

5 Resultados

Neste capítulo são apresentados os resultados detalhados de cada procedimento descrito na metodologia de estudo (capítulo 4). Na seção 5.1, os resultados parciais para a aquisição da melhor rede, capaz de inferir o módulo de Young dos nanocompósitos, são discutidos. Tal rede é então comparada aos modelos analíticos (seção 5.2). Por fim, os resultados referentes aos estudos de caso da parametrização na síntese de nanocompósitos por AGs, encontram-se na seção 5.3.

5.1 Redes Neurais

No desenvolvimento das redes neurais, utilizou-se o aplicativo Matlab[®]. Na elaboração de uma rede como aproximador de função, precisa-se de um tratamento dos dados, cujos resultados estão na subseção 5.1.1. Em seguida, é determinada qual a melhor rede obtida a partir dos experimentos realizados (subseção 5.1.2). Finalmente, uma análise do comportamento da rede é apresentada.

5.1.1 Tratamento dos dados

O resultado da normalização linear uniforme segue a mesma distribuição de dados que foi apresentada na seção 4.1.1. Vale lembrar que a normalização da identificação da matriz e da carga foram mantidas iguais para todos os experimentos. O histograma e o percentual cumulativo de suas normalizações encontram-se nas figuras 5.1 e 5.2, respectivamente. No caso da identificação da matriz duas abordagens foram feitas, uma utilizando uma variável classificatória (identificação) e outra utilizando o módulo de Young intrínseco da matriz. Em todas as figuras, observa-se uma boa distribuição dos dados, o que indica que esse tipo de normalização é suficiente, não necessitando de mais tratamento.

Para as demais características dos compósitos, ou seja, fração mássica, diâmetro e razão de aspecto da partícula e módulo relativo do compósito, tanto

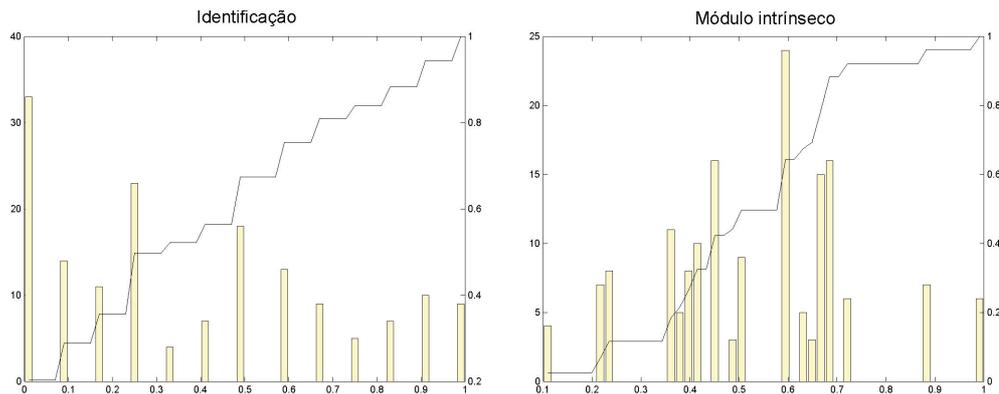


Figura 5.1: Normalizações referentes à classe e ao módulo de Young da matriz.

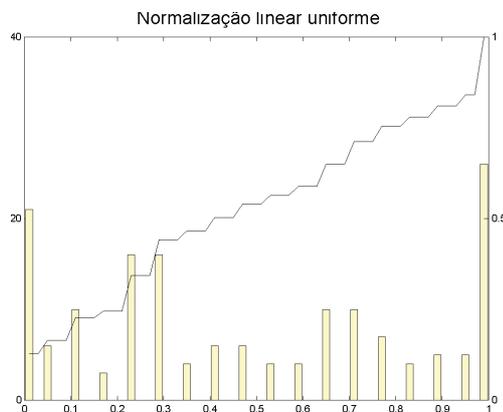


Figura 5.2: Normalização referente à classe da partícula.

a normalização linear uniforme quanto a por partes foram aplicadas. As figuras 5.3 a 5.6 apresentam comparações entre esses tipos de normalização de maneira semelhante ao realizado anteriormente. Observa-se que em todos os casos, ao se utilizar a normalização por partes, atingiu-se uma melhor dispersão dos dados, mantendo o histograma mais uniforme e, conseqüentemente, tornando os percentuais cumulativos de cada variável mais próximos a uma reta de coeficiente angular igual a 1 (equivalente à função de densidade acumulada da distribuição uniforme [47]).

Esse tratamento dos dados não visa descartar um tipo de normalização, sendo ambas empregadas como parâmetros que distinguem os experimentos para a escolha da melhor RNA. Tal abordagem é feita com fins comparativos.

5.1.2 Escolha da melhor RNA

Considera-se a melhor rede aquela que apresenta o menor erro de validação. Para tanto, quatro experimentos com configurações distintas foram simulados. Cada configuração foi testada 20 vezes e aquela que obteve o me-

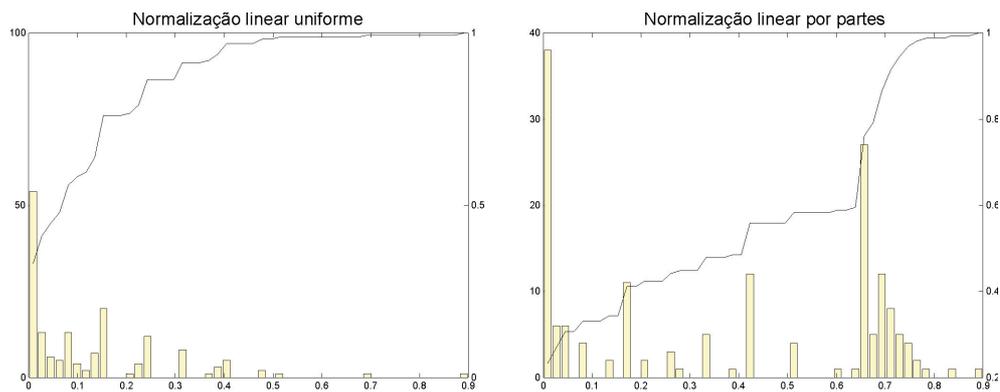


Figura 5.3: Normalização uniforme e por partes da fração mássica da partícula.

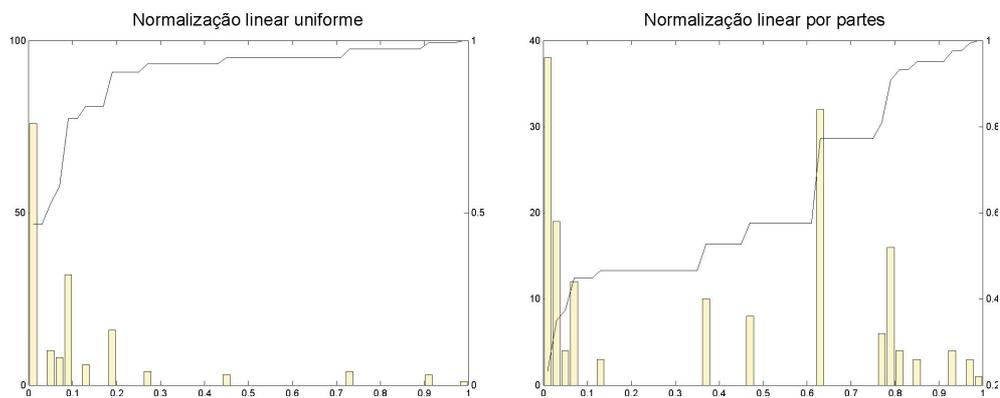


Figura 5.4: Normalização uniforme e por partes do diâmetro da partícula.

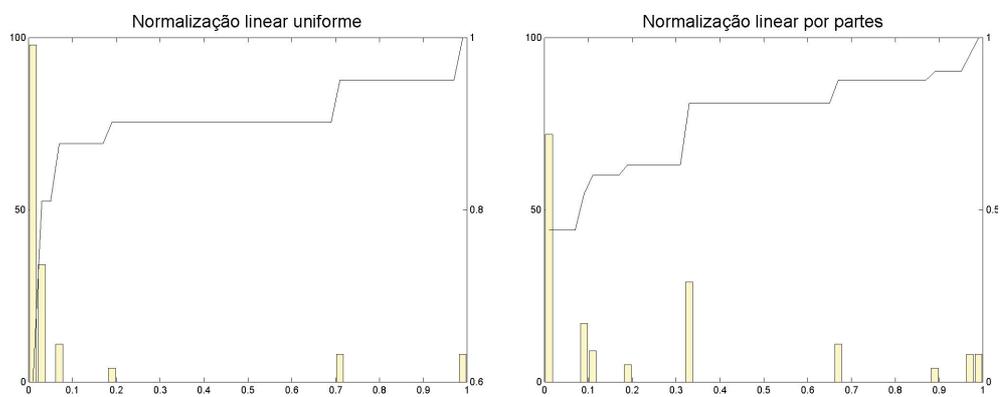


Figura 5.5: Normalização uniforme e por partes da razão de aspecto da partícula.

nor erro do conjunto de validação é apresentada nas tabelas a seguir.

O primeiro experimento, o qual possui a identificação da matriz e a normalização linear, apresentou como melhor rede a que tem MAPE de 9,84 e correlação de 0,9972. Tal rede é configurada com treinamento LM, função de ativação logística nas camadas escondidas e linear na de saída, como pode ser visto na tabela 5.1. Nessa rede, observa-se que o MAPE para todos os conjuntos (treinamento, validação e teste) varia em torno de 12%, apesar da correlação dos mesmos ser alta (acima de 0,97). Para as demais redes desse experimento

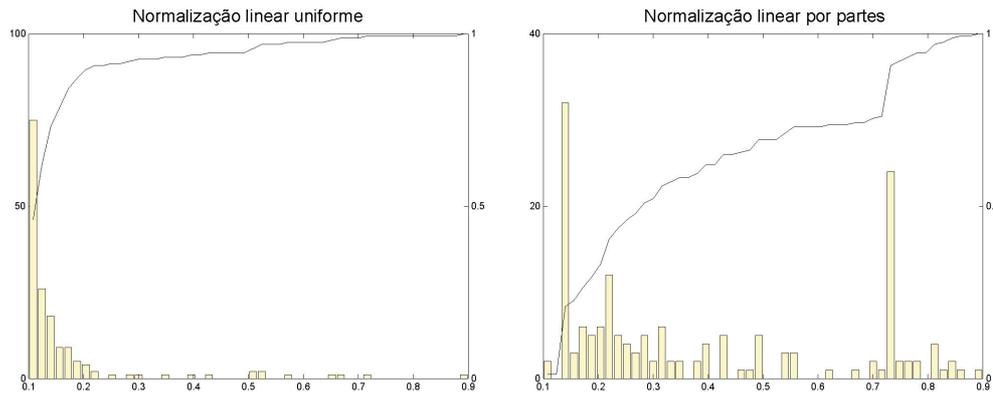


Figura 5.6: Normalização uniforme e por partes do módulo de Young relativo do compósito.

foram obtidos valores altos de erros de validação, chegando a 35,19% (terceira linha da tabela).

Trein.	Funções de ativação		Treinamento		Validação		Teste	
	escondidas	saída	MAPE	Corr	MAPE	Corr	MAPE	Corr
BFGS	Log.	Log.	15,66	0,9231	10,93	0,9912	19,69	0,9697
BFGS	Log.	Linear	20,95	0,7382	21,92	0,9705	40,77	0,6101
BFGS	Log.	Linear sat.	42,97	0,7411	35,19	0,9246	35,9	0,9416
BFGS	Tanh	Log.	16,33	0,9385	11,39	0,9893	13,58	0,9795
BFGS	Tanh	Linear	18,35	0,8006	11,26	0,9942	21,2	0,966
BFGS	Tanh	Linear sat.	18,88	0,8756	11,85	0,9917	22,17	0,8388
LM	Log.	Log.	6,33	0,9936	13,6	0,995	13,17	0,9914
LM	Log.	Linear	12,38	0,9714	9,84	0,9972	14,02	0,9787
LM	Log.	Linear sat.	8,64	0,9834	12,27	0,9959	20,55	0,9534
LM	Tanh	Log.	6,03	0,9944	11,77	0,9962	54,23	0,2039
LM	Tanh	Linear	10,9	0,9658	10,05	0,9966	15,74	0,9941
LM	Tanh	Linear sat.	11,98	0,9702	9,92	0,997	14,7	0,9697
RB	Log.	Log.	12,41	0,9665	17,09	0,9729	22,89	0,9208
RB	Log.	Linear	9,65	0,978	13,72	0,9918	22,98	0,9486
RB	Log.	Linear sat.	7,86	0,9909	15,33	0,9901	18,09	0,9155
RB	Tanh	Log.	12,24	0,9731	13,23	0,9913	11,02	0,9833
RB	Tanh	Linear	16,92	0,9512	20,7	0,9813	22,67	0,9768
RB	Tanh	Linear sat.	11,53	0,9706	15,46	0,9876	23,74	0,9392

Tabela 5.1: Resultados do experimento 1 (classes com normalização linear).

No segundo experimento, o qual possui a mesma identificação da matriz, porém normalização linear por partes, apesar do menor erro de validação das redes ser de 10,14, outra rede com um MAPE similar (10,7) foi escolhida por apresentar uma média entre os MAPEs de treinamento e validação inferiores à primeira. Essa rede apresenta uma maior capacidade de generalização, o que pode ser notado comparando-se o MAPE de teste dessas duas redes (16,94 e 14,59, respectivamente). A rede escolhida utiliza o mesmo treinamento do experimento anterior (LM), porém a função de ativação das camadas escondidas é a tangente hiperbólica e da camada de saída é a logística (tabela 5.2). O resultado dessa rede se mostrou inferior ao experimento anterior.

Apesar do MAPE da melhor rede ser semelhante, em torno de 13% para todos os conjuntos, a correlação é significativamente pior (0,8154).

Trein.	Funções de ativação		Treinamento		Validação		Teste	
	escondidas	saída	MAPE	Corr	MAPE	Corr	MAPE	Corr
BFGS	Log.	Log.	12,63	0,9246	14,65	0,9756	23,39	0,6909
BFGS	Log.	Linear	13,39	0,929	13,22	0,98	24,65	0,7101
BFGS	Log.	Linear sat.	22,24	0,6806	14,89	0,955	24,96	0,531
BFGS	Tanh	Log.	13,97	0,8811	11,66	0,9599	18,81	0,9819
BFGS	Tanh	Linear	14,58	0,7319	17,1	0,9238	24,67	0,6648
BFGS	Tanh	Linear sat.	17,58	0,807	10,14	0,9933	16,94	0,9714
LM	Log.	Log.	12,31	0,7015	17,4	0,7855	22,45	0,8688
LM	Log.	Linear	10,91	0,8799	14,85	0,8388	12,95	0,9463
LM	Log.	Linear sat.	16,99	0,8983	12,45	0,9633	22,36	0,7978
LM	Tanh	Log.	15,51	0,8043	10,7	0,8154	14,59	0,9239
LM	Tanh	Linear	15,07	0,7573	16,5	0,7291	16,94	0,9138
LM	Tanh	Linear sat.	18	0,7928	18,13	0,7832	16,4	0,9526
RB	Log.	Log.	10,41	0,8647	18,14	0,7741	21,72	0,6669
RB	Log.	Linear	16,94	0,5818	20,56	0,7228	22,97	0,6627
RB	Log.	Linear sat.	14,84	0,6419	22,14	0,6307	23,64	0,6273
RB	Tanh	Log.	15,92	0,8023	19,89	0,9534	22,61	0,755
RB	Tanh	Linear	16,84	0,5772	19,87	0,709	22,7	0,7047
RB	Tanh	Linear sat.	13,88	0,8433	20,11	0,9548	24,84	0,5482

Tabela 5.2: Resultados do experimento 2 (classes com normalização por partes).

No terceiro experimento, o qual possui o módulo de Young intrínseco da matriz como variável de entrada e normalização linear, a melhor rede atinge MAPE de 3,63 e correlação de 0,9988. Vale a pena lembrar que para este experimento, o melhor resultado relativo ao erro do conjunto de teste condiz com a rede escolhida. Mais uma vez a melhor rede utiliza treinamento LM, contendo a tangente hiperbólica como função de ativação nas camadas escondidas e a linear na de saída (tabela 5.3). Essa rede possui uma média de erro muito mais baixa que as anteriores (em torno de 4%) e uma correlação alta (acima de 0,99). Vale ressaltar que todas as redes desse experimento que utilizam o treinamento LM possuem MAPE de validação em torno de 5% e a correlação sempre se mantém alta.

No quarto experimento, o qual possui o módulo de Young intrínseco da matriz como variável de entrada e normalização por partes, a melhor rede atinge MAPE de 5,07 e correlação de 0,998. Mais uma vez o menor erro do teste condiz com a melhor rede. Observa-se um melhor desempenho das redes treinadas através de LM, conforme tabela 5.4. A melhor rede desse experimento tem como função de ativação nas camadas escondidas e de saída a tangente hiperbólica e a logística, respectivamente. Pode-se notar, ainda, que o desempenho dessa rede é similar ao obtido no experimento anterior, com um erro médio dos conjuntos em torno de 5% e uma correlação acima de

Trein.	Funções de ativação		Treinamento		Validação		Teste	
	escondidas	saída	MAPE	Corr	MAPE	Corr	MAPE	Corr
BFGS	Log.	Log.	13,55	0,9591	13,34	0,9632	17,22	0,9753
BFGS	Log.	Linear	19,65	0,8994	27,42	0,9245	23,1	0,969
BFGS	Log.	Linear sat.	45,17	0,7456	43,44	0,8818	37,84	0,9332
BFGS	Tanh	Log.	17,25	0,9343	16,06	0,9782	16,74	0,9751
BFGS	Tanh	Linear	16,65	0,9369	13,78	0,9874	14,97	0,9802
BFGS	Tanh	Linear sat.	26	0,8342	22,02	0,97	23,03	0,9708
LM	Log.	Log.	4,36	0,9966	5,76	0,9975	6,85	0,997
LM	Log.	Linear	8,34	0,9848	5,96	0,9981	10,55	0,9945
LM	Log.	Linear sat.	5	0,996	4,26	0,9972	5,66	0,9981
LM	Tanh	Log.	4,73	0,9964	4,64	0,9983	6,22	0,9985
LM	Tanh	Linear	4,17	0,997	3,63	0,9988	5,06	0,9977
LM	Tanh	Linear sat.	6,76	0,989	5,51	0,9987	6,8	0,9954
RB	Log.	Log.	10,54	0,9786	14,21	0,9668	13,78	0,9913
RB	Log.	Linear	8,01	0,9858	16,54	0,9667	8,66	0,9935
RB	Log.	Linear sat.	8,01	0,9858	16,54	0,9667	8,66	0,9935
RB	Tanh	Log.	9,64	0,9789	13,67	0,9735	10,1	0,9915
RB	Tanh	Linear	14,46	0,9621	15,81	0,9686	20,09	0,9805
RB	Tanh	Linear sat.	13,08	0,9611	19,8	0,9495	18,12	0,9768

Tabela 5.3: Resultados do experimento 3 (propriedades intrínsecas com normalização linear).

0,98. Entretanto, em média, ambas as métricas possuem avaliações piores que o experimento anterior.

Trein.	Funções de ativação		Treinamento		Validação		Teste	
	escondidas	saída	MAPE	Corr	MAPE	Corr	MAPE	Corr
BFGS	Log.	Log.	12,94	0,6845	24,16	0,2322	16,33	0,6802
BFGS	Log.	Linear	18,5	0,3644	19,44	0,5936	24,37	0,6641
BFGS	Log.	Linear sat.	17,58	0,4934	19,97	0,6015	25,18	0,6838
BFGS	Tanh	Log.	10,2	0,8209	15,18	0,9008	24,5	0,4557
BFGS	Tanh	Linear	14,27	0,7403	25,12	0,3438	14,66	0,8205
BFGS	Tanh	Linear sat.	16,02	0,7828	13,23	0,9751	12,44	0,86
LM	Log.	Log.	3,98	0,9855	14,17	0,9645	18,16	0,8712
LM	Log.	Linear	8,35	0,8599	12,1	0,9205	18,48	0,8013
LM	Log.	Linear sat.	7,1	0,9424	5,94	0,9911	28,03	0,654
LM	Tanh	Log.	5,24	0,9814	5,07	0,998	4,71	0,9968
LM	Tanh	Linear	7,2385	0,9489	7,4	0,956	29,78	0,705
LM	Tanh	Linear sat.	7,83	0,86	14,29	0,7821	10,96	0,9569
RB	Log.	Log.	12,95	0,6834	33,09	0,3897	12,43	0,8289
RB	Log.	Linear	18,12	0,4492	21,59	0,5915	25,99	0,7057
RB	Log.	Linear sat.	18,12	0,4492	21,59	0,5981	25,99	0,7057
RB	Tanh	Log.	11,4	0,8306	30,47	0,5547	8,31	0,9373
RB	Tanh	Linear	19,28	0,622	15,75	0,9537	17,95	0,7919
RB	Tanh	Linear sat.	17,34	0,465	22,06	0,6049	24,24	0,6049

Tabela 5.4: Resultados do experimento 4 (propriedades intrínsecas com normalização linear).

A partir dos resultados descritos, a substituição da identificação da matriz (tabelas 5.1 e 5.2) pelo módulo de Young intrínseco do polímero (tabelas 5.3 e 5.4), gerou uma diminuição do MAPE e aumento da correlação. Tal comportamento pode ser atribuído à perda de informação ao se discretizar o

domínio da variável referente à matriz. Esse resultado sugere que ao utilizar as propriedades intrínsecas das cargas pode-se melhorar o resultado obtido, porém, tais dados ainda não se encontram disponíveis na literatura. Uma forma de minorar a perda de informação é a utilização de uma codificação binária das classes. Entretanto, essa forma de codificar aumenta significativamente a quantidade de neurônios de entrada, passando de 5 para 12, o que implica na necessidade de aumentar o número de padrões de treinamento. Devido à pouca quantidade de dados disponíveis, nesse trabalho essa abordagem é inviável.

A comparação entre os algoritmos de treinamento pode ser vista na tabela 5.5, em que as médias e variâncias dos MAPE do conjunto de validação são apresentadas. Através desses dados, conclui-se que o algoritmo de treinamento Levenberg-Marquardt foi o mais eficiente, pois na maioria dos casos apresentou um erro menor.

Treinamento	Média	Variância
BFGS	18,22	67,55
LM	10,25	19,88
RB	19,05	23,78

Tabela 5.5: Comparação entre os algoritmos de treinamento

Outra característica importante é que, para a aproximação dos dados utilizados, a normalização linear por partes não se mostrou melhor que a uniforme. Ao se comparar os dados dos experimentos, nota-se que a média dos erros do experimento 1 e 3 são menores que as dos experimentos 2 e 4, ao contrário do que poderia se esperar com a melhor distribuição dos dados na normalização por partes (seção 5.1.1).

Sendo assim, a melhor rede encontrada atingiu um MAPE de 4,17 para o conjunto de treinamento, 3,63 para a validação e 5,06 para o teste. Tal rede possui a seguinte configuração: normalização linear uniforme dos dados; representação da matriz através do seu módulo de Young intrínseco; funções de ativação tangente hiperbólica e linear das camadas escondidas e de saída, respectivamente; algoritmo de treinamento Levenberg-Marquardt; 10 neurônios na primeira camada escondida e 2 na segunda. A figura 5.7 apresenta os dados utilizados no desenvolvimento da rede separados pelos três conjuntos. Essa figura mostra os valores alvo (o) e os valores obtidos pela rede (·). Observa-se que os dados que condizem a uma combinação matriz/carga não apresentada anteriormente a rede, são bem aproximados.

A análise da correlação entre os dados obtidos pela rede e desejados como saída é apresentada na figura 5.8. Esta figura consiste de quatro gráficos onde são plotados os dados dos valores obtidos (\mathbf{y}) pelos valores desejados

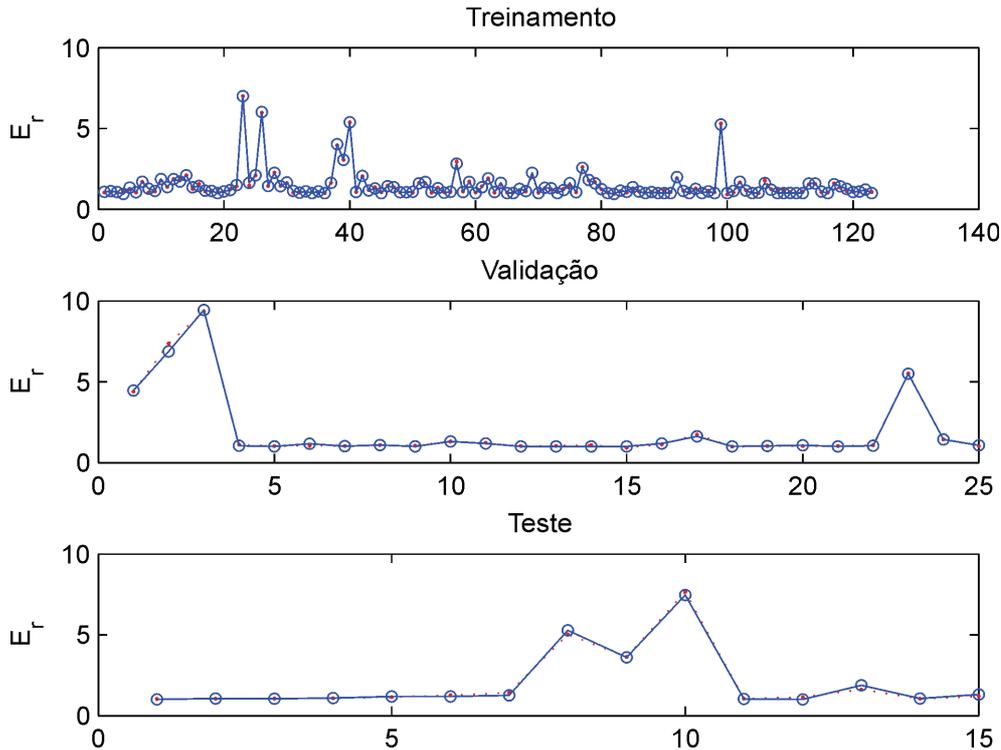


Figura 5.7: Resultados da melhor rede para os conjuntos de treinamento, validação e teste.

(\mathbf{t}) e a linha tracejada indica a melhor aproximação possível ($\mathbf{y} = \mathbf{t}$). Cada gráfico representa os conjuntos de treinamento, validação e teste, além de um quarto conjunto que engloba todos os anteriores. Observa-se em todos os casos que os dados plotados encontram-se muito próximos à reta tracejada sem que haja valores discrepantes (*outliers*). Nota-se, ainda, que os dados estão bem distribuídos entre todos os conjuntos.

5.1.3

Comportamento dos nanocompósitos

A análise do comportamento de um nanocompósito em função de suas variáveis é importante, pois permite ao especialista ter uma melhor noção da resposta do modelo. Nessa seção, mostra-se como a rede infere o módulo de elasticidade ao se variar a concentração e/ou diâmetro da partícula.

Um primeiro estudo é feito ao se variar a fração mássica da partícula (m_d/m_c) para quatro compósitos, conforme visto na figura 5.9, onde os quadrados representam os pontos experimentais e as linhas tracejadas representam a saída da rede. Os gráficos presentes nesta figura se distinguem de acordo com o nanocompósito formado: PP/SiO₂, iPP/CaCO₃, EGlass-PP/MMT e PU/CNF. Para traçar esses gráficos, quatro entradas foram mantidas constantes (mantendo a coerência dos dados experimentais relativos a cada compósito),

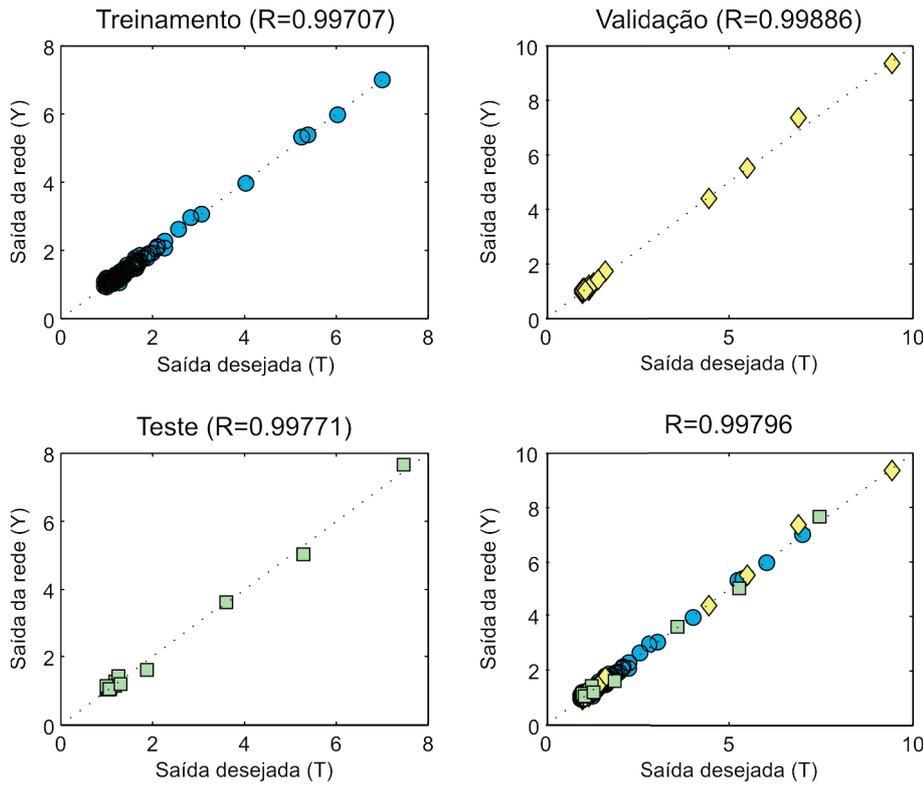


Figura 5.8: Correlação entre os valores alvo e os obtidos pela melhor rede para cada conjunto.

variando-se apenas a fração mássica da partícula. Em todos os casos, a aproximação dos dados não é linear. Em dois desses gráficos, PP/SiO₂ e PU/CNF, sugere-se um ponto de saturação, a partir do qual o E_r começa a diminuir (m_d/m_c em torno de 0,18). Tal comportamento pode ser interpretado como a aglomeração das partículas, formando partículas maiores e fazendo com que o nanocompósito passe a se comportar como um microcompósito.

Para o nanocompósito de iPP/CaCO₃, plotou-se as curvas de nível referentes ao E_r ao se variar o diâmetro (D_d) e a fração mássica (m_d/m_c) da partícula (figura 5.10). Tal partícula foi escolhida, pois os dados relativos ao seu diâmetro na criação da rede são os que mais variam. Essa figura sugere que a baixas concentrações de partículas com diâmetro pequeno obtém-se um aumento do E_r mais acentuado que ao se utilizar partículas maiores, as quais só terão desempenho similar ao atingir valores de m_d/m_c altos. Este comportamento está de acordo com os resultados que indicam que na escala nanométrica há um aumento maior do que na escala micrométrica [48].

Tanto a saturação proveniente do aumento da concentração das partículas, quanto a melhor resposta quando o diâmetro da partícula é menor, são coerentes com o comportamento esperado. Esse é um indício de que a rede é uma técnica válida para esse tipo de aproximação. Entretanto, deve-se

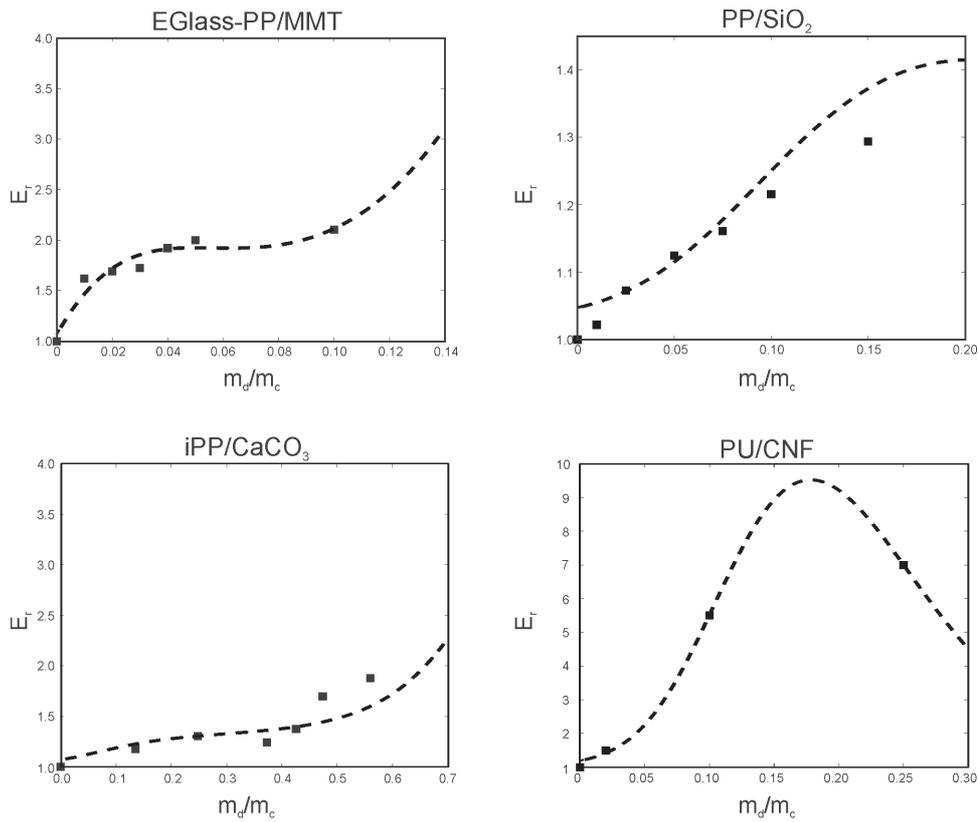


Figura 5.9: Módulo relativo do nanocompósito em função da concentração da carga.

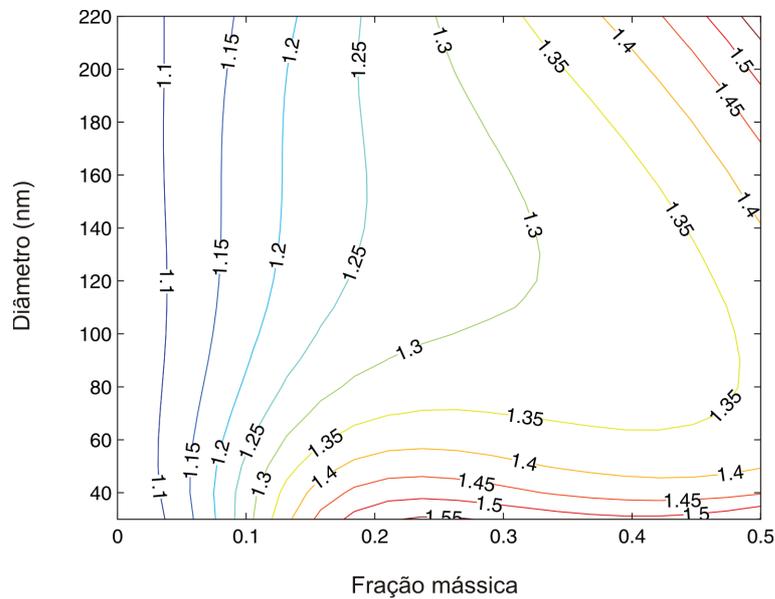


Figura 5.10: Curvas de nível referentes ao E_r em função do diâmetro e concentração de CaCO₃ em iPP.

ter em mente que apenas pode-se fazer essa análise para intervalos de valores próximos aos utilizados na aquisição da rede, a fim de evitar a obtenção de valores errôneos.

5.2 Comparação entre modelos

Na comparação entre os modelos, quatro conjuntos contendo a montmorilonita como cargas são utilizados para avaliar o modelo que mais se aproxima ao comportamento dos dados. Para isso as regras das misturas de Voigt e Reuss (seção 2.5.1) são plotadas junto com os modelos de I a IV (seção 2.5.2) propostos por Pal para partículas lamelares, com a melhor RNA obtida anteriormente e com os dados experimentais, representados por quadrados. Os parâmetros utilizados nos modelos I a IV encontram-se listados na tabela 4.7.

Na figura 5.11, é usado um nanocompósito de PA6/nanoargila orgânica para a comparação entre os modelos e a RNA (linha pontilhada). Nesse caso uma baixa concentração de carga é utilizada, não ultrapassando 3% v/v para os dados experimentais. Como pode ser visto, nesse intervalo a variação dos dados é quase linear e o modelo III é o mais adequado. A RNA não consegue aproximar a região de baixas frações volumétricas (valores abaixo de 1% v/v), embora reproduza o comportamento do modelo III para maiores frações.

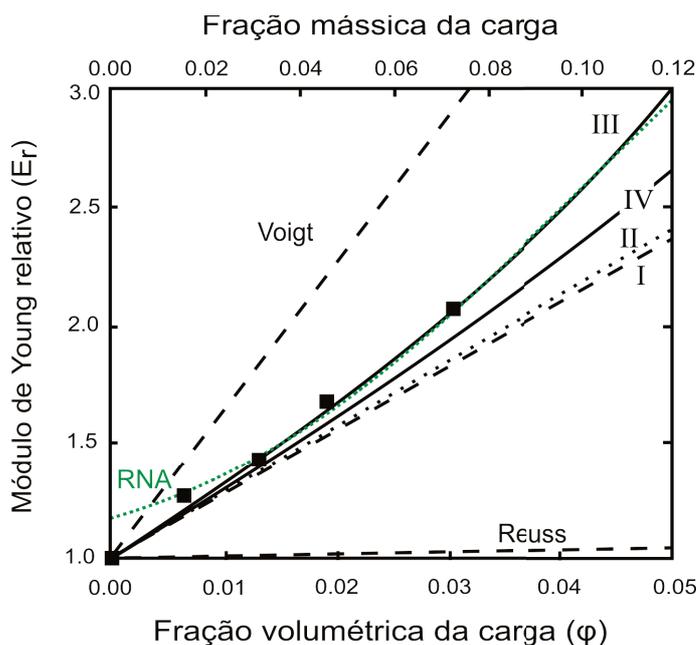


Figura 5.11: Aplicação dos modelos analíticos e da RNA ao compósito de PA6/Nanoargila.

O conjunto dos nanocompósitos de SBR/nanoargila é apresentado na figura 5.12, na qual nota-se um resultado diferente. Com uma maior faixa de fração mássica e um comportamento não linear, a RNA é capaz de inferir o comportamento dos dados, enquanto os modelos analíticos falham.

Nas figuras 5.13 e 5.14 os compósitos de NBR/nanoargila e CNBR/nanoargila são, respectivamente, comparados com os modelos. Mais

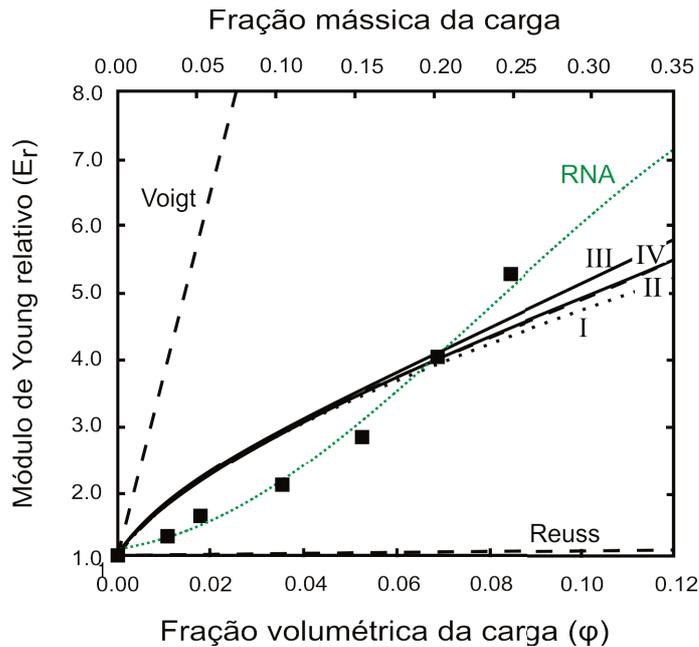


Figura 5.12: Aplicação dos modelos analíticos e da RNA ao compósito de SBR/Nanoargila.

uma vez, um comportamento não linear é observado e a capacidade da RNA de modelar essa tendência dos dados experimentais é a melhor nos dois conjuntos. Para esses casos, nota-se uma limitação dos modelos III e IV. Ao aumentar o volume das partículas além do limiar de percolação (ϕ_m), definidos como 0,12 e 0,10 para os modelos III e IV [23], respectivamente, esses modelos não são mais capazes de prever o comportamento dos compósitos. Isso pode ser notado nas equações 2-14 e evidenciado nas figuras 5.13 e 5.14. Ademais, ao utilizar um máximo de 0,55 m_d/m_c no conjunto de treinamento, a RNA é capaz de inferir compósitos com concentrações de partículas que variem até esse valor.

5.3

Algoritmo Genético

O uso de AG na síntese de materiais foi feito sobre o modelo obtido com a melhor RNA. Tal modelo foi utilizado como função de avaliação e cada indivíduo representou uma parametrização de síntese. Três casos de estudo com objetivos distintos foram realizados, sendo eles: a maximização do módulo de Young do nanocompósito (E_c), a maximização do módulo relativo (E_r) e, por fim, o múltiplo objetivo que consiste da maximização do E_r junto com a minimização da fração mássica da carga (m_d/m_c). Para a implementação do AG, utilizou-se a biblioteca GAcorn, desenvolvida pelo laboratório de Inteligência Computacional Aplicada da PUC-Rio. Os parâmetros utilizados no GA encontram-se na tabela 5.6. As probabilidades de aplicação dos operadores

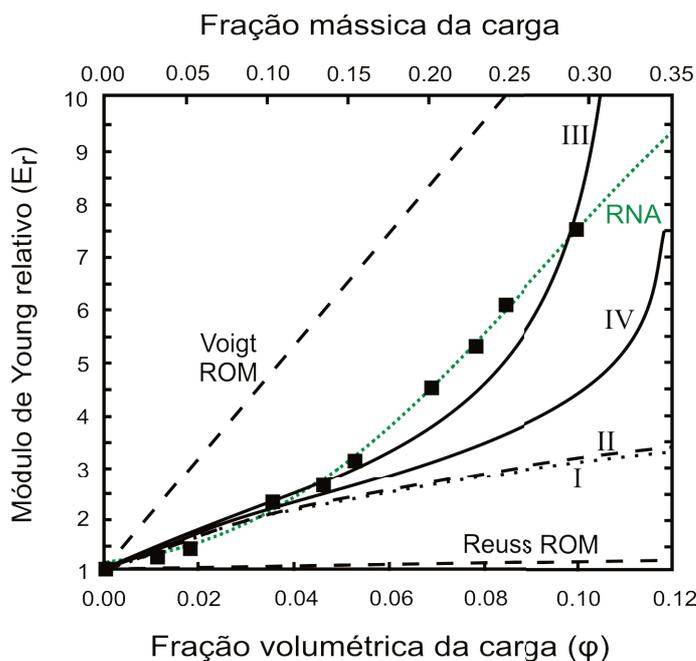


Figura 5.13: Aplicação dos modelos analíticos e da RNA ao compósito de NBR/Nanoargila.

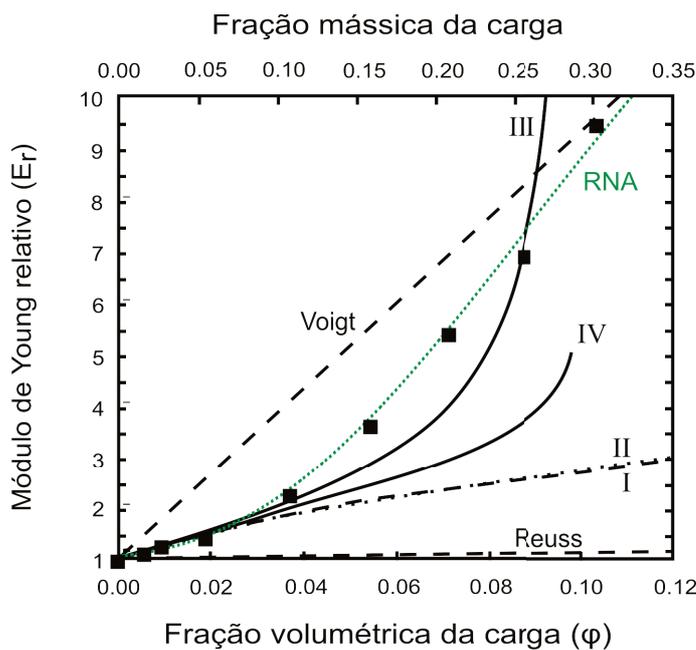


Figura 5.14: Aplicação dos modelos analíticos e da RNA ao compósito de CNBR/Nanoargila.

de cruzamento e mutação em cada indivíduo foram variadas linearmente entre os valores iniciais e finais de acordo com a geração do algoritmo.

A tabela 5.7 apresenta os resultados da execução do AG. O melhor indivíduo (parâmetros de síntese) resultante de cada objetivo é apresentado na forma de coluna. As seis primeiras linhas representam os genes (parâmetros) que formam os três indivíduos, onde ID_m é a identificação da matriz, E_m seu

Parâmetro	Valor
Tamanho da população	20
Número de gerações	300
Indivíduos criados por geração	18
Prob. de cruzamento (inicial)	0,8
Prob. de cruzamento (final)	0,4
Prob. de mutação (inicial)	0,08
Prob. de mutação (final)	0,3

Tabela 5.6: Parâmetros de configuração utilizados na execução do AG.

módulo de Young intrínseco, ID_d é a identificação da partícula, D_d seu diâmetro e RA_d sua razão de aspecto. A última linha diz respeito aos resultados das funções de avaliação (resultados dos objetivos) relativas a esses indivíduos.

Parâmetro	Objetivos		
	E_c	E_r	E_r e m_d/m_c
ID_m	3	6	6
E_m (GPa)	4,23	3,87	3,86
ID_d	9	9	9
m_d/m_c	0,11	0,11	0,096
D_d (nm)	2,62	2,62	2,62
RA_d	1111	1065	1014
Avaliação	103,28 GPa	22,26	1,414

Tabela 5.7: Resultados dos três casos de estudo do AG.

O processo de evolução do AG nos três casos selecionou apenas duas matrizes: PMMA ($ID_m=3$) e EGlass-PP ($ID_m=6$). Para o estudo de caso em que E_c foi maximizado, a matriz escolhida (PMMA) foi diferente dos demais casos, que usaram EGlass-PP, sendo o PMMA a matriz que possui maior módulo entre as utilizadas na confecção da rede ($E_m = 4,7$ GPa).

Para cada matriz os valores dos módulos de Young intrínsecos tenderam aos mínimos permitidos, cujos valores são 4,23 e 3,70 GPa para o PMMA e EGlass-PP, respectivamente. Cada matriz possui um intervalo relativo ao seu módulo de Young intrínseco, cujo limite inferior subtraído de 10% determina o valor mínimo de parametrização desse módulo.

Em todos os casos a partícula escolhida foi o nanotubo de carbono de parede dupla aminofuncionalizado ($ID_d=9$). O diâmetro obtido para essa partícula é próximo ao mínimo possível (2,52 nm), sendo esse calculado da mesma forma que o mínimo admissível para o E_m . Considerando que o intervalo admissível para a razão de aspecto de uma partícula baculiforme vai de zero a 2500, vale ressaltar que, em geral, o valor obtido pelo AG para tal parâmetro está em torno de 1100. Somente para o caso de múltiplos objetivos a fração

mássica não foi a máxima possível (0,11), pois o seu aumento produz uma diminuição na avaliação final do indivíduo.

A fim de comparar os resultados obtidos pela otimização com os dados disponíveis no desenvolvimento da rede, avaliou-se os módulos relativos ($E_r = E_c/E_m$) de cada objetivo. Os E_r resultantes dos objetivos de maximizar E_c e E_r , são de 21,96 e 22,26, respectivamente, enquanto que no múltiplo objetivo esse valor é de 18,98 (proveniente da desnormalização do módulo utilizado no múltiplo objetivo). Todos esses valores ultrapassaram os usados na elaboração da rede. Além disso, os resultados das otimizações, em todos os casos, propuseram a criação de novos nanocompósitos formados a partir de combinações entre matrizes e carga que não foram apresentados às redes. Esses compósitos devem ser fabricados experimentalmente de forma a validar os resultados.