

Avaliação de métodos estocásticos aplicados à problemas de minimização da Energia Potencial Total de sistemas mecânicos

Luis Vinicius Costa Silva

13 de Julho de 2019

Disciplina: Sistemas Bioinspirados
Professor: Fran Sérgio lobato

Resumo

O estado de equilíbrio de um sistema mecânico (ou de qualquer outro sistema clássico) pode ser obtido através da minimização de uma função objetivo que relacione os campos de deslocamento do sistema a uma energia potencial total. A popularidade desta estratégia se justifica pelo fato da mesma necessitar apenas da primeira derivada e se utilizar de métodos de otimização já conhecidos. Este trabalho buscou avaliar dois algoritmos evolutivos (PSO e Evolução Diferencial) e um clássico (algoritmo de Powell) na resolução de dois problemas desta natureza. Notou-se que todos os métodos foram capazes de obter respostas dentro da faixa de tolerância estabelecida na maioria dos casos, sendo que a Evolução Diferencial se mostrou o melhor algoritmo estocástico, necessitando de menores populações e iterações para uma convergência aceitável.

1 Introdução

O Princípio do mínimo da Energia Potencial dita que o estado de equilíbrio mecânico de um sistema é aquele que (de todas as alternativas possíveis) tem a menor energia potencial (basicamente uma reformulação da segunda lei da Termodinâmica) (Reddy (2007)). A determinação da configuração final de um sistema mecânico implica na formulação da função de energia potencial total do sistema em função das forças internas (energia armazenada por um sistema que sofre deformação - strain) e a energia potencial das forças externas. É sabido que a Energia Potencial Total de um sistema é dado pela diferença entre as forças internas (strain Energy/deformação) e o trabalho das Forças Externas.

$$\pi = U - W \quad (1)$$

Expandindo os termos da equação anterior, temos que:

$$\pi = \sum_{e=1}^n \Lambda^{(e)} - \sum_{i=1}^m F_i u_i \quad (2)$$

Onde $\Lambda^{(e)}$ é a energia de deformação para cada elemento do sistema e $F_i u_i$ é a força externa aplicada em cada campo de deslocamento do sistema.

A energia potencial mínima do sistema pode ser obtida igualando a derivada da energia potencial pelo deslocamento a zero:

$$\frac{\partial}{\partial u_i} \sum_{e=1}^n \Lambda^{(e)} - \frac{\partial}{\partial u_i} \sum_{i=1}^m F_i u_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3)$$

O princípio do mínimo da Energia Potencial Total se faz útil pelo fato de ser computacionalmente mais rápido que uma integração de equação diferencial que representa a dinâmica do sistema, visto que são necessários computar estados intermediários do sistema até atingir o estado de equilíbrio, acarretando em mais uso de processamento e memória Schlick and Overton (1987). Além disso, a resolução deste tipo de problema por este princípio requer apenas a primeira derivada, além de incorporar as condição de contorno de força (condição de contorno natural, i.e: forças, momentos prescritos, etc.) automaticamente. O deslocamento admissível precisa satisfazer somente a condição de contorno de deslocamento (condição de contorno geométrica) (Hill (1959)) .

Visto que tal diferenciação torna-se muito complicada para sistemas com vários u_i (i.e: pontos de deslocamento), faz-se necessário a formulação do problema no formato de minimização, a fim de que algoritmos de otimização atinjam o resultado esperado Felippa (1977).

2 Problemas de Teste

Os problemas escolhidos são os de número 13 e 20 do capítulo 10 do livro "Numerical Methods in Engineering with Python 3" (Kiusalaas (2013)). A escolha destes problemas se deu devido a facilidade em escrever e compreender a função objetivo e suas restrições, assim como a implementação de tais elementos na solução computacional. Além disso, ambos tem um grau de não-linearidade considerável, tornando um bom desafio para os métodos de otimização testados.

O problema 2 possui restrições geométricas de igualdade, que foram implementadas na solução computacional através da reescrita da função objetivo utilizando o Método da Penalidade da Função Exterior (visto que os todos os algoritmos testados são de otimização irrestrita).

2.1 Problema 1

Considere o sistema abaixo:

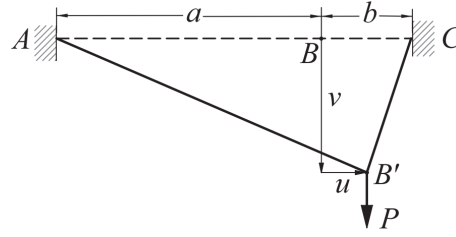


Figura 1: Diagrama do Problema 1

A corda elástica ABC tem uma rigidez k . Quando a força vertical P é aplicada em B , a corda é deformada para a forma $AB'C$. A energia potencial do sistema com esta característica de deformação é:

$$\min V = -Pv + \frac{k(a+b)}{2a}\delta_{AB} + \frac{k(a+b)}{2b}\delta_{BC} \quad \text{onde:} \quad (4)$$

$$\delta_{AB} = \sqrt{(a+u)^2 + v^2} - a$$

$$\delta_{BC} = \sqrt{(b-u)^2 + v^2} - b$$

Busca-se o deslocamento u e v que minimizam a função de energia potencial total V , considerando:

- $a = 150$ mm;
- $b = 50$ mm;
- $k = 0.6$ N/mm;
- $P = 5$ N

2.2 Problema 2

Considere o sistema abaixo:

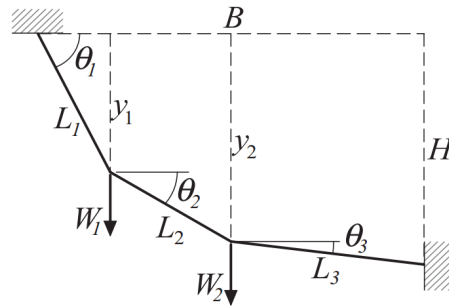


Figura 2: Diagrama do Problema 2

Como representado pelo figura acima, um cabo apoiado em suas extremidades suporta os pesos W_1 e W_2 . A energia potencial total do sistema é dada por:

$$V = -W_1 y_1 - W_2 y_2$$

$$\min V = -W_1 L_1 \sin \theta_1 - W_2 (L_1 \sin \theta_1 + L_2 \sin \theta_2) \quad \text{s.t:} \quad (5)$$

$$h_1(x) = L_1 \cos \theta_1 + L_2 \cos \theta_2 + L_3 \cos \theta_3 = B$$

$$h_2(x) = L_1 \sin \theta_1 + L_2 \sin \theta_2 + L_3 \sin \theta_3 = H$$

Busca-se os valores de θ_1, θ_2 e θ_3 que minimizam a função de energia potencial total V , considerando:

- $L_1 = 1.2 \text{ m}$;
- $L_2 = 1.5 \text{ m}$;
- $L_3 = 1.0 \text{ m}$;
- $B = 3.5 \text{ m}$;
- $H = 0$;
- $W_1 = 20 \text{ kN}$;
- $W_2 = 30 \text{ kN}$

3 Algoritmos utilizados

Como dito anteriormente, foram avaliados o algoritmo de Powell (determinístico) assim como o Algoritmo de Enxame de Partículas (PSO – Particle Swarm Optimization) e a Evolução Diferencial. A implementação se deu em linguagem *Python*. Para o algoritmo PSO, foi utilizada a implementação disponível em Miranda et al. (2018), do pacote *pyswarm* enquanto que o pacote *Scipy* Christensen et al. (2015) foi utilizado na avaliação do algoritmo de Powell e Evolução Diferencial.

3.1 Algoritmo de Powell

O algoritmo das direções conjugadas de Powell se utiliza de uma base vetorial para o espaço de otimização trabalhado. Normalmente a base adotada é a canônica, isto é, os vetores coluna que compõem a matriz identidade da ordem do vetor de variáveis de projeto (Fletcher and Reeves (1964)).

Uma vez que a base vetorial é definida, é explorado de forma sequencial a minimização unidimensional de cada uma destas direções. Ao fim da primeira iteração, é calculada a direção formada pelo ponto final deste processo e o ponto inicial ("chute inicial"). Esta direção, dita conjugada, constituída pela minimização da função em cada uma das direções da base

adotada, substituirá a primeira da base.

Cada uma das direções da nova base é explorada, criando-se outra direção conjugada nesta iteração, que substituirá a segunda direção da base inicial. O processo repete-se até que a condição de parada seja atingida.

O tamanho de passo ótimo para a busca em linha é feito da seguinte forma:

$$F(x_1) = F(x_0 + \alpha S) = F(\alpha) \quad (6)$$

A figura abaixo ilustra uma superfície tridimensional, onde as curvas mais internas possuem valores menores, sendo minimizada através do algoritmo de Powell.

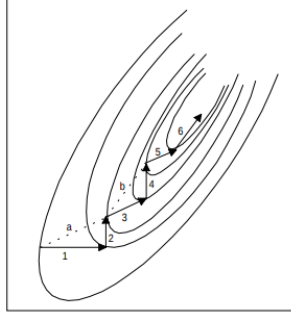


Figura 3: Uma ilustração da maneira que o Algoritmo de Powell percorre o espaço de busca – Retirado de Fletcher and Reeves (1964)

Assim, tem-se:

$$z = F(x) \text{ e } X = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in R^2 \quad (7)$$

Na figura anterior, têm-se que as direções 1 e 2 são as da base inicial. A direção a é a conjugada desta primeira iteração e substituirá a direção 1 da base inicial. Minimiza-se então as direções da nova base, formando-se então a direção conjugada b , que substituirá a direção 2 da base inicial. O processo é repetido até a condição de parada ser atingida.

3.2 Evolução Diferencial

O algoritmo de Evolução Diferencial proposto por Storn and Price (1997) trabalha com uma população de soluções iniciais, geradas aleatoriamente do espaço de busca $X_t = x_{t,i} | i = 1, \dots, N_p$ onde $x_{t,i}$ representa o i -ésimo indivíduo da t -ésima geração e N_p o número de indivíduos da população. Um indivíduo é descrito como um vetor da forma:

$$x_{t,i} = (x_{t,i,1}, x_{t,i,2}, \dots, x_{t,i,n}) \quad (8)$$

onde n é o número de variáveis de projeto. O algoritmo utiliza um processo de busca constituído na diferença entre duas soluções escolhidas aleatoriamente dentre as presentes na população. O resultado é adicionado a uma terceira solução x_{t,r_1} (estratégia *best1bin*).

$$v_{t,i} = x_{t,r_1} + F(x_{t,r_2} - x_{t,r_1}) \quad (9)$$

Onde $r_1 \neq r_2 \neq r_3$ e F é o fator de escala multiplicado pelo vetor diferença, $v_{t,i}$ é a i -ésima solução mutante da t -ésima geração e x_{t,r_1} é o vetor base no qual se aplica a mutação diferencial.

Assim, obtém-se uma população mutante $V_t = v_{t,i} | i = 1, 2, \dots, N_p$ que será re combinada com a população corrente X_t , formando a população de descendentes, chamada de U_t .

$$u_{t,i,j} = \begin{cases} v_{t,i,j} & \text{se } U_{[0,1]} \leq CR \text{ ou } j = \delta_i \\ x_{t,i,j} & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (10)$$

Em que CR é o parâmetro de recombinação discreta, tal que $CR \in [0, 1]$ e $\delta_i \in [1, \dots, n]$ é sorteado aleatoriamente, garantindo que ao menos uma variável da solução teste passe para a solução descendente. Observa-se que o parâmetro CR é capaz de administrar a porcentagem de $v_{t,i}$ herdada por $u_{t,i}$. Além disso, destaca-se que há um vetor mutante $u_{t,i,j}$ para cada indivíduo $x_{t,i,j}$ da população corrente. Logo ambas as populações, X_t e U_t possuem o mesmo número de indivíduos.

Após gerada a população U_t , é realizada uma seleção entre as soluções das populações X_t e U_t , avaliando o valor da função objetivo de $u_{t,i}$ e sua correspondente $x_{t,i}$, sendo aprovada a com melhor valor. A solução aprovada é classificada para compor a população corrente da próxima geração, X_{t+1} . Neste caso, representa-se por um problema de maximização.

$$x_{t+1,i} = \begin{cases} u_{t+1,i} & \text{se } f(u_{t,i}) > f(x_{t,i}), \\ x_{t,i} & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (11)$$

A ilustração abaixo representa como o algoritmo de Evolução Diferencial gera novos candidatos e percorre o espaço de busca:

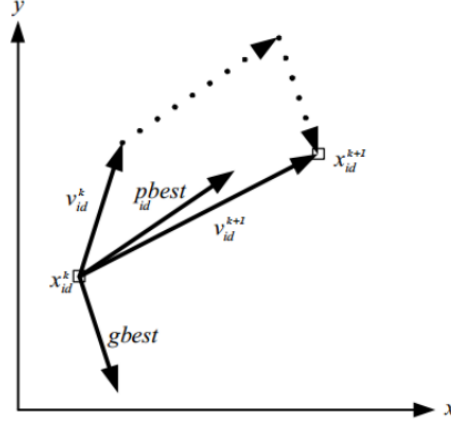


Figura 5: Uma ilustração da maneira que o PSO percorre o espaço de busca

Onde v_{id}^k representa a velocidade atual da partícula x_i^k . A velocidade adquirida pela partícula à cada iteração é determinada pela composição de sua velocidade atual com sua posição em relação à sua melhor posição e à melhor posição do bando.

A velocidade da partícula indica a direção que esta deve tomar, a fim de se aproximar do ótimo local ou global. Logo, a posição da partícula em cada iteração x_i^{k+1} é a sua posição anterior mais sua velocidade atualizada v_i^{k+1} . Os termos rand_1 e rand_2 são números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo $[0, 1]$.

A inércia da partícula, representada por w , introduz a preferência da partícula em continuar se movendo na mesma direção que seguia na iteração anterior. Um valor de inércia alto facilita uma exploração mais global, enquanto um valor baixo facilita uma exploração mais local na busca pelo ótimo (Miranda et al. (2018)).

Os valores indicados por c_1 e c_2 são constantes positivas inteiras que correspondem a componentes cognitivas e sociais do bando, isto é, são parâmetros de confiança que indicam o quanto uma partícula confia em si (c_1) e quanto ela confia no bando (c_2). Os parâmetros de confiança e de inércia devem ser ajustados de acordo com o problema aplicado, pois são utilizadas para a atualização do vetor velocidade (Miranda et al. (2018)).

4 Resultados

Os problemas foram resolvido com o seguintes parâmetros:

- no problema 1 $x_0 = (1.0, 1.0)$, no problema 2 $x_0 = (45.0, 30.0, 5.0)$ – Apenas para o método de Powell (chute inicial);
- $\phi_p = 0.5$ – fator de escala saindo da melhor posição da partícula;

- $\phi_g = 0.5$ – fator de escala para buscar saindo da melhor posição do enxame;
- $\text{minfunc} = 10^{-8}$ – menor mudança na função objetivo que termina;
- $\text{minstep} = 10^{-8}$ – tamanho de passo mínimo da melhor posição do enxame antes que a busca termine;
- $\text{max}_{it} = 100$ – máximo de iterações;
- $\omega = 0.5$ – Fator de escala da velocidade da partícula;
- $N = 100$ – tamanho da população;
- $r = 0.7$ – Probabilidade de recombinação no DE;
- estratégia = best1bin – Estratégia de mutação do DE;
- mutação = $(0.5, 1)$ – Taxa de Mutação do DE;

4.1 Problema 1

Foram obtidos os seguintes resultados:

Powell - x	Powell - f(x)	DE - x	DE - f(x)	PSO - x	PSO - f(x)
[0.00521 0.02836]	-0.10669	[0.00521 0.028375]	-0.10669	[0.00521 0.02837]	-0.10669

Tabela 1: Resultados do problema 1

Ou seja, o deslocamento (u, v) para o sistema em equilíbrio foi de aproximadamente $5.21mm$ e $28.37mm$, minimizando o sistema para uma energia potencial total de $-0.106J$. Para atingir a convergência, foram necessárias respectivamente 6, 31 e 39 iterações para o algoritmo de Powell, DE e PSO. Abaixo, observa-se a convergência de cada algoritmo até o mínimo da função:

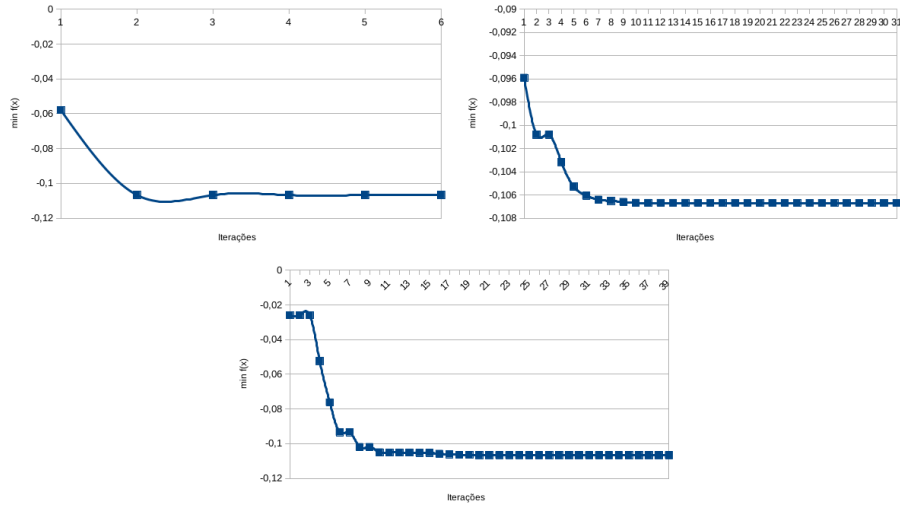


Figura 6: Convergência dos algoritmos Powell, DE e PSO testados

4.2 Problema 2

Visto que o problema 2 contém restrições de igualdade, foi necessária a reescrita da função objetivo através do Método da Penalidade Exterior, a fim de que as restrições de igualdade fossem incorporadas na função objetivo irrestrita. Devido a este fato, foi analisado o rP (termo que pondera o valor da restrição sobre a função objetivo) da função objetivo a cada execução. Foram obtidos os seguintes resultados:

Rp	Powell - x	Powell - f(x)	Powell - g(x)
10^{-6}	[0,55327702 0,07095995 -0,64445376]	-29502,421989	0,3196
10^{-7}	[0,39977555 0,0271785 -0,51592805]	-23723,9220183	0,0398
10^{-8}	[0,3757454 0,02229681 -0,49196887]	-22928,3090233	0,0041
10^{-9}	[0,37198841 0,02318257 -0,49028164]	-22843,3284124	0,0004
10^{-10}	[0,36858273 0,02707374 -0,49263702]	-22832,7967119	0,0001
10^{-11}	[-0,43345571 0,34622668 -0,00501443]	9929,79028962	0
10^{-12}	[-0,43346566 0,34621875 -0,00499285]	9930,65710977	0
10^{-13}	[-0,43346665 0,34621795 -0,00499069]	9930,7444071	0
10^{-14}	[-0,43346672 0,34621787 -0,00499051]	9930,75135866	0
10^{-15}	[-0,43346673 0,34621786 -0,00499049]	9930,75237759	0
10^{-16}	[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75247955	0
10^{-17}	[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75248946	0
10^{-18}	[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75249037	0
10^{-19}	[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75249046	0
10^{-20}	[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75249047	0
10^{-21}	[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75249047	0

Tabela 2: Soluções obtidas via algoritmo de Powell

DE - x	DE - f(x)	DE - g(x)
[-6,48035531e-13 1,18662181e-01 -4,99048000e-03]	1240,02479562	362
[-0,41130483 0,34284927 -0,00499048]	9399,85000118	0,0321
[-0,43132566 0,34593889 -0,00499048]	9878,37479558	0,0031
[-0,43325332 0,34619049 -0,00499048]	9925,52159636	0,0003
[-0,4334454 0,34621513 -0,00499048]	9930,22959866	0
[-0,4334646 0,34621758 -0,00499048]	9930,70033246	0
[-0,43346652 0,34621783 -0,00499048]	9930,74740518	0
[-0,43346671 0,34621785 -0,00499048]	9930,75211278	0
[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75258324	0
[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75263024	0
[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75263498	0
[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75263542	0
[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75263546	0
[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75263555	0
[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,75263549	0
[-0,43346673 0,34621786 -0,00499048]	9930,7526357	0

Tabela 3: Soluções obtidas via Evolução Diferencial

Rp	PSO - x	PSO - f(x)	PSO - g(x)
10 ⁶	[0, 0,11866258 -0,00499048]	1240,02479734	362
10 ⁷	[-0,41130508 0,34284941 -0,00499048]	9399,85000379	0,0321
10 ⁸	[-0,4313257 0,34593893 -0,00499048]	9878,3747961	0,0031
10 ⁹	[-0,43325333 0,3461905 -0,00499048]	9925,52159715	0,0003
10 ¹⁰	[-0,4334454 0,34621511 -0,00499048]	9930,22960282	0
10 ¹¹	[-0,4334646 0,34621759 -0,00499048]	9930,70033397	0
10 ¹²	[-0,43346653 0,34621783 -0,00499048]	9930,74741237	0
10 ¹³	[-0,43346671 0,34621785 -0,00499048]	9930,75212868	0
10 ¹⁴	[-0,43346673 0,34621785 -0,00499048]	9930,75259885	0
10 ¹⁵	[-0,43346674 0,34621786 -0,00499048]	9930,75351379	0
10 ¹⁶	[-0,43346674 0,34621786 -0,00499048]	9930,75962469	0
10 ¹⁷	[-0,43346674 0,34621786 -0,00499048]	9930,98196715	0
10 ¹⁸	[-0,43346674 0,34621786 -0,00499048]	9930,95643021	0
10 ¹⁹	[-0,43346672 0,34621785 -0,00499048]	10035,0003305	0
10 ²⁰	[-0,43346674 0,34621787 -0,00499048]	11399,7244991	0
10 ²¹	[-0,43346674 0,34621786 -0,00499048]	14915,491567	0

Tabela 4: Soluções obtidas via PSO

Os gráficos abaixo ilustram a convergência de cada algoritmo para um

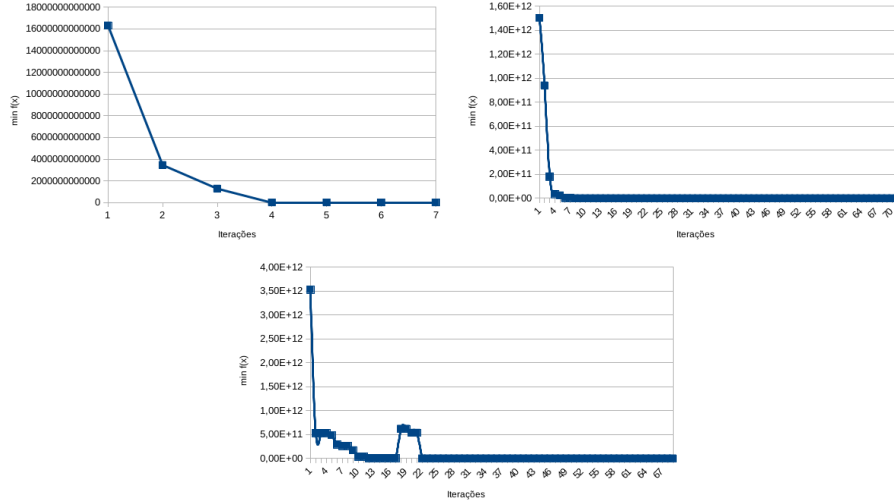


Figura 7: Convergência dos algoritmos de Powell, Evolução Diferencial e PSO para $R_p = 10^{15}$

Ou seja, o vetor de ângulos $(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \approx ((-24.83, 19.83, -0.28))$ uma vez que o sistema estiver em equilíbrio.

5 Conclusão

O princípio do mínimo da energia potencial é uma formulação interessante que permite que vários problemas físicos em contextos estáticos sejam resolvidos de maneira rápida e precisa. Este conceito foi aplicado em 2 problemas de mecânica, com um grau de não-linearidade substancial, e através de métodos de otimização estocásticos irrestritos, foram obtidas soluções para os mesmos. Nota-se que o algoritmo de Evolução Diferencial é capaz de convergir para uma solução dentro da faixa de tolerância a partir de populações menores, diferentemente do PSO. Apesar da robustez dos algoritmos estocásticos é evidente que seu custo computacional é extremamente custoso quando comparado a métodos clássicos. Além disso, todos os algoritmos necessitam de uma escolha minuciosa do termo R_p em casos onde há restrições no problema, visto que todos os algoritmos avaliados respeitaram as restrições apenas para $R_p > 10^{11}$. O PSO por sua vez começou a divergir do x ótimo após um $R_p > 10^{18}$.

Concluí-se que o algoritmo de Evolução Diferencial é o mais apto para resolução de problemas de minimização da energia potencial total de sistemas em casos onde é garantido que o espaço de busca esteja igualmente populado pelos vetores iniciais (algo alcançável através da amostragem por hipercubo latino).

Referências

- Baghmisheh, M. V., Peimani, M., Sadeghi, M. H., Ettetfagh, M. M., and Tabrizi, A. F. (2012). A hybrid particle swarm–nelder–mead optimization method for crack detection in cantilever beams. *Applied Soft Computing*, 12(8):2217–2226.
- Bai, Q. (2010). Analysis of particle swarm optimization algorithm. *Computer and information science*, 3(1):180.
- Bathe, K.-J. (2006). *Finite element procedures*. Klaus-Jurgen Bathe.
- Christensen, E. A., Blanco-Silva, F. J., et al. (2015). *Learning SciPy for Numerical and Scientific Computing*. Packt Publishing Ltd.
- Felippa, C. A. (1977). Numerical experiments in finite element grid optimization by direct energy search. *Applied Mathematical Modelling*, 1(5):239–244.
- Fletcher, R. and Reeves, C. M. (1964). Function minimization by conjugate gradients. *The computer journal*, 7(2):149–154.
- Hill, R. (1959). Some basic principles in the mechanics of solids without a natural time. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 7(3):209–225.
- Hutton, D. V. and Wu, J. (2004). *Fundamentals of finite element analysis*, volume 1. McGraw-hill New York.
- Kiusalaas, J. (2013). *Numerical methods in engineering with Python 3*. Cambridge university press.
- Liu, T., Bargteil, A. W., O’Brien, J. F., and Kavan, L. (2013). Fast simulation of mass-spring systems. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, 32(6):214.
- Miranda, L. J. V. et al. (2018). Pyswarms: a research toolkit for particle swarm optimization in python. *J. Open Source Software*, 3(21):433.
- Reddy, J. N. (2007). *An introduction to continuum mechanics*. Cambridge university press.
- Schlick, T. and Overton, M. (1987). A powerful truncated newton method for potential energy minimization. *Journal of Computational Chemistry*, 8(7):1025–1039.
- Storn, R. and Price, K. (1997). Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of global optimization*, 11(4):341–359.
- Wang, Z., Ruimi, A., and Srinivasa, A. (2015). A direct minimization technique for finding minimum energy configurations for beam buckling and post-buckling problems with constraints. *International Journal of Solids and Structures*, 72:165–173.

- Wendorff, A., Botero, E., and Alonso, J. J. (2016). Comparing different off-the-shelf optimizers' performance in conceptual aircraft design. In *17th AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference*, page 3362.
- Zhu, C., Byrd, R. H., Lu, P., and Nocedal, J. (1997). Algorithm 778: L-bfgs-b: Fortran subroutines for large-scale bound-constrained optimization. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 23(4):550–560.