การประชุมวิชาการเครือข่ายวิศวกรรมเครื่องกลแห่งประเทศไทยครั้งที่ 17
15-17 ตุลาคม 2546 จังหวัดปราจีนบุรี

การใช้ขั้นตอนวิธีเชิงพันธุกรรมในการหาค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองคอนสติติวทีฟของพอลิเมอร์

Using a Genetic Algorithm to Identify Parameters of a Constitutive Model for Polymers

นายวัฒนะ สืบกินร[1] ดร.อริสรา ชัยกิตติรัตนา[2*] ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ณชล ไชยรัตนะ[3*]
[1] ภาควิชาวิศวกรรมไฟฟ้า [2]ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล [3]ศูนย์วิจัยและพัฒนาระบบอัจฉริยะ
คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าพระนครเหนือ
1518 ถ.พิบูลสงคราม เขตบางซื่อ กรุงเทพฯ 10800
E-mail: acn@kmitnb.ac.th[2], stl@kmitnb.ac.th[3]

W. Seubkinorn[1], A. Chaikittiratana[2] and N. Chaiyaratana[3]
[1]Department of Electrical Engineering, [2] Department of Mechanical Engineering, [3] Research and Development Center for Intelligent Systems
Faculty of Engineering, King Mongkut's Institute of Technology North Bangkok
1518 Pibulsongkram Rd, Bangsue Bangkok 10800 Thailand
E-mail: acn@kmitnb.ac.th[2], nchl@kmitnb.ac.th[3]

บทคัดย่อ

ความยากของการพัฒนาวิเคราะห์สมการคอนสติติวทีฟของวัสดุวีสโคอีลาสติก (viscoelastic) คือความแม่นยำในการกำหนดค่าพารามิเตอร์คงที่ต่าง ๆ ที่ปรากฏอยู่ในสมการคอนสติติวทีฟซึ่งความสัมพันธ์ของค่าความเค้นและค่าความเครียดเป็นความสัมพันธ์ที่ซับซ้อน แบบจำลองคอนสติติวทีฟจึงมีความซับซ้อนและมีความไม่เป็นเชิงเส้นสูง โดยทั่วไปในการหาค่าคงที่ในแบบจำลองคอนสติติวทีฟนั้นต้องการความรู้ในเรื่องวัสดุวิทยา คณิตศาสตร์ และการปฏิสัมพันธ์ระหว่างเครื่องคอมพิวเตอร์กับมนุษย์อย่างมาก

ในงานวิจัยนี้นำเสนอวิธีการหาค่าพารามิเตอร์ของคอนสติติวทีฟโมเดลของพอลิเมอร์ โดยการใช้ขั้นตอนวิธีเชิงพันธุกรรมแบบหลายจุดประสงค์ที่มีการควบคุมความแตกต่าง (Multi-Objective and diversity control oriented : MODCGA) ด้วยการกำหนดค่าจุดประสงค์ที่แตกต่างกันโดยการรวมค่าผิดผลาดที่เป็นผลต่างระหว่างข้อมูลที่ได้จากการทดลองการคืบและการทดลองการบีบอัดด้วยอัตราความเครียดคงที่กับผลการจำลอง ค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากวิธีการค้นหาด้วย MODCGA นั้นมีความคล้ายคลึงกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการค้นหาด้วยมือ (Trial and error manual fitting method) อย่างไรก็ตาม MODCGA มีการปฏิสัมพันธ์กันระหว่างผู้ใช้งานกับคอมพิวเตอร์น้อยเมื่อเทียบกับวิธีการค้นหาด้วยมือโดยค่าพารามิเตอร์ที่ได้เกิดจากกระบวนการที่เป็นอัตโนมัติ อีกทั้ง MODCGA ไม่ต้องการการกำหนดค่าเริ่มต้น (initial guess values)ที่เหมาะสมโดยอาศัยความรู้จากผู้เชี่ยวชาญ

Abstract

This paper presents an alternative approach for determining non-linear viscoelastic parameters of a constitutive model for glassy polymers using a multi-objective diversity control oriented genetic algorithm (MODCGA). The algorithm is a stochastic multi-objective optimisation technique. In this work, minimisation objectives are defined from errors between the experimental data (creep-recovery and constant strain rate compressive tests) and the simulation results. The parameters obtained by the MODCGA are found to be similar to that obtained previously using a knowledge-based iterative trial-and-error manual fitting method. However, the use of MODCGA requires much less human-computer interaction during the optimisation process and more refined solutions can be obtained without initial guess values being provided.

1. บทนำ

อุปสรรค์ของการพัฒนาสมการวิสโคอิลาสติกคอนสติติวทีฟ คือความแม่นยำของค่าพารามิเตอร์ที่เป็นค่าคงที่ของสมการซึ่งค่าความเค้นและค่าความเครียดมีความสัมพันธ์กันอย่างซับซ้อน ซึ่งส่งผลให้สมการคอนสติติวทีฟมีความซับซ้อนและไม่เป็นเชิงเส้นโดยทั่วไปในการค่าพารามิเตอร์ที่เป็นค่าคงที่ของสมการจำเป็นต้องมีความรู้ในด้านวัสดุศาสตร์ คณิตศาสตร์และการปฏิสัมพันธ์ระหว่างมนุษย์กับคอมพิวเตอร์อย่างมาก

แบบจำลองคอนสติติวทีฟที่อธิบายพฤติกรรมที่ไม่เป็นเชิงเส้นของกลาสซี่พอลิเมอร์เป็นแบบจำลองใหม่ที่นำเสนอในงานวิจัยของ Chaikittiratana และ Buckley [1] ซึ่งสามารถอธิบายพฤติกรรมของการเปลี่ยนรูปภายใต้การเปลี่ยนแปลงของโหลดด้วยชุดพารามิเตอร์เพียงชุดเดียว ค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการค้นหาด้วยมือ โดยใช้ความรู้จากผู้เชี่ยวชาญ เปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากหลายการทดลองจนผลลัพธ์สอดคล้องกัน ในการค้นหาค่าพารามิเตอร์จากวิธีดังกล่าวมีความยุ่งยากและระยะเวลาในการทำงานกับคอมพิวเตอร์ที่ยาวนาน

อย่างไรก็ตามกระบวนการของการหาค่าพารามิเตอร์สามารถจัดเป็นปัญหาของการหาค่าคำตอบที่ดีที่สุดของปัญหาที่ไม่เป็นเชิงเส้นซึ่งเทคนิคของการหาค่าคำตอบที่ดีที่สุดที่ไม่เป็นเชิงเส้นอย่างเช่น วิธีขั้นตอนเชิงพันธุกรรม สามารถใช้เป็นอีกทางเลือกหนึ่งในการหาค่าพารามิเตอร์

2. แบบจำลองคอนสติติวทีฟของกลาสซีพอลิเมอร์

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ใหม่ที่นำเสนอในงานวิจัยของ Chaikittiratana และ Buckley [1] มีพื้นฐานมาจากแบบจำลองคอนสติติวทีฟของ Dooling และคณะ [2] ที่มีสมบัติเหมือนกันทั้ง 3 มิติ (Isotropic) ในแบบจำลองใหม่ใช้สมมุติฐานว่าโครงสร้างของการเรียงตัวของโพลีเมอร์โมเลกุลจะเปลี่ยนไปขณะมีการเสียรูป ความไม่เป็นเชิงเส้นจึงไม่ได้เกิดจากผลกระทบของค่าความเค้นเท่านั้น แต่ผลกระทบของการเปลี่ยนโครงสร้างในช่วงการเสียรูปก็ส่งผลให้เกิดความไม่เป็นเชิงเส้นของพฤติกรรมเชิงกลด้วย ผลกระทบของการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างและความเค้นที่ก่อให้เกิดความเปลี่ยนแปลงแบบไม่เชิงเส้นของ τ_j (Effective relaxation time) ซึ่งสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\tau_j = a_{\sigma,j} a_{T_f,j} \tau_{0,j} \qquad (1)$$

โดย

$$a_{\sigma,j} = \frac{V_{s,j} s^b_{oct,j}}{2RT} \frac{\exp\left(\frac{-V_{p,j}\sigma^b_m}{RT}\right)}{\sinh\left(\frac{V_{s,j} s^b_{oct,j}}{2RT}\right)}, \qquad (2)$$

$$a_{T_f,j} = \exp\left(\frac{C}{T_{f_0} + \Delta T_f - T_\infty} - \frac{C}{T_{f_0} - T_\infty}\right) \qquad (3)$$

$$\Delta T_{f_j} = T_{f_j} - T_{f0} = (T_{f\infty} - T_{f0})\left[1 - \exp\left(-\frac{\bar{\varepsilon}^v{}_j}{\varepsilon_0^v}\right)\right] \qquad (4)$$

$\tau_{0,j}$ คือ relaxation time ใน linear viscoelastic region, $s^b_{oct,j}$ คือ octahedral shear stress และ σ^b_m คือ mean stress $V_{p,j}$ และ $V_{s,j}$ คือ pressure and shear activation volumes ตามลำดับ โดยสมมุติ ทุก $\tau_{0,j}$ มีค่า $V_{p,j}$ และ $V_{s,j}$ เท่ากัน

ในแบบจำลองไม่เป็นเชิงเส้นวีสโคอิลาสติก มีค่าพารามิเตอร์ทั้งหมด 5 ตัว คือ $T_{f_\infty}, T_{fo}, V_s, V_p$ และ $\varepsilon_0{}^v$

3. ขั้นตอนวิธีเชิงพันธุกรรมแบบหลายจุดประสงค์ที่มีการควบคุมแตกต่าง (MODCGA)

เป็นการผสมผสานการทำงานกันระหว่างขั้นตอนวิธีเชิงพันธุกรรมแบบหลายจุดประสงค์ (MOGA) นำเสนอโดย Fonseca และ Fleming [3] และขั้นตอนวิธีเชิงพันธุกรรมที่มีการควบคุมความแตกต่าง (DCGA) นำเสนอโดย Shimodaira [4] MOGA ทำงานแตกต่างจากขั้นตอนวิธีเชิงพันธุกรรมมาตรฐาน (SGA) ตรงการคำนวณความแข็งแรง โดยใช้วิธีการจัดอันดับ (Ranking) เป้าหมายเพื่อหาค่าคำตอบที่ข่ม (Dominate) กันในเชิงค่าจุดประสงค์ กล่าวคือในปัญหาค่าต่ำสุดเวคเตอร์ของค่าจุดประสงค์ที่ได้จากค่าคำตอบ a น้อยกว่าหรือเท่ากับ ทุกตัวของสมาชิกของเวกเตอร์ค่าจุดประสงค์ที่ได้จากค่าคำตอบ *b (a p< b)*, i.e.

$$\mathbf{a}\ \ p < \mathbf{b} \leftrightarrow \forall i = 1,...,n : a_i \le b_i \wedge \exists i = 1,...,n : a_i < b_i \qquad (5)$$

จากสมการที่ (5) เราสามารถหาอันดับของค่าคำตอบใด ๆ ที่เราสนใจจากกลุ่มสมาชิกทั้งหมดได้ โดยนัยอันดับก็คือจำนวนค่าคำตอบที่ข่ม (Dominate) ค่าคำตอบที่เรากำลังพิจารณาจากทั้งกลุ่มประชากร ดั้งนั้นค่าคำตอบที่เรากำลังพิจารณาจะเป็นอันดับศูนย์ (Rank 0) ก็ต่อเมื่อ ไม่มีค่าคำตอบใดเลยจากทั้งหมดที่ข่ม (non-dominate) ค่าคำตอบที่เรากำลังพิจารณา โดยเป้าหมายของการค้นหาก็คือการค้นหากลุ่มของคำตอบที่เป็น Pareto optimal เซต ซึ่งก็คือ เซตของค่าคำตอบที่เป็น non-dominate อย่างแท้จริง หลังจากผ่านการจัดอันดับสามารถเปรียบเทียบเป็นค่าความแข็งแรงได้ (Fitness interpolation)

ส่วนการทำงานที่เป็น DCGA เริ่มโดยนำประชากรที่เป็นพ่อแม่และประชากรรุ่นลูกมารวมกัน และกำจัดค่าคำตอบที่ซ้ำกันทิ้ง ทำการจัดอันดับอีกครั้งเพื่อหาค่าความแข็งแรงใหม่และเรียงค่าคำตอบตามค่าความแข็งแรง เลือกคำตอบที่จะนำไปใช้ในรอบการคำนวณถัดไป ด้วยความน่าจะเป็น (CPSS : cross probabilistic survival selection) กำหนดค่าความน่าจะเป็นของแต่ละคำตอบได้ตามสมการที่ (6) ข้างล่าง หากได้ไม่ครบตามจำนวนที่ต้องการจะต้องสุ่มคำตอบขึ้นมาใหม่จนครบตามจำนวน

$$p_s = \{(1-c)h/L + c\}^\alpha \qquad (6)$$

โดย

- h คือระยะแฮมมิ่ง (hamming distance)
- L คือความยาวของสายรหัส
- c คือสัมประสิทธิ์ของรูปร่าง (Shape Coefficient)
- α คือตัวยกกำลัง (Exponent)

4. การประยุกต์ใช้ MODCGA ขั้นตอนในการหาค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองคอนสติติวทีฟของพอลิเมอร์

ในงานวิจัยนี้ MODAGA ทำหน้าที่ค้นหาค่าพารามิเตอร์ต่าง ๆ ทั้ง 5 ได้แก่ V_s, V_p, $T_{f\infty}$, T_{f0} C_{Tf} โดย $C_{Tf} = (T_{f0} - T_{f\infty})/\varepsilon_0^v$. ขอบเขตของการค้นหากำหนดโดยใช้ความรู้จากผู้เชี่ยวชาญ ตามตารางที่ 1

ตารางที่ 1 ขอบเขตของการค้นหา (Search range) ของ parameter.

V_s (m^3/mol)	V_p (m^3/mol)	$T_{f\infty}$ (K)	T_{f0} (K)	C_{Tf} (K)
0.0-0.1	0.00-0.01	370-390	350- $T_{f\infty}$	0-10,000

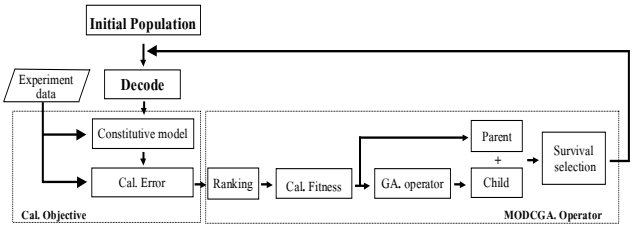
ในงานวิจัยนี้ค่าพารามิเตอร์หาโดยใช้ขั้นตอนวิธีเชิงพันธุกรรมแบบ MODCGA การหาค่าพารามิเตอร์ที่เหมาะสมที่สุดถูกพิจารณาจากหลายจุดประสงค์ แต่ละจุดประสงค์กำหนดโดยการรวมค่าผิดพลาดกำลังสอง (Squared error) ระหว่างข้อมูลที่ได้จากการทดลองที่แตกต่างกันกับผลการจำลองของคอนสติติวทีฟโมเดลและเงื่อนไขเพิ่มเติม ซึ่งในการกำหนดแบบ 7 ค่าจุดประสงค์ โดย 4 จุดประสงค์แรก กำหนดได้จากค่าผิดพลาดของการทดลองการคืบที่ค่าความเค้นแตกต่างกัน 4 ค่า อีก 2 ค่าจุดประสงค์กำหนดจากค่าผิดพลาดของความเค้นที่จุดสูงสุด (Yield peak) และความเค้นที่จุดต่ำสุดภายหลังค่าสูงสุด (Trough) ระหว่างการทดลองการบีบอัดที่อัตราความเค้นคงที่กับผลการจำลอง และจุดประสงค์สุดท้ายกำหนดจากค่าผิดพลาดของความเค้นที่จุดสูงสุด (Yield peak) ระหว่างการจำลองการดึงที่ประมาณด้วยอัตราส่วน 1.3 (“*Universal ratio*”) ของการทดลองการบีบอัดกับการจำลองการดึงจากคอนสติติวทีฟโมเดลที่อัตราความเครียดคงที่

เป้าหมายการทำงานของ MODCGA คือการค้นหาค่าพารามิเตอร์ที่ให้ค่าจุดประสงค์ (ค่าผิดพลาด) ต่ำที่สุด จากค่าผิดพลาดทั้ง 7 ค่า สามารถกำหนดเป็นค่าจุดประสงค์ 7 ค่าจุดประสงค์ (Minimisation Objectives) ซึ่งได้สรุปไว้ตามตารางที่ 2

ตารางที่ 2 การกำหนดค่าจุดประสงค์ (Minimisation Objectives)

ค่าจุดประสงค์	คำอธิบาย
Error 1	Sum of squared errors between the experimental data and simulation of creep recovery test at 9.94 MPa
Error 2	Sum of squared errors between the experimental data and simulation of creep recovery test at 11.55 MPa
Error 3	Sum of squared errors between the experimental data and simulation of creep recovery test at 14.45 MPa
Error 4	Sum of squared errors between the experimental data and simulation of creep recovery test at 19.66 MPa
Error 5	Squared error between the experimental and simulated values of compressive stress at the yield peak
Error 6	Squared error between the experimental and simulated values of compressive stress at the minimum yield drop
Error 7	Squared error between the calculated value using the universal ratio of 1.3 and simulated value of tensile stress at the yield peak

ขั้นตอนตอนการประยุกต์ใช้ MODCGA ในการหาค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองคอนสติติวทีฟของพอลิเมอร์สามารถสรุปได้ใน Flow chart ดังรูปที่ 1



รูปที่ 1 Flow chart ขั้นตอนตอนการประยุกต์ใช้ MODCGA ในการหาค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองคอนสติติวทีฟของพอลิเมอร์

5. ผลการจำลอง

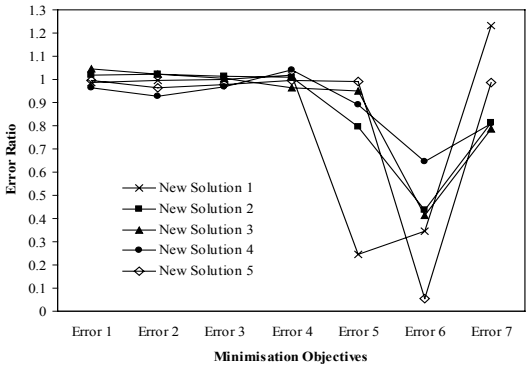
การทำงานของ MODCGA สามารถให้ค่าคำตอบที่แตกต่างกันจากการประมาณผลที่เป็นอัตโนมัติ ซึ่งแตกต่างจากเทคนิคของการหาคำตอบแบบมาตรฐานทั่วไปซึ่งจะให้คำตอบเพียงชุดเดียว อีกทั้ง MODCGA ไม่ต้องใช้ฐานความรู้ (Knowledge-based) ในการกำหนดค่าเริ่มต้นที่เหมาะสม

ค่าชุดคำตอบที่ไม่ข่มกัน (Non-dominated solutions) สามารถหาได้จาก MODCGA มาทั้งหมด 5ชุด ชุดคำตอบของค่าพารามิเตอร์แต่ละชุดประกอบด้วย 5 พารามิเตอร์ที่ได้จาก MODCGA และค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการค้นหาด้วยการลองผิดลองถูก (Trial and error) [1] ได้แสดงในตารางที่ 3

ตารางที่ 3: ชุดพารามิเตอร์ที่ได้จาก MODCGA

Optimised Parameter Set	V_s (m^3/mol)	V_p (m^3/mol)	$T_{f\infty}$ (K)	T_{f0} (K)	C_{Tf} (K)
1 (MODCGA)	0.00228	0.000339	385.34	379.39	1460.57
2 (MODCGA)	0.00228	0.000318	385.57	379.55	1571.66
3 (MODCGA)	0.00228	0.000317	385.57	379.59	1656.49
4 (MODCGA)	0.00231	0.000321	386.22	379.94	1647.34
5 (MODCGA)	0.00231	0.000329	383.93	378.92	1376.34
Manual [1]	0.002300	0.000330	382.00	378.00	1100.00

จะสังเกตได้ชัดเจนว่าค่าคำตอบที่ได้จาก MODCGA มีความใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากงานวิจัยอันก่อน[1] ซึ่งค่าผิดพลาดจากชุดค่าพารามิเตอร์ในตารางที่ 3 ได้แสดงไว้ในรูปที่ 2 โดยเทียบเป็นสัดส่วน(Ratio) กับค่าผิดพลาดจากชุดค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการค้นหาด้วยการลองผิดลองถูกจากงานวิจัยอันก่อน[1]



รูปที่ 2 ค่าสัดส่วนระหว่างค่าผิดพลาดจากชุดค่าพารามิเตอร์ที่หาโดย MODCGA เทียบกับค่าผิดพลาดจากชุดค่าพารามิเตอร์ที่หาด้วยการลองผิดลองถกจากงานวิจัยอันก่อน[1]

จากรูปที่ 3 จะเห็นได้ว่า ชุดค่าพารามิเตอร์ที่ได้มาใหม่สามารถลดค่าจุดประสงค์ Error 5 ถึง Error 7 ได้ โดยที่ค่าจุดประสงค์ Error 6 ได้รับการปรับปรุงอย่างเห็นได้ชัดเจน ทั้งนี้ชุดค่าค่าพารามิเตอร์ที่ได้มาใหม่ชุดที่ 5 สามารถปรับปรุงค่าความผิดพลาดจากเดิมได้ทุกค่าจุดประสงค์ (Ratio <1.0 ทั้งหมด)

ทั้งนี้จากผลการจำลองพบอีกว่าการเลือกกำหนดค่าผิดพลาดเป็นสิ่งสำคัญ โดยถ้าลองละเลยไม่นำค่าผิดพลาดที่ 7 เข้าร่วมกำหนดเป็นค่าจุดประสงค์พบว่าค่าพารามิเตอร์ที่ได้แตกต่างจากที่แสดงในตารางที่ 3 และพบว่าในการกำหนดขอบเขตของการค้นหามีความสำคัญต่อการค้นหาค่าคำตอบของค่า Tf_{∞} และ T_{f0} เมื่อผลกระทบของการคืนรูป (Recovery) และยิลด์ดรอบ (Yield drop) มีความไวต่อผลต่างของ $T_{f\infty}$ และ T_{f0} ไม่ใช่ที่ absolute value ของแต่ละค่า

5. สรุป

MODCGA สามารถหาค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองคอนสติติวทีฟของกลาสซี่พอลิเมอร์ โดยใช้ข้อมูลจากการทดลองต่าง ๆ และเงื่อนไขเพิ่มเติมในการกำหนดค่าจุดประสงค์หลายจุดประสงค์ และ MODCGA ให้ค่าพารามิเตอร์ที่เป็นคำตอบที่แตกต่างกัน โดยไม่ต้องจำเป็นต้องกำหนดค่าเริ่มต้น(initial guess values) อีกทั้ง MODCGA ยังสามารถให้ค่าคำตอบที่มีความละเอียดสูงกว่าการค้นหาด้วยมือ อย่างไรก็ตามความรู้จากผู้เชี่ยวชาญยังคงจำเป็นต่อการกำหนดค่าจุดประสงค์ต่างๆ ขอบเขตของการค้นหาและเลือกค่าพารามิเตอร์ที่เป็นไปได้อย่างเหมาะสมจากกลุ่มของค่าพารามิเตอร์ที่เป็นคำตอบ

เอกสารอ้างอิง

[1] A. Chaikittiratana and C. P. Buckley, “Nonlinear viscoelastic deformation modelling for glassy engineering polymers”, Proceedings of the JSME/ASME International Conference on Materials and Processing, Honolulu, HI , pp. 455, 2002.

[2] P. J Dooling, C. P Buckley and S. Hinduja, “The onset of nonlinear viscoelasticity in multiaxial creep of glassy polymers: A constitutive model and its application to PMMA”, Polymer Engineering and Science, 38(6), pp. 892, 1998.

[3] C. M. Fonseca and P. J. Fleming, “Genetic algorithms for multiobjective optimization: Formulation, discussion and generalization, Genetic Algorithms”, Proceedings of the 5th International Conference, Urbana-Champaign, IL, pp. 416, 1993.

[4] H. Shimodaira, DCGA: A diversity control oriented genetic algorithm, The Second International Conference on Genetic Algorithms in Engineering Systems: Innovations and Applications (GALESIA’97), Glasgow, UK , pp. 444, 1997.