

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS Faculdade de Engenharia Mecânica

DANIEL CANDELORO CUNHA

Análise de sensibilidade de variação finita assistida por redes neurais artificiais para concepção de metamateriais

CAMPINAS 2023

Análise de sensibilidade de variação finita assistida por redes neurais artificiais para concepção de metamateriais

Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica, na Área de Mecânica dos Sólidos e Projeto Mecânico

Orientador: Prof. Dr. Renato Pavanello

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA TESE DEFENDIDA PELO ALUNO DANIEL CAN-DELORO CUNHA, E ORIENTADA PELO PROF. DR. RENATO PAVANELLO.

CAMPINAS

2023

Ficha catalográfica Universidade Estadual de Campinas Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

Cunha, Daniel Candeloro, 1991-

C914a Análise de sensibilidade de variação finita assistida por redes neurais artificiais para concepção de metamateriais / Daniel Candeloro Cunha. – Campinas, SP : [s.n.], 2023.

Orientador: Renato Pavanello. Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.

1. Otimização topológica. 2. Análise de sensibilidade. 3. Metamateriais. 4. Redes neurais (Computação). I. Pavanello, Renato, 1959-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

Informações Complementares

Título em outro idioma: Finite variation sensitivity analysis assisted by artificial neural networks for designing metamaterials Palavras-chave em inglês: Topology optimization Sensitivity analysis **Metamaterials** Artificial neural network Área de concentração: Mecânica dos Sólidos e Projeto Mecânico Titulação: Doutor em Engenharia Mecânica Banca examinadora: Renato Pavanello [Orientador] Emílio Carlos Nelli Silva **Renato Picelli Sanches** José Roberto de França Arruda William Martins Vicente Data de defesa: 01-12-2023 Programa de Pós-Graduação: Engenharia Mecânica

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a) - ORCID do autor: https://orcid.org/0000-0002-3633-1974

⁻ Currículo Lattes do autor: http://lattes.cnpq.br/7885566840094835

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO ACADÊMICO

Análise de sensibilidade de variação finita assistida por redes neurais artificiais para concepção de metamateriais

Autor: Daniel Candeloro Cunha Orientador: Prof. Dr. Renato Pavanello

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta Tese:

Prof. Dr. Renato Pavanello ENG. MECÂNICA / UNICAMP

Prof. Dr. José Roberto de França Arruda ENG. MECÂNICA / UNICAMP

Prof. Dr. William Martins Vicente ENG. AGRÍCOLA / UNICAMP

Prof. Dr. Emílio Carlos Nelli Silva ENG. MECATRÔNICA E SISTEMAS MECÂNICOS / EP-USP

Prof. Dr. Renato Picelli Sanches ENG. NAVAL E OCEÂNICA / EP-USP

A Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no processo de vida acadêmica do aluno.

Campinas, 01 de Dezembro de 2023

Dedico este trabalho a minha companheira, Gabriela Natacha Alvares Numazawa, por acreditar em mim, por não me deixar cair, por sua doçura misteriosa e sua dureza apaixonante, pelas discussões revigorantes que me mantêm atento, pelo apoio cuidadoso que me dá tranquilidade, pelas risadas e aventuras que compartilhamos, pelo carinho que temos um pelo outro, pela felicidade que sinto vivendo a seu lado.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001. O presente trabalho foi realizado com apoio da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), processo nº 2019/19237-7. Agradeço ao CCES (*Center for Computing in Engineering and Sciences*), pela colaboração e pela infraestrutura disponibilizada. Aos colegas Breno Vincenzo de Almeida e Heitor Nigro Lopes, por tudo o que me ensinaram no decorrer desses seis anos que trabalhamos juntos, pelas discussões filosóficas sobre álgebra linear e pelos códigos caóticos, mas funcionais, que produzimos juntos nas mais diversas linguagens. E a meu orientador, Professor Renato Pavanello, pelo suporte que me deu quando foi necessário, pela compreensão nos momentos difíceis e pela amizade, que espero preservar pelo resto da vida.

Eles vieram por todos os lados, e nós fomos pegos desprevenidos.

Atacaram as Universidades Públicas, secaram as instituições de fomento, ofenderam estudantes, censuraram professores, ameaçaram pesquisadores. Desprezaram o conhecimento que acumulamos ao longo de milênios, rebaixaram a própria ciência, transformaram ignorância em opinião.
No processo, destruíram o que viram pela frente. Vieram com estupidez, violência, fogo e morte. A estupidez foi abafada pela violência, que logo perdeu foco para as florestas incendiadas, das quais nos esquecemos após a matança, após 700 000 vidas interrompidas num extermínio.

Toda a nossa inteligência não foi capaz de vencer o embate, eles definiram o jogo, eles pautaram as discussões, a ponto que até as mortes já ficaram para trás. Hoje, as coisas de que mais nos lembramos são as baixarias dos personagens toscos e perversos que produziram esse espetáculo horripilante.

> Mas como puderam os estúpidos nos derrotar assim? Seriam eles mais espertos do que parecem? Ou seríamos nós menos do que pensamos? Seria porque falhamos em democratizar os saberes? Seria porque falhamos em conscientizar as pessoas? Seria porque fomos passivos, inertes, apáticos?

Talvez agora fique mais claro que o resultado de uma ciência despolitizada não é uma fantasiosa neutralidade científica, mas uma verdadeira política obscurantista. Inspirando-me em Tavares, declaro: uma ciência que não se preocupa com a justiça social é uma ciência que condena os povos a uma letal submissão de seus corpos e mentes, perpetua a exploração humana e impossibilita a emancipação dos oprimidos. Eles vieram por todos os lados,

lentamente, em plena luz do dia,

e nós fomos pegos desprevenidos...

(Um lembrete aos pesquisadores, Daniel Candeloro Cunha)

RESUMO

Problemas de homogeneização inversa podem ser resolvidos numericamente para desenvolver metamateriais: materiais artificiais que podem ter propriedades incomuns, de acordo com suas microestruturas. Considerando metamateriais periódicos, métodos de otimização topológica podem ser usados para encontrar microestruturas que resultem em propriedades efetivas desejadas. Neste trabalho, a célula periódica que define a microestrutura é hexagonal e possui simetria diedral D_3 , o que garante propriedades homogeneizadas isotrópicas. O problema abordado consiste em projetar metamateriais com coeficientes de Poisson prescritos e valores de módulo de Young mínimos. Métodos discretos de otimização topológica são utilizados. Os problemas são abordados através de programação linear inteira sequencial. A principal etapa dessa abordagem é a linearização das funções de variáveis binárias, chamada de análise de sensibilidade. Na maior parte dos trabalhos da área, esse procedimento é feito através de uma relaxação contínua das funções, que então são linearizadas pelo truncamento de primeira ordem de suas séries de Taylor. Isso resulta num procedimento de custo computacional relativamente baixo e permite o reaproveitamento de expressões de sensibilidade desenvolvidas para métodos contínuos. Contudo, quando tal relaxação não é feita de maneira rigorosa, os erros de linearização podem ser demasiadamente elevados, prejudicando a efetividade e a estabilidade da otimização. Nesta tese, propõem-se formas sistemáticas de realizar a análise de sensibilidade, de uma maneira adequada para métodos discretos. As expressões convencionalmente utilizadas são obtidas como casos particulares, menos precisos, da abordagem desenvolvida, chamada de "Sensibilidade por Gradientes Conjugados". Essa abordagem não necessita de relaxações contínuas e fornece uma sequência de expressões de precisão crescente para os valores de sensibilidade. Expressões foram desenvolvidas para o caso de minimização de complacência mecânica, então, elas foram estendidas para o caso de concepção de metamateriais isotrópicos. Além disso, propõe-se utilizar redes neurais artificiais para estimar os valores exatos a partir dos valores aproximados obtidos pela abordagem proposta. Para desenvolver essas redes, extensos conjuntos de dados foram gerados. Os códigos usados para gerar os dados foram disponibilizados em repositórios públicos do GitHub. A disponibilização possibilita a utilização dos dados por outros pesquisadores que trabalhem com métodos de otimização topológica assistidos por aprendizado de máquina. As redes propostas foram treinadas e suas performances foram avaliadas em conjuntos de teste. Avaliou-se também a capacidade de generalização de cada rede em relação ao refinamento da malha. Por fim, a análise de sensibilidade de variação finita assistida por redes neurais artificiais foi utilizada para abordar um problema realista de concepção de metamateriais. Resultados promissores foram obtidos. As redes desenvolvidas tiveram sucesso em tornar os valores de sensibilidade mais precisos, o que resultou em procedimentos de otimização mais efetivos e estáveis. Contribuições relevantes foram feitas a essa área pouco explorada,

de análises de sensibilidade para métodos de otimização discretos, e à subárea ainda menos explorada, de utilização de técnicas de aprendizado de máquina para aprimorar tais análises. A análise de sensibilidade foi formalizada dentro do paradigma da programação linear inteira sequencial, novas expressões de sensibilidade foram descritas, extensos conjuntos de dados foram gerados, redes neurais artificiais foram desenvolvidas e diversos exemplos numéricos foram exibidos para ilustrar cada contribuição. Após a discussão de cada resultado e da elaboração das conclusões, apresentam-se alguns temas pertinentes para trabalhos futuros.

Palavras-chaves: Otimização Topológica Discreta; Análise de Sensibilidade; Metamaterial; Rede Neural Artificial.

ABSTRACT

Inverse homogenization problems can be numerically solved to develop metamaterials: artificial materials that can have uncommon properties, according to their microstructures. Considering periodic metamaterials, topology optimization methods may be used to obtain microstructures that yield desired effective properties. In this work, the periodic cell that defines the microstructure is hexagonal and it has dihedral D_3 symmetry, which ensures isotropic homogenized properties. The considered problem is to design metamaterials with prescribed Poisson ratios and minimal values for Young's modulus. Discrete topology optimization methods are used. The problems are approached through sequential integer linear programming. The main task of this approach is the linearization of the functions of binary variables, referred to as sensitivity analysis. In most works, this procedure is performed through a continuous relaxation of the functions, which are then linearized by first-order truncation of their Taylor series. This results in a procedure with relatively low computational costs, in which sensitivity expressions developed for continuous methods can be reused. However, when such relaxation is not rigorously performed, the linearization errors may be too high, affecting the effectiveness and stability of the optimization. In this thesis, systematic sensitivity analyses that are suitable for discrete methods are proposed. The usual expressions are obtained as particular cases, less accurate, of the developed approach, referred to as "Conjugate Gradient Sensitivity". This approach does not require continuous relaxations and it provides a sequence of expressions with increasing accuracy for the sensitivity values. Expressions were developed for the case of mechanical compliance minimization, then, they were extended to the case of designing isotropic metamaterials. Furthermore, it is proposed to use artificial neural networks to estimate the exact sensitivity values from the approximated values obtained by the proposed approach. To develop these networks, extensive datasets were generated. The codes used to generate the data have been made available in public GitHub repositories. By making them available, other researchers who work with topology optimization methods assisted by machine learning can benefit from these datasets. The proposed networks were trained and their performances were evaluated in test datasets. Generalization capabilities with respect to mesh refinement were also evaluated for each trained network. Lastly, the finite variation sensitivity analysis assisted by artificial neural networks was used to design metamaterials under realistic settings. Promising results were obtained. The developed networks successfully provided more accurate sensitivity values and, by using these improved sensitivity values, the optimization procedures became more effective and stable. Relevant contributions were made to this underexplored field, of sensitivity analysis for discrete optimization methods, and to the even less explored field, of using machine learning techniques to improve such analyses. A formal definition of the sensitivity analysis was presented for sequential integer linear programming approaches,

novel sensitivity expressions were described, extensive datasets were generated, artificial neural networks were developed and many numerical examples were exhibited to illustrate each contribution. After discussing each result and drawing conclusions, some pertinent topics for future work are presented.

Keywords: Discrete Topology Optimization; Sensitivity Analysis; Metamaterial; Artificial Neural Network.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura	1.1 -	Conceitos Introduzidos	3
Figura	2.1 -	Domínio de Projeto (Estrutura sob Carregamento Estático) 44	2
Figura	2.2 -	Condições de Contorno (Estrutura sob Carregamento Estático) 43	3
Figura	2.3 -	Numeração dos Elementos (Estrutura sob Carregamento Estático) 44	3
Figura	2.4 -	Numeração dos Nós (Estrutura sob Carregamento Estático) $\ .$ 44	3
Figura	2.5 -	Numeração Local dos Nós (Estrutura sob Carregamento Estático) 43	3
Figura	2.6 -	Domínio da Célula	6
Figura	2.7 -	Domínio de Projeto (Homogeneização de Material Periódico) 4'	7
Figura	2.8 -	Numeração dos Elementos (Homogeneização de Material Periódico) 4'	7
Figura	2.9 -	Numeração dos Nós (Homogeneização de Material Periódico) 44	8
Figura	2.10-	-Numeração Local dos Nós (Homogeneização de Material Periódico) 44	8
Figura	2.11-	-Função de Variáveis Binárias	9
Figura	2.12-	-Conjuntos de Vizinhança	0
Figura	2.13-	-Domínio de Filtragem (Concepção de Metamateriais)	0
Figura	2.14-	-Influência da Filtragem na Topologia Otimizada	0
Figura	2.15-	-Influência do Operador Morfológico na Topologia Otimizada	3
Figura	2.16-	-Fluxograma da Programação Linear Inteira Sequencial	5
Figura	3.1 –	Linearizações Aproximadas	0
Figura	4.1 -	Condições de Contorno Variáveis	6
Figura	4.2 -	Topologia Inicial para a Concepção de Metamateriais 109	9
Figura	5.1 -	Remoção de Bordas	6
Figura	5.2 -	Entradas e Saídas Consideradas	8
Figura	5.3 –	Dados de Entrada Vetorizados e Empilhados	9
Figura	5.4 -	Tratamento de Borda para o Problema de Minimização de Complacência11	9
Figura	5.5 -	Tratamento de Borda para o Problema de Concepção de Metamateriais 12	0
Figura	5.6 -	Aumento de Dados para o Problema de Minimização de Complacência 12	1
Figura	5.7 -	Aumento de Dados para o Problema de Concepção de Metamateriais $% \left({{\mathcal{L}}_{{\mathcal{A}}}} \right)$. 122	2
Figura	5.8 -	Neurônio Artificial (Perceptron)	6
Figura	5.9 -	Funções de Ativação	8
Figura	5.10 -	Perceptron Multicamadas	9
Figura	5.11-	-Máquina de Aprendizado Extremo	0
Figura	6.1 –	Estrutura de Dois Pórticos	7
Figura	6.2 -	Estruturas de Dois Pórticos com $V_f = 99\%$	8
Figura	6.3 –	Linearizações da Complacência em Relação a x_a	8
Figura	6.4 -	Linearizações da Complacência em Relação a x_b	9
Figura	6.5 -	Otimização da Estrutura de Dois Pórticos com $V_f(ar{x}^{(0)}) = 100\%$ 14	0

Figura	6.6 – Otimização da Estrutura de Dois Pórticos com $V_f(\bar{\boldsymbol{x}}^{(0)}) = 91\%$ 140
Figura	6.7 – Estrutura de Dois Pórticos com Malhas Refinadas
Figura	6.8 – Mapas de $\ \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{i}}\ _2$ para Diferentes Malhas $\dots \dots \dots$
Figura	6.9 – Valores de Sensibilidade na Estrutura de Dois Pórticos $\ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ $
Figura	6.10–Erro Relativo para Diferentes Malhas
Figura	6.11–Viga Engastada-Livre
Figura	6.12–Linearizações para a Viga Engastada-Livre
Figura	6.13–Otimização da Viga Engastada-Livre
Figura	6.14–Número de Passos do MGC para Atingir Diferentes Critérios 146
Figura	6.15–Vigas Engastadas-Livres Otimizadas
Figura	6.16–Viga Biapoiada
Figura	6.17–Vigas Biapoiadas Otimizadas
Figura	6.18–Tempos de Execução das Principais Tarefas
Figura	6.19–Medidas de Precisão para $\boldsymbol{\alpha}^{[h_{\nu}]}$
Figura	6.20–Medida de Erro para $\boldsymbol{\alpha}^{[\hat{E}]}$
Figura	6.21–Otimização Usando Valores Exatos de Sensibilidade $(N_d=256)$ 152
Figura	6.22–Soluções Otimizadas Usando Valores Exatos de Sensibilidade ($N_d = 256$)153
Figura	6.23–Mapas de $\boldsymbol{\alpha}^{[h_{\nu}]}$ para a Topologia Inicial ($N_d = 256$)
Figura	6.24–Precisão de $\boldsymbol{\alpha}^{[h_{\nu}]}$ para a Topologia Inicial $(N_d = 256)$
Figura	6.25–Mapas de $\boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{h}_{\boldsymbol{\nu}}]}$ para a Topologia Final $(N_d=256)$
Figura	6.26–Precisão de $\boldsymbol{\alpha}^{[h_{\nu}]}$ para a Topologia Final $(N_d = 256)$
Figura	6.27–Mapas de $\boldsymbol{\alpha}^{[\hat{E}]}$ para a Topologia Inicial ($N_d=256$)
Figura	6.28–Erro de $\boldsymbol{\alpha}^{[\hat{E}]}$ para a Topologia Inicial ($N_d = 256$)
Figura	6.29–Mapas de $\boldsymbol{\alpha}^{[\hat{E}]}$ para a Topologia Final ($N_d = 256$)
Figura	6.30–Erro de $\boldsymbol{\alpha}^{[\hat{E}]}$ para a Topologia Final ($N_d = 256$)
Figura	6.31–Otimização Usando ICPO Simples ($N_d = 256$)
Figura	6.32–Otimização Usando SGC-2 ($N_d = 256$)
Figura	6.33–Soluções Otimizadas para uma Topologia Inicial Sólida $\left(N_d=256\right)~$. 158
Figura	6.34–Soluções Otimizadas com Parâmetros Usuais $(N_d=256)$
Figura	6.35–Otimização usando ICPO Simples com $p_h=p_E=0 \ (N_d=16384)$ 160
Figura	6.36–Otimização usando ICPO Simples com $p_h=p_E=1 \ (N_d=16384)$ 161
Figura	6.37–Otimização usando ICPO Simples sem Filtros e Mom. $\left(N_d=16384\right)~$. 162
Figura	6.38–Otimização usando SGC-2 sem Filtros e Mom. $(N_d=16384)$ 163
Figura	6.39–Otimização usando ICPO Simples sem Mom. e Op. Morf. $\left(N_d=16384\right)163$
Figura	6.40–Otimização usando SGC-2 sem Mom. e Op. Morf. $(N_d=16384)$ 164
Figura	6.41–Diversas Células Otimizadas ($N_d = 16384$)
Figura	6.42–Estrutura Composta por Células Periódicas
Figura	6.43–Estruturas Compostas por Células Periódicas Deformadas $\ .\ .\ .\ .\ .$ 166
Figura	6.44–Células Deformadas e seus Comportamentos Qualitativos

Figura	6.45–Evolução das Funções na Otimização de uma Viga Usual $\ .\ .\ .\ .$	170
Figura	6.46–Solução da Otimização de uma Viga Usual (it. 42) \ldots \ldots \ldots \ldots	170
Figura	6.47–Topologia e Mapas de Sensibilidade para uma Viga Usual (it. 32) \ldots .	171
Figura	6.48–Viga Usual Deformada (it. 32)	171
Figura	6.49–Topologias Otimizadas para Diferentes Valores de p_{bc}	172
Figura	6.50–Topologias Otimizadas para Diferentes Valores de r_{bc}	172
Figura	6.51–Topologias Otimizadas para Diferentes Valores de p_{ld}	173
Figura	6.52–Topologias Otimizadas para Diferentes Valores de r_{ld}	174
Figura	6.53–Evolução das Funções para o Caso com 360 Iterações	174
Figura	6.54–Topologias para o Caso com 360 Iterações	175
Figura	6.55–Evolução das Funções para o Caso com 52 Iterações	176
Figura	6.56–Topologias para o Caso com 52 Iterações	176
Figura	6.57–Propriedades de Todos os Metamateriais Gerados	177
Figura	6.58–Propriedades dos Metamateriais Otimizados	178
Figura	6.59–Células Otimizadas e suas Propriedades Homogeneizadas	179
Figura	6.60–Cortes do Gráfico de Dispersão dos Resultados Otimizados	180
Figura	6.61–Topologias Otimizadas com Diferentes Coeficientes de Poisson ("A") $% \mathcal{A}$.	180
Figura	6.62–Topologias Otimizadas com Diferentes Módulos de Young ("B") 	180
Figura	6.63–Evolução das Funções para $\hat{\nu}^*=-0,3$ e $\hat{E}^{\min}=20\%$	181
Figura	6.64–Topologia Otimizada para $\hat{\nu}^* = -0.3 \text{ e } \hat{E}^{\min} = 20\%$ (it. 48)	182
Figura	6.65–Topologias para $\hat{\nu}^* = -0.3 \text{ e} \hat{E}^{\min} = 20\%$	182
Figura	6.66–Mapas de Sensibilidade para $\hat{\nu}^* = -0.3$ e $\hat{E}^{\min} = 20\%$ (it. 48)	183
Figura	6.67–Célula sob Macrodeformações Canônicas (it. 48)	183
Figura	6.68–Evolução das Funções para o Caso com 292 Iterações 	184
Figura	6.69–Topologias para o Caso com 292 Iterações	184
Figura	6.70–Evolução das Funções para o Caso com 37 Iterações	185
Figura	6.71–Topologias para o Caso com 37 Iterações	186
Figura	6.72–Varredura de λ para a rede Linear S0-V1-ET (Complacência) $~$	187
Figura	6.73–Varredura de λ para a rede Linear S2-V9-ET (Complacência) $~$	188
Figura	6.74–Saídas das MAE para Entradas Simétricas Aleatórias (Complacência) .	196
Figura	6.75–Saídas das MAE para Entradas Simétricas Aleatórias (Metamaterial) $% {\rm (Metamaterial)}$.	197
Figura	6.76–Saídas das MAE para Dados Simétricos (Complacência)	198
Figura	6.77–Saídas das MAE para Dados Simétricos (Metamaterial)	199
Figura	6.78–Arquiteturas Selecionadas para as Redes PMC	201
Figura	6.79–Saídas das Redes PMC para Dados Simétricos (Complacência)	204
Figura	6.80–Saídas das Redes PMC para Dados Simétricos (Metamaterial)	205
Figura	6.81–Valores de EQM para cada ASVF (Complacência)	211
Figura	6.82–Valores de EQM para cada ASVF (Metamaterial)	211
Figura	6.83–Viga Engastada-Livre em Diferentes Discretizações	213

Figura 6.84–Erro ℓ^2 Relativo para Diferentes Discretizações (Complacência) 213
Figura 6.85–Erro ℓ^∞ Relativo para Diferentes Discretizações (Complacência) 214
Figura 6.86–Coeficiente de Spearman para Diferentes Discretizações (Complacência) 215
Figura 6.87–Fração de Sensibilidades Subestimadas e Superestimadas (Complacência)215
Figura 6.88–Mapas de Sensibilidade de cada Abordagem (Complacência) 216
Figura 6.89–Célula de Base em Diferentes Discretizações
Figura 6.90–Erro ℓ^2 Relativo para Diferentes Discretizações (Metamaterial) 218
Figura 6.91–Erro ℓ^∞ Relativo para Diferentes Discretizações (Metamaterial) $~$ 218
Figura 6.92–Coeficiente de Spearman para Diferentes Discretizações (Metamaterial) 218
Figura 6.93–Fração de Sensibilidades Subestimadas e Superestimadas (Metamaterial) 219
Figura 6.94–Mapas de Sensibilidade de cada Abordagem (Metamaterial) 220
Figura 6.95–Evolução das Propriedades Homogeneizadas para a Abordagem SGC-0 $$ 221 $$
Figura 6.96–Evolução das Propriedades Homogeneizadas para a Abordagem SGC-2 $$ 222 $$
Figura 6.97–Evolução das Propriedades Homogeneizadas para a Abordagem PMC $$. 223
Figura 6.98–Eficiência das Iterações para a Abordagem SGC-0 \ldots \ldots \ldots \ldots 225
Figura 6.99–Eficiência das Iterações para a Abordagem SGC-2
Figura 6.100 Eficiência das Iterações para a Abordage m ${\rm PMC}$ \ldots \ldots \ldots \ldots 225
Figura 6.101-Topologias Otimizadas
Figura 6.102 S oluções Candidatas

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 – Parâmetros de Entrada (Viga Engastada-Livre) $\ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ $
Tabela 4.2 – Arquivos Gerados (Viga Engastada-Livre)
Tabela 4.3 – Parâmetros de Entrada (Célula de Base)
Tabela 4.4 – Arquivos Gerados (Célula de Base)
Tabela 5.1 – Conjuntos de Dados para o Problema de Minimização de Complacência 124
Tabela 5.2 – Conjuntos de Dados para o Problema de Concepção de Metamateriais 125
Tabela 6.1 – Tempo de Execução das Principais Tarefas (em segundos) $\ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ $
Tabela 6.2 – Coeficientes de Regularização para a Rede Linear (Complacência) 188
Tabela 6.3 – Coeficientes de Regularização para a Rede Linear (Metamaterial) $\ . \ . \ . \ 189$
Tabela 6.4 – Coeficientes de Regularização para a MAE (Complacência) 189
Tabela 6.5 – Coeficientes de Regularização para a MAE (Metamaterial) 190
Tabela $6.6-{\rm Coeficientes}$ de Regularização para a Rede PMC (Complacência) $~$ 203
Tabela 6.7 – Coeficientes de Regularização para a Rede PMC (Metamaterial) 203
Tabela 6.8 – Performances da SGC (Complacência) \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 206
Tabela 6.9 – Performances da SGC (Metamaterial) $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 206$
Tabela 6.10–Performances da Rede Linear (Complacência) \hdots
Tabela 6.11–Performances da Rede Linear (Metamaterial)
Tabela 6.12–Performances da MAE (Complacência)
Tabela 6.13–Performances da MAE (Metamaterial)
Tabela 6.14–Performances da PMC (Complacência)
Tabela 6.15–Performances da PMC (Metamaterial)
Tabela 6.16–Performances das Redes ES e ET nos Conjuntos ET e ES $\ \ldots\ \ldots\ 210$
Tabela 6.17–Performances das Redes de cada Caso para os Conjuntos Cruzados 211

LISTA DE PSEUDOCÓDIGOS

3.1	Gradientes Conjugados Pré-condicionado (Complacência)	•	•	•	•	•	 •		89
3.2	Gradientes Conjugados Pré-condicionado (Metamaterial)					•	 •	1	01

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADAM	Adaptive Moment Estimation
ASVF	Análise de Sensibilidade de Variação Finita
BESO	Bidirectional Evolutionary Structural Optimization
EQM	Erro Quadrático Médio
ICAO	Interpolação Contínua de Alta Ordem
ICPO	Interpolação Contínua de Primeira Ordem
KKT	Karush-Kuhn-Tucker
MAE	Máquina de Aprendizado Extremo
MGC	Método dos Gradientes Conjugados
PCS	Programação Convexa Sequencial
PLIS	Programação Linear Inteira Sequencial
PMC	Perceptron Multicamadas
ReLU	Rectified Linear Unit
RNA	Rede Neural Artificial
SERA	Sequential Element Rejections and Admissions
SGC	Sensibilidade por Gradientes Conjugados
SIMP	Solid Isotropic Material with Penalization
SW	Sensibilidade por Woodbury
TCC	Taxa de Classificações Corretas
TOBS	Topology Optimization of Binary Structures
ES	redes treinadas apenas com dados de elementos sólidos
ET	redes treinadas com a totalidade dos dados
$\mathbf{S0}$	redes com a aproximação SGC-0 como entrada
S1	redes com as aproximações SGC-0 e SGC-1 como entradas

- S2 redes com as aproximações SGC-0, SGC-1 e SGC-2 como entradas
- V1 redes com entradas referentes ao elemento de interesse
- V9 redes com entradas referentes ao elemento de interesse e seus vizinhos

LISTA DE SÍMBOLOS

0	vetor de zeros
$lpha^{\langle k angle}$	tensor de coeficientes de uma função de variáveis binárias
$lpha^{[ext{h}]}$	vetor de sensibilidades da função \boldsymbol{h}
$lpha^{[ext{fil}]}$	vetor de sensibilidades filtrado
$lpha^{[\mathrm{nf}]}$	vetor de sensibilidades filtrado e normalizado
$lpha^{[m mom]}$	vetor de sensibilidades com momento
$lpha^{[ext{nm}]}$	vetor de sensibilidades com momento e normalizado
β	parâmetro de penalidade da fração de volume
γ	parâmetro de momento dos vetores de sensibilidade
$\delta V_f^{\rm max}$	valor máximo para a redução de fração de volume em cada iteração
$\delta \hat{E}^{\max}$	valor máximo para a redução de módulo de Young em cada iteração
Δx	vetor de variação topológica
δ_u	estimativa da variação finita do vetor de deslocamentos
$arepsilon_u$	erro da variação finita do vetor de deslocamentos
ε_v	coeficiente da função ReLU com vazamento
$\eta^{(j)}$	eficiência da j -ésima iteração
λ	parâmetro de regularização ℓ^2 das Redes Neurais Artificiais
Λ	matriz de regularização ℓ^2 das Redes Neurais Artificiais
Λ_i	matriz diagonal dos autovalores de A_i
μ_k	k-ésimo coeficiente do Método dos Gradientes Conjugados
ν	coeficiente de Poisson do material de base
$\widehat{ u}$	coeficiente de Poisson do metamaterial
$\hat{\nu}^*$	valor prescrito para o coeficiente de Poisson homogeneizado

π	função de ativação
arphi	função de interpolação contínua
ϕ_{m1}	coeficiente para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
ϕ_{m2}	coeficiente para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
$\phi_{\eta 2}$	coeficiente para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
Φ_i	matriz ortogonal dos autove tores de \boldsymbol{A}_i
ψ	parâmetro de paciência
ω_{hm}	coeficiente para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
ω_{mk}	coeficiente para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
$\omega_{k\eta}$	coeficiente para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
$\omega_{\eta\xi}$	coeficiente para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
a	entrada das Redes Neurais Artificiais
A_{Ω}	área da célula hexagonal
A	matriz com entradas das Redes Neurais Artificias
٨	matriz auviliar para a análisa da sonsibilidada da alamanta <i>i</i>
A_i	matriz auxinar para a analise de sensibilidade do elemento i
\mathbf{A}_i b	saída esperada para as Redes Neurais Artificiais
A_i b \tilde{b}	saída esperada para as Redes Neurais Artificiais saída computada pelas Redes Neurais Artificiais
A_i b \tilde{b} B	saída esperada para as Redes Neurais Artificiais saída computada pelas Redes Neurais Artificiais limite superior para o erro de sensibilidade relativo
$egin{array}{ccc} A_i & & & & & & & & & & & & & & & & & & &$	saída esperada para as Redes Neurais Artificiais saída computada pelas Redes Neurais Artificiais limite superior para o erro de sensibilidade relativo vizinhança- q de \bar{x}
$egin{array}{c} A_i \ b \ ar{b} \ ar{b} \ B \ \mathbb{B}_q(m{x}) \ C \end{array}$	saída esperada para a analise de sensibilidade do elemento i saída esperada para as Redes Neurais Artificiais saída computada pelas Redes Neurais Artificiais limite superior para o erro de sensibilidade relativo vizinhança- q de \bar{x} complacência mecânica
$egin{array}{c} A_i \ b \ ar{b} \ B \ B_q(ar{m{x}}) \ C \ C^e \end{array}$	matriz auxinar para a analise de sensibilidade do elemento i saída esperada para as Redes Neurais Artificiais saída computada pelas Redes Neurais Artificiais limite superior para o erro de sensibilidade relativo vizinhança- q de \bar{x} complacência mecânica valor médio de C
$egin{aligned} \mathbf{A}_i & & & & & & & & & & & & & & & & & & &$	matriz auxinar para a analise de sensibilidade do elemento i saída esperada para as Redes Neurais Artificiais saída computada pelas Redes Neurais Artificiais limite superior para o erro de sensibilidade relativo vizinhança- q de \bar{x} complacência mecânica valor médio de C valor médio de C_{00}
$egin{aligned} \mathbf{A}_i & & & & & & & & & & & & & & & & & & &$	matriz auximar para a analise de sensibilidade do elemento i saída esperada para as Redes Neurais Artificiais saída computada pelas Redes Neurais Artificiais limite superior para o erro de sensibilidade relativo vizinhança- q de \bar{x} complacência mecânica valor médio de C valor médio de C_{00} valor médio de C_{11}
A_i b \tilde{b} B $B_q(\bar{x})$ C C^e C^e_{00} C_{11}^e C_{22}^e	natriz adxinar para a analise de sensibilidade do elemento i saída esperada para as Redes Neurais Artificiais saída computada pelas Redes Neurais Artificiais limite superior para o erro de sensibilidade relativo vizinhança- q de \bar{x} complacência mecânica valor médio de C valor médio de C_{00} valor médio de C_{11} valor médio de C_{22}
$egin{aligned} \mathbf{A}_i \ b \ & \ & \ & \ & \ & \ & \ & \ & \ &$	saída esperada para a analise de sensionidade do elemento i saída esperada para as Redes Neurais Artificiais saída computada pelas Redes Neurais Artificiais limite superior para o erro de sensibilidade relativo vizinhança- q de \bar{x} complacência mecânica valor médio de C valor médio de C_{00} valor médio de C_{11} valor médio de C_{22} matriz de propriedades homogeneizadas

D	medida de variação topológica

D_f	fração	de	variação	topológica
	2		2	1 0

D_f^{\max}	valor máximo para a fração de variação topológica em cada iteração
D_C	estimativa da variação finita da complacência mecânica
D_{00}	estimativa da variação finita de C_{00} (termo da diagonal de \boldsymbol{C})
D_{11}	estimativa da variação finita de C_{11} (termo da diagonal de \boldsymbol{C})
D_{22}	estimativa da variação finita de C_{22} (termo da diagonal de \boldsymbol{C})
d_k	$k\text{-}\acute{e}sima$ direção do Método dos Gradientes Conjugados
e_s	dimensão dos elementos quadrados
e_x	dimensão da aresta horizontal do elementos
e_y	dimensão da aresta vertical dos elementos
E	módulo de Young do material de base
\hat{E}	módulo de Young do metamaterial
\hat{E}^{\min}	valor mínimo para o módulo de Young homogeneizado
E_C	erro da variação finita da complacência mecânica
E_{00}	erro da variação finita de C_{00} (termo da diagonal de $\boldsymbol{C})$
E_{11}	erro da variação finita de C_{11} (termo da diagonal de $\boldsymbol{C})$
E_{22}	erro da variação finita de C_{22} (termo da diagonal de \boldsymbol{C})
$E^{[\mathrm{rel}]}$	erro relativo das variações finitas
f_i	$i\text{-}\acute{e}sima$ função fixada para as máquinas de aprendizado extremo
f	vetor de cargas conhecidas irrestrito
\check{f}	vetor de cargas conhecidas restrito
F	matriz de cargas conhecidas irrestrita
$reve{F}$	matriz de cargas conhecidas restrita
g	razão entre termos diagonais da matriz de elasticidade
G	número de graus de liberdade do sistema irrestrito

Ğ	número de graus de liberdade do sistema restrito
h	função escalar de variáveis binárias qualquer
$h^{[\mathrm{var}]}$	função escalar de variáveis binárias em sua forma variacional
$h^{[\mathrm{lin}]}$	função escalar de variáveis binárias linearizada
$h_{ u}$	função objetivo para a concepção de metamateriais
h_V	função de penalização da fração de volume
$h_{ m pen}$	função penalizada para a concepção de metamateriais
$H^{\mathrm{[fil]}}$	matriz do filtro de sensibilidade
$H^{[m mor]}$	matriz dos operadores morfológicos
H_i	fator da matriz K_i
\widecheck{H}_i	fator da matriz \widecheck{K}_i
Ι	matriz identidade
K	matriz de rigidez global irrestrita
\widecheck{K}	matriz de rigidez global restrita
$K_i^{[e]}$	matriz de rigidez do e -ésimo quadrilátero da i -ésima variável (sólido)
$K_i^{\mathrm{[solido]}}$	matriz de rigidez do i -ésimo elemento aumentado (sólido)
K_i	matriz de variação elementar irrestrita
$\widecheck{K_i}$	matriz de variação elementar restrita
K_m	matriz de rigidez mínima
L	função custo usada no treinamento das Redes Neurais Artificiais
L_x	dimensão da aresta horizontal do domínio de projeto
L_y	dimensão da aresta vertical do domínio de projeto
L	fator de Cholesky da matriz \widecheck{K}
m	número de passos realizados no Método dos Gradientes Conjugados
M	matriz pré-condicionadora do Método dos Gradientes Conjugados
n	número de entradas das Redes Neurais Artificiais

N_x	número de elementos na horizontal do domínio de projeto
N_y	número de elementos na vertical do domínio de projeto
N_s	número de elementos em ambas as direções do domínio de projeto
N_d	número de variáveis de projeto
N_t	número de elementos na malha
N_c	número de dados de entrada-saída no conjunto de dados
0	matriz de zeros
p	expoente da interpolação SIMP
p_k	parâmetro de <i>soft-kill</i>
p_C	fator de penalização de sensibilidade da função ${\cal C}$
p_h	fator de penalização de sensibilidade da função h_ν
p_E	fator de penalização de sensibilidade da função \hat{E}
p_{bc}	posição central da área engastada na viga engastada-livre
p_{ld}	posição central da área carregada na viga engastada-livre
Ρ	matriz de restrição
q	limiar de uma camada de Rede Neural Artificial (escalar)
q	limiar de uma camada de Rede Neural Artificial (vetor)
Q	matriz de espelhamento
r_f	raio de alcance dos filtros de sensibilidade
r_m	raio de alcance dos operadores morfológicos
r(i,j)	função que retorna a distância entre os centros dos elementos $i \in j$
r_{bc}	meia-altura da área engastada na viga engastada-livre
r_{ld}	meia-altura da área carregada na viga engastada-livre
R_V	função de redução de fração de volume
R_E	função de redução máxima de módulo de Young
r	vetor de cargas desconhecidas irrestrito

\check{r}	vetor de cargas desconhecidas restrito
R	matriz de cargas desconhecidas irrestrita
\check{R}	matriz de cargas desconhecidas restrita
s_1	coordenada horizontal no domínio de projeto
s_2	coordenada vertical no domínio de projeto
\boldsymbol{S}	matriz de coordenadas dos nós da malha
t	pesos sinápticos de uma camada de Rede Neural Artificial (vetor)
t_q	parâmetros de uma camada de Rede Neural Artificial
T	pesos sinápticos de uma camada de Rede Neural Artificial (matriz)
\boldsymbol{u}	vetor de deslocamentos nodais irrestrito
\check{u}	vetor de deslocamentos nodais restrito
\hat{U}	matriz de macrodeslocamentos
$\widetilde{oldsymbol{U}}$	matriz de microdeslocamentos
$oldsymbol{U}$	matriz de deslocamentos nodais irrestrita
\check{U}	matriz de deslocamentos nodais restrita
V	medida de volume de material sólido
V_f	fração de volume de material sólido
V_f^*	valor prescrito para a fração de volume
v_i	vetor auxiliar para a análise de sensibilidade do elemento \boldsymbol{i}
V_i	matriz auxiliar para a análise de sensibilidade do elemento \boldsymbol{i}
w(i,j)	função de pesos do filtro de sensibilidade
$w_x(i,j)$	função de pesos do filtro de sensibilidade no domínio estendido
w_i	vetor auxiliar para a análise de sensibilidade do elemento \boldsymbol{i}
W_i	matriz auxiliar para a análise de sensibilidade do elemento \boldsymbol{i}
$oldsymbol{x}$	vetor de densidades / topologia
$ar{x}$	vetor de densidades atual / topologia atual

 \boldsymbol{x}^* topologia otimizada

z_h	vetor auxiliar para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
z_m	vetor auxiliar para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
z_k	vetor auxiliar para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
z_η	vetor auxiliar para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados
z_{ξ}	vetor auxiliar para a Sensibilidade por Gradientes Conjugados

SUMÁRIO

1	Intr	odução		29
	1.1	Conte	xto	29
	1.2	Motiv	ação	34
	1.3	Objet	ivos	36
	1.4	Revis	ăo Bibliográfica	37
2	Otir	nização	Topológica	42
	2.1	Anális	se de Elementos Finitos	42
		2.1.1	Estrutura sob Carregamento Estático	42
		2.1.2	Homogeneização de Material Periódico	46
	2.2	Topol	ogia Baseada em Densidades	54
		2.2.1	Variáveis Binárias	54
		2.2.2	Variáveis Relaxadas	57
	2.3	Linear	rização de Funções de Variáveis Binárias	58
	2.4	Progra	amação Linear Inteira Sequencial (PLIS)	62
		2.4.1	Problemas Considerados	63
		2.4.2	Procedimentos Adicionais e Detalhes de Implementação	68
		2.4.3	Algoritmo BESO	76
		2.4.4	Simplex e Ramificar-e-Limitar	77
3	Aná	lise de	Sensibilidade de Variação Finita (ASVF)	79
	3.1	Minim	ização de Complacência Mecânica	81
		3.1.1	Abordagem Exaustiva	81
		3.1.2	Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO)	82
		3.1.3	Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO)	83
		3.1.4	Sensibilidade por Woodbury (SW)	85
		3.1.5	Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC) \hdots	87
	3.2	Conce	pção de Metamateriais Isotrópicos	91
				91
		3.2.1	Abordagem Exaustiva	
		3.2.1 3.2.2	Abordagem Exaustiva	93
		3.2.1 3.2.2 3.2.3	Abordagem Exaustiva	93 95
		3.2.13.2.23.2.33.2.4	Abordagem Exaustiva	93 95 95
		 3.2.1 3.2.2 3.2.3 3.2.4 3.2.5 	Abordagem Exaustiva	93 95 95 97
		 3.2.1 3.2.2 3.2.3 3.2.4 3.2.5 3.2.6 	Abordagem Exaustiva Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO) Simples Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO) Composta Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO) Composta Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO) Composta Sensibilidade por Woodbury (SW) Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC) Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC)	93 95 95 97 99
	3.3	3.2.1 3.2.2 3.2.3 3.2.4 3.2.5 3.2.6 Anális	Abordagem Exaustiva	93 95 95 97 99 103
4	3.3 Ger	3.2.1 3.2.2 3.2.3 3.2.4 3.2.5 3.2.6 Anális ação de	Abordagem Exaustiva Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO) Simples Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO) Composta Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO) Composta Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO) Composta Sensibilidade por Woodbury (SW) Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC) Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC) Bados Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO) Composta	93 95 95 97 99 103 105
4	3.3 Ger 4.1	3.2.1 3.2.2 3.2.3 3.2.4 3.2.5 3.2.6 Anális ação de Viga J	Abordagem Exaustiva Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO) Simples Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO) Composta Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO) Composta Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO) Composta Sensibilidade por Woodbury (SW) Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC) Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC) Bados Engastada-Livre	 93 95 95 97 99 103 105

5 I	Red 5.1	es Neur Pré-Pr 5.1.1 5.1.2	ais Artificiais (RNA)	114 114
Ţ	5.1	Pré-Pr 5.1.1 5.1.2	rocessamento dos Dados	114
		5.1.1 5.1.2	Reordenação Aleatória	
		5.1.2		115
			Ajustes e Normalização	115
		5.1.3	Entradas e Saídas	117
		5.1.4	Aumento de Dados	120
		5.1.5	Conjuntos de Treinamento, de Validação e de Teste $\ldots \ldots \ldots$	123
5	5.2	Arquit	$eturas \ldots \ldots$	125
		5.2.1	Perceptron Multicamadas (PMC)	126
		5.2.2	Máquina de Aprendizado Extremo (MAE)	129
		5.2.3	Regressão Linear	130
Ę	5.3	Treina	mento	131
		5.3.1	Método Direto	131
		5.3.2	Método Baseado em Gradiente Estocástico	133
Ę	5.4	Testes	de Performance $\ldots \ldots \ldots$	134
6 I	Resu	ltados		136
6	3.1	Anális	es de Sensibilidade	137
		6.1.1	Problemas de Minimização de Complacência	137
		6.1.2	Problemas de Concepção de Metamateriais	148
6	5.2	Amost	ras dos Dados Gerados	169
		6.2.1	Dados para Minimização de Complacência	169
		6.2.2	Dados para Concepção de Metamateriais	176
6	5.3	Desenv	volvimento das Redes Neurais	186
		6.3.1	Treinamento	186
		6.3.2	Performance nos Conjuntos de Teste	206
		6.3.3	Generalização em Relação ao Refinamento de Malha	212
6	5.4	ASVF	assistida por RNA para a Concepção de Metamateriais	220
7 (Con	clusão .		228

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contexto

A mecânica do contínuo estuda corpos deformáveis modelados como meios contínuos. Nos problemas mais usuais, consideram-se corpos compostos por uma seleção de materiais homogêneos, de propriedades mecânicas constantes. Contudo, nenhum material é verdadeiramente homogêneo. A microestrutura de um aço-carbono, por exemplo, é geralmente heterogênea, com fases de ferrita e cementita. E qualquer material é heterogêneo (e descontínuo) na escala atômica. Para que o modelo contínuo com materiais homogêneos seja capaz de representar uma estrutura real, é preciso que haja uma grande diferença de escala entre a microestrutura que compõe cada material e a macroestrutura que está sendo modelada. Nessa condição, métodos de homogeneização podem ser utilizados para computar as propriedades mecânicas efetivas que relacionam, em torno de cada ponto do corpo contínuo, os tensores de tensão média e de deformação média.

A homogeneização pode ser realizada de forma encadeada: propriedades na escala microscópica podem ser obtidas a partir da composição e da configuração definidas na escala molecular; e, considerando uma estrutura periódica nessa escala microscópica, novas propriedades podem ser obtidas em uma escala maior, da ordem de metro. Isso possibilita a concepção de metamateriais, sem que seja necessário alterar a composição ou a configuração molecular dos materiais componentes. Metamateriais são materiais artificiais que podem ter propriedades incomuns, de acordo com a microestrutura que os compõe. É o caso dos materiais auxéticos, que possuem coeficientes de Poisson menores ou iguais a zero.

A concepção de metamateriais corresponde a um problema de homogeneização inversa, isto é, ao invés de computar as propriedades efetivas a partir de uma microestrutura conhecida, deseja-se obter a microestrutura que resulta em propriedades efetivas especificadas. Definindo funções objetivo e restrições adequadas, esse problema pode ser descrito como um problema de otimização topológica.

Em métodos de otimização topológica, as variáveis de projeto são usadas para descrever a topologia de uma estrutura. A topologia consiste na quantidade de fases presentes na estrutura, na distribuição espacial dessas fases e na composição de cada uma delas. Além disso, nos métodos de otimização topológica, também se definem as formas das interfaces entre as fases, descrevendo completamente a distribuição dos materiais no domínio de projeto. Esses métodos são usados para se obter uma distribuição dos materiais que maximiza uma determinada função de performance, ou que minimiza uma determinada função de custo, respeitando um dado conjunto de restrições. Para que a otimização possa ser realizada numericamente, é necessário descrever o problema em termos de uma quantidade finita de variáveis de projeto. A estratégia mais comum consiste em discretizar a estrutura em uma malha de elementos finitos e atribuir uma quantidade de densidades virtuais a cada elemento. Considera-se que cada elemento é homogêneo e que sua composição é definida por seus valores de densidade. Quando há um único material componente, existem somente duas fases possíveis: sólida ou vazia. Nesse caso, um único valor de densidade é necessário para descrever o estado de cada elemento. Sendo N_d o número de elementos presentes no domínio de projeto, a topologia discretizada pode ser completamente descrita pelo vetor de densidades $\boldsymbol{x} \in \{0, 1\}^{N_d}$. Assim, cada variável binária define o estado de um elemento da malha: elementos sólidos têm densidade unitária e suas propriedades mecânicas são as mesmas do material componente; elementos vazios têm densidade nula e suas propriedades mecânicas são próximas de zero (não são identicamente nulas apenas para evitar problemas numéricos). Métodos de otimização topológica nos quais as estruturas são descritas dessa maneira são chamados de "métodos de densidade".

Nesses métodos, deseja-se resolver um problema de otimização de variáveis binárias. Para que estruturas complexas possam ser projetadas, uma grande quantidade de elementos deve ser utilizada. Na maior parte dos casos práticos, considera-se um número de variáveis de projeto entre dezenas de milhares e dezenas de milhões. As duas principais abordagens para solucionar problemas deste tipo são: abordagens baseadas em Programação Convexa Sequencial (PCS); e abordagens baseadas em Programação Linear Inteira Sequencial (PLIS).

Nas abordagens baseadas em PCS, a estratégia é relaxar o problema discreto, introduzindo funções de interpolação que definem propriedades mecânicas para elementos com densidades intermediárias (entre 0 e 1), de forma que as funções do problema passam a ser contínuas e diferenciáveis. Uma análise de sensibilidade é realizada, na qual se avalia a sensibilidade de cada função em relação a variações mínimas (infinitesimais) de cada variável de projeto. Essa análise corresponde à computação dos gradientes das funções, ou a procedimentos de linearização em torno do ponto atual. Utilizando as sensibilidades, um subproblema convexo é definido. Então, um método dual pode ser usado para obter uma solução em que as condições de otimalidade de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) sejam satisfeitas (ARORA, 2017). A solução do subproblema define uma nova topologia, em seguida, uma nova análise de sensibilidade é realizada e um novo subproblema convexo é definido. Os subproblemas são solucionados sequencialmente, até que o método convirja para um ótimo local. Funções de interpolação que penalizam densidades intermediárias e técnicas de projeção são utilizadas para que se obtenham soluções em $\{0,1\}^{N_d}$, isto é, para que se obtenham soluções para o problema discreto original, no qual todo elemento tem um estado bem definido (ou sólido, ou vazio).

Nas abordagens baseadas em PLIS, a estratégia é linearizar o problema discreto em torno do ponto atual. A linearização corresponde a uma análise de sensibilidade, na qual se avalia a sensibilidade de cada função em relação a variações mínimas (finitas) de cada variável de projeto. Para diferenciar esta análise de sensibilidade daquela realizada na PCS, esta é chamada de Análise de Sensibilidade de Variação Finita (ASVF). Utilizando as sensibilidades, um subproblema linear inteiro é definido. Num caso geral, ele pode ser resolvido da seguinte maneira: define-se um subproblema linear relaxado, de variáveis contínuas; obtém-se sua solução pelo algoritmo simplex; caso a solução não seja discreta, utiliza-se o método de ramificar-e-limitar para gerar dois novos subproblemas lineares relaxados, nos quais uma das variáveis tem seu valor imposto (em 0 no primeiro ramo; e em 1 no segundo); o procedimento continua até que uma solução ótima seja obtida para o subproblema linear inteiro. A solução define uma nova topologia, em seguida, uma nova análise de sensibilidade é realizada e um novo subproblema linear inteiro é definido. Os subproblemas são solucionados sequencialmente, até que um critério de parada seja atingido. A topologia otimizada corresponde à melhor estrutura obtida durante todo o processo iterativo.

A análise de sensibilidade utilizada na PCS consiste em calcular gradientes, é um procedimento bem definido e computacionalmente viável (normalmente com custo similar ao de computar a função objetivo do problema). Por outro lado, a ASVF necessária na PLIS é um procedimento computacionalmente proibitivo. Para viabilizar as abordagens baseadas em PLIS, aproximações são utilizadas para realizar a linearização das funções de variáveis binárias.

As aproximações mais usuais da literatura buscam reaproveitar as expressões desenvolvidas para abordagens baseadas em PCS. Nessas aproximações, relaxa-se o problema de acordo com funções de interpolação arbitradas (apenas para a análise de sensibilidade). Então, assume-se que as funções relaxadas variam linearmente com as variáveis de projeto. Sob tal hipótese, a análise de variações infinitesimais é suficiente para estimar a variação finita das funções quando o estado de cada elemento é alterado. Essa estratégia não é rigorosa, já que não há critérios sistemáticos para a definição das funções de interpolação. Apesar disso, ela é a estratégia que se estabeleceu historicamente e não há muitos autores investigando maneiras de realizar análises de sensibilidade adequadas para métodos de densidade discretos. Mesmo que, num caso geral, abordagens baseadas em PLIS não tenham garantias de convergência para ótimos locais, melhorar a análise de sensibilidade reduz suas incertezas e pode tornar a otimização mais robusta e efetiva. Nesse contexto, a busca por expressões de sensibilidade precisas e computacionalmente viáveis corresponde a um problema ainda aberto na área de otimização topológica por métodos de densidade discretos. Além desse, outro tema de pesquisa recente é a utilização de técnicas de aprendizado de máquina em problemas de otimização topológica. Muitos trabalhos vêm sendo publicados na área, em especial, trabalhos que usam Redes Neurais Artificiais (RNA) para aprimorar os métodos de otimização convencionais de diversas maneiras.

Uma RNA é uma função numérica cujo funcionamento é análogo ao de uma rede neural biológica (que constitui o cérebro humano, por exemplo). Essa função é determinada por um conjunto de parâmetros que podem ser calibrados para que ela realize uma tarefa especificada. A calibração desses parâmetros é o que se chama de processo de aprendizado da rede. No aprendizado supervisionado, treina-se a rede para representar uma função desejada utilizando um conjunto conhecido de entradas e saídas esperadas. O treinamento da rede consiste em obter os parâmetros que minimizam o erro entre as saídas geradas pela RNA e as saídas esperadas, para o conjunto de dados fornecido. Como as redes são funções diferenciáveis com respeito a seus parâmetros, métodos baseados em gradiente são utilizados para solucionar esse problema de otimização.

Para que esses modelos sejam efetivos em situações práticas, é preciso gerar um conjunto de dados suficientemente representativo, definir uma arquitetura adequada para as redes e utilizar técnicas de treinamento que favoreçam a generalização do problema, quer dizer, a obtenção de redes que realizem a tarefa desejada de forma robusta, sem se sobreajustar apenas aos dados de treinamento.

Nos trabalhos de otimização topológica, as RNA vêm sendo utilizadas com sucesso para realizar tarefas complexas: otimização de estruturas em uma única iteração (otimização direta); pós-tratamento de topologias otimizadas; aceleração da análise de sensibilidade para métodos contínuos (WOLDSETH *et al.*, 2022). Ainda assim, seu uso para aprimorar a ASVF é um tema que ainda não foi explorado. Quando métodos discretos são considerados, a análise de sensibilidade pode ser aprimorada não apenas na velocidade de computação, mas também na precisão dos valores computados. Nesse contexto, RNA poderiam ser desenvolvidas para fornecer valores precisos de sensibilidade em tempos viáveis, reduzindo as incertezas do processo de linearização usado nas abordagens baseadas em PLIS.

A Figura 1.1 resume os conceitos introduzidos. O procedimento de homogeneização, no qual, conhecendo-se a distribuição das propriedades em uma microestrutura periódica, obtêm-se as propriedades efetivas na macroescala. O procedimento de homogeneização inversa, no qual, definindo-se as propriedades efetivas na macroescala, obtém-se uma distribuição das propriedades na célula de base que resultam em tais propriedades homogeneizadas. Os métodos de densidade, nos quais as estruturas são discretizadas e as topologias são descritas por vetores de variáveis binárias (ao descrever a célula de base dessa forma, as propriedades homogeneizadas passam a ser funções do vetor de densidades). A PLIS, na qual o problema de otimização de variáveis binárias é solucionado iterativamente, linearizando as funções em cada iteração e então resolvendo o subproblema linear inteiro resultante por algum método bem estabelecido. A ASVF, na qual se buscam expressões aproximadas para o procedimento de linearização das funções de variáveis binárias, balanceando precisão e custo computacional. E os modelos de RNA, nos quais, por meio de um conjunto de dados de referência, uma função parametrizada é calibrada para aprender a realizar uma determinada tarefa, no caso, utilizar informações de custo computacional viável para estimar os valores de sensibilidade exatos (usados para linearizar as funções).



Figura 1.1 – Conceitos Introduzidos

1.2 Motivação

Como foi dito, há uma lacuna na literatura de otimização topológica por métodos de densidade discretos: na maior parte dos trabalhos, a análise de sensibilidade não é realizada sistematicamente. Apesar de os algoritmos considerados poderem ser interpretados como casos particulares de PLIS, essa nomenclatura não é a usualmente adotada na área de otimização topológica discreta. Nomenclaturas específicas costumam ser utilizadas e os algoritmos costumam ser justificados por heurísticas. Neste trabalho, busca-se apresentar a metodologia convencional de uma forma mais estruturada, explicitando as hipóteses adotadas, quais etapas contêm incertezas e quais etapas são exatas. A unificação dos métodos de densidade discretos convencionais como abordagens baseadas em PLIS não apenas permite que desenvolvimentos de outras subáreas de otimização possam ser aproveitados na área de otimização topológica, mas também permite uma definição rigorosa da ASVF, como um processo de linearização de funções de variáveis binárias. A partir disso, a análise de sensibilidade em métodos discretos pode ser realizada de maneira sistemática.

Mais do que apenas sistematizar o método de otimização e aprimorar as expressões de sensibilidade, este trabalho busca utilizar RNA para computar valores de sensibilidade de alta precisão, dentro de tempos aceitáveis para aplicações práticas. No processo de desenvolvimento das RNA, deve-se gerar um grande conjunto de dados. Esse conjunto não é exclusivo para o desenvolvimento de redes computadoras de sensibilidade, ele pode ser aproveitado por qualquer trabalho da área de otimização topológica assistida por aprendizado de máquina.

A análise de sensibilidade deve ser suficientemente precisa para que o processo de otimização seja robusto e efetivo. Quanto mais intricado o problema, mais crítico é que essa análise seja feita de maneira adequada. Aqui, consideram-se intricados problemas com funções objetivo e funções de restrição onerosas de computar, sem propriedades desejáveis, como monotonicidade, e muito sensíveis a alterações das variáveis de projeto. Como caso de estudo, considerou-se um problema de interesse prático, no qual se observa um erro substancial nas sensibilidades obtidas pela estratégia convencional: este trabalho busca projetar metamateriais mecânicos com propriedades isotrópicas. Consideram-se estruturas bidimensionais em estado plano de tensões.

A maior parte dos trabalhos de homogeneização inversa define microestruturas compostas por células periódicas quadradas e impõe a isotropia através de restrições adicionais no problema de otimização topológica. Esse processo cria algumas complicações, em especial em métodos de otimização discretos, nos quais tolerâncias devem ser incluídas em restrições de igualdade. Neste trabalho, busca-se expandir a literatura da área, garantindo a isotropia do metamaterial através da imposição de simetrias, o que facilita o processo de otimização. Para isso, definem-se microestruturas compostas por células periódicas hexagonais, com simetria diedral D_3 (BARBAROSIE *et al.*, 2017; ŁUKASIAK, 2017; PODESTÁ *et al.*, 2019; MÉNDEZ *et al.*, 2019).

Neste trabalho, busca-se projetar metamateriais com coeficiente de Poisson prescrito, sujeito a um módulo de Young mínimo. O apelo prático dos metamateriais vêm de propriedades desejáveis que eles podem adquirir. Por exemplo, materiais auxéticos, além de possuírem comportamentos cinemáticos atípicos, podem ter uma performance superior a materiais comuns em termos de resistência ao cisalhamento, resistência à indentação, absorção de energia, dentre outros (PRAWOTO, 2012; REN *et al.*, 2018).

Contudo, antes de abordar o problema de concepção de metamateriais, considerase um problema menos intricado: a minimização de complacência mecânica, com restrição sobre o volume de material utilizado para compor a estrutura.

Em resumo, busca-se realizar as seguintes contribuições: apresentar os métodos de otimização topológica discretos dentro do paradigma da PLIS; definir expressões exatas para as sensibilidades usadas na linearização de funções de variáveis binárias; propor uma metodologia sistemática para efetuar a ASVF em problemas práticos, na qual aproximações com custos computacionais aceitáveis devem ser obtidas para as sensibilidades; aplicar essa metodologia para obter novas expressões de sensibilidade para os problemas de estudo considerados (minimização de complacência e concepção de metamateriais isotrópicos); na concepção de metamateriais, gerar novos resultados para a literatura, utilizando células hexagonais com simetria diedral D_3 ; em ambos os problemas, gerar novos resultados para a literatura, utilizando sensibilidades aprimoradas; produzir conjuntos de dados extensos, armazenando topologias, deslocamentos e sensibilidades obtidos durante as otimizações dos problemas considerados; disponibilizar esses conjuntos de dados para que eles possam ser usados em trabalhos diversos sobre otimização topológica assistida por aprendizado de máquina; e desenvolver RNA que aprimorem ainda mais a ASVF para os problemas considerados.

1.3 Objetivos

Os objetivos deste trabalho estão listados abaixo.

- Descrever os problemas de otimização topológica como problemas de PLIS.
- Definir rigorosamente a ASVF para métodos de densidade discretos.
- Desenvolver novas expressões de sensibilidade:
 - para minimização de complacência mecânica;
 - para concepção de metamateriais isotrópicos.
- Demonstrar que aumentar a precisão das sensibilidades melhora os procedimentos de otimização.
- Desenvolver RNA que computem sensibilidades precisas e que possam ser utilizadas em problemas realistas.
1.4 Revisão Bibliográfica

A microestrutura de metamateriais celulares é definida por uma célula periódica (KELKAR *et al.*, 2020). As propriedades macroscópicas, obtidas através de um método de homogeneização, podem ser descritas com respeito à topologia da célula de base. Há diferentes métodos para realizar o procedimento de homogeneização (GEERS *et al.*, 2010), neste trabalho, o método de elementos finitos é usado para realizar o procedimento de homogeneização computacional descrito em Yvonnet (2019). Assume-se que as escalas podem ser separadas e que o material de base, que compõe a microestrutura, é homogêneo e isotrópico. Isto significa que o comprimento característico da microestrutura é muito menor que o da macroestrutura, mas ainda é grande o suficiente para que o material de base possa ser modelado como uma massa contínua.

O problema de homogeneização inversa, usado para projetar um metamaterial com propriedades prescritas, é formulado como um problema de otimização topológica (SIGMUND, 1994; SIGMUND, 1995). Dentre os métodos de otimização topológica, destacam-se: os métodos de densidade contínuos; os métodos de densidade discretos; e os métodos baseados em conjuntos de nível.

Considerando métodos de densidade contínuos, uma abordagem bem estabelecida é usar o esquema de interpolação SIMP (*Solid Isotropic Material with Penalization*) para realizar a relaxação do problema (BENDSØE, 1989; ZHOU; ROZVANY, 1991; BENDØSE; SIGMUND, 2003). Nesse esquema, um parâmetro de penalização é usado para inibir valores intermediários de densidade na solução. Para o problema de minimização de complacência mecânica, pode-se demonstrar que, se o parâmetro de penalização for suficientemente grande, a solução do problema relaxado corresponde a uma solução do problema discreto original (RIETZ, 2001; MARTINEZ, 2005). De toda forma, esse esquema de interpolação é comumente utilizado em uma diversidade de problemas (SIG-MUND; TORQUATO, 1997; WANG *et al.*, 2014; AGRAWAL *et al.*, 2022). Quando o esquema de penalização não é suficiente para garantir que as soluções sejam discretas, técnicas de projeção são utilizadas (ANDREASSEN *et al.*, 2014). Uma vez que o problema foi relaxado, ele pode ser solucionado por PCS, por exemplo, através do método das assíntotas móveis (SVANBERG, 1987; SVANBERG, 2002).

Em métodos de densidade discretos, o problema é solucionado por PLIS. Quando o problema é irrestrito, ou quando ele tem apenas restrições de volume ($||\boldsymbol{x}||_1$) e/ou de variação de topologia ($||\Delta \boldsymbol{x}||_1$), o algoritmo BESO (*Bidirectional Evolutionary Structural Optimization*) pode ser utilizado para resolver cada subproblema linear inteiro de forma eficiente (QUERIN *et al.*, 1998; YANG *et al.*, 1999; TANSKANEN, 2002). Em Huang *et al.* (2011), este algoritmo é usado para maximizar os módulos volumétrico e de cisalhamento de um metamaterial homogeneizado, para uma quantidade especificada de material compondo a célula de base. Destaca-se que alguns trabalhos da área utilizam o termo SERA (*Sequential Element Rejections and Admissions*) para se referir a algoritmos similares ao BESO (ROZVANY; QUERIN, 2002b; ROZVANY; QUERIN, 2002a).

Quando outras restrições são impostas, para que o algoritmo BESO possa ser usado, elas devem ser incluídas numa função de Lagrange. Nessa abordagem, valores apropriados precisam ser obtidos para os multiplicadores de Lagrange em cada iteração do processo de otimização, para que as restrições impostas sejam sempre respeitadas. Em Radman *et al.* (2013), esse algoritmo é usado para maximizar os módulos volumétrico e de cisalhamento, impondo-se condições de isotropia. Ainda que adaptações sejam frequentemente necessárias ao abordar novos problemas (ZHENG *et al.*, 2020; DA, 2021), quando utilizado de forma apropriada, esse método heurístico é efetivo e é utilizado com sucesso em uma variedade de problemas de otimização topológica.

Ao invés de usar o algoritmo BESO com multiplicadores de Lagrange, o método de ramificar-e-limitar pode ser usado em conjunto com o algoritmo simplex para solucionar cada subproblema linear inteiro. Isso é mais oneroso que o algoritmo BESO, mas ainda é uma abordagem viável, que é capaz de lidar sistematicamente com uma quantidade qualquer de restrições. Restrições relaxadas podem ser consideradas no decorrer do procedimento para garantir que cada subproblema tenha uma solução factível; e para limitar as variações das funções em cada iteração, o que reduz os erros de linearização. O termo TOBS (*Topology Optimization of Binary Structures*) tem sido empregado para se referir a esse tipo de estratégia (SIVAPURAM; PICELLI, 2018; SIVAPURAM *et al.*, 2018).

Em métodos baseados em conjuntos de nível, esquemas de interpolação também não são necessários e estruturas sem valores intermediários de densidade são obtidas (DIJK *et al.*, 2013). Assim como os métodos de densidade discretos, são vantajosos em problemas nos quais as interfaces devem ser bem delineadas (SÁ *et al.*, 2016). Em parte dos trabalhos, o conceito de derivada topológica é utilizado para realizar a análise de sensibilidade (CÉA *et al.*, 2000; NOVOTNY *et al.*, 2003; NORATO *et al.*, 2007).

Nesta tese, focam-se nos métodos de densidade discretos. Mais especificamente, no desenvolvimento de maneiras apropriadas para realizar a análise de sensibilidade. Em Zhou e Rozvany (2001), algumas críticas são feitas a essa classe de métodos, em especial sobre a falta de provas de eficácia rigorosas, devido a sua natureza heurística. Como foi ilustrado em Rozvany (2009), em determinadas configurações, esses métodos podem produzir topologias muito distantes do ótimo global. Os desenvolvimentos apresentados nesta tese trazem formas de superar esses problemas levantados, seja pela melhor compreensão dos métodos e das condições que devem ser garantidas para que eles sejam efetivos, seja pelo aprimoramento das expressões de sensibilidade, que reduz as incertezas e a quantidade de etapas de natureza heurística.

A ASVF considerada consiste em tentar prever os efeitos de variações finitas das variáveis de projeto. Alguns trabalhos na literatura abordam temas similares. Em Mróz e Bojczuk (2003), variações finitas de parâmetros topológicos são consideradas para otimizar estruturas de treliças e pórticos. Em Bojczuk e Mróz (2009), derivadas topológicas em conjunto com modificações finitas de topologia são usadas em um algoritmo heurístico para otimizar placas. Em algoritmos baseados em derivadas topológicas, termos de alta ordem da expansão assintótica podem ser considerados para melhorar as previsões (FARIA et al., 2007; HASSINE; KHELIFI, 2016). Da mesma forma, aproximações quadráticas podem ser produzidas com derivadas de segunda ordem das funções (GROENWOLD; ETMAN, 2010), que podem ser usadas em abordagens baseadas em programação quadrática inteira (LIANG; CHENG, 2019). Para funções bem comportadas, as abordagens quadráticas devem ser superiores às lineares quando se deseja estimar variações finitas. Considerando especificamente o problema de otimização topológica por métodos de densidade discretos, há alguns outros trabalhos que sugerem abordagens alternativas para realizar a ASVF de forma aproximada (MEI et al., 2007; GHABRAIE, 2015; SUN et al., 2022). Em trabalhos como Svanberg e Werme (2005), Svanberg e Werme (2006), mesmo sendo um procedimento oneroso, a ASVF exata é realizada para otimizar estruturas por um método de busca em vizinhanças, que tem garantia de convergência para um mínimo local.

A estratégia adotada nesta tese é semelhante à apresentada em Ghabraie (2015), onde as expressões de sensibilidade, dadas em termos das perturbações finitas aplicadas à matriz de rigidez da estrutura, são válidas para qualquer malha e para quaisquer tipos de elementos. O trabalho apresenta uma sequência de expressões de precisão crescente para o problema de minimização de complacência mecânica, elas são baseadas em somas parciais de séries de Taylor. Contudo, não foi demonstrado que as séries de Taylor consideradas são convergentes. Além disso, mesmo assumindo a convergência, as expressões obtidas são demasiado onerosas para serem utilizadas em problemas práticos. Nesta tese, busca-se abordar essas questões em aberto, considerando tanto o problema de minimização de complacência mecânica, quanto o problema de concepção de metamateriais.

Deseja-se utilizar técnicas de aprendizado de máquina para obter valores de sensibilidade de alta precisão. Nas técnicas de aprendizado de máquina, definem-se modelos parametrizados, que são ajustados através de conjuntos de dados adquiridos, para aproximar funções de difícil computação, ou cujas descrições explícitas são desconhecidas (GOODFELLOW *et al.*, 2018). Mais especificamente, deseja-se utilizar modelos de RNA, devido a suas estruturas flexíveis que podem ser adaptadas a uma variedade de problemas (JANIESCH *et al.*, 2021).

As RNA são caracterizadas por seus hiperparâmetros: funções de ativação uti-

lizadas, parâmetros usados nas estratégias de regularização (early stopping, regularização L_1 , regularização L_2 , dropout), número de camadas, número de nós em cada camada, conectividade entre os nós das diferentes camadas (GÉRON, 2017). Existe uma vasta gama de arquiteturas, aqui, consideram-se redes de alimentação direta, que são redes nas quais a informação se move numa única direção, da camada de entrada até a camada de saída. Quando todos os nós de cada camada estão conectados a todos os nós das camadas adjacentes, a rede é chamada de densa, ou totalmente conectada. Por sua vez, redes neurais convolucionais são redes inspiradas na percepção visual de seres vivos, elas possuem conexões locais (não são redes densas) e aplicam convoluções discretas para extrair as informações de dados organizados em grade (LI et al., 2021). Destacam-se também os modelos generativos, como autocodificadores variacionais (MAHMUD et al., 2020) e redes adversárias generativas (CRESWELL et al., 2018), que podem ser usados para gerar objetos complexos a partir de um espaço latente de dimensão reduzida.

Modelos de dimensão reduzida podem ser usados para descrever as topologias com uma quantidade de variáveis menor que o número de elementos na malha, reduzindo a dimensão do problema de otimização a ser resolvido (LUI; WOLF, 2019; LI *et al.*, 2019; DENG; TO, 2020). Além disso, os modelos podem ser construídos para gerarem apenas um subconjunto das topologias possíveis, já excluindo casos indesejáveis que surgem nos problemas numéricos, como: estruturas com tabuleiros de xadrez (regiões com elementos sólidos conectados apenas pelos nós); ou estruturas com ilhas (componentes sólidos desconectados dos suportes da estrutura).

Além das várias arquiteturas, há diversas categorias para o treinamento de RNA: aprendizado supervisionado; aprendizado não supervisionado; aprendizado por reforço.

No aprendizado supervisionado, utilizado neste trabalho, o conjunto de dados consiste em pares de entrada e de saída conhecidos, os parâmetros da rede são calibrados para minimizar o erro entre as predições e os valores esperados. No contexto da otimização topológica, esse tipo de aprendizado é utilizado para realizar otimizações em uma única iteração (KOLLMANN *et al.*, 2020) ou, em métodos de densidade contínuos, para estimar os valores dos gradientes das funções do problema relaxado (QIAN; YE, 2021).

No aprendizado não supervisionado, o modelo busca detectar padrões nos dados, sem a disponibilização de saídas esperadas. Esse tipo de aprendizado pode ser utilizado para gerar redes que otimizam estruturas sem a necessidade de realizar diversas otimizações prévias para gerar dados de treino (HALLE *et al.*, 2021), ou para pós-processar estruturas otimizadas através de processos de desomogeneização (ELINGAARD *et al.*, 2022).

No aprendizado por reforço, busca-se treinar o modelo para que ele tenha a

41

melhor performance depois de realizar uma sequência de ações, o treinamento é realizado por um esquema de recompensas e punições que definem a qualidade de cada ação. Esse tipo de aprendizado pode ser utilizado para explorar o domínio de topologias e obter múltiplas soluções para um mesmo problema (SUN; MA, 2020; JANG *et al.*, 2022).

Outra maneira de utilizar RNA em problemas de otimização topológica é desenvolver redes que substituam a etapa mais onerosa dos programas: a resolução da equação diferencial que rege o fenômeno físico considerado (SIRIGNANO; SPILIOPOULOS, 2018; RAISSI *et al.*, 2019; JEONG *et al.*, 2023). Quando o método de elementos finitos é utilizado, um grande sistema linear deve ser solucionado em cada iteração do processo de otimização. Alternativamente, RNA podem ser utilizadas para obter estimativas de baixo custo computacional, que devem ser apenas precisas o suficiente para que a otimização topológica possa ser realizada com sucesso.

2 OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA

2.1 Análise de Elementos Finitos

Para que as estruturas possam ser otimizadas, é preciso definir as funções que serão minimizadas (ou maximizadas) em termos de uma quantidade finita de variáveis de projeto. Para isso, as informações relevantes são computadas através de análises numéricas. Neste trabalho, dois problemas são considerados: uma estrutura sob carregamento estático; e a homogeneização de um material periódico.

2.1.1 Estrutura sob Carregamento Estático

No primeiro caso, considera-se uma estrutura bidimensional em estado plano de tensões, composta por material homogêneo e isotrópico, em regime linear-elástico, com pequenos deslocamentos e deformações. Conforme a Figura 2.1, a estrutura é definida em um domínio de projeto retangular, de dimensões L_x e L_y .



Figura 2.1 – Domínio de Projeto (Estrutura sob Carregamento Estático)

A Figura 2.2 ilustra os dois tipos de condições de contorno aplicadas: condição de Dirichlet homogênea (engaste); e condição de Neumann (carga distribuída). Mais especificamente, o engaste é posicionado na aresta esquerda e aplica-se uma carga vertical na aresta direita, obtendo-se uma viga engastada-livre. Como o problema de otimização abordado não depende da intensidade das cargas, uma carga total de 1 N por metro de espessura é considerada.

Para que o problema possa ser analisado numericamente, o domínio é discretizado em uma malha de elementos finitos. Consideram-se N_x elementos na direção horizontal e N_y elementos na direção vertical. Os parâmetros L_x , L_y , N_x e N_y são definidos de forma que os elementos sejam quadrados de aresta e_s . Como ilustrado na Figura 2.3 para uma malha de 8 × 4 elementos, a numeração dos elementos é feita coluna a coluna, de baixo para cima, da esquerda para a direita.



Figura 2.2 – Condições de Contorno (Estrutura sob Carregamento Estático)

									4
	3	7	11	15	19	23	27	31	
	2	6	10	14	18	22	26	30	$N_x = 8$
	1	5	9	13	17	21	25	29	$N_y = 4$
es	0	4	8	12	16	20	24	28	
	$\overline{e_s}$	•							

Figura 2.3 – Numeração dos Elementos (Estrutura sob Carregamento Estático)

Utilizam-se elementos de quatro nós, com um nó em cada vértice do quadrado. A Figura 2.4 apresenta a numeração dos nós na malha, que segue a mesma regra da numeração dos elementos.

		•	.		N			.	•
	4	9	14	19	24	29	34	39	44
	3	8	13	18	23	28	33	38	43
•	2	7	12	17	22	27	32	37	42
	1	6	11	16	21	26	31	36	41
•	0	5	10	15	20	25	30	35	40

Figura 2.4 – Numeração dos Nós (Estrutura sob Carregamento Estático)

Elementos bilineares são usados para descrever o campo de deslocamentos através de um vetor de deslocamentos nodais $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{G}$, sendo G o número de graus de liberdade do sistema irrestrito (incluindo os nós engastados). A numeração local dos nós de cada elemento é dada conforme a Figura 2.5.



Figura 2.5 – Numeração Local dos Nós (Estrutura sob Carregamento Estático)

Nessas condições, dada uma estrutura qualquer, definida pela distribuição de material no domínio de projeto, o método de elementos finitos pode ser usado para solucionar o problema elástico (COOK *et al.*, 2007). Computa-se a matriz de rigidez global da estrutura, $\boldsymbol{K} \in \mathbb{R}^{G \times G}$, e o vetor de cargas nodais equivalentes, $\boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^{G}$, tais que

$$\boldsymbol{K}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{f}\,, \qquad (2.1)$$

onde r é o vetor das cargas no engaste, isto é, o vetor com as cargas que garantem um deslocamento nulo aos nós restritos.

Nessa forma irrestrita, o sistema não pode ser facilmente solucionado, já que o vetor \boldsymbol{r} é desconhecido e a matriz \boldsymbol{K} é singular (devido aos modos de corpo rígido da estrutura). Para que um sistema de solução única seja obtido, as condições de Dirichlet devem ser aplicadas no problema discretizado. Para isso, define-se a matriz de restrição \boldsymbol{P} , a qual, para uma determinada permutação dos graus de liberdade do sistema, pode ser escrita como

$$\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{O}_{rd} \\ \boldsymbol{I}_{dd} \end{bmatrix}, \qquad (2.2)$$

onde O_{rd} é uma matriz de zeros (retangular) e I_{dd} é uma matriz identidade. O subíndice r se refere aos graus de liberdade dos nós engastados e o subíndice d se refere aos graus de liberdade dos nós livres. Sendo \check{G} o número de graus de liberdade livres, a matriz P tem dimensões $G \times \check{G}$.

Como os deslocamentos devem ser nulos nos graus de liberdade restritos, o vetor pode ser separado em um termo nulo 0_r e um termo de incógnitas u_d :

$$\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{0}_r \\ \boldsymbol{u}_d \end{bmatrix}.$$
(2.3)

Da mesma forma, os vetores de cargas podem ser escritos como

$$\boldsymbol{r} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_r \\ \boldsymbol{0}_d \end{bmatrix}$$
(2.4)

е

$$\boldsymbol{f} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{0}_r \\ \boldsymbol{f}_d \end{bmatrix}. \tag{2.5}$$

O vetores restritos, \check{u} , \check{r} e \check{f} , e a matriz restrita, \check{K} , se relacionam com os vetores e matriz irrestritos conforme as seguintes expressões:

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{P} \, \check{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{P} \, \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{d}} \, ; \tag{2.6}$$

$$\check{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}_d; \qquad (2.7)$$

$$\check{\boldsymbol{f}} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{f} = \boldsymbol{f}_d; \qquad (2.8)$$

$$\widetilde{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{K} \boldsymbol{P} \,. \tag{2.9}$$

Pré-multiplicando a Equação 2.1 por P^T , obtém-se um sistema sem termos desconhecidos no vetor de cargas e, considerando que há ao menos dois nós engastados, com uma matriz invertível:

$$\widetilde{\boldsymbol{K}}\,\widetilde{\boldsymbol{u}}\,=\,\widetilde{\boldsymbol{f}}\,.\tag{2.10}$$

A solução única do sistema pode ser escrita como

$$\check{\boldsymbol{u}} = \check{\boldsymbol{K}}^{-1} \check{\boldsymbol{f}} \,, \tag{2.11}$$

o que resulta em

$$\boldsymbol{u} = \left[\boldsymbol{P} \, \widecheck{\boldsymbol{K}}^{-1} \boldsymbol{P}^T \right] \boldsymbol{f} \,. \tag{2.12}$$

Nesse caso, em que se aplica uma carga fixa, a energia de deformação da estrutura corresponde a uma medida inversa de rigidez, isto é, uma medida de complacência mecânica da estrutura em relação ao carregamento aplicado. Para simplificar as expressões, a complacência C é definida como o dobro da energia de deformação:

$$C = \boldsymbol{u}^T \boldsymbol{K} \, \boldsymbol{u} = \breve{\boldsymbol{u}}^T \, \breve{\boldsymbol{K}} \, \breve{\boldsymbol{u}} = \breve{\boldsymbol{f}}^T \, \breve{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{f}^T \boldsymbol{u} \,.$$
(2.13)

Portanto, para projetar estruturas de rigidez elevada atráves de métodos de otimização, busca-se obter topologias que minimizam a complacência.

2.1.2 Homogeneização de Material Periódico

No segundo caso, considera-se um material periódico em estado plano de tensões, composto por células hexagonais. A estrutura da célula de base é constituída por material homogêneo e isotrópico, em regime linear-elástico, com pequenos deslocamentos e deformações. A Figura 2.6 apresenta o domínio da célula.



Figura 2.6 – Domínio da Célula

Aqui, utiliza-se uma célula hexagonal ao invés da abordagem mais comum, com célula quadrada, pois se deseja garantir que as propriedades homogeneizadas sejam isotrópicas através de uma imposição de simetria na microestrutura. Uma condição suficiente para isotropia é que a microestrutura tenha simetria diedral D_3 , isto é, possua as seis simetrias indicadas na Figura 2.7: três rotações, R_1 , R_2 e R_3 ; e três reflexões, M_1 , M_2 e M_3 . Nessas condições, o domínio de projeto é dado por um subdomínio simétrico, correspondente a um sexto da célula. Assim, definindo-se a distribuição de material no domínio de projeto, obtém-se a distribuição no restante da célula através das simetrias impostas, garantindo propriedades homogeneizadas isotrópicas ao metamaterial. Os parâmetros geométricos L_x e L_y , apresentados na Figura 2.6, correspondem às dimensões das arestas horizontal e vertical do domínio de projeto. Já que o hexágono deve ser um polígono regular, tem-se que $L_y = \sqrt{3} L_x$.

Para que o problema possa ser analisado numericamente, o domínio é discretizado em uma malha de elementos finitos. Consideram-se N_s elementos em cada direção do domínio de projeto. Como ilustrado na Figura 2.8 para $N_s = 3$, as $N_d = N_s^2$ variáveis de projeto podem ser organizadas numa matriz quadrada. No domínio de projeto, a numeração é feita coluna a coluna, de baixo para cima, da esquerda para a direita. Cada variável corresponde a seis elementos quadrilaterais na malha hexagonal (identificados pela cor na ilustração). Todos os elementos possuem a mesma área, suas dimensões e_x e e_y , com $e_y = \sqrt{3} e_x$, são dadas de acordo com os parâmetros L_x , L_y e N_s . Há duas geometrias diferentes para os elementos: um retângulo; e o quadrilátero obtido ao refletir um par de arestas adjacentes desse retângulo (em relação ao eixo que cruza o centro do retângulo ortogonalmente a uma de suas diagonais). Na célula total, discretizada em $N_t = 6 N_d$ elementos, cada geometria aparece em seis rotações distintas, resultando em doze tipos de elementos quadrilaterais bilineares. Na malha hexagonal, a numeração é feita do centro para as bordas, em uma espiral em sentido anti-horário.



Figura 2.7 – Domínio de Projeto (Homogeneização de Material Periódico)



Figura 2.8 – Numeração dos Elementos (Homogeneização de Material Periódico)

A Figura 2.9 apresenta a numeração dos nós na malha, que segue a mesma regra da numeração dos elementos.

A discretização é usada para descrever o campo de deslocamentos através de um vetor de deslocamentos nodais $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{G}$, sendo G o número de graus de liberdade da célula irrestrita. A numeração local de cada um dos doze elementos bilineares é dada conforme a Figura 2.10.



Figura 2.9 – Numeração dos Nós (Homogeneização de Material Periódico)



Figura 2.10 – Numeração Local dos Nós (Homogeneização de Material Periódico)

Nessas condições, dada uma microestrutura simétrica qualquer, definida pela distribuição de material no domínio de projeto, o método de elementos finitos pode ser usado para analisar o comportamento mecânico da célula de base (COOK *et al.*, 2007). Após computar a matriz de rigidez global da célula, $\boldsymbol{K} \in \mathbb{R}^{G \times G}$, tem-se que

$$\boldsymbol{K}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{r}\,,\tag{2.14}$$

onde r é o vetor de cargas nas arestas da célula, isto é, o vetor com as cargas que as células vizinhas aplicam sobre a célula que está sendo analisada.

Para realizar o procedimento de homogeneização e obter as propriedades elásticas efetivas de um material composto por um arranjo periódico da célula de base, é preciso computar a tensão média na célula quando uma deformação média é imposta. Então, as propriedades homogeneizadas podem ser extraídas do tensor que relaciona essas médias (YVONNET, 2019).

Além da consideração de pequenos deslocamentos e deformações, as seguintes hipóteses são adotadas. Assume-se que há uma grande diferença de escala, ou seja, a macroestrutura é composta por uma quantidade incontável de células periódicas. Efeitos de borda são desconsiderados e não há cargas de corpo. Existe um volume representativo suficientemente grande, usado para definir as medidas de macrodeformação e macrotensão, tal que todas as células interiores possuem praticamente a mesma cinemática (desconsiderando movimentos rígidos) e estão sujeitas aos mesmos esforços em suas interfaces com as células vizinhas. Isso significa que todas as células possuem praticamente o mesmo valor de deformação média, igual à deformação média no volume representativo, e que cargas em pontos correspondentes de arestas opostas possuem a mesma direção e sentidos opostos (cargas antissimétricas).

Como há uma relação linear entre deformações e deslocamentos, o vetor de deslocamentos obtido ao se impor um valor qualquer de deformação média deve ser combinação linear das soluções obtidas quando deformações canônicas são aplicadas. Portanto, é necessário considerar apenas três análises independentes, definidas pelos tensores canônicos de macrodeformação:

$$\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}} = \begin{bmatrix} 0 & 0\\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad e \quad \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.15)$$

Sendo S a matriz contendo as coordenadas de cada nó da malha (coordenadas horizontais na primeira coluna e coordenadas verticais na segunda), vetores de macrodes-locamentos são definidos como

$$\hat{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} = \operatorname{vetor}(\boldsymbol{S} \cdot \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}}) ,
\hat{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}} = \operatorname{vetor}(\boldsymbol{S} \cdot \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}}) ,$$

$$\hat{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}} = \operatorname{vetor}(\boldsymbol{S} \cdot \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}}) ,$$
(2.16)

onde "vetor" denota a operação de vetorização linha a linha. Para uma notação compacta,

eles são agrupados na matriz de macrodeslocamentos

$$\widehat{\boldsymbol{U}} = \begin{bmatrix} \widehat{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} & \widehat{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}} & \widehat{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}} \end{bmatrix}.$$
(2.17)

Esses deslocamentos correspondem às três deformações médias prescritas para a célula de base. Os deslocamentos totais são compostos pelos macrodeslocamentos somados a microdeslocamentos. Para garantir cada deformação média imposta, a deformação média correspondente a cada vetor de microdeslocamentos deve ser nula. Esses vetores também são agrupados em uma matriz de microdeslocamentos

$$\widetilde{\boldsymbol{U}} = \begin{bmatrix} \widetilde{\boldsymbol{u}}_{xx} & \widetilde{\boldsymbol{u}}_{yy} & \widetilde{\boldsymbol{u}}_{xy} \end{bmatrix}.$$
(2.18)

Por definição, tem-se que a matriz de deslocamentos totais, de colunas u_{xx} , u_{yy} e u_{xy} , é dada por:

$$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{\hat{U}} + \boldsymbol{\tilde{U}} \,. \tag{2.19}$$

Considerando simultaneamente os três sistemas, a Equação 2.14 pode ser reescrita como:

$$\boldsymbol{K}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{R} \Leftrightarrow \boldsymbol{K}\widetilde{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{R} - \boldsymbol{K}\widehat{\boldsymbol{U}}, \qquad (2.20)$$

onde R é a matriz com as cargas de borda para cada deformação canônica imposta.

Para eliminar translados rígidos, um sistema de referência é definido estabelecendo que o deslocamento do nó central é nulo em todas as análises. A única maneira de garantir simultaneamente que a deformação relacionada a \tilde{U} seja nula e que haja compatibilidade cinemática entre as células (de acordo com as hipóteses apresentadas) é se

$$\widetilde{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{U}^{[\text{per}]} + \boldsymbol{U}^{[\text{rot}]}, \qquad (2.21)$$

sendo $U^{[per]}$ um termo periódico (que se repete em cada célula) e $U^{[rot]}$ um termo de rotação rígida (no modelo de pequenos deslocamentos e deformações).

Assim, o modo de rotações rígidas pode ser eliminado do sistema impondose $U^{[rot]} = O$, o que resulta em uma matriz \tilde{U} com microdeslocamentos periódicos. Isso significa que os microdeslocamentos em pontos correspondentes de arestas opostas possuem o mesmo valor. Essas informações podem ser representadas no sistema de equações através de uma matriz de restrição \boldsymbol{P} , a qual, para uma determinada permutação dos graus de liberdade do sistema, pode ser escrita como

$$P = \begin{bmatrix} O_{rd} & O_{rb} & O_{rc} \\ I_{dd} & O_{db} & O_{dc} \\ O_{bd} & I_{bb} & O_{bc} \\ O_{bd} & I_{bb} & O_{bc} \\ O_{cd} & O_{cb} & I_{cc} \\ O_{cd} & O_{cb} & I_{cc} \\ O_{cd} & O_{cb} & I_{cc} \end{bmatrix} .$$
(2.22)

O subíndice r se refere aos graus de liberdade do nó central (que são restritos para serem iguais a zero); o subíndice d se refere aos graus de liberdade dos nós livres no domínio interno (todos os graus de liberdade que não estão nas bordas e que não correspondem ao nó central); o subíndice b se refere aos graus de liberdade que estão nas arestas, mas não nos cantos; e o subíndice c se refere aos graus de liberdade que estão nos cantos da célula hexagonal. Assim, os microdeslocamentos podem ser escritos em termos de uma matriz restrita $\check{\boldsymbol{U}} \in \mathbb{R}^{\check{G}\times 3}$ como

$$\widetilde{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{P}\,\widetilde{\boldsymbol{U}}\,. \tag{2.23}$$

A matriz restrita $\check{\boldsymbol{U}}$ tem dimensão reduzida pois não contém informações redundantes. A informação sobre os valores conhecidos (para o nó central), duplicados (para as arestas) e triplicados (para os cantos) está armazenada em \boldsymbol{P} .

Os termos da matriz com as cargas de borda podem ser divididos como

$$\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_{r} \\ \boldsymbol{O}_{d} \\ \boldsymbol{R}_{b}^{[1]} \\ \boldsymbol{R}_{b}^{[2]} \\ \boldsymbol{R}_{c}^{[1]} \\ \boldsymbol{R}_{c}^{[2]} \\ \boldsymbol{R}_{c}^{[3]} \end{bmatrix}, \qquad (2.24)$$

sendo \mathbf{R}_r a reação de apoio no nó central (que deve ser nula já que essa restrição apenas estabelece um sistema de referência para os deslocamentos); O_d a matriz de zeros correspondente à ausência de cargas no domínio interno; $\mathbf{R}_b^{[1]} \in \mathbf{R}_b^{[2]}$ as cargas nas arestas; e $\mathbf{R}_c^{[1]}$, $\mathbf{R}_c^{[2]} \in \mathbf{R}_c^{[3]}$ as cargas nos cantos.

Como as cargas devem ser antissimétricas nas bordas, tem-se que tanto a soma entre $\mathbf{R}_{b}^{[1]} \in \mathbf{R}_{b}^{[2]}$, quanto a soma entre $\mathbf{R}_{c}^{[1]}$, $\mathbf{R}_{c}^{[2]} \in \mathbf{R}_{c}^{[3]}$ devem ser nulas. Isso implica que todas as cargas incógnitas podem ser removidas do sistema através da seguinte operação:

$$\check{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{O}_d \\ \boldsymbol{O}_b \\ \boldsymbol{O}_c \end{bmatrix} .$$
(2.25)

Por sua vez, a matriz de rigidez restrita \widecheck{K} é dada por

$$\widetilde{K} = P^T K P \,. \tag{2.26}$$

Definindo

$$\boldsymbol{F} = -\boldsymbol{K}\,\hat{\boldsymbol{U}} \tag{2.27}$$

е

$$\check{\boldsymbol{F}} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{F} \,, \tag{2.28}$$

ao pré-multiplicar a Equação 2.20 por \boldsymbol{P}^T , obtém-se um sistema sem termos desconhecidos e, como todos os modos rígidos foram removidos, com uma matriz invertível:

$$\widetilde{\boldsymbol{K}}\widetilde{\boldsymbol{U}} = \widetilde{\boldsymbol{F}}.$$
(2.29)

A solução única do sistema pode ser escrita como

$$\check{\boldsymbol{U}} = \check{\boldsymbol{K}}^{-1} \check{\boldsymbol{F}} \,, \tag{2.30}$$

o que resulta em

$$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{\hat{U}} + \left[\boldsymbol{P} \, \boldsymbol{\check{K}}^{-1} \boldsymbol{P}^T \right] \boldsymbol{F} \,. \tag{2.31}$$

Com isso, obtêm-se os três vetores de deslocamentos correspondentes a cada uma das macrodeformações canônicas. Ao computar os 9 valores de tensão média correspondentes (três valores escalares para cada macrodeformação canônica), obtêm-se todos os termos da matriz de propriedades elásticas do material homogeneizado, C. Pelo lema de Hill-Mandel (YVONNET, 2019), tem-se que a energia de deformação da célula corresponde à energia computada através de seus valores médios de tensão e deformação. Como consequência, obtém-se uma expressão alternativa para a matriz C:

$$\boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} C_{00} & C_{01} & C_{02} \\ C_{10} & C_{11} & C_{12} \\ C_{20} & C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} = \frac{1}{A_{\Omega}} \boldsymbol{U}^T \boldsymbol{K} \boldsymbol{U} , \qquad (2.32)$$

onde A_{Ω} é a área da célula hexagonal.

Para qualquer distribuição de material no domínio de projeto, a simetria diedral D_3 da estrutura garante que a matriz constitutiva computada corresponda a um material isotrópico, ou seja, $C_{02} = C_{12} = C_{20} = C_{21} = 0$, $2C_{22} = C_{00} - C_{01}$, $C_{00} = C_{11}$ e $C_{01} = C_{10}$. Como são consideradas estruturas bidimensionais em estado plano de tensões, a matriz pode ser escrita em termos do coeficiente de Poisson homogeneizado $\hat{\nu}$ e do módulo de Young homogeneizado \hat{E} da seguinte maneira:

$$\boldsymbol{C} = \frac{\hat{E}}{1 - \hat{\nu}^2} \begin{bmatrix} 1 & \hat{\nu} & 0\\ \hat{\nu} & 1 & 0\\ 0 & 0 & \frac{1 - \hat{\nu}}{2} \end{bmatrix}.$$
 (2.33)

Comparando ambas as expressões, os parâmetros homogeneizados podem ser obtidos em termos dos componentes da matriz C (computada através do procedimento descrito):

$$\hat{\nu} = 1 - \frac{2C_{22}}{C_{00}} ; \qquad (2.34)$$

$$\hat{E} = \frac{4 C_{22} \left[C_{00} - C_{22} \right]}{C_{00}} \,. \tag{2.35}$$

Há diferentes formas de expressar esses parâmetros, os termos diagonais de C foram utilizados pois eles possuem uma propriedade conveniente: eles correspondem a energias de deformação da estrutura (considerando os casos em que cada deformação canônica é aplicada individualmente). Essa propriedade faz com que existam algumas semelhanças entre o problema usual de minimização de complacência e o problema de concepção de metamateriais, as quais podem ser úteis no desenvolvimento de expressões de sensibilidade.

Uma vez definido o procedimento de homogeneização, as propriedades do metamaterial podem ser computadas para qualquer distribuição de material no domínio de projeto. Com isso, pode-se projetar o material buscando obter topologias que minimizam a diferença entre as propriedades homogeneizadas e os valores desejados para elas.

2.2 Topologia Baseada em Densidades

Para que as funções apresentadas possam ser descritas em termos de uma quantidade finita de variáveis de projeto, métodos de densidade são adotados para descrever as topologias. Para esclarecer quais são as principais diferenças entre a abordagem discreta adotada e a abordagem contínua, apresentam-se ambas as formulações: considerando-se variáveis binárias; e considerando-se variáveis relaxadas.

2.2.1 Variáveis Binárias

O espaço de topologias deve ser restrito, de forma que apenas um subconjunto de dimensão finita seja considerado nos problemas de otimização. Nos métodos de densidade, a estratégia é considerar que a distribuição de material é uniforme dentro de cada elemento da malha discretizada. Em outras palavras, há apenas duas possibilidades de distribuição dentro de cada elemento: ou o material de base ocupa todo o volume do elemento (elemento sólido); ou não há material dentro do elemento (elemento vazio).

Sendo N_d o número de variáveis de projeto, o vetor de densidades $\boldsymbol{x} \in \{0, 1\}^{N_d}$ é usado para descrever completamente a topologia de uma estrutura, atribuindo um estado (sólido ou vazio) a cada elemento da malha considerada. Se a densidade de um elemento é unitária, ele corresponde a um elemento sólido, se sua densidade é nula, ele corresponde a um elemento vazio. Nessas condições, o espaço de topologias se torna finito, com 2^{N_d} estruturas possíveis.

No caso da estrutura sob carregamento estático, cada variável de projeto define o estado de um único elemento quadrilateral. Contudo, no caso da célula simétrica, cada variável define o estado de seis elementos quadrilaterais. Para unificar as notações e simplificar as expressões, denota-se $\mathbf{K}_i^{[e]}$ a matriz de rigidez do *e*-ésimo elemento quadrilateral correspondente à variável de projeto de índice *i* (considerando que esse elemento é sólido). No caso da estrutura sob carregamento estático, há apenas um elemento por variável $(e \in \{0\})$, no caso da célula simétrica, há seis elementos por variável $(e \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5\})$. Todas essas matrizes de rigidez são simétricas e possuem dimensão $G \times G$, sendo G a quantidade de graus de liberdade do sistema irrestrito (duas vezes o número de nós da malha). Cada uma delas é semidefinida positiva e assume valores nulos em todos os termos fora de uma pequena submatriz de dimensões 8×8 .

Em cada caso, define-se como i-ésimo elemento aumentado a união de todos os elementos quadrilaterais correspondentes à i-ésima variável de projeto. No primeiro caso, cada elemento aumentado é simplesmente um elemento de quatro nós. No segundo caso, cada elemento aumentado pode ter 13, 18 ou 24 nós, de acordo com sua posição em relação aos planos de simetria da célula. A partir daqui, adota-se como convenção que: sempre que o termo "elemento" for usado com correspondência biunívoca a uma variável de projeto, ele estará se referindo a um elemento aumentado. Tem-se a seguinte matriz para o i-ésimo elemento (considerando que ele é sólido):

$$\boldsymbol{K}_{i}^{[\text{solido}]} = \sum_{e} \boldsymbol{K}_{i}^{[e]} \,. \tag{2.36}$$

Para evitar singularidades no decorrer dos procedimentos de otimização, uma pequena rigidez é atribuída a elementos vazios. Sendo p_k um parâmetro de *soft-kill* tal que $0 < p_k \ll 1$, uma rigidez mínima \mathbf{K}_m é atribuída para toda a estrutura:

$$\boldsymbol{K_m} = p_k \sum_{i=0}^{N_d-1} \boldsymbol{K_i^{[solido]}}.$$
(2.37)

A matriz de variação elementar, que corresponde à variação aplicada à matriz de rigidez global quando o estado do i-ésimo elemento é alterado, é definida como

$$\boldsymbol{K}_{i} = \begin{bmatrix} 1 - p_{k} \end{bmatrix} \boldsymbol{K}_{i}^{[\text{solido}]} .$$
(2.38)

Pode-se então escrever a matriz de rigidez global irrestrita como uma função do vetor de densidades:

$$K(x) = K_m + \sum_{i=0}^{N_d-1} x_i K_i.$$
 (2.39)

Para ambos os casos, a matriz restrita é dada por

$$\widetilde{\boldsymbol{K}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{K}(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{P}.$$
(2.40)

Assim, as funções referentes à estrutura sob carregamento estático são dadas por:

$$\check{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}) = \left[\check{\boldsymbol{K}}(\boldsymbol{x})\right]^{-1}\check{\boldsymbol{f}}; \qquad (2.41)$$

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{P} \, \boldsymbol{\check{u}}(\boldsymbol{x}) \,; \tag{2.42}$$

$$C(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}^T \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}). \qquad (2.43)$$

Conforme descrito, a matriz $\mathbf{K}(\mathbf{x})$ tem dimensões $G \times G$; a matriz $\mathbf{K}(\mathbf{x})$ tem dimensões $\check{G} \times \check{G}$; a matriz \mathbf{P} tem dimensões $G \times \check{G}$; os vetores $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ e \mathbf{f} têm dimensões $G \times 1$; os vetores $\check{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ e $\check{\mathbf{f}}$ têm dimensões $\check{G} \times 1$; e $C(\mathbf{x})$ é uma função escalar.

Por sua vez, as funções referentes à homogeneização de um material periódico são dadas por:

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{K}(\boldsymbol{x})\,\hat{\boldsymbol{U}}\,; \qquad (2.44)$$

$$\check{\boldsymbol{F}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}); \qquad (2.45)$$

$$\check{\boldsymbol{U}}(\boldsymbol{x}) = \left[\check{\boldsymbol{K}}(\boldsymbol{x})\right]^{-1} \check{\boldsymbol{F}}(\boldsymbol{x}); \qquad (2.46)$$

$$\widetilde{\boldsymbol{U}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{P}\,\widetilde{\boldsymbol{U}}(\boldsymbol{x})\,;$$
(2.47)

$$\boldsymbol{U}(\boldsymbol{x}) = \widehat{\boldsymbol{U}} + \widetilde{\boldsymbol{U}}(\boldsymbol{x}); \qquad (2.48)$$

$$\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{A_{\Omega}} \left[\boldsymbol{U}(\boldsymbol{x}) \right]^{T} \boldsymbol{K}(\boldsymbol{x}) \, \boldsymbol{U}(\boldsymbol{x}) \, ; \qquad (2.49)$$

$$\hat{\nu}(\boldsymbol{x}) = 1 - \frac{2 C_{22}(\boldsymbol{x})}{C_{00}(\boldsymbol{x})};$$
(2.50)

$$\widehat{E}(\boldsymbol{x}) = \frac{4 C_{22}(\boldsymbol{x}) \left[C_{00}(\boldsymbol{x}) - C_{22}(\boldsymbol{x}) \right]}{C_{00}(\boldsymbol{x})} \,. \tag{2.51}$$

Conforme descrito, a matriz $\mathbf{K}(\mathbf{x})$ tem dimensões $G \times G$; a matriz $\mathbf{K}(\mathbf{x})$ tem dimensões $\check{G} \times \check{G}$; a matriz \mathbf{P} tem dimensões $G \times \check{G}$; as matrizes $\mathbf{U}(\mathbf{x})$, $\hat{\mathbf{U}}$, $\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{x})$ e $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ têm dimensões $G \times 3$; as matrizes $\check{\mathbf{U}}(\mathbf{x})$ e $\check{\mathbf{F}}(\mathbf{x})$ têm dimensões $\check{G} \times 3$; a matriz $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ tem dimensões 3×3 ; e $\hat{\nu}(\mathbf{x})$ e $\hat{E}(\mathbf{x})$ são funções escalares.

Além dessas, há duas outras funções escalares que são comumente usadas nos problemas de otimização topológica (para definir restrições): uma função de volume V e uma função de variação topológica D. A função de volume é usada em casos em que se deseja restringir o volume de material sólido que pode compor a estrutura. Neste trabalho, consideram-se apenas casos nos quais todos os elementos possuem a mesma área. Portanto, o número de elementos sólidos pode ser usado como medida de volume:

$$V(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{x}\|_{1} = \sum_{i=0}^{N_{d}-1} x_{i}.$$
 (2.52)

57

Considerando um vetor de densidades fixado \bar{x} , a função de variação topológica mede quão distante x está de \bar{x} . Ela é usada em casos em que se deseja restringir quanto a topologia pode mudar em cada iteração. Neste trabalho, utiliza-se a seguinte métrica:

$$D(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{x}\|_{1} = \|\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}}\|_{1} = \sum_{i=0}^{N_{d}-1} |x_{i} - \bar{x}_{i}| . \qquad (2.53)$$

Como as restrições geralmente são dadas em termos relativos, definem-se também as funções de fração de volume e de fração de variação topológica:

$$V_f(\boldsymbol{x}) = \frac{V(\boldsymbol{x})}{N_d}; \qquad (2.54)$$

$$D_f(\boldsymbol{x}) = \frac{D(\boldsymbol{x})}{N_d}.$$
(2.55)

Com isso, obtêm-se descrições de todas as funções relevantes para os problemas de otimização considerados em termos do vetor \boldsymbol{x} de variáveis de projeto binárias.

2.2.2 Variáveis Relaxadas

Em algumas abordagens, faz-se uma relaxação do problema discreto, obtendo um problema de otimização de variáveis contínuas que pode ser solucionado por métodos baseados em gradiente. Para isso, considera-se que cada elemento pode assumir densidades intermediárias, em [0, 1], e utiliza-se uma função de interpolação $\varphi : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$, com $\varphi(0) = 0$ e $\varphi(1) = 1$, para definir as propriedades dos elementos. Isso resulta na seguinte expressão para a matriz de rigidez global irrestrita:

$$\boldsymbol{K}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{m}} + \sum_{i=0}^{N_d - 1} \varphi(x_i) \, \boldsymbol{K}_i \,.$$
(2.56)

Com isso, todas as funções de variáveis binárias definidas na seção anterior passam a representar funções contínuas e diferenciáveis, descritas em termos do vetor de densidades relaxado $\boldsymbol{x} \in [0,1]^{N_d}$. A dimensão do espaço de topologias continua sendo finita, mas agora há uma infinidade de possibilidades para a estrutura relaxada. Ainda assim, o número de estruturas factíveis, isto é, estruturas nas quais o estado de cada elemento está indubitavelmente definido, continua sendo 2^{N_d} .

A priori, qualquer função monótona, contínua e diferenciável poderia ser usada para realizar a relaxação. Contudo, grande parte dos trabalhos utiliza o esquema de interpolação SIMP, dado por:

$$\varphi(x_i) = x_i^{\ p} \,. \tag{2.57}$$

Em problemas de minimização de complacência sujeito a uma restrição de volume, essa função de interpolação inibe a presença de valores intermediários de densidade. Nesses problemas, quando valores suficientemente elevados são usados para o expoente p, a solução do problema relaxado é também solução do problema discreto original.

Nesse tipo de abordagem, o maior desafio é garantir que a solução do problema relaxado descreva uma distribuição factível de material. Quando o esquema SIMP não é suficiente, geralmente se utilizam técnicas de projeção para reduzir a ocorrência de valores de densidades intermediários.

2.3 Linearização de Funções de Variáveis Binárias

Como observação inicial, destaca-se que, neste trabalho, o termo "linear" é usado para se referir a funções afins, isto é, funções que podem adquirir as propriedades de linearidade apenas com um translado do sistema de coordenadas. Em outras palavras, o termo é usado para se referir a funções que variam linearmente, mesmo que não cruzem a origem do sistema.

Tanto na abordagem discreta quanto na contínua, a principal etapa dos algoritmos de otimização consiste na análise de sensibilidade. Nessa etapa, avalia-se a sensibilidade das funções do problema em relação a variações mínimas de cada variável de projeto. No caso contínuo, isso corresponde à computação do gradiente de cada função. Esse procedimento pode ser entendido como a obtenção dos coeficientes da linearização de cada função em torno da topologia atual, denotada \bar{x} . No caso discreto, as variações mínimas são finitas e as funções não são diferenciáveis, ainda assim, como apresentado nesta seção, esse procedimento também corresponde à obtenção dos coeficientes da linearização de cada função em torno da topologia atual. Portanto, a análise de sensibilidade pode ser definida de uma forma mais geral, como um procedimento de linearização das funções, sejam elas contínuas ou de variáveis binárias.

Para linearizar uma função de variáveis binárias em torno de um ponto, é preciso descrevê-la em uma forma variacional e, em seguida, dividi-la em uma parte linear e uma não-linear. Então, a função linearizada é obtida desprezando-se a parte não-linear.

O conjunto $\{0,1\}^{N_d}$, no qual as variáveis de projeto são definidas, possui 2^{N_d} elementos. Dada uma regra de ordenação para as entradas possíveis, qualquer função escalar h de N_d variáveis binárias pode ser completamente descrita pelo conjunto ordenado de seus valores de saída.

Na Figura 2.11, isso é ilustrado para um caso particular, com $N_d = 4$. As 16 entradas possíveis estão apresentadas como topologias em uma malha de dimensões 2×2 , elementos sólidos $(x_i = 1)$ são representados em tom escuro e elementos vazios $(x_i = 0)$ são representados em tom claro. Cada entrada é pareada com um valor de saída correspondente, de forma que o conjunto ordenado $\{h_0, h_1, \ldots, h_{15}\}$ define completamente a função escalar $h(\boldsymbol{x})$.



Figura 2.11 – Função de Variáveis Binárias

Uma forma alternativa de representar tal função é através de suas variações relativas a um ponto fixo $\bar{\boldsymbol{x}}$. Sendo N_v o número de termos nulos em $\bar{\boldsymbol{x}}$ e N_s o número de termos unitários, o vetor de variação $\Delta \boldsymbol{x} \in \{0, 1\}^{N_v} \times \{0, -1\}^{N_s}$ pode ser definido como

$$\Delta \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}} \,. \tag{2.58}$$

Baseado em \bar{x} , se $\Delta x_i = 0$, não há variação no estado do *i*-ésimo elemento, se $\Delta x_i = \pm 1$, seu estado é alterado (de vazio para sólido, ou de sólido para vazio). Assim, para um dado \bar{x} , uma nova função pode ser definida como

$$h^{[\operatorname{var}]}(\Delta \boldsymbol{x}) = h^{[\operatorname{var}]}(\Delta \boldsymbol{x}(\boldsymbol{x})) = h(\boldsymbol{x}).$$
(2.59)

Ela pode ser parametrizada por um escalar $\alpha^{\langle 0 \rangle}$ e por N_d tensores de ordem crescente $\boldsymbol{\alpha}^{\langle \boldsymbol{k} \rangle}$, como mostrado abaixo:

$$h^{[\text{var}]}(\boldsymbol{\Delta x}) = \alpha^{\langle 0 \rangle} + \sum_{k=1}^{N_d} \boldsymbol{\alpha}^{\langle \boldsymbol{k} \rangle} \left(\cdot \right)^k \left[\boldsymbol{\Delta x} \right]^k \,. \tag{2.60}$$

Deve-se destacar que essa é uma expressão variacional exata para qualquer função escalar de N_d variáveis binárias. Ela não corresponde a um truncamento de série de Taylor, já que a função considerada é discreta e, portanto, não é diferenciável. Apesar de os tensores de alta ordem levarem em consideração os efeitos de acoplamento das variáveis (como os termos cruzados das derivadas de alta ordem fariam), esta é uma analogia equivocada que pode resultar em interpretações incorretas.

O tensor $[\Delta x]^k$, de ordem k, corresponde ao produto tensorial (produto externo) entre k vetores Δx ; e o produto interno de grau k, denotado $(\cdot)^k$ representa a operação dada por

$$\boldsymbol{\alpha}^{\langle \boldsymbol{k}\rangle}(\cdot)^{\boldsymbol{k}} \left[\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{x}\right]^{\boldsymbol{k}} = \sum_{i_1=0}^{N_d-1} \sum_{i_2=0}^{N_d-1} \dots \sum_{i_k=0}^{N_d-1} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_k}^{\langle \boldsymbol{k}\rangle} \left[\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{x}\right]_{i_1} \left[\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{x}\right]_{i_2} \dots \left[\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{x}\right]_{i_k} .$$
(2.61)

Exceto por $\boldsymbol{\alpha}^{\langle 1 \rangle}$, que é um vetor, cada tensor $\boldsymbol{\alpha}^{\langle k \rangle}$ é estritamente triangular superior, então $\alpha_{i_1 i_2 \dots i_k}^{\langle k \rangle}$ só assume valores não-nulos quando $i_1 < i_2 < \dots < i_k$. Isso significa que $\boldsymbol{\alpha}^{\langle k \rangle}$ é definido por $\binom{N_d}{k}$ parâmetros. Somados com o escalar $\boldsymbol{\alpha}^{\langle 0 \rangle}$, eles resultam nos 2^{N_d} parâmetros necessários para descrever completamente a função.

O escalar $\alpha^{\langle 0 \rangle}$ corresponde ao valor da função sem variação, $\alpha^{\langle 0 \rangle} = h^{[\text{var}]}(\mathbf{0}) = h(\bar{\boldsymbol{x}})$. O *i*-ésimo termo do tensor de primeira ordem, $\alpha_i^{\langle 1 \rangle}$, está relacionado com a variação de *h* quando somente a variável x_i é alterada. O $i_1 i_2$ -ésimo termo do tensor de segunda ordem, $\alpha_{i_1 i_2}^{\langle 2 \rangle}$ com $i_1 < i_2$, leva em consideração o efeito acoplado de alterar ambas as variáveis $x_{i_1} \in x_{i_2}$. De certa forma, ele prevê como $\alpha_{i_1}^{\langle 1 \rangle}$ (ou $\alpha_{i_2}^{\langle 1 \rangle}$) mudaria após alterar x_{i_2} (ou x_{i_1}) e reescrever $h^{[\text{var}]}$ em relação ao novo ponto. Como interpretação geral, o tensor de ordem $k, \boldsymbol{\alpha}^{\langle k \rangle}$ está relacionado ao efeito combinado de alterar k variáveis simultaneamente.

Apesar de a Equação 2.60 apresentar uma forma algébrica bastante compacta para a função $h^{[\text{var}]}$, sua compreensão exige algum esforço de abstração. Uma forma mais visual de entender a expressão é através do esquema ilustrado na Figura 2.12, para um caso particular de \bar{x} . Todas as topologias possíveis são organizadas em um grafo, no qual cada topologia é ligada a suas N_d vizinhas imediatas. Ao atribuir valores apropriados para cada aresta, esse grafo fornece uma representação equivalente para $h^{[\text{var}]}$, menos compacta mas mais compreensível.



Figura 2.12 – Conjuntos de Vizinhança

O conceito de vizinhança adotado é o seguinte. Dado um inteiro não-negativo $q \leq N_d$, a vizinhança-q de $\bar{\boldsymbol{x}}$ pode ser definida como o conjunto $\mathbb{B}_q(\bar{\boldsymbol{x}})$ dos vetores \boldsymbol{x} que diferem de $\bar{\boldsymbol{x}}$ em no máximo q termos. Para qualquer $\bar{\boldsymbol{x}}$, tem-se que $\{\bar{\boldsymbol{x}}\} = \mathbb{B}_0(\bar{\boldsymbol{x}}) \subset \mathbb{B}_1(\bar{\boldsymbol{x}}) \subset \ldots \subset \mathbb{B}_{N_d}(\bar{\boldsymbol{x}}) = \{0,1\}^{N_d}$. Diz-se que o ponto \boldsymbol{x} é vizinho imediato de $\bar{\boldsymbol{x}}$ quando

 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{B}_1(\bar{\boldsymbol{x}})$. Em notação matemática, a vizinhança-q pode ser expressa como:

$$\mathbb{B}_{q}(\bar{\boldsymbol{x}}) = \left\{ \boldsymbol{x} \in \{0,1\}^{N_{d}} \mid D(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=0}^{N_{d}-1} |x_{i} - \bar{x}_{i}| \leq q \right\}.$$
(2.62)

O valor da função no primeiro vértice à esquerda do grafo é dado por $h(\bar{x}) = h^{[\text{var}]}(\mathbf{0}) = \alpha^{\langle 0 \rangle}$. Qualquer variação topológica corresponde a um caminho no grafo e resulta numa variação Δh da função. Assim, os valores das arestas são definidos de forma que, para qualquer caminho possível, a soma dos valores das arestas direcionadas resulte em Δh . Na ilustração, cada linha representa um par de arestas, uma direcionada para a direita e uma, de mesmo valor e sinal oposto, direcionada para a esquerda. Há $\binom{4}{1}$ topologias na segunda camada, então 4 parâmetros (relacionados a $\alpha^{\langle 1 \rangle}$) devem ser definidos para atribuir os valores dos 4 pares de arestas entre a primeira e a segunda camadas. Há $\binom{4}{2}$ topologias na terceira camada, então 6 parâmetros (relacionados a $\alpha^{\langle 2 \rangle}$) devem ser definidos para atribuir os valores dos 12 pares de arestas entre a segunda e a terceira camadas. Há $\binom{4}{3}$ topologias na quarta camada, então 4 parâmetros dos 12 pares de arestas entre a terceira e a quarta camadas. Finalmente, como há $\binom{4}{4}$ topologia na última camada, 1 parâmetro (relacionado a $\alpha^{\langle 4 \rangle}$ deve ser definido para atribuir os valores dos 4 pares de arestas entre a última camada, 1 parâmetro (relacionado a $\alpha^{\langle 4 \rangle}$ deve ser definido para atribuir os valores dos 4 pares de arestas entre a última camadas.

A parte linear da função, corresponde à parte em que não há acoplamento de variáveis. Em outras palavras, para linearizar a função discreta h em torno de \bar{x} , faz-se o truncamento de $h^{[var]}$, desprezando todo $\alpha^{\langle k \rangle}$ com k > 1:

$$h^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) = \alpha^{\langle 0 \rangle} + \boldsymbol{\alpha}^{\langle 1 \rangle} \cdot [\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}}]$$
(2.63)

Para prever valores da função para entradas em $\mathbb{B}_q(\bar{x})$, os coeficientes de $\alpha^{\langle k \rangle}$ com k > q são irrelevantes. Isso significa que quando pontos mais próximos de \bar{x} são considerados, menos termos são desprezados no processo de truncamento, potencialmente reduzindo o erro da aproximação linear. De toda forma, a função linearizada fornece resultados exatos para qualquer $x \in \mathbb{B}_1(\bar{x})$.

Os coeficientes podem ser obtidos a partir da Equação 2.60, avaliando $h^{[var]}$ em cada ponto de $\mathbb{B}_1(\bar{\boldsymbol{x}})$:

$$\alpha^{\langle 0 \rangle} = h(\bar{\boldsymbol{x}}); \qquad (2.64)$$

$$\alpha_i^{\langle 1 \rangle} = h(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 1) - h(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 0).$$
(2.65)

Os argumentos ($\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 1$) e ($\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 0$) denotam vetores que são iguais a $\bar{\boldsymbol{x}}$ exceto em seus *i*-ésimos termos, que assumem os valores explicitamente definidos.

São necessárias $N_d + 1$ computações da função para descrever sua linearização em torno de um ponto, um número muito reduzido quando comparado às 2^{N_d} computações necessárias para descrever a função completa. Denotando-se o vetor $\boldsymbol{\alpha}^{\langle 1 \rangle}$ como $\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{h}]}$, podese escrever a função linearizada como:

$$h^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) = \left[\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{h}]}\right] \cdot \boldsymbol{x} + \left[h(\bar{\boldsymbol{x}}) - \boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{h}]} \cdot \bar{\boldsymbol{x}}\right].$$
(2.66)

Pela Equação 2.65, tem-se que $\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{h}]}$ mede a variação finita da função objetivo após a alteração independente de cada variável de projeto, do estado vazio para o sólido. Pela Equação 2.66, tem-se que esse vetor corresponde à taxa de variação da função, com respeito a variações da entrada. Isso caracteriza $\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{h}]}$ como o vetor de sensibilidades da função de variáveis binárias.

Deve-se destacar que há uma infinidade de maneiras de expressar uma mesma função escalar de variáveis binárias. Independentemente da função considerada, para que ela seja linear, é condição necessária e suficiente que ela seja aditivamente separável. Desde que cada parcela da expressão dependa apenas de uma única variável binária, a função é linear, mesmo que cada parcela corresponda a uma expressão que seria não-linear se variáveis relaxadas fossem usadas (como é o caso da função de variação topológica D). Portanto, o procedimento de linearização descrito fornece uma forma padrão para se expressar qualquer função de variáveis binárias linear: Equação 2.66. Nessa forma, a linearidade é conservada ao se relaxar as variáveis: obtém-se a equação do hiperplano em \mathbb{R}^{N_d+1} que passa por todos os pontos que definem a função discreta original.

2.4 Programação Linear Inteira Sequencial (PLIS)

Uma vez definido o procedimento de linearização, o problema de otimização discreto pode ser abordado por algoritmos de Programação Linear Inteira Sequencial (PLIS). Nesses algoritmos iterativos, parte-se de uma topologia inicial, linearizam-se as funções em torno dela, soluciona-se o subproblema de programação linear inteira obtido, atualiza-se a topologia para a solução do subproblema, repete-se o processo até algum critério de parada ser atingido. Há diferentes formas de solucionar cada subproblema linear inteiro, aqui, consideram-se dois métodos comumente utilizados na área de otimização topológica discreta: o algoritmo BESO; e o algoritmo simplex combinado com o método ramificar-e-limitar.

2.4.1 Problemas Considerados

No problema de otimização de uma estrutura sob carregamento estático, desejase obter a topologia que minimiza o valor de complacência mecânica. Como essa função é monótona e decrescente, deve-se incluir uma restrição de volume para evitar a solução trivial de uma estrutura completamente sólida, no formato do domínio de projeto. Ao minimizar a complacência mecânica sujeito a uma restrição de volume, obtém-se uma forma eficiente de distribuir material dentro do domínio de projeto. A otimização busca encontrar a estrutura mais rígida em relação à carga aplicada, para a quantidade de material especificada. Para um dado valor de fração de volume desejado V_f^* , esse problema de otimização topológica é descrito como

$$\boldsymbol{x}^* = \arg\min \ C(\boldsymbol{x})$$

sujeito a (2.67)
 $V_f(\boldsymbol{x}) = V_f^*$.

Para solucionar esse problema, resolve-se uma sucessão de subproblemas linearizados, conforme descrito adiante.

Além da restrição de volume, uma restrição de variação topológica é incluída em cada subproblema linearizado. Em métodos sequenciais, para reduzir a diferença entre as funções originais e suas versões simplificadas usadas nos subproblemas, as variações são limitadas em cada iteração. Nos problemas considerados, isso significa reduzir o espaço factível de topologias, considerando, em cada subproblema, apenas pontos da vizinhançaq da topologia atual, com $q < N_d$. Ao reduzir o espaço de $\{0, 1\}^{N_d}$ para $\mathbb{B}_q(\bar{x})$, todos os valores de $\alpha^{\langle k \rangle}$ com k > q se tornam irrelevantes, já que, em tais condições, a informação que há nesses tensores só diz respeito a valores das funções relativos a topologias inalcançáveis. Isso resulta numa redução da quantidade de termos truncados na linearização, melhorando a precisão das funções consideradas nos subproblemas.

A combinação dessas restrições pode resultar num subproblema sem solução factível, para evitar isso, é preciso definir uma progressão adequada de restrições de volume, até que o volume final desejado seja atingido. Em cada iteração, o valor de volume imposto deve ser tal que exista ao menos uma topologia em $\mathbb{B}_q(\bar{x})$ com esse valor de volume.

Nesse problema, parte-se de uma topologia completamente sólida, isto é, de um vetor $\bar{\boldsymbol{x}}^{(0)}$ tal que $\bar{\boldsymbol{x}}_i^{(0)} = 1$ para todo *i*. Há sempre um viés relacionado à escolha da topologia inicial, a razão da escolha tomada é o fato de, nesse tipo de problema, a maior parte da informação estar presente na cinemática dos elementos sólidos da estrutura deformada. Isso ocorre pois a função objetivo é praticamente insensível à maior parte dos elementos vazios (todos os que estiverem desconectados da parte sólida da topologia). Portanto, ao

iniciar com uma topologia completamente sólida, adquire-se informação sobre todos os elementos da malha, permitindo que o algoritmo tome decisões mais bem informadas na primeira iteração.

Para uma topologia atual qualquer, para que o subproblema possa ser definido, todas as funções devem ser linearizadas em torno dela. No caso, as funções $V_f \in D_f$ já são lineares, já que elas são aditivamente separáveis, de toda forma, o procedimento é descrito para um caso geral, no qual as restrições poderiam ser não-lineares. Para linearizar as funções, seus vetores de sensibilidade devem ser computados:

$$\alpha_i^{[C]} = C(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 1) - C(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 0); \qquad (2.68)$$

$$\alpha_i^{[V_f]} = V_f(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 1) - V_f(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 0); \qquad (2.69)$$

$$\alpha_i^{[D_f]} = D_f(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 1) - D_f(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 0).$$
(2.70)

Como discutido no próximo capítulo, não é uma tarefa fácil obter o vetor $\boldsymbol{\alpha}^{[C]}$ em um tempo viável para problemas práticos, geralmente, valores aproximados são usados. Por outro lado, os valores de sensibilidade de V_f e D_f são facilmente computados:

$$\alpha_i^{[V_f]} = \frac{1}{N_d};$$
 (2.71)

$$\alpha_i^{[D_f]} = \frac{1 - 2\,\bar{x}_i}{N_d} \,. \tag{2.72}$$

Para definir o subproblema, as funções são linearizadas e colocadas na forma padrão:

$$C(\boldsymbol{x}) \approx C^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) = \left[\boldsymbol{\alpha}^{[C]}\right] \cdot \boldsymbol{x} + \left[C(\bar{\boldsymbol{x}}) - \boldsymbol{\alpha}^{[C]} \cdot \bar{\boldsymbol{x}}\right]; \qquad (2.73)$$

$$V_f(\boldsymbol{x}) = V_f^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) = \left[\boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{V}_f]}\right] \cdot \boldsymbol{x} + \left[V_f(\bar{\boldsymbol{x}}) - \boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{V}_f]} \cdot \bar{\boldsymbol{x}}\right]; \qquad (2.74)$$

$$D_f(\boldsymbol{x}) = D_f^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) = \left[\boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{D}_f]}\right] \cdot \boldsymbol{x} + \left[D_f(\bar{\boldsymbol{x}}) - \boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{D}_f]} \cdot \bar{\boldsymbol{x}}\right].$$
(2.75)

Define-se um valor máximo para a redução de fração de volume em cada iteração, δV_f^{max} . Esse parâmetro de valor positivo é mantido constante no decorrer do processo iterativo. A partir dele, define-se a função R_V , que determina a redução de fração de volume para a iteração centrada numa topologia \bar{x} qualquer:

$$R_V(\bar{\boldsymbol{x}}) = \begin{cases} \delta V_f^{\max}, & \text{se } V_f(\bar{\boldsymbol{x}}) - V_f^* > \delta V_f^{\max}, \\ V_f(\bar{\boldsymbol{x}}) - V_f^*, & \text{se } V_f(\bar{\boldsymbol{x}}) - V_f^* \leqslant \delta V_f^{\max}. \end{cases}$$
(2.76)

Sendo D_f^{\max} o valor máximo para a fração de variação topológica em cada iteração, tem-se que, para garantir que a combinação das restrições não torne o subproblema infactível, os parâmetros devem ser definidos tais que:

$$D_f^{\max} \ge \delta V_f^{\max} > 0.$$
 (2.77)

Enfim, sendo $\bar{x}^{(j)}$ a topologia atual, referente à *j*-ésima iteração do processo de otimização por PLIS, após obter todas as funções linearizadas em torno de $\bar{x}^{(j)}$, a próxima topologia é obtida como a solução do seguinte subproblema linear inteiro:

$$\bar{\boldsymbol{x}}^{(j+1)} = \arg\min \ C^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) \\ \text{sujeito a} \\
V_f^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) = V_f(\bar{\boldsymbol{x}}^{(j)}) - R_V(\bar{\boldsymbol{x}}^{(j)}), \\
D_f^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) \leq D_f^{\max}.$$
(2.78)

O mesmo procedimento é realizado para o problema de concepção de metamateriais isotrópicos. Nesta tese, considera-se o problema de projetar um metamaterial com valor de coeficiente de Poisson prescrito $\hat{\nu}^*$, sujeito a um valor de módulo de Young mínimo \hat{E}^{\min} . Para isso, define-se a seguinte função a ser minimizada:

$$h_{\nu}(\boldsymbol{x}) = [\hat{\nu}(\boldsymbol{x}) - \hat{\nu}^*]^2 . \qquad (2.79)$$

Nesse caso, como a função objetivo não é monótona, não há necessidade de uma restrição sobre o volume. O problema de otimização topológica é descrito como

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}^* &= \arg\min \ h_{\nu}(\boldsymbol{x}) \\ \text{sujeito a} \\ \widehat{E}(\boldsymbol{x}) &\geq \widehat{E}^{\min}. \end{aligned} \tag{2.80}$$

Mais uma vez, a restrição de variação topológica é incluída para melhorar a precisão das funções linearizadas, através do parâmetro D_f^{max} . Nesse problema, uma estrutura completamente sólida não é uma boa escolha para a topologia inicial. Numa estrutura completamente sólida, o valor de sensibilidade de cada elemento quadrilateral deve ser o mesmo. Nessa situação, os elementos são praticamente indistinguíveis: já que o material é periódico, qualquer alteração mínima da topologia da célula de base, isto é, a inclusão de qualquer furo do tamanho de um elemento quadrilateral, resulta nas mesmas alterações das propriedades homogeneizadas. A imposição de simetria poderia resolver esse problema, contudo, mesmo nesse caso, algumas aproximações de sensibilidade continuam resultando em valores quase idênticos para todos os elementos. Em tais condições, não há um critério adequado para realizar o primeiro passo da otimização, resultando numa alteração praticamente aleatória da topologia. Para evitar esse problema, define-se a topologia inicial incluindo pequenos furos na estrutura completamente sólida.

Todo elemento sólido compondo uma ilha desconectada da estrutura principal (da parte que está conectada a todas as células da estrutura periódica) tem sensibilidade próxima de zero. Como a função objetivo não é monótona e não há restrição de volume, esse material irrelevante pode nunca ser removido, poluindo a solução. Para inibir a ocorrência desse problema, penaliza-se a função de fração de volume utilizando um pequeno parâmetro positivo β . Para isso, define-se a função

$$h_V(\boldsymbol{x}) = \beta \, V_f(\boldsymbol{x}) \tag{2.81}$$

e se busca minimizar a função penalizada:

$$h_{\text{pen}}(\boldsymbol{x}) = h_{\nu}(\boldsymbol{x}) + h_{V}(\boldsymbol{x}). \qquad (2.82)$$

Para linearizar as funções, seus vetores de sensibilidade devem ser computados:

$$\alpha_i^{[\hat{E}]} = \hat{E}(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 1) - \hat{E}(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 0); \qquad (2.83)$$

$$\alpha_i^{[h_{\nu}]} = h_{\nu}(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 1) - h_{\nu}(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 0); \qquad (2.84)$$

$$\alpha_i^{[h_V]} = h_V(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 1) - h_V(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 0); \qquad (2.85)$$

$$\alpha_i^{[h_{\text{pen}}]} = h_{\text{pen}}(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 1) - h_{\text{pen}}(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 0).$$
(2.86)

Como discutido no próximo capítulo, não é uma tarefa fácil obter os vetores $\alpha^{[\hat{E}]}$ e $\alpha^{[h_{\nu}]}$ em um tempo viável para problemas práticos, geralmente, valores aproximados são usados. Por outro lado, os valores de sensibilidade da função linear h_V são facilmente computados:

$$\alpha_i^{[h_V]} = \frac{\beta}{N_d} \,. \tag{2.87}$$

Como a função penalizada é dada pela soma de h_{ν} com h_{V} , ao estimar $\boldsymbol{\alpha}^{[h_{\nu}]}$, obtém-se uma estimativa para $\boldsymbol{\alpha}^{[h_{\text{pen}}]}$:

$$\alpha_i^{[h_{\rm pen}]} = \alpha_i^{[h_{\nu}]} + \alpha_i^{[h_V]} \,. \tag{2.88}$$

Para definir o subproblema, as funções são linearizadas e colocadas na forma padrão:

$$\widehat{E}(\boldsymbol{x}) \approx \widehat{E}^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) = \left[\boldsymbol{\alpha}^{[\widehat{E}]}\right] \cdot \boldsymbol{x} + \left[\widehat{E}(\overline{\boldsymbol{x}}) - \boldsymbol{\alpha}^{[\widehat{E}]} \cdot \overline{\boldsymbol{x}}\right]; \qquad (2.89)$$

$$h_{\nu}(\boldsymbol{x}) \approx h_{\nu}^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) = \left[\boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{h}_{\nu}]}\right] \cdot \boldsymbol{x} + \left[h_{\nu}(\bar{\boldsymbol{x}}) - \boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{h}_{\nu}]} \cdot \bar{\boldsymbol{x}}\right]; \qquad (2.90)$$

$$h_V(\boldsymbol{x}) = h_V^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) = \left[\boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{h}_V]}\right] \cdot \boldsymbol{x} + \left[h_V(\bar{\boldsymbol{x}}) - \boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{h}_V]} \cdot \bar{\boldsymbol{x}}\right].$$
(2.91)

Assim, tem-se que

$$h_{\rm pen}(\boldsymbol{x}) \approx h_{\rm pen}^{\rm [lin]}(\boldsymbol{x}) = h_{\nu}^{\rm [lin]}(\boldsymbol{x}) + h_{V}^{\rm [lin]}(\boldsymbol{x}).$$
 (2.92)

Além da limitação na fração de variação topológica, outra medida é tomada para buscar garantir que as funções linearizadas sejam boas estimativas das funções originais. Define-se um valor máximo para a redução do módulo de Young homogeneizado em cada iteração, $\delta \hat{E}^{\text{max}}$. Esse parâmetro de valor positivo é mantido constante no decorrer do processo iterativo. A partir dele, define-se a função R_E , que determina a redução máxima para a iteração centrada numa topologia \bar{x} qualquer:

$$R_E(\bar{\boldsymbol{x}}) = \begin{cases} \delta \hat{E}^{\max} &, \text{ se } \hat{E}(\bar{\boldsymbol{x}}) - \hat{E}^{\min} > \delta \hat{E}^{\max} ,\\ \hat{E}(\bar{\boldsymbol{x}}) - \hat{E}^{\min} , \text{ se } \hat{E}(\bar{\boldsymbol{x}}) - \hat{E}^{\min} \leqslant \delta \hat{E}^{\max} . \end{cases}$$
(2.93)

Enfim, sendo $\bar{x}^{(j)}$ a topologia atual, referente à *j*-ésima iteração do processo de otimização por PLIS, após obter todas as funções linearizadas em torno de $\bar{x}^{(j)}$, a próxima topologia é obtida como a solução do seguinte subproblema linear inteiro:

$$\bar{\boldsymbol{x}}^{(j+1)} = \arg\min h_{\text{pen}}^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) \\ \text{sujeito a} \\ \widehat{E}^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) \ge \widehat{E}(\bar{\boldsymbol{x}}^{(j)}) - R_E(\bar{\boldsymbol{x}}^{(j)}), \\ D_f^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) \le D_f^{\max}.$$
(2.94)

2.4.2 Procedimentos Adicionais e Detalhes de Implementação

Todos os programas foram desenvolvidos em Python 3: as bibliotecas "numpy" e "scipy" foram usadas para realizar as operações básicas de álgebra linear; a biblioteca "scikit-sparse" foi usada para resolver os sistemas lineares através da fatoração de Cholesky; e a biblioteca "pulp" foi usada para modelar e resolver os subproblemas de programação linear inteira. Alguns procedimentos, como a análise de sensibilidades, foram implementados em Cython, que é uma extensão da linguagem Python que permite que os códigos sejam compilados em C (BEHNEL *et al.*, 2011).

Há algumas dificuldades inerentes à otimização topológica por métodos de densidade. A primeira delas está relacionada à dependência de malha: a topologia otimizada se altera indefinidamente conforme se refina a malha de elementos finitos. Em malhas refinadas, componentes que eram espessos em malhas mais grosseiras são divididos em diversos componentes finos, ao se refinar ainda mais, surgem novos componentes ainda mais finos, e isso se repete indefinidamente. Essa dificuldade impede a determinação contundente de uma topologia ótima e também cria um evidente problema de fabricação. Portanto, considera-se uma restrição adicional: buscam-se apenas estruturas com um valor mínimo de espessura para todos os seus componentes. Não é simples impor tal restrição, estratégias indiretas são geralmente adotadas para garantir essa propriedade.

A segunda dificuldade está relacionada a problemas que surgem no modelo numérico. Por exemplo, quando elementos bilineares são usados, as estruturas otimizadas podem possuir tabuleiros de xadrez (regiões com elementos sólidos conectados apenas pelos nós). Isso ocorre pois, no modelo numérico, padrões como esse podem possuir uma rigidez elevada, mesmo que não possam ser reinterpretados como estruturas fisicamente admissíveis. Além de quebrar a restrição de espessura mínima, uma conexão pontual não é admissível já que as tensões no ponto de conexão iriam a infinito.

Outra dificuldade numérica que pode ocorrer em alguns problemas é o surgimento de ilhas (componentes sólidos desconectados dos suportes da estrutura). Como uma abordagem *soft-kill* é adotada, dependendo do problema considerado, elementos sólidos desconectados da estrutura principal podem ser mantidos na topologia otimizada. A presença desse material irrelevante não apenas polui a solução com ruído numérico, mas também pode prejudicar a estabilidade do processo de otimização. No caso de métodos discretos, ilhas podem facilitar conexões repentinas de diferentes regiões da estrutura, cujos efeitos não são previstos na análise de sensibilidade. Além da questão das ilhas, em métodos discretos, a insensibilidade da função objetivo em relação a elementos desconectados da estrutura principal cria uma outra dificuldade: dentre os elementos vazios, apenas os que estão nas interfaces possuem valores substanciais de sensibilidade. Nessas condições, em cada iteração, apenas elementos vazios de interface podem ser transformados em sólidos, o que torna o processo de otimização proibitivamente lento em malhas refinadas.

Para lidar com cada uma dessas dificuldades, procedimentos adicionais são incluídos nos algoritmos de otimização. Uma abordagem amplamente utilizada para lidar com a dependência de malha e inibir a ocorrência de topologias inadmissíveis é a aplicação de filtros de sensibilidade, usados para suavizar os mapas de sensibilidades antes de definir os subproblemas (SIGMUND; PETERSSON, 1998; SIGMUND; MAUTE, 2012). O filtro é caracterizado por seu raio de alcance, que é um parâmetro geométrico que pode ser calibrado para garantir indiretamente a restrição implícita de espessura mínima.

Neste trabalho, um filtro cônico foi utilizado. Sendo r_f o raio de alcance do filtro e r(i, j) a função que retorna a distância entre os centros dos elementos de índices i e j, a função de pesos do filtro, w(i, j), pode ser definida como

$$w(i,j) = \begin{cases} r_f - r(i,j), & \text{se } r(i,j) \leq r_f, \\ 0, & \text{se } r(i,j) > r_f. \end{cases}$$
(2.95)

A partir desses pesos, os termos da matriz de filtro $H^{[fil]}$ podem ser obtidos:

$$H_{ij}^{\text{[fil]}} = \frac{w(i,j)}{\sum_{k=0}^{N_d-1} w(i,k)}.$$
(2.96)

Sendo α o vetor de sensibilidades inalterado, o vetor suavizado é dado por

$$\boldsymbol{\alpha}^{[\text{fil}]} = \boldsymbol{H}^{[\text{fil}]} \boldsymbol{\alpha} \,. \tag{2.97}$$

No caso da concepção de metamateriais, para que uma suavização apropriada seja feita nas bordas do domínio de projeto, um domínio estendido é utilizado para a operação de filtragem. Conforme ilustrado na Figura 2.13, células vizinhas são incluídas, com valores de sensibilidade dados pela condição de periodicidade.

Sendo $\mathbb{C}_j = \{j_0, j_1, \dots, j_9\}$ o conjunto com os índices dos 10 elementos quadrilaterais do domínio estendido correspondentes à variável de projeto j, os valores de pesos do filtro de sensibilidade no domínio estendido são dados por

$$w_x(i,j) = \sum_{k \in \mathbb{C}_j} w(i,k) , \qquad (2.98)$$

onde *i* e *j* são índices das variáveis de projeto (elementos de $\{0, 1, ..., N_d - 1\}$) e *k* é um índice referente a elementos do domínio estendido (elemento de $\{0, 1, ..., 10 N_d - 1\}$).

Nesse caso, a matriz de filtro é redefinida como

$$H_{ij}^{[\text{fil}]} = \frac{w_x(i,j)}{\sum\limits_{k=0}^{N_d-1} w_x(i,k)}.$$
(2.99)



Figura 2.13 – Domínio de Filtragem (Concepção de Metamateriais)

A Figura 2.14 ilustra, para o caso de minimização de complacência em uma viga engastada-livre, a diferença entre a topologia obtida ao realizar a otimização sem usar um filtro de sensibilidade e a topologia obtida usando esse artifício no processo de otimização. Elementos sólidos são representados em tom escuro e elementos vazios são representados em tom claro.



Figura 2.14 – Influência da Filtragem na Topologia Otimizada

O filtro de sensibilidade, além de solucionar o problema de dependência de malha e de tabuleiros de xadrez, fornece valores de sensibilidade a elementos vazios desconectados da estrutura. Isso permite alterações mais rápidas das interfaces, mesmo quando malhas finas são utilizadas.

Para melhorar a estabilidade do procedimento de otimização, um método de momento é aplicado nos vetores de sensibilidade, de forma que a "direção de movimento" da topologia seja alterada de forma gradual, no decorrer das iterações (HUANG; XIE, 2007). Para evitar que picos de sensibilidade poluam demais o processo, os vetores são normalizados para a aplicação do momento (ZHOU *et al.*, 2021). Com isso, a análise de sensibilidades passa a ser feita da seguinte maneira: computa-se o vetor de sensibilidades a partir de sua definição (vetor dos coeficientes de linearização); o vetor é filtrado e normalizado; então, o método de momento é aplicado e o vetor é normalizado novamente. O vetor obtido após essas operações é utilizado para definir o subproblema linear inteiro de cada iteração.

O vetor filtrado e normalizado é dado por

$$\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{nf}]} = \frac{\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{fil}]}}{\|\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{fil}]}\|_{\infty}} = \frac{\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{fil}]}}{\max_{i} |\alpha_{i}^{[\mathbf{fil}]}|}.$$
(2.100)

Sendo $\gamma \in [0,1[$ o parâmetro de momento, o vetor de sensibilidades com momento é dado por

$$\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{mom}](j)} = \gamma \, \boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{nm}](j-1)} + [1-\gamma] \, \boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{nf}](j)} \,, \tag{2.101}$$

onde j indica a iteração, $\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{nm}]}$ é o vetor normalizado dado por

$$\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{nm}]} = \frac{\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{mom}]}}{\|\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{mom}]}\|_{\infty}} = \frac{\boldsymbol{\alpha}^{[\mathbf{mom}]}}{\max_{i} |\alpha_{i}^{[\mathbf{mom}]}|}$$
(2.102)

e, para a primeira iteração, define-se que $\alpha^{[nm](-1)} = 0$.

Em ambos os casos, o método de momento é aplicado apenas na sensibilidade da função objetivo. O vetor $\alpha^{[\hat{E}]}$ é filtrado, mas não é normalizado, para que as previsões de alteração da função de restrição não sejam prejudicadas.

No problema de minimização de complacência, além da utilização de filtro suavizador e momento, mais um procedimento é adicionado ao algoritmo: remove-se do domínio de projeto todo elemento com carga externa. Isso deve ser feito por duas razões. Primeiro, para evitar a eventualidade de uma solução com carga externa distribuída sobre a aresta de um elemento vazio. Segundo, se a análise de sensibilidade for precisa, elementos diretamente carregados podem ter valores de sensibilidade de módulos arbitrariamente elevados (de acordo com o parâmetro de *soft-kill* utilizado). Uma vez que esses picos extremos prejudicariam as etapas de filtragem e de normalização, impõe-se que os elementos nos quais se distribui o carregamento externo são sempre sólidos e não participam do problema de otimização.

No problema de concepção de metamateriais, além da utilização do filtro suavizador e momento, mais alguns procedimentos são adicionados. Operadores morfológicos (SIGMUND, 2007) são utilizados para enviesar as soluções para estruturas de melhor qualidade, isto é, estruturas com componentes sólidos e cavidades vazias maiores e com interfaces mais suaves. Em cada iteração, um operador de abertura é aplicado na solução do subproblema linearizado. Em seguida, ilhas de elementos sólidos são identificadas. Os elementos dessas ilhas são removidos de forma ordenada: elementos com valores de sensibilidade de menores módulos (em relação à função $\widehat{E}(\boldsymbol{x})$) são removidos primeiro. A mesma restrição de variação topológica aplicada no subproblema linearizado é usada nessa etapa, assim, removem-se no máximo $N_d \times D_f^{\max}$ elementos em cada iteração. Isso é feito dessa forma para que as partes mais isoladas das ilhas sejam removidas primeiro, o que pode possibilitar o algoritmo iterativo "desfazer" eventuais passos com efeitos indesejados, reconectando componentes que não deveriam ter sido desconectados. Caso a topologia não tenha sido alterada após todos esses procedimentos (resolução do subproblema linearizado; aplicação do operador de abertura; e remoção de ilhas), um operador de erosão é aplicado. Por último, se a restrição de módulo de Young mínimo não for respeitada pela topologia obtida no fim da iteração, a topologia da iteração anterior é recuperada e um operador de dilatação é aplicado. A restrição sobre o módulo de Young pode ser quebrada já que a solução do subproblema respeita apenas a restrição linearizada, portanto, após cada alteração da topologia, a função de restrição exata deve ser verificada. Quando a otimização é concluída, eventuais ilhas remanescentes são completamente removidas da solução final.

O procedimento de remoção de ilhas é incluído pois a penalização de volume pode não ser suficiente para inibir completamente a permanência de ilhas na estrutura, já que os efeitos do momento e do filtro de sensibilidades podem superar a influência da penalização de volume, a qual não pode ser grande demais para não desconfigurar a função objetivo. A inclusão desse procedimento facilita a calibração de β , já que o algoritmo continua funcionando mesmo se ele assumir valores pequenos. Dessa forma, a penalização de volume passa a atuar estabilizando o processo, reduzindo, em cada iteração, a quantidade de material removida abruptamente pelo procedimento de remoção de ilhas.

O operador de abertura também contribui para estabilizar o processo e simplificar a estrutura. A Figura 2.15 ilustra, para um caso de concepção de metamateriais no qual não se removem as ilhas no fim de cada iteração, a diferença entre a topologia
obtida ao realizar a otimização sem usar o operador de abertura e a topologia obtida usando esse artifício no processo de otimização. Quando todos os artifícios são incluídos, o procedimento de remoção direta de ilhas perde relevância, de toda forma, ele é mantido para garantir que todas as ilhas sejam eliminadas no decorrer do processo iterativo.



Figura 2.15 – Influência do Operador Morfológico na Topologia Otimizada

Sendo r_m o raio de alcance dos operadores morfológicos, os termos da matriz de operações morfológicas $H^{[mor]}$ são dados por

$$H_{ij}^{[\text{mor}]} = \begin{cases} 1, & \text{se } \min_{k \in \mathbb{C}_j} (r(i,k)) \leq r_m, \\ 0, & \text{se } \min_{k \in \mathbb{C}_j} (r(i,k)) > r_m. \end{cases}$$
(2.103)

Assim como foi feito para o filtro de sensibilidades, o domínio estendido é usado para obter relações apropriadas nas bordas do domínio de projeto. Tem-se que o termo $H_{ij}^{[\text{mor}]}$ assume valor unitário quando algum dos elementos quadrilaterais correspondentes à *j*-ésima variável está sob o alcance do *i*-ésimo elemento do domínio de projeto. Com isso, o vetor de densidades após a operação de erosão é dado por

$$x_i^{[\text{ero}]} = 1 - \max_j \left(H_{ij}^{[\text{mor}]} \left[1 - x_j \right] \right) ; \qquad (2.104)$$

o vetor de densidades após a operação de dilatação é dado por

$$x_i^{[\text{dil}]} = \max_j \left(H_{ij}^{[\text{mor}]} x_j \right) ;$$
 (2.105)

e o vetor de densidades após a operação de abertura (erosão, então dilatação) é dado por

$$x_i^{[\text{abe}]} = \max_j \left(H_{ij}^{[\text{mor}]} x_j^{[\text{ero}]} \right) \,. \tag{2.106}$$

A operação de erosão consiste em transformar em vazio qualquer elemento que tenha algum elemento vazio sob seu alcance, o efeito disso é alargar todas as cavidades da estrutura. A operação de dilatação consiste em transformar em sólido qualquer elemento que tenha algum elemento sólido sob seu alcance, o efeito disso é reduzir todas as cavidades da estrutura. E a operação de abertura consiste em dilatar a estrutura erodida, o que elimina componentes de pequena espessura e une cavidades próximas.

Deve-se destacar que, numa otimização baseada em PLIS, não se espera obter mínimos locais propriamente ditos. A proposta dessa abordagem é explorar o domínio de soluções possíveis de uma forma suficientemente informada, armazenando as topologias mais eficazes como potenciais soluções para o problema. Todos os procedimentos adicionais considerados (suavizações dos mapas de sensibilidade; inclusão de momento; operadores de abertura, erosão e dilatação; remoção de ilhas) devem ser compreendidos como pequenas perturbações razoáveis, aplicadas em cada iteração, para enviesar as topologias de uma forma desejável e para melhorar a explorabilidade do domínio de soluções possíveis.

Assim, um critério de parada apropriado para essa classe de métodos deve ser semelhante ao utilizado em Xia *et al.* (2018). Define-se um parâmetro de paciência $\psi \in \mathbb{N}^*$, então o seguinte critério é verificado a cada iteração: caso ψ iterações consecutivas tenham sido realizadas sem obter um valor para a função objetivo superior ao melhor valor obtido até então, a melhor topologia obtida até então é retornada como resultado otimizado. Ao adotar tal critério, torna-se garantida a conclusão do algoritmo de otimização em um número finito de iterações. O parâmetro de paciência não deve ser pequeno demais, para que o processo tenha possibilidade de explorar diferentes regiões do domínio. A ideia do procedimento é que as perturbações aplicadas podem fazer com que a topologia atual se mova através de diferentes bacias de atração, relativas a diferentes mínimos locais. Com isso, a otimização selecionaria o mínimo local mais eficaz, dentre os visitados. Deseja-se uma exploração suficientemente informada no sentido de haver informação suficiente para que estruturas eficazes sejam obtidas em cada bacia de atração visitada, mas de forma que passos subótimos ainda sejam realizados, permitindo uma exploração mais ampla do domínio de soluções possíveis.

Um último detalhe de implementação é que, apesar de as restrições de volume e variação topológica serem geralmente definidas em termos relativos, por meio das funções $V_f \in D_f$, no programa implementado, tudo é passado para valores absolutos inteiros, em termos das funções $V \in D$. Isso é feito para facilitar as comparações realizadas, em especial quando o algoritmo BESO é utilizado. Além disso, para evitar subproblemas infactíveis, os valores impostos para o volume relativo são sempre ajustados para que as restrições correspondam a números inteiros de elementos.



Figura 2.16 – Fluxograma da Programação Linear Inteira Sequencial

A Figura 2.16 ilustra o algoritmo descrito. As funções apresentadas são referentes ao problema de concepção de metamateriais, mas o mesmo fluxograma é válido para o problema de minimização de complacência mecânica. Começa-se definindo o problema e os parâmetros dos métodos, como o valor máximo de fração de variação topológica (D_f^{max}) , o parâmetro de penalização de volume (β) , os raios dos filtros de sensibilidade e dos operadores morfológicos $(r_f \in r_m)$, o parâmetro de momento (γ) , dentre outros. Então, define-se a topologia inicial $(\bar{x}^{(0)})$ e o laço iterativo é iniciado. Faz-se a análise numérica, utilizando o método de elementos finitos, para obter os vetores de deslocamentos referentes à topologia atual. Em seguida, computam-se todas as funções do problema e se verifica a convergência através do critério de parada estabelecido. Se o critério foi atingido, retorna-se a melhor topologia obtida até então como a topologia otimizada (x^*) , se o critério não foi atingido, o laço continua. Faz-se a análise de sensibilidades, na qual os coeficientes de linearização de cada função são computados e procedimentos adicionais são realizados, como normalizações, filtros de sensibilidade e métodos de momento. Os vetores resultantes são utilizados para definir o subproblema linearizado, que é resolvido através do algoritmo BESO ou pela abordagem com simplex e ramificar-e-limitar. Procedimentos adicionais são aplicados na topologia obtida, como operadores morfológicos e remoção de ilhas. A partir da topologia atualizada, inicia-se a próxima iteração. O processo continua até a convergência, isto é, até o critério de parada ser atingido.

2.4.3 Algoritmo BESO

Como todos os elementos têm o mesmo volume, no problema de minimização de complacência mecânica, em que só há restrições sobre o volume e sobre a variação topológica, o algoritmo BESO pode ser utilizado para uma resolução eficiente dos subproblemas linearizados. O mesmo se aplica para o problema de concepção de metamateriais quando não se restringe o módulo de Young ($\hat{E}^{\min} = 0$) ou, considerando uma restrição progressiva, em iterações tais que $\hat{E}(\bar{x}^{(j)}) - R_E(\bar{x}^{(j)}) = 0$.

Para um problema de minimização, com função objetivo linearizada dada por

$$h^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{x} + \text{constante},$$
 (2.107)

pode-se, alternativamente, minimizar a função transladada:

$$h^{[\text{tra}]}(\boldsymbol{x}) = h^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{x}) - h^{[\text{lin}]}(\boldsymbol{0}) = \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{x} = \sum_{i=0}^{N_d - 1} \alpha_i x_i.$$
 (2.108)

Se o *i*-ésimo elemento for sólido, ao ser transformado em vazio, a variação obtida na função objetivo é de $-\alpha_i$. Se o *i*-ésimo elemento for vazio, ao ser transformado em sólido, a variação obtida na função objetivo é de $+\alpha_i$. Nesse caso, é evidente que, para minimizar a função, deve-se transformar em sólido todo elemento vazio com valor de sensibilidade negativo e transformar em vazio todo elemento sólido com valor de sensibilidade positivo. Contudo, como é permitido alterar no máximo $N_d \times D_f^{\text{max}}$ elementos, deve-se selecionar os elementos que, ao serem alterados, mais contribuem para a redução da função. Assim, o algoritmo consiste em trocar o sinal dos valores de sensibilidade dos vazios, em seguida, ordenar o vetor de sensibilidades e alterar os elementos começando pelos de menor valor. Altera-se até não haver mais valores negativos, ou até o número máximo de alterações ser realizada.

Por sua vez, no caso em que há um valor imposto de volume, considerando que deve haver exatamente $N_d \times V_f^*$ elementos sólidos na topologia, tem-se que a solução ótima corresponde a impor que os $N_d \times V_f^*$ elementos com os menores valores de sensibilidade sejam sólidos e que os elementos restantes sejam vazios (aqui, o sinal dos valores de sensibilidade dos vazios não é trocado). Contudo, há também a limitação de quantos elementos podem ser alterados, portanto, os elementos devem ser alterados de maneira progressiva. Se é preciso aumentar o volume, os elementos vazios vão sendo transformados de sólidos, a partir dos elementos com menores valores de sensibilidade. Se é preciso reduzir o volume, os elementos sólidos vão sendo transformados em vazios, a partir dos elementos com maiores valores de sensibilidade. Quando o volume especificado for atingido, os elementos passam a ser alterados aos pares, o sólido de maior sensibilidade é alterado em conjunto com o vazio de menor sensibilidade. Isso é feito até que todos os elementos sólidos tenham valores de sensibilidade inferiores aos de todos os elementos vazios, ou até o número máximo de alterações ser realizada.

2.4.4 Simplex e Ramificar-e-Limitar

Em problemas mais gerais, como o de concepção de metamateriais com restrição sobre o módulo de Young, utiliza-se o algoritmo simplex combinado com o método ramificar-e-limitar.

Nesse algoritmo, as funções linearizadas descrevem um problema de programação linear relaxado, quer dizer, com variáveis contínuas. As restrições lineares definem um polítopo convexo e, como a função objetivo também é linear, a solução do problema de otimização está necessariamente sobre um dos vértices desse polítopo. O algoritmo simplex é usado para percorrer os vértices, até encontrar a solução ótima. Então, verificase se todas as variáveis da solução são inteiras. Em caso negativo, criam-se dois novos problemas lineares relaxados (ramificar). Seleciona-se uma das variáveis de projeto e, em uma das ramificações, define-se que seu valor é fixo e igual a 0, enquanto que, na outra ramificação, seu valor é fixo e igual a 1 (limitar). Diferentes critérios podem ser adotados para selecionar qual variável será limitada, por exemplo, pode-se restringir a variável com valor mais próximo de $\frac{1}{2}$. Esse procedimento é repetido até que se obtenha uma solução com todas as variáveis inteiras que seja solução ótima do problema de programação linear inteira original.

Cada solução relaxada define um limite inferior para a função otimizada para todos os ramos gerados a partir daquele nó. Toda solução inteira obtida atualiza o limite superior para a função de variáveis binárias otimizada. Esses limites, em conjunto com outros parâmetros do método, são utilizados para definir critérios de parada adequados, para que a solução otimizada seja obtida sem que uma busca exaustiva seja realizada.

Um elemento de densidade nula, valor de sensibilidade positivo em relação à função objetivo e valor de sensibilidade negativo em relação ao módulo de Young homogeneizado necessariamente deve permanecer com densidade nula, já que transformar tal elemento em sólido teria apenas efeitos indesejados: aumentaria a função objetivo, reduziria o módulo de Young e tornaria a restrição sobre a variação topológica ainda mais limitante. Pela mesma razão, um elemento de densidade unitária, valor de sensibilidade negativo em relação à função objetivo e valor de sensibilidade positivo em relação ao módulo de Young homogeneizado necessariamente deve permanecer com densidade unitária. Portanto, antes de iniciar o algoritmo de simplex com ramificar-e-limitar, removem-se do problema todas variáveis correspondentes a elementos como esses.

Ainda que problemas de programação inteira sejam NP-difíceis, ao limitar a variação topológica e ao eliminar do problema essas variáveis de valores conhecidos, observa-se que o algoritmo considerado resolve o problema linear inteiro em tempos computacionais viáveis para problemas práticos. Nos problemas de otimização topológica considerados neste trabalho, o tempo para solucionar o subproblema linearizado em cada iteração foi sempre substancialmente menor que o tempo para solucionar o sistema linear da análise de elementos finitos. Dessa forma, considera-se vantajosa a utilização desse algoritmo para lidar com problemas de restrições mais complexas, já que a abordagem é sistemática, funciona para qualquer problema e não exige calibração de coeficientes de penalização ou de multiplicadores de Lagrange.

3 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DE VARIAÇÃO FINITA (ASVF)

O procedimento mais importante da PLIS é a linearização das funções de variáveis binárias, chamada aqui de Análise de Sensibilidade de Variação Finita (ASVF). Nos problemas de otimização topológica, o custo computacional de realizar uma ASVF exata é proibitivo. Em problemas práticos, utilizam-se expressões aproximadas para os valores de sensibilidade. Na maior parte dos trabalhos, a estratégia adotada é relaxar as variáveis do problema e arbitrar funções de interpolação para definir as propriedades dos elementos para valores de densidade intermediários. Então, a ASVF é realizada assumindo que as funções relaxadas são aproximadamente lineares. Nessas condições, o procedimento corresponde à computação dos gradientes das funções.

Contudo, essa estratégia não é rigorosa e sua utilização sem a devida análise do problema pode prejudicar a efetividade e a estabilidade da otimização. Para ilustrar as imprecisões que podem ocorrer, um caso com um único elemento é considerado, ou seja, um caso com uma única variável de projeto $x \in \{0, 1\}$. Sendo y(x) a única propriedade relevante desse elemento, com $y(0) = y_0$ e $y(1) = y_1$, considera-se uma função objetivo expressa por:

$$h(x) = c_0 + c_1 y(x) + c_2 [y(x)]^2 + c_3 x.$$
(3.1)

Os valores da função, $h(0) \in h(1)$, são fixos. As constantes c_0 , c_1 , c_2 , c_3 podem ser quaisquer valores que garantam a representação correta da função nas extremidades. Como só há uma variável binária, a função discreta original já é uma função linear e há somente um valor de sensibilidade, dado por $\alpha = h(1) - h(0)$. Deseja-se fazer uma minimização irrestrita, já que restringir o problema já definiria o valor da variável única. Se uma interpolação SIMP for utilizada para relaxar a função, para um dado expoente p, tem-se que:

$$y(x) = y_0 + [y_1 - y_0] \varphi(x) = y_0 + [y_1 - y_0] x^p.$$
(3.2)

Em alguns casos, a imprecisão da linearização pode prejudicar apenas a comparação quantitativa entre elementos, o que é menos problemático pois, mesmo que a escolha dos elementos a serem alterados não seja ótima, ainda é possível melhorar a função objetivo. Entretanto, quando o sinal do valor de sensibilidade obtido está incorreto, tem-se uma imprecisão qualitativa: altera-se a variável esperando uma redução da função objetivo, mas a função aumenta. A Figura 3.1 apresenta quatro representações distintas (mas igualmente válidas) para a função discreta original. A mesma função de interpolação é usada em todos os casos, as diferentes representações são obtidas alterando-se apenas as constantes c_0 , c_1 , c_2 e c_3 . As linhas cinzas ligando os dois pontos extremos correspondem à linearização exata; as curvas em azul correspondem às funções relaxadas; as linhas pretas tracejadas correspondem às linearizações aproximadas (obtidas através da estratégia convencional).



Figura 3.1 – Linearizações Aproximadas

Na representação (a), uma função monótona é obtida, nessa condição, o sinal da sensibilidade fica com o valor correto (positivo). Nesse exemplo, o valor de sensibilidade é sobredeterminado quando x = 0 e subdeterminado quando x = 1, ainda assim, independentemente do valor inicial de x, a solução correta seria obtida para o problema de otimização $(x^* = 0)$. Na representação (b), o sinal da sensibilidade fica incorreto quando x = 0, o valor fica subdeterminado quando x = 0 e sobredeterminado quando x = 1. Nesse exemplo, o algoritmo de otimização oscilaria indefinidamente entre os pontos, já que ele sempre espera uma redução na função objetivo ao se alterar a variável. Na representação (c), o sinal da sensibilidade fica incorreto quando x = 1, o valor fica sobredeterminado quando x = 0 e subdeterminado quando x = 1. Nesse exemplo, o algoritmo de otimização retornaria o valor inicial de x, já que ele sempre espera um aumento na função objetivo ao se alterar a variável. Na representação (d), o sinal da sensibilidade fica incorreto e seu valor fica subdeterminado em ambos os pontos. Nesse exemplo, independentemente do valor inicial de x, a solução incorreta é obtida, já que o algoritmo de otimização entende que aumentar o valor de x sempre reduz o valor da função objetivo.

Esses exemplos denunciam a fragilidade da estratégia convencional, em que se definem funções de interpolação sem verificar as propriedades resultantes nas funções relaxadas. Mantendo a mesma função discreta original e a mesma função de interpolação, é possível obter os mais diversos comportamentos apenas alterando as constantes livres da representação adotada.

Em situações práticas, para uma dada representação da função objetivo, podese manipular a função relaxada alterando a função de interpolação. Assim, para utilizar a estratégia convencional de maneira apropriada, dever-se-ia buscar uma função de interpolação que resultasse numa função relaxada linear ou, ao menos, que garantisse a monotonicidade da função relaxada. No caso geral, seria necessário definir uma função de interpolação distinta para cada elemento, em cada iteração. Para se manter na estratégia convencional, em que uma única função de interpolação é utilizada, dever-se-ia buscar uma função de interpolação que minimize alguma medida de erro da linearização.

Nesta tese, propõe-se uma abordagem alternativa, denotada Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC), na qual não são necessárias funções de interpolação. O problema discreto é abordado diretamente e se obtém uma sequência de valores de sensibilidade com precisão crescente. Ainda assim, para uma melhor compreensão do problema e para explicitar as vantagens da abordagem proposta, diferentes análises de sensibilidade são apresentadas. Ambos os casos são considerados: minimização de complacência mecânica; e concepção de metamateriais isotrópicos.

3.1 Minimização de Complacência Mecânica

Diferentes maneiras de computar ou estimar os valores de sensibilidade são apresentadas. No caso de minimização de complacência mecânica, o único vetor de difícil obtenção é o referente à própria função objetivo: $\alpha^{[C]}$.

3.1.1 Abordagem Exaustiva

Para obter valores de referência, o vetor de sensibilidades exato pode ser computado através de esforço exaustivo. Considera-se que a análise de elementos finitos já foi realizada para a topologia atual, \bar{x} , portanto todos os dados atuais, K, \check{K} , $u \in C$, são conhecidos.

Então, o efeito de alterar o estado do *i*-ésimo elemento é avaliado (todos os outros elementos conservam seus estados): se $\bar{x}_i = 0$, a topologia alterada na qual $x_i = 1$ é considerada ($\Delta x_i = 1$); se $\bar{x}_i = 1$, a topologia alterada na qual $x_i = 0$ é considerada ($\Delta x_i = -1$). A variação finita do vetor de densidades resulta em uma variação ΔK da matriz de rigidez global irrestrita K:

$$\boldsymbol{\Delta K} = \begin{cases} \boldsymbol{K}_{i}, & \text{se } \bar{x}_{i} = 0, \\ -\boldsymbol{K}_{i}, & \text{se } \bar{x}_{i} = 1. \end{cases}$$
(3.3)

A variação correspondente na matriz restrita é dada por:

$$\Delta \widetilde{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{P}^T \left[\boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{K} \right] \boldsymbol{P} \,. \tag{3.4}$$

Isso resulta em um novo sistema linear, do qual um novo vetor de deslocamentos é obtido:

$$\check{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{\Delta} \check{\boldsymbol{u}} = \left[\widecheck{\boldsymbol{K}} + \boldsymbol{\Delta} \widecheck{\boldsymbol{K}} \right]^{-1} \widecheck{\boldsymbol{f}}.$$
(3.5)

A variação correspondente no vetor de deslocamentos completo é dada por:

$$\Delta \boldsymbol{u} = \boldsymbol{P} \left[\boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{\check{\boldsymbol{u}}} \right] \,. \tag{3.6}$$

Usando as equações

$$\boldsymbol{P}^{T}\boldsymbol{K}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{P}^{T}\left[\boldsymbol{K} + \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{K}\right]\left[\boldsymbol{u} + \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{u}\right] = \boldsymbol{\check{f}}, \qquad (3.7)$$

obtém-se a variação da complacência mecânica como

$$\Delta C = -\boldsymbol{u}^T \left[\boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{K} \right] \left[\boldsymbol{u} + \boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{u} \right] \,. \tag{3.8}$$

Com isso, o valor de sensibilidade do *i*-ésimo elemento pode ser obtido como

$$\alpha_i^{[C]} = \begin{cases} \Delta C , & \text{se } \bar{x}_i = 0 , \\ -\Delta C , & \text{se } \bar{x}_i = 1 , \end{cases}$$
(3.9)

ou, alternativamente, como

$$\alpha_i^{[C]} = -\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{K}_i \left[\boldsymbol{u} + \boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{u} \right] \,. \tag{3.10}$$

Para realizar essa ASVF exata em uma dada iteração do procedimento de otimização, N_d vetores Δu precisam ser obtidos, um para cada variável de projeto. O que significa que N_d sistemas lineares devem ser resolvidos, cada um com uma matriz $\breve{K} + \Delta \breve{K}$ diferente. Apesar de não ser viável para uso prático, a abordagem Exaustiva pode ser usada como referência para avaliar outras estratégias.

3.1.2 Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO)

A estratégia convencionalmente utilizada na literatura consiste em realizar uma relaxação contínua do problema. Em seguida, os valores de sensibilidade são obtidos através do truncamento de primeira ordem da série de Taylor de cada função. Neste trabalho, essa abordagem é chamada de Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO).

Considera-se uma função de interpolação $\varphi : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$, estritamente monótona, com $\varphi(0) = 0$ e $\varphi(1) = 1$. Como $|\Delta x_i| = 1$, o valor de sensibilidade corresponde à própria derivada da função. Obtém-se

$$\alpha_i^{[C]} = C(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 1) - C(\bar{\boldsymbol{x}}, x_i = 0) \approx \frac{\partial C}{\partial x_i} = -\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \boldsymbol{u}^T \boldsymbol{K}_i \boldsymbol{u}, \qquad (3.11)$$

onde o valor da derivada da função de interpolação é avaliado no ponto atual \bar{x}_i .

Como a função de interpolação é estritamente monótona, tem-se que $\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(0) > 0$ e $\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(1) > 0$. Já que dividir a função objetivo por qualquer constante positiva não altera o problema de otimização e, uma vez que a mesma função de interpolação é utilizada para todos os elementos, todos os valores de sensibilidades podem ser divididos por $\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(1)$, o que resulta em

$$\alpha_i^{[C]} \approx \begin{cases} -p_C \boldsymbol{u}^T \boldsymbol{K}_i \boldsymbol{u}, & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ -\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{K}_i \boldsymbol{u}, & \text{se } \bar{x}_i = 1, \end{cases}$$
(3.12)

onde $p_C = \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(0) / \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(1) > 0.$

Com isso, simplifica-se a estratégia convencional, sem perda de generalidade. Ao invés de arbitrar uma função de interpolação, basta fixar a função identidade como interpolação, $\varphi(x_i) = x_i$, e incluir o fator de penalização p_C para a sensibilidade dos elementos vazios. Então, ao adotar essa estratégia, deve-se buscar um valor de p_C que favoreça a efetividade e a estabilidade da otimização. Na maior parte dos trabalhos, um valor próximo de zero é usado: $p_C \approx 0$.

Nessa abordagem, nenhum sistema linear adicional precisa ser resolvido, ela fornece expressões simples e viáveis. Contudo, já que derivadas medem apenas comportamentos locais (efeitos de variações infinitesimais), ela pode falhar em estimar apropriadamente os efeitos das variações finitas do vetor de densidades.

3.1.3 Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO)

Como feito em Ghabraie (2015), uma Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO) pode ser utilizada para obter valores precisos de $\alpha^{[C]}$.

Mais uma vez, considera-se a função identidade como função de interpolação para se obter a relaxação contínua da matriz de rigidez. Um fator de penalização (p_C) pode ser incluído na expressão final para calibrar os valores de sensibilidade dos vazios, buscando melhorar a efetividade e a estabilidade da otimização. Assumindo que a série de Taylor de $C(x_i)$ é convergente, o valor de sensibilidade do *i*-ésimo elemento é dado por

$$\alpha_i^{[C]} = \begin{cases} \sum_{a=1}^{\infty} & \frac{1}{a!} & \frac{\partial^a C}{\partial x_i^a}, \text{ se } \bar{x}_i = 0, \\ \sum_{a=1}^{\infty} & \frac{[-1]^{a+1}}{a!} \frac{\partial^a C}{\partial x_i^a}, \text{ se } \bar{x}_i = 1. \end{cases}$$
(3.13)

O posto da matriz K_i é 5, assim, ela pode ser escrita em termos de uma matriz H_i de dimensões $G \times 5$, que assume valores nulos em todos os termos fora de uma submatriz de dimensões 8×5 :

$$\boldsymbol{K_i} = \boldsymbol{H_i} \, \boldsymbol{H_i^T} \,. \tag{3.14}$$

Sendo \widecheck{K}_i a matriz de variação elementar restrita dada por

$$\widecheck{\boldsymbol{K}}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{P} \,, \tag{3.15}$$

ao definir \widecheck{H}_i como

$$\check{\boldsymbol{H}}_{i} = \boldsymbol{P}^{T} \boldsymbol{H}_{i} \,, \tag{3.16}$$

tem-se que

$$\widecheck{K}_{i} = \widecheck{H}_{i} \widecheck{H}_{i}^{T} . \tag{3.17}$$

Diferenciando C, a série de Taylor é obtida como

$$\alpha_{i}^{[C]} = \begin{cases} -\sum_{a=1}^{\infty} \boldsymbol{v}_{i}^{T} \left[-\boldsymbol{A}_{i}\right]^{a-1} \boldsymbol{v}_{i}, \text{ se } \bar{x}_{i} = 0, \\ -\sum_{a=1}^{\infty} \boldsymbol{v}_{i}^{T} \left[\boldsymbol{A}_{i}\right]^{a-1} \boldsymbol{v}_{i}, \text{ se } \bar{x}_{i} = 1. \end{cases}$$
(3.18)

onde a matriz A_i e o vetor v_i são dados por:

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{\widetilde{H}}_{\boldsymbol{i}}^{T} \boldsymbol{\widetilde{K}}^{-1} \boldsymbol{\widetilde{H}}_{\boldsymbol{i}}; \qquad (3.19)$$

$$\boldsymbol{v}_{i} = \boldsymbol{H}_{i}^{T} \boldsymbol{u} = \widecheck{\boldsymbol{H}}_{i}^{T} \widecheck{\boldsymbol{u}}.$$
 (3.20)

A convergência dessas séries depende dos autovalores de A_i , que é simétrica e semidefinida positiva. Fatorando A_i em uma matriz diagonal de autovalores Λ_i e em uma matriz ortogonal de autovetores Φ_i ,

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{i}}^{T}, \qquad (3.21)$$

e definindo o vetor $\boldsymbol{w_i}$ como

$$\boldsymbol{w}_{i} = \boldsymbol{\Phi}_{i}^{T} \boldsymbol{v}_{i} \,, \tag{3.22}$$

a expressão de sensibilidade pode ser escrita como

$$\alpha_i^{[C]} = \begin{cases} -\sum_{a=1}^{\infty} \boldsymbol{w}_i^T \left[-\boldsymbol{\Lambda}_i \right]^{a-1} \boldsymbol{w}_i, & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ -\sum_{a=1}^{\infty} \boldsymbol{w}_i^T \left[\boldsymbol{\Lambda}_i \right]^{a-1} \boldsymbol{w}_i, & \text{se } \bar{x}_i = 1. \end{cases}$$
(3.23)

Para um vetor \boldsymbol{w}_i qualquer, essas séries são convergentes se e somente se $\|\boldsymbol{A}_i\|_2 = \max(\boldsymbol{\Lambda}_i) < 1$. Devido ao parâmetro de *soft-kill*, para qualquer $\boldsymbol{x} \in \{0, 1\}^{N_d}, \boldsymbol{\breve{K}}$ é definida positiva e \boldsymbol{A}_i semidefinida positiva. Nessas condições, pode ser demonstrado que $\|\boldsymbol{A}_i\|_2 < 1$ quando $\bar{x}_i = 1$ (CUNHA *et al.*, 2021), o que significa que a série correspondente a um elemento sólido é sempre convergente.

Com isso, as séries truncadas das Equações 3.18 e 3.23 podem ser usadas para estimar, com precisão arbitrária, os valores de sensibilidade para elementos sólidos. Como as séries podem divergir para elementos vazios, uma estratégia possível é impor um valor nulo de sensibilidade para todos os elementos vazios ($p_C = 0$) e deixar a parte sólida da estrutura "guiar" o processo de otimização.

3.1.4 Sensibilidade por Woodbury (SW)

Como feito em Svanberg e Werme (2005) e Svanberg e Werme (2006), sem a necessidade de uma função de interpolação, depois de alterar o estado de um dado elemento, uma nova matriz inversa pode ser obtida através da identidade matricial de Woodbury (GUTTMAN, 1946; WOODBURY, 1950; HAGER, 1989):

$$\left[\widetilde{\boldsymbol{K}} \pm \widetilde{\boldsymbol{K}}_{i}\right]^{-1} = \widetilde{\boldsymbol{K}}^{-1} \mp \widetilde{\boldsymbol{K}}^{-1} \widetilde{\boldsymbol{H}}_{i} \left[\boldsymbol{I} \pm \boldsymbol{A}_{i}\right]^{-1} \widetilde{\boldsymbol{H}}_{i}^{T} \widetilde{\boldsymbol{K}}^{-1}.$$
(3.24)

Essa abordagem, chamada de Sensibilidade por Woodbury (SW), resulta em uma expressão fechada para o vetor de sensibilidades exato, que é muito menos custosa que a expressão da abordagem Exaustiva. Se o sistema linear for resolvido através da decomposição de Cholesky, o procedimento de fatoração precisa ser realizado somente uma vez (ao invés de ser realizado $N_d + 1$ vezes). Além de fornecer valores de referência alternativos, a expressão obtida permite um entendimento mais profundo do comportamento da função C.

Combinando as Equações 3.5, 3.10 e 3.24, o valor de sensibilidade do i-ésimo elemento é obtido como

$$\alpha_{i}^{[C]} = \begin{cases} -\boldsymbol{v}_{i}^{T} \left[\boldsymbol{I} + \boldsymbol{A}_{i}\right]^{-1} \boldsymbol{v}_{i}, & \text{se } \bar{\boldsymbol{x}}_{i} = 0, \\ -\boldsymbol{v}_{i}^{T} \left[\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}_{i}\right]^{-1} \boldsymbol{v}_{i}, & \text{se } \bar{\boldsymbol{x}}_{i} = 1. \end{cases}$$
(3.25)

Que pode ser escrito em termos de Λ_i e w_i como

$$\alpha_{i}^{[C]} = \begin{cases} -\boldsymbol{w}_{i}^{T} \left[\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Lambda}_{i} \right]^{-1} \boldsymbol{w}_{i}, & \text{se } \bar{x}_{i} = 0, \\ -\boldsymbol{w}_{i}^{T} \left[\boldsymbol{I} - \boldsymbol{\Lambda}_{i} \right]^{-1} \boldsymbol{w}_{i}, & \text{se } \bar{x}_{i} = 1. \end{cases}$$
(3.26)

Destaca-se que, para $\|A_i\|_2 < 1$, essas expressões correspondem às somas das séries de potências das Equações 3.18 e 3.23. Além disso, como $I + \Lambda_i$ é uma matriz definida positiva, as expressões SW se mantêm válidas mesmo para elementos vazios tais que $\|A_i\|_2 \ge 1$.

Através da Equação 3.26, pode-se notar que a abordagem ICPO, com a função identidade como interpolação, sempre superestima $\left|\alpha_{i}^{[C]}\right|$ para elementos vazios e sempre subestima $\left|\alpha_{i}^{[C]}\right|$ para elementos sólidos. Assim, na Equação 3.12, o fator de penalização p_{C} deve sempre ser definido em [0, 1[para que as comparações entre elementos em diferentes estados sejam mais precisas.

Em ambas as abordagens ICAO e SW, cada matriz $\mathbf{A}_i = \widecheck{\mathbf{H}}_i^T \widecheck{\mathbf{K}}^{-1} \widecheck{\mathbf{H}}_i$ deve ser conhecida para computar o vetor $\boldsymbol{\alpha}^{[C]}$ completo. Uma estratégia, quando o sistema linear é resolvido através da decomposição de Cholesky ($\widecheck{\mathbf{K}} = \mathbf{L} \mathbf{L}^T$), é resolver 5 sistemas triangulares ($\mathbf{L}^{-1} \widecheck{\mathbf{H}}_i$) por elemento. Assim, para computar todas as matrizes \mathbf{A}_i , $5 N_d$ sistemas triangulares precisariam que ser resolvidos.

Alternativamente, em um sistema com \check{G} graus de liberdade, $2\check{G}$ sistemas triangulares podem ser resolvidos para computar toda a matriz inversa. Como \check{H}_i tem apenas 8 linhas não-nulas, apenas uma submatriz de \check{K}^{-1} de dimensões 8×8 é necessária para computar A_i para o *i*-ésimo elemento. Então, somente uma parte reduzida da matriz inversa densa precisaria ser armazenada.

Ainda que técnicas de inversão seletiva (LIN *et al.*, 2011; JACQUELIN *et al.*, 2016) possam melhorar esse procedimento, tais aprimoramentos estão fora do escopo

deste trabalho. A estratégia adotada na abordagem SW foi solucionar os $5 N_d$ sistemas triangulares.

Como as matrizes $I \pm A_i$ têm dimensões 5 × 5, a presença de suas inversas nas expressões SW não causam dificuldades em termos de custos computacionais, efetivamente, o procedimento apresentado é governado pelo custo de computar cada A_i .

A abordagem SW resulta em expressões melhores que as obtidas nas abordagens Exaustiva e ICAO. O custo computacional da SW é similar ao da ICAO, e ambas devem ser menos custosas que o procedimento Exaustivo. Contudo, as expressões SW são exatas, enquanto que as expressões ICAO truncadas fornecem valores aproximados. Além disso, a ICAO pode falhar em gerar valores de sensibilidade válidos para elementos vazios, um problema que não ocorre na abordagem SW.

3.1.5 Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC)

Propõe-se aqui uma estratégia iterativa, viável para uso prático e que é garantidamente mais precisa que a abordagem ICPO. Ademais, não é necessário relaxar as funções discretas do problema original, nem realizar inversões seletivas da matriz do sistema.

Essa abordagem, chamada de Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC), pode ser utilizada quando os valores de sensibilidade dependem de soluções de sistemas lineares cujas matrizes são definidas positivas. Neste trabalho, ela consiste em usar o Método dos Gradientes Conjugados (MGC) para estimar a solução do sistema linear da Equação 3.5. Então, os valores de sensibilidade são obtidos através da Equação 3.10. Para cada elemento, um pequeno número de passos do MGC é realizado simbolicamente, o que resulta em expressões de sensibilidade razoavelmente simples.

Assim como nas outras aproximações, um fator de penalização (p_C) pode ser incluído na expressão final para calibrar os valores de sensibilidade dos vazios, buscando melhorar a efetividade e a estabilidade da otimização.

Para obter valores aproximados de $\alpha_i^{[C]}$, a variação de deslocamento correspondente, Δu , deve ser estimada. A solução \check{u} , relativa à topologia atual \bar{x} , é usada como chute inicial para se obter a variação $\Delta \check{u}$, resultante da alteração de estado do i-ésimo elemento, por um MGC pré-condicionado. O MGC gera um conjunto de direções $\left[\breve{K} + \Delta \breve{K}\right]$ -ortogonais, $\{d_1, d_2, \ldots, d_{\breve{G}}\}$, e um conjunto de coeficientes correspondentes, $\{\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_{\breve{G}}\}$, tais que

$$\Delta \check{\boldsymbol{u}} = \sum_{k=1}^{\check{G}} \mu_k \, \boldsymbol{d_k} \,. \tag{3.27}$$

Computando-se m direções e coeficientes, a Equação 3.27 pode ser reescrita como

$$\Delta \breve{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} \,, \tag{3.28}$$

onde $\pmb{\delta}^{(m)}_{\pmb{u}}$ é o termo conhecido, dado por

$$\boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(\boldsymbol{m})} = \sum_{k=1}^{m} \mu_k \, \boldsymbol{d}_k \,, \qquad (3.29)$$

e $\pmb{\varepsilon}_{\pmb{u}}^{(\pmb{m})}$ é o erro desconhecido, dado por

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(\boldsymbol{m})} = \sum_{k=m+1}^{\check{G}} \mu_k \, \boldsymbol{d}_k \,. \tag{3.30}$$

A partir da Equação 3.8, pode-se dividir ΔC em dois termos:

$$\Delta C = D_C^{(m)} + E_C^{(m)} \,. \tag{3.31}$$

O termo conhecido $D_{C}^{\left(m\right)}$ é dado por

$$D_{C}^{(m)} = -\boldsymbol{u}^{T} \left[\boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{K} \right] \left[\boldsymbol{u} + \boldsymbol{P} \, \boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} \right]$$

= $- \left[\boldsymbol{u}^{T} \left[\boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{K} \right] \boldsymbol{u} + \left[\left[\boldsymbol{\Delta} \widecheck{\boldsymbol{K}} \right] \widecheck{\boldsymbol{u}} \right]^{T} \boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} \right]$ (3.32)

e o erro desconhecido $E_C^{(m)}$ é dado por

$$E_{C}^{(m)} = \left[\boldsymbol{\Delta} \check{\boldsymbol{u}}\right]^{T} \left[\widecheck{\boldsymbol{K}} + \boldsymbol{\Delta} \widecheck{\boldsymbol{K}} \right] \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} = \left[\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} \right]^{T} \left[\widecheck{\boldsymbol{K}} + \boldsymbol{\Delta} \widecheck{\boldsymbol{K}} \right] \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} = \left\| \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} \right\|_{\widetilde{\boldsymbol{K}} + \boldsymbol{\Delta} \widecheck{\boldsymbol{K}}}^{2} .$$

$$(3.33)$$

Nota-se que o erro $E_C^{(m)}$ é sempre não-negativo e que ele vai a zero monotonicamente conforme m aumenta, isto é, conforme mais passos do MGC são realizados. Considerando $\delta_u^{(0)} = \mathbf{0} \in \varepsilon_u^{(\check{G})} = \mathbf{0}$, as expressões apresentadas são válidas para qualquer $m \in \{0, 1, \dots, \check{G}\}$. A fórmula obtida após realizar m passos do MGC é denotada "expressão SGC-m". Assim, essa abordagem gera $\check{G} + 1$ expressões para $\alpha_i^{[C]}$ com precisão crescente. Ou seja, se $m_1 > m_2$, SGC- m_1 é mais precisa que SGC- m_2 , e a expressão SGC- \check{G} é exata.

Deve-se destacar que a abordagem SGC-0 resulta na mesma aproximação obtida pela abordagem ICPO $(D_C^{(0)} = \pm \frac{\partial C}{\partial x_i})$. Isso significa que, para qualquer número de passos $(m \ge 1)$, a abordagem SGC-*m* estima $\alpha_i^{[C]}$ com maior precisão que a ICPO.

O Pseudocódigo 3.1 apresenta o algoritmo do MGC pré-condicionado. O problema é definido pelos dados conhecidos $\breve{K} + \Delta \breve{K}$ e \check{f} . O chute inicial é \check{u} , a matriz pré-condicionadora M corresponde à diagonal de $\breve{K} + \Delta \breve{K}$ (pré-condicionamento de Jacobi) e o número de iterações é m.

Pseudocódigo 3.1 Gradientes Conjugados Pré-condicionado (Complacência)

Dados do Problema: $\widetilde{K} + \Delta \widetilde{K}$, \widetilde{f} Entradas: \widetilde{u} , M, m $g_1 \leftarrow \left[\Delta \widetilde{K}\right] \widetilde{u}$ $d_1 \leftarrow -M^{-1}g_1$ $e_1 \leftarrow \left[\widetilde{K} + \Delta \widetilde{K}\right] d_1$ $\mu_1 \leftarrow -\frac{d_1^T g_1}{d_1^T e_1}$ $\delta_u^{(1)} \leftarrow \mu_1 d_1$ for $k \in \{2, 3, \dots, m\}$ do $g_k \leftarrow g_{k-1} + \mu_{k-1} e_{k-1}$ $q_k \leftarrow M^{-1} g_k$ $\zeta_k \leftarrow \frac{q_k^T e_{k-1}}{d_{k-1}^T e_{k-1}}$ $d_k \leftarrow -q_k + \zeta_k d_{k-1}$ $e_k \leftarrow \left[\widetilde{K} + \Delta \widetilde{K}\right] d_k$ $\mu_k \leftarrow -\frac{d_k^T g_k}{d_k^T e_k}$ $\delta_u^{(k)} \leftarrow \delta_u^{(k-1)} + \mu_k d_k$ return $\delta_u^{(m)}$

Para obter a expressão SGC-1, os seguintes vetores devem ser computados:

$$\boldsymbol{z_h} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{K_i} \, \boldsymbol{u} = \boldsymbol{\breve{H}_i} \, \boldsymbol{H_i}^T \boldsymbol{u} \,; \tag{3.34}$$

$$z_m = M^{-1} z_h;$$
 (3.35)

$$\boldsymbol{z}_{\boldsymbol{k}} = \left[\boldsymbol{\breve{K}} + \boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{\breve{K}} \right] \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} \,. \tag{3.36}$$

Como H_i assume valores nulos em todos os termos fora de uma pequena submatriz de dimensões 8×5 , e como nenhuma linha de $K + \Delta K$ tem mais do que 18 termos não-nulos, essas operações podem ser realizadas eficientemente, usando apenas as pequenas submatrizes necessárias. Observa-se que os tamanhos dessas submatrizes são os mesmos para qualquer refinamento de malha, eles dependem apenas dos tipos de elementos finitos utilizados. Além disso, como M é uma matriz diagonal, não há dificuldades em computar o vetor z_m . Esses vetores são então usados para computar o seguintes coeficientes:

$$\omega_{hm} = \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{h}}^T \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} \,; \tag{3.37}$$

$$\omega_{mk} = \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}}^T \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{k}}; \qquad (3.38)$$

$$\phi_{m1} = \frac{\omega_{hm}}{\omega_{mk}}.$$
(3.39)

Através do Pseudocódigo 3.1, $\delta_u^{(1)}$ é obtido como

$$\boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(1)} = \begin{cases} -\phi_{m1} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} \,, & \text{se } \bar{x}_{i} = 0 \,, \\ \phi_{m1} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} \,, & \text{se } \bar{x}_{i} = 1 \,. \end{cases}$$
(3.40)

E, considerando $\Delta C \approx D_C^{(1)},$ a aproximação SGC-1 é obtida como:

$$\alpha_i^{[C]} \approx \begin{cases} -\left[\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{K}_i \, \boldsymbol{u} - \phi_{m_1} \, \omega_{hm}\right], & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ -\left[\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{K}_i \, \boldsymbol{u} + \phi_{m_1} \, \omega_{hm}\right], & \text{se } \bar{x}_i = 1. \end{cases}$$
(3.41)

Para obter a expressão SGC-2, os seguintes vetores devem ser computados (além de z_h , z_m e z_k):

$$\boldsymbol{z_{\eta}} = \boldsymbol{M}^{-1} \boldsymbol{z_k}; \qquad (3.42)$$

$$\boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\xi}} = \left[\boldsymbol{\widetilde{K}} + \boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{\widetilde{K}} \right] \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\eta}} \,. \tag{3.43}$$

Mais uma vez, essas operações podem ser realizadas eficientemente, usando apenas as pequenas submatrizes necessárias. Os vetores são então usados para computar os seguintes coeficientes:

$$\omega_{k\eta} = \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{k}}^T \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\eta}} \,; \tag{3.44}$$

$$\omega_{\eta\xi} = \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\eta}}^T \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\xi}} \,; \tag{3.45}$$

$$\phi_{m2} = \frac{\omega_{hm}\,\omega_{\eta\xi} - \omega_{mk}\,\omega_{k\eta}}{\omega_{mk}\,\omega_{\eta\xi} - \omega_{k\eta}^2};\tag{3.46}$$

$$\phi_{\eta 2} = \frac{\omega_{mk}^2 - \omega_{hm} \,\omega_{k\eta}}{\omega_{mk} \,\omega_{\eta\xi} - \omega_{k\eta}^2} \,. \tag{3.47}$$

Através do Pseudocódigo 3.1, $\delta_{u}^{(2)}$ é obtido como

$$\boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(2)} = \begin{cases} -\phi_{m2} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} - \phi_{\eta 2} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\eta}} \,, & \text{se } \bar{x}_{i} = 0 \,, \\ \phi_{m2} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} + \phi_{\eta 2} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\eta}} \,, & \text{se } \bar{x}_{i} = 1 \,. \end{cases}$$
(3.48)

Finalmente, considerando $\Delta C \approx D_C^{(2)}$, a aproximação SGC-2 é obtida pela como:

$$\alpha_i^{[C]} \approx \begin{cases} -\left[\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{K}_i \, \boldsymbol{u} - \phi_{m2} \, \omega_{hm} - \phi_{\eta 2} \, \omega_{mk}\right], & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ -\left[\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{K}_i \, \boldsymbol{u} + \phi_{m2} \, \omega_{hm} + \phi_{\eta 2} \, \omega_{mk}\right], & \text{se } \bar{x}_i = 1. \end{cases}$$
(3.49)

Para um número fixo de passos do MGC, a abordagem SGC é $\Theta(N_d)$ (CUNHA et al., 2021). Ou seja, a quantidade de operações aritméticas realizadas nesse procedimento escala linearmente com o refinamento da malha. Ainda assim, para uma malha fixa, os recursos computacionais necessários aumentam substancialmente conforme mais passos do MGC são realizados. Por essa razão, para manter custos computacionais razoáveis para a análise de sensibilidade, apenas dois passos são considerados.

3.2 Concepção de Metamateriais Isotrópicos

Diferentes maneiras de computar ou estimar os valores de sensibilidade são apresentadas. No caso de concepção de metamateriais isotrópicos, os vetores difíceis de se obter são: $\boldsymbol{\alpha}^{[h_{\nu}]} \in \boldsymbol{\alpha}^{[\hat{E}]}$.

3.2.1 Abordagem Exaustiva

Para obter valores de referência, os vetores de sensibilidade exatos podem ser computados através de esforço exaustivo. Considera-se que a análise de elementos finitos já foi realizada para a topologia atual, \bar{x} , portanto todos os dados atuais, K, \check{K} , F, \check{F} , U, \tilde{U} , \check{U} , C, $\hat{\nu} \in \hat{E}$, são conhecidos.

Então, o efeito de alterar o estado do *i*-ésimo elemento é avaliado (todos os outros elementos conservam seus estados): se $\bar{x}_i = 0$, a topologia alterada na qual $x_i = 1$ é considerada ($\Delta x_i = 1$); se $\bar{x}_i = 1$, a topologia alterada na qual $x_i = 0$ é considerada ($\Delta x_i = -1$). A variação finita do vetor de densidades resulta em uma variação ΔK da matriz de rigidez global irrestrita K:

$$\Delta \mathbf{K} = \begin{cases} \mathbf{K}_i, & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ -\mathbf{K}_i, & \text{se } \bar{x}_i = 1. \end{cases}$$
(3.50)

As variações correspondentes na matriz de rigidez restrita e nas matrizes de carga são dadas por:

$$\Delta \widetilde{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{P}^T \left[\Delta \boldsymbol{K} \right] \boldsymbol{P}; \qquad (3.51)$$

$$\Delta F = -\left[\Delta K\right] \hat{U}; \qquad (3.52)$$

$$\Delta \breve{F} = P^T [\Delta F] . \qquad (3.53)$$

Isso resulta em um novo sistema linear, do qual uma nova matriz de deslocamentos é obtida:

$$\check{\boldsymbol{U}} + \boldsymbol{\Delta}\check{\boldsymbol{U}} = \left[\check{\boldsymbol{K}} + \boldsymbol{\Delta}\check{\boldsymbol{K}}\right]^{-1} \left[\check{\boldsymbol{F}} + \boldsymbol{\Delta}\check{\boldsymbol{F}}\right].$$
(3.54)

As variações correspondentes na matriz de microdes locamentos e na matriz de des locamentos totais são dadas por:

$$\Delta \widetilde{U} = P\left[\Delta \widecheck{U}\right]; \qquad (3.55)$$

$$\Delta U = \Delta \widetilde{U} \,. \tag{3.56}$$

Usando as equações

$$\boldsymbol{P}^{T}\boldsymbol{K}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{P}^{T}\left[\boldsymbol{K} + \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{K}\right]\left[\boldsymbol{U} + \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{U}\right] = \boldsymbol{O}, \qquad (3.57)$$

obtém-se a variação da matriz de elasticidade como

$$\Delta \boldsymbol{C} = \frac{1}{A_{\Omega}} \boldsymbol{U}^{T} \left[\boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{K} \right] \left[\boldsymbol{U} + \boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{U} \right] \,. \tag{3.58}$$

Para uma notação mais compacta, os parâmetros $\bar{g}\in]0,1[$ e $\bar{\bar{g}}\in]0,1[$ são definidos como:

$$\bar{g} = \frac{C_{22}}{C_{00}};$$
 (3.59)

$$\bar{\bar{g}} = \frac{C_{22} + \Delta C_{22}}{C_{00} + \Delta C_{00}} \,. \tag{3.60}$$

Com isso, a variação de cada propriedade homogeneizada pode ser obtida como:

$$\Delta \hat{\nu} = \frac{2 \left[\bar{g} \left[\Delta C_{00} \right] - \Delta C_{22} \right]}{C_{00} + \Delta C_{00}};$$
(3.61)

$$\Delta \hat{E} = 4 \left[1 - \bar{\bar{g}} \right] \left[\Delta C_{22} \right] + 2 C_{22} \left[\Delta \hat{\nu} \right] .$$
(3.62)

Então, os valores de sensibilidade do *i*-ésimo elemento podem ser obtidos como:

$$\alpha_i^{[h_\nu]} = \begin{cases} 2\left[\hat{\nu} - \nu^*\right] \left[\Delta\hat{\nu}\right] + \left[\Delta\hat{\nu}\right]^2, & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ -2\left[\hat{\nu} - \nu^*\right] \left[\Delta\hat{\nu}\right] - \left[\Delta\hat{\nu}\right]^2, & \text{se } \bar{x}_i = 1; \end{cases}$$
(3.63)

$$\alpha_i^{[\hat{E}]} = \begin{cases} \Delta \hat{E} , & \text{se } \bar{x}_i = 0 ,\\ -\Delta \hat{E} , & \text{se } \bar{x}_i = 1 . \end{cases}$$
(3.64)

Para realizar essa ASVF exata em uma dada iteração do procedimento de otimização, N_d matrizes ΔU precisam ser obtidas, uma para cada variável de projeto. O que significa que N_d sistemas lineares devem ser resolvidos, cada um com uma matriz $\breve{K} + \Delta \breve{K}$ diferente. Apesar de não ser viável para uso prático, a abordagem Exaustiva pode ser usada como referência para avaliar outras estratégias.

3.2.2 Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO) Simples

A estratégia convencionalmente utilizada na literatura consiste em realizar uma relaxação contínua do problema. Em seguida, os valores de sensibilidade são obtidos através do truncamento de primeira ordem da série de Taylor de cada função. Neste trabalho, essa abordagem é chamada de Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO). Aqui, ela é denotada ICPO Simples para distingui-la da abordagem ICPO Composta, introduzida na subseção 3.2.3.

Considera-se uma função de interpolação $\varphi : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$, estritamente monótona, com $\varphi(0) = 0$ e $\varphi(1) = 1$. Assim como no caso da complacência, tem-se

$$\alpha_i^{[h_\nu]} \approx \begin{cases} p_h \frac{\partial h_\nu}{\partial x_i}, & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ \frac{\partial h_\nu}{\partial x_i}, & \text{se } \bar{x}_i = 1, \end{cases}$$
(3.65)

onde $p_h = \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(0) / \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(1) > 0$ é o fator de penalização da sensibilidade dos elementos vazios.

A contrário da função objetivo, dividir a função de restrição por uma constante positiva altera o problema. Portanto, duas constantes livres deveriam ser usadas no caso geral, uma que multiplica a sensibilidade dos vazios e uma que multiplica a sensibilidade dos sólidos. Ainda assim, neste trabalho, considera-se o caso particular em que uma constante unitária é usada para os elementos sólidos, o que resulta em:

$$\alpha_i^{[\hat{E}]} \approx \begin{cases} p_E \frac{\partial \hat{E}}{\partial x_i}, & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ \frac{\partial \hat{E}}{\partial x_i}, & \text{se } \bar{x}_i = 1, \end{cases}$$
(3.66)

onde $p_E > 0$ é o fator de penalização da sensibilidade dos elementos vazios.

Esse caso corresponde a uma função de interpolação tal que $\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(0) = p_E$ e $\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(1) = 1$. Assim, para manter a coerência do modelo, teria-se que $p_h = p_E$. Na maior parte dos trabalhos, valores próximos de zero são usados: $p_h = p_E \approx 0$.

Para obter as expressões de sensibilidade, as seguintes derivadas são necessárias:

$$\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\delta}} = \frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial x_i} = \frac{1}{A_{\Omega}} \boldsymbol{U}^T \boldsymbol{K}_i \boldsymbol{U}; \qquad (3.67)$$

$$\frac{\partial \hat{\nu}}{\partial C_{00}} = \frac{2\,\bar{g}}{C_{00}}\,;\tag{3.68}$$

$$\frac{\partial \hat{\nu}}{\partial C_{22}} = -\frac{2}{C_{00}}; \qquad (3.69)$$

$$\frac{\partial \hat{E}}{\partial C_{00}} = 4\,\bar{g}^2\,;\tag{3.70}$$

$$\frac{\partial \widehat{E}}{\partial C_{22}} = 4 \left[1 - 2 \,\overline{g} \right] = 4 \,\widehat{\nu} \,; \tag{3.71}$$

$$\frac{\partial h_{\nu}}{\partial \hat{\nu}} = 2 \left[\hat{\nu} - \nu^* \right] \,. \tag{3.72}$$

Usando a regra da cadeia, obtêm-se:

$$\frac{\partial h_{\nu}}{\partial x_{i}} = \frac{\partial h_{\nu}}{\partial \hat{\nu}} \left[\frac{\partial \hat{\nu}}{\partial C_{00}} \frac{\partial C_{00}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial \hat{\nu}}{\partial C_{22}} \frac{\partial C_{22}}{\partial x_{i}} \right] = 4 \left[\hat{\nu} - \nu^{*} \right] \left[\frac{\bar{g} C_{00}^{\delta} - C_{22}^{\delta}}{C_{00}} \right];$$
(3.73)

$$\frac{\partial \hat{E}}{\partial x_i} = \frac{\partial \hat{E}}{\partial C_{00}} \frac{\partial C_{00}}{\partial x_i} + \frac{\partial \hat{E}}{\partial C_{22}} \frac{\partial C_{22}}{\partial x_i} = 4 \left[\bar{g}^2 C_{00}^\delta + \hat{\nu} C_{22}^\delta \right].$$
(3.74)

Nessa abordagem, nenhum sistema linear adicional precisa ser resolvido, ela fornece expressões simples e viáveis. Contudo, já que derivadas medem apenas comportamentos locais (efeitos de variações infinitesimais), ela pode falhar em estimar apropriadamente os efeitos das variações finitas do vetor de densidades.

3.2.3 Interpolação Contínua de Primeira Ordem (ICPO) Composta

A abordagem ICPO é precisa quando as funções discretas são bem aproximadas pelas linearizações de Taylor de suas versões relaxadas. Neste trabalho, funções compostas são usadas nos subproblemas de otimização: $h_{\nu}(\boldsymbol{x}) = h_{\nu}(\hat{\nu}(\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x})))$ e $\hat{E}(\boldsymbol{x}) = \hat{E}(\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}))$. Exceto em casos particulares, nos quais as composições tornam as funções relaxadas "mais lineares" (reduzem a diferença entre as funções e suas versões linearizadas), elas devem aumentar o erro das expressões ICPO.

Como as variações finitas das funções externas, h_{ν} , $\hat{\nu} \in \hat{E}$, podem ser facilmente obtidas para uma dada variação finita da função interna, C, os valores de sensibilidade ICPO Simples podem ser aprimorados utilizando as expressões exatas das Equações 3.61, 3.62, 3.63 e 3.64, aproximando somente ΔC através de uma linearização de Taylor:

$$\Delta \boldsymbol{C} \approx \begin{cases} \boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\delta}}, & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ -\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\delta}}, & \text{se } \bar{x}_i = 1. \end{cases}$$
(3.75)

Assim como na abordagem anterior, fatores de penalização $(p_h e p_E)$ podem ser incluídos para os elementos vazios nas expressões finais de sensibilidade. Destacase que, mesmo tendo custos computacionais equivalentes, fora de situações particulares excepcionais, a abordagem ICPO Composta deve ser mais precisa que a ICPO Simples.

3.2.4 Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO) Composta

Como feito em Ghabraie (2015), uma Interpolação Contínua de Alta Ordem (ICAO) pode ser utilizada para obter valores precisos de ΔC . Então, na abordagem ICAO Composta, os vetores de sensibilidade são obtidos através das Equações 3.61, 3.62, 3.63 e 3.64.

Mais uma vez, considera-se a função identidade como função de interpolação para se obter a relaxação contínua da matriz de rigidez. Fatores de penalização $(p_h e p_E)$ podem ser incluídos nas expressões finais para calibrar os valores de sensibilidade dos vazios, buscando melhorar a efetividade e a estabilidade da otimização. Assumindo que a série de Taylor de $C(x_i)$ é convergente, sua variação finita é dada por

$$\boldsymbol{\Delta C} = \begin{cases} \sum_{a=1}^{\infty} & \frac{1}{a!} & \frac{\partial^{a} \boldsymbol{C}}{\partial x_{i}^{a}}, \text{ se } \bar{x}_{i} = 0, \\ \sum_{a=1}^{\infty} & \frac{[-1]^{a}}{a!} & \frac{\partial^{a} \boldsymbol{C}}{\partial x_{i}^{a}}, \text{ se } \bar{x}_{i} = 1. \end{cases}$$
(3.76)

Para o *i*-ésimo elemento, o posto da matriz K_i pode ser igual a 23, 27 ou 30, de acordo com a posição dos elementos quadrilaterais correspondentes em relação aos planos de simetria da célula. Assim, K_i pode ser escrita em termos de uma matriz H_i de dimensões $G \times 23$, $G \times 27$ ou $G \times 30$, que assume valores nulos em todos os termos fora de uma pequena submatriz de dimensões 26×23 , 36×27 ou 48×30 :

$$\boldsymbol{K_i} = \boldsymbol{H_i} \, \boldsymbol{H_i^T} \,. \tag{3.77}$$

Sendo \widecheck{K}_i a matriz de variação elementar restrita dada por

$$\widetilde{\boldsymbol{K}}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{P} \,, \tag{3.78}$$

ao definir \widecheck{H}_i como

$$\widetilde{\boldsymbol{H}}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{H}_{\boldsymbol{i}}, \qquad (3.79)$$

tem-se que

$$\widecheck{K}_{i} = \widecheck{H}_{i} \widecheck{H}_{i}^{T} . \tag{3.80}$$

Diferenciando C, a série de Taylor é obtida como

$$\boldsymbol{\Delta C} = \begin{cases} \frac{1}{A_{\Omega}} \sum_{a=1}^{\infty} \boldsymbol{V}_{i}^{T} \left[-\boldsymbol{A}_{i}\right]^{a-1} \boldsymbol{V}_{i}, & \text{se } \bar{x}_{i} = 0, \\ -\frac{1}{A_{\Omega}} \sum_{a=1}^{\infty} \boldsymbol{V}_{i}^{T} \left[\boldsymbol{A}_{i}\right]^{a-1} \boldsymbol{V}_{i}, & \text{se } \bar{x}_{i} = 1. \end{cases}$$
(3.81)

onde as matrizes $A_i \in V_i$ são dadas por:

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{\widetilde{H}}_{\boldsymbol{i}}^{T} \boldsymbol{\widetilde{K}}^{-1} \boldsymbol{\widetilde{H}}_{\boldsymbol{i}}; \qquad (3.82)$$

$$\boldsymbol{V_i} = \boldsymbol{H_i^T} \boldsymbol{U} = \boldsymbol{H_i^T} \hat{\boldsymbol{U}} + \boldsymbol{\breve{H}_i^T} \boldsymbol{\breve{U}} \,. \tag{3.83}$$

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{i}}^{T} \,, \tag{3.84}$$

e definindo a matriz W_i como

$$\boldsymbol{W}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{i}}^{T} \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{i}} \,, \tag{3.85}$$

a variação de C pode ser expressa como

$$\boldsymbol{\Delta C} = \begin{cases} \frac{1}{A_{\Omega}} \sum_{a=1}^{\infty} \boldsymbol{W}_{i}^{T} [-\boldsymbol{\Lambda}_{i}]^{a-1} \boldsymbol{W}_{i}, & \text{se } \bar{x}_{i} = 0, \\ -\frac{1}{A_{\Omega}} \sum_{a=1}^{\infty} \boldsymbol{W}_{i}^{T} [\boldsymbol{\Lambda}_{i}]^{a-1} \boldsymbol{W}_{i}, & \text{se } \bar{x}_{i} = 1. \end{cases}$$
(3.86)

Para uma matriz W_i qualquer, essas séries são convergentes se e somente se $\|A_i\|_2 = \max(\Lambda_i) < 1$. Devido ao parâmetro de *soft-kill*, para qualquer $x \in \{0, 1\}^{N_d}$, \breve{K} é definida positiva e A_i semidefinida positiva. Nessas condições, pode ser demonstrado que $\|A_i\|_2 < 1$ quando $\bar{x}_i = 1$ (CUNHA *et al.*, 2021), o que significa que a série correspondente a um elemento sólido é sempre convergente.

Com isso, as séries truncadas das Equações 3.81 e 3.86 podem ser usadas para estimar, com precisão arbitrária, os valores de sensibilidade para elementos sólidos. Como as séries podem divergir para elementos vazios, uma estratégia possível é impor um valor nulo de sensibilidade para todos os elementos vazios ($p_h = p_E = 0$) e deixar a parte sólida da estrutura "guiar" o processo de otimização.

3.2.5 Sensibilidade por Woodbury (SW)

Assim como foi feito para o problema de complacência, a identidade matricial de Woodbury (GUTTMAN, 1946; WOODBURY, 1950; HAGER, 1989) pode ser usada para obter a nova matriz inversa, após alterar o estado de um dado elemento:

$$\left[\widetilde{\boldsymbol{K}} \pm \widetilde{\boldsymbol{K}}_{i}\right]^{-1} = \widetilde{\boldsymbol{K}}^{-1} \mp \widetilde{\boldsymbol{K}}^{-1} \widetilde{\boldsymbol{H}}_{i} \left[\boldsymbol{I} \pm \boldsymbol{A}_{i}\right]^{-1} \widetilde{\boldsymbol{H}}_{i}^{T} \widetilde{\boldsymbol{K}}^{-1}.$$
(3.87)

Combinando as Equações 3.54, 3.58 e 3.87, a variação da matriz de elasticidade é obtida como

$$\Delta \boldsymbol{C} = \begin{cases} \frac{1}{A_{\Omega}} \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{i}}^{T} \left[\boldsymbol{I} + \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{i}} \right]^{-1} \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{i}}, & \text{se } \bar{x}_{\boldsymbol{i}} = 0, \\ -\frac{1}{A_{\Omega}} \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{i}}^{T} \left[\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{i}} \right]^{-1} \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{i}}, & \text{se } \bar{x}_{\boldsymbol{i}} = 1. \end{cases}$$
(3.88)

Que pode ser escrita em termos de Λ_i e W_i como

$$\Delta \boldsymbol{C} = \begin{cases} \frac{1}{A_{\Omega}} \boldsymbol{W}_{\boldsymbol{i}}^{T} [\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{i}}]^{-1} \boldsymbol{W}_{\boldsymbol{i}}, & \text{se } \bar{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}} = 0, \\ -\frac{1}{A_{\Omega}} \boldsymbol{W}_{\boldsymbol{i}}^{T} [\boldsymbol{I} - \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{i}}]^{-1} \boldsymbol{W}_{\boldsymbol{i}}, & \text{se } \bar{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}} = 1. \end{cases}$$
(3.89)

Destaca-se que, para $\|A_i\|_2 < 1$, essas expressões correspondem às somas das séries de potências das Equações 3.81 e 3.86. Além disso, como $I + \Lambda_i$ é uma matriz definida positiva, as expressões SW se mantêm válidas mesmo para elementos vazios tais que $\|A_i\|_2 \ge 1$.

Comparando as Equações 3.67 e 3.89, as seguintes relações são obtidas:

$$\begin{cases} 0 \leqslant \Delta C_{00} \leqslant C_{00}^{\delta} &, \text{ se } \bar{x}_i = 0, \\ 0 \leqslant C_{00}^{\delta} \leqslant -\Delta C_{00}, \text{ se } \bar{x}_i = 1; \end{cases}$$

$$(3.90)$$

$$\begin{cases} 0 \leqslant \Delta C_{22} \leqslant C_{22}^{\delta} , & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ 0 \leqslant C_{22}^{\delta} \leqslant -\Delta C_{22}, & \text{se } \bar{x}_i = 1. \end{cases}$$

$$(3.91)$$

Isso significa que a ICPO Composta sempre superestima $|\Delta C_{00}| \in |\Delta C_{22}|$ para elementos vazios e sempre subestima $|\Delta C_{00}| \in |\Delta C_{22}|$ para elementos sólidos.

Em ambas as abordagens ICAO e SW, cada matriz $\mathbf{A}_i = \mathbf{H}_i^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{H}_i$ deve ser conhecida para computar as todas as variações ΔC (uma para cada elemento). Quando o sistema linear é resolvido através da decomposição de Cholesky ($\mathbf{K} = \mathbf{L} \mathbf{L}^T$), essas matrizes podem ser obtidas pela resolução dos 23, 27 ou 30 sistemas triangulares ($\mathbf{L}^{-1}\mathbf{H}_i$) correspondentes a cada elemento. Assim, para computar todas as matrizes \mathbf{A}_i , deve-se resolver algo entre 23 N_d e 30 N_d sistemas triangulares.

Como as matrizes $I \pm A_i$ têm dimensões 23×23 , 27×27 ou 30×30 , a presença de suas inversas nas expressões SW não causam dificuldades em termos de custos computacionais, efetivamente, o procedimento apresentado é governado pelo custo de computar cada A_i .

A abordagem SW resulta em expressões melhores que as obtidas nas abordagens Exaustiva e ICAO Composta. O custo computacional da SW é similar ao da ICAO, e ambas devem ser menos custosas que o procedimento Exaustivo. Contudo, as expressões SW são exatas, enquanto que as expressões ICAO truncadas fornecem valores aproximados. Além disso, a ICAO pode falhar em gerar valores de sensibilidade válidos para elementos vazios, um problema que não ocorre na abordagem SW.

3.2.6 Sensibilidade por Gradientes Conjugados (SGC)

como

A abordagem SGC pode ser utilizada para estimar os termos diagonais de ΔC . Essa estatégia é viável computacionalmente e é garantidamente mais precisa que a abordagem ICPO Composta.

Para o caso de concepção de metamateriais, a abordagem consiste em usar o Método dos Gradientes Conjugados (MGC) para estimar a solução do sistema linear da Equação 3.54. Então, os valores de sensibilidade são obtidos através das Equações 3.58, 3.61, 3.62, 3.63 e 3.64. Para cada elemento, um pequeno número de passos do MGC é realizado simbolicamente, o que resulta em expressões de sensibilidade razoavelmente simples.

Assim como nas outras aproximações, fatores de penalização $(p_h e p_E)$ podem ser incluídos nas expressões finais para calibrar os valores de sensibilidade dos vazios, buscando melhorar a efetividade e a estabilidade da otimização.

Para obter valores aproximados de ΔC_{00} e ΔC_{22} , as variações de deslocamento correspondentes, Δu_{xx} (primeira coluna de ΔU) e Δu_{xy} (terceira coluna de ΔU), devem ser estimadas.

Primeiramente, considera-se o procedimento para estimar Δu_{xx} . A solução \check{u}_{xx} , relativa à topologia atual \bar{x} , é usada como chute inicial para se obter a variação $\Delta \check{u}_{xx}$, resultante da alteração de estado do *i*-ésimo elemento, por um MGC pré-condicionado. O MGC gera um conjunto de direções $\left[\breve{K} + \Delta \breve{K}\right]$ -ortogonais, $\{d_1, d_2, \ldots, d_{\breve{G}}\}$, e um conjunto de coeficientes correspondentes, $\{\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_{\breve{G}}\}$, tais que

$$\Delta \breve{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} = \sum_{k=1}^{\breve{G}} \mu_k \, \boldsymbol{d}_k \,. \tag{3.92}$$

Computando-se m direções e coeficientes, a Equação 3.92 pode ser reescrita

$$\Delta \breve{\boldsymbol{u}}_{xx} = \boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} \,, \tag{3.93}$$

onde $\boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(m)}$ é o termo conhecido, dado por

$$\boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(\boldsymbol{m})} = \sum_{k=1}^{m} \mu_k \, \boldsymbol{d}_k \,, \qquad (3.94)$$

e $\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)}$ é o erro desconhecido, dado por

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(\boldsymbol{m})} = \sum_{k=m+1}^{\check{G}} \mu_k \, \boldsymbol{d}_{\boldsymbol{k}} \,. \tag{3.95}$$

A partir da Equação 3.58, pode-se dividir ΔC_{00} em dois termos:

$$\Delta C_{00} = D_{00}^{(m)} + E_{00}^{(m)} \,. \tag{3.96}$$

Sendo $\Delta \check{f}_{xx}$ a primeira coluna de $\Delta \check{F}$, o termo conhecido $D_{00}^{(m)}$ é dado por

$$D_{00}^{(m)} = \frac{1}{A_{\Omega}} \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}}^{T} \left[\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{K}\right] \left[\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{P} \,\boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(m)}\right]$$

$$= \frac{1}{A_{\Omega}} \left[\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}}^{T} \left[\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{K}\right] \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} + \left[\left[\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\breve{K}}\right] \boldsymbol{\breve{u}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\breve{f}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}}\right]^{T} \boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(m)}\right]$$
(3.97)

e o erro desconhecido $E_{00}^{(m)}$ é dado por

$$E_{00}^{(m)} = -\frac{1}{A_{\Omega}} \left[\boldsymbol{\Delta} \breve{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} \right]^{T} \left[\widecheck{\boldsymbol{K}} + \boldsymbol{\Delta} \widecheck{\boldsymbol{K}} \right] \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)}
= -\frac{1}{A_{\Omega}} \left[\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} \right]^{T} \left[\widecheck{\boldsymbol{K}} + \boldsymbol{\Delta} \widecheck{\boldsymbol{K}} \right] \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} = -\frac{1}{A_{\Omega}} \left\| \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}^{(m)} \right\|_{\widetilde{\boldsymbol{K}} + \boldsymbol{\Delta} \widecheck{\boldsymbol{K}}}^{2} .$$
(3.98)

Nota-se que o erro $E_{00}^{(m)}$ é sempre não-positivo e que ele vai a zero monotonicamente conforme m aumenta, isto é, conforme mais passos do MGC são realizados. Considerando $\delta_u^{(0)} = \mathbf{0}$ e $\varepsilon_u^{(\check{G})} = \mathbf{0}$, as expressões apresentadas são válidas para qualquer $m \in \{0, 1, \dots, \check{G}\}$. A fórmula obtida após realizar m passos do MGC é denotada "expressão SGC-m". Assim, essa abordagem gera $\check{G} + 1$ expressões para ΔC_{00} com precisão crescente. Ou seja, em relação à estimativa de ΔC_{00} , se $m_1 > m_2$, SGC- m_1 é mais precisa que SGC- m_2 , e a expressão SGC- \check{G} é exata.

Deve-se destacar que a abordagem SGC-0 resulta na mesma aproximação obtida pela abordagem ICPO Composta $(D_{00}^{(0)} = \pm C_{00}^{\delta})$. Isso significa que, para qualquer número de passos $(m \ge 1)$, a abordagem SGC-*m* estima ΔC_{00} com maior precisão que a ICPO Composta. O Pseudocódigo 3.2 apresenta o algoritmo do MGC pré-condicionado. O problema é definido pelos dados conhecidos $\breve{K} + \Delta \breve{K}$ e $\check{f}_{xx} + \Delta \check{f}_{xx}$ (primeira coluna de $\check{F} + \Delta \breve{F}$). O chute inicial é \check{u}_{xx} , a matriz pré-condicionadora M corresponde à diagonal de $\breve{K} + \Delta \breve{K}$ (pré-condicionamento de Jacobi) e o número de iterações é m.

Pseudocódigo 3.2 Gradientes Conjugados Pré-condicionado (Metamaterial)

Dados do Problema: $\mathbf{\breve{K}} + \Delta \mathbf{\breve{K}}, \ \mathbf{\breve{f}}_{xx} + \Delta \mathbf{\breve{f}}_{xx}$ Entradas: $\mathbf{\breve{u}}_{xx}, \mathbf{M}, m$ $\mathbf{g_1} \leftarrow \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{\breve{K}} \end{bmatrix} \mathbf{\breve{u}}_{xx} - \Delta \mathbf{\breve{f}}_{xx}$ $d_1 \leftarrow -M^{-1}g_1$ $e_1 \leftarrow \begin{bmatrix} \mathbf{\breve{K}} + \Delta \mathbf{\breve{K}} \end{bmatrix} d_1$ $\mu_1 \leftarrow -\frac{d_1^T g_1}{d_1^T e_1}$ $\delta_u^{(1)} \leftarrow \mu_1 d_1$ for $k \in \{2, 3, \dots, m\}$ do $\mathbf{g_k} \leftarrow \mathbf{g_{k-1}} + \mu_{k-1} e_{k-1}$ $q_k \leftarrow M^{-1} g_k$ $\zeta_k \leftarrow -\frac{q_k^T e_{k-1}}{d_{k-1}^T e_{k-1}}$ $d_k \leftarrow -q_k + \zeta_k d_{k-1}$ $e_k \leftarrow \begin{bmatrix} \mathbf{\breve{K}} + \Delta \mathbf{\breve{K}} \end{bmatrix} d_k$ $\mu_k \leftarrow -\frac{d_k^T g_k}{d_k^T e_k}$ $\delta_u^{(k)} \leftarrow \delta_u^{(k-1)} + \mu_k d_k$ return $\delta_u^{(m)}$

Para obter a expressão SGC-1, os seguintes vetores devem ser computados:

$$\boldsymbol{z_h} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{K_i} \, \boldsymbol{u_{xx}} = \boldsymbol{\widecheck{H}_i} \, \boldsymbol{H_i}^T \boldsymbol{u_{xx}} \,, \tag{3.99}$$

$$z_m = M^{-1} z_h ,$$
 (3.100)

$$\boldsymbol{z}_{\boldsymbol{k}} = \left[\boldsymbol{\breve{K}} + \boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{\breve{K}} \right] \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} \,, \tag{3.101}$$

onde u_{xx} é o vetor de deslocamentos totais $(\hat{u}_{xx} + \tilde{u}_{xx})$.

Como H_i assume valores nulos em todos os termos fora de uma pequena submatriz de dimensões, no máximo, 48×30 , e como nenhuma linha de $K + \Delta K$ tem mais do que 26 termos não-nulos, essas operações podem ser realizadas eficientemente, usando apenas as pequenas submatrizes necessárias. Observa-se que os tamanhos dessas submatrizes são os mesmos para qualquer refinamento de malha, eles dependem apenas dos tipos de elementos finitos utilizados. Além disso, como M é uma matriz diagonal, não há dificuldades em computar o vetor z_m . Esses vetores são então usados para computar o seguintes coeficientes:

$$\omega_{hm} = \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{h}}^T \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} \,; \qquad (3.102)$$

$$\omega_{mk} = \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}}^T \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{k}}; \qquad (3.103)$$

$$\phi_{m1} = \frac{\omega_{hm}}{\omega_{mk}} \,. \tag{3.104}$$

Através do Pseudocódigo 3.2, $\pmb{\delta}^{(1)}_{\pmb{u}}$ é obtido como

$$\boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(1)} = \begin{cases} -\phi_{m1} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} \,, \, \text{ se } \, \bar{x}_{i} = 0 \,, \\ \phi_{m1} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} \,, \, \text{ se } \, \bar{x}_{i} = 1 \,. \end{cases}$$
(3.105)

E a aproximação SGC-1 para ΔC_{00} é obtida pela Equação 3.97:

$$\Delta C_{00} \approx D_{00}^{(1)} = \begin{cases} C_{00}^{\delta} - \frac{1}{A_{\Omega}} \left[\phi_{m1} \,\omega_{hm} \right], & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ -C_{00}^{\delta} - \frac{1}{A_{\Omega}} \left[\phi_{m1} \,\omega_{hm} \right], & \text{se } \bar{x}_i = 1. \end{cases}$$
(3.106)

Para obter a expressão SGC-2, os seguintes vetores devem ser computados (além de $z_h, z_m \in z_k$):

$$z_{\eta} = M^{-1} z_k;$$
 (3.107)

$$\boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\xi}} = \left[\boldsymbol{\breve{K}} + \boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{\breve{K}} \right] \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\eta}} \,. \tag{3.108}$$

Mais uma vez, essas operações podem ser realizadas eficientemente, usando apenas as pequenas submatrizes necessárias. Os vetores são então usados para computar os seguintes coeficientes:

$$\omega_{k\eta} = \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{k}}^T \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\eta}}; \qquad (3.109)$$

$$\omega_{\eta\xi} = \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\eta}}^T \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\xi}} \,; \tag{3.110}$$

$$\phi_{m2} = \frac{\omega_{hm}\,\omega_{\eta\xi} - \omega_{mk}\,\omega_{k\eta}}{\omega_{mk}\,\omega_{\eta\xi} - \omega_{k\eta}^2}; \qquad (3.111)$$

$$\phi_{\eta 2} = \frac{\omega_{mk}^2 - \omega_{hm} \,\omega_{k\eta}}{\omega_{mk} \,\omega_{\eta\xi} - \omega_{k\eta}^2} \,. \tag{3.112}$$

Através do Pseudocódigo 3.2, $\delta_u^{(2)}$ é obtido como

$$\boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{u}}^{(2)} = \begin{cases} -\phi_{m2} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} - \phi_{\eta 2} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\eta}} \,, & \text{se } \bar{x}_{i} = 0 \,, \\ \phi_{m2} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{m}} + \phi_{\eta 2} \, \boldsymbol{z}_{\boldsymbol{\eta}} \,, & \text{se } \bar{x}_{i} = 1 \,. \end{cases}$$
(3.113)

Finalmente, a aproximação SGC-2 para ΔC_{00} é obtida pela Equação 3.97:

$$\Delta C_{00} \approx D_{00}^{(2)} = \begin{cases} C_{00}^{\delta} - \frac{1}{A_{\Omega}} \left[\phi_{m2} \,\omega_{hm} + \phi_{\eta 2} \,\omega_{mk} \right], & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ -C_{00}^{\delta} - \frac{1}{A_{\Omega}} \left[\phi_{m2} \,\omega_{hm} + \phi_{\eta 2} \,\omega_{mk} \right], & \text{se } \bar{x}_i = 1. \end{cases}$$
(3.114)

A mesma dedução é válida para qualquer outro termo da diagonal de ΔC , usando a coluna correspondente de U no lugar de u_{xx} (usa-se u_{yy} para estimar ΔC_{11} ; e u_{xy} para estimar ΔC_{22}). Após estimar ΔC_{00} e ΔC_{22} , os valores de sensibilidade são obtidos através das Equações 3.61, 3.62, 3.63 e 3.64.

Como a isotropia é garantida, $C_{00} = C_{11}$ e $\Delta C_{00} = \Delta C_{11}$. Além disso, como o erro é sempre não-positivo, ao estimar ambas as variações ΔC_{00} e ΔC_{11} pela abordagem SGC, sabe-se qual das duas é a estimativa mais precisa. Portanto, se ambas as análises forem realizadas, os resultados podem ser melhorados usando a melhor das duas para computar os valores de sensibilidade: $\Delta C_{00} \approx \min \left(D_{00}^{(m)}, D_{11}^{(m)} \right)$.

Para um número fixo de passos do MGC, a abordagem SGC é $\Theta(N_d)$ (CUNHA et al., 2021). Ou seja, a quantidade de operações aritméticas realizadas nesse procedimento escala linearmente com o refinamento da malha. Ainda assim, para uma malha fixa, os recursos computacionais necessários aumentam substancialmente conforme mais passos do MGC são realizados. Por essa razão, para manter custos computacionais razoáveis para a análise de sensibilidade, apenas dois passos são considerados.

3.3 Análise de Erros

As expressões Exaustiva e SW são exatas, portanto não há erro nessas abordagens. Considerando séries convergentes ($||A_i||_2 < 1$), o erro da abordagem ICAO vai a zero conforme mais termos são incluídos nas séries truncadas. A convergência é rápida quando $||A_i||_2$ assume valores próximos de 0, mas ela pode ser bastante lenta se $||A_i||_2$ assumir valores próximos de 1. Na abordagem ICPO, para o caso de minimização de complacência, pode-se obter um limite superior para o erro relativo em termos de $\|A_i\|_2$ (CUNHA *et al.*, 2021). Definindo o erro relativo como

$$E^{[\text{rel}]} = \left| \frac{E_C^{(0)}}{D_C^{(0)}} \right| = \left| \frac{\Delta C - D_C^{(0)}}{D_C^{(0)}} \right|, \qquad (3.115)$$

tem-se como limite superior:

$$B = \begin{cases} \frac{\|\boldsymbol{A}_i\|_2}{1 + \|\boldsymbol{A}_i\|_2}, & \text{se } \bar{x}_i = 0, \\ \frac{\|\boldsymbol{A}_i\|_2}{1 - \|\boldsymbol{A}_i\|_2}, & \text{se } \bar{x}_i = 1. \end{cases}$$
(3.116)

Ou seja, $E^{[\text{rel}]} \leq B$. O mesmo vale para as estimativas referentes à concepção de metamateriais, referentes à abordagem ICPO Composta. Redefinindo o erro em termos de ΔC_{00} e $D_{00}^{(0)}$, ou de ΔC_{22} e $D_{22}^{(0)}$, tem-se o mesmo limite superior B.

Dessa forma, pode-se interpretar o maior autovalor da matriz A_i como uma medida de não-linearidade potencial das funções relaxadas. Quanto maior seu valor, maior é o limite superior para o erro das expressões ICPO. Como a abordagem SGC é sempre mais precisa que a ICPO, tem-se que *B* também estabelece um limite superior para o erro das expressões SGC.

No caso de concepção de metamateriais, não há garantia que os erros de $\alpha_i^{h_{\nu}}$ e $\alpha_i^{\check{E}}$ sejam reduzidos monotonicamente, conforme mais passos são considerados na abordagem SGC. Contudo, é razoável esperar que, para a maior parte dos casos, aproximações mais precisas de ΔC_{00} e ΔC_{22} resultem em aproximações mais precisas para as variações das funções h_{ν} e \hat{E} . Os resultados obtidos, apresentados no Capítulo 6, mostram que isso de fato ocorre.

Uma última consideração deve ser feita em relação aos valores de sensibilidade dos elementos vazios. Nos problemas considerados, a sensibilidade das funções C, h_{ν} e \hat{E} em relação a elementos desconectados da estrutura é praticamente nula. Isso significa que, num caso prático, a maior parte dos elementos vazios tem valores de sensibilidade próximos de zero. Ainda que, com passos suficientes, a abordagem SGC seja capaz de zerar a sensibilidade dos elementos desconectados, esse é um processamento redundante e que mantém um ruído numérico desnecessário. Especialmente quando malhas finas são utilizadas, deve-se avaliar a pertinência de se computar os valores de sensibilidade para elementos vazios. Em alguns casos, pode ser vantajoso, em termos de efetividade e estabilidade, desconsiderar a sensibilidade de todos os elementos vazios ($p_C = 0$ ou $p_h = p_E = 0$) e deixar que a parte sólida da estrutura "guie" o processo de otimização.

4 GERAÇÃO DE DADOS

Para que as RNA sejam treinadas por aprendizado supervisionado, é necessário gerar conjuntos de dados que relacionem as entradas consideradas com saídas esperadas. No caso, para desenvolver redes que forneçam valores precisos de sensibilidade a partir de valores estimados, é necessário armazenar os valores estimados e exatos para diversas topologias. Os valores estimados são computados pelas expressões SGC-0, SGC-1 e SGC-2; e os valores exatos são computados pelas expressões SW.

Para que as redes sejam capazes de generalizar a tarefa, isto é, realizá-la de forma satisfatória mesmo para casos que não foram usados para os treinamentos, é preciso que o conjunto de dados seja suficientemente representativo. A estratégia adotada corresponde a realizar uma grande quantidade de otimizações, em diferentes condições, e armazenar todos os dados produzidos no processo.

Armazenam-se todos os dados, mesmo os que não são necessários para o desenvolvimento deste trabalho. Isso possibilita a utilização dos conjuntos de dados gerados em outros trabalhos sobre otimização topológica assistida por aprendizado de máquina.

Consideram-se dois conjuntos de dados, um para cada problema abordado: minimização de complacência mecânica em uma viga engastada-livre; e otimização da célula de base de um metamaterial isotrópico.

4.1 Viga Engastada-Livre

Para o caso de minimização de complacência, considera-se uma viga engastadalivre de dimensões $L_x = 2,0 m$ e $L_y = 1,0 m$. A malha é mantida fixa, com $N_x = 64$ e $N_y = 32$, o que resulta num total de $N_d = 2048$ elementos. As propriedades do material sólido são E = 1,0 Pa e $\nu = 0,3$, e o parâmetro de soft-kill é dado por $p_k = 1 \times 10^{-6}$. O valor prescrito para a fração de volume é de $V_f^* = 50\%$, o que corresponde a 1024 elementos. O valor máximo para a redução de fração de volume em cada iteração é $\delta V_f^{\text{max}} = \frac{1}{64} = 1.5625\%$ (32 elementos). O valor máximo para a fração de variação topológica em cada iteração é $D_f^{\text{max}} = \frac{1}{32} = 3.1250\%$ (64 elementos). O raio de alcance do filtro de sensibilidade é de $r_f = 0,125 m$, o parâmetro de momento dos vetores de sensibilidade é de $\gamma = 50\%$ e o parâmetro de paciência é dado por $\psi = 20$. Uma estrutura completamente sólida é utilizada como topologia inicial.

A sensibilidade exata é utilizada para realizar cada iteração das otimizações, então não há necessidade de um fator de penalização para ajustar os valores de sensibilidade dos elementos vazios ($p_C = 1$). Além disso, no problema de complacência, não há penalidade de volume ($\beta = 0$) e operadores morfológicos não são utilizados ($r_m = 0$).

Para produzir a variabilidade desejada nos procedimentos de otimização, alteramse as condições de contorno do problema. Conforme ilustrado na Figura 4.1, quatro variáveis são utilizadas para definir diferentes condições de contorno para os problemas: a variável p_{bc} define a posição central da área engastada; a variável r_{bc} define a meia-altura da área engastada; a variável p_{ld} define a posição central da área carregada; e a variável r_{ld} define a meia-altura da área carregada.



Figura 4.1 – Condições de Contorno Variáveis

Cada configuração única de $\{p_{bc}, r_{bc}, p_{ld}, r_{ld}\}$ define um problema de otimização topológica distinto. Consideram-se posições e meia-alturas definidas de forma que os limites das regiões engastadas e carregadas sempre coincidam com nós da malha. Ao menos dois nós devem estar engastados, o que resulta em 528 configurações distintas para o engaste. Como cargas pontuais são permitidas, há mais configurações distintas para o carregamento, um total de 561. Destaca-se que a carga total (unitária) é a mesma em todos os casos: quando a carga é pontual, toda ela é aplicada no nó único; quando vários elementos são carregados, a carga é dividida igualmente entre eles. A Tabela 4.1 apresenta as faixas de valores consideradas para cada variável.

Variável	Valores $[m]$	Descrição
p_{bc}	$-0,484375 \sim 0,484375$	posição central da área engastada
r_{bc}	$0,031250 \sim 0,500000$	meia-altura da área engastada
p_{ld}	$-0,500000 \sim 0,500000$	posição central da área carregada
r_{ld}	$0,000000 \sim 0,500000$	meia-altura da área carregada

Tabela 4.1 – Parâmetros de Entrada (Viga Engastada-Livre)

Nessas condições, definem-se $528 \times 561 = 296\,208$ problemas de otimização. Para reduzir custos de processamento e armazenamento, entradas redundantes são ignoradas. Se os resultados da otimização para $\{p_{bc}, r_{bc}, p_{ld}, r_{ld}\}$ são conhecidos, então os resultados para $\{-p_{bc}, r_{bc}, -p_{ld}, r_{ld}\}$ podem ser facilmente obtidos: inverte-se a carga; obtêm-se os novos deslocamentos pela propriedade de linearidade; então, todos os vetores de topologia, sensibilidade e deslocamentos são espelhados em relação ao eixo horizontal; os valores das funções objetivo e de volume não são alterados. Apenas valores não-positivos de p_{bc} são considerados e, quando $p_{bc} = 0,0 m$, apenas valores não-positivos de p_{ld} são considerados. Isso resulta em **148 240** possibilidades não-redundantes.

Para reduzir o tempo de gravação em disco na geração dos dados e de leitura de disco na utilização do conjunto gerado, cada arquivo contém os dados referentes a 16 problemas de otimização distintos. Assim, as 148240 otimizações resultam em 9265 arquivos de cada tipo.

Os arquivos gerados são os seguintes. Arquivos de índices de entrada ("fid.npy"), que armazenam um índice único para cada entrada $\{p_{bc}, r_{bc}, p_{ld}, r_{ld}\}$, de 0 até 148239. Arquivos de dados de entrada ("inp.npy"), que armazenam cada conjunto de valores $\{p_{bc}, r_{bc}, p_{ld}, r_{ld}\}$. Arquivos com as topologias otimizadas ("top_opt.npy"). Arquivos com os valores da função objetivo para as topologias otimizadas ("obj_opt.npy"). Arquivos com ponteiros que relacionam cada entrada com as iterações correspondentes dos processos de otimização ("ptr2opt.npy"), usados para identificar cada uma das 16 otimizações dentro de um mesmo arquivo. Arquivos com ponteiros que relacionam cada iteração dos processos de otimização com a entrada correspondente ("ptr2inp.npy"), usados para identificar cada uma das 16 otimizações dentro de um mesmo arquivo. Arquivos com as topologias de todas as iterações dos processos de otimização ("top.npy"). Arquivos com os vetores de deslocamentos de cada topologia ("dis.npy"). Arquivos com os vetores de sensibilidade de cada topologia: SGC-0 ("sen_0.npy"); SGC-1 ("sen_1.npy"); SGC-2 ("sen_2.npy"); e SW ("sen w.npy"). Arquivos com os valores da fração de volume de cada topologia ("vol.npy"). Arquivos com os valores da função objetivo de cada topologia ("obj.npy"). E arquivos com os tempos de execução das principais etapas dos processos de otimização, em conjunto com o número de iterações realizadas em cada processo ("tim.npy").

Cada valor de densidade que compõe os vetores de topologia, é armazenado num único bit. O restante dos dados são armazenados no formato de 4-bytes. Assim, cada arquivo "fid.npy" contém 64 bytes; cada "inp.npy" contém 256 bytes; cada "top_opt.npy" contém 4,0 kB; cada "obj_opt.npy" contém 64 bytes; cada "ptr2opt.npy" contém 68 bytes; e cada "tim.npy" contém 896 bytes. Os outros arquivos dependem do número de iterações realizadas em cada processo de otimização. Considerando um valor médio de 82 iterações (o que corresponde a 83 topologias, contando a inicial), cada "ptr2inp.npy" conteria 5,2 kB; cada "top.npy" conteria 332,0 kB; cada "dis.npy" conteria 21,8 MB; cada "sen_0.npy" conteria 10,4 MB; cada "sen_1.npy" conteria 10,4 MB; cada "sen_2.npy" conteria 10,4 MB; cada "sen_w.npy" conteria 10,4 MB; cada "vol.npy" conteria 5,2 kB; e cada "obj.npy" conteria 5,2 kB. Nesse caso, todos esses arquivos combinados corresponderiam a 64 MB de dados. Os arquivos e seus tamanhos médios são apresentados na Tabela 4.2.

Dessa forma, o tamanho do conjunto de dados completo, contendo $9\,265$ arquivos de cada tipo, deve ser em torno de **579 GB**.

Arquivo	Tamanho Médio (82 it.)	Descrição
dis.npy	21,8 MB	deslocamentos
fid.npy	64 bytes	índices de entrada
inp.npy	256 bytes	dados de entrada
obj.npy	5,2 kB	valores da função objetivo
obj_opt.npy	64 bytes	valores otimizados da função objetivo
ptr2inp.npy	5,2 kB	ponteiros de iterações para entradas
ptr2opt.npy	68 bytes	ponteiros de entradas para iterações
sen_0.npy	10,4 MB	aproximações SGC-0
sen_1.npy	10,4 MB	aproximações SGC-1
sen_2.npy	10,4 MB	aproximações SGC-2
sen_w.npy	10,4 MB	valores de sensibilidade exatos
tim.npy	896 bytes	tempos e números de iterações
top.npy	332,0 kB	topologias
top_opt.npy	4,0 kB	topologias otimizadas
vol.npy	5,2 kB	valores de fração de volume

Tabela 4.2 – Arquivos Gerados (Viga Engastada-Livre)

Programas desenvolvidos em Python são utilizados para a geração e para a utilização dos conjuntos de dados. Por isso, todos os arquivos são armazenados como numpy arrays. Eles são salvos através da função "numpy.save(\cdot)" e podem ser lidos através da função "numpy.load(\cdot)".

4.2 Célula de Base de um Metamaterial

Para o caso de concepção de metamateriais, considera-se uma célula de área unitária $(A_{\Omega} = 1, 0 m^2)$, com dimensões $L_x = \left[\frac{1}{108}\right]^{\frac{1}{4}} m \approx 0,310 m$ e $L_y = \left[\frac{1}{12}\right]^{\frac{1}{4}} m \approx 0,537 m$. A malha é mantida fixa, com $N_s = 32$, o que resulta num total de $N_d = 1024$ variáveis de projeto e $N_t = 6144$ elementos quadrilaterais. As propriedades do material de base são E = 1,0 Pa e $\nu = 0,3$, e o parâmetro de *soft-kill* é dado por $p_k = 1 \times 10^{-9}$. O valor máximo para a redução de modulo de Young em cada iteração é de $\delta \hat{E}^{\max} = 0,05 Pa$. O valor máximo para a fração de variação topológica em cada iteração é $D_f^{\max} = \frac{1}{64} = 1,5625\%$, o que corresponde a 16 variáveis de projeto, ou a 96 elementos quadrilaterais. O raio de alcance do filtro de sensibilidade é de $r_f = 0,024 m$, o raio de alcance dos operadores morfológicos é de $r_m = 0,018 m$, o parâmetro de momento dos vetores de sensibilidade da função objetivo é de $\gamma = 25\%$, o parâmetro de penalidade da fração de volume é de $\beta = 0,05$ e o parâmetro de paciência é dado por $\psi = 30$.

A topologia inicial é dada por uma estrutura com três pequenos furos. Como ilustrado na Figura 4.2, os furos são losangulares e estão posicionados sobre os planos
de simetria, cada um está posicionado entre o centro da célula hexagonal e uma de suas arestas. A diagonal menor dos losangos é de $\frac{L_x}{8} \approx 0,03878 \, m$ e a diagonal maior é de $\frac{L_y}{8} \approx 0,06716 \, m$. Na estrutura discretizada, cada cavidade corresponde a 12 elementos quadrilaterais, totalizando 36 elementos quadrilaterais vazios, referentes a 6 variáveis de projeto.



Figura 4.2 – Topologia Inicial para a Concepção de Metamateriais

A sensibilidade exata é utilizada para realizar cada iteração das otimizações, então não há necessidade de fatores de penalização para ajustar os valores de sensibilidade dos elementos vazios ($p_h = p_E = 1$).

Para produzir a variabilidade desejada nos procedimentos de otimização, alteramse os valores das propriedades de projeto do metamaterial: o coeficiente de Poisson prescrito, $\hat{\nu}^*$; e o módulo de Young mínimo, \hat{E}^{\min} . Cada configuração única de $\{\hat{\nu}^*, \hat{E}^{\min}\}$ define um problema de otimização topológica distinto. Consideram-se valores de Poisson entre -1,00 e 1,00, com passo de 0,01. Valores entre 0,20 e 0,40 não são considerados pois estão próximos à propriedade do material de base, então os valores $\{0,21;0,22;\ldots;0,39\}$ são desconsiderados. Isso resulta em 182 valores possíveis para $\hat{\nu}^*$. O módulo de Young mínimo varia de 0,000 *Pa* até 0,500 *Pa*, com passo de 0,005 *Pa*. Isso resulta em 101 valores possíveis para \hat{E}^{\min} . A Tabela 4.3 apresenta as faixas de valores consideradas para cada variável.

Variável	Valores	Descrição
$\widehat{\nu}^*$	$-1,00 \sim 0,20 \mid 0,40 \sim 1,00$	coeficiente de Poisson prescrito
\hat{E}^{\min}	$0,000 Pa \sim 0,500 Pa$	módulo de Young mínimo

Tabela 4.3 – Parâmetros de Entrada (Célula de Base)

Assim, definem-se 182 \times 101 = **18**382 problemas de otimização. Para reduzir

o tempo de gravação em disco na geração dos dados e de leitura de disco na utilização do conjunto gerado, cada arquivo contém os dados referentes a 7 problemas de otimização distintos. Assim, as 18 382 otimizações resultam em 2 626 arquivos de cada tipo.

Os arquivos gerados são os seguintes. Arquivos de índices de entrada ("fid.npy"), que armazenam um índice único para cada entrada $\{\hat{\nu}^*, \hat{E}^{\min}\}$, de 0 até 18381. Arquivos de dados de entrada ("inp.npy"), que armazenam cada conjunto de valores $\{\hat{\nu}^*, \hat{E}^{\min}\}$. Arquivos com as topologias otimizadas ("top opt.npy"). Arquivos com os valores das propriedades mecânicas para as topologias otimizadas: $\hat{\nu}$ ("nu_opt.npy"); e \hat{E} ("Ev_opt.npy"). Arquivos com ponteiros que relacionam cada entrada com as iterações correspondentes dos processos de otimização ("ptr2opt.npy"), usados para identificar cada uma das 7 otimizações dentro de um mesmo arquivo. Arquivos com ponteiros que relacionam cada iteração dos processos de otimização com a entrada correspondente ("ptr2inp.npy"), usados para identificar cada uma das 7 otimizações dentro de um mesmo arquivo. Arquivos com as topologias de todas as iterações dos processos de otimização ("top.npy"). Arquivos com os vetores de deslocamentos de cada topologia: u_{xx} ("dis_xx.npy"); u_{yy} ("dis_yy.npy"); e u_{xy} ("dis_xy.npy"). Arquivos com as variações finitas de C_{00} de cada topologia: SGC-0 ("dC00_0.npy"); SGC-1 ("dC00_1.npy"); SGC-2 ("dC00_2.npy"); e SW ("dC00_w.npy"). Arquivos com as variações finitas de C_{11} de cada topologia: SGC-0 ("dC11 0.npy"); SGC-1 ("dC11 1.npy"); SGC-2 ("dC11 2.npy"); e SW ("dC11 w.npy"). Arquivos com as variações finitas de C_{22} de cada topologia: SGC-0 ("dC22_0.npy"); SGC-1 ("dC22_1.npy"); SGC-2 ("dC22_2.npy"); e SW ("dC22_w.npy"). Arquivos com os valores da fração de volume de cada topologia ("vol.npy"). Arquivos com os valores das propriedades mecânicas de cada topologia: $\hat{\nu}$ ("nu.npy"); e \hat{E} ("Ey.npy"). E arquivos com os tempos de execução das principais etapas dos processos de otimização, em conjunto com o número de iterações realizadas em cada processo ("tim.npy").

Cada valor de densidade que compõe os vetores de topologia (de tamanho $N_d = 1\,024$) é armazenado num único bit. O restante dos dados são armazenados no formato de 4-bytes. Assim, cada arquivo "fid.npy" contém 28 bytes; cada "inp.npy" contém 56 bytes; cada "top_opt.npy" contém 896 bytes; cada "nu_opt.npy" contém 28 bytes; cada "Ey_opt.npy" contém 28 bytes; cada "ptr2opt.npy" contém 32 bytes; e cada "tim.npy" contém 196 bytes. Os outros arquivos dependem do número de iterações realizadas em cada processo de otimização. Considerando um valor médio de 74 iterações (o que corresponde a 75 topologias, contando a inicial), cada "ptr2inp.npy" conteria 2,1 kB; cada "top.npy" conteria 65,6 kB; cada "dis_xx.npy" conteria 25,4 MB; cada "dC00_0.npy" conteria 2,1 MB; cada "dC00_1.npy" conteria 2,1 MB; cada "dC00_2.npy" conteria 2,1 MB; cada "dC00_v.npy" conteria 2,1 MB; cada "dC11_0.npy" conteria 2,1 MB; cada "dC11_1.npy" conteria 2,1 MB; cada "dC11_2.npy" conteria 2,1 MB; cada "dC11_w.npy"

conteria 2,1 MB; cada "dC22_0.npy" conteria 2,1 MB; cada "dC22_1.npy" conteria 2,1 MB; cada "dC22_2.npy" conteria 2,1 MB; cada "dC22_w.npy" conteria 2,1 MB; cada "vol.npy" conteria 2,1 kB; cada "nu.npy" conteria 2,1 kB; e cada "Ey.npy" conteria 2,1 kB. Nesse caso, todos esses arquivos combinados corresponderiam a 101 MB de dados. Os arquivos e seus tamanhos médios são apresentados na Tabela 4.4.

Arquivo	Tamanho Médio (74 it.)	Descrição	
dC00_0.npy	2,1 MB	aproximações SGC-0 para ΔC_{00}	
dC11_0.npy	2,1 MB	aproximações SGC-0 para ΔC_{11}	
dC22_0.npy	2,1 MB	aproximações SGC-0 para ΔC_{22}	
dC00_1.npy	2,1 MB	aproximações SGC-1 para ΔC_{00}	
dC11_1.npy	2,1 MB	aproximações SGC-1 para ΔC_{11}	
dC22_1.npy	2,1 MB	aproximações SGC-1 para ΔC_{22}	
dC00_2.npy	2,1 MB	aproximações SGC-2 para ΔC_{00}	
dC11_2.npy	2,1 MB	aproximações SGC-2 para ΔC_{11}	
dC22_2.npy	2,1 MB	aproximações SGC-2 para ΔC_{22}	
dC00_w.npy	2,1 MB	variações finitas exatas de C_{00}	
dC11_w.npy	2,1 MB	variações finitas exatas de C_{11}	
dC22_w.npy	2,1 MB	variações finitas exatas de C_{22}	
dis_xx.npy	25,4 MB	deslocamentos usados para obter C_{00}	
dis_yy.npy	25,4 MB	deslocamentos usados para obter C_{11}	
dis_xy.npy	25,4 MB	deslocamentos usados para obter C_{22}	
Ey.npy	2,1 kB	valores de módulo de Young	
Ey_opt.npy	28 bytes	valores otimizados de módulo de Young	
fid.npy	28 bytes	índices de entrada	
inp.npy	56 bytes	dados de entrada	
nu.npy	2,1 kB	valores de coeficiente de Poisson	
nu_opt.npy	28 bytes	valores otimizados de coeficiente de Poisson	
ptr2inp.npy	2,1 kB	ponteiros de iterações para entradas	
ptr2opt.npy	32 bytes	ponteiros de entradas para iterações	
tim.npy	196 bytes	tempos e números de iterações	
top.npy	65,6 kB	topologias	
top_opt.npy	896 bytes	topologias otimizadas	
vol.npy	2,1 kB	valores de fração de volume	

Tabela 4.4 – Arquivos Gerados (Célula de Base)

Dessa forma, o tamanho do conjunto de dados completo, contendo 2626 arquivos de cada tipo, deve ser em torno de **260 GB**.

Programas desenvolvidos em Python são utilizados para a geração e para a utilização dos conjuntos de dados. Por isso, todos os arquivos são armazenados como

numpy arrays. Eles são salvos através da função "numpy.save(\cdot)" e podem ser lidos através da função "numpy.load(\cdot)".

4.3 Possibilidades de Uso

Neste trabalho, os conjuntos de dados são usados para treinar redes que corrigem as estimativas de sensibilidade computadas.

No caso de minimização de complacência, os dados dos arquivos "sen_0.npy", "sen_1.npy" e "sen_2.npy" contêm as aproximações de $\alpha_i^{[C]}$ referentes às estimativas $D_C^{(0)}$, $D_C^{(1)} \in D_C^{(2)}$ da abordagem SGC. Esses valores são fornecidos como entradas e deseja-se que a rede retorne os valores exatos de $\alpha_i^{[C]}$, armazenados nos arquivos "sen_w.npy". Os dados dos arquivos "top.npy", que contêm cada vetor de densidades $\bar{\boldsymbol{x}}$, podem ser usados para diferenciar os valores de sensibilidade de elementos sólidos e vazios, e para recuperar os valores de $D_C^{(0)}$, $D_C^{(1)} \in D_C^{(2)}$. E os dados dos arquivos "obj.npy", que contêm cada valor de complacência $C(\bar{\boldsymbol{x}})$, podem ser usados para normalizar os dados.

No caso de concepção de metamateriais, os dados dos arquivos "dC00_0.npy", "dC11_0.npy", "dC22_0.npy", "dC00_1.npy", "dC11_1.npy", "dC22_1.npy", "dC00_2.npy", "dC11_2.npy" e "dC22_2.npy" contêm as aproximações de ΔC_{00} , ΔC_{11} e ΔC_{22} referentes às estimativas $D_{00}^{(0)}$, $D_{11}^{(0)}$, $D_{22}^{(0)}$, $D_{22}^{(1)}$, $D_{22}^{(2)}$, $D_{00}^{(2)}$, $D_{11}^{(2)}$ e $D_{22}^{(2)}$ da abordagem SGC. Esses valores são fornecidos como entradas e deseja-se que a rede retorne os valores exatos de ΔC_{00} , ΔC_{11} e ΔC_{22} , armazenados nos arquivos "dC00_w.npy", "dC11_w.npy" e "dC22_w.npy". Para normalizar os dados, os valores de C_{00} , C_{11} e C_{22} podem ser recuperados a partir dos arquivos "nu.npy" e "Ey.npy", que contêm cada valor de coeficiente de Poisson $\hat{\nu}$ e de módulo de Young \hat{E} .

Abaixo, apresentam-se algumas outras possibilidades de uso dos dados gerados, que podem ser exploradas em trabalhos futuros.

Uma abordagem comum é a otimização direta, isto é, obter uma topologia otimizada em uma única iteração. Nesse caso, as redes seriam treinadas para relacionar as variáveis de entrada, armazenadas nos arquivos "inp.npy", com as topologias otimizadas, armazenadas nos arquivos "top_opt.npy".

Outra possibilidade é usar as redes para estimar os vetores de deslocamentos. No caso de minimização de complacência, podem-se usar as topologias, armazenadas nos arquivos "top.npy" e as condições de contorno, armazenadas nos arquivos "inp.npy", para estimar os deslocamentos, armazenados nos arquivos "dis.npy". No caso de concepção de metamateriais, como as condinções de contorno são fixas, as redes seriam treinadas para relacionar as topologias de "top.npy" com os vetores de deslocamentos, armazenados nos arquivos "dis_xx.npy", "dis_yy.npy" e "dis_xy.npy". Nesses casos, além dos dados armazenados, informações sobre a física dos problemas também poderiam ser incluídas nos treinamentos.

A partir das topologias e das condições de contorno, podem-se treinar redes que estimem a função objetivo ou as propriedades homogeneizadas, armazenadas em "obj.npy", "nu.npy" e "Ey.npy". As sensibilidades e variações finitas exatas, armazenadas em "sen_w.npy", "dC00_w.npy", "dC11_w.npy" e "dC22_w.npy" poderiam ser usadas nos treinamentos, considerando as saídas das redes após alterações finitas de suas entradas. Uma vez treinada, os valores de sensibilidade poderiam ser obtidos computando a saída da rede após alterar o estado de cada entrada correspondente a uma variável de projeto. Alternativamente, podem-se treinar redes para relacionar diretamente as topologias e as condições de contorno com os vetores de sensibilidade exatos.

Pode-se também utilizar as redes para reduzir as dimensões do problema. Utilizando as topologias armazenadas em "top.npy", redes generativas podem ser treinadas para produzir topologias a partir de um conjunto de variáveis latentes de dimensão reduzida. Reduzir a quantidade de variáveis de projeto pode viabilizar a utilização de outros tipos de métodos de otimização. Além disso, essa abordagem pode ser usada para reduzir o espaço de soluções possíveis, descartando topologias indesejadas (com tabuleiros de xadrez, ilhas de sólidos, componentes estruturais finos demais).

Nesta tese, ao invés de buscar reduzir custos computacionais, a escolha feita foi a de usar as redes neurais artificiais para melhorar a precisão dos valores de sensibilidade, o que contribui para a efetividade e estabilidade dos processos de otimização. Nesse contexto, busca-se fornecer às redes dados com informações relevantes para realizar a tarefa desejada: uma sequência de aproximações SGC.

5 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNA)

O desenvolvimento de Redes Neurais Artificiais (RNA) consiste na definição de suas arquiteturas e na determinação de seus parâmetros e hiperparâmetros através de processos de treinamento. No aprendizado supervisionado, o processo de treinamento é feito minimizando o erro médio entre as saídas da rede e as saídas esperadas, para um dado conjunto de dados de entrada.

A partir dos conjuntos de dados gerados, constroem-se os conjuntos de treinamento, de validação e de teste. O conjunto de treinamento é usado para computar o gradiente da função de erro médio em relação aos parâmetros do modelo e definir a direção de descida para o método de otimização iterativo. O conjunto de validação é usado para evitar que a rede seja sobreajustada ao conjunto de treinamento, ou seja, para garantir que a rede aprenda a solucionar o problema generalizado e não somente para os dados de treinamento. Esse conjunto é usado para computar o erro médio e definir a parada do treinamento. Por fim, o conjunto de teste é usado para medir a performance real do modelo treinado, já que ele é composto por dados distintos dos usados no processo de treinamento.

Neste trabalho, deseja-se desenvolver RNA que computem valores exatos de sensibilidade a partir dos valores estimados pela abordagem SGC. Buscam-se as variações finitas da complacência mecânica e dos termos diagonais da matriz de propriedades homogeneizadas.

5.1 Pré-Processamento dos Dados

Antes de fazer a divisão dos dados em conjuntos de treinamento, de validação e de teste, alguns procedimentos de pré-processamento são realizados para facilitar as etapas subsequentes.

Para as RNA consideradas, apenas os dados de topologia e de sensibilidade são relevantes. Assim, os arquivos utilizados para o caso de minimização de complacência são: "top.npy", "sen_0.npy", "sen_1.npy", "sen_2.npy" e "sen_w.npy". E os arquivos utilizados para o caso de concepção de metamateriais são: "top.npy", "dC00_0.npy", "dC11_0.npy", "dC22_0.npy", "dC00_1.npy", "dC11_1.npy", "dC22_1.npy", "dC00_2.npy", "dC11_2.npy", "dC22_2.npy", "dC00_w.npy", "dC11_w.npy" e "dC22_w.npy".

5.1.1 Reordenação Aleatória

Nos conjuntos de dados gerados, os arquivos estão ordenados seguindo uma regra estabelecida: as topologias seguem a sequência produzida por cada processo de otimização; e os problemas de otimização seguem uma progressão estruturada dos parâmetros (condições de contorno no caso de minimização de complacência e propriedades homogeneizadas no caso de concepção de metamateriais). Para evitar que a ordenação regrada dos dados enviese o processo de aprendizado de máquina, eles devem ser reordenados aleatoriamente.

No caso de minimização de complacência, os 9265 arquivos de cada tipo correspondem a 12283242 topologias. Há 148240 condições de contorno distintas, portanto, mesmo topologias idênticas podem conter dados de sensibilidade distintos. As topologias foram reordenadas aleatoriamente e armazenadas em 1000 novos arquivos de cada tipo: cada um dos 242 primeiros arquivos corresponde a 12284 topologias; e cada um dos 758 arquivos seguintes corresponde a 12283 topologias.

No caso de concepção e metamateriais, os 2626 arquivos de cada tipo correspondem a 1374656 topologias. Já que topologias iguais resultam nos mesmos valores de sensibilidade para C_{00} , C_{11} e C_{22} , é preciso remover do conjunto os dados referentes a topologias redundantes: o número de topologias únicas é de 630922 (46% do total). As topologias únicas foram reordenadas aleatoriamente e armazenadas em 100 novos arquivos de cada tipo: cada um dos 22 primeiros arquivos corresponde a 6310 topologias; e cada um dos 78 arquivos seguintes corresponde a 6309 topologias.

5.1.2 Ajustes e Normalização

Deseja-se avaliar se é possível utilizar as RNA desenvolvidas para minimização de complacência para abordar o caso de concepção de metamateriais (por exemplo, através de aprendizado por transferência). Por isso, realizam-se alguns procedimentos para tornar os problemas mais similares.

No caso de minimização de complacência, a condição de Neumann (carregamento imposto) pode produzir valores de sensibilidade muito elevados para elementos próximos ao carregamento ou ao engaste. Para reduzir os efeitos de borda, as duas primeiras colunas de elementos e as duas últimas são removidas da estrutura, conforme ilustrado na Figura 5.1. Assim, o comprimento da estrutura é reduzido em 6,25% e ela é redefinida numa malha de 32×60 elementos, com carregamentos nas arestas esquerda e direita que resultam na cinemática da estrutura original. Isso é suficiente para reduzir a ordem dos picos de sensibilidade de 10^{10} para 10^4 .

Deseja-se que a informação sobre o estado de cada elemento seja fornecida às RNA. Para isso, utilizam-se valores positivos para os elementos sólidos e valores negativos para os elementos vazios. Portanto, no caso de minimização de complacência, os valores usados são os de variação de C $(D_C^{(0)}, D_C^{(1)}, D_C^{(2)} \in \Delta C)$; e no caso de concepção de metamateriais, os valores usados são os opostos das variações de $C_{00}, C_{11} \in C_{22}$ $(-D_{00}^{(0)}, -D_{11}^{(0)}, -D_{22}^{(0)}, -D_{11}^{(1)}, -D_{22}^{(2)}, -D_{00}^{(2)}, -D_{11}^{(2)}, -D_{22}^{(2)}, -\Delta C_{00}, -\Delta C_{11} \in -\Delta C_{22}).$



Figura 5.1 – Remoção de Bordas

Correções são realizadas para eliminar pequenas flutuações, para evitar que imprecisões da aritmética de ponto flutuante alterem as propriedades conhecidas das grandezas: todos os sólidos devem possuir valores positivos; todos os vazios devem possuir valores negativos; e as expressões SGC devem fornecer uma progressão monótona. Primeiramente, identificam-se os dados que não respeitam essas propriedades e verifica-se se esses erros são menores que uma tolerância numérica. Para cada topologia, ao usar como tolerância o maior valor absoluto de sensibilidade exata multiplicado por 1×10^{-9} , confirmou-se que todos os casos anômalos estão dentro da tolerância adotada. Em seguida, todos os valores negativos correspondentes a elementos sólidos são transformados em 0,0; todos os valores positivos correspondentes a elementos vazios são transformados em 0,0; toda aproximação SGC-2 maior do que o valor exato, torna-se igual ao valor exato; toda aproximação SGC-1 maior que o valor SGC-2, torna-se igual ao valor SGC-2; e toda aproximação SGC-0 maior que o valor SGC-1, torna-se igual ao valor SGC-1.

Para melhorar a qualidade numérica dos dados e para obter redes com melhores capacidades de generalização, todos os dados são normalizados e reescalados. A normalização consiste em dividir todos os valores pelo dobro do valor médio de energia de deformação elementar. Para o caso de minimização de complacência, o divisor é dado por:

$$C^{e}(\boldsymbol{x}) = \frac{C(\boldsymbol{x})}{V(\boldsymbol{x})}.$$
(5.1)

Essa operação torna os dados invariantes à intensidade do carregamento (para o caso de minimização de complacência) e ao valor do módulo de Young do material de base. Além disso, considerando a aplicação da mesma rede em estruturas com diferentes discretizações, ela pode compensar a redução dos valores de sensibilidade que ocorre quando se refinam as malhas. Observa-se que, como a estrutura do caso de minimização de complacência foi alterada, o valor de C da estrutura reduzida deve ser recuperado a partir dos valores de energia elementares (considerando apenas elementos da malha reduzida), armazenados nas aproximações SGC-0:

$$C = \boldsymbol{u}^{T} \left[\frac{1}{1 - p_{k}} \sum_{\text{sólidos}} \boldsymbol{K}_{i} + \frac{p_{k}}{1 - p_{k}} \sum_{\text{vazios}} \boldsymbol{K}_{i} \right] \boldsymbol{u} = \frac{1}{1 - p_{k}} \left[\sum_{\text{sólidos}} D_{C}^{(0)} - p_{k} \sum_{\text{vazios}} D_{C}^{(0)} \right].$$
(5.2)

O mesmo é feito para os dados referentes à concepção de metamateriais, nesse caso, os divisores da normalização são dados por:

$$C_{00}^{e}(\boldsymbol{x}) = \frac{C_{00}(\boldsymbol{x})}{V(\boldsymbol{x})}; \qquad (5.3)$$

$$C_{11}^{e}(\boldsymbol{x}) = \frac{C_{11}(\boldsymbol{x})}{V(\boldsymbol{x})};$$
 (5.4)

$$C_{22}^{e}(\boldsymbol{x}) = \frac{C_{22}(\boldsymbol{x})}{V(\boldsymbol{x})}.$$
 (5.5)

A normalização adotada não é suficiente para eliminar os picos de sensibilidade que ocorrem em algumas situações particulares (por exemplo, quando alterar o estado de um único elemento desconecta ou conecta diferentes partes da estrutura). Para evitar que esses picos prejudiquem o treinamento das redes e melhorar a resolução dos valores em [-1,1], os dados normalizados são reescalados: utiliza-se a raiz cúbica de cada dado de entrada-saída.

Assim, para cada dado de entrada a e saída correspondente b, as RNA desenvolvidas buscam representar o mapeamento:

$$\left[\frac{1}{C^e} \boldsymbol{a}\right]^{\frac{1}{3}} \to \left[\frac{1}{C^e} \boldsymbol{b}\right]^{\frac{1}{3}}.$$
(5.6)

Por último, para garantir que picos muito intensos não prejudiquem o treinamento, adotam-se -20 e 20 como valores mínimos e máximos para os dados préprocessados. Com isso, todos os dados de entrada-saída com algum valor elevado demais (que exceda esses limites) são removidos dos conjuntos de dados.

5.1.3 Entradas e Saídas

Para avaliar a relevância de diferentes informações para computar os valores exatos de sensibilidade, 6 tipos de entrada distintos foram considerados para as RNA.

As entradas diferem em relação à quantidade de termos computados da sequência de aproximações SGC; e à quantidade de elementos vizinhos levados em conta.

Consideram-se redes que computam o valor de sensibilidade de um único elemento por vez, ou seja, redes com uma única saída escalar. Por sua vez, as diferentes entradas consideradas podem ter dimensões 1, 2, 3, 9, 18 ou 27.

Utiliza-se a nomenclatura "S0" para redes que recebem como entrada apenas a aproximação SGC-0; a nomenclatura "S1" para redes que recebem as aproximações SGC-0 e SGC-1; e a nomenclatura "S2" para redes que recebem as aproximações SGC-0, SGC-1 e SGC-2. Utiliza-se a nomenclatura "V1" para redes que recebem como entrada apenas valores de sensibilidade referentes ao elemento de interesse (do qual se deseja calcular a sensibilidade exata); e a nomenclatura "V9" para redes que recebem como entrada os valores de sensibilidade referentes ao elemento de interesse e a seus 8 vizinhos imediatos. A Figura 5.2 apresenta os 3 canais de entrada considerados (SGC-0, SGC-1 e SGC-2) e os dados utilizados em cada caso. Antes de serem enviados às RNA, os dados de entrada são vetorizados e empilhados, conforme ilustrado na Figura 5.3.



Figura 5.2 – Entradas e Saídas Consideradas

Ao comparar a performance das redes desenvolvidas com essas diferentes entradas, pode-se avaliar se é mais relevante incluir informações dos elementos vizinhos ou aumentar a quantidade de termos computados da sequência SGC; e verificar se as informações fornecidas são suficientes, redundantes ou insuficientes para realizar o mapeamento desejado.



Figura 5.3 – Dados de Entrada Vetorizados e Empilhados

É necessário definir como lidar com as bordas dos domínios para as redes V9. Para o caso de minimização e complacência, deixa-se de avaliar a saída das redes para os elementos da borda do domínio retangular, conforme exemplificado na Figura 5.4 para uma malha de dimensões 7×7 . Assim, a malha de 32×60 é usada para definir 1740 (30×58) dados de entrada-saída por topologia. Para avaliar as diferentes redes em relação aos mesmos dados de saída, esses elementos de borda também são desconsiderados para as redes V1.



Figura 5.4 – Tratamento de Borda para o Problema de Minimização de Complacência

Para o caso de concepção de metamateriais, o entorno do domínio é preenchido (padding) de acordo com as condições de simetria e de periodicidade da célula de base, conforme exemplificado na Figura 5.5 para um domínio de projeto de dimensões 7 × 7. Dessa forma, cada topologia resulta em 1024 (32×32) dados de entrada-saída. As redes consideradas utilizam os dados representados matricialmente, portanto, cada elemento deve ter exatamente 8 vizinhos: 4 conectados por arestas e 4 conectados apenas por vértices. Contudo, no domínio de projeto em representação geométrica, o elemento superior direito tem 3 elementos conectados apenas por seu vértice superior direito e o elemento

inferior esquerdo não tem nenhum elemento conectado apenas por seu vértice inferior esquerdo. Para definir os dados em representação matricial de maneira apropriada, esses 3 vizinhos do elemento superior direito são condensados em um único elemento (o valor permanece o mesmo, já que todos correspondem à mesma variável de projeto); e um novo elemento é criado entre os vizinhos do elemento inferior esquerdo (o valor é o mesmo dos vizinhos, já que todos os elementos conectados ao vértice em questão correspondem à mesma variável de projeto).



Figura 5.5 – Tratamento de Borda para o Problema de Concepção de Metamateriais

5.1.4 Aumento de Dados

Assumindo que cada entrada S2-V9 contém informações suficientes para obter o valor de sensibilidade exato de cada elemento, tem-se que, necessariamente, as RNA devem ser invariantes em relação às rotações e espelhamentos ilustrados nas Figuras 5.6 e 5.7. Para garantir a propriedade de invariância e aumentar a capacidade de generalização das redes desenvolvidas, os dados são aumentados para incluir essas simetrias. Assim, para o problema de minimização de complacência, cada dado V9 original produz 8 dados de entradas simétricas e de mesma saída; e, para o problema de concepção de metamateriais, cada dado V9 produz 2 dados de entradas simétricas e de mesma saída.

Sendo Q a matriz de espelhamento dada por

$$\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$
(5.7)

e Z uma matriz qualquer de dimensões 3×3 , as simetrias consideradas podem ser expressas da seguinte maneira:

$$Z_0 = Z$$
 (identidade); (5.8)

$$Z_1 = Q Z$$
 (espelhamento das linhas); (5.9)

$$Z_2 = Z Q$$
 (espelhamento das colunas); (5.10)

$$\boldsymbol{Z_3} = \boldsymbol{Q} \, \boldsymbol{Z} \, \boldsymbol{Q} \quad (\text{rotação de 180}^o); \tag{5.11}$$

$$\mathbf{Z}_{4} = \mathbf{Z}^{T}$$
 (esp. linhas e rot. horária de 90°); (5.12)

$$Z_5 = Q Z^T$$
 (rotação anti-horária de 90°); (5.13)

$$\boldsymbol{Z_6} = \boldsymbol{Z}^T \boldsymbol{Q} \quad (\text{rotação horária de 90}^o); \tag{5.14}$$

$$Z_7 = Q Z^T Q$$
 (esp. linhas e rot. anti-horária de 90°). (5.15)



Figura 5.6 – Aumento de Dados para o Problema de Minimização de Complacência



Figura 5.7 – Aumento de Dados para o Problema de Concepção de Metamateriais

Conforme ilustrado, espera-se que as RNA relativas ao problema de minimização de complacência sejam invariantes em relação a essas 7 simetrias; e que as RNA relativas ao problema de concepção de metamateriais sejam invariantes em relação à simetria indicada como Z_7 (espelhamento das linhas, seguido por uma rotação anti-horária de 90°).

Após aumentar os dados, para o problema de minimização de complacência, obtêm-se 13 920 ($8 \times 30 \times 58$) dados de entrada-saída por topologia. No caso das redes com entradas S2-V9, cada dado de entrada-saída possui 27 valores de entrada e 1 valor de saída, armazenados no formato de 4-bytes. Isso significa que há 1,49 MB ($4 \times 28 \times 13$ 920 bytes) de dados por topologia. Os 1 000 arquivos do conjunto de dados contêm informações sobre 12 283 242 topologias, o que resultaria em 170 982 728 640 dados de entrada-saída, correspondentes a 17,42 TB. Como o disco de armazenamento disponível para a realização deste trabalho tem apenas 10 TB, somente se utilizou em torno de 10% desses 17,42 TB de dados no desenvolvimento das RNA: 17 099 328 000 dados de entrada-saída (1,74 TB), aleatorizados, ajustados, normalizados e reescalados, foram organizados em 100 arquivos de 17,84 GB, cada um deles referente a 12 284 topologias.

Da mesma maneira, para o problema de concepção de metamateriais, obtêm-se 2048 ($2 \times 32 \times 32$) dados de entrada-saída por topologia, para cada termo diagonal de C. Considerando a totalidade dos conjuntos (referentes a C_{00} , $C_{11} \in C_{22}$), há 6144 (3×2048) dados de entrada-saída por topologia. Para redes com entradas S2-V9, isso significa que há 672 kB ($4 \times 28 \times 6144$ bytes) de dados por topologia. Os 100 arquivos do conjunto de dados contêm informações sobre 630 922 topologias, o que resulta em 3 876 384 768 dados de entrada-saída, correspondentes a 404,34 GB.

Ao remover os dados com picos de sensibilidade (com valores pré-processados menores que -20 ou maiores que 20), obtêm-se **17 097 133 760** dados de entrada-saída (**1,74 TB**) para o problema de minimização de complacência e **3 843 966 960** dados de

entrada-saída (400,96 GB) para o problema de concepção de metamateriais.

Para o problema de minimização de complacência, os dados pré-processados têm os seguintes valores de mediana, média e desvio padrão: 0,50 (mediana SGC-0), 0,60 (mediana SGC-1), 0,63 (mediana SGC-2), 0,67 (mediana SW); -0,02 (média SGC-0), 0,21 (média SGC-1), 0,23 (média SGC-2), 0,59 (média SW); 0,85 (desvio padrão SGC-0), 0,60 (desvio padrão SGC-1), 0,56 (desvio padrão SGC-2) e 0,68 (desvio padrão SW).

Para o problema de concepção de metamateriais, os dados pré-processados têm os seguintes valores: 0,90 (mediana SGC-0), 1,05 (mediana SGC-1), 1,09 (mediana SGC-2), 1,15 (mediana SW); 0,11 (média SGC-0), 0,59 (média SGC-1), 0,86 (média SGC-2), 0,97 (média SW); 2,22 (desvio padrão SGC-0), 1,43 (desvio padrão SGC-1), 1,13 (desvio padrão SGC-2) e 0,81 (desvio padrão SW).

5.1.5 Conjuntos de Treinamento, de Validação e de Teste

Antes de definir os conjuntos de treinamento, de validação e de teste, deve-se verificar se há dados redundantes (repetição de dados) ou contraditórios (dados com as mesmas entradas mas com saídas distintas). Os dados S2-V9 foram considerados para essa verificação e utilizou-se como tolerância numérica o maior valor absoluto de sensibilidade exata multiplicado por 1×10^{-9} .

Para o caso de minimização de complacência, cada um dos 100 arquivos foi analisado separadamente (já que não seria possível analisar todos simultaneamente com apenas 128 GB de RAM). Em cada amostra, observou-se que mais que 99,9% dos dados são únicos. Considera-se aceitável esse nível de redundância (menor que 0,1%), já que ele não deve ser suficiente para enviesar as RNA. Em média, identificaram-se 3 dados contraditórios em cada amostra com 170 milhões de dados de entrada-saída. Essa quantidade muda com pequenas alterações da tolerância numérica, o que indica que os dados contraditórios correspondem a valores muito similares. Com isso, entende-se que os dados de entrada considerados são suficientes para definir o mapeamento desejado, já que entradas repetidas correspondem a saídas equivalentes (para 99,999999% dos dados de cada amostra), ou muito próximas (para 0,000001% dos dados de cada amostra).

Para o caso de concepção de metamateriais, também se observou que mais que 99,9% dos dados de cada amostra são únicos. Em média, identificaram-se 10 mil dados contraditórios em cada amostra com 40 milhões de dados de entrada-saída. Observou-se que todos os dados contraditórios correspondem a valores muito próximos de zero, o que indica que essas contradições estão relacionadas a imprecisões da aritmética de ponto flutuante. Com isso, entende-se que os dados de entrada considerados são suficientes para definir o mapeamento desejado, já que entradas repetidas correspondem a saídas equivalentes (para 99,975% dos dados de cada amostra), ou muito próximas (para 0,025%)

dos dados de cada amostra).

Como há diferenças substanciais entre os valores de sensibilidade dos elementos sólidos e os valores de sensibilidade dos elementos vazios, pode-se facilitar o desenvolvimento das RNA restringindo o conjunto a dados referentes apenas a elementos sólidos. As redes exclusivas para sólidos ainda poderiam ser usadas em problemas práticos pois, em métodos de densidade, a otimização é regida pela parte sólida da estrutura. Utiliza-se a nomenclatura "ES" para as redes treinadas apenas com dados de entrada referentes a elementos sólidos; e a nomenclatura "ET" para redes treinadas com a totalidade dos dados. Para que elementos vazios não estejam presentes nas entradas V9 das redes ES, restringem-se os dados aos correspondentes a elementos sólidos cujos 8 vizinhos são todos sólidos. Para avaliar as diferentes redes em relação aos mesmos dados de saída, essa mesma restrição é aplicada aos conjuntos de dados das redes ES-V1. Dessa maneira, a partir dos 100 arquivos de dados relativos às redes ET, extraem-se os 100 arquivos correspondentes, com o subconjunto de dados relativo às redes ES.

As Tabelas 5.1 e 5.2 apresentam os diferentes conjuntos de dados e seus respectivos tamanhos, considerando a soma dos 100 arquivos correspondentes a cada caso.

Tipo de Dados	Dimensão da Entrada	Quantidade de Dados	Tamanho do Conjunto
S0-V1-ES	1	7,65 bilhões	$57,03~\mathrm{GB}$
S0-V1-ET	1	17,10 bilhões	127,38 GB
S1-V1-ES	2	7,65 bilhões	$85,55~\mathrm{GB}$
S1-V1-ET	2	17,10 bilhões	191,08 GB
S2-V1-ES	3	7,65 bilhões	114,07 GB
S2-V1-ET	3	17,10 bilhões	$254,77 { m GB}$
S0-V9-ES	9	7,65 bilhões	$285,\!17~\mathrm{GB}$
S0-V9-ET	9	17,10 bilhões	$636,92~\mathrm{GB}$
S1-V9-ES	18	7,65 bilhões	$541,\!82~\mathrm{GB}$
S1-V9-ET	18	17,10 bilhões	1210,14 GB
S2-V9-ES	27	7,65 bilhões	798,48 GB
S2-V9-ET	27	17,10 bilhões	1783,37 GB

Tabela 5.1 – Conjuntos de Dados para o Problema de Minimização de Complacência

Enfim, os conjuntos de treinamento, de validação e de teste podem ser definidos. Neste trabalho, utilizam-se os 70 primeiros arquivos como conjunto de treinamento; os 15 arquivos seguintes como conjunto de validação; e os últimos 15 arquivos como conjunto de teste. Todos os arquivos têm tamanhos equivalentes, portanto é uma divisão de 70%, 15% e 15%.

Tipo de Dados	Dimensão da Entrada	Quantidade de Dados	Tamanho do Conjunto
S0-V1-ES	1	2,97 bilhões	22,11 GB
S0-V1-ET	1	3,84 bilhões	$28,64~\mathrm{GB}$
S1-V1-ES	2	2,97 bilhões	$33,16~\mathrm{GB}$
S1-V1-ET	2	3,84 bilhões	$42,96~\mathrm{GB}$
S2-V1-ES	3	2,97 bilhões	$44,21~\mathrm{GB}$
S2-V1-ET	3	3,84 bilhões	$57,28~\mathrm{GB}$
S0-V9-ES	9	2,97 bilhões	$110,53~\mathrm{GB}$
S0-V9-ET	9	3,84 bilhões	$143,20~\mathrm{GB}$
S1-V9-ES	18	2,97 bilhões	210,00 GB
S1-V9-ET	18	3,84 bilhões	$272{,}08~\mathrm{GB}$
S2-V9-ES	27	2,97 bilhões	$309,47~\mathrm{GB}$
S2-V9-ET	27	3,84 bilhões	400,96 GB

Tabela 5.2 – Conjuntos de Dados para o Problema de Concepção de Metamateriais

Destaca-se que os dados foram armazenados apenas para os casos com as maiores entradas (S2-V9-ES e S2-V9-ET). Para os treinamentos das redes com entradas menores, os arquivos são lidos e os subconjuntos apropriados são extraídos durante a execução. Os dados aumentados são idênticos para as redes V1, o que significa que há repetições de cada dado de entrada-saída, contudo, como os dados aumentados estão sempre nos mesmos arquivos, isso não prejudica as etapas de validação e de teste (os três conjuntos continuam sendo disjuntos). O único efeito prático dessa repetição de dados é que cada época de treinamento das redes V1 corresponde, em rigor, a múltiplas épocas. Ou seja, ao percorrer todos os arquivos durante o treinamento das redes V1, cada dado original é utilizado múltiplas vezes (8 vezes para o problema de minimização de complacência; 2 vezes para o problema de concepção de metamateriais).

5.2 Arquiteturas

Consideram-se apenas redes não-recorrentes (*feedfoward*) e completamente conectadas. Ou seja, o sinal se move sempre adiante, de camada em camada, e todos os neurônios de cada camada recebem o sinal de saída de todos os neurônios da camada imediatamente anterior. Mais especificamente, consideram-se três tipos de RNA: redes lineares; Máquinas de Aprendizado Extremo (MAE); e redes do tipo Perceptron Multicamadas (PMC).

Deve-se destacar que, apesar de os dados poderem ser arranjados matricialmente e de vizinhos serem considerados nas entradas V9, as redes consideradas não são redes neurais convolucionais (ZEILER; FERGUS, 2014). Em redes convolucionais profundas, a cada nova operação de convolução, informações de elementos cada vez mais distantes são obtidas. Contudo, ainda que a primeira camada das redes V9 possa ser compreendida como uma convolução, redes mais simples são consideradas neste trabalho, com as quais se tenta estimar a sensibilidade de cada elemento apenas com informações locais: referentes apenas ao elemento de interesse (nas redes V1); ou referentes apenas à vizinhança imediata do elemento de interesse (nas redes V9). Assim, para obter os mapas de sensibilidade de uma dada topologia usando as redes desenvolvidas, elas devem ser aplicadas independentemente a cada elemento da malha.

5.2.1 Perceptron Multicamadas (PMC)

As RNA consistem em uma composição de neurônios artificiais que, por sua vez, são modelos paramétricos que podem ser calibrados para extrair determinadas informações de um sinal de entrada. A Figura 5.8 apresenta os parâmetros do modelo Perceptron para o neurônio artificial (ROSENBLATT, 1958). A função de ativação π_d corresponde à função degrau:

$$\pi_d(v) = \begin{cases} 1, & \text{se } v \ge 0, \\ 0, & \text{se } v < 0. \end{cases}$$
(5.16)



Figura 5.8 – Neurônio Artificial (Perceptron)

O Perceptron é um classificador binário. Os parâmetros que podem ser ajustados durante o aprendizado de máquina são: os coeficientes da combinação linear (pesos sinápticos), t; e o limiar de ativação (*bias*), q. Quando a combinação linear das entradas é maior do que -q, o neurônio é ativado e retorna o valor 1; quando a combinação não é suficiente para ativar o neurônio, ele retorna o valor 0. Conforme ilustrado, o limiar de ativação pode ser entendido como o peso sináptico de uma entrada unitária constante.

Como o treinamento é feito através de métodos de gradiente, a função de ativação deve ser relaxada, para ela passe a ser diferenciável. Ou, ao menos, ela deve ser alterada para que existam derivadas finitas e não-nulas, de forma a habilitar o treinamento. Pode-se usar, por exemplo, uma função sigmoide, que corresponde a um degrau relaxado, retornando valores entre 0 e 1. Ademais, outros tipos de ativação são frequentemente utilizadas na literatura (RASAMOELINA *et al.*, 2020): a tangente hiperbólica, que também corresponde a um degrau relaxado, mas que retorna valores entre -1 e 1; a função ReLU (*Rectified Linear Unit*), que corresponde à função identidade para entradas positivas e à função nula para entradas negativas; a função ReLU com vazamento (*Leaky* ReLU), na qual a parte negativa da ReLU é transformada em uma função linear com um pequeno coeficiente angular ε_v (para que sua derivada deixe de ser nula para entradas negativas); e a função identidade (saída sem ativação), em que a saída corresponde simplesmente a uma combinação linear das entradas somada a uma constante. Destaca-se que as três últimas não correspondem a classificadores binários, já que as saídas passam a diferir não em relação ao estado (ativado ou desativado), mas em relação à intensidade.

A Figura 5.9 ilustra as diferentes funções de ativação consideradas. Respectivamente, as expressões da função sigmoide (π_s) , da tangente hiperbólica (π_t) , da ReLU (π_r) , da ReLU com vazamento (π_v) e da função identidade (π_I) são dadas por:

$$\pi_s(v) = \frac{1}{1 + e^{-v}} \tag{5.17}$$

$$\pi_t(v) = \frac{2}{1 + e^{-2v}} - 1 \tag{5.18}$$

$$\pi_r(v) = \max(0, v)$$
 (5.19)

$$\pi_v(v) = \max(0, v) + \varepsilon_v \min(0, v)$$
(5.20)

$$\pi_I(v) = v \tag{5.21}$$

As RNA são construídas fazendo-se uma composição de camadas de neurônios. A Figura 5.10 ilustra uma rede com 2 camadas ocultas e uma entrada de dimensão 3. Quando há mais de uma camada oculta, as RNA são chamadas de redes profundas. Em modelos de aprendizado profundo (*deep learning*), a sequência de camadas de processamento é usada para aprender diferentes representações dos dados com níveis diversos de abstração (LECUN *et al.*, 2015).

A saída da k-ésima camada $(\boldsymbol{b}^{[k]})$ corresponde à entrada da camada seguinte $(\boldsymbol{a}^{[k+1]})$. Os pesos sinápticos são armazenados em matrizes $\boldsymbol{T}^{[k]}$ e os valores de limiar são armazenados em vetores $\boldsymbol{q}^{[k]}$. Para uma dada função de ativação π , a seguinte computação é realizada em cada neurônio de cada camada:

$$b_i^{[k]} = \pi \left(q_i^{[k]} + \sum_j T_{ij}^{[k]} a_j^{[k]} \right)$$
(5.22)



Figura 5.9 – Funções de Ativação

Além dos parâmetros ajustados através do treinamento (cada $T^{[k]} \in q^{[k]}$), é preciso definir os hiperparâmetros das RNA para otimizar sua performance. Para a PMC, precisa-se definir: o número de camadas, o número de neurônios em cada uma delas e a função de ativação utilizada em cada neurônio.



Figura 5.10 – Perceptron Multicamadas

5.2.2 Máquina de Aprendizado Extremo (MAE)

Para avaliar os ganhos obtidos ao utilizar uma arquitetura mais complexa, casos particulares são considerados. Eles possuem menor capacidade de generalização, mas são mais fáceis de treinar. O primeiro caso particular considerado é a MAE (WANG *et al.*, 2022). Nesse tipo de rede, treina-se apenas a última camada. Todas as camadas anteriores são usadas para fazer algum mapeamento não-linear dos dados de entrada, que permanece fixo após ser definido.

Neste trabalho, considera-se a última camada linear. Define-se um conjunto de funções f_i que realizam determinadas transformações nos dados de entrada, então, a rede retorna uma combinação linear das saídas dessas funções (somada a uma constante), conforme ilustrado na Figura 5.11.

As seguintes funções são utilizadas:

$$f_i(a_0, a_1, \dots, a_{n-1}) = \operatorname{sinal}(a_{j_i}) \sqrt{|a_{j_i} a_{k_i}|}, \qquad (5.23)$$

onde a função de sinal é dada por

$$\operatorname{sinal}(a_{j_i}) = \begin{cases} 1, & \operatorname{se} \ a_{j_i} \ge 0, \\ -1, & \operatorname{se} \ a_{j_i} < 0. \end{cases}$$
(5.24)



Figura 5.11 – Máquina de Aprendizado Extremo

Sendo n o número de entradas da RNA, a quantidade de possibilidades para as funções f_i é dada pela quantidade de pares ordenados dessas n entradas, permitindo repetição. Portanto, as n entradas originais resultariam em n^2 valores, sendo que n deles corresponderiam às próprias entradas originais (obtidos quando $j_i = k_i$). Contudo, já que valores linearmente dependentes seriam produzidos para os conjuntos de dados ES (que contêm apenas entradas e saídas não-negativas), utilizam-se apenas funções tais que $j_i \ge k_i$, o que resulta em $\frac{n^2+n}{2}$ valores.

Utilizando todas as funções f_i sob tais condições, a dimensão de entrada das redes S2-V9 passa de 27 para 378; a das redes S1-V9 passa de 18 para 171; a das redes S0-V9 passa de 9 para 45; a das redes S2-V1 passa de 3 para 6; a das redes S1-V1 passa de 2 para 3; e a das redes S0-V1 permanece inalterada, igual a 1.

5.2.3 Regressão Linear

Para avaliar quanto os termos não-lineares considerados na MAE contribuem para realizar o mapeamento, um caso ainda mais particular é avaliado: redes lineares. Essas redes correspondem a uma regressão linear dos dados de entrada. Para um vetor de pesos sinápticos t e um valor de limiar q, a saída da rede é

$$\widetilde{b}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{t},q) = \boldsymbol{t} \cdot \boldsymbol{a} + q. \qquad (5.25)$$

Nesse caso, não há hiperparâmetros referentes à arquitetura, as dimensões são fixas, determinadas pelas dimensões de entrada e de saída da rede.

5.3 Treinamento

O treinamento das redes é realizado através de um procedimento de otimização. Deseja-se obter os parâmetros $T^{[k]}$ e $q^{[k]}$ que minimizam uma dada medida de erro. Neste trabalho, utiliza-se o Erro Quadrático Médio (EQM). Sendo N_c é o número de dados de entrada-saída considerados, $a^{\langle d \rangle}$ o d-ésimo dado de entrada, $b^{\langle d \rangle}$ sua saída esperada e \tilde{b} a saída computada pela rede, o EQM é definido como

$$\mathrm{EQM}(\boldsymbol{T}^{[k]}, \boldsymbol{q}^{[k]}) = \frac{1}{N_c} \sum_{d=0}^{N_c-1} \left[b^{\langle d \rangle} - \widetilde{b}(\boldsymbol{a}^{\langle d \rangle}, \boldsymbol{T}^{[k]}, \boldsymbol{q}^{[k]}) \right]^2.$$
(5.26)

Há diversas técnicas para reduzir problemas de sobreajuste em RNA (BEJANI; GHATEE, 2021), neste estudo, adotou-se a regularização ℓ^2 . De acordo com um parâmetro positivo λ , a soma dos quadrados de todos os pesos sinápticos da rede é penalizada para inibir a ocorrência de parâmetros com valores absolutos muito elevados. Isso melhora a função objetivo em termos de convexidade, já que resulta na adição de uma matriz semidefinida positiva à matriz hessiana. Assim, a função custo a ser minimizada é dada por

$$L(\boldsymbol{T}^{[k]}, \boldsymbol{q}^{[k]}) = \mathrm{EQM}(\boldsymbol{T}^{[k]}, \boldsymbol{q}^{[k]}) + \lambda \sum_{k} [\boldsymbol{T}^{[k]} : \boldsymbol{T}^{[k]}].$$
(5.27)

As redes mais simples (rede linear e MAE) podem ser treinadas através da resolução de um único sistema linear. Por sua vez, a rede PMC é treinada através de um algoritmo iterativo.

5.3.1 Método Direto

O desenvolvimento abaixo diz respeito tanto à rede linear quanto à MAE (com última camada linear), já que esta corresponde a uma rede linear com entradas modificadas. Para a MAE, chama-se de entrada o valor modificado, isto é, o valor de cada função f_i .

Para treinar uma rede linear com n entradas, primeiramente se organizam os N_c dados do conjunto de treinamento numa matriz de dimensões $N_c \times [n+1]$:

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & a_0^{\langle 0 \rangle} & a_1^{\langle 0 \rangle} & \dots & a_{n-1}^{\langle 0 \rangle} \\ 1 & a_0^{\langle 1 \rangle} & a_1^{\langle 1 \rangle} & \dots & a_{n-1}^{\langle 1 \rangle} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & a_0^{\langle N_c - 1 \rangle} & a_1^{\langle N_c - 1 \rangle} & \dots & a_{n-1}^{\langle N_c - 1 \rangle} \end{bmatrix}.$$
 (5.28)

Então, a função custo pode ser escrita como

$$L(\boldsymbol{t}_{\boldsymbol{q}}) = \frac{1}{N_c} \left[\boldsymbol{A} \, \boldsymbol{t}_{\boldsymbol{q}} - \boldsymbol{b} \right]^T \left[\boldsymbol{A} \, \boldsymbol{t}_{\boldsymbol{q}} - \boldsymbol{b} \right] + \boldsymbol{t}_{\boldsymbol{q}}^T \boldsymbol{\Lambda} \, \boldsymbol{t}_{\boldsymbol{q}} \,, \tag{5.29}$$

onde o vetor de parâmetros da rede, t_q ; o vetor de saídas esperadas, b; e a matriz de regularização, Λ , são dados por:

$$\boldsymbol{t}_{\boldsymbol{q}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{t} \end{bmatrix}; \qquad (5.30)$$
$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b^{\langle 0 \rangle} \\ b^{\langle 1 \rangle} \\ \vdots \\ b^{\langle N_{c}-1 \rangle} \end{bmatrix}; \qquad (5.31)$$
$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{0}^{T} \\ \boldsymbol{0} & \lambda \boldsymbol{I} \end{bmatrix}. \qquad (5.32)$$

Assim, o gradiente da função custo é dado por

$$\nabla L(\boldsymbol{t}_{\boldsymbol{q}}) = \left[\frac{2}{N_c}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} + 2\boldsymbol{\Lambda}\right]\boldsymbol{t}_{\boldsymbol{q}} - \frac{2}{N_c}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}.$$
 (5.33)

Ambas as componentes da matriz hessiana, $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \in \mathbf{\Lambda}$, são matrizes semidefinidas positivas, portanto, o problema considerado é convexo. Uma condição suficiente para que o problema seja estritamente convexo (e tenha solução única) é que a matriz \mathbf{A} tenha posto completo. O pior caso possui n = 378 entradas e mais de um bilhão de dados $(N_c > 1 \times 10^9)$, ou seja, a matriz \mathbf{A} , que possui mais de um bilhão de linhas, tem, no máximo 379 colunas. Para que essa matriz tenha posto completo, basta que existam 379 linhas linearmente independentes.

Conforme verificado numericamente para cada um dos casos, a matriz realmente tem posto completo. Logo, o problema é convexo e pode ser solucionado ao igualar o gradiente da função custo a zero. Para um dado valor de λ , a solução t_q^* é computada utilizando os dados do conjunto de treinamento:

$$\nabla L(\boldsymbol{t}_{\boldsymbol{q}}^{*}) = \boldsymbol{0} \Leftrightarrow \boldsymbol{t}_{\boldsymbol{q}}^{*} = \left[\frac{1}{N_{c}}\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{\Lambda}\right]^{-1} \left[\frac{1}{N_{c}}\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{b}\right].$$
(5.34)

Para obter o valor ótimo de λ , realiza-se uma busca em grade (em escala logarítmica) seguida de uma busca de bisseção. O critério dessa otimização é o valor do EQM para os dados do conjunto de validação, usando $t_q^*(\lambda)$ como os parâmetros da rede.

Dessa maneira, os treinamentos das redes lineares e das MAE consideradas são realizados solucionando alguns sistemas lineares de dimensão, no máximo, 379.

5.3.2 Método Baseado em Gradiente Estocástico

Para o treinamento das redes PMC, adota-se um método de gradiente descendente. Utiliza-se um gradiente estocástico, isto é, em cada passo, computa-se o gradiente apenas para uma subamostra dos dados (assume-se que a subamostra representa suficientemente o conjunto de treinamento). Em seguida, usando a informação desse gradiente estocástico, os parâmetros da rede são atualizados numa direção de descida da função custo L. Utiliza-se o algoritmo ADAM (Adaptive Moment Estimation) para atualizar a direção a cada passo (KINGMA; BA, 2014).

Utiliza-se a implementação disponível na biblioteca "tensorflow.keras", que executa os cálculos na unidade de processamento gráfico. Utilizou-se uma taxa de aprendizado de 0,0001. Os parâmetros padrão da biblioteca foram usados para a taxa de decaimento das estimativas de primeiro momento (0,9) e para a taxa de decaimento das estimativas de segundo momento (0,999). Para obter a derivada da função objetivo em relação a cada parâmetro da rede, a regra da cadeia é aplicada, a partir da última camada até chegar na primeira (retropropagação). Cada derivada é obtida numericamente, utilizando algoritmos de diferenciação automática.

Todos os valores de limiar são inicializados como 0,0. Os pesos sinápticos são inicializados camada a camada, usando a inicialização de Xavier (GLOROT; BENGIO, 2010): sendo n_e e n_s as dimensões de entrada e de saída da camada em questão, os pesos são inicializados aleatoriamente, a partir de uma distribuição normal de média 0,0 e variância

$$\operatorname{Var} = \frac{2}{n_e + n_s} \,. \tag{5.35}$$

Em cada época, os dados de cada um dos 70 arquivos do conjunto de treinamento são embaralhados e divididos em 2000 minilotes. Portanto, 140000 passos são realizados por época.

Antes de definir o valor do parâmetro de regularização λ , realiza-se uma busca para definir os hiperparâmetros da rede. Os hiperparâmetros são selecionados de acordo com a performance das redes em relação ao conjunto de treinamento. Nessa etapa, os treinamentos são feitos sem regularização ($\lambda = 0$) e, para cada configuração de número de camadas, número de neurônios e função de ativação, cinco redes com inicializações distintas são treinadas (para evitar que uma inicialização ruim prejudique a análise). Para a seleção dos hiperparâmetros, utiliza-se o melhor dos cinco resultados.

Após definir os hiperparâmetros, buscam-se valores apropriados para λ . Como os treinamentos das redes PMC demandam muito mais tempo do que os treinamentos das redes lineares e das MAE, adota-se outra estratégia para definir o parâmetro de regularização. Treina-se sem regularização ($\lambda = 0$), então, observando os valores do EQM e da soma dos quadrados dos pesos sinápticos para a rede treinada, define-se um valor candidato para λ . Esse valor é definido de forma que, para a rede treinada, a função custo L corresponda a três vezes o valor de EQM. Faz-se um treinamento com esse valor de λ e os efeitos da regularização são avaliados, comparando a performance no conjunto de treinamento com a performance no conjunto de validação. De acordo com os resultados, pode-se definir um novo candidato para λ . Esse processo é repetido até que um valor eficaz seja obtido. Na busca pelo valor ótimo λ^* , também se utiliza o melhor resultado de cinco treinamentos com inicializações distintas.

5.4 Testes de Performance

Após o treinamento, verifica-se se as propriedades de invariância (Figuras 5.6 e 5.7) foram extraídas com sucesso dos dados de treinamento. Para as redes lineares, isso pode ser facilmente observado ao arranjar matricialmente os pesos sinápticos obtidos e verificar as simetrias esperadas. Para as outras redes (MAE e PMC), as simetrias são verificadas através de experimentos numéricos.

Para cada RNA com entrada V9, a verificação numérica é feita traçando o gráfico da saída da rede para um conjunto de entradas parametrizadas. Esse conjunto corresponde a pontos uniformemente distribuídos entre uma entrada aleatória e uma entrada simétrica correspondente. Cada termo da entrada varia linearmente com um único parâmetro que vai de -1 (entrada gerada aleatoriamente) até 1 (entrada simétrica correspondente). Como a saída deve ser a mesma para entradas simétricas, o gráfico obtido para a interpolação deve corresponder a uma função par (exceto para os casos de rotações de 90°, sem espelhamento).

Para os casos de rotações de 90° horária e anti-horária, entradas interpoladas equidistantes de 0 não são simétricas, portanto, para esses dois casos, devem-se observar gráficos distintos dos de uma função par, mas que assumem o mesmo valor nas extremidades (em -1 e 1). Além disso, o gráfico relativo à rotação horária deve corresponder ao gráfico relativo à rotação anti-horária espelhado horizontalmente (em relação ao eixo vertical que passa pela origem).

Antes de realizar a análise de performance das redes, avalia-se o EQM referente

às estimativas SGC. Espera-se que as RNA desenvolvidas sejam capazes de melhorar essas performances de referência. Em seguida, mede-se a performance de cada uma das redes treinadas. Os conjuntos de teste ES (apenas com dados de elementos sólidos) e os conjuntos de teste ET (com dados tanto de elementos sólidos quanto de elementos vazios) são analisados separadamente.

De acordo com as performances observadas, seleciona-se a melhor RNA para o caso de minimização de complacência e a melhor RNA para o caso de concepção de metamateriais.

Usando as redes selecionadas, avalia-se a possibilidade de aprendizado por transferência entre os dois problemas considerados. Isso é feito verificando as performances das redes desenvolvidas para o problema de minimização de complacência nos conjuntos de teste do problema de concepção de metamateriais; e verificando as performances das redes desenvolvidas para o problema de concepção de metamateriais nos conjuntos de teste do problema de minimização de complacência. Deseja-se avaliar se as redes desenvolvidas para um problema possuem performances razoáveis no outro. Isso seria um indicativo de que os problemas considerados possuem similaridades suficientes para que técnicas de aprendizado por transferência possam ser utilizadas.

Por fim, avalia-se a capacidade de generalização das redes selecionadas em relação ao refinamento da malha. Para topologias fixas de uma viga engastada-livre e de uma célula de base, usando diferentes discretizações, comparam-se os resultados obtidos pelas abordagens SGC-0 e SGC-2 com os resultados obtidos utilizando as RNA desenvolvidas.

6 RESULTADOS

As abordagens de ASVF desenvolvidas foram aplicadas em problemas de minimização de complacência e em problemas de concepção de metamateriais. Os resultados apresentados na primeira seção deste capítulo compuseram dois artigos. O primeiro foi publicado na revista científica *Structural and Multidisciplinary Optimization*, que possui classificação A1 no sistema Qualis (2017-2020) na área de Engenharia Mecânica (Engenharias III) e fator de impacto de 4,3 (2021). O segundo está atualmente sendo revisado, ele foi submetido na revista científica *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, que possui classificação A1 no sistema Qualis (2017-2020) na área de Engenharia Mecânica (Engenharias III) e fator de impacto de 2,9 (2022).

O primeiro artigo, intitulado "Finite variation sensitivity analysis for discrete topology optimization of continuum structures" (CUNHA et al., 2021), contém o desenvolvimento das expressões de sensibilidade e os respectivos resultados para o caso de minimização de complacência mecânica. O segundo artigo, intitulado "Finite variation sensitivity analysis in the design of isotropic metamaterials through discrete topology optimization" (em revisão), contém o desenvolvimento das expressões de sensibilidade e os respectivos resultados para o caso de concepção de metamateriais. Além disso, a discussão da metodologia proposta e alguns resultados obtidos foram apresentados no trabalho intitulado "Finite variation sensitivity analysis: methods to perform accurate linearizations in discrete topology optimization problems". Ele foi exibido, em apresentação oral, na 15^a edição do World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimisation (WCSMO), que ocorreu em Cork, na Irlanda, em Junho de 2023.

Os programas de otimização topológica implementados foram usados para gerar os conjuntos de dados descritos. Algumas amostras dos dados gerados são apresentadas neste capítulo. Os códigos usados para gerar cada conjunto de dados foram disponibilizados em repositórios públicos do *GitHub*. Os códigos referentes ao caso de minimização de complacência em uma viga engastada-livre estão em <https://github.com/Joquempo/ Cantilever-Dataset>; e os códigos referentes ao caso de otimização da célula de base de um metamaterial estão em <https://github.com/Joquempo/Metamaterial-Dataset>.

Destaca-se que, no caso da viga engastada-livre, também foram disponibilizados códigos que geram dados utilizando um método de densidade contínuo. Utilizou-se o esquema SIMP para relaxar o problema e o método das assíntotas móveis para resolver a otimização através de PCS. Contudo, esse conjunto de dados não foi utilizado neste trabalho, já que o tema central da tese é o desenvolvimento de análises de sensibilidade para problemas de variáveis binárias.

Por fim, as RNA propostas foram desenvolvidas e suas performances foram

avaliadas. A melhor rede obtida foi usada para abordar um problema realista de concepção de metamateriais isotrópicos, utilizando uma malha refinada.

6.1 Análises de Sensibilidade

Apresentam-se resultados para ilustrar as vantagens das abordagens propostas para a análise de sensibilidade. As abordagens foram comparadas em termos da precisão dos valores de sensibilidade; e de seus efeitos nas otimizações, em relação à efetividade e à estabilidade dos processos. Estruturas bidimensionais em estado plano de tensões foram consideradas.

6.1.1 Problemas de Minimização de Complacência

Para demonstrar como uma análise de sensibilidade mais precisa pode melhorar os processos de otimização, o caso elaborado em Zhou e Rozvany (2001) é considerado. A estrutura, apresentada na Figura 6.1, consiste em dois pórticos, um horizontal e um vertical. Há uma carga total de 6 N/m distribuída nas arestas dos três elementos da face direita, e uma carga total de 1 N/m distribuída na aresta de um elemento da face inferior.



Figura 6.1 – Estrutura de Dois Pórticos

Para obter um caso em que a otimização por PLIS com a análise de sensibilidade convencional resulta em uma estrutura muito distante da solução ótima, Zhou e Rozvany (2001) utilizaram uma malha grosseira, com apenas 100 elementos, e um material com coeficiente de Poisson igual a zero. O módulo de Young e as arestas dos elementos quadrados têm valores unitários. Deseja-se minimizar a complacência mecânica da estrutura, o valor prescrito para a fração de volume é de $V_f^* = 40\%$ e altera-se um único elemento por vez ($D_f^{\text{max}} = \delta V_f^{\text{max}} = 1\%$). Filtros e métodos de momento não são utilizados. Ao considerar uma topologia inicial completamente sólida ($V_f(\bar{x}^{(0)}) = 100\%$), tem-se $C(\bar{x}^{(0)}) = 194.4 J/m$.

A Figura 6.2 mostra que, já na primeira iteração, a abordagem convencional (ICPO) produz um resultado muito inferior ao que seria obtido utilizando valores de sensibilidade exatos. Elementos sólidos são representados em preto, elementos vazios são representados em cinza, o índice "a" é usado para se referir ao elemento vazio da Figura 6.2(a) e o índice "b" é usado para se referir ao elemento vazio da Figura 6.2(b). Nas Figuras 6.3 e 6.4, as linearizações produzidas pelas abordagens ICAO e SGC são apresentadas para os elementos "a" e "b", cujos valores de densidade são denotados x_a e x_b . O comportamento das funções relaxadas com uma interpolação linear também é apresentado. Na legenda, o número ao lado da sigla ICAO indica sua ordem (ICPO corresponde a ICAO-1); e o número ao lado da sigla SGC indica quantos passos foram realizados. Na Figura 6.3, as linearizações não são linhas retas pois o eixo horizontal está em escala logarítmica.



Figura 6.2 – Estruturas de Dois Pórticos com $V_f = 99\%$



Figura 6.3 – Linearizações da Complacência em Relação a x_a

A relaxação contínua de $C(x_b)$ é relativamente bem comportada. A abordagem ICPO produz um resultado razoável e, para ordens um pouco mais elevadas, a abordagem ICAO gera valores de sensibilidade precisos. A abordagem SGC também gera valores precisos com uma pequena quantidade de passos. Por outro lado, $C(x_a)$ tem comportamentos local e global muito distintos. Quando a densidade x_a está próxima de 1, sua variação tem pouca influência na complacência mecânica. Quando ela se torna menor que 0,01, o efeito da desconexão do pórtico vertical aparece como uma variação abrupta de complacência, a qual não pode ser prevista por uma análise de sensibilidade local. A abordagem ICAO resulta em valores razoáveis apenas para ordens acima de 1000. E, para obter valores razoáveis, a abordagem SGC precisa de aproximadamente metade do número máximo de passos do MGC, que produziria o resultado exato.



Figura 6.4 – Linearizações da Complacência em Relação a x_b

Ao realizar a otimização com valores de sensibilidade exatos, o resultado apresentado na Figura 6.5 é obtido. Como predições exatas são usadas, cada iteração produz uma topologia com aumento mínimo de complacência. A desconexão do pórtico vertical foi prevenida com sucesso. Deve-se notar que alguns efeitos não-físicos estão presentes devido ao tipo de elemento finito utilizado: elementos conectados apenas por seus nós não afetam negativamente a rigidez da estrutura; os três elementos da face direita têm um carregamento distribuído em suas arestas, ainda assim, o elemento do meio pode ser removido sem produzir uma singularidade.

Após remover todos exceto um dos elementos centrais do pórtico horizontal, o programa é forçado a remover um elemento crítico. Ele quebra o componente horizontal inferior, já que isso resulta em uma ganho de complacência menor do que quebrar o componente horizontal superior ou o pórtico vertical. O momento de quebra pode ser facilmente identificado no gráfico da função objetivo no decorrer das iterações, corresponde ao ponto onde há um crescimento abrupto de complacência.

O resultado obtido é pior do que a solução apresentada em Zhou e Rozvany (2001). No geral, em métodos de otimização iterativos, para obter a melhor solução pos-

sível, o chute inicial deve estar dentro da bacia de atração de um ótimo global. De certa forma, isso também é verdade para métodos discretos, um caminho de topologias sucessivas é gerado e seu ponto final sempre dependerá do ponto inicial. Foi mostrado que, quando o processo de otimização começa de uma estrutura completamente sólida, a sucessão de variações topológicas com ganho mínimo de complacência não leva ao ótimo desejado. Entretanto, quando a otimização com valores de sensibilidade exatos começa da topologia inicial apresentada na Figura 6.6, a solução de referência é obtida.



Figura 6.5 – Otimização da Estrutura de Dois Pórticos com $V_f(\bar{\boldsymbol{x}}^{(0)}) = 100\%$



Figura 6.6 – Otimização da Estrutura de Dois Pórticos com $V_f(\bar{\boldsymbol{x}}^{(0)}) = 91\%$

O comportamento do problema pode ser melhorado ao utilizar uma malha mais refinada, com parâmetros de otimização apropriados. Uma malha de 25 600 elementos foi considerada, obtida remalhando cada elemento grosseiro como 16 × 16 elementos refinados de dimensões 0,0625 × 0,0625. Otimizações foram realizadas partindo de uma estrutura completamente sólida e da topologia inicial apresentada na Figura 6.6. Um filtro de sensibilidade de raio $r_f = 0,2$ e um parâmetro de momento de $\gamma = 50\%$ foram utilizados. O valor máximo para a redução de fração de volume em cada iteração foi de $\delta V_f^{\text{max}} = 0,5\%$;

e o valor máximo para a fração de variação topológica foi de $D_f^{\text{max}} = 4,5\%$ nas iterações com variação de volume e de $D_f^{\text{max}} = 4,0\%$ nas iterações com volume constante. A abordagem convencional foi utilizada: ICPO com fator de penalização de $p_C = 1 \times 10^{-6}$, para os valores de sensibilidade dos elementos vazios. A Figura 6.7 apresenta os resultados obtidos.



Figura 6.7 – Estrutura de Dois Pórticos com Malhas Refinadas

Duas soluções distintas são obtidas, mas que possuem o mesmo valor de complacência mecânica. O refinamento da malha não apenas permite que o método distribua as variações topológicas pelo domínio, mas também melhora o comportamento geral da função objetivo em relação a cada variável de projeto. Uma forma de observar esse efeito é através dos mapas de $||A_i||_2$ para diferentes malhas (Equações 3.19 e 3.21), mostrados na Figura 6.8 para estruturas completamente sólidas. Como apresentado na Equação 3.116, esses valores definem limites superiores para o erro das estimativas de sensibilidade.

O valor médio de $||A_i||_2$ vai de 0,83, na malha com 100 elementos, para 0,64 na malha com 25 600 elementos. Elementos em cantos têm normas próximas de 1,00, o que significa que o erro das estimativas é praticamente ilimitado; elementos em arestas livres têm normas abaixo de 1,00, mas ainda relativamente elevadas; elementos internos à estrutura têm normas abaixo de 0,70; e elementos na aresta engastada têm os menores valores de norma, em torno de 0,50. Isso está relacionado ao potencial que cada elemento tem em desconectar uma carga dos suportes da estrutura. Um elemento de canto sempre pode produzir uma singularidade: se houver uma carga no canto e o elemento for removido, o deslocamento do nó do canto iria para infinito. Quando a malha é refinada, a razão entre elementos nas interfaces e elementos internos à estrutura é reduzida, então o comportamento geral da função objetivo é melhorado. Deve-se destacar que, apesar de todo elemento de interface ter um valor elevado de limite superior para o erro, isso não significa que o erro será necessariamente elevado.



Figura 6.8 – Mapas de $\|\boldsymbol{A}_i\|_2$ para Diferentes Malhas

Na Figura 6.9, os mapas de sensibilidade são apresentados para a estrutura completamente sólida, na malha de 100 elementos e na malha de 25 600 elementos, obtidos através das abordagens ICPO, SGC-2 e SW (valores exatos). Como valores de sensibilidade exatos vão para infinito nos elementos de canto carregados, esses elementos não foram considerados nas análises. Pode-se observar que o comportamento altamente não-linear dos elementos do pórtico vertical desaparece na malha refinada. Na malha de 25 600 elementos, a abordagem ICPO produz valores de sensibilidade coerentes e a abordagem SGC produz resultados muito satisfatórios. Como se pode notar, os valores de sensibilidade assumem valores absolutos menores em malhas refinadas, já que a influência individual de cada elemento é reduzida quando os elementos são menores.





Para as estruturas completamente sólidas com diferentes refinamentos de malha, a Figura 6.10 apresenta a progressão do erro relativo, dado pela norma ℓ^2 do vetor de erros dividida pela norma ℓ^2 do vetor de sensibilidades exato. Na legenda, o asterisco indica que a abordagem SGC foi utilizada sem pré-condicionamento (M = I). Na malha mais grosseira, o erro relativo ficou em torno de 100% para todos os casos, isso ocorre devido aos valores elevados de erro para os elementos do pórtico vertical. A partir da segunda malha (400 elementos) até a última (25 600 elementos), o erro relativo de cada caso decai como um monômio de expoente fixo (os gráficos em escala logarítmica variam de maneira aproximadamente linear).



Figura 6.10 – Erro Relativo para Diferentes Malhas

Em todas as abordagens, incluindo a convencional (ICPO), o erro das estimativas foi reduzido com o refinamento da malha. Isso significa que, conforme a malha é refinada, a função objetivo relaxada se torna "mais linear" (sua aproximação de primeira ordem se torna mais precisa) em relação a cada variável de projeto. Além disso, ao utilizar a abordagem proposta (SGC), há uma melhora substancial nos valores de erro e em suas taxas de decaimento com o refinamento da malha. Para a malha mais refinada, mesmo usando um único passo do MGC sem pré-condicionamento, o erro foi reduzido de mais de 50% para em torno de 30%, em comparação com a abordagem convencional.

O segundo caso de minimização de complacência considerado é apresentado na Figura 6.11. A viga engastada-livre é discretizada em uma malha de 32×20 elementos quadrados e a topologia inicial possui uma fração de volume de $V_f(\bar{\boldsymbol{x}}^{(0)}) = 50\%$.

Na Figura 6.12, linearizações produzidas pela ASVF são apresentadas para três elementos da extremidade engastada: o primeiro elemento sólido a partir do topo (elemento "c"); o elemento vazio imediatamente acima dele (elemento "b"); e o próximo elemento vazio acima (elemento "a"). O gráfico da função relaxada com uma interpolação linear também é apresentado.

Pode-se notar que as três funções relaxadas são bem comportadas e um pequeno número de passos do MGC é necessário para obter valores de sensibilidade precisos.



Figura 6.11 – Viga Engastada-Livre

A abordagem convencional (ICPO) sem fator de penalização ($p_C = 1$) resulta em valores de sensibilidade imprecisos para elementos vazios, especialmente elementos vazios desconectados da estrutura.

A Figura 6.13 apresenta a otimização da viga, usando valores de sensibilidade exatos. Ela foi realizada com uma fração de volume fixa $V_f(\bar{\boldsymbol{x}}^{(j)}) = V_f^* = 50\%$. O valor máximo para a fração de variação topológica foi de $D_f^{\text{max}} = 4,4\%$ (28 elementos). Filtros e métodos de momento não foram utilizados. A estrutura de complacência mínima foi obtida na 29^a iteração, após isso, as topologias oscilam até o critério de parada ser atingido.

Considerando a abordagem SGC, a Figura 6.14 apresenta o número mínimo de passos para atingir diferentes critérios de precisão, para cada topologia obtida na otimização realizada. Os critérios são: o elemento sólido com o menor valor absoluto de sensibilidade estar corretamente classificado; o vetor de sensibilidades possuir um erro relativo menor que 50%; e o vetor de sensibilidades possuir um erro relativo menor que 10%. Apenas elementos sólidos foram considerados nessa análise.

Observa-se que, nesse problema, apenas dois passos (SGC-2) já são suficientes para manter o erro relativo sempre abaixo de 50%. Em todas as iterações, quando o erro estava abaixo de 50%, ao menos 4,4% dos elementos sólidos foram corretamente classificados; quando o erro estava abaixo de 10%, ao menos 32,1% dos elementos sólidos foram corretamente classificados.

O erro relativo usando a norma ℓ^2 dos vetores é uma boa medida para avaliar o comportamento geral do vetor de sensibilidades. Contudo, destaca-se que, mesmo quando esse erro é pequeno, elementos com valores de sensibilidade próximos ainda podem ser incorretamente classificados, em comparação com a classificação baseada nos valores de sensibilidade exatos.

Filtros de sensibilidade não foram usados para que os valores de sensibilidade correspondessem de fato a variações da função objetivo. Por essa razão, topologias com tabuleiros de xadrez foram obtidas. Evidentemente, para que estruturas otimizadas apro-


Figura 6.12 – Linearizações para a Viga Engastada-Livre

priadas sejam obtidas, o procedimento de filtragem é essencial. Ao incluir um filtro de raio $r_f = 3 mm$ na otimização, a topologia apresentada na Figura 6.15 é obtida.

O terceiro caso de minimização de complacência considerado é apresentado na Figura 6.16. O domínio de projeto é discretizado em uma malha de 300×100 elementos quadrados e uma estrutura completamente sólida é usada como topologia inicial.

Nesse caso, com 30 000 elementos, não é viável realizar a análise de sensibilidade exata. A otimização foi feita com a abordagem convencional, ICPO com $p_C = 0$, e com a abordagem proposta, SGC-2 com $p_C = 1$. O valor prescrito para a fração de volume foi











Figura 6.15 – Vigas Engastadas-Livres Otimizadas

de $V_f^* = 50\%$; valor máximo para a redução de fração de volume em cada iteração foi de $\delta V_f^{\max} = 1\%$; e o valor máximo para a fração de variação topológica foi de $D_f^{\max} = 5\%$ nas iterações com variação de volume e de $D_f^{\max} = 4\%$ nas iterações com volume constante.



Figura 6.16 – Viga Biapoiada

Um filtro de sensibilidade de raio $r_f = 40 \, mm$ e um parâmetro de momento de $\gamma = 50\%$ foram utilizados. O parâmetro de paciência foi de $\psi = 20$.

A Figura 6.17 mostra os resultados obtidos, o número entre parênteses corresponde ao número da iteração de cada topologia otimizada. As vigas completas são apresentadas, em malhas de 600 × 100 elementos. Observa-se que a quantidade de iterações foi semelhante para ambas as abordagens, contudo, o resultado obtido usando a abordagem SGC-2 teve uma performance superior (redução de 2% na complacência). Além disso, o resultado obtido mostra que a abordagem proposta é mais robusta do que a abordagem convencional, que não é capaz de realizar a otimização sem a penalização dos valores de sensibilidade dos elementos vazios. Se a ICPO é utilizada com $p_C = 1$, o processo de otimização produz estruturas degeneradas.



Figura 6.17 – Vigas Biapoiadas Otimizadas

Para diferentes malhas, a Figura 6.18 apresenta os tempos médios de execuções individuais das principais tarefas do processo de otimização: a resolução do sistema linear; a aplicação do filtro de sensibilidade; e a ASVF. A viga biapoiada foi considerada em malhas de 1875, 7500, 30000, 120000, 480000 e 1920000 elementos no domínio de projeto. Tudo foi executado de maneira serial e o tempo médio de 10 execuções independentes foi utilizado como resultado. Regressões lineares foram realizadas para avaliar como cada tarefa escala com o refinamento da malha, os expoentes obtidos estão apresentados na legenda. Como esperado, há um balanço entre precisão e custo computacional. Na implementação atual, para a malha de 30 000 elementos, cada análise SGC-2 leva em torno de 40 vezes mais tempo que cada análise ICPO. Ainda assim, o tempo para executar toda a otimização continua sendo regido pelo tempo gasto solucionando sistemas lineares. E, em malhas refinadas, o custo de aplicar o filtro de sensibilidade também ultrapassa o custo da análise SGC-2. Ambas as abordagens escalam linearmente com o refinamento da malha, além disso, as análises de sensibilidade são tarefas perfeitamente paralelizáveis.



Figura 6.18 – Tempos de Execução das Principais Tarefas

Portanto, as expressões SGC apresentadas são viáveis para serem utilizadas em problemas práticos de otimização topológica. Para malhas finas o bastante para que o tempo de execução possa ser uma limitação, o aumento de tempo ao utilizar SGC-2 ao invés de ICPO é irrelevante, enquanto que o ganho em precisão é substancial e pode melhorar a efetividade e a estabilidade dos procedimentos de otimização.

6.1.2 Problemas de Concepção de Metamateriais

Nos problemas de concepção de metamateriais, não se tem garantia que a abordagem SGC seja sempre superior à abordagem convencional (ICPO Simples). De toda forma, é razoável esperar que, em geral, a ICPO Composta seja superior à ICPO Simples e que a SGC seja superior à ICPO Composta. Espera-se que estimativas melhores de ΔC_{00} e ΔC_{22} produzam resultados mais precisos para $\boldsymbol{\alpha}^{[h_{\nu}]} \in \boldsymbol{\alpha}^{[\hat{E}]}$.

Para avaliar a precisão de cada abordagem, esses vetores de sensibilidade são computados para diferentes malhas, considerando uma célula sólida com um único furo hexagonal em seu centro, de aresta $\frac{L_x}{8} \approx 0.03878 \, m$. Apenas os valores de sensibilidade de

elementos sólidos são avaliados e os valores exatos são computados através da abordagem SW.

Quando o problema de otimização topológica é solucionado por PLIS, as seguintes métricas são relevantes para medir a qualidade dos valores de sensibilidade da função objetivo: o coeficiente de correlação de Spearman; a Taxa de Classificações Corretas (TCC) dos sinais dos valores de sensibilidade; e a TCC dos elementos com os maiores valores absolutos de sensibilidade.

O coeficiente de Spearman mede quão correta está a ordenação dos elementos baseada em seus valores de sensibilidade. Ele assume valores entre -1,0 (completamente incorreto) e 1,0 (completamente correto).

A TCC dos sinais dos valores de sensibilidade mede a quantidade de elementos que tiveram seus comportamentos qualitativos corretamente classificados. Isto é, mede quantos elementos que possuem valores de sensibilidade positivos realmente aumentam a função objetivo ao serem transformados em sólidos; e quantos elementos que possuem valores de sensibilidade negativos realmente diminuem a função objetivo ao serem transformados em sólidos. Elementos com valores de sensibilidade próximos de zero são desconsiderados nessa análise.

A TCC dos elementos com os maiores valores absolutos de sensibilidade mede quantos elementos que possuem valores de sensibilidade elevados foram corretamente identificados. Os elementos que estão entre os 5% com os maiores valores absolutos de sensibilidade são avaliados: verifica-se quantos deles estão de fato entre os 5%, quando valores exatos de sensibilidade são considerados.

Considerando a abordagem convencional (ICPO Simples) e a proposta (SGC-2), a Figura 6.19 apresenta essas três medidas de precisão de $\alpha^{[h_{\nu}]}$, para diferentes refinamentos de malha. Utilizou-se $\hat{\nu}^* = 0,0$ como valor prescrito para o coeficiente de Poisson. Variou-se o número de elementos quadrilaterais na célula ($N_t = 6 N_d$) de 1536 a 786264.

Observa-se que todas as métricas melhoraram quando a abordagem proposta foi utilizada. Nas duas abordagens, malhas mais refinadas resultaram em valores superiores para o coeficiente de Spearman. Quando a SGC-2 foi usada no lugar da ICPO Simples, para todos os refinamentos, o coeficiente de Spearman aumentou em mais de 0,2; e as TCC dos sinais e dos elementos de sensibilidade elevada aumentaram em mais de 12,5%.

Por sua vez, uma métrica relevante para medir a qualidade dos valores de sensibilidade de uma função de restrição é o erro relativo do vetor de sensibilidades, dado pela norma ℓ^2 do vetor de erros absolutos dividida pela norma ℓ^2 do vetor de sensibilidades exato.

Considerando a abordagem convencional (ICPO Simples) e a proposta (SGC-



Figura 6.19 – Medidas de Precisão para $\boldsymbol{\alpha}^{[h_{\nu}]}$

2), a Figura 6.20 apresenta essa medida de erro de $\alpha^{[\hat{E}]}$, para diferentes refinamentos de malha.

Mais uma vez, a métrica considerada melhorou quando a abordagem proposta foi utilizada. Quando a SGC-2 foi usada no lugar da ICPO Simples, para todos os refinamentos, o erro relativo foi consistentemente reduzido, de valores próximos a 55% para valores em torno de 15%.

Esses resultados indicam que a abordagem proposta é substancialmente mais precisa do que a abordagem convencionalmente usada na literatura. Ela fornece mais informação para o algoritmo decidir como atualizar a topologia em cada iteração, o que deve melhorar a efetividade e a estabilidade do procedimento de otimização.



Figura 6.20 – Medida de Erro para $\boldsymbol{\alpha}^{[\hat{E}]}$

Para ilustrar os efeitos desse ganho de precisão, algumas otimizações foram realizadas. Em todos os casos, as propriedades do material de base são $\nu = 0,3$ e E = 1,0 Pa, o módulo de Young mínimo é de 10% ($\hat{E}^{\min} = 0,1 Pa$) e o parâmetro de soft-kill é de $p_k = 1 \times 10^{-9}$.

Primeiramente, considerando uma malha de $N_d = 256$ variáveis de projeto $(N_t = 1536 \text{ elementos quadrilaterais})$, as otimizações foram realizadas alterando o estado de um único elemento aumentado em cada iteração $(D_f^{\text{max}} = \frac{1}{256})$. Filtros, operadores morfológicos e métodos de momento não foram utilizados. Além disso, o parâmetro de penalidade da fração de volume foi de $\beta = 1 \times 10^{-9}$, a redução de módulo de Young em cada iteração não foi limitada ($\delta \hat{E}^{\text{max}} = 1,0 Pa$) e os valores de sensibilidade dos elementos vazios não foram penalizados $(p_h = p_E = 1)$. Nessas condições, se a análise de sensibilidade for suficientemente precisa, a convergência da PLIS para um mínimo local é garantida.

A Figura 6.21 mostra a otimização realizada usando valores exatos de sensibilidade, para um valor prescrito de $\hat{\nu}^* = 0,0$. Utilizou-se a topologia inicial dada na Figura 4.2 e um parâmetro de paciência de $\psi = 5$. Ao realizar apenas passos ótimos, temse que o coeficiente de Poisson homogeneizado se aproxima mais do valor prescrito em cada iteração, então, quando o valor ótimo é atingido, a estrutura é mantida inalterada até que o critério de parada seja atingido.

Resultados para valores prescritos de $\hat{\nu}^* = -0.3$, $\hat{\nu}^* = 0.0$ e $\hat{\nu}^* = 0.6$ são apresentados na Figura 6.22, para duas topologias iniciais diferentes: a estrutura com três furos losangulares (linha de cima); e uma estrutura completamente sólida (linha de baixo).

Os valores prescritos foram obtidos com sucesso em cinco dos seis casos. A estrutura completamente sólida é um mínimo local quando o objetivo é aumentar o coeficiente de Poisson homogeneizado, em outras palavras, qualquer alteração de um único elemento aumentado reduziria o valor de Poisson. Assim, para esse caso, nenhuma alteração foi realizada e o programa retornou essa solução subótima.



Figura 6.21 – Otimização Usando Valores Exatos de Sensibilidade $(N_d = 256)$

As topologias da primeira e última iterações da Figura 6.21, com $\hat{\nu}^* = 0,0$, foram usadas para comparar os mapas de sensibilidade obtidos usando diferentes abordagens. A Figura 6.23 apresenta $\alpha^{[h_{\nu}]}$ para a topologia inicial, obtido utilizando as abordagens ICPO Simples, SGC-0, SGC-1, SGC-2 e SW (valores exatos). Na primeira linha, a escala é linear e é a mesma para todos os mapas de cores. Na segunda linha, os mesmos mapas de sensibilidade são apresentados, mas uma escala não-linear independente é definida para cada um, para melhorar a resolução de contraste das figuras.

Uma comparação quantitativa é apresentada na Figura 6.24, o coeficiente de

Spearman foi computado para cada aproximação, considerando todos os elementos (barras à esquerda, em azul) e considerando somente os elementos sólidos (barras à direita, em laranja). As abordagens ICPO Simples e SGC-0 produziram resultados similares, ambas com diferenças consideráveis em relação aos valores exatos. As abordagens SGC-1 e SGC-2 produziram resultados mais precisos. Comparando SGC-1 com SGC-2, pode-se observar um ganho de precisão substancial ao realizar um segundo passo na abordagem SGC.



Figura 6.22 – Soluções Otimizadas Usando Valores Exatos de Sensibilidade ($N_d = 256$)



Figura 6.23 – Mapas de $\boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{h}_{\boldsymbol{\nu}}]}$ para a Topologia Inicial ($N_d=256$)

As mesmas comparações são apresentadas nas Figuras 6.25 e 6.26 para a topologia final. Percebe-se que a abordagem convencional (ICPO Simples) falha em prever valores de sensibilidade razoáveis quando o coeficiente de Poisson homogeneizado está próximo do valor prescrito, ela produz valores de sensibilidade próximos de zero para todos os elementos, resultando em coeficientes de Spearman muito distantes de 1,0. Para essa topologia, a abordagem SGC-0, que possui custos computacionais equivalentes aos da abordagem convencional, já foi suficiente para obter valores elevados para o coeficiente de Spearman. Isso reforça a importância de um desenvolvimento sistemático para as expressões de sensibilidade quando métodos de otimização topológica discretos são considerados. Análises de sensibilidade adequadas devem ser realizadas, ao invés de simplesmente diferenciar funções relaxadas para reusar expressões que foram desenvolvidas para métodos contínuos.



Figura 6.24 – Precisão de $\boldsymbol{\alpha}^{[\boldsymbol{h}_{\boldsymbol{\nu}}]}$ para a Topologia Inicial ($N_d = 256$)



Figura 6.25 – Mapas de $\pmb{\alpha}^{[\pmb{h}_{\pmb{\nu}}]}$ para a Topologia Final ($N_d=256)$

Essa análise foi repetida para os valores de sensibilidade da função de restrição, $\alpha^{[\hat{E}]}$. Ao invés de computar o coeficiente de Spearman, o erro relativo foi usado para a comparação quantitativa. Os resultados são apresentados nas Figuras 6.27 e 6.28 para a topologia inicial, e nas Figuras 6.29 e 6.30 para a topologia final.

Para a topologia inicial, mais uma vez, as abordagens ICPO Simples e SGC-0 produziram resultados similares, e a precisão aumentou substancialmente conforme mais passos foram realizados na abordagem SGC. Os valores de sensibilidade dos elementos sólidos foram mais precisos que os valores obtidos para os elementos vazios.



Figura 6.26 – Precisão de $\boldsymbol{\alpha}^{[h_{\nu}]}$ para a Topologia Final ($N_d = 256$)



Figura 6.27 – Mapas de $\boldsymbol{\alpha}^{[\hat{E}]}$ para a Topologia Inicial ($N_d = 256$)

Para a topologia final, apesar de a ordenação dos valores de sensibilidade terem sido razoáveis, os valores obtidos para os elementos vazios foram muito distantes dos valores exatos. Para os elementos vazios, SGC-0 reduziu o erro total de um valor próximo a 500% para um valor próximo a 400%, SGC-2 reduziu esse valor para um número abaixo de 250%. Ainda que esses erros sejam elevados, deve-se notar que a otimização é geralmente regida pela parte sólida da estrutura, especialmente quando valores mais precisos de sensibilidade são utilizados. Os valores de sensibilidade dos elementos vazios que não estão diretamente conectados à estrutura devem ser próximos de zero. Assim, apenas elementos vazios de interface podem ter valores de sensibilidade relevantes e influenciar como a topologia será alterada. Ademais, a malha considerada pode explicar parcialmente esses valores elevados de erro. Algumas imprecisões podem ser agravadas em malhas grosseiras, já que a análise de sensibilidade tenta prever os efeitos de alterar um volume maior da estrutura.



Figura 6.28 – Erro de $\boldsymbol{\alpha}^{[\hat{E}]}$ para a Topologia Inicial ($N_d = 256$)



Figura 6.29 – Mapas de $\pmb{\alpha}^{[\hat{\pmb{E}}]}$ para a Topologia Final (N_d = 256)

Para avaliar a performance das aproximações em predizer as variações das funções objetivo e de restrição, ICPO Simples e SGC-2 foram usadas para otimizar a célula de base para um valor prescrito de $\hat{\nu}^* = 0,0$, alterando apenas um elemento aumentado por iteração, sem filtros de sensibilidade, operadores morfológicos e métodos de momento. Respectivamente, as Figuras 6.31 e 6.32 mostram as otimizações realizadas usando as abordagens ICPO Simples e SGC-2. O parâmetro de paciência foi de $\psi = 10$. Em ambas as otimizações, a restrição de módulo de Young mínimo foi respeitada em todas as iterações.

A otimização realizada com ICPO Simples falhou em obter o valor prescrito. Ela começou reduzindo o valor de Poisson mas, após obter um valor menor do que o valor prescrito, um passo muito ineficiente foi realizado, o que aumentou o coeficiente de Poisson para em torno de 0,25. Depois disso, o programa começou a fazer e desfazer a mesma alteração na topologia, produzindo um comportamento oscilatório.



Figura 6.30 – Erro de $\boldsymbol{\alpha}^{[\hat{\boldsymbol{E}}]}$ para a Topologia Final ($N_d = 256$)



Figura 6.31 – Otimização Usando ICPO Simples ($N_d = 256$)

Por sua vez, a otimização realizada com SGC-2 atingiu o valor prescrito. Como esperado nessas condições, ao usar valores precisos de sensibilidade, uma evolução efetiva e estável foi obtida.

As mesmas otimizações foram realizadas utilizando uma estrutura completamente sólida como topologia inicial, as soluções obtidas são apresentadas na Figura 6.33. Para essa estrutura inicial, os valores de sensibilidade ICPO Simples são praticamente os mesmos para todos os elementos, assim, quando essa abordagem é utilizada, realizase uma alteração de topologia arbitrária na primeira iteração da otimização. Após isso, a otimização pode realizar passos mais bem informados e melhorar a função objetivo. Entretanto, nesse caso, o programa começou a fazer e desfazer a mesma alteração na topologia, produzindo um comportamento oscilatório, apesar de o coeficiente de Poisson estar distante do valor prescrito. Isso significa que depois de alterar o elemento com o maior valor de sensibilidade, ele se tornou o elemento com o menor valor de sensibilidade, portanto, aproximações muito imprecisas foram obtidas em ao menos um dos vetores de sensibilidade computados nessas duas iterações (possivelmente nos dois). Esse é o pior comportamento possível, já que tal imprecisão impede uma exploração apropriada do domínio de soluções possíveis, interrompendo o processo de otimização. Assim como no caso anterior, ao usar as aproximações mais precisas da abordagem SGC-2, o coeficiente de Poisson prescrito foi obtido com sucesso.



Figura 6.32 – Otimização Usando SGC-2 ($N_d = 256$)



Figura 6.33 – Soluções Otimizadas para uma Topologia Inicial Sólida ($N_d = 256$)

Os resultados apresentados para essa malha grosseira são promissores, contudo, eles foram obtidos usando uma configuração de parâmetros muito específica, pouco usual. Na prática, deseja-se alterar mais elementos em cada iteração para reduzir custos computacionais e melhorar a explorabilidade do domínio de soluções possíveis. Além disso, filtros de sensibilidades e operadores morfológicos devem ser incluídos para lidar com o problema de dependência de malha e evitar estruturas demasiadamente complexas, de difícil manufatura. Ao fazer isso, torna-se mais difícil garantir que uma solução próxima da ótima seja obtida e que o procedimento iterativo seja razoavelmente estável. O problema considerado é muito sensível a todos os parâmetros e pequenas mudanças na topologia produzem grandes mudanças nas propriedades homogeneizadas. Os valores de sensibilidade aprimorados podem tornar a otimização mais robusta, de forma que seja mais fácil calibrar os parâmetros para obter soluções efetivas.

Assim, as análises ICPO Simples, SGC-2 e SW (exata) foram usadas para otimizar a célula de base para um valor prescrito de $\hat{\nu}^* = 0,0$. Agora, foram considerados: filtros de sensibilidade de raio $r_f = 0,068 \, m$; operadores morfológicos de raio $r_m = 0,034 \, m$; e um parâmetro de momento de $\gamma = 70\%$ para os valores de sensibilidade da função objetivo. Ademais, $D_f^{\text{max}} = \frac{1}{64}$ (4 elementos aumentados), $\beta = 0,06, \,\delta \hat{E}^{\text{max}} = 0,008 \, Pa$ e $\psi = 40$.

As soluções estão apresentadas na Figura 6.34. Com essa configuração de parâmetros, ambos os resultados usando SGC-2 e SW atingiram o valor prescrito. Mais do que isso, as duas estruturas obtidas têm os atributos desejáveis que são esperados em soluções práticas: não há tabuleiros de xadrez; não há ilhas sólidas desconectadas; as cavidades têm tamanhos razoáveis. Mais uma vez, a otimização usando ICPO Simples não foi capaz de atingir o valor prescrito.



Figura 6.34 – Soluções Otimizadas com Parâmetros Usuais ($N_d = 256$)

Todos os resultados obtidos para essa malha grosseira sugerem que aprimorar as expressões de sensibilidade resulta em procedimentos mais robustos e soluções melhores, mais próximas de topologias ótimas.

Otimizações também foram realizadas para uma malha refinada, com $N_d =$ 16384 variáveis de projeto ($N_t = 98304$ elementos quadrilaterais).

Geralmente, fatores de penalização $(p_h e p_E)$ são aplicados para reduzir o valor de sensibilidade dos elementos vazios. Esse procedimento é razoável já que, em uma malha refinada, a maior parte dos elementos vazios deve ter valores de sensibilidade próximos de zero. Contudo, diferentemente do que ocorre nos problemas de minimização de complacência, mesmo na abordagem ICPO Simples (que geralmente precisa desses fatores para produzir resultados satisfatórios), observou-se que fatores de penalização pequenos tornam o processo menos estável. Os resultados observados indicam que isso ocorre pois, quando os valores de sensibilidade dos vazios são penalizados, os valores de sensibilidade dos sólidos próximos às interfaces são reduzidos pela operação de filtragem. Isso faz com que, para esses elementos, valores de sensibilidade subestimados sejam obtidos para a função de restrição. Essas subestimativas resultam em maiores reduções do módulo de Young homogeneizado em cada iteração. A restrição é quebrada mais rapidamente, assim, os operadores de dilatação são aplicados com maior frequência, produzindo uma evolução errática das propriedades homogeneizadas no decorrer do procedimento de otimização.

Esse comportamento está ilustrado na Figura 6.35, na qual os valores de sensibilidade dos elementos vazios foram totalmente penalizados ($p_h = p_E = 0$), e na Figura 6.36, na qual não há penalização ($p_h = p_E = 1$). Em ambos os casos, ICPO Simples foi usada para realizar a ASVF; o valor prescrito para o coeficiente de Poisson foi de $\hat{\nu}^* = -0.3$; o raio dos filtros de sensibilidades foi de $r_f = 0.016 m$; o raio dos operadores morfológicos foi de $r_m = 0.008 m$; o parâmetro de momento foi de $\gamma = 50\%$; o valor máximo para a fração de variação topológica em cada iteração foi de $D_f^{\text{max}} = \frac{1}{128}$ (128 elementos aumentados); o parâmetro de penalidade da fração de volume foi de $\beta = 0.06$; o valor máximo para a redução de módulo de Young em cada iteração foi de $\delta \hat{E}^{\text{max}} = 0.016 Pa$; e o parâmetro de paciência foi de $\psi = 40$.



Figura 6.35 – Otimização usando ICPO Simples com $p_h = p_E = 0$ ($N_d = 16384$)



Figura 6.36 – Otimização usando ICPO Simples com $p_h = p_E = 1$ ($N_d = 16384$)

Observa-se que, quando não há penalização nos valores de sensibilidade dos vazios, o valor máximo para a redução de módulo de Young ($\delta \hat{E}^{\max} = 0.016 Pa$) é respeitado com maior frequência, ou seja, o modelo linearizado estima com mais precisão como a função de restrição varia no modelo real. Isso faz com que o módulo de Young se mantenha acima do valor mínimo por mais iterações, resultando em um procedimento mais estável. Assim, nos casos seguintes, os valores de sensibilidade dos elementos vazios não foram penalizados ($p_h = p_E = 1$). Destaca-se que a redução máxima de módulo de Young é sempre respeitada em cada subproblema linearizado, as reduções maiores que esse limite ocorrem apenas no problema não-linear original.

O problema considerado é muito sensível a todos os parâmetros e há uma grande quantidade de ótimos locais que são soluções igualmente válidas. Ao calibrar os raios dos filtros de sensibilidades e operadores morfológicos, resultados satisfatórios foram obtidos para todas as expressões de sensibilidade apresentadas neste trabalho. Isso significa que mesmo a abordagem convencional (ICPO Simples) pode ser suficiente para realizar as otimizações, se os parâmetros forem suficientemente calibrados. Ainda assim, expressões de sensibilidade aprimoradas podem contribuir nesse processo, melhorando a robustez dos procedimentos de otimização e produzindo uma exploração mais efetiva do domínio de soluções possíveis.

Ao reduzir os raio dos filtros de sensibilidades e o parâmetro de momento, as otimizações com ICPO Simples algumas vezes ficam presas em torno de mínimos locais. Esse problema pode ser agravado pelos operadores morfológicos, já que suas perturbações podem desfazer alterações realizadas após a resolução de cada subproblema linear inteiro. Tal comportamento pode ser evitado ao utilizar valores de sensibilidade precisos, como verificado nos exemplos seguintes, otimizados para um valor prescrito de $\hat{\nu}^* = 0.6$, sem filtros de sensibilidade e métodos de momento, com operadores morfológicos de raio $r_m = 0.008 \, m$.

No resultado apresentado na Figura 6.37, a abordagem ICPO Simples foi usada para realizar a ASVF. O procedimento de otimização falhou em atingir o valor prescrito para o coeficiente de Poisson. Além disso, observam-se platôs na curva de evolução, o que indica que as topologias começaram a oscilar em torno de um mínimo local, fazendo com que a função objetivo estagnasse em torno de um valor insatisfatório.



Figura 6.37 – Otimização usando ICPO Simples sem Filtros e Mom. $(N_d = 16384)$

No resultado apresentado na Figura 6.38, a abordagem SGC-2 foi usada para realizar a ASVF. O procedimento de otimização conseguiu atingir o valor prescrito para o coeficiente de Poisson. A curva de evolução obtida exibe um comportamento desejável, com o coeficiente de Poisson oscilando em torno do valor prescrito. Com isso, diferentes topologias candidatas foram obtidas durante a exploração do domínio de soluções possíveis.

Outros exemplos foram considerados para avaliar a melhora de robustez obtida ao utilizar valores de sensibilidade mais precisos. As otimizações seguintes foram feitas para um valor prescrito de $\hat{\nu}^* = -0.3$, com filtros de sensibilidades de raio $r_f = 0.016 m$, sem métodos de momento e operadores morfológicos. Para visualizar melhor as soluções, ilhas sólidas desconectadas foram removidas das topologias finais.



Figura 6.38 – Otimização usando SGC-2 sem Filtros e Mom. $(N_d = 16\,384)$

No resultado apresentado na Figura 6.39, a abordagem ICPO Simples foi usada para realizar a ASVF. Novamente, o procedimento falhou em atingir o valor prescrito para o coeficiente de Poisson. Nesse caso, ao invés de oscilar em torno de um mínimo local, o programa continuou explorando o domínio de soluções possíveis, mas ele não foi capaz de melhorar a função objetivo satisfatoriamente.



Figura 6.39 – Otimização usando ICPO Simples sem Mom. e Op. Morf. ($N_d = 16384$)

No resultado apresentado na Figura 6.40, a abordagem SGC-2 foi usada para realizar a ASVF. O procedimento conseguiu atingir o valor prescrito para o coeficiente de Poisson. Esses resultados mostram que as expressões de sensibilidade mais precisas podem melhorar os procedimentos de otimização, tornando-os mais robustos. Quando análises de sensibilidade precisas são realizadas, os parâmetros podem ser calibrados com mais facilidade, produzindo soluções efetivas mesmo que a configuração de parâmetros não seja ideal.



Figura 6.40 – Otimização usando SGC-2 sem Mom. e Op. Morf. $(N_d = 16\,384)$

Durante o desenvolvimento deste estudo, uma variedade de resultados foi obtida, alguns deles são apresentados na Figura 6.41. Para essa malha, três valores foram considerados para o coeficiente de Poisson prescrito: $\hat{\nu}^* = -0.3$; $\hat{\nu}^* = 0.0$; e $\hat{\nu}^* = 0.6$. Como já foi dito, pode-se observar que o problema considerado é muito sensível e que há diversos mínimos locais igualmente válidos, o que cria dificuldades aos programas de otimização. Reforça-se assim a importância de aprimoramentos como os apresentados neste trabalho, que reduzem incertezas ao realizar linearizações mais precisas na PLIS.

Observando as estruturas otimizadas, pode não ficar claro como seria o comportamento cinemático das células de base em uma estrutura real, em outras palavras, pode não ficar claro como uma estrutura composta por um padrão periódico dessas células exibiria as propriedades homogeneizadas computadas. Para entender melhor os resultados, o comportamento qualitativo de algumas células da Figura 6.41 foi analisado. Para realizar tal análise, o problema apresentado na Figura 6.42 foi considerado, a região mais clara corresponde a uma estrutura composta por um padrão periódico de células e as regiões mais escuras correspondem a corpos rígidos usados para impor valores fixos de deslocamento nas extremidades esquerda e direita.

Como se realiza apenas uma análise qualitativa, um pequeno número de células foi considerado, usado principalmente para reduzir efeitos de borda na célula central. Ainda assim, essa estrutura com um pequeno número de células já corresponde a um sistema com 1 577 986 graus de liberdade. A Figura 6.43 apresenta os resultados para três células otimizadas diferentes e para uma célula completamente sólida.



Figura 6.41 – Diversas Células Otimizadas ($N_d = 16384$)



Figura 6.42 – Estrutura Composta por Células Periódicas

Na Figura 6.44, apresentam-se as células centrais dos casos considerados, em suas configurações não-deformadas e deformadas. Na direita, apresentam-se apenas seus contornos e algumas linhas horizontais, traçadas para comparar as alturas das células nãodeformadas e deformadas. Como esperado, quando o coeficiente de Poisson é negativo, a altura aumenta quando uma tração horizontal é aplicada; quando o coeficiente é próximo de zero, a altura é mantida praticamente constante; quando o coeficiente é positivo, a altura diminui; e quando ele é positivo, com um valor maior, a altura diminui ainda mais.



Figura 6.43 – Estruturas Compostas por Células Periódicas Deformadas

Para realizar uma análise quantitativa com uma estrutura heterogênea tal que as propriedades homogeneizadas fossem obtidas, a estrutura precisaria ser composta por um grande número de células, o que pode ser computacionalmente proibitivo. O propósito



da análise apresentada é apenas ilustrar o comportamento geral das células selecionadas e mostrar, por outro prisma, que as otimizações foram efetivas.

Figura 6.44 – Células Deformadas e seus Comportamentos Qualitativos

No problema considerado, no qual se impõe simetria diedral D_3 na célula hexagonal, as matrizes locais necessárias para realizar a análise SGC-2 têm dimensões de até 192 × 192 (no caso sem simetria, em que cada variável de projeto corresponderia a um único elemento quadrilateral, essas matrizes teriam dimensões de, no máximo, 32 × 32). Apesar de essas matrizes serem esparsas, na implementação atual usada para desenvolver o método, matrizes densas foram usadas, o que aumenta substancialmente os recursos computacionais necessários para realizar essa tarefa. Além do aprimoramento da eficiência do programa, pode-se ainda, em implementações futuras, utilizar estratégias similares à usada em Barbarosie *et al.* (2017), onde o custo computacional de problemas simétricos é reduzido ao resolver vários sistemas lineares pequenos em um único subdomínio simétrico, ao invés de resolver um sistema linear grande no domínio completo. Assim, entende-se que, para avaliar se a abordagem desenvolvida é viável para uso prático, é suficiente mostrar que a implementação atual não possui custos computacionais proibitivos.

Para diferentes malhas, a Tabela 6.1 apresenta os tempos medianos de execu-

ções individuais das principais tarefas do processo de otimização: a resolução do sistema linear; a aplicação dos filtros de sensibilidade; a resolução do subproblema linear inteiro; e a ASVF. A estrutura com um único furo hexagonal no centro foi utilizada, em malhas de 1536, 3174, 6144, 12150, 24576, 49686, 98304, 196566, 393216 e 786264 elementos quadrilaterais. Tudo foi executado de maneira serial e o tempo mediano de 11 execuções independentes foi utilizado como resultado.

				-	
N_t	ICPO	SGC-2	Filtragem	Subprob. Linear	Sist. Linear
1 536	$6,8 \times 10^{-5}$	$2,5 \times 10^{-2}$	$5,2 \times 10^{-5}$	$1,6 \times 10^{-2}$	1.0×10^{-2}
3174	$1,4 \times 10^{-4}$	$5,3 imes 10^{-2}$	$7,8 \times 10^{-5}$	$4,\!4\times10^{-2}$	$2{,}4\times10^{-2}$
6 1 4 4	$2,5 \times 10^{-4}$	$1,0 \times 10^{-1}$	$1,3 \times 10^{-4}$	$4,1 \times 10^{-2}$	$5,1 \times 10^{-2}$
12 150	$5,1 \times 10^{-4}$	$2,0 imes 10^{-1}$	$3,8 \times 10^{-4}$	$1,1 \times 10^{-1}$	$1,1\times 10^{-1}$
24576	$1,1 \times 10^{-3}$	$4{,}0\times10^{-1}$	$1,2 \times 10^{-3}$	$1,3 \times 10^{-1}$	$2{,}4\times10^{-1}$
49 686	$2,2 \times 10^{-3}$	$8,2 \times 10^{-1}$	$4,6 \times 10^{-3}$	$2,3\times 10^{-1}$	$3,7 \times 10^{-1}$
98 304	$5,0 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^0$	$1,7 \times 10^{-2}$	$4,6 \times 10^{-1}$	$8,6 \times 10^{-1}$
196566	$1,1 \times 10^{-2}$	$3,2 \times 10^0$	$6,9 \times 10^{-2}$	$9,3 imes 10^{-1}$	$2,0 \times 10^0$
393 216	$2,3 \times 10^{-2}$	$6,4 \times 10^0$	$3,1 \times 10^{-1}$	$2,7 \times 10^{0}$	$4,5 \times 10^0$
786 264	$5,0 \times 10^{-2}$	$1,3 \times 10^1$	$1,1 \times 10^{0}$	$3,8 \times 10^1$	$1,1 \times 10^1$

Tabela 6.1 – Tempo de Execução das Principais Tarefas (em segundos)

Na implementação atual, cada análise SGC-2 leva em torno de 300 vezes mais do que cada análise ICPO. Exceto para a malha mais refinada, o tempo de cada iteração do processo de otimização praticamente dobraria ao utilizar a abordagem proposta (SGC-2) ao invés da convencional (ICPO). Ainda assim, ambas as abordagens são perfeitamente paralelizáveis e escalam linearmente com o refinamento da malha. Enquanto que a operação de filtragem escala de maneira quadrática; a resolução do sistema linear escala com um expoente entre 1 e 2; e a resolução do subproblema linear inteiro escala mais do que todas as outras tarefas, como observado para a malha mais refinada.

Num uso prático, o programa seria executado de maneira paralela, o que reduziria o tempo das análises de sensibilidade em ao menos uma ordem de grandeza. Isso significa que, mesmo na implementação subotimizada atual, considerando a malha de 786 264 elementos quadrilaterais, o tempo que seria gasto em cada iteração para realizar a análise SGC-2 seria da ordem de um segundo. O impacto computacional em utilizar a abordagem proposta ao invés da convencional está dentro de margens razoáveis e, portanto, afirma-se que a abordagem SGC-2 é adequada para ser utilizada em problemas práticos de concepção de metamateriais isotrópicos.

6.2 Amostras dos Dados Gerados

Os programas desenvolvidos foram usados para gerar conjuntos de dados para os treinamentos das RNA. Todos os dados produzidos durante os procedimentos de otimização foram armazenados, o que permite o uso dos conjuntos de dados em outras aplicações além da considerada aqui, de computação de valores de sensibilidade precisos. Para ilustrar o conteúdo dos conjuntos gerados, algumas amostras são apresentadas nesta seção.

6.2.1 Dados para Minimização de Complacência

Considerando uma malha de $N_d = 2\,048$ elementos, 148 240 otimizações foram realizadas em uma viga engastada-livre com diferentes condições de contorno, utilizando o algoritmo BESO para solucionar cada subproblema da PLIS.

Primeiramente, apresentam-se os resultados para uma viga usual, com a aresta esquerda completamente engastada e uma carga pontual no centro da extremidade direita. O que corresponde a $p_{bc} = 0.0 m$, $r_{bc} = 0.5 m$, $p_{ld} = 0.0 m$ e $r_{ld} = 0.0 m$.

Na Figura 6.45, pode-se notar que a fração de volume progride de 100% até 50% em 32 iterações, em uma taxa constante de 1,5625%. Como esperado, o valor da função objetivo aumenta enquanto o volume está sendo reduzido. Alguns picos ocorrem quando componentes estruturais são rompidos, alterando a topologia da viga. Depois de atingir o volume prescrito, a função objetivo é reduzida, por fim, ela oscila até que o critério de parada seja atingido. Esse é um caso bem comportado, no qual 62 iterações foram realizadas. Uma vez que um parâmetro de paciência de $\psi = 20$ foi usado, a solução otimizada corresponde à topologia da 42^a iteração.

A solução otimizada, da 42^a iteração, é apresentada na Figura 6.46. Para informar quais elementos estão engastados e quais estão carregados, duas colunas adicionais foram incluídas ao lado das arestas esquerda e direita do domínio de projeto. Na coluna adicional da esquerda, um elemento em branco indica que ambos os nós de sua aresta direita estão irrestritos; um elemento em cinza claro indica que um nó de sua aresta direita está restrito; e um elemento em cinza escuro indica que ambos os nós de sua aresta direita estão restritos. Na coluna adicional da direita, um elemento em branco indica que não há carga em nenhum nó de sua aresta esquerda; um elemento em cinza claro indica que um nó de sua aresta esquerda está carregado; e um elemento em cinza escuro indica que ambos os nós de sua aresta esquerda estão carregados. Dentro do domínio de projeto (excluindo as colunas adicionais), elementos em branco correspondem a vazios e elementos em preto correspondem a sólidos.

Além dos valores da função objetivo e da fração de volume, os vetores de topologia e de sensibilidade de cada iteração são armazenados. A Figura 6.47 mostra a

topologia (em cima, à esquerda), o mapa de sensibilidade SGC-0 (em cima, à direita), o mapa de sensibilidade SGC-1 (no meio, à direita), o mapa de sensibilidade SGC-2 (em baixo, à direita) e o mapa de sensibilidade SW (em baixo, à esquerda) para a 32^a iteração. Para atualizar a topologia em cada iteração, utilizam-se os valores de sensibilidade exatos, dados pelo mapa de sesibilidade SW. Como esperado, pode-se notar que a precisão das aproximações SGC aumenta conforme mais passos são considerados (de 0 até 2).



Figura 6.45 – Evolução das Funções na Otimização de uma Viga Usual



Figura 6.46 – Solução da Otimização de uma Viga Usual (it. 42)

Os vetores de deslocamentos de cada iteração também são armazenados. A Figura 6.48 mostra a estrutura da 32^a iteração deformada. Os valores de deslocamento foram reescalados para melhorar a visualização.



Figura 6.47 – Topologia e Mapas de Sensibilidade para uma Viga Usual (it. 32)



Figura 6.48 – Viga Usual Deformada (it. 32)

Para observar os efeitos de alterar cada uma das entradas $(p_{bc}, r_{bc}, p_{ld}, r_{ld})$, apresentam-se as topologias otimizadas obtidas com três parâmetros fixos e o quarto parâmetro variando com incrementos mínimos.

Os resultados apresentados na Figura 6.49 foram obtidos variando a posição central da área engastada na viga engastada-livre. Um único elemento é engastado, então há 32 (N_y) valores possíveis para p_{bc} . A carga é aplicada na metade inferior da aresta direita, então $p_{ld} = -0.25 m$ e $r_{ld} = 0.25 m$. Como apenas entradas não-redundantes são consideradas no conjunto de dados, alguns dos resultados apresentados tiveram que ser espelhados em relação ao eixo horizontal, os resultados espelhados estão identificados com asteriscos (topologias com índices de 16 a 31).



Figura 6.49 – Topologias Otimizadas para Diferentes Valores de p_{bc}

Os resultados apresentados na Figura 6.50 foram obtidos variando a meiaaltura da área engastada na viga engastada-livre. A região engastada é centralizada no meio da aresta, então há 16 $\left(\frac{N_y}{2}\right)$ valores possíveis para r_{bc} . A carga é aplicada na metade inferior da aresta direita, então $p_{ld} = -0.25 m$ e $r_{ld} = 0.25 m$.



Figura 6.50 – Topologias Otimizadas para Diferentes Valores de r_{bc}

Os resultados apresentados na Figura 6.51 foram obtidos variando a posição central da área carregada na viga engastada-livre. Para posições centrais sobre um nó, uma carga pontual foi considerada. Para posições centrais entre dois nós, ambos os nós são carregados. Então, há 65 $(2 N_y + 1)$ valores possíveis para p_{ld} . A restrição mecânica é aplicada na metade inferior da aresta esquerda, então $p_{bc} = -0.25 m$ e $r_{bc} = 0.25 m$.



Figura 6.51 – Topologias Otimizadas para Diferentes Valores de p_{ld}

Os resultados apresentados na Figura 6.52 foram obtidos variando a meiaaltura da área carregada na viga engastada-livre. A região carregada é centralizada no meio da aresta, então há 17 $\left(\frac{N_y}{2} + 1\right)$ valores possíveis para r_{ld} . A restrição mecânica é aplicada na metade inferior da aresta esquerda, então $p_{bc} = -0.25 m$ e $r_{bc} = 0.25 m$.

O caso que levou mais iterações para atingir o critério de parada precisou de 360 iterações e tem como parâmetros de entrada: $p_{bc} = -0.234375 m$; $r_{bc} = 0.031250 m$; $p_{ld} = -0.109375 m$; e $r_{ld} = 0.312500 m$. A Figura 6.53 apresenta a evolução da função objetivo e da fração de volume no decorrer da otimização e a Figura 6.54 apresenta as topologias de algumas iterações. A topologia otimizada está identificada com um asterisco.

O pico da função objetivo, que ocorre na 31^a iteração, corresponde a uma alteração muito ineficiente da topologia. Nessa iteração, um componente estrutural importante é rompido. Geralmente, quando isso acontece, o material restante do componente é rapidamente removido, já que ele deixa de contribuir para a rigidez da estrutura.



Figura 6.52 – Topologias Otimizadas para Diferentes Valores de r_{ld}



Figura6.53– Evolução das Funções para o Caso com 360 Iterações

Nesse caso, a alteração abrupta da topologia não foi suficiente para alterar o mínimo local que estava sendo rodeado pelo algoritmo. Assim, o programa lentamente recuperou o componente rompido no decorrer das iterações seguintes. O método consi-

derado pode remover material da estrutura com muito mais facilidade do que ele pode readicionar material. Além disso, para que o procedimento seja estável, valores pequenos são usados para D_f^{max} . O que explica porque mais de 300 iterações foram necessárias para produzir o resultado otimizado.



Figura 6.54 – Topologias para o Caso com 360 Iterações

Um dos casos que levou menos iterações para atingir o critério de parada precisou de 52 iterações e tem como parâmetros de entrada: $p_{bc} = -0.078125 m$; $r_{bc} = 0.312500 m$; $p_{ld} = 0.234375 m$; e $r_{ld} = 0.093750 m$. A Figura 6.55 apresenta a evolução da função objetivo e da fração de volume no decorrer da otimização e a Figura 6.56 apresenta as topologias de algumas iterações. A topologia otimizada está identificada com um asterisco.

Nos problemas considerados para a geração do conjunto de dados, 52 iterações corresponde ao menor número possível. Significa que, dentre as topologias com $V_f = V_f^* = 50\%$, a topologia com o menor valor de complacência foi obtida na 32^a iteração, que é a primeira iteração na qual a estrutura possui o valor de fração de volume prescrito. Como se pode observar, uma convergência rápida ocorre porque um componente estrutural importante é rompido na 33^a iteração. Nesse caso, isso foi suficiente para alterar o mínimo local que estava sendo rodeado pelo algoritmo. Como o novo mínimo é pior que o anterior, a estrutura da 32^a iteração foi retornada como solução.

O conjunto de dados completo, contendo os resultados das 148240 otimizações, corresponde a 579 GB de dados. Os programas utilizados estão disponíveis no repositório público: <https://github.com/Joquempo/Cantilever-Dataset>. No repositório, há uma documentação mais detalhada que informa como os programas funcionam e como eles devem ser utilizados para gerar o conjunto de dados.



Figura 6.55 – Evolução das Funções para o Caso com 52 Iterações



Figura 6.56 – Topologias para o Caso com 52 Iterações

6.2.2 Dados para Concepção de Metamateriais

Considerando uma malha de $N_d = 1024$ variáveis de projeto ($N_t = 6144$ elementos quadrilaterais), 18382 otimizações foram realizadas na célula de base de um metamaterial isotrópico com diferentes valores de propriedades prescritas, utilizando o algoritmo simplex combinado com ramificar-e-limitar para solucionar cada subproblema da PLIS.

Observa-se que, na documentação produzida para o conjunto de dados, o valor

de módulo de Young homogeneizado é apresentado em termos relativos, como uma porcentagem do módulo de Young do material de base. De qualquer maneira, os valores são equivalentes já que a propriedade do material de base é de E = 1,0 Pa.

Para ilustrar o tamanho do conjunto de dados, as propriedades homogeneizadas de todas as topologias geradas são apresentadas na Figura 6.57. Há 1374656 topologias armazenadas no conjunto gerado, contudo, em torno de metade delas tem propriedades muito similares (ou idênticas). No gráfico de dispersão apresentado, os pontos correspondem a 616862 topologias com propriedades homogeneizadas únicas.



Figura 6.57 – Propriedades de Todos os Metamateriais Gerados

Pode-se observar que topologias com módulos de Young próximos de 100% têm coeficientes de Poisson próximos de 0,3, que é a propriedade do material de base. Valores mais extremos são obtidos para o coeficiente de Poisson conforme valores menores são considerados para o módulo de Young. Quando os módulos de Young estão próximos de 0%, obtêm-se coeficientes de Poisson de valores próximos de -1,0 até valores próximos de 1,0. Há uma região com pontos mais esparsos que corresponde aos valores de Poisson entre 0,2 e 0,4. Ela ocorre pois todas as otimizações começam de uma topologia com coeficiente de Poisson próximo de 0,3 e se deseja obter valores que sejam ou maiores do que 0,4 ou menores do que 0,2. Então, as topologias entram nessa região apenas quando passos indesejáveis são realizados nos procedimentos de otimização. Há duas regiões com pontos mais densos em torno dos valores de Poisson mínimo e máximo para cada módulo de Young. Elas ocorrem pois, para cada valor mínimo de módulo de Young (\hat{E}^{\min}) , o valor prescrito para o coeficiente de Poisson $(\hat{\nu}^*)$ varia de -1,0 até 1,0. Então, quando \hat{E}^{\min} é muito elevado para permitir valores de Poisson extremos, todas as otimizações que não foram capazes de atingir seus valores prescritos retornam topologias em torno dos valores de Poisson mínimo e máximo admissíveis para aquela restrição de módulo de Young.

A Figura 6.58 apresenta os pontos correspondentes a resultados otimizados. Topologias com propriedades muito similares (ou idênticas) foram desconsideradas: em torno de metade das 18382 topologias otimizadas são mostradas no gráfico de dispersão. As mesmas observações podem ser feitas: há uma região vazia que corresponde aos valores de Poisson entre 0,2 e 0,4; e há regiões mais densas em torno dos valores de Poisson mínimo e máximo.



Figura 6.58 – Propriedades dos Metamateriais Otimizados

Na Figura 6.59, uma pequena amostra de 19 topologias otimizadas é mostrada, as posições das estruturas apresentadas indicam suas propriedades homogeneizadas. A parte sólida das estruturas é representada em tom escuro e a parte vazia é representada em tom claro.



Figura 6.59 – Células Otimizadas e suas Propriedades Homogeneizadas

Em seguida, apresentam-se mais amostras, extraídas dos cortes destacados na Figura 6.60.

No corte "A", topologias com módulos de Young entre 10% e 15% são consideradas, uma amostra de 28 estruturas com diferentes coeficientes de Poisson é apresentada na Figura 6.61. Passos de 0,04 são considerados. Topologias com coeficientes de Poisson variando de -0,49 a 0,19 e de 0,41 a 0,77 são mostradas.

No corte "B", topologias com coeficientes de Poisson entre -0.02 e 0.02 são consideradas, uma amostra de 10 estruturas com diferentes módulos de Young é apresentada na Figura 6.62. Passos de até 7% são considerados. Topologias com módulos de Young variando de 0% a 44% são mostradas.

Para ilustrar o conteúdo armazenado no conjunto de dados gerado, considerase o caso com $\hat{\nu}^* = -0.3$ e $\hat{E}^{\min} = 20\%$. Os resultados obtidos são apresentados nas Figuras 6.63, 6.64, 6.65, 6.66 e 6.67.



Figura 6.60 – Cortes do Gráfico de Dispersão dos Resultados Otimizados



Figura 6.61 – Topologias Otimizadas com Diferentes Coeficientes de Poisson ("A")



Figura 6.62 – Topologias Otimizadas com Diferentes Módulos de Young ("B")

Na Figura 6.63, pode-se notar que o coeficiente de Poisson melhora consistentemente quando o módulo de Young está longe de seu valor mínimo. Quando a restrição
é ativada, o processo se torna menos estável pois cada vez que a solução do subproblema linearizado quebra a restrição, a estrutura é dilatada. A operação de dilatação pode ser identificada pelos aumentos abruptos na fração de volume. O melhor resultado, apresentado na Figura 6.64, foi obtido na 48^a iteração, suas propriedades são $\hat{\nu} = -0,29$ e $\hat{E} = 20,4\%$. A Figura 6.65 apresenta todas as topologias avaliadas. Apesar de um parâmetro de paciência de $\psi = 30$ ter sido usado, 81 iterações foram necessárias para concluir o procedimento porque a topologia da iteração 51 possui uma fração de volume menor do que a 48^a topologia, o que resultou em um valor menor para a função objetivo com penalização de volume.



Figura 6.63 – Evolução das Funções para $\hat{\nu}^*=-0,3$ e $\hat{E}^{\min}=20\%$

Além das topologias, propriedades homogeneizadas e frações de volume, os vetores de sensibilidades e de deslocamentos de cada iteração foram armazenados. A Figura 6.66 mostra os 12 vetores de sensibilidades armazenados para a topologia otimizada. Em rigor, armazenam-se as variações finitas ΔC_{00} , ΔC_{11} e ΔC_{22} . Para obter os valores de sensibilidade propriamente ditos, referentes aos termos diagonais de C, é necessário alterar o sinal dessas variações finitas para os elementos sólidos. Os mapas de ΔC_{00} estão na primeira linha, os de ΔC_{11} estão na segunda linha e os de ΔC_{22} estão na terceira linha. A primeira coluna corresponde às estimativas SGC-0, a segunda coluna às estimativas SGC-1, a terceira coluna às estimativas SGC-2 e a quarta coluna aos valores exatos, computados através da abordagem SW. Uma escala não-linear independente é definida para cada mapa, para melhorar a resolução de contraste das figuras.



Figura 6.64 – Topologia Otimizada para $\hat{\nu}^*=-0,3$ e $\hat{E}^{\min}=20\%$ (it. 48)



Figura 6.65 – Topologias para $\hat{\nu}^* = -0.3$ e $\hat{E}^{\min} = 20\%$

Na Figura 6.67, apresenta-se a célula deformada para as três macrodeformações canônicas impostas para realizar o procedimento de homogeneização. Os valores de deslocamento são reescalados para melhorar a visualização.

O caso que levou mais iterações para atingir o critério de parada precisou de 292 iterações e tem como parâmetros de entrada: $\hat{\nu}^* = 0.57$ e $\hat{E}^{\min} = 6.5\%$. A Figura 6.68 apresenta a evolução das propriedades homogeneizadas e da fração de volume no decorrer da otimização e a Figura 6.69 apresenta as topologias de algumas iterações. A topologia otimizada está identificada com um asterisco (iteração 262), suas propriedades homogeneizadas são $\hat{\nu} = 0.57$ e $\hat{E} = 15.3\%$.



Figura 6.66 – Mapas de Sensibilidade para $\hat{\nu}^*=-0,3$ e $\hat{E}^{\min}=20\%$ (it. 48)



Figura 6.67 – Célula sob Macrodeformações Canônicas (it. 48)

A otimização foi longa pois o procedimento de dilatação frequentemente produziu topologias em bacias de atração de diferentes mínimos locais. Assim, mais candidatos foram avaliados no decorrer do processo iterativo. Depois da iteração 262, o programa não foi capaz de continuar melhorando a função objetivo, então o critério de parada foi alcançado.

Um dos casos que levou menos iterações para atingir o critério de parada precisou de 37 iterações e tem como parâmetros de entrada: $\hat{\nu}^* = -0.89$ e $\hat{E}^{\min} = 40.5\%$. A Figura 6.70 apresenta a evolução das propriedades homogeneizadas e da fração de volume no decorrer da otimização e a Figura 6.71 apresenta as topologias avaliadas no processo iterativo. A topologia otimizada está identificada com um asterisco (iteração 7), suas propriedades homogeneizadas são $\hat{\nu} = 0.08$ e $\hat{E} = 42.9\%$.



Figura 6.68 – Evolução das Funções para o Caso com 292 Iterações



Figura 6.69 – Topologias para o Caso com 292 Iterações

O valor elevado para o módulo de Young mínimo faz com que a restrição seja quebrada com maior facilidade, então apenas 7 iterações foram realizadas antes da primeira dilatação. Nesse caso, as perturbações do procedimento de dilatação não foram suficientes para retirar as topologias da bacia de atração do mínimo local que estava sendo rodeado. Então, antes de cada dilatação, estruturas similares foram obtidas. Aqui, o primeiro candidato foi o que teve a melhor performance, então o processo de otimização levou apenas 37 iterações para ser concluído.

O conjunto de dados completo, contendo os resultados das 18382 otimizações, corresponde a 260 GB de dados. Os programas utilizados estão disponíveis no repositório público: https://github.com/Joquempo/Metamaterial-Dataset>. No repositório, há uma documentação mais detalhada que informa como os programas funcionam e como eles devem ser utilizados para gerar o conjunto de dados.



Figura 6.70 – Evolução das Funções para o Caso com 37 Iterações



Figura 6.71 – Topologias para o Caso com 37 Iterações

6.3 Desenvolvimento das Redes Neurais

Os conjuntos de dados gerados foram utilizados para o desenvolvimento das redes neurais propostas. O treinamento das redes lineares e das MAE foi feito pelo método direto descrito, no qual os parâmetros das redes são obtidos através da resolução de sistemas lineares. O treinamento das redes PMC foi feito por um método baseado em gradiente estocástico.

Após o treinamento de cada rede, avaliou-se a performance junto aos conjuntos de teste, a possibilidade de aprendizado por transferência e a capacidade de generalização em relação ao refinamento de malha.

6.3.1 Treinamento

Para as redes lineares e para as MAE, cada treinamento foi feito para uma gama de parâmetros de regularização λ . Além do caso sem regularização ($\lambda = 0$), fez-se uma varredura avaliando 301 pontos entre 10^{-14} e 10^{14} .

Em todos os casos das redes lineares e das MAE, o comportamento apresentado nas Figuras 6.72 e 6.73 foi observado para o EQM e para a soma dos quadrados dos pesos sinápticos $(t \cdot t)$. Em cada caso, o EQM foi avaliado no conjunto de validação correspondente.

Os resultados mostram uma piora da performance dessas redes quando valores significativos de λ são utilizados. Isso indica que, para as redes lineares e para as MAE

consideradas, o problema de sobreajuste não ocorre: uma boa performance no conjunto de treinamento implica uma boa performance na totalidade dos dados. Para valores elevados de λ , os pesos sinápticos t assumem valores praticamente nulos e a estimativa de cada rede é dada somente por seu valor de limiar q, o que faz com que o EQM atinja seu valor máximo.



Figura 6.72 – Varredura de λ para a rede Linear S0-V1-ET (Complacência)

Após realizar a varredura, o valor ótimo λ^* foi obtido através de buscas de bisseção. Os ótimos obtidos são apresentados nas Tabelas 6.2 e 6.3 para as redes lineares; e nas Tabelas 6.4 e 6.5 para as MAE.

Em todos os casos, valores pequenos foram obtidos para o coeficiente de regularização. A redução observada no EQM com a regularização foi praticamente nula e, mesmo nos casos com maiores valores de λ^* , o valor de $t \cdot t$ foi reduzido em menos de 5%.



Figura 6.73 – Var
redura de λ para a rede Linear S2-V9-ET (Complacência)

Rede	λ^*	EQM	$oldsymbol{t}\cdotoldsymbol{t}$
Linear S0-V1-ES	0,0	$1,233 \times 10^{-3}$	$1,576 \times 10^{0}$
Linear S0-V1-ET	$5{,}6\times10^{-14}$	$1{,}295\times10^{-1}$	$2{,}446\times10^{-1}$
Linear S1-V1-ES	$2,3 \times 10^{-8}$	$1{,}634\times10^{-4}$	$2,176 \times 10^0$
Linear S1-V1-ET	0,0	$3{,}505\times10^{-2}$	$2,208 \times 10^{0}$
Linear S2-V1-ES	$1,5 imes 10^{-8}$	$6,846 \times 10^{-5}$	$3,292 \times 10^0$
Linear S2-V1-ET	$2{,}9\times10^{-14}$	$2{,}539\times10^{-2}$	$7{,}085\times10^{-1}$
Linear S0-V9-ES	0,0	$1{,}201\times10^{-3}$	$1,767 \times 10^{0}$
Linear S0-V9-ET	$1,\!1\times10^{-13}$	$1{,}116\times10^{-1}$	$7{,}391\times10^{-1}$
Linear S1-V9-ES	0,0	$1{,}361\times10^{-4}$	$1,960 \times 10^0$
Linear S1-V9-ET	$5,7 \times 10^{-6}$	$3{,}318\times10^{-2}$	$1,512 \times 10^0$
Linear S2-V9-ES	$2,7 \times 10^{-10}$	$3{,}827\times10^{-5}$	$3,327 \times 10^{0}$
Linear S2-V9-ET	$5,0 imes 10^{-8}$	$2,094 \times 10^{-2}$	$3,654 \times 10^0$

Tabela 6.2 – Coeficientes de Regularização para a Rede Linear (Complacência)

Rede	λ^*	EQM	$oldsymbol{t}\cdotoldsymbol{t}$
Linear S0-V1-ES	$1,8 \times 10^{-6}$	$9{,}613\times10^{-4}$	$1,732 \times 10^0$
Linear S0-V1-ET	$1,5\times 10^{-14}$	$3{,}029\times10^{-1}$	$6{,}333\times10^{-2}$
Linear S1-V1-ES	0,0	$4{,}523\times10^{-4}$	$1,397 \times 10^{0}$
Linear S1-V1-ET	0,0	$8{,}500\times10^{-2}$	$2,595 \times 10^{0}$
Linear S2-V1-ES	$1,7 \times 10^{-8}$	$1{,}749\times10^{-4}$	$4,677 \times 10^{0}$
Linear S2-V1-ET	0,0	$8{,}017\times10^{-2}$	$1,121 \times 10^0$
Linear S0-V9-ES	$6,2 imes 10^{-8}$	$9{,}545\times10^{-4}$	$1,955 \times 10^{0}$
Linear S0-V9-ET	$1{,}9\times10^{-14}$	$2{,}570\times10^{-1}$	$2{,}448\times10^{-1}$
Linear S1-V9-ES	0,0	$4{,}412\times10^{-4}$	$1,235 \times 10^{0}$
Linear S1-V9-ET	0,0	$8{,}092\times10^{-2}$	$3,413 \times 10^{0}$
Linear S2-V9-ES	0,0	$1{,}665\times10^{-4}$	$3,393 \times 10^{0}$
Linear S2-V9-ET	0,0	$7,326 \times 10^{-2}$	$3,128 \times 10^{0}$

Tabela 6.3 – Coeficientes de Regularização para a Rede Linear (Metamaterial)

Tabela6.4 – Coeficientes de Regularização para a MAE (Complacência)

Rede	λ^*	EQM	$oldsymbol{t}\cdotoldsymbol{t}$
MAE S0-V1-ES	0,0	$1,233 \times 10^{-3}$	$1,576 \times 10^{0}$
MAE S0-V1-ET	$5,\!6 \times 10^{-14}$	$1,295 \times 10^{-1}$	$2,446 \times 10^{-1}$
MAE S1-V1-ES	0,0	$1{,}603\times10^{-4}$	$1,204 \times 10^3$
MAE S1-V1-ET	$5,6 imes 10^{-7}$	$1{,}179\times10^{-2}$	$3,545 \times 10^1$
MAE S2-V1-ES	0,0	$6,657 \times 10^{-5}$	$4,\!578\times10^4$
MAE S2-V1-ET	$3,2 \times 10^{-7}$	$8,890 \times 10^{-3}$	$8,501 \times 10^0$
MAE S0-V9-ES	0,0	$1{,}104\times10^{-3}$	$5,\!119 imes 10^1$
MAE S0-V9-ET	$1,0 imes 10^{-13}$	$1,014 \times 10^{-1}$	$3,507 \times 10^0$
MAE S1-V9-ES	$7{,}6\times10^{-14}$	$9,686 \times 10^{-5}$	$1{,}147\times10^{5}$
MAE S1-V9-ET	0,0	$4,806 \times 10^{-3}$	$1,986 \times 10^1$
MAE S2-V9-ES	0,0	$1,666 \times 10^{-5}$	$6,123 \times 10^5$
MAE S2-V9-ET	$1,0 \times 10^{-14}$	$2,035 \times 10^{-3}$	$3,630 \times 10^{1}$

Rede	λ^*	EQM	$oldsymbol{t}\cdotoldsymbol{t}$
MAE S0-V1-ES	$1,8 \times 10^{-6}$	$9{,}613\times10^{-4}$	$1,732 \times 10^0$
MAE S0-V1-ET	$1,8 \times 10^{-14}$	$3,029 \times 10^{-1}$	$6{,}333\times10^{-2}$
MAE S1-V1-ES	0,0	$4{,}516\times10^{-4}$	$2{,}184\times10^2$
MAE S1-V1-ET	$5,6 imes 10^{-7}$	$4,501 \times 10^{-2}$	$1,529 \times 10^2$
MAE S2-V1-ES	$3,4 \times 10^{-13}$	$1{,}510\times10^{-4}$	$3,\!047 \times 10^5$
MAE S2-V1-ET	0,0	$3,318 \times 10^{-2}$	$3,153 \times 10^1$
MAE S0-V9-ES	0,0	$9{,}361\times10^{-4}$	$1,335 \times 10^1$
MAE S0-V9-ET	$1,0 \times 10^{-5}$	$1,878 \times 10^{-1}$	$2,563 \times 10^0$
MAE S1-V9-ES	$7{,}3\times10^{-12}$	$4,078 \times 10^{-4}$	$5,316 \times 10^3$
MAE S1-V9-ET	0,0	$2{,}192\times10^{-2}$	$1,221 \times 10^2$
MAE S2-V9-ES	$1,6 \times 10^{-14}$	$1,020 \times 10^{-4}$	$4{,}346\times10^{5}$
MAE S2-V9-ET	$1{,}0\times10^{-14}$	$1,344 \times 10^{-2}$	$8,904 \times 10^{1}$

Tabela 6.5 – Coeficientes de Regularização para a MAE (Metamaterial)

Para o caso de minimização de complacência, as redes lineares obtidas possuem os seguintes parâmetros:

$$q_{[\text{S0-V1-ES}]}^{[\text{comp-lin}]} = 1,465 \times 10^{-2} \; ; \; \boldsymbol{t}_{[\text{S0-V1-ES}]}^{[\text{comp-lin}]} = \left[1,256 \times 10^{0}\right] \; ; \tag{6.1}$$

$$q_{[\text{S0-V1-ET}]}^{[\text{comp-lin}]} = 6,020 \times 10^{-1} \; ; \; \boldsymbol{t}_{[\text{S0-V1-ET}]}^{[\text{comp-lin}]} = \left[4,946 \times 10^{-1}\right] \; ; \tag{6.2}$$

$$q_{[\text{S1-V1-ES}]}^{[\text{comp-lin}]} = 4,120 \times 10^{-3} \; ; \; \boldsymbol{t}_{[\text{S1-V1-ES}]}^{[\text{comp-lin}]} = \begin{bmatrix} -3,931 \times 10^{-1} & 1,422 \times 10^{0} \end{bmatrix}; \quad (6.3)$$

$$q_{[\text{S1-V1-ET}]}^{[\text{comp-lin}]} = 7,850 \times 10^{-2} \; ; \; \boldsymbol{t}_{[\text{S1-V1-ET}]}^{[\text{comp-lin}]} = \begin{bmatrix} -4,718 \times 10^{-1} & 1,409 \times 10^{0} \end{bmatrix} ; \quad (6.4)$$

$$\begin{split} q^{[\text{comp-lin}]}_{[\text{S2-V1-ES}]} &= 3,822 \times 10^{-3} \; ; \; \boldsymbol{t}^{[\text{comp-lin}]}_{[\text{S2-V1-ES}]} = \begin{bmatrix} -1,449 \times 10^{-1} & -5,790 \times 10^{-1} & 1,714 \times 10^{0} \end{bmatrix}; \\ q^{[\text{comp-lin}]}_{[\text{S2-V1-ET}]} &= 8,511 \times 10^{-2} \; ; \; \boldsymbol{t}^{[\text{comp-lin}]}_{[\text{S2-V1-ET}]} = \begin{bmatrix} -1,686 \times 10^{-1} & 3,982 \times 10^{-1} & 7,221 \times 10^{-1} \end{bmatrix}; \\ (6.6) \end{split}$$

$$\begin{aligned} q^{[\text{comp-lin}]}_{[\text{S0-V9-ES}]} &= 1,481 \times 10^{-2} \; ; \; \boldsymbol{t}^{[\text{comp-lin}]}_{[\text{S0-V9-ES}]} = \begin{bmatrix} -5,956 \times 10^{-2} & 4,314 \times 10^{-2} & -5,956 \times 10^{-2} \\ 4,314 \times 10^{-2} & 1,321 \times 10^{0} & 4,314 \times 10^{-2} \\ -5,956 \times 10^{-2} & 4,314 \times 10^{-2} & -5,956 \times 10^{-2} \end{bmatrix}; \end{split}$$

$$\begin{split} q_{[\text{SOV-W-ET]}}^{[\text{comp-lin]}} &= 6.002 \times 10^{-1} \ ; \ t_{[\text{SOV-W-ET]}}^{[\text{comp-lin]}} &= \begin{bmatrix} -6.004 \times 10^{-3} & -9.333 \times 10^{-2} & -6.004 \times 10^{-3} \\ -9.333 \times 10^{-2} & 8.391 \times 10^{-1} & -9.333 \times 10^{-2} \\ -6.004 \times 10^{-3} & -9.333 \times 10^{-2} & -6.004 \times 10^{-3} \\ (6.8) \end{bmatrix}; \\ \\ q_{[\text{SOV-W-ET]}}^{[\text{comp-lin]}} &= 3.510 \times 10^{-3} \ ; \ t_{[\text{SIV-W-ES]}}^{[\text{comp-lin]}} &= \begin{bmatrix} -9.902 \times 10^{-2} & 4.785 \times 10^{-2} & -9.902 \times 10^{-2} \\ 4.785 \times 10^{-2} & -2.292 \times 10^{-1} & 4.785 \times 10^{-2} \\ -9.902 \times 10^{-2} & 4.785 \times 10^{-2} & -9.902 \times 10^{-2} \\ -9.902 \times 10^{-2} & 4.785 \times 10^{-2} & -9.902 \times 10^{-2} \\ -9.902 \times 10^{-2} & 4.785 \times 10^{-2} & -9.902 \times 10^{-2} \\ -9.902 \times 10^{-2} & 1.358 \times 10^{0} & -3.000 \times 10^{-2} \\ 5.448 \times 10^{-2} & -3.000 \times 10^{-2} & 5.448 \times 10^{-2} \\ -3.000 \times 10^{-2} & 1.358 \times 10^{0} & -3.000 \times 10^{-2} \\ 5.448 \times 10^{-2} & -3.000 \times 10^{-2} & 5.448 \times 10^{-2} \\ -8.725 \times 10^{-2} & -2.050 \times 10^{-1} & -8.725 \times 10^{-2} \\ 2.123 \times 10^{-2} & -8.725 \times 10^{-2} & 2.123 \times 10^{-2} \\ -8.725 \times 10^{-2} & 2.050 \times 10^{-1} & -8.725 \times 10^{-2} \\ 2.123 \times 10^{-2} & 3.746 \times 10^{-2} & 1.239 \times 10^{-2} \\ 1.239 \times 10^{-2} & 3.746 \times 10^{-2} & 1.239 \times 10^{-2} \\ 1.239 \times 10^{-2} & 3.746 \times 10^{-2} & 1.239 \times 10^{-2} \\ -6.100 & 3.746 \times 10^{-2} & 1.239 \times 10^{-2} \\ -6.100 & 3.746 \times 10^{-2} & 1.239 \times 10^{-2} \\ -5.035 \times 10^{-1} & -3.474 \times 10^{-1} & 1.966 \times 10^{-1} \\ -5.035 \times 10^{-1} & 3.684 \times 10^{-1} \\ -5.035 \times 10^{-1} & 3.684 \times 10^{-1} \\ -5.035 \times 10^{-1} & 3.684 \times 10^{-1} \\ -5.035 \times 10^{-1} & 5.035 \times 10^{-1} & 2.584 \times 10^{-1} \\ -5.035 \times 10^{-1} & 3.276 \times 10^{-1} & -1.391 \times 10^{-1} \\ 3.276 \times 10^{-1} & -1.391 \times 10^{-1} \\ 3.276 \times 10^{-1} & -1.391 \times 10^{-1} \\ -1.391 \times 10^{-1} & 3.276 \times 10^{-1} & -1.391 \times 10^{-1} \\ -1.391 \times 10^{-1} & 3.276 \times 10^{-1} & -1.391 \times 10^{-1} \\ -1.391 \times 10^{-1} & 3.276 \times 10^{-1} & -1.391 \times 10^{-1} \\ -1.391 \times 10^{-1} & 3.276 \times 10^{-1} & -1.391 \times 10^{-1} \\ -1.391 \times 10^{-1} & 3.276 \times 10^{-1} & -1.391 \times 10^{-1} \\ -1.391 \times 10^{-1} & 3.276 \times 10^{-1} & -1.391 \times 10^{-1} \\ -1.501 \times 10^{-1} & -1.391 \times 10^{-1} \\ -1.501 \times 10^{-1} &$$

$$q_{[\text{comp-lin}]}^{[\text{comp-lin}]} = 7,558 \times 10^{-2} ; \ \boldsymbol{t}_{[\text{S2-V9-ET}]}^{[\text{comp-lin}]} = \frac{9,257 \times 10^{-2} - 1,100 \times 10^{-2} - 9,257 \times 10^{-2}}{-1,100 \times 10^{-2} - 4,170 \times 10^{-1} - 1,100 \times 10^{-2}} \\ 9,257 \times 10^{-2} - 1,100 \times 10^{-2} - 9,257 \times 10^{-2} - 1,286 \times 10^{-1} - 1,286 \times 10^{-1} - 1,286 \times 10^{-1} - 2,587 \times 10^{-1} - 1,286 \times 10^{-1} - 2,587 \times 10^{-1} - 1,286 \times 10^{-1} - 2,587 \times 10^{-1} - 1,286 \times 10^{-1} - 2,587 \times 10^{-1} - 1,286 \times 10^{-1} - 1,$$

Os pesos sinápticos das redes V9 foram organizados matricialmente para que as simetrias obtidas possam ser observadas. Em cada bloco de dimensões 3×3 , observa-se que as matrizes obtidas são simétricas em relação a rotações de 90 e 180 graus, e a espelhamentos verticais e horizontais. Isso garante a propriedade de invariância apresentada na Figura 5.6.

Para o caso de concepção de metamateriais, as redes lineares obtidas possuem os seguintes parâmetros:

$$q_{[\text{S0-V1-ES}]}^{[\text{meta-lin}]} = -2,783 \times 10^{-2} \; ; \; \boldsymbol{t}_{[\text{S0-V1-ES}]}^{[\text{meta-lin}]} = \left[1,316 \times 10^{0}\right] \; ; \tag{6.13}$$

$$q_{[\text{S0-V1-ET}]}^{[\text{meta-lin}]} = 9,423 \times 10^{-1} \; ; \; \boldsymbol{t}_{[\text{S0-V1-ET}]}^{[\text{meta-lin}]} = \left[2,517 \times 10^{-1}\right] \; ; \tag{6.14}$$

$$q_{[\text{S1-V1-ES}]}^{[\text{meta-lin}]} = -1,044 \times 10^{-2} \; ; \; \boldsymbol{t}_{[\text{S1-V1-ES}]}^{[\text{meta-lin}]} = \begin{bmatrix} -8,224 \times 10^{-2} & 1,179 \times 10^{0} \end{bmatrix}; \quad (6.15)$$

$$q_{[\text{S1-V1-ET}]}^{[\text{meta-lin}]} = 2,188 \times 10^{-1} \; ; \; \boldsymbol{t}_{[\text{S1-V1-ET}]}^{[\text{meta-lin}]} = \begin{bmatrix} -6,656 \times 10^{-1} & 1,467 \times 10^{0} \end{bmatrix}; \quad (6.16)$$

$$q_{[\text{S2-V1-ES}]}^{[\text{meta-lin}]} = -6,170 \times 10^{-3} ; \quad \boldsymbol{t}_{[\text{S2-V1-ES}]}^{[\text{meta-lin}]} = \begin{bmatrix} 8,172 \times 10^{-2} & -9,764 \times 10^{-1} & 1,928 \times 10^{0} \end{bmatrix};$$
(6.17)

$$q_{[\text{S2-V1-ET}]}^{[\text{meta-lin}]} = 2,278 \times 10^{-1} ; \quad \boldsymbol{t}_{[\text{S2-V1-ET}]}^{[\text{meta-lin}]} = \begin{bmatrix} -4,705 \times 10^{-1} & 8,482 \times 10^{-1} & 4,251 \times 10^{-1} \end{bmatrix};$$
(6.18)

;

$$\begin{split} q^{[\text{ineta-lin}]}_{[\text{S0-V9-ES}]} &= -2,652 \times 10^{-2} \; ; \; t^{[\text{imeta-lin}]}_{[\text{S0-V9-ES}]} = \begin{bmatrix} -1,945 \times 10^{-2} & -3,982 \times 10^{-3} & -1,396 \times 10^{-2} \\ -8,315 \times 10^{-3} & 1,398 \times 10^{0} & -3,982 \times 10^{-3} \\ -5,398 \times 10^{-3} & -8,315 \times 10^{-3} & -1,945 \times 10^{-2} \\ (6.19) \end{bmatrix} ; \\ q^{[\text{imeta-lin}]}_{[\text{S0-V9-ET]}} &= 9,550 \times 10^{-1} \; ; \; t^{[\text{imeta-lin}]}_{[\text{S0-V9-ET]}} = \begin{bmatrix} -1,320 \times 10^{-2} & -4,246 \times 10^{-2} & -1,310 \times 10^{-2} \\ -6,418 \times 10^{-2} & 4,809 \times 10^{-1} & -4,246 \times 10^{-2} \\ -3,443 \times 10^{-2} & -6,418 \times 10^{-2} & -1,320 \times 10^{-2} \\ (6.20) \end{bmatrix} ; \\ q^{[\text{ineta-lin}]}_{[\text{S1-V9-ES]}} &= -8,124 \times 10^{-3} \; ; \; t^{[\text{imeta-lin}]}_{[\text{S1-V9-ES]}} = \begin{bmatrix} -2,613 \times 10^{-2} & -3,268 \times 10^{-2} & -1,320 \times 10^{-2} \\ -1,871 \times 10^{-2} & -1,681 \times 10^{-1} & -3,268 \times 10^{-2} \\ -5,084 \times 10^{-2} & -1,871 \times 10^{-2} & -2,613 \times 10^{-2} \\ -5,084 \times 10^{-2} & -1,871 \times 10^{-2} & -2,613 \times 10^{-2} \\ -5,531 \times 10^{-3} & 1,852 \times 10^{-2} & 3,198 \times 10^{-3} \\ 8,243 \times 10^{-3} & 1,101 \times 10^{0} & 1,852 \times 10^{-3} \\ 8,243 \times 10^{-3} & 1,101 \times 10^{0} & 1,852 \times 10^{-2} \\ -6,137 \times 10^{-3} & -7,786 \times 10^{-1} & -1,093 \times 10^{-2} \\ -1,3937 \times 10^{-2} & -1,205 \times 10^{-2} & -1,205 \times 10^{-2} \\ -3,937 \times 10^{-2} & -1,606 \times 10^{0} & -1,205 \times 10^{-2} \\ -3,937 \times 10^{-2} & -1,606 \times 10^{0} & -1,205 \times 10^{-2} \\ -3,937 \times 10^{-2} & -1,606 \times 10^{0} & -1,205 \times 10^{-2} \\ -1,454 \times 10^{-1} & -3,337 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,454 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,540 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,454 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,540 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,454 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,454 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,454 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,454 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,454 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,454 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,454 \times 10^{-1} & -3,937 \times 10^{-2} & -5,590 \times 10^{-2} \\ -4,454 \times 10^{-1} & -3,$$

Os pesos sinápticos das redes V9 foram organizados matricialmente para que as simetrias obtidas possam ser observadas. Em cada bloco de dimensões 3×3 , observa-se que matrizes simétricas em relação à diagonal secundária foram obtidas. Isso garante a propriedade de invariância apresentada na Figura 5.7.

Como se pode observar, nos casos S0-ET, os valores de limiar são mais elevados, chegando a valores próximos de 1,0, e as somas dos pesos sinápticos são da ordem de 10^{-1} . Em todos os outros casos, os valores de limiar são da ordem de 10^{-1} ou menores e as somas dos pesos sinápticos estão em torno de 1,0.

;

Nas redes ES, nas quais se consideram apenas elementos sólidos, o resultado esperado foi obtido. Os valores mais precisos de sensibilidade possuem pesos maiores (os termos de SGC-2 têm pesos maiores que os termos de SGC-1, os quais têm pesos maiores que os termos de SGC-0) e as operações resultam num aumento do valor obtido pelas estimativas SGC (já que essas estimativas sempre subestimam os valores de sensibilidade para elementos sólidos).

Nas redes ET, em especial nas S0, os pesos sinápticos são menores para tentar compensar os valores de sensibilidade superestimados dos elementos vazios. Em contrapartida, os valores de limiar são mais elevados para balancear essa redução que prejudica as estimativas para os elementos sólidos.

Todos os pesos sinápticos obtidos para as redes lineares estão entre -1 e 2. Parâmetros nessa ordem de grandeza são outro indicativo de que não houve sobreajuste: expressões simples foram obtidas para realizar a tarefa; e o comportamento observado deve ser similar mesmo para dados externos aos conjuntos de dados considerados.

Como as MAE possuem uma quantidade elevada de parâmetros, eles não serão explicitamente apresentados. Para essas redes, exceto para os casos S0-ET, os valores de limiar obtidos também foram da ordem de 10^{-1} ou menores e, em cada caso, a soma dos pesos sinápticos ficou em torno de 1,0. Nos casos S0-ET, o valor de limiar foi mais elevado e a soma dos pesos sinápticos foi da ordem de 10^{-1} .

Contudo, em comparação com as redes lineares, parâmetros mais elevados foram obtidos nas MAE. Em todos os casos, os pesos sinápticos aumentaram em até uma ordem de grandeza quando os valores SGC-1 foram incluídos às entradas. Ao incluir os valores SGC-2, os pesos foram reduzidos para os casos ET (ficando entre -4 e 4), mas aumentaram de outra ordem de grandeza para os casos ES (chegando a valores absolutos maiores que 400). Os parâmetros elevados obtidos nos casos ES são indesejáveis, já que eles produzem expressões muito sensíveis a variações das entradas, que têm comportamentos imprevisíveis para dados extrapolados.

Para coeficientes não-nulos dos termos não-lineares, a estrutura adotada para as MAE não permite a garantia da propriedades de invariância apresentadas nas Figuras 5.6 e 5.7 para qualquer par de entradas simétricas. Ainda assim, a invariância pôde ser garantida perfeitamente para as redes ES pois, nesses casos, apenas entradas não-negativas são consideradas, o que remove as funções de sinal que causam assimetrias estruturais. Para as redes ET, o erro é minimizado simultaneamente para todos os dados originais e seus simétricos, isso faz com que entradas simétricas produzam saídas similares (mas não idênticas). Ou seja, é vantajoso definir coeficientes não-nulos aos termos não-lineares, sacrificando a garantia das invariâncias nas redes ET para reduzir o erro médio das saídas. As Figuras 6.74 e 6.75 apresentam as saídas referentes a pares de entradas simétricas e a entradas intermediárias, obtidas por interpolação linear. O eixo horizontal indica o parâmetro de interpolação, que vai de -1 (entrada gerada aleatoriamente) até 1 (entrada simétrica correspondente). A entrada gerada aleatoriamente possui valores entre 0 e 5 para os casos ES; e valores entre -2 e 5 para os casos ET. Além disso, garantem-se as propriedades básicas das entradas SGC: os valores SGC-2 são maiores que os valores SGC-1, que são maiores que os valores SGC-0; para um mesmo elemento, os três valores SGC possuem o mesmo sinal.



Figura 6.74 – Saídas das MAE para Entradas Simétricas Aleatórias (Complacência)

No caso de minimização de complacência, as 7 curvas (referente às 7 simetrias consideradas) são apresentadas. As curvas em azul correspondem às simetrias que deveriam gerar gráficos correspondentes a funções pares; as curvas em laranja correspondem aos casos de rotações de 90° horária e anti-horária. No caso de concepção de metamateriais há apenas uma simetria, que deve produzir um gráfico correspondente a uma função par.

Como pode ser observado, para as redes ES, os gráficos obtidos possuem as propriedades esperadas. Entretanto, para as redes ET, comportamentos erráticos foram obtidos e valores bastante distintos foram obtidos para cada par de entradas simétricas. As alterações bruscas observadas nas curvas são produzidas pelas funções de sinal utilizadas nas MAE, elas ocorrem quando alguma entrada cruza a origem.



Figura 6.75 – Saídas das MAE para Entradas Simétricas Aleatórias (Metamaterial)

Esses gráficos sugerem que, ainda que as MAE tenham performances superiores às redes lineares, as funções utilizadas não produzem resultados satisfatórios para os casos com dados positivos e negativos (ET): regressões com respostas mais suaves são preferíveis pois, no geral, elas generalizam melhor a tarefa desejada (têm comportamentos mais consistentes tanto para dados interpolados quanto para dados extrapolados).

Apesar de não garantirem as propriedades de invariância, ao menos para os conjuntos de dados considerados, as MAE desenvolvidas são bem sucedidas em realizar a regressão desejada. Nas Figuras 6.76 e 6.77, os mesmos gráficos foram gerados para uma entrada real dos conjuntos de dados (ao invés de uma entrada fictícia produzida aleatoriamente). Para uma análise apropriada, uma entrada com valores positivos e negativos foi selecionada. Os pontos em verde indicam os valores de saída exatos para as entradas simétricas.

Observa-se que, para as entradas simétricas, as saídas produzidas pelas MAE (pontos em azul) se aproximam dos valores esperados. Na Figura 6.76, pode-se notar uma curva bem comportada. Ela corresponde a uma simetria que, especificamente para a entrada selecionada, conserva o sinal de todos os termos de entrada. Contudo, quando há mudanças de sinal, as curvas produzidas pelas interpolações são imprevisíveis e não possuem as propriedades de invariância desejadas.



Figura 6.76 – Saídas das MAE para Dados Simétricos (Complacência)



Figura 6.77 – Saídas das MAE para Dados Simétricos (Metamaterial)

A arquitetura de cada rede PMC foi definida com base nas redes S2-V9-ET. A seguinte sequência de etapas foi realizada para a definição dos hiperparâmetros.

Primeiramente, para ambos os casos (complacência e metamaterial), redes S2-V9-ET com 17 camadas ocultas de 86 neurônios cada (totalizando aproximadamente 120000 parâmetros) foram treinadas para as quatro diferentes funções de ativação consideradas: sigmoide; tangente hiperbólica; ReLU; e ReLU com vazamento ($\varepsilon_v = 0,20$). Utiliza-se a mesma função de ativação em todas as camadas ocultas, a camada de saída não possui ativação.

Em cada caso, as redes foram treinadas por uma época, que corresponde a 140 000 atualizações dos parâmetros, e o melhor resultado de cinco treinamentos independentes foi utilizado para a comparação. As melhores performances foram obtidas quando a ativação ReLU foi utilizada. A ReLU com vazamento produziu resultados similares, mas levemente inferiores. A tangente hiperbólica resultou em valores de EQM mais de duas vezes maiores que os obtidos utilizando ReLU. E a ativação sigmoide produziu resultados substancialmente inferiores (com valores de EQM de ao menos uma ordem de grandeza acima dos obtidos utilizando ReLU).

Avaliações similares foram feitas para redes com 1, 3, 5 e 9 camadas ocultas de, respectivamente, 4138, 238, 170 e 121 neurônios por camada (totalizando aproximadamente 120000 parâmetros). Os resultados confirmaram a superioridade da ativação ReLU para os casos considerados. Assim, em todos os casos subsequentes, apenas a ativação ReLU foi utilizada.

Em seguida, redes S2-V9-ET com diferentes números de camadas ocultas foram avaliadas (de 1 até 17 camadas ocultas), usando a mesma quantidade de neurônios em cada camada oculta. A quantidade de neurônios das camadas foi definida de forma a manter as redes com em torno de 120 000 parâmetros. Em cada caso, as redes foram treinadas por uma época e o melhor resultado de cinco treinamentos independentes foi utilizado para a comparação. Para ambos os casos (complacência e metamaterial), as melhores performances foram obtidas para redes com 7 camadas ocultas. Usando essas redes, os valores de EQM foram reduzidos em torno de 15% em relação às redes com o menor número de camadas (1 camada oculta); e em torno de 10% em relação às redes com o maior número de camadas (17 camadas ocultas).

Usando redes com 7 camadas, diferentes tipos de progressão de neurônios foram avaliadas: a mesma quantidade em todas as camadas; quantidades decrescentes; quantidades crescentes; quantidades decrescentes da 1^a à 4^a camada oculta e crescentes da 4^a à 7^a ; quantidades crescentes da 1^a à 4^a camada oculta e decrescentes da 4^a à 7^a . As melhores performances foram obtidas para redes com camadas decrescentes, ou seja, aumentar o número de neurônios das primeiras camadas e reduzir o número de neurônios das últimas foi a estratégia mais eficaz. Então, mantendo o número total de parâmetros, diferentes redes decrescentes foram testadas, alterando a redução de neurônios entre camadas. Nos testes realizados, as melhores performances foram obtidas reduzindo 14 neurônios por camada. Essas alterações reduziram os valores de EQM em cerca de 5%.

Por último, mantendo essa estrutura, variou-se o número de parâmetros. Com o intuito de utilizar a mesma arquitetura para ambos os problemas e, balanceando os ganhos em performance e o aumento de custos computacionais, decidiu-se utilizar redes com 130 000 parâmetros. Com essas redes, para o problema de minimização de complacência, não houve ganhos significativos em relação às redes com 120 000 parâmetros. Contudo, para o problema de concepção de metamateriais, observaram-se valores de EQM cerca de 2% menores. Nos testes realizados, não foi vantajoso aumentar ainda mais o número de parâmetros.

Exceto para a escolha da função de ativação, cada uma das mudanças de

arquitetura resultou em ganhos de performance relativamente baixos, que possivelmente poderiam ser obtidos apenas realizando mais treinamentos (até que inicializações mais eficazes fossem obtidas). Isso pode significar que o número de parâmetros utilizado é maior que o necessário para realizar as regressões desejadas. De toda forma, como o presente estudo foca em avaliar o potencial das redes em aumentar a precisão da ASVF, aceitase qualquer arquitetura que possa ser percorrida rapidamente e que tenha ao menos a complexidade mínima para realizar a tarefa desejada. Destaca-se que as redes consideradas podem ser percorridas em tempos suficientemente curtos (dezenas de milhões de dados de entrada podem ser processados em poucos segundos) e, portanto, elas são adequadas para o estudo em questão.

Em resumo, as redes selecionadas possuem cerca de 130 000 parâmetros; 7 camadas ocultas com quantidades de neurônios decrescentes, reduzindo 14 neurônios por camada; função de ativação ReLU em todas as camadas ocultas; e função identidade para a ativação da última camada (saída sem ativação). Como entradas com dimensões distintas são consideradas, para manter a quantidade total de parâmetros em torno de 130 000, as redes com menos entradas devem possuir mais neurônios por camada oculta. As arquiteturas utilizadas estão apresentadas na Figura 6.78.



Figura 6.78 – Arquiteturas Selecionadas para as Redes PMC

Com as arquiteturas selecionadas, buscaram-se valores apropriados para λ . Para o maior caso (minimização de complacência com conjunto de dados ET), cinco treinamentos de uma época para as seis redes levam em torno de 30 horas para serem realizados com a unidade de processamento gráfico utilizada (NVIDIA GeForce RTX 3060 Ti). Portanto, não seria viável realizar uma busca em grade seguida de uma busca de bisseção. A estratégia adotada consiste em treinar sem a regularização ($\lambda = 0$) e usar os resultados obtidos para definir candidatos efetivos para λ . O primeiro valor candidato é definido de forma que, para a rede treinada sem regularização, a função custo $L(\mathbf{T}^{[k]}, \mathbf{q}^{[k]})$ corresponda a três vezes o valor de EQM.

Assim como observado para as redes lineares e para as MAE, os resultados obtidos para as redes PMC indicam que o conjunto de dados é suficientemente representativo, de forma que a regularização não é necessária para que se obtenham boas performances nos conjuntos de validação. Além de os valores de EQM nos conjuntos de treinamento e de validação não indicarem sobreajuste, os valores de limiar obtidos são todos da ordem de 10^{-1} ou menores e todos os pesos sinápticos obtidos estão entre -4 e 2. Ao utilizar apenas os dados ES, os valores de limiar e os pesos sinápticos obtidos são ainda menores.

Ao incluir o parâmetro de regularização candidato em cada caso, os valores de EQM aumentaram em menos de 2%, enquanto que as somas dos quadrados dos parâmetros foram reduzidas em mais de 80%. Os valores de limiar não foram substancialmente afetados, por outro lado, todos os pesos sinápticos passaram a ficar entre -1 e 1. Qualquer uma dessas RNA, sem ou com regularização, mostrou-se adequada para a aplicação considerada. Portanto, considerou-se desnecessário realizar treinamentos com outros valores para os parâmetros de regularização.

Em nenhuma das redes PMC, as propriedades de invariância foram perfeitamente satisfeitas. Para dados simétricos gerados aleatoriamente, os resultados são imprevisíveis, mas ao menos produzem curvas suaves (ao contrário do que foi obtido para as MAE, nos casos ET). Para entradas reais dos conjuntos de dados, os resultados são mais bem comportados e saídas similares são obtidas para duas entradas simétricas. Em termos das propriedades de invariância, não houve diferenças notáveis entre as redes treinadas sem e com regularização.

Apesar de os resultados indicarem que a regularização não é necessária, optouse por utilizar as redes regularizadas na sequência deste trabalho. Coeficientes menores produzem comportamentos mais estáveis para as RNA, o que potencialmente melhora suas performances para dados externos aos conjuntos considerados. Além disso, os aumentos de EQM observados foram pouco significativos.

Uma vez definidas as arquiteturas e os parâmetros de regularização, as redes foram treinadas por mais uma época, o que resultou numa pequena redução dos valores de EQM e dos pesos sinápticos. As Tabelas 6.6 e 6.7 apresentam os resultados obtidos para as redes PMC, com os valores de EQM avaliados nos conjuntos de validação. As Figuras 6.79 e 6.80 mostram as saídas das redes treinadas para pares de entradas simétricas, extraídos dos conjuntos de dados, e suas interpolações.

Rede	λ^*	EQM	$\sum oldsymbol{T}^{[k]}:oldsymbol{T}^{[k]}$
PMC S0-V1-ES	$2,7 \times 10^{-6}$	$1,206 \times 10^{-3}$	$9,979 \times 10^{0}$
PMC S0-V1-ET	$6,3 imes 10^{-5}$	$2{,}984\times10^{-2}$	$9,258 \times 10^{0}$
PMC S1-V1-ES	$2,9 \times 10^{-7}$	$1{,}308\times10^{-4}$	$4{,}965\times10^{1}$
PMC S1-V1-ET	$7,4 \times 10^{-6}$	$4{,}567\times10^{-3}$	$3,928 \times 10^1$
PMC S2-V1-ES	$1,1 \times 10^{-7}$	$4,639 \times 10^{-5}$	$8,760 \times 10^1$
PMC S2-V1-ET	$4,2 \times 10^{-6}$	$3{,}203\times10^{-3}$	$6,788 \times 10^1$
PMC S0-V9-ES	$5,8 \times 10^{-7}$	$4{,}493\times10^{-4}$	$1,\!679 imes 10^2$
PMC S0-V9-ET	$1,3 imes 10^{-6}$	$8{,}266\times10^{-4}$	$2{,}023\times10^2$
PMC S1-V9-ES	$4,2 \times 10^{-8}$	$1,943 \times 10^{-5}$	$2,007 \times 10^2$
PMC S1-V9-ET	$7,9 \times 10^{-7}$	$4{,}719\times10^{-4}$	$2,005 \times 10^2$
PMC S2-V9-ES	$1,9 imes 10^{-8}$	$7,231 \times 10^{-6}$	$2,034 \times 10^{2}$
PMC S2-V9-ET	$7,3 \times 10^{-7}$	$4,141 \times 10^{-4}$	$2,153 \times 10^2$

Tabela 6.6 – Coeficientes de Regularização para a Rede PMC (Complacência)

Tabela 6.7 – Coeficientes de Regularização para a Rede PMC (Metamaterial)

Rede	λ^*	EQM	$\sum oldsymbol{T}^{[k]}:oldsymbol{T}^{[k]}$
PMC S0-V1-ES	$2,1 \times 10^{-6}$	$9,422 \times 10^{-4}$	$1,201 \times 10^1$
PMC S0-V1-ET	$3,1 \times 10^{-4}$	$1,586 \times 10^{-1}$	$1,006 \times 10^1$
PMC S1-V1-ES	$8,2 \times 10^{-7}$	$3{,}951\times10^{-4}$	$3,\!630 imes 10^1$
PMC S1-V1-ET	$3,8 \times 10^{-5}$	$2,365 \times 10^{-2}$	$2,621 \times 10^1$
PMC S2-V1-ES	$2,0 \times 10^{-7}$	$1,114 \times 10^{-4}$	$8,304 \times 10^1$
PMC S2-V1-ET	$1,8 imes 10^{-5}$	$1,258 \times 10^{-2}$	$4{,}389\times10^{1}$
PMC S0-V9-ES	$8,9 imes 10^{-7}$	$6,420 \times 10^{-4}$	$1,178 \times 10^2$
PMC S0-V9-ET	$9,0 \times 10^{-6}$	$7,549 \times 10^{-3}$	$3,052 \times 10^2$
PMC S1-V9-ES	$2,2 \times 10^{-7}$	$1,460 \times 10^{-4}$	$2,118 \times 10^2$
PMC S1-V9-ET	$2,5 imes 10^{-6}$	$1{,}820\times10^{-3}$	$2{,}398\times10^2$
PMC S2-V9-ES	$7,4 \times 10^{-8}$	$4,013 \times 10^{-5}$	$2,\overline{274 \times 10^2}$
PMC S2-V9-ET	$2,1 \times 10^{-6}$	$1,374 \times 10^{-3}$	$2,361 \times 10^2$



Figura 6.79 – Saídas das Redes PMC para Dados Simétricos (Complacência)



Figura 6.80 – Saídas das Redes PMC para Dados Simétricos (Metamaterial)

6.3.2 Performance nos Conjuntos de Teste

As Tabelas 6.8 e 6.9 apresentam as performances das expressões SGC para os conjuntos de dados gerados.

Estimativa	EQM – treinamento	EQM – validação	EQM - teste
SGC-0 (ES)	$5,853 \times 10^{-2}$	$5,846 \times 10^{-2}$	$5,846 \times 10^{-2}$
SGC-0 (ET)	$8{,}566\times10^{-1}$	$8{,}516\times10^{-1}$	$8{,}544\times10^{-1}$
SGC-1 (ES)	$8,653 \times 10^{-3}$	$8,642 \times 10^{-3}$	$8,643 \times 10^{-3}$
SGC-1 (ET)	$1,\!486 \times 10^{-1}$	$1,477 \times 10^{-1}$	$1,481 \times 10^{-1}$
SGC-2 (ES)	$2{,}277\times10^{-3}$	$2{,}274\times10^{-3}$	$2{,}274\times10^{-3}$
SGC-2 (ET)	$3,843 \times 10^{-2}$	$3,810 \times 10^{-2}$	$3,833 \times 10^{-2}$

Tabela 6.8 – Performances da SGC (Complacência)

Tabela 6.9 – Performances da SGC (Metamaterial)

Estimativa	EQM - treinamento	EQM – validação	EQM-teste
SGC-0 (ES)	$7,279 \times 10^{-2}$	$7{,}282\times10^{-2}$	$7,275 \times 10^{-2}$
SGC-0 (ET)	$4,082 \times 10^{0}$	$4,053 \times 10^{0}$	$4,099 \times 10^{0}$
SGC-1 (ES)	$1,231 \times 10^{-2}$	$1,232 \times 10^{-2}$	$1,231 \times 10^{-2}$
SGC-1 (ET)	$1,031 \times 10^{0}$	$1,024 \times 10^0$	$1,036 \times 10^{0}$
SGC-2 (ES)	$4{,}015\times10^{-3}$	$4,016 \times 10^{-3}$	$4,013 \times 10^{-3}$
SGC-2 (ET)	$3,558 \times 10^{-1}$	$3,542 \times 10^{-1}$	$3,567 \times 10^{-1}$

Pode-se observar que performances equivalentes foram obtidas para os três conjuntos (treinamento, validação e teste). A abordagem SGC-2, proposta neste trabalho, resultou em reduções dos valores de EQM de mais de 90%, quando comparada à abordagem SGC-0, convencionalmente utilizada na literatura. Além disso, o EQM obtido para os conjuntos ES é de ao menos uma ordem de grandeza menor do que o obtido para os conjuntos ET. Isso indica uma diferença de sensibilidade significativa entre sólidos internos (que compõem os conjuntos ES) e o restante dos elementos (sólidos de interface; vazios de interface; e vazios desconectados). Nota-se também que os erros obtidos para o problema de minimização de complacência foram menores do que os obtidos para o problema de concepção de metamateriais. Diferenças entre os dois problemas eram esperadas já que eles diferem quanto a malha, condições de carregamento e condições de simetria.

As Tabelas $6.10 \ e \ 6.11$ apresentam as performances das redes lineares desenvolvidas.

Os valores de EQM foram equivalentes para os três conjuntos (treinamento, validação e teste), o que indica que não houve sobreajuste. Os resultados esperados foram obtidos: as redes S2 são mais precisas que as redes S1, que são mais precisas que as redes

S0; e as redes V9 são mais precisas que as redes V1. Observa-se que utilizar expressões SGC de maior grau (usar S1 ao invés de S0, ou S2 ao invés de S1) contribui mais para a performance do que incluir dados de elementos vizinhos (usar entradas V9 ao invés de V1). O ganho de performance ao utilizar redes lineares (no lugar das expressões SGC) foi mais intenso para os casos ES. Isso reforça que há uma diferença substancial de comportamento entre as sensibilidades dos sólidos internos e do restante dos elementos, que não foi satisfatoriamente capturada pelas redes lineares.

Rede	EQM – treinamento	EQM – validação	EQM – teste
Linear S0-V1-ES	$1,235 \times 10^{-3}$	$1,233 \times 10^{-3}$	$1,234 \times 10^{-3}$
Linear S0-V1-ET	$1,301 \times 10^{-1}$	$1,295 \times 10^{-1}$	$1,299 \times 10^{-1}$
Linear S1-V1-ES	$1{,}638\times10^{-4}$	$1{,}634\times10^{-4}$	$1,637 \times 10^{-4}$
Linear S1-V1-ET	$3,533 \times 10^{-2}$	$3,505 \times 10^{-2}$	$3,532 \times 10^{-2}$
Linear S2-V1-ES	$6,864 \times 10^{-5}$	$6,846 \times 10^{-5}$	$6,863 \times 10^{-5}$
Linear S2-V1-ET	$2,562 imes 10^{-2}$	$2{,}539\times10^{-2}$	$2,557 \times 10^{-2}$
Linear S0-V9-ES	$1,202 \times 10^{-3}$	$1{,}201\times10^{-3}$	$1,\!202\times10^{-3}$
Linear S0-V9-ET	$1,122 \times 10^{-1}$	$1,116 \times 10^{-1}$	$1,120 \times 10^{-1}$
Linear S1-V9-ES	$1{,}365\times10^{-4}$	$1{,}361\times10^{-4}$	$1,364 \times 10^{-4}$
Linear S1-V9-ET	$3,346 \times 10^{-2}$	$3,318 \times 10^{-2}$	$3,345 \times 10^{-2}$
Linear S2-V9-ES	$3,838 \times 10^{-5}$	$3,827 \times 10^{-5}$	$3,839 \times 10^{-5}$
Linear S2-V9-ET	$2,113 \times 10^{-2}$	$2,094 \times 10^{-2}$	$2,108 \times 10^{-2}$

Tabela 6.10 – Performances da Rede Linear (Complacência)

Tabela 6.11 – Performances da Rede Linear (Metamaterial)

Rede	EQM – treinamento	EQM – validação	EQM – teste
Linear S0-V1-ES	$9,621 \times 10^{-4}$	$9,613 \times 10^{-4}$	$9,612 \times 10^{-4}$
Linear S0-V1-ET	$3,037 imes 10^{-1}$	$3,029 \times 10^{-1}$	$3{,}044\times10^{-1}$
Linear S1-V1-ES	$4{,}527\times10^{-4}$	$4{,}523\times10^{-4}$	$4{,}521\times10^{-4}$
Linear S1-V1-ET	$8,546 \times 10^{-2}$	$8,500 \times 10^{-2}$	$8{,}564\times10^{-2}$
Linear S2-V1-ES	$1,754\times10^{-4}$	$1{,}749\times10^{-4}$	$1{,}748\times10^{-4}$
Linear S2-V1-ET	$8{,}047\times10^{-2}$	$8{,}017\times10^{-2}$	$8{,}063\times10^{-2}$
Linear S0-V9-ES	$9{,}553\times10^{-4}$	$9{,}545\times10^{-4}$	$9{,}544\times10^{-4}$
Linear S0-V9-ET	$2{,}576\times10^{-1}$	$2,570 \times 10^{-1}$	$2{,}583\times10^{-1}$
Linear S1-V9-ES	$4{,}416\times10^{-4}$	$4{,}412\times10^{-4}$	$4{,}410\times10^{-4}$
Linear S1-V9-ET	$8{,}134\times10^{-2}$	$8,092 \times 10^{-2}$	$8,152 \times 10^{-2}$
Linear S2-V9-ES	$1,\!669 imes 10^{-4}$	$1,665 \times 10^{-4}$	$1,\!664\times10^{-4}$
Linear S2-V9-ET	$7,349 imes 10^{-2}$	$7,326 \times 10^{-2}$	$7,362 \times 10^{-2}$

As Tabelas 6.12 e 6.13 apresentam as performances das MAE desenvolvidas.

Rede	EQM – treinamento	EQM – validação	EQM - teste
MAE S0-V1-ES	$1,235 \times 10^{-3}$	$1{,}233\times10^{-3}$	$1,234 \times 10^{-3}$
MAE S0-V1-ET	$1,301 \times 10^{-1}$	$1,295 \times 10^{-1}$	$1,299 \times 10^{-1}$
MAE S1-V1-ES	$1,608 \times 10^{-4}$	$1,603 \times 10^{-4}$	$1,606 \times 10^{-4}$
MAE S1-V1-ET	$1,188 \times 10^{-2}$	$1{,}179\times10^{-2}$	$1,186 \times 10^{-2}$
MAE S2-V1-ES	$6,\!675 imes 10^{-5}$	$6,\!657 imes 10^{-5}$	$6,673 \times 10^{-5}$
MAE S2-V1-ET	$8,955 \times 10^{-3}$	$8,890 \times 10^{-3}$	$8,930 \times 10^{-3}$
MAE S0-V9-ES	$1{,}105\times10^{-3}$	$1{,}104\times10^{-3}$	$1,104 \times 10^{-3}$
MAE S0-V9-ET	$1,018 \times 10^{-1}$	$1,014 \times 10^{-1}$	$1,017 \times 10^{-1}$
MAE S1-V9-ES	$9,720 \times 10^{-5}$	$9,686 \times 10^{-5}$	$9,714 \times 10^{-5}$
MAE S1-V9-ET	$4,842 \times 10^{-3}$	$4{,}806\times10^{-3}$	$4,823 \times 10^{-3}$
MAE S2-V9-ES	$1,669 \times 10^{-5}$	$1,666 \times 10^{-5}$	$1,668 \times 10^{-5}$
MAE S2-V9-ET	$2,057 \times 10^{-3}$	$2{,}035\times10^{-3}$	$2,039 \times 10^{-3}$

Tabela 6.12 – Performances da MAE (Complacência)

Tabela 6.13 – Performances da MAE (Metamaterial)

Rede	EQM – treinamento	EQM – validação	EQM – teste
MAE S0-V1-ES	$9,621 \times 10^{-4}$	$9{,}613\times10^{-4}$	$9,612 \times 10^{-4}$
MAE S0-V1-ET	$3,037 \times 10^{-1}$	$3,029 \times 10^{-1}$	$3,044 \times 10^{-1}$
MAE S1-V1-ES	$4,520 \times 10^{-4}$	$4,516 \times 10^{-4}$	$4,515 \times 10^{-4}$
MAE S1-V1-ET	$4,511 \times 10^{-2}$	$4,501 \times 10^{-2}$	$4,515 \times 10^{-2}$
MAE S2-V1-ES	$1,513 \times 10^{-4}$	$1,510 \times 10^{-4}$	$1,511 \times 10^{-4}$
MAE S2-V1-ET	$3,322 \times 10^{-2}$	$3,318 \times 10^{-2}$	$3,323 \times 10^{-2}$
MAE S0-V9-ES	$9,368 \times 10^{-4}$	$9,361 \times 10^{-4}$	$9,360 \times 10^{-4}$
MAE S0-V9-ET	$1,881 \times 10^{-1}$	$1,878 \times 10^{-1}$	$1,888 \times 10^{-1}$
MAE S1-V9-ES	$4,080 \times 10^{-4}$	$4,078 \times 10^{-4}$	$4,088 \times 10^{-4}$
MAE S1-V9-ET	$2,194 \times 10^{-2}$	$2,192 \times 10^{-2}$	$2,195 \times 10^{-2}$
MAE S2-V9-ES	$1,021 \times 10^{-4}$	$1,020 \times 10^{-4}$	$1,023 \times 10^{-4}$
MAE S2-V9-ET	$1,344 \times 10^{-2}$	$1,344 \times 10^{-2}$	$1,342 \times 10^{-2}$

Novamente, os valores foram equivalentes para os três conjuntos, o que indica que não houve sobreajuste. Os resultados esperados foram obtidos: as MAE S0-V1 correspondem às redes lineares; e cada uma das outras MAE supera a performance das redes lineares correspondentes, já que mais termos são incluídos na combinação linear. O ganho de performance ao utilizar as MAE (no lugar das redes lineares) foi mais intenso para os casos ET. O que significa que a inclusão de termos não-lineares tornou as redes mais efetivas em representar os diferentes comportamentos observados.

As Tabelas 6.14 e 6.15 apresentam as performances das rede
s PMC desenvolvidas.

Rede	EQM – treinamento	EQM – validação	EQM-teste
PMC S0-V1-ES	$1,207 \times 10^{-3}$	$1,206 \times 10^{-3}$	$1{,}207\times10^{-3}$
PMC S0-V1-ET	$2,992 \times 10^{-2}$	$2,984 \times 10^{-2}$	$2,989 \times 10^{-2}$
PMC S1-V1-ES	$1,311 \times 10^{-4}$	$1,308 \times 10^{-4}$	$1{,}310\times10^{-4}$
PMC S1-V1-ET	$4,597 \times 10^{-3}$	$4,567 \times 10^{-3}$	$4{,}578\times10^{-3}$
PMC S2-V1-ES	$4,657 \times 10^{-5}$	$4,639 \times 10^{-5}$	$4,653 \times 10^{-5}$
PMC S2-V1-ET	$3,229 \times 10^{-3}$	$3,203 \times 10^{-3}$	$3{,}213\times10^{-3}$
PMC S0-V9-ES	$4,506 \times 10^{-4}$	$4,493 \times 10^{-4}$	$4,496 \times 10^{-4}$
PMC S0-V9-ET	$8,377 \times 10^{-4}$	$8,266 \times 10^{-4}$	$8,293 \times 10^{-4}$
PMC S1-V9-ES	$1,949 \times 10^{-5}$	$1,943 \times 10^{-5}$	$1{,}945\times10^{-5}$
PMC S1-V9-ET	$4{,}814\times10^{-4}$	$4{,}719\times10^{-4}$	$4{,}748\times10^{-4}$
PMC S2-V9-ES	$7,254 \times 10^{-6}$	$7,231 \times 10^{-6}$	$7,240 \times 10^{-6}$
PMC S2-V9-ET	$4,232 \times 10^{-4}$	$4,141 \times 10^{-4}$	$4,174 \times 10^{-4}$

Tabela 6.14 – Performances da PMC (Complacência)

Tabela 6.15 – Performances da PMC (Metamaterial)

Rede	EQM – treinamento	EQM - validação	EQM-teste
PMC S0-V1-ES	$9{,}427\times10^{-4}$	$9,422 \times 10^{-4}$	$9{,}417\times10^{-4}$
PMC S0-V1-ET	$1,583 \times 10^{-1}$	$1,586 \times 10^{-1}$	$1,584 \times 10^{-1}$
PMC S1-V1-ES	$3,951 \times 10^{-4}$	$3,951 \times 10^{-4}$	$3,950 \times 10^{-4}$
PMC S1-V1-ET	$2,365 \times 10^{-2}$	$2,365 \times 10^{-2}$	$2,361 \times 10^{-2}$
PMC S2-V1-ES	$1,115 \times 10^{-4}$	$1,114 \times 10^{-4}$	$1,114 \times 10^{-4}$
PMC S2-V1-ET	$1,253 \times 10^{-2}$	$1,258 \times 10^{-2}$	$1{,}251\times10^{-2}$
PMC S0-V9-ES	$6,416 \times 10^{-4}$	$6,420 \times 10^{-4}$	$6{,}415\times10^{-4}$
PMC S0-V9-ET	$7,531 \times 10^{-3}$	$7,549 \times 10^{-3}$	$7,466 \times 10^{-3}$
PMC S1-V9-ES	$1,460 \times 10^{-4}$	$1,460 \times 10^{-4}$	$1{,}458\times10^{-4}$
PMC S1-V9-ET	$1,789 \times 10^{-3}$	$1,820 \times 10^{-3}$	$1{,}767\times10^{-3}$
PMC S2-V9-ES	$4,018 \times 10^{-5}$	$4,013 \times 10^{-5}$	$4{,}014\times10^{-5}$
PMC S2-V9-ET	$1,340 \times 10^{-3}$	$1,374 \times 10^{-3}$	$1,324 \times 10^{-3}$

Assim como nos outros casos, não houve sobreajuste. Para os casos V1-ES, os ganhos obtidos em relação às MAE foram relativamente baixos. Contudo, ao incluir os vizinhos, nos casos V9-ES, reduções relevantes foram obtidas para o EQM. Os resultados para os casos ET são similares, com ganhos ainda mais intensos observados para as redes V9-ET, em que os valores de EQM foram reduzidos em ao menos uma ordem de grandeza, quando comparados aos resultados das MAE.

Os resultados indicam que todas as informações fornecidas são relevantes para realizar o mapeamento desejado, tanto a progressão dos valores SGC, quanto as informações sobre os vizinhos imediatos do elemento de interesse. Valores pequenos de EQM foram obtidos utilizando as redes PMC desenvolvidas (da ordem de 10^{-3} ou menores), ao menos três ordens de grandeza menores do que os obtidos pela abordagem convencionalmente utilizada (SGC-0). Isso indica que as 27 entradas consideradas são suficientes para realizar a tarefa em questão.

Na Tabela 6.16, as performances das redes S2-V9-ES e S2-V9-ET são comparadas para cada caso (complacência e metamaterial), em ambos os conjuntos de testes (ES e ET).

Caso	Rede	EQM – teste (ES)	EQM – teste (ET)
Complacência	PMC S2-V9-ES	$7,240 \times 10^{-6}$	$4,984 \times 10^{-2}$
Complacência	PMC S2-V9-ET	$1,713 \times 10^{-5}$	$4,174 \times 10^{-4}$
Metamaterial	PMC S2-V9-ES	$4,014 \times 10^{-5}$	$2,619 \times 10^{-1}$
Metamaterial	PMC S2-V9-ET	$9,538 \times 10^{-5}$	$1,324 \times 10^{-3}$

Tabela 6.16 – Performances das Redes ES e ET nos Conjuntos ET e ES

Os valores de EQM das redes ES são duas ordens de grandeza maiores que os das redes ET, quando todos os elementos são considerados (conjunto ET); enquanto que, ao considerar apenas sólidos internos (conjunto ES), os valores de EQM das redes ET são apenas duas ou três vezes maiores que os das redes ES. Isso mostra, mais uma vez, que sólidos internos têm comportamentos mais previsíveis que os elementos de interface. Ainda que as redes ET não tenham atingido as mesmas performance que as redes ES para os sólidos internos, as performances obtidas ainda são satisfatórias (valores de EQM menores que 1×10^{-4}). Assim, as redes PMC S2-V9-ET, que produzem valores precisos de sensibilidade para qualquer tipo de elemento, foram selecionadas para realizar as ASVF propostas em todos os casos subsequentes.

Deve-se destacar que, as RNA consideradas, com cerca de 130 000 parâmetros, são viáveis para serem utilizadas em problemas práticos. A execução de cada rede PMC é um procedimento perfeitamente paralelizável que escala linearmente com o refinamento da malha.

As Figuras 6.81 e 6.82 resumem os resultados apresentados nesta seção. Nelas, os valores de EQM são apresentados para os respectivos conjuntos de teste (ES ou ET) para cada ASVF: análise convencional, SGC-0; análises propostas, SGC-1 e SGC-2; e análises assistidas por RNA, Linear, MAE e PMC (redes S2-V9).

Antes de avaliar as capacidades de generalização das redes desenvolvidas, as redes S2-V9-ET de cada caso (complacência e metamaterial) foram avaliadas nos conjuntos de teste cruzados (a rede desenvolvida para um caso, foi avaliada no conjunto de teste do outro). Os valores de EQM obtidos são apresentados na Tabela 6.17. Isso foi feito para aferir se os problemas são suficientemente similares, de forma a habilitar o uso de aprendizado por transferência entre eles.



Figura 6.81 – Valores de EQM para cada ASVF (Complacência)



Figura 6.82 – Valores de EQM para cada ASVF (Metamaterial)

Tabela 6.17 – Performances	das	Redes	de	cada	Caso	para	\mathbf{OS}	Conjun	tos	Cruzad	los
----------------------------	-----	-------	----	------	------	------	---------------	--------	-----	--------	-----

Caso	Rede	EQM – teste (Comp.)	EQM – teste (Meta.)
Complacência	PMC S2-V9-ET	$4,174 \times 10^{-4}$	$5,092 \times 10^{-2}$
Metamaterial	PMC S2-V9-ET	$2,628 \times 10^{-3}$	$1{,}324\times10^{-3}$

Em ambos os problemas, as funções consideradas (valor de complacência e termos diagonais da matriz de propriedades homogeneizadas) correspondem a energias de deformação de estruturas de material elástico, homogêneo e isotrópico, em estado plano de tensões. Contudo, há algumas diferenças significativas entre os problemas: cada variável de projeto corresponde a um elemento quadrado no problema de minimização de complacência, mas corresponde a seis elementos quadrilaterais (não-quadrados) no problema de concepção de metamateriais; e, no problema de complacência, tem-se um carregamento imposto, enquanto que, no problema de metamaterial, impõem-se deformações médias com condições de periodicidade sobre os microdeslocamentos. Dessa forma, não é evidente se as informações extraídas dos dados de treinamento de um dos problemas possam ser usadas para obter alguma informação sobre o outro problema. Considerando os conjuntos cruzados, os valores de EQM obtidos aumentaram em uma ordem de grandeza. Ainda assim, os valores de EQM foram uma ordem de grandeza menores do que os obtidos pela abordagem SGC-2. O que significa que a rede desenvolvida para um dos problemas (complacência ou metamaterial) seria capaz de melhorar a precisão dos valores de sensibilidade para o outro problema. Isso indica que há similaridades suficientes entre esses dois problemas e que estratégias de aprendizado por transferência podem ser exploradas em trabalhos futuros. Apesar de ser um resultado preliminar, é um indicativo relevante para a área de otimização topológica assistida por aprendizado de máquina, já que sugere que desenvolvimentos específicos para os problemas clássicos de minimização de complacência podem ser aproveitados para abordar problemas mais complexos (como a concepção de metamateriais).

6.3.3 Generalização em Relação ao Refinamento de Malha

Para que os desenvolvimentos apresentados tenham utilidade prática, é necessário que as RNA sejam capazes de generalizar a tarefa em questão para malhas mais refinadas dos que as que foram usadas na geração dos dados de treinamento. Nesta seção, dois exemplos são utilizados para avaliar a capacidade de generalização das redes desenvolvidas.

O primeiro exemplo corresponde ao problema de minimização de complacência. Utiliza-se uma viga engastada-livre com a totalidade da face esquerda engastada e um carregamento centralizado na face direita, unitário, distribuído em 25% da altura da viga. As proporções são as mesmas utilizadas na geração dos conjuntos de dados: 1 m de altura e 2 m de comprimento. As propriedades do material sólido são E = 1,0 Pa e $\nu = 0,3$, e o parâmetro de *soft-kill* é dado por $p_k = 1 \times 10^{-6}$.

Cinco malhas foram consideradas, uma mais grosseira que a de referência, de 512 (16×32) elementos; a malha de referência, de 2048 (32×64) elementos; e três malhas mais refinadas, de 8 192 (64×128), de 32 768 (128×256) e de 131 072 (256×512) elementos.

Para avaliar apenas os efeitos do refinamento da malha, as mesmas condições usadas nos treinamentos das redes são consideradas. Assim, a análise é feita com apenas 93,75% dos elementos: removem-se as colunas mais próximas do engaste e da face carregada, conforme ilustrado na Figura 6.83 para as malhas de 512 e 131072 elementos. Além disso, os valores de sensibilidade dos elementos de borda das malhas reduzidas não são computados pelas redes PMC, já que eles não possuem os 8 vizinhos necessários para definir as entradas da rede S2-V9-ET.

A topologia considerada, apresentada na Figura 6.83, foi definida manualmente e não pertence aos conjuntos de dados produzidos. Na malha mais refinada (de 131072 elementos), sua fração de volume é de 68% e seu valor de complacência é de 111,5 J/m.



Figura 6.83 – Viga Engastada-Livre em Diferentes Discretizações

Realizou-se todo o procedimento para obter os valores de sensibilidade $\alpha_i^{[C]}$ utilizando a RNA desenvolvida: os valores SGC-0, SGC-1 e SGC-2 foram calculados; então, eles foram normalizados e reescalados; os 27 valores de entrada relativos a cada elemento foram enviados à rede PMC; por fim, cada valor de saída foi reescalado e desnormalizado.

A primeira verificação feita foi em relação ao sinal dos valores de sensibilidade. Observou-se o comportamento desejado: para todos os refinamentos, apenas valores negativos foram obtidos utilizando a rede PMC.

Em seguida, realizaram-se comparações entre os valores de sensibilidade obtidos pela abordagem convencional (SGC-0), pela abordagem SGC-2 e utilizando a rede PMC desenvolvida. O erro ℓ^2 relativo foi avaliado para cada caso, para todos os elementos da análise (ET) e apenas para sólidos internos (ES). A Figura 6.84 apresenta os resultados para as cinco malhas.



Figura 6.84 – Erro ℓ^2 Relativo para Diferentes Discretizações (Complacência)

Considerando todos os elementos (ET), para a abordagem SGC-0 e para as redes PMC, observa-se um pequeno aumento do erro conforme se refina a malha. Enquanto que, para a abordagem SGC-2 o erro é reduzido com o refinamento. Ainda assim, mesmo na malha mais refinada o erro obtido com a PMC é cerca de três vezes menor do que o obtido pela abordagem SGC-2 (e ambos são mais de dez vezes menores que o obtido pela abordagem convencional). Quando apenas sólidos internos são considerados (ES), os valores de erro variam menos com o refinamento. Para sólidos internos, o ganho em performance obtido foi ainda maior: os valores de erro para a SGC-0 estão em torno de 50%; para a SGC-2, em torno de 10%; e para a PMC, em torno de 2%.

Para avaliar o pior caso, isto é, o valor de sensibilidade com maior erro, o erro ℓ^{∞} relativo foi avaliado para cada caso. A Figura 6.85 apresenta os resultados obtidos para as cinco malhas.



Figura 6.85 – Erro ℓ^{∞} Relativo para Diferentes Discretizações (Complacência)

Em relação ao maior erro elementar obtido, a rede PMC perde precisão quando a malha é refinada. Ainda assim, para a malha mais refinada, sua performance é similar à obtida pela abordagem SGC-2 quando todos os elementos são considerados e, quando apenas sólidos internos são considerados, sua performance é superior.

O erro máximo geralmente ocorre em elementos de interface e ele pode ser bastante elevado quando há concentração de tensões na estrutura, ou quando há possibilidade de desconectar ou conectar diferentes partes da estrutura alterando o estado de apenas um elemento. De toda forma, um erro elevado em uma pequena parte dos elementos não necessariamente prejudica o processo de otimização. Se o comportamento geral for coerente (medido pelo erro ℓ^2 relativo) e se a ordenação dos elementos por seus valores de sensibilidade estiver correta, a otimização deve ser bem sucedida. Para avaliar a qualidade da ordenação obtida, o coeficiente de Spearman de cada caso foi computado, os resultados obtidos são apresentados na Figura 6.86.

Observa-se que, quando apenas sólidos internos são considerados, mesmo a abordagem SGC-0 resulta numa ordenação quase perfeita dos elementos, com coeficientes de Spearman maiores que 0,99. Contudo, ao incluir elementos de interface e vazios desconectados, performances bastante distintas são obtidas para cada abordagem. A abordagem convencional falha em fornecer valores de sensibilidade coerentes para elementos vazios, o que resulta em coeficientes de Spearman insatisfatórios. A abordagem SGC-2 produz ordenações coerentes, com melhores performances para malhas refinadas. Por sua vez, as redes PMC produzem ordenações excepcionais para todas as malhas, com coeficientes de Spearman muito próximos do valor máximo.



Figura 6.86 – Coeficiente de Spearman para Diferentes Discretizações (Complacência)

As expressões SGC produzem uma sequência monótona de valores de sensibilidade que convergem ao valor exato: partindo do valor SGC-0, dá-se um passo para chegar no valor SGC-1, outro passo no mesmo sentido para chegar no valor SGC-2 e, por fim, outro passo no mesmo sentido precisa ser dado para atingir o valor exato. Pode-se entender que a PMC fornece esse ajuste, esse passo desconhecido que leva do valor SGC-2 ao valor exato. Para concluir a análise desse caso, verificou-se a quantidade passos de sensibilidade subestimados e a quantidade de superestimados produzidos pela rede PMC. Ou seja, a fração de sensibilidades que não atingiram os valores exatos e a fração de sensibilidades que os ultrapassaram. A Figura 6.87 apresenta os resultados obtidos para cada malha. Os subestimados são divididos em valores que melhoraram a precisão da estimativa (valores entre SGC-2 e SW); e valores que pioraram a precisão da estimativa (correspondentes a passos realizados no sentido incorreto).



Figura 6.87 – Fração de Sensibilidades Subestimadas e Superestimadas (Complacência)

Pode-se notar que a rede PMC não realiza passos na direção incorreta. Em torno de metade das estimativas foi subestimada (com valores entre SGC-2 e SW) e em torno de metade foi superestimada. Ao incluir uma pequena tolerância numérica, de forma que valores um pouco além do exato sejam classificados como subestimados, ou valores um pouco aquém sejam classificados como superestimados, pode-se alterar qualquer uma dessas frações para números próximos de 0% ou de 100%. Isso significa que a grande maioria das estimativas da PMC estão no entorno próximo dos valores exatos.

Os resultados indicam que, apesar de o erro ℓ^{∞} referente à rede PMC piorar com o refinamento da malha, a generalização desejada ocorre satisfatoriamente. Pelas métricas avaliadas, um ganho substancial de precisão pode ser obtido aplicando a rede PMC desenvolvida na ASVF, mesmo para casos muito mais refinados que os considerados nas etapas de treinamento.

Na Figura 6.88, os mapas de sensibilidade obtidos são apresentados na mesma escala, pode-se observar o erro elevado para elementos vazios na abordagem SGC-0 e pequenos erros em elementos de interface na abordagem SGC-2. Em conformidade com as métricas avaliadas, ao utilizar a RNA, tem-se um resultado visualmente indistinguível do exato.



Figura 6.88 – Mapas de Sensibilidade de cada Abordagem (Complacência)

O segundo exemplo corresponde ao problema de concepção de metamateriais. As propriedades do material sólido são E = 1,0 Pa e $\nu = 0,3$, e o parâmetro de *soft-kill* é dado por $p_k = 1 \times 10^{-9}$.

Cinco malhas foram consideradas, uma mais grosseira que a de referência, de 256 (16 × 16) elementos aumentados (1 536 elementos quadrilaterais); a malha de referência, de 1 024 (32×32) elementos aumentados (6 144 elementos quadrilaterais); e três malhas mais refinadas, de 4 096 (64×64), de 16 384 (128×128) e de 65 536 (256×256) elementos aumentados (respectivamente, 24 576, 98 304 e 393 216 elementos quadrilaterais).
A topologia considerada, apresentada na Figura 6.89, foi definida manualmente e não pertence aos conjuntos de dados produzidos. Na malha mais refinada (com 393 216 elementos quadrilaterais), ela possui uma fração de volume de 72%; os termos diagonais da matriz de propriedades homogeneizadas são dados por $C_{00} = C_{11} = 0.377 Pa$ e $C_{22} =$ 0.138 Pa; e as propriedades mecânicas homogeneizadas são dadas por $\hat{E} = 0.35 Pa$ e $\hat{\nu} = 0.27$.



Figura 6.89 – Célula de Base em Diferentes Discretizações

Realizou-se todo o procedimento para obter os valores de variação finita ΔC_{00} , ΔC_{11} e ΔC_{22} utilizando a RNA desenvolvida: os valores SGC-0, SGC-1 e SGC-2 foram calculados; então, eles foram normalizados e reescalados; os 27 valores de entrada relativos a cada elemento foram enviados à rede PMC; por fim, cada valor de saída foi reescalado e desnormalizado. Como os resultados obtidos foram muito similares para as três variações $(\Delta C_{00}, \Delta C_{11} \in \Delta C_{22})$, apresentam-se abaixo apenas os resultados referentes a ΔC_{00} .

Nesse caso, também se observou o comportamento desejado: ao utilizar a PMC, para todos os refinamentos, apenas valores negativos foram obtidos para os elementos sólidos e apenas valores positivos foram obtidos para os elementos vazios.

Realizaram-se comparações entre os valores de sensibilidade obtidos pelas abordagens SGC-0, SGC-2 e PMC. O erro ℓ^2 relativo e o erro ℓ^{∞} foram avaliados para cada caso. As Figuras 6.90 e 6.91 apresentam os resultados para as cinco malhas.

Os resultados produzidos pela RNA foram substancialmente superiores aos da abordagem SGC-2. Ao contrário do que foi observado no exemplo anterior, aqui, todos os valores de erros referentes à rede PMC são reduzidos com o refinamento da malha.

Em seguida, o coeficiente de Spearman de cada caso foi computado, os resultados são apresentados na Figura 6.92. Em comparação com o exemplo anterior, os resultados foram melhores para as abordagens SGC-0 e SGC-2. Para a rede PMC, mais uma vez, obtiveram-se ordenações quase perfeitas para todas as malhas, com coeficientes de Spearman muito próximos do valor máximo.



Figura 6.90 – Erro ℓ^2 Relativo para Diferentes Discretizações (Metamaterial)



Figura 6.91 – Erro ℓ^{∞} Relativo para Diferentes Discretizações (Metamaterial)



Figura 6.92 – Coeficiente de Spearman para Diferentes Discretizações (Metamaterial)

As expressões SGC também produzem uma sequência monótona para as variações finitas dos termos diagonais de C, assim, pode-se entender que a PMC informa o passo que precisa ser dado para continuar a progressão do valor SGC-2 até o valor exato. A Figura 6.93 apresenta, para cada malha, a fração de sensibilidades que foram subestimadas (passos menores que o necessário) e a fração de sensibilidades que foram superestimadas (passos maiores que o necessário) pela rede PMC desenvolvida.

Novamente, nota-se que a rede PMC não realiza passos na direção incorreta. O mesmo comportamento foi observado: a grande maioria das estimativas da PMC estão no entorno próximo dos valores exatos.



Figura 6.93 – Fração de Sensibilidades Subestimadas e Superestimadas (Metamaterial)

Destaca-se que, apesar de as propriedades homogeneizadas (módulo de Young e coeficiente de Poisson) serem muito sensíveis em relação às variáveis de projeto, os termos diagonais da matriz de propriedades (C_{00} , C_{11} e C_{22}) são relativamente bem comportados. Eles correspondem a energias de deformação de estruturas com deformações médias fixadas, o que resulta em funções limitadas mesmo quando o parâmetro de *soft-kill* tende a zero, ao contrário do que ocorre quando cargas são impostas. Isso pode explicar porque resultados melhores foram obtidos para o caso de concepção de metamateriais.

Todas as métricas avaliadas sugerem que a rede PMC é capaz de generalizar a tarefa satisfatoriamente. Ganhos substanciais foram obtidos ao aplicar a RNA desenvolvida na ASVF, mesmo para casos muito mais refinados que os considerados nas etapas de treinamento.

Na Figura 6.94, os mapas de sensibilidade são apresentados. Cada um está em uma escala não-linear independente, definida de forma a melhorar a resolução de contraste das figuras, portanto, eles informam apenas sobre a distribuição relativa dos valores e não sobre suas magnitudes. Pode-se observar imprecisões para elementos vazios na abordagem SGC-0 e, em conformidade com seus coeficientes de Spearman elevados, tem-se que tanto os valores SGC-2 quanto os valores obtidos com a RNA produzem distribuições muito semelhantes à exata.

Os resultados de ambos os exemplos sugerem que as redes desenvolvidas continuam sendo eficazes mesmo quando malhas distintas são utilizadas. O procedimento de normalização dos dados parece ser suficiente para levar em conta as diferenças produzidas pelo refinamento. Isso justifica o tempo investido na geração dos extensos conjuntos de dados, já que essas RNA podem ser aplicadas em uma quantidade de casos muito superior à considerada nos conjuntos de treinamento, de validação e de teste.



Figura 6.94 – Mapas de Sensibilidade de cada Abordagem (Metamaterial)

6.4 ASVF assistida por RNA para a Concepção de Metamateriais

Finalmente, a RNA desenvolvida foi utilizada para aprimorar a ASVF num problema prático de concepção de metamateriais.

Utilizaram-se 65536 (256×256) variáveis de projeto para descrever as topologias da célula de base, o que corresponde a uma malha de 393216 elementos quadrilaterais. Nessa malha, mesmo usando computação paralela, uma análise de sensibilidade exata (SW) leva mais de uma hora para ser realizada, portanto, dias seriam necessários para efetuar uma otimização completa. Em aplicações práticas, múltiplas otimizações precisam ser realizadas, tanto para calibrar os parâmetros do programa quanto para fornecer ao projetista diferentes soluções possíveis para o problema abordado. Assim, o custo de utilizar valores exatos de sensibilidade seria provavelmente proibitivo, já que semanas seriam necessárias para realizar todo o processo de concepção.

Por outro lado, ao usar computação paralela, os tempos da análise SGC-2 e das computações da rede PMC são da ordem de um segundo. O que permite realizar uma otimização completa em alguns minutos. Com isso, o processo completo (que inclui múltiplas otimizações) pode ser feito em algumas horas.

Considerou-se um material de base com propriedades $\nu = 0.3$ e E = 1.0 Pa. Para evitar problemas numéricos, um parâmetro de *soft-kill* de $p_k = 1 \times 10^{-8}$. O valor prescrito para o coeficiente de Poisson foi de $\hat{\nu}^* = -0.5$ e o valor de módulo de Young mínimo foi de $\hat{E}^{\min} = 0.1 Pa$. Como pode ser observado nas Figuras 6.57 e 6.58, durante a geração dos conjuntos de dados, os módulos de Young dos metamateriais com coeficiente de Poisson de -0.5 nunca foram muito maiores que 0.1 Pa, o que sugere que esses valores estão próximos do limite factível. Portanto, essa é uma otimização desafiadora, na qual a restrição sobre o módulo de Young deve dificultar a redução do coeficiente de Poisson até o valor prescrito.

Otimizações foram feitas usando as abordagens SGC-0, SGC-2 e PMC para a realização da ASVF. Diferentes conjuntos de parâmetros foram testados, em todos eles, a abordagem SGC-0 falhou em atingir o valor prescrito para o coeficiente de Poisson homogeneizado. Para algumas configurações de parâmetros, nenhuma das três abordagens teve sucesso (os valores de Poisson foram reduzidos, mas ainda ficaram acima do desejado). Em quase todos os casos, os resultados obtidos com a PMC foram superiores aos obtidos pelas abordagens SGC-0 e SGC-2.

Para realizar uma analise comparativa, um caso representativo foi selecionado. As Figuras 6.95, 6.96 e 6.97 apresentam a evolução das propriedades homogeneizadas na otimização referente a cada uma das três abordagens (SGC-0, SGC-2 e PMC).



Figura 6.95 – Evolução das Propriedades Homogeneizadas para a Abordagem SGC-0



Figura 6.96 – Evolução das Propriedades Homogeneizadas para a Abordagem SGC-2

Os seguintes parâmetros foram utilizados: $D_f^{\text{max}} = \frac{1}{128}$; $r_s = 0,005 m$; $r_m = 0,005 m$; $\gamma = 0\%$; $p_h = 1$; $p_E = 1$; $\beta = 0$; $\delta \hat{E}^{\text{max}} = 0,05 Pa$; e $\psi = 30$. Considerou-se a mesma topologia inicial usada na geração dos dados, com três pequenos furos losangulares (Figura 4.2). Na malha de 393 216 elementos quadrilaterais, essa topologia tem fração de volume de $V_f = 99,6\%$ e resulta num metamaterial de propriedades homogeneizadas $\hat{\nu} = 0,299$ e $\hat{E} = 0,984 Pa$.

No caso SGC-0, por volta da iteração 35, a restrição foi ativada. A topologia obtida possui uma única cavidade, de dimensões relativamente grandes. Por essa razão, as operações de dilatação afetaram pouco o comportamento estrutural. Como o valor de módulo de Young aumentou pouco com cada dilatação, a restrição foi quebrada frequentemente. De toda forma, o processo teve sucesso em produzir candidatos cada vez melhores para a topologia ótima, reduzindo o coeficiente de Poisson a cada novo ciclo. Na iteração 73, o melhor resultado foi obtido, com um coeficiente de Poisson em torno de -0.35.



Figura 6.97 – Evolução das Propriedades Homogeneizadas para a Abordagem PMC

No caso SGC-2, o melhor resultado foi obtido na iteração 18, com um coeficiente de Poisson também em torno de -0.35, e a restrição foi quebrada pela primeira vez na iteração 19. Nesse caso, as dimensões das cavidades são menores, o que faz com que as operações de dilatação afetem o comportamento estrutural com maior intensidade. Em comparação com o resultado obtido no caso SGC-0, a evolução foi acelerada. Maiores reduções de coeficiente de Poisson foram obtidas por iteração, que provocaram maiores reduções no módulo de Young. Ainda assim, mesmo utilizando uma análise de sensibilidade mais precisa que a SGC-0, o valor desejado não foi alcançado com essa configuração de parâmetros.

No caso PMC, a evolução também foi acelerada em relação ao caso SGC-0. Contudo, ao contrário do que ocorreu no caso SGC-2, topologias mais complexas foram obtidas. Para essas estruturas, os efeitos das dilatações foram ainda mais intensos, o que habilitou a produção de uma variedade de soluções candidatas. Ao invés de ficar em torno do mesmo mínimo, fazendo melhorias marginais a cada novo ciclo de dilatação, houve uma exploração maior do domínio de soluções possíveis. Na iteração 53, o melhor resultado foi obtido, com um coeficiente de Poisson igual ao valor prescrito de -0.5.

Apesar de haver uma preferência por topologias mais simples, os resultados indicam que o valor prescrito para o coeficiente de Poisson não pode ser atingido com topologias de cavidade única (soluções dos casos SGC-0 e SGC-2). Ao utilizar as redes PMC para otimizar as estruturas a partir das soluções SGC-0 e SGC-2, obtêm-se valores próximos de -0.4, mas o valor prescrito continua não sendo atingido. Como a abordagem PMC teve sucesso em encontrar um mínimo com o valor prescrito e em continuar a otimizar a soluções dos outros casos, entende-se que de fato houve um aumento de precisão nas análises de sensibilidade, o que resultou em processos de otimização mais efetivos.

Para avaliar quantitativamente os ganhos obtidos ao utilizar uma análise de sensibilidade mais precisa no decorrer das otimizações, define-se uma medida de eficiência para cada iteração:

$$\eta^{(j)} = \begin{cases} \frac{\hat{\nu}^{(j-1)} - \hat{\nu}^{(j)}}{\hat{E}^{(j-1)} - \hat{E}^{(j)}} &, \text{ se } \hat{\nu}^{(j-1)} > \hat{\nu}^{(j)} & \text{e } \hat{E}^{(j-1)} > \hat{E}^{(j)} \\ \frac{\hat{E}^{(j)} - \hat{E}^{(j-1)}}{\hat{\nu}^{(j)} - \hat{\nu}^{(j-1)}} &, \text{ se } \hat{\nu}^{(j)} > \hat{\nu}^{(j-1)} & \text{e } \hat{E}^{(j)} > \hat{E}^{(j-1)} \\ 0 &, \text{ caso contrário.} \end{cases}$$
(6.25)

Essa medida avalia a eficiência da j-ésima iteração em converter uma redução de módulo de Young em uma redução de coeficiente de Poisson (se ambos forem reduzidos), ou em converter um aumento de coeficiente de Poisson em um aumento do módulo de Young (se ambos forem aumentados). O valor de eficiência é definido como zero para os raros casos em que o coeficiente de Poisson é reduzido sem que o módulo de Young diminua (situação completamente vantajosa), ou em que o módulo de Young diminui apesar de o coeficiente de Poisson aumentar (situação completamente desvantajosa). Nas otimizações realizadas, observou-se que esses casos excepcionais ocorreram em menos de 3% das iterações.

As Figuras 6.98, 6.99 e 6.100 mostram os valores de eficiência de cada iteração, de cada processo de otimização. No processo de otimização de todos os casos, observa-se um conjunto significativo de iterações no qual a eficiência se manteve acima de 1,0, garantindo a redução da função objetivo (mesmo que um mínimo global não tenha sido atingido com as abordagens SGC-0 e SGC-2). A eficiência máxima obtida com a abordagem SGC-0 foi em torno de 3,0; a obtida com a abordagem SGC-2 foi de pouco menos de 5,0; e a obtida com a abordagem PMC foi de pouco mais de 8,0. Ignorando os casos excepcionais (aos quais se atribuem eficiência nula), os valores de eficiência médios obtidos para cada caso foram: 1,42 (SGC-0), 1,60 (SGC-2) e 1,72 (PMC).



Figura 6.98 – Eficiência das Iterações para a Abordagem SGC-0



Figura 6.99 – Eficiência das Iterações para a Abordagem SGC-2



Figura 6.100 – Eficiência das Iterações para a Abordagem PMC

Novamente, observa-se que a abordagem SGC-2 extrai mais informações do problema que a abordagem SGC-0, que tem performance similar ou superior à abordagem convencionalmente utilizada na literatura (ICPO Simples). E, por sua vez, a abordagem PMC extrai ainda mais informações. Esse resultado reforça que a rede PMC teve sucesso em aprimorar a ASVF considerada e, por consequência, todo o processo de otimização.

Por fim, as Figuras 6.101 e 6.102 apresentam, respectivamente, as topologias otimizadas obtidas por cada procedimento de otimização e as quatro soluções candidatas obtidas durante a otimização PMC.



Figura 6.102 – Soluções Candidatas

As topologias obtidas pelas abordagens SGC-0 e SGC-2 são simples, de cavidade única, e possuem coeficiente de Poisson negativo, contudo, não atingiram o valor prescrito. Por sua vez, a solução obtida pela abordagem PMC corresponde a um mínimo global, com coeficiente de Poisson de -0,500. Ainda assim, nessa solução, há algumas cavidades pequenas que podem dificultar a manufatura de tais estruturas. Avaliando as soluções candidatas da otimização PMC, a estrutura com coeficiente de Poisson -0.546 não apenas possui uma topologia mais simples, mas também fornece um valor de Poisson inferior ao prescrito (que pode ser facilmente corrigido, já que aproximar a propriedade homogeneizada do valor da propriedade do material de base é uma tarefa relativamente fácil). Numa aplicação prática, essa candidata poderia ser adotada como solução final para o problema realista considerado.

A partir dos resultados apresentados, ficam evidentes as dificuldades em balancear todos os critérios: função-objetivo, restrições, independência de malha, manufaturabilidade das estruturas. Todos os parâmetros do programa de otimização influenciam muito o comportamento do problema abordado e, mesmo utilizando valores de sensibilidade precisos, etapas de calibração continuam sendo necessárias. De toda forma, as ASVF propostas reduzem a quantidade de incertezas do método e facilitam essas etapas calibração de parâmetros. Para esse exemplo de aplicação realista, em concordância com todos os outros resultados obtidos, os aprimoramentos desenvolvidos resultaram em procedimentos de otimização mais robustos, estáveis e efetivos.

7 CONCLUSÃO

Nesta tese, problemas de otimização topológica por métodos de densidade discretos foram descritos sob o paradigma da PLIS. Isso permitiu uma definição rigorosa da principal etapa dessa classe de algoritmos, a ASVF. Essa análise sistemática contrapõe a prática convencionalmente utilizada na literatura atual, em que expressões desenvolvidas para métodos contínuos são reaproveitadas para os métodos discretos, sem que seja devidamente avaliado se tais expressões são adequadas para os problemas estudados.

Dois problemas foram abordados: o problema de minimização de complacência mecânica, sujeito a um volume imposto; e o problema de concepção de metamateriais isotrópicos, com coeficiente de Poisson prescrito e módulo de Young mínimo. A isotropia dos metamateriais foi garantida através de imposição de simetria diedral D_3 na célula de base, por essa razão, células hexagonais foram usadas. A abordagem SGC foi proposta e desenvolvida, ela fornece uma sequência de expressões de sensibilidade de precisão crescente. Mesmo para um único passo, demonstrou-se que essa abordagem já fornece expressões mais precisas que as convencionalmente utilizadas na literatura.

Diversos resultados foram produzidos para ambos os problemas, eles ilustram os ganhos em precisão obtidos pelas análises SGC. Esses resultados compuseram dois artigos científicos submetidos em revistas de elevado fator de impacto (um deles já foi publicado, o outro está atualmente sendo revisado).

Programas robustos foram desenvolvidos para gerar extensos conjuntos de dados para cada um dos problemas. Os códigos estão disponíveis em repositórios públicos do *GitHub* e podem ser usados por qualquer pesquisador que queira usar técnicas de aprendizado de máquina em problemas de otimização topológica: <https://github.com/ Joquempo/Cantilever-Dataset>; <https://github.com/Joquempo/Metamaterial-Dataset>.

Os conjuntos gerados foram utilizados para o treinamento de algumas RNA. Para ambos os problemas, as redes PMC obtidas se mostraram capazes de fornecer valores de sensibilidade de elevada precisão, com custos computacionais baixos. As redes desenvolvidas continuam funcionando bem quando malhas refinadas são utilizadas, o que habilita sua utilização em problemas práticos.

Por fim, a ASVF assistida por RNA foi utilizada para abordar um caso realista de concepção de metamateriais. Os resultados são promissores e sugerem que os desenvolvimentos apresentados de fato aprimoram os procedimentos de otimização.

Todos os objetivos listados foram atingidos com sucesso. Ademais, deseja-se, posteriormente à defesa desta tese, elaborar mais um artigo científico, especificamente

sobre o uso de RNA na ASVF. Uma vez publicado o artigo, as RNA serão disponibilizadas em um repositório público do *GitHub*, em conjunto com instruções de uso.

Quanto à implementação utilizada, não há conclusões contundentes. Métodos de densidade ainda precisam remediar os problemas de dependência de malha e de manufaturabilidade das estruturas, e, por ora, não há maneira fácil de solucionar essas questões. Filtros de sensibilidade são frequentemente usados e, neste trabalho, também foram incluídos operadores morfológicos para melhorar a qualidade dos resultados. Operadores de abertura foram aplicados em cada iteração, como uma pequena perturbação que enviesa as estruturas para que elas sejam mais manufaturáveis. E operadores de dilatação foram usados para afastar os valores de módulo de Young de seus valores mínimos, sempre que a restrição era quebrada.

Destaca-se que, tanto a inclusão dos operadores de dilatação, quanto a utilização de um critério de parada adequado a essa classe de métodos de otimização (baseado em paciência), foram medidas que certamente tornaram os programas mais robustos. O critério de parada necessariamente é atingido em um número finito de iterações e, no geral, várias estruturas candidatas são avaliadas durante o processo de otimização, aumentando as chances de uma solução eficaz ser obtida.

Todos os resultados obtidos sugerem que, ao realizar análises de sensibilidade mais precisas, o algoritmo de otimização realiza passos mais bem informados que possibilitam a obtenção de estruturas mais eficazes. Além disso, a redução de incertezas facilita a calibração dos parâmetros do programa. Mesmo que a configuração de parâmetros não seja ideal, se os valores de sensibilidade forem precisos, o programa geralmente produz boas soluções.

Quanto ao desenvolvimento das RNA, há alguns comentários relevantes. Os resultados indicam que, não apenas as redes generalizam a tarefa para malhas distintas do treinamento, mas há uma correlação entre os dois problemas abordados, o que possibilita o uso de técnicas de aprendizado por transferência. Isso significa que os dados gerados e as redes treinadas podem ser reaproveitados para abordar casos que extrapolam seus escopos iniciais. Assim, contesta-se o ceticismo sobre a utilidade prática de redes neurais em problemas de otimização topológica. Mostrou-se que, especificando bem a aplicação e fornecendo uma quantidade suficiente de informações pré-processadas, essa ferramenta pode efetivamente contribuir para aprimorar os métodos atuais de otimização topológica.

As informações fornecidas para as redes se mostraram necessárias para realizar o mapeamento desejado (e suficientes nos exemplos avaliados). Tanto a progressão das sensibilidades SGC quanto as informações dos vizinhos imediatos contribuíram para a estimativa dos valores de sensibilidade exatos. Devido à grande extensão dos conjuntos de dados, técnicas de regularização se mostraram desnecessárias. Ao adquirir uma boa performance para o conjunto de treinamento, as redes adquiriram boas performances para os conjuntos de validação e de teste.

Em trabalhos futuros, as redes desenvolvidas devem passar por mais otimizações de arquitetura. Aparentemente, as redes selecionadas possuem mais parâmetros que o necessário, portanto, alterando os hiperparâmetros, a mesma precisão possivelmente pode ser obtida com custos computacionais reduzidos.

As propriedades de invariância esperadas não foram perfeitamente extraídas dos conjuntos de dados. Uma possibilidade futura seria incluir penalidades na função custo do treinamento, de forma a garantir essas propriedades. Tal medida potencialmente poderia melhorar as capacidades de generalização das redes.

Algo que ficou evidente durante todo o desenvolvimento desta tese são as diferenças substanciais entre elementos de diferentes classes. Vazios desconectados devem possuir sensibilidades próximas de zero. O efeito de alterar o estado de um sólido interno geralmente é um efeito local, o que resulta em estimativas SGC muito precisas para essa classe de elementos. Sólidos e vazios de interface podem causar alterações globais no comportamento estrutural, ao serem alterados, eles podem conectar ou desconectar diferentes regiões da estrutura.

A maior parte dos dados gerados diz respeito a sólidos internos e vazios desconectados, enquanto que as classes mais críticas (de elementos de interface) possivelmente ficaram sub-representadas durante os treinamentos das redes e as avaliações de performance. Uma sugestão para aprimorar ainda mais a precisão das análises, seria considerar separadamente cada classe de elementos.

No caso de minimização de complacência, efeitos de borda foram desconsiderados. Quando cargas são impostas, sensibilidades extremas são obtidas para uma parte dos elementos. Nas análises SGC, talvez isso não cause problemas, já que um elemento de sensibilidade muito elevada, mesmo que haja alguma imprecisão na estimativa, continuará sendo classificado corretamente. Contudo, quando RNA são utilizadas, os picos podem produzir respostas imprevisíveis. Lidar com tais efeitos de borda é um problema deixado em aberto, que deve ser estudado futuramente.

No caso de concepção de metamateriais, a SGC foi estudada apenas para os termos diagonais da matriz de propriedades homogeneizadas, mas a abordagem também pode ser usada para estimar qualquer termo não-diagonal. Assim como foi feito para os termos diagonais, estudos específicos devem ser realizados para, por exemplo, buscar um chute inicial do MGC que resulte em expressões cujos erros decaem monotonicamente. Ademais, os desenvolvimentos apresentados não são exclusivos para materiais isotrópicos, desde que as funções do problema dependam apenas dos termos diagonais da matriz de propriedades homogeneizadas, materiais anisotrópicos podem ser projetados utilizando exatamente as mesmas expressões apresentadas neste trabalho.

Os desenvolvimentos apresentados podem ser estendidos a problemas de condução térmica, mecanismos flexíveis e a estruturas tridimensionais. Temas que também devem ser abordados com profundidade em trabalhos futuros.

REFERÊNCIAS

AGRAWAL, G. *et al.* Robust topology optimization of negative poisson's ratio metamaterials under material uncertainty. Finite Elements in Analysis and Design, Elsevier, v. 198, p. 103649, 2022.

ANDREASSEN, E.; LAZAROV, B. S.; SIGMUND, O. Design of manufacturable 3d extremal elastic microstructure. **Mechanics of Materials**, Elsevier, v. 69, n. 1, p. 1–10, 2014.

ARORA, J. S. Introduction to optimum design. [S.l.]: Fourth Edition. Elsevier, 2017.

BARBAROSIE, C.; TORTORELLI, D. A.; WATTS, S. On domain symmetry and its use in homogenization. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 320, p. 1–45, 2017.

BEHNEL, S. *et al.* Cython: The best of both worlds. Computing in Science & Engineering, IEEE, v. 13, n. 2, p. 31–39, 2011.

BEJANI, M. M.; GHATEE, M. A systematic review on overfitting control in shallow and deep neural networks. Artificial Intelligence Review, Springer, p. 1–48, 2021.

BENDØSE, M.; SIGMUND, O. Topology optimization: theory, methods and applications. [S.l.]: Springer, 2003.

BENDSØE, M. P. Optimal shape design as a material distribution problem. Structural optimization, Springer, v. 1, n. 4, p. 193–202, 1989.

BOJCZUK, D.; MRÓZ, Z. Topological sensitivity derivative and finite topology modifications: application to optimization of plates in bending. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 39, n. 1, p. 1, 2009.

CÉA, J. *et al.* The shape and topological optimizations connection. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 188, n. 4, p. 713–726, 2000.

COOK, R. D. *et al.* Concepts and applications of finite element analysis. [S.l.]: John wiley & sons, 2007.

CRESWELL, A. *et al.* Generative adversarial networks: An overview. **IEEE signal processing magazine**, IEEE, v. 35, n. 1, p. 53–65, 2018.

CUNHA, D. C. *et al.* Finite variation sensitivity analysis for discrete topology optimization of continuum structures. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 64, n. 6, p. 3877–3909, 2021.

DA, D. Inverse homogenization design of lattice structures without scale separation. In: ELSEVIER. **Structures**. [S.l.], 2021. v. 29, p. 796–805.

DENG, H.; TO, A. C. Topology optimization based on deep representation learning (drl) for compliance and stress-constrained design. **Computational Mechanics**, Springer, v. 66, n. 2, p. 449–469, 2020.

DIJK, N. P. van *et al.* Level-set methods for structural topology optimization: a review. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 48, n. 3, p. 437–472, 2013.

ELINGAARD, M. O. *et al.* De-homogenization using convolutional neural networks. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 388, p. 114197, 2022.

FARIA, J. R. de *et al.* Second order topological sensitivity analysis. International journal of solids and structures, Elsevier, v. 44, n. 14-15, p. 4958–4977, 2007.

GEERS, M. G.; KOUZNETSOVA, V. G.; BREKELMANS, W. Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges. Journal of computational and applied mathematics, Elsevier, v. 234, n. 7, p. 2175–2182, 2010.

GÉRON, A. Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow: Concepts. [S.l.]: O'Reilly Media, 2017.

GHABRAIE, K. The eso method revisited. Structural and Multidisciplinary Optimization, Springer, v. 51, n. 6, p. 1211–1222, 2015.

GLOROT, X.; BENGIO, Y. Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks. In: JMLR WORKSHOP AND CONFERENCE PROCEEDINGS. **Proceedings of the thirteenth international conference on artificial intelligence and statistics**. [S.l.], 2010. p. 249–256.

GOODFELLOW, I.; MCDANIEL, P.; PAPERNOT, N. Making machine learning robust against adversarial inputs. **Communications of the ACM**, ACM New York, NY, USA, v. 61, n. 7, p. 56–66, 2018.

GROENWOLD, A. A.; ETMAN, L. F. P. A quadratic approximation for structural topology optimization. International Journal for Numerical Methods in Engineering, Wiley Online Library, v. 82, n. 4, p. 505–524, 2010.

GUTTMAN, L. Enlargement methods for computing the inverse matrix. The annals of mathematical statistics, Institute of Mathematical Statistics, v. 17, n. 3, p. 336–343, 1946.

HAGER, W. W. Updating the inverse of a matrix. **SIAM review**, SIAM, v. 31, n. 2, p. 221–239, 1989.

HALLE, A.; CAMPANILE, L. F.; HASSE, A. An artificial intelligence–assisted design method for topology optimization without pre-optimized training data. **Applied Sciences**, MDPI, v. 11, n. 19, p. 9041, 2021.

HASSINE, M.; KHELIFI, K. Higher-order topological sensitivity analysis for the laplace operator. Comptes Rendus Mathematique, Elsevier, v. 354, n. 10, p. 993–999, 2016.

HUANG, X.; RADMAN, A.; XIE, Y. M. Topological design of microstructures of cellular materials for maximum bulk or shear modulus. **Computational Materials Science**, Elsevier, v. 50, n. 6, p. 1861–1870, 2011.

HUANG, X.; XIE, Y. M. Convergent and mesh-independent solutions for the bidirectional evolutionary structural optimization method. Finite Elements in Analysis and Design, Elsevier, v. 43, n. 14, p. 1039–1049, 2007.

JACQUELIN, M.; LIN, L.; YANG, C. Pselinv—a distributed memory parallel algorithm for selected inversion: The symmetric case. **ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)**, ACM New York, NY, USA, v. 43, n. 3, p. 1–28, 2016.

JANG, S.; YOO, S.; KANG, N. Generative design by reinforcement learning: enhancing the diversity of topology optimization designs. **Computer-Aided Design**, Elsevier, v. 146, p. 103225, 2022.

JANIESCH, C.; ZSCHECH, P.; HEINRICH, K. Machine learning and deep learning. **Electronic Markets**, Springer, v. 31, n. 3, p. 685–695, 2021.

JEONG, H. *et al.* A physics-informed neural network-based topology optimization (pinnto) framework for structural optimization. **Engineering Structures**, Elsevier, v. 278, p. 115484, 2023.

KELKAR, P. U. *et al.* Cellular auxetic structures for mechanical metamaterials: A review. **Sensors**, MDPI, v. 20, n. 11, p. 3132, 2020.

KINGMA, D. P.; BA, J. Adam: A method for stochastic optimization. arXiv preprint arXiv:1412.6980, 2014.

KOLLMANN, H. T. *et al.* Deep learning for topology optimization of 2d metamaterials. **Materials & Design**, Elsevier, v. 196, p. 109098, 2020.

LECUN, Y.; BENGIO, Y.; HINTON, G. Deep learning. **nature**, Nature Publishing Group UK London, v. 521, n. 7553, p. 436–444, 2015.

LI, M. *et al.* Dimension reduction and surrogate based topology optimization of periodic structures. **Composite Structures**, Elsevier, v. 229, p. 111385, 2019.

LI, Z. *et al.* A survey of convolutional neural networks: analysis, applications, and prospects. **IEEE transactions on neural networks and learning systems**, IEEE, 2021.

LIANG, Y.; CHENG, G. Topology optimization via sequential integer programming and canonical relaxation algorithm. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier, v. 348, p. 64–96, 2019.

LIN, L. *et al.* Selinv—an algorithm for selected inversion of a sparse symmetric matrix. **ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)**, ACM New York, NY, USA, v. 37, n. 4, p. 1–19, 2011.

LUI, H. F.; WOLF, W. R. Construction of reduced-order models for fluid flows using deep feedforward neural networks. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 872, p. 963–994, 2019.

ŁUKASIAK, T. Macroscopically isotropic and cubic-isotropic two-material periodic structures constructed by the inverse-homogenization method. In: SPRINGER. World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimisation. [S.l.], 2017. p. 1333–1348.

MAHMUD, M. S.; HUANG, J. Z.; FU, X. Variational autoencoder-based dimensionality reduction for high-dimensional small-sample data classification. International Journal of Computational Intelligence and Applications, World Scientific, v. 19, n. 01, p. 2050002, 2020.

MARTINEZ, J. A note on the theoretical convergence properties of the simp method. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 29, n. 4, p. 319–323, 2005.

MEI, Y.-l.; WANG, X.-m.; CHENG, G.-d. Binary discrete method of topology optimization. **Applied Mathematics and Mechanics**, Springer, v. 28, n. 6, p. 707–719, 2007.

MÉNDEZ, C. *et al.* Making use of symmetries in the three-dimensional elastic inverse homogenization problem. International Journal for Multiscale Computational Engineering, Begel House Inc., v. 17, n. 3, 2019.

MRÓZ, Z.; BOJCZUK, D. Finite topology variations in optimal design of structures. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 25, n. 3, p. 153–173, 2003.

NORATO, J. A. *et al.* A topological derivative method for topology optimization. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 33, n. 4-5, p. 375–386, 2007.

NOVOTNY, A. A. *et al.* Topological sensitivity analysis. Computer methods in applied mechanics and engineering, Elsevier, v. 192, n. 7-8, p. 803–829, 2003.

PODESTÁ, J. M. *et al.* Symmetry considerations for topology design in the elastic inverse homogenization problem. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Elsevier, v. 128, p. 54–78, 2019.

PRAWOTO, Y. Seeing auxetic materials from the mechanics point of view: a structural review on the negative poisson's ratio. **Computational Materials Science**, Elsevier, v. 58, p. 140–153, 2012.

QIAN, C.; YE, W. Accelerating gradient-based topology optimization design with dualmodel artificial neural networks. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 63, p. 1687–1707, 2021.

QUERIN, O. M.; STEVEN, G. P.; XIE, Y. M. Evolutionary structural optimisation (eso) using a bidirectional algorithm. **Engineering computations**, MCB UP Ltd, v. 15, n. 8, p. 1031–1048, 1998.

RADMAN, A.; HUANG, X.; XIE, Y. Topological optimization for the design of microstructures of isotropic cellular materials. **Engineering optimization**, Taylor & Francis, v. 45, n. 11, p. 1331–1348, 2013.

RAISSI, M.; PERDIKARIS, P.; KARNIADAKIS, G. E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational physics, Elsevier, v. 378, p. 686–707, 2019.

RASAMOELINA, A. D.; ADJAILIA, F.; SINČÁK, P. A review of activation function for artificial neural network. In: IEEE. **2020 IEEE 18th World Symposium on Applied Machine Intelligence and Informatics (SAMI)**. [S.l.], 2020. p. 281–286.

REN, X. *et al.* Auxetic metamaterials and structures: a review. Smart materials and structures, IOP Publishing, v. 27, n. 2, p. 023001, 2018.

RIETZ, A. Sufficiency of a finite exponent in simp (power law) methods. Structural and Multidisciplinary Optimization, Springer, v. 21, n. 2, p. 159–163, 2001.

ROSENBLATT, F. The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain. **Psychological review**, American Psychological Association, v. 65, n. 6, p. 386, 1958.

ROZVANY, G. I. N. A critical review of established methods of structural topology optimization. **Structural and multidisciplinary optimization**, Springer, v. 37, n. 3, p. 217–237, 2009.

ROZVANY, G. I. N.; QUERIN, O. M. Combining eso with rigorous optimality criteria. **International journal of vehicle design**, Inderscience Publishers, v. 28, n. 4, p. 294–299, 2002.

ROZVANY, G. I. N.; QUERIN, O. M. Theoretical foundations of sequential element rejections and admissions (sera) methods and their computational implementation in topology optimization. In: **9th AIAA/ISSMO symposium on multidisciplinary analysis and optimization**. [S.l.: s.n.], 2002. p. 5521.

SÁ, L. F. N. *et al.* Topological derivatives applied to fluid flow channel design optimization problems. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 54, n. 2, p. 249–264, 2016.

SIGMUND, O. Materials with prescribed constitutive parameters: an inverse homogenization problem. International Journal of Solids and Structures, Elsevier, v. 31, n. 17, p. 2313–2329, 1994.

SIGMUND, O. Tailoring materials with prescribed elastic properties. Mechanics of Materials, Elsevier, v. 20, n. 4, p. 351–368, 1995.

SIGMUND, O. Morphology-based black and white filters for topology optimization. Structural and Multidisciplinary Optimization, Springer, v. 33, n. 4, p. 401–424, 2007.

SIGMUND, O.; MAUTE, K. Sensitivity filtering from a continuum mechanics perspective. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 46, n. 4, p. 471–475, 2012.

SIGMUND, O.; PETERSSON, J. Numerical instabilities in topology optimization: a survey on procedures dealing with checkerboards, mesh-dependencies and local minima. **Structural optimization**, Springer, v. 16, n. 1, p. 68–75, 1998.

SIGMUND, O.; TORQUATO, S. Design of materials with extreme thermal expansion using a three-phase topology optimization method. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Elsevier, v. 45, n. 6, p. 1037–1067, 1997.

SIRIGNANO, J.; SPILIOPOULOS, K. Dgm: A deep learning algorithm for solving partial differential equations. Journal of computational physics, Elsevier, v. 375, p. 1339–1364, 2018.

SIVAPURAM, R.; PICELLI, R. Topology optimization of binary structures using integer linear programming. Finite Elements in Analysis and Design, Elsevier, v. 139, p. 49–61, 2018.

SIVAPURAM, R.; PICELLI, R.; XIE, Y. M. Topology optimization of binary microstructures involving various non-volume constraints. **Computational Materials Science**, Elsevier, v. 154, p. 405–425, 2018.

SUN, H.; MA, L. Generative design by using exploration approaches of reinforcement learning in density-based structural topology optimization. **Designs**, MDPI, v. 4, n. 2, p. 10, 2020.

SUN, K.; LIANG, Y.; CHENG, G. Sensitivity analysis of discrete variable topology optimization. Structural and Multidisciplinary Optimization, Springer, v. 65, n. 8, p. 1–18, 2022.

SVANBERG, K. The method of moving asymptotes—a new method for structural optimization. International journal for numerical methods in engineering, Wiley Online Library, v. 24, n. 2, p. 359–373, 1987.

SVANBERG, K. A class of globally convergent optimization methods based on conservative convex separable approximations. **SIAM journal on optimization**, SIAM, v. 12, n. 2, p. 555–573, 2002.

SVANBERG, K.; WERME, M. A hierarchical neighbourhood search method for topology optimization. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 29, n. 5, p. 325–340, 2005.

SVANBERG, K.; WERME, M. Topology optimization by a neighbourhood search method based on efficient sensitivity calculations. **International journal for numerical methods in engineering**, Wiley Online Library, v. 67, n. 12, p. 1670–1699, 2006.

TANSKANEN, P. The evolutionary structural optimization method: theoretical aspects. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 191, n. 47-48, p. 5485–5498, 2002.

WANG, F.; SIGMUND, O.; JENSEN, J. S. Design of materials with prescribed nonlinear properties. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Elsevier, v. 69, p. 156–174, 2014.

WANG, J. *et al.* A review on extreme learning machine. Multimedia Tools and Applications, Springer, v. 81, n. 29, p. 41611–41660, 2022.

WOLDSETH, R. V. *et al.* On the use of artificial neural networks in topology optimisation. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 65, n. 10, p. 294, 2022.

WOODBURY, M. A. Inverting modified matrices. **Memorandum report**, v. 42, n. 106, p. 336, 1950.

XIA, L. *et al.* Stress-based topology optimization using bi-directional evolutionary structural optimization method. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier, v. 333, p. 356–370, 2018.

YANG, X. Y. *et al.* Bidirectional evolutionary method for stiffness optimization. **AIAA** journal, v. 37, n. 11, p. 1483–1488, 1999.

YVONNET, J. Computational homogenization of heterogeneous materials with finite elements. [S.l.]: Springer, 2019. v. 258.

ZEILER, M. D.; FERGUS, R. Visualizing and understanding convolutional networks. In: SPRINGER. Computer Vision–ECCV 2014: 13th European Conference, Zurich, Switzerland, September 6-12, 2014, Proceedings, Part I 13. [S.l.], 2014. p. 818–833.

ZHENG, Y. *et al.* Evolutionary topology optimization for mechanical metamaterials with auxetic property. **International Journal of Mechanical Sciences**, Elsevier, v. 179, p. 105638, 2020.

ZHOU, E. *et al.* A normalization strategy for beso-based structural optimization and its application to frequency response suppression. Acta Mechanica, Springer, v. 232, n. 4, p. 1307–1327, 2021.

ZHOU, M.; ROZVANY, G. I. N. The coc algorithm, part ii: Topological, geometrical and generalized shape optimization. Computer methods in applied mechanics and engineering, Elsevier, v. 89, n. 1–3, p. 309–336, 1991.

ZHOU, M.; ROZVANY, G. I. N. On the validity of eso type methods in topology optimization. Structural and Multidisciplinary Optimization, Springer, v. 21, n. 1, p. 80–83, 2001.