto verde faz referência ao ponto que promove a maximização da melhoria esperada modificada. Para esse exemplo, foram utilizados três valores diferentes para o parâmetro  $w$ . Interessante notar que, como essa função é simples e unimodal, valores maiores de  $w$  realmente aparentam proporcionar melhores estimativas. Quando utilizado  $w = 0.7$ , o ponto adicionado é muito próximo ao ótimo global. Esse comportamento segue o padrão apontado pelo autor.

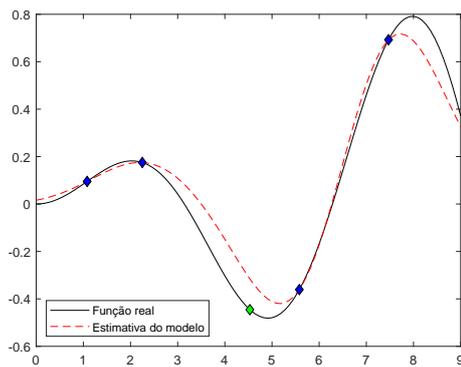
Figura 27 – Melhoria da estimativa com a aplicação da abordagem WEI



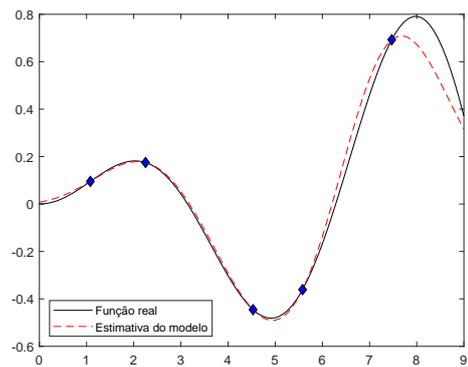
(a) Ponto definido para  $w = 0.1$



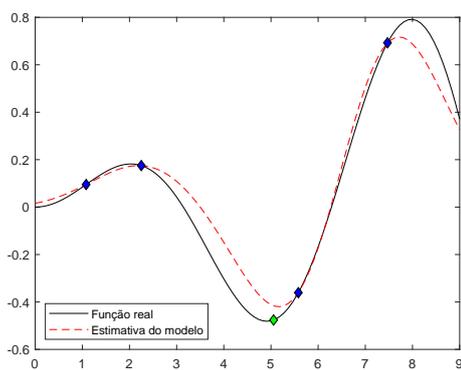
(b) Estimativa após WEI com  $w = 0.1$



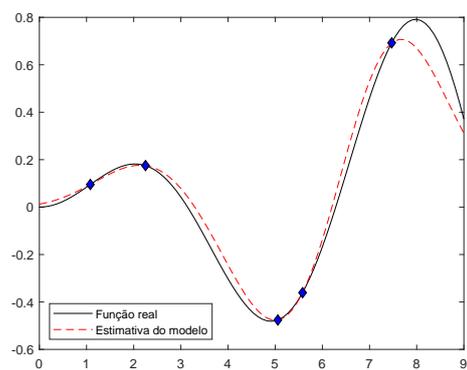
(c) Ponto definido para  $w = 0.35$



(d) Estimativa após WEI com  $w = 0.35$



(e) Ponto definido para  $w = 0.7$



(f) Estimativa após WEI com  $w = 0.7$

Fonte: elaborado pelo autor

## 6 METODOLOGIA

Nesse capítulo será discutido o método a ser utilizado para realizar as comparações propostas. De forma geral, estas serão feitas com uso do RBF aliado a diferentes metodologias SAO. Nestas, será utilizada a Sequência de Hammersley (HSS) de forma a gerar uma amostra inicial uniforme a ser avaliada. O número inicial de pontos será definido de acordo com a abordagem proposta por Amouzgar e Strömberg (2016), utilizando uma amostra inicial pequena.

Inicialmente, de forma a validar a proposta e estudar comportamentos gerais da aplicação do procedimento, será promovido um estudo comparativo em Funções Teste de referência entre diferentes abordagens SAO e diferentes métodos para a definição da largura de modelos RBF. Essa comparação é importante visto que, ao longo da otimização, a amostra vai perdendo sua uniformidade inicial. No entanto, a abordagem de definição da largura deve ser tal que, ainda assim, consiga aproximar bem a função ao longo de todo o processo iterativo. Nessa etapa serão consideradas tanto funções sem restrição quanto funções com restrição, todas já estudadas e facilmente encontradas na literatura. No caso de funções com restrição, todas elas serão aproximadas por modelos substitutos, o que não é o ideal em casos reais: restrições de cálculo simples devem ser sempre avaliadas de forma exata (FORRESTER *et al.*, 2008).

Após esse estudo preliminar, serão realizadas as otimizações de FGM. Inicialmente, o processo de análise desses deve ser validado a partir de comparações com trabalhos passados. Logo após, o processo de otimização será realizado com uso das abordagens propostas, de forma a demonstrar a eficiência alcançada com o uso de modelos substitutos na otimização desse tipo de material.

Devido ao caráter estocástico do processo, para cada exemplo serão realizadas 10 otimizações, alterando a *seed* utilizada em cada uma dessas. As métricas utilizadas para auxiliar a comparação serão o rendimento e a precisão. A primeira destas se refere ao número de avaliações de alta fidelidade necessárias, em média, para que o algoritmo convirja, utilizando o ponto ótimo da função objetivo como ponto de validação. Essa métrica será nomeada como Número Médio de Pontos Amostrais para Convergir (NMPAC). O percentual de otimizações que conseguiram alcançar a convergência também será apontado. Nesse trabalho será considerado que a convergência é alcançada quando a Raiz do Erro Quadrático Médio Normalizado (NRMSE, *Normalized Root Mean Squared Error*) encontrada é menor que 5%, em que este é calculado

por:

$$NRMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n_v} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n_v} (y_i)^2}}, \quad (6.1)$$

em que  $n_v$  se refere a quantidade de pontos de validação utilizados.

Já a precisão se refere ao quão próximos os valores ótimos encontrados nas otimizações estão do ótimo global ao final do processo iterativo. Essa será observada a partir da média dos NRMSE encontrados nas dez otimizações, além da apresentação dos resultados encontrados em formato de Boxplot de forma a estudar como se dá a variação dos resultados.

Além disso, nos problemas de otimização de problemas estruturais será utilizada uma métrica relativa ao *Speed-up* que, nesse contexto, se refere ao ganho de eficiência computacional com uso de modelos substitutos. Essa métrica pode ser calculada por:

$$S = \frac{T_{HFM}}{T_{SUR}} \quad (6.2)$$

em que  $T_{HFM}$  se refere ao tempo gasto na otimização convencional e  $T_{SUR}$  ao tempo gasto na otimização com uso de modelos substitutos. Nestes, considerou-se o *Wall-clock time*, o tempo desde o início do processo de otimização até a finalização do algoritmo completo.

Por fim, para melhor identificar cada método utilizado, serão utilizados acrônimos. Quanto às metodologias de definição da largura, NAK se refere à proposta de Nakayama *et al.* (2002), ASKIT à proposta de Kitayama *et al.* (2010) (com uso da escala adaptativa), LOOCV à abordagem homônima e 5FCV à versão da abordagem  $k$ -FCV quando  $k = 5$ . Em casos que não forem bidimensionais, será utilizada ainda a versão uniforme da fórmula proposta por Kitayama *et al.* (2010), denominada de UKIT, a qual o mesmo comenta que promove uma generalização melhor que a NAK para funções de maior dimensionalidade. Já em relação às abordagens SAO, KITSAO se refere à abordagem proposta por Kitayama *et al.* (2010), enquanto que RBEISAO se refere ao uso da EI e RBFWEISAO se refere ao uso da WEI, cujo valor de  $w$  alternará entre os valores de 0.1, 0.3, 0.5 e 0.7 em cada iteração. O funcionamento geral do algoritmo dessas duas é similar à proposta por Sobester *et al.* (2005), como já apontado.

Como todos os problemas de otimização, incluindo os problemas estruturais, trabalharão com variáveis contínuas, será utilizado o PSO para realizar as otimizações presentes em cada abordagem SAO, visto que esse algoritmo é melhor que o GA para tratar desse tipo de problema.

A implementação será promovida na linguagem de programação C++, utilizando o paradigma de Programação Orientada a Objetos (OOP, *Object Oriented Programming*), através

do programa *Biologically Inspired Optimization System* (BIOS), desenvolvido no Laboratório de Mecânica Computacional e Visualização (LMCV). A análise numérica será promovida através do programa *Finite Analysis Tool* (FAST), também desenvolvido pelo LMCV.

## 7 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesse capítulo serão expostos os resultados obtidos de acordo com o método definido previamente, assim como será feita uma breve discussão a cerca destes. Estes serão divididos entre a otimização de Funções Teste, largamente conhecidas e estudadas pela literatura, e a otimização de problemas estruturais, focando em estruturas bidimensionais compostas por FGM. Todos os exemplos numéricos foram promovidos em um máquina i7-5500U CPU de 2.4 GHz e 16 GB de RAM. Em nenhum dos casos houve paralelização do processo de otimização.

### 7.1 Funções Teste

De forma a validar a metodologia proposta, o presente trabalho promoverá comparações em dois tipos de problemas de referência: com ou sem restrições. Essa divisão é importante pois o tratamento destas se dá de forma muito diferenciada para cada uma das metodologias a serem testadas. Nas subseções seguintes, cada uma destas receberá enfoque.

#### 7.1.1 Problemas sem restrição

As Funções Teste sem restrições que serão utilizadas como referência no estudo comparativo entre algoritmos são apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 – Apresentação das funções teste sem restrição utilizadas

Nome	Código	$m$	Domínio	Solução exata	Mínimo global
Peaks	FT1	2	$x_i \in [-3, 3]$	$\mathbf{x} = (0.22887, -1.62596)$	$f_{opt} = -6.5508$
Hartmann3	FT2	3	$x_i \in [0, 1]$	$\mathbf{x} = (0.11461, 0.55565, 0.85255)$	$f_{opt} = -3.86279$
Hartmann6	FT3	6	$x_i \in [0, 1]$	$\mathbf{x} = (0.20169, 0.15001, 0.47687, 0.27533, 0.31165, 0.65730)$	$f_{opt} = -3.32237$
Styblinski-Tang	FT4	10	$x_i \in [-5, 5]$	$\mathbf{x} = (-\mathbf{2.90353})$	$f_{opt} = -391.6599$

Essas quatro Funções Teste (FT1-4) se referem a problemas de minimização, cujos melhores indivíduos e mínimos globais se encontram dispostos na referida tabela. A FT1 se refere à função Peaks, uma função bidimensional multimodal que já foi apresentada em alguns exemplos anteriores. A formulação desta é definida por:

$$f(\mathbf{x}) = 3(1 - x_1)^2 e^{-(x_1^2 + (x_2 + 1)^2)} - 10 \left( \frac{x_1}{5} - x_1^3 - x_2^5 \right) e^{-(x_1^2 + x_2^2)} - \frac{1}{3} e^{-(x_2^2 + (x_1 + 1)^2)} \quad (7.1)$$

As funções FT2 e FT3 se referem às clássicas funções Hartmann3 e Hartmann6, vastamente utilizadas como funções teste na literatura referente à otimização. Ambas possuem

igual formulação, definida por:

$$f(\mathbf{x}) = - \sum_{i=1}^4 \alpha_i \exp \left( - \sum_{j=1}^m A_{ij} (x_j - P_{ij})^2 \right) \quad (7.2)$$

em que  $\alpha = (1.0, 1.2, 3.0, 3.2)$ . A diferença entre as duas funções se dá na caracterização das matrizes  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{P}$ . No caso da Hartmann3, estas são definidas por:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 10 & 30 \\ 0.1 & 10 & 35 \\ 3 & 10 & 30 \\ 0.1 & 10 & 35 \end{bmatrix} \quad (7.3a)$$

$$\mathbf{P} = 10^{-4} \begin{bmatrix} 3689 & 1170 & 2673 \\ 4699 & 4387 & 7470 \\ 1091 & 8732 & 5547 \\ 381 & 5743 & 8828 \end{bmatrix} \quad (7.3b)$$

Já na otimização da função Hartmann6, essas matrizes são definidas por:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 10 & 3 & 17 & 3.5 & 1.7 & 8 \\ 0.05 & 10 & 17 & 0.1 & 8 & 14 \\ 3 & 3.5 & 1.7 & 10 & 17 & 8 \\ 17 & 8 & 0.05 & 10 & 0.1 & 14 \end{bmatrix} \quad (7.4a)$$

$$\mathbf{P} = 10^{-4} \begin{bmatrix} 1312 & 1696 & 5569 & 124 & 8283 & 5886 \\ 2329 & 4135 & 8307 & 3736 & 1004 & 9991 \\ 2348 & 1451 & 3522 & 2883 & 3047 & 6650 \\ 4047 & 8828 & 8732 & 5743 & 1091 & 381 \end{bmatrix} \quad (7.4b)$$

Por fim, a FT4 se refere à função Styblinski-Tang, cuja dimensionalidade pode ser definida de acordo com a vontade do usuário. No projeto em questão, será utilizada uma versão desta com 10 variáveis. Devido ao custo computacional obtido, a abordagem LOOCV não será estudada nesse exemplo. Essa função é definida por:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (x_i^4 - 16x_i^2 + 5x_i) \quad (7.5)$$

Em todos os exemplos, o critério de parada utilizado foi o número de avaliações do modelo de alta fidelidade. Para a FT1, FT2, FT3 e FT4 o número máximo de avaliações considerado foi de, respectivamente, 75, 150, 200 e 300. Em relação às otimizações realizadas

dentro dos algoritmos, foi utilizado um algoritmo PSO com 500 iterações e 50 partículas, com exceção da FT4, na qual utilizaram-se 750 iterações e 75 partículas. Visto que as análises são rápidas, esse elevado número de avaliações foi utilizado para garantir que os ótimos fossem encontrados. Estes valores eram suficientes para que, utilizando a otimização convencional, o ótimo global fosse encontrado com certa facilidade. Os resultados encontrados para cada uma destas funções se encontram nas Figuras 28, 29, 30 e 31. As métricas de erro para as mesmas são apresentadas nas Tabelas 2, 3, 4 e 5.

Tabela 2 – Métricas de erro obtidas para a FT1

Estratégia SAO	Largura	Percentual de convergência	NMPAC	$\overline{NRMSE}$
KITSAO	NAK	0%	-	5.70%
	ASKIT	0%	-	65.39%
	LOOCV	100%	44	0.21%
	5FCV	100%	40	2.33%
RBFESAO	NAK	100%	14	0.04%
	ASKIT	0%	-	47.87%
	LOOCV	100%	15	0.03%
	5FCV	100%	31	0.05%
RBFWEISAO	NAK	100%	15	0.08%
	ASKIT	0%	-	36.93%
	LOOCV	100%	16	0.01%
	5FCV	100%	18	0.02%

Tabela 3 – Métricas de erro obtidas para a FT2

Estratégia SAO	Largura	Percentual de convergência	NMPAC	$\overline{NRMSE}$
KITSAO	NAK	0%	-	9.64%
	UKIT	0%	-	8.01%
	ASKIT	0%	-	9.44%
	LOOCV	100%	25	0.45%
	5FCV	50%	29	3.47%
RBFESAO	NAK	100%	16	0.07%
	UKIT	100%	16	0.12%
	ASKIT	30%	70	6.02%
	LOOCV	100%	21	0.15%
	5FCV	100%	18	0.07%
RBFWEISAO	NAK	100%	23	0.96%
	UKIT	100%	17	0.13%
	ASKIT	50%	55	4.36%
	LOOCV	100%	22	0.21%
	5FCV	100%	23	0.33%

Tabela 4 – Métricas de erro obtidas para a FT3

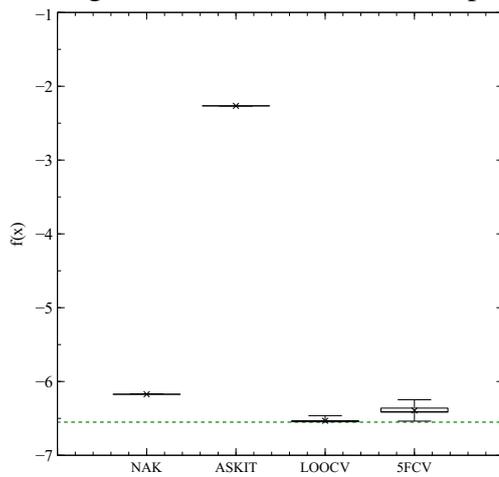
Estratégia SAO	Largura	Percentual de convergência	NMPAC	$\overline{NRMSE}$
KITSAO	NAK	60%	174	5.26%
	UKIT	0%	-	26.51%
	ASKIT	0%	-	14.79%
	LOOCV	0%	-	20.56%
	5FCV	0%	-	10.06%
RBFESAO	NAK	100%	96	0.16%
	UKIT	100%	68	0.16%
	ASKIT	10%	162	18.02%
	LOOCV	100%	59	0.06%
	5FCV	100%	62	0.07%
RBFWEISAO	NAK	100%	154	1.28%
	UKIT	100%	65	0.03%
	ASKIT	0%	-	21.66%
	LOOCV	0%	-	26.41%
	5FCV	100%	91	1.34%

Tabela 5 – Métricas de erro obtidas para a FT4

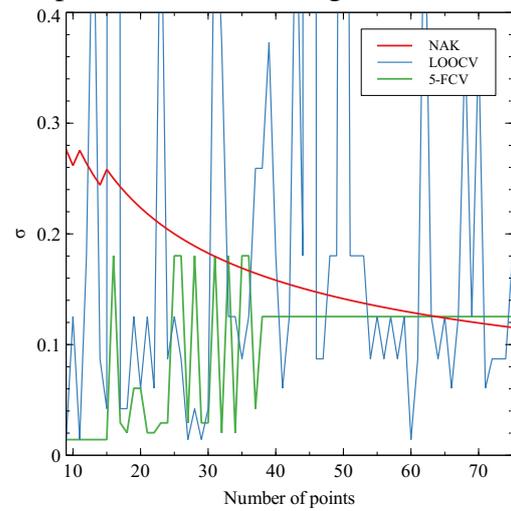
Estratégia SAO	Largura	Percentual de convergência	NMPAC	$\overline{NRMSE}$
KITSAO	NAK	0%	-	40.10%
	UKIT	0%	-	32.10%
	ASKIT	0%	-	36.10%
	5FCV	0%	-	36.96%
RBFESAO	NAK	0%	-	32.62%
	UKIT	20%	203	11.40%
	ASKIT	0%	-	10.64%
	5FCV	0%	-	17.87%
RBFWEISAO	NAK	0%	-	38.97%
	UKIT	30%	193	10.88%
	ASKIT	10%	265	14.55%
	5FCV	50%	156	5.84%

Analisando os resultados, é facilmente perceptível que as abordagens envolvendo a Melhoria Esperada (RBFESAO e RBFWEISAO) realizam uma busca tanto mais inteligente, alcançando baixo erros após uma pequena quantidade de pontos adicionais, quanto mais eficaz, usualmente apresentando menores  $\overline{NRMSE}$  ao final do processo que a KITSAO. O percentual de convergência delas é também maior em todos os casos. Entre essas duas, enquanto que a RBFESAO apresenta maior eficiência em certos casos, a RBFWEISAO aparenta prover uma maior robustez ao método. Sobester *et al.* (2005) comenta que a EI usual favorece a busca local, sendo necessário que o usuário ajuste os pesos sugeridos para que seja feita uma busca global. Assim, o uso de uma postura mais generalizada, como no caso aplicado no presente trabalho,

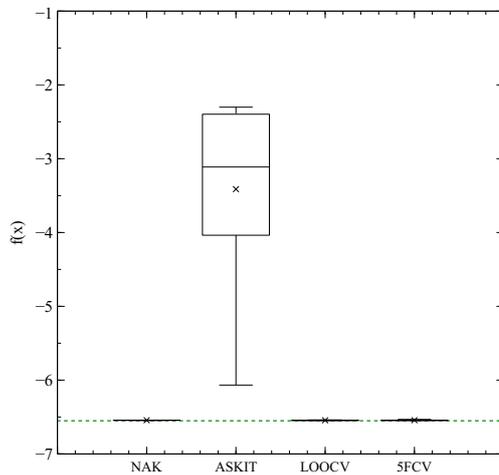
Figura 28 – Resultados obtidos para FT1 por diferentes abordagens SAO



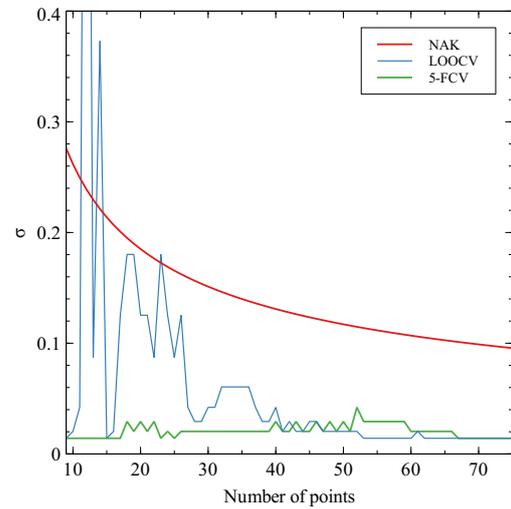
(a) Resultados obtidos com KITSAO



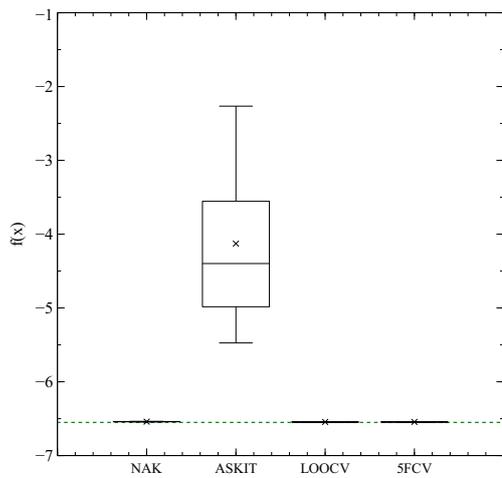
(b) Larguras estimadas



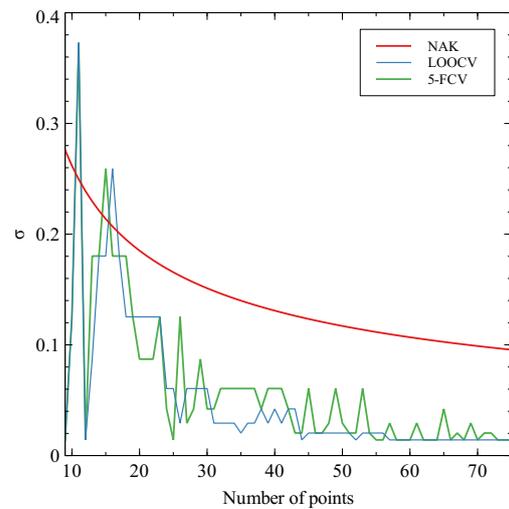
(c) Resultados obtidos com RBEISAO



(d) Larguras estimadas



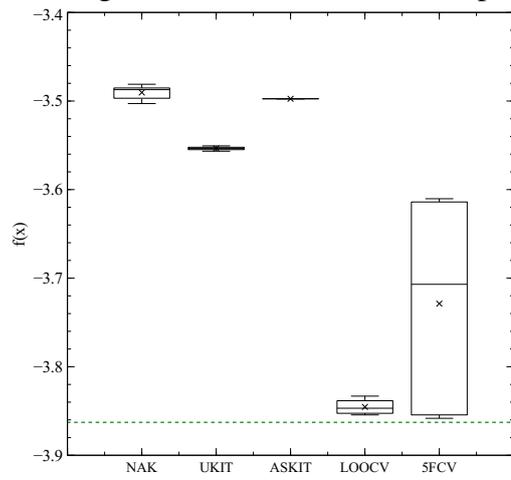
(e) Resultados obtidos com RBFWEISAO



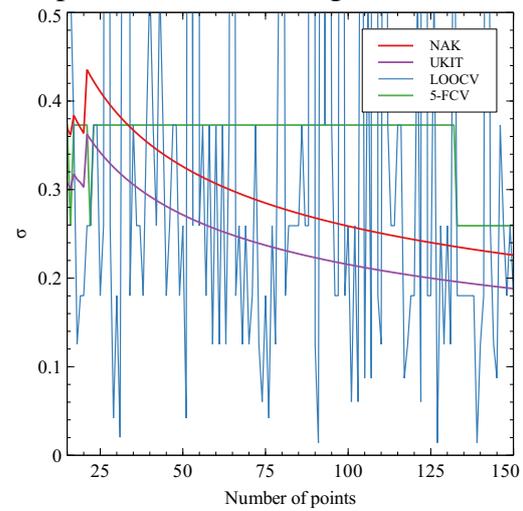
(f) Larguras estimadas

Fonte: elaborado pelo autor

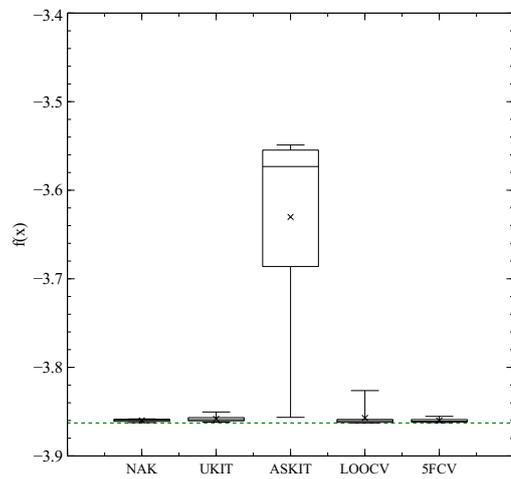
Figura 29 – Resultados obtidos para FT2 por diferentes abordagens SAO



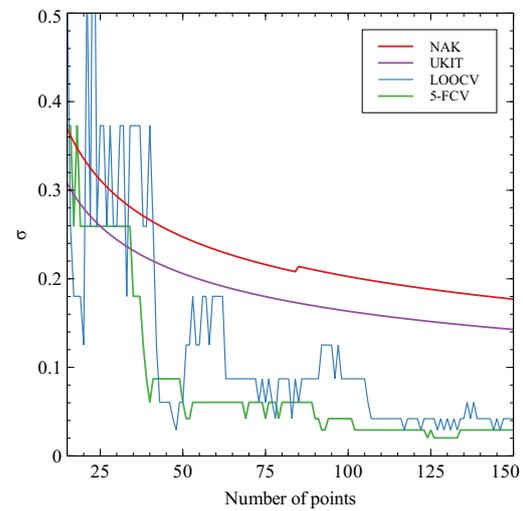
(a) Resultados obtidos com KITSAO



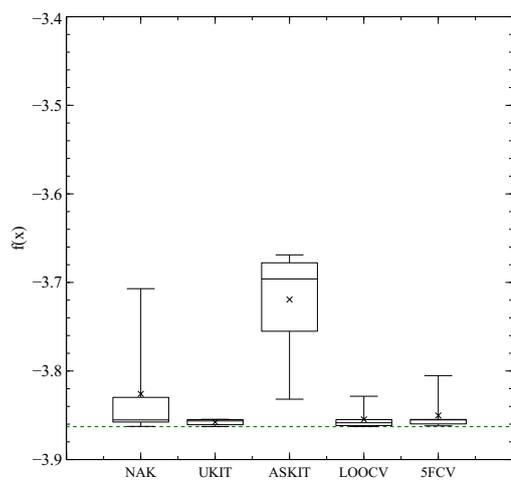
(b) Larguras estimadas



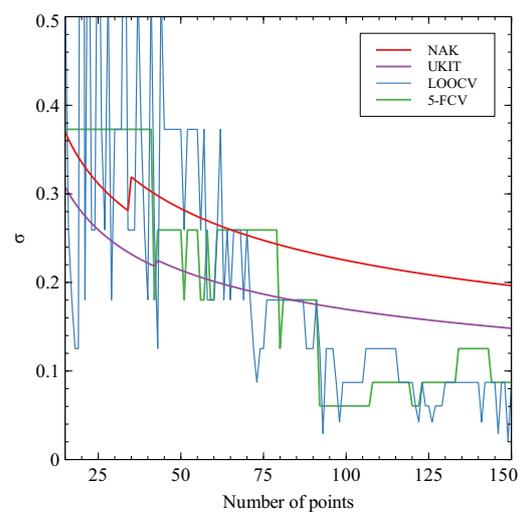
(c) Resultados obtidos com RBEISAO



(d) Larguras estimadas



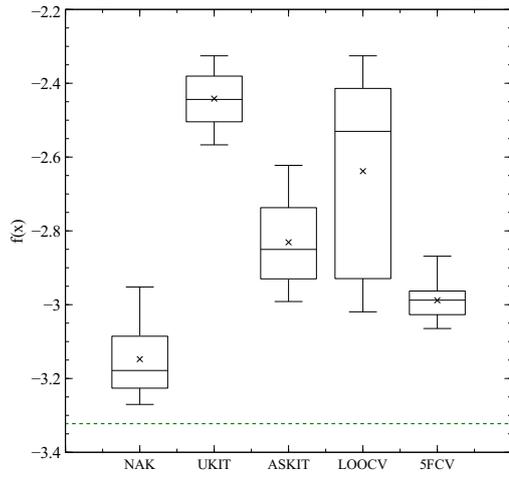
(e) Resultados obtidos com RBFWEISAO



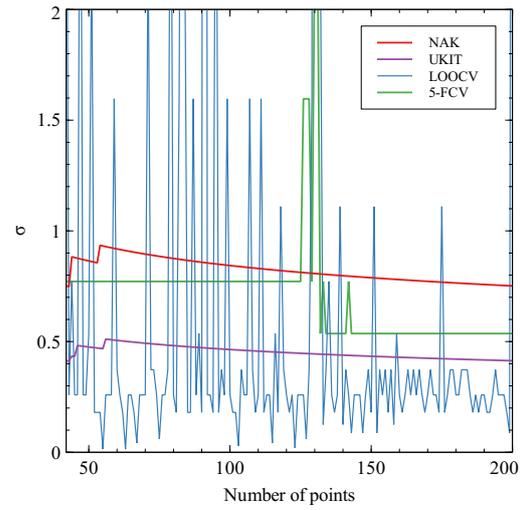
(f) Larguras estimadas

Fonte: elaborado pelo autor

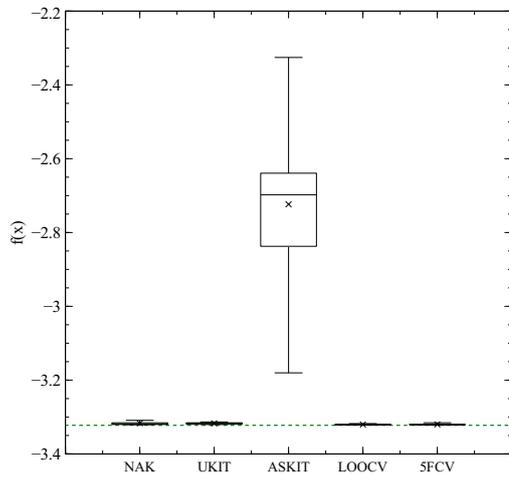
Figura 30 – Resultados obtidos para FT3 por diferentes abordagens SAO



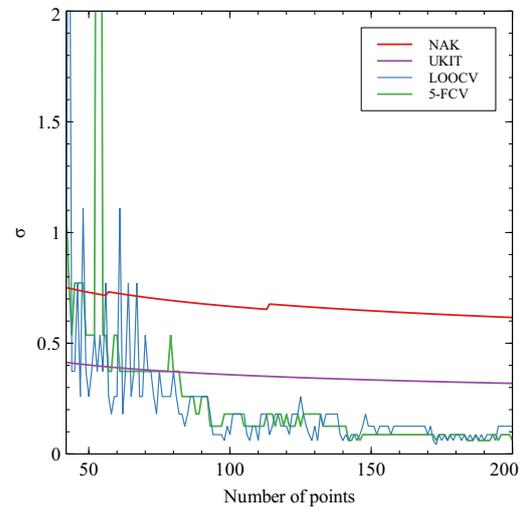
(a) Resultados obtidos com KITSAO



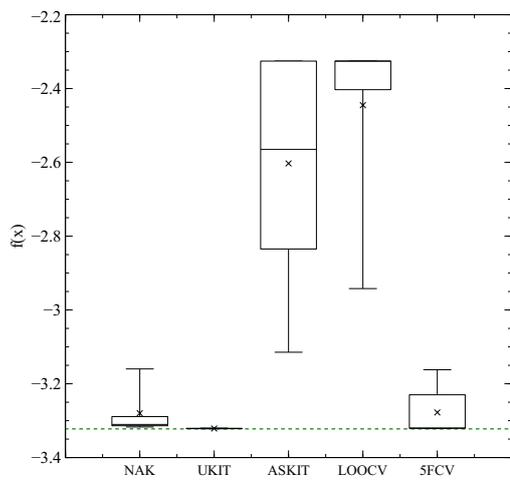
(b) Larguras estimadas



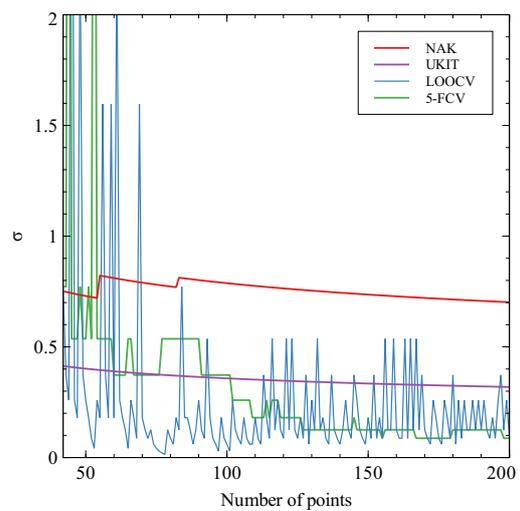
(c) Resultados obtidos com RBEISAO



(d) Larguras estimadas



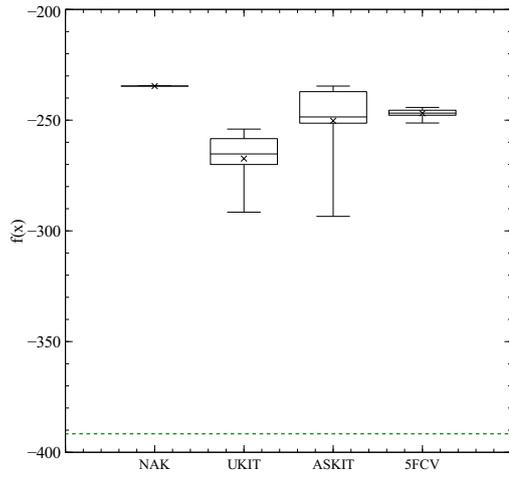
(e) Resultados obtidos com RBFWEISAO



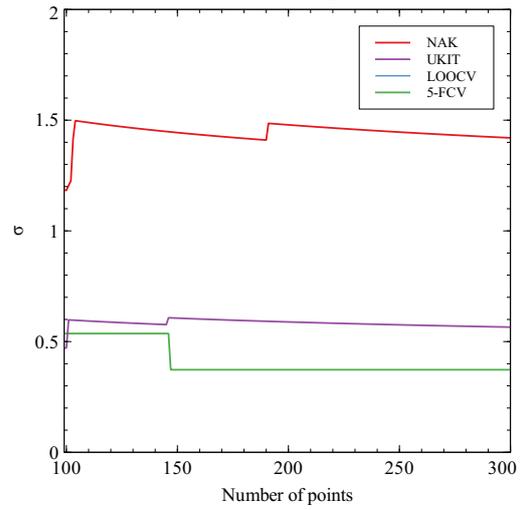
(f) Larguras estimadas

Fonte: elaborado pelo autor

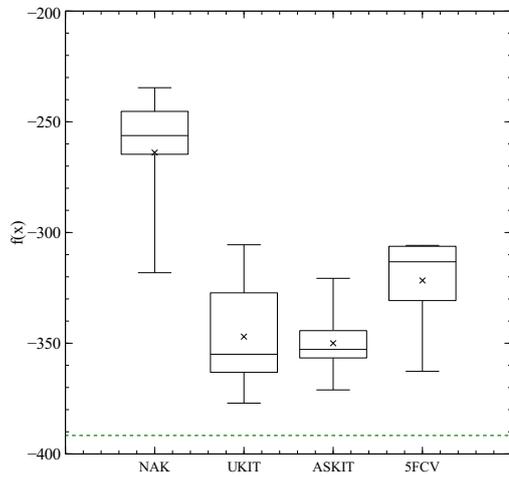
Figura 31 – Resultados obtidos para FT4 por diferentes abordagens SAO



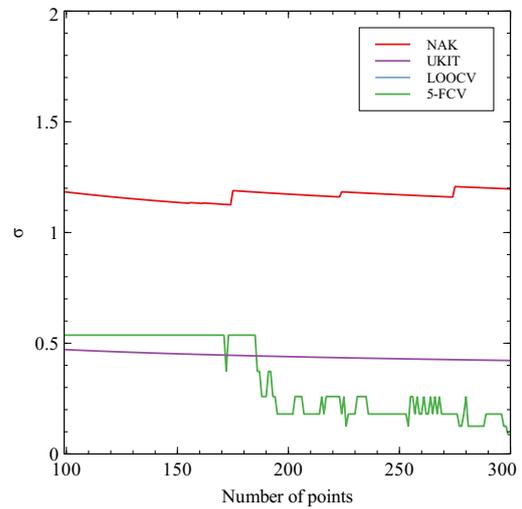
(a) Resultados obtidos com KITSAO



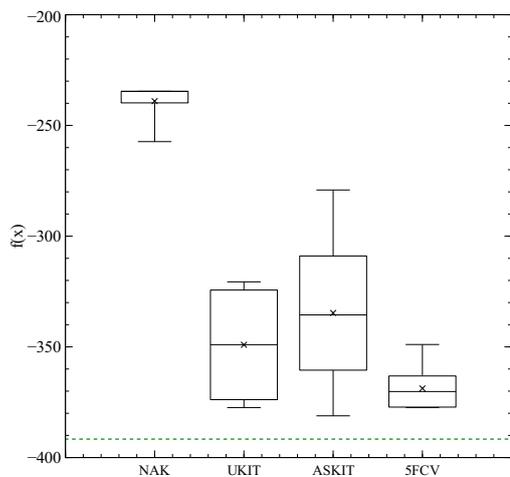
(b) Larguras estimadas



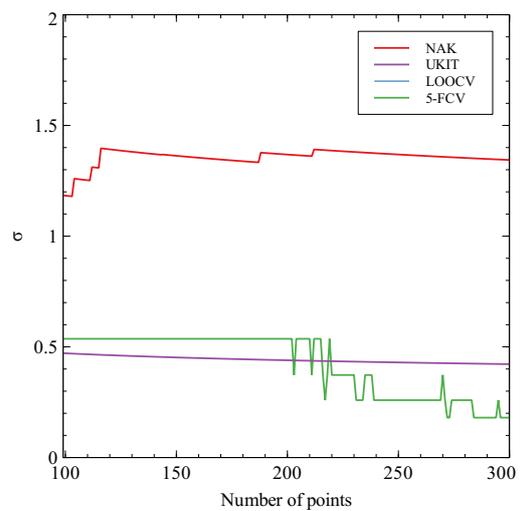
(c) Resultados obtidos com RBEISAO



(d) Larguras estimadas



(e) Resultados obtidos com RBFWEISAO



(f) Larguras estimadas

Fonte: elaborado pelo autor

oferta uma maior eficácia ao método em casos nos quais a busca global se faz necessária. Um exemplo claro disso são os resultados obtidos na FT4.

Em relação às abordagens de definição da largura, as melhores são, em geral, as abordagens de validação cruzada. No entanto, em alguns casos, a LOOCV apresenta uma variância muito grande, tornando o problema instável e dificultando a otimização do mesmo. Interessante notar que isso ocorre com maior frequência na abordagem KITSAO. Em certos casos, esse comportamento instável torna os resultados apresentados piores que os encontrados na 5FCV. Na FT4, devido ao aumento no número de pontos, o custo da LOOCV foi tão alto que foi preferível não analisar a abordagem.

Em relação às abordagens analíticas, tanto NAK quanto UKIT apresentam uma estimativa boa da largura em problemas de baixa dimensionalidade, demonstrando bons resultados quando utilizadas em conjunto com a RBEISAO e RBFWEISAO. No entanto, com o acréscimo no número de variáveis, UKIT realmente se sobressai, aparentemente provendo uma melhor generalização. Esse comportamento segue a crítica feita por Kitayama *et al.* (2010).

Já a ASKIT não apresenta resultados notáveis em nenhum dos problemas. No entanto, o aumento de dimensionalidade parece ter favorecido a abordagem, alcançando resultados próximos do ótimo quando utilizada em conjunto com a RBFWEISAO na FT4. Kitayama *et al.* (2010) promovem uma otimização dessa mesma função com uso da abordagem KITSAO, comparando resultados obtidos utilizando as metodologias de largura NAK e ASKIT, encontrando resultados muito promissores com o uso da última, proposta pelos autores. Enquanto que esses resultados diferem dos encontrados aqui, deve ser notado que os autores utilizaram um número máximo de pontos igual a 500, enquanto no caso atual foram utilizados 300 pontos. Ainda assim, se percebe uma eficácia maior com o uso de outras abordagens.

### **7.1.2 Problemas com restrição**

Os problemas com restrição são naturalmente mais complexos e fornecem uma dificuldade maior de se encontrar o ótimo. Os modelos substitutos devem ser capazes de identificar que regiões do espaço de projeto levam a projetos inviáveis a partir de uma boa estimativa das restrições. No caso dos problemas teste, todas as restrições serão aproximadas, o que não é o ideal em problemas reais: restrições simples usualmente devem ser tratadas com seu cálculo exato, visto que estas não possuem um alto custo de análise. Além disso, devido à existência de vários modelos substitutos em um único problema, o custo das abordagens de

validação cruzada aumenta linearmente, visto que a melhor largura deve ser definida para cada uma das aproximações. Devido a isso, serão feitas comparações em problemas de menor número de variáveis. As duas funções teste utilizadas são apresentadas na Tabela 6.

Tabela 6 – Apresentação das funções teste com restrição utilizadas

Nome	Código	$m$	Domínio	Solução exata	Mínimo global
Kitayama5	FT5	2	$x_i \in [0, 1]$	$\mathbf{x} = (0.2015, 0.8332)$	$f_{opt} = -0.7484$
GSuite4	FT6	5	$x_1 \in [78.0, 102]$ $x_2 \in [33.0, 45.0]$ $x_{3,4,5} \in [27.0, 45.0]$	$\mathbf{x} = (78, 33, 29.995,$ $45, 36.776)$	$f_{opt} = -30665.539$
Vaso de Pressão	FT7	4	$x_{1,2} \in [0.0625, 5]$ $x_{3,4} \in [10, 200]$	$\mathbf{x} = (0.7782, 0.3846$ $40.32, 200.0)$	$f_{opt} = 5885.33$

O FT5 representa o problema nomeado como Kitayama5, utilizado por Kitayama *et al.* (2010), definido por:

$$\begin{aligned}
 \text{minimize} \quad & f(\mathbf{x}) = -(x_1 - 1)^2 - (x_2 - 0.5)^2 \\
 \text{de forma que} \quad & g_1(\mathbf{x}) = [(x_1 - 3)^2 + (x_2 + 2)^2] \exp(-x_2^7) / 12 - 1 \leq 0 \\
 & g_2(\mathbf{x}) = (10x_1 + x_2) / 7 - 1 \leq 0 \\
 & g_3(\mathbf{x}) = [(x_1 - 0.5)^2 + (x_2 - 0.5)^2] / 0.2 - 1 \leq 0
 \end{aligned} \tag{7.6}$$

Embora a função objetivo possua uma formulação muito simples, as restrições ofertam maior complexidade ao problema, existindo, assim, um mínimo local e um mínimo global. O primeiro desafio dos algoritmos será primeiro escapar do mínimo local, encontrando a região do mínimo global. Depois, eles devem conseguir extrapolar essa região, de forma a alcançar a convergência.

O FT6 representa um problema clássico proposto por Koziel e Michalewicz (1999) sendo um dos 11 problemas "*G-Suite*" propostos para uso em otimização com restrições (G1-G11). O problema possui 6 restrições, todas elas como desigualdades não-lineares, e o ótimo é encontrado com duas restrições ativas. Devido à ordem de grandeza dos valores obtidos por sua função objetivo, é muito simples encontrar um  $NRMSE \leq 5\%$ , como exposto pela Equação (6.1). Assim, para o cálculo da métrica NMPAC será considerada a iteração na qual o algoritmo

alcançou um erro de 0.1%. A formulação desse problema é dado por:

$$\begin{aligned}
 \text{minimize} \quad & f(\mathbf{x}) = 5.3578547x_3^2 + 0.8356891x_1x_5 + 37.293239x_1 - 40792.141 \\
 \text{de forma que} \quad & g_1(\mathbf{x}) = 5.334407 + 0.0056858x_2x_5 + 0.0006262x_1x_4 - 0.0022053x_3x_5 - 92 \leq 0 \\
 & g_2(\mathbf{x}) = -(5.334407 + 0.0056858x_2x_5 + 0.0006262x_1x_4 - 0.0022053x_3x_5) \leq 0 \\
 & g_3(\mathbf{x}) = 80.51249 + 0.0071317x_2x_5 + 0.0029955x_1x_2 + 0.0021813x_3^2 - 110 \leq 0 \\
 & g_4(\mathbf{x}) = -(80.51249 + 0.0071317x_2x_5 + 0.0029955x_1x_2 + 0.0021813x_3^2) - 90 \leq 0 \\
 & g_5(\mathbf{x}) = 9.300961 + 0.0047026x_3x_5 + 0.0012547x_1x_3 + 0.0019085x_3x_4 - 25 \leq 0 \\
 & g_6(\mathbf{x}) = -(9.300961 + 0.0047026x_3x_5 + 0.0012547x_1x_3 + 0.0019085x_3x_4) - 20 \leq 0
 \end{aligned}
 \tag{7.7}$$

Por fim, o FT7 representa um problema também clássico relativo à minimização do custo de um vaso de pressão cilíndrico, com duas extremidades semi-esféricas, apresentado na Figura 32.

Figura 32 – Vaso de pressão cilíndrico



Fonte: elaborado pelo autor

Esse problema foi bastante estudado pela literatura, utilizando, como variáveis, a espessura do vaso de pressão ( $x_1$ ), a espessura da cabeça cilíndrica ( $x_2$ ), o raio interno ( $x_3$ ) e o comprimento do corpo do vaso ( $x_4$ ). Embora usualmente as duas primeiras variáveis são tidas como discretas, para adequar a otimização ao objetivo do trabalho, serão consideradas todas essas como variáveis contínuas. Esse problema já foi estudado por diversos pesquisadores, utilizando diferentes algoritmos de otimização, muitos deles encontrando valores bastante divergentes para o mínimo global (LEMONGE; BARBOSA, 2003; GARG, 2016). O ótimo global considerado, utilizando variáveis contínuas, foi retirado de Garg (2016). A formulação do problema é dada

por:

$$\text{minimize } f(\mathbf{x}) = 0.6224x_1x_2x_3 + 1.7781x_2x_3^2 + 3.1661x_1^2x_4 + 19.84x_1^2x_3$$

$$\text{de forma que } g_1(\mathbf{x}) = 0.0193x_3 - x_1 \leq 0$$

$$g_2(\mathbf{x}) = 0.00954x_3 - x_2 \leq 0 \quad (7.8)$$

$$g_3(\mathbf{x}) = 1296000 - \frac{4}{3}\pi x_3^3 - \pi x_3^2 x_4 \leq 0$$

$$g_4(\mathbf{x}) = 240 - x_4 \leq 0$$

Para a FT5, FT6 e FT7 o número máximo de avaliações considerado foi de, respectivamente, 75, 150 e 175. Em relação aos processos de otimização realizados nos algoritmos SAO, foi utilizado um algoritmo PSO com 500 iterações e 50 partículas, com exceção da FT7, na qual utilizaram-se 750 iterações e 75 partículas. Os resultados encontrados para cada uma destas funções se encontram nas Figuras 33, 34 e 35. As métricas de erro para as mesmas são apresentadas nas Tabelas 7, 8 e 9.

Tabela 7 – Métricas de erro obtidas para a FT5

Estratégia SAO	Largura	Percentual de convergência	NMPAC	$\overline{NRMSE}$
KITSAO	NAK	100%	23	0.07%
	ASKIT	100%	51	1.26%
	LOOCV	30%	51	9.34%
	5FCV	100%	30	0.82%
RBFESAO	NAK	40%	51	5.03%
	ASKIT	20%	13	11.75%
	LOOCV	100%	20	0.25%
	5FCV	100%	17	0.13%
RBFWEISAO	NAK	70%	33	2.54%
	ASKIT	10%	11	8.92%
	LOOCV	100%	26	0.17%
	5FCV	100%	27	0.20%

Em geral, os resultados encontrados seguem o mesmo padrão anterior. As abordagens que utilizam a EI apresentam melhores resultados em geral, e as abordagens de validação cruzada usualmente promovem uma estimativa melhor da função, em especial a 5FCV, que demonstra resultados mais consistentes que a própria LOOCV.

Na FT5 e FT6, é interessante notar o quão bem a ASKIT se comportou. Analisando melhor, isso se dá devido à forma das funções envolvidas: por apresentarem superfícies suaves, estas se favorecem com o uso de um vetor  $\sigma$  com os altos valores de largura fornecidos pela ASKIT em funções bidimensionais.

Tabela 8 – Métricas de erro obtidas para a FT6

Estratégia SAO	Largura	Percentual de convergência <sup>a</sup>	NMPAC <sup>a</sup>	$\overline{NRMSE}$
KITSAO	NAK	0%	-	1.00%
	UKIT	0%	-	1.97%
	ASKIT	100%	58	0.02%
	LOOCV	0%	-	1.61%
	5FCV	80%	88	0.07%
RBFEISAO	NAK	50%	124	0.46%
	UKIT	0%	-	2.09%
	ASKIT	100%	43	0.00%
	LOOCV	100%	55	0.00%
	5FCV	100%	42	0.00%
RBFWEISAO	NAK	0%	-	1.03%
	UKIT	0%	-	2.62%
	ASKIT	100%	52	0.01%
	LOOCV	90%	69	0.02%
	5FCV	100%	45	0.00%

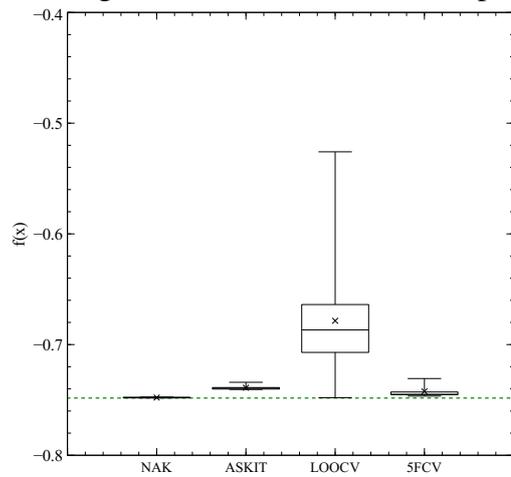
<sup>a</sup> Para esse problema, é considerado que a convergência é atingida quando  $NRMSE \leq 0.1\%$

Tabela 9 – Métricas de erro obtidas para a FT7

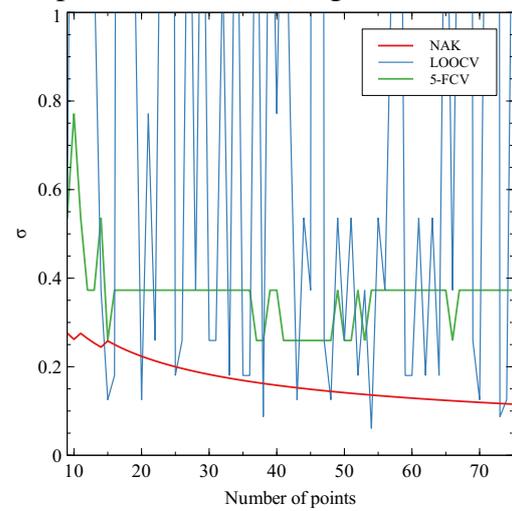
Estratégia SAO	Largura	Percentual de convergência	NMPAC	$\overline{NRMSE}$
KITSAO	NAK	0%	-	107.16%
	UKIT	0%	-	324.84%
	ASKIT	0%	-	184.34%
	LOOCV	0%	-	301.44%
	5FCV	10%	90	324.77%
RBFEISAO	NAK	60%	56	110.56%
	UKIT	20%	88	28.21%
	ASKIT	0%	-	173.17%
	LOOCV	0%	-	188.32%
	5FCV	60%	57	52.50%
RBFWEISAO	NAK	40%	56	15.82%
	UKIT	40%	111	84.95%
	ASKIT	30%	37	91.54%
	LOOCV	0%	-	258.63%
	5FCV	50%	87	62.87%

No caso da FT7, esta apresenta os resultados mais díspares encontrados até agora. O  $\overline{NRMSE}$  foi bastante alto em todos os casos. Apesar disso, em uma análise mais cuidadosa dos resultados apresentados na Figura 35, percebe-se que esse valor é naturalmente mais alto devido à grande variabilidade nos valores encontrados para a função objetivo. Assim, certos resultados ruins influenciam muito a média. Além disso, em alguns casos, alcançou-se, com certa consistência, valores próximos ao mínimo global. Esses ocorrem usualmente com uso da

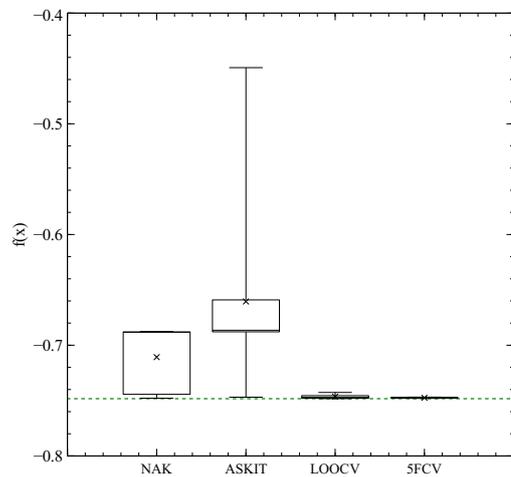
Figura 33 – Resultados obtidos para FT5 por diferentes abordagens SAO



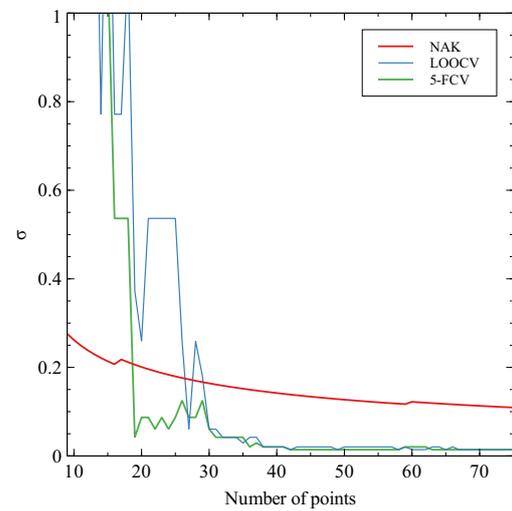
(a) Resultados obtidos com KITSAO



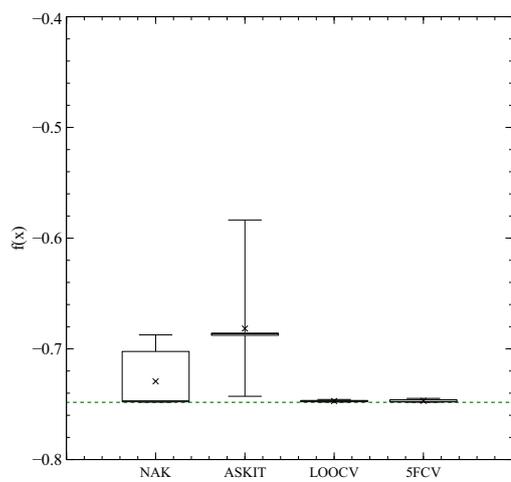
(b) Larguras estimadas



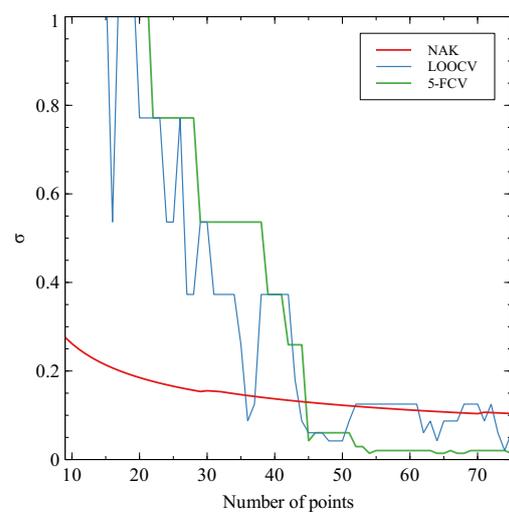
(c) Resultados obtidos com RBEISAO



(d) Larguras estimadas



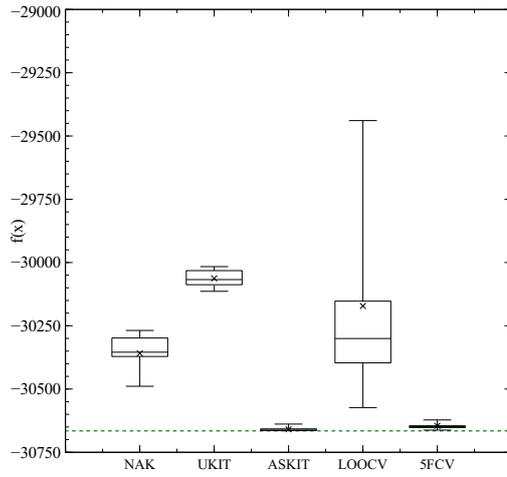
(e) Resultados obtidos com RBFWEISAO



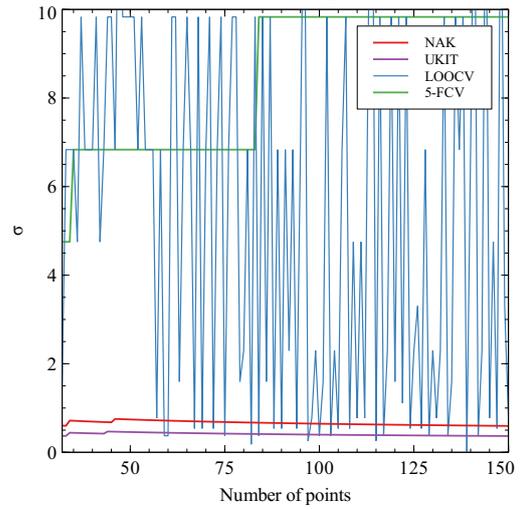
(f) Larguras estimadas

Fonte: elaborado pelo autor

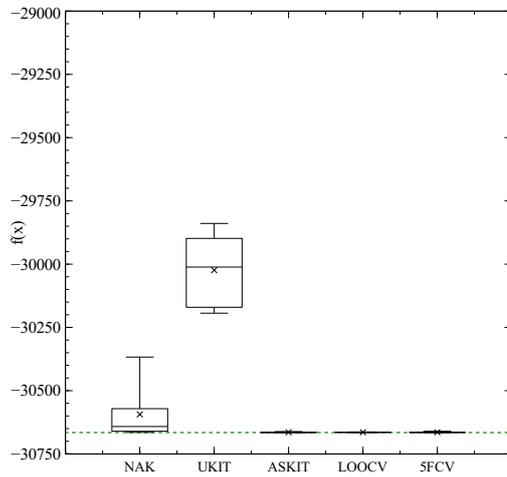
Figura 34 – Resultados obtidos para FT6 por diferentes abordagens SAO



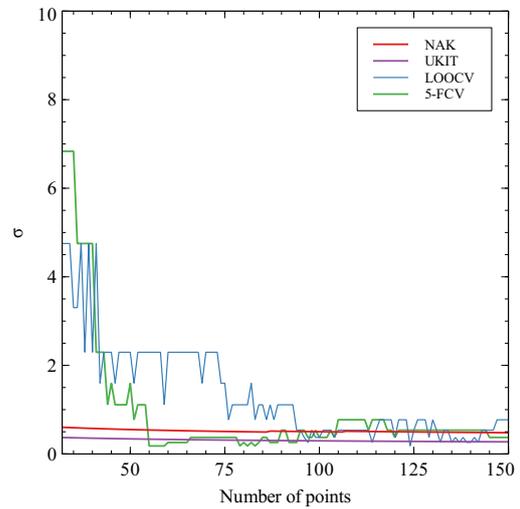
(a) Resultados obtidos com KITSAO



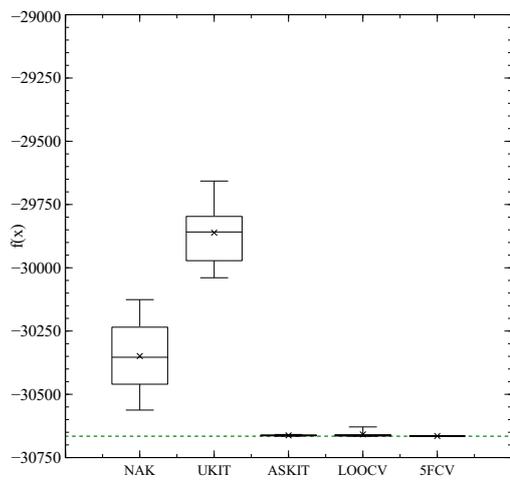
(b) Larguras estimadas



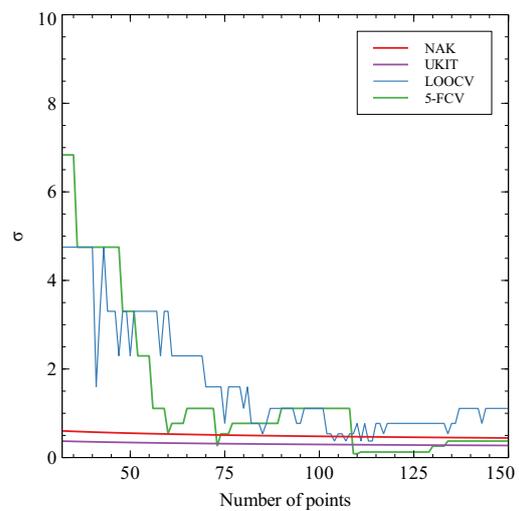
(c) Resultados obtidos com RBEISAO



(d) Larguras estimadas



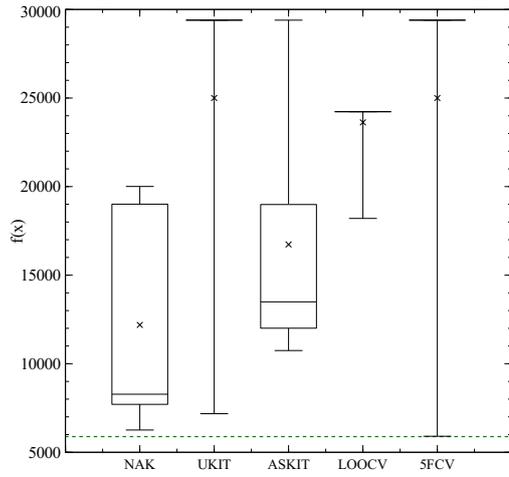
(e) Resultados obtidos com RBFWEISAO



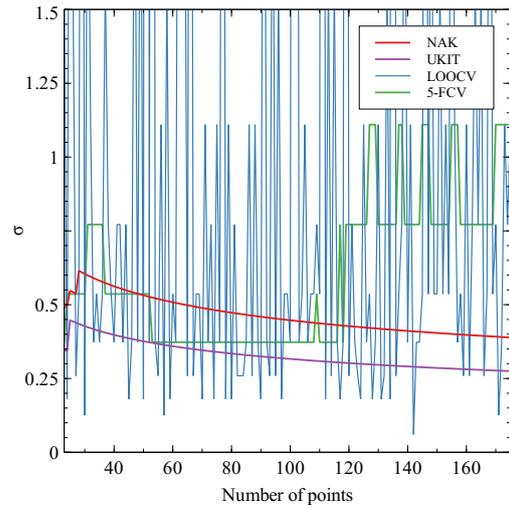
(f) Larguras estimadas

Fonte: elaborado pelo autor

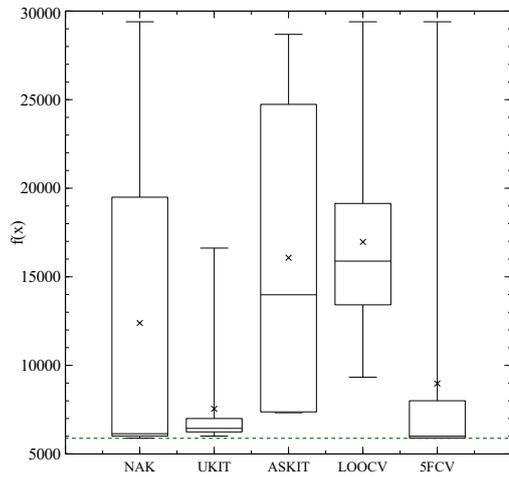
Figura 35 – Resultados obtidos para FT7 por diferentes abordagens SAO



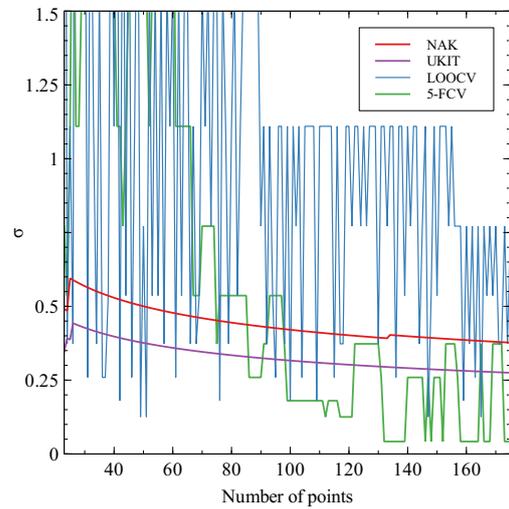
(a) Resultados obtidos com KITSAO



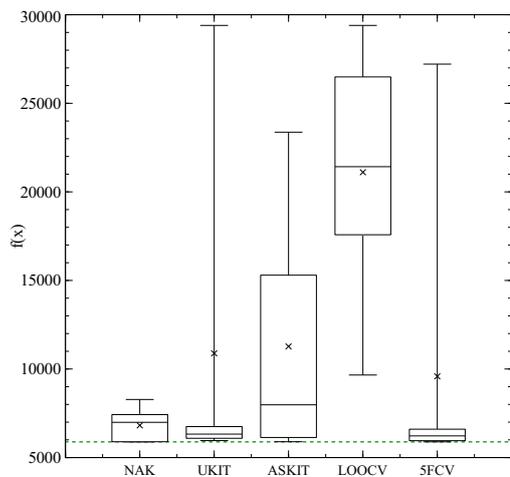
(b) Larguras estimadas



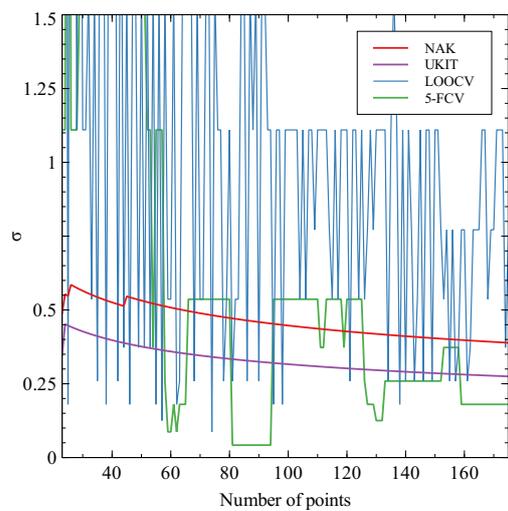
(c) Resultados obtidos com RBEISAO



(d) Larguras estimadas



(e) Resultados obtidos com RBFWEISAO



(f) Larguras estimadas

Fonte: elaborado pelo autor

NAK, UKIT e 5FCV, aliados à RBFEISAO ou à RBFWEISAO. Nesse sentido, os resultados não diferem muito dos encontrados anteriormente.

## 7.2 Otimização de FGM

Finalmente, o procedimento proposto será aplicado a otimização de estruturas de FGM, mais precisamente a placas com uma graduação específica no sentido da espessura. As propriedades dos materiais considerados nessa seção são apresentadas na Tabela 10.

Tabela 10 – Materiais utilizados e suas respectivas propriedades

Material	$E$ (GPa)	$\nu$	$\rho$ ( $kg/m^3$ )
Al	70	0.3	2707
SUS304	201.04	0.3	8166
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	380	0.3	3800
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	348.43	0.3	2370

A análise numérica, realizada através do programa computacional FAST, será aplicada a problemas de autovalor. Essas serão validadas a partir de certos resultados encontrados na literatura. A Tabela 11 apresenta, para alguns valores de  $N$  da *Power-law function*, os resultados obtidos por Auad *et al.* (2019) para a carga de flambagem encontrada em uma placa quadrada formada por Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> carregada uniaxialmente e completamente engastada. Nesse exemplo, o Modelo de Voigt foi utilizado para estimar as propriedades do material ao longo da espessura. A placa possui 2 metros de lado e razão  $h/a = 1/100$ . São apresentados ainda os resultados obtidos utilizando o software de análise estrutural FAST, que será utilizado nas otimizações. Nesse exemplo os resultados são normalizados segundo  $\lambda_{norm} = N_{cr}a^2/\pi^2D_0$ , em que  $D_0 = E_c h^3/12(1 - \nu_c^2)$ .

Tabela 11 – Carga de flambagem para diferentes  $N$  na placa quadrada de lado 2 m

Fonte	$N$			
	0	1	2	5
Referência (AUAD <i>et al.</i> , 2019)	10.11	5.25	4.20	3.52
FAST (IGA)	10.16	5.28	4.22	3.53
Erro	0.49%	0.50%	0.48%	0.30%

De forma complementar, será ainda realizada a validação presente em Do *et al.* (2019). Nesta, uma placa quadrada simplesmente apoiada também formada por Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> é carregada uniaxialmente. A placa dessa vez possui 10 metros de lado e razão  $h/a = 1/10$ . As

propriedades são estimadas pelo Modelo de Mori-Tanaka. Vale notar que, em placas simplesmente apoiada de FGM, estruturas com graduação assimétrica em relação ao eixo médio não flambam quando submetidas a cargas uniformes devido ao deslocamento do centro de massa (AUAD *et al.*, 2019). Dito isso, esse exemplo é apresentado com propósito puramente de validar a análise. Na referência, é utilizada uma teoria de terceira ordem para o cisalhamento, enquanto que o elemento utilizado no FAST utiliza somente uma teoria de primeira ordem. Os resultados para diferentes expoentes  $N$  da *Power-law* são apresentados na Tabela 12.

Tabela 12 – Carga de flambagem para diferentes  $N$  na placa quadrada de lado 10 m

Fonte	$N$		
	1	2	5
Referência (DO <i>et al.</i> , 2019)	8.0806	6.8108	5.8431
FAST (IGA)	8.1085	6.8382	5.6653
Erro	0.35%	0.40%	3.04%

Interessante notar que, apesar do uso de teorias diferentes para o efeito do cisalhamento, a diferença não é tão grande, visto que a relação  $h/a$  é pequena.

Também serão realizadas análises relativas à vibração de placas com graduação ao longo da espessura. Inicialmente, os valores foram comparados com certas combinações de espessura  $h$  e expoente  $N$  da *Power-law* presentes em certos projetos ótimos de Correia *et al.* (2018). A placa em questão é simplesmente apoiada e possui  $a = 5$  m, sendo composta por SUS304/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. As propriedades são estimadas pelo Modelo de Voigt. Os resultados encontrados na referência e na análise pelo FAST se encontram na Tabela 13.

Tabela 13 – Frequência natural para diferentes  $N$  e espessuras na placa quadrada de lado 0.5 m

Fonte	Caso 1	Caso 2	Caso 3
	$h = 35.0$ mm $p = 1.0$	$h = 25.8$ mm $p = 0.2$	$h = 36.0$ mm $p = 10.0$
Referência (CORREIA <i>et al.</i> , 2018)	5760.81	5705.86	4629.91
FAST (FEM)	5764.93	5705.00	4630.00
Erro	0.07%	0.02%	0.00%

De forma complementar, foi feita a validação ainda com certos valores apresentados em Do *et al.* (2019). Dessa vez a razão  $a/h = 10$ , sendo a placa novamente quadrada, simplesmente apoiada e composta por SUS304/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. No entanto, as propriedades são agora estimadas pelo Modelo de Mori-Tanaka. Os resultados encontrados foram normalizados segundo

$\omega_{norm} = \omega h \sqrt{\rho_c / G_c}$ , em que  $G_c = E_c / (2(1 + \nu_c))$ . Os resultados encontrados na referência e na análise pelo FAST se encontram na Tabela 14.

Tabela 14 – Frequência natural para diferentes  $N$  na placa quadrada de lado 10 m

Fonte	$N$			
	1	2	5	10
Referência (DO <i>et al.</i> , 2019)	0.0542	0.0485	0.044	0.0419
FAST (FEM)	0.0545	0.0487	0.0439	0.0416
Erro	0.50%	0.42%	0.13%	0.61%

Os exemplos de otimização de FGM serão apresentados nas subseções seguintes.

### 7.2.1 Maximização da carga de flambagem

O primeiro exemplo apresentado é um problema proposto por Do *et al.* (2019) em que deve ser maximizada a carga de flambagem de uma placa quadrada, simplesmente apoiada e sujeita a um carregamento uniaxial, que possui  $a = 10$  m e razão  $h/a = 1/10$ . Os materiais constituintes são Al e o  $Al_2O_3$  e, dessa vez, as propriedades são estimadas pelo Modelo de Mori-Tanaka. A fração de volume é estimada através de curvas *B-Splines* e as variáveis são as posições dos pontos de controle. No exemplo considerado são utilizados 9 pontos e, por estes serem simétricos em relação ao eixo médio da placa, o problema possui 5 variáveis no total. Além disso, é utilizada uma restrição relativa à fração de volume de cerâmica, que deve compor menos de 35% da estrutura.

O volume médio de cerâmica na estrutura é calculado através de uma integral, como apresentado em:

$$\bar{V}_c(\mathbf{z}) = \frac{\int_{-h/2}^{h/2} V_c dz}{h} \quad (7.9)$$

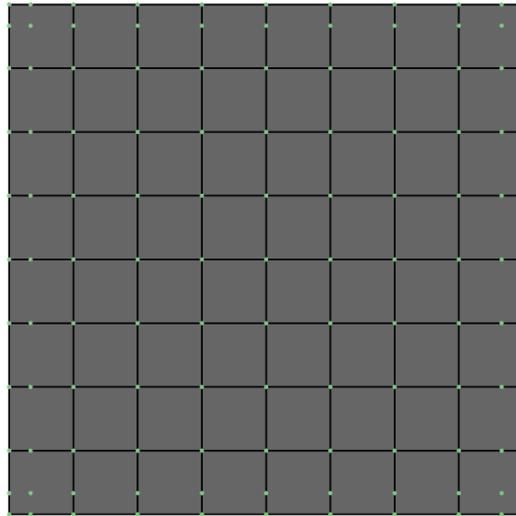
em que  $h$  é a espessura da estrutura e  $V_c$  a fração de volume de cerâmica. Essa integral será avaliada por integração de Gauss, utilizando 10 pontos de Gauss para prover uma melhor precisão. Como essa é uma restrição de fácil avaliação, o cálculo será feito de forma exata, sem aproximação através de um modelo substituto. Assim, para esse problema, a restrição é dada por:

$$g_1(\mathbf{z}) = \bar{V}_c(\mathbf{x}) - 0.35 \leq 0 \quad (7.10)$$

Primeiramente, é realizada a otimização convencional da estrutura. Para isso, se utilizam 10 otimizações de um algoritmo PSO, utilizando 100 iterações e 50 partículas, realizando

assim 5000 avaliações no total. Como este problema é similar aos utilizados na validação do processo de análise, é utilizada uma malha 8x8, com grau igual a 3, apresentada na Figura 36, apresentando uma análise numérica bem rápida. A configuração utilizada foi escolhida com o propósito de garantir certa confiabilidade ao processo, sendo encontrada uma taxa de sucesso de 80% e sendo necessárias, em média, 78 iterações para encontrar o projeto ótimo. Como o problema não é tão complexo, cada otimização dura cerca de 6 minutos e 50 segundos.

Figura 36 – Malha utilizada para a análise do Problema 01



Fonte: elaborado pelo autor

A Tabela 15 apresenta os resultados encontrados na referência e na otimização local para esse problema. Na referência, a malha utilizada é 7x7. A carga de flambagem é normalizada segundo  $\lambda_{norm} = N_{cr}a/D_m$ , em que  $D_m = E_m h^3 / 12(1 - \nu_m^2)$ . Nesse exemplo, a carga crítica foi calculada utilizando Análise Isogeométrica.

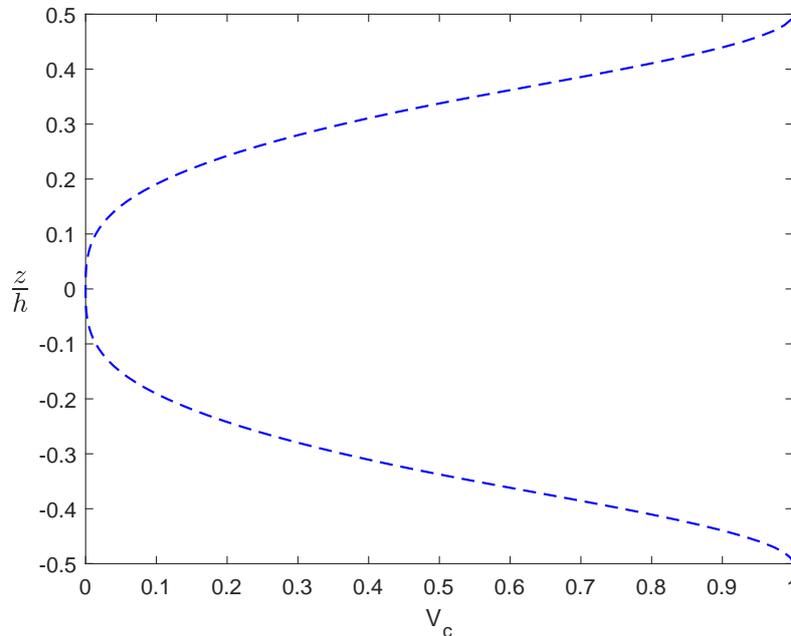
Tabela 15 – Resultados da otimização convencional para o Problema 01

Fonte	Variáveis					$\lambda_{norm}$	Diferença
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$		
Este trabalho (PSO+AIG)	1.0	1.0	0.4	0.0	0.0	10.5695	5.77%
Referência (DO <i>et al.</i> , 2019)	1.0	1.0	0.4003	0.0	0.0	11.2171	

Apesar da diferença na função objetivo, essa se dá devido ao processo de análise: além da malha ligeiramente diferente, enquanto que a referência original aplica uma teoria de cisalhamento de terceira ordem, o elemento utilizado no software de análise FAST utiliza um teoria de primeira ordem. Ainda assim, as variáveis encontradas foram praticamente iguais, e os projetos ótimos encontrados são os mesmos. A Figura 37 apresenta como se dá a variação

da fração de volume ao longo da espessura no projeto ótimo, lembrando que as variáveis apresentadas na Tabela 15 representam pontos de controle simétricos em relação ao eixo médio.

Figura 37 – Variação da fração de volume de cerâmica ao longo da espessura - Problema 01



Fonte: elaborado pelo autor

Finalmente, serão apresentados os resultados para esse problema utilizando as abordagens propostas. A Tabela 16 apresenta as métricas de erro para esse problema, assim como o *Speed-up* médio, enquanto que a Figura 38 apresenta os resultados encontrados por cada abordagem SAO para diferentes métodos de definição de largura. Como critério de parada foi utilizado o número máximo de avaliações de alta fidelidade, nesse caso igual a 100.

Para esse exemplo, os resultados foram excelentes. Enquanto que, com a otimização convencional, 5000 avaliações de alta fidelidade são necessárias para promover o processo de otimização completo, o uso das técnicas propostas muitas vezes consegue encontrar resultados muito promissores com menos de 50 avaliações. Isso se reflete no *Speed-up*: em alguns casos, a otimização com modelos substitutos foi quase 17 vezes mais rápida que a convencional. Além disso, como o problema possui uma geometria simples, sua análise é muito rápida. Em problemas mais complexos, esse acréscimo de eficiência com certeza seria bem mais aparente.

Vale notar que o *Speed-up* da KITSAO foi bem maior que nas abordagens que utilizam a EI, a RBFESAO e a RBFWEISAO. Isso provavelmente se deve ao grande número de operações com matrizes realizadas nesses últimos, visto que, para cada partícula, a estimativa do erro e a melhoria esperada devem ser calculadas, conforme as Equações (5.1), (5.4) e (5.9). Outro

Tabela 16 – Métricas de erro obtidas para o Problema 01

Estratégia SAO	Largura	Percentual de convergência	NMPAC	$\overline{NRMSE}$	<i>Speed-up</i>
KITSAO	NAK	100%	68	1.34%	16.88
	UKIT	0%	-	12.92%	15.83
	ASKIT	100%	40	0.01%	15.77
	LOOCV	100%	40	0.01%	3.10
	5FCV	100%	48	0.02%	13.99
RBFESAO	NAK	100%	45	0.01%	5.00
	UKIT	100%	72	0.04%	5.05
	ASKIT	100%	32	0.02%	4.24
	LOOCV	100%	33	0.02%	2.24
	5FCV	100%	33	0.01%	4.98
RBFWEISAO	NAK	100%	45	0.01%	5.26
	UKIT	90%	83	2.66%	5.12
	ASKIT	100%	34	0.01%	5.30
	LOOCV	100%	33	0.02%	2.47
	5FCV	100%	34	0.05%	5.05

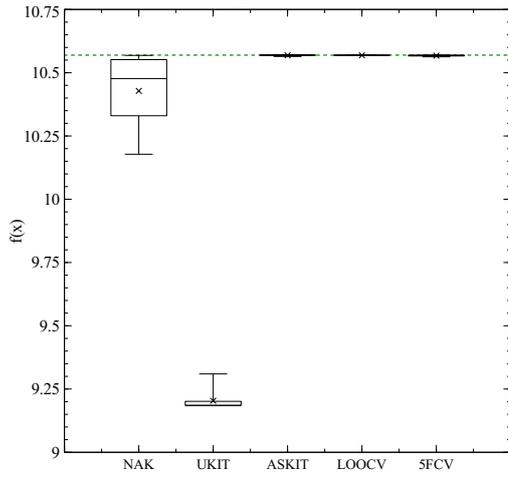
aspecto importante é o alto custo apresentado pela LOOCV, enquanto que a 5FCV apresentou um custo muito similar às abordagens analíticas.

Na grande maioria dos exemplos, a convergência foi alcançada, em especial utilizando a Melhoria Esperada (EI). No entanto, essa abordagem também promove um custo computacional adicional, visto que o *Speed-up* é bem maior na KITSAO. Ainda assim, em todos os exemplos, a métrica é satisfatória. Um comportamento similar acontece com a LOOCV, que promove um decréscimo acentuado no *Speed-up* aliado a uma melhor precisão. Já a 5-FCV, que alcançou uma eficácia muito similar, não aparentou sofrer desse aspecto.

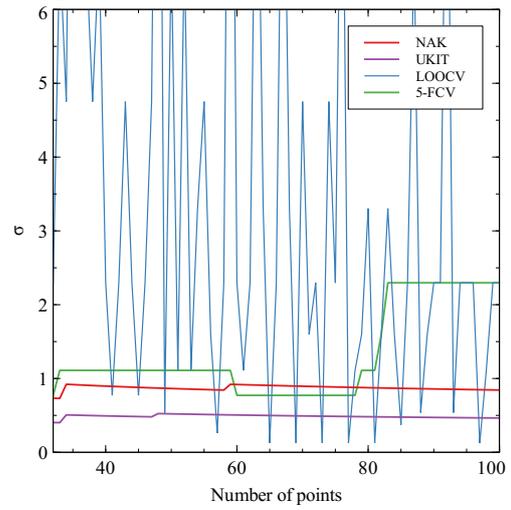
### 7.2.2 Maximização da frequência natural

O segundo problema de otimização é outro também proposto por Do *et al.* (2019), dessa vez relativa à maximização da frequência natural da estrutura. A placa utilizada é igual a passada, quadrada, simplesmente apoiada, de razão  $a/h = 10$ , mas, sendo esse um problema de vibração livre, a placa não é submetida à carga uniaxial. Dessa vez, os materiais utilizados serão o SUS304/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, e as propriedades efetivas serão estimadas segundo o Modelo de Mori-Tanaka. Dessa vez, será otimizado o caso em que a fração de volume, também regida por uma *B-Spline*, possui 13 pontos de controle, simétricos em relação ao plano médio da placa. Assim, o problema possui 7 variáveis. Novamente, é aplicada uma restrição ao volume de cerâmica na estrutura, que, nesse caso, não pode ser superior a 50% do volume total. Esta será novamente calculada de

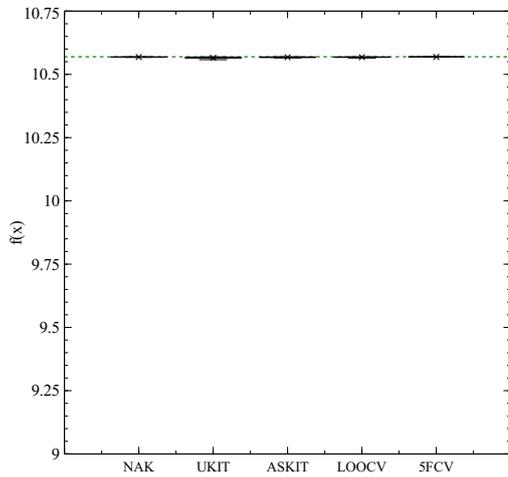
Figura 38 – Resultados obtidos para o Problema 01



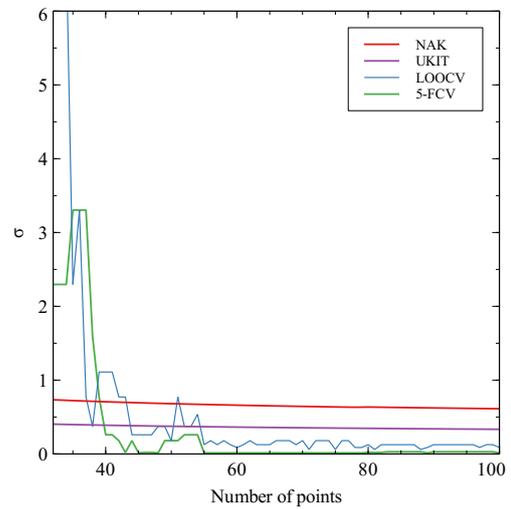
(a) Resultados obtidos com KITSAO



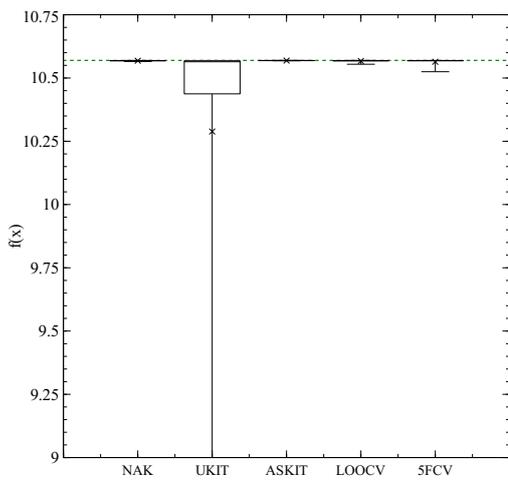
(b) Larguras estimadas



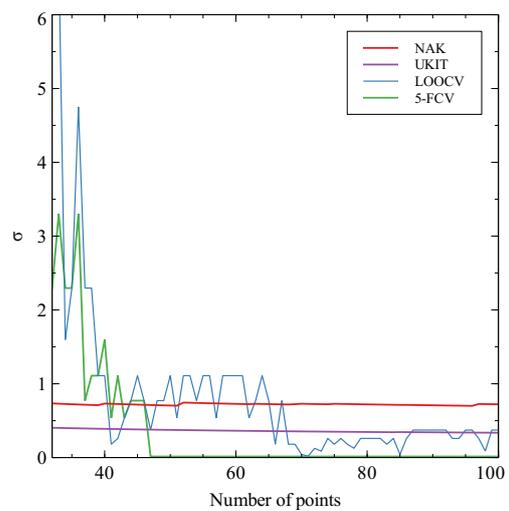
(c) Resultados obtidos com RBEISAO



(d) Larguras estimadas



(e) Resultados obtidos com RBFWEISAO



(f) Larguras estimadas

Fonte: elaborado pelo autor

forma exata, sem aproximação por um modelo substituto. Para esse problema, a restrição é dada por:

$$g_1(\mathbf{z}) = \overline{V}_c(\mathbf{x}) - 0.50 \leq 0 \quad (7.11)$$

Como ocorreu um acréscimo no número de variáveis, a otimização convencional foi realizada, dessa vez, com 125 iterações e 50 partículas, totalizando 6250 avaliações de alta fidelidade. Devido à similaridade com os problemas utilizadas na validação, foi novamente utilizada uma malha simples 8x8, similar à apresentada na Figura 36. A Tabela 17 apresenta os resultados encontrados na referência e na otimização local para esse problema. A frequência natural é normalizada segundo  $\omega_{norm} = \omega h \sqrt{\rho_c / G_c}$ , em que  $G_c = E_c / (2(1 + \nu_c))$ . Nesse exemplo, a análise foi realizada utilizando o Método dos Elementos Finitos, e cada otimização dura cerca de 17 minutos e 30 segundos. Novamente, os parâmetros utilizados foram definidos de forma a prover certa confiança no resultado, sendo encontrada uma taxa de sucesso de 100%, sendo necessárias, em média, 83 iterações para encontrar o projeto ótimo.

Tabela 17 – Resultados da otimização convencional para o Problema 02

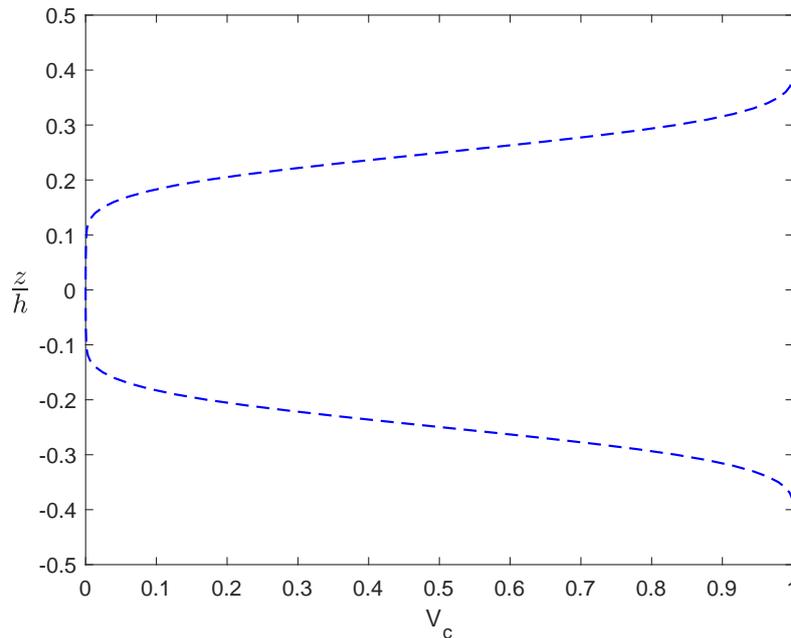
Fonte	Variáveis							$\omega_{norm}$	Erro
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$	$x_7$		
Este trabalho (PSO+MEF)	1.0	1.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0601	0.52%
Referência (DO <i>et al.</i> , 2019)	1.0	1.0	1.0	1.0	0.007	0.0	0.0	0.0598	

Nesse caso, o resultado da referência e da otimização local foram praticamente iguais. A Figura 39 apresenta a variação da fração de volume de cerâmica ao longo da espessura da placa no projeto ótimo.

A otimização utilizando as abordagens propostas foi realizada a seguir, e os resultados obtidos podem ser encontrados na Tabela 18, que apresenta as métricas de erro para esse problema assim como o *Speed-up* médio, e na Figura 40, que apresenta os resultados encontrados por cada abordagem SAO para diferentes métodos de definição de largura. Como critério de parada foi utilizado o número máximo de avaliações de alta fidelidade, nesse caso igual a 125.

Mais uma vez, os resultados se mostram excelentes. O uso da abordagem KITSAO novamente apresenta um tempo gasto bem menor que a otimização convencional, alcançando um *Speed-up* entre 17 e 21 na maioria dos casos. Já o uso da Melhoria Esperada (EI) novamente denota um acréscimo no esforço computacional, aliada, no entanto, a um aumento de eficácia. Mesmo assim, é possível perceber que, principalmente quando aliada às metodologias analíticas

Figura 39 – Variação da fração de volume de cerâmica ao longo da espessura - Problema 02



Fonte: elaborado pelo autor

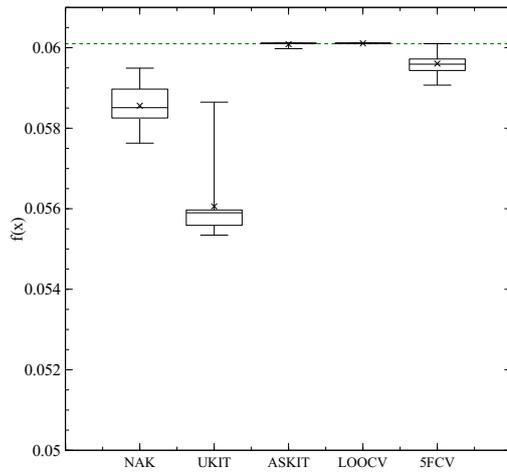
Tabela 18 – Métricas de erro obtidas para o Problema 02

Estratégia SAO	Largura	Percentual de convergência	NMPAC	$\overline{NRMSE}$	Speed-up
KITSAO	NAK	100%	74	2.58%	21.32
	UKIT	10%	92	6.74%	21.36
	ASKIT	100%	68	0.04%	19.98
	LOOCV	100%	59	0.01%	2.87
	5FCV	100%	60	0.84%	17.53
RBFESAO	NAK	40%	113	4.96%	7.27
	UKIT	0%	-	6.55%	7.43
	ASKIT	100%	59	0.00%	7.27
	LOOCV	100%	54	0.00%	2.34
	5FCV	100%	54	0.00%	7.91
RBFWEISAO	NAK	60%	110	4.94%	8.18
	UKIT	0%	-	6.71%	8.02
	ASKIT	100%	54	0.00%	8.02
	LOOCV	100%	55	0.00%	2.88
	5FCV	100%	55	0.00%	7.69

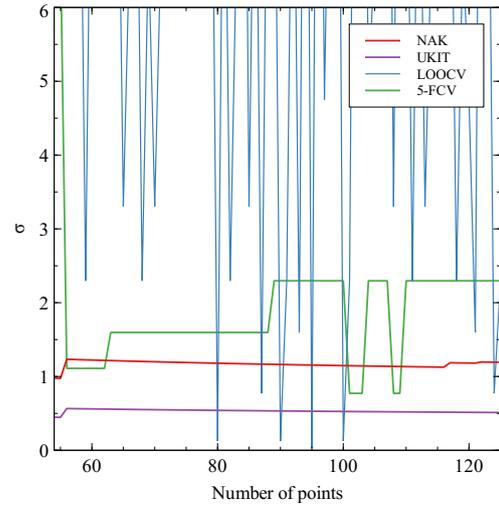
NAK e UKIT, os resultados da KITSAO foram ligeiramente melhores. Pode-se dizer que a EI aparenta se adequar melhor às abordagens de validação cruzada nesse aspecto.

Os resultados encontrados com uso da ASKIT são particularmente interessantes. Enquanto que, nas Funções Teste, essa nem sempre conseguiram aproximar a função desejada, nos problemas de FGM essa parece realizar previsões tão boas quanto as metodologias de validação cruzada. Isso provavelmente se deve ao comportamento das funções que estão sendo aproximada,

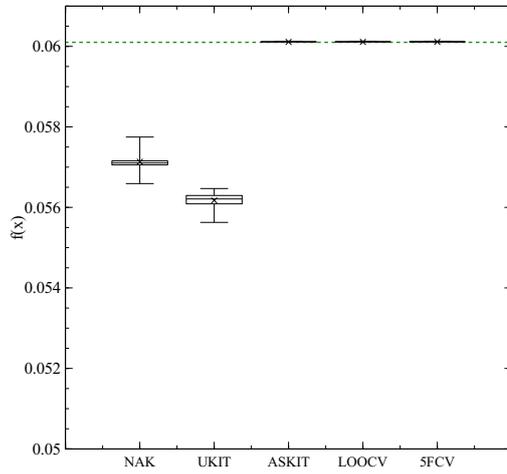
Figura 40 – Resultados obtidos para o Problema 02



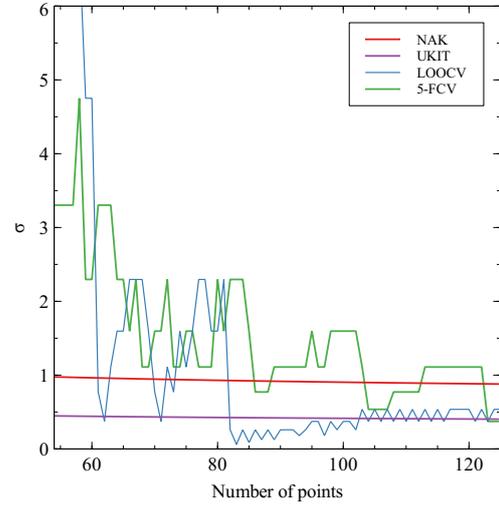
(a) Resultados obtidos com KITSAO



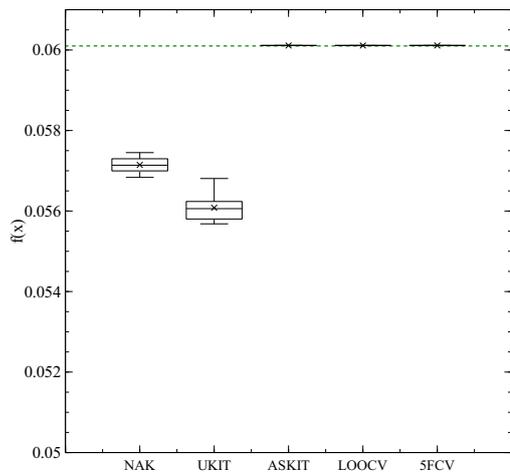
(b) Larguras estimadas



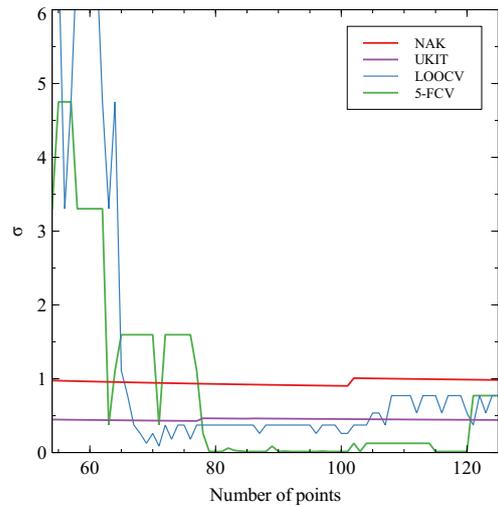
(c) Resultados obtidos com RBEISAO



(d) Larguras estimadas



(e) Resultados obtidos com RBFWEISAO



(f) Larguras estimadas

Fonte: elaborado pelo autor

que se adequa melhor a uma largura de base escalonada para maior: ou seja, são funções mais suaves e planas. De fato, analisando as larguras estimadas pelos métodos de validação cruzada nas iterações iniciais, essas são bem maiores que 1.0.

### 7.2.3 Maximização da carga de flambagem, com uso da frequência natural como restrição

Por fim, o último problema a ser otimizado se refere novamente a um problema de maximização da carga de flambagem, mas dessa vez com duas restrições: a primeira relativa ao volume máximo de cerâmica, que não pode ser superior a 65% do volume total da estrutura, e outra à frequência natural da estrutura, em que  $\omega_{norm}$  deve ser inferior a 0.040. Enquanto que a primeira será calculada de forma exata, a segunda será estimada a partir de um modelo substituto. Para aplicação da Melhoria Esperada, o procedimento proposto por Tutum *et al.* (2014) será aplicado nesse caso, seguindo a Equação (5.8). Para esse problema, as restrições são dadas por:

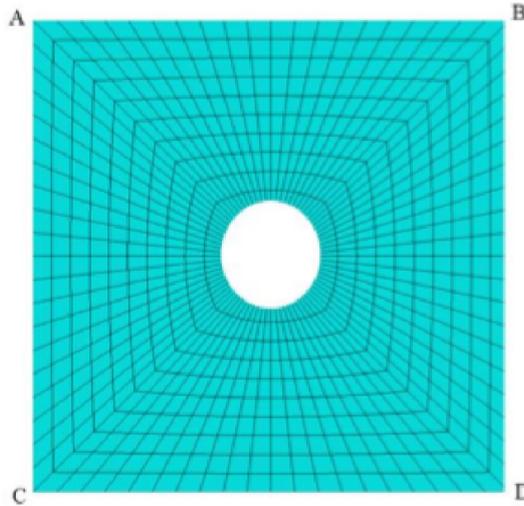
$$\begin{aligned} g_1(\mathbf{z}) &= \overline{V}_c(\mathbf{x}) - 0.65 \leq 0 \\ g_2(\mathbf{x}) &= \omega_{norm} - 0.040 \leq 0 \end{aligned} \tag{7.12}$$

Nesse caso, o problema apresenta uma geometria mais complexa. A placa quadrada e simplesmente apoiada, de  $a = 0.72$  m, possui um furo central em formato circular, de raio  $r = 0.072$  m. Devido à geometria mais complexa, é utilizada uma malha em Elementos Finitos com 20 elementos em cada extremidade, totalizando 200 elementos no total, para caracterizar o problema. Essa é apresentada na Figura 41. Por último, a razão  $a/h$  é igual a 10 e os materiais utilizados são o Al e o  $Al_2O_3$ , com uso do Modelo de Mori-Tanaka para estimar as propriedades efetivas.

Novamente, será utilizada uma *B-Spline* para representar as frações de volume de cada material, com pontos de controle simétricos em relação ao eixo médio. Nesse caso, serão utilizados 17 pontos de controle, representando 9 variáveis no total. Novamente, devido ao acréscimo no número de variáveis, o processo será realizado com 150 iterações e 50 partículas. Mais uma vez, esses parâmetros foram escolhidos de forma a proporcionar certa confiabilidade no resultado obtido. A taxa de sucesso encontrada foi de 100% e o indivíduo ótimo foi encontrado, em média, após 104 iterações. A Tabela 19 apresenta o resultado da otimização convencional. Devido à complexidade um pouco maior que nos problemas anteriores, cada processo de otimização dura cerca de 3 horas e 40 minutos.

Dessa forma, somente a restrição relativa à vibração é ativa. Dadas as variáveis do projeto ótimo, a Figura 42 apresenta a variação da fração de volume de cerâmica ao longo da

Figura 41 – Malha utilizada para a análise do Problema 03



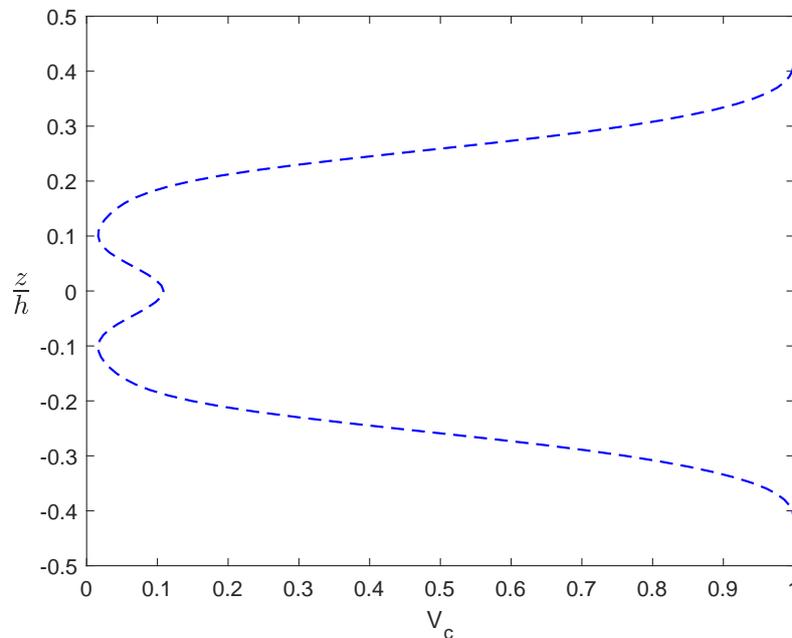
Fonte: elaborado pelo autor

Tabela 19 – Resultados da otimização convencional para o Problema 03

Fonte	Variáveis						$\lambda_{norm}$	$V_{ctot}$	$\omega_{norm}$
	$x_{1,2,3,4}$	$x_5$	$x_6$	$x_7$	$x_8$	$x_9$			
Este trabalho (PSO+MEF)	1.0	0.740	0.125	0.022	0.0	0.163	0.333	49.6 %	0.040

espessura dessa estrutura.

Figura 42 – Variação da fração de volume de cerâmica ao longo da espessura - Problema 03



Fonte: elaborado pelo autor

Finalmente, foi feita a otimização desse problema utilizando as abordagens propostas. Os resultados obtidos podem ser encontrados na Tabela 20, que apresenta as métricas de erro

para esse problema, e na Figura 43, que apresenta os resultados encontrados por cada abordagem SAO para diferentes métodos de definição de largura. Como critério de parada foi utilizado o número máximo de avaliações de alta fidelidade, nesse caso igual a 150.

Tabela 20 – Métricas de erro obtidas para o Problema 03

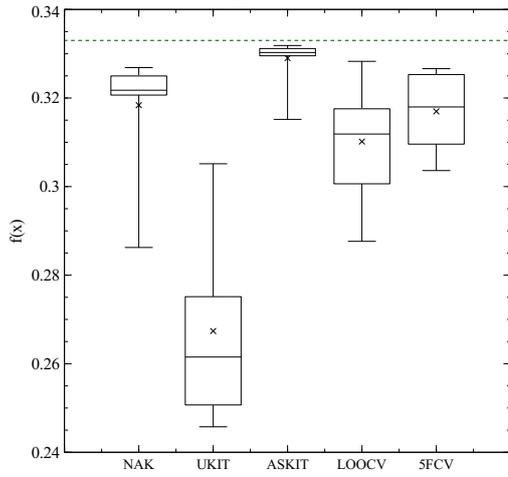
Estratégia SAO	Largura	Percentual de convergência	NMPAC	$\overline{NRMSE}$	<i>Speed-up</i>
KITSAO	NAK	80%	110	4.18%	45.95
	UKIT	0%	-	19.60%	45.95
	ASKIT	90%	113	1.07%	43.52
	LOOCV	30%	131	6.73%	10.15
	5FCV	60%	128	4.68%	39.47
RBFESAO	NAK	100%	105	0.60%	25.52
	UKIT	0%	-	19.84%	26.29
	ASKIT	100%	92	0.12%	23.72
	LOOCV	100%	89	0.62%	10.42
	5FCV	100%	84	0.15%	25.72
RBFWEISAO	NAK	100%	107	0.50%	26.08
	UKIT	0%	-	14.59%	24.89
	ASKIT	100%	97	0.17%	26.34
	LOOCV	100%	88	0.92%	11.34
	5FCV	100%	88	0.39%	25.18

É perceptível que o uso de uma restrição aproximada fornece uma complexidade a mais ao problema de otimização, como esperado. Apesar do alto *Speed-up* da tática, a abordagem KITSAO, mesmo que ainda capaz de encontrar resultados próximos ao ótimo, necessita de mais inserções de pontos para tal e chega ao final do processo com um NRMSE médio bem maior que as técnicas baseadas na Melhoria Esperada. Além disso, o percentual de convergência deixa a desejar em alguns casos. Interessante notar que as abordagens de validação cruzada se comportaram pior nesse caso do que as abordagens analíticas, o que não é esperado.

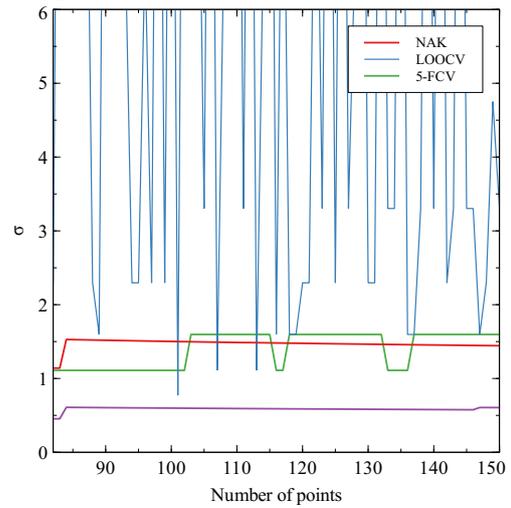
Em relação ao NRMSE médio encontrado, apesar dos resultados não tão bons com uso da KITSAO, as abordagens RBFESAO e RBFWEISAO mantêm sua performance excepcional. Usualmente estas conseguem encontrar projetos satisfatórios em poucas iterações, e, em quase todos os casos, o NRMSE médio foi abaixo de 1%. A exceção é quando se utiliza a tática aliada à abordagem de definição de largura UKIT que, para problemas de otimização de FGM, aparenta subestimar muito a largura.

Por fim mas não menos importante, interessante notar como o uso dessas técnicas é eficiente quando o custo da análise aumenta. Dessa vez, mesmo com uso da LOOCV aliada a EI, foi possível alcançar valores de *Speed-up* maiores que 10. Utilizando a abordagem 5FCV,

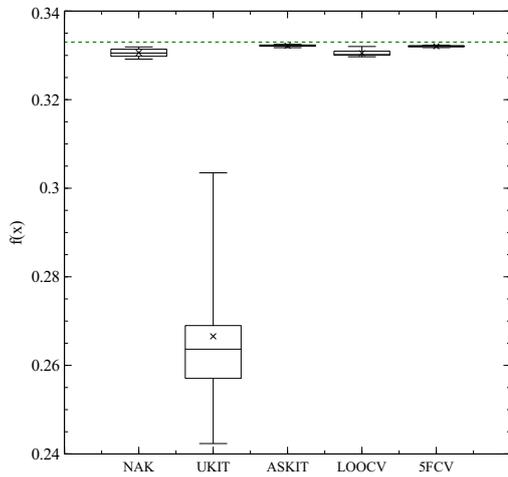
Figura 43 – Resultados obtidos para o Problema 03



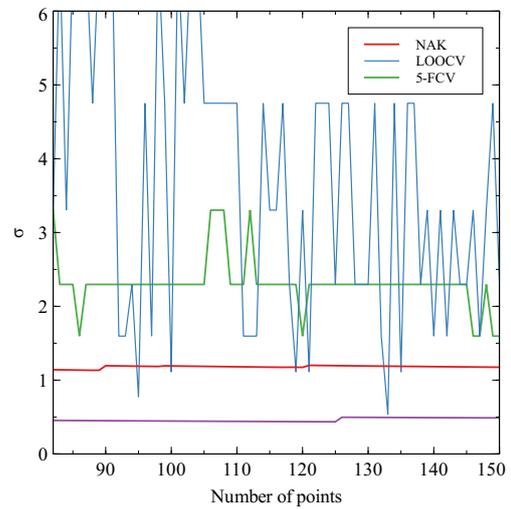
(a) Resultados obtidos com KITSAO



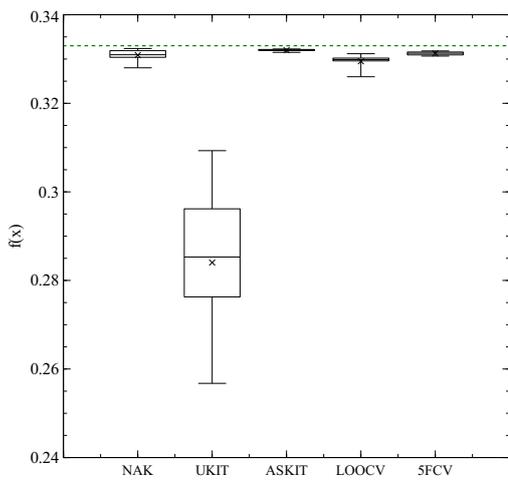
(b) Larguras estimadas



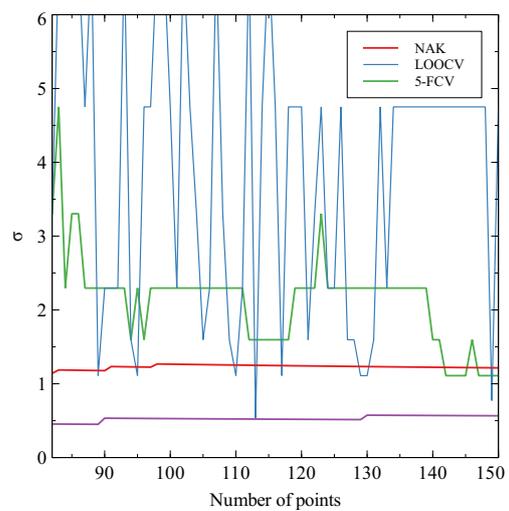
(c) Resultados obtidos com RBEISAO



(d) Larguras estimadas



(e) Resultados obtidos com RBFWEISAO



(f) Larguras estimadas

Fonte: elaborado pelo autor

sem apresentar perda de eficácia quando comparada com a LOOCV, os valores chegaram a ser maiores que 25. Em realidade, vale notar que, no caso desse problema, os resultados da 5FCV em termos de precisão foram todos melhores que com o uso da LOOCV. Esse aspecto se repete, como visto em algumas das comparações realizadas em Funções Teste anteriores.

## 8 CONCLUSÃO

Nesse trabalho, foi proposta a aplicação de uma técnica aproximada, o Modelo Substituto, para melhorar a eficiência de processos de otimização de estruturas compostas por FGM. Esses modelos, quando aliados a uma abordagem SAO, conseguem alcançar o ótimo global de problemas diversos através de uma metodologia aproximada, mas eficaz. Devido aos benefícios em questão de eficiência, facilidade de implementação e eficácia generalizada, o modelo substituto escolhido para o projeto foi o RBF, com uso de funções de base Gaussiana.

O projeto se inicia com a apresentação do tipo de material a ser otimizado, com todas as suas especificidades. Este possui diversos tratamentos diferentes encontrados na literatura, especialmente referentes a forma como se dá a variação das frações de volume ao longo da estrutura e às considerações a cerca das propriedades do material conjunto, características essas que governam os resultados da análise. Ao final, as otimizações foram propostas utilizando uma variação na fração de volume reguladas por *B-Splines*, que possuem a propriedade de ofertar variações suaves ao longo da espessura, e com propriedades efetivas variando de acordo com o Modelo de Mori-Tanaka.

Devido ao tratamento, em todos problemas, com variáveis contínuas, foi escolhido o uso de um algoritmo PSO para lidar com as sub-otimizações presentes em cada abordagem SAO. O uso dessa técnica heurística permite ainda a otimização sem a necessidade de informação a cerca do gradiente da função a ser otimizada, além de raramente se prender em mínimos locais.

O modelo substituto escolhido pelo projeto, as Funções de Base Radial, foi descrito com cuidado, sendo apresentadas discussões feitas pela literatura a cerca do seu uso em comparação com outros modelos, além de diferentes abordagens utilizadas por pesquisadores para definir a largura da função de base Gaussiana. Logo depois, foram descritas diferentes abordagens SAO utilizadas na literatura. Devido a falta de informações consistentes a cerca da melhor metodologia a ser utilizada, no projeto foram testadas algumas combinações de parâmetros diferentes, de forma que algumas dessas questões presentes na literatura pudessem ser melhor elucidadas. Assim, a largura da função de base foi definida através de 5 métodos distintos, enquanto que as 3 abordagens SAO comentadas previamente foram implementadas. Os métodos utilizados para estudar a largura se referem a algumas abordagens analíticas propostas por Nakayama *et al.* (2003) e Kitayama *et al.* (2010), além de abordagens de validação cruzada como adotadas em Sobester *et al.* (2005) e em Müller e Shoemaker (2014). Já em relação às abordagens SAO, os métodos escolhidos para serem testados foram o método proposto em Kitayama *et al.* (2010),

denominado de KITSAO, o conhecido método da Melhoria Esperada (EI) (FORRESTER *et al.*, 2008), denominado de RBEISAO, e o uso de uma Melhoria Esperada alternativa, em que o peso para cada tipo de busca é alternado ciclicamente, como proposto por Sobester *et al.* (2005), denominado de RBFWEISAO.

O uso das técnicas propostas foi testada tanto em Funções Teste, conhecidas e largamente estudadas na literatura, quanto em problemas estruturais. Nestes, o foco do trabalho se manteve na maximização da carga de flambagem e da frequência natural de placas compostas por FGM, utilizando restrições exatas e aproximadas. As otimizações foram promovidas através do programa BIOS enquanto que as análises foram realizadas através do programa FAST, ambos desenvolvidos no LMCV. Os dois programas foram implementados em C++, utilizando o paradigma de Programação Orientada a Objetos.

Os resultados encontrados nas Funções Teste foram ótimos. Apesar da diminuição da eficácia em problemas mais complexos, o uso da técnica da Melhoria Esperada, especialmente aliada à técnicas de validação cruzada, usualmente atingia o mínimo global após um certo número de pontos amostrais. Nestas, as abordagens RBEISAO e RBFWEISAO aparentam apresentar os melhores resultados, alcançando maior eficácia. O segundo em particular aparenta demonstrar uma maior robustez, alcançando bons resultados com uma frequência maior que o primeiro em certos problemas mais complicados. Além disso, interessante notar que, em alguns casos, a 5FCV apresenta resultados melhores que a LOOCV.

Quanto à otimização de estruturas compostas por FGM, os resultados foram excelentes. Muito dos pontos discutidos e também percebidos no caso das Funções Teste se repetiram, como a maior acurácia das abordagens baseadas na Melhoria Esperada. Nestas, no entanto, uma nova métrica foi adicionada, relativa ao *Speed-up*, ou à diminuição do tempo de otimização em relação à otimização convencional. Analisando a métrica, a queda no esforço computacional é perceptível e vertiginosa. Nos problemas estudados, o *Speed-up* variou desde 2.24, em um caso utilizando a Melhoria Esperada e a LOOCV, até 45.95, em um caso utilizando a KITSAO e uma abordagem analítica. Assim, o ganho de eficiência foi enorme em certos casos.

No entanto, vale lembrar que não existe almoço grátis. Assim, o ganho de eficiência vem, muitas vezes, acompanhado de uma perda de eficácia, de forma que não vale a pena o uso de uma abordagem mais rápida que não forneça resultados satisfatórios. Pode-se notar que os resultados obtidos com uso da ASKIT foram bastante satisfatórios, muito embora isso provavelmente se deva ao tipo de função sendo aproximado: é possível que o aspecto não

se confirmasse se utilizados outros tipos de análise. Dito isso, o uso da 5FCV apresentou um *Speed-up* muito parecido com tais abordagens analíticas, além de geralmente denotar um NRMSE médio bem baixo ao final do processo. Além disso, a métrica usualmente alcançou erros baixos após um número pequeno de pontos adicionados, em especial quando aliada à abordagens baseadas na Melhoria Esperada (EI). Dessa forma, o presente trabalho sugere o uso dessas duas técnicas em conjunto para casos gerais. Casos específicos podem ser melhor estudados pontualmente, de forma a possivelmente sugerir modalidades mais eficientes e eficazes.

O uso das Funções de Base Radial, aliadas a diferente abordagens SAO, foi capaz de aumentar a eficiência mesmo em otimizações em que a análise numérica não é tão custosa. No entanto, percebe-se que, em problemas cuja análise é mais cara, o ganho de eficiência aumenta vertiginosamente. Dessa forma, o uso da técnica é altamente indicado quando o tipo de análise realizado passa a gerar um custo computacional proibitivo, provendo uma excelente precisão ao método aliado a um *Speed-up* enorme.

## REFERÊNCIAS

- ACAR, E. Simultaneous optimization of shape parameters and weight factors in ensemble of radial basis functions. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 49, n. 6, p. 969–978, 2013.
- AKGOZ, B.; CIVALEK, O. Longitudinal vibration analysis of strain gradient bars made of functionally graded materials (fgm). **Composites Part B: Engineering**, v. 55, p. 263–268, 2013.
- AMOUZGAR, K.; STRÖMBERG, N. Radial basis functions as surrogate models with a priori bias in comparison with a posteriori bias. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 55, n. 4, p. 1453–1469, 2016.
- ARORA, J. S. **Introduction to optimum design**. 3. ed. [S.l.]: Academic Press/Elsevier, 2017.
- ASHJARI, M.; KHOSHRAVAN, M. Mass optimization of functionally graded plate for mechanical loading in the presence of deflection and stress constraints. **Composite Structures**, v. 110, p. 118–132, 2014.
- AUAD, S.; PRACIANO, J.; BARROSO, E.; JR., J. S.; JUNIOR, E. P. Isogeometric analysis of fgm plates. **Materials Today: Proceedings**, v. 8, p. 738–746, 2019.
- BALREIRA, D. S. **Otimização sequencial aproximada de estruturas laminadas de material compósito**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Ceará, 2018.
- BARROSO, E. S. **Análise e otimização de estruturas laminadas utilizando a formulação isogeométrica**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Ceará, 2015.
- BARROSO, E. S.; PARENTE, E.; MELO, A. M. C. D. A hybrid pso-ga algorithm for optimization of laminated composites. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 55, n. 6, p. 2111–2130, 2016.
- BEACHKOFSKI, B.; GRANDHI, R. Improved distributed hypercube sampling. **43rd AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference**, 2002.
- BENGIO, Y.; GRANDVALET, Y. No unbiased estimator of the variance of k-fold cross-validation. **JOURNAL OF MACHINE LEARNING RESEARCH**, v. 5, p. 1089–1105, 2003.
- BHOSEKAR, A.; IERAPETRITOU, M. Advances in surrogate based modeling, feasibility analysis, and optimization: A review. **Computers and Chemical Engineering**, v. 108, p. 250–267, 2018.
- BIRMAN, V. Modeling and analysis of functionally graded materials and structures. **Encyclopedia of Thermal Stresses**, p. 3104–3112, 2014.
- BRATTON, D.; KENNEDY, J. Defining a standard for particle swarm optimization. **2007 IEEE Swarm Intelligence Symposium**, 2007.
- CHEN, Y. T.; XIANG, S.; ZHAO, W. P. Generalized multiquadrics with optimal shape parameter and exponent for deflection and stress of functionally graded plates. **Applied Mechanics and Materials**, v. 709, p. 121–124, 2014.

CHENG, Y. C.; JIANG, C. P.; LIN, D. H. Finite element based optimization design for a one-piece zirconia ceramic dental implant under dynamic loading and fatigue life validation. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 59, n. 3, p. 835–849, 2018.

CHO, I.; LEE, Y.; RYU, D.; CHOI, D.-H. Comparison study of sampling methods for computer experiments using various performance measures. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 55, n. 1, p. 221–235, 2016.

CHOI, J. H.; CHO, J. R. Optimum material design of metal-ceramic hybrid functionally graded composite. **Materials Science Forum**, v. 569, p. 121–124, 2008.

CHUNG, I.-B.; PARK, D.; CHOI, D.-H. Surrogate-based global optimization using an adaptive switching infill sampling criterion for expensive black-box functions. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 57, n. 4, p. 1443–1459, 2018.

CORREIA, V. M. F.; MADEIRA, J. A.; ARAÚJO, A. L.; SOARES, C. M. M. Multiobjective optimization of ceramic-metal functionally graded plates using a higher order model. **Composite Structures**, v. 183, p. 146–160, 2018.

CORREIA, V. M. F.; MADEIRA, J. A.; ARAÚJO, A. L.; SOARES, C. M. M. Multiobjective optimization of functionally graded material plates with thermo-mechanical loading. **Composite Structures**, v. 207, p. 845–857, 2019.

CORTES, C.; VAPNIK, V. Support-vector networks. **Machine Learning**, v. 20, n. 3, p. 273–297, 1995.

DANG, V.-T.; LABERGÈRE, C.; LAFON, P. Adaptive metamodel-assisted shape optimization for springback in metal forming processes. **International Journal of Material Forming**, v. 12, n. 4, p. 535–552, Jun 2018.

DETTE, H.; PEPELYSHEV, A. Generalized latin hypercube design for computer experiments. **Technometrics**, v. 52, n. 4, p. 421–429, 2010.

DO, D.; LEE, D.; LEE, J. Material optimization of functionally graded plates using deep neural network and modified symbiotic organisms search for eigenvalue problems. **Composites Part B: Engineering**, v. 159, p. 300–326, 2019.

DURANTIN, C.; ROUXEL, J.; DÉSIDÉRI, J.-A.; GLIÈRE, A. Multifidelity surrogate modeling based on radial basis functions. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 56, n. 5, p. 1061–1075, 2017.

DÍAZ-MANRÍQUEZ, A.; TOSCANO-PULIDO, G.; GÓMEZ-FLORES, W. On the Selection of Surrogate Models in Evolutionary Optimization Algorithms. p. 2155–2162, 2011.

ELISSEEFF, A.; PONTIL, M. Leave-one-out error and stability of learning algorithms with applications stability of randomized learning algorithms source. **International Journal of Systems Science - IJSySc**, v. 6, 01 2002.

FORRESTER, A. I.; KEANE, A. J. Recent advances in surrogate-based optimization. **Progress in Aerospace Sciences**, v. 45, n. 1-3, p. 50–79, 2009.

FORRESTER, A. I. J.; SOBESTER, A.; KEANE, A. J. **Engineering design via surrogate modelling: a practical guide**. [S.l.]: Wiley, 2008.

- GAN, N.; GU, J. Hybrid meta-model-based design space exploration method for expensive problems. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 59, n. 3, p. 907–917, 2018.
- GARG, H. A hybrid pso-ga algorithm for constrained optimization problems. **Applied Mathematics and Computation**, v. 274, p. 292–305, 2016.
- GEN, M.; CHENG, R. **Genetic algorithms and engineering optimization**. [S.l.]: John Wiley and Sons, 2000.
- GOEL, T.; HAFTKA, R. T.; SHYY, W.; QUEIPO, N. V. **Ensemble of surrogates**. Springer-Verlag, 2006. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007/s00158-006-0051-9>>.
- GUNST, R. F.; MYERS, R. H.; MONTGOMERY, D. C. Response surface methodology: Process and product optimization using designed experiments. **Technometrics**, v. 38, n. 3, p. 285, 1996.
- HAFTKA, R. T.; GÜRDAL, Z. Elements of structural optimization. **Solid Mechanics And Its Applications**, 1992.
- HARDY, R. L. Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces. **Journal of Geophysical Research**, v. 76, n. 8, p. 1905–1915, 1971.
- HAVINGA, J.; BOOGAARD, A. H. V. D.; KLASEBOER, G. Sequential improvement for robust optimization using an uncertainty measure for radial basis functions. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 55, n. 4, p. 1345–1363, 2016.
- HAYKIN. **Neural networks for radar signal processing**. [S.l.]: John Wiley and Sons, 2012.
- HAYKIN, S. **Neural Networks: A Comprehensive Foundation**. [S.l.]: Macmillan Publishing, 1994.
- HOLSCLAW, T.; SANSÓ, B.; LEE, H. K. H.; HEITMANN, K.; HABIB, S.; HIGDON, D.; ALAM, U. Gaussian process modeling of derivative curves. **Technometrics**, v. 55, n. 1, p. 57–67, 2012.
- HUSSAIN, M. F.; BARTON, R. R.; JOSHI, S. B. Metamodeling: Radial basis functions, versus polynomials. **European Journal of Operational Research**, v. 138, n. 1, p. 142–154, 2002.
- HUSSEIN, O.; MULANI, S. B. Two-dimensional optimization of functionally graded material plates subjected to buckling constraints. **58th AIAA/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference**, 2017.
- HUSSEIN, O. S.; MULANI, S. B. Multi-dimensional optimization of functionally graded material composition using polynomial expansion of the volume fraction. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 56, n. 2, p. 271–284, 2017.
- HUSSEIN, O. S.; MULANI, S. B. Optimization of in-plane functionally graded panels for buckling strength: Unstiffened, stiffened panels, and panels with cutouts. **Thin-Walled Structures**, v. 122, p. 173–181, 2018.
- JACOBS, J.; ETMAN, L.; KEULEN, F. V.; ROODA, J. Framework for sequential approximate optimization. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 27, n. 5, 2004.
- JAMSHIDI, M.; ARGHAVANI, J. Optimal design of two-dimensional porosity distribution in shear deformable functionally graded porous beams for stability analysis. **Thin-Walled Structures**, v. 120, p. 81–90, 2017.

- JHA, D.; KANT, T.; SINGH, R. A critical review of recent research on functionally graded plates. **Composite Structures**, v. 96, p. 833–849, 2013.
- JIN, R.; CHEN, W.; SIMPSON, T. W. Comparative studies of metamodelling techniques under multiple modelling criteria. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 23, n. 1, p. 1–13, 2001. ISSN 1615147X.
- JIN, Z. H.; PAULINO, G. H.; DODDS, R. H. Cohesive fracture modeling of elastic-plastic crack growth in functionally graded materials. **Engineering Fracture Mechanics**, v. 70, n. 14, p. 1885–1912, 2003. ISSN 00137944.
- JONES, D. R.; SCHONLAU, M.; WELCH, W. J. Efficient global optimization of expensive black-box functions. **Journal of Global Optimization**, p. 455–492, 1998.
- JONES, R. M. **Mechanics of composite materials**. Jones. [S.l.]: McGraw-Hill, 1999.
- KENNEDY, J.; EBERHART, R. **Particle swarm optimization**. [S.l.: s.n.], 1995. v. 4.
- KHALFALLAH, S.; GHENAIET, A. Radial basis function-based shape optimization of centrifugal impeller using sequential sampling. **Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering**, v. 229, n. 4, p. 648–665, Oct 2014.
- KIM, B. S.; LEE, Y. B.; CHOI, D. H. Comparison study on the accuracy of metamodeling technique for non-convex functions. **Journal of Mechanical Science and Technology**, v. 23, n. 4, p. 1175–1181, 2009. ISSN 1738494X.
- KITAYAMA, S.; ARAKAWA, M.; YAMAZAKI, K. Sequential approximate optimization using radial basis function network for engineering optimization. **Optimization and Engineering**, v. 12, n. 4, p. 535–557, 2010.
- KITAYAMA, S.; HUANG, S.; YAMAZAKI, K. Optimization of variable blank holder force trajectory for springback reduction via sequential approximate optimization with radial basis function network. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 47, n. 2, p. 289–300, 2012.
- KITAYAMA, S.; SAIKYO, M.; KAWAMOTO, K.; YAMAMICHI, K. Multi-objective optimization of blank shape for deep drawing with variable blank holder force via sequential approximate optimization. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 52, n. 5, p. 1001–1012, Jul 2015.
- KITAYAMA, S.; SRIRAT, J.; ARAKAWA, M.; YAMAZAKI, K. Sequential approximate multi-objective optimization using radial basis function network. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 48, n. 3, p. 501–515, 2013.
- KITAYAMA, S.; YAMAZAKI, K. Simple estimate of the width in gaussian kernel with adaptive scaling technique. **Applied Soft Computing**, v. 11, n. 8, p. 4726–4737, 2011.
- KLEIJNEN, J. P. C.; SANCHEZ, S. M.; LUCAS, T. W.; CIOPPA, T. M. State-of-the-art review: A user's guide to the brave new world of designing simulation experiments. **INFORMS Journal on Computing**, v. 17, n. 3, p. 263–289, 2005.
- KOGISO, N.; WATSON, L. T.; GÜRDAL, Z.; HAFTKA, R. T. Genetic algorithms with local improvement for composite laminate design. **Structural Optimization**, v. 7, n. 4, p. 207–218, 1994.

- KOHAVI, R. A study of cross-validation and bootstrap for accuracy estimation and model selection. In: **Proceedings of the 14th International Joint Conference on Artificial Intelligence - Volume 2**. San Francisco, CA, USA: Morgan Kaufmann Publishers Inc., 1995. (IJCAI'95), p. 1137–1143. ISBN 1-55860-363-8. Disponível em: <<http://dl.acm.org/citation.cfm?id=1643031.1643047>>.
- KOU, X.; PARKS, G.; TAN, S. Optimal design of functionally graded materials using a procedural model and particle swarm optimization. **Computer-Aided Design**, v. 44, n. 4, p. 300–310, 2012.
- KOZIEL, S.; MICHALEWICZ, Z. Evolutionary algorithms, homomorphous mappings, and constrained parameter optimization. **Evol. Comput.**, MIT Press, Cambridge, MA, USA, v. 7, n. 1, p. 19–44, mar. 1999. ISSN 1063-6560. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1162/evco.1999.7.1.19>>.
- KRAMER, O. **Genetic Algorithm Essentials**. [S.l.]: Springer International Publishing, 2017.
- KRIGE, D. G. A statistical approaches to some basic mine valuation problems on the witwatersrand. **Journal of the Chemical, Metallurgical and Mining Society of South Africa**, v. 52, p. 119–139, 1951.
- LEMONGE, A. C. C.; BARBOSA, H. J. C. An adaptive penalty scheme for genetic algorithms in structural optimization. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 59, n. 5, p. 703–736, 2003.
- LI, X.; GAO, W.; GU, L.; GONG, C.; JING, Z.; SU, H. A cooperative radial basis function method for variable-fidelity surrogate modeling. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 56, n. 5, p. 1077–1092, 2017.
- LIU, L.; WAKELAND, W. Does more uniformly distributed sampling generally lead to more accurate prediction in computer experiments? **Proceedings of the 37th Winter Simulation Conference**, 2005.
- LOJA, M. On the use of particle swarm optimization to maximize bending stiffness of functionally graded structures. **Journal of Symbolic Computation**, v. 61-62, p. 12–30, 2014.
- LOJA, M.; BARBOSA, J.; SOARES, C. M. Analysis of sandwich beam structures using kriging based higher order models. **Composite Structures**, v. 119, p. 99–106, 2015.
- LUK-CYR, J.; EL-BAWAB, R.; CHAMPLIAUD, H.; LANTEIGNE, J.; VADEAN, A. Sequential approximate optimization of industrial hammer peening using finite element simulations. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 55, n. 3, p. 767–778, Nov 2016.
- MAIA, M. A.; RIBEIRO, L. G.; PARENTE JR., E.; MELO, A. M. C. de. Sequential approximate optimization using kriging and radial basis functions. **XL Ibero-Latin American Congress on Computational Methods in Engineering**, 2019. Submitted for publication.
- MEDEIROS JR., M. S.; JR., E. P.; MELO, A. M. C. D. Influence of the micromechanics models and volume fraction distribution on the overall behavior of sic/al functionally graded pressurized cylinders. **Latin American Journal of Solids and Structures**, v. 16, n. 4, 2019.

MEHMANI, A.; CHOWDHURY, S.; MEINRENKEN, C.; MESSAC, A. Concurrent surrogate model selection (cosmos): optimizing model type, kernel function, and hyper-parameters. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 57, n. 3, p. 1093–1114, 2017.

MOITA, J. S.; ARAÚJO, A. L.; CORREIA, V. F.; SOARES, C. M. M.; HERSKOVITS, J. Material distribution and sizing optimization of functionally graded plate-shell structures. **Composites Part B: Engineering**, v. 142, p. 263–272, 2018.

MONGILLO, M. Choosing basis functions and shape parameters for radial basis function methods. **SIAM Undergraduate Research Online**, v. 4, p. 190–209, 2011.

MÜLLER, J.; SHOEMAKER, C. A. Influence of ensemble surrogate models and sampling strategy on the solution quality of algorithms for computationally expensive black-box global optimization problems. **Journal of Global Optimization**, v. 60, n. 2, p. 123–144, 2014.

NABIAN, M.; AHMADIAN, M. T. Multi-objective optimization of functionally graded hollow cylinders. **Volume 8: Mechanics of Solids, Structures and Fluids; Vibration, Acoustics and Wave Propagation**, 2011.

NAEBE, M.; SHIRVANIMOGHADDAM, K. Functionally graded materials: A review of fabrication and properties. **Applied Materials Today**, v. 5, p. 223–245, 2016.

NAKAYAMA, H.; ARAKAWA, M.; SASAKI, R. Simulation-based optimization using computational intelligence. **Optimization and Engineering**, v. 3, n. 2, p. 201–214, 2002.

NAKAYAMA, H.; ARAKAWA, M.; WASHINO, K. Optimization for black-box objective functions. **Series on Computers and Operations Research Optimization and Optimal Control**, p. 185–210, 2003.

NGUYEN, T.-T.; LEE, J. Optimal design of thin-walled functionally graded beams for buckling problems. **Composite Structures**, v. 179, p. 459–467, 2017.

NIKBAKHT, S.; KAMARIAN, S.; SHAKERI, M. A review on optimization of composite structures part ii: Functionally graded materials. **Composite Structures**, v. 214, p. 83–102, 2019.

PAN, G.; YE, P.; WANG, P.; YANG, Z. A sequential optimization sampling method for metamodels with radial basis functions. **The Scientific World Journal**, v. 2014, p. 1–17, 2014.

PRICE, K. V.; STORN, R. M.; LAMPINEN, J. A. **Differential Evolution: A Practical Approach to Global Optimization**. [S.l.]: Springer, 2005.

REHMAN, S. U.; LANGELAAR, M. Expected improvement based infill sampling for global robust optimization of constrained problems. **Optimization and Engineering**, v. 18, n. 3, p. 723–753, 2017.

RENNEN, G. Subset selection from large datasets for kriging modeling. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 38, n. 6, p. 545–569, 2008.

RIBEIRO, L. G.; MAIA, M. A.; PARENTE JR., E.; MELO, A. M. C. de. Comparative study on multiple width-defining methods for radial basis functions. **XL Ibero-Latin American Congress on Computational Methods in Engineering**, 2019. Submitted for publication.

- ROQUE, C.; FERREIRA, A. New developments in the radial basis functions analysis of composite shells. **Composite Structures**, v. 87, n. 2, p. 141–150, 2009.
- ROQUE, C.; MARTINS, P. Differential evolution for optimization of functionally graded beams. **Composite Structures**, v. 133, p. 1191–1197, 2015.
- SACKS, J.; WELCH, W. J.; MITCHELL, T. J.; WYNN, H. P. Design and analysis of computer experiments. **Statistical Science**, v. 4, n. 4, p. 409–423, 1989.
- SCHMIT, L.; FARSHI, B. Some approximation concepts for structural synthesis. **AIAA Journal**, v. 12, n. 5, p. 692–699, 1974.
- SHEN, H. S. **Functionally graded materials: Nonlinear analysis of plates and shells**. [S.l.]: CRC Press, 2009.
- SHEN, H.-S.; WANG, Z.-X. Assessment of voigt and mori–tanaka models for vibration analysis of functionally graded plates. **Composite Structures**, v. 94, n. 7, p. 2197–2208, 2012.
- SHI, J.-X.; SHIMODA, M. Interface shape optimization of designing functionally graded sandwich structures. **Composite Structures**, v. 125, p. 88–95, 2015.
- SHI, L.; SUN, B.; IBRAHIM, D. S. An active learning reliability method with multiple kernel functions based on radial basis function. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, 2019.
- SIMPSON, T. W.; LIN, D. K. J.; CHEN, W. Sampling strategies for computer experiments: Design and analysis. **International Journal of Reliability and Applications**, 2002.
- SOBESTER, A.; LEARY, S. J.; KEANE, A. J. On the design of optimization strategies based on global response surface approximation models. **Journal of Global Optimization**, p. 31–59, 2005.
- SONG, X.; LV, L.; SUN, W.; ZHANG, J. A radial basis function-based multi-fidelity surrogate model: exploring correlation between high-fidelity and low-fidelity models. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, 2019.
- STEPONAVIČĖ, I.; SHIRAZI-MANESH, M.; HYNDMAN, R. J.; SMITH-MILES, K.; VILLANOVA, L. On sampling methods for costly multi-objective black-box optimization. **Advances in Stochastic and Deterministic Global Optimization Springer Optimization and Its Applications**, p. 273–296, 2016.
- SUN, G.; SONG, X.; BAEK, S.; LI, Q. Robust optimization of foam-filled thin-walled structure based on sequential kriging metamodel. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 49, n. 6, p. 897–913, 2013.
- TAATI, E.; SINA, N. Multi-objective optimization of functionally graded materials, thickness and aspect ratio in micro-beams embedded in an elastic medium. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 58, n. 1, p. 265–285, 2018.
- TANIGAWA, Y. O. Y. Optimization of material composition of functionally graded plate for thermal stress relaxation using a genetic algorithm. **Journal of Thermal Stresses**, v. 23, n. 3, p. 257–271, 2000.

TENNE, Y. Initial sampling methods in metamodel-assisted optimization. **Engineering with Computers**, v. 31, n. 4, p. 661–680, 2014.

THAI, H. T.; KIM, S. E. **A review of theories for the modeling and analysis of functionally graded plates and shells**. Elsevier Ltd, 2015. v. 128. 70 p. ISSN 02638223. ISBN 8223408333. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.compstruct.2015.03.010>>.

TOULOUKIAN, Y. S. **Thermophysical Properties Research Literature Retrieval Guide**. [S.l.: s.n.], 1974.

TUTUM, C. C.; DEB, K.; BARAN, I. Constrained efficient global optimization for pultrusion process. **Materials and Manufacturing Processes**, v. 30, n. 4, p. 538–551, 2014.

UDUPA, G.; RAO, S. S.; GANGADHARAN, K. Functionally graded composite materials: An overview. **Procedia Materials Science**, v. 5, p. 1291–1299, 2014.

VU, K. K.; HAMADI, Y.; LIBERTI, L.; D'AMBROSIO, C. **Surrogate-based methods for black-box optimization**. John Wiley and Sons, Ltd (10.1111), 2016. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1111/itor.12292>>.

WANG, C.; YU, T.; CURIEL-SOSA, J. L.; XIE, N.; BUI, T. Q. Adaptive chaotic particle swarm algorithm for isogeometric multi-objective size optimization of fg plates. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 60, n. 2, p. 757–778, 2019.

WANG, G. G.; SHAN, S. Review of metamodeling techniques in support of engineering design optimization. **Journal of Mechanical Design**, v. 129, n. 4, p. 370, 2007. ISSN 10500472.

WANG, X.; LI, M.; LIU, Y.; SUN, W.; SONG, X.; ZHANG, J. Surrogate based multidisciplinary design optimization of lithium-ion battery thermal management system in electric vehicles. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 56, n. 6, p. 1555–1570, 2017.

XIANG, H.; LI, Y.; LIAO, H.; LI, C. An adaptive surrogate model based on support vector regression and its application to the optimization of railway wind barriers. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 55, n. 2, p. 701–713, Aug 2016.

XIANG, S.; BI, Z.-Y.; JIANG, S.-X.; JIN, Y.-X.; YANG, M.-S. Thin plate spline radial basis function for the free vibration analysis of laminated composite shells. **Composite Structures**, v. 93, n. 2, p. 611–615, 2011.

XING, Y.; WU, Y.; LIU, B.; FERREIRA, A.; NEVES, A. Static and dynamic analyses of laminated plates using a layerwise theory and a radial basis function finite element method. **Composite Structures**, v. 170, p. 158–168, 2017.

YAN, C.; SHEN, X.; GUO, F.; ZHAO, S.; ZHANG, L. A novel model modification method for support vector regression based on radial basis functions. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, 2019.

YAO, W.; CHEN, X.; HUANG, Y.; TOOREN, M. V. A surrogate-based optimization method with rbf neural network enhanced by linear interpolation and hybrid infill strategy. **Optimization Methods and Software**, v. 29, n. 2, p. 406–429, 2013.

YI, P.; CHENG, G. Further study on efficiency of sequential approximate programming for probabilistic structural design optimization. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 35, n. 6, p. 509–522, Mar 2007.

ZHANG, J.; CHOWDHURY, S.; ZHANG, J.; MESSAC, A.; CASTILLO, L. Adaptive hybrid surrogate modeling for complex systems. **AIAA Journal**, v. 51, n. 3, p. 643–656, 2013.

ZHOU, M.; LUO, Z.; YI, P.; CHENG, G. A two-phase approach based on sequential approximation for reliability-based design optimization. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 57, n. 2, p. 489–508, Sep 2018.

ŞİMŞEK, M. Size dependent nonlinear free vibration of an axially functionally graded (afg) microbeam using he's variational method. **Composite Structures**, v. 131, p. 207–214, 2015.