

## OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA ACELERADA COM REDES NEURAIS

Palavras-Chave: Otimização Topológica, Machine Learning, Inteligência Artificial

João Vítor Omonte Neves<sup>1</sup>, Renato Pavanello<sup>1</sup> (orientador), Humberto Martins<sup>2</sup> e Álvaro Neves<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Faculdade de Engenharia Mecânica, UNICAMP, <sup>2</sup>Departamento de Física, UFV

### 1. INTRODUÇÃO:

A otimização topológica é um ramo vibrante da engenharia que estuda como distribuir espacialmente o material que constitui uma estrutura, de modo a otimizar o seu desempenho, respeitando certas limitações. Este trabalho endereça o problema clássico de maximizar a rigidez mecânica de uma estrutura contendo uma determinada massa, submetida a determinadas forças externas e tendo pontos com movimento restrito (*constraints*).

Os métodos computacionais evolucionários BESO e SIMP (HUANG; XIE, 2010) estão entre os mais utilizados na área. Eles partem de uma distribuição inicial de material, sujeita a condições de contorno dadas, e usam o método de elementos finitos para calcular grandezas de interesse para o problema, como a distribuição de temperatura ou, no nosso caso, a de energia elástica de deformação da estrutura (*compliance*). Tendo em vista o objetivo do processo de otimização, no caso a minimização da *compliance*, os métodos evolucionários indicam uma pequena modificação na distribuição do material (topologia) da estrutura em questão. O processo segue ciclicamente, calculando-se as propriedades de interesse e efetuando-se novas alterações na distribuição de material.

Evidentemente esse processo tem um custo computacional elevado e a busca por métodos para reduzi-lo é um problema central na área de otimização topológica. Em 2019, Sosnovik e Oseledets (2019) propuseram utilizar o aprendizado de máquina com redes neurais para isso. Essencialmente, eles

usaram o método SIMP para gerar a solução de oitenta mil problemas de otimização e treinaram uma rede neural para que ela, ao receber como entrada a topologia de uma estrutura parcialmente otimizada por poucas iterações SIMP e a variação desta entre iterações, fornecesse como saída uma previsão acurada da topologia otimizada final do método evolucionário. Dessa maneira, depois de treinada, a rede pode gerar a topologia otimizada de outros problemas, sem iterações. Evidentemente, ainda seriam necessárias algumas iterações SIMP para gerar a entrada para a rede.

Neste trabalho, tratamos da mesma classe de problemas de otimização topológica endereçada por Sosnovik para aprimorar significativamente o seu método. A contribuição principal deste trabalho é demonstrar que ao treinar uma rede com dados do método BESO, podemos dispensar inteiramente os métodos evolucionários ao utilizar a rede treinada – ela gera previsões acuradas da estrutura otimizada a partir da distribuição de sensibilidade da estrutura inicial, calculada por elementos finitos. Ademais, nessa abordagem reduzimos pela metade o tamanho dos dados de entrada da rede e simplificamos a função custo usada no treinamento, diminuindo a sua demanda computacional e ainda assim obtivemos topologias otimizadas tão acuradas quanto as de Sosnovik.

### 2. METODOLOGIA:

Seguindo Sosnovik e Oseledets (2019), foi considerada uma estrutura de 50 x 50 mm feita de material linear elástico e isotrópico com módulo de Young  $E = 100$  GPa e

coeficiente de Poisson  $\nu = 0,3$ . Para esta, utilizou-se uma malha de  $40 \times 40$  elementos finitos quadrados, na qual foram sorteados 10.000 problemas pseudoaleatórios. Para tanto, sorteou-se o número de forças (sempre de módulo 1 N e para baixo), de apoios que impedem deslocamento em  $x$ , e de apoios que impedem deslocamento na direção  $y$  (os três aplicados em nós da malha), respectivamente chamados de  $N_L$ ,  $N_x$  e  $N_y$ . Estes números foram sorteados com probabilidade dadas pelas expressões abaixo, onde  $P$  é a distribuição de Poisson.

$$N_x \sim P(\lambda = 2) \text{ e } N_y, N_L \sim P(\lambda = 1) \quad (1)$$

Por fim, com os números sorteados, foram então sorteados quais nós têm forças aplicadas neles e quais têm restrição de deslocamento em  $x$  e em  $y$ . Isso foi feito considerando uma distribuição que é 100 vezes mais provável em nós nas bordas da malha do que em nós do interior desta.

Fez-se a otimização topológica de cada problema com o BESO. Buscava-se maximizar a rigidez (minimizar o compliance) e reduzir a massa a 50% da massa inicial. Isso é representado matematicamente por:

$$\min C = \sum_j s_j, \text{ com } s_j = u_j^T k_0 u_j \quad (2)$$

$$V^* - \sum_j V_j x_j = 0, \text{ com } x_j = 0 \text{ ou } 1, \text{ e } F = KU \quad (3)$$

Onde  $C$  é a grandeza chamada compliance, que se quer minimizar,  $s_j$  é a chamada sensibilidade de cada elemento  $j$ ,  $u_j$  é o deslocamento dele e  $k_0$  é a sua matriz de rigidez.  $V^*$  é o volume ou massa final da estrutura prescrito,  $V_j$  é o volume de cada elemento e  $x_j$  é o vetor de material, que é 1 quando há material e 0 caso não haja. Ainda  $F, K$  e  $U$  são grandezas globais, respectivamente, o vetor de forças, a matriz de rigidez e o vetor de deslocamentos. Em cada iteração, o BESO retira material onde a sensibilidade é mais baixa e coloca onde ela é mais alta. A quantidade material removida e adicionada em cada iteração é determinada pelos parâmetros taxa de remoção (ER) e taxa máxima de adição (ARmax). O processo termina quando se chega ao volume prescrito

e tem-se estabilização da topologia. Neste estudo, os parâmetros BESO usados foram ER=0,010, ARmax=0,05, raio mínimo de ponderação do filtro  $r_{min}=3$  mm e número de iterações para o cálculo do erro  $N=5$ .

Com os 10.000 problemas otimizados, foram gerados problemas adicionais. Isso foi feito por meio de data augmentation: rotação e reflexão dos 10.000 originais, como Sosnovik e Oseledets (2019). Assim, chegou-se a 80.000 problemas resolvidos de otimização topológica.

A figura que se segue sintetiza o processo de otimização topológica utilizado neste trabalho. A rede neural, como a de Sosnovik, baseia-se na UNET, porém tem um único canal de entrada (input) – a distribuição de sensibilidade de uma estrutura parcialmente otimizada por algumas iterações do BESO. A rede é treinada para prever a topologia final do BESO (ground truth). Como indica a figura, a topologia prevista passa por um filtro digital que transforma valores de massa  $x_i$  menores que a mediana do conjunto em 0 (ausência de material) e outros valores em 1 (presença de material).

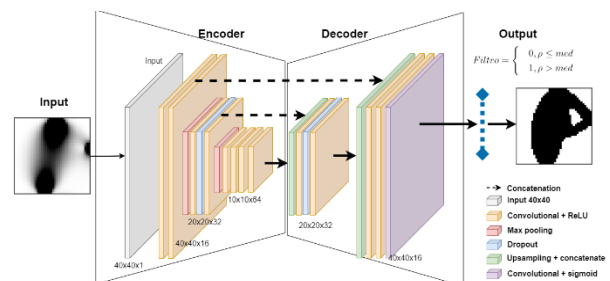


Figura 1- Síntese do processo de otimização topológica deste trabalho, com o uso de redes neurais.

A rede é treinada com 64.000 problemas sorteados do conjunto de dados. Dos problemas restantes, 8.000 constituem o conjunto de validação e também 8.000, o conjunto de teste. O treinamento foi realizado com o método do gradiente estocástico com momento (ADAM) com os parâmetros padrão, learning rate inicial de 0,001 e adotando a entropia cruzada binária como função custo.

A performance da rede é avaliada com base nas métricas acurácias binária e IoU, abaixo definidas, que dizem o quão próximo

cada previsão da rede está da saída correta, também chamada ground truth.

$$Ac. bin = \frac{w_{00}+w_{11}}{n_0+n_1} \quad IoU = \frac{1}{2} \left( \frac{w_{00}+n_0}{w_{10}} + \frac{w_{11}+n_1}{w_{01}} \right) \quad (4)$$

Onde  $n_l, l = 0,1$  é o total de elementos finitos da classe  $l$ , respectivamente, sem ou com material. O  $w_{tp}, t, p = 0,1$  é o número de elementos finitos da classe  $t$  previstos como sendo da classe  $p$ .

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO:

A inovação mais profícua deste trabalho foi usar como entrada para a rede neural as grandezas relacionadas com a distribuição da sensibilidade de estruturas parcialmente otimizadas. A figura 2 mostra a sensibilidade inicial de um dos problemas à esquerda e à direita a sua topologia final otimizada pelo método BESO. Percebe-se que a distribuição da sensibilidade inicial já delinea a forma da topologia otimizada – a massa concentra-se nas regiões com os maiores valores de sensibilidade.

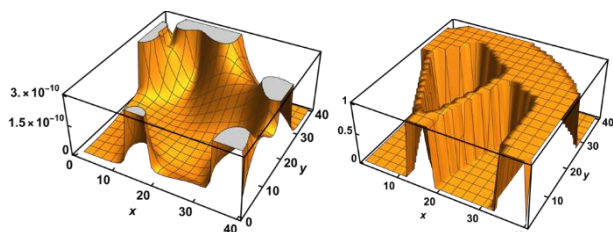


Figura 2- À esquerda encontra-se a distribuição da sensibilidade inicial de um dos problemas e à direita topologia final correspondente (0 → sem massa, 1 → com massa).

Contudo, como os valores da sensibilidade propriamente ditos são majoritariamente muito pequenos, a sua utilização como entrada resulta em erros significativos. Testando diferentes variantes, adotou-se como entrada para a rede a sensibilidade condicionada  $s_j^*$ , definida pela equação que se seguem, onde  $\{s_i\}$ , com  $i \in \{1,2,\dots,1.600\}$  é o conjunto de valores da sensibilidade de uma estrutura e  $\tilde{s}$  é a mediana note-se que para toda estrutura os valores condicionados estão no intervalo  $[0,1]$ .

$$s_j^* = \frac{\min(\{s_j, 5\tilde{s}\})}{5\tilde{s}} \quad (5)$$

Percebe-se que a distribuição da sensibilidade inicial já delinea a forma da topologia otimizada – a massa concentra-se

nas regiões com os maiores valores de sensibilidade.

As sensibilidades de estruturas obtidas com um número maior de iterações BESO trazem mais detalhes da topologia final. Ao longo do processo de otimização os picos maiores de sensibilidade são preservados, enquanto emergem outras regiões com sensibilidade elevada.

Rede neurais com a arquitetura descrita foram treinadas com as sensibilidades advindas de estruturas com diferentes percentuais da massa inicial. Consideremos inicialmente aquela correspondente a 60% da massa. Essa rede foi utilizada no processo da figura 1 para realizar a previsão da topologia otimizada dos problemas no conjunto de teste. Chegou-se a uma acurácia binária média de 95,68% e uma IoU média de 91,72%. A figura 3 mostra o ground truth, ou seja, a topologia otimizada correta, obtida pelo BESO completo, e também a previsão do nosso processo, com rede e filtro, para três problemas representativos de teste. Abaixo das topologias de cada problema, encontram-se a acurácia e o IoU atingidos. Nota-se que as previsões são superiores para problemas mais compactos (os dois mais de baixo). Contudo, mesmo nos problemas envolvendo estruturas mais complexas, como o mais de cima, o processo de otimização entrega uma previsão acurada.

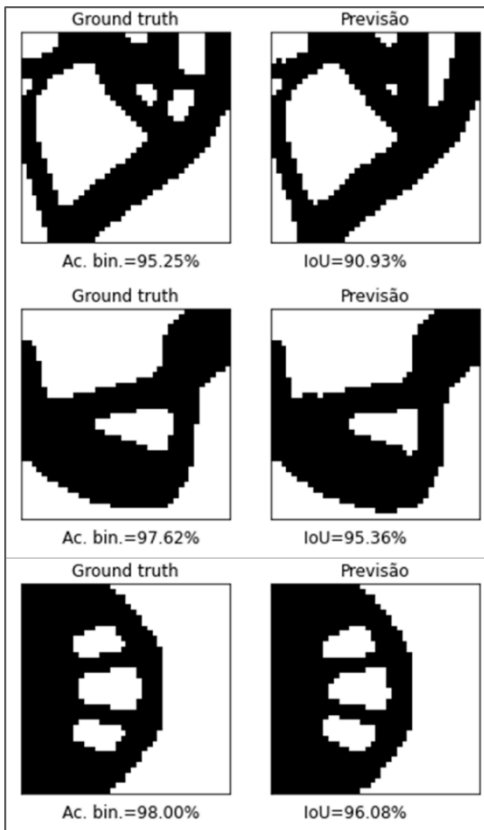


Figura 3 - Ground truth e previsões da rede para três problemas de teste. A entrada é a distribuição de sensibilidades condicionada quando se tem 60 % da massa inicial. A acurácia e a IoU é mostrada abaixo de cada problema.

É mais desafiador fazer a previsão da topologia final a partir da sensibilidade de estruturas menos trabalhadas pelo BES0. O caso extremo é usar a sensibilidade condicionada de estruturas com 100% da massa inicial, ou seja, de estruturas intocadas pelo BES0. Usou-se o nosso processo com uma rede treinada com esses dados, para realizar as previsões das topologias otimizadas, para os problemas de teste. Chegou-se a uma acurácia binária média de 92,44% e uma IoU média de 85,93%. Como esperado, esses números são inferiores aos obtidos com 60% da massa inicial – trata-se de um problema bem mais difícil, no qual entrada contém pálidas informações sobre a topologia otimizada. Entretanto, estes números indicam boas previsões, como se vê na figura abaixo. Ela mostra o ground truth, a previsão do processo em estudo, bem como os IoUs e acurácias binárias para os mesmos três problemas de teste exibidos na figura precedente. Nota-se, como esperado, que as

previsões são agora inferiores às anteriores. No entanto, para os problemas compactos (os dois mais de baixo) essa queda de performance foi menos aguda, ou seja, as previsões são ainda muito próximas do ground truth. Já no caso do problema menos compacto (o mais acima), as métricas tiveram queda maior, mas ainda se tem uma ideia geral da estrutura correta na previsão, porém detalhes são perdidos.

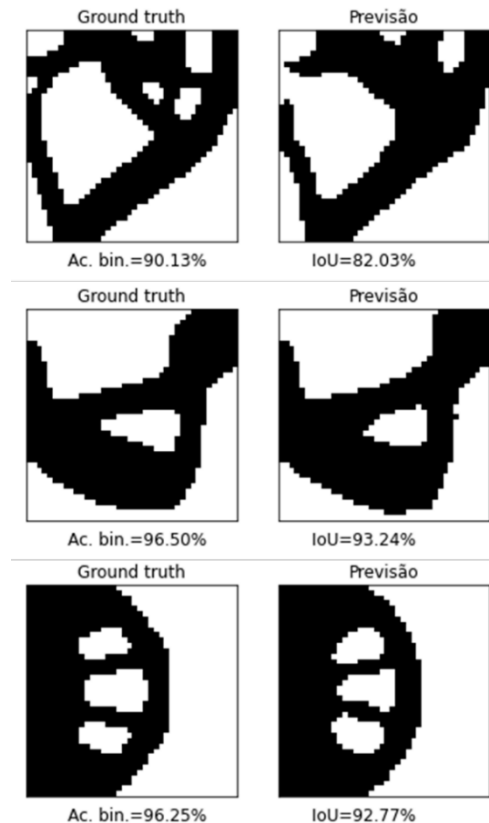


Figura 4 - Ground truth e previsões da rede para três problemas de teste. A entrada é a distribuição de sensibilidades condicionada quando se tem 100 % da massa inicial. A acurácia e a IoU é mostrada abaixo de cada problema.

De forma análoga, foram também treinadas redes a partir das sensibilidades condicionadas correspondentes a outros percentagens da massa inicial. Experimentou-se ainda treinar a rede utilizando como entrada as distribuições de material das estruturas parcialmente otimizadas. As figuras abaixo mostram, respectivamente, as acurácias binárias e as IoUs para todos os problemas de teste com as diferentes entradas das redes. Utilizando entradas mais otimizadas (mais à esquerda nos gráficos), a diferença de performance entre as entradas

distribuição de material e de sensibilidades condicionada é pequena. Porém, é evidente que a primeira é ligeiramente superior à segunda. E, conforme se utilizam como entrada estruturas cada vez menos otimizadas (mais à direita nos gráficos), as performances de ambas caem, o que era esperado, pois o problema se torna cada vez mais difícil. No entanto, as curvas de sensibilidades caem muito menos do que as de massa. Assim, com 100 % da massa inicial, a performance da sensibilidade é muito superior à da massa. Enquanto esta tem acurácia binária próxima de 55%, a daquela é superior a 90%. No caso do IoU, o desta é próxima de 40%, e o daquela é superior a 85%. Isso era esperado, pois com uma otimização cada vez mais preliminar, a quantidade de informações da distribuição de sensibilidades e de material caem, porém a relativa ao material cai muito mais. No caso dos 100% de massa inicial, por exemplo, as entradas de distribuição de material são as mesmas (matriz cheia de material) para todos os problemas, portanto não há muitos padrões a serem descobertos pela rede neural. Já a entrada distribuição de sensibilidades condicionada é distinta para cada problema. Além disso, esta tem mais informações e padrões que a rede neural descobre no treinamento.

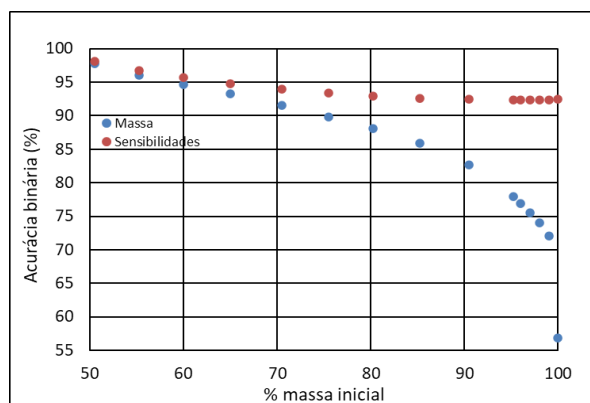


Figura 5- Acurácias binárias utilizando dados de teste. As entradas são distintas: distribuição de sensibilidades ou de massa quando há diferentes frações da massa inicial ainda presentes (otimização parcial)

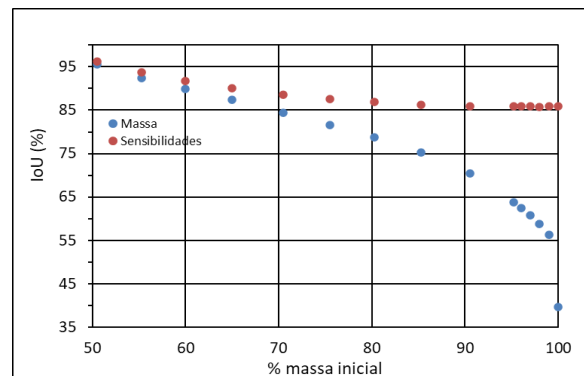


Figura 6 - IoUs utilizando dados de teste. As entradas são distintas: distribuição de sensibilidades ou de massa quando há diferentes frações da massa inicial ainda presentes (otimização parcial)

#### 4. CONCLUSÕES:

O presente trabalho visou acelerar a otimização topológica por meio do uso de redes neurais artificiais, de forma semelhante a Sosnovik e Oseledets (2019). Porém, diferentemente deles, os dados de treinamento deste trabalho foram gerados pelo BESO e utilizou-se apenas um canal de entrada: a distribuição de sensibilidades condicionadas. Mesmo utilizando inputs correspondentes a estruturas pouquíssimo otimizadas, foram obtidas acurácias binárias e IoUs semelhantes às de Sosnovik e Oseledets (2019) (eles não utilizaram entradas correspondentes a estruturas tão pouco otimizadas). Particularmente, no caso extremo de nenhuma iteração do BESO, em que apenas se utiliza o método dos elementos finitos, a rede com entrada distribuição de sensibilidades condicionada chegou a uma acurácia binária de teste de 92,33%, e a uma IoU de teste de 85,44%. Neste caso, com a rede treinada, não é mais necessária qualquer iteração do BESO, basta um programa de elementos finitos, e a otimização é toda feita pela rede em apenas um passo. Isso leva a uma enorme economia de tempo e redução do custo computacional.

#### 5. BIBLIOGRAFIA

- HUANG, X.; XIE, Y.M.. **Evolutionary topology optimization of continuum structures: Methods and applications**. West Sussex: John Wiley And Sons Ltd, 2010. 223 p.
- SOSNOVIK, Ivan; OSELEDETS, Ivan. Neural networks for topology optimization. **Russian Journal Of Numerical Analysis And Mathematical Modelling**, [S.L.], v. 34, n. 4, p. 215-223, 27 ago. 2019. Walter de Gruyter GmbH. <http://dx.doi.org/10.1515/rnam-2019-0018>.