METAMODELAGEM DE FUNÇÕES DETERMINÍSTICAS POR COMPOSIÇÃO INTEGRADA DE ESPECIALISTAS LOCAIS

Carla Frisso
Instituto Tecnológico de Aeronáutica
Pça. Mal. Eduardo Gomes, 50, CTA – ITA, São José dos Campos – SP, CEP 12228-900.
carla.frisso@gmail.com

Rodrigo Arnaldo Scarpel
Instituto Tecnológico de Aeronáutica
Pça. Mal. Eduardo Gomes, 50 sala 2311, CTA – ITA, São José dos Campos – SP, CEP 12228-900.
rodrigo@ita.br

Denise Beatriz Teixeira Pinto do Areal Ferrari
Instituto Tecnológico de Aeronáutica
Pça. Mal. Eduardo Gomes, 50, CTA – ITA, São José dos Campos – SP, CEP 12228-900.
denise@ita.br

RESUMO

Em engenharia, a investigação de sistemas e processos para otimização pode ser uma tarefa difícil ou até impossível se não sistematizada adequadamente. A metodologia de superfícies de resposta (MSR) pode facilitar o tratamento de tais problemas. Uma opção é aplicar um procedimento global, em que se determina uma função de mapeamento da variável resposta considerando todo o espaço de entrada. Para isto, empregam-se métodos aproximativos, em que uma representação matemática muito mais simples (metamodelo) que a superfície real é utilizada para reduzir significativamente o custo de processamento associado às simulações computacionais. Neste trabalho, o modelo de composição integrada de especialistas locais (CIEL), proposto por Scarpel e Milioni (2006) para geração de modelos de previsão, é explorado para a metamodelagem de algumas funções determinísticas, visando auxiliar o processo de otimização. A ideia básica é construir uma superfície de resposta utilizando um metamodelo composto por especialistas simples (funções polinomiais de primeiro grau).

PALAVRAS CHAVE. Metamodelos, Otimização, Composição de Especialistas Locais.

Área principal: PO na Indústria, Outras Aplicações em PO.

ABSTRACT

The analysis and optimization of most Engineering systems and processes can be a hard or even impossible task, if not properly systematized. Response surface methods can be used to facilitate the analysis of such problems. One possible approach is to adopt global procedures that map the response variable as a function of the input variables, considering the whole input space. Therefore, approximation methods can be used to provide a much simpler mathematical representation (metamodel or surrogate model) of the real response surface, in order to reduce the processing cost of computer simulations. This article explores the use of integrated mixture of local experts model (IMLEM or CIEL, in Portuguese), proposed by Scarpel and Milioni (2006) to perform prediction, in the context of metamodeling deterministic functions for optimization. The main idea is to construct a response surface using a metamodel composed of simple experts (first degree polynomial functions).

KEYWORDS. Metamodel. Optimization. Mixture of Local Experts.

Main area: OR in Industry, Other Applications of OR.

1. Introdução

Em engenharia, a investigação de sistemas e processos para otimização pode ser uma tarefa difícil ou até mesmo impossível se não sistematizada adequadamente, dada a complexidade dos problemas atuais. Esta dificuldade se dá, principalmente, devido ao elevado número de variáveis envolvidas e a intrincada relação entre elas, inviabilizando sua otimização.

Para tratar esse tipo de situação, foi desenvolvida a metodologia de superfícies de resposta (MSR). Segundo Montgomery (2001), a MSR é uma coleção de técnicas matemáticas e estatísticas úteis na coleta de dados, modelagem e análise de problemas, em que uma resposta de interesse é influenciada por um conjunto de variáveis e o objetivo é otimizar esta resposta. Por esta metodologia, cria-se uma função que mapeie e represente, de forma razoável, a variável resposta Y (espaço de saída) para os pontos do espaço de entrada (variáveis independentes), a partir de um conjunto finito de amostras coletadas de forma sistemática, para, posteriormente, aplicar algum dos métodos de otimização existentes, sendo a função objetivo do problema a função de mapeamento obtida e as suas variáveis de decisão as variáveis independentes do modelo.

De acordo com Montgomery (2001), a forma tradicional de aplicar a MSR é através de um procedimento sequencial em que, inicialmente, gera-se uma função de mapeamento da variável resposta utilizando modelos polinomiais de primeira ou segunda ordem, em uma pequena região do espaço de entrada. Esse mapeamento é feito em uma pequena região do espaço de entrada, pois é pouco provável que um único modelo deste tipo seja capaz de gerar uma boa aproximação da relação funcional real para todo o espaço de entrada. Ao analisar a função de mapeamento obtida, caso esteja longe da solução ótima, esta tem pouca curvatura, de forma que, um modelo de primeira ordem, além de apropriado, possibilita a identificação de um caminho de melhoria. Seguindo-se por este caminho, identifica-se a região em que o ponto ótimo se encontra e para obter a solução ótima um modelo de segunda ordem é utilizado.

De forma alternativa, pode-se aplicar um procedimento global, em que funções mais sofisticadas são empregadas para a criação da função de mapeamento da variável resposta, considerando todo o espaço de entrada.

Nos casos em que os experimentos reais para a coleta dos dados é proibitivo, seja por conta dos altos custos ou dos riscos envolvidos, uma alternativa é a realização de simulações, ou experimentos computacionais. As simulações computacionais começaram a substituir os experimentos físicos na indústria aeronáutica, a partir das décadas de 60-70, de acordo com Jasbir (1997). A partir de experiências bem sucedidas, outras áreas da engenharia incorporaram simulação e análise computacionais em diversas tarefas. O desenvolvimento e evolução de *softwares* para análise de projeto de engenharia, como os de análise estrutural através de elementos finitos ou de dinâmica dos fluidos, forneceram o suporte necessário para a obtenção de respostas de alta fidelidade.

Apesar da crescente velocidade e potência computacional, os códigos complexos de alta fidelidade ainda possuem alto custo computacional, que pode inviabilizar a análise de todas as combinações possíveis das variáveis. Gu apud Simpson et al. (2004) cita o exemplo da *Ford Motor Company*, em que a simulação da colisão de um automóvel pode levar de 36 a 160 horas.

Em consequência disso, empregam-se métodos aproximativos, os quais reduzem significativamente o custo computacional. A ideia básica é determinar uma aproximação matemática muito mais simples da superfície real. Tal modelo é chamado de “modelo do modelo” ou metamodelo. O metamodelo é mais fácil de avaliar e possui uma fórmula analítica, o que facilita a otimização multidisciplinar, visualização do espaço, previsão, análise de sensibilidade, entre outros.

Portanto, de acordo com Mack et al. (2007), a metamodelagem envolve quatro etapas básicas: (i) a escolha do projeto de experimentos, (ii) a realização de simulações numéricas nos pontos escolhidos, (iii) a escolha do modelo para representar os dados considerados e (iv) o ajuste do modelo. Para cada uma das etapas, há muitas opções disponíveis e já exploradas.

Scarpel e Milioni (2006) propõem o modelo de composição integrada de especialistas locais (CIEL) para geração de modelos de previsão. Neste trabalho, o modelo CIEL é explorado para a metamodelagem de algumas funções determinísticas conhecidas, visando auxiliar o processo de otimização.

Assim, a ideia básica é construir uma superfície de resposta por um metamodelo composto por especialistas simples (funções polinomiais de primeiro grau), a partir de dados coletados usando o hipercubo latino. Para isso, particiona-se o espaço de entrada em diferentes regiões e, em cada região, seleciona-se o especialista mais adequado. Na abordagem adotada, a estimação dos parâmetros é feita de modo a integrar as etapas de formação de agrupamentos e de designação dos especialistas, como forma de melhorar a qualidade dos ajustes dos modelos.

2. Revisão da literatura

Vários autores discutem acerca das opções existentes para as etapas da metamodelagem. Em relação ao primeiro passo, o projeto de experimentos visa selecionar pontos para serem avaliados por experimentos ou por modelos numéricos, que servirão como base para construir o metamodelo. Mack et al. (2007) ressalta que os pontos-chave para a seleção da técnica adequada são a dimensionalidade do problema, a importância do erro estocástico, o número de simulações ou experimentos que podem ser realizados, o tipo de metamodelagem usada para modelar o problema e a forma do espaço do experimento.

Experimentos computacionais possuem diferenças significativas quando comparados com experimentos físicos. Fang et al. (2006) destaca que aqueles normalmente envolvem maior quantidade de variáveis, consideram maior domínio e são determinísticos (o mesmo *output* é obtido quando se usa os mesmos *inputs*). Portanto, esses diferentes experimentos necessitam de técnicas de amostragem diferentes.

Devido à ausência de erros aleatórios, Sacks et al. (1989) afirma que as noções clássicas de blocagem, replicação e aleatoriedade são irrelevantes para experimentos computacionais. Portanto, considerando as características peculiares dos experimentos computacionais, técnicas *space-filling* vêm sendo adotadas. Fang et al. (2006) discute várias opções, entre elas o hipercubo latino, arranjos ortogonais e experimentos uniformes. Dentre os critérios de otimalidade para um plano experimental, pode-se encontrar o minimax, maximin, de uniformidade, de entropia e de erro quadrado médio integrado.

Para construir o metamodelo, Queipo et al. (2005) aponta alternativas paramétricas (como regressão polinomial e Kriging) e não paramétricas (regressão *projection-pursuit* e funções de base radial). Na abordagem paramétrica, assume-se que a forma global funcional da relação entre a resposta e as variáveis é conhecida, enquanto a não paramétrica usa diferentes tipos de modelos locais simples para construir o modelo geral.

Diversas aplicações de otimização baseada em metamodelo podem ser encontradas na indústria aeronáutica, aeroespacial, automotiva, entre outras.

Ramu et al. (2010) utiliza a regressão polinomial (de segunda ordem, a fim de considerar a curvatura), a partir de pontos gerados por arranjos ortogonais. A estimação dos parâmetros do metamodelo é realizada utilizando o método dos mínimos quadrados, enquanto que para a otimização da superfície de resposta são empregados algoritmos evolutivos.

No estudo de Wang (2004), avaliou-se o uso da função multiquádrica para a construção de uma superfície de resposta aproximada para otimização de projetos. Discutiram-se formulações para determinar o parâmetro “deslocamento” da função multiquádrica. Observou-se que este parâmetro, responsável pela suavização da superfície de aproximação, tem grande influência sobre o desempenho da superfície gerada.

Ao discutir de forma ampla as etapas na otimização baseada em metamodelagem, Queipo et al. (2006) abordou principalmente como técnicas de projeto de experimentos o Hipercubo Latino e os Arranjos Ortogonais e como técnicas de metamodelagem a regressão polinomial, funções Kriging e de base radial. Os autores apresentam o estudo de caso associado a um projeto multi-objetivo de um injetor de propelente líquido. O tipo de projeto de experimentos escolhido foi o de arranjos ortogonais e a abordagem adotada para construir o metamodelo foi a regressão polinomial paramétrica, utilizando a regressão por mínimos quadrados para a estimação dos parâmetros. Procedeu-se à otimização por meio da avaliação da fronteira de Pareto, por se tratar de um problema multi-objetivo.

Através de um estudo de caso em propulsão aeroespacial, Mack et al. (2007) mostram a importância de refinar o experimento para concentrar esforços na região de melhor

desempenho e para que o espaço considerado não possua grandes regiões inviáveis. Os autores utilizaram o Hipercubo Latino em todas as 6 variáveis do problema e o experimento fatorial (com 5 níveis) nas 3 variáveis com maior impacto nos pontos de melhor desempenho. O metamodelo é associado com a construção de uma fronteira de Pareto utilizando algoritmo genético.

Comparação entre metamodelos baseados na regressão polinomial, no método Kriging (e suas variações), funções de base radial, mínimos quadrados móveis (*moving least-squares*) e *Support Vetor Regression* podem ser encontrados em Forrester e Keane (2009). A otimização baseada em fronteira de Pareto também é discutida.

O método proposto neste trabalho para formar metamodelos se baseia na composição de especialistas, primeiramente proposto por Jacobs (1991). A abordagem utiliza um sistema composto por diferentes especialistas e uma rede supervisora que decide como cada especialista deve ser associado a uma dada observação do conjunto de treinamento. Dessa forma, pretende-se obter um melhor resultado do que seria obtido pelos especialistas trabalhando independentemente. As etapas dessa abordagem são: (a) dividir o espaço de atributos utilizando algum método de geração de agrupamentos, (b) designar um especialista para responder em cada região do espaço de atributos, (c) implementar a composição de especialistas usando uma rede supervisora que decide como ponderar as saídas de cada especialista.

Pela abordagem convencional de composição de especialistas, as etapas de partição do espaço de entrada e de estimação dos parâmetros dos especialistas locais são realizadas isoladamente. Scarpel e Milioni (2006) propõem a integração das etapas de partição do espaço de entrada e de estimação dos parâmetros dos especialistas locais como uma possibilidade de melhoria tanto na qualidade do ajuste, na fase de estimação dos parâmetros, como na utilização dos modelos para fazer previsões. Devido a essa modificação incluída na concepção original, este modelo será denominado de modelo de composição integrada de especialistas locais (CIEL). Os autores obtiveram bons resultados em geração de modelos de previsão, utilizando como especialistas apenas funções lineares.

3. Materiais e métodos

3.1 Projeto de experimentos – Hipercubo Latino

O Hipercubo Latino é uma técnica de amostragem estratificada, a qual garante a representação de cada variável ao longo de todo seu domínio considerado. Seguindo a notação de Fang et al. (2006), para se obter uma amostra de tamanho n, deve-se dividir o domínio C^s de cada x_k em n camadas de igual probabilidade marginal $1/n$, e retirar uma amostra em cada camada.

Ainda segundo Fang et al. (2006), esta técnica possui as vantagens de (a) ser adequada para experimentos computacionais, (b) requerer pequeno esforço computacional para gerar planos amostrais, (c) poder lidar com grande número de variáveis e de tamanho de amostra e (d) apresentar média amostral com variância menor que aquela de uma amostra aleatória. Entretanto, é necessário atentar que o Hipercubo Latino não obtém a menor variância possível para a média amostral.

Como critério de otimalidade do projeto de experimentos foi utilizado o maximin, que busca maximizar a menor distância entre dois experimentos ao longo do espaço de atributos. Este critério garante que a distância entre pontos amostrais, tomados par a par, é máxima possível, assegurando uniformidade ao projeto.

O tamanho da amostra considerado na aplicação do método foi de 150 observações. Para gerar o projeto de experimentos, foi utilizado o pacote *lhs* do *software* estatístico R.

3.2 Partição do espaço de entrada

Além dos parâmetros dos modelos especialistas, são parâmetros do modelo CIEL os centroides dos agrupamentos, aos quais serão associados especialistas como descreve a seção 3.3. A posição inicial destes centroides é determinada de acordo com o algoritmo k-médias, a partir dos pontos obtidos pelo Hipercubo Latino.

A partição em k agrupamentos (*clusters*) é realizada de forma a minimizar a soma das

distâncias euclidianas das observações pertencentes ao agrupamento relativas ao respectivo centroide, conforme Webb (2002). Para particionar *n* observações, no espaço *p*-dimensional, em *k* agrupamentos, a formulação matemática do problema é:

$$Min \sum_{i=1}^{n}\sum_{c=1}^{k} z_{ic}\left[\sum_{j=1}^{p}\left(x_{ij}-m_{cj}\right)^2\right]^{1/2} \quad (1)$$

$S.A.$

$$\sum_{c=1}^{k} z_{ic} = 1, \qquad i = 1,\dots,n$$

$$\sum_{i=1}^{n} z_{ic} \geq 1, \qquad c = 1,\dots,k$$

onde

$$z_{ic} = \begin{cases} 1, se\ o\ ponto\ i\ pertencer\ ao\ agrupamento\ c \\ 0, caso\ contrário \end{cases}$$

$$m_{cj} = \sum_{i=1}^{n} z_{ic}\cdot x_{ij} \Big/ \sum_{i=1}^{n} z_{ic} \quad (2)$$

$c = 1,\dots, k$ e $j = 1,\dots, p$.

Logo, a formulação objetiva alocar cada um dos *n* pontos a 1 e somente 1 dos *k* agrupamentos (regido pela variável de decisão binária z_{ic}), de forma a minimizar a soma da distância Euclidiana entre os pontos e seus respectivos centroides.

3.3 Metamodelo – Composição Integrada de Especialistas Locais (CIEL)

Na fase de treinamento dos especialistas, objetiva-se determinar os parâmetros dos centroides e parâmetros dos especialistas de modo integrado, de forma a minimizar o risco empírico dado por

$$R_{emp} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L(Y_i, f(X_i)_c) \quad (3)$$

em que:

- O índice *c* se refere ao agrupamento e $c = 1,\dots, k$.
- $L(Y_i, f(X_i)_c)$ é uma função de perda ou de custo. Existem várias funções de perda usadas na literatura: a de mínimos quadrados, a de mínimo módulo (também conhecida por Laplace), a robusta (de Huber) e a ε-insensível. Neste trabalho, será utilizada a de mínimos quadrados, em que $L(Y_i, f(X_i)_c) = (Y_i - f(X_i)_c)^2$.
- $f(X_i)_c$ é o especialista do agrupamento *c*. No caso bidimensional (com duas variáveis de decisão), o modelo linear é dado por $f(X_i)_c = \beta_{0,c} + \beta_{1,c}X_1 + \beta_{2,c}X_2$, o qual será examinado.

Seguindo a lógica de Scarpel e Milioni (2006), para fazer a integração das etapas de partição do espaço de entrada e de estimação dos parâmetros dos especialistas locais, emprega-se a seguinte formulação que incorpora a partição do espaço de entrada na estimação dos parâmetros dos modelos locais:

$$Min\ \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[Y_i - \sum_{c=1}^{k} P_{ic}\cdot f(X_i)_c\right]^2 \qquad (4)$$

em que o grau de pertinência das observações aos agrupamentos (P_{ic}) é dado pela funçao *softmax*:

$$P_{ic} = exp\left[-\left(\sum_{j=1}^{p}(X_{ij} - m_{cj})^2\right)^{1/2}\right] \Big/ \sum_{c=1}^{k} exp\left[-\left(\sum_{j=1}^{p}(X_{ij} - m_{cj})^2\right)^{1/2}\right].$$

A equação (4) consiste em um problema de otimização não linear irrestrito, cujas variáveis de decisão são os centroides dos agrupamentos (m_{cj}) e os parâmetros de cada especialista (β_{lc}).

Para a resolução deste problema, foi utilizado um time assíncrono composto por uma meta-heurística baseada em estratégia evolutiva e por um método quasi-Newton. Segundo Saito Jr. (1999), a lógica desta abordagem consiste em utilizar algoritmos com características diferentes em conjunto, a fim de aumentar a probabilidade de obter um resultado melhor do que aqueles obtidos pelos algoritmos individualmente. Desta forma, a estratégia evolutiva é utilizada para obter uma solução que servirá como ponto de partida para o algoritmo quasi-Newton. Implementou-se o time assíncrono utilizando a linguagem *Visual Basic for Applications*, em um microcomputador com processador Intel Core Duo 2,00 GHz e 4,0 GB de memória RAM.

4. Análises e resultados

Serão considerados a seguir três exemplos que ilustram o emprego do CIEL como metamodelo para otimização de funções determinísticas. Para simular superfícies de respostas, foram utilizadas funções sintéticas, normalmente encontradas na literatura.

Para cada aplicação, realizam-se o projeto de experimentos, a partição do espaço de entrada e a construção do metamodelo, variando-se até de 2 até 5 o número de agrupamentos da composição de especialistas.

O tempo demandado na estimação dos parâmetros pelo time assíncrono em cada aplicação é indicado no Apêndice 1.

4.1 Aplicação 1 – Função Bohachevsky

A primeira função considerada é a de Bohachevsky. Relativamente simples, apresenta valor mínimo igual a 0 no ponto de coordenadas (0,0) e superfície suave em todo seu dom (5) como mostra a equação (5) e a Figura 1.

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2 - 0{,}3\cos(3\pi x_1) - 0{,}4\cos(4\pi x_2) + 0{,}7,\ x_1,\ x_2 \in (-100, 100)$$

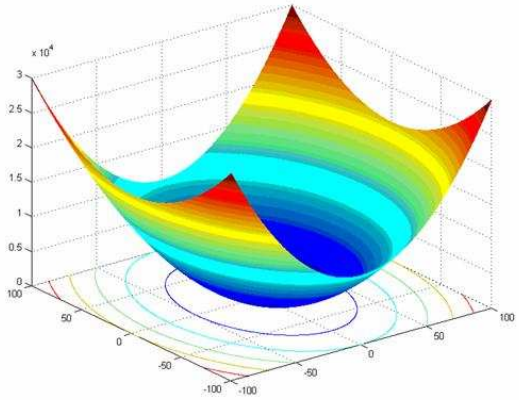

Figura 1 – Função Bohachevsky

Como critério de avaliação dos metamodelos, utilizou-se a distância euclidiana entre as coordenadas do ponto ótimo estimado e as coordenadas do ponto ótimo real[1]. Quanto mais próximo o ótimo estimado estiver do ótimo real, mais precisamente o metamodelo identificou a região de ótimo e, portanto, melhor seu desempenho.

Neste artigo, a avaliação dos metamodelos baseada na distância euclidiana serve apenas para fins didáticos já que dificilmente em um problema real, em que a superfície de resposta é desconhecida, seria possível calcular a proximidade da solução calculada ao ponto ótimo da função. A distância euclidiana entre o ponto ótimo estimado e ponto ótimo real para cada metamodelo criado a partir de determinado número de agrupamentos é mostrada na Figura 2.

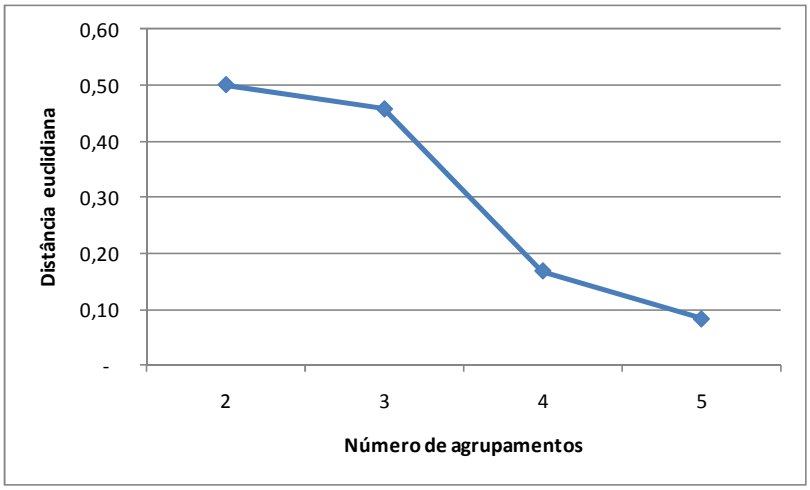

Figura 2 - Distância euclidiana entre o ponto ótimo estimado e ponto ótimo real de acordo com o número de agrupamentos considerado em cada metamodelo - função Bohachevsky

Verifica-se que a distância do ponto ótimo do metamodelo ao ponto ótimo real diminui à medida que o número de agrupamentos aumenta, indicando melhora de desempenho com a inclusão de agrupamentos no metamodelo. Sendo assim, conclui-se que, para a função Bohachevsky, a melhor composição é aquela baseada em 5 agrupamentos, cuja superfície é mostrada na Figura 3.

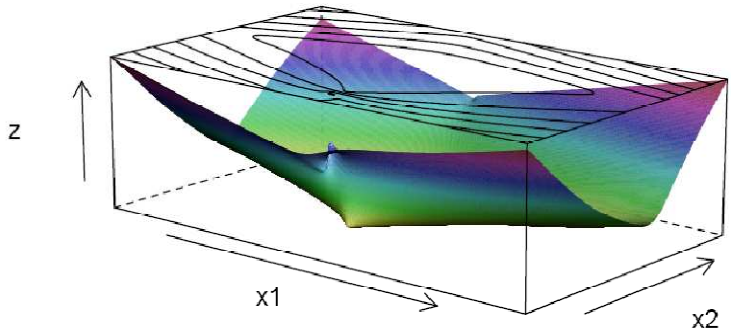

Figura 3 - Superfície do metamodelo gerado a partir de 5 agrupamentos para a função Bohachevsky

Uma medida alternativa para avaliar a proximidade do ponto ótimo estimado ao ponto ótimo real frente ao domínio considerado consiste em comparar a área circular necessária para englobar o ponto ótimo real, centrada no ponto ótimo estimado (A_p) em relação à área total da região de domínio (A_0). Para tanto, usa-se o índice de proximidade (IP) dado por:

$$IP = 1 - \frac{A_p}{A_0} \qquad (6)$$

[1] Para este cálculo, as coordenadas dos pontos ótimos (estimado e real) foram re-escaladas para o intervalo [0,1].

Este índice varia entre 0 a 1 e representa o ganho proporcionado pelo metamodelo na delimitação da área mínima possível para abranger o ótimo real. Quanto mais próximo de 1, menor a área de busca necessária a partir do ponto ótimo estimado, comparativamente ao espaço domínio, para conter o ponto ótimo real. Assim como o critério de avaliação baseado em distância mencionado anteriormente, o índice não seria aplicável em um problema real, mas fornece informação útil neste estudo.

Como o ponto mínimo do metamodelo com 5 clusters encontra-se em (-7,15; 14,92), seu *IP* é 0,914, o que indica ponto de ótimo do metamodelo bem próximo do real, considerando a extensão do domínio da função.

4.2 Aplicação 2 – Função Ackley

A função Ackley também apresenta valor mínimo igual a 0 no ponto de coordenadas (0,0), mas sua superfície não é suave (Figura 4). A forma funcional é dada por:

$$f(x_1, x_2) = 20 + exp(1) - 20 \cdot exp\left[-20\left(\frac{1}{2} \cdot (x_1^2 + x_2^2)\right)\right] - exp\left[\frac{1}{2} \cdot (\cos x_1^2 + \cos x_2^2)\right],$$
$$x_1, x_2 \in (-32{,}768, 32{,}768) \quad (7)$$

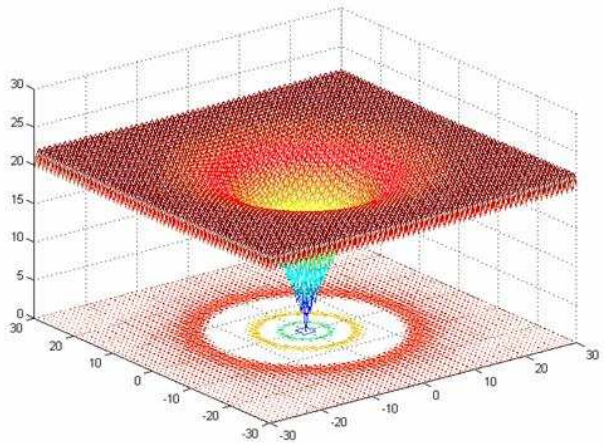

Figura 4 - Função Ackley

Os metamodelos da função Ackley seguiram um comportamento bem diferente dos da função Bohachevsky em relação à distância Euclidiana, como exibe a Figura 5.

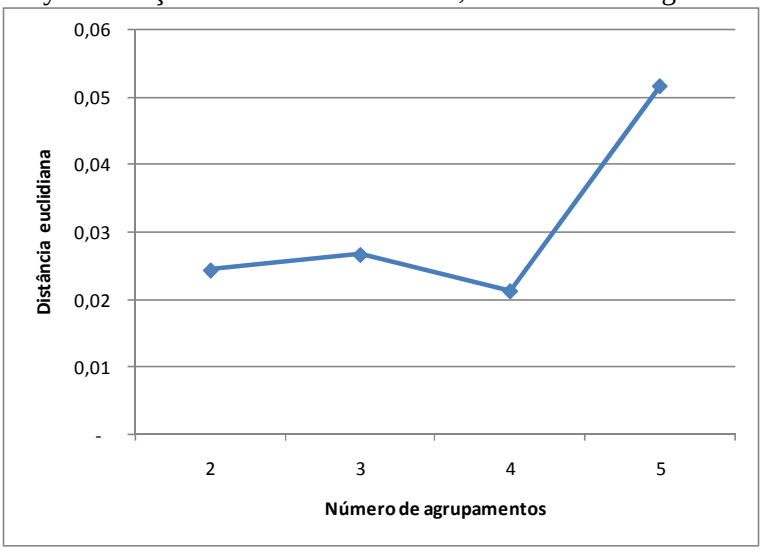

Figura 5 – Distância euclidiana entre o ponto ótimo estimado e ponto ótimo real de acordo com o número de agrupamentos considerado em cada metamodelo - função Ackley

A grande mudança foi o aumento da distância quando se passa de 2 para 3 agrupamentos e a maior distância encontrada no metamodelo com 5 agrupamentos. Não se observa uma tendência em diminuir a distância ao ótimo real quando se aumenta o número de agrupamentos, embora todos eles se concentrem numa área muito pequena ao redor do mínimo real. Os pontos de mínimo dos metamodelos de 2, 3, 4 e 5 agrupamentos foram, respectivamente, (1,59; 0,00), (-1,25; -1,24), (-0,85; -1,11) e (-3,14; -1,27). Os *IP*'s de todos os metamodelos possuem valores muito próximos de 1 (0,993; 0,991; 0,994 e 0,966 para 2, 3, 4 e 5 agrupamentos), indicando grande proximidade com o ótimo real.

O metamodelo utilizando 4 agrupamentos, de melhor desempenho, gera a superfície mostrada na Figura 6.

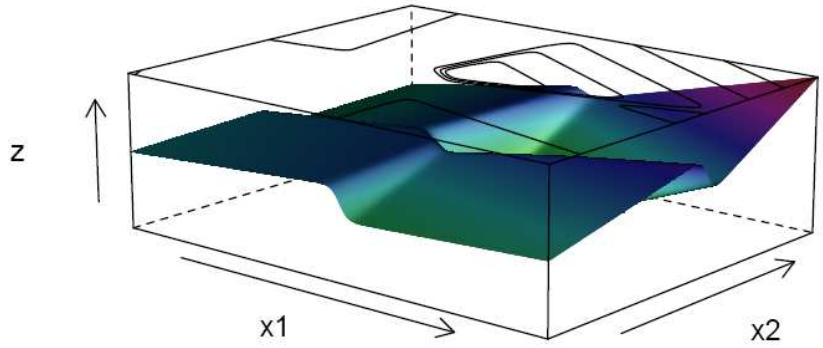

Figura 6 - Superfície do metamodelo gerado a partir de 4 agrupamentos para a função Ackley

Embora a superfície gerada não se assemelhe muito à função Ackley (e portanto não seja adequada para representação), o metamodelo com 4 agrupamentos contribuiu efetivamente para o objetivo primordial do metamodelo, o de otimização da função, contradizendo a intuição.

O metamodelo utilizando 5 agrupamentos, que possui melhor aderência à função Ackley (comparando-se os desvios-padrão estimados de cada metamodelo) e ponto de ótimo também muito próximo do ótimo real, gera a superfície mostrada na Figura 7.

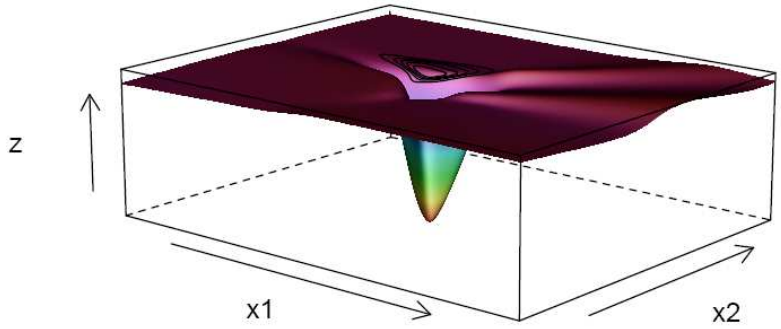

Figura 7 - Superfície do metamodelo gerado a partir de 5 agrupamentos para a função Ackley

Percebe-se uma suavização da parte superior da superfície, região que apresenta várias pequenas ondulações na superfície real. A forma geral é capturada pelo metamodelo, que facilita tanto a otimização como a visualização do espaço.

Os resultados dos metamodelos para a função Ackley são muito relevantes. A função possui forma complexa e de difícil representação mesmo com a utilização de metamodelos complexos. O método apresentado, entretanto, conseguiu indicar com boa precisão a região em que o ótimo se encontra.

4.3 Aplicação 3 – Função composição de senoides

Por último, será avaliada a função formada a partir de composição de senoides, definida pela equação (8) e exibida na Figura 8:

(8)

$$f(x_1, x_2) = x_1 \cdot sen(4\pi x_1) - x_2 \cdot sen(4\pi x_2 + \pi) + 1, \qquad x_1, x_2 \in (-2,1)$$

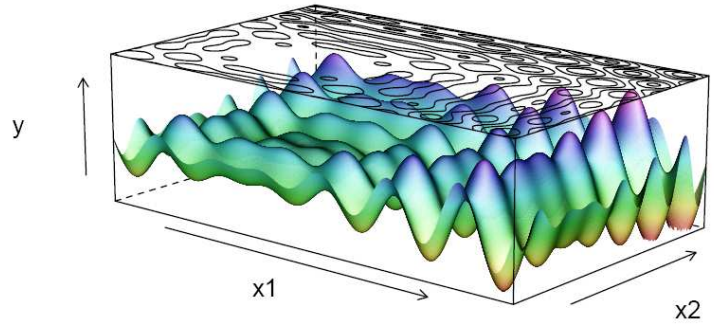

Figura 8 – Função composição de senoides

A função possui superfície altamente acidentada, com vários ótimos locais e mudanças abruptas do valor da função para pontos do domínio próximos. Portanto, representá-la e otimizá-la a partir de um metamodelo constitui um desafio. Seu máximo global possui valor 4,25 no ponto (1,62; 1,62).

Os critérios de desempenho dos metamodelos seguiram o comportamento de acordo com a Figura 9.

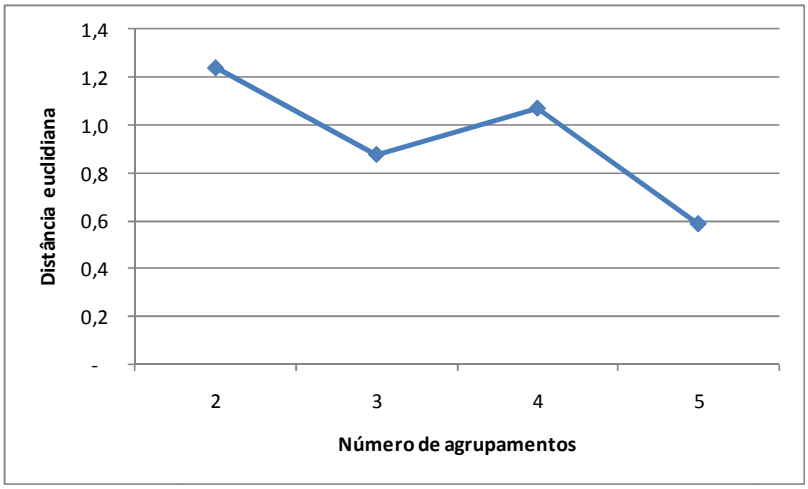

Figura 9 – Distância euclidiana entre o ponto ótimo estimado e ponto ótimo real de acordo com o número de agrupamentos considerado em cada metamodelo - função composição de senoides

Os metamodelos construídos indicaram pontos de máximo globais bem distantes do ponto de máximo real. Os *IP*'s dos metamodelos possuem valores muito baixos: 0,237; 0,201; 0,201 e 0,408 para 2, 3, 4 e 5 agrupamentos respectivamente. Além disso, o modelo não detectou as ondulações da superfície real. A forma geral do metamodelo com 5 agrupamentos, o de melhor desempenho, não fornece um bom auxílio na otimização nem se assemelha à função composição de senoides, como mostra a Figura 10.

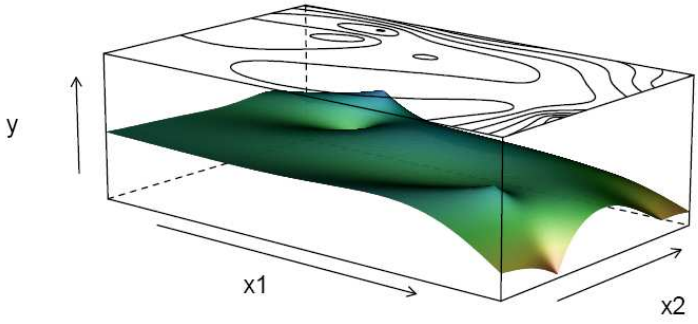

Figura 10 - Superfície do metamodelo gerado a partir de 5 agrupamentos para a função composição de senoides

5. Conclusão

A partir dos resultados obtidos, pode-se afirmar que o metamodelo baseado em composição de especialistas funcionou relativamente bem para as funções Bohachevsky e Ackley. Ambas as funções possuem ótimo global bem destacado, não existindo ótimos locais próximos. As superfícies geradas pelos metamodelos de melhor desempenho apontaram ótimo relativamente próximo do ótimo real.

Em especial, destaca-se o potencial do metamodelo CIEL em situações similares à da função Ackley. Apesar de esta função possuir forma complexa e de difícil representação, o metamodelo foi capaz de indicar a região do ponto de ótimo real de forma inequívoca.

Um importante desdobramento do método nestes casos pode ser a aplicação de seu resultado para delimitar uma área de interesse, próxima ao ponto de ótimo global, a fim de servir como guia para posterior refinamento. Dessa forma, o analista pode concentrar esforços em uma área mais limitada e obter informações mais precisas sobre o comportamento do fenômeno naquela área.

Já para a composição de senoides, a superfície gerada pelo metamodelo não conseguiu indicar região próxima ao ponto de ótimo real. Os pontos de ótimo indicados pelos modelos também variaram inconsistentemente, sem se aproximar do máximo global da função. Além disso, não capturaram a forma geral da função. Portanto, deve-se ter cautela ao utilizar o método em funções com características similares.

Cabe ressaltar que, em um projeto de experimentos real, uma das dificuldades é justamente não saber, a priori, a forma da superfície de resposta e seu ponto ótimo. Sendo assim, os procedimentos de análise adotados neste trabalho, embora adequados à situação hipotética considerada, em que a forma funcional da superfície de resposta é conhecida, dificilmente poderiam ser aplicados na prática. Deste modo, é importante definir um critério de parada que indique o número de agrupamentos ideal para o metamodelo, considerando que não se conhece o ponto ótimo a priori. Essa questão, entretanto, é um desafio a ser explorado em trabalhos futuros e não foi abordada neste trabalho.

Há outras questões interessantes para investigações futuras. Pretende-se averiguar o uso de mais agrupamentos nos metamodelos, além de um critério de parada no aumento do número de agrupamentos para abranger a aplicabilidade do método a situações reais. O comportamento dos metamodelos com a variação do número de amostras adotadas e com a mudança no ponto de partida inicial do time assíncrono também será explorado. Ainda, pretende-se abordar problemas com restrições, analisar o *trade-off* entre representação e otimalidade e comparar o desempenho do processo de otimização com a abordagem tradicional de superfícies de resposta.

Apêndice 1 – Tempo computacional do time assíncrono nas aplicações realizadas

A Tabela 1 na página seguinte mostra o tempo demandado na estimação dos parâmetros pelo time assíncrono composto por uma meta-heurística baseada em estratégia evolutiva e por um método quasi-Newton, em cada aplicação considerada.

Tabela 1 - Tempo computacional na estimação dos parâmetros

Nº de agrupamentos		Aplicação 1 - Função Bohachevsky	Aplicação 2 - Função Ackley	Aplicação 3 - Função composição de senoides
2	Estratégia Evolutiva	01:10:02	00:34:54	00:13:50
	Método Quasi-Newton	00:05:23	00:00:08	00:00:43
	Total	01:15:25	00:35:02	00:14:33
3	Estratégia Evolutiva	01:43:00	00:44:38	00:15:31
	Método Quasi-Newton	00:03:36	00:00:30	00:01:17
	Total	01:46:36	00:45:08	00:16:48
4	Estratégia Evolutiva	02:24:56	01:23:48	00:18:54
	Método Quasi-Newton	00:04:04	00:04:17	00:03:22
	Total	02:29:00	01:28:05	00:22:16
5	Estratégia Evolutiva	02:59:28	02:31:04	00:33:15
	Método Quasi-Newton	00:10:13	00:03:44	00:07:14
	Total	03:09:41	02:34:48	00:40:29

OBS.: O critério de parada da estratégia evolutiva foi a obtenção de uma solução com melhora de 0,000001 na função objetivo

Referências

Fang, K.-T., Li, R. e Sudjianto, A., *Design and Modeling for Computer Experiments*, Chapman & Hall/CRC, Florida, 2006.

Forrester, A. I. J. e Keane, A. J. (2009), Recent advances in surrogate-based optimization, *Progress in Aerospace Sciences*, Vol. 5, 50-79.

Jacobs, R.A.; Jordan, M.I.; Nowlan, S.J. & Hinton, G.E. (1991). Adaptive mixture of local experts. *Neural Computation, MIT Press*, 3(1), 79-87.

Jasbir, A. S., *Guide to Structural Optimization*, Structural Engineering Institute, Estados Unidos da América, 1997.

Mack, Y., Goel, T., Shyy, W. e Haftka, R. (2007), Surrogate Model-Based Optimization Framework: A Case Study in Aerospace Design, *Studies in Computational Intelligence (SCI)* 51, 323–342.

Montgomery, D. C., *Design and Analysis of Experiments*, John Wiley & Sons, Inc., Nova Iorque, 2001.

Ramu, M., Prabhu Raja, V., Thyla, P. R. e Gunaseelan, M. (2010), Design Optimization of Complex Structures Using Metamodels. *Jordan Journal of Mechanical and Industrial Engineering*, Vol.4, nº 5, 653-666.

Sacks, J., Welc, W. J., Mitchell, T.J. e Wynn, H. P. (1989), Design and Analysis of Computer Experiments, *Statistical Science*, Vol. 4, nº 4, 409-435.

Saito Jr., P.A. Treinamento de redes neurais utilizando time assíncrono. *Tese de Mestrado em Engenharia Eletrônica e Computação, área de Sistemas e Controle*, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, 1999.

Scarpel, R. A. e Milioni, A. Z. (2006), Otimização na Formação de Agrupamentos em Problemas de Composição de Especialistas, *Pesquisa Operacional*, Vol. 27, nº 1, 85-104.

Shao, T. e Krishnamurty, S. (2008), A Clustering-Based Surrogate Model Updating Approach to Simulation-Based Engineering Design, Journal of Mechanical Design, Vol.130.

Simpson, T. W., Booker, A. J., Ghosh, D., Giunta, A. A., Knoch, P. N. e Yang, R.-J. (2004), Approximation methods in multidisciplinary analysis and optimization: a panel discussion. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 27, nº 5, 302-313.

Wang, B. P. (2004), *Parameter Optimization in Multiquadric Response Surface Approximations*, Structural and Multidisciplinary Optimization, Vol. 26, nº 3-4, 219-223.

Webb, A. *Statistical Pattern Recognition*. 2ª edição, John Wiley & Sons Inc., Inglaterra, 2002.