

Análise de Otimização Offline Data-Driven Baseado em Modelos RBF Surrogate

Vinicius Martins Duarte * Gilberto Reynoso-Meza **

* *Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção e Sistemas, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, PR, (e-mail: martins.duarte@pucpr.edu.br).*

** *Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção e Sistemas, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, PR, (e-mail: g.reynosomeza@pucpr.br).*

Abstract: This paper aims to study the using of Surrogate models followed by optimization. Several executions of the algorithm that generates the Surrogate Models were carried out and optimizations were performed based on them. In sequence, the quality of the generated models and the execution time of the algorithm were analyzed, respectively. After analyzing the model and the time that the algorithm spent in the process, the solutions found were analyzed. The results demonstrated that with the increase of scans performed by the algorithm, the results tend to improve both for the adjustment of the models in relation to the sample data, as well as for the values of optimal solutions. However, with the increase of scans made by the algorithm, the time spent increases considerably.

Resumo: Este artigo tem como objetivo estudar o uso de modelos Surrogate seguidos de otimização. Foram realizadas diversas execuções do algoritmo que gera os modelos Surrogate seguidas de otimizações baseadas nos mesmos. Em sequência foram analisadas a qualidade dos modelos gerados e o tempo de execução do algoritmo respectivamente. Após a análise do modelo e o tempo que o algoritmo despendeu no processo, foram analisadas as soluções encontradas. Os resultados obtidos demonstraram que com o aumento de varreduras realizadas pelo algoritmo os resultados tendem a melhorar tanto para o ajuste dos modelos em relação aos dados de amostra, como também para os valores de soluções ótimas. Porém com o aumento de varreduras feitas pelo algoritmo o tempo despendido cresce consideravelmente.

Keywords: Artificial Neural Networks; Data-Driven; Optimization; Evolutionary Algorithms; Surrogate Models.

Palavras-chaves: Redes Neurais Artificiais; Data-Driven; Otimização; Algoritmos Evolucionários; Modelos Surrogate.

1. INTRODUÇÃO

Com o avanço tecnológico e por consequência o aumento na capacidade de processamento dos computadores, a busca por modelos computacionais que tragam informações com maior qualidade para as organizações se torna cada vez mais importante.

Um dos possíveis impulsionamentos desse avanço tecnológico se deve pela presença cada vez mais perceptível da Indústria 4.0. De acordo com Stock and Seliger (2016), atualmente a Indústria 4.0 tem influência substancial na transformação do cenário industrial atual. Isto se deve ao objetivo de estabelecer fábricas inteligentes, produtos inteligentes e serviços inteligentes. Além disso, novos modelos de negócios inovadores e disruptivos estão evoluindo em torno desses elementos da indústria 4.0. Seguindo essa

premissa uma nova formação dos profissionais e organizações se torna necessária, pois há uma necessidade cada vez maior de que os profissionais tenham cada vez mais conhecimentos nas áreas de inovação tecnológica seguido de uma reestruturação das organizações que visam otimizar as tomadas de decisões, tendo impacto em seus processos e produtos.

Um dos campos de estudos notáveis com o avanço da indústria 4.0 é a utilização de modelos Surrogate, que segundo Stork et al. (2017) a utilização desses modelos se mostrou muito bem-sucedidas quando aplicadas em problemas industriais. Esses problemas transitam por diversas áreas do conhecimento, desde controle, processos e demais assuntos. O uso de modelos Surrogate se torna vantajoso quando é muito custoso para se obter um modelo polinomial para descrever precisamente um certo problema de uma aplicação da qual queremos extrair soluções ótimas. Visto que é comum se ter um conjunto muito grande de variáveis que possam interferir em um fenômeno específico ou mais dentro de ambientes industriais. Essa abordagem

* O primeiro autor agradece a PUCPR pelo incentivo e apoio financeiro no desenvolvimento do projeto de pesquisa de mestrado. Este trabalho foi apoiado parcialmente pelo CNPq através das subvenções dos projetos PQ2 / 310079 / 2019-5 and UNI / 437105 / 2018-0

relativa a um conjunto de dados muito grandes é um dos pilares em que se insere a Indústria 4.0.

Além da utilização dos modelos Surrogate em problemas industriais, segundo Stork et al. (2017) a utilização de técnicas de otimização para resolver problemas de engenharia provou-se também serem muito bem sucedidas. Ainda segundo Stork et al. (2017) os estudos realizados na área mostram que a otimização aplicada em modelos Surrogate é capaz de superar os métodos de otimização metaheurística em modelos tradicionais quando aplicadas em um baixo número de avaliações de modelagem. Além disso, o modelo Surrogate pode ser usado para uma significativa análise das entradas e conexões de um sistema para explorar ainda mais o problema em formação.

Seguindo a ideia de otimização em modelos Surrogate, as aplicações desses modelos e técnicas em ambientes industriais são das mais diversas, como por exemplo em Grimstad et al. (2016) que utilizou modelos Surrogate em aplicações de óleo e gás, com o intuito de otimizar a produção por meio de ajustes em válvulas que controlam o processo produtivo. Outro exemplo que também pode ser citado, Beglerovic et al. (2017) que usou de modelos Surrogate para um problema de otimização relacionado a veículos autônomos.

Como motivação desse artigo, será realizado um estudo aplicações de modelos Surrogate utilizando redes neurais artificiais seguidos de otimização para um dos problemas da competição proposta por Handing Wang (2020). A seções seguintes desse trabalho serão referentes a uma breve introdução do embasamento teórico envolvido incluindo a metodologia proposta seguidos pela formulação do problema, resultados obtidos e conclusão.

2. ABORDAGEM E FERRAMENTAS UTILIZADAS

2.1 Otimização Evolucionária em Offline Data-Driven

Segundo Wang et al. (2018) uma ampla variedade de problemas de otimização do mundo real pode ser resolvido apenas usando abordagens de otimização baseadas em dados offline. Isso sugere que nenhum novo dado pode ser inserido durante o processo de otimização. A Figura 1 mostra uma abordagem geral de Offline Data-Driven para otimização baseada em modelos Surrogate.

Observando a Figura 1 a abordagem Offline em Data-Driven pode ser separada em três etapas. A primeira etapa é referente a coleta de dados. Em seguida, na segunda etapa, é apresentada a modelagem do problema. Nessa etapa são construídos os modelos e é onde o conceito de modelos Surrogate são aplicados, pois é nessa etapa onde se cria modelos substitutos aos gerados inicialmente. Na segunda etapa é também realizada a gestão de qual modelo será utilizado. Por fim, a terceira etapa, onde será realizada a otimização do modelo. Nessa etapa são analisadas as variações ocorridas no modelo proposto e também é realizada a tomada de decisão sobre a utilização do modelo.

Segundo Wang et al. (2018) a utilização de um Data-Driven offline pode apresentar algumas vantagens e desvantagens quando comparado a um Online. As vantagens são referentes a facilidade de implementação uma vez que

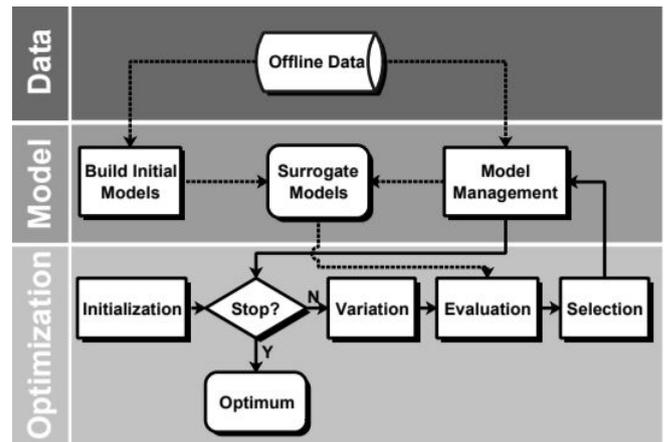


Figura 1. Offline Data-Driven Para a Otimização de Modelos Surrogate

Wang et al. (2018)

o modelo esteja pronto. As desvantagens ficam na ausência de flexibilização e atualização do modelo, e impossibilidade de acompanhar em tempo real as variações geradas. Com esse panorama é importante que os modelos gerados offline sejam de alta qualidade, justificando a utilização de modelos Surrogate.

De acordo com Stork et al. (2017) a aplicação de modelos Surrogate são muito utilizadas em estruturas de Redes Neurais Artificiais.

2.2 Modelos Surrogate Baseados em Redes Neurais

Segundo Wang (2003) o começo da história da utilização das redes neurais pode ser datada na década de 1940, onde os cientistas começaram a desenvolver um modelo onde redes neurais pretendiam emular como os neurônios realizavam um processo de aprendizado. Atualmente, sabe-se que existem diversas estruturas de modelos baseadas em redes neurais. Gutmann (2001) propõe a utilização de Radial Basis Function (RBF) como estratégia para o problema de otimização quando não se há informações adicionais ao problema e também quando se é muito custoso para definir uma função para o modelo. A Figura 2 mostra a estrutura de uma RBF.

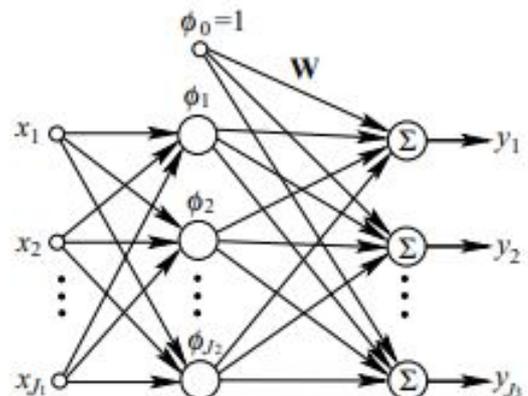


Figura 2. Estrutura Radial Basis Function
Du and Swamy (2014)

A Figura 2 mostra a estrutura de uma RBF. A expressão (1) ilustra uma expressão para a RBF, onde Y representa as saídas, Φ representa as saídas das operações realizadas na camada oculta e W os pesos para cada elemento da camada oculta da rede neural.

$$Y = W^T \Phi \quad (1)$$

Essa função tem por finalidade convergir e gerenciar os valores gerados pela operação de somatória da rede neural. Os pesos das entradas observados em Figura 2 da rede neural tem seus valores otimizados por algoritmos presentes no efeito Back-Propagation.

Segundo Montgomery and Runger (2013) para escolher um possível modelo de um problema matemático é importante que se saiba a respeito da qualidade do mesmo. Isso é importante para que se tenha um modelo eficiente para fornecer as soluções necessárias para o usuário. Uma das formas de avaliar a qualidade de um modelo é através do coeficiente de determinação R^2 . Este indicador tem como finalidade mostrar o quanto um modelo é capaz de explicar os dados observados. A demonstração de como é calculado o coeficiente de determinação pode ser visualizado em (2).

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (2)$$

Os valores y_i são referentes as observações realizadas, \bar{y} é a média dos valores observados e por fim \hat{y}_i ao valor estimado pelo modelo. O valor de R^2 está contido em um intervalo entre 0 e 1 e quanto mais próximo de 1 estiver, isso indica que o modelo tem um comportamento melhor.

Ainda segundo Montgomery and Runger (2013), outra maneira de se avaliar um modelo se da pela análise do erro que o modelo possui em relação as observações. Existem diversos indicadores de erro na literatura, porém um dos mais utilizados é o Root Mean Squared Error (RMSE) ilustrado em (3)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3)$$

Esse indicador de erro é muito útil pois mostra o quanto o modelo está errando em relação aos dados originais. Para avaliar a performance do modelo utilizando o RMSE, basta observar o quão perto de zero o modelo está, quanto menor, melhor.

2.3 Introdução a Otimização

Segundo Koziel and Yang (2011) em engenharia e nas demais áreas do conhecimento científico, os profissionais sempre estão em procura de se otimizar alguma coisa. Isso pode ser algum processo, característica de um produto, efeito ou fenômeno observado, entre muitas outras possibilidades. Para isso se faz necessário formular problemas matemáticos baseados em dados disponíveis sobre tal aplicação e desenvolver uma função objetivo a qual se deseja otimizar. Além dessa função objetivo também é importante verificar as restrições e limites das quais os

problemas de otimização estão envolvidos. Em (2) formula-se de maneira geral um problema de otimização, onde procura-se um valor mínimo (ótimo) de $f(x)$ sujeito a restrições $g(x)$ e $h(x)$.

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ h_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (4)$$

Em essência os procedimentos em relação ao processo de otimização envolvem três etapas que podem ser visualizadas em Figura 3. A primeira etapa é referente ao modelo gerado o qual é baseado em leis da física, química e demais assuntos da ciência. A segunda etapa é a otimização, que por meio de algoritmos fazem uma varredura a procura de valores ótimos para a função objetivo. Por fim, a terceira e ultima etapa que é responsável pela simulação matemática do fenômeno e sua possível otimização. Essa etapa é importante para que se observe se há uma convergência dos resultados ótimos obtidos pelos otimizadores para validar a solução de otimização.

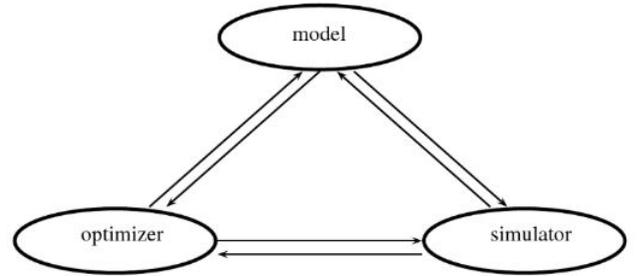


Figura 3. Etapas de Otimização
Koziel and Yang (2011)

Em modelos Surrogate uma das propostas de aplicação de otimização é a utilização de modelos RBF como proposto por Gutmann (2001) de maneira a encontrar soluções ótimas para o problema.

3. DESENVOLVIMENTO

3.1 Considerações Iniciais

O presente trabalho tem como objetivo aplicar e analisar o uso de modelos Surrogate baseados em RBF para posteriormente realizar uma otimização baseada em resposta de superfície com a finalidade de otimizar um dos problemas propostos por Handing Wang (2020). Na Figura 4 ilustra de uma forma generalizada as etapas do processo que será empregada.

O Problema escolhido dentre os propostos por Handing Wang (2020) foi uma minimização de arrasto de um aerofólio transônico RAE 2822 que possui dezoito variáveis de decisão. Em Figura 5 ilustra o aerofólio RAE 2822.

Para realizar a otimização offline baseada em modelos Surrogate, foi utilizada uma toolbox, Muller (2012), para esse tipo de trabalho que contém diversas ferramentas incluindo a criação de modelos RBF e a otimização por resposta de superfície.

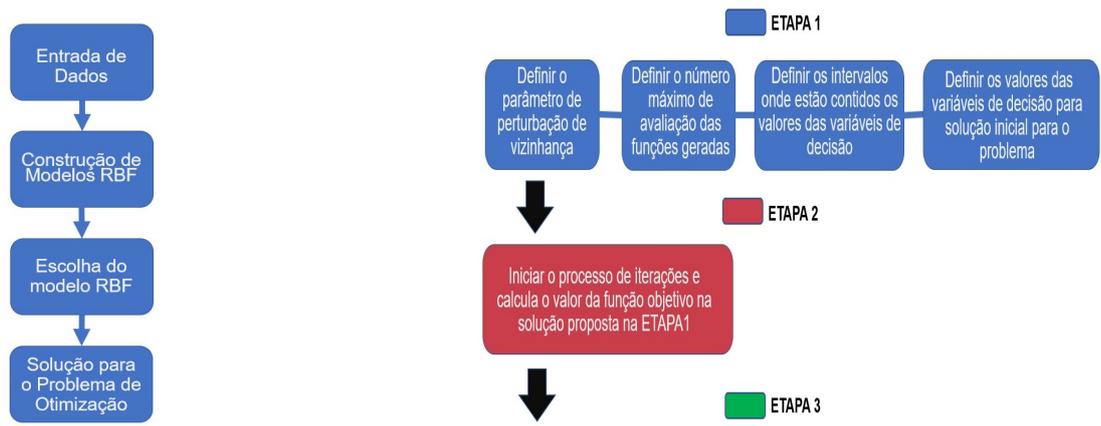


Figura 4. Generalização das Etapas Implementadas

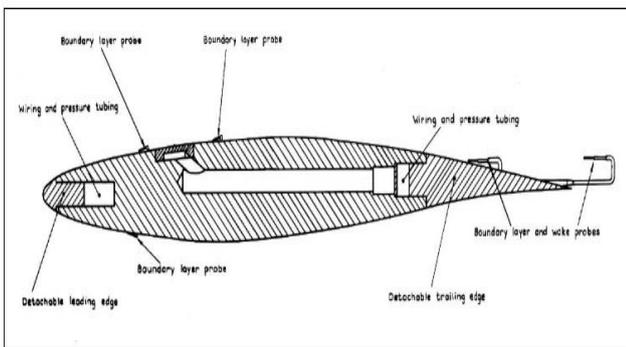


Figura 5. Aerofólio transônico RAE 2822
Cook et al. (1979)

O processo de escolha do modelo é baseado no algoritmo Dynamically Dimensioned Search (DDS) utilizado por Tolson and Shoemaker (2007). Na Figura 6 ilustra uma simplificação das etapas do algoritmo DDS que é utilizado para a escolha do modelo e o valor da solução ótima encontrada.

3.2 Desenvolvimento do experimento

O experimento foi realizado teve como objetivo avaliar os modelos selecionados pelo algoritmo implementado na toolbox assim como comparar os valores ótimos obtidos em cada solução. Para avaliar os modelos foram realizadas cem repetições do algoritmo para quantidades diferentes de número máximo de avaliações das soluções obtidas. Isso tem como finalidade observar o comportamento dos modelos Surrogate que foram gerados e também o comportamento das soluções ótimas obtidas.

Para analisar os modelos Surrogate obtidos, inicialmente foi realizada uma normalização dos dados do modelo e dos dados de amostra. Foram utilizados como indicadores os valores $RMSE$ e R^2 para observar o erro entre os modelos gerados e o quão ajustados estão estes modelos em relação aos dados de amostra do problema. Esses indicadores foram aplicados para diversas quantidades de número máximo de avaliações das soluções obtidas.

Observando a Figura 7, é possível visualizar a evolução dos valores dos indicadores conforme vai aumentando o

Figura 6. Simplificação das etapas do algoritmo DDS

número máximo de avaliações do algoritmo durante as repetições de execução do programa.

Utilizando como referência os indicadores $RMSE$ e R^2 foram elaborados gráficos comparando os dados de amostra com os modelos Surrogate gerados com os piores e melhores valores respectivamente desses indicadores. Esses gráficos podem ser visualizados na Figura 8.

Após realizar a observação dos indicadores de erro e de ajuste de curva, também se mostrou interessante observar o tempo que o algoritmo precisou para encontrar as soluções ótimas para problema proposto. A Figura 9 ilustra a evolução do tempo despendido pelo algoritmo para en-

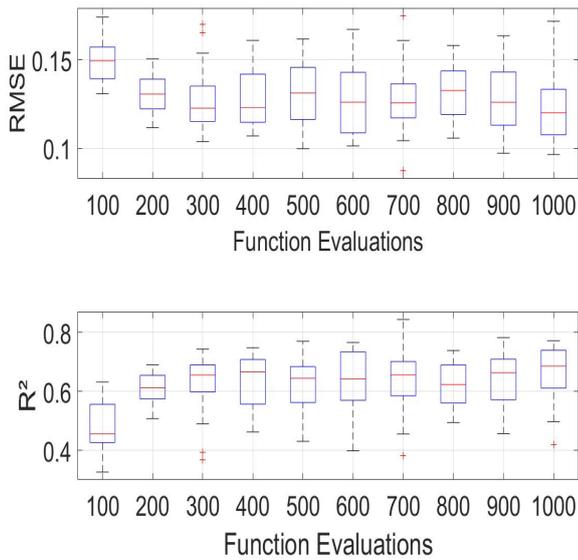


Figura 7. Box-Plots: $RMSE$ e R^2

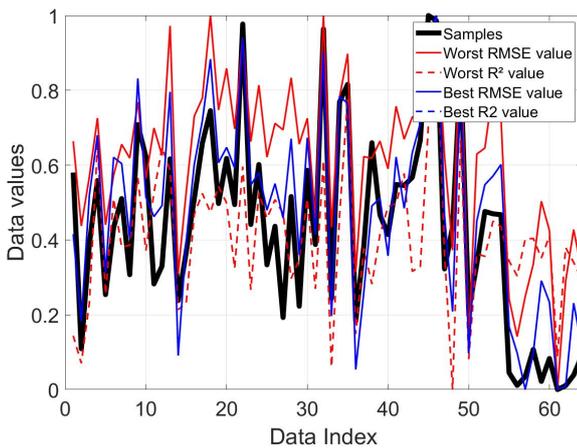


Figura 8. Modelos Surrogate

contrar a solução em função do crescimento do número de avaliações de função do algoritmo nas diversas repetições.

Para observar as soluções ótimas obtidas pelo algoritmo de otimização baseado em modelos Surrogate a Figura 10 ilustra os valores das variáveis de decisão que possuíram o pior e melhor resultado respectivamente segundo o critério de minimização da função objetivo.

Além da visualização dos valores das variáveis de decisão, a Figura 11 ilustra características do comportamento dos melhores valores de minimização da função objetivo do problema proposto

4. APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS

Para analisar os valores de $RMSE$ e R^2 foram aplicados os testes de Wilcoxon e Friedman respectivamente para verificar se houve uma variação significativa dos modelos gerados conforme fosse aumentando o número de avaliações de resultados do algoritmo. A Tabela 1 ilustra os

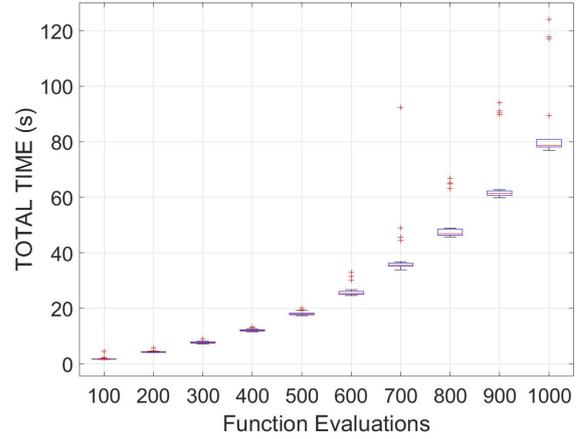


Figura 9. Box-Plots: Tempo de Execução (s)

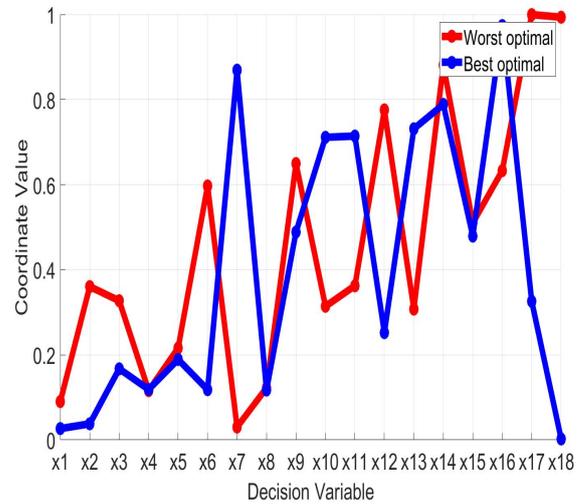


Figura 10. Valores ótimos para as variáveis de decisão

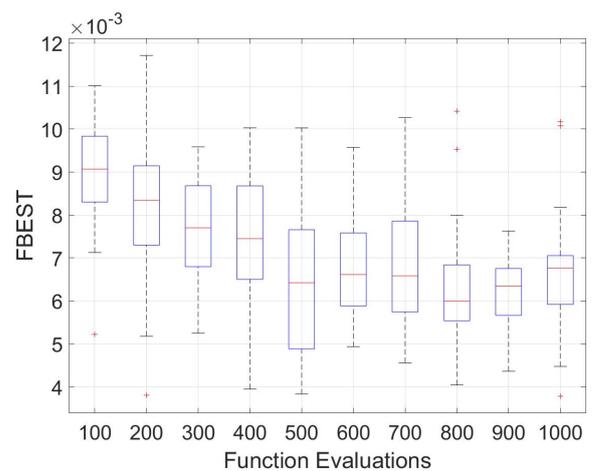


Figura 11. Box-Plots: Optimal values

resultados obtidos. Conforme visualizado na Tabela 1 os testes Wilcoxon e Friedman apontaram que houve uma mudança significativa conforme o aumento do número de avaliações realizadas pelo algoritmo, isso pode ser observado comparando o p -value dos resultados.

Tabela 1. Testes estatísticos para $RMSE$ e R^2

Testes	Wilcoxon	Friedman
Rejeição de H_0	$p - value < 0.05$	$p < Chi - Sq$
$RMSE$	2.7451e-04	0.0006<11.76
R^2	1.5997e-05	3.12538e-05<17.34

Da mesma forma que os testes de Wilcoxon e Friedman foram aplicados para os indicadores dos modelos Surrogate gerados pelo algoritmo, os mesmos testes também foram aplicados para verificar se houve uma variação significativa para os valores ótimos da função objetivo. A Tabela 2 ilustra os resultados obtidos pelos testes que apontaram houve uma mudança significativa nos valores ótimos obtidos em relação ao aumento do número de avaliações realizadas pelo algoritmo.

Tabela 2. Testes estatísticos para os valores otimizados obtidos

Testes	Wilcoxon	Friedman
Rejeição de H_0	$p - value < 0.05$	$p < Chi - Sq$
$F_{optimal}$	1.5997e-05	0.0002<13.5

5. CONCLUSÃO

Analisando as Figura 7, notou-se que os indicadores de curva apresentaram bons valores para o indicador $RMSE$. Já para o indicador R^2 houve alguns valores que chegaram a atingir bons resultados mas não foram a maior parte dos casos. Contudo, para gerar esses resultados foi necessário realizar uma normalização dos dados. Observando a Tabela 1 foi possível verificar houve uma mudança significativa com os valores de $RMSE$ e R^2 conforme o aumento do número de avaliações que o algoritmo realizava na procura por soluções ótimas.

Observando os valores dos testes estatísticos ilustrados na Tabela 2 foi possível verificar que houve mudança significativa quanto ao comportamento das soluções ótimas encontradas para a função objetivo em função do número de vezes em que o algoritmo realizava varreduras. Além desses resultados, foi observado na Figura 9 um aumento expressivo em relação ao tempo despendido pelo algoritmo conforme o aumento do número de avaliação de funções.

Conclui-se que para o problema proposto, os modelos apresentaram resultados promissores em relação ao erro $RMSE$, porém deixaram um pouco a desejar em relação ao indicador R^2 . Verificou-se que com o aumento do número de avaliações realizadas pelo algoritmo os resultados de modelagem e otimização de funções tendem a melhorar conforme o esperado. Também pode-se notar que com o aumento do número de varreduras realizadas pelo algoritmo o tempo despendido no processo cresce consideravelmente.

Como proposta de estudos futuros sugere-se a aplicação de outros tipos de modelos Surrogate, como por exemplo os polinomiais. Além da utilização de outros tipos de modelos Surrogate, também sugere-se o estudo de outros algoritmos de minimização, assim como o uso de abordagens multi-objetivo para auxiliar a tomada de decisão comparando os resultados gerados pelos algoritmos em relação a outros critérios que sejam relevantes para uma melhor performance seguida de melhores resultados.

AGRADECIMENTOS

Os agradecimentos a Deus, as famílias dos autores e a PUCPR pelo incentivo e apoio financeiro.

REFERÊNCIAS

- Beglerovic, H., Stolz, M., and Horn, M. (2017). Testing of autonomous vehicles using surrogate models and stochastic optimization. 1–6.
- Cook, P., McDonald, M., and Firmin, M. (1979). Aerofoil rae 2822: Pressure distribution and boundary layer and wake measurements. *agard ar 138. Research and Technology Organization, Neuilly-sur-Seine.*
- Du, K.L. and Swamy, M. (2014). *Radial Basis Function Networks.* doi:10.1007/978-1-4471-5571-3_10.
- Grimstad, B., Foss, B., Hedde, R., and Woodman, M. (2016). Global optimization of multiphase flow networks using spline surrogate models. *Computers & Chemical Engineering*, 84, 237–254.
- Gutmann, H.M. (2001). A radial basis function method for global optimization. *Journal of global optimization*, 19(3), 201–227.
- Handing Wang, Liang Bao, F.L.Z.H.Y.J. (2020). Competition on offline data-driven evolutionary optimization. In *2020 IEEE World Congress on Computational Intelligence.* <https://handingwang.github.io/DDEO-WCCI2020/>.
- Koziel, S. and Yang, X.S. (2011). *Computational optimization, methods and algorithms*, volume 356. Springer.
- Montgomery, D.C. and Runger, G.C. (2013). *Applied statistics and probability for engineers.* John Wiley & Sons, 6th edition.
- Muller, J. (2012). *User guide for Modularized Surrogate Model Toolbox.* Tampere University of Technology, Department of Mathematics.
- Stock, T. and Seliger, G. (2016). Opportunities of sustainable manufacturing in industry 4.0. *Procedia Cirp*, 40, 536–541.
- Stork, J., Zaefferer, M., Fischbach, A., Rehbach, F., and Bartz-Beielstein, T. (2017). Surrogate-assisted learning of neural networks.
- Tolson, B.A. and Shoemaker, C.A. (2007). Dynamically dimensioned search algorithm for computationally efficient watershed model calibration. *Water Resources Research*, 43(1).
- Wang, H., Jin, Y., Sun, C., and Doherty, J. (2018). Offline data-driven evolutionary optimization using selective surrogate ensembles. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 23(2), 203–216.
- Wang, S.C. (2003). Artificial neural network. 81–100.