

4

Otimização de parâmetros dos arranjos gerados

Nem sempre o algoritmo escolhido para a realização de uma etapa do projeto retorna aquilo que exatamente seria necessário para a etapa seguinte. Em tais situações uma otimização é vantajosa, visando um melhor ajuste ao subsequente desenrolar do trabalho. Deve-se levar em consideração ao otimizar um conjunto de parâmetros que, indubitavelmente, haverá algumas restrições que não poderão ser violadas. Neste projeto a otimização foi realizada utilizando-se algoritmos genéticos (AG).

4.1

Algoritmo genético

Chamamos algoritmos evolucionários (AE) um ramo na área da inteligência artificial (IA) que utiliza alguns mecanismos inspirados na teoria da evolução das espécies de Charles Darwin [13]. Na evolução segundo Darwin, características individuais são passadas de pais para filhos. Se um indivíduo é mais adaptado ao ambiente, é mais provável que sobreviva e que produza mais descendentes, passando suas características para a próxima geração. Tal fenômeno é chamado seleção natural.

Existem vários tipos de AE, todos compartilhando os mesmos fundamentos básicos, diferindo somente em alguns detalhes de implementação e natureza do problema. Dentre os AE, destacam-se os algoritmos genéticos (AG), como o proposto por Holland [20], que é aplicado neste projeto. De maneira geral, o AG pode ser definido como uma ferramenta computacional, pertencente ao grupo dos AE, que visa encontrar soluções aproximadas ou exatas a problemas de busca e otimização. O algoritmo é ilustrado na figura 4.1, que é melhor explicado nas seções seguintes.

4.1.1

Representação

O primeiro passo de um AG é a escolha da representação. Uma boa representação deve buscar expressar objetivamente a solução do problema em questão, além de ser manipulável computacionalmente.

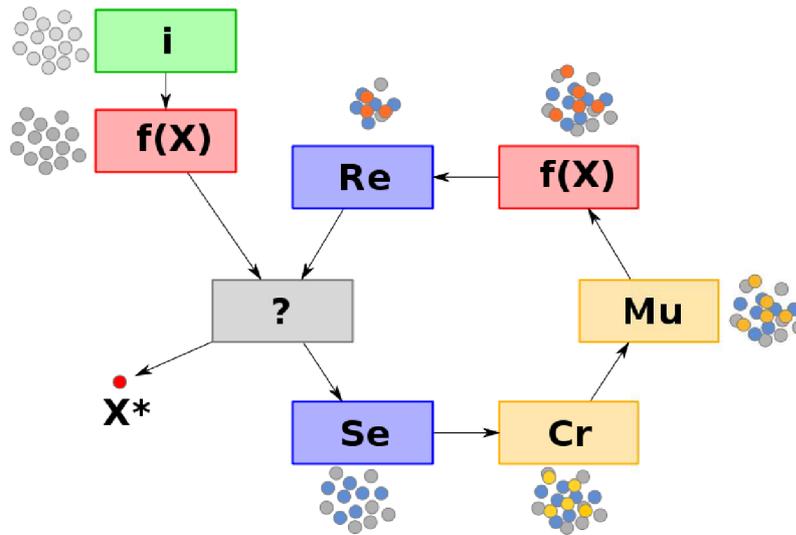


Figura 4.1: (Dreo [16])

Na representação de um indivíduo, cada característica importante do problema é chamada gene e o conjunto dos genes é chamado cromossomo. Cada cromossomo representa uma solução potencial do problema; sendo chamada população, o conjunto de cromossomos em uma determinada geração. A população inicial está sendo representada na figura 4.1 por i .

Na formulação original do AG, essa codificação somente é composta de valores binários, ou seja, cada gene é discretizado em bits dependendo da precisão que se deseja obter. Esses bits são chamados alelos e, naturalmente, não é necessário que cada gene tenha o mesmo número alelos.

Hoje em dia, entretanto, existem formulações que permitem que os genes possam representar diretamente parâmetros através de inteiros ou reais.

4.1.2 Avaliação

O conceito de seleção natural no contexto do AG depende de um critério de identificação dos indivíduos mais aptos em uma dada população. Esse critério, chamado função de avaliação ou função-objetivo, deve ser explicitamente definido e retorna um valor numérico que simboliza o quão perto está a solução representada pelo indivíduo da solução ideal. A função de avaliação é específica para cada problema que se deseja modelar. Está sendo representado na figura 4.1 por $f(X)$.

4.1.3

Operadores genéticos

Os operadores genéticos são responsáveis pela geração de novos indivíduos, sendo assim ferramentas necessárias para o processo de evolução. Os mais empregados serão melhor analisados adiante.

Seleção

Os operadores de seleção são responsáveis por escolher quais indivíduos terão a oportunidade de se reproduzir. Esta seleção deve levar em consideração a função de avaliação, de maneira que os indivíduos mais aptos tenham uma maior probabilidade de reprodução, sem, entretanto, desconsiderar completamente a participação dos indivíduos menos aptos. Os operadores de seleção podem ser identificados na figura 4.1 por *Se*.

Seleção por roleta Um dos operadores de seleção mais utilizados é a seleção por roleta, desenvolvida por De Jong [14]. Neste algoritmo, cada indivíduo na população recebe uma fatia de uma roleta, de tamanho proporcional a sua aptidão, como visto figura 4.2. Um valor é sorteado e o indivíduo correspondente é selecionado.

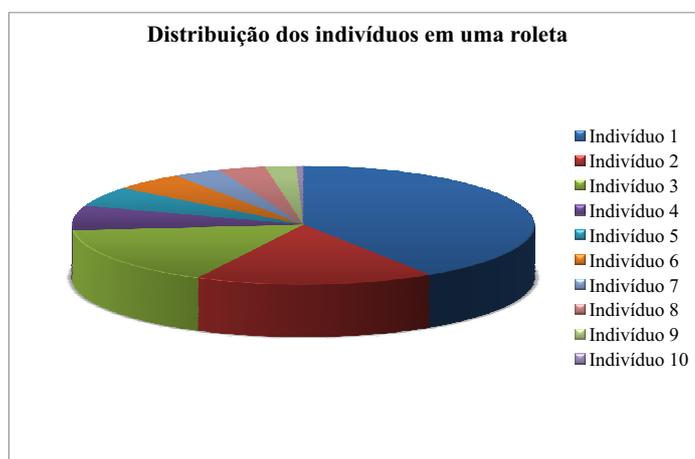


Figura 4.2: Exemplo de distribuição dos indivíduos em uma roleta.

Crossover

O *crossover*, também chamado recombinação ou cruzamento, opera nos indivíduos selecionados para reprodução, dois a dois. É, portanto, uma es-

tratégia de reprodução sexuada. Sua função é misturar o código genético dos indivíduos, na expectativa de gerar uma nova população com indivíduos mais aptos. Está sendo representado na figura 4.1 por *Cr*. Deve-se salientar que nem sempre os indivíduos selecionados sofrem recombinação — existe uma taxa de *crossover* que exprime a probabilidade deste ocorrer. Um cuidado que se deve ter é que ao ocorrer a recombinação, os descendentes não sejam indivíduos inválidos. No caso dos operadores de *crossover* possuírem alguma possibilidade de gerar tais indivíduos, será necessária uma validação, e em caso de invalidez, outros indivíduos deverão ser gerados. Dependendo da maneira que o problema é abordado, essa etapa pode ser muito custosa. Há uma infinidade de algoritmos de *crossover*, específicos para cada representação. Alguns dos mais comuns são descritos a seguir.

- Alguns tipos de *crossover* podem ser empregados independentemente da codificação ser binária ou não:

De um ponto Utiliza um ponto de corte nos cromossomos. Este corte é aleatório e separa os indivíduos em duas partes. Essas partes são então permutadas entre os dois cromossomos, como na figura 4.3.

De dois pontos Análogo ao de um ponto de corte, com a evidente diferença de ter dois pontos de corte como na figura 4.4. Os segmentos centrais são permutados.

- Outros tipos, no entanto, somente podem ser empregados no caso de codificações não-binárias:

Aritmético Este *crossover* gera um descendente que tem seus genes definidos como sendo a média aritmética dos genes de seus genitores.

Mutação

A mutação é uma estratégia de reprodução assexuada que provoca uma alteração aleatória em alguns genes, embora geralmente somente em um deles. Pode ser visto na figura 4.1 representado por *Mu*. Com freqüência, a mutação é aplicada a um ou ambos os descendentes gerados no *crossover*, segundo uma dada probabilidade. Deve-se ter o mesmo cuidado com a mutação que se tem com o *crossover* em relação à validade dos indivíduos. Existem inúmeros operadores de mutação. O mais básico simplesmente modifica aleatoriamente um gene do cromossomo, como na figura 4.5. Outro operador bem simples troca dois alelos de posição.

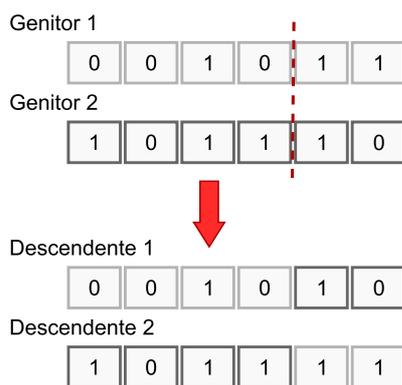


Figura 4.3: Exemplo de crossover de um ponto.

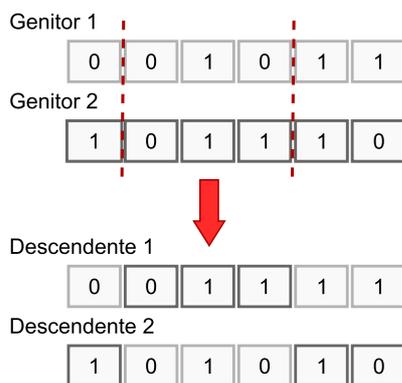


Figura 4.4: Exemplo de crossover de dois pontos.

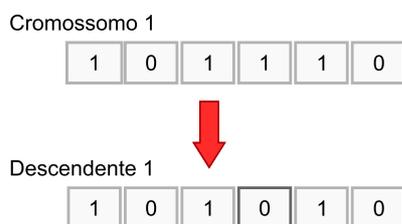


Figura 4.5: Exemplo de mutação.

Reposição

Os algoritmos de reposição, representados na figura 4.1 por *Re*, não existiam na formulação original de Holland [20]. Nessa formulação, os operadores genéticos de *crossover* e mutação atuam em uma população temporária, e os descendentes dessas operações são adicionados à população, que após ser completamente preenchida se torna a população atual. Outras formulações permitem que esses operadores sejam aplicados diretamente à população genética. Nesse caso, de modo a manter o tamanho da população constante, não se pode simplesmente acrescentar-lhe os descendentes — primeiramente deve-se retirar um igual número de indivíduos da população. Podem ser vistos alguns tipos abaixo.

Reposição dos genitores Os genitores dão espaço aos descendentes.

Reposição dos piores indivíduos Aleatoriamente selecionam-se dentre os piores indivíduos os indivíduos a serem eliminados. Geralmente são considerados os últimos 10% [38].

Reposição aleatória São selecionados aleatoriamente os indivíduos que serão excluídos.

4.1.4

Critérios de parada

Idealmente, o AG deveria parar quando alcançasse a solução ótima para o problema estudado (X^* na figura 4.1), no entanto, nem sempre essa solução é conhecida, e portanto, outros critérios de parada devem ser aplicados. Os critérios de parada são representados na figura 4.1 por ? (sinal de interrogação). Alguns dos critérios normalmente usados são:

- alcançar um nível satisfatório de aptidão;
- alcançar um número máximo de gerações;
- a convergência da população. Por exemplo, se 95% da população possui os mesmos genes [38];
- atingir o orçamento atribuído (tempo de computação / dinheiro);
- combinação dos critérios anteriores.

Dependendo do critério de parada, ao final do algoritmo, pode acontecer de não ter sido alcançada uma solução satisfatória.

4.1.5

Implementação do AG no projeto

Para a implementação do AG no projeto, foi utilizada uma biblioteca chamada Java Genetic Algorithms Package (JGAP). Segundo o autor [31], essa biblioteca “provê mecanismos genéticos básicos que podem ser facilmente usados para aplicar princípios evolucionários a soluções de problemas, sendo projetada para ser muito fácil para o uso ‘out of the box’ (imediate), ainda que altamente modular, permitindo que usuários mais ‘aventureiros’ possam facilmente implementar operadores genéticos e outros subcomponentes personalizados”.

A implementação do AG é direta utilizando o JGAP. Além de configurações básicas, é necessário apenas definir a função de avaliação, algo que é inerente a cada problema.

4.2

Otimização do arranjo de partículas

No caso da geração de arranjos para a simulação através do MED, muitas vezes é interessante modelar o mais realisticamente possível um dado problema. Em casos assim, pode ser necessário prescrever um valor de porosidade, por exemplo. No entanto, o algoritmo proposto não permite esta parametrização e por isso, foi utilizado o AG para otimizar a porosidade.

A porosidade é definida pela razão entre volume de vazios e volume total, como mostrado na equação 4-1.

$$\phi = \frac{V_V}{V_T} \quad (4-1)$$

No projeto, por se tratar de uma representação bidimensional, a porosidade foi definida como a razão entre a área total subtraída da área somada de todas as partículas e a área total, como mostrado na equação 4-2.

$$\phi = \frac{A_T - \sum A_p}{A_T} \quad (4-2)$$

4.2.1

Configuração do AG

Para o caso de otimização da porosidade, pode-se ou modificar o tamanho das partículas do arranjo, sem que, no entanto, se desvie da granulometria prescrita, ou reordenar as partículas do arranjo.

A formulação inicialmente imaginada para representar o arranjo foi um cromossomo composto por uma quantidade n_{est} de genes. Cada gene representaria o tamanho de uma partícula; e n_{est} seria um número suficientemente

grande para que qualquer indivíduo fosse capaz de preencher o domínio, conforme a equação 3-1.

Entretanto, com esta representação, seria muito difícil obedecer à granulometria dada, sobrecarregando a etapa de validação dos indivíduos.

Uma maneira possível para contornar este problema é a utilização do método da transformada inversa como visto em Devroye [15]. Este método permite a geração de números aleatórios não-uniformes através da função de distribuição acumulada: dada uma variável contínua uniforme $U \in [0, 1]$ e a função de distribuição acumulada F , pode-se construir uma variável aleatória $X = F^{-1}(U)$ que possui distribuição F .

A curva granulométrica é uma função de distribuição acumulada: no eixo das abcissas são indicados os diâmetros dos grãos e no das ordenadas a porcentagem passante acumulada em cada peneira, embora fosse igualmente possível utilizar a porcentagem retida acumulada. Como a curva adotada é composta por segmentos de retas, a inversão da função de distribuição acumulada em cada trecho é trivial, simplesmente sendo realizada uma regra de três, observando-se que o resultado deve ser tratado devido ao gráfico ser semilogarítmico.

Agora, os genes não mais representam os tamanhos das partículas, e sim, o percentual passante, que é convertido em tamanho durante o processo.

A função de avaliação foi modelada utilizando o algoritmo proposto neste projeto para geração de arranjos. Durante a avaliação da aptidão de cada cromossomo, é gerado um arranjo através do algoritmo proposto, e desse arranjo calcula-se a porosidade. O problema será considerado como de minimização, ou seja, um cromossomo é considerado mais apto quanto menor for o resultado da função de avaliação. Neste problema, o resultado de tal função é o quadrado da diferença entre a porosidade avaliada e a porosidade desejada.

4.3

Otimização de propriedades das partículas

Além da otimização do arranjo de partículas em si, outra sugestão que pode ser feita é a otimização de propriedades das partículas visando gerar, por exemplo, arranjos para a simulação de materiais compósitos, como concreto (figura 4.6), e de materiais com gradação funcional (MGF).

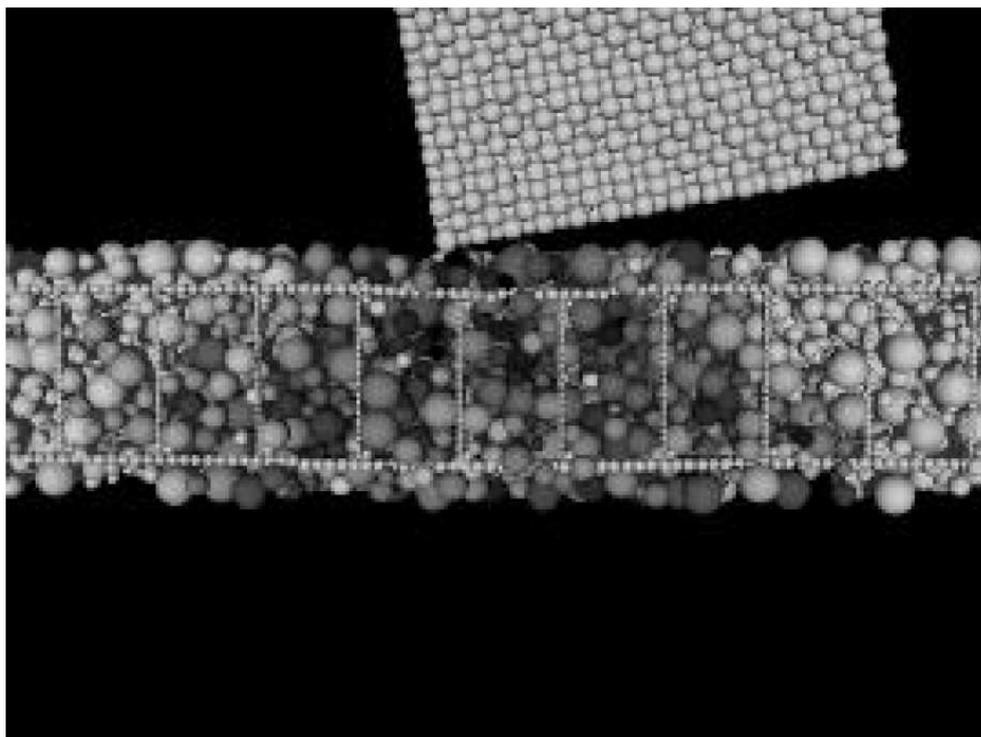


Figura 4.6: Modelagem de concreto armado no MED.

4.3.1

Material com gradação funcional

Freqüentemente em projetos de estruturas, aos materiais são atribuídas funções e/ou propriedades uniformizadas. Muitas aplicações, entretanto, estão expostas a condições adversas para as quais tais materiais não são apropriados, o que motiva o desenvolvimento de novos materiais com propriedades otimizadas. Inicialmente, foram desenvolvidos materiais compostos por camadas de diferentes características, todavia, o problema da descontinuidade entre as camadas é um fator limitante na utilização plena dessas características. De forma a suprir tais deficiências, foram desenvolvidas técnicas que visavam gerar materiais que tinham suas características modificadas gradualmente. Segundo Japan Aerospace Exploration Agency (JAXA) [23], define-se materiais com gradação funcional (MGF) como um material cujas composições e/ou funções variam continuamente ou segundo uma função-degrau, desde um lado até o outro.

Os MGF podem ser obtidos através de diferentes tipos de gradação microestrutural, como: a contínua, a discreta e a multi-fásica; conforme mostrado na figura 4.7.

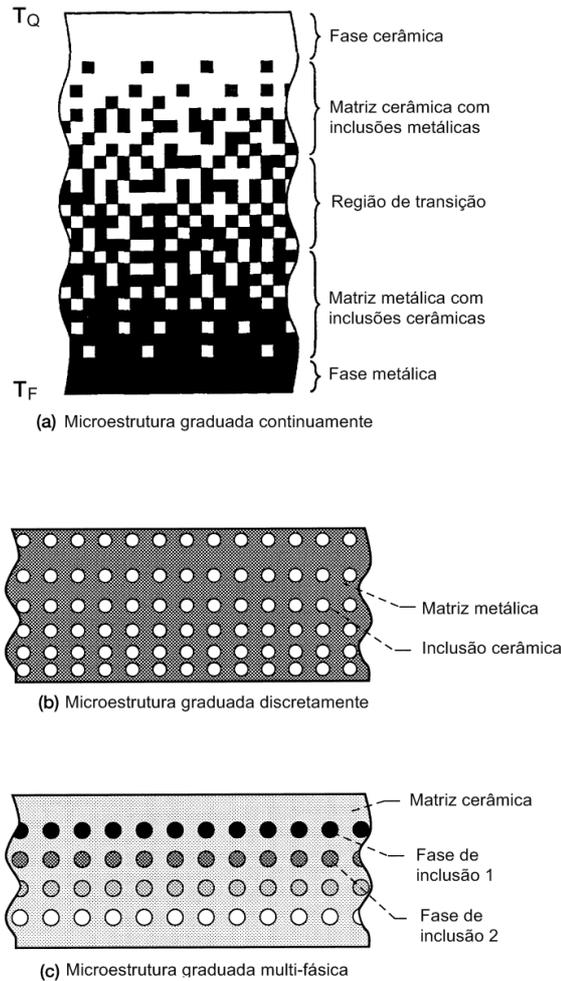


Figura 4.7: Exemplos de diferentes tipos de microestruturas de gradação funcional (Aboudi et al. [2]).

Há muitos campos de utilização dos MGF. A indústria aeronáutica — o campo de aplicação para o qual o MGF foi originalmente proposto — utiliza barreiras de tratamento térmico (figura 4.8). Esse MGF tem por finalidade proteger os componentes metálicos das altas temperaturas nas turbinas. No ramo dos materiais industriais buscam-se materiais que tenham tanto resistência ao desgaste quanto tenacidade. A optoeletrônica busca alcançar altas velocidades de transmissão através de MGF que possuam índice de refração variável. Em relação a biomateriais, uma área de estudo é a substituição de ossos e juntas. Nesse caso, os MGF necessitam de dureza e resistência à corrosão, além de compatibilidade biológica e inocuidade. Um exemplo é visto na figura 4.9.

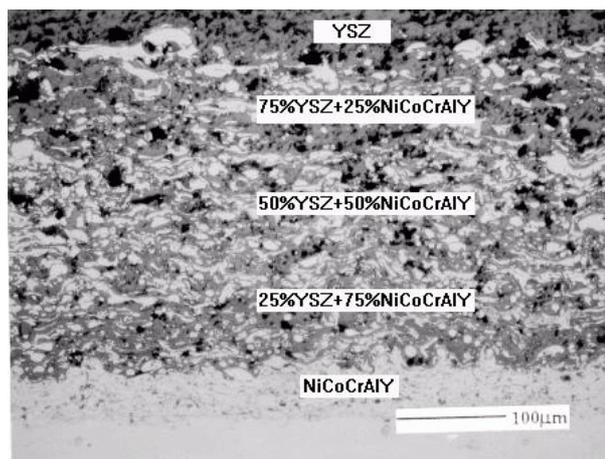


Figura 4.8: Barreira de tratamento térmico (AMPRSP [4]).

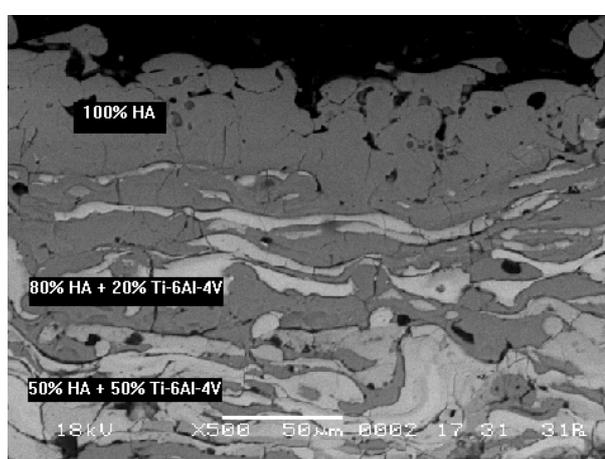


Figura 4.9: MGF para utilização em implantes (AMPRSP [5]).

4.3.2 Configuração do AG

Durante a otimização das propriedades das partículas, a configuração física do arranjo não é alterada, sendo o arranjo inicialmente gerado com a utilização do algoritmo proposto.

O cromossomo é composto de genes que representam as propriedades a serem otimizadas.

A função de avaliação foi modelada utilizando o algoritmo proposto neste projeto para geração de arranjos. Durante a avaliação da aptidão de cada cromossomo, é gerado um arranjo através do algoritmo proposto, e desse arranjo calcula-se a porosidade. O problema será considerado como de minimização, ou seja, um cromossomo é considerado mais apto quanto menor for o resultado da função de avaliação. Neste problema, o resultado de tal função é o quadrado da diferença entre a porosidade avaliada e a porosidade desejada.

4.4

Avaliação da otimização

De modo a avaliar a otimização através do AG, foram realizados alguns testes. Para efeito de simplificação, foi definido um domínio quadrado de 20mm de lado.

4.4.1

Avaliação da otimização para aumento da porosidade

A fim de simular uma porosidade alta, utilizou-se um valor médio obtido pelo programa PFC2D para o método de tentativas. Essa porosidade foi estipulada como 0,5. Os outros parâmetros foram modificados e combinados de forma a conceber os seguintes testes.

O teste AP-1 (figura 4.10) tem granulometria constante igual a 1,2mm e portanto, não possui variação na configuração do arranjo em relação ao algoritmo rodado isoladamente. Este teste foi concebido principalmente para comparação dos tempos.

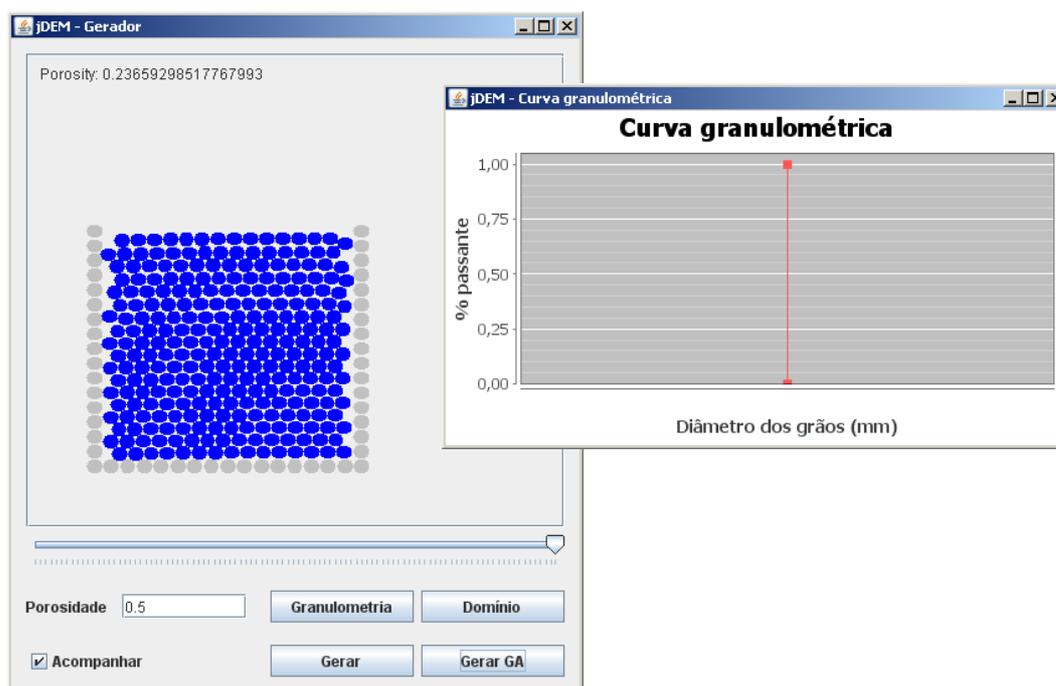


Figura 4.10: Teste AP-1 — granulometria constante igual a 1,2mm.

O teste AP-2 (figura 4.11) tem granulometria uniformemente distribuída entre 1,2mm e 1,3mm. Como quase não há variação na granulometria, obtém-se somente um leve aumento da porosidade.

O teste AP-3 (figura 4.12) tem granulometria uniformemente distribuída entre 1,2mm e 2,4mm. A porosidade já apresenta um aumento mais significativo nesse teste.

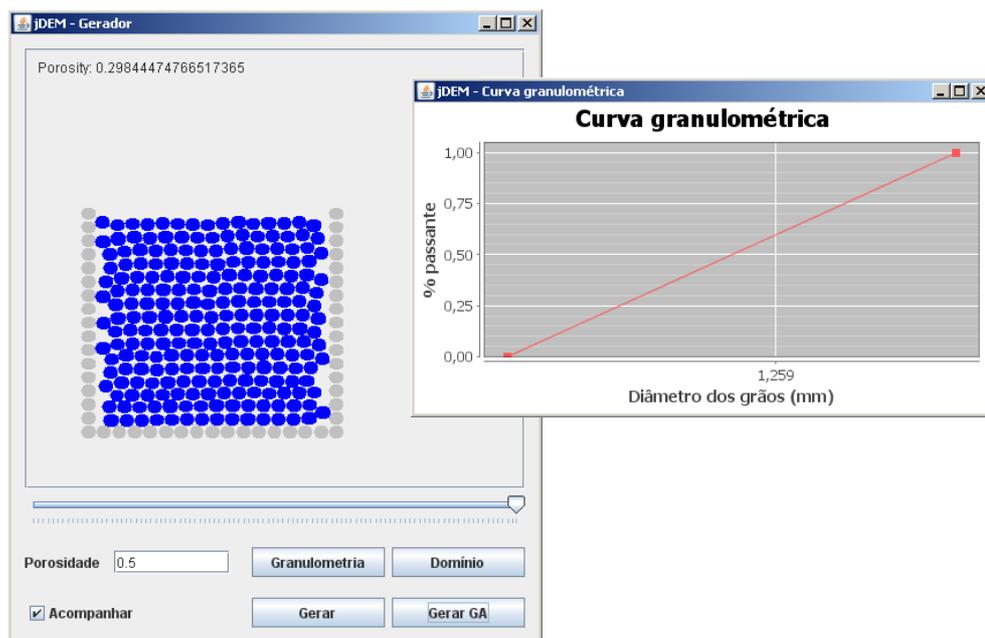


Figura 4.11: Teste AP-2 — granulometria uniformemente distribuída entre 1,2mm e 1,3mm.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0721419/CA

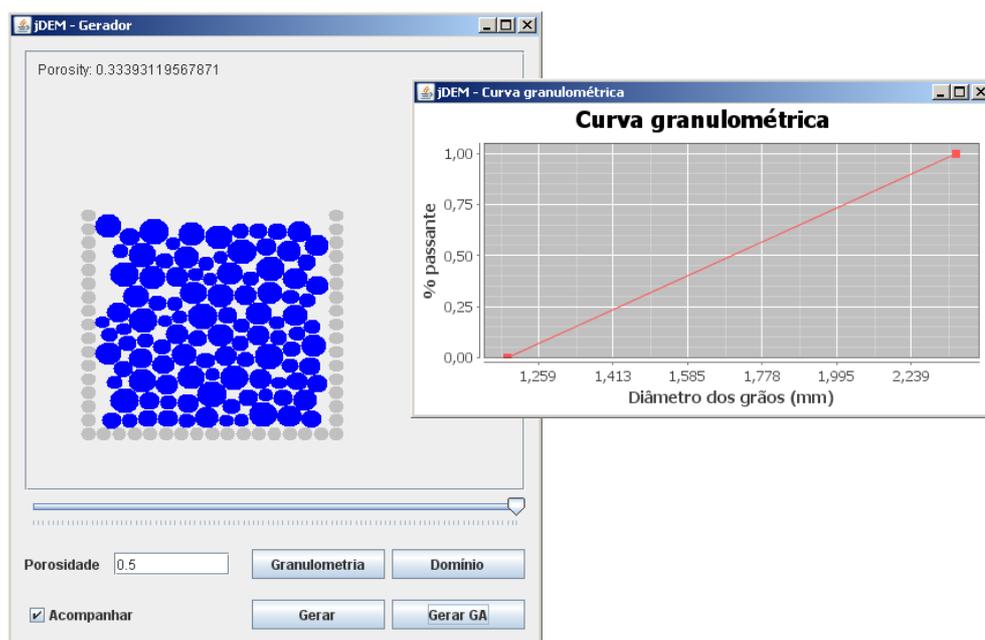


Figura 4.12: Teste AP-3 — granulometria uniformemente distribuída entre 1,2mm e 2,4mm.

O teste AP-4 (figura 4.13) tem granulometria uniformemente distribuída entre 1,2mm e 4,8mm. Embora exista uma maior variação da granulometria, ainda não foi possível alcançar uma porosidade alta como a desejada.

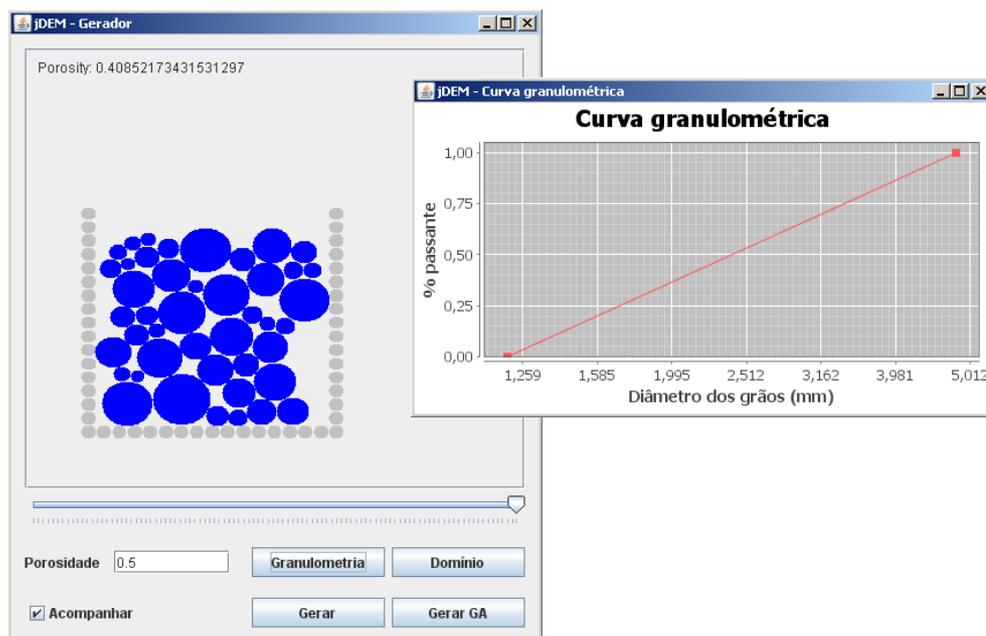


Figura 4.13: Teste AP-4 — granulometria uniformemente distribuída entre 1,2mm e 4,8mm.

O teste AP-5 (figura 4.14) tem granulometria estabelecida segundo a tabela 4.1. É preciso ser ressaltado que o conceito de porosidade já não é mais tão correto, dado que o pacote granular não ocupa completamente o domínio. Para que esta denominação continue a ser válida, deveriam ser desconsiderados os vazios que estão ao redor do pacote. Esse problema é minimizado conforme há um aumento das dimensões do domínio.

Tabela 4.1: Granulometria utilizada no teste AP-5.

% passante acumulada	Granulometria
0-10	uniformemente distribuída entre 1,2 e 2,4
10-90	constante igual a 2,4
90-100	uniformemente distribuída entre 2,4 e 6,0

A tabela 4.2 resume os resultados dos testes AP-1 a AP-5.

Tabela 4.2: Resultados da otimização em um domínio de dimensões 20mm × 20mm para os testes AP-1 a AP-5.

Teste	Porosidade alcançada	Tempo (s)
AP-1	0.237	609
AP-2	0.298	507
AP-3	0.334	352
AP-4	0.409	312
AP-5	0.467	240

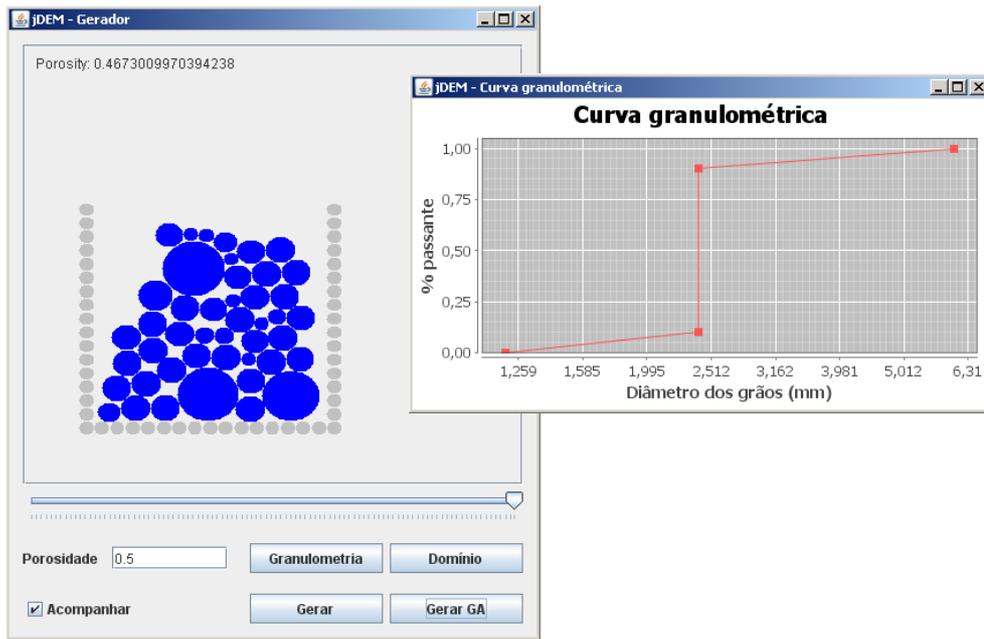


Figura 4.14: Teste AP-5 — granulometria estabelecida segundo a tabela 4.1.

4.4.2 Avaliação da otimização de propriedades das partículas

Para testar a otimização de propriedades das partículas foram feitos os seguintes testes variando a cor das partículas. Nota-se que poderia ser mudada esta propriedade por uma outra qualquer, somente sendo escolhida a propriedade cor para uma fácil identificação visual do resultado.

No teste MGF-1 (figura 4.15), o arranjo é constituído somente por partículas com uma mesma propriedade.

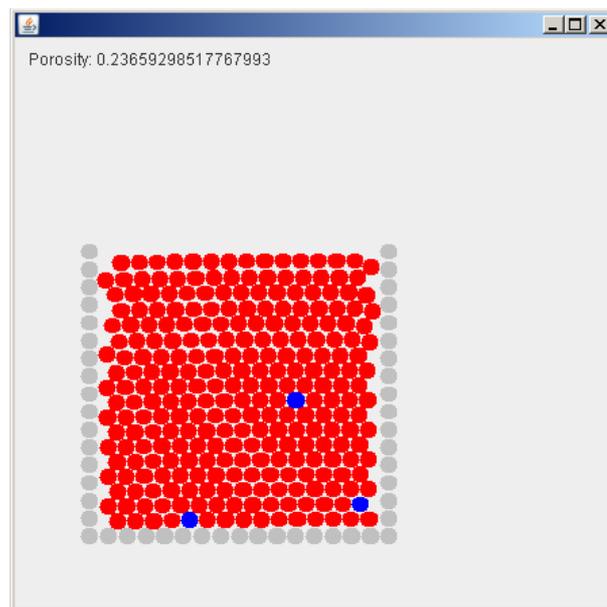


Figura 4.15: Teste MGF-1 — arranjo com uma propriedade.

No teste MGF-2 (figura 4.16), o arranjo é constituído por partículas com duas propriedades distribuídas em camadas sobrepostas.

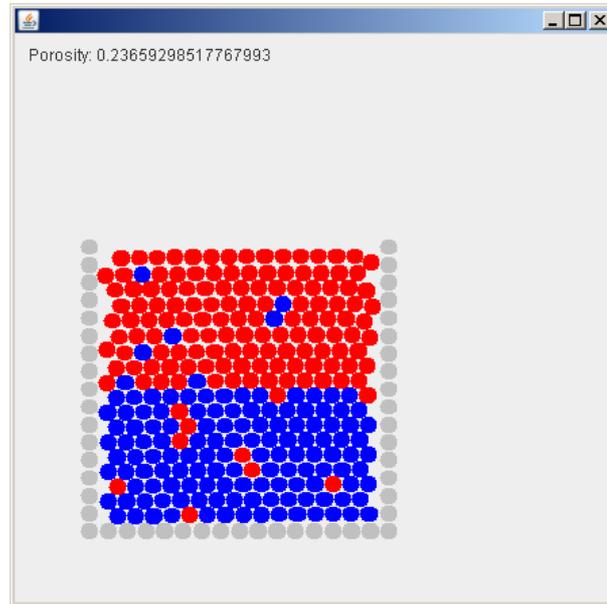


Figura 4.16: Teste MGF-2 — arranjo com duas propriedades distribuídas em camadas sobrepostas.

No teste MGF-3 (figura 4.17), o arranjo é constituído por partículas com três propriedades distribuídas em camadas sobrepostas.

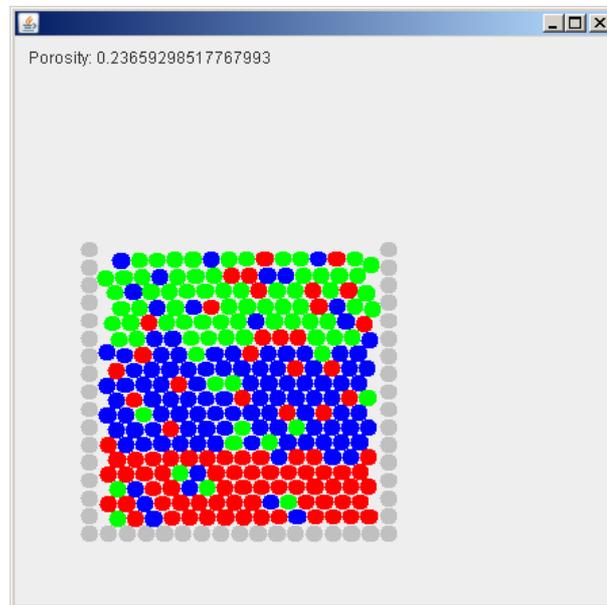


Figura 4.17: Teste MGF-3 — arranjo com três propriedades distribuídas em camadas sobrepostas.

A tabela 4.3 resume os resultados dos testes MGF-1 a MGF-3.

Tabela 4.3: Resultados da otimização em um domínio de dimensões 20mm × 20mm para os testes MGF-1 a MGF-3.

Teste	Tempo (s)
MGF-1	257
MGF-2	260
MGF-3	257