Trabalho apresentado no XLI CNMAC, Unicamp - Campinas - SP, 2022.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics Preprint

Sobre a parametrização via funções de base radial em métodos baseados em conjuntos de nível para otimização topológica

Giovanna Castello de Andrade¹, Sandra Augusta Santos²

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica - Unicamp, Campinas, SP

Resumo. Este trabalho considera o uso de funções de base radial de suporte compacto em métodos baseados em conjuntos de nível parametrizados para otimização topológica. O problema de minimização da flexibilidade média de uma estrutura estaticamente equilibrada com restrição de desigualdade de volume é considerado e tratado a partir de uma formulação do Lagrangiano aumentado com atualização consistente de seus parâmetros. Adotando uma estratégia de extensão *Hilbertiana* da velocidade, e permitindo o desacoplamento das malhas de elementos finitos e de funções de base radial adotadas, o efeito do número de funções-base utilizado para parametrização é investigado.

Palavras-chave. Otimização topológica, conjuntos de nível, funções de base radial de suporte compacto, métodos numéricos, experimentos computacionais.

1 Introdução

O problema de otimização topológica visa determinar a geometria e a topologia ótima a serem ocupadas por materiais, sob determinadas condições pré-estabelecidas. A depender da aplicação, a formulação do problema pode ter diferentes naturezas, como mecânicas, hidráulicas, térmicas ou mistas, caracterizando problemas multi-físicos. Neste trabalho, consideramos o problema clássico de minimização da flexibilidade média de uma estrutura sujeita a condições *mecânicas* de apoio e tração e a uma restrição de volume, considerada na desigualdade. Para sua solução, adotamos um esquema de Lagrangiano aumentado com atualização consistente de seus parâmetros, cf. [3, 4].

Ao longo do tempo, diversas estratégias foram propostas para solução deste problema, cf. relatam os artigos de revisão [6, 11] e referências neles contidas. Investigamos neste trabalho o uso de *métodos baseados em conjuntos de nível parametrizados* com funções de base radial. Diferente dos trabalhos de Wang e Wang [12] e Wei et al. [13, 14], que consideram, em conjunto com esta abordagem, uma extensão *natural* do campo de velocidades, adotamos a *extensão Hilbertiana* da velocidade [5, 7, 9]. Além disso, motivadas pelo trabalho recente de Wei et al. [13], investigamos o desacoplamento da malha de parametrização da *função de conjunto de nível* e de representação dos domínios de interesse e solução dos problemas variacionais neles definidos. Os resultados aqui apresentados compõem parte da dissertação de mestrado [2].

2 A formulação do problema

Consideramos neste trabalho estruturas sob hipótese de *estado plano de tensões*, de modo que podem sem tratadas como domínios bidimensionais. Definindo então um domínio de referência

¹giovanna.castelloa@gmail.com

²sasantos@unicamp.br

2

retangular \mathcal{D} , cada estrutura a ser considerada ocupa um domínio $\Omega \subset \mathcal{D}$. As condições de contorno do problema consistem na aplicação de uma força de tração e uma região de apoio, ou seja, de deslocamento nulo. Com isso, sob hipótese de *equilíbrio estático*, formula-se um problema de valor de contorno em Ω , cuja solução consiste no campo de deslocamentos sofrido pelo domínio. Esse campo, por sua vez, é utilizado para avaliar a flexibilidade média $J(\Omega)$ da estrutura, a qual estamos interessados em minimizar, cf. [2, Capítulo 1].

Consideramos ainda uma restrição de volume para a estrutura, definida a partir da diferença entre a fração $V(\Omega)$ do domínio de referência ocupada por Ω e uma fração de volume prescrita \overline{V} . Esta restrição é denotada como $\mathcal{C}(\Omega)$ e considerada na desigualdade, de forma que buscamos por um domínio ótimo cuja fração de volume seja menor ou igual à prescrita. Como discutido em [2, Seção 1.3], para tratar este problema, definimos o funcional de Lagrangiano aumentado

$$\mathcal{L}_{\rho}(\Omega,\Lambda) := J(\Omega) + \frac{\rho}{2} \left(\max\left\{ 0, \mathcal{C}(\Omega) + \frac{\Lambda}{\rho} \right\}^2 - \frac{\Lambda^2}{\rho^2} \right), \tag{1}$$

de modo que o problema original pode ser reformulado como a minimização irrestrita de $\mathcal{L}_{\rho}(\Omega, \Lambda)$, acoplada com uma atualização consistente do multiplicador de Lagrange Λ e do parâmetro de penalização ρ , realizadas com base em [3, 4].

3 Métodos baseados em conjuntos de nível

Em contraste com abordagens clássicas como a SIMP, do inglês solid isotropic material with penalization, que trabalham com densidades para solução do problema de otimização topológica e podem levar a estruturas com aspecto tabuleiro de xadrez (cf. [11]), em métodos baseados em conjuntos de nível o domínio e sua fronteira são representados implicitamente por uma função $\phi: \mathcal{D} \times \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$, chamada função de conjunto de nível, ou LSF, do inglês level set function. Em particular, a convenção que adotamos aqui é que o interior do domínio é associado a pontos com valores positivos da LSF, a fronteira a valores nulos e o exterior a valores negativos, como ilustrado na Figura 1.



Figura 1: Função de conjunto de nível com sobreposição do plano $\phi = 0$ (esquerda), domínio representado implicitamente por ϕ (centro) e ilustração do desacoplamento entre a representação discreta de ϕ e de Ω (direita).

A caracterização de métodos baseados em conjuntos de nível se dá ao permitir que essa função evolua em um tempo fictício, o que pode ser modelado por equações diferenciais parciais [10]. Em particular, a equação de Hamilton-Jacobi é frequentemente adotada - seja na sua forma tradicional, envolvendo um campo vetorial de velocidades (cf. [9]), ou considerando um campo apenas com componentes normais às curvas de nível (cf. [12–14]). Outras equações podem ainda ser adotadas, por exemplo com fins regularizadores ou de viabilização da geração de novos furos no domínio, fenômeno conhecido como nucleação [11]. Neste trabalho, em particular, consideramos a equação de Hamilton-Jacobi modificada adotada por [13, 14], que visa evitar o crescimento excessivo da LSF ao longo do processo evolutivo. A representação discreta para a LSF pode ser feita tanto em termos de valores nodais, acompanhada de um esquema de diferenças finitas para solução discreta da equação de evolução (ver, p.ex. [9]), como a partir da definição de uma parametrização, opção adotada neste trabalho (cf. Seção 4), considerando como principais referências os trabalhos de [12–14]. Ao primeiro caso, nos referimos como métodos baseados em conjuntos de nível convencionais, enquanto ao segundo, como métodos baseados em conjuntos de nível parametrizados.

Na Figura 2 apresentamos o esquema básico de um método baseado em conjunto de nível para solução do problema de otimização topológica estrutural. Um maior detalhamento sobre estratégias para realização de cada etapa pode ser encontrado em [2]. A cada iteração do método, uma representação explícita para o domínio Ω representado implicitamente por ϕ precisa ser obtida, de modo que o problema de equilíbrio no domínio corrente possa ser solucionado e com isso a função objetivo do problema avaliada. A esta etapa nos referimos como mapeamento da geometria. De acordo com [11], é geralmente interessante que a malha de representação do domínio seja desacoplada da malha de representação para a LSF, como ilustrado à direita na Figura 1. Com isso, a acurácia na solução dos problemas variacionais em Ω via método dos elementos finitos pode ser garantida mantendo a eficiência do processo de evolução da função ϕ .



Figura 2: Esquema básico de um método baseado em conjuntos de nível para otimização topológica estrutural.

Independentemente da equação de evolução escolhida, é necessária a obtenção e a extensão de um campo de velocidades visando a evolução em direção a um minimizador do problema [2, Seção 2.4]. Para isso, nos baseamos no conceito de derivada de forma, sendo possível trabalhar com a sua expressão de fronteira, cf. [12–14] ou de volume, cf. [9]. A primeira opção é frequentemente adotada quando há a necessidade de obtenção de um campo normal de velocidades, como é o caso deste trabalho. Já a segunda, é interessante para a obtenção de um campo vetorial de velocidades. A expressão de fronteira da derivada de forma do funcional de Lagrangiano aumentado (1) pode ser determinada via linearidade e regra da cadeia a partir das derivadas de forma de $V(\Omega)$ e $J(\Omega)$, cujas expressões são clássicas e apresentadas por exemplo em [1]. Em contraste com os trabalhos de [12–14], que adotam uma estratégia de *extensão natural* do campo de velocidades, consideramos neste trabalho a *extensão Hilbertiana*, discutida por [5, 7, 9] no contexto de *métodos baseados em conjuntos de nível convencionais*. Em linhas gerais, esse enfoque propõe a obtenção do campo de velocidades como solução de um problema variacional, formulado a partir da expressão da derivada

3

4

de forma do funcional objetivo do problema e da definição de um produto interno no espaço de Hilbert apropriado, assim como apresentado em [2, Seção 2.4]. A escolha deste produto interno desempenha papel fundamental, uma vez que viabiliza o controle, por meio de uma constante denotada *parâmetro de extensão-regularização*, do tamanho da faixa de extensão do campo com relação à fronteira do domínio [7].

4 A abordagem parametrizada via funções de base radial

Na abordagem parametrizada aqui considerada, a *função de conjunto de nível parametrizada* ou PLSF, do inglês *parametrized level set function*, é definida como uma combinação linear de um conjunto de funções-base espacialmente fixas, conforme ilustrado na Figura 3. Nesse caso, a representação discreta para a função de conjunto de nível é feita em termos da malha de localização das funções-base e as variáveis de otimização correspondem aos coeficientes da parametrização, que evoluem ao longo do tempo fictício. Em particular, adotamos o uso de funções de base radial ou RBF, do inglês *radial basis function*, introduzido em 2006 por Wang e Wang [12] e também adotado em em [13, 14]. O desenvolvimento teórico envolvendo este tipo de parametrização é apresentado em detalhes em [2, Capítulo 3].



Figura 3: Conjunto de funções-base (esquerda), efeito dos coeficientes associados a cada função base (centro) e função de conjunto de nível parametrizada (direita).

Tendo em vista o esquema da Figura 2, a inicialização dos coeficientes da parametrização passa então a compor seu *Passo 0*, sendo formulada como um problema de interpolação a partir de valores nodais iniciais para a PLSF. Este problema envolve a solução de um sistema linear com a *matriz de interpolação G*, de dimensão $m \times m$, em que *m* denota o número de RBF's utilizado para a parametrização. A estrutura dessa matriz depende do tipo de RBF utilizada. As multiquádricas (MQ-RBF's), por exemplo, possuem suporte global e, por consequência, resultam em matrizes densas. As funções de base radial C2-Wendland (C2-RBF's), por outro lado, possuem suporte compacto, de modo que obtemos matrizes esparsas com formato de banda, como ilustrado na Figura 4. Essas matrizes podem então ser exploradas utilizando álgebra linear computacional apropriada visando economizar esforço computacional e consistem na escolha deste trabalho.

Já no que diz respeito à evolução da PLSF, devido à separação entre espaço e tempo, a equação parcial diferencial escolhida para modelar o movimento de ϕ pode ser convertida, por uma estratégia de colocação combinada com o método das linhas, em um sistema de m equações diferenciais ordinárias envolvendo a matriz G [12–14]. Desta forma, um passo de Euler pode ser utilizado para evolução dos coeficientes da parametrização, compondo o Passo 4 do esquema da Figura 2. Para cada passo é necessária a solução de um sistema linear envolvendo a matriz G, de modo que o potencial das C2-RBF's em economizar esforço computacional é reforçado. Além disso, se n denota o número de nós que compõem a malha de elementos finitos a ser considerada, a avaliação dos valores nodais da PLSF nestes nós pode ser feita também de forma matricial, a partir da definição de uma matriz de transição, que possui dimensão $n \times m$. Com isso, o mapeamento da geometria pode ser realizado.



Figura 4: Ilustração de RBF's e matrizes de interpolação associadas, considerando malha 5×5 e função do tipo C2-Wendland com raio de suporte equivalente a 1.5 elementos da discretização (esquerda) ou multi-quádrica (direita).

5 Experimentos numéricos

O esquema de otimização proposto foi implementado utilizando a linguagem Python e os recursos do projeto FEniCS para solução dos problemas variacionais de equilíbrio estático e extensão Hilbertiana da velocidade via método dos elementos finitos [8]. Os experimentos realizados foram executados em um notebook DELL Inspiron 7460, Intel Core i7-7500U processador 2.70GHz, 16GB RAM (64-bit). Para os resultados que serão apresentados, consideramos um domínio com dimensões 2×1 e uma viga em balanço, sujeita a uma região de apoio em sua extremidade esquerda e a uma força de tração unitária no ponto central da extremidade direita. Além disso, consideramos um domínio inicial como o proposto por Wei et al. [14], cf. ilustrado na Figura 5. Por fim, ainda que não seja uma hipótese necessária para o desenvolvimento teórico da parametrização considerada neste trabalho, os experimentos foram executados sob hipótese de que os nós de localização das RBF's estão contidos na malha de resolução dos problemas variacionais via elementos finitos.



Figura 5: Ilustração de condições de contorno de viga em balanço (esquerda), inicialização do domínio adotada (centro) e sobreposição com exemplo de malha de elementos finitos, em azul, e de distribuição das RBF's, em laranja (direita).

Um primeiro resultado importante que foi observado em testes preliminares diz respeito à escolha do parâmetro de extensão-regularização para obtenção do campo de velocidades, cf. apresentado em [2, Seção 4.5]. Considerando uma discretização do domínio, a extensão do campo de velocidades com relação à fronteira precisa ser suficiente para que o campo seja capturado pelos nós da discretização, sobretudo considerando que no geral não há sobreposição dos nós com as fronteiras de Ω , como ilustrado à direita na Figura 5. Por um lado, o problema variacional da extensão Hilbertiana é resolvido na malha de elementos finitos, considerando a discretização das RBF's. Desta forma, concluímos que uma particularidade da combinação da estratégia *Hilbertiana* de extensão da velocidade com a abordagem parametrizada aqui proposta é a necessidade de se considerar o refinamento de ambas as discretizações para a evolução apropriada sem risco de perda de informações.

Ilustramos a seguir o efeito do número de RBF's consideradas para a parametrização da função de conjunto de nível, tomando quatro malhas diferentes com elementos quadrados para sua dispo-

5

sição: 20×10 , 30×15 , 60×30 e 90×45 . Já para a malha de elementos finitos, consideramos uma discretização fixa de 180×90 elementos, de modo que a escolha de disposição das RBF's consiste em tomar uma função-base a cada nove, seis, três e dois nós da malha de elementos finitos, respectivamente. Além disso, consideramos um raio de suporte fixo para todas as funções de base radial, equivalente a dois elementos da malha menos refinadas. O processo evolutivo obtido para cada um dos casos é apresentado na Tabela 1. Observamos que em termos de topologia, as estruturas obtidas são equivalentes. No entanto, no caso das malhas menos refinada, é perceptível uma dificuldade de representação do domínio, especialmente nas regiões de barras mais finas, resultando em um aspecto ondulado nas fronteiras. Já quando contrastamos os resultados obtidos com as duas malhas mais refinadas, não é possível observar diferenças significativas na capacidade de representação do domínio. Por outro lado, há um aumento de 55,8% no tempo computacional gasto por iteração do método. Efeitos análogos foram observado com outros *problemas-teste*, cf. apresentado em [2, Capítulo 4], em que outros aspectos da abordagem são também investigados.



Tabela 1: Processo evolutivo obtido com diferentes malhas. O número de iterações para convergência e tempo por iteração para cada caso são apresentados a seguir. 20×10 : Sem convergência, 1.047s; 30×15 : 66 iterações, 1.044s; 60×30 : 60 iterações, 1.353s; 90×45 : 61 iterações, 2.108s.

6 Considerações finais

Quando a *extensão-regularização Hilbertiana* da velocidade é adotada juntamente com a abordagem parametrizada de conjuntos de nível aqui discutida, é importante garantir que a extensão do campo de velocidades seja suficiente para que o mesmo seja capturado pelos nós da malha responsável pela evolução do domínio. No que diz respeito ao esforço computacional, o uso de funções de base radial de suporte compacto é interessante em contraste com as clássicas *multi-quádricas*, uma vez que leva a matrizes de interpolação e transição esparsas, cuja álgebra linear computacional pode ser eficientemente explorada. Além disso, o estudo a respeito do desacoplamento das malhas foi importante para observar que, ainda que haja um número mínimo de funções-base necessárias para uma representação apropriada dos domínios, é possível adotar um número reduzido de C2-RBF's em comparação com o número de nós da malha de elementos finitos, levando a matrizes de dimensões menores. Com isso, o processo de evolução pode ser mantido eficiente ao mesmo tempo em que se preserva a acurácia na solução dos problemas variacionais.

Agradecimentos

Agradecemos à FAPESP (processos 2020/00521-4, 2018/24293-0 e 2013/07375-0), à CAPES (código financeiro 001), e ao CNPq (processo 305010/2020-4) pelo suporte financeiro.

Referências

- [1] G. Allaire, F. Jouve e A.-M. Toader. "Structural optimization using sensitivity analysis and a level-set method". Em: Journal of Computational Physics 194 (2004), pp. 363–393.
- [2] G. C. Andrade. Sobre métodos baseados em conjunto de nível para otimização topológica estrutural. Dissertação de mestrado. 2022.
- D. P. Bertsekas. Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods. New York: Academic Press, 1982. ISBN: 1-886529-04-3.
- [4] E. G. Birgin e J. M. Martínez. Practical Augmented Lagrangian Methods for Constrained Optimization. Philadelphia, USA: SIAM, 2014. ISBN: 978-1-611973-35-8.
- [5] M. Burger e S. J. Osher. "A survey on level set methods for inverse problems and optimal design". Em: European Journal of Applied Mathematics 16.2 (2005), pp. 263–301. DOI: 10.1017/S0956792505006182.
- [6] A. L. Gain e G. H. Paulino. "A critical comparative assessment of differential equation-driven methods for structural topology optimization". Em: Structural and Multidisciplinary Optimization 48.4 (2013), pp. 685–710. DOI: 10.1007/s00158-013-0935-4.
- [7] F. de Gournay. "Velocity extension for the level-set method and multiple eigenvalues in shape optimization". Em: SIAM Journal on Control and Optimization 45.1 (2006), pp. 343– 367.
- [8] H. P. Langtangen e A. Logg. Solving PDEs in Python The FEniCS Tutorial. Cham: Springer, 2017. ISBN: 978-3-319-52461-0. DOI: 10.1007/978-3-319-52462-7.
- [9] A. Laurain. "A level set-based structural optimization code using FEniCS". Em: Structural and Multidisciplinary Optimization 58.3 (2018), pp. 1311–1334. ISSN: 16151488. DOI: 10.1007/s00158-018-1950-2.
- [10] S. Osher e R. Fedkiw. Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces. New York: Springer, 2003. ISBN: 0-387-95482-1.
- N. P. Van Dijk et al. "Level-set methods for structural topology optimization: A review".
 Em: Structural and Multidisciplinary Optimization 48.3 (2013), pp. 437–472. ISSN: 1615147X. DOI: 10.1007/s00158-013-0912-y.
- [12] S. Wang e M. Y. Wang. "Radial basis functions and level set method for structural topology optimization". Em: International Journal for Numerical Methods in Engineering 65.12 (2006), pp. 2060–2090. ISSN: 00295981. DOI: 10.1002/nme.1536.
- P. Wei et al. "A Study on Basis Functions of the Parameterized Level Set Method for Topology Optimization of Continuums". Em: Journal of Mechanical Design 143.4 (2021), 041701(1– 17). ISSN: 1050-0472. URL: https://doi.org/10.1115/1.4047900.
- [14] P. Wei et al. "An 88-line MATLAB code for the parameterized level set method based topology optimization using radial basis functions". Em: Structural and Multidisciplinary Optimization 58.2 (2018), pp. 831–849. DOI: 10.1007/s00158-018-1904-8.

7