

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO

**Técnicas de Metamodelagem Aplicadas à
Otimização de Turbomáquinas**

Autora: Edna Raimunda da Silva

Orientador: Prof. Dr. Nelson Manzanares Filho

Co-Orientador: Prof. Dr. Ramiro Gustavo Ramirez Camacho

Itajubá, Dezembro de 2011

M.G – Brasil

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO

**Técnicas de Metamodelagem Aplicadas à
Otimização de Turbomáquinas**

Autora: Edna Raimunda da Silva

Orientador: Prof. Dr. Nelson Manzanares Filho

Co-Orientador: Prof. Dr. Ramiro Gustavo Ramirez Camacho

Curso: Doutorado em Engenharia Mecânica

Área de Concentração: Dinâmica dos Fluidos e Maquinas de Fluxo

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica como parte dos requisitos para obtenção do Título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Itajubá, Dezembro de 2011

MG – Brasil

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO

Técnicas de Metamodelagem Aplicadas à Otimização de Turbomáquinas

Autora: Edna Raimunda da Silva

Orientador: Prof. Dr. Nelson Manzanares Filho

Co-Orientador: Prof. Dr. Ramiro Gustavo Ramirez Camacho

Composição da Banca Examinadora:

Prof. Dr. João Roberto Barbosa - ITA

Prof. Dr. Antonio Marcos Gonçalves de Lima – UFU

Prof. Dr. Waldir de Oliveira – IEM / UNIFEI

Prof. Dr. Genésio José Menon – IEM / UNIFEI

Prof. Dr. Ramiro Gustavo Ramirez Camacho – IEM / UNIFEI

Prof. Dr. Nelson Manzanares Filho – IEM / UNIFEI

Moderador: Prof. Dr. José Eugênio Ricci – IEM / UNIFEI

Dedicatória

A Deus

e à minha família

Agradecimentos

Ao meu Orientador, Prof. Dr. Nelson Manzanares Filho, pela competência, dedicação, paciência e amizade.

Ao meu Co-Orientador Prof. Dr. Ramiro G. Ramirez Camacho e ao Prof. Dr. Antonio Marcos G. Lima pela competência, paciência, colaboração, amizade e valiosas contribuições.

Aos Professores da Universidade Federal de Itajubá, José Juliano de Lima Jr., Edson de Jesus, Genésio José Menon, Waldir de Oliveira, Ariosto Jorge Bretanha, Ramiro Gustavo Ramirez Camacho, Antonio Marcos Gonçalves Lima e Nelson Manzanares Filho, pelo apoio e valiosas sugestões, que contribuíram para a elaboração deste trabalho.

Ao Instituto de Engenharia Mecânica da UNIFEI, representado pelos seus dedicados Professores e Funcionários, pela oportunidade que me concedeu na realização deste trabalho, e aos amigos desse Instituto, pelo convívio profissional.

A toda a minha família pelo incentivo e pelas palavras de ânimo e estímulo que muitas vezes me auxiliaram na continuidade deste trabalho, em especial à minha mãe, por suas preciosas orações.

Aos amigos Michelly Martuchele, Fernanda Sírio, Cleber Reis, Marcos Antonio, William, André Giorgi, César, Eduardo, Bruno Silva, Carina, Angie, Lady, Luiz Guilherme, Luiz Augusto, Eric Peres, Adriana Diacenco, Janaina e demais colegas de pós-graduação pelo permanente incentivo, colaboração, amizade, momentos de lazer e inesquecível convívio profissional.

E à CAPES, através do Programa de bolsas, pelo apoio financeiro.

Viver, Aprender.

Resumo

SILVA, E. R. (2011), *Técnicas de Metamodelagem aplicadas à Otimização de Turbomáquinas*, Itajubá, 142 p. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

Apresenta-se um estudo teórico de aproximação abordando conceitos e fundamentos de funções de base radial e polinomial clássica, para construção de superfícies de resposta, fazendo-se uso das técnicas estatísticas, como planos de experiências (*Design of Experiments* - DOE). Neste estudo, desenvolve-se uma metodologia para melhorar o processo de otimização de turbomáquinas utilizando técnicas de metamodelagem, onde são descritos os métodos matemáticos e estatísticos de aproximação de modelos. Para o processo de otimização são utilizados algoritmos de busca aleatória controlada (CRSA). Em princípio, aplica-se a metodologia para a análise de uma grade linear onde o campo de escoamento é calculado utilizando o método dos painéis de Hess & Smith (2D), com modificações que permitem introduzir os efeitos viscosos e separação da camada-limite na quantificação dos coeficientes aerodinâmicos. Numa segunda abordagem, o enfoque é dado na integração de uma estratégia de otimização global com restrições, própria para aplicação a *solvers* custosos, como CFD – 3D. Tal estratégia faz uso das técnicas de metamodelagem com base em funções de base radial (RBF - *Radial Basis Function*) em conjunto com algoritmos de otimização para construção de superfícies de resposta. Esta metodologia permite de forma rápida e eficiente alcançar uma solução ótima do projeto da grade linear ou do rotor.

Palavras-chave

Busca Aleatória Controlada, Metamodelagem, Turbomáquinas, Otimização, CFD.

Abstract

SILVA, E. D. (2011), *Metamodeling techniques applied to optimization of turbomachinery*, Itajubá, 142p. (Doctorate in Mechanical Engineering) - Institute of Mechanical Engineering, Federal University of Itajubá.

It presents a theoretical study approach covering concepts and fundamentals of radial basis functions and polynomial classical construction of response surfaces, making use of statistical techniques, such as plans of experiments (Design of Experiments - DOE). This study develops a methodology for improving the process of optimization of turbomachinery using metamodeling techniques, which describes the mathematical and statistical modeling approach. For the process of optimization algorithms are used for controlled random search (CRSA). In principle, applied to methodology for the analysis of a linear cascade where the flow field is calculated using the method of Smith & Hess panels (2D), with modifications enabling the effects to introduce the viscous boundary layer separation on the quantification of aerodynamic coefficients. In a second approach, the focus is on integrating a strategy for global optimization with constraints, suitable for application to costly solvers, such as CFD - 3D. This strategy makes use of metamodeling techniques based on radial basis functions (RBF - Radial Basis Function) in conjunction with optimization algorithms for construction of response surfaces. This methodology allows us to fast and efficiently achieve an optimal solution of the cascades design Linear or rotor.

Keywords

Controlled Random Search Algorithm, Metamodeling, Turbomachinery, Optimization, CFD.

Sumário

DEDICATÓRIA	i
AGRADECIMENTOS	ii
RESUMO	iii
ABSTRACT	iv
SUMÁRIO	v
LISTA DE FIGURAS.....	ix
LISTA DE TABELAS.....	xii
SIMBOLOGIA	xiv
LETRAS LATINAS	xiv
LETRAS GREGAS	xvi
SOBRESCRITOS	xvii
SUBSCRITOS.....	xviii
ABREVIATURAS	xviii
SIGLAS	xix
Capítulo 1	1
INTRODUÇÃO	1
1.1 MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS DO TRABALHO	2
1.2 DELINEAMENTO DA PESQUISA.....	4
Capítulo 2	7

ESTADO DA ARTE.....	7
2.1 PESQUISA BIBLIOGRÁFICA	7
2.1.1 Estudos sobre Metamodelagem como Ferramenta de Apoio a Otimização.....	7
2.1.2 Estudos sobre Otimização com Base na Construção de Metamodelos Aplicados à Engenharia	10
2.1.3 Estudos sobre Otimização Global com base na Construção de Metamodelos.....	13
2.1.4 Estudos Sobre o Parâmetro de Forma, c , Usado na Múltiquadrica e Múltiquadrica Inversa.	14
2.1.5 Estudos sobre Otimização com base na Construção de Metamodelos Usando CFD.....	15
2.2 CONSIDERAÇÕES FINAIS	19
Capítulo 3	20
OTIMIZAÇÃO	20
3.1 DEFINIÇÃO DE OTIMIZAÇÃO	20
3.2 BREVE DESENVOLVIMENTO HISTÓRICO	21
3.3 A TERMINOLOGIA DE UM PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO	22
3.4 CLASSIFICAÇÃO DOS MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO	23
3.5 PROBLEMAS COM MULTIPLOS OBJETIVOS	27
3.6 PROBLEMAS MULTIDISCIPLINARES	28
3.7 MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO APLICADOS NA PESQUISA.....	29
3.7.1 CRSA – Algoritmos de Busca Aleatória Controlada	30
3.8 CONSIDERAÇÕES FINAIS	32
Capítulo 4	33
METODOLOGIA DE CONSTRUÇÃO DE METAMODELOS.....	33
4.1 PLANO DE EXPERIÊNCIAS	33
4.2 SUPERFÍCIE DE RESPOSTAS CLÁSSICAS (SRC)	34
4.2.1 Análise de Sensibilidade.....	36
4.2.2 ANOVA (Análise de Variância).....	37
4.3 INTERPOLAÇÃO POR FUNÇÕES DE BASE RADIAL (FBR).....	37
4.4 APLICAÇÕES COM METAMODELOS.....	41
4.4.1 Metodologia Clássica e Interpolação por Funções de Base Radial	41

4.4.2 Análises	43
4.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS	46
Capítulo 5	48
ESTRATÉGIA DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL COM RESTRIÇÕES COM BASE EM METAMODELOS.....	48
5.1 INTRODUÇÃO.....	48
5.2 DESCRIÇÃO DA METODOLOGIA	50
5.2.1 Experimentos Computacionais	53
5.3 TÉCNICA DE AUTOMATIZAÇÃO DO PARÂMETRO DE FORMA C USADO EM FUNÇÕES DE BASE RADIAL	59
5.3.1 Implementação do LEAVE-ONE-OUT CROSS-VALIDATION	60
5.3.2 Aplicação do LOOCV	68
5.4 ESTRATÉGIA DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL (OGM) COM VALIDAÇÃO CRUZADA PARA AJUSTE DO PARÂMETRO DE FORMA C	69
5.4.1 Aplicação da Estratégia OGM com Validação Cruzada Usando Otimizador Estocástico.....	70
5.4.2 Aplicação da Estratégia OGM-LOOCV Sem Uso do Otimizador Estocástico - CRSA	75
5.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS	77
5.5.1 Algoritmos Estocásticos	77
5.5.2 Metamodelos	78
5.5.3 Funções de Base Radial.....	78
5.5.4 Técnicas Automáticas de Escolha do Parâmetro de Forma C	79
5.5.5 Integração de Processos.....	79
Capítulo 6	81
APLICAÇÕES EM SISTEMAS COMPLEXOS DE ENGENHARIA – ÁREA: TURBOMÁQUINAS.....	81
6.1 MÉTODOS DOS PAINÉIS HESS & SMITH PARA O CALCULO DO ESCOAMENTO EM GRADES	81
6.1.1 Transpiração – Região sem Separação da Camada-Limite (CL)	88
6.1.2 Injeção de Vazão – Região com Separação da Camada-Limite (CL).....	89

6.1.3 Coeficientes de Arrasto.	90
6.1.4 Aplicação das Técnicas de Metamodelagem em Grades Utilizando o Método dos Painéis.....	92
6.2 PROBLEMA INVERSO EM GRADES DE TURBOMÁQUINAS.....	100
6.2.1 Aplicação do Método de Otimização Global com Escolha Arbitrária de c	100
6.3 APLICAÇÃO DO MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL EM GRADES USANDO CFD-2D.	104
6.4 APLICAÇÃO DO MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL PARA UMA TURBINA HIDRAULICA AXIAL USANDO CFD-3D.	113
6.4.1 Resultados do Processo de Otimização	117
6.5 APLICAÇÕES DO MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL (OGM-LOOCV) COM ESCOLHA AUTOMÁTICA DE C EM GRADES USADO CFD-2D.	120
6.6 CONSIDERAÇÕES FINAIS	124
Capítulo 7	125
CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS.....	125
7.1 CONCLUSÕES	125
7.2 PERSPECTIVAS FUTURAS	128
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	129
Apêndice A	138
SCRIPT PARA GERAÇÃO AUTOMÁTICA DE MALHA TCL/TK (LISTAGEM PARCIAL).....	138
Apêndice B	140
JOURNAL FILES PARA CÁLCULO DO ESCOAMENTO.....	140

Lista de Figuras

Figura 3.1	Técnicas de otimização.....	26
Figura 4.1	Número de Condição para o MRBF com PFC.....	44
Figura 4.2	(a) Erro médio quadrático - MSE; (b) Superfície da função GP.....	44
Figura 4.3	(a) Análise do erro para MPOL; (b) Análise do erro para MFBR.....	45
Figura 4.4	(a) Erro médio quadrático - MSE; (b) Superfície da função BR.....	45
Figura 4.5	(a) Análise do erro para MPOL; (b) Análise do erro para MFBR.....	46
Figura 5.1	Número de Condição de Interpolação da Matriz A para a interpolação múltiquadrada sobre um conjunto de 100 pontos.....	65
Figura 5.2	Erros para a interpolação múltiquadrada em um conjunto de 100 pontos para a função $F1$: (a) Gráfico de F_{erro} ; (b) MSE como uma função de c	66
Figura 5.3	Erros para a interpolação múltiquadrada em um conjunto de 81 pontos para a função $F3$: (a) Gráfico de F_{erro} ; (b) MSE como uma função de c	67
Figura 5.4	Erros para a interpolação múltiquadrada em um conjunto de 100 pontos para a função $F6$: (a) Gráfico de F_{erro} ; (b) MSE como uma função de c	67
Figura 5.5	Erros para a interpolação múltiquadrada inversa em um conjunto de 100 pontos para a função $F6$: (a) Gráfico de F_{erro} ; (b) MSE como uma função de c	68
Figura 5.6	Evolução do processo de otimização para a função Branin no Modo 2: (a) Ótimo c ; (b) Menor valor do erro (F_{erro}).....	72
Figura 5.7	Evolução do processo de otimização para a função Hartman6 no Modo 2: (a) Ótimo c ; (b) Menor valor do erro (F_{erro}).....	73

Figura 5.8	Evolução do processo de otimização para a função Shekel5 no Modo 2: (a) Ótimo c ; (b) Menor valor do erro (F_{erro}).....	73
Figura 6.1	Grade representativa de um rotor axial.....	82
Figura 6.2	Grade linear e diagrama de velocidades.....	84
Figura 6.3	Definição das componentes tangenciais de velocidade (Hayashi 1977b).....	90
Figura 6.4	Resultados para regressão com funções polinomiais, nível = 3, (a) Comparação para C_l , (b) Comparação para C_d	95
Figura 6.5	Resultados para regressão com funções polinomiais, nível = 5, (a) Comparação para C_l , (b) Comparação para C_d	96
Figura 6.6	Resultados para regressão com funções polinomiais, nível = 3 e 5 níveis, respectivamente, (a) e (b) Comparação para C_l ; (c) e (d) Comparação para C_d	97
Figura 6.7	Resultados para interpolação com funções de base radial multiquádricas $c = 1$, nível = 3; (a) Comparação para C_l ; (b) Comparação para C_d	98
Figura 6.8	Resultados para interpolação com funções de base radial multiquádricas $c = 3$, nível = 3; (a) Comparação para C_l ; (b) Comparação para C_d	99
Figura 6.9	Esquema de uma grade retilínea de aerofólios	100
Figura 6.10	Aproximação do aerofólio NACA 65 ₁ -412 por curvas Bezier.....	101
Figura 6.11	Objetivo e distribuição final de pressão.....	103
Figura 6.12	Forma final do aerofólio	104
Figura 6.13	Distribuição de pressão para NACA65(18)-10 Grade: $\lambda = 0.5$, $\beta_1 = 45^\circ$, $\beta = 25.3^\circ$, $Re = 2.45 \times 10^5$	105
Figura 6.14	Malha gerada para o perfil base NACA65(15)-10	106
Figura 6.15	Comparação do aerofólio base com o aerofólio otimizado	109
Figura 6.16	Histórico do processo de otimização	111
Figura 6.17	Resultados obtidos no ponto de otimização (OGM), (a) Linhas de corrente, (b) Distribuição de pressão estática.....	112

Figura 6.18	(a) Contorno de pressão estática, (b) Contorno de viscosidade turbulenta modificada (m^2/s).....	112
Figura 6.19	Geometria e canal periódico da turbina axial, (b) empilhamento da pá em 3 posições radiais.....	114
Figura 6.20	Malha híbrida camada prismática, núcleo hexa e tetra, 2699545 células.....	115
Figura 6.21	(a) Geometria do domínio computacional, gerada automaticamente do <i>script file</i> , (b) Geometria do rotor (replicado)	116
Figura 6.22	Histórico do Processo de Otimização.....	119
Figura 6.23	(a) Contornos de pressão estática (Pascal), (b) Convergência.....	120
Figura 6.23	Comparação do aerofólio base com o aerofólio otimizado	122
Figura 6.24	Histórico do processo de otimização - OGM-LOOCV	123

Lista de Tabelas

Tabela 4.1	Funções de Base Radial Dependente de Parâmetro de forma.....	39
Tabela 4.2	Funções de Base Radial Condicionalmente Positiva Definida e Independente de Parâmetros.....	40
Tabela 5.1	Funções de teste (Dixon & Szegö,1978).....	54
Tabela 5.2	Comparação: OGM x CRSA nas funções de teste Dixon-Szegö.....	54
Tabela 5.3	Comparação da implementação OGM e CRSA nas funções de teste Dixon-Szegö.....	57
Tabela 5.4	Comparação da implementação OGM e CRSA nas funções de teste Dixon-Szegö com dois tipos de busca padrão para a função Thin Plate Spline com Polinômio Linear.....	58
Tabela 5.5	Otimização do parâmetro de forma c sobre o erro de interpolação RBF para 10 funções de testes (Rippa,1999), (Dixon & Dzegö, 1978).....	69
Tabela 5.6	Otimização de funções reais usando OGM com Otimização do parâmetro de forma c para 6 funções de teste Dixon-Szegö – Modo 1.....	71
Tabela 5.7	Otimização de funções reais usando OGM com Otimização do parâmetro de forma c para 6 funções de teste Dixon-Szegö – Mode 2.....	72
Tabela 5.8	Comparação da implementação OGM-LOOCV sem o uso de otimizador estocástico para valor adequado de c nas funções de teste Dixon-Szegö.....	76
Tabela 6.1	Limites Inferiores e Superiores.....	93

Tabela 6.2	Dados Geométricos, Condições de Contorno e Propriedades do Escoamento.....	108
Tabela 6.3	Resultados da Otimização.....	109
Tabela 6.4	Histórico do processo de otimização.....	110
Tabela 6.5	Histórico do Processo de Otimização.....	118
Tabela 6.6	Resultados da Otimização.....	122
Tabela 6.7	Histórico do processo de otimização.....	123

Simbologia

Letras Latinas

$[A]$	Matriz de coeficientes de influência na direção normal
$[B]$	Matriz de coeficientes de influência na direção tangencial
$\{D\}$ e $\{C\}$	Vetor de influência de vórtices pela velocidade normal
C_d	Coefficiente de arrasto
C_f	Coefficiente de atrito
C_l	Coefficiente de sustentação
C_p	Coefficiente de pressão
C_{p-min}	Coefficiente de pressão mínimo
CN	<i>Condition Number</i>
$\{D\}$	Vetor de influência de vórtices pela velocidade tangencial
D	Subconjunto compacto de \mathbb{R}^d
e_q	Erro quadrático
ε	Erro médio quadrático e tolerância obtida
ϵ	Precisão da Máquina
$f(x)$	Função original
f_{ap}	Função aproximada
f_{ex}	Função exata
f_h	Valor da função no pior ponto
f_l	Valor da função no melhor ponto
F	Vetor dos valores da função calculados nos pontos x_i e função senoidal.

F_{erro}	Função que imita o erro médio quadrático
$g(\mathbf{x})$	Função aproximada, $\hat{y} = g(\mathbf{x})$ e função restrição
g_k	Densidade linear
HCL	Hipercubo latino
H	Fator de forma na separação turbulenta
i	Número da iteração
J, k	Índice do nó ou painel
K+1	Número de simulações
k	Número de parâmetros considerados
l	Comprimento do painel e Comprimento da corda do perfil
l_j	Função restrição
l_{sp}	Parâmetros geométricos da grade
l/t	Razão de solidez
m	Número de experimentos do plano fatorial completo
n_c	Número de coeficientes a serem determinados
n_{niv}	Número de níveis
N_{pop}	Número da população inicial
N	Número de painéis e comprimento do ciclo para busca padrão
n_{BE}	Pontos da curva de Bezier
P	Polinômio linear e população inicial do CRSA
p	Vetor que contém os coeficientes do polinômio
r	Raio
R	Conjunto dos números reais
s	Função de interpolação, coordenada natural em torno do perfil e distância
S_i	Vetor dos pontos iniciais para OGM
Re	Numero de Reynolds
t	Espaçamento ou passo do perfil em grade linear
X	Matriz de experiências
x	Vetor de entradas
\tilde{x}	Ponto candidato
x^L	Restrições laterais inferiores
x^U	Restrições laterais superiores
y	Vetor de respostas para construção do metamodelo

y_{\max}	Intensidade do vórtice
y_{tA}	Distância da posição do ponto de separação na superfície do perfil ate a linha media do esqueleto do lado de sucção mais o lado de pressão
Z_{ei}	Ponto de controle
Z_{ci}	Ponto de controle
W_1	Velocidade relativa do escoamento na entrada da grade.
W_2	Velocidade relativa do escoamento na saída da grade.
W_∞	Velocidade do escoamento não perturbado / vetorial
W_n	Velocidade normal
W_{nd}	Velocidade normal de transpiração
W_s	Velocidade de separação
W_t	Velocidade tangencial.
\overline{W}	Velocidade complexa conjugada

Letras Gregas

α	Coefficientes do polinômio e também da função de base radial
α_1	Ângulo de incidência na grade
β	Ângulo de montagem da grade
β_1	Ângulo do escoamento na entrada do perfil em grade
β_2	Ângulo do escoamento na saída do perfil em grade
β_∞	Ângulo do escoamento médio para perfis em grades lineares
β_u, β_l	Parâmetros geométricos do perfil
σ	Fontes
θ	Espessura de quantidade de movimento
θ	Ângulo de deflexão
ϕ	Tipo de função de base radial
φ	Matriz formada pelas funções de base radial

δ^*	Espessura de deslocamento da camada limite
λ	Razão de solidez
λ_i	Coefficientes a ser determinado pela função da base radial + termo polinomial
$\Delta\beta$	Ângulo de deflexão do escoamento na grade
$\beta\Delta$	Padrão de busca e Distância dos pontos previamente avaliados
Γ	Circulação em torno da pá.
PI	Constante $\pi = 3.1415192654$
c	Parâmetro de forma
ζ	Coefficiente de perdas
$1/\zeta$	Inverso do número de condição
ϵ	Precisão da máquina
$\bar{\omega}$	Coefficiente de perdas
ρ	Massa específica
μ	Coefficientes reais a serem determinados do Polinomio Linear

Sobrescritos

T	Transposta de uma matriz ou vetor
\rightarrow	Vetor
n	número
d	Dimensão do espaço linear dado por polinômios
k	Número de variáveis
L	lower
U	upper
* ou \wedge	Para indicar quando uma função é uma aproximação ou ponto de aproximação

Subscritos

i e j	índice
exp	experimentos
niv	níveis
bf	bordo de fuga
sep	separação
inf, s_l	inferior
sup, s_u	superior
∞	infinito
máx	máximo
min	mínimo
nt	normal na superfície
norm	normal
tan	tangencial
$c, I, II,$ $III, nd,$ nf, ng	Índices relativos as disciplinas em MDO

Abreviaturas

et al.	Co-autores
MQ	Multiquádrica
GP	Goldstein Price
BR	Branin
MF	Máquinas de fluxo

2D e 3D Bidimensional e tridimensional

IA Inteligência Artificial

Siglas

MFBR Metamodelo baseado em funções de base radial

MPOL Metamodelo polinomial

DOE Design of experiments

RBFNs Radial basis function Networks

RBF Radial basis function

FBR Funções de base radial

CORS Constrained optimization using response surface

CFD Dinâmica dos fluidos computacional

DFC *Computational fluid dynamics*

CPU Unidade de processamento central

RSM Response surface methodology

PFC Plano fatorial completo

RMSE Erro médio quadrático

HESSTURBO Solver implementado por (Ramirez, 2005)

CRSA Controlled random search algorithm

DIRECT Solver usado por (Jones, 2001a)

TS Taxa de sucesso

SP1 Search pattern 1

SP2 Search pattern 2

AM Ângulo de montagem

MAXMIN Ponto que está o mais longe possível do previamente avaliado

CORS-RBF	Constrained optimization surface response – Radial basis function
OGM-FBR	Otimização Global utilizando Metamodelagem com funções de base radial
OGM	Otimização Global utilizando Metamodelagem
LOOCV	Leave one out cross validation
OGM- LOOCV	Otimização Global utilizando Metamodelagem com <i>Leave one out cross validation</i>
VIFI	viscous-inviscid flow injection
MDO	Multidisciplinary Design Optimization

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, muitos esforços têm sido empregados para o desenvolvimento de estratégias de metamodelagem capazes de avaliar o comportamento exato típico da engenharia de estruturas e aerodinâmica (Brik et al., 2004). Como resultado é correntemente possível modelar estruturas de engenharias complexas como rotores de turbomáquinas, automóveis, aviões, satélites de comunicação, construções e estruturas espaciais usando metamodelos representativos com o objetivo de reduzir o esforço computacional requerido para computar as soluções exatas.

Uma extensão natural da capacidade de modelagem é a otimização de componentes de um sistema de engenharia com o objetivo de reduzir o custo e ou a maximização do desempenho ou eficiência. Em questão de otimização os engenheiros são frequentemente confrontados com modelos físicos complexos onde se tem muitas variáveis de projeto envolvidas, que geralmente requerem um grande número de avaliações das funções computacionalmente caras envolvidas nas relações entrada-saída. Sendo assim, a metamodelagem tem sido amplamente empregada como uma técnica de redução do esforço computacional. A estratégia é substituir os modelos complexos de alta ordem por modelos de baixa ordem capazes de representar adequadamente a relação entrada-saída.

No entanto o uso apenas de técnicas de metamodelagem pode não contribuir para um resultado mais fidedigno. A construção dos metamodelos empregados para solução ótima deve ser feita com uma maior amostragem dos pontos iniciais e uma boa escolha da função de base radial. No entanto, trabalhar com espaços de projetos mais povoados para construção dos

metamodelos e fazer uso destes para o processo de otimização, pode não ser aplicado para muitos problemas de engenharia, principalmente os que envolvem simulações em CFD - *Computational Fluid Dynamics*. Neste sentido, torna-se interessante aplicar uma metodologia na construção de metamodelos para acelerar o processo de otimização. Este método parte de uma pequena população inicial para a construção dos metamodelos, os quais vão sendo melhorados no decorrer do processo de otimização.

Para mostrar a eficiência da metodologia, foram feitas avaliações das funções de base radial que fazem uso de um parâmetro de forma, denominado de c , bem como foi também criada uma metodologia para escolha automática deste parâmetro de forma. Foi trabalhado nesta metodologia um algoritmo estocástico que se comportou muito eficazmente. O algoritmo de otimização também não é o mais importante na estrutura da metodologia, porém pode contribuir de forma excelente para atingir os resultados esperados.

1.1 MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS DO TRABALHO

A necessidade de modelos complexos para cálculo do escoamento em turbomáquinas requer um esforço computacional considerável, dificultando o processo de otimização. Este fato é comprovado especificamente quando modelos bi ou tri-dimensional de um campo de escoamento são empregados, ainda que avanços em termos de capacidade e velocidade computacional venham ocorrendo. Nesse sentido, o estudo de ferramentas como, por exemplo, métodos de aproximação (metamodelos) adequados, tornam-se valiosos, pois permitem uma rápida representação do modelo físico.

Procura-se, então, desenvolver uma metodologia de projeto de turbomáquinas utilizando técnicas de metamodelagem, onde um metamodelo (i.e., um modelo substituto ou superfícies de resposta) é concebido para ser usado com muito maior frequência que o modelo real. Este, por sua vez, é utilizado poucas vezes para avaliar situações de projeto consideradas mais promissoras. Resultando em uma metodologia de baixo custo computacional, com base na construção de superfícies de resposta usando interpolações por meio de funções de base radial, acoplada com algoritmos de otimização evolucionários (por exemplo, algoritmo de busca aleatória controlada – CRSA), com restrições.

Uma vez estabelecida a metodologia, é possível obter resultados mais efetivos do ótimo que se quer atingir. Para validar a metodologia, resultados serão comparados com dados extraídos da literatura, aplicados em funções para teste, onde o ótimo de cada função testada é conhecido.

Após as análises com as funções de teste, a metodologia é aplicada ao estudo de otimização de grades de turbomáquinas, como:

- Alcançar a maior eficiência na grade através da maximização da relação sustentação e arrasto.

- Aplicação em projeto inverso através do conhecimento de uma distribuição, pré-otimizada de pressões ou velocidades, obter uma grade de perfis aerodinâmicos de alta eficiência.

- Maximizar a eficiência hidráulica em rotores de turbinas axiais.

Os aspectos e objetivos mais específicos podem ser apresentados da seguinte maneira:

- Uso de metamodelos como uma medida de redução do esforço computacional, onde modelos complexos bi e tri dimensional estão envolvidos;

- Reduzir o número de avaliações das funções-objetivo quando se utiliza código computacional caro;

- Uso de melhores algoritmos de otimização, tais como algoritmos evolucionários;

- Emprego de técnicas de otimização acopladas com metamodelos a fim de acelerar o processo de otimização;

- Aperfeiçoar o código já implementado com técnicas de automatização do parâmetro de forma c necessário às funções de base radial múltiquadrada e múltiquadrada inversa.

- Aplicação da metodologia em sistemas complexos de engenharia, como por exemplo, grades axiais e rotores de turbomáquinas, fazendo-se uso de dinâmica dos fluidos computacional.

Os estudos relatados na literatura, com base na aplicação de metamodelos mostraram como é vasto o campo de aplicação e como tem sido bem sucedida a aplicação para turbomáquinas, como empregada por Marjavaara (2006).

Os caminhos que conduzem à pesquisa são bastante motivadores, abrangem diferentes áreas do conhecimento, além de contribuir significativamente para a pesquisa científica.

1.2 DELINEAMENTO DA PESQUISA

Este primeiro capítulo apresenta uma breve introdução ao estudo da técnica de metamodelagem e descreve os objetivos e as motivações que deram origem à pesquisa em questão, bem como a estrutura do trabalho.

No Capítulo 2 é apresentada a evolução dos diversos aspectos com relação à metamodelagem e às aplicações em engenharia. Além disso, o estudo bibliográfico é importante para mostrar os aspectos que serão abordados e aprofundados neste trabalho.

No contexto da metamodelagem aplicada em turbomáquinas, o número de parâmetros envolvidos e a necessidade de um grande número de análises no modelo real, conduzem à exploração dos métodos de aproximação, tais como: redes neurais artificiais, superfícies de resposta clássicas polinomiais, adaptativas, e funções de base radial.

No Capítulo 3 será apresentada uma classificação das principais técnicas de otimização, permitindo de forma clara o entendimento da técnica utilizada, em função do problema proposto. Neste capítulo é detalhado o método de otimização estocástico utilizado no trabalho.

No Capítulo 4 faz-se um estudo de duas metodologias de construção de metamodelos, (i) metamodelos clássicos permitem obter uma estimativa através de uma aproximação polinomial gerando a resposta real da aplicação de plano de experiências, ou seja, do plano fatorial completo - PFC. Esta resposta deve ser analítica e contínua em todo seu domínio. O uso de apenas uma configuração polinomial pode conduzir a resultados não satisfatórios. Para isto, propõe-se uma metodologia baseada em outras amostragens aleatórias a fim de obter várias configurações para, assim, obter um polinômio mais representativo da realidade física do problema. Isto pode também ser adquirido pelo método hipercubo latino (HCL); (ii) e metamodelos baseados na aproximação por interpolação com funções de base radial, como: múltiquadrada, múltiquadrada inversa, cônica e *thin plate splines*, para aproximar a resposta do modelo físico. Podem-se encontrar melhores resultados, variando o parâmetro de forma que

algumas dessas funções levam. Para a construção das superfícies de respostas utilizando funções de base radial, a escolha das variáveis do problema e suas interações, para construção da matriz de experiências é feita também através do PFC. Este tipo de metodologia tem como base aplicações nos domínios da química orgânica e farmacêutica e suas aplicações atualmente são interdisciplinares. Para análise da eficiência e robustez das metodologias de construção de metamodelos alguns estudos de caso são apresentados. Estes casos incluem funções propostas por Dixon-Szegö (1978).

No Capítulo 5 é apresentada uma estratégia de otimização global com base na construção de metamodelos em conjunto com um algoritmo de busca aleatória controlada (CRSA). Esta técnica está baseada na construção iterativa de metamodelos com funções de base radial e a aplicação de critérios heurísticos por atualizar o banco de dados durante o processo de otimização. Padrões de busca cíclicos para otimização dos metamodelos construídos iterativamente são usados para determinar os pontos candidatos que preencherão o banco de dados. No processo de iteração são inseridas algumas restrições no espaço de busca do projeto, bem como restrições adicionais relacionadas à distância entre pontos já avaliados como os que ainda vão ser avaliados. Ainda neste capítulo é descrita a técnica *leave-one-out cross validation* (LOOCV) de automatização do parâmetro de forma c proposto por Rippa (1999). A técnica é inserida na metodologia de otimização global de forma a permitir a automatização do c . Porém o melhor c é encontrado usando uma otimização simples implementada em conjunto com a técnica LOOCV. Para análise da eficiência da metodologia proposta as funções de Dixon-Szegö (1978) são avaliadas.

No Capítulo 6 são apresentadas as aplicações em sistemas complexos de engenharia, em especial a área de turbomáquinas. Para melhor entendimento dos resultados, são descritos o cálculo do escoamento em grades lineares, que tem como base o método dos painéis de Hess & Smith (1967), com modificações que introduzem os efeitos viscosos através da interação com a camada limite; um resumo do problema inverso em grades de turbomáquinas e uma breve discussão sobre dinâmica dos fluidos computacional. Para cada um destes assuntos, são mostrados os resultados e análises das aplicações.

Um dos resultados é obtido por meio do emprego de metamodelos apenas, com o objetivo de comparar a metodologia clássica e a metodologia com base em funções de base radial, de forma a analisar a viabilidade de uso da técnica que apresentou melhor desempenho. Os resultados foram obtidos, construindo metamodelos de códigos computacionais como

HessTurbo (Ramirez, 2003). Para o problema de projeto inverso de grade foi empregada técnica de otimização global com base em metamodelagem já acoplada com algoritmos estocásticos, para cálculo da distribuição de pressão, com objetivo de avaliar o desempenho da metodologia proposta. É também feita uma aplicação em grades lineares, com o objetivo de maximizar a relação sustentação/arrasto. E ainda outra aplicação da metodologia é estendida para um rotor hidráulico, a fim de obter a maximização da eficiência. A contribuição mais relevante do trabalho é a aplicação da metodologia de otimização global com base na construção de metamodelos com automatização do parâmetro de forma c .

No capítulo 7 são apresentadas as conclusões gerais, e como o presente trabalho pode contribuir para a pesquisa científica. Espera-se que a presente metodologia tenha alcançado seu objetivo e que os códigos computacionais implementados auxiliem no processo de otimização. Os estudos em otimização poderão ser enriquecidos com a continuidade desta pesquisa que tem por base o emprego de metamodelos, ainda mais se as pesquisas compreenderem o campo da otimização multiobjetivo robusta. As perspectivas de aproveitamento da presente proposta são bastante promissoras, no sentido de que as aplicações de metamodelos no campo da engenharia estão sendo cada vez mais requisitados, por ser menos custosos computacionalmente, contrariamente ao cálculo extenso quando se faz uso de modelos complexos para a determinação do campo de escoamento nas turbomáquinas, através do uso da Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC).

Capítulo 2

ESTADO DA ARTE

Neste capítulo será apresentada uma revisão bibliográfica que reúne os principais assuntos que compõem a otimização, a construção de metamodelos e uso de funções de base radial. Embora cada conteúdo por si só representa um volume muito grande de informações, procurou-se apresentar os trabalhos e informações mais relevantes à pesquisa.

2.1 PESQUISA BIBLIOGRÁFICA

2.1.1 Estudos Sobre Metamodelagem Como Ferramenta de Apoio à Otimização.

Atualmente, muitas pesquisas que se referem aos métodos e técnicas de construção de superfícies de resposta ou metamodelos têm sido relatadas sob vários aspectos e em diferentes áreas do conhecimento. Diversos autores demonstraram a efetividade das aplicações quando aplicadas em projetos ótimos em engenharia. Neste sentido, o trabalho de Barton (1998) contribui com a descrição de forma avançada dos vários tipos de metamodelos e projetos experimentais, os quais vêm sendo estudados há cerca de 25 anos. A técnica mais popular tem sido baseada em superfícies de resposta polinomiais paramétricas incluindo tipos de metamodelos alternativos, como *splines*, funções de base radial, redes neurais, e modelos de

correlação. Os modelos que envolvem regressão polinomial são desenvolvidos para explorar metamodelos que auxiliam o processo de otimização. Este tipo de aproximação faz uso de modelos polinomiais de primeira e segunda ordem. Metamodelos do tipo *spline* são construídos a partir de combinações lineares de funções. Foram amplamente usados para aproximação de respostas de modelos determinísticos. Funções de base radial (FBR) (*thin plate splines, cubic splines*) provêm uma aproximação alternativa para metamodelagem onde possui a característica de reconstruir funções com muitas variáveis. As redes neurais usadas para aproximação de funções são as do tipo multicamadas. Metamodelos do tipo correlação espacial possuem características semelhantes às da *spline* suave. Modelos de correlação espacial também conhecidos como modelos *kriging* ficaram popularmente conhecidos como metamodelos para simulação determinística.

Trabalhos como os de Jin et al., (2001) e de Simpson et al., (2001) também fazem um estudo bastante rico de metamodelagem. As técnicas mais consideradas são: técnicas de regressão polinomial, regressão de *splines* adaptativas multivariadas, função de base radial, e *kriging* com base em critérios de desempenhos múltiplos, método de Taguchi, redes neurais, e outros. A pesquisa de Simpson et al., (2001) considera a aplicação em projetos de engenharia, e também apresenta os riscos ao fazer uso da aplicação de técnicas estatísticas tradicionais para aproximar modelos determinísticos, incluindo recomendações para o uso apropriado de tais técnicas.

O trabalho de Jones (2001a) traz uma revisão dos métodos de otimização globais com base em superfícies de resposta. Estes métodos são ilustrados com exemplos numéricos simples mostrando suas vantagens e desvantagens. O trabalho revela que são bastante razoáveis, e aspectos referentes a insucessos não são tão óbvios, porém, entendê-los ajuda o desenvolvimento de melhores algoritmos para aproximação de superfície. Uma indicação de grande interesse no uso de aproximações de superfície ficou evidenciada através do *Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization* (2000), em que no mínimo treze trabalhos envolveram modelos substitutos. Como resultado dessa pesquisa tem-se que, além da redução do esforço computacional, a aproximação inicia com um projeto experimental, estatístico, que contribui para identificar variáveis que maior influência tem nos resultados; o efeito principal pode ser visualizado através das relações de entrada - saída (Jones et al., 1998). Torna-se possível visualizar a curva de relação do compromisso entre as funções-objetivo. Em situações em que um modelo computacional (código-fonte) não se encontra disponível, superfícies de resposta provêm uma forma para reconstruir funções que

relacionam entrada e saída, para então serem embutidas em grandes simulações computacionais ou usar diretamente em projeto robusto de otimização.

O trabalho de Gutmann (2001) introduz um método que visa encontrar o mínimo global de uma função contínua não convexa em um subconjunto compacto de \mathbb{R}^d . Supõe-se que as avaliações das funções são caras e que nenhuma informação adicional está disponível. Interpolação por função de base radial é usada para definir uma função utilitária. Além disso, verifica-se que o método está intimamente relacionado com um método estatístico de otimização global (P-algoritmo). Um quadro geral de ambos os métodos é apresentado. Finalmente, alguns exemplos numéricos mostram que, em conjunto com as funções de teste Dixon-Szegö (1978) o método produz resultados favoráveis em comparação com outras iniciativas globais de métodos de otimização.

Metamodelagem como superfícies de resposta clássica (SRC) têm sido empregada na modelagem e otimização de estruturas mecânicas. Os procedimentos frequentemente usados em otimização requerem muitas análises que são indispensáveis para prever o comportamento dinâmico destas estruturas, porém, a complexidade dos modelos, tais como, elementos finitos, modelos com comportamento não linear, conduzem a um longo tempo de análise e é algumas vezes impossível devido ao custo de cálculo computacional. Para resolver esta dificuldade, Ghanmi et al., (2005), desenvolveram uma estratégia baseada na metodologia baseada em superfície de resposta clássica (RSM - *Response Surface Methodology*). Esta estratégia consiste em substituir a resposta complexa de estruturas por um polinômio de grau geralmente menor que três, mais simples para usar. Esta escolha permite a minimização do custo de cálculo durante a otimização.

Os Metamodelos baseados em função de base radial são de fácil construção e têm a habilidade de capturar o mínimo da função. No trabalho proposto por Hussain et al., (2002) é feita uma comparação deste metamodelo com outro que usa superfície de resposta baseada em função polinomial. Para ajustar o modelo, foram usados planos fatoriais completos e hipercubo latino e métodos gráficos e estatísticos para fazer análise dos resultados do teste. Os metamodelos foram testados em sete diferentes conjuntos de dados obtidos do relacionamento entrada e saída, conhecida como funções teste de Dixon-Szegö (1978), para determinar a efetividade dos metamodelos em situações em que os relacionamentos entrada e saída não são conhecidos. A comparação foi realizada pelo uso de diferentes medidas de desempenho e por comparação visual entre metamodelo e função teste.

Aproximação baseada em superfícies de resposta adaptativas tem sido empregada em otimização multiobjetivo em estruturas mecânicas, proposta por Ghanmi et al., (2005), consiste em uma técnica de superfícies de resposta baseada em polinômios adaptativos (*Meshless Methods*), que consiste na aproximação da resposta real do domínio de estudo, exige uma discretização fina. Neste estudo, foi demonstrado que essa técnica fornece soluções para as dificuldades colocadas pelos problemas de otimização multiobjetivo, no que diz respeito ao custo. Foram demonstrados os benefícios do método de superfície de respostas adaptativas em comparação com o RSM, utilizando algoritmos genéticos e foram calculadas e geram as soluções ótimas por Pareto.

O trabalho de Wang (2006) é um estado da arte das técnicas de modelagem para otimização de projeto, formulação do problema, projeto de exploração do espaço, aproximação de modelos físicos, e solução para vários tipos de problemas de otimização. Wang enfatiza que os problemas de projeto que demandam alto poder computacional são muito comuns nas indústrias. O esforço computacional é causado frequentemente pelas caras análises dos processos de simulação para alcançar um nível de precisão comparável com dados físicos. Para enfrentar tal desafio, o uso de técnicas de modelagem estão sendo frequentemente usadas e aplicadas em diversas áreas tais como, matemática, informática, e engenharia. Metamodelos são desenvolvidos como substitutos dos caros processos de simulação a fim de melhorar a eficiência global em computação. É uma valiosa ferramenta de apoio para as mais variadas atividades em projetos modernos de engenharia. Este trabalho é um estado da arte das técnicas de modelagem sob a perspectiva de um praticante que apoie o uso de modelagem.

2.1.2 Estudos Sobre Otimização com Base na Construção de Metamodelos Aplicados à Engenharia

A melhor forma para estudar otimização é analisar um problema típico de engenharia. Portanto, o processo de otimização consiste na escolha de um método ou ferramenta computacional para realizar análises diferenciadas que permitem a obtenção de conjuntos de parâmetros variáveis modificados que apresentam a melhor solução.

Atualmente a área de engenharia tem sido enriquecida com os avanços na pesquisa em otimização e com os recursos computacionais avançados. Muitos projetos otimizados são

concebidos com maior facilidade e uma gama de técnicas diferenciadas tem sido utilizadas permitindo uma análise da efetividade das mesmas. Alguns dos trabalhos apresentados fazem uso de técnicas de otimização, que consideram o uso de metamodelos para auxiliar o processo de otimização, devido ao alto custo computacional requerido.

Um projeto ótimo para formas aerodinâmicas conseguidas por meio de métodos de otimização estocásticos e inteligência computacional pode ser visto em Giannakoglou (2002). Apesar de conseguir resultados vantajosos, todos os algoritmos de busca requerem tempo de processamento excessivo, isso devido ao grande número de pontos candidatos que precisam ser avaliados por *solvers* computacionais caros. O objetivo foi reduzir o tempo computacional para otimizar de forma eficiente e efetiva. Muita ênfase foi dada nas técnicas de construção e no uso de modelos substitutos para avaliar o *solver* caro. Encontra-se também uma pesquisa da literatura de vários métodos pertinentes, seguida por numerosos exemplos que demonstram o benefício desses métodos.

Já o trabalho de Giotis et al., (2002) apresenta uma técnica de otimização estocástica de baixo custo para aplicações em engenharia. Em seus estudos, algoritmos evolutivos (algoritmos genéticos, estratégias evolutivas) combinados com modelos substitutos baseados em funções de base radial treinadas durante a evolução, reduzem notoriamente o número de avaliações computacionais válidas, exigidas para alcançar uma solução ótima. Seus estudos são aplicados em problemas de engenharia como, por exemplo, em projeto inverso de aerofólios, demonstrando o ganho em termos de custos computacionais. Para o projeto inverso de aerofólios, o principal objetivo é encontrar um perfil de aerofólio que produz uma determinada distribuição de distribuições ao longo de seu contorno com determinadas condições de escoamento. A distribuição foi calculada previamente pelo mesmo código computacional usado para fazer avaliações da função-objetivo. Assim, o objetivo foi reconstruir o perfil conhecido. A parametrização do aerofólio é feita utilizando curvas de *Bezier*, para os lados de sucção e de pressão, com sete pontos de controle cada, contendo um total de catorze variáveis de projeto. As boas razões para a escolha de redes neurais de função de base radiais (RBFNs) como modelos substitutos são os ótimos desempenhos que os conjuntos de valores paramétricos conseguem em relação às funções de custo, obtidas por meio do código computacional de avaliação das funções-objetivo. Este é usado para o treinamento da RBFN e um banco de dados é dinamicamente atualizado durante a evolução. O treinamento e uso de RBFN tem custo computacional baixíssimo, pois requer apenas a

inversão de uma pequena matriz simétrica para cada novo ponto em otimização multiobjetivo. O algoritmo inicia com uma população fortuitamente gerada que continua evoluindo para gerações que usam avaliações exatas da função-objetivo com pontos sistematicamente escolhidos (pela técnica conhecida como “plano de experiências”) para serem incluídos no banco de dados.

Um desafio principal para o desenvolvimento completo e eficiente de sistemas aeroespaciais modernos é alcançar objetivos como desempenho melhorado, custos reduzidos, e aumento da segurança. Modelos precisos, de alta fidelidade, são tipicamente caros, consomem muito tempo computacional. Além disso, decisões deveriam ser tomadas com conhecimento da influência das variáveis (sensibilidade global) de projeto nas diferentes funções-objetivo. Neste contexto, Queipo et al., (2005) apresentam a aproximação baseada em modelos substitutos para análise e otimização e considera que a mesma pode tornar-se uma ferramenta muito valiosa. Os modelos substitutos são construídos usando dados extraídos de modelos de alta fidelidade, e provêm aproximações rápidas das funções-objetivo e restrições, a ponto de se obterem novos projetos, analisando a sensibilidade e estudando a possibilidade de otimização. Discutem-se então os aspectos fundamentais que surgem da análise com base em otimização por modelos substitutos, realçando conceitos, métodos, técnicas, como também implicações práticas. Dentre os assuntos estudados, eles incluem a seleção da função de perda e critérios de regularização por construir modelos substitutos, plano de experiências, análise de sensibilidade, convergência, e otimização. O projeto ótimo multiobjetivo de um injetor de foguete líquido é apresentado para realçar o estado da arte e conduzir os esforços futuros.

Giannakoglou et al., (2006) faz uso das ferramentas de avaliação por modelos substitutos e algoritmos evolucionários em problemas de otimização e projeto de formas aerodinâmicas. O uso de metamodelos ou o treinamento separado ou durante o processo, alcança uma redução considerável do custo de computação global. Propõe apoiar algoritmos evolutivos com base em metamodelos, que utiliza respostas conhecidas e gradientes de resposta para os treinamentos. Propuzeram demonstrar as capacidades de predição dos modelos substitutos e investigar diferentes modos de implementação com algoritmos de busca junto com um custo de CPU relevante. O número de formas aerodinâmicas 2D e 3D (isto é, aerofólio e pás de turbomáquinas) são analisados como problemas de projeto. São considerados problemas com um único objetivo ou com dois objetivos. Tais problemas

apontam formas de projeto que reproduzem as distribuições de pressão conhecidas em um ponto de operação específico. A ferramenta de avaliação exata é um *solver* numérico da equação de escoamento de fluido compressível. O gradiente necessário da função-objetivo é obtido pela formulação e resolução numérica integrando essas equações.

2.1.3 Estudos Sobre Otimização Global com Base na Construção de Metamodelos.

Regis e Shoemaker (2005) apresentam uma nova estratégia para otimização global com restrições de funções computacionalmente caras utilizando modelos de superfície de resposta. Os métodos globais de otimização que utilizavam modelos de superfícies de resposta eram limitados a problemas com restrição, mas este novo método pode facilmente incorporar restrições gerais não lineares, que foi chamado de método de otimização com restrições usando superfícies de resposta (CORS – *Constrained Optimization Response Surface*), em que o próximo ponto de avaliação da função computacionalmente cara é escolhido para ser o que minimiza o atual modelo de superfícies de resposta sujeita as restrições laterais e a outras restrições adicionais em que o ponto está a alguma distância dos pontos previamente avaliados. A distância requerida funciona em ciclo, a partir de uma busca global, e termina com uma busca local. O objetivo da restrição é conduzir o método para explorar regiões de domínio e para evitar a convergência prematura para algum ponto que pode não ser um local do mínimo da função desconhecida (*Black Box*). O novo método converge para o mínimo global de qualquer função contínua sobre um conjunto compacto, independentemente do modelo de superfície de resposta que é utilizado e faz uso de um tipo de função de base radial (CORS-RBF) acoplado a algoritmos de otimização determinísticos. Os resultados indicam que os algoritmos CORS-RBF são competitivos com os algoritmos de otimização global existentes para avaliações de funções computacionalmente caras nos problemas com restrições. Além disso, mostraram que são eficientes para otimização global com restrições não lineares.

2.1.4 Estudos Sobre o Parâmetro de Forma, c , Usado na Multiquádrica e Multiquádrica Inversa.

Pode-se notar pela revisão bibliográfica até agora vista que as funções de base radial se tornaram ferramenta importante quando se trata de aproximação de funções, ou seja, construção de metamodelos. Não são poucos os trabalhos que consideram este fato. Atenção especial vem ganhando as funções multiquádrica e multiquádrica inversa pelos bons resultados que apresentaram, como observado por vários autores (Franke, 1982). Outra questão que tem sido levantada é o parâmetro de forma c de que elas necessitam, sendo este escolhido pelo usuário arbitrariamente. Alguns trabalhos trazem conteúdo que mostram a importância do c nas multiquádras, e estudo para melhorar e encontrar o melhor c pode ser visto no trabalho de Fornberg (2003) estudou a estabilidade computacional usando diferentes parâmetros de forma em interpolação com funções de base radial multiquádras. Vários tipos de RBFs possuem um parâmetro livre, mas não têm recebido muita atenção porque conduz a um problema crítico de mal-condicionamento. O autor apresentou um algoritmo que evita tal problema, e que permite cálculos numericamente estáveis de multiquádrica interpolante de RBF para todos os valores do parâmetro. Conclui-se que a precisão das aproximações resultantes, em alguns casos, torna-se de ordem de magnitude muito alto como é o caso de um conjunto de parâmetros disponíveis previamente avaliados. Este novo método provê uma primeira ferramenta para a exploração numérica de multiquádrica interpolante de RBF dentro do limite de c tendendo ao infinito. O método demonstrou sucesso e pode sem qualquer mudança ser aplicado em muitos outros casos.

Rippa (1999) propôs um algoritmo para selecionar um valor adequado para o parâmetro de forma c em interpolação de função de base radial. A precisão na interpolação dos dados com funções de base radial depende de tal parâmetro e para isso um estudo foi feito acerca do efeito do parâmetro de ajuste nas funções multiquádrica, multiquádrica inversa e Gaussiana para medir a qualidade da representação que a mudança nos valores de c pode oferecer. Foi mostrado numericamente que o valor do c ótimo depende do número e da distribuição de pontos de dados, no conjunto de dados, e na precisão computacional. Um algoritmo foi apresentado para selecionar um bom valor para c que implicitamente leva em conta todas as considerações anteriores. O algoritmo seleciona um c que minimiza uma

função, chamada de função custo, que imita o erro entre a interpolante radial e o conjunto de dados treinados que gera a função desconhecida.

O parâmetro de forma desempenha um papel muito importante para a precisão da função de base radial. Muitos autores escolhem esse parâmetro por tentativa e erro, Fasshauer e Zhang, (2007) propuseram, também, uma extensão do método de *cross validation* (caso especial - *leave-one-out*), para a escolha de um ótimo parâmetro de forma proposto anteriormente por Rippa.

2.1.5 Estudos Sobre Otimização com Base na Construção de Metamodelos Usando CFD.

Fluidos e suas propriedades vêm sendo pesquisados desde a antiguidade. Esses estudos eram eminentemente experimentais, pois não havia ainda uma teoria física que explicasse o movimento e as propriedades dos fluidos.

As equações de Navier-Stokes foram obtidas no início do século XIX. Apesar de todos os progressos da matemática desde então, ainda não é possível resolver analiticamente as equações de Navier-Stokes para problemas reais de engenharia, os quais possuem domínios e condições de contorno complexas. Dependendo do tipo de problema a ser analisado, mesmo métodos experimentais podem ser inviáveis ou apresentar um custo elevado. Dessa forma, recorre-se a técnicas computacionais para o estudo do escoamento. A técnica que é considerada a alternativa para as análises do campo de escoamento com base em técnicas numéricas de solução de equações diferenciais e que complementa as áreas puramente teóricas e experimentais da mecânica dos fluidos, recebeu o nome de dinâmica de fluidos computacional (DFC) ou em língua inglesa como é mais conhecida: *Computational Fluid Dynamics* (CFD). Antes utilizada apenas por pesquisadores, hoje é estudada por profissionais das mais diversas áreas: meteorologia, engenharias mecânica, civil, aeronáutica, até engenharias eletrônica, química, medicina, entre outras. CFD complementa estudos em que análises teóricas ou experimentais não são suficientes, por razões de complexidade, custo e tempo, para possibilitar o entendimento dos fenômenos físicos envolvidos. A simulação numérica auxiliada pelos modernos computadores, pode acelerar o desenvolvimento de um

projeto, por meio da redução do tempo gasto em ensaios experimentais com os diferentes parâmetros do problema a serem estudados.

A solução simulada ou modelada de certo problema de engenharia pode ser integrada com programas de otimização de forma a realizar modificações nos protótipos virtuais até que seja alcançada uma função-objetivo.

Levando em consideração a complexidade da geometria, os fenômenos envolvidos no problema, o grau de refinamento da malha computacional e o modelo computacional adotado pode-se chegar a um valor calculado muito próximo do real.

Dentro das áreas de engenharia o uso de CFD se tornou rotina constante e então integrar os complexos e caros modelos com algoritmos de otimização vem sendo temas de pesquisas no universo científico. Vale então destacar alguns trabalhos que se encaixam neste contexto.

Martinelli et al., (2004) apresentaram diferentes métodos práticos para calcular a incerteza do coeficiente de arrasto em dinâmica dos fluidos computacional (CFD), levando em conta a variabilidade das condições operacionais, como o número de *Mach* ou o ângulo de ataque, para substituir o cálculo clássico do arrasto, por estimação estatística, como média e variância. Dois métodos foram comparados: uso de *software* de diferenciação automática para calcular as derivadas com respeito a parâmetros incertos e o uso de técnicas de metamodelagem para representar a variabilidade do arrasto em um banco de dados. Foi medida a precisão e a eficiência computacional dos métodos propostos. Foi considerado no contexto o escoamento euleriano subsônico ao redor da asa de uma aeronave empresarial (aerofólio NACA 0012) sujeita a operar em condições de incertezas em termos do número de *Mach* e incidência. Foi considerado como coeficientes aerodinâmicos para o cálculo das derivadas de 1ª e 2ª ordem, com respeito às variáveis de incertezas, o coeficiente de arrasto e de sustentação. Então, foi usado um *software* de diferenciação automática. Este *software* possui um código fonte que calcula automaticamente as derivadas de um código FORTRAN® original. Para o segundo caso, foi feita à estimacão da incerteza usando metamodelos, cujas avaliações são menos caras que o modelo original, e podem ser usados com a finalidade de substituir algumas avaliações do modelo original ou prover informação adicional. Os metamodelos construídos de acordo com dados disponíveis são armazenados em um banco de dados e o cálculo do arrasto é feito usando algum conjunto de parâmetros. Este banco de dados pode ser gerado separadamente ou durante um processo de otimização. Foram

utilizados metamodelos como: 1- polinomial (aproximação por mínimos quadrados), 2- redes neurais artificiais, 3- funções de base radial, 4- métodos de *kriging* (processo gaussiano). Eles demonstraram que as últimas 3 opções são boas para representar comportamentos não lineares comumente encontrados em aerodinâmica. Os metamodelos podem ser empregados para calcular as modificações do arrasto devido às flutuações do parâmetro incerto, simulação de monte carlo ou integração numérica podem ser usadas para estimar o cálculo da estatística do arrasto. A escolha dos pontos para o banco de dados é crítico e dentre os métodos existentes na literatura, foi usado neste trabalho o hipercubo latino. Este estudo restringiu ao escoamento compressível não viscoso tridimensional governado pela equação de Euler. A malha tetraédrica simétrica da asa no avião empregou 31124 nós. Os resultados obtidos pela construção dos metamodelos RBF e *kriging* para banco de dados gerados por hipercubo latino alcançaram um erro no arrasto de menos de 0,5 %. Para a diferenciação automática o resultado foi similar com projeto de oito e nove pontos. Em termos computacionais, tempo de CPU e exigências de memória, a computação da solução do escoamento com 1ª e 2ª derivada requer aproximadamente dez vezes mais memória que a solução apenas do escoamento. Porém, este resultado pode ser melhorado usando alocação de memória dinâmica ou programação avançada. Para o tempo computacional, a aproximação com base em automação diferenciada é particularmente eficiente neste caso, desde que o tempo de CPU só aumenta duas vezes aproximadamente para obter o gradiente. Com relação aos metamodelos, os custos são relacionados principalmente à construção do banco de dados. Se for construído consecutivamente, a memória requerida é igual ao usado pelo *solver* do escoamento somente, considerando que o tempo de CPU aumenta linearmente. Se for construído com computação paralela, com vários processadores, então torna-se igual ao tamanho do banco de dados. Conclui-se que o método baseado em metamodelos é mais caro em termos de tempo de CPU, se não for construído fazendo uso da computação paralela. Os resultados são promissores, mas o problema considerado é simples, apenas dois parâmetros incertos são considerados. Se o número de parâmetros aumentarem, o tempo de CPU e exigências de memória também aumentará, tornando um desafio administrar um grande número de parâmetros incertos, além de outras questões que devem ser levadas em consideração como os ruídos numéricos. Foram obtidos resultados satisfatórios em termos de precisão para um caso de teste bastante simples. Porém, estas metodologias ainda precisam amadurecer para um aumento do número de parâmetros incertos.

Outros estudos realizados utilizando CFD foram feitos para uma turbina hidráulica de reação. A eficiência dessa turbina é significativamente afetada pelo desempenho do tubo de sucção. A forma e a distribuição da velocidade na entrada, ângulo de incidência, são os dois principais fatores que afetam o desempenho do tubo de sucção. Tradicionalmente, o projeto deste componente tem sido baseado em métodos analíticos simplificados, regras experimentais e modelos de testes. Nas últimas décadas, o uso de CFD, tem dramaticamente crescido no processo do projeto e continuará devido à flexibilidade e efetividade de custo. Predições numéricas do escoamento no tubo de sucção consomem muito tempo, causado pelas características de escoamento instável, turbulento, separável, com linhas de corrente nas curvaturas, escoamento secundário, redemoinhos e vórtices. Conseqüentemente, isto mostra uma grande necessidade de desenvolver modelos CFD precisos e confiáveis, com uma estrutura de otimização eficiente. Neste sentido, Marjavaara (2006) emprega uma estrutura de otimização com base em modelos substitutos, para desenvolver e implementar uma aproximação computacional tratável a fim de otimizar a forma do tubo de sucção de uma turbina hidráulica. Com esta metodologia é possível substituir o caro modelo CFD com um modelo substituto na fase de otimização, para prover uma exploração rápida e mais efetiva do espaço de solução do projeto. Em complemento, obtém-se uma idéia entre a verdadeira relação das variáveis de projeto e as funções-objetivo. Além disso, este estudo tem dado subsídio para aumentar a qualidade e confiança do projeto do tubo em simulações de escoamento não triviais. O trabalho de Marjavaara foi dividido em duas partes principais: a primeira é relativa à análise da otimização baseada em modelos substitutos - SBO, e a segunda relativa à validade dos cálculos de CFD obtidos. Como resultado, nota-se o potencial e os benefícios de modelos substitutos quando usados na fase de projeto de tubos de sucção para turbinas hidráulicas. Um exemplo é o esforço computacional que se exige, usar uma estrutura de SBO reduz tal esforço se comparado com uma estrutura de otimização somente. Também é preferível testar múltiplos modelos substitutos, desde que a capacidade de predição seja um problema dependente altamente do tempo de custo e se isto for relativamente baixo. A otimização resultante mostra tendências semelhantes aos testes de modelo, ilustrando a confiança da aproximação. Algumas discrepâncias são encontradas e é recomendado aumentar as simulações de CFD, por exemplo, incluir a geometria do rotor ou usar modelos de turbulência mais avançados nos cálculos.

2.2 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Pode-se notar que a maioria dos trabalhos aqui pesquisados considera o uso de metamodelos como uma técnica muito eficiente para redução do esforço computacional no processo de otimização de problemas complexos em engenharia. Todavia, a maioria delas trata a técnica de metamodelagem de forma separada, procuram melhorar bem o processo de construção dos metamodelos de forma a obtê-los cada vez mais eficientes e utilizá-los. Mas a combinação de tais técnicas com o modelo original e o processo de otimização é uma importante descoberta no campo da pesquisa de otimização global. O trabalho de Régis e Shoemaker (2005) contribui significativamente para a otimização global, porém seus experimentos não foram ainda aplicados aos complexos problemas de engenharia. Com base nesta pesquisa, a presente proposta de trabalho visa a partir da abordagem por eles proposta e a trabalhar com as funções de base radial que merecem destaque devido aos bons resultados que apresentam para a pesquisa. Por exemplo: a multiquádrica e a multiquádrica inversa. Porém, tais funções de base radial necessitam de um parâmetro de forma c que é escolhido arbitrariamente, assim, a proposta visa também a automatizar a escolha desse parâmetro de forma, trabalhando a técnica proposta por Rippa (1999). O melhor parâmetro de forma c pode ser encontrado construindo uma função que aproxima o erro relativo do modelo caro. Neste sentido, o presente trabalho compreende a implementação de uma estratégia de otimização global com restrições nos moldes daquela proposta por Régis e Shoemaker (2005), combinadas com uma técnica de automatização do c , utilizando algoritmos de otimização estocásticos que são então aplicados a problemas da área de turbomáquinas.

Capítulo 3

OTIMIZAÇÃO

Neste capítulo descrevem-se os conceitos fundamentais sobre otimização, bem como a formulação de um problema de otimização e os principais métodos são classificados. Breve considerações sobre otimização multiobjetivo e multidisciplinar são também feitas.

3.1 DEFINIÇÃO DE OTIMIZAÇÃO

Em qualquer sistema de engenharia, como projetos, construção e manutenção, muitas decisões gerenciais e tecnológicas precisam ser tomadas, visando a minimizar o esforço requerido, como tempo e custo, a maximizar os benefícios desejados, como qualidade do produto ou lucro, ou ainda a melhorar o desempenho ou repotenciar turbomáquinas. Tais problemas conflitantes encontrados, sendo em engenharia ou em qualquer outra área, constituem um vasto campo de trabalho para aplicar técnicas que melhoram projetos já existentes ou que permitem a proposição de novos projetos, mais eficientes e com menores custos.

Pode-se definir otimização como o processo de obtenção do valor máximo ou mínimo de uma função através da escolha sistemática dos valores das variáveis dentro de um espaço de busca viável. No entanto, o aumento do tempo computacional requerido, advindo do aumento do número de variáveis de projeto, tem sido um fator de limitação, ocasionando

convergência demorada, surgimento de funções com presença de muitos mínimos locais e dificultando a obtenção do mínimo global.

Resumido, a otimização consiste de busca automática, sistemática e dirigida para determinar melhores soluções de projeto dentro de um conjunto de soluções existentes.

A otimização pode ser aplicada para resolver qualquer problema, como: projetos de estruturas aeroespaciais para minimizar o peso, encontrar ótimas trajetórias para veículos espaciais, projetos de estruturas em engenharia civil, como, armações, fundações, pontes, torres e represas visando minimizar custo, análises de dados estatísticos e construção de modelos empíricos dos resultados experimentais para obter maior precisão da representação dos fenômenos físicos e aplicações típicas de diferentes áreas da engenharia.

Conseqüentemente, um grande número de métodos de otimização tem sido desenvolvido para os mais diferentes tipos de problemas de otimização. A sofisticação dos recursos computacionais (aumento da capacidade de processamento), desenvolvidos nos últimos anos, tem motivado o avanço das técnicas de otimização.

3.2 BREVE DESENVOLVIMENTO HISTÓRICO

Desde 1947, quando o método simplex apresentado por Dantzig marcou a história da otimização, abriu-se um campo de pesquisa que percorre o tempo deixando a comunidade científica com maior riqueza de conhecimento, cobrindo o campo de pesquisa sobre Inteligência Artificial (IA), (1956), sobre técnicas de otimização multiobjetivo, que tornaram populares em 1961, conforme (Rao, 1996), sobre estratégias evolucionárias inspiradas na evolução biológica das espécies, inicialmente apresentadas por Rechenberg em 1965, (Rechenberg, 1973).

Desde então, os algoritmos estocásticos começaram a ficar importantes. Dez anos mais tarde, John Holland (Holland, 1975) apresentou as primeiras versões do algoritmo genético, culminando em 1980, na Programação Genética com Smith, e em 1983, no método *Simulated Annealing* proposto por S. Kirkpatrick, Gelatt e Vecchi (1983), inspirada na técnica experimental de recozimento usada por metalúrgicos, conforme Dréo et al. (2006).

Pode-se perceber que, os métodos baseados em mecanismos evolucionários não eram interessantes, devido ao custo computacional elevado. Contudo, nos últimos 20 anos, os progressos nas pesquisas se tornaram significativos devido aos avanços na computação paralela e nos avanços da tecnologia de microprocessadores. Como a evolução dos métodos de otimização mencionados convergiram para a otimização de sistemas complexos, por exemplo, simulações baseadas em CFD, originou-se uma área de estudos denominada *Multidisciplinary Design Optimization* (MDO), com o objetivo de aumentar o desempenho do sistema e reduzir o tempo de desenvolvimento, lidando com os seguintes desafios: a definição do problema de otimização; a integração das disciplinas de engenharia do sistema; a redução do tempo de otimização, diminuindo as avaliações do sistema com modelos de alta fidelidade; e, a sumarização dos compromissos entre as variáveis e os objetivos de projeto (Barbosa et al., 2009).

Após a década de 70, a formulação teórica de alguns algoritmos de otimização já desenvolvida começou a ser implementada, devido ao desenvolvimento das linguagens de programação, assim como os métodos de otimização e os algoritmos genéticos. Os primeiros *softwares* comerciais de otimização estrutural aparecem então, em 1980, e em 1990, foram desenvolvidos os *softwares* para a otimização topológica.

A última década tem se caracterizado pelo desenvolvimento de algoritmos e estratégias de otimização para problemas com múltiplos objetivos que podem ser tratados ou não, como problemas multidisciplinares. No entanto, um dos itens de estudo que contempla esta pesquisa é fazer uso dos métodos de otimização, em especial os algoritmos e as estratégias para tratar de problemas mono-objetivos que requerem muito esforço computacional.

3.3 A TERMINOLOGIA DE UM PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO

Problemas de otimização ou problema de programação matemática são problemas caracterizados pela maximização ou minimização de funções, chamadas de funções-objetivo, as quais podem possuir várias variáveis dentro de um determinado domínio, sendo que geralmente, estas variáveis podem estar sujeitas a um conjunto de restrições.

A formulação pode ser declarada como segue:

Minimizar $f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} = [x_1, x_2, x_3, \dots, x_n]^T$, $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$

sujeito às restrições:

$$g_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = 1, 2, \dots, m$$

$$l_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, P$$

$$x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

O \mathbf{x} é um vetor de dimensão n chamado de vetor de pontos do projeto. Dentro deste vetor o ponto x que apresenta o menor valor da função dentro de toda a região viável, delimitada pelas restrições, é conhecido como mínimo global. Já o ponto que apresenta um valor da mínimo entre todos os pontos situados numa sub-região definida é conhecido como mínimo local. x_i^L , x_i^U são limites inferiores e superiores respectivamente, $f(\mathbf{x})$ é a função-objetivo e $g_j(\mathbf{x})$ e $l_j(\mathbf{x})$ são conhecidas como restrições de desigualdades e igualdades, respectivamente.

3.4 CLASSIFICAÇÃO DOS MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO

Os métodos determinísticos (maioria das técnicas clássicas) conhecidos há mais de um século, são muito utilizados na solução de equações diferenciais, porém podem apresentar algumas dificuldades numéricas e problemas de robustez relacionadas com a falta de continuidade das funções a serem otimizadas ou de suas restrições, funções não convexas, multimodalidade, existência de muitos mínimos e máximos locais, dentre outros (Carpio, 2005). Tais métodos baseiam-se em teoremas que lhes garantem a convergência para uma solução ótima, que não é necessariamente a solução ótima global. A solução encontrada é extremamente dependente do ponto de partida fornecido e pode convergir para um ótimo local. Por isso, não possuem bom desempenho em otimizar funções que possuem vários ótimos locais.

Os problemas de otimização abordados pelos métodos clássicos podem ser classificados em duas classes, conforme as características da função-objetivo e das restrições:

- Programação linear, por exemplo, o método simplex;

- Programação não-linear. De acordo com Rao (1978), a programação não-linear pode ser subdividida em três classes: (i) Métodos de minimização unidimensional; (ii) Métodos para solução de problemas sem restrições; (iii) Métodos para solução de problemas com restrições; existem métodos que convertem o problema com restrição num problema sem restrição para depois resolvê-lo, como é o caso do método de penalização.

Problemas com restrições podem ser solucionados por meio da aplicação de dois tipos de métodos: Métodos diretos e indiretos. Métodos diretos verificam as restrições após seguirem o procedimento do algoritmo de otimização sem restrição. Já os métodos indiretos transformam o problema com restrição em um problema sem restrição para em seguida resolvê-lo, como por exemplo, o método indireto de penalização (Wangdahl, 1972). No método de busca com penalidades, define-se uma função auxiliar, que incorpora a função-objetivo original e as de restrições, convertendo o problema com restrições num processo de otimização sem restrições (Fletcher, 1973).

Métodos probabilísticos surgem como uma forte tendência nos últimos anos, conhecidos também como computação evolucionária (CE), destacando-se os algoritmos genéticos que são fortemente usados. A computação evolucionária juntamente com as redes neurais, parte integrante da Inteligência Artificial é baseada em mecanismos de busca, inspirada no processo de seleção natural proposto por Darwin e da genética das populações, estudado por Mendel, constituindo uma alternativa às técnicas convencionais de busca e otimização. Por não utilizar a derivada da função objetivo, ela é considerada como método de ordem zero.

Em relação aos algoritmos determinísticos, os algoritmos evolucionários são mais vantajosos no que diz respeito a:

- A função-objetivo e as restrições não precisam necessariamente ter uma representação matemática;
- Não requerem que a função-objetivo seja contínua ou diferenciável;
- Trabalham adequadamente, tanto com parâmetros contínuos quanto com discretos, ou ainda com uma combinação deles;
- Não há restrição alguma quanto o ponto de partida dentro do espaço de busca;
- Realizam buscas simultâneas no espaço de possíveis soluções através de uma população de indivíduos;

- Otimizam um grande número de variáveis, desde que a avaliação da função-objetivo não tenha um custo computacional demasiadamente alto.

Na literatura é possível encontrar exemplos bem documentados de análises e validação da eficiência dos algoritmos de otimização, conforme Chase (2008) que descreve procedimentos para a comparação de diferentes métodos de otimização. A Figura 3.1 apresenta um esquema com as diferentes técnicas de otimização (Rao, 1978).

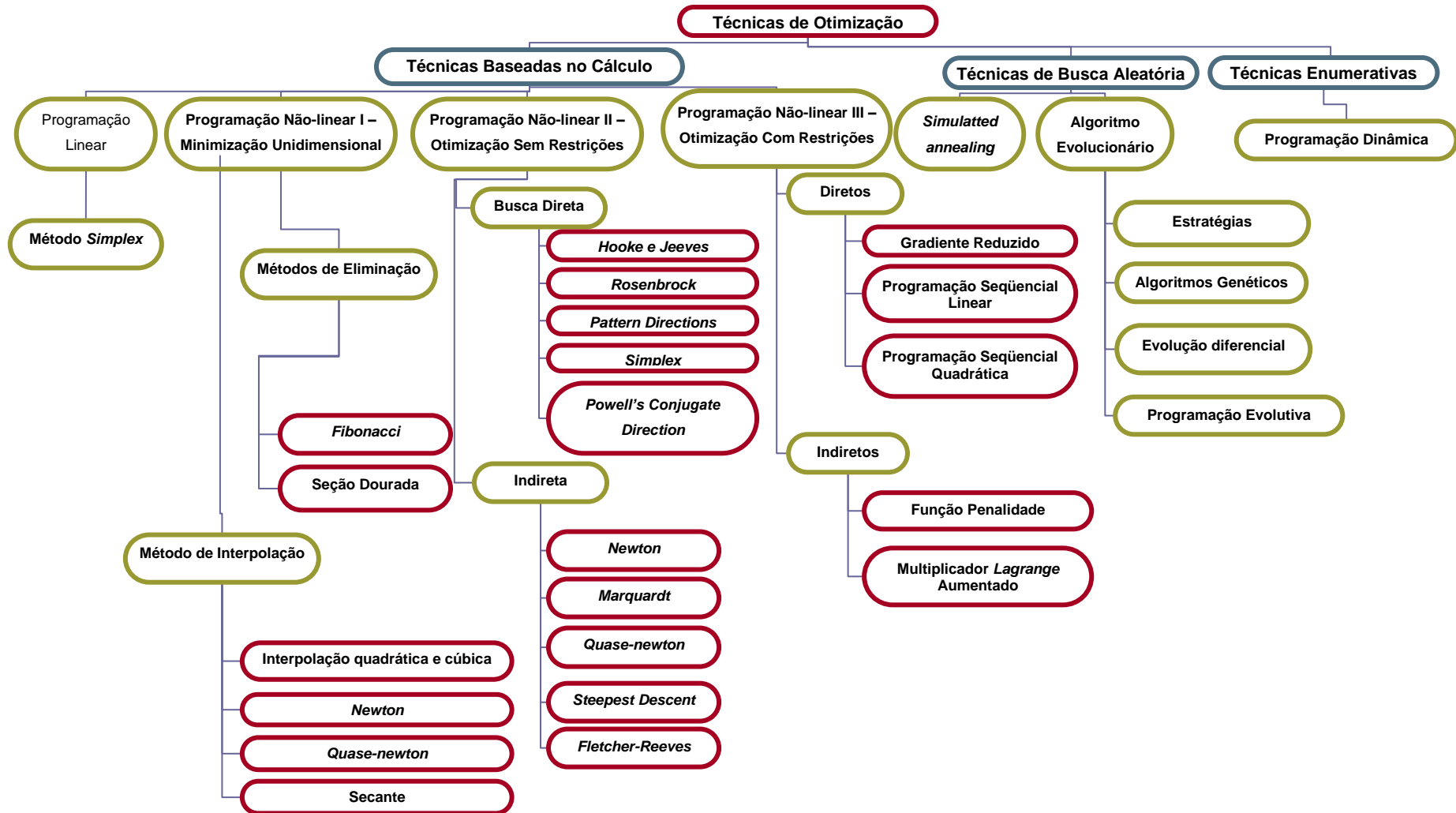


Figura 3.1 – Técnicas de otimização

A maioria dos métodos de otimização busca uma solução local. A solução global é a melhor entre todas as soluções locais, porém é difícil de identificar e localizar o ponto ótimo global, tornando-se uma área para extensa investigação científica.

3.5 PROBLEMAS COM MÚLTIPLOS OBJETIVOS

Em muitos casos uma única função-objetivo não é suficiente. A tomada de decisões depende do equilíbrio de vários critérios. Nestes casos, o processo de otimização é denominado otimização multiobjetivo, pois trabalha com mais de uma função objetivo.

Por exemplo, no contexto dos procedimentos de otimização de formatos aerodinâmicos, observa-se que os engenheiros e pesquisadores são confrontados com objetivos que são freqüentemente contraditórios, como a maximização da sustentação e minimização do momento de arfagem em asas de aeronaves, maximização do rendimento nominal e maximização da faixa operacional de turbo-compressores, etc. Para isto, tais situações são tratadas frequentemente como multiobjetivo ou multicritério (Goldberg, 1989).

Classicamente, um problema com múltiplos objetivos é definido pela seguinte expressão (Srinivas e Deb, 1993):

$$\begin{cases} \min_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_n(\mathbf{x})] \\ g_j(\mathbf{x}) \leq 0 \quad j=1, \dots, m ; \mathbf{x}_L \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_U \quad \mathbf{x} \in C \end{cases} \quad (3.1)$$

em que $n \geq 2$ é o número de funções-objetivo, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)$ é o vetor que representa as variáveis de projeto, $C \subset R^k$ representa o conjunto realizável (espaço de projeto) associado às restrições de igualdade ou desigualdade $g_j(\mathbf{x})$, e os limites explícitos; $F(\mathbf{x})$ é o vetor de funções-objetivo a serem otimizadas.

Tomar decisões implica um processo que consiste de vários fatores, cujo objetivo é encontrar a melhor solução. Em alguns casos, podem existir várias soluções boas, das quais nenhuma é absolutamente melhor que a outra. Por exemplo, isto acontece quando se quer maximizar o desempenho de uma turbina ou bomba hidráulica e minimizar a cavitação. Neste caso, há possíveis soluções de projeto ótimo, em que, algumas soluções podem apresentar maior eficiência que implica numa maior cavitação.

Existe um compromisso entre os objetivos, possibilitando verificar várias combinações de solução. Diz-se que uma solução domina outra solução se seus valores são melhores em todos os objetivos. Portanto, existe um conjunto de soluções ótimas chamadas de conjunto não dominado, que se encontram num espaço contínuo, onde se desenha uma curva. Todos os pontos contidos na curva forma a fronteira de pareto.

3.6 PROBLEMAS MULTIDISCIPLINARES

Otimização multidisciplinar, ou MDO (*multidisciplinary optimization*), consiste em realizar a integração, análise e otimização de diferentes disciplinas a fim de atender a um ou mais objetivos comuns respeitando determinadas restrições.

A estratégia de otimização multidisciplinar vem ganhando espaço entre as pesquisas, agregando múltiplos objetivos pertencentes a diferentes campos do conhecimento num mesmo projeto. Um dos primeiros trabalhos sobre o assunto pode ser encontrado em Birk e Claus (2001), em que foram agregados os objetivos hidrodinâmicos aos objetivos estruturais. Outros trabalhos, como o de Belengundu et al., (2000), mais recentemente de Peri et al., (2008), mostram aplicações bem sucedidas que incentivam o uso desta técnica em projetos de engenharia ainda que seja muito restrita à academia.

O problema de otimização multidisciplinar pode ser formulado separando o problema multiobjetivo em disciplinas acopladas. O primeiro passo é separar o vetor de variáveis ($\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$), em um vetor de variáveis comuns (a todas as disciplinas) e n_d vetores, cada um contendo as variáveis específica de cada disciplina, conforme a expressão

$$\mathbf{x} = x_c + x_I + x_{II} + x_{III} \dots x_{n_d} \quad (3.2)$$

Os vetores relativos às disciplinas devem conter também variáveis artificiais, que correspondem a parâmetros de acoplamentos oriundos de outras disciplinas. O passo seguinte é agrupar as funções-objetivo de acordo com as disciplinas a que se referem:

Disciplina I

$$\begin{aligned} \min f_{I,i}(x_c + x_1) &= \min f_{I,i}(x_{c,1}, x_{c,2} \dots x_{I,1}, x_{I,2} \dots) \\ g_{I,j}(x_c + x_1) &\leq 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

Disciplina II

$$\begin{aligned} \min f_{II,i}(x_c + x_1) &= \min f_{II,i}(x_{c,1}, x_{c,2} \dots x_{II,1}, x_{II,2} \dots) \\ g_{II,j}(x_c + x_1) &\leq 0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

Por fim, descrevem-se os acoplamentos indicando a que disciplina e função correspondem cada variável artificial introduzida:

Acoplamentos

$$A_k : x_{nd,nv} = (f_{nd,nf} \ g_{nd,ng}) \quad (3.5)$$

Pode-se observar que esta é a formulação completa de um problema multidisciplinar, incluindo variáveis comuns, acoplamentos e funções globais de restrição e objetivo. Porém alguns problemas podem apresentar apenas alguns destes elementos (Tancredi, 2008).

Mais detalhes dos algoritmos de otimização multiobjetivo e multidisciplinar são omitidos, pois fogem do escopo desta pesquisa. No entanto, pode ser encontrado na literatura um grande número de obras que tratam do assunto.

3.7 MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO APLICADOS NA PESQUISA

Muitos métodos de otimização existentes podem ser considerados para a solução de problemas de otimização, em função da sua aplicação, complexidade, precisão, considerando o tempo computacional requerido.

No campo das turbomáquinas, o uso eficiente dessas técnicas de otimização permite encontrar situações de projeto para grades mais eficientes. Por exemplo, te encontrar um melhor conjunto de parâmetros geométricos para um perfil ótimo que conduz ao máximo rendimento, através da relação sustentação/arrasto. É possível também maximizar a eficiência hidráulica de uma bomba ou turbina, maximizar a eficiência isentrópica em compressores e turbinas a gás, entre outros.

É importante destacar que a presente pesquisa não se propõe a desenvolver um novo método de otimização, ou utilizar métodos que já existem para uma análise da eficiência destes métodos aplicados ao contexto das turbomáquinas. A proposta consiste em desenvolver um ambiente que permita utilizar diferentes métodos de otimização, inseridos em uma estratégia de otimização global, de forma a encontrar a solução do problema mais rapidamente. Tal estratégia é destinada ao projeto de sistemas complexos de engenharia que normalmente apresentam problemas que requerem muito esforço computacional. No entanto, a escolha do método de otimização se concentra na aplicação de um algoritmo estocástico, mono-objetivo. Trabalhos futuros poderão envolver algoritmos multiobjetivos robustos.

Para modelar o problema em estudo, como já destacado, utilizam-se algumas técnicas heurísticas de otimização. É feita uma combinação das técnicas de construção de metamodelos com algoritmos de busca aleatória controlada, (CRSA – *Controlled Random Search Algorithm*), empregando plano de experiências que permite gerar pontos de dados uniformemente distribuídos.

O CRSA será descrito na seqüência, porém, o detalhamento das técnicas de construção de metamodelos e plano de experiências serão abordados nos capítulos seguintes. O ambiente de programação adotado é o *software* Microsoft^(R) Developer Studio Fortran, versão 6.5.

3.7.1 CRSA – Algoritmos de Busca Aleatória Controlada

Algoritmos de busca aleatória controlada são técnicas de otimização estocástica baseadas num conjunto de população capaz de encontrar os mínimos globais de funções reais contínuas eficientemente. Definido como $S = \{x \in \mathcal{R}^n : x_j^L \leq x_j \leq x_j^U, j = 1, \dots, n\}$, onde $x_j^L \leq x_j \leq x_j^U$, representa respectivamente, os limites inferiores e superiores para n coordenadas de x . O ponto x^* é um mínimo global de f se $f(x^*) \leq f(x), \forall x \in S$. Além das restrições laterais usados na definição de S , podem ser impostos outros tipos de restrições, em princípio, por meio de um esquema de penalização da função-objetivo.

Os CRSA's foram propostos como aperfeiçoamento para os métodos de busca aleatória simples, nos quais apenas o ponto com o melhor valor da função-objetivo permanece em cada iteração (Price, 1977). Como os Algoritmos Genéticos e de Evolução Diferencial, um CRSA é um algoritmo populacional que parte de um conjunto ou população inicial P de N

pontos aleatoriamente tomados em S e então executa um processo iterativo de contração dessa população em direção ao ótimo global por meios puramente heurísticos (Ali et al., 1997; Ali e Törn, 2004).

Nos CRSA's, o tamanho N da população é mantido ao longo de todo o processo de otimização. Ao contrário de outros algoritmos de otimização globais mencionados, CRSA substitui um único ponto da população (seu pior ponto, \mathbf{h}) por um ponto melhor \mathbf{l} em cada iteração (i.e., um ponto de teste \mathbf{l} de forma que $f(\mathbf{l}) < f(\mathbf{h})$). Assim sua implementação é mais direta.

O CRSA básico para minimização é descrito como segue (adaptado de Ali et al., 1997, e Ali e Törn, 2004):

1. Geração da população inicial P de N pontos aleatórios em S : $P = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$. Determinação do pior ponto, \mathbf{h} , e do melhor ponto, \mathbf{l} , isto é, pontos em P com os melhores e os piores valores da função, $f_{\mathbf{h}}$ e $f_{\mathbf{l}}$, respectivamente. Se o critério de parada sempre for satisfeito, então pare (por exemplo, pare se $f_{\mathbf{h}} - f_{\mathbf{l}} < \epsilon$, onde ϵ é uma tolerância obtida).
2. Geração dos pontos de teste \mathbf{p} para substituir o pior ponto, \mathbf{h} .
3. Se \mathbf{p} é inviável ($\mathbf{p} \notin S$), seguir para o passo 2 (ou alterar \mathbf{p} , tornando-o viável).
4. Avaliar $f_{\mathbf{p}} = f(\mathbf{p})$. Se \mathbf{p} é insatisfatório ($f_{\mathbf{p}} \geq f_{\mathbf{h}}$), seguir para o passo 2.
5. Atualizar o conjunto de pontos P substituindo o atual pior ponto pelo ponto de teste: ($P \leftarrow P \cap \{\mathbf{p}\} / \{\mathbf{h}\}$). Encontrar \mathbf{h} e $f_{\mathbf{h}}$ em novo P . Se $f_{\mathbf{p}} < f_{\mathbf{l}}$, então configurar \mathbf{p} , $f_{\mathbf{p}}$ como novo \mathbf{l} , $f_{\mathbf{l}}$.
6. Se o critério de parada for satisfeito, finalizar, senão seguir para o passo 2.

As duas principais diferenças entre os CRSA's disponíveis referem-se: (i) o modo de geração do ponto tentativa (passo 2); (ii) o acesso opcional a uma fase de busca local sempre que o melhor ponto for o mais recente na população (quando $f_{\mathbf{p}} < f_{\mathbf{l}}$ no passo 5). Deve-se notar que todas as versões assumem que $N \gg n$; como regra geral, sugere-se tipicamente $N_{\text{pop}} = 10(n + 1)$ (Albuquerque et al., 2006; Manzanares et al., 2005).

3.8 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste capítulo foram apresentados os fundamentos de otimização, como se formula um problema de otimização e a classificação dos principais métodos. Breves considerações sobre otimização multiobjetivo e multidisciplinar também foram feitas. No entanto, o assunto que merece destaque é a técnica de otimização utilizada na pesquisa – o CRSA.

O programa CRSA foi utilizado como um otimizador. Por ser um programa que envolve algoritmos estocásticos foram necessárias muitas execuções para obter uma média do número de avaliações da função-objetivo. É importante ressaltar que algoritmos estocásticos são eficientes para realizar pesquisas globais.

Capítulo 4

METODOLOGIA DE CONSTRUÇÃO DE METAMODELOS

Neste capítulo serão apresentados os conceitos fundamentais sobre representação das superfícies de resposta utilizando polinômios e redes neurais artificiais representadas por funções de base radial, incluindo uma das principais técnicas estatísticas, o plano de experiências para a construção das superfícies de resposta ou metamodelos.

4.1 PLANO DE EXPERIÊNCIAS

A qualidade e a capacidade de predição de um metamodelo podem ser fortemente dependentes da distribuição dos pontos de dados do modelo dos quais uma aproximação será construída. Experiências corretamente projetadas são, então, essenciais para uma análise de metamodelos de forma efetiva e permite adquirir uma boa avaliação do espaço de solução.

Diferentes planos de experiências foram desenvolvidos para experimentos físicos e computacionais e são aplicadas regularmente. Eles podem ser definidos como uma matriz de testes que representa todas as possíveis combinações entre os parâmetros envolvidos e seus níveis de discretização. Alguns planos de experiências mais conhecidos são: plano fatorial completo (PFC), plano fatorial fracionário e hipercubo latino dentre outros.

Para o desenvolvimento do trabalho em questão, utiliza-se o plano fatorial completo. O número de experiências alcançadas por um plano fatorial completo pode ser determinado pela seguinte expressão:

$$m = n_{niv}^k \quad (4.1)$$

Em que m é o número de experiências, k é o número de parâmetros considerados, n_{niv} é o número de níveis em que foram discretizados os parâmetros. A vantagem em utilizar PFC é a possibilidade de avaliar tanto os efeitos principais como também todas as interações, dois a dois, três a três. Porém quando for necessário um maior número de parâmetros, ou uma maior discretização dos níveis, o número de experiências cresce substancialmente.

4.2 SUPERFÍCIE DE RESPOSTAS CLÁSSICAS (SRC)

Nesta seção a formulação da SRC é apresentada resumidamente, com base nos desenvolvimentos originalmente feitos por Myers e Montgomery (2002). Considerando um fenômeno físico obtido, o qual não tem efeito de memória (as respostas obtidas dependem somente das entradas naquele instante), entradas, \mathbf{x} , e saídas, \mathbf{y} , são relacionamentos que podem matematicamente ser definido por uma função: $\mathbf{y} = f(\mathbf{x})$. Se não for possível modelar precisamente o fenômeno físico, a estratégia é usar técnicas de aproximação de funções no qual o objetivo é criar uma nova função conhecida $g(\mathbf{x})$ a partir de uma função exata $f(\mathbf{x})$, que pelo menos, representará um determinado espaço. Considerando que a função $f(\mathbf{x})$ é desconhecida a priori, o erro quadrático, $e_q = \|f(\mathbf{x}) - g(\mathbf{x})\|^2$ não pode ser calculado com precisão. O conceito principal das técnicas de aproximação é usar um conjunto de medidas $(x_k, y_k = f(x_k))$ do fenômeno físico para calcular o seguinte erro médio quadrático ε (Bataglia et al., 1992).

$$\varepsilon = \frac{1}{n_e} \sum_{k=1}^{n_e} \|y_k - g(\mathbf{p}, x_k)\|^2 \quad (4.2)$$

em que n_e é o número de experiências, e \mathbf{p} é o vetor que contém os coeficientes dos polinômios, $g(\mathbf{p}, x_k)$ a ser determinado pela aproximação.

De acordo com a Eq. (4.2), o interesse é gerar $g(\mathbf{x})$ que minimiza ε . Para isto, são requeridos dois passos: treinamento e validação. O processo de treinamento é a escolha dos dados para executar a aproximação, que deve representar as evoluções da função exata. No processo de validação, o conjunto de dados deve ser distinto dos dados de treinamento, e é usado para conferir a aproximação. Entre esses métodos de aproximação que são usados para determinar a função $g(\mathbf{x})$, podem-se usar polinômios.

Depois que a escolha do uso de polinômios é feita, o problema de aproximação se torna um problema de otimização paramétrica para determinar o vetor \mathbf{p} que contém os coeficientes dos polinômios que minimizam a função ε . Neste sentido, é possível usar a metodologia de superfícies de resposta para aproximar as soluções exatas pela relação $\hat{\mathbf{y}} = g(\mathbf{x})$.

A família de polinômios normalmente usada para gerar o metamodelo é a de primeira ordem (linear) e a de segunda ordem. Os modelos de 1ª ordem podem ser divididos em modelos sem interações, modelos que contêm todas as interações, e os que contêm só as interações de ordem 1, representadas, respectivamente, pelas seguintes expressões:

$$\hat{y} = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \alpha_3 x_3 + \varepsilon \quad (4.3a)$$

$$\hat{y} = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \alpha_3 x_3 + \alpha_{12} x_1 x_2 + \alpha_{13} x_1 x_3 + \alpha_{23} x_2 x_3 + \alpha_{123} x_1 x_2 x_3 + \varepsilon \quad (4.3b)$$

$$\hat{y} = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \alpha_3 x_3 + \alpha_{12} x_1 x_2 + \alpha_{13} x_1 x_3 + \alpha_{23} x_2 x_3 + \varepsilon \quad (4.3c)$$

Estes modelos requerem pelo menos $(k+1)$, 2^k e $(k^2 + k + 2)/2$ cálculos, para então serem completamente definidos.

Os modelos de 2ª ordem, composto pelos termos quadráticos podem ser expressos como segue:

$$\hat{y} = \alpha_0 + \sum \alpha_i x_i + \sum_{i \neq j} a_{ij} x_i x_j + \sum \alpha_{ii} x_i^2 + \dots + \varepsilon \quad (4.4)$$

Em que este modelo requer pelo menos $(k^2 + 3k + 2)/2$ cálculos para poder ser completamente definido. As equações (4.3) e (4.4) podem ser definidas como uma notação matricial da seguinte forma:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (4.5)$$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,n_c} - 1 \\ 1 & x_{2,1} & \cdots & x_{2,n_c} - 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n_e,1} & \cdots & x_{n_e,n_c} - 1 \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

em que n_c é o número de coeficientes a serem determinados; $x_{i,j}$ representa as variáveis e interações; $\boldsymbol{\alpha} \in R^{n_c}$ e $\boldsymbol{\varepsilon} \in R^{n_e}$ são vetores que contêm os coeficientes e os erros aleatórios a serem obtidos, respectivamente. $\mathbf{X} \in R^{n_e \times n_c}$ representa a matriz de experiências. Se $n_e > n_c$ e $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ é não singular, o Método dos Mínimos Quadrados (Bataglia et al., 1996) possibilita o cálculo do vetor de coeficientes $\boldsymbol{\alpha} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$. Então, a resposta assume a seguinte forma:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (4.7)$$

4.2.1 Análise de Sensibilidade

A análise de sensibilidade pode ser aplicada em problemas com um número grande de variáveis de projeto, quando se desconhece o grau de importância dessas variáveis para a solução do problema. Podem existir variáveis tais que não exercem nenhuma influência e que poderão ser retiradas do plano de experiências. Neste sentido, dependendo do número de variáveis, e se elas têm certa influência no modelo, é possível obter um metamodelo simplificado pela aplicação do método de Análise de Sensibilidade a priori que levará em conta somente os fatores influentes.

Esta metodologia tem como base analisar os valores das respostas nos pontos do espaço de projeto para medir a influência na resposta exata, ou para reduzir o número de coeficientes do polinômio de referência, e desde que seja feita antes da metamodelagem.

Conhecendo o sistema físico, esta análise pode ser feita por derivadas de 1ª ordem, caso contrário, usa-se o método de diferenças finitas.

O método que responde a este objetivo é a análise da variância (ANOVA) (Droesbeke 1997). Análises gráficas como o gráfico de probabilidade normal ou (gráfico de Daniel) e o gráfico de Pareto também podem ser usadas nesta colocação (Myers e Montgomery, 2002).

4.2.2 ANOVA (Análise de Variância).

A Análise da Variância é um método algébrico que responde ao objetivo da Análise de Sensibilidade a priori, freqüentemente usada no domínio experimental. A ideia da Anova é comparar a variação devida aos experimentos com a variação devida ao acaso ou resíduo. Ela é um método estatístico usado para fazer comparações simultâneas entre duas ou mais médias; um método estatístico que produz valores que podem ser testados para determinar se existe uma relação significativa entre as variáveis.

O objetivo é determinar se a diferença observada entre duas médias amostrais é estatisticamente diferente. Esse é outro modo de dizer que a análise de variância ajuda a descobrir um modo de avaliar numericamente o quão diferentes são as médias e quanto as observações encontram-se dispersas ao redor das respectivas médias. Enfim, mesmo que se possa concluir que as médias são diferentes, será necessário decidir se diferem o suficiente para poderem ser consideradas de importância prática. Essa diferença em termos de variabilidade pode ser conseguida por meio do cálculo do desvio-padrão.

4.3 INTERPOLAÇÃO POR FUNÇÕES DE BASE RADIAL (FBR)

Interpolações por funções de base radial (FBR) pertencem a uma classe de modelos lineares generalizados. Diferem da metodologia clássica por permitir a escolha das funções de base (Keane e Nair, 2005). Foi originalmente desenvolvida por Hardy (1971), e intensamente estudada por Powell (1992) para reconstruir uma determinada função $g(x)$ desconhecida, considerada “caixa preta” a uma função $f(x)$ a partir de dados conhecidos. Por ser uma técnica

de reconstrução de funções que possuem muitas variáveis, a função de base radial têm demonstrado serem muito úteis para solucionar os problemas advindos da computação científica das mais variadas áreas. Suas aplicações são encontradas no campo da ciência e da engenharia, provêm desempenhos excelentes para modelos determinísticos e estocásticos e são muito eficientes para tratar problemas complexos em engenharia que exigem muito esforço computacional ou que possuem grande dimensão.

No entanto, a reconstrução de funções com muitas variáveis não se limita a apenas quantidade delas, mas também a necessidade de grande poder computacional (Chen et al., 2007). O número de condição (definido como o produto da norma de uma matriz e sua inversa) de um sistema linear que descreve o metamodelo deteriora rapidamente com o aumento da dimensionalidade do problema e com o aumento do número de pontos de dados analisados. É frequentemente observado que precisão é encontrada à beira da instabilidade numérica (Keane e Nair, 2005).

A função de base radial na forma $\phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|)$ pode ser definida como uma função em que seus valores dependem somente da distância da origem, ou alternativamente da distância de um ponto a outro ponto \mathbf{x} , chamado de centro. Também é definida como função da norma: $\phi(\|\bar{\mathbf{x}}\|) : R^n \rightarrow R$. Qualquer função ϕ que satisfaça a propriedade $\phi(\mathbf{x}) = (\|\bar{\mathbf{x}}\|)$ é uma função radial.

Matematicamente, uma interpolação FBR, pode ser representada da seguinte forma:

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|) \quad (4.8)$$

em que $s(\mathbf{x})$ é a função aproximada, e é representada como a soma das n funções de base radial, $\phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|)$, cada uma associada com diferentes centros, \mathbf{x}_i , sem qualquer informação especial na posição de seus números ou posição geométrica, que são avaliados por coeficientes, α_i .

As funções de base radial, em geral, podem ser classificadas em duas grandes categorias:

1ª - Funções dependentes de um parâmetro de forma c , o qual pode ser definido pelo usuário. Suas estruturas e parametrizações são demonstradas na tabela 4.1. Este parâmetro de

forma é usado para controlar o domínio de influência e a suavidade de aproximação da FBR (Chen et al., 2007). Se ϕ for positiva definida, como a Gaussiana e a Multiquádrica Inversa, a não singularidade será garantida, entretanto, valores extensos de c , podem tornar o sistema muito mal condicionado.

Tabela 4.1 - Funções de base radial dependente de parâmetro de forma.

Nome da Função	$\phi(r)$
Gaussiana	$\exp(-r^2/c^2)$
Multiquádrica	$\sqrt{r^2+c^2}$
Multiquádrica Inversa	$\frac{1}{\sqrt{r^2+c^2}}$

2ª - Funções independentes de parâmetros, como demonstrada na tabela 4.2 e que falham na condição de serem positivo-definidas, sendo necessário adicionar um termo polinomial P , e reescrever como:

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|) + \mu_0 + \sum_{i=1}^d \mu_i x_i, \quad \mathbf{x} \in R^d \quad (4.9)$$

em que $\|\cdot\|$ é a norma euclidiana em R^d , e \mathbf{x}_i as i -ésimas coordenadas do ponto \mathbf{x} ; α_i ($i=1, \dots, n$) e μ ($i=0, \dots, d$) são os coeficientes reais a serem determinados.

As seguintes matrizes $\varphi \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ e $P \in \mathfrak{R}^{n \times (d+1)}$ são construídas por funções de base radial e um polinômio linear respectivamente:

$$(\varphi)_{ij} = \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|), \quad i, j = 1, \dots, n \quad (4.10)$$

$$P = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1d} \\ \vdots & \vdots & x_{ij} & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_{nd} \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

A função que interpola os pontos $((\mathbf{x}_1, f(\mathbf{x}_1)), \dots, (\mathbf{x}_n, f(\mathbf{x}_n)))$ é obtida resolvendo o sistema.

$$\begin{pmatrix} \varphi & P \\ P^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ 0_{d+1} \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

em que $F = (f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_n))^T$, $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)^T \in \mathbb{R}^n$ e $(\mu_0, \dots, \mu_d)^T \in \mathbb{R}^{d+1}$.

A matriz de ordem $n+d+1$ da Eq. (4.11) é simétrica e positivo-definida para as equações demonstradas na tabela 4.2, neste caso a matriz é inversível e o sistema na Eq. (4.12) é solucionado.

Tabela 4.2 - Funções de base radial condicionalmente positiva definida e independente de parâmetros

Nome da Função	$\phi(r)$
Linear	r
Cúbica	r^3
<i>Thin Plate Splines</i>	$r^2 \log r$

Deve-se notar que a função de base radial do tipo Multiquádrica, além de levar em conta o parâmetro de forma, também falha na condição de ser positivo-definida. Franke (1982) comparou uma variedade de técnicas de interpolação, aplicou em problemas bidimensionais e mostrou que as multiquádricas dão melhores resultados quando comparadas com outras técnicas. Tal observação tem sido considerada por muitos autores (Chen et al., 2007).

As características da interpolação das funções de base radial podem envolver uma estimativa do erro local a um ponto particular escolhido em um domínio, definido como erro relativo, e escrito como:

$$Erro\ Relativo = \left| \frac{f_{ap} - f_{ex}}{f_{ex}} \right| \times 100\% \quad (4.13)$$

Em que f_{ap} e f_{ex} são aproximações e valores exatos das funções calculadas nos pontos de avaliação. Outra forma de estimar os erros de interpolação é fazer uso do erro médio quadrático ε , como em Eq. (4.2).

4.4 APLICAÇÕES COM METAMODELOS

4.4.1 Metodologia Clássica e Interpolação por Funções de Base Radial

Aplicações da metodologia clássica de construção de metamodelos e de interpolação por funções de base radial foram realizadas em duas funções propostas por Dixon e Dzegö (1978), com o objetivo de analisar o desempenho dos metamodelos. Para a construção dos metamodelos polinomial quadrático (MPOL) e metamodelo baseado em funções de base radial (MFBR) foram usados, como plano de experiências, o plano fatorial completo (PFC). O número de variáveis (k) das funções neste estudo é igual a dois, para permitir fácil visualização dos resultados apresentados através de gráficos. Os pontos do projeto (m), são obtidos variando-se os níveis (n_{niv}) de três à dez gerados pelo PFC, $m = n_{niv}^k$, como pontos de dados de entrada para construção dos metamodelos.

O metamodelo MFBR usa da função de base radial, *Linear Splines* ou Cônica, é dado por:

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \alpha_i \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\| \quad (4.14)$$

em que $\|\cdot\|$ é a norma euclidiana, \mathbf{x}_i é um vetor com os dados de entrada de dimensão n , m é o número de simulações executadas, e α_i 's são os coeficientes para serem estimadas. $\mathbf{x}_1^i = (x_1^i, \dots, x_n^i)$, é a entrada de dimensão n , e y_i a saída da i -ésima simulação. Substituindo-se estes valores na Eq. (4.14) para m execuções, os coeficientes α_i podem ser estimados usando a seguinte expressão:

$$\alpha = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{x}, \quad (4.15)$$

em que

$$\mathbf{A} = (a_{ij}), \quad (4.16)$$

$$a_{ij} = \left[\sum_{k=1}^n (\mathbf{x}_k^i - \mathbf{x}_k^j)^2 \right]^{1/2}, \quad 1 \leq i, j \leq m. \quad (4.17)$$

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_i), \quad \mathbf{y} = (y_i), \quad 1 \leq i \leq m. \quad (4.18)$$

O cálculo dos coeficientes depende de cada matriz A ser singular ou mal condicionada. O número de condição ζ obtido da matriz A mostra a dificuldade de calcular A^{-1} . Se este número for muito grande, ao ponto de que $1/\zeta$ está próximo de ϵ (onde ϵ é a precisão da máquina), pequenas mudanças em A causam grandes mudanças em α .

Para a análise dos metamodelos MFBR e MPOL foram utilizadas as seguintes medidas de desempenho:

- Cálculo da inversa do número de condição ($1/\zeta$) para o metamodelo MFBR. A figura 4.1 mostra o comportamento de $1/\zeta$ para todos os valores de m (ou seja, para todos os planos de experiências).

- A média e desvio padrão dos erros entre os metamodelos e as funções originais foram calculados para 200 pontos gerados aleatoriamente, para todos os m 's.

- Superfície e contornos gráficos de cada função e os erros correspondentes foram representados graficamente para $m = 100$. O erro da função é definido como a diferença entre o metamodelo e a função original.

As funções *GP* (Goldstein e Price) e *BR* (Branin) são usadas para testar algoritmos de otimização global. A função *BR* possui vários mínimos locais (Hussain, 2002).

Função - GP (Goldstein e Price)

$$f(\mathbf{x}) = \left[\begin{array}{l} 1 + (x_1 + x_2 + 1)^2 \cdot (19 - 14x_1 + 3x_1^2 - 14x_2 + 6x_1x_2 + 3x_2^2) \\ 30 + (2x_1 - 3x_2)^2 \cdot (18 - 32x_1 + 12x_1^2 - 48x_2 - 36x_1x_2 + 27x_2^2) \end{array} \right] \quad (4.19a)$$

$$-2 \leq x_1, x_2 \leq 2 \quad \mathbf{x}_{\min} = (0, 1), \quad f(\mathbf{x}_{\min}) = 3. \quad (4.19b)$$

Função - BR (Branin)

$$f(\mathbf{x}) = a(x_2 - bx_1^2 + cx_1 - d)^2 + e(1 - g)\cos x_1 + e, \quad (4.20a)$$

Em que

$$a=1, b=\frac{5.1}{4\pi^2}, c=\frac{5}{\pi}, d=6, e=10, g=\frac{1}{8\pi} \quad (4.20b)$$

$$-5 \leq x_1 \leq 10, 0 \leq x_2 \leq 15 \quad (4.20c)$$

$$x_{\min} = (-\pi, 12.275); (\pi, 2.2755); (3\pi, 2.475) \quad f(x_{\min}) = 0.39789. \quad (4.20d)$$

4.4.2 Análises

As análises das superfícies de respostas construídas foram feitas de forma quantitativa e qualitativa. Os testes quantitativos foram conduzidos com ajuda do cálculo do erro médio quadrático (MSE). Os testes qualitativos foram conduzidos por meio de uma comparação visual dos metamodelos com a função original representado graficamente.

A Figura 4.1 mostra o comportamento de $1/\zeta$ para MFBR. O pior valor do número de condição foi de 0.00000572, quando os pontos do plano de experiências aumentam, por volta de 100. Desde que este valor não ultrapasse a precisão da máquina, é possível construir metamodelos usando função de base radial para um grande número de problemas.

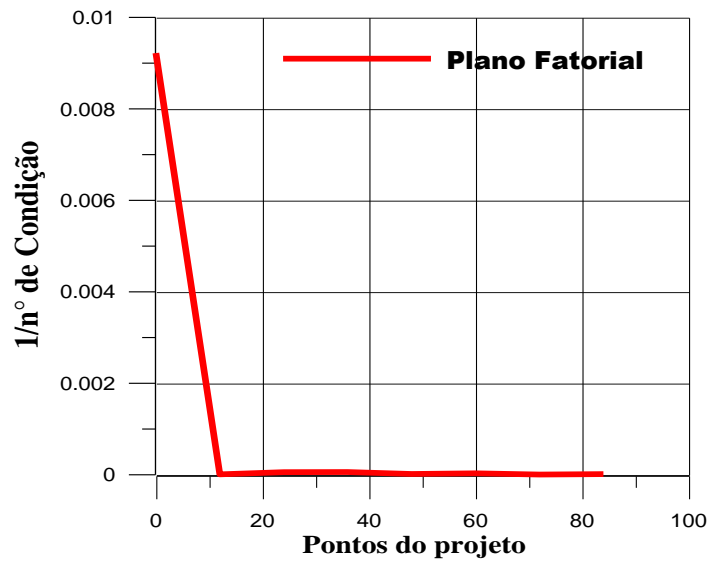


Figura 4.1 – Número de Condição para o MRBF com PFC.

Os gráficos das medidas de desempenho para a função *GP* são apresentados na Fig. 4.2. O gráfico para o erro médio quadrático (Mean Squared Error - MSE) (Fig. 4.2a) mostra que o metamodelo MFBR tem menores erros quando comparado com o metamodelo MPOL. O gráfico de superfície é mostrado na Fig. 4.2b e dos erros é mostrado na Fig. 4.3.

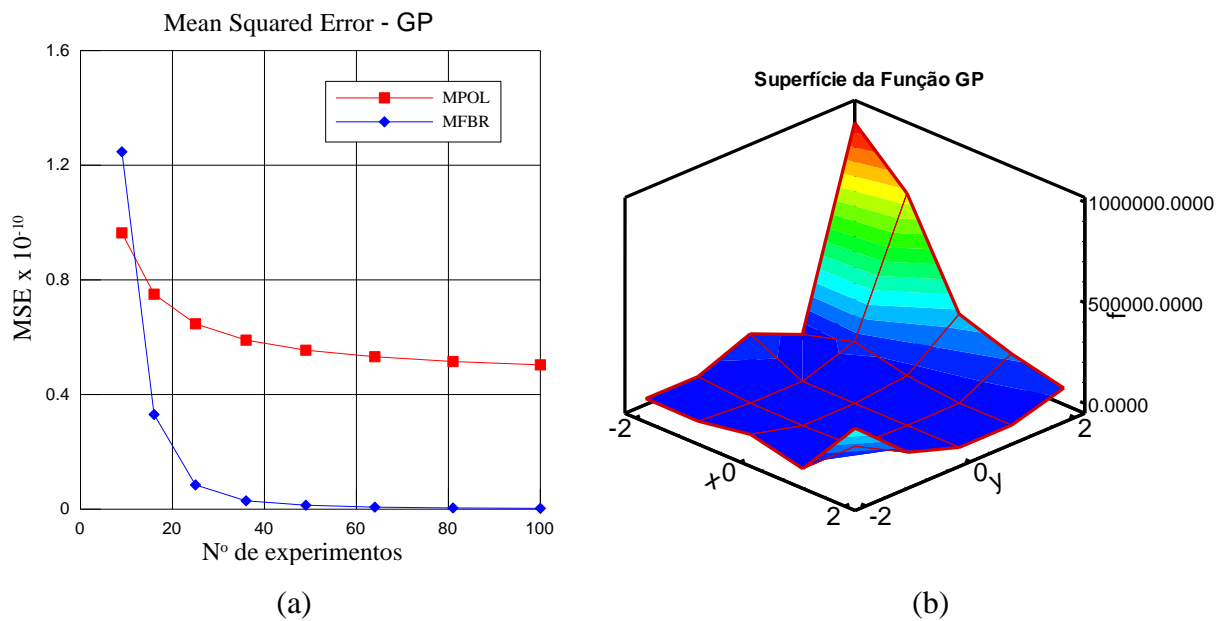


Figura 4.2 – (a) Erro médio quadrático - MSE; (b) Superfície da função GP

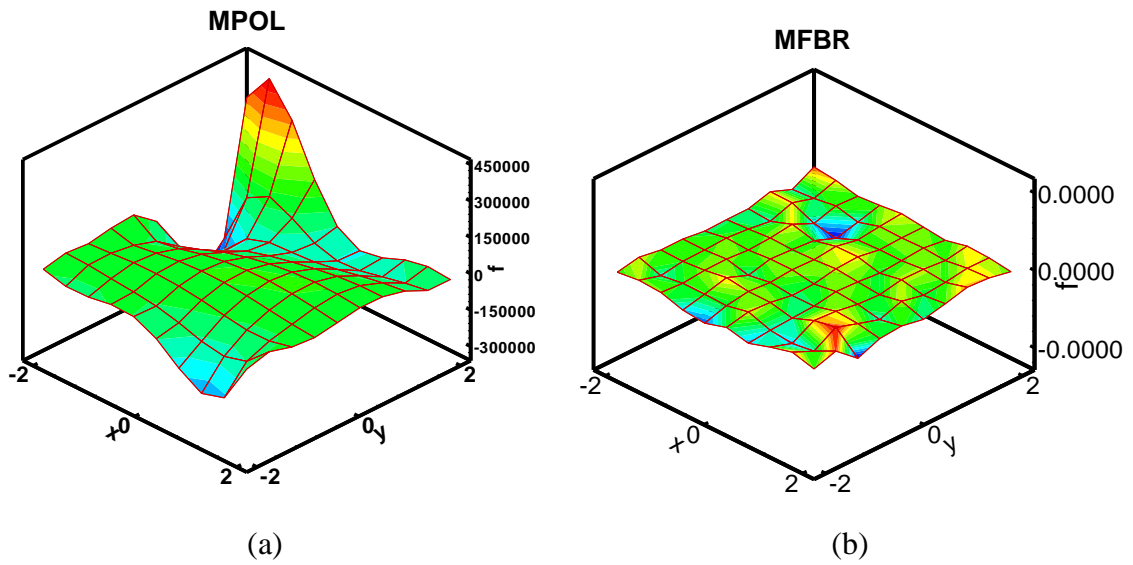


Figura 4.3 – (a) Análise do erro para MPOL; (b) Análise do erro para MFBR

O gráfico de superfície da função e das medidas de desempenho para a função *BR* é apresentado nas Figs. 4.4a e 4.4b. O metamodelo polinomial apresenta erro médio quadrático pequeno, porém, o metamodelo MFBR apresenta melhor comportamento do erro.

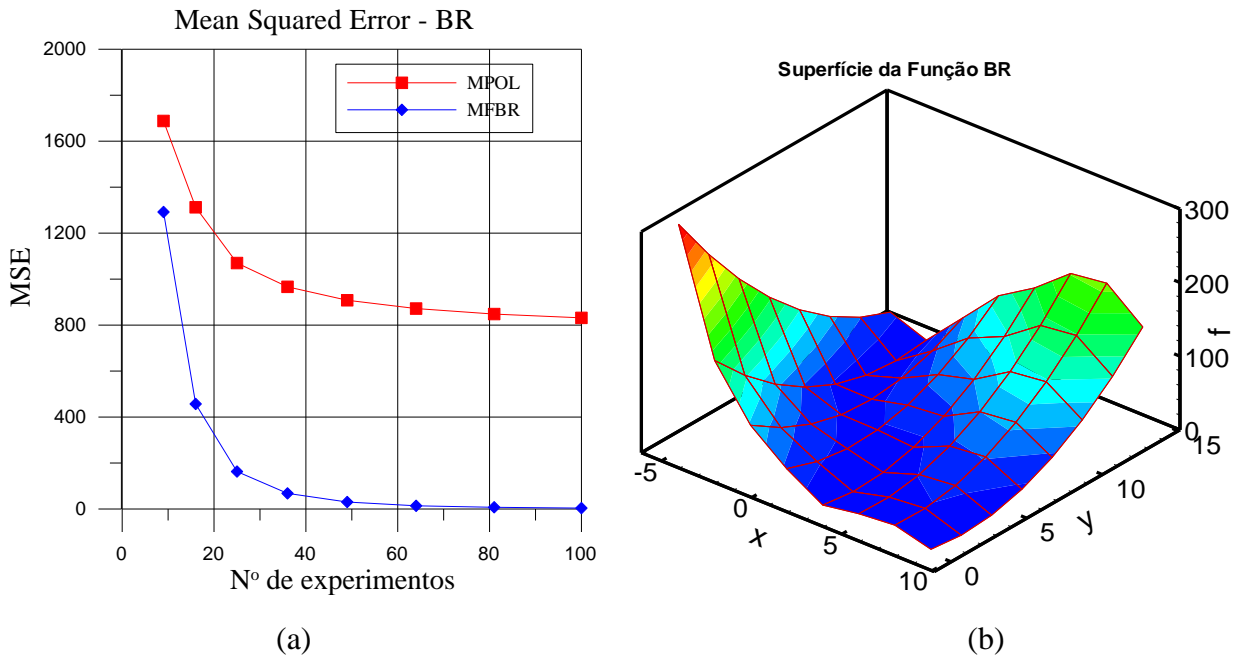


Figura 4.4 – (a) Erro médio quadrático - MSE; (b) Superfície da função *BR*

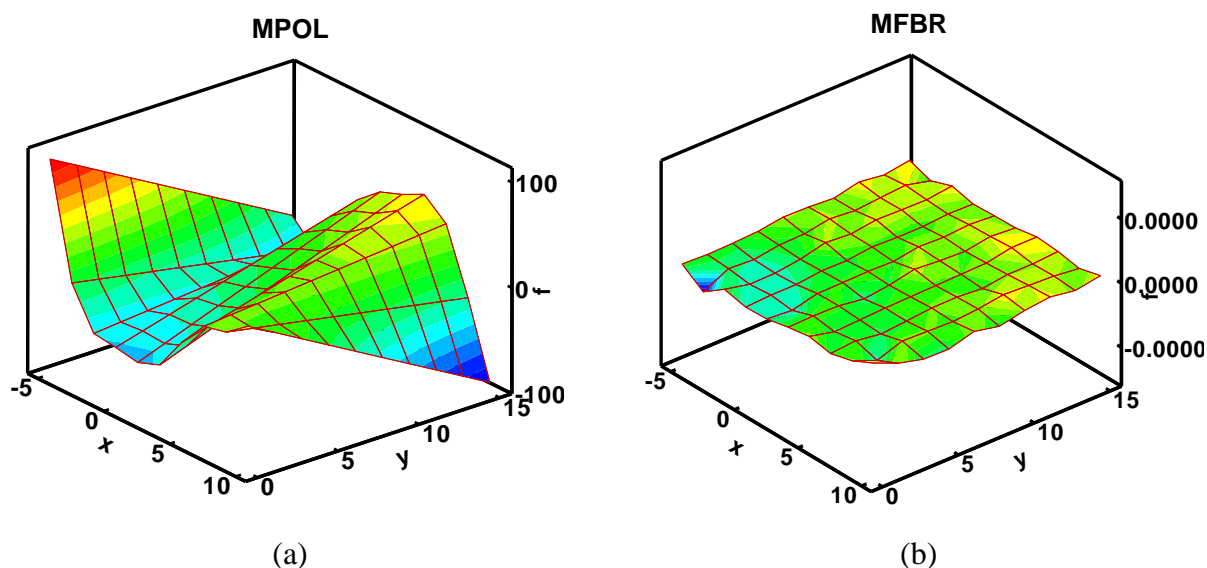


Figura 4.5 – (a) Análise do erro para MPOL; (b) Análise do erro para MFBR

O gráfico dos erros relativos para a função BR é apresentado nas Figs. 4.5a e 4.5b. O metamodelo MFBR mostra melhor comportamento, devido à técnica de interpolação, os erros são nulos. Os erros de superfície do metamodelo polinomial flutuam significativamente.

4.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

As técnicas de metamodelagem demonstram ser eficientes na construção de funções aproximadas de um modelo real. Então se tornam ferramentas de auxílio para otimizar processos que exigem recursos computacionais custosos.

Neste capítulo foram estudadas duas importantes técnicas de metamodelagem (SRC e FBR); implementações e aplicações também foram introduzidas. O programa FBR respondeu de forma eficiente no confronto entre modelo exato e modelo aproximado. Todas as funções de base radial testadas demonstraram maior eficiência quando foram comparadas com os resultados obtidos do programa SRC.

Portanto, escolhe-se fazer uso das funções de base radial multiquádrica e multiquádrica inversa nas aplicações em turbomáquinas, pois responderam de forma mais efetiva nas análises obtidas no confronto entre exato e aproximado.

Outro aspecto que deve ser observado quando é necessário resolver problemas de otimização que possuem grande número de variáveis de projeto é a necessidade de aplicar técnicas de análise de sensibilidade a priori e ANOVA, pois permitem verificar o grau de importância das variáveis envolvidas na solução do problema.

Capítulo 5

ESTRATÉGIA DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL COM RESTRIÇÕES COM BASE EM METAMODELOS

Neste capítulo será apresentada a implementação de uma estratégia de otimização global para aplicação em modelos computacionais caros. Esta estratégia faz uso da técnica de construção de metamodelos como ferramenta de auxílio para acelerar o processo de otimização. Esta ferramenta permite a redução do número de avaliações do modelo caro e em consequência exige pouco esforço computacional.

5.1 INTRODUÇÃO

Otimização Global de funções que são computacionalmente caras representa um grande desafio para problemas em engenharia. Uma única simulação pode requerer a solução de grandes sistemas de equações diferenciais parciais e, conseqüentemente, pode demorar muito tempo, dependendo da aplicação. Torna-se, então interessante desenvolver algoritmos de otimização global que produza soluções razoavelmente boas, com um pequeno número de avaliações da função.

A maioria dos atuais métodos de otimização é deficiente para ser aplicado em funções computacionalmente caras. Algoritmos baseados em Gradiente não podem ser utilizados em muitos casos, simplesmente porque as derivadas não estão disponíveis e aproximações por

diferenças finitas são demasiado caras para executar (Regis e Shoemaker, 2005). Apesar de ser possível utilizar técnicas de diferenciação automática, elas não podem ser utilizadas em casos em que não se tem disponível o código-fonte para a função-objetivo. Além disso, com a exceção do método de otimização global DIRECT (Jones, 2001), os métodos de busca diretos são usados para encontrar pontos estacionários, fazendo com que a otimização global reinicie várias vezes, exigindo ainda mais avaliações da função. Métodos heurísticos como algoritmos evolucionários também exigem um grande número de avaliações da função para obter adequadamente boas soluções para problema de otimização global.

Técnicas de otimização com base em metamodelos constituem então uma alternativa para funções que exigem muito esforço computacional. O propósito do metamodelo envolve identificar pontos promissores para avaliar a função-objetivo. O mais popular desses métodos é a tradicional metodologia de superfícies de resposta (Myers e Montgomery, 2002) que geralmente envolve regressão polinomial de baixa ordem. Outra classe de métodos de otimização que são livres de derivadas foi estudada por Powell (1994, 2000, 2002) e por Conn et al., (1997) que utilizam modelos de interpolação polinomial com muitas variáveis, dentro de uma região de confiança.

Estes métodos são importantes para resolver problemas de otimização com restrição, também são projetados para encontrar pontos estacionários, e são mais eficientes do que os métodos de busca direta. Outros métodos de superfícies de resposta utilizados para otimizar funções computacionalmente caras são aqueles baseados em modelos *kriging* (Jones et al., 1998; Simpson et al., 2004; Jones, 2001a) e funções de base radial (Gutmann, 2001).

O modelo real construído por metamodelagem pode ser local (ou seja, restrito a uma região específica), ou global, como mostra o método de Jones et al., (1998) ou como mostra o método de função de base radial de Gutmann (2001), ou pode ser uma combinação de ambos. Métodos que utilizam um metamodelo local, sua região de exploração é periodicamente deslocada e o seu tamanho é ajustado com base nas informações fornecidas pelos pontos recém avaliados. No caso de métodos que utilizam um metamodelo global, o mínimo global no modelo aproximado não costuma corresponder a um mínimo global da superfície real. Assim, a aproximação da superfície global é periodicamente atualizada com a adição de novos pontos avaliados (Praveen e Duvigneau, 2007).

5.2 DESCRIÇÃO DA METODOLOGIA

De acordo com as discussões feitas na introdução deste capítulo, foi escolhida como desenvolvimento da metodologia de trabalho, métodos de otimização estocásticos e metamodelos construídos por interpolação FBR.

Nessa metodologia, um plano de experiências; PFC é inicialmente construído com as variáveis de projeto e seus intervalos de variação. A partir do PFC são obtidas as respostas calculadas com o modelo real. Um metamodelo base é construído com poucos pontos de dados, isto é, utilizando apenas *corners*. Dentro de um processo de iteração, o ponto que minimiza o atual modelo de superfícies de resposta, através do CRSA é um ponto candidato a ser o melhor ponto global. Ele será o próximo ponto de avaliação da função computacionalmente cara. Esse ponto está sujeito às restrições dadas que definem uma região específica D , e restrições adicionais que devem ser de alguma distância a partir de pontos previamente avaliados.

Seja D um subconjunto compacto de \mathbb{R}^d e $f: D \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua determinística. O problema de otimização global é encontrar $\mathbf{x}^* \in D$ tal que $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ para todos $\mathbf{x} \in D$. Sob as condições dadas, f é uma função desconhecida e cara para ser avaliada e atinge o seu valor mínimo global em D . Uma vez que a função-objetivo é cara, o objetivo é encontrar um ponto $\tilde{\mathbf{x}} \in D$ tal que $f(\tilde{\mathbf{x}})$ está perto do $\min_{\mathbf{x} \in D}$ utilizando apenas um número relativamente pequeno de avaliações da função.

A metodologia é construída de forma iterativa e, a cada iteração, o metamodelo é atualizado e exatamente um ponto é selecionado para avaliação da função computacionalmente cara. O objetivo da restrição é conduzir o algoritmo a explorar as regiões inexploradas e evitar a convergência prematura. Para realizar uma busca local e global é preciso percorrer uma distância entre valores altos (pesquisa global) e valores baixos (busca local).

A seleção dos pontos de avaliação da função-objetivo tem como finalidade encontrar novos pontos que possuem um valor mínimo e melhorar o metamodelo nas regiões em D onde existe pouca informação. Assim, a seleção do ponto de partida para a próxima avaliação da função-objetivo é baseada na minimização do atual metamodelo sujeito às restrições que mostram o quanto o próximo ponto avaliado pode estar perto dos já anteriormente avaliados.

O limite para saber até onde um ponto (x_1, \dots, x_n) pode ser previamente avaliado a partir de um ponto é dado por:

$$\Delta = \max_{\tilde{x} \in D} \min_{1 \leq j \leq n} \|\tilde{x} - \mathbf{x}_j\| \quad (5.1)$$

O próximo ponto de avaliação deve ser, pelo menos, de distância $\beta\Delta$ de todos os pontos avaliados anteriormente, com $0 \leq \beta \leq 1$ como um parâmetro a ser definido pelo usuário.

A estrutura do algoritmo para o novo método é apresentada a seguir:

Passo 1 (Seleção dos pontos iniciais). Configurar $i = 1$ e selecionar um conjunto inicial finito de pontos $S_i = \{x_1, \dots, x_k\} \in D$ para avaliação da função computacionalmente cara. Por exemplo, os *corners*.

Passo 2 (Avaliação da função computacionalmente cara). Avaliar a função f nos pontos S_i e atualizar com o melhor valor encontrado da função a cada avaliação da função.

Passo 3 (iteração). Enquanto a condição de término não for satisfeita seguir: $f(x^*) \leq f(x)$?

Passo 3.1 (Preenchimento ou atualização do metamodelo). Preencher ou atualizar \hat{f}_i utilizando os pontos de dados $D_i = \{(\mathbf{x}, f(\mathbf{x})) : \mathbf{x} \in S_i\}$.

Passo 3.2 (Seleção do ponto candidato). Selecionar o ponto candidato \mathbf{x}_{k+i} para avaliação da função-objetivo e para ser um ponto \mathbf{x} que resolve o seguinte problema de otimização com restrição:

Minimizar $\hat{f}_i(\mathbf{x})$

Sujeito a

$$\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_j\| \geq \beta_i \Delta_i, \quad j=1, \dots, k+i-1$$

$x \in D$

Onde

$$\Delta = \max_{\tilde{x} \in D} \min_{1 \leq j \leq k+i-1} \|\tilde{x} - \mathbf{x}_j\|$$

Passo 3.3 (Avaliação da função computacionalmente cara). Avaliar a função f em \mathbf{x}_{k+i} e atualizar com o melhor valor da função encontrado até o momento.

Passo 3.4 (Atualização das informações). $S_{i+1} = S_i \cup \{\mathbf{x}_{k+i}\}$; $D_{i+1} = D_i \cup \{(\mathbf{x}_{k+i}, f(\mathbf{x}_{k+i}))\}$.

Reinicializar i .

$$i = i + 1.$$

Fim

Na notação acima, k é o número de pontos da avaliação inicial, i denota o número da iteração, S_i é o conjunto de pontos previamente avaliados na iteração i , e \hat{f}_i é o metamodelo na iteração i . Os parâmetros β_i são definidos pela realização de ciclos de $N_{cycl} + 1$ iterações em que cada ciclo emprega uma quantidade de valores para o β_i , começando com um valor próximo de 1 (Busca global) e terminando com $\beta_i = 0$ (busca local). Mais precisamente, $\beta_i = \beta_{i+N_{cycl}+1}$ para todos os $i \geq 1$ e $1 \geq \beta_1 \geq \beta_2 \geq \dots \geq \beta_{N_{cycl}+1} = 0$. Refere-se à N_{cycl} como *comprimento do ciclo* e a seqüência $[\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{N_{cycl}+1} = 0]$ como um *padrão de busca*.

Para maior simplicidade, o termo *ponto de MAXIMIN* é usado para referir ao ponto em D que está o mais longe possível de qualquer ponto avaliado anteriormente. A expressão de Δ_i na Eq. (5.1) representa a distância do *ponto de MAXIMIN* ao ponto mais próximo previamente avaliado. Na iteração i , o ponto de avaliação candidato deve ser de distância de pelo menos $\beta_i \Delta_i$ a partir do próximo ponto previamente avaliado. Um *padrão de busca* inclui um conjunto de valores entre 0 e 1, como $[0,90; 0,75; 0,25; 0,05; 0,03; 0]$. Minimizar o metamodelo não é tão importante quanto encontrar um ponto de avaliação da função-objetivo, que satisfaz as restrições. Estes requisitos permitem acelerar o processo para encontrar um ponto de mínimo global para a função-objetivo original. De fato, a única exigência para a convergência é ter um *padrão de busca* com, pelo menos, uma entrada diferente de zero.

Este novo algoritmo converge ao mínimo global de qualquer função contínua, e é implementado utilizando funções de base radial. Os testes para validação da metodologia foram realizados usando as funções de Dixon-Szegö (Dixon e Szegö, 1978). Os resultados indicam que o novo método é competitivo com os atuais métodos de otimização, no menor número de avaliações da função-objetivo.

5.2.1 Experimentos Computacionais

Regis e Shoemaker (2005) empregaram um metamodelo que faz uso da função de base radial do tipo *thin plate splines* aumentado por um polinômio linear para a construção do metamodelo. Para a otimização global empregaram o método DIRECT de Jones, (2001) em conjunto com um *solver* baseado em gradiente local (*fmincon*, *Matlab*). A proposta originalmente feita por Regis e Shoemaker (2005) foi denominada de CORS-RBF (*Constrained Optimization Response Surface – Radial Basis Function*). A proposta foi modificada e será chamada de OGM-FBR (*Otimização Global utilizando Metamodelagem – com Funções de Base Radial*), mas apenas OGM será usado. Um algoritmo de busca aleatória controlada (CRSA) é empregado para desempenhar a tarefa de otimização. A função de interpolação é dada por:

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \phi \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|, \quad \mathbf{x} \in \mathfrak{R}^d \quad (5.2)$$

em que $\|\cdot\|$ é a norma Euclidiana em \mathfrak{R}^d e λ_i são os coeficientes para serem determinados. A função de base radial utilizada para a construção do metamodelo é a multiquádrica inversa, dada por:

$$\phi(r) = \frac{1}{\sqrt{r^2 + c^2}} \quad (5.3)$$

Em que c é o parâmetro de forma que tem forte influência na interpolação.

A implementação do algoritmo de otimização global com restrições foi testada nas funções de teste Dixon-Szegö. Nota-se que o mínimo global de cada função já é conhecido.

As funções Dixon-Szegö foram testadas independentemente vinte vezes. O padrão de busca (0,95; 0,50; 0,25; 0,005; 0,0005; 0,00) e $N_{cicl} = 6$, foi escolhido para todos os testes. O CRSA foi dez vezes aplicado para resolver o problema do passo 3.2. Uma população igual a $10(d+1)$ foi adotada. A tabela 5.1 mostra as características das funções.

Tabela 5.1 – Funções de teste (Dixon e Szegö, 1978).

Função de teste	Dimensão	Domínio	Nº de mínimos locais	Nº de mínimos globais	Valor do mínimo Global
Branin	2	[-5,10] x [0,15]	3	3	0,398
Goldstein-Price	2	[-2,2] ²	4	1	3
Hartman3	3	[0,1] ³	4	1	-3,86
Shekel5	4	[0,10] ⁴	5	1	-10,1532
Shekel7	4	[0,10] ⁴	7	1	-10,4029
Shekel10	4	[0,10] ⁴	10	1	-10,5364
Hartman6	6	[0,1] ⁶	4	1	-3,32

Dentro da estrutura da estratégia OGM, o critério de convergência do CRSA foi uma tolerância de contração da população abaixo de 10^{-4} (diferença absoluta entre o valor da função dos piores e melhores pontos na população) ou o número máximo de avaliações da função igual a 10.000 avaliações.

Tabela 5.2 – Comparação: OGM x CRSA nas funções de teste Dixon-Szegö

Função de Teste	c	CORS					
		OGM (média)	OGM (min)	OGM (max)	(Regis e Shoemaker (2005)) SP1 / SP2 *	CRSA (média)	CRSA TS
Branin	0,50	19,8	16	20	34 / 40	138	100 %
Goldstein-Price	0,50	46,8	35	65	49 / 64	257	100 %
Hartman3	0,50	36,8	22	48	25 / 61	113	100 %
Shekel5	0,05	57,0	44	74	41 / 52	621	55 %
Shekel7	0,05	55,0	39	104	46 / 64	588	55 %
Shekel10	0,05	46,3	33	76	51 / 64	553	80%
Hartman6	0,50	105,0	93	117	104 / 108	427	80 %

Os valores na tabela indicam o número de avaliações da função-objetivo para obter um erro relativo menor que 1%

* SP1/SP2 Search Pattern 1 / Search Pattern 2

O critério de convergência de OGM adotado foi obter um erro relativo entre o valor mínimo calculado e o valor mínimo conhecido menor que 1%. Durante os testes foi observado que o parâmetro de forma na multiquádrica inversa mostrou um forte efeito na convergência. Uma explicação plausível para essa tendência é que podem existir valores ótimos de c para melhorar a construção do metamodelo; além disso, a utilização de tais valores não só podem acelerar a convergência do algoritmo mas também diminuir os efeitos da aleatoriedade do CRSA. Uma conclusão evidente é que um esquema consistente para otimizar os valores de c para a construção do metamodelo não só será bem-vinda, mas bastante necessário quando se utiliza o CRSA. As funções Shekel requerem valores menores de c do que as outras funções. Observa-se que é aconselhável implementar um esquema para aperfeiçoar o parâmetro de forma c para diminuir este efeito.

A tabela 5.2 mostra os resultados obtidos incluindo o valor de c para cada função. A média, o mínimo, o máximo e o número de avaliações da função-objetivo são listados. Os valores obtidos por Regis e Shoemaker, (2005) usando dois tipos diferentes de *padrão de busca* são também mostrados. As últimas duas colunas listam a média e a taxa de sucesso (TS) obtida com a aplicação direta do CRSA. Pode-se observar que a estratégia de metamodelagem mostra habilidade para reduzir o número de avaliações da função substancialmente. A aceleração mínima aconteceu para a função Hartman3 (≈ 3 vezes), enquanto a aceleração máxima aconteceu para função Shekel10 (≈ 12 vezes). É importante notar que a taxa de sucesso do método OGM foi de 100% para todos os testes o que nem sempre acontece com o CRSA. Assim, OGM não só pode acelerar o processo de otimização de funções computacionalmente caras como também melhorar a confiança e robustez do processo de busca.

Outros testes também similares aos que foram feitos por Regis e Shoemaker, (2005), são mostrados na tabela 5.3. Utilizando a mesma função de base radial (*thin plate splines*) e também multiquádrica inversa aumentada por um polinômio linear, porém com algoritmo estocástico (CRSA). A função de interpolação é representada na forma:

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|) + \mu_0 + \sum_{i=1}^d \mu_i x_i, \quad \mathbf{x} \in \mathfrak{R}^d \quad (5.4)$$

Considerando as matrizes $\Phi \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ e $P \in \mathfrak{R}^{n \times (d+1)}$, construídas por funções de base radial, e polinômio linear respectivamente.

$$(\Phi_{ij}) = \phi\|x-x_i\|, i, j=1, \dots, n \quad (5.5)$$

$$P = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1d} \\ \vdots & \vdots & x_{ij} & \vdots \\ 1 & x_n & \vdots & x_{nd} \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

A função que interpola os pontos $((\mathbf{x}_1, f(\mathbf{x}_1)), \dots, (\mathbf{x}_n, f(\mathbf{x}_n)))$ é obtida resolvendo o seguinte sistema,

$$\begin{pmatrix} \Phi & P \\ P^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ 0_{d+1} \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

em que $F = (f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_n))^T$, $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)^T \in \mathbf{R}^n$ e $(\mu_0, \dots, \mu_d)^T \in \mathbf{R}^{d+1}$.

Os coeficientes da matriz na Eq. (5.7) são da ordem $n+d+1$. A Matriz é simétrica e positiva definida para ambas as funções multiquádrica inversa e *thin plate splines*. Então a matriz poder ser invertida e o sistema solucionável. Sem o termo polinomial a propriedade de positividade é preservada somente para a multiquádrica inversa.

A tabela 5.3 mostra resultados obtidos usando três diferentes modelos de funções de base radial com um *padrão de busca* (0,95; 0,50; 0,25; 0,005; 0,0005; 0,00), $N_{cicl} = 6$. As funções foram testadas independentemente dez vezes.

Tabela 5.3 – Comparação da implementação OGM e CRSA nas funções de teste Dixon-Szegö

Função de Teste	c	OGM* (média)	OGM ** (média)	OGM*** (média)	CORS		
					(Regis e Shoemaker (2005)) SP1 / SP2	CRSA (média)	CRSA TS
Branin	0,50	19,8	18,4	51,7	34 / 40	138	100 %
Goldstein-Price	0,50	46,5	47,1	59,7	49 / 64	257	100 %
Hartman3	0,50	36,3	33,1	46,7	25 / 61	113	100 %
Shekel5	0,05	57,6	103,4	142,8	41 / 52	621	55 %
Shekel7	0,05	57,3	64,5	94,1	46 / 64	588	55 %
Shekel10	0,05	46,0	62,8	76,6	51 / 64	553	80%
Hartman6	0,50	102,0	62,6	82,6	104 / 108	427	80 %

Os valores na tabela indicam o número de avaliações da função para obter um erro relativo menor que 1%

* Resultado para multiquádrica inversa (transcritos da tabela 5.2)

** Resultado para multiquádrica inversa com um polinômio linear

*** Resultado para *thin plate splines* com um polinômio linear (sem a necessidade do parâmetro de forma)

Analisando os resultados na tabela 5.3, pode se notar que a escolha da função de base radial ou o parâmetro de forma tem forte influência nos resultados, dependendo do valor de c nem converge. A multiquádrica inversa, com ou sem o polinômio, mostrou melhores resultados do que a *thin plate splines* com polinômio. O polinômio não trouxe muitos benefícios para a multiquádrica inversa, já a *thin plate splines* sem este termo, requer um número expansivo de avaliações da função, talvez esse comportamento possa ser explicado porque Regis e Shoemaker (2005) apresentaram resultados somente para *thin plate splines* com polinômio.

A tabela 5.4 mostra os resultados com dois diferentes padrões de busca SP1 (0,95; 0,50; 0,25; 0,005; 0,0005; 0,00) e SP2 (0,90; 0,75; 0,25; 0,05; 0,03; 0,00). Pode se notar que o padrão de busca também tem influência na convergência. Em geral, a média dos resultados obtidos com SP2 foi melhor que aquelas com SP1, exceto para as funções Goldstein-Price e Shekel10.

Tabela 5.4 – Comparação da implementação OGM e CRSA nas funções de teste Dixon-Szegö com dois tipos de *padrão de busca* para a função *Thin Plate Splines* com Polinômio Linear.

Função de Teste	OGM - SP1 - *** (média)	OGM (min / max)	OGM – SP2- *** (média)	OGM (min / max)
Branin	51,7	44 / 69	37,3	33 / 40
Goldstein-Price	59,7	46 / 87	70,6	46 / 86
Hartman3	46,7	24 / 86	50,9	24 / 96
Shekel5	116,4	87 / 130	82,6	40 / 124
Shekel7	94,1	57 / 128	70,0	46 / 82
Shekel10	76,6	52 / 104	79,0	58 / 88
Hartman6	142,8	118 / 164	129,2	104 / 176

Dos resultados mostrados na Tabela 5.2 e 5.3, é possível concluir que a implementação do método OGM estudado é, em geral, competitivo com a implementação original por Regis e Shoemaker, (2005).

Para a conclusão dos testes nesta seção, três abordagens foram utilizadas. Na 1ª abordagem a estratégia OGM foi aplicada sobre as funções de teste Dixon-Szegö com dois valores do parâmetro de forma c escolhido para cada função e 20 execuções independentes para cada teste. Os melhores resultados médios obtidos são favoravelmente comparados com os resultados obtidos por Regis e Shoemaker (2005) que empregava *Thin Plate Splines* com Polinômio Linear para a construção do metamodelo e um algoritmo determinístico DIRECT para a otimização. Reduções substanciais (Tab. 5.3, coluna 3) no número de avaliações da função foram observadas em comparação com os resultados obtidos quando o algoritmo CRSA foi aplicado diretamente. Além disso, a estratégia alcançou uma taxa de sucesso de 100% em todos os testes que nem sempre ocorrem com CRSA sozinho. Por outro lado tem-se observado que a variação do parâmetro de forma c afeta um pouco a velocidade das avaliações da estratégia OGM. Valores ótimos do parâmetro de forma c podem existir de forma a maximizar esta velocidade. Devido à aleatoriedade CRSA, tem-se observado também uma diferença relativamente grande entre o número máximo e mínimo de avaliações de função entre as execuções independentes. Essa diferença tende a diminuir quando os valores do melhor parâmetro de forma são empregados, ou seja, valores que aumentam a velocidade da estratégia.

Na 2ª abordagem foram realizados testes similares aos que foram feitos por Régis e Shoemaker, (2005). Utilizando a mesma função de base radial (*thin plate splines (tab. 4.2)*) e também multiquádrica inversa aumentada por um polinômio linear, porém com algoritmo estocástico (CRSA). Observam-se as mesmas análises feitas sobre os resultados da primeira abordagem, na segunda, porém, nesta o número de avaliações da função foram um pouco maiores do que a primeira abordagem, mas tão competitiva quando comparadas com os resultados obtidos por Régis e Shoemaker (2005).

Na 3ª abordagem a estratégia foi aplicada sobre as mesmas funções de testes, usando a função de base radial *thin plate splines* com polinômio linear, porém com dois diferentes tipos de *padrão de busca*. O primeiro SP1 foi adotado na tese e o segundo SP2 foi proposto por Régis e Shoemaker. Nessa comparação, nota-se que a escolha do *padrão de busca* também tem certa influência na taxa de aceleração da estratégia.

5.3 TÉCNICA DE AUTOMATIZAÇÃO DO PARÂMETRO DE FORMA c USADO EM FUNÇÕES DE BASE RADIAL

Modernos métodos de otimização como algoritmos genéticos e *particle swarm*, utilizados com interpolação por funções de base radial (FBR), foram aplicados para solucionar problemas de projeto em engenharia e resolver equações diferenciais parciais e demonstraram serem eficazes (Praveen e Duvigneau, 2007, Roque e Ferreira, 2009). Interpolações FBR são capazes de reconstruir funções que não são suaves de forma eficiente e de melhorar a habilidade e rapidez dos métodos de otimização em encontrar soluções ótimas. Quando as funções de base radial como multiquádricas e multiquádricas inversas são usadas, o desempenho desta estratégia pode ser altamente dependente de uma adequada escolha do parâmetro de forma c .

Várias técnicas a respeito do c foram propostas na literatura, do número de pontos de interpolação e da distância entre eles e servem como um guia (Franke, 1982, Hardy, 1971, Fasshauer, 2002). Carlson e Foley (1991) estudaram a dependência da precisão da multiquádrica e da multiquádrica inversa no parâmetro c . Em suas observações, um valor elevado de c corresponde a funções que são bem aproximadas por um polinômio quadrático e

isso se traduz em um esquema para selecionar um valor efetivo para c . O sistema é baseado no erro residual obtido pelo método dos mínimos quadrados. Em muitos casos, no entanto, a escolha do parâmetro de forma ainda estava longe do ideal e a interpolação correspondente não foi tão precisa quanto à interpolação construída com a escolha do c ótimo. Carlson e Foley (1991) propuseram outro esquema para o cálculo de um melhor valor de c , com base na idéia de que o valor ideal é aquele que minimiza o erro médio quadrático entre a interpolação multiquádrica e a multiquádrica inversa. Os experimentos numéricos de Carlson e Foley (1991) foram realizados em problemas bidimensionais. Não está claro se esse sistema pode ser aplicado a outras funções de base ou a problemas de interpolação com maior dimensão.

Rippa (1999) sugeriu outro algoritmo para selecionar um bom valor para o parâmetro c e comparou-o com os experimentos de Foley. Ele concluiu que um bom valor de c depende do número e da distribuição de pontos de dados, da função de interpolação, do número de condição de interpolação da matriz e da precisão do computador. Com base nessas observações, Rippa propôs uma técnica rápida de validação cruzada *leave-one-out* em que um bom valor de c é selecionado através da minimização de uma função erro que imita o erro médio quadrático entre a interpolação radial e o conjunto de dados treinados que gera a função desconhecida.

O parâmetro de forma desempenha um papel muito importante para a precisão da função de base radial, muitos autores escolhem esse parâmetro na tentativa e erro, Fasshauer e Zhang (2000) propuseram uma extensão do método de *cross validation* (caso especial - *leave-one-out*), para a escolha de um ótimo c proposto anteriormente por Rippa. Neste trabalho, é mostrado que se pode superar os problemas de condicionamento da RBF tradicional e até mesmo evitar o mal condicionamento da matriz. Roque e Ferreira (2009) também fizeram uso da técnica proposta por Rippa. Propuseram uma investigação numérica de uma técnica para escolher um ótimo c .

5.3.1 IMPLEMENTAÇÃO DO LEAVE-ONE-OUT CROSS-VALIDATION

Para definir a técnica *Leave-One-Out Cross-Validation* (LOOCV), o seguinte texto é extraído do trabalho de Roque e Ferreira (2009): “*Cross-Validation* é uma técnica estatística baseada em uma nova amostra de dados. Métodos de reamostragem de dados são divididos em dois grupos: o conjunto de treinamento ou de aprendizagem e conjunto de teste ou de

validação. Várias abordagens são possíveis sobre a divisão de dados. A validação cruzada divide os N dados em subamostras k de aproximadamente o mesmo tamanho. Uma subamostra é utilizada como dados para validação, e as restantes $k-1$ subamostras são utilizados como dados de treinamento. O processo é repetido k vezes, cada vez utilizando uma subamostra diferente (*k-fold cross-validation*). No caso particular de $k=N$, o processo é chamado de *leave-one-out cross-validation*". Esta técnica pode ser computacionalmente cara por isso, neste presente trabalho, usa-se um algoritmo rápido sugerido por Rippa (1999), o qual reduz o número de operações.

A seleção do parâmetro de forma c para a interpolação de dados feita com funções de base radial é conseguida através da minimização de uma função que imita o comportamento do erro médio quadrático (MSE – *mean square error*) entre a interpolação e a função da qual o vetor de dados $f = (f_1, \dots, f_N)$ forneceu uma amostragem. Para a aplicação direta de LOOCV, o cálculo de c requer a solução de N equações lineares de ordem $(N-1) \times (N-1)$ cada uma. Se o sistema linear for resolvido através da decomposição LU o número total de operações é da ordem $O(N^4)$, que pode ser muito caro, mesmo para conjuntos de dados de tamanho moderado. O algoritmo que seleciona um bom valor para c , dado por Rippa (1999) requer apenas uma decomposição LU com um custo de $O(N^3)$ e é descrito da seguinte forma.

A interpolação FBR que deixa de fora o ponto k é dada por

$$S^{(k)} = S^{(k)}(x) = \sum_{j=1, j \neq k}^N \lambda_j^{(k)} \Phi(\|x_j - x\|) \quad (5.8)$$

em que o vetor de coeficientes $\lambda^{(k)} = (\lambda_1^{(k)}, \dots, \lambda_{k-1}^{(k)}, \lambda_{k+1}^{(k)}, \dots, \lambda_N^{(k)})^T$ é determinado pela condição de interpolação

$$S^{(k)}(x_i) = f_i, \quad i = 1, \dots, N, i \neq k, \quad (5.9)$$

O que é equivalente a solucionar o sistema linear não singular

$$A^{(k)} \lambda^{(k)} = f^{(k)} \quad (5.10)$$

em que $A^{(k)}$ é obtido de A pela remoção da $K^{\text{ésima}}$ linha e da $K^{\text{ésima}}$ coluna. Note que se $y \in R^N$ é tal que $y_k = 0$ então

$$Ay = z \Rightarrow A^{(k)} (y_1, \dots, y_{k-1}, y_{k+1}, \dots, y_N)^T = (z_1, \dots, z_{k-1}, z_{k+1}, \dots, z_N)^T \quad (5.11)$$

Calculado $S^{(k)}$, pode-se calcular o $K^{\text{ésimo}}$ termo, o erro, $E_k = f_k - S^k(x_k)$. Assim se define a função que mede a qualidade de ajuste da interpolação S construído com o erro obtido por qualquer norma do vetor que contem os erros calculados.

Agora se considera a solução x^k para o sistema

$$Ax^{[k]} = e^{[k]}, \quad (5.12)$$

em que $e^{[k]}$ é a $K^{\text{ésima}}$ coluna da matriz identidade $N \times N$. É fácil verificar que $x_k^{[k]} \neq 0$.

Entretanto, se $x_k^{[k]} = 0$ então por (5.11) e (5.12) conclui-se que

$$A^{(k)} (x_1^{[k]}, \dots, x_{k-1}^{[k]}, x_{k+1}^{[k]}, \dots, x_N^{[k]})^T = 0, \quad (5.13)$$

o que implica, a partir da não singularidade de $A^{(k)}$, que $x^{[k]} = 0$, o que é impossível, porque $x_k^{[k]}$ é a solução para (5.12). Considerando o vetor $b^{[k]} \in R^N$ definido por

$$b^{[k]} = \lambda - \frac{\lambda_k}{x_k^{[k]}} x^{[k]} \quad (5.14)$$

então tem-se que

$$Ab^{[k]} = A\lambda - \frac{\lambda_k}{x_k^{[k]}} Ax^{[k]} = f - \frac{\lambda_k}{x_k^{[k]}} e^{[k]} = (f_1, \dots, f_{k-1}, f_k - \frac{\lambda_k}{x_k^{[k]}}, f_{k+1}, \dots, f_N)^T \quad (5.15)$$

E, uma vez que $b_k^{[k]} = 0$, se usar a equação (5.11) mais uma vez pode-se concluir que

$$\lambda^{[k]} = (b_1^{[k]}, \dots, b_{k-1}^{[k]}, b_{k+1}^{[k]}, \dots, b_N^{[k]})^T.$$

Isso implica que

$$\begin{aligned} S^{(k)}(x_k) &= \sum_{j=1, j \neq k}^N \lambda_j^{(k)} \Phi(\|x_j - x_k\|) \\ &= \sum_{j=1, j \neq k}^N b_j^{[k]} \Phi(\|x_j - x_k\|) \\ &= \sum_{j=1}^N b_j^{[k]} \Phi(\|x_j - x_k\|) \\ &= (Ab^{[k]})_k \\ &= f_k - \frac{\lambda_k}{x_k^{[k]}} \end{aligned}$$

que fornece uma formula simples para o erro de interpolação no ponto excluído x_k .

$$E_k = f_k - S^k(x_k) = \frac{\lambda_k}{x_k^{[k]}}, \quad (5.16)$$

se usar a decomposição LU para resolver os sistemas de equações lineares, o custo de uma decomposição da matriz A é $O(N^3)$ enquanto que o custo para resolver as N equações lineares (5.12) é $O(N^2)$ de modo que o total é $O(N^3)$. Uma função para medir o erro, chamada de F_{erro} é calculada com base na norma l_2 do vetor E em (5.16) e apresentada em (5.17):

$$F_{\text{erro}} = [(E_1^2 + \dots + E_N^2)/N]^{1/2} \quad (5.17)$$

O parâmetro de forma c em funções de base radial tem uma influência crítica sobre a precisão da função de interpolação. Neste sentido, alguns experimentos foram feitos para avaliar a influência de c na qualidade da aproximação com a função multiquádrica. Para os experimentos foram consideradas três funções ($F1$, $F3$, $F6$) de duas variáveis propostas por Rippa (1999):

$$\begin{aligned}
F1 &= 0.75 \exp\left(-\frac{(9x-2)^2 + (9y-2)^2}{4}\right) + 0.75 \exp\left(-\frac{(9x+1)^2}{49} - \frac{(9y+1)^2}{10}\right) \\
&+ 0.5 \exp\left(-\frac{(9x-7)^2 + (9y-3)^2}{4}\right) - 0.2 \exp\left(-\frac{(9x-4)^2 + (9y-7)^2}{4}\right) \\
&0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1
\end{aligned} \tag{5.18}$$

$$\begin{aligned}
F3 &= \frac{1.25 + \cos(5.4y)}{6(1 + (3x-1)^2)} \\
&0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1
\end{aligned} \tag{5.19}$$

$$\begin{aligned}
F6 &= \frac{\sqrt{64 - 81((x-0.5)^2 + (y-0.5)^2)}}{9} - 0.5 \\
&0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1
\end{aligned} \tag{5.20}$$

utilizando como plano de experiências a técnica PFC, com 100 pontos de interpolação. Apenas para a $F3$ foi usado um plano com 81 pontos de interpolação. Para construir a F_{erro} , um conjunto de 100 pontos escolhidos aleatoriamente foram avaliados para obter o erro entre a função de interpolação e a função exata.

Para cada seleção do parâmetro de forma c , a interpolação por função de base radial sobre um conjunto de pontos dados, é encontrada como segue:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|) \tag{5.21}$$

Um vetor de dados \mathbf{f} é definido pela avaliação de F sobre um conjunto de pontos de dados, isto é, tem-se $f_i = F(x_i, y_i)$, $i = 1, \dots, N$. O vetor $\boldsymbol{\lambda}$ dos coeficientes de interpolação é calculado pela resolução do sistema linear algébrico a seguir:

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{f} \tag{5.22}$$

O sistema é resolvido usando a mesma decomposição LU usada para resolver os N sistemas na Eq.(5.12), para $k=1, \dots, N$, com um custo computacional de $O(N^3)$. Os valores do

RMSE (erro real) são calculados pela Eq.(5.23), usando os valores avaliados em M pontos aleatórios diferentes daqueles utilizados para a interpolação ($M = 100$).

$$\text{MSE} = \sqrt{\left(\frac{1}{M} \left(\sum_{i=1}^M \text{solução exata}(i) - \text{solução RBF}(i) \right) \right)^2}. \quad (5.23)$$

Para o parâmetro de forma c , foram escolhidos 100 valores distribuídos uniformemente em um intervalo de $[0 - 1,5]$. Os resultados obtidos do cálculo para o número de condição de interpolação da matriz são mostrados na Fig. 5.1. Pode-se notar que para valores de c acima de 1.10, a matriz de interpolação torna-se extremamente mal condicionada.

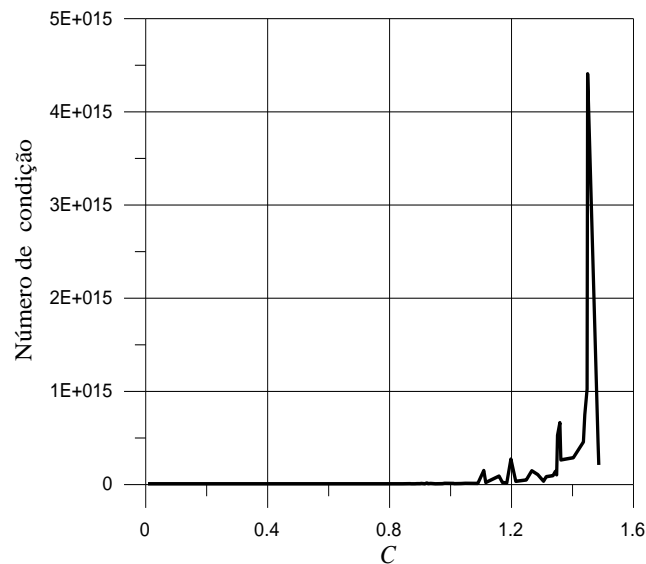


Figura 5.1 – Número de condição de interpolação da matriz A para a interpolação multiquádrica sobre um conjunto de 100 pontos.

Mas a questão importante é que, em geral, será necessário impor uma restrição de segurança no número de condição máximo para um ajuste automático do parâmetro c (por exemplo, $\log_{10}(\text{CN}) \leq 14$). O número de condição da matriz A foi calculado usando a sub-rotina DLFCRG (IMSL library - FORTRAN).

Primeiramente, foram obtidos os resultados pela aplicação da técnica “*Leave-one-out cross validation - LOOCV*” para a construção de uma função (F_{erro}) que apresenta um comportamento similar ao RSME. Observa-se nas Figuras 5.2 a 5.5 que, em geral, há uma semelhança no comportamento dos valores de F_{erro} e do MSE com o aumento do parâmetro c ,

mesmo quando diferentes funções de base radial são empregadas, para a $F6$, foi utilizada multiquádrica em Fig. 5.4 e multiquádrica inversa em Fig. 5.5. Uma exceção é verificada para a função $F3$, Fig. 5.3, onde F_{erro} atinge um comportamento assintótico antes de tornar-se extremamente mal condicionada, quando MSE apresenta um valor mínimo para c entre 0,4 e 0,6 e aumenta posteriormente. Mesmo neste caso, no entanto, uma restrição no número de condição pode ser suficiente para garantir um valor razoável para o parâmetro c em um esquema de ajuste automático. Assim, o esquema proposto por Rippa (1999) pode ser usado para este objetivo.

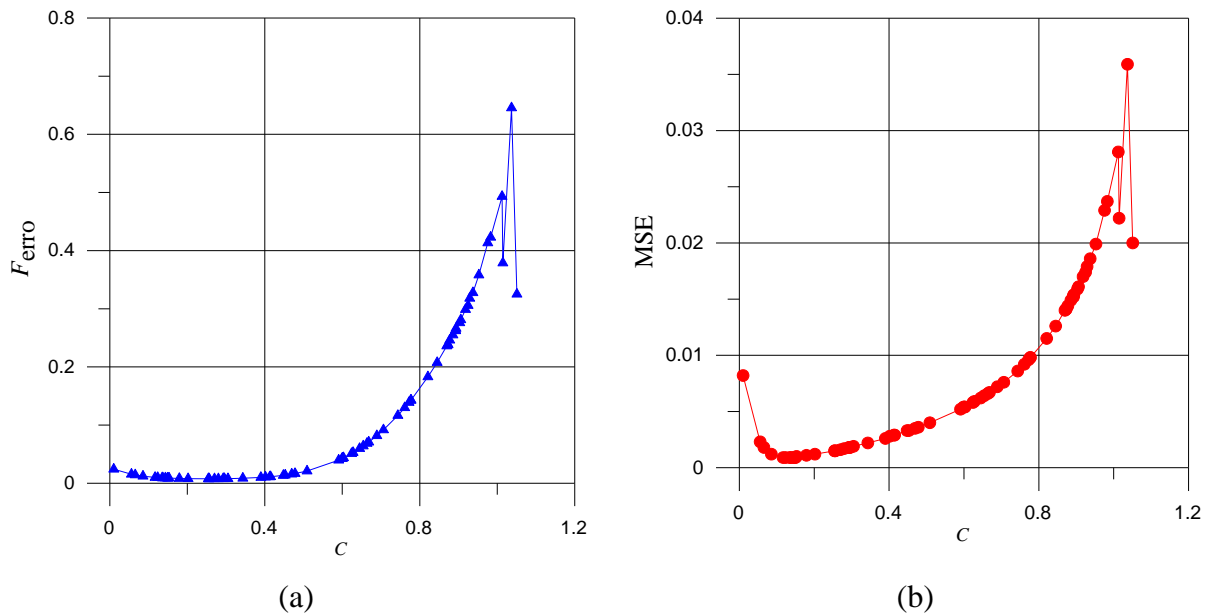


Figura 5.2 – Erros para a interpolação multiquádrica em um conjunto de 100 pontos para a função $F1$: (a) Gráfico de F_{erro} ; (b) MSE como uma função de c .

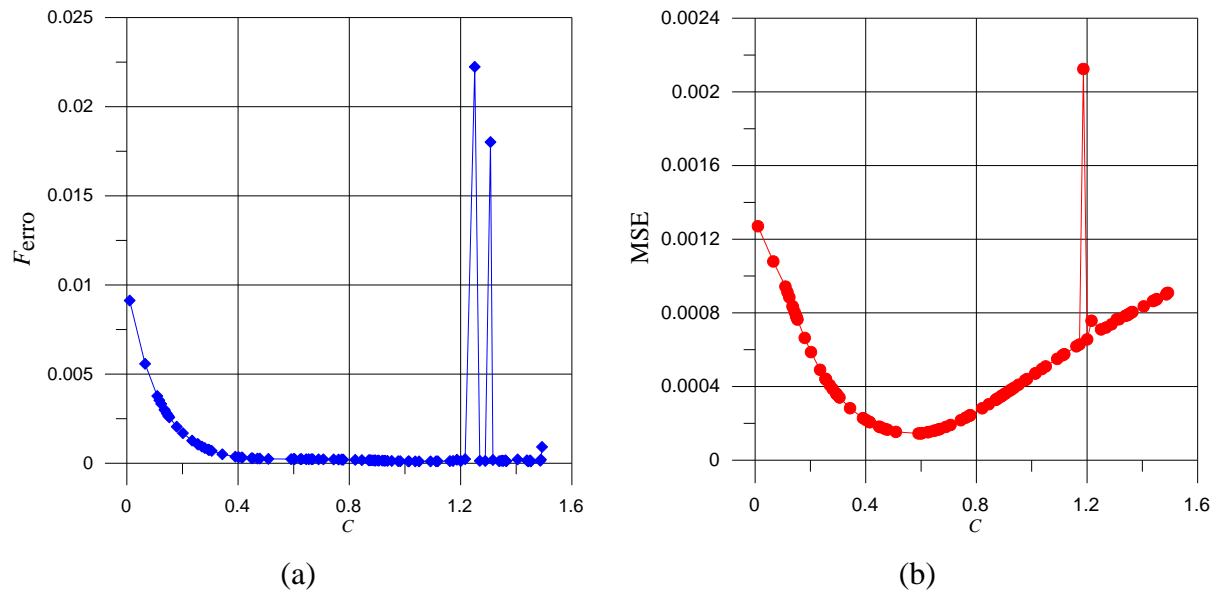


Figura 5.3 – Erros para a interpolação multiquádrica em um conjunto de 81 pontos para a função F_3 : (a) Gráfico de F_{erro} ; (b) MSE como uma função de c .

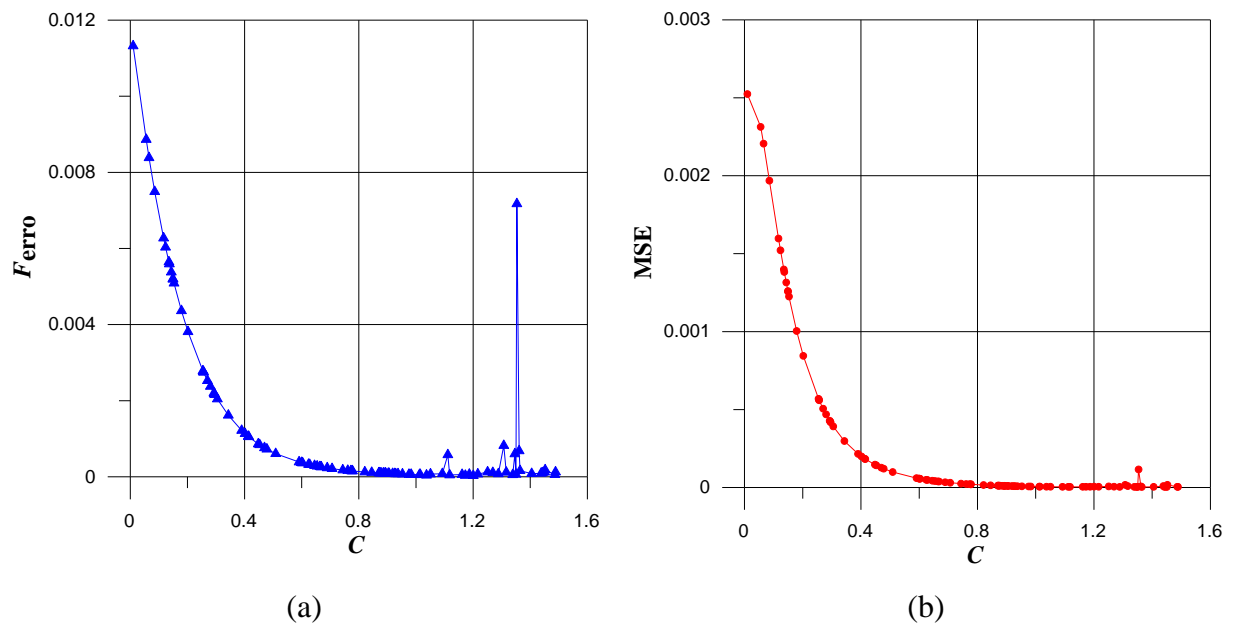


Figura 5.4 – Erros para a interpolação multiquádrica em um conjunto de 100 pontos para a função F_6 : (a) Gráfico de F_{erro} ; (b) MSE como uma função de c .

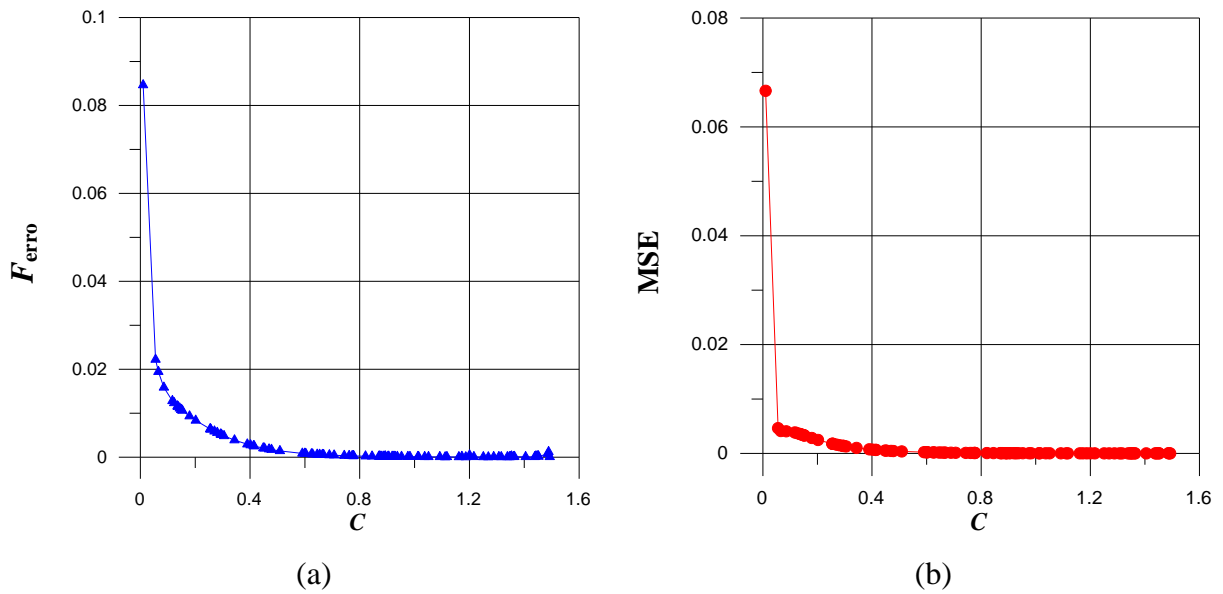


Figura 5.5 – Erros para a interpolação multiquádrica inversa em um conjunto de 100 pontos para a função F_6 : (a) Gráfico de F_{erro} ; (b) MSE como uma função de c .

5.3.2 APLICAÇÃO DO LOOCV

Para a escolha do melhor parâmetro de forma c , a idéia foi aplicar a técnica LOOCV, construir a função F_{erro} e minimizá-la utilizando um algoritmo de otimização. Neste sentido, experimentos foram feitos usando um algoritmo de busca aleatória controlada (CRSA). Uma população de 20 indivíduos aleatoriamente distribuída num intervalo de $[0,01 - 3,01]$ para c foi empregada.

Um esquema de penalidade usado para tratar as restrições sobre o número de condição foi $\log_{10}(\text{CN}) \leq 14$. Para estes experimentos foram consideradas seis funções de teste, Dixon-Szegö (1978), mas somente a multiquádrica inversa foi usada.

Diferentes conjuntos de pontos de dados iniciais baseados em PFC foram usados e listados na Tabela 5.5. Os resultados obtidos para um c ideal, mínimo F_{erro} , RMSE correspondente e número de condição também são mostrados na Tabela 5.5. Para as funções Shekel, dois conjuntos de pontos diferentes foram testados. Pode-se notar que o melhor valor de c depende fortemente do número e distribuição dos pontos de dados.

Tabela 5.5 – Otimização do parâmetro de forma c sobre o erro de interpolação RBF para 10 funções de testes (Rippa, 1999), (Dixon e Dzegö, 1978).

Funções Teste	c ótimo	Conjunto de pontos	F_{erro}	RMSE	Número de Condição
F1	0,1937	81	0,0132	0,2459	7×10^{12}
F3	0,1336	81	0,0057	0,0623	5×10^5
F6	0,0105	81	0,0105	0,0634	9×10^5
Branin	0,1946	4	19,11	46,21	1×10^5
Hartman3	0,2502	8	0,030	0,019	9×10^2
Hartman6	1,01	64	0,000716	0,0151	$5,8 \times 10^3$
Shekel5	0,01/0,0598	16/64	0,0624/0,0535	0,097/0,0902	$1 \times 10^3 / 9 \times 10^3$
Shekel7	0,01/0,0598	16/64	0,073/0,187	0,14/0,12	$1 \times 10^3 / 9 \times 10^3$
Shekel10	0,01/0,0598	16/64	0,079/0,228	0,186/0,149	$1 \times 10^3 / 7 \times 10^3$

5.4 ESTRATÉGIA DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL (OGM) COM VALIDAÇÃO CRUZADA PARA AJUSTE DO PARÂMETRO DE FORMA C

Uma estratégia confiável e eficiente para a otimização global de funções caras foi, então, proposta por Regis e Shoemaker, (2005), usando *thin plate splines*, e esta foi discutida na presente pesquisa, e no trabalho de Manzanares-Filho et al., (2009), utilizando multiquádrica inversa. A estratégia baseia-se na otimização iterativa de metamodelos provisoriamente construídos com o conjunto de pontos calculados com a função cara. O próximo ponto do banco de dados é o ponto ideal do metamodelo sujeito a restrições em suas distâncias a partir dos pontos do banco de dados atual. A estratégia é chamada de otimização global com restrições utilizando metamodelos (OGM). Verificou-se que uma boa escolha de c tem uma forte influência sobre a taxa de convergência da estratégia. Um esquema para ajustar automaticamente o valor de c para melhorar a confiabilidade e robustez da estratégia, é então sugerido nesta tese. Neste sentido, discute-se um método de automatização do c utilizando o método de validação cruzada *leave-one-out* proposta por Rippa (1999).

5.4.1 Aplicação da Estratégia OGM com Validação Cruzada Usando Otimizador Estocástico.

Na aplicação da estratégia OGM, o banco de dados de pontos já avaliados pela função *cost* é atualizado a cada iteração e um novo metamodelo é construído com esses pontos, possivelmente usando um novo valor de *c*. Por outro lado, a forte dependência do melhor valor de *c* sobre o número e a distribuição dos pontos é uma questão importante para o uso do LOOCV no contexto da estratégia OGM. Como a estratégia OGM é iterativa, a maneira como o valor de *c* varia entre as iterações pode ter um impacto em seu desempenho. No entanto, independentemente do modo que esta variação é aplicada, é importante fazer escolhas arbitrárias de *c* desnecessárias. Em outras palavras, o ajuste do valor *c* entre as iterações deve ser automático.

Em princípio, têm-se duas escolhas naturais sobre a forma como o valor de *c* pode variar entre as iterações da estratégia OGM:

(Modo 1) Aplicar o LOOCV a *c* apenas para otimizar o banco de dados inicial, antes de qualquer iteração e usar este valor ideal inicial para todo o processo iterativo;

(Modo 2) Aplicar o LOOCV para otimizar o valor de *c* para cada metamodelo provisório construído ao longo das iterações.

Para testar essas duas opções, aplica-se a estratégia OGM para as seis funções de teste Dixon-Szegö usando o banco de dados inicial construído com PFC. Os resultados estão listados na Tabela 5.6. Para todos os testes, os metamodelos provisórios foram construídos com a multiquádrica inversa e a otimização dos mesmos foi feita com CRSA. Uma população igual a $10(d + 1)$ foi adotada para o CRSA, seguindo uma sugestão de Ali et al., (2004) (*d* é a dimensão do problema). Outros detalhes da implementação são os mesmos que foram feitos nos testes anteriores apresentados na tabela 5.2, seção 5.2.1.

A Tabela 5.6 mostra os resultados obtidos pelo modo 1 para ajuste do *c*. Devido à natureza estocástica do CRSA, a estratégia OGM foi avaliada 20 vezes para cada função e a média dessas avaliações foram obtidas para comparação com estudos anteriores feitos com valores constantes de *c* escolhidos de forma arbitrária. Para as funções Branin, Hartman3 e Hartman6, os resultados são comparáveis aos obtidos na referência Silva et al., (2009). Mas, para funções Shekel o melhor valor de *c* para o banco de dados inicial ($c = 0,01$) leva a uma taxa de convergência significativamente inferior ao observado em Silva et al., (2009). Usando

o melhor valor de c para um conjunto de 64 pontos na tabela 5.6 ($c = 0,0598$), sem qualquer automatismo, os resultados são muito próximos aos de referência Silva et al., (2009), quando um valor $c = 0,05$ foi usado. Como seria de esperar, Modo 1 é altamente dependente do banco de dados inicial e não é recomendável para aplicações gerais. No entanto, quando o tamanho do banco de dados inicial já é representativo, Modo 1 pode ser uma boa escolha.

Tabela 5.6 – Otimização de funções reais usando OGM com Otimização do parâmetro de forma c para 6 funções de teste Dixon-Szegö – Modo 1.

Funções de teste	c ótimo	OGM com LOOCV* (média)	c	OGM (média)	CRSA (média)	TS CRSA (média)
Branin	0,1946	18,8	0,50	19,8	138	100 %
Hartman3	0,2502	30,9	0,50	36,3	113	100 %
Hartman6	1,01	98,5	0,50	102,0	621	55 %
Shekel5	0,01/0,0598	79,2/55,2	0,05	57,0	588	55 %
Shekel7	0,01/0,0598	90,1/59,5	0,05	55,0	553	80%
Shekel10	0,01/0,0598	95,2/46,0	0,05	46,3	427	80 %

LOOCV = *Leave-one-out cross validation*; os valores na coluna indicam o numero de avaliações da função para obter um erro relativo menor do que 1%.

A Tabela 5.7 mostra os resultados obtidos pelo modo 2 para ajuste do c . A estratégia OGM foi avaliada apenas 10 vezes para cada função, devido ao tempo computacional excessivo. O motivo foi à penalização freqüente de grandes números de condição ocorrendo nas iterações anteriores, quando o banco de dados crescia. Torna-se necessário substituir CRSA por outro algoritmo de busca para o ajuste automático de c em futuras investigações do Modo 2, mas o CRSA pode ainda ser utilizado como motor principal do processo de otimização da estratégia. De qualquer forma, os resultados obtidos ainda são bastante competitivos com os das referências Regis e Shoemaker, (2005), Manzanares-Filho et al., (2009) e Silva et al., (2009); alguns detalhes da implementação são apenas uma questão de refinamento.

Tabela 5.7 – Otimização de funções reais usando OGM com Otimização do parâmetro de forma c para 6 funções de teste Dixon-Szegö – Modo 2.

Funções de teste	OGM-LOOCV-CRSA (média)	OGM (média) Silva et al., (2009)	CORS		TS CRSA (média)
			(melhores resultados) Regis e Shoemaker, (2005)	CRSA (média)	
Branin	19,7	19,8	34	138	100 %
Hartman3	35,4	36,3	25	113	100 %
Hartman6	113,3	102,0	104	621	55 %
Shekel5	41,1	57,0	41	588	55 %
Shekel7	45,7	55,0	46	553	80%
Shekel10	55,8	46,3	51	427	80 %

CORS = *Constrained Optimization Response Surface* usado por Regis e Shoemaker, (2005)

Pode-se ver nas Tabelas 5.6 e 5.7 que a estratégia OGM, com ou sem LOOCV, foi capaz de reduzir o número de avaliações da função substancialmente em comparação com a aplicação direta de CRSA (de 4 a até 14 vezes).

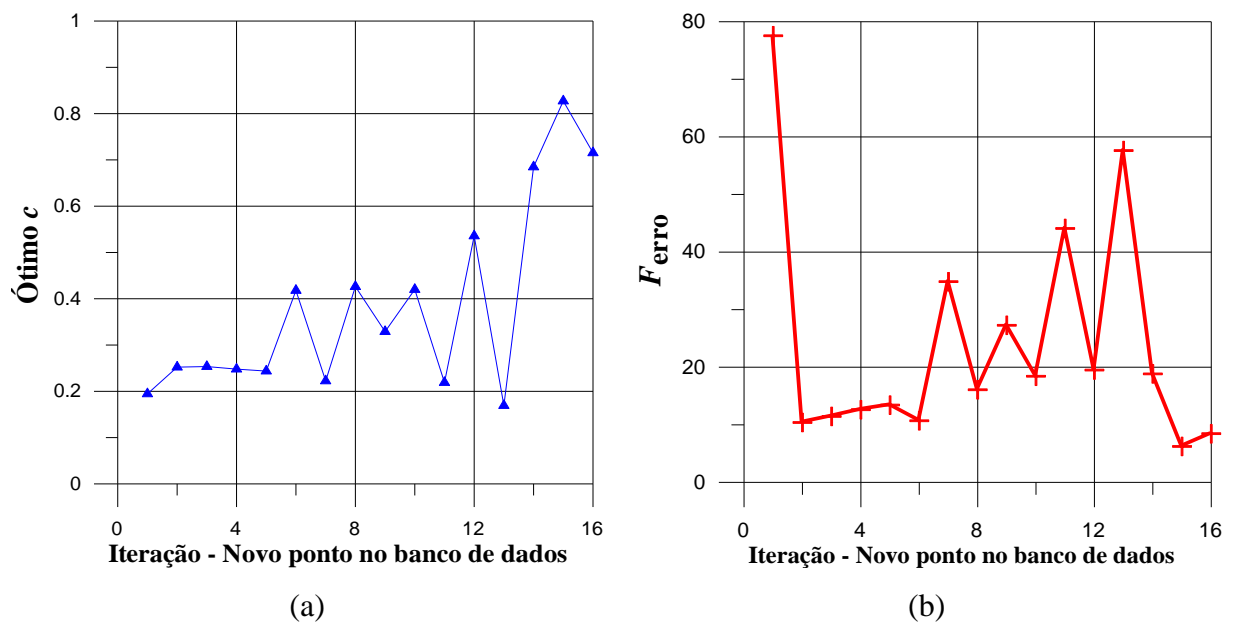


Figura 5.6 – Evolução do processo de otimização para a função Branin no Modo 2:

(a) Ótimo c ; (b) Menor valor do erro (F_{erro}).

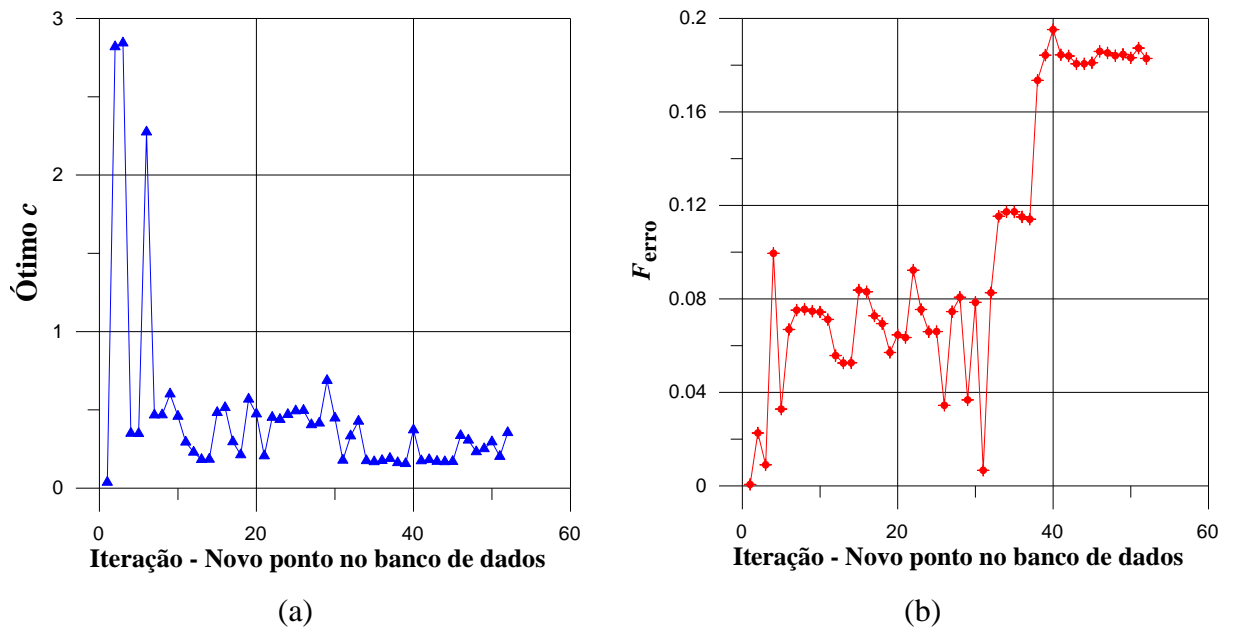


Figura 5.7 – Evolução do processo de otimização para a função Hartman6 no Modo 2:

(a) Ótimo c ; (b) Menor valor do erro (F_{erro}).

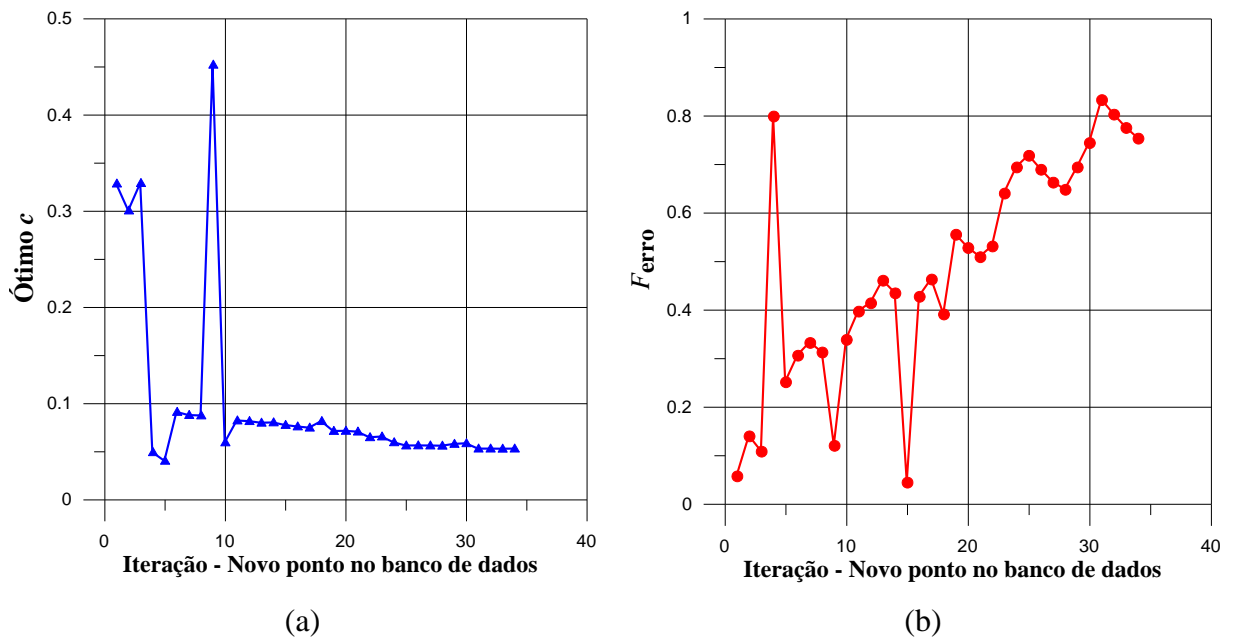


Figura 5.8 – Evolução do processo de otimização para a função Shekel5 no Modo 2:

(a) Ótimo c ; (b) Menor valor do erro (F_{erro}).

Finalmente, a evolução do parâmetro de forma ideal e o valor de erro nas iterações nos moldes do Modo 2 são apresentados para algumas funções. O cálculo correspondente ao menor número de avaliações da função foi considerado. Para a função Branin, Fig. 5.6, há uma tendência de aumento do valor de c e uma diminuição no valor do erro na F_{erro} . Um comportamento totalmente diferente é observado para Hartman6 e funções Shekel5, Fig. 5.7 e Fig. 5.8, respectivamente. Mas verifica-se que oscilações significativas dos parâmetros de forma e erro de aproximação são típicos da evolução de OGM com LOOCV no modo 2. Portanto, uma questão permanece se o Modo 2, variando o valor de c em cada iteração, é a melhor escolha, ou alguma opção melhor é concebível.

Uma investigação numérica foi feita com uma técnica para seleção automática do parâmetro de forma c ótimo de funções de base radial, no contexto de ferramentas de metamodelagem para otimização global. A técnica rápida de *leave-one-out* de validação cruzada (LOOCV), proposto pela Rippa, (1999), foi incorporado no OGM, estratégia de otimização global de funções custosa com base na construção de metamodelos. Testes realizados em algumas funções de referência têm mostrado que escolhas inadequadas do parâmetro de forma c podem ter um impacto negativo sobre a taxa de convergência de OGM. Isso também pode ocorrer se apenas o parâmetro de forma ideal correspondente ao metamodelo inicial de OGM é usado para todo o processo iterativo (Modo 1). A melhor opção é para otimizar o valor do c em cada iteração e usá-lo para construir o metamodelo provisório correspondente (Modo 2). Esta opção tem mostrado ser capaz de produzir taxas de convergência comparáveis aos obtidos com OGM em experimentos anteriores (Manzanares-Filho et al., 2009, Silva et al., 2009), com a vantagem de que uma escolha arbitrária de c torna-se desnecessário. Ainda permanece a questão sobre o melhor modo que se deve usar para variar o parâmetro de forma entre as iterações, ou se uma opção melhor é concebível. Neste sentido, é interessante investigar uma técnica que possa fazer uso do OGM com funções de base radial que contam com a automatização do c por LOOCV. Tal técnica é então investigada na próxima seção, referenciada como OGM-LOOCV (Otimização Global com Base em Metamodelagem utilizando *leave one out cross validation*).

5.4.2 APLICAÇÃO DA ESTRATÉGIA OGM-LOOCV SEM USO DO OTIMIZADOR ESTOCÁSTICO - CRSA

A estrutura geral da estratégia OGM-LOOCV é mantida, porém foram feitas modificações para permitir o ajuste automático do parâmetro de forma c sem o auxílio de algoritmos de otimização para o c . Essas modificações referem-se ao modo de otimização do parâmetro de forma. A técnica de validação cruzada é mantida, porém, para encontrar o melhor valor para c uma subrotina foi implementada para construir um conjunto de valores para c . A técnica LOOCV é empregada sobre estes valores, para encontrar o menor valor do erro e com base neste valor o c correspondente é usado para construir o metamodelo provisório que será otimizado pelo CRSA. Pode-se notar que o CRSA não é mais usado para fazer a tarefa de otimização do parâmetro de forma, ele é apenas usado para encontrar o melhor ponto do metamodelo naquele instante.

O algoritmo para ajuste do parâmetro de forma c inserido dentro do processo de otimização da estratégia OGM no Passo 3.2, disposto na seção 5.2 é apresentado a seguir

Passo 1 - Seleção do conjunto de valores para c : $nc = 100$

Passo 2 - Selecionar o valor mínimo para c : $c_{min} = \sqrt{\frac{nd}{nc}}$.

Passo 3 - Selecionar o valor máximo para c : $c_{max} = \sqrt{nd}$. Sendo nd é a dimensão do problema.

Passo 4 - Construir metamodelos para cada um dos valores de c .

Passo 5 - Construir a função erro F_{erro} , que simula o erro verdadeiro da função original para cada metamodelo, usando validação cruzada, e guardar o metamodelo e o valor de c .

Passo 6 - Comparar o valor do erro da função. Se for o menor entre todos. Selecionar o c e o metamodelo correspondente construído.

Passo 7 - Fim do algoritmo.

Na aplicação do OGM-LOOCV o Modo 2 é escolhido para os testes. Os resultados são mostrados na tabela 5.8 e pode se notar que são tão ou mais competitivos que os resultados obtidos em experimentos anteriores e com os resultados apresentados por Regis e Shoemaker, (2005).

A tabela 5.8 mostra os resultados para 6 funções de teste Dixon-Szegö. Os testes apresentados a partir da terceira coluna foram transcritos da tabela 5.3 para melhor

visualização e facilidade de comparação para as análises. A coluna do valor de c arbitrariamente escolhido foi propositalmente colocada após a segunda coluna. Pois na primeira coluna são apresentados os testes em que a escolha de c é automatizada. O valor de c varia iterativamente, conforme o modo 2 explicado anteriormente. As mesmas configurações (critério de convergência, tolerância, número de indivíduos da população inicial e número de avaliações) usadas nos testes anteriores foram adotadas.

Tabela 5.8 – Comparação da implementação OGM-LOOCV sem o uso de otimizador estocástico para valor adequado de c nas funções de teste Dixon-Szegö

Função de Teste	OGM-LOOCV (média)	OGM-LOOCV-CRSA (média)	c	OGM* (média)	OGM** (média)	OGM*** (média)	CORS	
							(Regis e Shoemaker (2005))	CRSA (média)
Branin	21,2	19,7	0,50	19,8	18,4	51,7	34 / 40	138
Goldstein-Price	46,0	-	0,50	46,5	47,1	59,7	49 / 64	257
Hartman3	49,3	35,4	0,50	36,3	33,1	46,7	25 / 61	113
Shekel5	62,5	41,1	0,05	57,6	103,4	142,8	41 / 52	621
Shekel7	64,5	45,7	0,05	57,3	64,5	94,1	46 / 64	588
Shekel10	73,9	55,8	0,05	46,0	62,8	76,6	51 / 64	553
Hartman6	132	113,3	0,50	102,0	62,6	82,6	104 / 108	427

Os valores na tabela indicam o número de avaliações da função para obter um erro relativo menor que 1%

* Resultado para multiquádrica inversa

** Resultado para multiquádrica inversa com um polinômio linear

*** Resultado para *thin plate splines* com um polinômio linear (sem a necessidade do parâmetro de forma)

Os resultados obtidos após 20 execuções da estratégia OGM-LOOCV mostram que são competitivos quando comparados com os resultados obtidos nos testes anteriores e que estão dispostos nas colunas 4 a 6 da tabela 5.8, onde a escolha de c foi feita arbitrariamente, também são competitivos com os resultados obtidos da literatura apresentados na coluna 7.

É importante observar que os resultados dispostos na 2ª coluna foram significativamente melhores. Estes resultados foram àqueles obtidos com a estratégia OGM-LOOCV utilizando para otimização do c o CRSA. A restrição no número de condição foi $\log_{10}(\text{NC}) \leq 14$.

Enquanto que para os resultados na 1ª coluna a restrição no número de condição foi $\log_{10}(\text{NC}) \leq 30$).

5.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

As principais contribuições relevantes desenvolvidas nesta pesquisa complementam e podem também servir de auxílio para diversos trabalhos apresentados na revisão bibliográfica. Essas contribuições juntamente com a ferramenta computacional desenvolvida, tornam-se um trabalho bastante importante para a pesquisa como também para obtenção de resultados práticos reais.

5.5.1 Algoritmos Estocásticos

Diversos fatores que impossibilitam o uso de algoritmos determinísticos na aplicação em sistemas de engenharia já discutidos anteriormente contribuem para a análise da utilização de algoritmos estocásticos. Há uma tendência cada vez mais forte do uso de algoritmos estocásticos populacionais, como os algoritmos genéticos. Eles são mais adequados para resolver problemas em que as técnicas de programação não lineares padrão são ineficientes, computacionalmente caras e na maioria dos casos, encontram ótimos relativos próximos do ponto inicial. Em muitos casos eles podem encontrar uma solução ótima global com alta probabilidade.

A razão para se utilizar algoritmos estocásticos de forma ampla em vários domínios de aplicação são:

- São robustos e podem capturar o ótimo global, sem ficar preso a ótimos locais.
- Podem incorporar soluções de qualquer *software* de avaliação, como por exemplo, CFD.
- Podem manipular problemas mono e multiobjetivo.
- Podem ser facilmente paralelizados, de modo que diferentes membros da população atual podem ser executados simultaneamente em diferentes processadores de rede.

Por outro lado, a desvantagem se caracteriza pelo elevado número de avaliações da função-objetivo que exige um considerável custo computacional, fazendo se necessário o uso de metamodelos.

A escolha por algoritmos estocásticos foi motivada devido à diversidade de *solvers* acadêmicos quanto comerciais, de fácil manipulação e por permitir que trabalhos futuros possam ser continuados a partir deste.

5.5.2 Metamodelos

A presente pesquisa apresenta uma abordagem inovadora para aplicar em conjunto com as técnicas de otimização. Refere-se à construção e utilização de metamodelos. Os metamodelos são construídos ao longo das iterações do código OGM, sendo melhorados a cada iteração. Porém melhorar o metamodelo não é o objetivo da estratégia, mas sim utilizá-los para encontrar um ponto de avaliação candidato, que será avaliado pela função cara e será inserido no banco de dados para a construção do próximo novo metamodelo. O movimento do algoritmo percorre regiões onde o possível ponto ótimo global possa estar. Um processo baseado no cálculo da distância dos pontos de avaliação candidatos em relação aos pontos previamente avaliados, obedecendo a um critério heurístico de *padrão de busca* é implementado para induzir a procura pelo melhor ponto global.

A grande vantagem no uso de metamodelos é que são muito úteis no processo de otimização por reduzir consideravelmente o número de avaliações da função cara.

5.5.3 Funções de Base Radial

A presente pesquisa apresenta uma metodologia simples para a representação de funções custosas através da construção de metamodelos. Os metamodelos são construídos utilizando funções de base radial. Foi comprovado por muitos trabalhos da literatura que tais funções são eficientes na reconstrução de funções. São baseadas na distância e no erro residual nulo, pois faz uso de interpolação dos pontos. Pode-se usá-las também para reconstruir funções com múltiplas variáveis.

A contribuição que difere esta pesquisa dos demais trabalhos publicados sobre o assunto, é o procedimento de automatização do parâmetro de forma c que algumas das funções de base radial, como por exemplo, a multiquádrica e a multiquádrica inversa. Porém outras FBRs podem também fazer uso do c , como a *thin plate splines*. É importante ressaltar que tal automatização do c torna-se desnecessária a escolha arbitrária do valor de c . Este recurso foi estudado e inserido dentro da estratégia de otimização global por perceber que a convergência do algoritmo era fortemente influenciado por tal parâmetro de forma.

5.5.4 Técnicas Automáticas de Escolha do Parâmetro de Forma C

Para a automatização do parâmetro de forma c , várias técnicas foram estudadas, porém a técnica mais rápida e eficiente foi proposta por Rippa (*leave-one-out cross validation*) e adaptada nesta pesquisa. Porém foram necessários alguns ajustes computacionais para a aplicação dessa técnica. Ela permite criar uma função que simula o erro da aproximação. No entanto, para encontrar o menor erro que tem o valor de c adequado, uma rotina simples de busca do c adequado foi implementada com base no dimensionamento da função custosa.

5.5.5 Integração de Processos

Para otimizar sistemas complexos em engenharia foi empregada uma metodologia de integração de processos. Essa metodologia consiste em integrar diversos programas escritos em diferentes linguagens de programação. É uma contribuição bastante significativa para conseguir desenvolver projetos ótimos em engenharia, principalmente aqueles os que possuem domínios tridimensionais.

Um exemplo de integração de processos é usado no processo de otimização de turbinas hidráulicas axiais. É necessário a concepção do projeto inicial do rotor, com base na metodologia de Bran e Souza (1980). Define-se o domínio computacional do rotor, isto é, a construção automática de malhas e geometrias parametrizadas através de arquivo tipo *script*, com comandos de edição escritos na linguagem Tcl/Tk, que será interpretado pelo programa comercial ICEM-CFD[®], em modo *batch*, resultando assim na construção da geometria e malha do rotor. Para a solução do escoamento no rotor da turbina, utiliza-se o software FLUENT[®], em que as condições de contorno são introduzidas através de arquivos auxiliares

tipo *Journal file*. Para a otimização do rotor, é realizada a integração de todos os processos (OGM→Script.dat→ICEM-CFD[®]→Journal.file→Fluent[®]) que podem ser feitos utilizando o programa comercial ModeFRONTIER[®] ou uma plataforma em FORTRAN[®] com algoritmos de otimização desenvolvidos de fácil gerenciamento. Na pesquisa em questão utiliza-se a estratégia OGM e OGM-LOOCV implementada em FORTRAN[®].

Capítulo 6

APLICAÇÕES EM SISTEMAS COMPLEXOS DE ENGENHARIA – ÁREA: TURBOMÁQUINAS

Dentro das áreas da engenharia mecânica, o projeto das máquinas de fluxo tem sido explorado extensivamente através de inúmeras publicações disponíveis nos diversos meios de comunicação. Muitas dessas análises foram desenvolvidas com base em modelos unidimensionais com auxílio de correlações semi-empíricas para a previsão do seu campo de funcionamento. Entretanto, atualmente técnicas de otimização aplicadas a problema de projeto inverso e o uso da Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) tornam-se ferramentas eficientes para aprimorar projetos. Neste capítulo serão apresentadas aplicações das técnicas de otimização em grades de turbomáquinas (2D) e em rotores axiais de turbinas hidráulicas (3D).

6.1 MÉTODOS DOS PAINÉIS HESS & SMITH PARA O CÁLCULO DO ESCOAMENTO EM GRADES

Grades lineares são retificações de cortes cilíndricos em máquinas de fluxo axiais, como mostra a Fig. 6.1. Análises em grades representam uma ferramenta fundamental no projeto de rotores. Muitos esforços têm sido empregados no sentido de alcançar projetos otimizados

aplicados em aerodinâmica de grades e rotores objetivando alcançar eficiências máximas, e assim controlar ou reduzir as perdas no escoamento.

Modelos matemáticos em 2-D, que representam o campo de escoamento na grade com base em formulações diferenciais, são eficientes, porém, de custo computacional elevado. De custo mais elevado ainda são modelos em 3-D, que podem representar a complexidade física do escoamento no rotor, como os campos de escoamentos primários e secundários, regiões de dissipação de energia nas paredes do topo e da base da palheta. Muitos parâmetros geométricos e cinemáticos do escoamento devem ser analisados de forma simultânea, enquanto se procura uma solução ótima que satisfaça as características no melhor ponto de projeto. Tal análise demanda um alto custo computacional, principalmente quando as variáveis são determinadas através de geração de malhas computacionais e soluções do campo de escoamento através de técnicas de CFD.

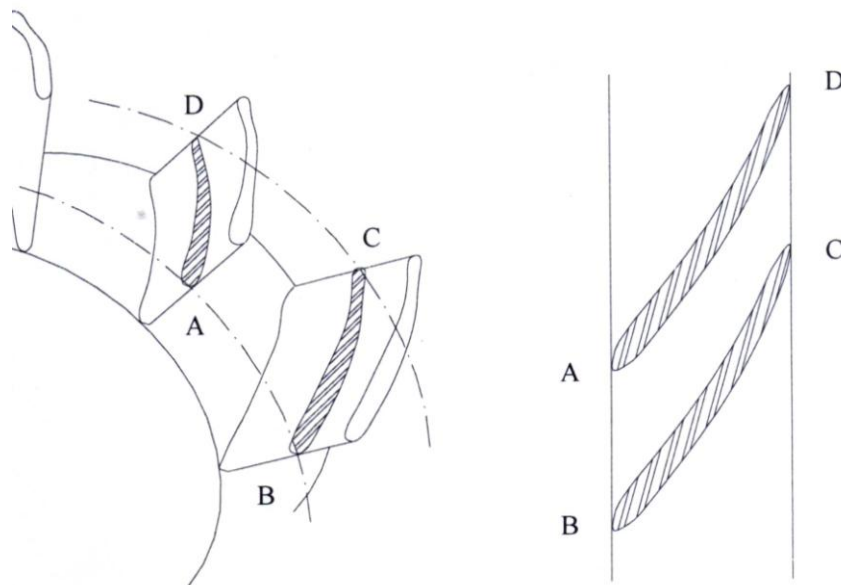


Figura 6.1 - Grade representativa de um rotor axial

Uma maneira de conseguir soluções rápidas e eficientes é através do uso de programas econômicos, como o método dos painéis. Por outro lado, para fins de otimização é importante o uso de técnicas de multiprocessamento e de metamodelos integrados à algoritmos de otimização (Manzanares-Filho et al., 2009).

No sentido de otimizar a grade, será utilizado um código computacional de baixa fidelidade (Ramirez, 2003) com base no método dos painéis de Hess & Smith (1967) para solução do escoamento, com modificações para prever as regiões de separação, onde os efeitos viscosos são introduzidos por meio das velocidades de transpirações normais, obtidos do cálculo de camada-limite na forma integral. Esta metodologia permite uma solução eficiente e rápida na obtenção de variáveis aerodinâmicas locais e globais na grade, como as distribuições de pressões, ângulo de deflexão e os coeficientes de arrasto e de sustentação. Neste item será apresentada uma descrição sucinta do método dos painéis de Hess & Smith, sobretudo no cálculo dos coeficientes de arrasto e sustentação. Uma descrição detalhada do método pode ser encontrada nos trabalhos de Ramirez (2001), Ramirez e Manzaneres-Filho (2005).

São consideradas como variáveis de projeto na grade: ângulo de montagem $\beta(x_1)$, arqueamento (x_2) e o passo da grade $t(x_3)$. O arqueamento do aerofólio é definido com base na serie NACA-65. Tem-se como função-objetivo maximizar a relação de C_l/C_d , mais uma função de penalidade para a deflexão da grade $\Delta\beta = \beta_1 - \beta_2$. (Vide Fig. 6.2).

Tratando-se de grades, é importante que ao mesmo tempo em que for alcançada a máxima relação de sustentação e arrasto, também se deve considerar a máxima deflexão da grade e é por esta razão que é introduzida uma função penalidade. Nesta condição, as turbomáquinas axiais do tipo geradoras, normalmente operam nas condições nominais com áreas significantes de separação de camada-limite (em torno de 15% do comprimento da corda). Este fato foi observado por Schlichting (1959) e Lieblein (1959), e confirmado teoricamente pelas análises de camada-limite e resultados experimentais em grades de túneis de vento. Sendo assim é importante que seja considerado o efeito de separação da camada-limite, principalmente no lado de sucção.

Uma das técnicas clássicas para a determinação do campo de escoamento em grades de turbomáquinas é através do método dos painéis. Consiste na distribuição de $N+1$ pontos sobre o contorno do perfil, inclusive sobre o bordo de fuga, numerados em sentido horário partindo do bordo de fuga pelo lado de pressão, contornando o bordo de ataque, e terminando no bordo de fuga pelo lado de sucção. As uniões desses pontos por segmentos de retas definem um polígono de N lados, cada lado sendo denominado de painel.

O método dos painéis de Hess & Smith (1967) consiste na distribuição de singularidades do tipo fonte e vórtice, distribuídos nos pontos centrais de cada painel, com uma distribuição uniforme de vórtices e de fontes variáveis a serem determinados. Entretanto, uma distribuição de vórtices de intensidade uniforme ao longo do perfil dificulta a aplicação correta da condição de Kutta, que exige $\gamma=0$ no bordo de fuga. Assim, definiu-se uma relação de forma a suavizar o carregamento de vórtices na região do bordo de fuga. A distribuição de vórtices adotada é dada na forma: $\gamma(s) = \gamma_{\max} F(s)$, onde $F(s) = \frac{1}{2} \left[1 + \text{sen} \left[\pi \left(\frac{2s}{s_l} - \frac{1}{2} \right) \right] \right]$, (Ramirez e Manzanares-Filho, 2005).

A grade é formada por perfis idênticos igualmente espaçados e de um passo t , com comprimento de corda l e ângulo de montagem β em relação ao eixo x (vide Fig. 6.2).

Definido o campo de velocidades \vec{W} relativo à grade, onde são consideradas as hipóteses de escoamento bidimensional, permanente, incompressível e potencial. Os parâmetros de escoamento são representados pelos ângulos do mesmo na entrada e na saída da grade, β_1 e β_2 , pelo seu ângulo de deflexão $\Delta\beta = (\beta_1 - \beta_2)$ e pelas velocidades na entrada e na saída \vec{W}_1 e \vec{W}_2 . A velocidade do escoamento não-perturbado é dada pela média das velocidades de entrada e saída: $\vec{W}_\infty = (\vec{W}_1 + \vec{W}_2) / 2$.

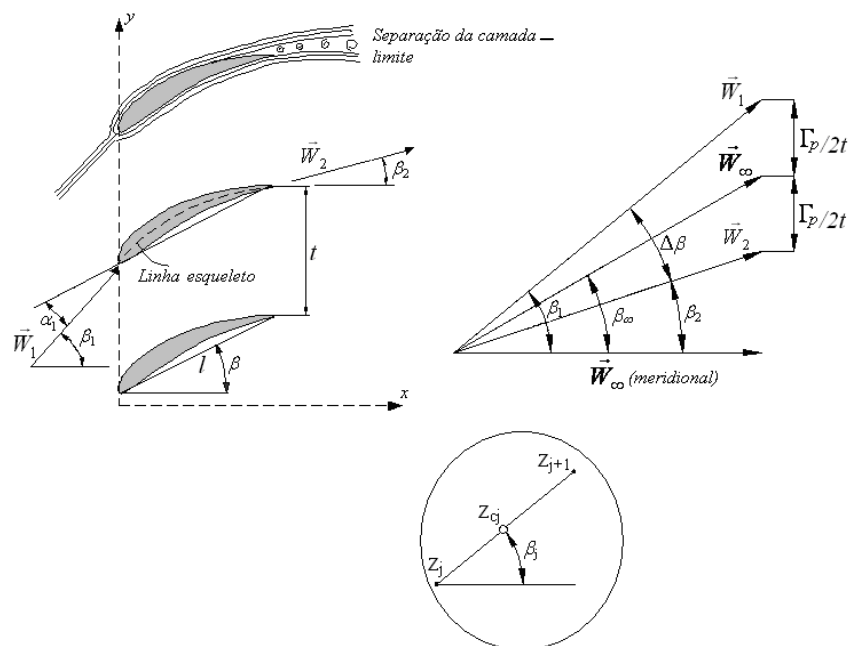


Figura 6.2 - Grade linear, diagrama de velocidades e painel (Ramirez, 2001).

A técnica de Hess & Smith (1967) para perfis em grades representativas das turbomáquinas costuma fixar a velocidade na entrada da grade \vec{W}_1 e o ângulo de entrada β_1 medido em relação à direção axial.

Para introduzir esta formulação, adiciona-se o campo de escoamento não-perturbado \vec{W}_∞ na equação para a velocidade complexa conjugada, induzida pelas distribuições de fontes e vórtices de todos os painéis. Logo:

$$\vec{W}(z_{c_j}) = \vec{W}_\infty + \sum_{k=1}^N \frac{g_k e^{-i\beta_k}}{2\pi} \log \left[\frac{\sinh \frac{\pi(z_{c_j} - z_k)}{t}}{\sinh \frac{\pi(z_{c_j} - z_{k+1})}{t}} \right] \quad (6.1)$$

em que g_k representa uma densidade linear para a combinação fonte-vórtice $g(s) = \sigma(s) + i\gamma(s)$, e para $j = k$ é necessário considerar um efeito especial de auto-indução (Ramirez e Manzanares-Filho, 2005).

Dos triângulos das velocidades na Figura 6.2, pode-se obter a relação entre as velocidades complexas conjugadas média \vec{W}_∞ e na entrada \vec{W}_1 , através do cálculo da circulação obtida através das velocidades tangenciais no contorno do perfil:

$$\vec{W}_\infty = \vec{W}_1 + i \frac{\Gamma}{2t} \quad (6.2)$$

Substituindo a Eq. (6.1) na Eq. (6.2) e calculando em seguida as componentes normais de velocidades, W_n , e tangencial, W_t , no contorno do perfil no ponto de controle Z_{c_j} resultam as expressões para as velocidades, tangenciais e normais, nos pontos de controle, em termos da velocidade na entrada W_1 , com o efeito adequado da distribuição de vórtices F :

$$W_{t_j} = \mathbf{Re} \left\{ \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k e^{-i\beta_k}}{2\pi} \log(K_{jk}) e^{i\beta_j} + \gamma_{\max} i \left(\sum_{k=1}^N \frac{e^{i\beta_k}}{2\pi} \log(K_{jk}) e^{i\beta_j} F_j + P e^{i\beta_j} \right) + W_1 e^{-i\beta_1} e^{i\beta_j} \right\} \quad (6.3)$$

$$W_{nj} = -\mathbf{Im} \left\{ \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k e^{-i\beta_k}}{2\pi} \log(K_{jk}) e^{i\beta_j} + \gamma_{\max} i \left(\sum_{k=1}^N \frac{e^{i\beta_k}}{2\pi} \log(K_{jk}) e^{i\beta_j} F_j + P e^{i\beta_j} \right) + W_1 e^{-i\beta_1} e^{i\beta_j} \right\} \quad (6.4)$$

$$K_{jk} = \left[\frac{\sinh(z_{c_j} - z_k) \pi / t}{\sinh(z_{c_j} - z_{k+1}) \pi / t} \right], \quad P = \frac{\sum_{k=1}^N F_j \Delta s_j}{2t} \quad (6.5)$$

A circulação em torno da pá é representada por uma integração numérica que faz uso da função peso definida por:

$$\Gamma_{pá} = \gamma_{\max} \sum_{k=1}^N F_j \Delta s_j \quad ; \quad \text{sendo } \Delta s_j = \|z_{j+1} - z_j\| \quad (6.6)$$

As Equações (6.3) e (6.4) podem ser escritas na forma de equações matriciais:

$$\{W_t\} = [B]\{\sigma\} + \gamma_{\max} \{D\} + \{W_{tan}^1\} \quad , \quad (6.7)$$

$$\{W_{nt}\} = [A]\{\sigma\} + \gamma_{\max} \{C\} + \{W_{nor}^1\} \quad , \quad (6.8)$$

[A] e [B] são matrizes dos coeficientes de influência normal e tangencial, respectivamente, que dependem da geometria do perfil, do passo da grade, do ângulo de montagem e do número de painéis; {D} e {C} representam, respectivamente, os vetores de influência tangencial e normal dos vórtices; $\{W_{tan}^1\}$ e $\{W_{nor}^1\}$ são os vetores das componentes normal e tangencial do escoamento na entrada da grade; $\{W_t\}$ e $\{W_{nt}\}$ são os vetores das velocidades normais e tangenciais, respectivamente, nos pontos de controle do perfil.

É neste ponto que se faz a análise da resolução das incógnitas γ_{\max} (vórtices) e σ (fontes) pela aplicação simultânea de duas condições: a primeira é a condição de contorno de impenetrabilidade, que exige velocidade normal nula sobre a superfície do corpo $\{W_{nt}\} = 0$; a segunda é a condição de Kutta clássica, que exige escoamento que não contorne o bordo de

fuga, a qual pode ser aproximadamente imposta exigindo que as velocidades tangenciais nos pontos de controle sobre os painéis do bordo de fuga sejam iguais, mas em sentido contrário, $W_m = -W_{tl}$.

Assim, introduzindo estes conceitos na Eq. (6.8), isolando $\{\sigma\}$ e substituindo na Eq. (6.7), tem-se a solução potencial para a distribuição de velocidades tangenciais em torno do perfil.

$$\{W_t\} = -[B][A]^{-1}\{W_n^\infty\} + \{W_t^\infty\} + \gamma_{\max} \{[B][A]^{-1}\{C\} + \{D\}\} \quad (6.9)$$

Determinando γ_{\max} , pode-se então determinar as distribuições de velocidades tangenciais e as intensidades de fontes.

Para determinar o valor de γ_{\max} , é aplicada a condição de Kutta, $W_{t1} + W_{tN} = 0$, em que o índice 1 refere-se à velocidade calculada no ponto de controle no primeiro painel do lado de pressão, (com sinal trocado) e N, ao último ponto de controle do lado de sucção, ou seja,

$$\gamma_{\max} = -\frac{-[B][A]^{-1}\{W_n^\infty\} + \{W_t^\infty\}|_N - [B][A]^{-1}\{W_n^\infty\} + \{W_t^\infty\}|_1}{[B][A]^{-1}\{C\} + \{D\}|_N + [B][A]^{-1}\{C\} + \{D\}|_1} \quad (6.10)$$

o coeficiente de pressão C_p para os casos de perfis dispostos em grades lineares será calculado em relação à velocidade na entrada do escoamento, isto é:

$$C_{p1} = 1 - \left(\frac{W_t}{W_1}\right)^2 \quad (6.11)$$

6.1.1 Transpiração – Região sem Separação da Camada-Limite (CL)

Através de técnicas de interação viscoso/não-viscoso, é possível realizar o acoplamento entre o escoamento potencial e viscoso de forma a se obterem as tensões viscosas na parede para o cálculo do arrasto e da sustentação.

Um aspecto da interação entre a camada-limite viscosa e o escoamento externo não-viscoso é o aparecimento de uma velocidade normal externa que depende da espessura de deslocamento da camada-limite, denominada velocidade de “*transpiração*”, desenvolvida por Lighthill (1958), para representar a velocidade de transpiração:

$$W_{nt} = \frac{d}{ds}(W_t \delta^*) \quad (6.12)$$

em que W_t é a distribuição de velocidades tangenciais do lado externo da camada-limite, calculada pelo modelo potencial, $\delta^*(s)$ é a distribuição da espessura de deslocamento, obtida através do cálculo da camada-limite, e s é a coordenada natural em torno do perfil.

A teoria da camada-limite mostra a existência de um deslocamento da linha de corrente no escoamento externo, originado pelos efeitos viscosos e definido pela espessura de deslocamento da camada-limite, que representa um déficit de fluxo de massa do escoamento exterior. Esse descolamento pode ser representado no cálculo do escoamento potencial externo pela alteração da condição de contorno de forma a levar em conta a Eq. (6.12) na Eq. (6.8).

Para a determinação da distribuição da espessura de deslocamento δ^* , da espessura de quantidade de movimento θ , do coeficiente de atrito superficial C_f e do ponto de separação, resolve-se numericamente a equação da quantidade de movimento de Von Kármán, conhecida uma distribuição de velocidades equivale a especificar o gradiente de pressão. Para a solução dessa equação, são estabelecidos os seguintes métodos e critérios: o método integral de Thwaites (1949) para a região de camada-limite laminar, o critério de *Michel* para a transição laminar – turbulenta e o método de Head (1959) para a região de camada-limite turbulenta. Na separação turbulenta, adotou-se o valor do fator de forma $H = 2,4$. O código computacional para o cálculo da camada-limite foi obtido do trabalho de Cebeci e Bradshaw

(1977). A formulação matemática da camada-limite, utilizada neste trabalho, pode também ser encontrada em Moran (1984) e Brederode (1997).

Esta metodologia de interação viscoso–não viscoso pode ser utilizada em situações em que se tem ângulos de incidência moderados, sem a formação da região de separação da camada-limite.

6.1.2 Injeção de Vazão – Região com Separação Camada-Limite (CL)

Segundo Hayashi e Endo (1977), é possível quantificar a vazão fictícia alocada na região de descolamento a partir de relações geométricas do perfil. A intensidade de vazão injetada na região de separação da camada-limite é dada por:

$$\{W_{nd}\} = W_s \{K\}; \quad \{K\} = \frac{2f(\beta_u, \beta_l)\{S\}}{l_{sp}} \quad (6.13)$$

$\{W_{nd}\}$ é o vetor de velocidades normais na região de separação da camada-limite, W_s é a velocidade de separação calculada através do código integral de camada-limite, $\{S\}$, é o vetor das coordenadas locais da região descolada a partir do ponto de separação, l_{sp} distância do ponto de separação do bordo de fuga e $f(\beta_u, \beta_l)$ função definida por Hayashi e Endo (1977), como:

$$f(\beta_u, \beta_l) = 0,25 + 0,55 \cos\left(\frac{\beta_u + \beta_l}{2}\right) + 1,70 \sin\left(\frac{\beta_u - \beta_l}{2}\right) - 1,26 \cos\left(\frac{\beta_u + \beta_l}{2}\right) \sin\left(\frac{\beta_u - \beta_l}{2}\right) \quad (6.14)$$

Nas Eqs. (6.8) e (6.13) verifica-se que, tanto a intensidade máxima do vórtice γ_{max} , como a velocidade de separação W_s são incógnitas. Para determiná-las, modifica-se a condição de Kutta, fazendo com que a velocidade no ponto de separação W_s seja idêntica à velocidade do bordo de fuga do lado inferior: $W_s = W_{psep} = -W_1$.

A extensão será válida para tratar qualquer porção de uma camada-limite sem descolamento, sendo os efeitos viscosos correspondentes quantificados através da técnica da transpiração. Já na região descolada, a extensão será válida unicamente para as situações de separação do lado de sucção do perfil (extradorso): $\{W_n\} = \{W_{nd}\} + \{W_{nt}\}$, $\{W_{nd}\} = W_s \{K\}$,

em que os elementos do vetor “transpiração” $\{W_{nt}\}$ são nulos na região descolada, enquanto os elementos do vetor “injeção” $\{W_{nd}\}$ são nulos na região colada, resultando assim um vetor completo de velocidades normais em todo o contorno do corpo aerodinâmico W_n . Sendo assim é possível substituir a condição de contorno de W_n na Eq.(6.7).

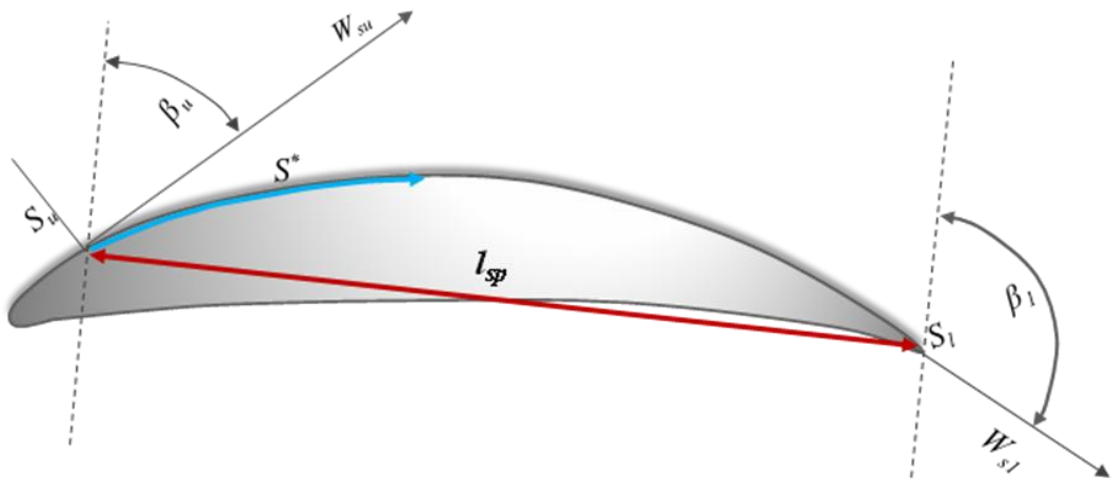


Figura 6.3 - Definição das componentes tangenciais de velocidade (Hayashi 1977).

O valor do coeficiente de pressão Cp_1 é calculado levando-se em conta as componentes das velocidades normais e tangenciais, com relação à velocidade na entrada da grade W_1 .

$$Cp_1 = 1 - \left(\frac{W_t}{W_1} \right)^2 - \left(\frac{W_n}{W_1} \right)^2 \quad (6.15)$$

6.1.3 Coeficientes de Arrasto

Com base nos trabalhos de Speidel (1954) e Schlichting (1959), o coeficiente de perdas Eq. (6.16), é dado pela função Eq. (6.17):

$$\bar{\omega}_1 = \frac{\lambda C_{d_1}^*}{\cos \beta_\infty} \quad (6.16)$$

$$C_{d_1}^* = 2 \theta_{bf} \frac{\cos^2 \beta_1}{\cos^3 \beta_2} \cos \beta_\infty \quad (6.17)$$

em que θ_{bf} é a espessura total de quantidade de movimento das camadas viscosas no bordo de fuga do lado de pressão e sucção, $\theta_{bf} = \theta_{bf(\text{pressão})} + \theta_{bf(\text{sucção})}$, parametrizadas com relação à corda l do perfil. A Eq. (6.16) indica que qualquer um dos coeficientes, $C_{d_1}^*$ ou $\bar{\omega}$, pode ser usado para quantificar os processos dissipativos da grade. Note-se que $\bar{\omega}$ decresce com a razão de solidez λ e, no caso de perfil isolado ($\lambda = 0$), ocorre arrasto, mas não perdas.

Speidel (1954) através de análises teóricas e experimentais obteve uma correlação empírica para a determinação da espessura da quantidade de movimento adicional devido à separação da camada-limite do lado de sucção do perfil aerodinâmico θ_{sep} :

$$\theta_{sep} = \frac{1}{2} y_{iA} \left[\left(\frac{W_s}{W_2} \right) - 0,9 \right] \quad (6.18)$$

em que W_s , é a velocidade de separação calculada, W_2 velocidade na saída da grade e y_{iA} a distância da posição do ponto de separação na superfície do perfil até linha média de esqueleto do lado de sucção, mais o de lado de pressão ($y(\text{sucção})A + y(\text{pressão})A = y_{iA}$).

O valor da espessura da quantidade de movimento na região de separação pode ser acrescentado, de forma a se obter uma relação para o cálculo do coeficiente de arrasto total, resultando:

$$C_{d_1} = 2 (\theta_{bf} + \theta_{sep}) \frac{\cos^2 \beta_1}{\cos^3 \beta_2} \cos \beta_\infty \quad (6.19)$$

em que θ_{bf} deve agora ser interpretada como sendo a soma da espessura de quantidade de movimento no ponto de separação com a espessura de quantidade de movimento no bordo de fuga do lado de pressão.

Por outro lado, sabe-se que a força de arrasto total é dada pela soma do arrasto de pressão e do arrasto de atrito viscoso. Essas parcelas podem ser calculadas pela integração de pressões e de tensões cisalhantes resultantes dos códigos de cálculo potencial e de camada-limite. Todavia o processo de integração das tensões de atrito de pressões é freqüentemente, pouco confiável, estando sujeito a erros numéricos de difícil controle (“ruídos numéricos”), que dependem fortemente da discretização e dos parâmetros cinemáticos. No caso de grade, a situação se agrava, pois a força de arrasto é definida pelas direções da velocidade W_∞ , que é resultante do cálculo: pequenos erros na determinação dessa direção podem introduzir grandes erros na pequena componente de arrasto, sem afetar substancialmente a componente de sustentação que é dominante. No caso de perfis isolados, a situação é menos crítica, pois a direção de W_∞ é estabelecida “a priori”. Diante desses fatos, é desejável que o coeficiente de arrasto seja calculado através de formulações alternativas, como a apresentada nos parágrafos anteriores, Eq. (6.19), fazendo uso dos valores de espessura de quantidade de movimento, relações geométricas da grade e ângulo do escoamento.

Para o cálculo do coeficiente de sustentação foi utilizada a técnica de integração de forças de pressão e das tensões de cisalhamento da direção normal.

6.1.4 Aplicação das Técnicas de Metamodelagem em Grades Utilizando o Método dos Painéis

Para a obtenção de soluções ótimas de projeto de grades de turbomaquinas, o emprego de algoritmos globais de busca torna-se necessário. Tais algoritmos demandam um grande número de avaliações das funções-objetivo envolvidas. No caso do projeto hidrodinâmico de uma turbomáquina, para certa modificação de um parâmetro geométrico relevante, como por exemplo, o ângulo de montagem da pá, pode ser necessário um cálculo muito extenso utilizando modelos complexos de cálculo tridimensional de escoamento, para cada variação geométrica de montagem da pá. Neste sentido, a redução do número de cálculos feitos com

códigos computacionais caros empregando técnicas de metamodelagem torna-se uma alternativa desejada.

As técnicas de metamodelagem já anteriormente estudadas com base no emprego de funções de base radial e superfícies de resposta clássica polinomial são, então, aplicadas em projeto de pás, para realizar perturbações de projeto em torno de condições nominais e avaliá-las de modo aproximado. As condições nominais, por sua vez, são avaliadas pelo modelo real (ou também por metamodelagem, dependendo dessa escolha da complexidade do modelo).

Técnicas de metamodelagem são então empregadas para aproximar um sistema físico através do cálculo de escoamento 2D em grades de turbomáquinas com base no método dos painéis de Hess & Smith, com modificações para introduzir os efeitos viscosos e de separação da camada-limite em torno de perfis da serie NACA65, tais cálculos são realizados por meio de um código computacional de baixa fidelidade chamado de HessTurbo.

Para a construção dos metamodelos foram utilizados PFC, discretizados em três níveis cada variável, como segue: Número de Variáveis: $k = 3$, Limites de variação: ângulo de montagem $\beta(x_1)$, arqueamento (x_2) e o passo da grade $t(x_3)$, respectivamente, O ângulo de incidência da pá foi fixado como 30° .

Tabela 6.1 – Limites Inferiores e Superiores

	$L_{\text{inf}}/L_{\text{sup}}$
x_1	$[15^\circ - 18^\circ]$
x_2	$[1,5 - 1,8]$
x_3	$[0,9 - 1,0]$

Para a construção do metamodelo foi utilizada a função de base radial multiquádrica, definida por:

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^m \alpha_i \left(\sqrt{\|x - x_i\|^2 + c^2} \right) \quad (6.20)$$

em que α_i são os coeficientes a serem calculados por interpolação e c é o parâmetro de forma. O metamodelo construído por função de base radial é comparado com o metamodelo

polinomial de ordem dois, Eq. (6.21). Para obter os coeficientes do polinômio, foi utilizado o cálculo de regressão.

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2 \quad (6.21)$$

Para testar e validar os metamodelos, FBR e MPOL foram gerados 500 amostras das variáveis; x_1 , x_2 , x_3 , através do método *hipercubo latino*. As respostas exatas foram calculadas através do *solver* HessTurbo (Ramirez, 2003) para o coeficiente de sustentação (C_l) e para o coeficiente de arrasto (C_d). Com estas mesmas amostras, foram obtidas as respostas das funções aproximadas de C_l e C_d .

Os seguintes polinômios apresentados nas Eqs. (6.22) e (6.23) foram obtidos, com HessTurbo e MPOL, para o coeficiente de sustentação e para o coeficiente de arrasto, respectivamente:

$$\begin{aligned} C_l = & 0.7527884 - 0.038001973 x_1 + 0.031488683 x_2 + 0.031269591 x_3 \\ & + 0.0002553314 x_1x_2 - 0.0018618207 x_1x_3 + 0.0009546181 x_2x_3 \\ & - 0.0001924228 x_1^2 - 0.001629506 x_2^2 - 0.0003818368 x_3^2 \end{aligned} \quad (6.22)$$

$$\begin{aligned} C_d = & 0.011909298 - 2.6516669E-005 x_1 + 0.0003453056 x_2 + 0.00010593375 x_3 \\ & - 4.0874973E-005 x_1x_2 + 0.00025723339 x_1x_3 + 2.3850163E-005 x_2x_3 \\ & - 0.00014001617 x_1^2 + 0.00083008583 x_2^2 - 0.00015243079 x_3^2 \end{aligned} \quad (6.23)$$

De forma similar, utilizando a resposta do programa HessTurbo, foi construído o metamodelo FBR, em que se obtêm funções radiais para o coeficiente de sustentação e para o coeficiente de arrasto, o número de constantes α destas funções é igual ao número de experimentos do PFC.

Na Figura 6.4 são apresentados os resultados exatos obtidos através do *solver* HessTurbo, confrontados com o metamodelo polinomial (MPOL) com base no polinômio da Eq. (6.22) para o coeficiente de sustentação e no polinômio da Eq. (6.23) para o coeficiente de arrasto.

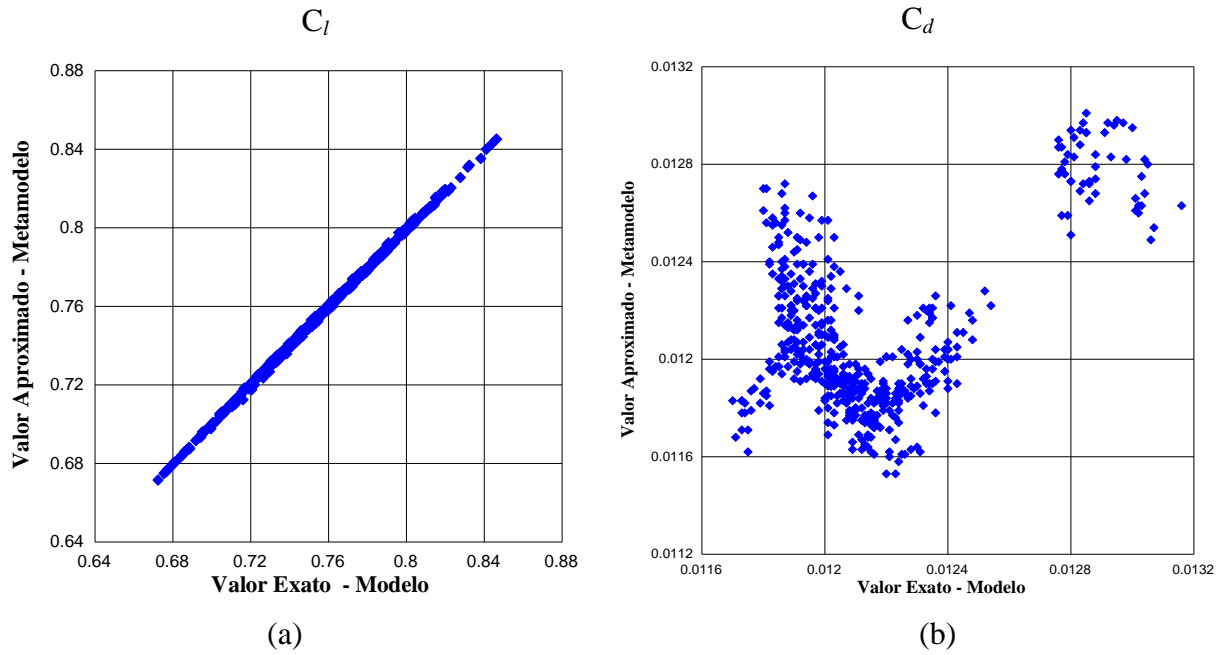


Figura 6.4 – Resultados para regressão com funções polinomiais, nível = 3, (a) Comparação para C_l , (b) Comparação para C_d

Pode-se observar na Fig. 6.4a que a superfície ou polinômio de resposta representa efetivamente o resultado exato, inclusive verifica-se que na região central existe uma dispersão mais uniforme para o coeficiente de sustentação.

Os resultados obtidos através da solução aproximada do polinômio da Eq. (6.23) não apresentaram boa representação do coeficiente de arrasto, porém esta discrepância pode ser superada com um aumento do número de painéis ou elementos de discretização do aerofólio no programa de cálculo de escoamento em grades, ou com uma maior discretização dos níveis dos fatores e aumento da ordem do polinômio.

As Figuras 6.5a e 6.5b mostram os resultados obtidos com uma maior discretização dos níveis ($n_{niv} = 5$) dos parâmetros de projeto, mantendo a mesma ordem do polinômio.

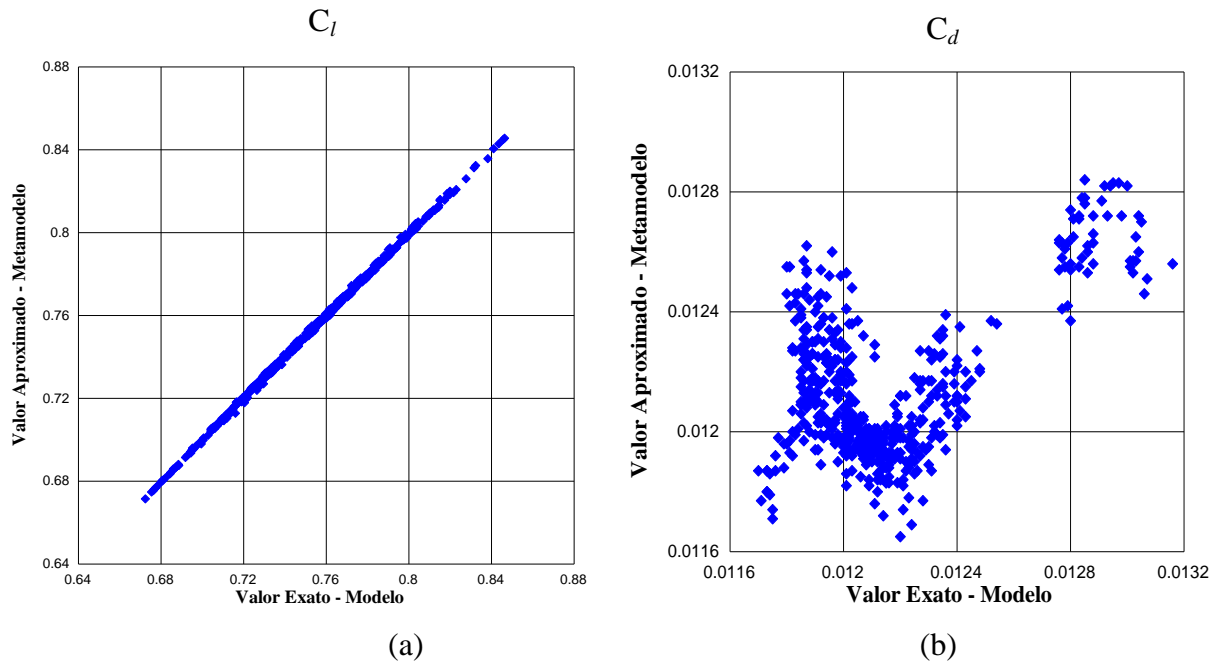


Figura 6.5 – Resultados para regressão com funções polinomiais, nível = 5, (a) Comparação para C_l , (b) Comparação para C_d

Observa-se que na Figura 6.5a, com uma maior discretização dos níveis houve uma sensível melhora no coeficiente de sustentação, porém para o coeficiente de arrasto nenhum efeito causa no resultado esperado.

Os próximos resultados (Figs. 6.6 e 6.7) foram obtidos com o metamodelo polinomial, em que vários polinômios foram gerados de forma aleatória e a média desse conjunto de polinômios foi obtida. O polinômio médio então foi então usado para os novos testes.

O conjunto de polinômios que foram obtidos foram testados e os melhores foram selecionados após satisfazer critérios estatísticos bem determinados, tais como: MSE, em que o valor deve satisfazer o critério de 6 sigmas, não podendo ultrapassar 0,09028, e $RSquare$, em que o valor deve estar entre 0 e 1 (Bataglia, 1996).

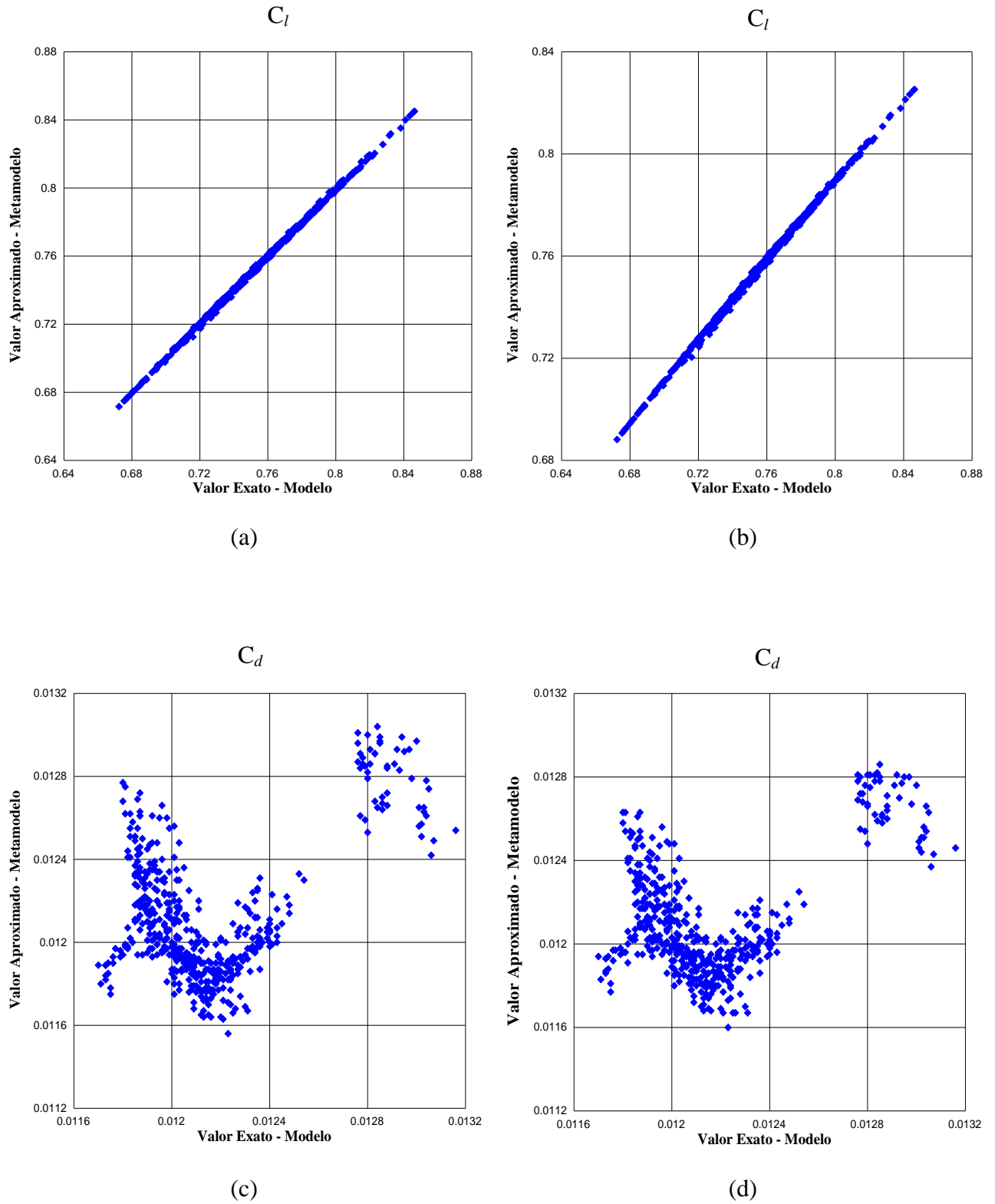


Figura 6.6 – Resultados para regressão com funções polinomiais, nível = 3 e 5 níveis, respectivamente, (a) e (b) Comparação para C_l ; (c) e (d) Comparação para C_d .

Deve-se notar que o cálculo do arrasto sempre oferece dificuldades, sobretudo quando se tem três variáveis de projeto sendo avaliadas em conjunto. Nesse sentido, pequenas variações no ângulo de montagem (β), ou no arqueamento do perfil, causam sensíveis variações na determinação do ponto de separação da camada-limite, o que provoca instabilidade numérica no cálculo do arrasto. Por outro lado, deve-se considerar o próprio ruído numérico no cálculo de variações de ordem relativamente pequena como o caso do arrasto.

A Figura 6.7 mostra os resultados obtidos usando funções de base radial, através da solução aproximada interpolada com funções multiquádricas, $c = 1$ (parâmetro de forma) para o coeficiente de sustentação e para o coeficiente de arrasto.

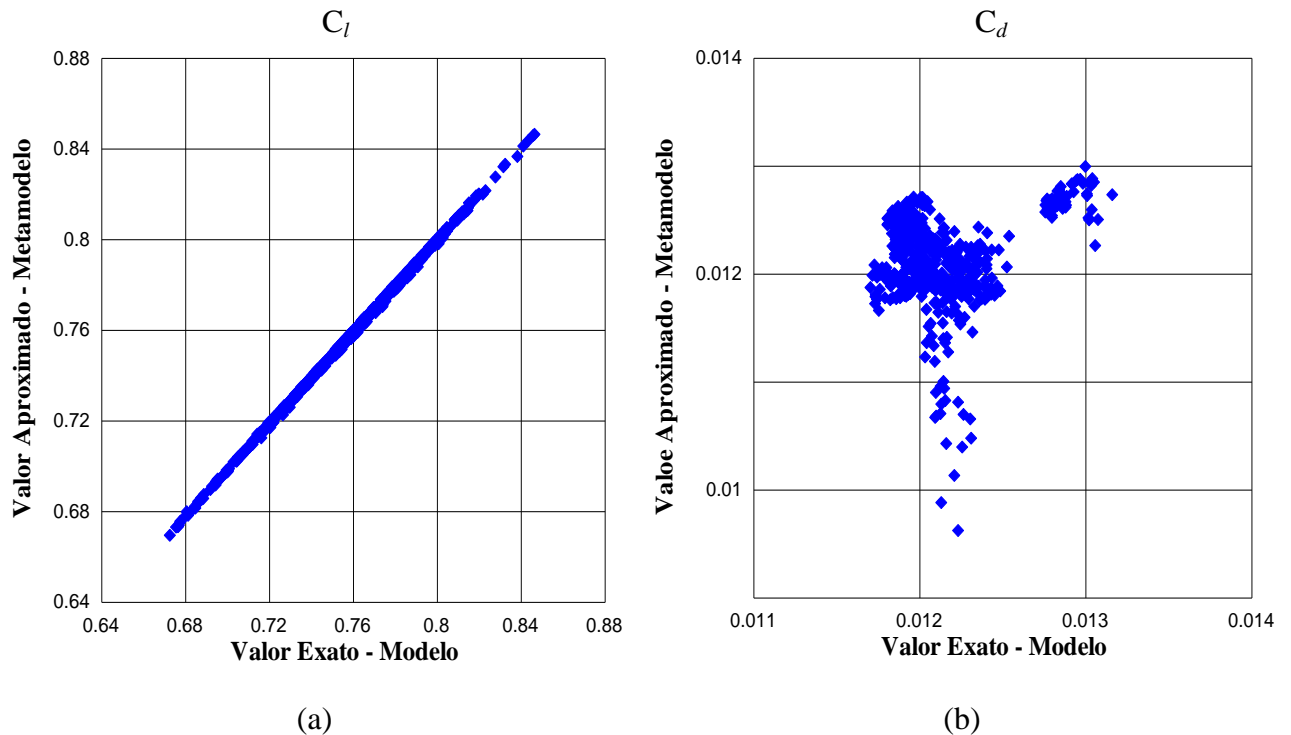


Figura 6.7 – Resultados para interpolação com funções de base radial multiquádricas $c = 1$, nível = 3; (a) Comparação para C_l ; (b) Comparação para C_d .

E na Figura 6.8 são mostrados os resultados obtidos através da solução aproximada interpolada com funções multiquádricas ($c = 3$), para o coeficiente de sustentação e para o coeficiente de arrasto.

Na Figura 6.8a são mostrados o confronto do coeficiente de sustentação obtido através da interpolação com base em funções de base radial (RBF). Nota-se que este metamodelo confrontou eficientemente o modelo exato, em que existe uma maior concentração de pontos.

Na Figura 6.8b são mostrados o confronto do coeficiente de arrasto, nota-se um comportamento bastante similar ao representado com o MPOL. Os resultados não conseguiram uma boa representação, onde mais uma vez verifica-se a dificuldade no cálculo do coeficiente de arrasto.

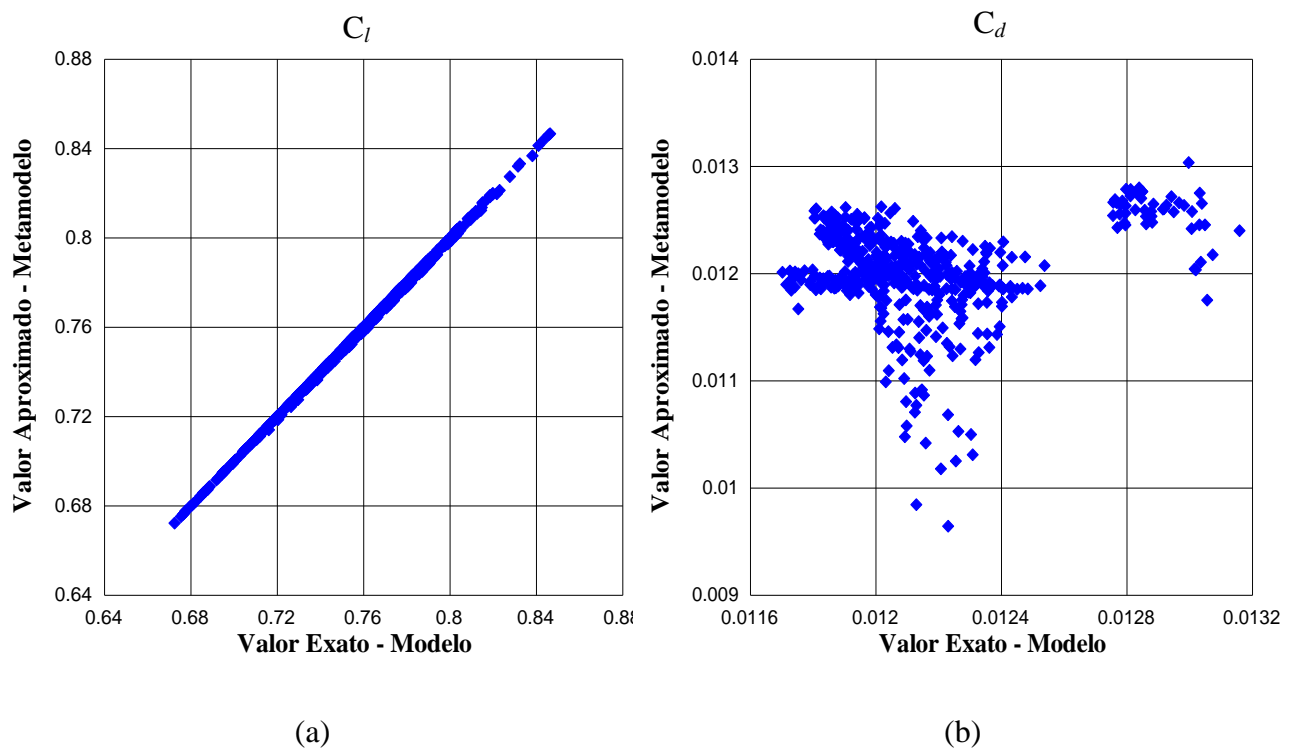


Figura 6.8 – Resultados para interpolação com funções de base radial multiquádricas $c = 3$, nível = 3; (a) Comparação para C_l ; (b) Comparação para C_d .

Nas Figuras 6.7 e 6.8 dois parâmetros de forma foram considerados ($c=1$ e $c=3$) e ambos tiveram desempenhos similares. Pode se observar que tanto o metamodelo FBR quanto o MPOL conseguem bons resultados para o coeficiente de sustentação, e desempenho similar para o coeficiente de arrasto.

6.2 PROBLEMA INVERSO EM GRADES DE TURBOMÁQUINAS

6.2.1 Aplicação do Método de Otimização Global com Escolha Arbitrária de c

O projeto inverso do aerofólio tem como base a determinação da forma aerodinâmica da pá que satisfaça uma distribuição de velocidade ou pressão prescrita no contorno do aerofólio. Para a solução, será tratado como um problema de otimização a minimização da norma da diferença entre a distribuição alvo e a distribuição calculada que é o resultado do processo de otimização.

Os parâmetros do aerofólio são indicados na Figura 6.9: Ângulo de montagem da grade β , relação de espaçamento da corda (solidez) $\sigma = c/s$, parâmetros geométricos definindo a forma do aerofólio, as velocidades do escoamento e ângulos (W_1, β_1) e (W_2, β_2) , a jusante e a montante da grade, respectivamente. De acordo com o modelo do escoamento adotado, parâmetros como número de Reynolds e número de *Mach* podem aparecer.

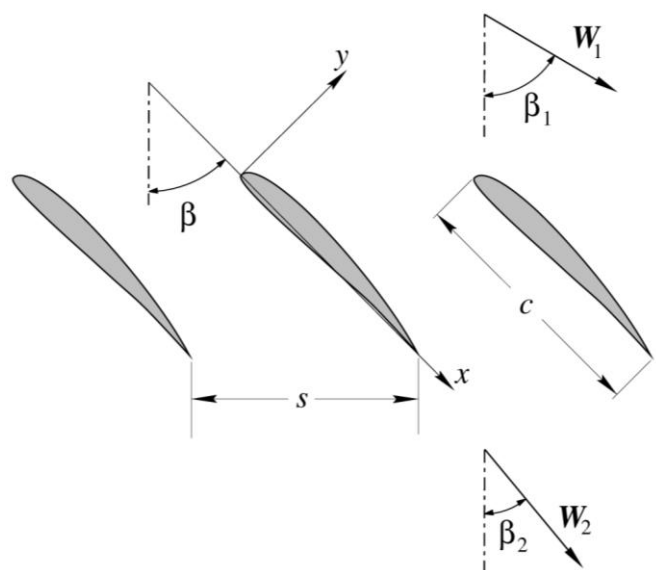


Figura 6.9– Esquema de uma grade retilínea de aerofólios

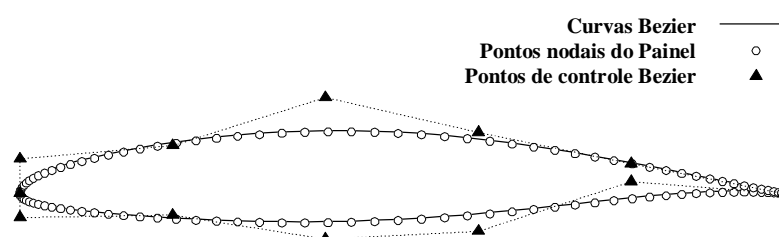


Figura 6.10 – Aproximação do aerofólio NACA 65₁-412 por curvas de Bezier

As superfícies inferior e superior do aerofólio são representadas por curvas de Bezier de alto grau. Uma curva Bezier de grau n_B no plano (x, y) é definida por um conjunto de $n_B + 1$ pontos de controle $\mathbf{P}_i = (P_{xi}, P_{yi})$. Um ponto $\mathbf{r}(x, y)$ da curva é dado por:

$$\mathbf{r}(t) = \sum_{i=0}^{n_B} \frac{n_B!}{i!(n_B - i)!} t^i (1-t)^{n_B-i} \mathbf{P}_i \quad (6.24)$$

em que t representa o parâmetro da curva variando entre 0 e 1. O primeiro ponto de controle coincide com o ponto inicial da curva ($t = 0$); o último ponto de controle coincide com o ponto final da curva ($t = 1$). Os primeiro e último pontos de controle de ambas as curvas são fixos ao aerofólio. As abscissas dos pontos de controle restantes também são fixadas e somente suas ordenadas são tratadas como variáveis de projeto. Sendo n_{BE} e n_{BI} os graus das curvas superior e inferior, respectivamente, resultando em um número máximo de variáveis de projeto $n = n_{BE} + n_{BI} - 2$. A Figura 6.10 mostra uma aproximação do aerofólio NACA 65₁-412 por curvas de Bezier descritas com $n_{BE} = 6$ e $n_{BI} = 6$ e abscissas igualmente espaçadas. Também é mostrada uma discretização do contorno do aerofólio usando 120 painéis para aplicação do *solver* de escoamento descrito abaixo.

O *solver* empregado para o teste de projeto de grade é de baixa fidelidade. Emprega uma aproximação da interação viscoso - não viscoso simplificado, mas somente a formulação potencial para não viscoso é aplicada neste exemplo. O *solver* consiste de uma implementação de um elemento de contorno do painel de vórtice constante com correções de curvatura local para melhorar a precisão. Detalhes na formulação e implementação numérica de métodos de

elemento de vórtice, inclusive a consideração de efeitos na grade, podem ser encontrados em Lewis (1991). Detalhes dos métodos de painel são encontrados em Katz e Plotkin (2001).

Para os resultados obtidos, foi feito um teste para o problema inverso de grade considerando a distribuição de pressão final usado por Rogalsky et al., (1999). O coeficiente de pressão $C_p = 1 - (w/W_1)^2$ é dado como uma função da coordenada natural do aerofólio, $C_p(s)$. Então a função-objetivo $f(\mathbf{x})$ é simplesmente igual à norma da diferença entre os coeficientes de pressão objetivo (C_{pT}) e os calculados (C_p), (Petrucci, 1998).

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_p} (C_{pT} - C_p)_i^2 \quad (6.25)$$

em que n_p é o número de painéis usados na discretização do aerofólio e i é o índice de colocação do ponto. Além do ângulo de ataque β e solidez σ os únicos parâmetros considerados como variável de projeto são as ordenadas dos três pontos superiores perto do controle próximo do aerofólio final principal, Py_1, Py_2, Py_3 . Os parâmetros Bezier restantes são fixados. A dimensão do espaço de busca é 5 e o vetor de variáveis de projeto é $\mathbf{x} = (Py_1, Py_2, Py_3, \beta, \sigma)$. Isto reduz a dimensão para permitir o uso de um plano fatorial completo para inicialização do método OGM no Passo 1. Testes futuros com maior dimensão podem requerer outros tipos de plano de experiências (hipercubo latino, por exemplo).

Primeiramente o CRSA foi aplicado diretamente para resolver o problema inverso de grade. O ângulo de entrada do escoamento foi fixado, $\beta = 30^\circ$. Os mesmos parâmetros usados para testar as funções de Dixon-Szegö foram fixados. Foram dez execuções independentes para identificar um possível mínimo global com restrições laterais, $x^L = (0,03; 0,025; -0,02; 0,5; 20)$ e $x^U = (0,10; 0,70; 0,40; 1,5; 30)$. Todos os testes convergiram resultando em um vetor de solução $\mathbf{x}' \approx (0,0460; 0,288; 0,0666; 28,1; 0,906)$ com o valor final de função $f(\mathbf{x}') \approx 2,01553$. Para estes testes iniciais, foi assumida uma tolerância de contração de população de 10^{-7} e o número de avaliações da função para convergência foi 7254.

O valor final da função-objetivo é muito alto para a norma definida na Eq. (6.25), indicando que a solução do problema inverso não seria aceitável para propósitos práticos.

Provavelmente não seria possível melhorar a situação usando a parametrização mostrada na Fig. 6.10. Porém, o objetivo principal do teste é somente avaliar o desempenho do método OGM aplicado para problemas inversos e não resolver um problema real de projeto de grades. O uso de um melhor esquema de parametrização superará estas desvantagens em futuros testes.

A Figura 6.11 mostra o objetivo e as distribuições de pressão final que confirmam a má concordância dos parâmetros escolhidos. A Figura 6.12 mostra a forma final do aerofólio.

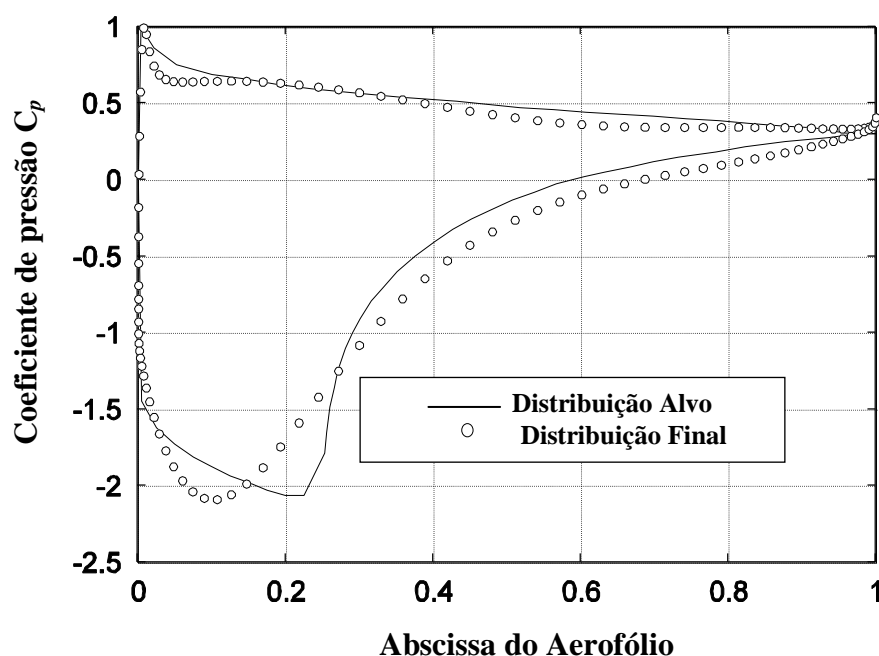


Figura 6.11 – Objetivo e distribuição final de pressão

Em comparação com a estratégia OGM, testes adicionais CRSA, foram feitos. Um conjunto menor de restrições laterais incluindo x' foi considerado: $x^L = (0,030; 0,025; 0,00; 0,7; 25)$ e $x^U = (0,050; 0,300; 0,080; 1,0; 30)$. O CRSA foi executado diretamente dez vezes de forma independente. Para atingir um erro relativo abaixo de 1% do valor final $f(x') \approx 2.01553$, a média do número de avaliações da função ocorreu por volta de 421 avaliações nestes novos testes de CRSA. O mínimo e máximo do número de avaliações da função foi 177 e 1500, respectivamente.

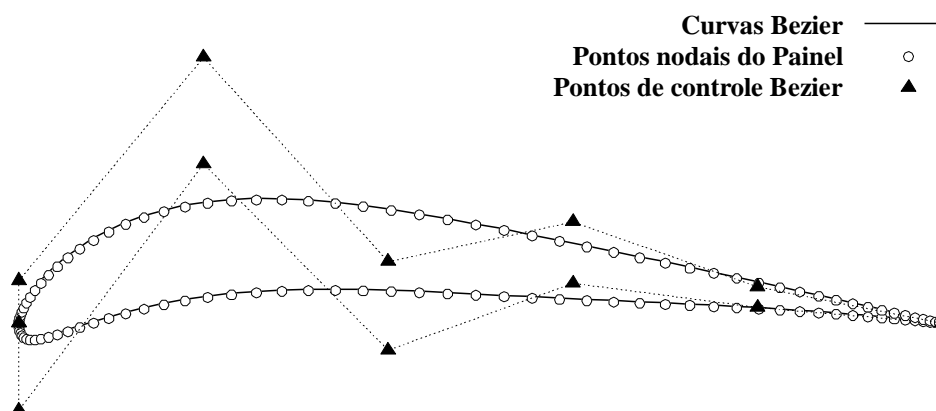


Figura 6.12 – Forma final do aerofólio

Finalmente, a estratégia OGM foi avaliada usando o segundo conjunto de restrições definido no último parágrafo. Os mesmos parâmetros usados para avaliar as funções de teste Dixon-Szegö foram assumidos, com exceção do parâmetro de forma da multiquádrica. Agora o valor $c = 1$ mostrou ser mais adequado. A estratégia OGM foi executada dez vezes de forma independente. A média, número mínimo e máximo de avaliações da função para obter um erro relativo abaixo de 1% do valor final $f(\mathbf{x}^*) \approx 2,01553$ foram 99, 83 e 120, respectivamente. A média do fator de aceleração foi observada por volta de 4.6.

6.3 APLICAÇÃO DO MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL EM GRADES USANDO CFD-2D

Uma importante ferramenta de projeto em turbomáquinas são as análises em grades representativas de rotores axiais através do uso da Dinâmica dos Fluidos Computacional CFD. Sendo assim, a metodologia de otimização OGM, será estendida para o caso de projeto de uma grade linear.

Uma série periódica de perfis idênticos (aerofólios) tem como função provocar a maior deflexão na grade, isto é, aumentando a quantidade de movimento, como mostra a figura 6.9. Assim como na aplicação da metodologia em projeto inverso de grades, os mesmos parâmetros geométricos são definidos como: as velocidades, ângulos do escoamento uniforme

(W_1, β_1) e (W_2, β_2) a montante e jusante, ângulo de montagem da grade β , e a relação de espaçamento da corda (solidez) $\lambda = s/c$. Nesta aplicação somente o número de Reynolds é relevante, desde que o escoamento seja considerado incompressível ($Mach = 0$).

As quantidades resultantes relevantes incluem a distribuição da pressão na superfície da pá, o ângulo de deflexão do escoamento $\theta = \beta_1 - \beta_2$, a perda de energia, e as forças de sustentação e arrasto na pá.

Para o cálculo do escoamento na grade (2-D) foi utilizado o *software* FLUENT[®]. As malhas requeridas foram geradas pelo *software* ICEM-CFD[®]. Algumas comparações entre resultados obtidos pelo FLUENT[®], injeção de fluxo viscoso-não viscoso (VIFI - *viscous-inviscid flow injection*- HessTurbo) com base no método dos painéis de Hess & Smith (Ramirez e Manzanares-Filho, 2005), modelo potencial e resultados experimentais (Emery et al., 1958) são mostrados na Figura 6.13. Pode-se ver que ambos, FLUENT[®] e VIFI produzem resultados aceitáveis; VIFI é significativamente mais rápido. No futuro, ambos podem ser usados como um esquema computacional multi-fidelidade, porém nesta aplicação somente FLUENT[®] foi adotado para a avaliação OGM/CRSA.

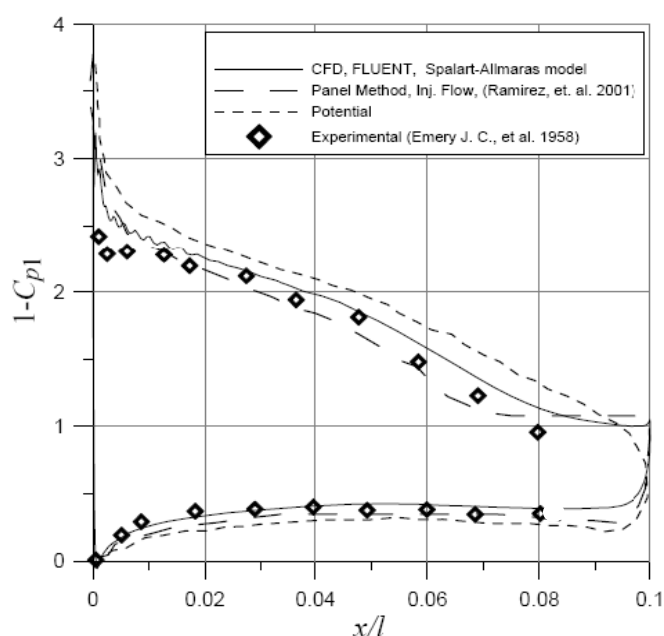


Figura 6.13 – Distribuição de pressão para NACA65(18)-
10 Grade: $\lambda = 0,5$; $\beta_1 = 45^\circ$; $\beta = 25,3^\circ$; $Re = 2,45 \times 10^5$

Para o teste aplicado em grades (Fig. 6.9) o modelo e os parâmetros geométricos são adequadamente selecionados para obter convergência e precisão dos resultados. Então parâmetros similares são empregados para análise do desempenho em grade durante o teste de otimização para discussões posteriores.

As malhas 2-D são geradas por um *script* escrito em linguagem Tcl/Tk que podem ser modificadas pelo otimizador e interpretadas pelo *software* ICEM-CFD[®]. Foi considerado o refinamento da malha perto da parede, a fim de quantificar apropriadamente as tensões de cisalhamento. Todas as malhas foram construídas com 122688 elementos hexaédricos. A Figura 6.14 mostra um exemplo de malha em torno de uma grade. Os elementos da malha crescem geometricamente a partir da parede para o exterior com uma taxa de 1.1. A distância Y^+ da parede aos pontos mais próximos da malha em torno de um valor apropriado para o modelo de turbulência de Spalart Almaras (SA).

O vetor de velocidade do escoamento é definido na entrada da grade e de pressão na saída. Condições de contorno periódicas foram consideradas para a redução do domínio computacional para uma única região em torno de um aerofólio. O modelo de turbulência Spalart-Allmaras (SA) com funções de parede foi escolhido uma vez que este permite respostas mais realistas para problemas de aerodinâmica com números relativamente baixos de Reynolds e camadas limite sujeitos a gradientes de pressão adversos. O cálculo do escoamento realizado pelo FLUENT[®] foi considerado convergido quando o resíduo normalizado das equações de conservação e modelo de turbulência tornou-se abaixo de 10^{-7} .

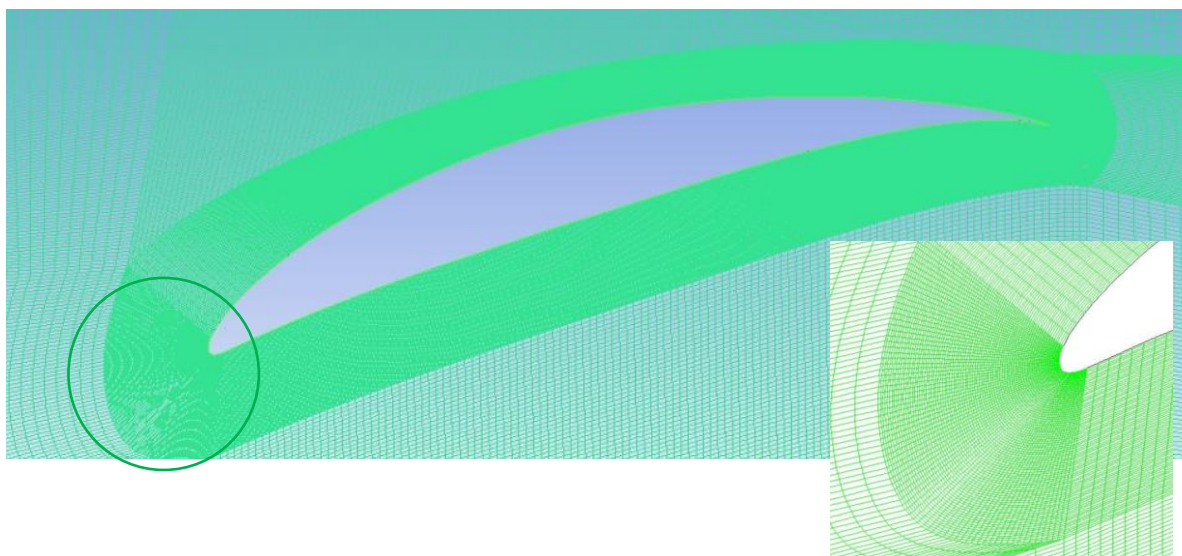


Figura 6.14 – Malha gerada para o perfil base NACA65(15)-10

Os coeficientes de arrasto e de sustentação foram calculados com base na magnitude do vetor de velocidade média, W_∞ (Vide Fig 6.2). O coeficiente de sustentação foi calculado pela integração direta da pressão e distribuição de tensões na superfície do perfil aerodinâmico. O coeficiente de arrasto foi calculado de forma diferente: primeiro, a diferença da pressão total ponderada pela massa entre a entrada e saída da grade é avaliada e o coeficiente de perda ζ é calculado conforme a Eq. (6.26):

$$\zeta = \frac{P_1 - P_2}{(\rho/2)W_2^2} \quad (6.26)$$

A quantidade ponderada pela massa na saída foi avaliada por linha de controle (*line / rake*) localizado a uma distância do comprimento da corda a partir do bordo de fuga. Assim, o coeficiente de arrasto é calculado pela seguinte relação (Vavra, 1974):

$$C_d = \frac{\zeta \cos^3 \beta_\infty}{(l/t) \cos^2 \beta_2} \quad (6.27)$$

Esta metodologia para o cálculo do coeficiente de arrasto evita erros numéricos associados com a integração das forças de superfície da pá. Esses erros podem ser intensificados pelas variações de malha exigidas pelo processo de otimização (mesmo pequenos), produzindo ruído numérico.

A série NACA65 (XX)-10 foi selecionada para o teste. Apenas duas variáveis de projeto foram considerados: o parâmetro arqueamento $ARC = XX/10$ e a razão passo/corda $\lambda = s/c$. A grade base foi o aerofólio NACA65 (15)-10, ($ARC = 1.5$) e $\lambda = 1$. A Tabela 6.2 mostra os parâmetros e faixas de projeto usado no teste. Um número de Reynolds igual a 2.45×10^5 foi considerado ao longo de todo o teste.

A maximização da relação sustentação/arrasto (C_l / C_d) foi escolhida como objetivo sem restrições no ângulo de saída do escoamento. Em princípio, isso é muito próximo da minimização do coeficiente de perda ζ com uma restrição no ângulo de saída do escoamento igual aquele da grade base.

Tabela 6.2 – Dados Geométricos, Condições de Contorno e Propriedades do Escoamento.

Parâmetros da Grade	
Razão passo/corda (λ)	0,85 – 1,15
Arqueamento (ARC)	14% - 16%
Ângulo de Montagem (β)	15°
Corda (c)	1 m
Ângulo de Entrada do Escoamento (β_1)	30°
Ângulo de Incidência (α_1)	$\alpha_1 = \beta_1 - \beta$
Propriedade do Fluido (ar)	
Massa Específica (ρ)	1,225 kg/m ³
Viscosidade (μ)	1,7894x10 ⁻⁵ kg/(m.s)
Condições de Contorno de Entrada	
Componente de velocidade em x	3,1783 m/s
Componente de velocidade em y	1,8350 m/s

Primeiramente, o CRSA foi testado sem a estratégia OGM. Como nos experimentos computacionais do capítulo 5, uma população inicial de 15 indivíduos foi aleatoriamente definida e avaliada. O critério de parada foi uma tolerância de contração da população abaixo de 10^{-4} . Apenas uma execução foi realizada e os resultados obtidos convergiram após 47 chamadas de função exata.

Para a estratégia OGM, a função multiquádrica com $c = 1$ foi empregada. O banco de dados inicial foi definido com PFC de dois níveis (4 pontos nos cantos do domínio, $d = 2$). Ao contrário do capítulo 5, no entanto, o ótimo global não é conhecido com antecedência, neste caso, e não há critérios óbvios para finalizar a execução. Assim, o processo de otimização foi interrompido após exatamente 47 chamadas da função exata, como foi o caso quando CRSA foi testado sem OGM. A intenção agora é comparar as estratégias ao longo do processo de otimização inteiro, não apenas os resultados finais.

A Tabela 6.3 mostra alguns resultados obtidos após as 47 avaliações da função exata. Pode-se ver que a estratégia OGM foi capaz de obter uma maior relação (sustentação-arrasto) e um coeficiente de perdas menor que o CRSA sozinho. Ambas as estratégias produzem deflexões do escoamento ligeiramente inferior que aqueles comparados com o perfil base, mas esse efeito é menos pronunciado com OGM. Estes resultados são indicativos da eficácia da pesquisa global OGM — embora seja impossível avaliar a proximidade dos resultados finais OGM a um ótimo global.

A Figura 6.15 mostra as formas finais do aerofólio em comparação com a forma do aerofólio base. Somente o arqueamento foi variado e parametrizações melhores são, obviamente, concebíveis. O arqueamento do aerofólio obtido com OGM foi menor do que o arqueamento do aerofólio base, mas a relação passo/corda foi menor (ver Tabela 6.3). Com o CRSA sozinho, as tendências foram invertidas. Observe que uma menor relação passo/corda implica o uso de um maior número de pás e/ou pás maiores. Em ambos os casos, seria necessário usar mais material para a fabricação de pás — essa é uma questão que mereceria um tratamento multiobjetivo.

Tabela 6.3 Resultados da Otimização

	Arqueamento	Passo - corda	C_l	C_d	C_l/C_d	ζ	θ (ângulo de deflexão)
Perfil Base	1,500	1,0000	0,7186	0,0279	25,76	0,0320	24,32°
CRSA	1,540	1,1500	0,8022	0,0293	27,36	0,0294	23,55°
OGM	1,400	0,9675	0,6846	0,0241	28,41	0,0286	23,98°

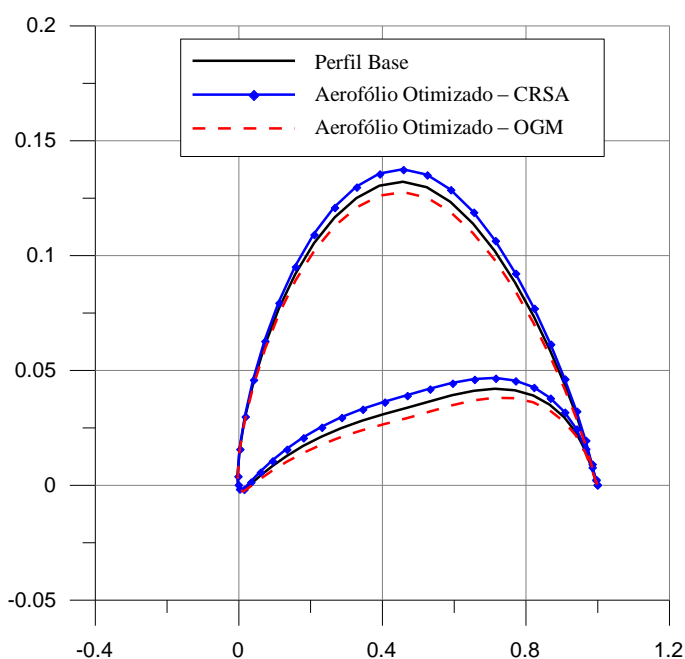


Figura 6.15 – Comparação do aerofólio base com o aerofólio otimizado.

Tabela 6.4 e Figura 6.16 mostram o histórico do processo de convergência. Na Tabela 6.4, apenas as ocorrências de melhoria de C_l/C_d são mostrados. Incidentalmente, um dos quatro pontos do banco de dados inicial OGM já foi melhor do que o melhor ponto encontrado por CRSA sozinho. Sabendo que os primeiros 15 indivíduos da população CRSA foram sempre definidos aleatoriamente, assim sendo, esse evento não pode ser visto como anormal. Note-se que com 6 avaliações da função, CRSA foi capaz de encontrar um ponto que é de apenas 0.6% pior do que o ponto correspondente obtido por OGM. No entanto, a partir daí até o final do processo de otimização a melhoria obtida por CRSA foi de cerca de 0.53%, enquanto que OGM produziu uma melhoria de 3.8% — 7 vezes mais. Assim, devido à natureza específica deste exemplo, as propriedades de aceleração da estratégia OGM são mais bem avaliadas quando se visualiza toda a evolução, em vez de o número de avaliações da função exata necessária para atingir um determinado objetivo.

Tabela 6.4 Histórico do processo de otimização

CRSA		OGM	
NAF*	C_l/C_d	NAF	C_l/C_d
1	23,5784	4	27,36396
2	26,9881	6	27,37631
6	27,2150	7	27,38754
7	27,2201	8	27,41754
13	27,3248	9	27,42456
18	27,3349	17	28,40664
39	27,3363	47	28,40664
42	27,3594		
47	27,3594		

*Número de avaliações da função

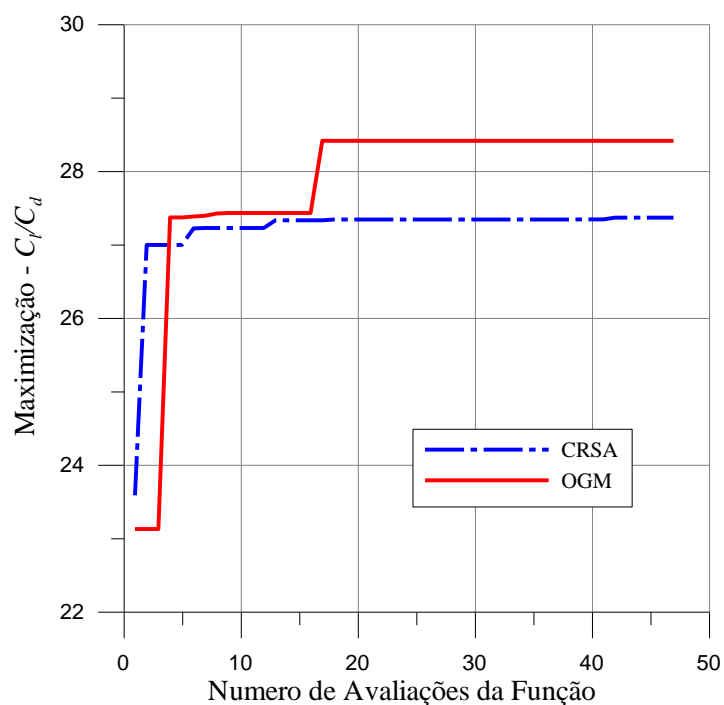


Figura 6.16 – Histórico do processo de otimização

Alguns resultados de campo ilustrativo para a melhor grade encontrada por OGM são mostrados nas Figuras 6.17 e 6.18.

A Figura 6.17a mostra o padrão da linha de corrente no domínio da cascata, onde o ângulo de deflexão do escoamento pode ser justificado. Figura 6.17b mostra a distribuição de pressão estática na superfície do perfil aerodinâmico. No lado da superfície de sucção, não aparece uma porção de pressão constante perto do bordo de fuga do aerofólio otimizado — indicando ausência de efeitos significativos de separação, como também pode ser observado na Figura 6.17a.

A Figura 6.18 mostra os contornos suaves de pressão estática e contornos de viscosidade turbulenta. Nestas figuras a condição de periodicidade pode ser observada no canal replicado. Observe que o bordo de fuga do aerofólio otimizado a jusante é relativamente fino.

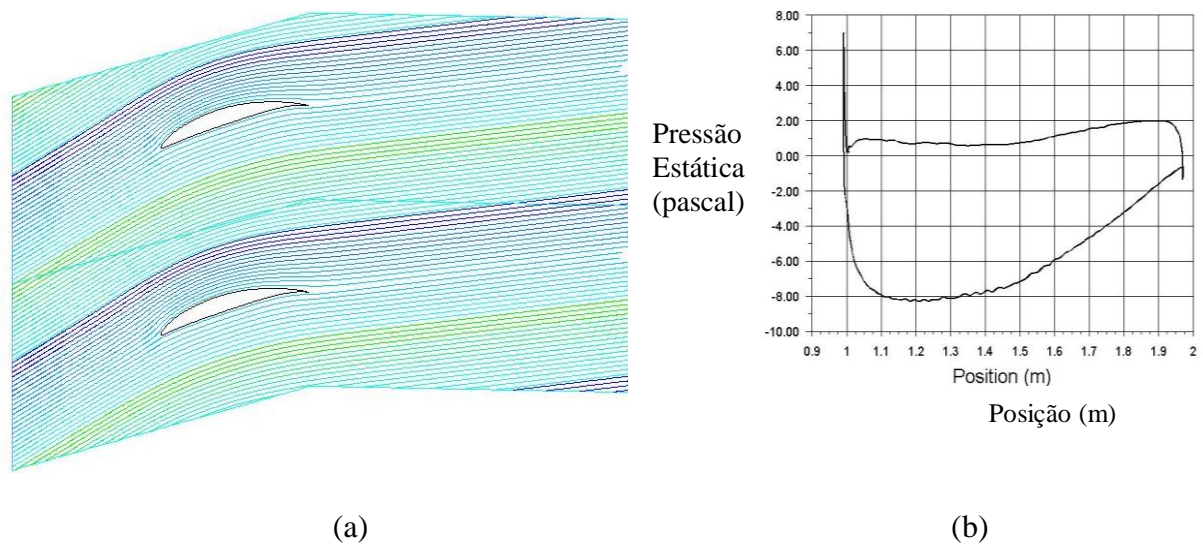


Figura 6.17 – Resultados obtidos no ponto de otimização (OGM), (a) Linhas de corrente, (b) Distribuição de pressão estática.

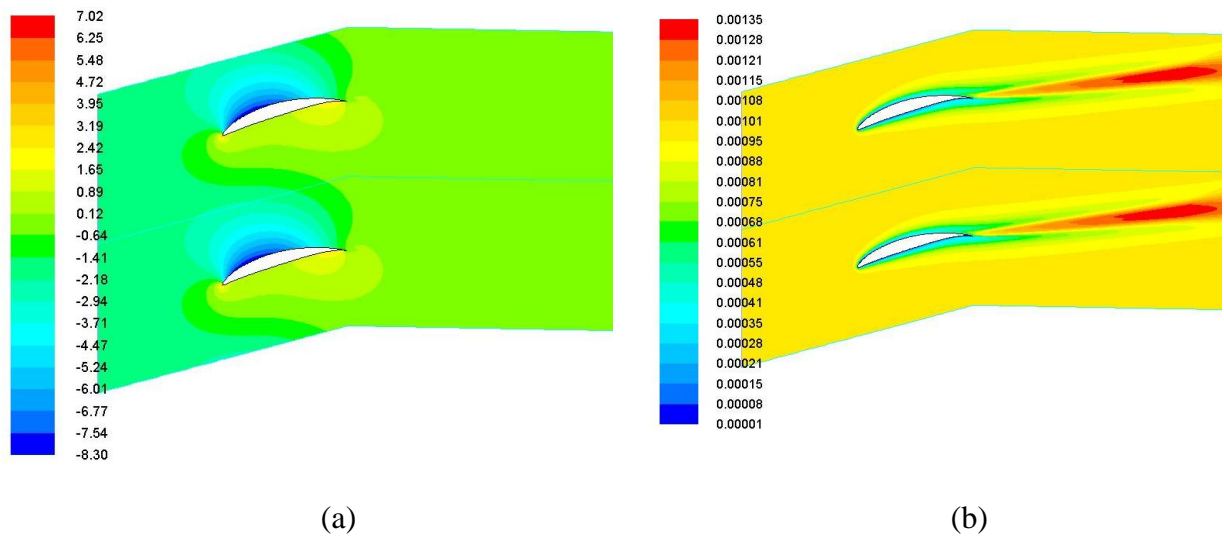


Figura 6.18 – (a) Contornos de pressão estática, (b) Contorno de viscosidade turbulenta modificada (m^2/s).

Um exemplo simples de grades de pás foi apresentado com o objetivo de maximizar a relação sustentação/arrasto tendo como variáveis de projeto o arqueamento do aerofólio e a

relação passo/corda. O código de CFD FLUENT[®] foi usado como *solver*. O histórico do processo de otimização mostra que o uso da estratégia OGM aumenta as taxas de melhora da função-objetivo, em comparação com CRSA sozinho.

Finalmente conclui-se que: (i) funções de base radial que possuem parâmetro de forma c pode realmente ser útil no contexto da estratégia OGM; (ii) A estratégia OGM é promissora para acelerar e melhorar a confiabilidade de um otimizador estocástico como CRSA; (iii) um esquema consistente para otimizar o parâmetro de forma é bastante necessário para melhorar a eficácia da estratégia OGM, tornando-o mais estável quando otimizadores estocásticos são usados.

6.4 APLICAÇÃO DO MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL PARA UMA TURBINA HIDRÁULICA AXIAL USANDO CFD-3D

A metodologia OGM é agora aplicada para o caso do rotor de uma turbina hidráulica axial com um modelo solução 3-D. Apenas o rotor é considerado porque outros componentes como o sistema diretor e tubo de sucção, necessitariam de muito mais recursos computacionais que não estão acessíveis no momento. Além disso, só o ângulo de montagem do perfil no meio e na ponta da pá foram tratados como parâmetros de projeto a serem otimizados (Fig. 6.19b). Embora limitada, esta parametrização é capaz de capturar variações representativas na eficiência hidráulica do rotor.

Com base na teoria da asa de sustentação e na hipótese de equilíbrio radial de vórtice livre, foi desenvolvida uma metodologia de projeto preliminar do rotor (Bran e Souza, 1980). As principais dimensões geométricas, como a relação de cubo, perfis de seção da pá, ângulos de montagem e ângulos de ataque na base no centro e na ponta, são assim obtidos (Fig.6.19) com base no trabalho de Ramirez (2010). A definição de uma pá mais geral também exigiria outros parâmetros geométricos, tais como os efeitos, axial e circunferencial de empilhamento (deslocamentos *sweep* e *dihedral*), entre outros. Na busca de melhor eficiência, a variação independente destes parâmetros resultaria em excesso de esforço computacional e um projeto menos viável, trabalhando com os recursos computacionais disponíveis neste momento.

Os parâmetros de projeto foram considerados os seguintes: $Q = 8 \text{ m}^3 / \text{s}$ (vazão), $H = 6 \text{ m}$ (altura de queda líquida), $Z_{nj} = 600 \text{ m}$ (altitude local a nível de jusante), $T = 25 \text{ }^\circ\text{C}$ (temperatura local), $P_{atm} = 101325 \text{ Pa}$ (pressão local), $f = 60 \text{ Hz}$ (frequência do sistema elétrico).

A Figura 6.19a mostra um esquema do rotor axial com as dimensões básicas; ogiva, cubo, eixo e pá na base no cubo. A Figura 6.20b mostra o empilhamento da pá em três posições radiais (base, meio e ponta) definidos os ângulos de montagem (β) e os comprimentos das cordas.

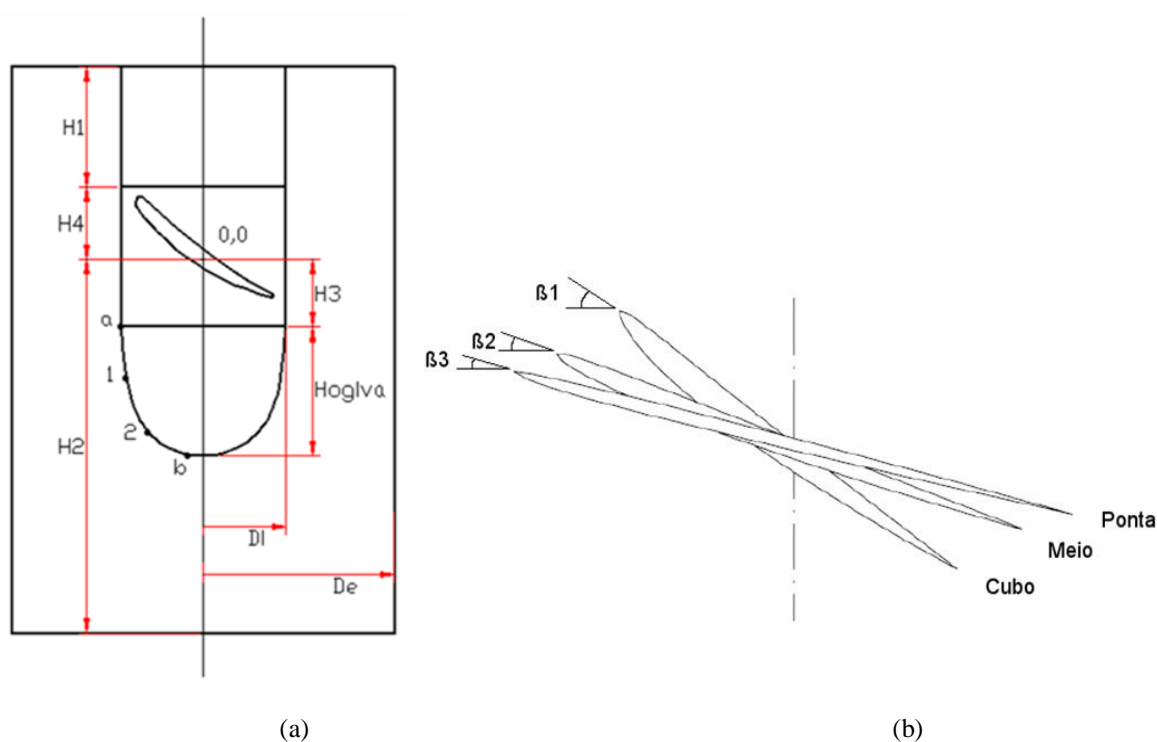


Figura 6.19 – (a) Geometria e canal periódico da turbina axial, (b) empilhamento da pá em 3 posições radiais.

Para o cálculo do escoamento através do canal do rotor de uma turbina axial foi usado o *software* comercial CFD-FLUENT[®]. Para o processo de integração com algoritmos de otimização (CRSA e OGM), é extremamente importante que a construção da malha paramétrica se encaixe perfeitamente às variações do formato da pá e também apresente melhorias em regiões de maior pressão ou gradientes de velocidade, especialmente aquelas

próximas das paredes, onde o crescimento da malha é controlado pela *lei da parede* definida em modelos de turbulência (critério $y^+ \approx 1.0$).

Uma malha híbrida foi escolhida, permitindo que elementos prismáticos possam ser distribuídos na parede e uma transição para um núcleo de elementos hexahedricos por meio de elementos tetraédricos epiramidais intermediários (Figura 6.20).

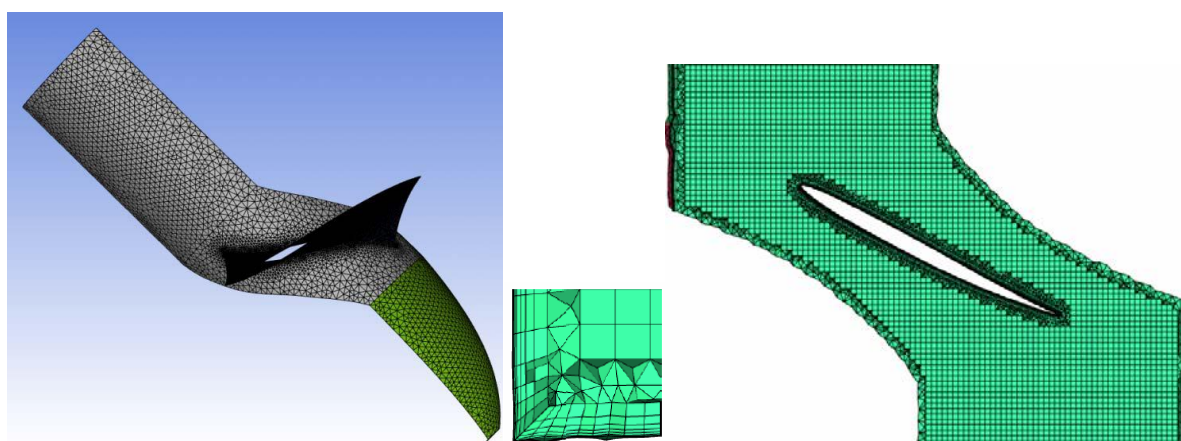


Figura 6.20 – Malha híbrida camada prismática, núcleo hexa e tetra, 2699545 células

Com base nas principais dimensões do rotor da turbina, um *script file* foi construído com comandos de edição escrito em linguagem Tcl/Tk, interpretado pelo *software* comercial ICEM-CFD[®]. Esta metodologia permite a construção automática da geometria e da malha parametrizada. É semelhante à adotada para o caso de teste em grade na Seção 6.3.4. No apêndice A, um trecho do script será apresentado para melhor compreensão da geração automática da geometria e malha e pode também ser visto como o cálculo do escoamento é automaticamente inicializado pelo FLUENT[®].

Como esse projeto inicial não inclui as palhetas diretrizes de entrada, um canal periódico foi gerado contendo uma única pá, uma vez que a geometria é perfeitamente regular e todas as superfícies são de revolução. Para esta simplificação é apropriado o uso do modelo SRF (*Single Roating Frame*), ajudando a reduzir o custo computacional (FLUENT[®], 2006).

A Figura 6.21a mostra o canal do rotor com as condições de contorno, tais como: entrada, saída, parede da pá e interfaces periódicas. Figura 6.21b mostra a geometria do canal periodicamente replicado, resultando no rotor de turbina axial.

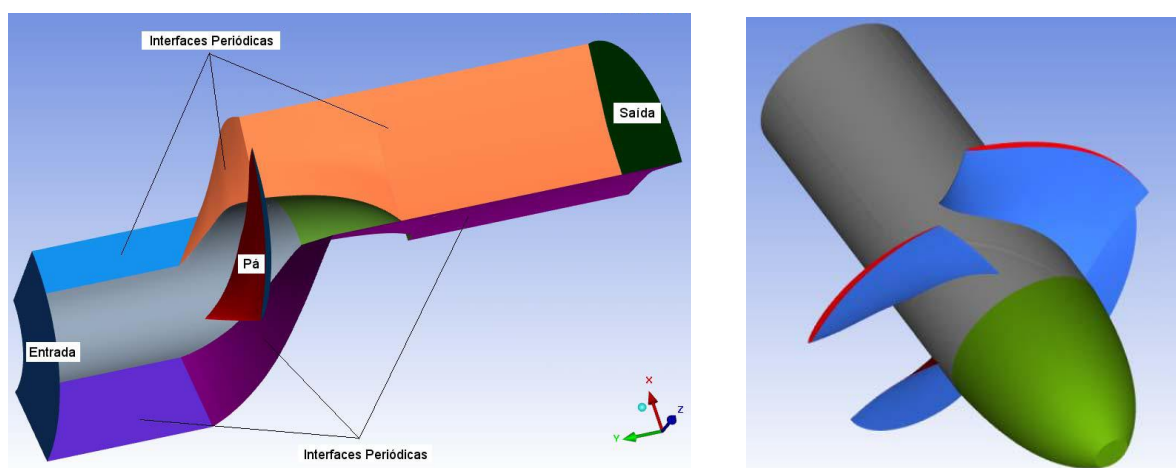


Figura 6.21 – a) Geometria do domínio computacional, gerada automaticamente do *script file*,
b) Geometria do rotor (replicado)

Devido à sua precisão, economia e razoável robustez para uma ampla gama de escoamento turbulento, o modelo $k-\varepsilon$ foi escolhido para todas as simulações nesta aplicação (Versteeg e Malalasekera, 1995; Wilcox, 1993).

No canal na entrada define-se a taxa de fluxo de massa e a direção do vetor de velocidade relativa, com referência à secção média da pá em coordenadas cilíndricas. No canal de saída foi imposta uma condição, que garante a continuidade da massa entre a entrada e a saída da superfície (FLUENT[®], 2005)

O arquivo de leitura *journal file* do FLUENT[®] construído, contém uma lista de comandos executados em seqüência, como a leitura da malha, verificação de erros na malha, o dimensionamento, a definição de unidades de trabalho, definição do material, modelo matemático de solução, ajuste de parâmetros do modelo de sub-relaxação, ajuste dos parâmetros de convergência, ajustes das condições de operação, definição de condições de contorno, definição de interfaces, topologia de configuração de turbomáquinas (*turbo topology*).

O *software* FLUENT[®] possui uma ferramenta para análise de campo de escoamento de turbomáquinas no arquivo "*turbo topology*", que permite a integração de pressão da parede e das tensões de cisalhamento no sistema não inercial (cubo e pá) com respeito a um sistema de referência no eixo do rotor e assim o cálculo da potência do eixo P_e . A potência hidráulica P_h é obtida com base na altura de queda líquida disponível, através do cálculo da diferença de

pressão total entre a entrada e saída do rotor. A eficiência hidráulica total do rotor é definida como: $\eta_T = P_s/P_h$. O valor da eficiência hidráulica foi alcançado dentro do intervalo da eficiência esperada (Bran e Souza, 1980).

6.4.1 Resultados do Processo de Otimização

A maximização da eficiência hidráulica total do rotor foi escolhida como função-objetivo. As variáveis de projeto são os ângulos de montagem na seção média e na ponta da pá (β_2 e β_3 na Figura 6.19). Os intervalos de busca foram definidos como $[17,75^\circ - 19,75^\circ]$ para β_2 e $[12,45^\circ - 14,45^\circ]$ para β_3 .

Primeiramente o CRSA foi testado sem a estratégia OGM. Uma população inicial de 9 indivíduos foi aleatoriamente adotada e avaliada. O critério de parada foi tolerância da contração da população abaixo de 10^{-4} . Somente uma execução foi feita e a convergência dos resultados foi obtida após 25 avaliações da função exata.

Para a estratégia OGM, a função multiquádrica com $c = 1$ foi empregada. O banco de dados inicial foi definido utilizando plano fatorial completo com uma amostragem de dois níveis. Como na Seção 5.2, um ótimo global não é conhecido com antecedência, neste caso, não há critérios de parada óbvios.

O algoritmo de otimização foi codificado em linguagem FORTRAN. Ele integra um arquivo do ICEM-CFD[®] (*script file*) e um arquivo do FLUENT[®] (*journal file*), a fim de gerar automaticamente as malhas paramétricas, as condições de contorno e parâmetros do modelo, e executar os cálculos do escoamento.

A Figura 6.22 mostra os resultados obtidos com a aplicação da estratégia OGM-RBF com CRSA representado por linha vermelha com símbolos triangulares, e o CRSA foi diretamente aplicado e os resultados são representados pela linha azul com símbolos losango, respectivamente. Pode-se notar que a estratégia foi capaz de obter uma maior eficiência hidráulica do que o CRSA sozinho.

Tabela 6.5 Histórico do Processo de Otimização

CRSA		OGM	
NAF*	η	NAF	η
1	81,9352	1	81,7153
2	84,8153	6	84,5503
12	84,8736	8	85,3719
13	84,9355	25	85,3719
14	84,9427		
25	84,9427		

*Número de avaliações da função

Na Tabela 6.5, as ocorrências de melhoria da eficiência ao longo da otimização são mostrados. A Figura 6.22 mostra o histórico do processo de otimização. Note que estratégia OGM permaneceu abaixo do CRSA entre a 2ª e a 8ª avaliação da função, mas, em seguida, obteve seu melhor ponto e depois permaneceu até o final do processo, com 0,65% de melhora. Por outro lado, CRSA foi capaz de encontrar o seu melhor ponto na 12ª avaliação da função, que foi de 0,57% pior do que OGM. Do melhor ponto da população inicial até o final do processo de otimização, CRSA obteve uma melhoria de 0,15%, enquanto que OGM produziu uma melhora de 0,97% – 6 vezes mais.

Assim como no exemplo da grade, as propriedades da aceleração de OGM é melhor avaliada através da visualização de toda a evolução, ao invés do número de avaliações da função com precisão necessária para atingir um determinado objetivo.

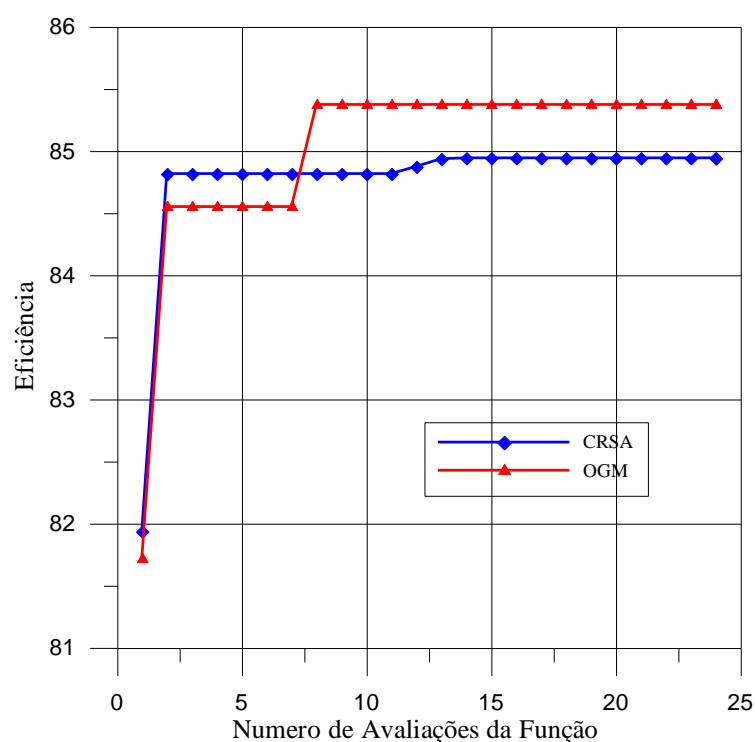


Figura 6.22 – Histórico do Processo de Otimização

Alguns resultados de campo ilustrativo para a melhor turbina axial encontrada por OGM são apresentados nas Figuras 6.23.

A Figura 6.23a mostra os contornos de pressão estática. A Figura 6.23b mostra o processo iterativo de convergência de FLUENT[®]. Neste caso, cada convergência completa teve um custo computacional equivalente a 3 horas de processamento. A função-objetivo foi avaliada 25 vezes, resultando em 75 horas de simulação para o projeto ideal. O uso de OGM é mais seguro que o uso de CRSA sozinho, já que resultados melhores podem ser obtidos com o mesmo esforço computacional.

As superfícies de resposta (metamodelos) foram construídos utilizando funções de base radial multiquádrica direta. O processo de otimização do metamodelo é realizado por meio de um algoritmo de busca aleatória controlada (CRSA).

Após os testes realizados com a aplicação da estratégia OGM, pode-se concluir que reduções substanciais no número de avaliações da função-objetivo foram observadas em comparação com os resultados obtidos quando o algoritmo CRSA foi aplicado diretamente.

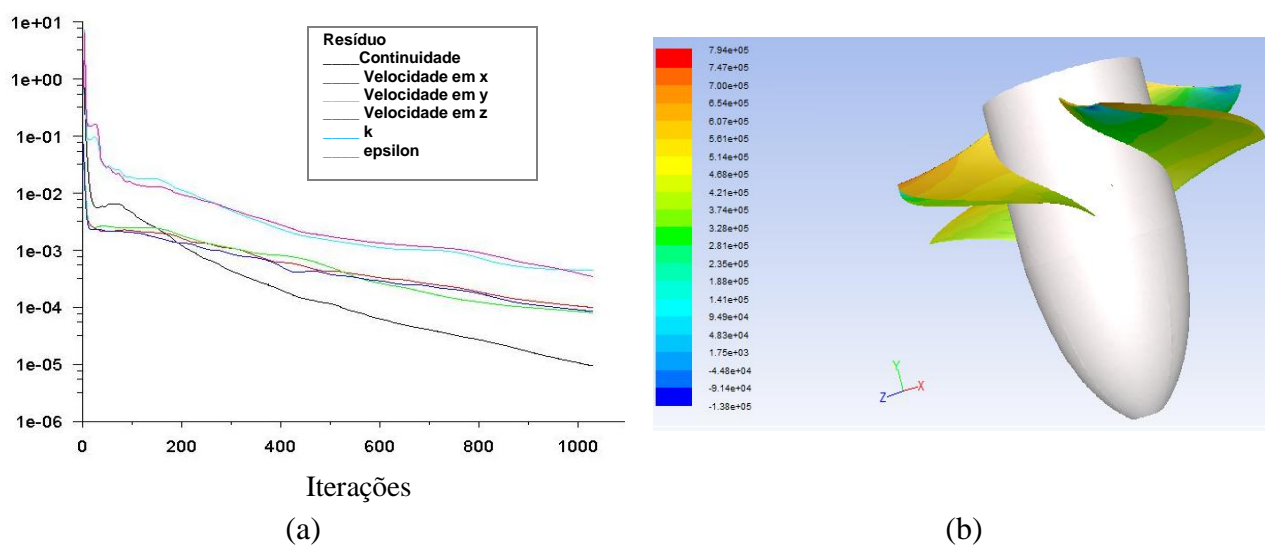


Figura 6.23 – a) Convergência (Pascal), b) Contornos de pressão estática.

6.5 APLICAÇÕES DO MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL (OGM-LOOCV) COM ESCOLHA AUTOMÁTICA DE c EM GRADES USANDO CFD-2D

Os testes, bem como as discussões feitas até este momento foram realizados utilizando a estratégia de otimização global com base na construção de metamodelos com e sem uso da técnica de validação cruzada. Foi observado que sem o uso dessa técnica, as funções de base radial múltiquadrada e múltiquadrada inversa, escolhidas e que necessitam de um parâmetro de forma c mostraram extremamente eficientes, porém um c adequado era escolhido arbitrariamente após exaustivos testes. Foi então proposto fazer uso da técnica de validação cruzada *leave-one-out* para uma escolha adequada do parâmetro de forma c , porém, para inserir tal técnica num processo iterativo seria necessário fazer uso de um algoritmo de otimização (CRSA) que buscasse o melhor c , e a cada iteração, conseqüentemente, cada novo metamodelo era construído e então diferentes valores para c eram obtidos. Foi observado que para algumas funções esta técnica foi, pode-se dizer muito eficiente, porém para outras funções, devido ao mal condicionamento da função interpolante que era construída a cada

momento, a escolha do melhor c foi prejudicado. Neste sentido, foi então feito um estudo para modificar a técnica ou melhorá-la de forma que pudesse satisfazer todas as situações.

O algoritmo de otimização usado para encontrar o valor de c adequado foi substituído por uma pequena rotina implementada e demonstrada na seção 5.5.4. Novos testes foram realizados e observou-se que os resultados foram bons. Porém, os testes foram realizados nas funções Dixon-Szegö, apenas.

Assim escolheu-se o problema de maximização da relação sustentação-arrasto de grades axiais de turbomáquinas para aplicação da metodologia agora sem escolha arbitrária de c e sem otimizador CRSA para o parâmetro de forma.

As mesmas configurações dispostas na seção 6.3 foram utilizadas, porém com algumas alterações. Neste experimento, não serão utilizados os resultados obtidos com CRSA direto foram. Apenas uma execução será realizada e os resultados obtidos após a convergência, serão mostrados juntamente com os resultados mostrados no experimento anterior, somente os que foram obtidos utilizando a estratégia OGM com escolha arbitrária de c .

Para a estratégia OGM, a função multiquádrica foi usada sem a necessidade de escolher c . O banco de dados inicial foi definido com PFC de dois níveis. Lembrando que o ótimo global não é conhecido com antecedência. Assim, o processo de otimização foi interrompido após exatamente 47 chamadas de função exata. A intenção agora é comparar as estratégias OGM sem LOOCV e OGM-LOOCV ao longo do processo de otimização inteiro.

A Tabela 6.6 mostra alguns resultados obtidos após as 47 avaliações da função exata. Pode-se ver que a estratégia OGM-LOOCV foi capaz de obter uma maior relação (sustentação-arrasto) e um coeficiente de perdas menor que o OGM e CRSA sozinho. Ambas as estratégias produzem deflexões do escoamento ligeiramente inferior que aqueles comparados com o perfil base. Estes resultados indicam que a estratégia OGM-LOOCV, agora com escolha automática de c é eficaz.

A Figura 6.24 mostra as formas finais do aerofólio em comparação com a forma do aerofólio base. Foram variados o arqueamento e a relação passo/corda do aerofólio. O arqueamento do aerofólio obtido com OGM-LOOCV foi ligeiramente menor do que o arqueamento do aerofólio base, e a relação passo/corda foi ligeiramente maior (ver Tabela 6.6). Neste caso, observa-se que os parâmetros variáveis estão muito próximos daqueles que são do perfil base. Nota-se que com aplicação da técnica de otimização global é possível

encontrar um ótimo bem próximo do ponto de partida. É importante notar que o coeficiente de perdas foi menor em relação às técnicas (CRSA e OGM) empregadas anteriormente.

Tabela 6.6 Resultados da Otimização

	Arqueamento	Passo/Corda	C_l	C_d	C_l/C_d	ζ	θ (ângulo de deflexão)
Perfil Base	1,500	1,0000	0,7186	0,0279	25,76	0,0320	24,32°
CRSA	1,540	1,1500	0,8022	0,0293	27,36	0,0294	23,55°
OGM	1,400	0,9675	0,6846	0,0241	28,41	0,0286	23,98°
OGM- LOOCV	1,480	1,0550	0,7425	0,0255	29,06	0,0279	23,84°

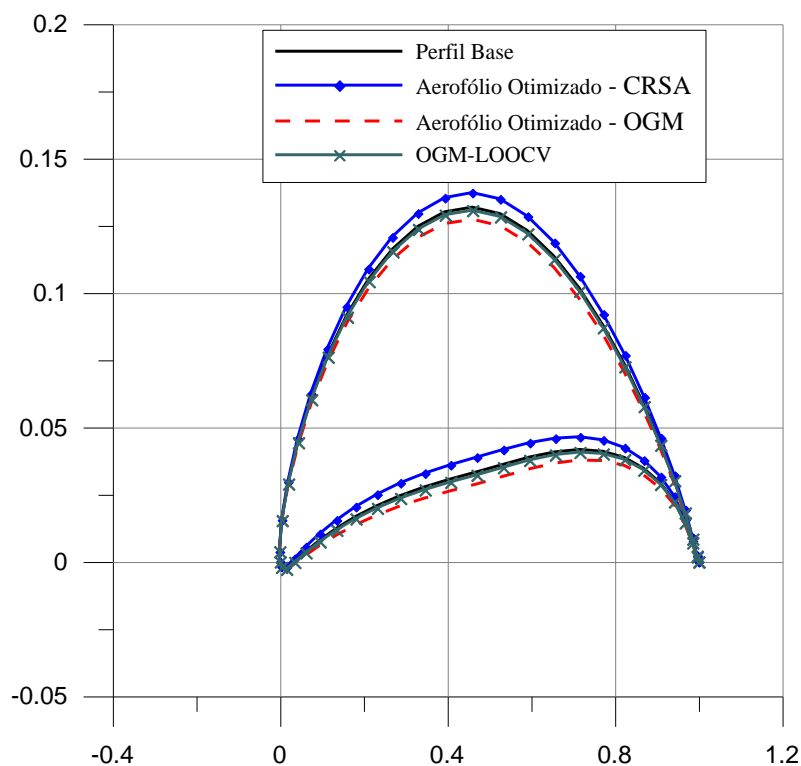


Figura 6.24 – Comparação do aerofólio-base com o aerofólio otimizado

Tabela 6.7 Histórico do processo de otimização

CRSA		OGM		OGM-LOOCV	
NAF*	C_l/C_d	NAF	C_l/C_d	NAF	C_l/C_d
1	23,5784	4	27,36396	1	22,7236
2	26,9881	6	27,37631	2	24,0521
6	27,2150	7	27,38754	3	27,5311
7	27,2201	8	27,41754	14	29,0632
13	27,3248	9	27,42456	47	29,0632
18	27,3349	17	28,40664		
39	27,3363	47	28,40664		
42	27,3594				
47	27,3594				

*Numero de avaliações da função

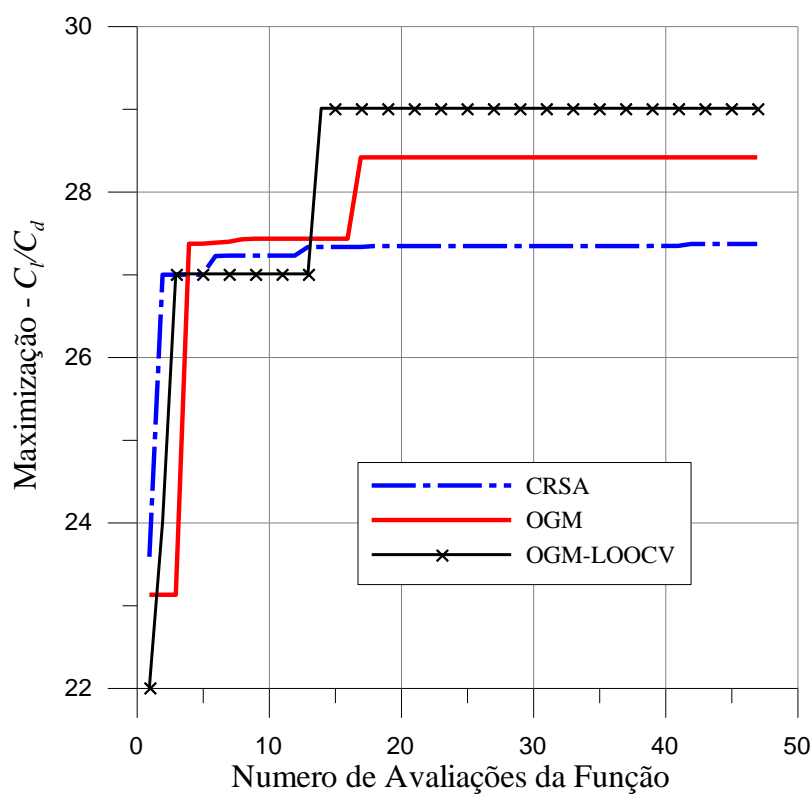


Figura 6.25 – Histórico do processo de otimização - OGM-LOOCV

Tabela 6.7 e Figura 6.25 mostram o histórico do processo de convergência. Na Tabela 6.7, apenas as ocorrências de melhoria de C_l/C_d são mostrados. O melhor ponto encontrado pela estratégia OGM-LOOCV ocorre na 14ª avaliação da função. Este resultado é melhor do que o que foi obtido com CRSA e com OGM com escolha arbitrária de c . OGM-LOOCV foi 2,3 % mais rápido do que OGM e produziu uma melhoria de 6.22% em relação ao CRSA sozinho, ou seja, 11 vezes mais rápido. Assim, devido à natureza específica deste exemplo, as propriedades de aceleração da estratégia OGM-LOOCV são mais bem avaliadas quando se visualiza toda a evolução, em vez de apenas o número de avaliações da função exata necessária para atingir um determinado objetivo.

6.6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este capítulo finaliza o trabalho desenvolvido com a realização de testes e demonstração dos resultados obtidos com a aplicação da estratégia de otimização global com base na construção de metamodelos e ajuste automático do parâmetro de forma c .

As aplicações envolveram um exemplo simples de grades de pás (escoamento 2D) e um rotor de turbina hidráulica axial (escoamento 3D).

Conclui-se, então, que a metodologia OGM-LOOCV (Otimização Global com Base em Metamodelos utilizando *leave one out cross validation*) destaca-se como uma ferramenta importante para redução dos números de avaliações da função-objetivo, resultando em conseqüente redução do esforço computacional, como também aprimora a construção dos metamodelos.

Capítulo 7

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

7.1 CONCLUSÕES

Analisando os resultados obtidos pode-se concluir que, as técnicas de metamodelagem demonstraram eficácia na construção de funções aproximadas de um modelo real. Então se tornam ferramentas de auxílio muito eficaz para otimizar processos que exigem recursos computacionais custosos.

O programa FBR respondeu de forma eficiente no confronto entre modelo exato e modelos aproximados. Todas as funções de base radial testadas demonstraram maior eficiência quando foram comparadas com os resultados obtidos do programa SRC. Ambos implementados em linguagem Fortran. O estudo comparativo entre a análise do programa FBR e SRC foi satisfatório, visto que, os resultados obtidos dos mesmos em relação aos obtidos dos modelos exatos foram eficientes e responderam aos critérios estatísticos de desempenho.

O programa HessTurbo é eficiente no cálculo do escoamento em grade, como comprovado com dados experimentais (Emery et al., 2002). Foi utilizado como modelo exato para construir metamodelos dos coeficientes de arrasto e sustentação, embora o metamodelo que representa o coeficiente de arrasto não demonstrou boa representação, devido a características particulares que o envolvem, os resultados foram satisfatórios.

O Programa OGM respondeu eficientemente na procura do mínimo global das funções de teste Dixon-Szegö, para todas as funções testadas e também para o cálculo inverso de grades, os mínimos foram encontrados com uma taxa de 100% de sucesso. Sua estrutura permitiu melhorar o processo de otimização, reduzir o número de chamadas da função objetivo e melhorar o desempenho do metamodelo.

O programa para cálculo inverso de grade demonstrou eficácia na procura de uma melhor distribuição de pressão para um determinado perfil, com parâmetros pré-definidos, para conseguir atingir o objetivo de perdas mínimos. Embora tal programa, utilizado também como modelo exato, não foi explorado mais amplamente.

O programa CRSA foi utilizado como um otimizador. Por ser um programa que envolve algoritmos estocásticos foram necessárias muitas execuções, para obter uma média. É importante ressaltar que algoritmos estocásticos são eficientes para realizar pesquisas globais. Foi utilizado dentro do programa OGM, para otimizar os metamodelos que foram construídos iterativamente, e auxiliar na construção de um banco de dados, onde foram armazenados os melhores pontos encontrados no processo, obedecendo à certas restrições de distância impostas.

Foi então utilizada a metodologia de construção iterativa de superfícies de resposta com funções de base radial em conjunto com o CRSA e aplicação de critérios heurísticos de atualização do banco de dado iterativo, aplicada à *solver* custosos, tais como CFD, de forma a atender a otimização de grades de turbomáquinas.

Os metamodelos foram construídos utilizando função de base radial, multiquádrica inversa para os testes com as funções Dixon-Szegö e Multiquádrica para aplicações nos problemas de engenharia da área de turbomáquinas.

Escolheu-se fazer uso da função multiquádrica e multiquádrica inversa que responderam de forma mais efetiva na aplicação da metodologia. A idéia era procurar o valor do parâmetro de forma que obtêm melhor desempenho. Para isso um algoritmo de otimização do parâmetro de forma c foi implementado.

Dois exemplos de projetos otimizados foram apresentados: uma grade axial (escoamento 2D) e um rotor de turbina hidráulica axial (escoamento 3D). A função objetivo para o primeiro exemplo foi a maximização da relação sustentação com o arqueamento do aerofólio e a relação passo-a-corda como variáveis de projeto. Para o segundo exemplo, o

objetivo era a maximização da eficiência hidráulica; ângulos de montagem na seção média na ponta da pá foram escolhidos como variáveis de projeto. O código comercial CFD-FLUENT® foi usado como *solver*. Como foi observado nas funções de teste Dixon-Szegö, a otimização usando a estratégia OGM aumentam as taxas de melhoria da função-objetivo, em comparação com CRSA sozinho.

Após os testes realizados e resultados obtidos com as estratégias acima relacionadas, percebeu-se a necessidade de otimizar o parâmetro de forma c que as funções de base radial adotadas necessitam. Assim sendo, novas conclusões são descritas abaixo advindo do acréscimo de novos estudos à pesquisa.

Foi então feita uma implementação alternativa da estratégia de otimização com restrições utilizando superfícies de resposta (CORS) algoritmo originalmente proposto por Regis & Shoemaker (2005), aqui nesta pesquisa foi referenciada OGM-LOOCV – Otimização Global com base em Metamodelos utilizando *leave one out cross validation*.

Um exemplo simples de grades de pás foi escolhido para testar a nova estratégia. O objetivo foi maximizar a relação sustentação/arrasto tendo como variáveis de projeto o arqueamento do aerofólio e a relação passo/corda. O código de CFD FLUENT® foi usado como *solver*. Dos resultados pode ser visto que o uso da estratégia OGM-LOOCV aumenta as taxas de melhora da função objetivo, em comparação com CRSA sozinho e também com OGM com escolha arbitrária de c .

A principal característica que foi observada durante os testes, foram à eficácia das funções de base radial – multiquádrica e multiquádrica inversa – essas funções necessitam de um parâmetro de forma c , que influencia de maneira significativa no número de avaliações da função-objetivo. Nesse sentido, foi implementado um esquema consistente que automatiza a escolha adequada do c .

Conclui-se, então, que a metodologia OGM-LOOCV (Otimização Global com Base em Metamodelos utilizando *leave one out cross validation*) destaca-se como uma ferramenta importante para redução dos números de avaliações da função-objetivo, resultando em conseqüente redução do esforço computacional, como também aprimora a construção dos metamodelos, se isso for considerado como a possibilidade de fazer uso de tais metamodelos para outros objetivos. E, além disso, a estratégia pode ser usada para melhorar a confiabilidade de um otimizador estocástico como, por exemplo, o CRSA.

7.2 PERSPECTIVAS FUTURAS

A presente pesquisa encontra-se no contexto dos principais temas que são abordados e discutidos no meio científico. Observa-se, então que é considerada bastante promissora a continuidade da mesma. A contribuição científica, objetivando o desenvolvimento de uma metodologia que possa ser aplicada efetivamente para otimização de projetos de turbomáquinas, foi então desenvolvida e como ampliação da metodologia, apresenta-se a seguir sugestões para desenvolvimentos futuros.

- Desenvolvimento de uma metodologia de projeto aplicado nas máquinas de fluxo (M.F.) utilizando estratégias de otimização global que tem como base na construção de metamodelos empregando algoritmos multiobjetivos.

- Ampliação da metodologia, incorporando métodos de otimização robustos e multiobjetivos, como por exemplo, o método da máxima entropia para modelagem de incertezas.

Como resultado da continuidade dessa pesquisa destaca-se algumas esperanças:

- Projetar uma turbina bomba axial de alto desempenho, através da parametrização da geometria da pá, de forma a introduzir os efeitos *sweep* e *dihedral*, com objetivo de reduzir os gradientes provocados pela folga de topo minimizando a formação de cavitação.

- Projetar um ventilador centrífugo de alta eficiência com base na integração de projeto conceitual 3D em CFD e algoritmos de otimização multiobjetivos e multidisciplinares. Este trabalho contempla as áreas de interação fluido-aero-acústica, de forma a reduzir os níveis de ruído mantendo alta eficiência.

- Projetar um canal para turbina hidráulica amigável para peixe com maiores níveis de eficiência resguardando a integridade do peixe com base na integração de projeto conceitual - CFD e algoritmos de otimização mono-objetivo.

- Projetar um canal meridional do rotor e difusor de um compressor centrífugo de forma a otimizar a eficiência isentrópica.

Apêndice A

SCRIPT PARA GERAÇÃO AUTOMÁTICA DE MALHA TCL/TK (LISTAGEM PARCIAL).

Em função do grande tamanho do script, apenas uma pequena parte deste será apresentado

```
### VARIAVEIS GEOMETRICAS
set beta2 19.71
set beta3 13.64
set Z 4           ;# numero de pás
set n 15          ;# numero de pares de pontos por perfil
set De 1400       ;# diâmetro externo (mm)
set Di 635        ;# diâmetro interno (mm)
set L1 797.6      ;# corda 1(mm)
set L2 879.0      ;# corda 2(mm)
set L3 989.8      ;# corda 3(mm)
set C0_E1 0.608   ;# coef. de afinamento da estação 1
set C0_E2 0.516   ;# coef. de afinamento da estação 2
set C0_E3 0.344   ;# coef. de afinamento da estação 3
set beta1 31.33   ;# angulo de montagem do perfil 1 (graus)
set beta2 "$beta2" ;# angulo de montagem do perfil 2 (graus)
set beta3 "$beta3" ;# angulo de montagem do perfil 3 (graus)
set XCE1 0.5      ;# % da corda referente ao centro de rotação no eixo X da estação 1
.....

#### PARAMETROS DE MALHA
set Yplus 0.4     ;# Yplus
set tetratio 1.35 ;# Razão de crescimento de células tetraédricas
set prism_height 12.5 ;# Espessura total das camadas prismáticas
set prism_layers 9 ;# Numero de camadas prismáticas
```

```
set prism_ratio 1.5      ;# Razão de crescimento entre camadas prismáticas
set  emax_fluido 12.5    ;# Tamanho Maximo de elemento no domínio fluido
set  emax_pa 7.5        ;# Tamanho Maximo do elemento nas superfícies das pás
set  emax_canal 25.0     ;# Tamanho Maximo dos elementos nas superfícies cilíndricas
do canal
set  emax_io 25.0       ;# Tamanho Maximo dos elementos na entrada e saída
set  emax_ogiva 17.5    ;# Tamanho Maximo dos elementos na ogiva
set  emax_eixo 25.0     ;# Tamanho Maximo dos elementos no eixo
set  emax_cubo 17.5     ;# Tamanho Maximo dos elementos no cubo
set  emax_periodic 25.0 ;# Tamanho Maximo dos elementos nas faces periódicas
```

Apêndice B

JOURNAL FILES PARA CÁLCULO DO ESCOAMENTO.

FLUENT® JOURNAL FILE PARA ROTOR DE TURBINA HIDRÁULICA AXIAL

```

;
;#####
;## Script de automatizacao de set-up case para canal periódico de turbina axial      ##
;##                                                                                      ##
;## Ex(windows):                                                                    ##
;## 'C:\v121\fluent\ntbin\win64\fluent.exe 3ddp -t8 -i -hidden canal.jou '          ##
;##                                                                                      ##
;## Autor: ERIC PERES PERES Versao 1.0 Fluent 12 18/10/2009                          ##
;##   modificado por Edna R. Silva 17/10/2011                                       ##
;#####
;
; #####   Read Case   #####
/file/read-case "canal.msh"
;
; #####   Grid Check  #####
/mesh/check
;
; #####   Grid Scale  #####
/mesh/scale 0.001 0.001 0.001
;
; #####   Change Units #####
/define/units angular-velocity rpm
;

```

```

;##### Define Materials #####
/define/materials/copy fluid water-liquid
;
;##### Set Solver #####
/define/models/solver/pressure-based yes
/define/models/steady?
/define/models/viscous/ke-realizable? yes
/solve/set/gradient-scheme yes
;
;##### Set Under-relaxation Values #####
; Default: Pressure 0.3 ; Density 1 ; Body forces 1 ; Momentum 0.7 ;
; Turbulent Viscosity 1 ; Turbulent Kinetic Energy (k) 0.8 ; Turbulent Dissipation
Rate(epsilon) 0.8
/solve/set/under-relaxation/body-force 1
/solve/set/under-relaxation/density 1
/solve/set/under-relaxation/pressure 0.3
/solve/set/under-relaxation/mom 0.6
/solve/set/under-relaxation/k 0.7
/solve/set/under-relaxation/epsilon 0.7
/solve/set/under-relaxation/turb-viscosity 0.85
;
;##### Set Convergence / Monitors #####
/solve/monitors/residual/plot? yes
/solve/monitors/residual/window 1
/solve/monitors/residual/check-convergence? yes yes yes yes yes yes
/solve/monitors/residual/convergence-criteria 0.0001 0.0001 0.0001 0.0001 0.001
0.001
/solve/monitors/force/moment-coefficient yes pa_pressao pa_succao cubo ogiva () yes
yes "moment.log" yes 2 no 0 0 0 1 0
;
;##### Set Operating Conditions #####
/define/operating-conditions/gravity yes 0 -9.81 0
/define/operating-conditions/operating-pressure 101325
/define/operating-conditions/reference-pressure-location 0 -2.66 0
;
;##### Set Boundary Conditions #####
/define/boundary-conditions/fluid fluido yes water-liquid no no no yes 0 0 0 -360 0
0 0 1 0 no no no
/define/boundary-conditions/zone-type entrada mass-flow-inlet
/define/boundary-conditions/mass-flow-inlet entrada no yes yes no 2447.5 no 0 yes
no yes no 0 no 10.749 no -6.543 no no yes 2 2
/define/boundary-conditions/zone-type saida pressure-outlet
/define/boundary-conditions/pressure-outlet saida no 0 no yes no no yes 5 10 no yes
no 2447.5 no 5000000 no 1
/define/boundary-conditions/wall pa_pressao yes motion-bc-moving no yes yes no no 0
no 0.5 0 0 0 0 1 0
/define/boundary-conditions/wall pa_succao yes motion-bc-moving no yes yes no no 0
no 0.5 0 0 0 0 1 0
/define/boundary-conditions/wall cubo yes motion-bc-moving no yes yes no no 0 no
0.5 0 0 0 0 1 0
/define/boundary-conditions/wall ogiva yes motion-bc-moving no yes yes no no 0 no

```

```

0.5 0 0 0 0 1 0
/define/boundary-conditions/wall eixo yes motion-bc-moving no no yes no no 0 no 0.5
0 0 0 0 0 1 0
/define/boundary-conditions/wall canal_ext1 yes motion-bc-moving no no yes no no 0
no 0.5 0 0 0 0 1 0
/define/boundary-conditions/wall canal_ext2 yes motion-bc-moving no no yes no no 0
no 0.5 0 0 0 0 1 0
;
;##### Grid Interfaces #####
/define/boundary-conditions/zone-type per_l1 interface
/define/boundary-conditions/zone-type per_l2 interface
/define/boundary-conditions/zone-type per_r1 interface
/define/boundary-conditions/zone-type per_r2 interface
;
;##### Make Periodic #####
/define/mesh-interfaces/make-periodic per_l1 per_r1 yes 90 yes per_1
/define/mesh-interfaces/make-periodic per_l2 per_r2 yes 90 yes per_2
;
;##### Turbo Topology #####
/define/turbo/define-topology "canal_axial" cubo ogiva () canal_ext1 canal_ext2 ()
entrada () saida () pa_pressao pa_succao () per_l1 per_l2 per_r1 per_r2 ()
;
;##### Initialize #####
/solve/initialize/compute-defaults/mass-flow-inlet entrada
/solve/initialize/initialize-flow
;
;##### Solve #####
/solve/iterate 1000
;
;##### Turbo Report #####
;/turbo/compute-report canal_axial mass-weighted
;
/turbo/write-report "turboreport.log" canal_axial Mass yes
;
;##### Save Case and Dat #####
/file/write-case-data "canal.cas.gz"
;
;##### Exit #####
exit

```