

6

Obtenção da condição ótima de operação utilizando o algoritmo de minimização com restrição tipo caixa

Conforme visto no capítulo anterior, a determinação do campo do fator de amplificação envolve uma carga computacional enorme, mesmo quando se trata de um domínio definido apenas por duas variáveis. O uso de um algoritmo de otimização para a procura de valores das variáveis que minimizam o fator de amplificação reduz tremendamente este trabalho computacional.

Uma rotina para otimização envolve uma função objetivo que se queira maximizar ou minimizar, variáveis de projeto e, geralmente, algumas restrições nos valores possíveis destas variáveis de projeto.

$$f : \Omega \rightarrow R \quad ; \quad \Omega \subset R^n \quad (137)$$

A função objetivo f leva um ponto do espaço de variáveis de projeto ao valor real correspondente. O domínio Ω em que f está definida depende das restrições aplicadas às variáveis de projeto, e o método de otimização percorre o domínio Ω em busca de pontos estacionários, candidatos a pontos extremos.

A fig. (87) representa as curvas de nível de uma função, f , de duas variáveis. O retângulo formado pelas linhas pontilhadas representa o domínio em que f está definida e x^* representa um ponto de mínimo interior ao domínio.

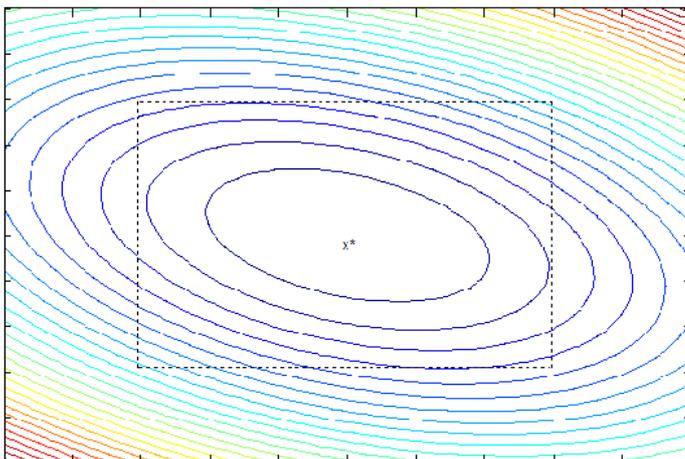


Figura 87 – Curvas de nível de f e indicação do ponto ótimo em um domínio compacto

A relação funcional entre a função objetivo e as variáveis de projeto nem sempre é conhecida.

Um dos critérios de classificação dos problemas de otimização é o seguinte:

- a) Natureza da função objetivo e do domínio formado pelas variáveis de projeto: linear ou não linear, convexa ou não convexa;
- b) Número de variáveis de projeto: pequeno ou grande;
- c) Suavidade da função objetivo e restrição nas variáveis de projeto: diferenciável ou não diferenciável;
- d) Presença ou não de restrições nas variáveis de projeto.

Há um grande número de algoritmos para otimização de funções de uma ou várias variáveis, todos iterativos. Alguns não necessitam da avaliação das derivadas (métodos diretos), outros necessitam desta avaliação (métodos gradientes).

Deve-se mencionar que algoritmos de otimização numérica muito raramente levam a ótimos globais, mesmo porque muitas vezes não é possível saber se um ponto extremo é ótimo local ou global. O algoritmo utilizado e a aproximação inicial dada influem na velocidade de convergência para o ponto ótimo.

Em geral, os métodos gradientes são mais elaborados e convergem mais rapidamente para o ponto ótimo, porém requerem o trabalho adicional da determinação das derivadas primeiras e talvez das derivadas segundas.

As características desejáveis de um bom algoritmo de otimização são (Nocedal & Wright, 1999):

- a) Robustez: funcionar bem para uma dada classe de problemas, independentemente da escolha inicial do valor das variáveis;
- b) Eficiência: não utilizar muita memória ou levar muito tempo para processamento;
- c) Precisão: ser pouco sensível a erro nos dados e a erro de arredondamentos.

Nesta tese, a função objetivo é o fator de amplificação e as variáveis de projeto são os parâmetros de processo e produto (fresta de revestimento, nível de vácuo, velocidade do substrato, viscosidade, tensão superficial) e variáveis geométricas representas na fig. (88).

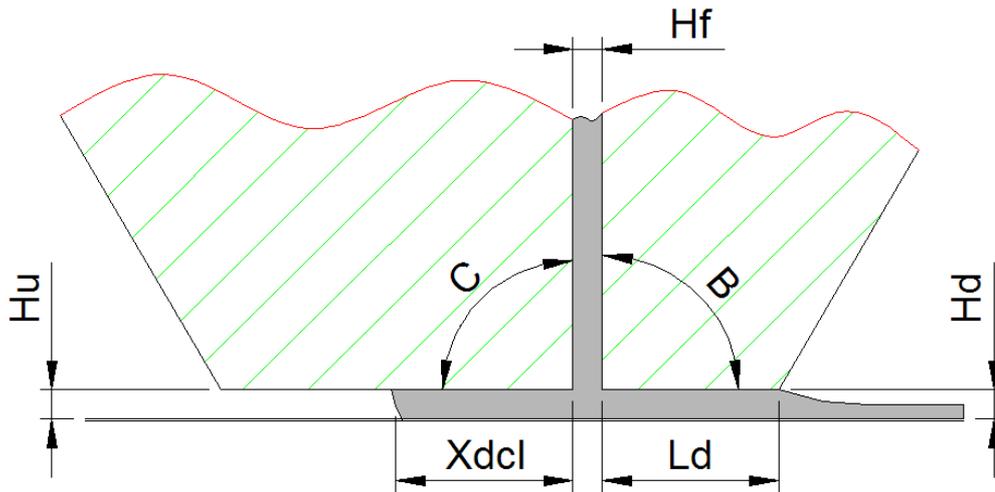


Figura 88 – Variáveis geométricas para otimização da função objetivo

6.1 Teoria da otimização não linear com restrição tipo caixa

A função objetivo a ser minimizada é o fator de amplificação da oscilação da fresta de revestimento. Não há uma descrição analítica desta função, mas assume-se que é contínua em todo o domínio das variáveis de projeto $\Omega \subset R^n$.

O domínio $\Omega \subset R^n$ é a caixa no R^n , $l \leq x \leq u$, portanto um conjunto compacto (fechado e limitado).

O teorema de Bolzano-Weierstrass garante que se $f : \Omega \subset R^n \rightarrow R$ é contínua e $\Omega \subset R^n$ é compacto, então existe $x_0 \in \Omega$, minimizador global de $f(x)$ em R (Martínez & Santos, 1995).

A existência do minimizador global $x_0 \in \Omega$ é um fato importante. Porém, não há garantia que o algoritmo de minimização encontrará este ponto. Da mesma forma, não há sequer garantia de encontrar um minimizador local para $f(x)$ em R^n . O algoritmo apenas encontra candidatos a mínimo.

Nesta tese, é utilizado um algoritmo de minimização em caixa (Martinez & Santos, 1995) com restrições ativas e região de confiança.

Minimizar $f(x)$

Sujeito a $l \leq x \leq u$ (138)

onde l e u são os limites mínimos e máximos das variáveis de projeto.

A função objetivo é aproximada por uma quadrática no ponto e , em seguida, esta quadrática é minimizada dentro de uma região que é a intersecção da região de confiança definida e as restrições às variáveis de projeto. Um critério baseado na queda obtida na função objetivo comparada à queda na quadrática determina se o passo é aceitável. Em caso positivo, repete-se o procedimento para o novo ponto, do contrário volta-se ao ponto original, reduz-se a região de confiança e minimiza-se novamente a quadrática.

Como critério de parada, define-se o gradiente projetado negativo como:

$$\bar{g}_p(x)_i = \begin{cases} 0 & \text{se } x_i = l_i \text{ e } [\nabla f(x)]_i > 0 \\ 0 & \text{se } x_i = u_i \text{ e } [\nabla f(x)]_i < 0 \\ -[\nabla f(x)]_i & \text{outros casos} \end{cases} \quad (139)$$

Se \mathbf{x} é um minimizador local ou global, tem-se necessariamente $\bar{g}_p(x)_i = 0$ e o método termina.

O algoritmo para resolução do problema (139) trabalha da seguinte forma:

1- Aproxima-se a função $f(x)$ pela função quadrática

$$q(x-x_0) = \frac{1}{2}(x-x_0)^T H(x-x_0) + b^T(x-x_0) + f(x_0) \text{ nas proximidades de } x_0.$$

onde $H = \nabla^2 f(x_0)$ é a Hessiana da função no ponto x_0 ;

$b = \nabla f(x_0)$ é o gradiente da função no ponto x_0 .

2- Faz-se a minimização da função quadrática $q(x-x_0)$ dentro de uma região Ω^* que é a intersecção de uma região de confiança $\|x-x_0\|_\infty \leq \Delta$, onde acreditamos que a função quadrática é uma boa aproximação para $f(x)$, e a caixa $l_i \leq x_i \leq u_i$

3- A redução aceitável para $f(x)$ é dada pelo critério $f(x) - f(x_0) \leq \rho(q(x) - q(x_0))$, onde $0 < \rho_{\min} \leq \rho \leq \rho_{\max} < 1$ é o fator de redução aceitável.

4- Se o passo é considerado aceitável, voltamos ao passo 1 para x_1 . Neste caso, pode-se aumentar Δ sob certas condições. Do contrário, reduzimos a região de confiança Δ , por exemplo multiplicando-a por 0,8, e voltamos ao passo 2.

O algoritmo apresenta convergência global para um ponto estacionário de $f(x)$ e, além disso, desde que x_k não seja ponto estacionário, x_{k+1} estará bem definido e $f(x_{k+1}) < f(x_k)$.

Como apresentado acima, a minimização da função quadrática $q(x)$ dentro da região Ω^* é o coração do algoritmo. O algoritmo escolhido para esta minimização é o método dos gradientes conjugados.

Assumindo que a função objetivo é comportada o suficiente para possuir derivadas segundas contínuas em Ω , (classe C^2), temos a matriz Hessiana simétrica (Lima, 2007).

O método dos gradientes conjugados pode ser considerado um método de máxima descida com memória, onde ao invés de dar os passos seguindo sempre a direção oposta ao gradiente da função no ponto, as direções de busca são escolhidas dentro de subespaços com dimensão cada vez maior.

6.1.1

Validação do algoritmo de minimização de quadráticas

Como mencionado, a minimização da função quadrática $q(x - x_0) = \frac{1}{2}(x - x_0)^T H(x - x_0) + b^T(x - x_0) + f(x_0)$ é o coração do algoritmo de minimização em caixa.

Como a princípio a matriz $H = \nabla^2 f(x_0)$ pode ser (semi) definida positiva, (semi) definida negativa ou indefinida, é necessária a validação do algoritmo de minimização de quadráticas para todas estas possibilidades.

Portanto na validação do programa para minimização de quadráticas, foram consideradas diferentes situações com relação à matriz H (definida positiva, definida negativa, indefinida e semi-definida positiva), além de variações no ponto inicial e a localização do minimizador global (no caso de H definida positiva).

Embora possamos utilizar quantas variáveis de projeto forem necessárias (dentro do limite de memória do computador), foram consideradas apenas 2 variáveis de projeto para facilitar a visualização dos passos do método de otimização.

O algoritmo de otimização implementado é testado com funções objetivo analíticas de forma a ser validado. Os resultados são apresentados a seguir.

6.1.1.1 Matriz H definida positiva

Pontos onde o gradiente de f é nulo e a matriz hessiana é definida positiva são pontos de mínimo local isolado (Lima, 2007). Uma matriz simétrica H é definida positiva quando sua forma quadrática é maior que zero para todo vetor $v \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$;

$$Q(H) = v^t H v > 0 \quad \forall v \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \quad (140)$$

Nos casos 1, 2 e 3 apresentados abaixo, o ponto de mínimo está localizado no centro do domínio e é avaliado o impacto da posição do ponto inicial no número de iterações do método. A região incluindo a linha pontilhada e seu interior nas figuras a seguir representa o domínio das variáveis de projeto, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Pode-se observar que o número de iterações até o ponto de mínimo depende do chute inicial.

Caso 1: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 6 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -5 \\ -2 \end{bmatrix}$$

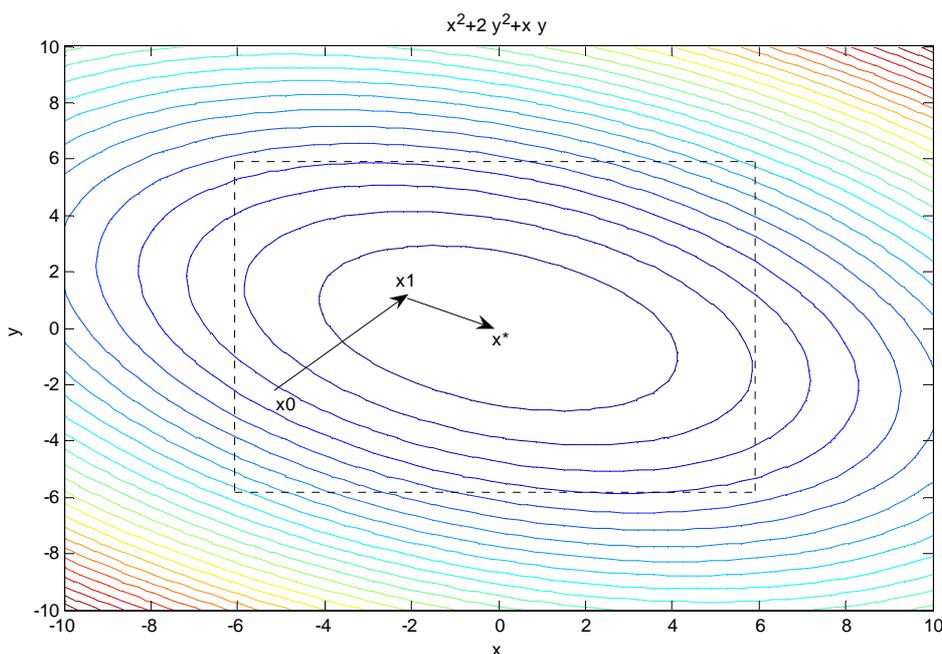


Figura 89 – Hessiana definida positiva, caso 1

Caso 2: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 6 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -6 \\ -2 \end{bmatrix}$$

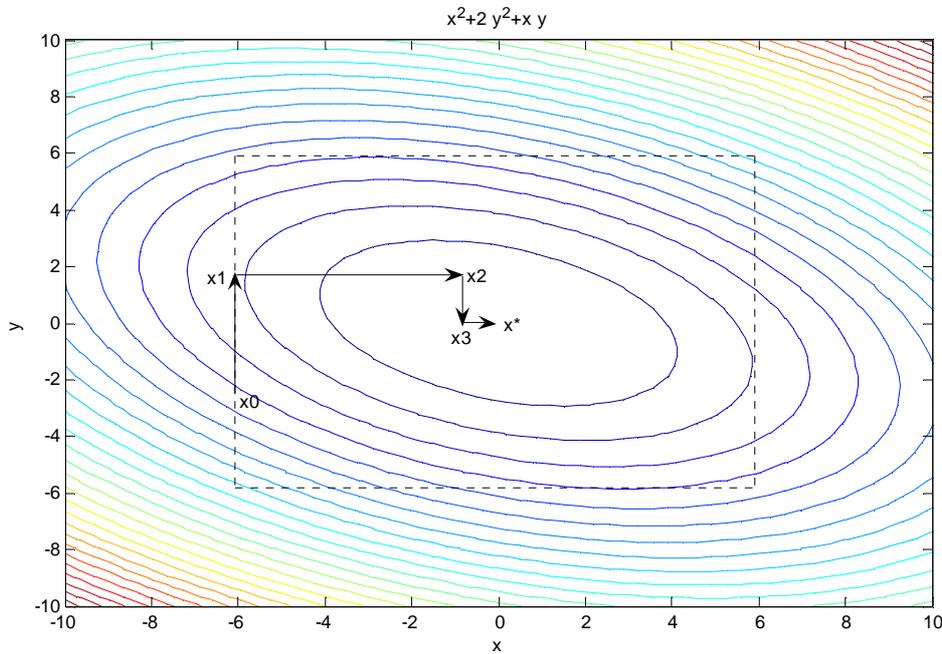


Figura 90 – Hessiana definida positiva, caso 2

Caso 3: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 6 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} 6 \\ -6 \end{bmatrix}$$

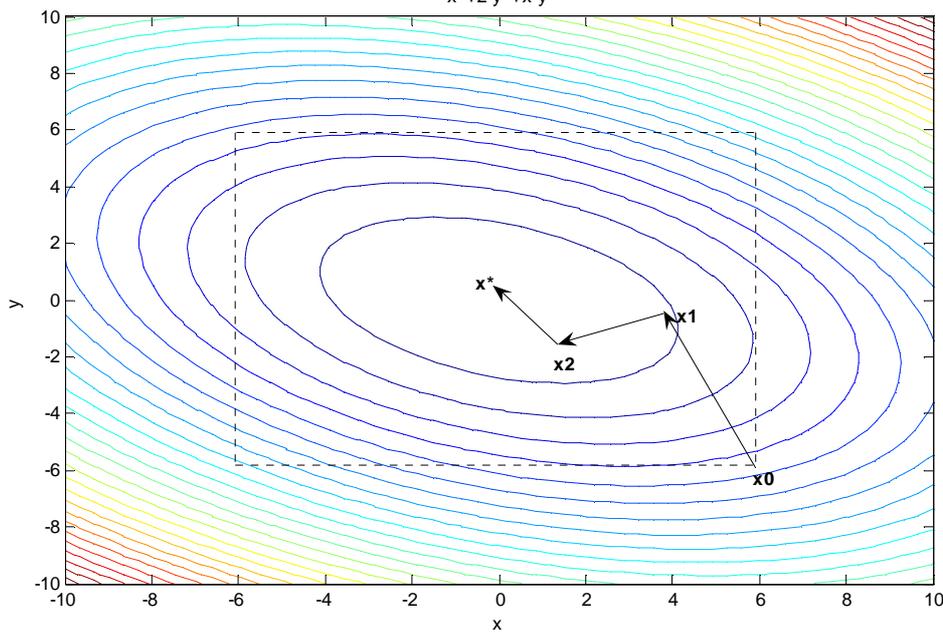


Figura 91 – Hessiana definida positiva, caso 3

Nos casos 4 a 10, o ponto de mínimo está localizado sobre o limite do domínio e é avaliado o impacto da posição do ponto inicial no número de iterações do método.

As fig. (92) a (98) apresentam a evolução do processo iterativo até a determinação do ponto de mínimo.

Caso 4: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -5 \\ -5 \end{bmatrix}$$

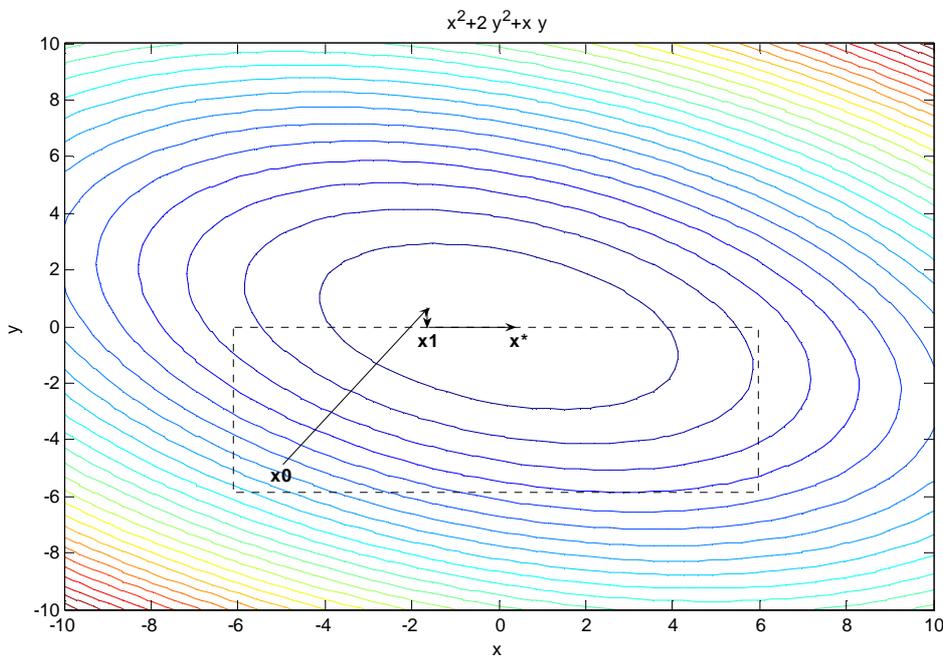


Figura 92 – Hessiana definida positiva, caso 4

Caso 5: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -6 \\ -5 \end{bmatrix}$$

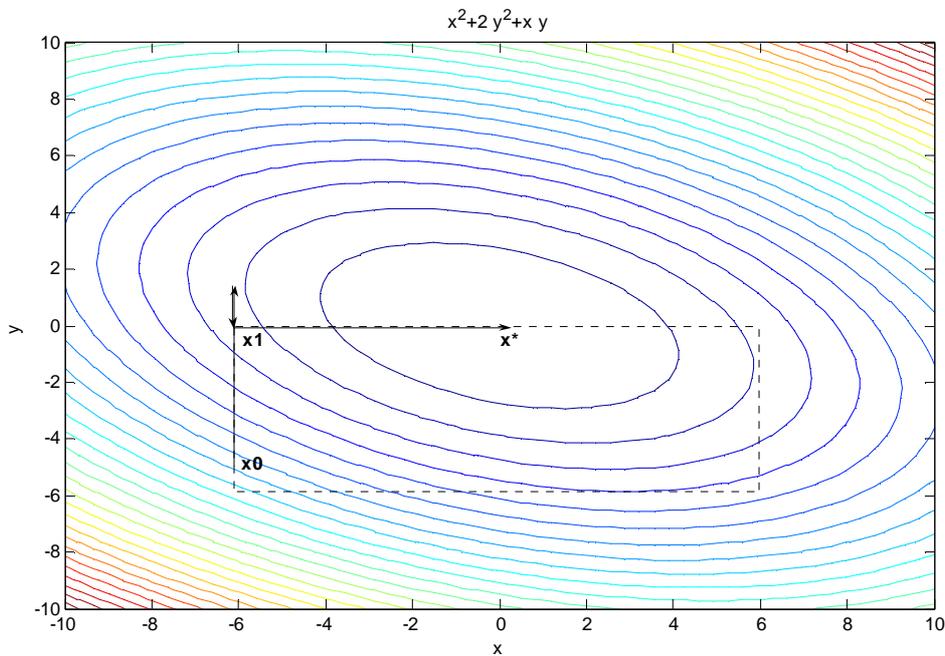


Figura 93 – Hessiana definida positiva, caso 5

Caso 6: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} 6 \\ -5 \end{bmatrix}$$

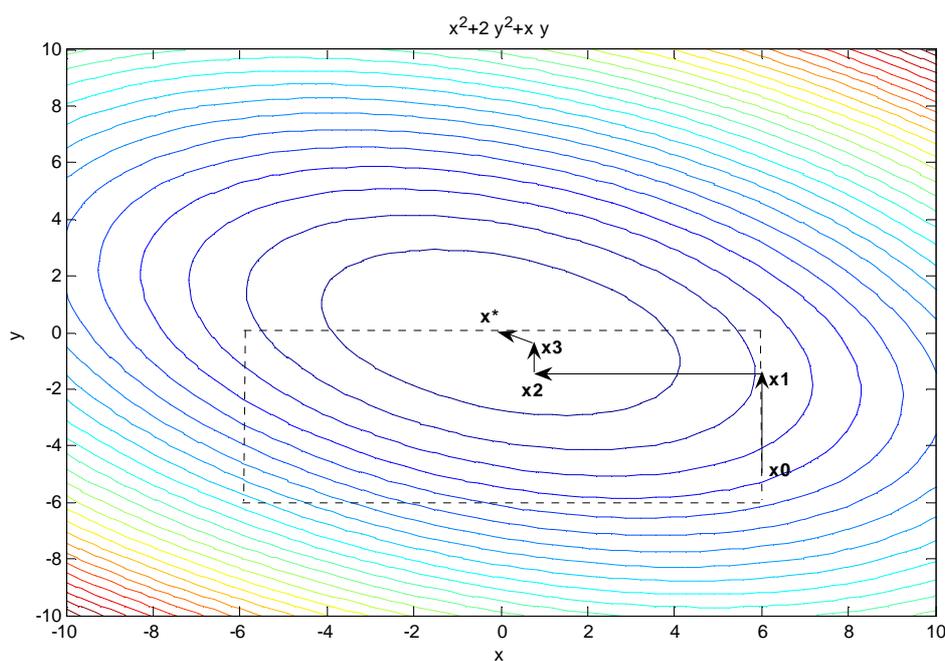


Figura 94 – Hessiana definida positiva, caso 6

Caso 7: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \end{bmatrix}$$

x^2+2y^2+xy

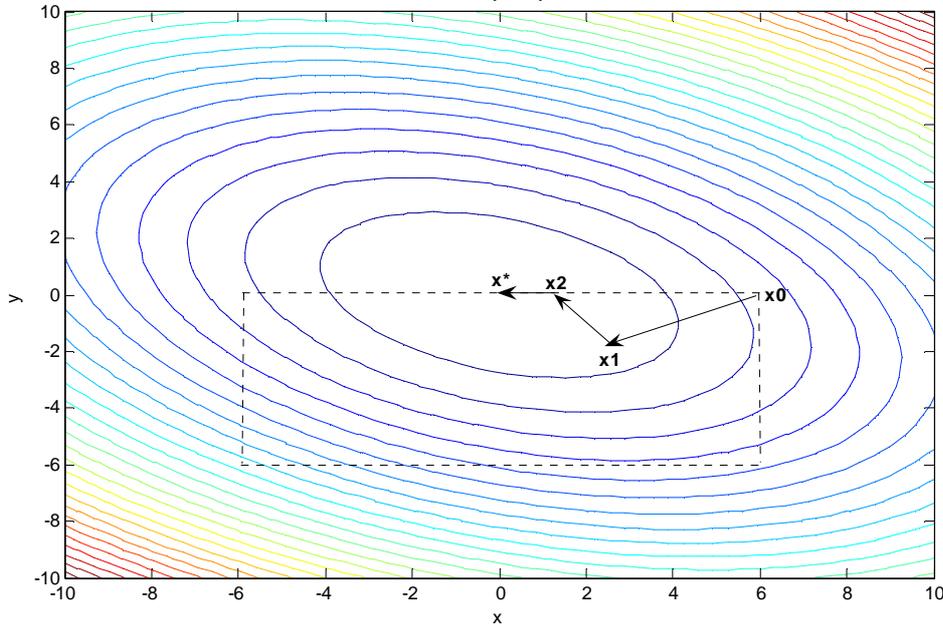


Figura 95 – Hessiana definida positiva, caso 7

Caso 8: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -1 \\ -5 \end{bmatrix}$$

x^2+2y^2+xy

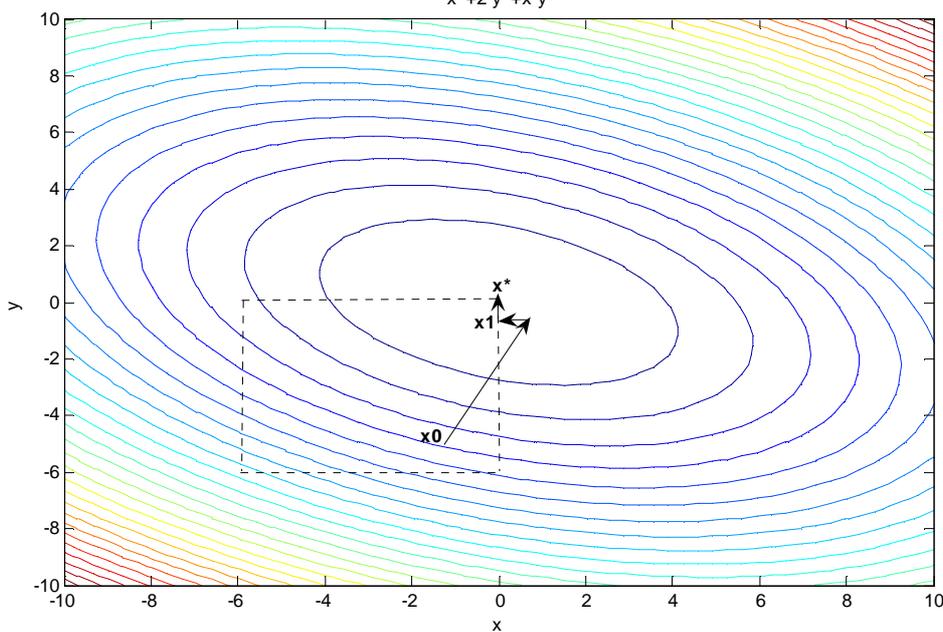


Figura 96 – Hessiana definida positiva, caso 8

Caso 9: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -4 \\ -6 \end{bmatrix}$$

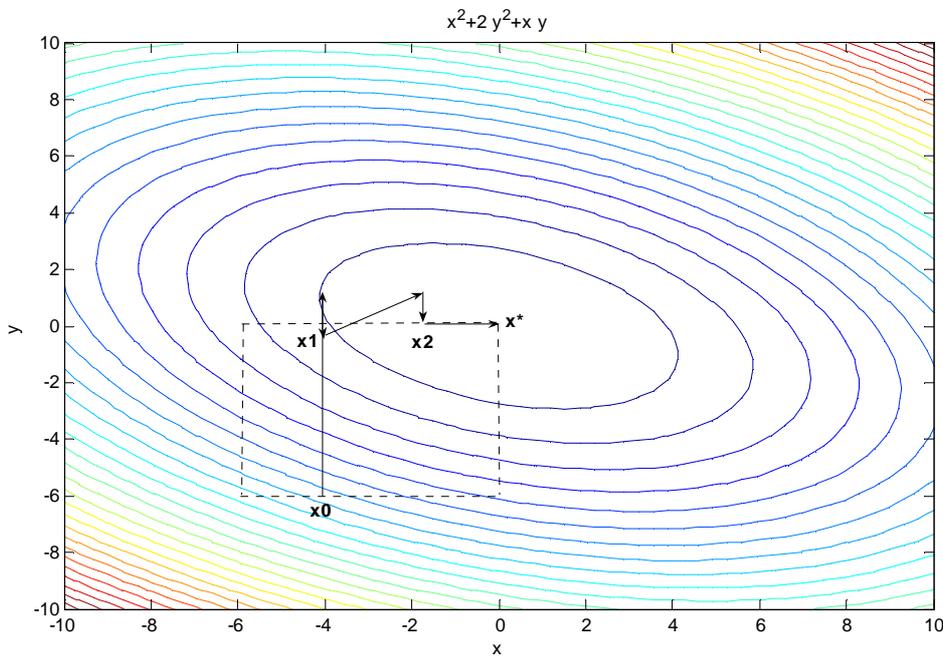


Figura 97 – Hessiana definida positiva, caso 9

Caso 10: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix}$$

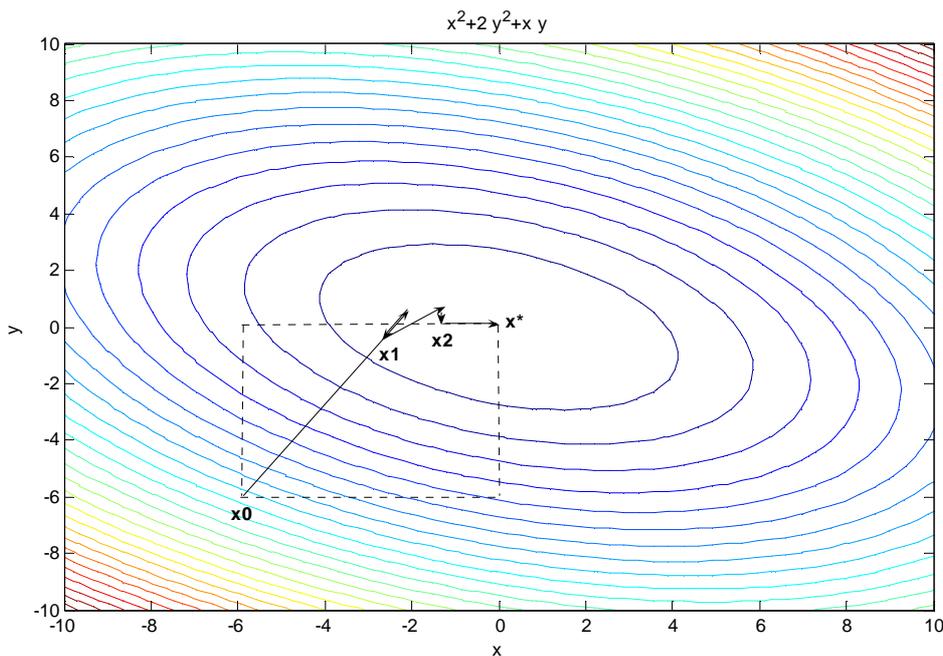


Figura 98 – Hessiana definida positiva, caso 10

Nos casos 11 a 13 o ponto de mínimo está localizado fora do domínio e novamente é avaliado o impacto da posição do ponto inicial no número de iterações do método.

As fig. (99) a (101) apresentam a evolução do processo iterativo. O método converge para ponto interior ao domínio que minimiza a função objetivo.

Caso 11: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -4 \\ -8 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -3 \\ -5 \end{bmatrix}$$

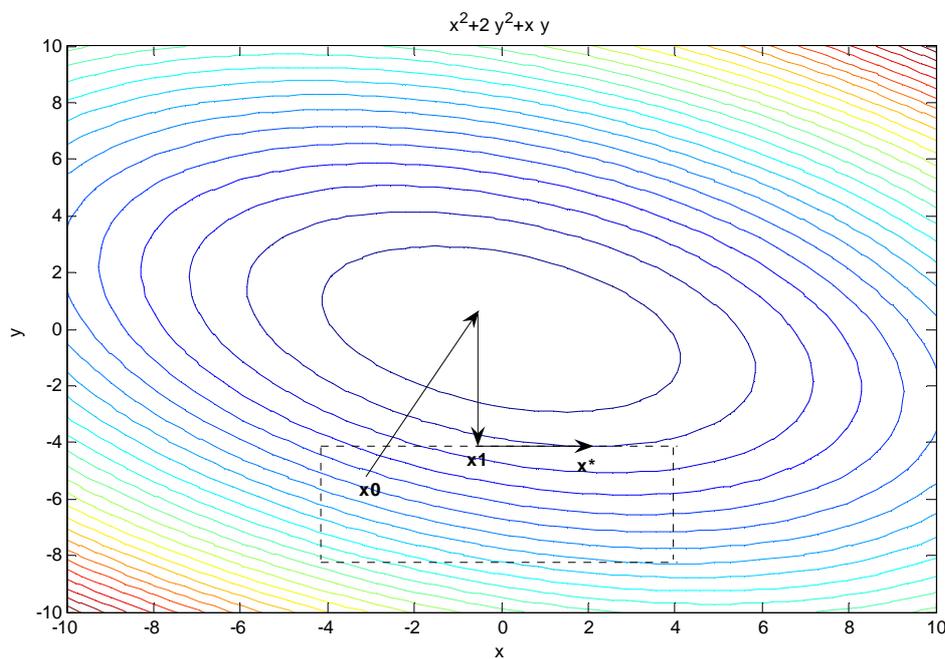


Figura 99 – Hessiana definida positiva, caso 11

Caso 12: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -4 \\ -8 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} 4 \\ -7 \end{bmatrix}$$

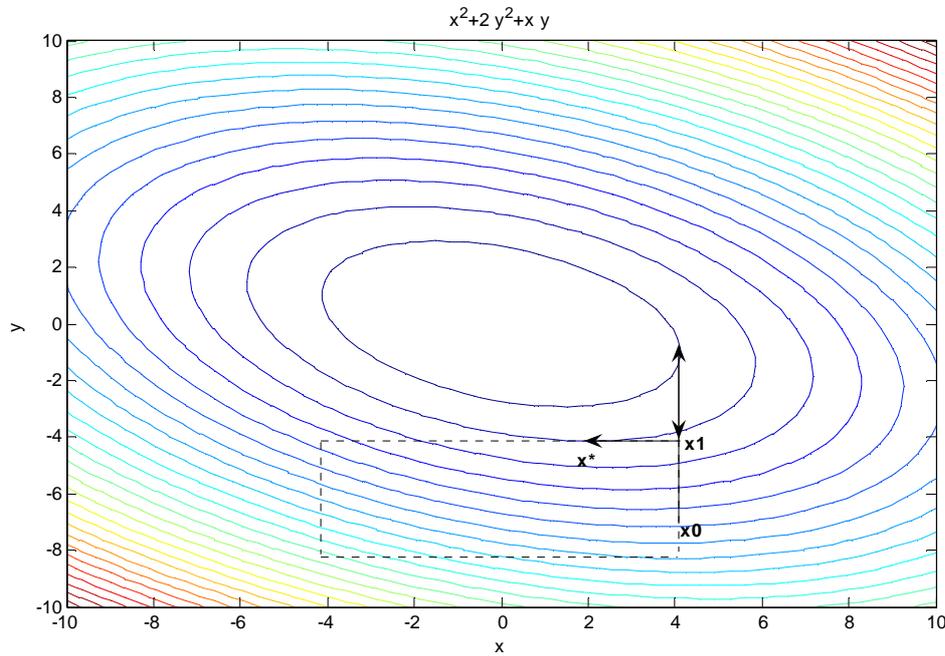


Figura100 – Hessiana definida positiva, caso 12

Caso 13: $q(x) = x^2 + 2y^2 + xy$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -4 \\ -8 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -4 \\ -4 \end{bmatrix}$$

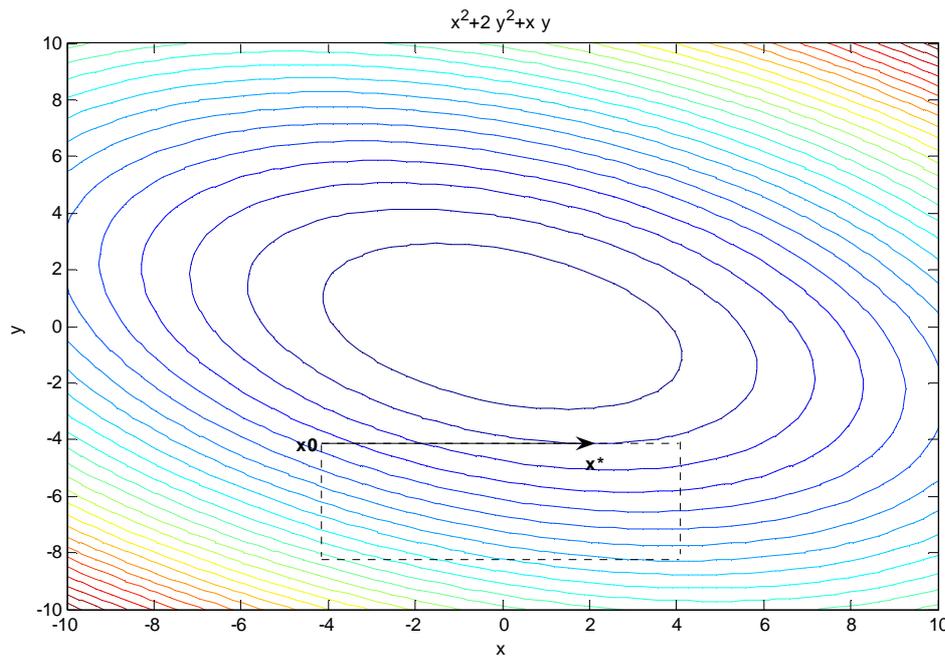


Figura 101 – Hessiana definida positiva, caso 13

6.1.1.2 Matriz H definida negativa

Pontos onde o gradiente de f é nulo e a matriz hessiana é definida negativa são pontos de máximo local isolado da função irrestrita f (Lima, 2007).

Uma matriz simétrica H é definida negativa quando sua forma quadrática é menor que zero para todo vetor $v \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$;

$$Q(H) = v^t H v < 0 \quad \forall v \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \quad (141)$$

Nos casos 1, 2 e 3 abaixo, é avaliado o impacto da posição do ponto inicial no número de iterações do método.

As fig. (102) a (104) apresentam o processo iterativo para diferentes valores do ponto inicial. Observe que o algoritmo converge para um dos pontos de mínimo local dentro do domínio da função objetivo.

Caso 1: $q(x) = -x^2 - 2y^2 + 2xy + 2x + y$

$$H = \begin{bmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6.5 \\ -2 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 2.5 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -2.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

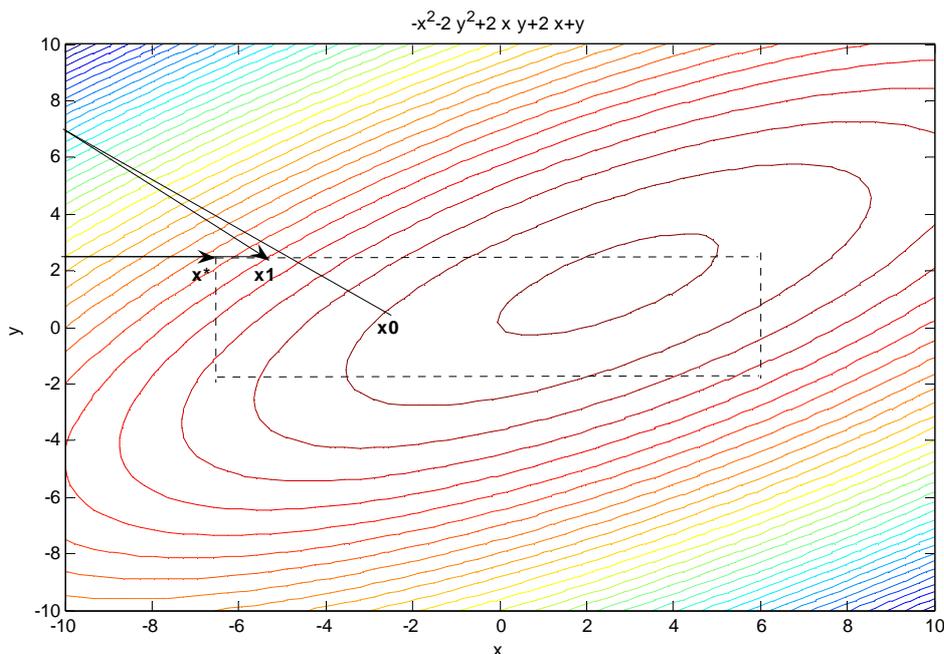


Figura 102 – Hessiana definida negativa, caso 1

Caso 2: $q(x) = -x^2 - 2y^2 + 2xy + 2x + y$

$$H = \begin{bmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6.5 \\ -2 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 2.5 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -2.54 \\ 1.52 \end{bmatrix}$$

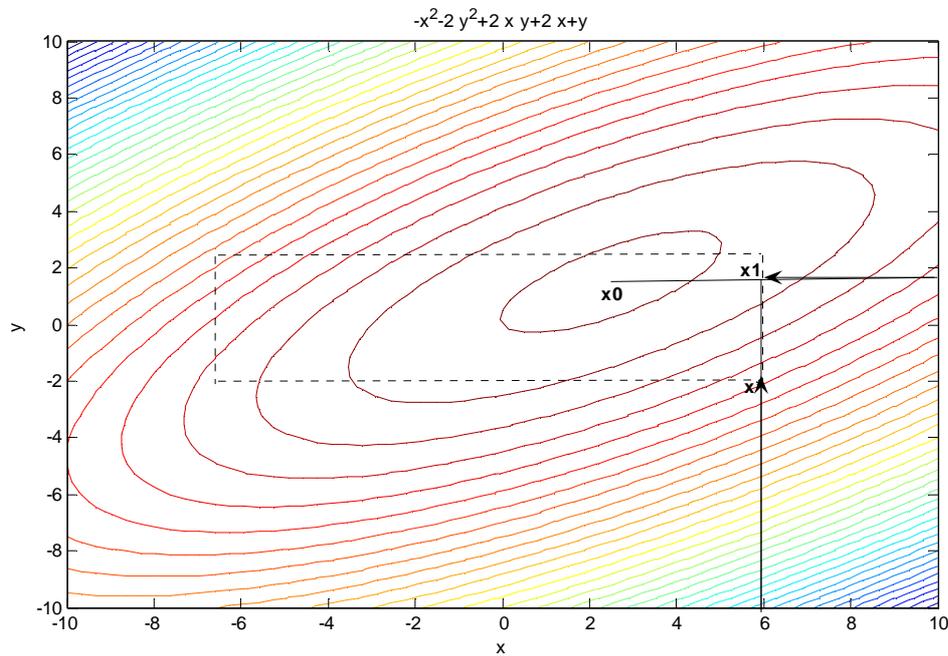


Figura 103 – Hessiana definida negativa, caso 2

Caso 3: $q(x) = -x^2 - 2y^2 + 2xy + 2x + y$

$$H = \begin{bmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6.5 \\ -2 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 2.5 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

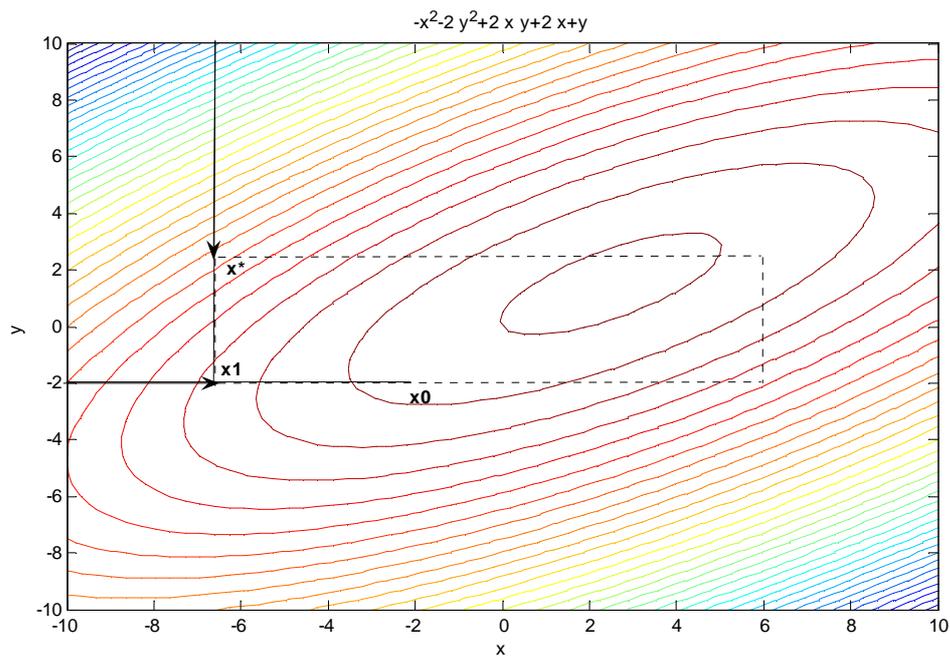


Figura 104 – Hessiana definida negativa, caso 3

6.1.1.3 Matriz H indefinida

Pontos onde o gradiente de f é nulo e a matriz hessiana é indefinida não são pontos de máximo nem mínimo local da função irrestrita f (Lima, 2007).

Uma matriz simétrica H é indefinida quando assume valores positivos ou negativos dependendo do vetor $v \in \Omega \subset R^n$. Os casos 1, 2 e 3 apresentados nas fig. (105) a (107) são exemplos de quadráticas com matriz H indefinidas. As figuras apresentam os passos do método para pontos iniciais diferentes. O algoritmo converge para mínimos locais dentro do domínio Ω .

Caso 1:

$$q(x) = -x^2 + 2y^2 + 2xy + x + 2y$$

$$H = \begin{bmatrix} -2 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -5 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

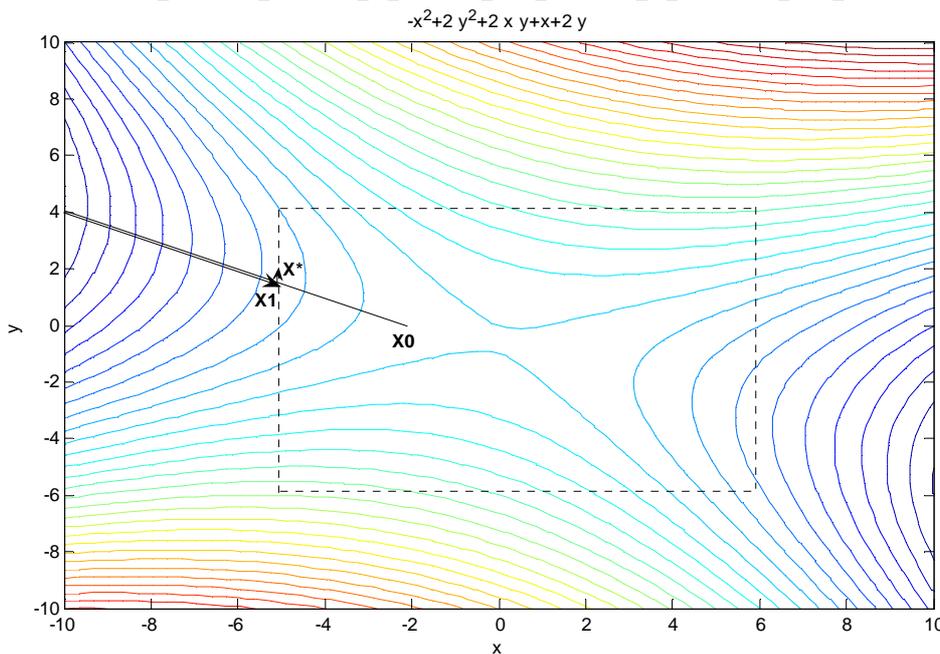


Figura 105 – Hessiana indefinida, caso 1

Caso 2: $q(x) = -x^2 + 2y^2 + 2xy + x + 2y$

$$H = \begin{bmatrix} -2 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -5 \\ -6 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

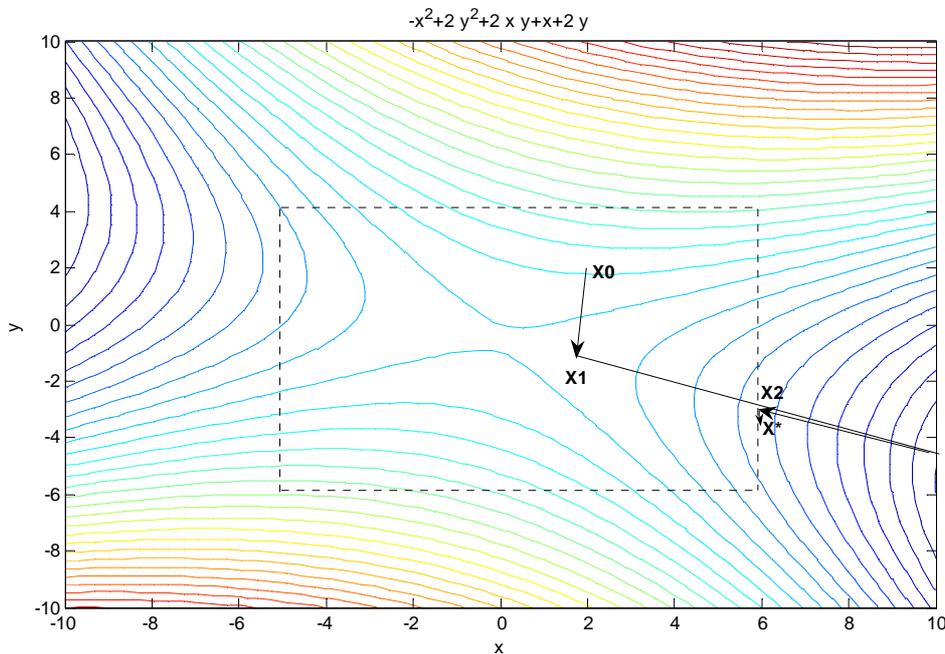


Figura 106 – Hessiana indefinida, caso 2

6.1.1.4

Matriz H semi-definida positiva

Pontos onde o gradiente de f é nulo e a matriz hessiana é semi-definida positiva são pontos de mínimo local não isolado da função f .

Uma matriz simétrica H é semi-definida positiva quando sua forma quadrática é maior ou igual a zero para todo vetor $v \in \Omega \subset R^n$;

$$Q(H) = v^t H v \geq 0 \quad \forall v \in \Omega \subset R^n \quad (142)$$

Exemplos da aplicação do algoritmo em quadráticas com matriz H semi-definida positiva são apresentados nos casos 1 e 2 das fig. (107) e (108).

Caso 1: $q(x) = x^2 + y^2 + 2xy + x + 2y$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} -6 \\ -5 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 8 \\ 5 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}$$

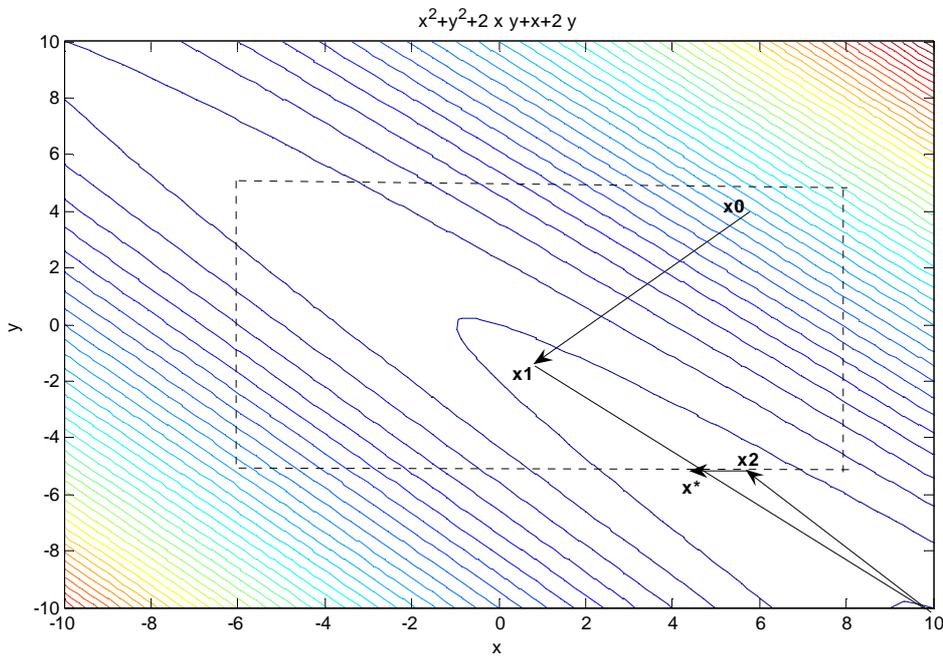


Figura 107 – Hessiana semi-definida positiva, caso 1

Caso 2: $q(x) = x^2 + y^2 + 2xy + x + 2y$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}; b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}; l = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 8 \\ 5 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}$$

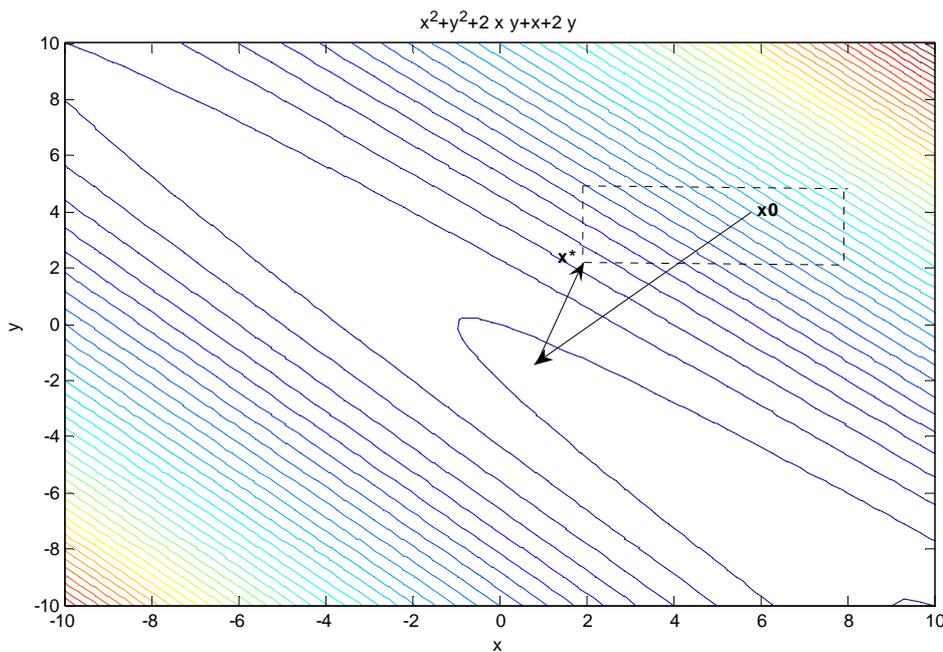


Figura 108 – Hessiana semi-definida positiva, caso 2

6.1.2

Validação do algoritmo para a minimização de uma função geral

O algoritmo utilizado garante convergência global a um ponto estacionário, mesmo que seja no limite, quando o número de iterações tende ao infinito.

O número de iterações necessárias para se atingir um ponto estacionário dependerá da função objetivo, do ponto inicial x_0 , da precisão requerida para parada do algoritmo, do tamanho da região de confiança adotado em cada iteração e do fator de redução $\rho = \frac{f(x) - f(x_0)}{q(x) - q(x_0)}$, onde $f(x)$ é o valor função objetivo no

ponto x e $q(x)$ é o valor da aproximação quadrática da função objetivo no ponto x .

Nos casos 1 a 3, apresentados nas fig. (109) a (111), algumas funções objetivo não quadráticas são definidas para validação do método numérico. Para cada caso é feito um resumo do desempenho com os principais parâmetros que influem no número de iterações até a convergência do método numérico.

Caso 1: $q(x) = x^3 + (y+1)^2 + xy$; $l = \begin{bmatrix} -2 \\ -3 \end{bmatrix}$; $u = \begin{bmatrix} 8 \\ 8 \end{bmatrix}$

Seqüência 1: $x_0 = \begin{bmatrix} 6 \\ -3 \end{bmatrix}$; Seqüência 2: $x_0 = \begin{bmatrix} 6 \\ 5 \end{bmatrix}$; Seqüência 3: $x_0 = \begin{bmatrix} -1 \\ 7 \end{bmatrix}$;

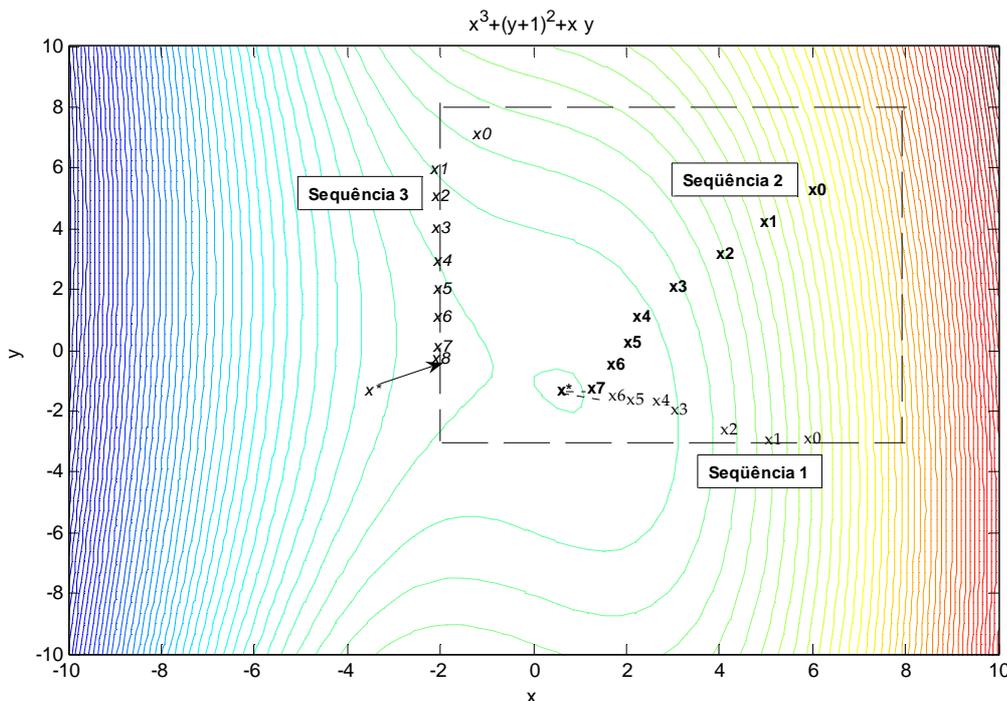


Figura 109 – Função geral para validação do método numérico, caso 1

Na fig. (109), observa-se que o método converge para pontos diferentes, dependendo do ponto inicial.

A tab. (32) apresenta o resumo do desempenho do algoritmo na minimização da função do caso 1.

Nota-se que o número de iterações para atingimento da norma requerida do gradiente projetado varia de acordo com o ponto inicial tomado (sequências 1, 2 e 3), e que a definição do critério de aceitação do passo (valor de ρ) também tem uma grande influência no número de iterações necessárias para a convergência.

Tabela 32 – Resumo do desempenho do algoritmo de minimização para função da fig. (109)

Número de iterações para atingimento da precisão requerida para a norma do gradiente projetado negativo						
$\rho = 0,5$						
Seqüência	$<10^{-1}$	$<10^{-2}$	$<10^{-3}$	$<10^{-4}$	$<10^{-5}$	$<10^{-6}$
1	17	22	28	33	38	43
2	17	22	28	33	38	43
3	8	9	9	9	9	9

Número de iterações para atingimento da norma do gradiente projetado negativo $< 10^{-6}$							
Seqüência	$\rho = 0,1$	$\rho = 0,2$	$\rho = 0,3$	$\rho = 0,4$	$\rho = 0,5$	$\rho = 0,6$	$\rho = 0,7$
1	*	*	72	48	43	34	*
2	*	*	72	49	43	36	*
3	9	9	9	9	9	*	*

* Não convergiu após 1000 iterações

Caso 2: $q(x) = x(x-1)y$

$$l = \begin{bmatrix} -4 \\ -8 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 6 \\ -2 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} 4 \\ -7 \end{bmatrix};$$

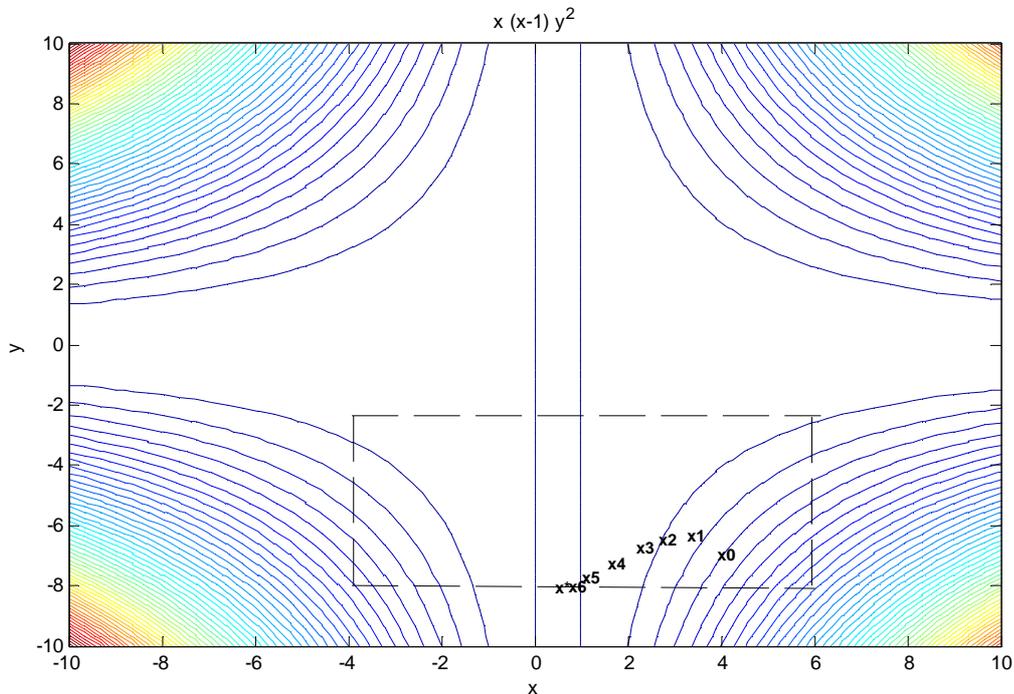


Figura 110 – Função geral para validação do método numérico, caso 2

A tab. (33) apresenta o resumo do desempenho do algoritmo na minimização da função do caso 2.

Tabela 33 – Resumo do desempenho do algoritmo de minimização para função da fig. (110).

Número de iterações para atingimento da precisão requerida para a norma do gradiente projetado negativo						
$\rho = 0,5$						
	$<10^{-1}$	$<10^{-2}$	$<10^{-3}$	$<10^{-4}$	$<10^{-5}$	$<10^{-6}$
Iterações	21	26	31	36	41	*

Número de iterações para atingimento da norma do gradiente projetado negativo $< 10^{-6}$							
	$\rho = 0,1$	$\rho = 0,2$	$\rho = 0,3$	$\rho = 0,4$	$\rho = 0,5$	$\rho = 0,6$	$\rho = 0,7$
Iterações	86	72	77	41	41	*	*

* Não convergiu após 1000 iterações

Caso 3: $q(x) = (x - 2)^4 - (y - 2)^3$

$$l = \begin{bmatrix} -6 \\ 2 \end{bmatrix}; u = \begin{bmatrix} 1 \\ 6 \end{bmatrix}; x_0 = \begin{bmatrix} -5 \\ 3 \end{bmatrix};$$

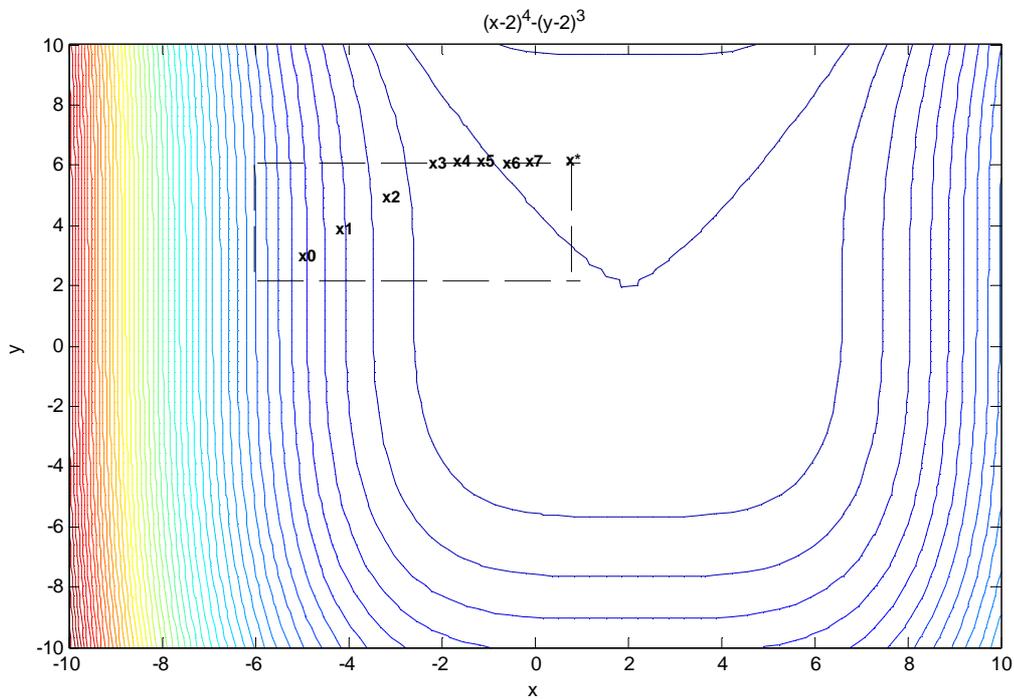


Figura 111 – Função geral para validação do método numérico, caso 3

A tab. (34) apresenta o resumo do desempenho do algoritmo na minimização da função do caso 3.

Tabela 34 – Resumo do desempenho do algoritmo de minimização para função da fig. (111)

Número de iterações para atingimento da precisão requerida para a norma do gradiente projetado negativo						
$\rho = 0,5$						
	$<10^{-1}$	$<10^{-2}$	$<10^{-3}$	$<10^{-4}$	$<10^{-5}$	$<10^{-6}$
Iterações	13	13	13	13	13	13

Número de iterações para atingimento da norma do gradiente projetado negativo $< 10^{-6}$							
	$\rho = 0,1$	$\rho = 0,2$	$\rho = 0,3$	$\rho = 0,4$	$\rho = 0,5$	$\rho = 0,6$	$\rho = 0,7$
Iterações	25	19	16	15	13	12	11

Os resultados apresentados mostram que o algoritmo funciona bem no caso de funções analíticas gerais, e que o usuário deve estar atento à escolha do critério de aceitação do passo (valor de ρ), para garantir uma convergência rápida.

Outro fator importante para a velocidade de convergência, e implícito na obtenção dos resultados, é a definição do tamanho da região de confiança.

6.2

Aplicação do algoritmo de minimização em caixa para otimização do processo de revestimento por extrusão

Nesta seção, o algoritmo de minimização em caixa apresentado na seção 6.1 é utilizado para minimização do fator de amplificação em alguns campos apresentados no cap. 5.

O objetivo é mostrar a utilidade deste algoritmo para minimização desta classe de problemas, assim como extrair novas informações sobre a localização de pontos de mínimo.

Em todos os casos apresentados na seção 6.1, a forma analítica da função objetivo é conhecida, portanto a determinação do valor da função num ponto, assim como o gradiente e a Hessiana, é feito de maneira trivial.

No caso da aplicação do algoritmo de minimização em caixa para otimização do fator de amplificação, a função objetivo não é analítica e é necessário aproximar numericamente o gradiente e a Hessiana em cada ponto do domínio das variáveis de projeto.

Os valores da função objetivo em cada ponto do domínio são obtidos pela solução numérica do modelo matemático apresentado no cap. 2.

Utilizando diferenças finitas centrais, as estimativas para o gradiente e a Hessiana em um ponto (x,y) do espaço de 2 variáveis de projeto são feitas da seguinte forma:

		$(x,y+2\varepsilon_y)$		
	$(x-\varepsilon_x,y+\varepsilon_y)$	$(x,y+\varepsilon_y)$	$(x+\varepsilon_x,y+\varepsilon_y)$	
$(x-2\varepsilon_x,y)$	$(x-\varepsilon_x,y)$	(x,y)	$(x+\varepsilon_x,y)$	$(x+2\varepsilon_x,y)$
	$(x-\varepsilon_x,y-\varepsilon_y)$	$(x,y-\varepsilon_y)$	$(x+\varepsilon_x,y-\varepsilon_y)$	
		$(x,y-2\varepsilon_y)$		

Figura 112 – Esquema numérico para estimativa do gradiente e da hessiana no ponto (x,y)

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = \frac{f(x + \varepsilon_x, y) - f(x - \varepsilon_x, y)}{2\varepsilon_x} \quad ; \quad \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} = \frac{f(x, y + \varepsilon_y) - f(x, y - \varepsilon_y)}{2\varepsilon_y}$$

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} = \left[\frac{(f(x + 2\varepsilon_x, y) - f(x, y)) - (f(x, y) - f(x - 2\varepsilon_x, y))}{4\varepsilon_x^2} \right]$$

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial y \partial x} = \left[\frac{(f(x + \varepsilon_x, y + \varepsilon_y) - f(x - \varepsilon_x, y + \varepsilon_y)) - (f(x + \varepsilon_x, y - \varepsilon_y) - f(x - \varepsilon_x, y - \varepsilon_y))}{4\varepsilon_x \varepsilon_y} \right]$$

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x \partial y} = \left[\frac{(f(x + \varepsilon_x, y + \varepsilon_y) - f(x + \varepsilon_x, y - \varepsilon_y)) - (f(x - \varepsilon_x, y + \varepsilon_y) - f(x - \varepsilon_x, y - \varepsilon_y))}{4\varepsilon_x \varepsilon_y} \right]$$

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} = \left[\frac{(f(x, y + 2\varepsilon_y) - f(x, y)) - (f(x, y) - f(x, y - 2\varepsilon_y))}{4\varepsilon_y^2} \right] \quad (143)$$

Os valores de ε_x e ε_y foram definidos como 1% do valor de cada variável no ponto (x, y) .

Observe que como a função objetivo não é analítica, é necessária a obtenção de 13 valores de f próximos a (x, y) para o cálculo da matriz $H(x, y)$.

Inicialmente, o campo da fig. (86) a 3Hz foi utilizado para aplicação do algoritmo de minimização em caixa. Este campo é relativo à geometria da fig. (85), parâmetros de processo da tab. (30) na frequência de 3 Hz e domínio de f (retangular) restrito aos valores mínimos e máximos das variáveis da tab. (35).

Tabela 35 – Domínio das variáveis de projeto

	Fresta Adimensional	Vácuo (Pa)
Mínimo	1,200	600
Máximo	4,400	2600

Como observado na fig. (113), o ponto de mínimo foi encontrado após 5 iterações do algoritmo de otimização, e está localizado no limite inferior do nível de vácuo.

Cada iteração do algoritmo de minimização e os parâmetros ajustáveis do programa de minimização, tamanho da região de confiança (Ω^*) e queda aceitável na função objetivo (ρ), estão ilustrados na fig. (113) e na tab. (36).

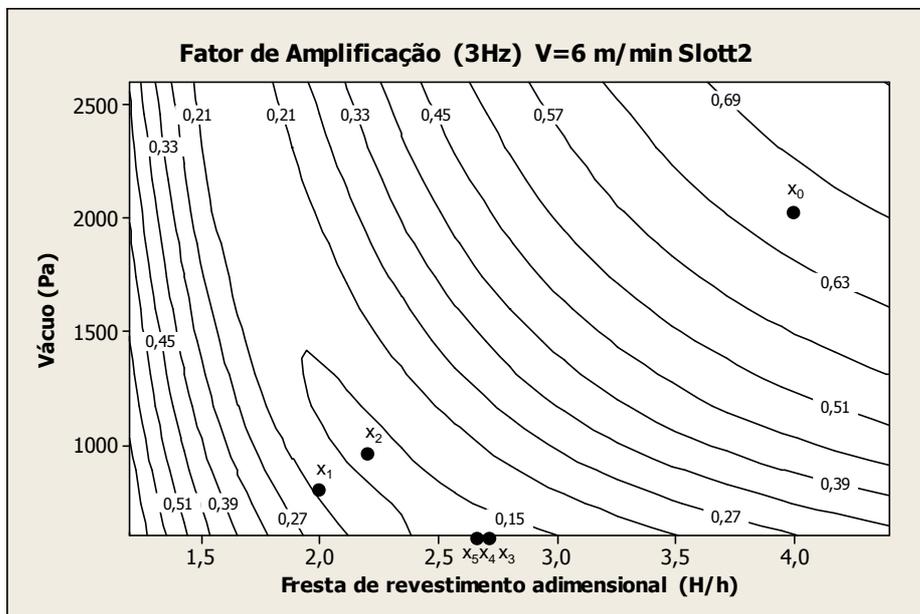


Figura 113 – Iterações do algoritmo de minimização em caixa

Tabela 36 – Resumo das iterações do algoritmo de minimização em caixa aplicado ao campo da fig. (113). Parâmetro de redução aceitável para a função objetivo, $\rho = 0,3$

Região de Confiança	iter #	Fresta Adimensional	Vácuo (Pa)	Fator de Amplificação	Norma do Gradiente Projetado
2,00	0	4,000	2000	0,65785	0,1264
0,34	1	2,000	800	0,19855	0,3445
0,67	2	2,300	980	0,14555	0,0975
1,34	3	2,670	600	0,13130	0,0084
2,68	4	2,655	600	0,13115	0,0019
	5	2,653	600	0,13110	0,0009

Pode-se então explorar candidatos a pontos de mínimo em um domínio expandido, com níveis de vácuo, por exemplo, até 96 Pa.

Neste caso, partindo-se do ponto de mínimo da fig. (113) chega-se a um novo ponto de mínimo para a região expandida após 3 iterações, conforme tab. (37).

Tabela 37 – Resumo das iterações do algoritmo de minimização em caixa aplicado ao campo expandido da fig. (113). Parâmetro de redução aceitável para a função objetivo, $\rho = 0,3$

Região de Confiança	iter #	Fresta Adimensional	Vácuo (Pa)	Fator de Amplificação	Norma do Gradiente Projetado
0,30	0	2,653	600	0,13110	0,020
0,02	1	2,953	458	0,12795	0,012
0,02	2	3,058	434	0,12745	0,005
	3	3,078	424	0,12740	0,006

Na fig. (114) um exemplo de campo de fator de amplificação numa frequência intermediária foi selecionado para aplicação do algoritmo de minimização em caixa. Este campo também é relativo à geometria da fig. (85) e parâmetros de processo da tab. (31) na frequência de 30 Hz.

Cada iteração do algoritmo de minimização e os parâmetros ajustáveis do programa de minimização, tamanho da região de confiança (Ω^*) e queda aceitável na função objetivo (ρ), estão ilustrados na fig. (114) e na tab. (38).

Nota-se na fig. (114), que a escolha do ponto inicial causou um passo (x_1) que apesar de apresentar norma nula do gradiente projetado, não é mínimo local. Este é um caso especial que ocorreu porque o gradiente de f está no cone das restrições ativas.

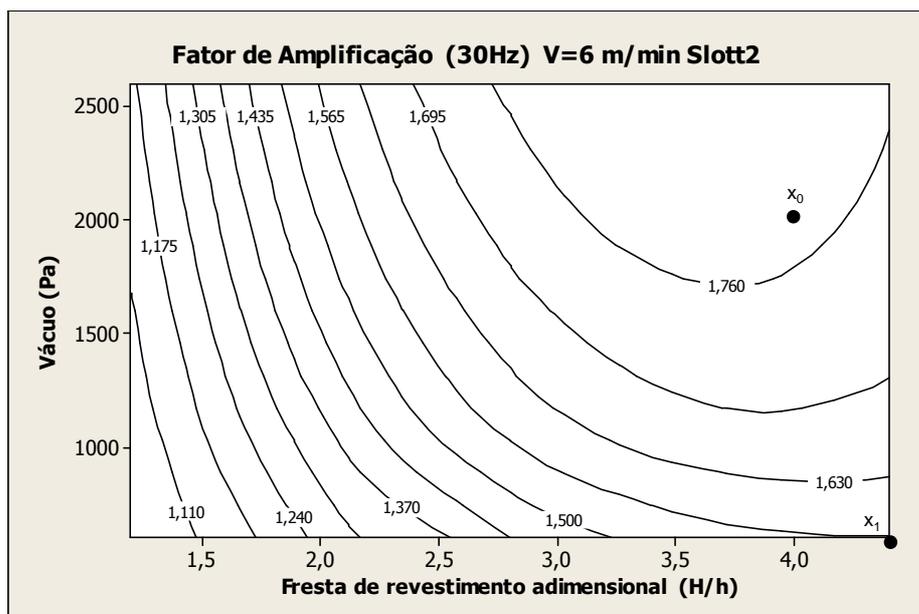


Figura 114 – Iterações do algoritmo de minimização em caixa

Tabela 38 – Resumo das iterações do algoritmo de minimização em caixa aplicado ao campo da fig. (114). Parâmetro de redução aceitável para a função objetivo, $\rho = 0,06$

Região de Confiança	iter #	Fresta Adimensional	Vácuo (Pa)	Fator de Amplificação	Norma do Gradiente Projetado
3,0	0	4,0	2000	1,77445	0,07
	1	4,4	600	1,56285	0,00

Para eliminar este problema, expande-se o domínio das variáveis de projeto para níveis de vácuo, por exemplo, até 96 Pa em busca de outros pontos candidatos a mínimo. O resultado está apresentado na tab. (39).

Tabela 39 – Resumo das iterações do algoritmo de minimização em caixa aplicado ao campo expandido da fig. (114)

Região de Confiança	iter #	Fresta Adimensional	Vácuo	Fator de Amplificação	Norma do Gradiente Projetado
3,0	0	4,4	600	1,56285	0,197
3,0	1	1,4	96	1,04640	0,093
	2	1,2	96	1,02730	0,000

Os exemplos apresentados nesta seção mostram a aplicação do algoritmo de minimização em caixa na determinação de pontos de mínimo no fator de amplificação do processo de revestimento por extrusão.

Embora os exemplos envolvam domínios bidimensionais de variáveis de projeto, o mesmo algoritmo pode ser utilizado para qualquer número de variáveis de projeto dentro do limite de memória do computador.

A aplicação do algoritmo de otimização para a determinação do(s) ponto(s) de mínimo do fator de amplificação economiza tempo computacional que seria utilizado para a determinação dos campos completos apresentados na seção 5.