



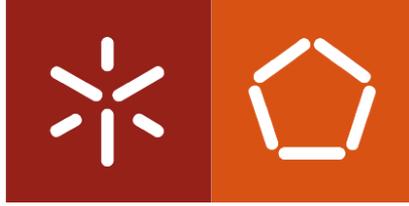
Universidade do Minho

Escola de Engenharia

António Lúcio Martins Gomes

**Determinação de Espectros de Relaxação
de Líquidos Viscoelásticos através de
Algoritmos Genéticos**

Novembro de 2007



Universidade do Minho

Escola de Engenharia

António Lúcio Martins Gomes

**Determinação de Espectros de Relaxação
de Líquidos Viscoelásticos através de
Algoritmos Genéticos**

Dissertação de Mestrado em Matemática e Aplicações à
Mecânica

Trabalho efectuado sob a orientação do

Professor Doutor João Manuel Luís Lopes Maia

Professor Doutor Jorge Manuel da Silva Figueiredo

Novembro de 2007

Agradecimentos

Como este trabalho assenta num campo por mim anteriormente desconhecido e como profissionalmente não me encontro a exercer neste ramo, devo desde já agradecer ao professor Gaspar Cunha do Departamento de Polímeros da Universidade do Minho, pelos conhecimentos que me transmitiu assim como os documentos científicos que me facultou.

No desenvolvimento deste trabalho muitos foram os contratemplos que me fizeram questionar sobre a conclusão do estudo, no entanto, o apoio de todos os que me rodeiam contribuiu para que não desistisse. Entre eles devo destacar a magnífica Margarida que, à sua maneira, foi a que mais acreditou em mim; Os meus pais e irmãos por toda a educação que me deram e pela formação que me permitiram obter e todas as outras pessoas que frequentemente se preocupam comigo. A todos eles os meus sinceros agradecimentos.

Não posso deixar também de mencionar todos os outros familiares e amigos que muitos ensinamentos me transmitiram, mas que tão cedo partiram, especialmente os meus avós.

A todos, muito obrigado.

Sumário

Na modelação e simulação de sistemas físicos a relação *causa – efeito* assume grande protagonismo. Assim como é importante quantificar os *efeitos* provocados por determinadas *causas*, pequenas causas podem implicar grandes efeitos, também é enriquecedor determinar as causas para obter efeitos desejados. Os problemas inversos são reconhecidos pela intenção de alcançar as causas que proporcionem um determinado efeito conhecido ou desejado.

Nos problemas inversos não é possível garantir a *existência*, *unicidade* e *estabilidade* da solução levando a que maior parte destes problemas sejam considerados como *mal formulados*. Matematicamente, muitos dos problemas inversos são descritos por uma equação integral de Fredholm de 1ª espécie, a qual sustenta a sua resolução em diversas noções de Análise Funcional.

O estudo para a determinação do espectro de relaxação de materiais viscoelásticos poder-se-á suportar por vários modelos já anteriormente desenvolvidos, entre eles o modelo de Maxwell, relacionado com a combinação em série de dois mecanismos, uma mola elástica e um amortecedor.

Encontradas as funções que possibilitam o cálculo do módulo elástico e do módulo de dissipação, torna-se necessário elaborar uma busca de soluções óptimas para o módulo elástico e tempo de relaxação.

Com base numa optimização suportada pelas teorias de John Holland, Algoritmos Genéticos, executou-se uma busca de indivíduos de vários tamanhos estruturados por pares de resultados que se pretendiam otimizar. Os dados recolhidos na fase final do trabalho foram comparados e confrontados entre si de modo a que se vislumbrasse o vector com melhor desempenho segundo as variáveis erro e diferença.

Summary

In modeling and simulation of physical systems the relation *cause-effect* assumes a great importance. So, it is very important to quantify the effects caused by certain causes can lead to great effects; it is also very enriching to determine the causes needed to reach the wanted goals. Inverse problems are recognized by the intension of achieving the causes that can lead to a determined kwon and the wanted effect.

In the inverse problems it is not possible to guarantee the *existence*, the *singleness* and *stability* of the solution, in consequence of this major part of these problems are described by an integral equaton of Fredholm of 1st specie which sustains its resolution in various notions of funcional analysis.

The study to determine the spectrum of relaxation of viscoelastic materials can be supported by several models previously developed, among them the Maxwell model, related with the combination in series of two mechanisms, one elastic spring and one choker absorder.

Once founded the functins that make possible the calculation of the elastic module and of the dissipation module, it becomes necessary to elaborate a research of the best solutions for the elastic module and the relaxation time.

Based on the an optimization supported by the theories of John Holand, Genetic Algorithms, it has been performed a research of individuals of several sizes structured by pairs of results which could be optimized. The results obtained in the final step of this task, were compared and confronted between themselves in away that it was possible to see clearly the best vector with the best performance according to the variables of error and diference.

Índice

Agradecimentos	iii
Sumário	iv
Summary	v
Índice	vi
1 – Introdução	1
2 – Espectros de relaxação	3
2.1 – Problema inverso	3
2.2 – Definição do problema	5
2.3 – Métodos numéricos	14
3 – Resolução do problema	17
3.1 – Optimização	17
3.2 – Algoritmos Genéticos	17
3.2.1. Comprimento variável dos cromossomas	21
3.2.2. Representação e codificação	21
3.2.3. Geração da população inicial	23
3.2.4. Avaliação dos indivíduos	24
3.2.5. Selecção	24
3.2.6. Reprodução	29
3.2.7. Mutação	32
3.2.8. Critérios de paragem do algoritmo genético	33
3.3 – Teorema do <i>esquema</i>	34
3.4 – Optimização Multi-objectivo	41
3.5 – Algoritmos Evolutivos Multi-objectivo	44
3.5.1. VEGA	45
3.5.2. MOGA	46
3.5.3. NPGA	47
3.5.4. NSGA	47
3.5.5. SPEA	48
3.5.6. RPSGA	48

4 – Resultados e discussão	52
4.1 – Dados do estudo	52
4.2 – Análise estatística dos resultados	53
4.3 – Espectro de relaxação	58
5 – Conclusões	69
Referências	71

1 – Introdução

Ao interpretar as transformações que os materiais sofrem ao longo do tempo, é necessário quantificar os efeitos e causas dos vários fenómenos físicos, logo, para caracterizar os diversos materiais é necessário identificar o modo como estes fluem, como se deformam ao longo do tempo sob uma dada tensão ou determinar a força necessária para se obterem determinadas deformações. Os líquidos viscosos não apresentam formas geométricas definidas, por outro lado, os materiais com características elásticas apresentam uma forma geométrica que se deforma com a acção de forças externas, assumindo uma outra forma de equilíbrio. Muitos materiais, principalmente os de natureza polimérica, apresentam um comportamento mecânico intermédio entre estes dois extremos, assumindo tanto características viscosas como elásticas, sendo conhecidos como viscoelásticos.

A Reologia é utilizada para descrever as propriedades de uma variedade larga de materiais que não podem ser tratados como sólidos, dentro desta, encontra-se uma área que lida com a viscoelasticidade linear, a qual, estuda um grupo específico de fluxos que respondem com pequenas deformações ao se aplicar pequenas taxas de deformação ou tensões.

Ao manusear os conhecimentos de viscoelasticidade linear é possível conhecer melhor a estrutura molecular dos materiais tal como a distribuição do peso molecular, no entanto, os parâmetros materiais e as funções medidas nas experiências são úteis no processo de modelação e controlo da qualidade dos materiais. Utilizando as equações constitutivas do comportamento viscoelástico linear dos materiais, é possível estruturar um problema inverso que permita a determinação dos espectros de relaxação.

Com este trabalho pretende-se enriquecer as técnicas de busca de soluções de um problema inverso. Após esta introdução, referenciar-se-á um problema inverso relacionado com as equações constitutivas do comportamento viscoelástico linear dos materiais – *a determinação dos espectros de relaxação através de dados obtidos em experiências oscilatórias*. As pesquisas sobre este problema, foram iniciadas por Ferry [16], e posteriormente desenvolvidas por outros investigadores que utilizaram os resultados até então alcançados. Novos métodos foram surgindo, assim como outros foram aperfeiçoados, tendo como objectivo alcançar uma maior e mais rápida convergência de valores. O enriquecimento das linguagens de programação também

possibilitou um aumento de métodos de iteração ou processos de obter resultados que possibilitem um avanço positivo na determinação dos espectros de relaxação.

A definição do problema que se pretende otimizar, será sustentada e descrita por um raciocínio matemático, o qual fornecerá um conjunto de fórmulas e conceitos indispensáveis à execução de um algoritmo. Desta forma são promovidos importantes recursos na construção de um processo iterativo.

Como esta dissertação se encontra aliada à manipulação de um método de busca de soluções que satisfaçam o mais possível as condições iniciais de um problema inverso, será oportuno e enriquecedor transmitir ao leitor alguns conhecimentos sobre otimização. Nesse capítulo, *Resolução do problema*, será apresentado e descrito um esquema sobre o funcionamento de um método iterativo. Posteriormente, será feita uma descrição dos algoritmos genéticos, os quais relacionam a obtenção de variáveis numéricas à sua compatibilidade e aprovação no meio para o qual são pretendidos, baseados na teoria de evolução de Darwin e nas leis genéticas apresentadas por Mendel. No desenvolvimento deste tema, poder-se-á verificar a funcionalidade e a convergência do algoritmo, numa referência ao *teorema do esquema*. Para finalizar a otimização, será conveniente abordar a otimização multi-objectivo, pois prevê-se que seja um grande recurso aquando da apresentação e discussão dos resultados obtidos pelo algoritmo.

Numa fase final do trabalho serão divulgados os parâmetros do algoritmo e os resultados obtidos, seguindo-se um estudo estatístico sobre os mesmos. Tendo como base as exigências do problema, as variáveis a otimizar e os dados experimentais, o trabalho posterior irá possibilitar a identificação e quantificação da importância a atribuir ao *erro* e à *diferença*, devolvidos pelo algoritmo, assim como a ordenação dos cromossomas com melhor desempenho, segundo o seu tamanho. Desta forma, pretende-se verificar a aprovação do algoritmo genético na resolução do problema quando os melhores indivíduos forem testados através da representação gráfica e do cálculo das normas.

Na parte final deste documento, serão registadas algumas considerações finais suportadas por uma reflexão de tudo o que foi abordado, estudado e desenvolvido, não esquecendo os resultados entretanto obtidos.

2 – Espectros de relaxação

A viscosidade é uma das variáveis que caracteriza reologicamente uma substância. Poder-se-á entender por propriedade reológica aquela que especifica a deformação ou a taxa de deformação que uma substância apresenta quando sujeita a uma tensão. O comportamento reológico de um material permite classificá-lo como puramente viscoso ou elástico. A sustentabilidade desta classificação é suportada por modelos lineares que relacionam a deformação à tensão aplicada no material.

Na prática, os problemas inversos assumem um papel importante na modelação e simulação do comportamento de materiais complexos. Estes problemas encontram-se relacionados com o conhecimento da evolução anterior ou dos parâmetros de um sistema físico. Também é possível influenciar um sistema para um estado desejado no futuro, conhecendo para tal a situação presente ou os parâmetros físicos indispensáveis. Nomeadamente, a caracterização de materiais e das suas taxas de deformação.

2.1. – Problema inverso

Num problema é possível observar as causas como explicação dos efeitos, assim como, interpretar um efeito como consequência de uma causa. As diferenças na abordagem a situações problemáticas provocaram a distinção entre problemas directos e inversos.

Do ponto de vista matemático, ambos os problemas, directo e inverso, encontram-se relacionados, pois é possível obter um problema através do outro alterando o papel dos dados e das incógnitas. Desta forma, torna-se arbitrário classificar o problema directo e o inverso, mas dum ponto de vista físico, o problema directo é um problema orientado no sentido *causa – efeito*, isto é, o problema directo consiste em encontrar um único efeito para uma dada causa, usando uma dedução adequada. Assim, a definição do par directo/inverso deve-se basear em leis físicas bem definidas, que especifiquem quais as causas e os efeitos de um dado fenómeno e que forneçam as equações que relacionam os efeitos e as causas.

Num raciocínio matemático, o problema directo consiste em determinar o efeito y de uma causa x , respeitando um processo físico modelado matematicamente por um operador T , bem definido e contínuo.

$$y = T x \tag{2.1}$$

As condições em que se enquadra a aplicação T garantem que para um único efeito y exista uma causa x , assim como pequenas alterações de x provocam pequenas alterações em y .

Enquanto que nos problemas directos, a existência, unicidade e estabilidade da solução são garantidas, nos problemas inversos, não é possível garantir nenhuma das hipóteses, sendo frequentemente definidos como problemas mal formulados.

O conceito de problema bem formulado foi introduzido por Hadamard (¹), em 1902 [22], estabelecendo que um problema matemático é bem formulado se a sua solução for única e existir para dados arbitrários. Posteriormente, em 1923 [23], o mesmo defende ainda, a necessidade da solução depender, de forma contínua, dos dados. Courant e Hilbert (²)[7], formularam pela primeira vez uma definição de problema bem formulado, englobando as três características. Um problema diz-se bem formulado (well-posed) quando: existe solução para o problema (existência); a solução do problema é única (unicidade) e a solução depende dos dados de maneira contínua (estabilidade).

Na interpretação da definição apresentada, verifica-se que a primeira condição impede que a solução contenha propriedades contraditórias, a segunda admite a inexistência de ambiguidade, a não ser que esteja estipulada pela situação física descrita. Por último, a estabilidade, argumenta que um problema matemático não compare a realidade física se pequenas variações nos dados conduzirem a grandes variações na solução, esta exigência de estabilidade não é essencial em problemas de física

¹ *Jacques S. Hadamard* (1865 – 1963) matemático francês. Os seus trabalhos de pesquisa foram dirigidos essencialmente para a teoria dos números, teoria das funções e equações da física e da matemática. A sua obra “*Psychology da invenção no campo magnético*” serviu, também, como base para a análise funcional moderna.

² *David Hilbert* (1862 – 1943) matemático alemão. Os trabalhos por ele desenvolvidos contribuíram para vários ramos da matemática, incluindo a teoria algébrica do número, análise funcional, físicas matemáticas e os cálculos de variações. Ao longo da sua vida, *Hilbert* enumerou 23 problemas matemáticos não solucionados, tendo sido considerado uma figura importante de transição entre os séculos XIX e XX.

matemática, mas sim em métodos de aproximação [7]. Também é necessário conhecer o domínio de influência dos dados ou domínio de dependência da solução, pois nem sempre a solução depende da globalidade dos dados conhecidos.

Os problemas que não são bem formulados segundo a definição de Hadamard, isto é, não satisfazem pelo menos uma das três condições, dizem-se problemas mal formulados (ill-posed). Do ponto de vista matemático, todos os problemas podem ser considerados como sendo bem ou mal formulados.

Os problemas inversos são muitas vezes mal formulados, pois causas distintas podem levar ao mesmo efeito e pequenas alterações num certo efeito provocam grandes mudanças nas causas. Para a modelação destes problemas é frequente recorrer a equações integrais de Fredholm de primeira espécie,

$$y(s) = \int_a^b k(s,t) x(t) dt, \quad (2.2)$$

onde $k(.,.)$ representa um modelo simplificado do processo estabelecido, $x(t)$ é a função que se pretende determinar e $y(s)$ é função dada. Considera-se o intervalo $[a,b]$, que pode ou não ser um intervalo limitado, para o domínio das funções de uma única variável $x(t)$ e $y(s)$, e o conjunto plano $[a,b] \times [a,b]$ para domínio de k . A função k é usualmente identificada como núcleo da equação integral.

As equações constitutivas do comportamento viscoelástico linear dos materiais possibilitam a formulação de um problema inverso que permita a determinação dos espectros de relaxação.

2.2. – Definição do problema

Ao longo dos anos, a viscoelasticidade tem sido motivo de escrita de vários artigos científicos, tentando-se descrever ou justificar o aparecimento de distintas deformações em materiais diversos. A lei de Hooke ⁽³⁾ aplicada aos sólidos, defendia

³ *Robert Hooke* (1635 – 1703) físico inglês. Em 1660 descobriu a lei de Hooke da elasticidade, a qual descreve a variação linear da tensão com a extensão de uma mola elástica. Efectuou observações astronómicas, tentando provar que a terra efectua movimentos elípticos à volta do sol, este estudo

que a extensão do material era directamente proporcional à tensão, por outro lado, a lei de Newton (⁴) para os líquidos, estabelecia que a força exercida era directamente proporcional ao gradiente da velocidade. No entanto, estas leis representam casos extremos, como são os casos dos sólidos Hookeanos e os líquidos Newtonianos.

Os primeiros têm um comportamento elástico pois a deformação verificada é reversível, isto é, volta à forma inicial após ser retirada a tensão exercida. O comportamento elástico linear poder-se-á exemplificar com uma mola como a da *figura 2.1*, com σ a representar a tensão e E a constante de rigidez do material.



Figura 2.1 – Modelo representativo de uma mola linear.

Como se pode ver na *figura 2.2*, a tensão resultante da aplicação de uma força nos extremos da mola é directamente proporcional à sua deformação ϵ . Após a aplicação da força, a deformação é instantânea, não existindo deformação permanente ou irreversível. A energia dispendida na deformação é armazenada e reutilizada na reversibilidade à forma inicial.

estendeu-se à observação do movimento de outros planetas. Entre outras obras, em 1678 publicou “*The Theory of Elasticity*”. Hooke foi uma das figuras chave da revolução científica.

⁴ *Isaac Newton* (1643-1727) matemático e físico inglês. Na fazenda onde morava, realizou experiências que possibilitaram descobertas que mudaram o rumo da ciência. Newton publicou obras que contribuíram significativamente para o avanço da matemática e da física, nomeadamente a “*Philosophiae naturalis principia mathematica*”. Para além de ter sido o primeiro a inventar notações e algoritmos gerais para o cálculo infinitesimal, também fundou a dinâmica e a mecânica celeste.

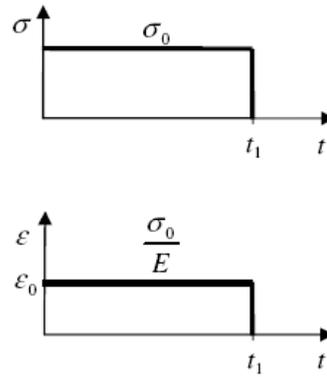


Figura 2.2 - Relação entre a tensão aplicada e a deformação obtida.

Já os líquidos Newtonianos são puramente viscosos, a tensão exercida é proporcional à deformação, no entanto, o comportamento dos materiais depende do tempo e a deformação provocada pela aplicação não é completamente reversível.

Os modelos mecânicos que podem representar a resposta das deformações viscosas são os amortecedores que se diferenciam pela constante de viscosidade, η , que apresentam.

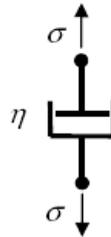


Figura 2.3 – Modelo representativo de um amortecedor.

Na *figura 2.4* pode-se observar que ao longo do tempo a tensão é proporcional à taxa de deformação.

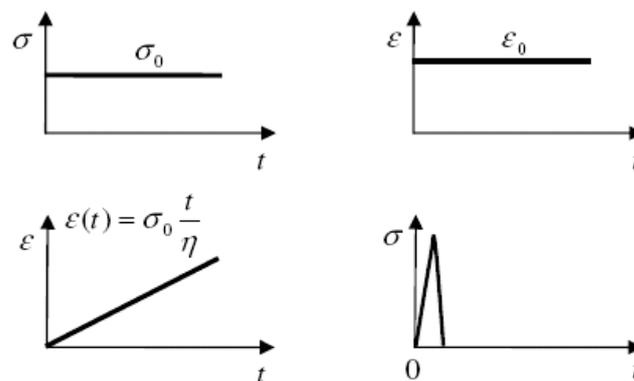


Figura 2.4 – Deformação de um amortecedor linear quando sujeito a uma tensão σ .

Mas, a maioria dos materiais revelam um comportamento que os situa entre estes dois extremos referidos anteriormente, pois apresentam propriedades viscosas e elásticas, os chamados, materiais viscoelásticos.

A teoria da viscoelasticidade explica de que forma é que um determinado material responde em tensão ao longo do tempo, à aplicação de uma determinada deformação ou vice-versa. Esta teoria relaciona-se com o estudo de fluxos que envolvem pequenas tensões e taxas de deformação, sendo utilizadas na sua descrição equações diferenciais lineares da forma

$$\sigma \left(1 + \alpha_1 \frac{\partial}{\partial t} + \alpha_2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \dots + \alpha_n \frac{\partial^n}{\partial t^n} \right) = \varepsilon \left(1 + \beta_1 \frac{\partial}{\partial t} + \beta_2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \dots + \beta_m \frac{\partial^m}{\partial t^m} \right), \quad (2.3)$$

onde ε é a deformação, σ é a tensão e α_i e β_j são constantes, com $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, m$ e $n = m$ ou $n = m = 1$ ⁽⁵⁾.

Estas equações diferenciais encontram-se associadas a deformações provocadas por forças com direcção tangencial à superfície sobre a qual actuam. Mas, as referidas equações podem ser generalizadas, direccionando-as para outros tipos de deformações, para tal, substituiu-se os escalares σ e ε pelos tensores apropriados.

São várias as formas de descrever a viscoelasticidade linear, como são exemplo os modelos de Kelvin⁽⁶⁾ e Maxwell⁽⁷⁾.

⁵ $\sigma = \beta_0 \varepsilon$ caracteriza o comportamento de um sólido Hookeano com β_0 o módulo de rigidez e $\sigma = \beta_1 \dot{\varepsilon}$ representa o fluxo viscoso Newtoniano, β_1 o coeficiente de viscosidade.

⁶ *Kelvin* (1824 – 1907) matemático e físico britânico. As propriedades do calor e as suas consequências foram os principais objectos de estudo. Após algum estudo e baseado noutras teorias, *Kelvin* defendeu que o volume da matéria não se anula a determinadas temperaturas, mas sim a energia cinética das moléculas. Os seus estudos influenciaram a indústria, essencialmente a produção de melhores cabos eléctricos.

⁷ *James Clerk Maxwell* (1831 – 1879) matemático escocês. Desenvolveu os seus trabalhos no campo da electricidade e magnetismo e na teoria cinética dos gases. Em 1867, apresentou a teoria electromagnética da luz, na qual a luz é definida como um fenómeno electromagnético. Na sua obra "*Electricity and magnetism*", de 1873, foram referidas pela primeira vez as quatro equações diferenciais de derivadas parciais, as equações de Maxwell. O desenvolvimento dos seus estudos permitiu mostrar que a viscosidade de um gás é independente da pressão, lei de Maxwell.

O modelo de Kelvin resulta da combinação entre uma mola linear e um amortecedor linear. Esta disposição é feita em paralelo, como ilustra a *figura 2.5*, logo a tensão total resulta da soma da tensão elástica com a tensão viscosa, σ_E e σ_η .

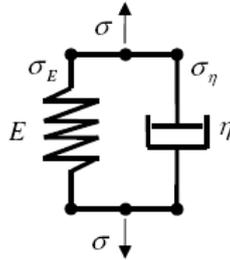


Figura 2.5 – Esquema representativo do modelo de Kelvin.

$$\sigma = \sigma_E + \sigma_\eta. \quad (2.4)$$

Considerando que,

$$\sigma_E = E \varepsilon, \quad (2.5)$$

$$\sigma_\eta = \eta \dot{\varepsilon}, \quad (2.6)$$

e substituindo na equação (2.4) vem,

$$\sigma = E \varepsilon + \eta \dot{\varepsilon}, \quad (2.7)$$

logo,

$$\dot{\varepsilon} + \frac{E}{\eta} \varepsilon = \frac{\sigma}{\eta}. \quad (2.8)$$

Ao estabelecer uma combinação em série com os mesmos mecanismos obtém-se o modelo de Maxwell.

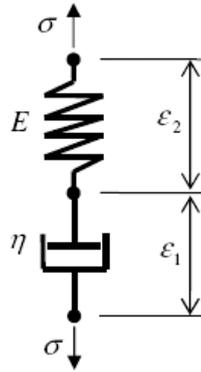


Figura 2.6 – Esquema representativo do modelo de Maxwell.

Como se pode observar no esquema da *figura 2.6* a deformação da série resulta da soma de duas deformações, da mola e do amortecedor.

O modelo que servirá de recurso neste trabalho é o de Maxwell que se representa com a equação (2.3), sendo $n = m = 1$, $\alpha_1 = \tau$, $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = \eta$:

$$\sigma + \tau \dot{\sigma} = \eta \dot{\epsilon}, \quad (2.9)$$

onde τ e η representam respectivamente o tempo de relaxação e a viscosidade do material.

Considerando $\sigma(-\infty) = 0$, então a equação (2.9) também é

$$\sigma(t) = \frac{\eta}{\tau} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{(t-t')}{\tau}\right) \dot{\epsilon}(t') dt', \quad (2.10)$$

onde as variáveis t e t' representam o tempo presente e passado respectivamente. A equação (2.10) pode ser generalizada para um número $n+1$ de elementos de Maxwell discretos e associados a diferentes tempos de relaxação

$$\sigma(t) = \sum_{i=0}^n \frac{\eta_i}{\tau_i} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{(t-t')}{\tau_i}\right) \dot{\epsilon}(t') dt'. \quad (2.11)$$

Ao conjunto finito das constantes η_i e τ_i dá-se o nome de espectro de relaxação discreto de um material.

Pode-se generalizar a equação (2.11) a uma distribuição contínua de tempos de relaxação $H(\tau)$, sendo que $H(\tau) d\tau$ representa a contribuição de todos os elementos de Maxwell associados aos tempos de relaxação entre τ e $\tau + d\tau$ para a viscosidade total, ficando assim,

$$\sigma(t) = \int_0^{+\infty} \frac{H(\tau)}{\tau} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{(t-t')}{\tau}\right) \dot{\epsilon}(t') dt' d\tau. \quad (2.12)$$

Através do módulo de relaxação linear

$$G(s) = \int_0^{+\infty} \frac{H(\tau)}{\tau} \exp\left(-\frac{s}{\tau}\right) d\tau \quad (2.13)$$

é possível escrever a equação (2.12) da seguinte forma:

$$\sigma(t) = \int G(t-t') \dot{\epsilon}(t') dt'. \quad (2.14)$$

Para os n elementos de Maxwell, $G(s)$ definido na equação (2.13) representa-se

$$G(s) = \sum_{i=0}^n \frac{\eta_i}{\tau_i} \exp\left(-\frac{s}{\tau_i}\right) = \sum_{i=0}^n g_i \exp\left(-\frac{s}{\tau_i}\right), \quad (2.15)$$

sendo g_i o módulo elástico, $\eta_i = g_i \tau_i$.

Desta forma, o espectro de relaxação define-se

$$H(\tau) = \sum_{i=0}^n \eta_i \delta(\tau - \tau_i) = \sum_{i=0}^n g_i \tau_i \delta(\tau - \tau_i), \quad (2.16)$$

onde $\delta(\tau - \tau_i)$ representa a *função delta* de Dirac ⁽⁸⁾ centrada em $\tau = \tau_i$.

As experiências dinâmicas servem para estudar o comportamento viscoelástico linear dos materiais. As quais se baseiam na aplicação de deformações, com pequenas amplitudes, ao material. Recorrendo ao modelo de Maxwell, a deformação aplicada ao longo do tempo é descrita da forma

$$\varepsilon(t') = \varepsilon_0 \exp(i\omega t'), \quad (2.17)$$

onde ω é a frequência, $i = \sqrt{-1}$, $\exp(i\theta) = \cos\theta + i\sin\theta$ e ε_0 é a amplitude de deformação suficientemente pequena de modo que ainda caia no campo da viscoelasticidade linear. Assim

$$\dot{\varepsilon}(t') = i\omega \varepsilon_0 \exp(i\omega t') \quad (2.18)$$

ao substituir em (2.12), simplificando de seguida, obtém-se

$$\sigma(t) = i\omega \varepsilon_0 \int_0^{+\infty} \frac{H(\tau)}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \int_{-\infty}^t \exp\left[t'\left(\frac{1}{\tau} + i\omega\right)\right] dt' d\tau. \quad (2.19)$$

Mas,

$$\int_{-\infty}^t \exp\left[t'\left(\frac{1}{\tau} + i\omega\right)\right] dt' = \frac{\tau - i\omega\tau^2}{1 + \omega^2\tau^2} \exp\left[t\left(\frac{1}{\tau} + i\omega\right)\right] \quad (2.20)$$

logo, substituindo em (2.19), tem-se

$$\sigma(t) = \varepsilon_0 i\omega \int_0^{+\infty} \frac{H(\tau)}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \frac{\tau - i\omega\tau^2}{1 + \omega^2\tau^2} \exp\left[t\left(\frac{1}{\tau} + i\omega\right)\right] d\tau \quad (2.21)$$

⁸ Paul Adrien Maurice Dirac (1902 – 1984) físico britânico. Os seus trabalhos direccionados para a mecânica quântica revestem-se de uma importância excepcional, pois, unificaram as teorias da mecânica quântica e da relatividade. Dirac desenvolveu outros trabalhos relacionados com a antimatéria, a função de Dirac, pólos magnéticos, etc. Recebeu o prémio Nobel da Física em 1933.

simplificando, verifica-se

$$\sigma(t) = \varepsilon_0 \exp(i\omega t) \int_0^{+\infty} \frac{H(\tau)}{\tau} \frac{\omega^2 \tau^2 + i\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} d\tau \quad (2.22)$$

para o módulo complexo

$$G^*(\omega) = \int_0^{+\infty} \frac{H(\tau)}{\tau} \frac{\omega^2 \tau^2 + i\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} d\tau \quad (2.23)$$

assim

$$\sigma(t) = G^*(\omega) \varepsilon(t). \quad (2.24)$$

Utilizando a análise complexa, separa-se a parte real da parte imaginária do módulo complexo, $G^* = G' + iG''$, obtém-se

$$G' = \int_0^{+\infty} H(\tau) \frac{\omega^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \frac{d\tau}{\tau}, \quad (2.25)$$

$$G'' = \int_0^{+\infty} H(\tau) \frac{\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \frac{d\tau}{\tau}, \quad (2.26)$$

onde G' e G'' representam respectivamente o módulo elástico e o módulo de dissipação. Estas funções também são por vezes designadas por funções dinâmicas. Os resultados das experiências oscilatórias utilizam normalmente termos destas funções.

No desenvolvimento do raciocínio, ao substituir a equação (2.18) na equação (2.14), tem-se

$$\begin{aligned}\sigma(t) &= iw \varepsilon_0 \exp(iwt) \int_0^{+\infty} G(s) \exp(-iws) ds \\ &= iw \varepsilon(t) \int_0^{+\infty} G(s) \exp(-iws) ds\end{aligned}$$

sendo $t - t' = s$

Logo, segundo (2.24), verifica-se

$$G^*(w) = iw \int_0^{+\infty} G(s) \exp(-iws) ds \quad (2.27)$$

e sabendo que $\exp(i\theta) = \cos \theta + i \operatorname{sen} \theta$, então

$$G'(w) = w \int_0^{+\infty} G(s) \operatorname{sen}(ws) ds, \quad w \geq 0 \quad (2.28)$$

$$G''(w) = w \int_0^{+\infty} G(s) \cos(ws) ds, \quad w \geq 0 \quad (2.29)$$

Finalmente, ao considerar-se, novamente, o modelo dos n elementos de Maxwell e substituindo H pela forma (2.16) nas equações (2.28) e (2.29), é possível obter a representação discreta das funções G' e G''

$$G'(w) = \sum_{i=1}^M g_i \frac{w^2 \tau_i^2}{1 + w^2 \tau_i^2}, \quad (2.30)$$

$$G''(w) = \sum_{i=1}^M g_i \frac{w \tau_i}{1 + w^2 \tau_i^2}. \quad (2.31)$$

Após determinar o espectro de relaxação, é possível calcular dois novos vectores para G' e G'' , manipulando as equações (2.30) e (2.31).

O processo que permite a determinação do espectro encontra-se dependente de algumas exigências e dos resultados obtidos experimentalmente. Pequenas alterações

dos valores experimentais de G' e G'' , podem provocar grandes alterações no cálculo do espectro do tempo de relaxação, logo, a determinação do espectro é influenciada pela qualidade dos valores obtidos experimentalmente.

2.3. – Métodos numéricos

O problema da determinação do espectro de relaxação através dos módulos dinâmicos tem sido objecto de investigação há já algum tempo, mais intensamente nas últimas décadas. Inicialmente, alguns autores, entre eles, Ferry [19], utilizaram métodos de aproximação que envolviam derivadas da função inicial ou uma função com ela relacionada. Com o progresso dos estudos, outros métodos foram surgindo, os quais manipulavam as transformadas de Laplace e de Stieltjes, utilizadas por N. W. Tschoegl [34], assim com técnicas de inversão numéricas ou até mesmo a fusão entre elas proporcionada por J. L. Hopkins [26] e B. Hlavacek. A discussão em torno do cálculo do espectro de relaxação arrastou-se, tendo sido considerado, nos anos sessenta, um problema mal formulado.

Desde então, têm sido manipulados métodos de regularização para esta determinação, tendo-se revelado particularmente útil a regularização de Tikhonov [35]. Honerkamp e Weese [25] são alguns dos autores que utilizaram e desenvolveram métodos baseados na regularização de Tikhonov.

Posteriormente, A. Russell Davies e R. S. Anderssen desenvolveram um método que apresenta vantagens sobre todos os outros apresentados até à altura. Trata-se de um método recente (1997), cuja a vantagem consiste em utilizar uma análise dos aspectos matemáticos do problema em questão, entre eles, a definição do melhor intervalo de frequências a ter em consideração na obtenção dos dados, valores experimentais dos módulos elástico e dissipativo.

A determinação do espectro é, obviamente, influenciada pela qualidade dos dados obtidos experimentalmente e pela condicionalidade de outros factores, como a limitação do intervalo de frequências; a possibilidade de obter um conjunto discreto de dados em determinados valores de frequência; existência de erros de observação sistemáticos associados à truncatura e erros estatísticos que podem de algum modo influenciar esses dados [11] [36].

O algoritmo utilizado para a determinação do espectro, na sua forma contínua ou discreta, através de valores experimentais para determinados valores de frequência, revela-se extremamente importante. É necessário que o espectro obtido represente as funções das quais foi calculado, G' e G'' . Relativamente aos valores determinados, não podem ser negativos, pois torna-se impossível atribuir qualquer significado físico, assim como o espectro determinado deve ser aceitável numa abordagem física, ou seja, deve apresentar-se como uma boa descrição daquilo que se pretende interpretar.

Matematicamente, o método a adoptar terá que obter uma representação discreta do espectro

$$\{g_i, \tau_i, \quad i = 1, \dots, M\}$$

através dos dados $\{g'_j, g''_j, \quad j = 1, \dots, N\}$ obtidos por medições das funções G' e G'' para as frequências $\{w_j, \quad j = 1, \dots, N\}$, respectivamente.

Ao considerar-se um erro relativo σ_0 , associado aos dados, é possível atribuir erros distintos para os vectores de G' e G'' ,

$$\sigma'_j = g'_j \sigma_0 \text{ e } \sigma''_j = g''_j \sigma_0.$$

Desta forma, procura-se minimizar a função

$$\chi^2 = \sum_{j=1}^N \frac{1}{\sigma_j'^2} \left(g'_j - \sum_{i=1}^M K'_{ji} g_i \right)^2 + \sum_{j=1}^N \frac{1}{\sigma_j''^2} \left(g''_j - \sum_{i=1}^M K''_{ji} g_i \right)^2 \quad (2.32)$$

onde

$$K'_{ji} = \frac{w_j^2 \tau_i^2}{1 + w_j^2 \tau_i^2} \text{ e } K''_{ji} = \frac{w_j \tau_i}{1 + w_j^2 \tau_i^2}. \quad (2.33)$$

Qualquer que seja o método utilizado, o espectro calculado não deve ser visto como um fim, mas sim um portador de informação inicial para uma investigação

reológica. A aplicabilidade do espectro calculado e a sua consistência são os pré-requisitos de um bom método a adoptar.

3 – Resolução do problema

3.1. – Optimização

Para distintos problemas, existem diferentes formas de optimização, são distintas as funções objectivo que se pretendem optimizar. Mas, de uma forma geral, o pretendido é maximizar ou minimizar a função objectivo, a qual poderá estar sujeita a algumas limitações.

Ao estabelecer as iterações que permitem a execução de uma busca de soluções, são necessárias informações e condições do problema que se pretende resolver: intervalo viável bem definido, suavidade da função ou funções objectivo e convexidade do problema. No entanto, esta forma de programar, manipula valores iniciais, dos quais por vezes não se consegue libertar na sua totalidade, obtendo-se assim uma solução que depende em muito do conjunto de valores introduzidos inicialmente. Os algoritmos utilizados podem não obter uma solução óptima global, mas sim, um conjunto de resultados que depende da solução adoptada à partida.

Dada a impossibilidade de garantir a existência, unicidade e estabilidade da ou das soluções do problema apresentado anteriormente, visto que causas distintas podem levar ao mesmo efeito e pequenas alterações num certo efeito provocam grandes mudanças nas causas, torna-se necessário estabelecer uma busca de soluções que satisfaçam as condições do problema inverso definido.

Os algoritmos são uma ferramenta necessária na validação das tarefas que serão posteriormente automatizadas. No entanto, torna-se importante referir que os algoritmos não são a solução de um problema, mas sim, a sequência lógica de etapas adaptadas às condições do problema inverso para o qual se pretende obter um conjunto de possíveis soluções.

3.2 – Algoritmos Genéticos

Como grande observador da natureza, Charles Darwin no século XIX revolucionou o mundo com a sua teoria da evolução, na qual defendia que na natureza,

os seres vivos com melhores capacidades de adaptação, têm maiores possibilidades de sobrevivência. Mas, a observação do comportamento dos seres vivos, necessitava de bases que justificassem a reincidência de características e comportamentos ao longo das gerações. Neste campo, foi Gregor Mendel que através de várias experiências com vegetais, argumentou que as características de um indivíduo dependem da informação genética transmitida pelos progenitores, lei da herança genética.

Orientados os estudos e dissipadas todas as discussões acerca destas teorias, outras ciências, apoiadas em meios computacionais, que entretanto surgiram, inspiraram-se mais uma vez na natureza/biologia e definiram novas estratégias para a resolução de problemas, surgindo assim mais uma técnica de inteligência artificial denominada por algoritmos genéticos.

Os algoritmos genéticos constituem uma técnica de busca e optimização inspirada no princípio Darwiniano de selecção natural e reprodução genética. São algoritmos de busca exaustiva que se fundamentam no processo da selecção natural proposto por Darwin e nos mecanismos da genética [21]. O princípio da selecção privilegia os indivíduos mais aptos, com melhor desempenho, portanto, com maior probabilidade de reprodução.

Os códigos são um conjunto de símbolos correctamente sequenciados que formam a identidade de cada indivíduo e encontram-se representados através de vectores que se equiparam a cromossomas.

Estas teorias são utilizadas na construção de algoritmos computacionais que buscam uma melhor solução para um determinado problema, através da evolução de populações de soluções representadas em cromossomas artificiais.

Nos algoritmos genéticos um cromossoma é uma estrutura de dados que representa uma das possíveis soluções do espaço de procura do problema, sendo submetidos a um processo evolutivo que envolve avaliação, selecção, recombinação *crossover* e mutação. Após vários ciclos de evolução a população deverá conter indivíduos mais aptos.

Antes de avançar para a descrição do algoritmo propriamente dita, será importante relacionar termos dos algoritmos genéticos com fenómenos do sistema natural, analogias representadas na tabela abaixo:

Tabela 3.1 – Analogia entre os Algoritmos Genéticos e o sistema natural.

Natureza	Algoritmos Genéticos
Cromossoma	Vector
Gene	Característica do problema
Alelo	Valor da característica
Loco	Posição no vector
Genótipo	Estrutura
Fenótipo	Estrutura submetida ao problema
Indivíduo	Solução
Geração	Ciclo

John Holland iniciou um trabalho de pesquisa sobre estes algoritmos, que culminou com a publicação em 1975, do livro “*Adaptation in Natural and Artificial Systems*”, tendo sido esta obra o marco dos algoritmos genéticos. Desde então, os algoritmos genéticos têm sido aplicados com sucesso nas mais diversas áreas, como um utensílio de optimização.

Como qualquer algoritmo de optimização, também os algoritmos genéticos sofrem alterações, de forma a serem adaptados ao problema que se pretende resolver ou às soluções que se pretendem. Posteriormente, em 1991, Rawlins apresentou uma definição restrita de um algoritmo genético canónico, considerado também como algoritmo genético padrão. Hoje em dia, existem diferentes formas de elaborar um algoritmo genético, no entanto, a sequencia das diferentes etapas encontra-se descrita no esquema da *figura 3.1*.

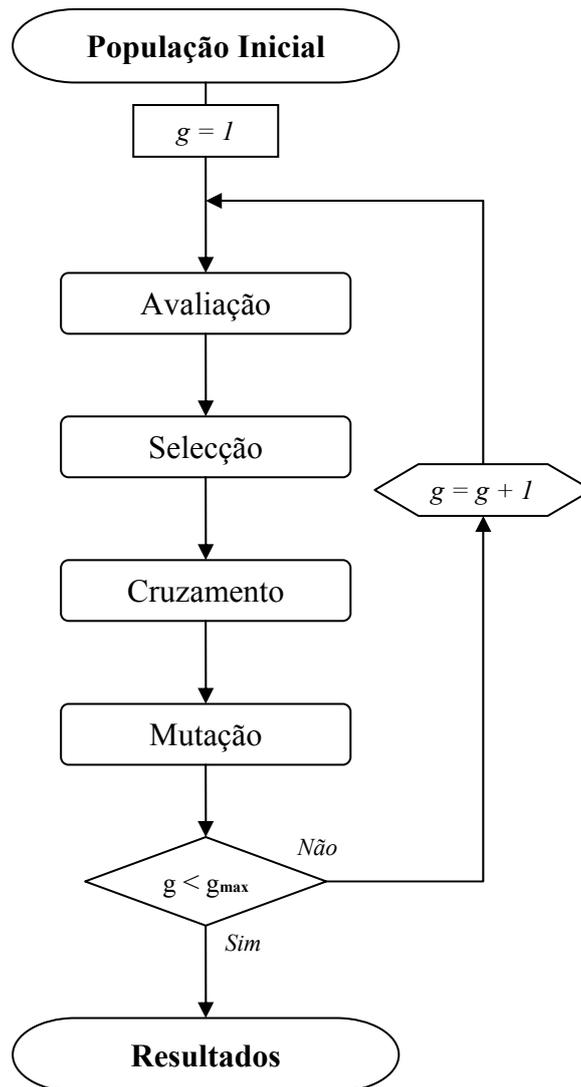


Figura 3.1 – Fluxograma de um Algoritmo Genético.

Após a geração de uma população inicial, os indivíduos que formam a *geração um* serão sujeitos a uma avaliação, na qual lhe será determinado o seu desempenho. Na etapa que se segue, os indivíduos vão ser seleccionados segundo um valor probabilístico proporcional ao seu valor de aptidão. Feita a selecção aleatória dos indivíduos, os vectores apurados irão sofrer uma recombinação, pois determinados sectores poderão vir a ser trocados por outros sectores de um indivíduo também seleccionado, formando-se assim uma população provisória. No seguimento do algoritmo, nos cromossomas, agora da população provisória, alguns genes serão alterados, este processo designa-se por mutação.

Os algoritmos genéticos são particularmente aplicados em problemas complexos de otimização: problemas com diversos parâmetros ou características que precisam ser combinadas em busca da melhor solução; problemas com muitas restrições ou condições que não podem ser representadas matematicamente; e ainda problemas com grandes espaços de busca.

3.2.1. Comprimento variável dos cromossomas

Os indivíduos das diversas populações são representados por cadeias de genes que formam vários cromossomas. Matematicamente, cada cromossoma é um vector, onde em cada posição se encontra codificada uma determinada informação.

Na planificação do algoritmo é importante definir a dimensão do cromossoma, pois os valores resultantes do algoritmo também dependem do tamanho de cada indivíduo. A aplicação dos operadores genéticos depende da quantidade de informação que estes têm para operar. Um indivíduo com um comprimento menor e que apresente um bom *fitness*, no cruzamento ou numa provável mutação possui maiores probabilidades de perder as características que o tornavam um bom indivíduo, pois como é estruturado por poucos valores, maior é o risco de dispersar a informação, impossibilitando a convergência para uma solução óptima. Por outro lado, um cromossoma com uma grande quantidade de genes, não sofre as alterações tão rapidamente. Dado o seu comprimento extenso, as probabilidades de enriquecimento ou extinção dos sectores dos cromossomas mais pobres é muito menor, logo a procura de bons indivíduos torna-se mais lenta e até mesmo pouco conclusiva. Para além deste factor, a manipulação de cromossomas longos exige um maior esforço computacional, assim como o tamanho dos cromossomas é proporcional ao tempo de execução do algoritmo.

3.2.2. Representação e codificação

Como foi mencionado anteriormente, os algoritmos genéticos mimetizam, ou melhor, simulam o processo de selecção natural, tendo como objectivo otimizar uma

função de aptidão. Pode-se no entanto, encará-los de uma outra maneira: um método heurístico de busca num espaço multi-dimensional. Cada parâmetro do problema a otimizar pode ser considerado uma dimensão independente e o método deve encontrar o melhor valor de cada parâmetro, otimizando desta forma o problema inicial. Nos algoritmos genéticos isto é executado, representando todos os parâmetros num único, chamado de cromossoma ou indivíduo, e a busca é feita, usando-se como representação este único parâmetro. Sendo assim, cada indivíduo é representado por um cromossoma, o qual se divide em vários fragmentos, cadeia de genes de um indivíduo.

O ponto de partida da busca de soluções ótimas coincide, forçosamente, com a forma pela qual serão representados ou codificados os genes de cada indivíduo, mais concretamente, a informação que cada indivíduo irá apresentar e transmitir às futuras gerações. A representação ou codificação das possíveis soluções do espaço de busca de um problema define a estrutura do cromossoma a ser manipulado pelo algoritmo.

Existem distintas formas de representar as possíveis soluções, pois a representação dos cromossomas depende do problema e daquilo que, essencialmente, se deseja manipular geneticamente.

A representação binária é simples, pois facilita a manipulação de cromossomas através dos operadores genéticos e a transformação das sequências binárias em números inteiros ou reais é facilmente executável. A codificação binária também facilita a prova de alguns teoremas que consolidam estes algoritmos, todavia, a representação por números reais também apresenta excelentes desempenhos.

Para uma melhor percepção do modo como funcionam os algoritmos, poder-se-á analisar um exemplo, para valores inteiros $x \in [0,63]$, encontrar o valor máximo da função $f(x) = x^2$.

As soluções do problema podem vir a ser representadas através de um cromossoma de 6 bits.

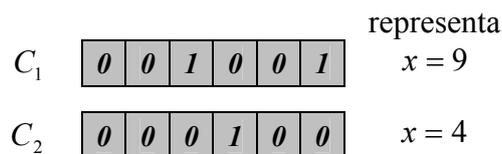


Figura 3.2 – Exemplo de uma codificação binária.

Um código binário também pode representar um número real $x_R \in [x_{\min}, x_{\max}]$, com previsão para p casas decimais. Para tal, serão necessários um certo número de bits, K , o qual se determina na resolução da seguinte inequação,

$$2^K \leq (x_{\max} - x_{\min})10^p$$

Ao codificar o espaço de busca, o utilizador terá que posteriormente descodificar a solução otimizada. O processo de descodificação possibilita a construção da solução para que esta seja avaliada pelo problema. Na transformação para um número real, deve-se considerar o intervalo de valores reais na aplicação da seguinte equação,

$$x_r = x_b \frac{C}{2^n - 1} - x_{\min} \quad (3.1)$$

onde $x_R \in [x_{\min}, x_{\max}]$, como já foi mencionado, x_b é o inteiro representado pelo código, n é o número de bits do cromossoma e C corresponde ao comprimento do domínio da variável x , $C = |x_{\max} - x_{\min}|$.

3.2.3. Geração da população inicial

Para que o algoritmo inicia a sua busca, é necessário um conjunto inicial de indivíduos, população inicial. A introdução da população inicia o processo de criação dos indivíduos para o primeiro ciclo do algoritmo. Usualmente, a população inicial é formada por indivíduos aleatoriamente criados. O conhecimento prévio de um conjunto de bons indivíduos, bons progenitores, poderá proporcionar uma evolução mais rápida, pois com bons progenitores, as gerações seguintes irão convergir mais rapidamente.

É de salientar que a dimensão das populações é um parâmetro de grande importância, pois afecta a qualidade da solução final, assim como o tempo de processamento. Uma população com poucos indivíduos apresentar-se-á com um conjunto de resultados pouco diversificados, pois não ocupa um extenso espaço de soluções. O número de indivíduos por população é directamente proporcional à probabilidade de obter melhores soluções, visto que existe uma maior diversidade de

indivíduos. Por outro lado, quanto maior for a população, maior será o esforço computacional e o tempo despendido na execução do algoritmo.

3.2.4. Avaliação dos indivíduos

Após a obtenção de uma população, é necessário quantificar a qualidade de cada indivíduo. A avaliação é considerada como sendo a ligação entre os algoritmos genéticos e o mundo exterior. Com a utilização de uma função, a que melhor represente o problema, associar-se-á um valor a cada indivíduo, valor esse que será o *fitness*, grau de adaptação de cada indivíduo ao problema, contribuindo directamente com a futura *sobrevivência* ou não, dos cromossomas. Deste modo a função avaliação é para o algoritmo o que o meio ambiente é para os seres vivos. É de salientar que a escolha da função que avaliará os indivíduos é muito importante, pois as etapas que se seguem estarão dependentes destes valores, assim como em alguns casos de optimização, mais concretamente, maximização, a evolução dos indivíduos ao longo das várias gerações, permite a obtenção de avaliações algo convergentes, exigindo por vezes a utilização de uma nova função de avaliação.

Utilizando o exemplo mencionado anteriormente, função quadrática, poder-se-á verificar na *figura 3.3* os valores com que dois cromossomas foram avaliados.

		x_i	f_i
C_1	0 0 1 0 0 1	$x = 9$	81
C_2	0 0 0 1 0 0	$x = 4$	16

Figura 3.3 – Exemplo de dois cromossomas e o respectivo desempenho.

3.2.5. Selecção

O processo de selecção baseia-se no princípio natural “*sobrevivência dos melhores indivíduos*”, onde os cromossomas (vectores) com melhor *fitness* têm maior probabilidade de serem seleccionados para futuras gerações. Os indivíduos seleccionados irão formar uma população temporária, de onde serão escolhidos

aleatoriamente progenitores da próxima geração, na prática computacional, esta população temporária já se encontra previamente planificada, isto é, os indivíduos já são seleccionados aos pares, formando a geração seguinte com os seus herdeiros genéticos.

Ao longo dos anos foram várias as técnicas de selecção utilizadas e defendidas pelos distintos investigadores que as abordaram, no entanto, o objectivo é o mesmo, escolher os progenitores para gerar a próxima geração mantendo os valores dos melhores vectores. O procedimento também não altera muito, pois as diferentes formas de selecção passam por atribuir um valor de selecção através do *fitness* de cada indivíduo.

Como esta fase dos algoritmos genéticos é a que coloca em prática a selecção natural segundo Darwin, muitas foram e serão as discussões sobre a forma ou o método como deve ser executada. Desde transitar para futuras gerações exclusivamente os indivíduos com melhor *fitness*, até à passagem de uma certa percentagem (80%) de um grupo onde se encontram os vectores que apresentam os valores mais adaptados ao problema (*over selection*), várias foram as hipóteses postas em prática. No entanto, de todas as formas de seleccionar, aquela com maior taxa de utilização, encontra-se associada ao esquema original proposto por Holland [24], o *método da roleta*.

Numa fase inicial deste método, a cada indivíduo I_i será atribuído uma dada probabilidade p_i de selecção, aplicando neste cálculo o *fitness* f_i de cada indivíduo,

$$p_i = \frac{f_i}{\sum_{i=1}^N f_i}, \quad i \in \{1, \dots, N\} \quad (3.2)$$

onde N é o tamanho da população.

A *tabela 3.2* apresenta valores calculados através de (3.2). Resultados que confirmam o facto de indivíduos com melhor *fitness* terem maior probabilidade de serem seleccionados, enquanto os indivíduos com menor adaptação apresentam-se com probabilidades mais baixas, não sendo todavia, impossível a sua selecção.

Tabela 3.2 – Correspondência entre o desempenho e a probabilidade de selecção.

Indivíduos	<i>fitness</i>	Probabilidade
I_i	f_i	p_i
10110	2,23	0,144
11000	7,27	0,468
11110	1,05	0,068

01001	3,35	0,216
00110	1,64	0,106

Cada indivíduo será representado pelo arco de um círculo, em que a sua amplitude será proporcional à probabilidade obtida e esta proporcional ao seu *fitness*.

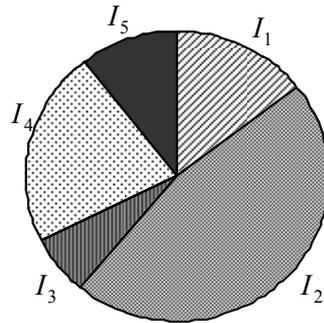


Figura 3.4 – Roleta associada aos valores da tabela 3.2.

Estabelecida a roleta, o processo evolui com o N lançamentos da mesma, a população temporária dependerá do tamanho da população de onde foram extraídos os indivíduos. A elevada variância poderá levar à existência de várias cópias de um bom indivíduo, o que provoca a diminuição da diversidade das populações. Esta situação alerta para uma possível convergência prematura do algoritmo para uma solução adaptada mas não a ideal. Por outro lado, quando a execução já se encontra numa fase mais avançada, onde os indivíduos já apresentam valores de *fitness* muito próximos, observar-se-á uma certa estagnação do algoritmo, pois todos os indivíduos se apresentam com semelhantes probabilidades de selecção.

O operador de selecção é um componente essencial de algoritmos genéticos. As várias obras escritas identificam cinco principais mecanismos de selecção: proporcional, por torneios, com truncamento, por normalização linear e normalização exponencial [3]. Um mecanismo de selecção é caracterizado pela pressão selectiva ou intensidade de selecção que o mesmo introduz no algoritmo genético. O termo *pressão selectiva* é utilizado em diferentes contextos e com significados diferentes na literatura de computação evolucionária. O conceito de intensidade de selecção empregada em

genética é a variação na aptidão média da população induzida pelo método de selecção [3].

Considerando que o valor médio da performance E_m para uma população de tamanho N se determina por:

$$E_m = \frac{\sum f_i}{N} \quad (3.3)$$

a intensidade de selecção I , é dada por,

$$I = \frac{E_m^* - E_m}{\sigma} \quad (3.4)$$

sendo E_m^* o valor médio de performance esperado após a selecção e σ o desvio padrão dos valores que resultaram da avaliação antes da selecção.

No caso de selecção proporcional, a probabilidade de um determinado indivíduo ser seleccionado é simplesmente proporcional ao seu *fitness*, ou seja,

$$p_i = \frac{f_i}{N E_m} \quad (3.5)$$

desta forma, a pressão selectiva é dada pela razão entre o desvio padrão dos valores de performance e a médio dos mesmos [3].

$$I = \frac{\sigma}{E_m} \quad (3.6)$$

O método de selecção proporcional apresenta dois problemas: existência de indivíduos com excelente *fitness* e competição próxima. Relativamente ao primeiro, ocorre quando um indivíduo apresenta um desempenho bem maior que o dos restantes indivíduos, o que provoca uma convergência prematura do algoritmo. O segundo

desenrola-se quando um determinado número de indivíduos de indivíduos apresentam uma aptidão muito próxima, mas não idênticas, neste caso, a intensidade selectiva pode ser bem menor que a desejável.

No que concerne à selecção por torneios, um grupo de t indivíduos é aleatoriamente escolhido, sendo posteriormente seleccionado, dentro deste grupo, o indivíduo com melhor avaliação. Neste caso, a intensidade de selecção será dada pela solução da seguinte equação integral [3];

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} t x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left(\int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}} dy \right)^{t-1} dx \quad (3.7)$$

A partir da solução numérica da equação (3.7), observa-se que a pressão selectiva aumenta à medida que o número de indivíduos envolvidos no torneio aumenta. Nesta forma de seleccionar é utilizada uma distribuição *Gaussiana* de valores, em que as variáveis x e y representam os valores de aptidão da população.

Relativamente ao método de selecção por truncamento, inicialmente é definido um patamar, apenas os q melhores indivíduos podem vir a ser seleccionados, apresentando todos a mesma probabilidade de selecção. Posto isto, poder-se-á verificar que a intensidade de selecção é [3],

$$I = \frac{1}{q} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{f_c^2}{2}} \quad (3.8)$$

sendo f_c o valor da menor performance verificado entre os q melhores indivíduos.

Numa análise da equação (3.8) poder-se-á constatar, que o aumento do patamar q implica a diminuição da pressão selectiva.

A selecção por normalização linear inicia-se com a ordenação dos indivíduos, tendo em conta o seu fitness. O indivíduo com pior performance fica com uma aptidão mínima (*mín*) e passa a ocupar a posição $i=1$, enquanto que o indivíduo com melhor fitness, atribuirá a aptidão máxima (*máx*). Os restantes indivíduos irão ter valores de aptidão distribuídos linearmente entre *mín* e *máx*, consoante a posição que ocupa na ordenação inicial.

$$A_i \equiv \text{mín} + \frac{\text{máx} - \text{mín}}{n-1} (i-1) \quad i \in \{1, \dots, n\} \quad (3.9)$$

Este método reduz algum, possível, domínio por parte de um super cromossoma, assim como aumenta a pressão selectiva entre indivíduos com uma avaliação inicial muito próxima. A intensidade de selecção, neste método, que é dada por,

$$I = (1 - \text{mín}) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \quad (3.10)$$

prova que o aumento do valor *mín* provoca a diminuição da pressão selectiva.

Por último, no método de normalização exponencial, as probabilidades de selecção de cada indivíduo orientam-se segundo uma função exponencial,

$$p_i = \frac{c-1}{c^N - 1} c^{N-i} \quad i \in \{1, \dots, N\} \quad (3.11)$$

onde *c* é o grau *exponencial* da função, podendo este variar entre 0 e 1, mas, os melhores valores são os que distam de 1.

Na equação (3.12), intensidade de selecção, é possível constatar que a pressão selectiva diminui, à medida que o grau *c* aumenta [3].

$$I \approx \frac{\ln(c^N)}{-2,548 - 1,086 \sqrt{c^N} + 0,4028 \ln(c^N)} \quad (3.12)$$

3.2.6. Reprodução

Na fase da reprodução, o algoritmo procura criar novas e melhores soluções, através do cruzamento de genes dos indivíduos previamente seleccionados. Inicialmente, a população temporária é agrupada por $N/2$ pares de prováveis progenitores preparados para uma possível transmissão de informações para as gerações seguintes. O cruzamento genético passa por uma fase de aprovação, isto é, para cada par de

indivíduos é atribuída uma probabilidade de cruzamento que será comparada com a probabilidade de cruzamento estabelecida para todos os pares. Se o valor da probabilidade do par for inferior à probabilidade de cruzamento, o cruzamento é aprovado, caso contrário, os indivíduos transitam para a população seguinte, sem que sofram qualquer alteração nesta fase do algoritmo.

A reprodução é uma das etapas do algoritmo genético que colabora para a alteração do código de cada indivíduo ao longo das várias gerações, dando assim alguma relevância ao algoritmo, pois este só faria sentido com as sistemáticas alterações exercidas sobre os indivíduos. Os descendentes serão diferentes dos seus pais, mas com características genéticas de ambos os progenitores.

A nível computacional, nos pares de indivíduos aprovados para reprodução serão trocados entre si fragmentos dos vectores que os representam. Este processo informático procura representar a lei da hereditariedade, os cromossomas agora reestruturados serão os transmissores das informações dos seus antecessores. Este cruzamento de genes, poder-se-á executar de várias formas.

Uma das formas de recombinação dos novos vectores defina-se como cruzamento num ponto (*one-point crossover*). Neste método de cruzamento são permutados todos os genes a partir de uma dada posição. Como se pode ver na *figura 3.5*, a partir de uma certa posição um bom indivíduo poderá perder a informação que lhe permitiu obter um bom desempenho.

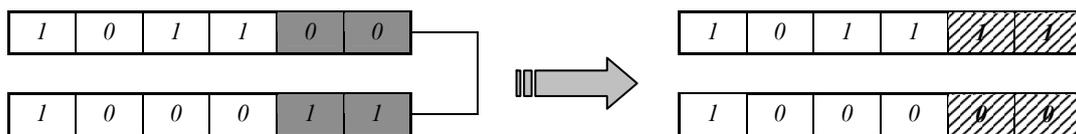


Figura 3.5 – Cruzamento com um ponto de corte.

Outros especialistas no tema defendem que a combinação poder-se-ia executar noutros sectores dos vectores, que não os extremos, *figura 3.6*. Desta forma, surge o cruzamento *multi-ponto*, são trocados genes entre duas posições, deixando os extremos inalterados.

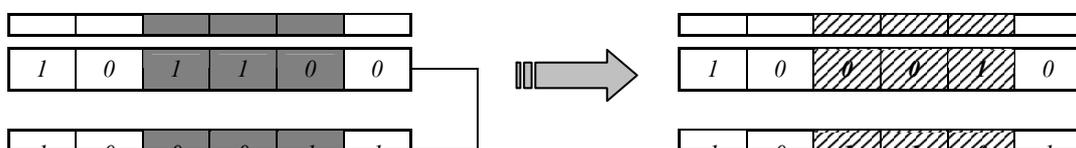


Figura 3.6 – Cruzamento com dois pontos de corte.

A necessidade de gerar indivíduos com informação das anteriores gerações, sem que se entre na insistência em determinados valores e a adaptação dos algoritmos genéticos a situações distintas interferiram na utilização de um cruzamento *uniforme*. Tal como se pode ver no esquema da *figura 3.7*, esta forma de cruzamento agrupa os dois anteriores, pois através de uma probabilidade são determinados os genes que serão trocados.

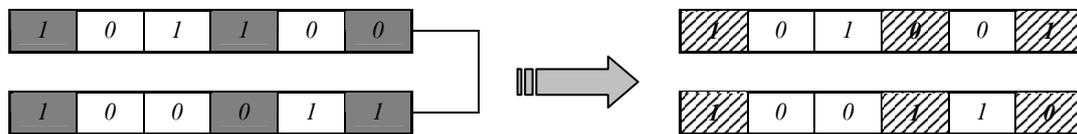


Figura 3.7 – Cruzamento uniforme

Quando o algoritmo utiliza uma codificação com numeração real, poderá ainda existir a possibilidade de uma outra forma de cruzamento. Através da *figura 3.8* pode-se constatar que o único vector herdeiro genético será formado por genes que resultam da média aritmética dos valores dos progenitores nas respectivas posições. Esta forma de cruzamento altera consideravelmente as gerações, diminuindo o número de indivíduos por população ao longo das gerações.

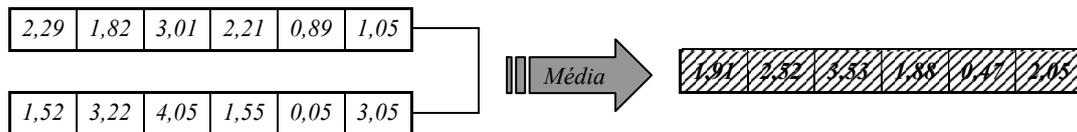


Figura 3.8 – O cruzamento por média origina um único indivíduo.

Como podemos ver existem inúmeras formas de cruzamento, no entanto, como foi mencionado anteriormente, a reprodução encontra-se directamente ligada a uma probabilidade previamente definida. Quanto maior for a probabilidade de cruzamento, maior serão as alterações nos novos indivíduos introduzidos nas próximas gerações, mas, se a mesma probabilidade for demasiado alta, poder-se-ão perder os indivíduos com um óptimo *fitness*. Por outro lado, a baixa probabilidade encontra-se associada a

uma busca de soluções lenta. Em grande parte das otimizações através de algoritmos genéticos utiliza-se uma taxa de cruzamento compreendida entre 0,5 e 0,95.

3.2.7. Mutação

Mesmo após o cruzamento, é possível existirem indivíduos, na população provisória, idênticos aos anteriores. Para que isto não se verifique, frequentemente, é necessário introduzir e manipular uma considerável diversidade genética. A mutação altera com determinada probabilidade um ou mais genes de determinados cromossomas, introduzindo novos elementos na população. Desta forma, é assegurada a possibilidade de se alcançar qualquer solução num espaço de busca, contornando um previsível problema de ótimos locais.

Numa representação binária, a mutação inicia-se com a escolha aleatória de uma posição do cromossoma, a qual será posteriormente alterada.

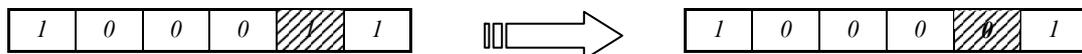


Figura 3.9 – Exemplo de uma mutação num código binário.

Para outras situações executam-se outros procedimentos devidamente enquadrados nas exigências da representação. Em cromossomas com codificação numérica, poder-se-á utilizar, entre outras, mutação aleatória ou por incremento. A mutação aleatória (Figura 3.10) selecciona um ou mais genes e substitui o valor por um outro aleatório, pertencente ao intervalo de validade previamente definido.

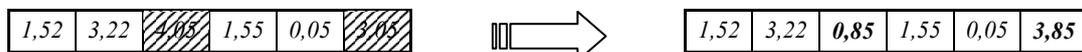


Figura 3.10 – Mutação aleatória.

Este tipo de mutação poderá alterar consideravelmente a solução representada pelo indivíduo modificado, pois os recentes genes poderão apresentar valores algo distintos dos anteriores, alterando consequentemente o *fitness* do indivíduo.

Como podemos ver na figura 3.11, na mutação por incremento, o valor do gene ou genes será substituído pela soma do valor anterior com um incremento, aleatório.

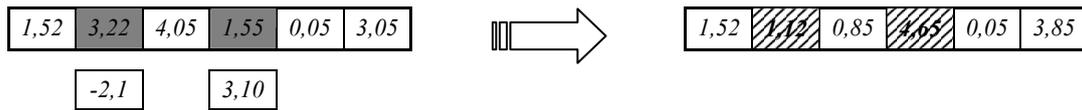


Figura 3.11 – Exemplo de uma mutação por incremento.

Como foi mencionado anteriormente, a mutação é utilizada para fornecer novas informações dentro das populações, prevenindo que estas se tornem saturadas com cromossomas similares. Esta etapa do algoritmo aumenta a diversidade populacional e possibilita uma maior extensão no intervalo de busca, no entanto, este operador genético é controlado pela probabilidade de mutação, a qual indica a taxa de ocorrência da operação mutação sobre o genótipo de um dado indivíduo.

A probabilidade de mutação foi muito discutida ao longo de vários anos, pois nem sempre houve conformidade na escolha da taxa a utilizar. Alguns investigadores recomendam que a escolha da taxa de mutação deve ter como base o tamanho dos cromossomas e das populações. De Jong [10] sugeriu que a probabilidade de mutação deve ser inversamente proporcional ao tamanho da população, enquanto que Hesser e Manner [11] defendiam que a taxa óptima de mutação pode ser calculada pela expressão:

$$P_m = (N \sqrt{L})^{-1}, \quad (3.13)$$

sendo N o tamanho da população e L o comprimento dos vectores que representam cada indivíduo.

Como nos restantes operadores genéticos, a probabilidade de mutação depende do problema que se pretende resolver, no entanto, uma taxa elevada poderá tornar o algoritmo genético essencialmente aleatório. Os valores mais utilizados variam entre $0,001$ e $0,1$.

3.2.8. Critérios de paragem do algoritmo genético

Ao iniciar a aplicação de um algoritmo genético o utilizador deve previamente estabelecer a sua finalização. O critério de paragem deste tipo de algoritmos depende, em grande parte, do problema em causa, das exigências computacionais necessárias e do tempo despendido, sem esquecer a qualidade da solução que se pretende.

Nos algoritmos genéticos, existem vários parâmetros que controlam o processo evolutivo:

Tabela 3.3 – Descrição de parâmetros que controlam os Algoritmos Genéticos.

Parâmetro	Descrição
Tamanho da população	<i>Quantidade de indivíduos que são considerados em cada ciclo do algoritmo.</i>
Taxa de crossover	<i>A probabilidade de recombinação de dois indivíduos.</i>
Taxa de mutação	<i>A probabilidade de mutação da informação contida numa certa posição.</i>
Número de populações	<i>Quantidade de gerações formadas ou número de ciclos executados pelo algoritmo.</i>
Número de indivíduos	<i>Número de indivíduos avaliados.</i>

Dos parâmetros referidos na *tabela 3.3*, os dois últimos são, geralmente, utilizados como critérios de paragem. Outro critério possível relaciona-se com o *fitness* verificado pelos indivíduos, isto é, um cromossoma que proporcione um valor compreendido num intervalo de avaliação ideal, previamente estabelecido, provoca a imediata paragem do algoritmo. Por outro lado, se o tempo de execução não for limitado, a procura da melhor solução poder-se-á estender até à obtenção de populações que apresentam valores de desempenho muito próximos. Neste último caso o algoritmo pára quando não se verificam melhorias significativas a partir de determinadas gerações.

3.3 – Teorema do esquema

Do ponto de vista matemático, os algoritmos genéticos ainda não foram tratados profundamente. O *teorema do esquema* procura explicar, teoricamente, o porquê da convergência dos algoritmos genéticos e com que velocidade o processo se desenrola. Uma maneira de estudar o comportamento dos algoritmos genéticos, matematicamente, é através do que se chama de esquema. Um esquema é uma máscara, ou padrão, que representa os indivíduos da população.

No caso de uma codificação binária, um esquema é uma cadeia formada com os caracteres $\{0, 1, *\}$ onde $* \in \{0, 1\}$. O comprimento l do esquema é definido como o número de elementos que constituem a cadeia. Assim, um esquema com comprimento 5 poderá ser:

$$0*101, *****, 10101, \dots$$

O código “*” (asterisco) num esquema indica que pode ser utilizado o 0 ou o 1, nessa posição, isto é, o esquema $[10*]$ poderá representar 100 ou 101, e o esquema $[10*01*]$ poderá ter quatro interpretações: 100010, 100011, 101010 e 101011.

Sendo assim, o número máximo de esquemas para cada indivíduo cujos cromossomas possuem l genes, será 3^l , pois, para cada posição na cadeia, poder-se-ão aplicar 3 caracteres: 0, 1 e *.

Mas, um único esquema de comprimento l representa exactamente 2^r cromossomas onde r é o número de asteriscos no esquema. Por outro lado, um cromossoma com o mesmo comprimento é representante de 2^l (cada posição da cadeia pode ter o símbolo original do cromossoma ou o asterisco). Portanto, numa população com N indivíduos de tamanho l tem-se no máximo $N \times 2^l$ esquemas.

Entenda-se por ordem de um esquema S , denotado por $o(S)$, o número de símbolos que não sejam asteriscos. No caso de uma codificação binária, seria a quantidade de símbolos de $\{0, 1\}$.

$$o(11001) = 5$$

$$o(1***1) = 2$$

$$o(***0***) = 1$$

A ordem do esquema é a diferença entre o comprimento do cromossoma e a quantidade de asteriscos.

O comprimento, conhecido por *defining length*, do esquema é representado por δ , é a distância entre o primeiro e o último símbolos não asteriscos do esquema:

$$\delta(1***0) = |1 - 5| = |-4| = 4$$

$$\delta(****11) = |5 - 6| = |-1| = 1$$

$$\delta(***0***) = |4 - 4| = |0| = 0$$

Os algoritmos genéticos centram a sua busca na selecção e recombinação de indivíduos com um bom *fitness*, desta forma, estas etapas são as cruciais em todo o algoritmo, logo é necessário estudar a influência destes dois passos nos esquemas presentes na população.

Ao analisar uma população de tamanho N é possível representar o número de indivíduos representados por um esquema S num determinado instante t , $m(S,t)$, determinando-se da seguinte forma:

Ao considerar as populações nos instantes indicados,

$t = 0$	$t = 1$	$t = 2$
1001	0110	0011
0011	0111	1010
1100	1101	1101
0101	0001	0100

Tabela 3.4 – Indivíduos resultantes em três instantes.

Verifica-se que

$$m(1***, 0) = 2 \quad (1001, 1100)$$

$$m(1***, 1) = 1 \quad (1101)$$

$$m(**00, 0) = 1 \quad (1100)$$

$$m(**00, 1) = 0$$

$$m(**00, 2) = 1 \quad (0100).$$

Outra característica do esquema é a sua avaliação no instante t . Denota-se por $f(S,t)$ o valor médio *fitness*, no instante t , de todos os indivíduos v_i que representem o esquema S sobre a população.

$$f(S, t) = \frac{\sum_S f_i}{m(S, t)} \quad (3.14)$$

onde $\sum_S f_i$ é o somatório dos *fitness* dos indivíduos que representam o esquema S .

Com isto, procura-se descobrir uma fórmula que possibilite determinar a quantidade de indivíduos que representam um dado esquema S , como função das probabilidades de mutação, recombinação e *fitness*, ou seja, pretende-se determinar $m(S, t+1)$.

Relativamente aos efeitos da selecção e reprodução sobre os esquemas da população, poder-se-á avaliar através do método da selecção por roleta, o mais utilizado e desenvolvido. É sabido que os indivíduos são escolhidos e copiados de acordo com seu performance (*fitness*), isto é, designa-se por p_i a probabilidade de um indivíduo (v_i) ser escolhido para a reprodução, p_i é proporcional ao valor de f_i ,

$$p_i = \frac{f_i}{\sum f_i}, i \in \{1, \dots, N\} \quad (3.15)$$

Considerando a média dos valores de performance, equação (3.3), temos que

$$p_i = \frac{f_i}{N E_m} \quad (3.16)$$

O número esperado de cópias do indivíduo v_i , na próxima geração será o produto da probabilidade do próprio pelo número de tentativas N , ou seja,

$$m(v_i, t+1) = p_i N = \frac{f_i}{E_m} \quad (3.17)$$

Considerando, agora, o esquema S , temos,

$$m(S, t+1) = \sum_S m(v_i, t+1) \quad (3.18)$$

com v_i representante de S .

Desenvolvendo a equação (3.14), obtém-se

$$\sum_s f_i = m(s, t) f(s, t) \quad (3.19)$$

então, por (3.17) e (3.19)

$$\sum_s m(v_i, t+1) = \frac{\sum_s f_i}{E_m} = \frac{m(s, t) f(s, t)}{E_m}. \quad (3.20)$$

Logo, para o esquema S , a quantidade de indivíduos que representam o esquema S no instante $t+1$, em função do instante anterior, será

$$m(S, t+1) = \frac{m(s, t) f(S, t)}{E_m}. \quad (3.21)$$

No que respeita a recombinação, como a posição em que cada cromossoma poderá ser cortado é seleccionada aleatoriamente com probabilidade uniforme em todas as posições. A probabilidade de um esquema S ser quebrado pelo *crossover*, será,

$$p_q(S) = \frac{\delta(S)}{l-1} \quad (3.22)$$

sendo $\delta(S)$ o comprimento de S e l o comprimento do cromossoma. Considerando p_c , probabilidade de existir *crossover*, a probabilidade de romper o esquema, p_r , será o produto entre as probabilidades de cruzamento e quebra, ou seja,

$$p_r(S) = p_c \frac{\delta(S)}{l-1} \quad (3.23)$$

pois p_c e p_q representam procedimentos independentes. Desta forma, é possível calcular a probabilidade do esquema sobreviver ao cruzamento

$$p_{sc}(S) = 1 - p_c \frac{\delta(S)}{l-1}. \quad (3.24)$$

Um esquema que não entrar em ruptura, permanecerá preservado, mas o caso contrário nem sempre é verdade. É possível encontrar um esquema que após sofrer um cruzamento permanece inalterado, desde que as partes que recebeu sejam idênticas às que cedeu. Assim sendo, a probabilidade de um esquema se manter inalterado não será inferior à probabilidade de se salvar do cruzamento,

$$p_{inalt}(S) \geq 1 - p_c \frac{\delta(S)}{l-1}. \quad (3.25)$$

A quantidade de indivíduos que representam um determinado esquema S , e que sobrevivam à selecção/reprodução e recombinação poder-se-á limitar através da junção de (3.21) com (3.25), obtendo-se a condição:

$$m(S, t+1) \geq \frac{m(S, t) f(S, t)}{E_m} \times \left(1 - p_c \frac{\delta(S)}{l-1} \right) \quad (3.26)$$

Após iniciar a formação da futura população, através do *crossover*, este processo será finalizado com a mutação. Todas as posições dos vectores que representam os indivíduos têm a mesma probabilidade, geralmente baixa, de ser trocada. Logo, quanto maior for o vector, maior será o risco de ser alterado. Esquemas de ordens grandes serão mais afectados que os esquemas de ordem menor, pois a probabilidade do esquema S não ser alterado (p_{sm}) é a probabilidade da não mutação elevada à ordem do esquema, ou seja:

$$P_{sm}(S) = (1 - p_m)^{o(S)} \quad (3.27)$$

visto que a probabilidade de um único bit não ser alterado é $1 - p_m$ e independente de todos os outros bits do esquema.

Como, por regra geral, p_m é muito pequena, poder-se-ão ignorar os termos em p_m de ordem superior a l e aproximar.

$$p_{sm}(S) = 1 - p_m o(S) \quad (3.28)$$

Não esquecendo que a recombinação e a mutação são procedimentos independentes, a probabilidade total do esquema S sobreviver após ocorrer a recombinação e mutação será,

$$p_s(S) = p_{sm}(S) p_{sc}(S). \quad (3.29)$$

Logo, o número de representantes do esquema S , traduz-se por:

$$m(S, t+1) = \frac{m(S, t) f(S, t)}{E_m} p_s(S), \quad (3.30)$$

através de (3.26) e (3.30), obtém-se:

$$m(S, t+1) \geq \frac{m(S, t) f(S, t)}{E_m} \left[1 - p_c \frac{\delta(S)}{l-1} \right] [1 - p_m o(S)]. \quad (3.31)$$

Aplicando a distributividade em (3.31) e anulando os termos cruzados $p_c \times p_m$, obtém-se a forma matemática do *teorema do esquema*:

$$m(S, t+1) \geq \frac{m(S, t) f(S, t)}{E_m} \left[1 - p_c \frac{\delta(S)}{l-1} - p_m o(S) \right] \quad (3.32)$$

Ao analisar (3.32), poder-se-á dizer que é do tipo,

$$m(S, t+1) \geq \frac{m(S, t) f(S, t)}{E_m} K_1 \quad (3.33)$$

com K_1 o resultado das operações entre as constantes p_c , $\delta(S)$, l , p_m e $o(S)$. Relativamente à relação entre o valor de performance médio dos esquemas e o valor de performance médio da população, se este também for constante, então a equação poderá ter a forma,

$$m(S, t+1) = m(S, t) K. \quad (3.34)$$

Sendo então possível obter $m(S, t)$ através de uma solução exponencial.

Os esquemas que têm o valor de K superior a 1 , condição do teorema do esquema, produzem indivíduos representantes a uma taxa exponencial com o tempo, enquanto que para valores inferiores a 1 , tendem a desaparecer.

Assim, também se poderá explicar a rapidez da convergência dos algoritmos genéticos.

No entanto, tanto a convergência do algoritmo como o tamanho dos cromossomas depende, também, das exigências do problema inicial, podendo o utilizador executar o algoritmo para tamanhos distintos, analisando o respectivo desempenho das populações e a respectiva convergência do processo.

3.4 – Optimização Multi-objectivo

Grande parte dos problemas do mundo real envolve uma colecção de variáveis dependentes que por vezes competem entre si. A optimização de problemas com vários objectivos é dificultada pela conflitualidade provocada entre as soluções, pois a busca para determinados objectivos tem como consequência a deterioração de outros.

A compra de um computador exemplifica plenamente um problema que manipula dois objectivos, desempenho informático e custo. Estes objectivos, na grande parte dos casos, competem entre si, pois a minimização do custo proporciona o enfraquecimento da máquina, por outro lado, os computadores com melhor desempenho apresentam custos superiores. Desta forma o comprador terá que optar por um

equipamento que melhor satisfaça os dois objectivos, a solução será a compra de um computador com um desempenho maior ou equivalente por um preço menor ou igual. Estas soluções são as chamadas soluções não dominadas. Num problema com mais que um objectivo não existe uma solução única óptima, mas sim um conjunto de soluções que agrupam os melhores resultados no intervalo de busca, ao serem considerados todos os objectivos. Estas soluções são também chamadas soluções óptimas de Pareto [16].

No recurso à optimização multi-objectivo, o utilizador poderá optar entre dois processos. Se conhecer as prioridades e os pesos entre os vários objectivos desenvolve-se uma escolha das soluções óptimas de Pareto, do qual se irá seleccionar a mais conveniente. No entanto, na observação dos vários problemas multi-objectivos do mundo real é possível verificar a imprevisibilidade das informações qualitativas e quantitativas, a falta ou insuficiência das informações sobre as prioridades e os pesos dos objectivos reforçam a escolha pelo segundo processo. Esta conclusão também justifica a preferência pelos métodos evolutivos, pois os métodos clássicos de optimização não se encontram projectados para manipularem múltiplas soluções.

Para melhor entender estes problemas de optimização, será importante uma abordagem mais matemática. Um problema multi-objectivo poderá ser descrito através de um vector y de n funções objectivo, que dependem de um outro vector x de m variáveis. Portanto, pretende-se optimizar (maximizar ou minimizar),

$$y = f(x) = (f_1(x), \dots, f_n(x)) \quad y \in Y$$

sendo,

$$x = (x_1, \dots, x_m) \quad x \in X$$

e considerando-se que:

y : vector objectivo

x : vector decisão

x_i : variáveis de decisão

f_i : funções objectivo

Y : espaço de funções objectivo

X : espaço de variáveis de decisão.

O conjunto de soluções de X obtido é formado por vectores de decisão que não podem melhorar o valor de qualquer objectivo, sem enfraquecer qualquer um dos restantes. Sem perda de generalidade é possível descrever as soluções óptimas de Pareto formalmente para um problema de minimização pura, isto é, onde todas as funções objectivo devem ser minimizadas, utilizando:

Dominância

Um ponto $A = (a_1, a_2, \dots, a_m)$ domina um outro ponto $B = (b_1, b_2, \dots, b_m)$ se:

$$\forall i \in \{1, 2, \dots, n\}: f_i(A) \leq f_i(B) \quad e \quad \exists j \in \{1, 2, \dots, n\}: f_j(A) < f_j(B)$$

Solução não-dominada ou óptima de Pareto

Um ponto A é uma solução *não-dominada* e pertencente à fronteira de Pareto se não existir nenhum outro ponto B , tal que B domine A . Em geral, para cada região viável existe um subconjunto S de soluções *não-dominadas*, também conhecidas como óptimas de Pareto.

É de salientar que existe uma diferença entre um conjunto de soluções não dominadas e um conjunto óptima de Pareto, pois o primeiro é definido no contexto de uma amostra do espaço de busca, enquanto o segundo é definido em relação a todo o espaço de busca.

Como exemplo deste tipo de problemas de optimização poder-se-á considerar a minimização de duas funções,

$$f(x) = x^2 \quad e \quad g(x) = (x - 1)^2 + 1$$

Visto que em determinados intervalos a variação destas funções não coincide, a identificação das soluções óptimas de Pareto torna-se mais complicada.

Representando os resultados das duas funções, num gráfico paramétrico, para um determinado valor de x , tem-se,

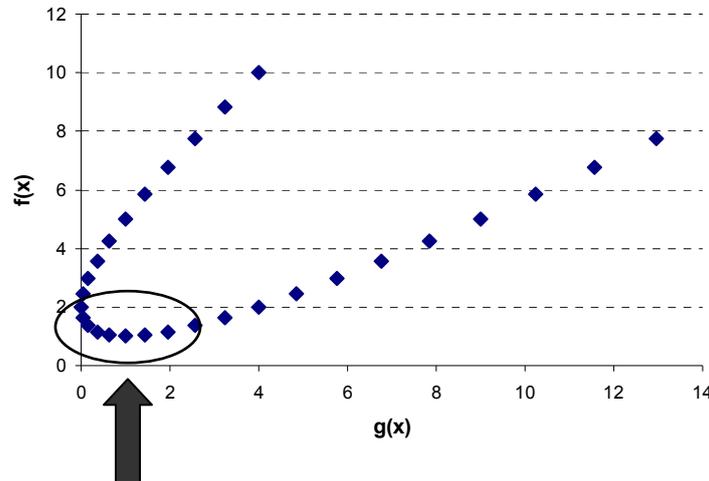


Figura 3.12 – Representação e marcação de um conjunto de soluções óptimas.

No gráfico da *figura 3.12* facilmente se identifica um conjunto de valores que satisfazem o problema inicial, soluções óptimas. Mas, em problemas maiores, nem sempre é possível uma análise gráfica do problema estudado.

Dos métodos de busca conhecidos, os algoritmos evolucionários destacam-se por utilizar uma população de soluções a cada iteração, devolvendo outro conjunto de soluções, procurando, deste modo, um conjunto de bons indivíduos e não uma solução global ideal.

A grande diferença entre um algoritmo evolutivo convencional e os algoritmos evolutivos multi-objectivo está na forma como o grau de desempenho é atribuído aos indivíduos da população. Enquanto no primeiro a *fitness* é directamente proporcional à avaliação das soluções, indivíduos, nos outros, deve-se também ter em conta a proximidade.

3.5 – Algoritmos Evolutivos Multi-objectivo

Como foi referido anteriormente, os métodos evolutivos apresentam determinadas características que os tornam mais apropriados para a resolução de problemas multi-objectivo. Os algoritmos evolutivos multi-objectivo substituem a fase de selecção de um algoritmo evolutivo por uma rotina com potencialidades para lidar com objectivo múltiplos.

Estes algoritmos incidem essencialmente no valor do desempenho de cada indivíduo, assim como na proximidade dessa potencial solução, complementando-se em três tarefas básicas.

- ✓ Atribuir um valor para o desempenho, direccionar a população para a fronteira de *Pareto*, utilizando um método de selecção multi-objectivo, eficiente e robusto.
- ✓ Estimar a densidade, manter as soluções dispersas ao longo da fronteira de *Pareto* através da manipulação de um operador capaz de ter em conta a proximidade das soluções.
- ✓ Arquivar, manter uma população secundária onde as melhores soluções, identificadas anteriormente pelo seu nível de desempenho, estejam retidas a aguardar uma futura incorporação na população principal.

O livro de Goldberg [21] tornou-se um marco dos algoritmos evolutivos e projectou o tratamento de problemas de optimização multi-objectivo. No seguimento das suas ideias foram desenvolvidas e aplicadas inúmeras implementações associadas a problemas do quotidiano.

Não sendo possível enumerar todas as adaptações, far-se-á uma curta referência às principais correntes no campo dos algoritmos evolutivos multi-objectivo.

3.5.1. VEGA

Schafer [32] desenvolveu o chamado “*Vector Evaluated Genetic Algorithms*”, mais conhecido por VEGA. *Schafer* modificou o software GENESIS tendo como objectivo a implementação de um procedimento de selecção original que se repete para

cada objectivo singular até ser formado um conjunto de indivíduos, por objectivo, para reprodução. Posteriormente será feita uma escolha aleatória de indivíduos para a recombinação e mutação.

Verificou-se alguma eficiência em determinadas gerações, mas em alguns casos deixou de executar a pesquisa de alguns indivíduos, especializando assim a população e conduzindo a mesma, após várias gerações, para uma convergência em soluções óptimas individuais.

Para tentar minimizar os efeitos desta especialização, *Schafer* desenvolveu dois processos heurísticos de selecção:

- ✓ *Seleccção heurística não-dominada*, na qual os indivíduos dominados são penalizados com a subtracção de um pequeno valor ao número esperado de cópias durante a selecção. O valor total penalizado é dividido pelos não dominados através da adição ao número de cópias esperado. Será importante analisar a funcionalidade deste algoritmo quando a população tem um pequeno número de indivíduos não-dominados, pois poderão vir a ter um grande valor no desempenho.

- ✓ *Seleccção heurística cruzada*, esta promove o cruzamento de indivíduos especializados de diferentes subgrupos. É feita uma selecção aleatória de um indivíduo que irá cruzar a sua informação com o que se encontrar mais distante de si.

3.5.2. MOGA

O *Multi-objective Optimization Genetic Algorithm* ou MOGA [20] executa um processo de ordenamento não-dominado. Toda a população é verificada e todos os indivíduos não-dominados ocupam uma nova posição, assim como outros serão colocados segundo o número de soluções que os dominam. Desta forma, no final deste processo poder-se-ão encontrar vários indivíduos na mesma posição.

Após a ordenação das soluções será feita uma selecção até se encontrarem indivíduos que irão cruzar-se e formar a geração seguinte.

Ao agrupar os indivíduos por blocos haverá uma maior pressão na selecção, conduzindo o processo para uma convergência prematura.

3.5.3. NPGA

O algoritmo implantado por *Horn e Nafpliotis* [27], *Niched Pareto Genetic Algorithm*, proporciona a inclusão de todos os indivíduos na substituição de uma geração por outra. Este algoritmo manipula e sequencia um procedimento de ordenamento na etapa da selecção. Após a formação um conjunto com um número específico de indivíduos da população, conjunto de comparação, são retirados da população dois indivíduos que irão competir entre si proporcionando a selecção de um vencedor. As duas soluções são equiparadas com os indivíduos do conjunto de comparação para quantificar a dominância segundo as regras: se um deles é não-dominado e o outro dominado, é seleccionado o indivíduo não-dominado; caso os dois sejam não-dominados ou dominados será feita uma contagem do número de soluções que se encontrem a uma dada distância de cada indivíduo. A solução que obtiver a contagem inferior será seleccionada.

A formação do grupo de comparação é a parte mais importante deste algoritmo, visto que o sucesso depende em muito do número de indivíduos a colocar neste grupo. Um pequeno número de indivíduos poderá proporcionar a obtenção de poucas soluções não-dominadas, assim como grupos de comparação extensos podem causar uma convergência prematura do algoritmo.

3.5.4. NSGA

O *Nondominated Sorting Genetic Algorithm* ou NSGA [8,10,17,18], é mais um EMOA tradicional, o qual se baseia num processo de selecção por ordenamento dos indivíduos não-dominados associado à formação de refúgios, de modo manter a diversidade da população.

Para que todos os indivíduos possam ter a mesma probabilidade de intervir na reprodução, é feita uma ordenação das soluções segundo o seu grau de não-dominância, atribuindo, de seguida, aos indivíduos não-dominados altos valores de aptidão, que serão compartilhados entre as soluções não-dominadas com base nas suas distâncias Euclidianas.

Posteriormente, e após serem processados o resto dos membros da população, ao determinar novas soluções não-dominadas será atribuído um valor de aptidão inferior ao pior compartilhado no nível anterior. Este processo repetir-se-á até que todos os indivíduos da população tenham uma aptidão compartilhada e desta forma semelhantes potencialidades de reprodução.

3.5.5. SPEA

Mais recentemente Zitzler e Theile [37] desenvolveram e apresentaram um algoritmo multi-objectivo elitista, o *Strength Pareto Evolutionary Algorithm*, no qual são utilizados conceitos de não dominância.

Este algoritmo assenta, essencialmente, sobre a formação e manipulação de uma população secundária que armazena, desde a geração inicial, um conjunto de soluções não-dominadas. Os indivíduos que formam a população secundária recebem um valor de aptidão fundamentado no número de soluções que dominam, desde que garanta uma procura direccionada para a fronteira não-dominada e permita a diversidade entre indivíduos dominados e não-dominados. Assim sendo, é necessário que não sejam atribuídos piores desempenhos que os verificados nas melhores soluções dominadas. Os indivíduos da população secundária também participam nas operações genéticas previamente estabelecidas

O facto do grau de desempenho ser determinado apenas pelas soluções da população secundária evidencia a ausência de parâmetros de distância.

3.5.6. RPSGA

O *Reduced Pareto Set Genetic Algorithm*, RPSGA, manipula a técnica de agrupamento de soluções, ou seja, reduz o número de soluções na fronteira eficiente, sem no entanto alterar as suas características.

Também baseado no método apresentado por *Roseman e Gero* [30], ligação-completa, este algoritmo estabelece uma comparação entre a proximidade das soluções no *hiper-espaço*, ou seja, a semelhança entre duas soluções é quantificada através de uma medida de distância entre elas, agregando as várias distâncias verificadas em cada critério.

O RPSGA estabelece uma graduação baseada no *fitness* atribuído aos indivíduos, esta graduação irá possibilitar a formação de algumas categorias entre as soluções que formam as populações. Este procedimento assenta em determinadas etapas:

1. Estabelecer o número de categorias graduados, N_{Ranks} , e atribuir a todos os indivíduos i a *categoria 0*, $Rank[i] = 0$;
2. Para a primeira classe, $r = 1$, a população é reduzida a N_R indivíduos, através do agrupamento de soluções;
3. Atribuir a *categoria 1* a estes N_R indivíduos;
4. O algoritmo prossegue para a categoria seguinte, $r = 2$, o ciclo termina quando o número de categorias for igual ao número pré-definido;
5. O *fitness* de cada indivíduo, f_i , é determinado segundo o escalonamento linear:

$$f_i = 2 - SP + \frac{2(SP - 1)(N_{ranks} + 1 - Rank[i])}{N_{ranks}}$$

onde SP define a pressão de selecção ($1 < SP < 2$).

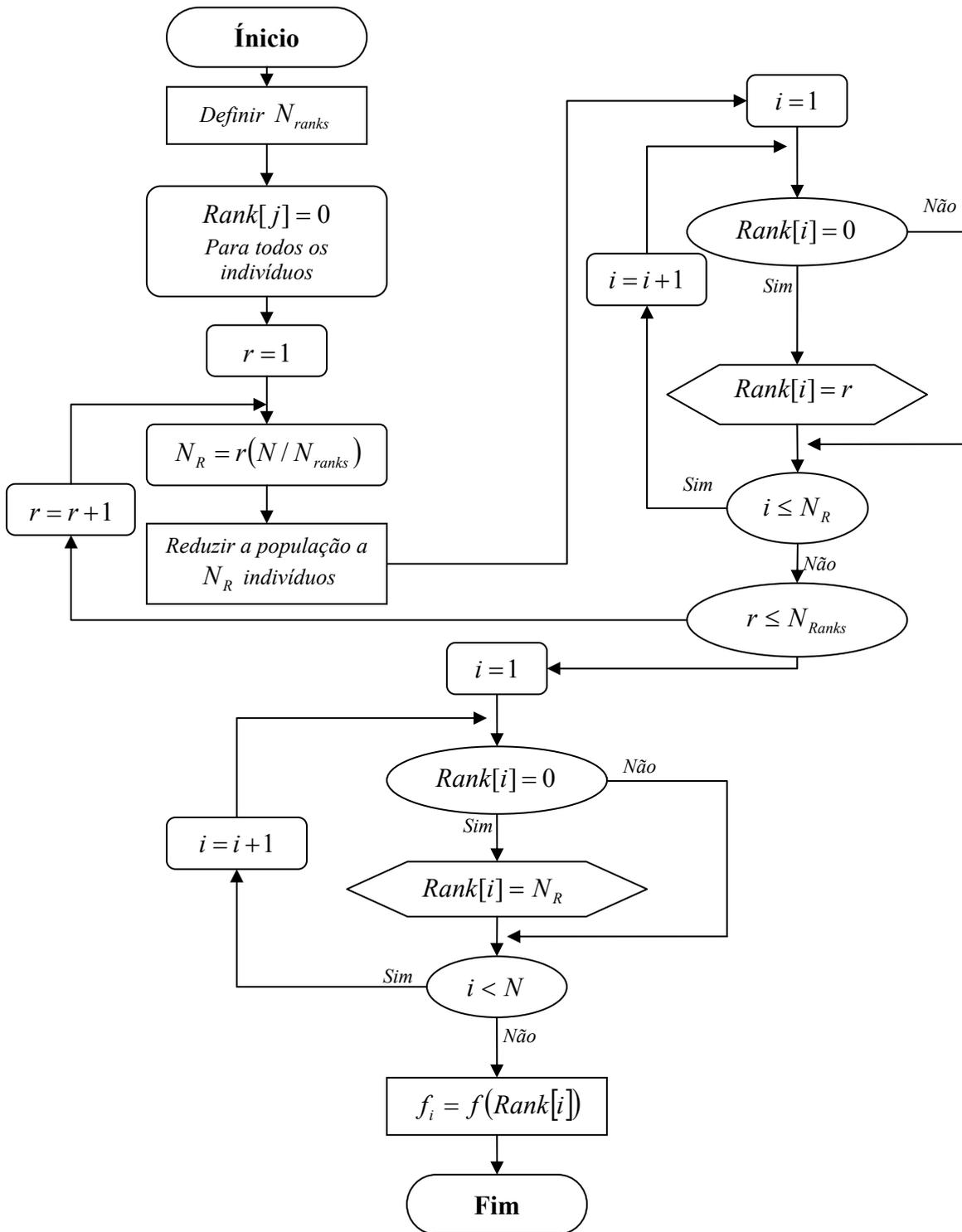


Figura 3.13 – Fluxograma do RPSGA.

Na figura 3.13 poder-se-á visualizar a forma como o algoritmo [9] se desenvolve tendo em conta as diferentes fases por que passa e que estão mencionadas anteriormente.

Sendo o RPSGA o algoritmo modelo deste trabalho, torna-se também necessário referenciar a importância de determinados parâmetros na implementação do algoritmo:

o número de níveis, N_{Ranks} ; a elaboração da população; os intervalos de indiferença; a função objectivo; o número de indivíduos que em cada geração transita da população interna para a externa; o tamanho da população elitista e o número de indivíduos elitistas copiados para a população interna.

4 – Resultados e discussão

4.1. – Dados do estudo

Como foi mencionado anteriormente, o programa iniciará a execução das diversas iterações com base nos dados experimentais da frequência, de G' e de G'' . Estes dados sustentarão uma futura comparação entre os resultados experimentais e os otimizados. A *tabela 4.1* apresenta os dados experimentais de w , G' e G'' , respectivamente a frequência, o módulo elástico e o módulo de dissipação obtidos experimentalmente.

Tabela 4.1 – *Dados experimentais de w , G' e G'' .*

w	G'	G''
1,00000E-01	2,88000E+01	1,54000E+02
1,47000E-01	6,14000E+01	2,45000E+02
2,15000E-01	8,83000E+01	3,55000E+02
3,16000E-01	1,20000E+02	5,08000E+02
4,64000E-01	1,60000E+02	7,27000E+02
6,81000E-01	2,11000E+02	1,04000E+03
1,00000E+00	2,82000E+02	1,48000E+03
1,47000E+00	3,82000E+02	2,10000E+03
2,15000E+00	5,29000E+02	2,99000E+03
3,16000E+00	7,55000E+02	4,24000E+03
4,64000E+00	1,10000E+03	6,01000E+03
6,81000E+00	1,66000E+03	8,48000E+03
1,00000E+01	2,55000E+03	1,19000E+04
1,47000E+01	4,02000E+03	1,65000E+04
2,15000E+01	6,40000E+03	2,27000E+04
3,16000E+01	1,01000E+04	3,05000E+04
4,64000E+01	1,55000E+04	4,01000E+04
6,81000E+01	2,34000E+04	5,19000E+04
1,00000E+02	3,42000E+04	6,57000E+04

Esta base de informação, espectro, será o ponto de partida de toda a funcionalidade do algoritmo genético. O número de variáveis a otimizar depende do tamanho do cromossoma inicialmente proposto, visto que g_i e τ_i encontram-se igualmente distribuídos nos cromossomas. Por exemplo, um cromossoma de *2 pares* implicará a otimização de 4 variáveis. No entanto os valores de partida serão atribuídos aleatoriamente segundo um determinado intervalo de escolha.

Tabela 4.2 – Variáveis a otimizar.

<i>variáveis</i>	<i>mínimo</i>	<i>máximo</i>
g_i	0,0	8,0
τ_i	-5,0	5,0

As soluções otimizadas e que futuramente serão apresentadas, são o resultado de iterações segundo os parâmetros mencionados na *tabela 4.3*.

Tabela 4.3 – Parâmetros do Algoritmo Genético.

<i>Taxa de crossover</i>	0,8
<i>Taxa de mutação</i>	0,05
<i>Razão de mutação</i>	0,08
<i>Taxa de inversão</i>	0,00
<i>Numero máximo de iterações</i>	100
<i>Comprimento das populações</i>	100

A cada indivíduo da população será atribuído um *erro* e uma *diferença* relativamente aos dados experimentais. Estes serão os parâmetros da função objectivo, os quais irão permitir, após uma análise gráfica, identificar os indivíduos que apresentam um melhor desempenho.

4.2 – Análise estatística dos resultados

Numa primeira fase do estudo procurou-se analisar estatisticamente todos os resultados do *erro* e da *diferença*, estabelecendo uma relação entre eles e, se possível, promover uma primeira filtragem dos melhores indivíduos. Após executar o programa para cromossomas de 2, 3, 4, 5 e 6 *pares* e com a ajuda da ferramenta *SPSS 14.0*, verificou-se que as variáveis erro e diferença não têm uma distribuição de valores normal.

Como se pode constatar na *tabela 4.4*, os valores obtidos pela taxa de validação *sig.* confirmam a não normalidade das distribuições das duas variáveis.

Tabela 4.4 – Teste de normalidade das variáveis erro e diferença.

	<i>Kolmogorov-Smirnov</i>			<i>Shapiro-Wilk</i>		
	<i>Statistic</i>	<i>df</i>	<i>Sig.</i>	<i>Statistic</i>	<i>df</i>	<i>Sig.</i>
<i>erro</i>	0,374	255	0,000	0,593	255	0,000
<i>diferença</i>	0,438	255	0,000	0,555	255	0,000

Com um *sig* assim tão baixo verifica-se que a distribuição das soluções não é normal, mas, na representação e relação entre todos os resultados do erro e os *quartis* verificados, *figura 4.1*, conhecido como *gráfico de bigodes*, poder-se-ão identificar alguns resultados que distam de um padrão mais comum, ou seja, estão fora de uma linha comum, *outliers*.

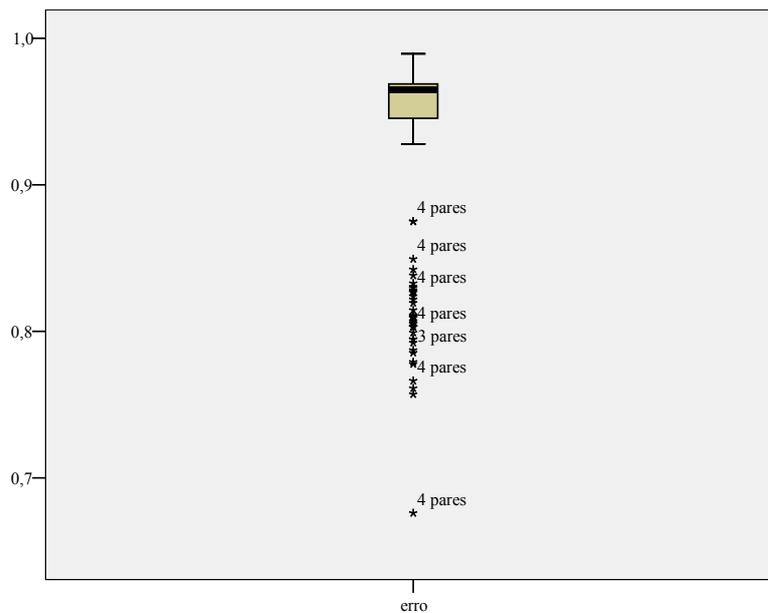


Figura 4.1 – Distribuição da variável erro.

Com base na *figura 4.1* pode-se concluir que alguns cromossomas de 3 e 4 *pares* apresentam um erro inferior à normalidade dos indivíduos que formam a população final. Após estas observações sobre os valores obtidos para a variável erro surge a necessidade de analisar o comportamento da diferença.

Para os mesmos indivíduos, a variável diferença apresenta um conjunto de valores que se distribuem de modo semelhante aos do erro.

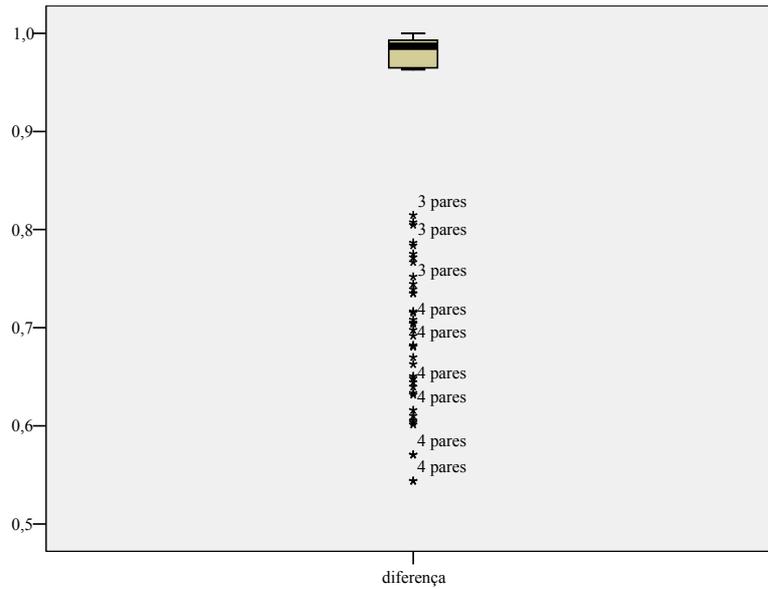


figura 4.2 – Distribuição da variável diferença.

Desta forma, possivelmente, os indivíduos com *erro* e *diferença* menores encontram-se nos grupos de 3 e 4 pares. Para sustentar esta hipótese, é importante analisar o comportamento das variáveis para os diferentes tamanhos dos cromossomas.

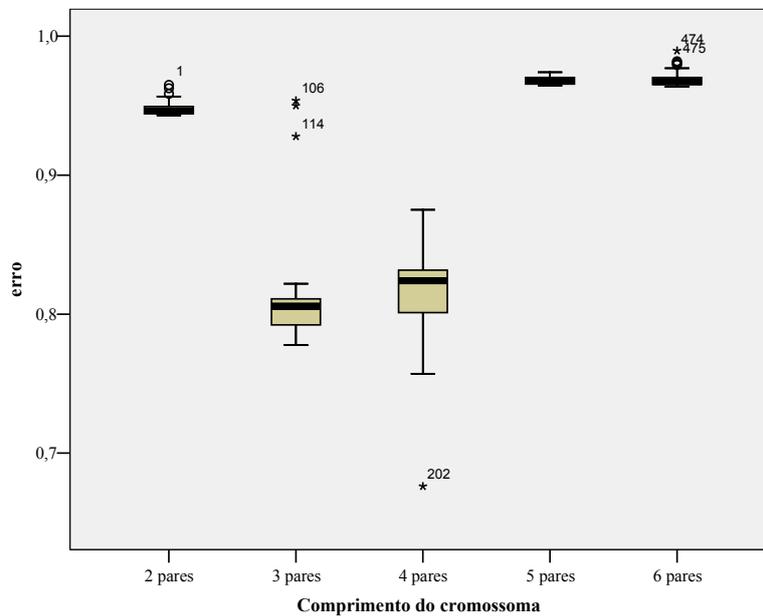


Figura 4.3 – Distribuição da variável erro para os 5 comprimentos dos cromossomas.

As *figuras 4.3* e *4.4* reforçam a ideia que os valores mais baixos do *erro* e da *diferença* são obtidos pelos cromossomas de 3 e 4 pares.

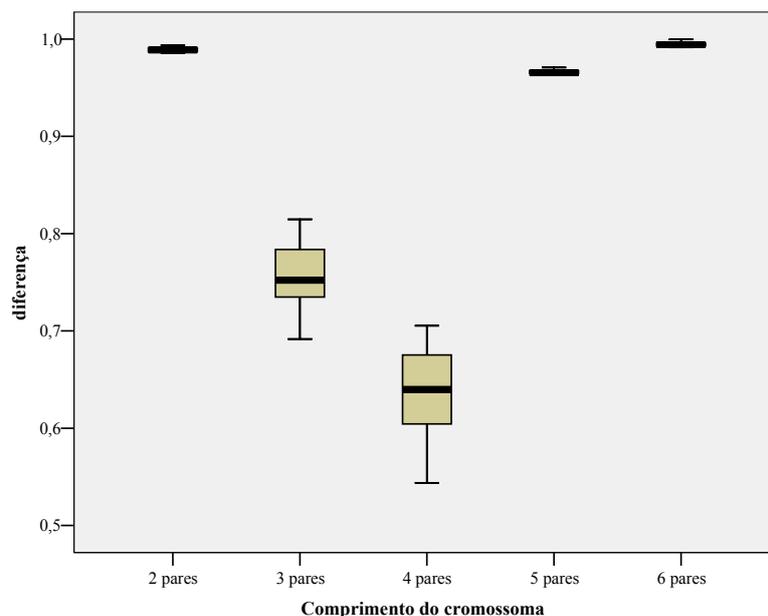


Figura 4.4 – Distribuição da variável diferença para os 5 comprimentos dos cromossomas

Para finalizar a análise deste ponto, torna-se importante verificar a importância do tamanho dos cromossomas para as variáveis *erro* e *diferença*. Utilizando o teste de *Kruskal-Wallis* rejeita-se a hipótese da não existência de diferenças significativas entre os indivíduos com tamanhos distintos.

	<i>erro</i>	<i>diferença</i>
<i>Chi-Square</i>	190,178	233,546
<i>df</i>	4	4
<i>Asymp. Sig.</i>	0,000	0,000

Tabela 4.5 – Teste de *Kruskal-Wallis*

Tendo como base a *tabela 4.5* poder-se-á afirmar que os resultados do *erro* e da *diferença* variam segundo o tamanho do cromossoma. As linhas sombreadas da *tabela 4.6* confirmam a ideia de que os cromossomas de 3 e 4 *pares* apresentam erros e diferenças mais baixos, no entanto, ainda não estamos em situação de adiantar que estes são os cromossomas com melhor desempenho no contexto do nosso problema.

Tabela 4.6 – Resultados do erro e a diferença para os tamanhos de cromossomas testados

	Erro			Diferença		
	Média	Mínimo	Máximo	Média	Mínimo	Máximo
2 pares	0,94760225	0,94310408	0,96483663	0,98909793	0,98575150	0,99371327
3 pares	0,82473891	0,77766200	0,95365372	0,75579794	0,69170791	0,81467422
4 pares	0,81233860	0,67602819	0,87508405	0,63468321	0,54390142	0,70529309
5 pares	0,96821670	0,96426172	0,97410809	0,96606840	0,96299406	0,97076838
6 pares	0,96865218	0,96352811	0,98949169	0,99461541	0,99155956	0,99971907

Uma análise gráfica da relação entre as duas variáveis possibilitará estabelecer uma relação entre ambas. No gráfico da *figura 4.5* constata-se que os cromossomas com 3 e 4 *pares* apresentam-se com valores mais baixos, mas não se deslumbra qualquer relação pois os pontos encontram-se dispersos. Mas, excluindo determinados pontos poder-se-á estabelecer uma ligeira linearidade com declive negativo para cada um dos dois grupos de valores.

Quanto aos cromossomas com 2, 5 e 6 *pares*, as variáveis *erro* e *diferença* definem uma curva hiperbólica associada à proporcionalidade inversa, o aumento de uma variável implica a diminuição da outra. Ou seja, os indivíduos com diferença mais baixa apresentam valores para o erro mais alto e vice versa.

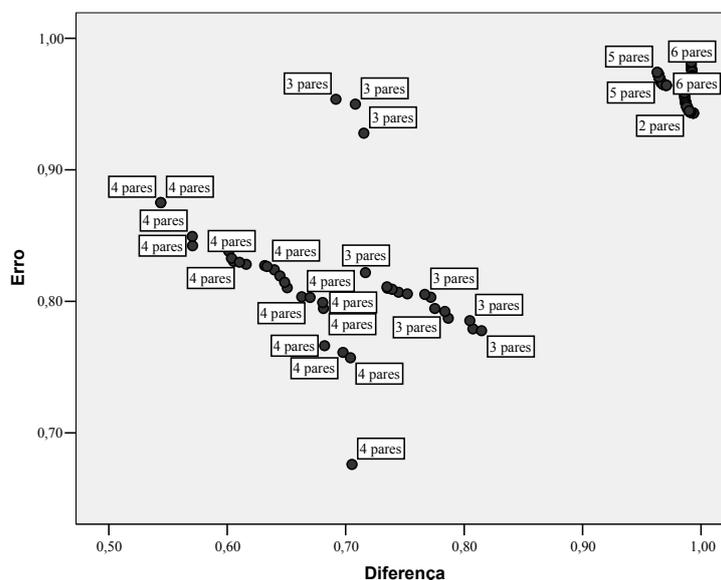


Figura 4.5 – Representação gráfica do erro e da diferença para os tamanhos dos cromossomas estudados.

Como se pode constatar na *figura 4.5* os valores dos indivíduos com 2, 5 e 6 *pares* encontram-se mais próximos uns dos outros.

4.3 – Espectro de relaxação

Identificados os grupos dos indivíduos e as soluções que representam, o estudo prossegue para o cálculo do espectro de relaxação através dos indivíduos otimizados e segundo o tamanho dos cromossomas.

A escolha dos cromossomas será suportada pelos desempenhos que cada um apresenta. Para os diferentes comprimentos, serão seleccionados três indivíduos segundo as seguintes características: a maior diferença; o maior erro e um erro e diferença intermédios. Após o cálculo de G' e G'' para uma frequência inicialmente proposta, *tabela 4.1*, seguir-se-á a representação gráfica dos espectros experimentais e dos otimizados. A aprovação das melhores soluções será também suportada pelo cálculo da norma entre o espectro experimental e os otimizados.

Nesta fase do estudo, vamos analisar os espectros G' e G'' separadamente. Inicialmente desenvolver-se-á a procura do conjunto de indivíduos que apresenta a melhor aproximação a G' obtido experimentalmente.

Para os diferentes comprimentos estudados serão utilizados os seguintes vectores:

$$\text{Frequência: } (w_i) = (w_1, w_2, \dots, w_n)$$

$$G' \text{ inicial: } (x'_i) = (x'_1, x'_2, \dots, x'_n)$$

$$G' \text{ otimizado: } (y'_i) = (y'_1, y'_2, \dots, y'_n)$$

com $i \in \{1, 2, \dots, n\}$.

A *tabela 4.7* apresenta os cálculos para duas normas, a soma da diferença entre cada ponto e a raiz quadrada da soma dos quadrados das diferenças entre cada ponto para os espectros relacionados com os indivíduos que registaram maior diferença, maior erro e ambos intermédios.

Tabela 4.7 – Normas entre os espectros de G' , otimizados e experimentais.

		$\sum_{i=1}^n x_i - y_i $	$\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}$
2 pares	<i>Diferença máxima</i>	9,5307E+05	2,5441E+05
	<i>Erro máximo</i>	1,5989E+06	4,2633E+05
	<i>Intermédios</i>	1,1609E+06	3,0957E+05
3 pares	<i>Diferença máxima</i>	6,3867E+06	1,7079E+06
	<i>Erro máximo</i>	7,2925E+06	1,9504E+06
	<i>Intermédios</i>	4,3727E+06	1,1684E+06
4 pares	<i>Diferença máxima</i>	4,6998E+06	1,2559E+06
	<i>Erro máximo</i>	1,7509E+07	4,6871E+06
	<i>Intermédios</i>	8,9450E+06	2,3930E+06
5 pares	<i>Diferença máxima</i>	<u>9,4982E+05</u>	<u>2,5355E+05</u>
	<i>Erro máximo</i>	1,3339E+06	3,5565E+05
	<i>Intermédios</i>	1,1128E+06	2,9678E+05
6 pares	<i>Diferença máxima</i>	2,8040E+06	6,5616E+05
	<i>Erro máximo</i>	1,5516E+06	4,0984E+05
	<i>Intermédios</i>	1,1613E+06	3,0906E+05

Tendo como base os valores apresentados na *tabela 4.7* poder-se-á afirmar que os cromossomas com 3 e 4 *pares* registam as distâncias mais significativas. Não deixa de ser relevante que o conjunto dos indivíduos com *erro* e *diferença* menores apresenta o desempenho menos satisfatório quando calculado o G' respectivo. Esta observação poderá por em causa a importância de valores inferiores para o *erro* e a *diferença*.

Mas, ainda é possível adiantar mais. Geralmente, os indivíduos que apresentam distâncias, normas, menores são os que têm a maior *diferença* e o respectivo *erro* menor. Assim como, dos valores otimizados, os que mais se aproximam dos valores experimentais são os cromossomas com 2 ou 5 *pares*. A diferença entre as distâncias verificadas nestes dois grupos não é muito significativa, no entanto, cruzando os valores, verifica-se que os cromossomas com 5 *pares* apresentam normas inferiores nas três situações analisadas em cada um dos cinco comprimentos.

Partindo do pressuposto que os valores mais próximos do G' experimental resultam de cromossomas com 5 *pares*, passa a ser importante analisar o desempenho deste conjunto de indivíduos para o espectro G'' . A *tabela 4.8* permite, estabelecer uma

comparação entre os desempenhos dos cromossomas de diferentes tamanhos, desta vez para as soluções de G'' otimizados pelo algoritmo genético.

Tabela 4.8 – Normas entre os espectros de G'' , otimizados e experimentais.

		$\sum_{i=1}^n x_i - y_i $	$\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}$
2 pares	<i>Diferença máxima</i>	4,8700E+05	1,3196E+05
	<i>Erro máximo</i>	6,5886E+05	1,7501E+05
	<i>Intermédios</i>	5,4145E+05	1,4461E+05
3 pares	<i>Diferença máxima</i>	2,0306E+06	5,8700E+05
	<i>Erro máximo</i>	2,2989E+06	6,6832E+05
	<i>Intermédios</i>	1,4456E+06	4,0757E+05
4 pares	<i>Diferença máxima</i>	1,5399E+06	4,3638E+05
	<i>Erro máximo</i>	5,3553E+06	1,5941E+06
	<i>Intermédios</i>	2,7886E+06	8,1732E+05
5 pares	<i>Diferença máxima</i>	4,8606E+05	1,3174E+05
	<i>Erro máximo</i>	5,8598E+05	1,5592E+05
	<i>Intermédios</i>	5,2881E+05	1,4154E+05
6 pares	<i>Diferença máxima</i>	<u>4,8590E+05</u>	<u>1,3170E+05</u>
	<i>Erro máximo</i>	6,3016E+05	1,6747E+05
	<i>Intermédios</i>	5,3963E+05	1,4411E+05

Tal como se verificou para os valores de G' , os cromossomas com normas superiores voltam a ser os de 3 e 4 *pares*, reforçando a ideia que os melhores indivíduos não são os que estão associados com erros e diferenças menores. Mas, não deixa de ser verdade que para G' e G'' , os indivíduos com maior erro apresentam sempre as normas maiores. O critério do *erro máximo* deixa então de ser um recurso na identificação dos melhores indivíduos.

Numa nova análise das *tabelas 4.7 e 4.8* constata-se que somente no conjunto dos cromossomas de 3 *pares* as normas menores não estão associadas a indivíduos com uma diferença máxima, critério esse que também não foi verificado nos cromossomas de 6 *pares* para os valores de G' . Nas restantes situações o factor *diferença máxima* está relacionado com a obtenção das menores normas, isto é, na maior parte dos grupos de estudo, os cromossomas com maior diferença são os que mais aproximam os valores otimizados dos experimentais.

Para os valores G'' , o tamanho *6 pares* é o que apresenta menores normas, contrariando desta forma os resultados de G' . No entanto, os cromossomas de *5 pares* não apresentam uma norma significativamente superior,

$$131742,8526 - 131697,3499 = 45,50268744$$

comparada com a diferença verificada em G' ,

$$656162,0221 - 253547,7008 = 402614,3213,$$

onde o tamanho *5 pares* se apresenta mais próximo dos dados experimentais. Facilmente se constata que a diferença verificada nos resultados de G'' é insignificante tendo em conta a incompatibilidade verificada em G' .

Sabendo que o indivíduo que se pretende obter deve apresentar um conjunto de resultados que permitam o cálculo de um G' e G'' o mais próximo possível dos dados experimentais, o conjunto dos cromossomas de *5 pares* apresenta-se como o próximo ponto da nossa busca, sem colocar de parte os valores apresentados nas *tabelas 4.7 e 4.8*.

Após a execução do algoritmo genético sobre uma população inicial de cromossomas de *5 pares*, obteve-se à centésima iteração um conjunto óptimo de 79 indivíduos, em 100, associados aos valores do erro e diferença que irão condicionar a escolha do ou dos indivíduos com melhor desempenho.

Tabela 4.9 – Resultados do erro e da diferença para cromossomas de 5 pares.

	<i>Mínimo</i>	<i>Média</i>	<i>Máximo</i>
Erro	0,96426	0,96822	0,97411
Diferença	0,96299	0,96607	0,97077

A *tabela 4.9* permite verificar que os intervalos nos quais variam o erro e a diferença são relativamente curtos e intersectam-se.

$$[erro_{\min}, erro_{\max}] \cap [diferença_{\min}, diferença_{\max}] \neq \emptyset$$

Assim como as médias se encontram relativamente próximas.

A *figura 4.6* permite uma melhor visualização dos pontos que irão proporcionar a localização de um conjunto de soluções óptimas.

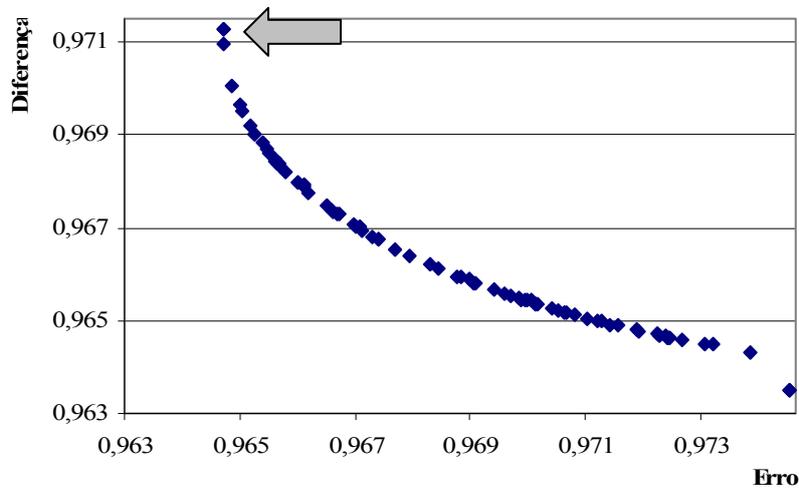


Figura 4.6 – Relação entre o erro e a diferença dos indivíduos de 5 pares.

Os valores apresentados nas tabelas 4.7 e 4.8 sugerem que para cromossomas de 5 *pares* os resultados mais próximos dos experimentais estão associados aos máximos da diferença, respectivamente mínimos de erro. No *gráfico 4.6* está localizado o indivíduo com maior diferença, aproximadamente 0,9708, o qual tem a seguinte estrutura:

Tabela 4.10 – Estrutura do cromossoma com maior diferença.

4,92299	0,01048	0,10536	-1,57522	0,69691	-2,91243	0,14971	-0,05114	3,27577	-3,76669
---------	---------	---------	----------	---------	----------	---------	----------	---------	----------

Estas soluções resultam de uma transformação logarítmica de base 10, de modo a garantir as exigências computacionais, por isso, serão objecto de uma nova adulteração. O vector correcto será o resultado de uma potência de base 10, preenchido por valores fisicamente enquadrados nas características das variáveis g_i e τ_i .

Tabela 4.11 – Soluções que proporcionarão o cálculo do espectro.

g_i	τ_i								
8,375E+04	1,024E+00	1,275E+00	2,659E-02	4,976E+00	1,223E-03	1,412E+00	8,889E-01	1,887E+03	1,711E-04

Com estes resultados e com os dados da frequência, *tabela 4.1*, estão reunidas as condições para determinar G' e G'' , utilizando para tal as condições:

$$G'(w) = \sum_{i=1}^M g_i \frac{w^2 \tau_i^2}{1 + w^2 \tau_i^2} \quad (4.1)$$

$$G''(w) = \sum_{i=1}^M g_i \frac{w \tau_i}{1 + w^2 \tau_i^2} \quad (4.2)$$

Ao utilizar a fórmula (4.1) é determinado um novo vector para o módulo elástico, o qual resulta do algoritmo genético e está representado no gráfico da *figura 4.7*, juntamente com os dados experimentais referidos na *tabela 4.1*.

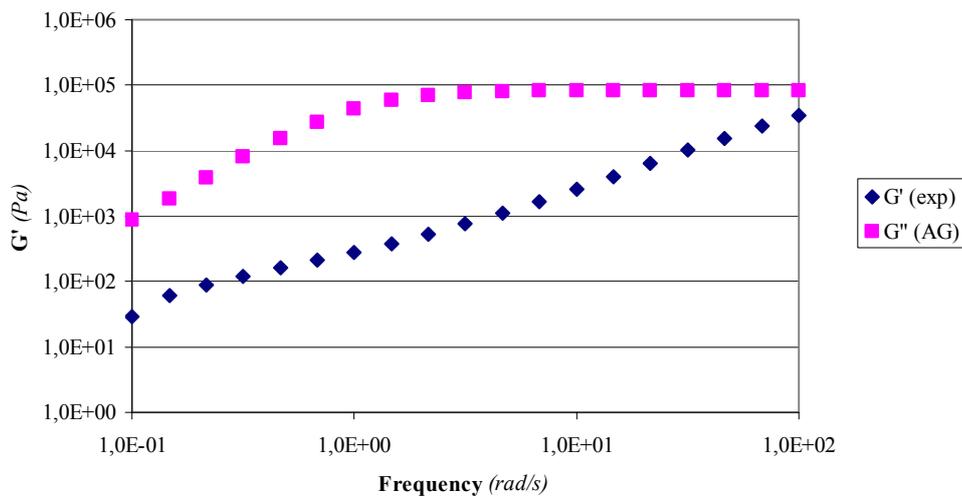


Figura 4.7 – Representação do G' , experimental e otimizado.

Graficamente não deixa de ser evidente um afastamento dos pontos para valores intermédios da frequência, mas, dos analisados, estes são os que mais se aproximam, como comprova a *tabela 4.7*.

Utilizando agora a equação (4.2) e seguindo o procedimento referido anteriormente, é obtido um novo vector para G'' .

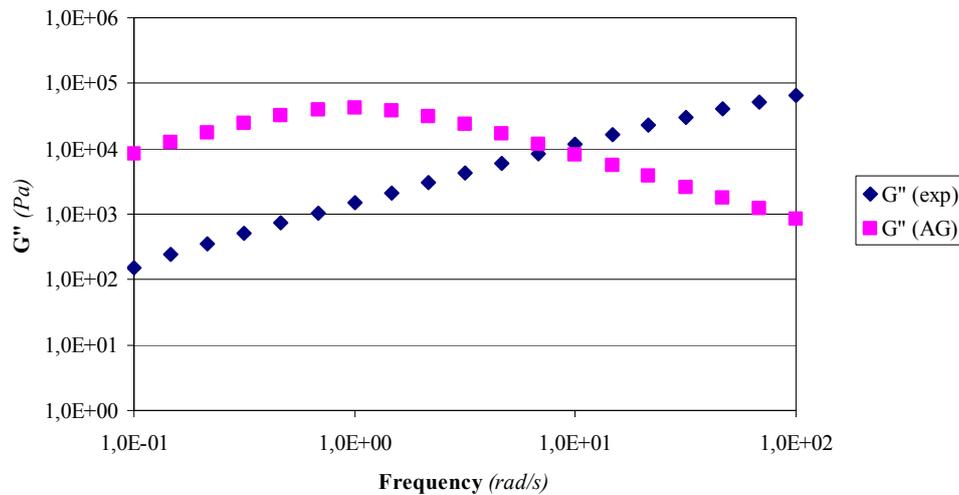


Figura 4.8 – Representação do G'' , experimental e otimizado.

Se os pontos para determinadas frequências se encontram satisfatoriamente próximos, também não deixa de ser verdade que para outros valores da frequência os registos insistem em se afastarem.

Posto isto, torna-se necessário referir que para os dados recolhidos experimentalmente, o algoritmo genético produziu distintas populações para distintos tamanhos de indivíduos. Destes, com base no cálculo das normas, verificou-se que na maior parte dos casos a diferença máxima localiza os melhores desempenhos, assim como o tamanho que proporciona uma maior aproximação entre os dados experimentais apresentados e os agora otimizados é o de *5 pares*.

A consecução das conclusões sobre as soluções que foram optimizadas segundo o espectro da *tabela 4.1* abriu novas linhas de investigação. Essencialmente torna-se necessário verificar o comportamento dos algoritmos genéticos num outro conjunto de dados experimentais.

Os vectores experimentais da *tabela 4.12* serviram de suporte para uma nova execução do algoritmo, o qual irá expulsar soluções optimizadas que permitirão o cálculo de novos espectros de G' e G'' . Posteriormente este novo conjunto de soluções será mais uma vez comparado com os dados experimentais, *tabela 4.12*.

Tabela 4.12 – Espectros experimentais de w , G' e G'' .

w	G'	G''
1,0000E-01	7,3242E+00	4,6950E+02
1,3700E-01	1,3646E+01	6,4247E+02
1,8700E-01	2,5083E+01	8,7512E+02
2,5700E-01	4,6199E+01	1,1981E+03
3,5100E-01	8,2454E+01	1,6257E+03
4,8100E-01	1,4339E+02	2,2038E+03
6,5800E-01	2,3704E+02	2,9668E+03
9,0100E-01	3,6952E+02	3,9784E+03
1,2300E+00	5,4130E+02	5,3087E+03
1,6900E+00	7,7140E+02	7,1391E+03
2,3100E+00	1,0979E+03	9,5924E+03
3,1600E+00	1,6290E+03	1,2943E+04
4,3300E+00	2,5651E+03	1,7510E+04
5,9300E+00	4,2480E+03	2,3603E+04
8,1100E+00	7,2429E+03	3,1507E+04
1,1100E+01	1,2457E+04	4,1389E+04
1,5200E+01	2,1064E+04	5,2865E+04
2,0800E+01	3,4060E+04	6,4645E+04
2,8500E+01	5,1652E+04	7,4802E+04
3,9000E+01	7,2426E+04	8,1504E+04
5,3400E+01	9,4670E+04	8,4278E+04
7,3100E+01	1,1711E+05	8,3302E+04
1,0000E+02	1,3875E+05	7,8476E+04

Os números inseridos na *tabela 4.12* vão ser comparados com o conjunto de resultados que se irá obter na execução do algoritmo genético adaptado aos 5 tamanhos de cromossomas anteriormente mencionados.

Sabendo que o factor *diferença máxima* foi o que obteve, no estudo anterior, grande parte de normas menores e que o *erro máximo* obteve um desempenho contrário, ir-se-á aproveitar uma comparação gráfica entre o indivíduo com maior diferença e um outro representante do conjunto óptimo de Pareto, isto para todos os tipos de cromossomas.

No gráfico da *figura 4.9* pode-se observar os dados experimentais de G' representados conjuntamente com as soluções encontradas. Os resultados não experimentais resultam de indivíduos de diferentes tamanhos, como consta na legenda, mas que nas suas populações apresentaram maiores diferenças.

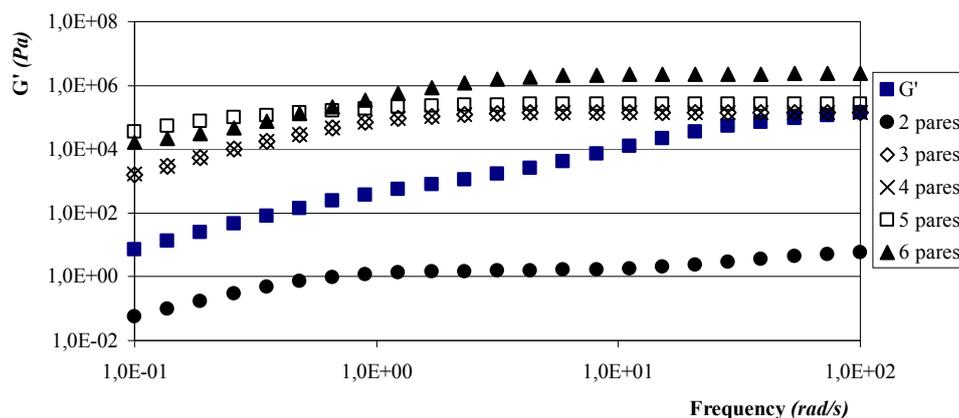


Figura 4.9 – Representação do G' dos indivíduos com maiores diferenças.

Relativamente aos indivíduos com 3 e 4 *pares* constata-se que apresentam desempenhos bastante similares e que com o aumento da frequência se aproximam dos dados experimentais. Comportamento idêntico têm os cromossomas com 5 e 6 *pares*, mas para frequências baixas estes indivíduos apresentam resultados um pouco mais distantes dos experimentais. Os indivíduos com *dois pares* apresentam soluções não tão próximas e inferiores aos dados que serviram de suporte neste estudo.

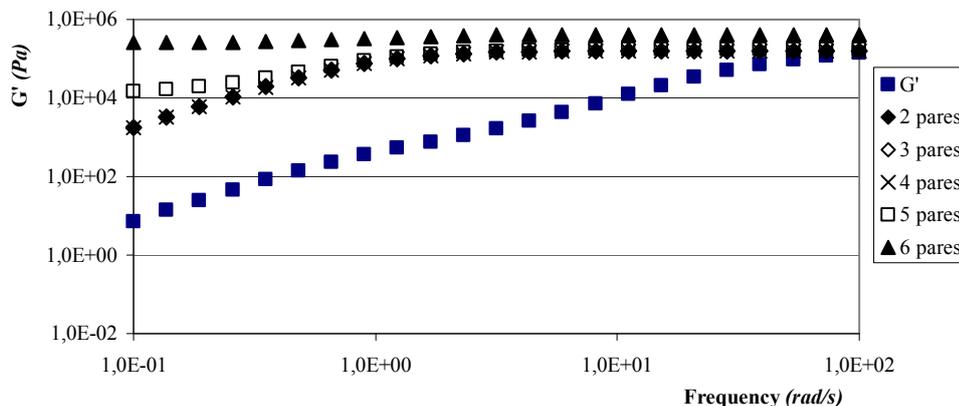


Figura 4.10 – Representação do G' dos representantes dos conjuntos ótimos.

Na *figura 4.10* verifica-se que com o aumento da frequência o conjunto das soluções optimizadas converge para os dados iniciais. No entanto os indivíduos formados por 6 *pares* são os que apresentam resultados mais distantes dos experimentais.

Os cromossomas com 3 e 4 *pares* continuam a ter desempenhos similares e a ser os que mais se aproximam dos dados introduzidos, tendo nestes representantes de soluções de Pareto a companhia dos indivíduos com 2 e 5 *pares*.

Com base nos gráficos das figuras 4.9 e 4.10 pode-se concluir que os indivíduos representativos dos cinco conjuntos óptimos de Pareto não só apresentam desempenhos mais próximos entre si como no geral se aproximam mais dos dados experimentais. Também se deve acrescentar que o comportamento dos cromossomas com tamanho intermédio não difere muito entre as duas condições, *diferença máxima* e *soluções de Pareto*, principalmente os de 3 e 4 *pares*.

Torna-se agora importante verificar o desempenho dos mesmos indivíduos para os valores de G'' .

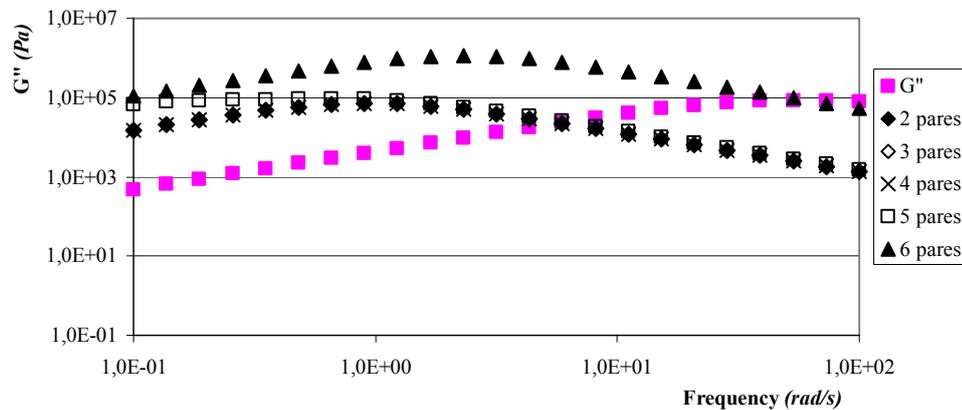


Figura 4.11 – Representação do G'' dos indivíduos com maiores diferenças.

Segundo a *figura 4.11*, para as soluções optimizadas de G'' dos indivíduos com maior diferença não se verificam desempenhos semelhantes aos de G' nas mesmas condições, *figura 4.9*, existe alguma conformidade. Os cromossomas de 6 *pares* são os que mais se afastam dos dados experimentais, enquanto que os restantes tamanhos se apresentam relativamente encaixados.

Para finalizar este estudo comparativo falta analisar o comportamento dos indivíduos de diferentes tamanhos que representam os respectivos conjuntos de soluções óptimas.

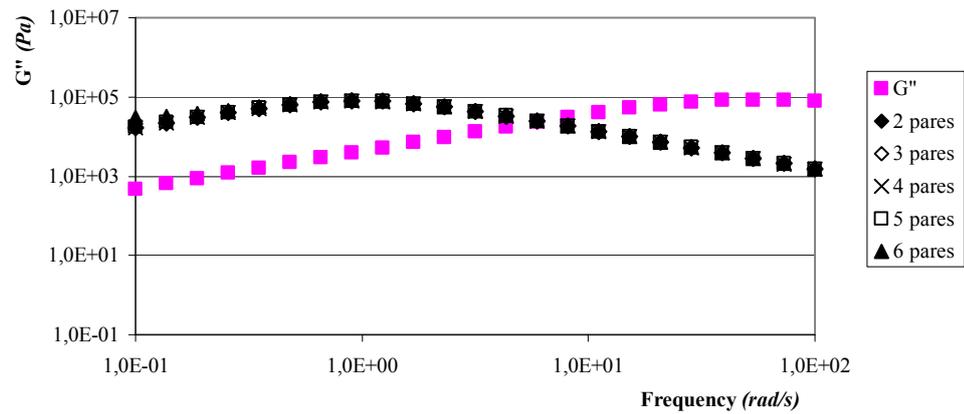


Figura 4.12 – Representação do G'' dos representantes dos conjuntos ótimos.

Algo surpreendente os resultados representados no gráfico da *figura 4.12*. A uniformidade entre os cinco tamanhos e a relativa aproximação aos valores experimentais vem reforçar o que foi mencionado para G' . Os indivíduos que representam os conjuntos ótimos de Pareto dão mais garantias, minimizam a problemática do tamanho dos cromossomas pois tanto para G' como G'' , cromossomas de diferentes tamanhos têm valores similares.

5 – Conclusões

Inicialmente, neste trabalho foi apresentado um problema mal formulado, relacionado com o cálculo do espectro de relaxação através de dados experimentais. Tal como outros, este tipo de problemas espera uma resolução através de conjuntos de soluções que tendem a convergir para intervalos óptimos. O problema abordado prende-se com a determinação do espectro de relaxação a partir das funções dinâmicas.

Constatou-se que são utilizadas diferentes formas de regularização, sob a condição de determinar G' e G'' através do espectro $\{\tau_i, g_i, i = 1 \dots N\}$ para um determinado valor de N que também se pretende analisar.

A ferramenta utilizada na procura da ou das soluções óptimas pretendidas foram os Algoritmos Genéticos. Este tipo de algoritmos têm como ponto de partida um conjunto de potenciais soluções com tamanho N , previamente estabelecido, as quais serão avaliadas segundo as equações (2.32) e (2.33). Posteriormente, e dependendo do seu desempenho, os indivíduos serão seleccionados, recombinados e modificados segundo os parâmetros do algoritmo estipulados previamente. As várias iterações terminam ao serem encontrados bons indivíduos ou após um determinado número de gerações, quantidade essa atribuída também inicialmente.

A cada indivíduo da última geração, o *output* associou um valor para o *erro* e um outro para a *diferença*. Estes valores constituíram, também, a base que suportou o estudo estatístico que procurava quantificar as diferenças de aptidão entre indivíduos de tamanhos diferentes e identificar qual ou quais seriam os tamanhos ideais para os indivíduos.

Após a execução do programa para dois espectros obtidos experimentalmente, passou-se a análise e discussão dos valores obtidos. Inicialmente o estudo estatístico, entre outras coisas, permitiu verificar que indivíduos com *erro* e *diferença* menor encontram-se entre os vectores de 3 e 4 *pares*, ou seja, um N igual a 3 ou 4. No entanto, desconhecia-se nesta altura se estes seriam ou não os indivíduos com melhor desempenho, isto é, os que representam as melhores soluções.

Seleccionados alguns indivíduos, segundo o *maior erro*, *maior diferença* ou *erro e diferença intermédios*, critérios definidos no capítulo antecedente, determinou-se os valores de G' e G'' , utilizando-se para tal a frequência inicial e as equações (2.30) e

(2.31). Após a obtenção deste novo espectro foi possível calcular normas entre estes valores e os valores experimentais.

As normas permitiram concluir que os indivíduos com maior aproximação aos valores experimentais são os que, na maior parte dos casos, se encontram associados a maiores diferenças e menores erros, podendo ser este um possível critério a adoptar futuramente.

Posteriormente, utilizou-se um outro conjunto de valores para elaborar um estudo gráfico que cruzou a variável tamanho de cada indivíduo com a forma com que este foi seleccionado, ou seja, indivíduo com diferença máxima ou indivíduo representativo de um conjunto de soluções óptimas de Pareto. Nesta fase final do trabalho constatou-se que os indivíduos extraídos dos conjuntos óptimos apresentaram desempenhos análogos, minimizando assim a importância da variável tamanho dos códigos. Os valores dos indivíduos com diferença máxima apresentaram-se algo dispersos, mas sustentaram alguma uniformidade entre os indivíduos com tamanhos intermédios.

Findado este trabalho conclui-se que os indivíduos que formam o conjunto de soluções de Pareto são os que mais aproximam os valores otimizados resultantes dos diferentes tamanhos, e que os cromossomas com tamanhos intermédios são os que codificam os valores mais próximas dos espectros experimentais.

Referências

1. Bertero, M. & Boccacci, P. (1998). *Introduction to Inverse Problems in Imaging*. Institute of Physics Publishing.
2. Blickle, T. & Thiele, L. (1995). *A comparison of Selection Schemes used in Genetic Algorithms*. Report nº 11, Computer Engineering and Communication Networks Lab. (Tik), Swiss Federal Institute of Technology.
3. Blickle, T. (1996). *Theory of Evolutionary Algorithms And Application to System Synthesis*, dissertação de doutoramento. Swiss Federal Institute of Technology, Zurique.
4. Brabec, C.J.; Rögl, H. & Schausberg, A. (1997). *Investigation of relaxation properties of polymer melts by comparison of relaxation time spectra calculated with different algorithms*. Rheological Acta, 36, 667-676. Steinkopff Verlag.
5. Cantú-Paz, E. (1995). *A Summary of Research on Parallel Genetic Algorithms*. IlliGal Report, 95007.
6. Courant, R. & Hilbert, D. (1989). *Methods of Mathematical Physics*, volume II. John Wiley & Sons.
7. Covas, J.A.; Cunha, A.G. & Oliveira, P. (1999). *An Optimization Approach to Practical Problems in Plasticating Single Screw Extrusion*. Reprinted From Polymer Engineering and Science, Vol. 39, 3.
8. Cunha, A.G.L. (1999). *Modelling and Optimisation of Single Screw Extrusion*. Tese para a obtenção do grau de Doutor em Ciência e Engenharia de Polímeros, Universidade do Minho.
9. Cunha, A.G. & Covas, J.A.. *RPSGAe – Reduced Pareto Set Genetic Algorithm: Application to Polymer Extrusion*. Dept. of Polymer Engineering, University of Minho.
10. Cunha, A.G.; Oliveira, P. & Covas, J. (1997). *Use of Genetic Algorithms in Multicriteria Optimization to Solve Industrial Problems*. Proceedings of the Seventh International Conference on Genetic Algorithms, Morgan Kaufmann, 682-688.
11. Davies, A.R. & Anderssen, R.S. (1997). *Sampling localization in determining the relaxation spectrum*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 73, 163-179. Elsevier Science B. V..
12. Davies, A.R. & Anderssen, R.S. (1998). *Sampling localization and duality algorithms in practice*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 79, 235-253. Elsevier Science B. V..

13. Davies, A.R. & Anderssen, R.S. (2001). *Simple moving-average formulae for the direct recovery of the relaxation spectrum*. The Society of Rheological, Inc. Journal Rheological, 45(1).
14. Davis, L. (1991). *Handbook of Genetic Algorithms*. Van Nostrand Reinhold.
15. De Jong, K.A. (1975). *An Analysis of the Behavior of a class of Genetic Adaptive System*. Ph. D. dissertation, University of Michigan.
16. Deb, K. (2001). *Multiobjective optimization using Evolutionary Algorithms*. John Wiley & Sons.
17. Deb, K.; Agrawal, S.; Pratap, A. & Meyarivan, T. (2000). *A Fast Elitist Non-dominated Sorting Genetic Algorithm for Multi-Objective Optimisation: NSGAI*. Proceed-ings of the Parallel Problem Solving From Nature VI, 849-858.
18. Deb, K.; Pratap, A.; Agrawal, S. & Meyarivan, T. (2002). *A Fast and Elitist Multi-Objective Genetic Algorithm: NSGAI*. IEEE Transactions on Evolutionary Computation 6, 182-197.
19. Ferry, J. D. (1970). *Viscoelastic Properties of Polymers* (2nd ed.). Wiley.
20. Fonseca, C.M. & Fleming, P.J. (1993). *Genetic Algorithms of Multiojective Optimization: Formulation, Discussion and Generalization*. Proc. Fifth Int. Conf. on Genetic Algorithms, 416-423.
21. Goldberg, D.E. (1989). *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Adison-Wesley.
22. Hadamard, J. (1902). *Bulletin University Princeton*, 13.
23. Hadamard, J. (1923). *Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equation*. Yale University Press.
24. Holland, J.H. (1975). *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. University of Michigan Press.
25. Honerkamp, J & Weese, Jürgen (1989). *Determination of the relaxation spectrum by a regularization method*. Macromolecules, 22, 4372-4377.
26. Hopkins, J.L. (1961). *Journal Polymer Sci.*, 50.
27. Horn, J.; Nafpliotis, N. & Goldberg, D.E. (1994). *A Niche Pareto Genetic Algorithm for Multiojective Optimization*. Proc. First IEEE Conf. on Evolutionary Computation, 82-87.

28. Michell, M. (1996). *An Introduction to Genetic Algorithms (Complex Adaptive Systems)*.
29. Pereira, P.A.S. (2001). *Determinação do Espectro de Relaxação de Materiais Viscoelásticos a Partir de Funções Materiais: Um Problema “Mal Formulado”*. Dissertação de mestrado em Matemática e Aplicações à Mecânica. Escola de ciências da universidade do Minho, Guimarães.
30. Rawlins, G. (1991). *Foundations of Genetic Algorithms, First Workshop on the Foundations of Genetic Algorithms and Classifier Systems*. Morgan Kaufman Publishers.
31. Roseman, M.A. & Gero, J.S. (1985). *Reducing the Pareto Optimal Set Multicriteria Optimization*. Eng. Optim., 8, 189-206.
32. Schafer, J.D. (1984). *Some Experiments in Machine Learning Using Vector Evaluated Genetic Algorithms*. Ph. D. Thesis, Nashville, TN, Vanderbilt University.
33. Shaffer, R.. *Practical Guide to Genetic Algorithms*. Naval Research Laboratory, Chemistry Division. In: <http://chem1.nrl.navy.mil/~shafer/practga.html>
34. Tschoegl, N. W. (1971). *A general method for the determination of approximations to the spectral distributions from the dynamic response functions*. Rheological Acta, 10, 582-594.
35. Tikhonov, A. N. (1977). *Solutions of Ill-Posed Problems*. Wiley.
36. Winter, H. Henning (1997). *Analysis of dynamic mechanical data: Inversion into a relaxation time spectrum and consistency check*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 68, 225-239. Elsevier Science B. V..
37. Zitzler, E. & Thiele, L. (1999). *Multiobjective Evolutionary Algorithms: A Comparative Study and the Strength Pareto Approach*. IEEE Transactions on Evolutionary Computation 3, 257-271.