Princípio do Mínimo da Energia Potencial Total aplicado a deformação de uma estrutura treliçada do tipo cantilever

Luis Vinicius Costa Silva 26 de Junho de 2019

Disciplina: Otimização Clássica Professor: Romes Antônio Borges

1 Introdução

Este trabalho tem como objetivo criar um modelo matemático que permita representar a deformação de uma estrutura dada sua configuração inicial. Foi utilizada uma abordagem da otimização clássica que se baseia no Princípio do mínimo da Energia Potencial.

Para tanto, fez-se a modelagem de uma viga treliçada do tipo cantilever, e a obtenção das equações constitutivas do sistema e a escrita do problema em forma de problema de otimização. Posteriormente foi escrito um código computacional (em linguagem Python) para a resolução computacional do problema, isto é: dada uma configuração inicial da estrutura, minimizar a Função de Energia Potencial Total do sistema, obtendo os valores das variáveis de estados (configuração final da estrutura) associada a energia potencial mínima do sistema. Foram utilizados três algoritmos clássicos para a resolução do problema de otimização: L-BFGS-B, SLSQP e Newton Truncado. Além disso foi utilizado a Evolução Diferecial como algoritmo evolutivo para a resolução do problema. Os resultados obtidos por tais algoritmos foram comparados em um estudo de caso, avaliando as vantagens e desvantagens de cada um deles para o problema em questão.

2 Modelagem

2.1 Princípio do mínimo da Energia Potencial Total

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.

$$\pi = U - W \tag{1}$$

Expandindo os termos da equação anterior, temos que:

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

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

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

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.

2.2 Modelagem da treliça simplesmente engastada

Energia potencial de uma mola entre dois pontos:

$$\frac{1}{2}k((|p_1 - p_2|) - r)^2 \tag{4}$$

Energia potencial total de uma massa:

$$E_{pq} = mgh (5)$$

Logo, têm-se a seguinte função objetivo:

$$min \ U = \sum_{i=1}^{n} mgy_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} ka_{ij} (|p_i - p_j| - l_{ij})^2 \ s.t :$$

$$p_1 = (0.0, 0.0)$$

$$p_2 = (0.0, -0.1)$$

$$p_i - 1.0 \le p_i \le p_i + 1.0 \ , i = 3, ..., n, \ (opcional)$$

$$(6)$$

- n quantidade de nós da malha;
- m massa sobre a estrutura (kg);
- g constante gravitacional (m/s);
- y_i coordenada y do nó;
- k constante elástica das molas (kg/m);

- p_i i-ésima posição (x,y) do nó;
- a_{ij} elemento da matriz de adjacência (1 caso exista mola, 0 senão);
- l_{ij} comprimento relaxado da mola (i,j) (0 caso não exista mola entre nós);

3 Algoritmos utilizados

3.1 L-BFGS-B

O algoritmo L-BFGS-B (Byrd et al., 1995) é uma modificação do algoritmo BFGS capaz de lidar com limites laterais (i.e: $a \le x \le b$) diretamente. Além disso, este algoritmo não armazena uma aproximação densa da inversa da matriz hessiana, ao invés disso, o algoritmo armazena apenas alguns vetores que representam tal termo implicitamente, i.e: o algoritmo armazena as últimas m atualizações de x e $\nabla f(x)$. Estes termos são utilizados quando algumas operações exigem o produto vetorial da matriz H_k .

O tratamento dos limites laterais é realizado através do método de gradiente que identifica o conjunto com os limites das variáveis de entrada que estão ativas, e então o modelo quadrático é aproximadamente minimizado, em relação as variáveis livres.

Após isso, o próximo ponto de avaliação é calculado através da busca unidimensional, utilizando um determinado tamanho de passo $\alpha_{l-bfqs-b}$ (hiperparâmetro).

3.2 SLSQP

O SLSQP (Sequential Least Squares Quadratic Programming) é um algoritmo de programação sequencial de mínimos quadrados. O SLSQP usa o algoritmo BFGS para aproximar a Hessiana e a função de mérito L é usada para uma busca unidimensional.

As restrições de desigualdade e igualdade são combinadas e expressadas por $\overrightarrow{h_k}$, o vetor de multiplicadores de Lagrange é dado por u_k . As restrições de desigualdade são igualadas a zero e tratadas de acordo (entretanto os multiplicadores de Lagrange associados a estas restrições não devem ser negativos), restrições de desigualdade inativas são ignoradas.

Existem 3 critérios de parada para o algoritmo SLSQP, são eles:

$$|\nabla f_k^T d_k| + \sum |u_i| |h_i(x_k)| \le tol \tag{7}$$

Equation 7: Condição de Parada 1

$$|f(x)_k - f(x)_{k+1}| \le tol \tag{8}$$

Equation 8: Condição de Parada 2

$$k \ge \max it$$
 (9)

Equation 9: Condição de Parada 3

Como pode ser visto pela equação ?? O tamanho do primeiro passo da busca unidimensional geralmente é 1, este tamanho de passo é reduzido sucessivamente por um determinado fator de contração. Logo, o primeiro termo $|\nabla f_k^T d_k|$ representa representa o quanto de melhoria a função objetivo obteve ao longo da direção de descida mais íngreme com o maior comprimento de passo. O segundo termo representa uma combinação ponderada do total de todas as violações. Portanto, este critério denota que, uma vez que ocorreu uma melhoria significativa da função Lagrangeana L menor que uma tolerância pré-definida, então considera-se que o algoritmo convergiu para um x*.

O critério de parada ?? e ?? são amplamente conhecidos, e denotam respectivamente a parada do algoritmo em função da diferença entre dois x_k de iterações consecutivas ser menor que uma tolerância pré-definida, e a parada do algoritmo após um número máximo de iterações.

A função de mérito L_1 (equação 10) é utilizada para garantir uma convergência global, o que significa que o x ótimo será encontrado, independentemente do x inicial. A função de mérito pode ser considerada como uma função objetivo para a busca unidimensional, esta é decrementada sucessivamente para a geração de um novo x_k no decorrer do processo. Para problemas irrestritos a função objetivo original pode ser usada como função de mérito, em qualquer outro caso, a função de mérito L_1 assume a seguinte forma:

$$L_1 = f(x_k + \alpha d_k) + \sum_{i=1}^{m} \rho_i |h_i(x_k + \alpha d_k)|$$
 (10)

Equation 10: Função de mérito L1

O fluxograma abaixo demonstra o funcionamento básico do algoritmo SLSQP:

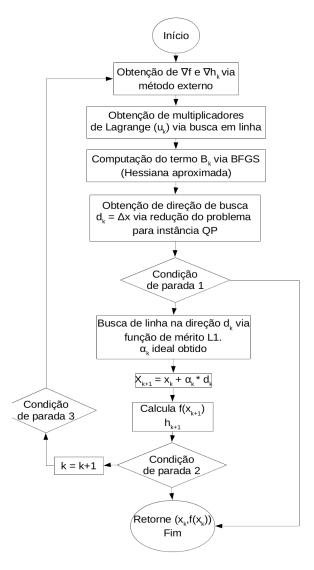


Figura 1: Fluxograma do algoritmo SLSQP

3.3 Método de Newton Truncado

O método de Newton truncado é um algoritmo de otimização que, dado um x_k , aproxima um x* resolvendo as equações de Newton (...) usando algum algoritmo iterativo com precondicionamento M^k . M^k é escolhido com informação de algum outro algoritmo de otimização (geralmente gradiente conjugado) ou com base em iterações anteriores. Usando a solução obtida para as equações de Newton, uma direção de descida é computada, e uma nova aproximação x_{k+1} de x* é obtida. As equações de Newton são definidas da seguinte forma:

Considerando que a função objetivo é aproximada por uma série de Taylor, temos:

$$F(x^{(0)} + p) = F(x^{(0)}) + p^{T} \nabla F(x^{(0)} + \frac{1}{2} p^{T} \nabla^{2} F(x^{(0)}) p + R_{3}(x^{(0)}, p)$$
(11)

onde $R_3(x^{(0)}, p)$ representam os termos de alta ordem da série. Logo, as equações de Newton são dadas pela fórmula abaixo:

$$Hp = -g \tag{12}$$

Onde H é a matriz Hessiana, g é o gradiente de f e p é o ponto de interesse da série.

3.4 Evolução Diferencial

O algoritmo de Evolução Diferencial é um algoritmo de otimização simples e eficiente que foi proposto por Rainer Storn e Kenneth Price em 1995 (Storn e Price, 1995). Mostra-se eficaz para funções objetivo que não são diferenciáveis ou convexas e tem facilidade na busca do ótimo com populações pequenas (Cheng e Hwang, 2001). O DE pode ser descrito como uma manipulação de indivíduos que representam as soluções candidatas. No decorrer das gerações, essas soluções candidatas sofrem modificações de mutação e cruzamento, onde são geradas novas soluções candidatas, e logo após é feita a seleção e o ciclo se repete. A figura 2 demonstra o funcionamento básico do algoritmo de Evolução Diferencial

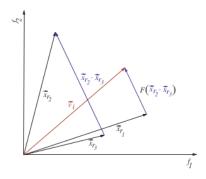


Figura 2: Funcionamento da Evolução Diferencial – Price et al. (2005)

Partindo de três vetores $\overrightarrow{x_{r1}}$, $\overrightarrow{x_{r2}}$ e $\overrightarrow{x_{r3}}$, são escolhidos aleatoriamente dois deles (nesse caso $\overrightarrow{x_{r2}}$ e $\overrightarrow{x_{r3}}$), sendo realizada a subtração dos mesmos. O resultado é multiplicado por um escalar F, gerando assim um vetor com módulo diferente da subtração original. Esse novo vetor é então somado ao vetor $\overrightarrow{x_{r1}}$, fornecendo assim um novo vetor $\overrightarrow{v_i}$. Esse vetor $\overrightarrow{v_i}$ indicará uma nova posição no espaço, ou um novo indivíduo (muito semelhante a um algoritmo genético, mas com cromossomos compostos por valores reais).

4 Resultados e Conclusões

4.1 Métodos Clássicos

Parâmetros do experimento 1:

- massa m = 0.1;
- número de nós n = 20;
- distância inicial entre nós e = 0.1;
- comprimento das molas em situações sem deformação l=0.1;
- $\bullet\,$ constante de rigidez da mola $k=10000\,$

Configuração inicial da treliça:

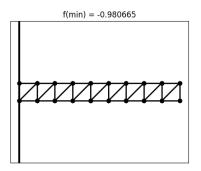
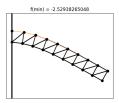
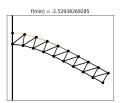


Figura 3: Representação gráfica da configuração inicial da treliça

Métodos x Métricas	Qtde de variáveis	Qtde de Iterações	Avaliações da função objetivo	Min F(x)
L-BFGS-B	40 (20 nós)	133	138	-2.52938265048
SLSQP	40 (20 nós)	58	2557	-2.529382692846
Newton Truncado	40 (20 nós)	830	62	-2.51249006635

Tabela 1: Resultados obtidos no experimento 1





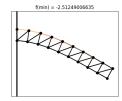


Figura 4: Configuração Final da treliça computada pelo Algoritmo L-BFGS-B, SLSQP e Newton Truncado respectivamente

X	у
0.00000000000000000000000000000000000	0.00000000000000000000000000000000000
0.00000000000000000000000000000000000	-1.00000000000000056e-01
1.076604963454961816e-01	-1.234808813968935916e-02
9.285609344426656864e-02	-1.121326312494193983e-01
2.110453836830193108e-01	-3.846447531552332072e-02
1.850558031116051882e-01	-1.360255187418834555e-01
3.100610838664475399e-01	-7.385988911778323951e-02
2.758761475637592775e-01	-1.688408715429658424e-01
4.052258921423890214e-01	-1.154953481559722744e-01
3.652746997896266223e-01	-2.081062035747603123e-01
4.973522619098407760e-01	-1.610865755944085043e-01
4.535493330435532711e-01	-2.518005457540001268e-01
5.873054061940690129e-01	-2.089383588685599091e-01
5.411242112703530394e-01	-2.982980063307638652e-01
6.758761883112499591e-01	-2.578169836431673523e-01
6.284127007501388862e-01	-3.463189503723093643e-01
7.637177846436586925e-01	-3.068631367068182514e-01
7.157347676073907428e-01	-3.948925412627222187e-01
8.513196221584131695e-01	-3.555422158899081975e-01
8.032695093465200831e-01	-4.433394937483930431e-01

Tabela 2: Posições finais dos nós computados pelo L-BFGS-B

x	у
0.00000000000000000000000000000000000	0.00000000000000000000000000000000000
0.00000000000000000000000000000000000	-1.000000000000000056e-01
1.076581016588509659e-01	-1.234252877187444822e-02
9.285697905639224425e-02	-1.121273723211763246e-01
2.110435483900849618e-01	-3.845261169162977194e-02
1.850589607610042264e-01	-1.360139709305897282e-01
3.100614950867626729e-01	-7.383759639200435099e-02

Continuação da tabela 3

x	у
2.758808407504163562e-01	-1.688194012225558427e-01
4.052274160172885109e-01	-1.154721206354224761e-01
3.652794197173069302e-01	-2.080853121149189855e-01
4.973554329820704112e-01	-1.610579591497134644e-01
4.535571696553672427e-01	-2.517734303334946966e-01
5.873107838861030272e-01	-2.089042278612215919e-01
5.411329922867171849e-01	-2.982663049064730454e-01
6.758827785101579888e-01	-2.577831678481600219e-01
6.284233764303035485e-01	-3.462874535685726007e-01
7.637250577912088056e-01	-3.068229353638805001e-01
7.157473943252998794e-01	-3.948549020339718885e-01
8.513293735802619500e-01	-3.554980033699064457e-01
8.032843643335488837e-01	-4.432975511277799652e-01
4.973554329820704112e-01 4.535571696553672427e-01 5.873107838861030272e-01 5.411329922867171849e-01 6.758827785101579888e-01 6.284233764303035485e-01 7.637250577912088056e-01 7.157473943252998794e-01 8.513293735802619500e-01	-1.610579591497134644e-01 -2.517734303334946966e-01 -2.089042278612215919e-01 -2.982663049064730454e-01 -2.577831678481600219e-01 -3.462874535685726007e-01 -3.068229353638805001e-01 -3.948549020339718885e-01 -3.554980033699064457e-01

Tabela 3: Posições finais dos nós computados pelo SLSQP

x	у
0.00000000000000000000000000000000000	0.00000000000000000000000000000000000
0.00000000000000000000000000000000000	-1.00000000000000056e-01
1.073453320603787731e-01	-1.131906141904176315e-02
9.390695378617000544e-02	-1.111144547211459221e-01
2.109855703932395077e-01	-3.505453679425795527e-02
1.871162548763355415e-01	-1.329081016022125861e-01
3.109290112846055387e-01	-6.796005448866306031e-02
2.786578919106891261e-01	-1.634131799516077566e-01
4.072288059110498737e-01	-1.080791236868817312e-01
3.685794437575616311e-01	-2.012766910145951105e-01
5.002811533915770825e-01	-1.532024195396144706e-01
4.570264280056981487e-01	-2.440769482580765759e-01
5.908554038684504794e-01	-2.009954397605685228e-01
5.443707874541260372e-01	-2.902751946570642505e-01
6.792081549818771435e-01	-2.504898803189012924e-01
6.309492576946710285e-01	-3.387666102692873382e-01
7.663160328145873779e-01	-3.007088386085366438e-01
7.175186124147107103e-01	-3.884533589826867916e-01
8.533262796408570550e-01	-3.504586983865930483e-01
8.045345136075724435e-01	-4.377923103295616736e-01

Tabela 4: Posições finais dos nós computados pelo Método de Newton Truncado

4.2 Métodos Evolutivos

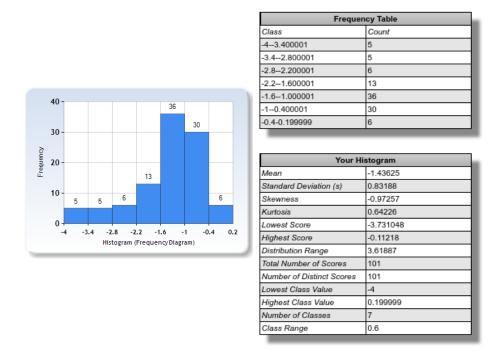


Figura 5: Histograma e análise estatística da resposta do algoritmo de Evolução Diferencial para uma população de 40 candidatos

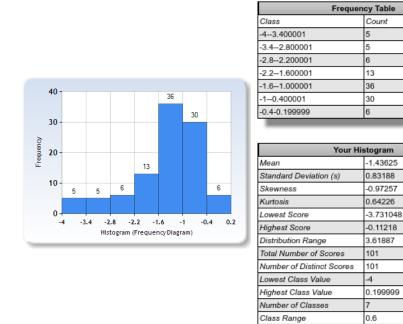


Figura 6: Histograma e análise estatística da resposta do algoritmo de Evolução Diferencial para uma população de 100 candidatos