



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE INFORMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS DA COMPUTAÇÃO

JOSÉ GUILHERME BISPO DE ALBUQUERQUE LIMA

**INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL APLICADA À DESCOBERTA INTELIGENTE DE
MATERIAIS NANOFOTÔNICOS**

Recife

2023

JOSÉ GUILHERME BISPO DE ALBUQUERQUE LIMA

**INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL APLICADA À DESCOBERTA INTELIGENTE DE
MATERIAIS NANOFOTÔNICOS**

Dissertação apresentada ao programa de pós graduação em Ciências da Computação do Centro de Informática da Universidade Federal de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Ciência da Computação.

Área de concentração: Inteligência Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Adiel Teixeira de Almeida Filho.

Coorientador: Prof. Dr. Anderson Stevens Leôndas Gomes.

Recife

2023

L732i	Lima, José Guilherme Bispo de Albuquerque Inteligência artificial aplicada à descoberta inteligente de materiais nanofotônicos / José Guilherme Bispo de Albuquerque Lima. – 2023. 82 f.: il., fig., tab. Orientador: Adiel Teixeira de Almeida Filho. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. Cln, Ciência da Computação, Recife, 2023. Inclui referências e apêndices. 1. Nanobastões de ouro. 2. Algoritmos genéticos multiobjetivo. 3. Otimização. 4. Revisão sistemática. 5. Métodos dos elementos finitos. I. Almeida Filho, Adiel Teixeira de (Orientador). II. Título.	
004	CDD (23. ed.)	UFPE - CCEN 2023 – 203

José Guilherme Bispo de Albuquerque Lima

**INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL APLICADA À DESCOBERTA INTELIGENTE
DE MATERIAIS NANOFOTÔNICOS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciência da Computação. Área de Concentração: Inteligência Computacional.

Aprovado em: 23/10/2023.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Paulo Salgado Gomes de Mattos Neto
Centro de Informática / UFPE

Profa. Dra. Isabel Cristina dos Santos Carvalho
Departamento de Física / PUC/RJ

Prof. Dr. Adiel Teixeira de Almeida Filho
Centro de Informática / UFPE
(orientador)

AGRADECIMENTOS

Esta pesquisa foi apoiada pela Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco (FACEPE) através do Processo N^o.: IBPG-1118-1.03/21.

Agradeço à minha família por todo apoio sempre, em especial a minha mãe, Gleide Bispo.

Agradeço à equipe da PUC-Rio por todo suporte nas simulações em elementos finitos e conceitos de óptica, em especial ao Yan Machado e Leonardo Araújo.

Agradeço aos amigos pelos conselhos, Filipe e Jefferson.

Agradeço ao orientadores pela oportunidade da pesquisa.

RESUMO

A otimização de nanobastões de ouro ainda enfrenta desafios, especialmente devido à complexidade do processo, que envolve múltiplos objetivos, como: eficiência, custo, e escalabilidade do processo de fabricação. Os Algoritmos Genéticos (AG) são capazes de produzir soluções de qualidade para problemas complexos em um tempo computacional viável, e são particularmente adequados para otimizar materiais nanofotônicos, pois podem explorar espaços de soluções amplos e otimizar múltiplos objetivos simultaneamente, o que é fundamental devido à interdependência das propriedades ópticas e geométricas do material em tais aplicações. Neste trabalho foram obtidas configurações de nanobastões de ouro através da implementação de um algoritmo genético multiobjetivo (AGM), com o propósito de encontrar um espaço de soluções que melhorem o desempenho das curvas de seção transversal de extinção, métrica que mede a eficiência de absorção de luz em nanobastões. O trabalho iniciou com uma revisão sistemática das aplicações da Inteligência Artificial (IA), como Aprendizado Profundo, AG no aprimoramento e desenvolvimento de materiais nanofotônicos para entender como essas áreas se relacionam entre si, buscando fornecer uma visão baseada em evidências dos principais trabalhos publicados. O software de elementos finitos, Comsol Multiphysics, também foi utilizado para simulação das configurações finais do AGM. O algoritmo operou em regime restrito de intervalos de valores dos parâmetros e funções objetivo, também foram aplicados testes estatísticos de hipóteses para validação dos resultados.

Palavras-chave: nanobastões de ouro; algoritmos genéticos multiobjetivo; otimização; revisão sistemática; métodos dos elementos finitos.

ABSTRACT

The optimization of gold nanorods still faces challenges, especially because of the complexity of the process, which involves multiple objectives, such as: efficiency, cost, and scalability of the manufacturing process. Genetic Algorithms (GA) are capable of producing quality solutions to complex problems in a viable computational time and are particularly suitable for optimizing nanophotonic materials, as they can explore broad solution spaces and optimize multiple objectives simultaneously, which is fundamental due to the interdependence of the optical and geometric properties of the material in such applications. In this work, configurations of gold nanorods were obtained through the implementation of a multi-objective genetic algorithm (MOGA), with the purpose of finding a space of solutions that improve the performance of extinction cross-section curves, a metric that measures the absorption efficiency of light in nanorods. The work began with a systematic review of the applications of Artificial Intelligence (AI), such as Deep Learning, and GA in the improvement and development of nanophotonic materials to understand how these areas relate to each other, seeking to provide an evidence-based view of the main published works. The finite element software, Comsol Multiphysics, was also used to simulate the final MOGA configurations. The algorithm operated within a restricted regime of parameter value ranges and objective functions. Statistical tests of hypotheses were also applied to validate the results.

Keywords: gold nanorods; multi-objective genetic algorithms; optimization; systematic review; finite element methods.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Etapas de um algoritmo genético simples.	15
Figura 2 – Exemplo ilustrativo da otimização de Pareto no espaço objetivo.	18
Figura 3 – Possível relação de soluções no espaço objetivo.	19
Figura 4 – Distância de Aglomeração - Procedimento.	26
Figura 5 – Procedimentos do Algoritmo NSGA-II.	28
Figura 6 – Passos processo de filtragem.	35
Figura 7 – Fluxo de processo do Mapeamento científico.	37
Figura 8 – Interface da Biblioshiny na web.	37
Figura 9 – Número de artigos publicados por ano.	38
Figura 10 – Países mais influentes no número de publicações.	41
Figura 11 – Rede de Co-ocorrência.	42
Figura 12 – TreeMap das palavras-chave mais relevantes.	43
Figura 13 – Metodologia utilizada.	46
Figura 14 – Geometria aproximada do nanobastão.	50
Figura 15 – Vista geral do COMSOL Multiphysics.	55
Figura 16 – Vista geral do COMSOL Multiphysics.	56
Figura 17 – Caracterização do campo eletromagnético.	58
Figura 18 – Definição das malhas do modelo.	58
Figura 19 – Funções de Aptidão máximas de cada geração.	60
Figura 20 – Fronteira de pareto da geração de convergência.	61
Figura 21 – Configuração 1 - gerações 20 a 85.	65
Figura 22 – Configuração 2 - gerações 20 a 85.	65
Figura 23 – Configuração 3 - gerações 20 a 85.	66
Figura 24 – Configuração 4 - gerações 20 a 85.	66
Figura 25 – Configuração 5 - gerações 20 a 85.	67
Figura 26 – Configurações de nanobastões do artigo base.	67

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Categorias por Seleção de Pareto.	21
Tabela 2 – Categorias por Seleção Escalar.	21
Tabela 3 – Categorias por Seleção de Critério.	21
Tabela 4 – Principais <i>AGMOs</i> , mecanismos de diversidade e elitismo.	22
Tabela 5 – Principais <i>AGMOs</i> , mecanismos de diversidade e elitismo.	23
Tabela 6 – Principais <i>AGMOs</i> , vantagens e desvantagens.	23
Tabela 7 – Principais <i>AGMOs</i> , vantagens e desvantagens.	24
Tabela 8 – Lista e descrição das questões de pesquisa.	33
Tabela 9 – Palavras-chave.	33
Tabela 10 – Informações principais sobre os dados.	39
Tabela 11 – Artigos citados em destaque.	40
Tabela 12 – Fatores de impacto por jornal.	43
Tabela 13 – Fatores de impacto por autor.	44
Tabela 14 – Parâmetros do nanobastão de ouro	56
Tabela 15 – Equações de contorno do nanobastão de ouro.	59
Tabela 16 – Estatística do teste de Mann-Whitney.	62
Tabela 17 – Estatística do teste de Kruskal-Wallis.	62
Tabela 18 – Parâmetros do nanobastão - gerações 20, 40 e 60.	63
Tabela 19 – Parâmetros do nanobastão - gerações 80 e 85.	64

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	MOTIVAÇÃO	12
1.2	OBJETIVOS	12
1.2.1	Objetivo Geral	12
1.2.2	Objetivos Específicos	12
1.3	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	13
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	14
2.1	ALGORITMOS GENÉTICOS	14
2.2	PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO MULTI-OBJETIVOS	16
2.2.1	Algoritmos Genéticos Multiobjetivos	20
2.2.2	Algoritmo Genético de ordenamento não dominado (NSGA-II)	25
2.2.2.1	<i>Complexidade algorítmica</i>	26
2.2.2.2	<i>Distância de Aglomeração</i>	26
2.3	MATERIAIS NANOFOTÔNICOS	29
2.3.1	Alinhamento dinâmico de nanobastões de ouro	29
3	REVISÃO DE LITERATURA	31
3.1	REVISÃO SISTEMÁTICA DA LITERATURA	31
3.1.1	Protocolos e recomendações	32
3.1.2	Questões relevantes para a pesquisa	32
3.1.3	Base de dados	32
3.1.4	Filtragem do processo	34
3.1.5	Bibliometrix e R-studio	36
3.1.6	Publicações globais e produção científica	38
3.1.7	Distribuições das publicações	41
4	FRAMEWORK	45
4.1	METODOLOGIA	46
4.2	ALGORITMO GENÉTICO E MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS	47
4.2.1	Parâmetros do algoritmo genético multiobjetivo NSGA-II	48
4.2.2	Testes Estatísticos	53
4.2.3	Modelagem no COMSOL Multiphysics	54

5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	60
5.1	RESULTADOS NSGA-II	60
5.2	TESTES ESTATÍSTICOS E VALIDAÇÃO DAS GERAÇÕES	61
5.3	RESULTADOS COMSOL MULTIPHYSICS	64
6	CONCLUSÃO	69
6.1	TRABALHOS FUTUROS	70
	REFERÊNCIAS	71
	APÊNDICE A – MAPEAMENTO CIENTÍFICO	77
	APÊNDICE B – IMPLEMENTAÇÃO NSGA-II	79

1 INTRODUÇÃO

Os avanços de nanotecnologias e da nanociência permitiram que a fabricação de vários tipos de nanomateriais fosse facilitada para explorar seu uso em numerosas aplicações. Particularmente, as nanoestruturas baseadas em ouro (Au) receberam enorme atenção devido a uma série de vantagens, incluindo inércia/estabilidade química, propriedades optoeletrônicas ajustáveis, grande relação superfície-volume, altamente eficientes na absorção, e na emissão de luz em comprimentos de onda próximos à região infravermelha. Assim, nanoestruturas de ouro encontraram uso em várias aplicações, incluindo armazenamento de dados, energia fotovoltaica, geração de imagens de células, e espectroscopia aprimorada de superfície (KAUSHAL et al., 2020).

No entanto, a otimização de materiais nanofotônicos ainda apresenta algumas limitações. Uma das principais limitações é a complexidade do processo de otimização, que envolve múltiplos objetivos, incluindo a eficiência, o custo e a escalabilidade do processo de fabricação (PARK et al., 2022).

Como parte da Inteligência Artificial (IA), as abordagens de Computação Evolucionária (CE) são inspiradas pela natureza e resolvem problemas de otimização de forma estocástica, as quais podem oferecer uma abordagem confiável e efetiva para lidar com aplicações de problemas complexos do mundo real (TELIKANI et al., 2021).

Os algoritmos genéticos, um dos paradigmas da CE, são métodos extremamente flexíveis e com capacidade de produzir soluções de boa qualidade em problemas complexos e de grande porte em um tempo computacional viável. Estes algoritmos têm sido aplicados com enorme sucesso em uma grande variedade de problemas de otimização multiobjetivo (GOLBERG, 1989). Desde que os Algoritmos Evolucionários e os Algoritmos Evolucionários Multiobjetivo (AEMO) podem codificar soluções individuais em numerosas representações diretas (estrutura de dados do cromossomo) assim como diretamente computar valores objetivo associados, eles possuem uma considerável vantagem robusta que as tradicionais técnicas de busca para problemas multiobjetivo.

A aplicação de algoritmos genéticos em materiais nanofotônicos envolve a definição de funções objetivo que representam o desempenho do dispositivo fotônico, como por exemplo, a absorbância, que mede a capacidade de um material absorver luz em uma determinada faixa de comprimentos de onda na escala nanométrica. Algoritmos genéticos Multiobjetivo (AGM)

são candidatos promissores para otimizar materiais nanofotônicos devido a sua capacidade de explorar grandes espaços de soluções e otimizar múltiplos objetivos simultaneamente. Isso é particularmente útil na otimização de materiais nanofotônicos, onde as propriedades ópticas e a geometria do material são altamente interdependentes e afetam o desempenho do dispositivo. Além disso, permitem que os pesquisadores obtenham um conjunto de soluções ideais em vez de uma única solução (KONAK; COIT; SMITH, 2006)(WIECHA et al., 2017).

1.1 MOTIVAÇÃO

A nanofotônica é uma área de pesquisa extremamente promissora, com um grande potencial para revolucionar a tecnologia em diversas áreas. No entanto, a otimização de materiais e um alto custo de produção é um desafio que requer soluções inovadoras e eficazes. Nesse sentido, a motivação surgiu em aplicar um algoritmo genético multiobjetivo para obtenção de novos nanobastões de ouro gerados de forma evolutiva, e em grande escala, diminuindo os custos para produzir, e superando a forma tradicional de criar materiais nanofotônicos.

1.2 OBJETIVOS

A seguir serão descritos os objetivos geral e específicos do presente trabalho.

1.2.1 Objetivo Geral

Gerar um mapeamento científico das áreas de IA e Nanofotônicos, encontrando resultados quantitativos. Obter configurações de nanobastões de ouro gerados através de um algoritmo genético multiobjetivo.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Selecionar da literatura um método de mapeamento científico para realização da revisão sistemática, buscando entender como essas duas áreas do conhecimento se relacionam;
- Obter resultados quantitativos a partir do método de mapeamento escolhido;
- Selecionar da literatura um algoritmo genético multiobjetivo para se obter soluções não-

dominadas que representam configurações de nanobastões de ouro;

- Definir os parâmetros dos nanobastões para que seja possível obter configurações de materiais válidas;
- Adaptar as funções objetivo do algoritmo a fim de se adequar as configurações dos nanobastões de ouro;
- Aplicar técnicas de estatística para avaliar a convergência do algoritmo genético multi-objetivo e selecionar as populações que apresentam diferenças estatísticas;
- Definição dos parâmetros e condições de contorno para modelagem em software de elementos finitos;
- Obter as curvas da seção transversal de extinção via software de elementos finitos;
- Validar os resultados obtidos comparando com os resultados computacionais do artigo base.

1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

A dissertação é dividida em 6 capítulos e dois apêndices. O capítulo 1 diz respeito a introdução, objetivos e motivação. O capítulo 2 trata de realizar uma fundamentação teórica dos principais temas, definindo importantes conceitos do trabalho. O capítulo 3 trata de realizar uma revisão sistemática da literatura com o propósito de investigar de forma mais ampla como as áreas de Inteligência Artificial, bem como suas principais sub-áreas se relacionam com os materiais nanofotônicos, e assim trazer resultados quantitativos relevantes, e produzir uma visão abrangente e imparcial da evidência existente sobre o assunto. O capítulo 4 diz respeito a framework necessária para a viabilidade da otimização dos parâmetros, assim como a metodologia adotada, como modelo de trabalho que se pretende implementar, detalhes sobre escolhas de parâmetros e como a modelagem em software de elementos finitos foi realizada. O capítulo 5 trata do resultados encontrados e discussões realizadas. O capítulo 6 trata de concluir as evidências encontradas, e propor trabalhos futuros. O apêndice A mostra em detalhes as palavras-chave finais para o mapeamento científico realizado. O apêndice B mostra em detalhes a implementação do algoritmo genético multiobjetivo definido.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

As seções subsequentes tratarão de expor conceitos fundamentais a respeito dos principais temas da presente dissertação, com o objetivo de desenvolver uma estrutura teórica para guiar a pesquisa.

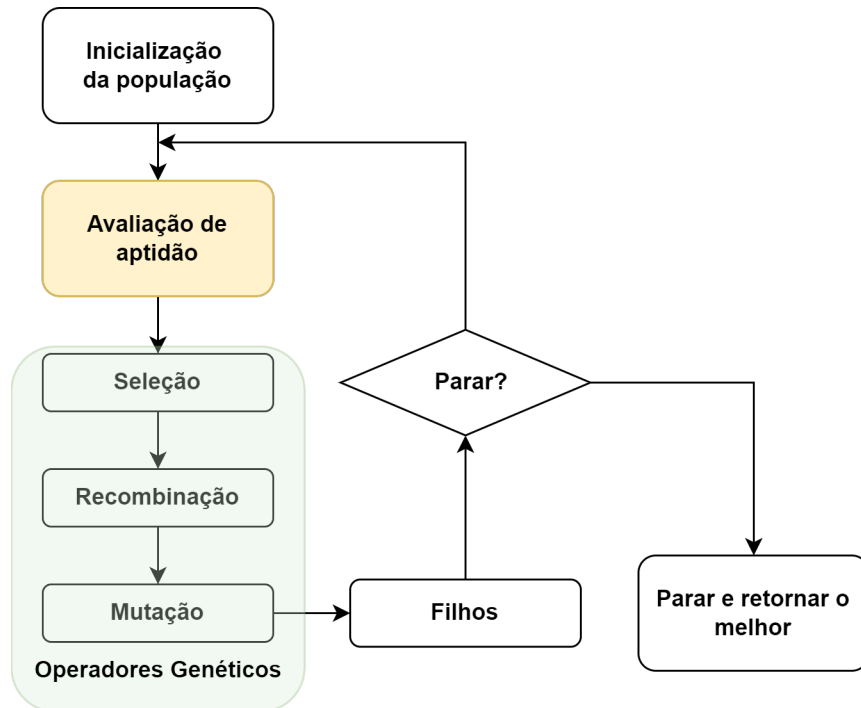
2.1 ALGORITMOS GENÉTICOS

Existem muitas abordagens e classes de algoritmos evolucionários, sendo os algoritmos genéticos um dos mais popularizados ao longo da história. A ideia subjacente mais comum por trás de todas as técnicas é a mesma: fornecida uma população de indivíduos em algum ambiente que limita recursos, a competição por estes recursos causa seleção natural (sobrevivência do mais adequado). Isto por sua vez causa um aumento na aptidão da população. Fornecida uma função de qualidade para ser maximizada, Pode-se criar aleatoriamente um conjunto de soluções candidatas, em outras palavras, elementos do domínio da função. Então se aplica a função de qualidade para estes elementos como uma medida abstrata de aptidão, quanto maior o valor da função, melhor. Os melhores candidatos são escolhidos para a próxima geração, isto é feito aplicando cruzamento e/ou mutação entre os candidatos. A execução das operações de cruzamento e mutação leva para a criação de um conjunto de novos candidatos (os filhos). Assim como os pais, estes também possuem suas aptidões avaliadas e então competem entre si. Este processo pode ser iterado até um candidato com suficiente qualidade (uma solução) seja encontrada ou um limite computacional previamente definido seja alcançado (EIBEN; SMITH et al., 2003).

A Figura 1 ilustra um diagrama geral com os principais mecanismos de um algoritmo evolucionário, com o algoritmo genético sendo o principal representante.

O algoritmo genético é um algoritmo heurístico inspirado pela teoria da evolução: Indivíduos em um ecossistema com alta adaptabilidade para variáveis ambientais possuem alta probabilidade de sobrevivência e reprodução. A adaptabilidade média da população é esperada melhorar gradualmente com cada geração. Indivíduos qualificados (Aqueles com baixo valor de aptidão, se o objetivo for minimização, ou alto valor de aptidão, se o objetivo for maximização) são selecionados da população inicial como pais. Alguns dos indivíduos nos pais que tiverem o mais baixo (ou mais alto) valor de aptidão são escolhidos como *elite*, os quais são passados

Figura 1 – Etapas de um algoritmo genético simples.



Fonte: Adaptado de (ZHANG et al., 2021)

diretamente para a próxima geração (ZHANG et al., 2021).

Na terminologia de algoritmos genéticos, um vetor $\mathbf{x} \in \mathbf{X}$ (espaço de soluções) é chamado indivíduo ou *cromossomo*. Cromossomos são feitos de unidades discretas chamadas genes. Cada gene controla uma ou mais característica do cromossomo. A forma de representação dos genes varia com o problema em análise, sendo a representação clássica a binária, porém podendo igualmente se apresentar numa sequência de números inteiros, números reais etc. Normalmente, um cromossomo corresponde a uma única solução $\mathbf{x}$ no espaço de soluções. Isto requer um mecanismo de mapeamento entre o espaço de soluções e os cromossomos, o qual é chamado de codificação. Algoritmos genéticos trabalham na codificação do problema, não no problema em si (KONAK; COIT; SMITH, 2006).

Existem procedimentos de seleção diferentes nos algoritmos genéticos dependendo de como os valores de aptidão são usados. Seleção por proporção, ranqueamento, seleção por torneio são os procedimentos de seleção mais populares. Um procedimento genérico para um algoritmo genético pode ser dado como segue (KONAK; COIT; SMITH, 2006):

Passo 1: Configura $t = 1$. Gera aleatoriamente N soluções para formar a primeira população, P_1 . Avalia as aptidões das soluções em P_1 .

Passo 2: Cruzamento: Gera uma população de filhos Q_t como segue:

2.1. Escolha duas soluções $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ de P_t baseado no valores de aptidão.

2.2 Usando cruzamento, gera filhos e os adiciona em Q_t .

Passo 3: Mutação: Muta cada solução $\mathbf{x} \in Q_t$ com uma taxa de mutação pré-definida.

Passo 4: Atribuição de aptidão: Avalia e atribue um valor de aptidão para cada solução $\mathbf{x} \in Q_t$ baseado nas suas funções objetivos e inviabilidade.

Passo 5: Seleção: Seleciona N soluções de Q_t baseado nos seus valores de aptidão e os copia para P_{t+1} .

Passo 6: Se o critério de parado é satisfeito, termina a busca e retorna a população atual, senão, configura $t = t + 1$ e volta para o passo 2.

Algoritmos genéticos (AG) são ideais para tarefas de otimização global multi-paramétrico, aplicando conceitos de seleção natural da biologia evolucionária para pesquisar de forma inteligente por parâmetros ótimos (WOODWARD; KELLEHER, 2016).

2.2 PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO MULTI-OBJETIVOS

Formulações multiobjetivos são modelos realistas para muitos problemas complexos de otimização de engenharia. Em muitos problemas na vida real, objetivos estão em considerável conflitos entre si, e otimizando uma solução particular em relação a um único objetivo pode resultar em resultados inaceitáveis em relação aos outros objetivos. Uma solução razoável para um problema multiobjetivo é investigar um conjunto de soluções, cada qual satisfaz os objetivos em um nível aceitável sem ser dominada por nenhuma outra solução. Muitos objetivos podem ser definidos explicitamente como critérios de otimização separados ou formulados como restrições, dependendo das prioridades as quais se deseja alcançar (KONAK; COIT; SMITH, 2006)(ZITZLER, 1999). Algumas definições a respeito de problemas de otimização são necessárias para melhor entendimento. Formalmente, pode-se definir como segue.

Def.1: (Problema de otimização multiobjetivo) *Um problema geral de otimização multi-objetivo inclui um conjunto de n parâmetros (variáveis de decisão), um conjunto de k funções objetivo, e um conjunto de m restrições. Funções objetivo e restrições são funções das variáveis de decisão. A meta de otimização é para:*

$$\text{maximizar } \mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_k(\mathbf{x})$$

$$\text{sujeito a } \mathbf{e}(\mathbf{x}) = (e_1(\mathbf{x}), e_2(\mathbf{x}), \dots, e_m(\mathbf{x})) \leq \mathbf{0}$$

$$\text{onde } \mathbf{x} = x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbf{X}$$

$$\mathbf{y} = y_1, y_2, \dots, y_k \in \mathbf{Y}$$

sendo $\mathbf{x}$ o vetor de decisão, $\mathbf{y}$ o vetor objetivo, $\mathbf{X}$ é chamado como o espaço de decisão, e $\mathbf{Y}$ é chamado de espaço objetivo. As restrições $\mathbf{e}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$ determinam o conjunto de soluções viáveis.

Def.2.: (Conjunto factível) O conjunto factível $\mathbf{X}_f$ é definido como o conjunto de vetores de decisão $\mathbf{x}$ que satisfaz as restrições $\mathbf{e}(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{X}_f = \{\mathbf{x} \in \mathbf{X} \mid \mathbf{e}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}\}$$

A imagem de $\mathbf{X}_f$, isto é, a região factível no espaço objetivo, é denotado como $\mathbf{Y}_f = \mathbf{f}(\mathbf{X}_f) = \bigcup_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}_f} \mathbf{f}(\mathbf{x})$.

Def.3.: (Dominância de Pareto) Para quaisquer dois vetores de decisão $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$,

$$\mathbf{a} > \mathbf{b} \text{ (a domina b) se } \mathbf{f}(\mathbf{a}) > \mathbf{f}(\mathbf{b})$$

$$\mathbf{a} \geq \mathbf{b} \text{ (a domina fracamente b) se } \mathbf{f}(\mathbf{a}) \geq \mathbf{f}(\mathbf{b})$$

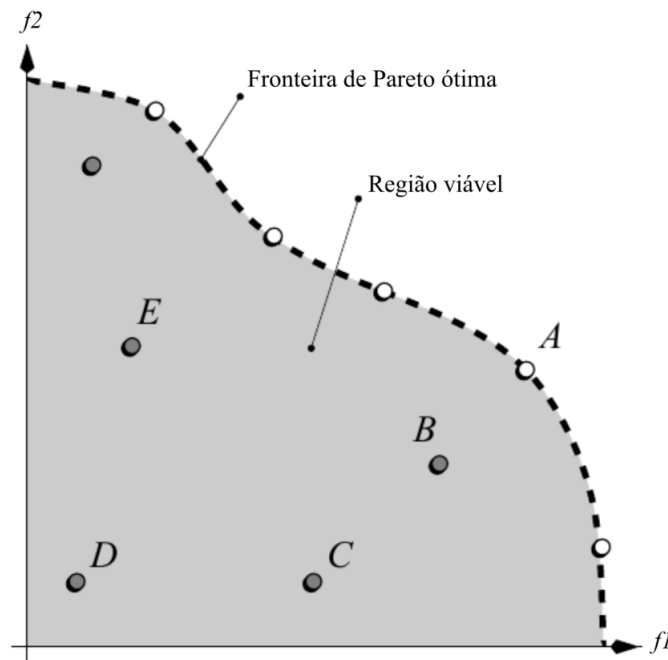
$$\mathbf{a} \sim \mathbf{b} \text{ (a é indiferente a b) se } \mathbf{f}(\mathbf{a}) \not\geq \mathbf{f}(\mathbf{b}) \wedge \mathbf{f}(\mathbf{b}) \not\geq \mathbf{f}(\mathbf{a})$$

Def.4.: (Otimização de Pareto) Um vetor de decisão $\mathbf{x} \in \mathbf{X}_f$ é dito como sendo não dominado com a respeito um conjunto $\mathbf{A} \subseteq \mathbf{X}_f$ se:

$$\nexists \mathbf{a} \in \mathbf{A} : \mathbf{a} > \mathbf{x}$$

As soluções contidas numa fronteira de Pareto são indiferentes entre cada um deles. Logo, não há uma única solução ótima, mas em vez disso, um conjunto de compensações ideais. Nenhuma destas podem ser identificadas como melhores que outras, ao menos que informações preferenciais sejam incluídas. A totalidade de todas as soluções Pareto-ótimas é chamada de conjunto Pareto-ótimo. As Figuras 2 e 3 ilustram uma possível fronteira de Pareto ótima e relações entre vetores de decisão num espaço de soluções. Para contexto, deseja-se maximizar as funções objetivo f_1 e f_2 .

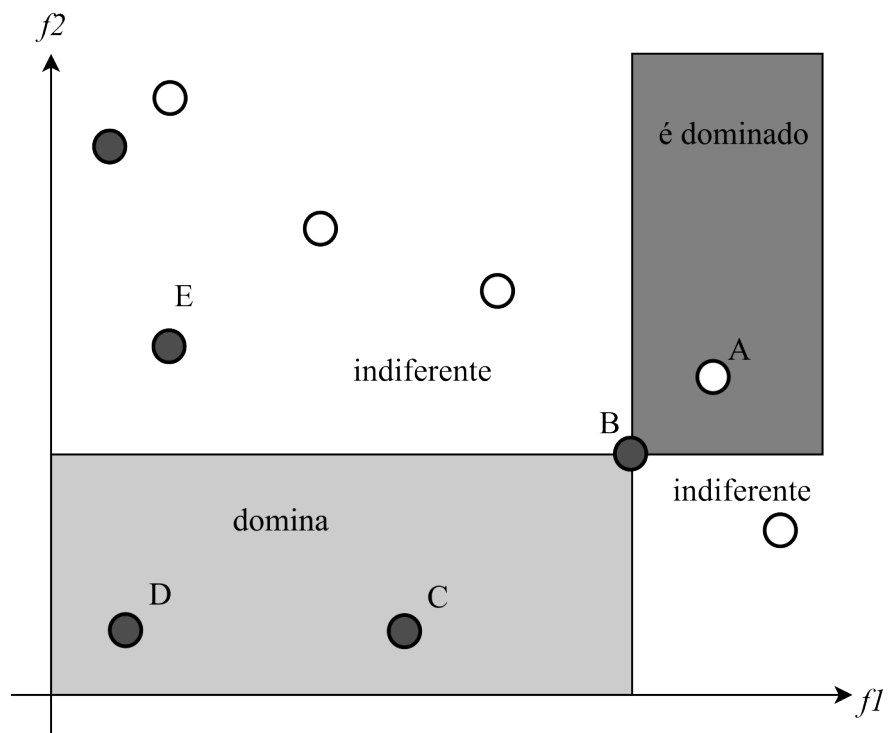
Figura 2 – Exemplo ilustrativo da otimização de Pareto no espaço objetivo.



Fonte: Adaptado de (ZITZLER, 1999).

Na Figura 3, o retângulo cinza-claro é dominado pelo vetor de decisão representado pelo ponto B . No retângulo cinza-escuro, qualquer vetor de decisão domina a solução associada com B . A região viável na Figura 2 define vetores de decisão não ótimos mas que são possíveis candidatos para melhorar um dos objetivos, mas não mais de um. Voltando para a Figura 3, todas as soluções as quais o vetor objetivo resultante não está em nenhum retângulo são indiferentes para a solução representada por B . O vetor de decisão representado por A é único entre todos os pontos em destaque porque não é dominado por nenhum outro vetor de decisão. Isso significa que A é ótimo no sentido que não pode ser melhorado em um objetivo sem causar uma degradação em pelo menos em outro objetivo. Tais soluções são denominadas Pareto ótimo. A fronteira de Pareto (pontos em branco) define soluções que dominam outras soluções, sejam totalmente (em todos os objetivos) ou fracamente, conforme definições postuladas (ZITZLER, 1999).

Figura 3 – Possível relação de soluções no espaço objetivo.



Fonte: Adaptado de (ZITZLER, 1999).

2.2.1 Algoritmos Genéticos Multiobjetivos

Por serem métodos extremamente flexíveis e com capacidade de produzir soluções de boa qualidade em problemas complexos e de grande porte em um tempo computacional viável, os Algoritmos Genéticos têm sido aplicados com enorme sucesso em uma grande variedade de problemas de otimização multiobjetivo (GOLBERG, 1989) (ZBIGNIEW, 1996).

Cada solução de um algoritmo genético aplicado a um problema de otimização deve ser codificada ou representada na forma de uma estrutura finita (vetor, matriz etc.). Os operadores genéticos, seleção, cruzamento, mutação e estratégias de elitismo devem ser escolhidos de acordo com as características intrínsecas do problema. Por exemplo, operadores apropriados para uma representação binária diferem de uma representação de ordenamento, se tratando de números inteiros, em que as soluções são permutações (ARROYO et al., 2002).

Em uma otimização de Pareto, a meta global é encontrar o conjunto de soluções Pareto global, ou alternativamente, o conjunto de pontos eficiente. O último é geralmente suficiente porque normalmente não é requerido mais de uma solução considerando atributos idênticos (KNOWLES, 2002).

Uma das limitações no processo de otimização de Pareto é o fato de apenas um ordenamento parcial de soluções está disponível, resultando em três métodos alternativos para realização de seleção por um algoritmo evolucionário ou outra meta-heurística de busca. Os métodos podem ser categorizados como segue (HORN, 1997):

- Considera apenas um objetivo em isolamento, em cada vez, uma solução é avaliada por seleção. Este método é conhecido como seleção de critério.
- Utiliza o ordenamento parcial diretamente para desempenhar seleção. Este método é conhecido como seleção de Pareto.
- Escala os diferentes objetivos utilizando uma função parametrizada, e varia os parâmetros tais que uma diversidade de soluções podem ser encontradas. Este método é conhecido como seleção Escalar.

As Tabelas 1, 2 e 3 resumem alguns algoritmos de propósitos gerais para Otimização de Pareto, classificados por mecanismo de seleção e estratégia de busca geral.

Desde que os Algoritmos Evolucionários e os Algoritmos Evolucionários Multiobjetivos (AE-MOs) podem codificar soluções individuais em numerosas representações diretas (estrutura de

Tabela 1 – Categorias por Seleção de Pareto.

Categorias	Seleção de Pareto
Abordagens baseada na população	MOGA, NPGA (FONSECA; FLEMING, 1995) (HORN; NAFPLIOTIS; GOLDBERG, 1993) NSGA,SPEA (SRINIVAS et al., 1995) (ZITZLER; THIELE, 1999) PESA, NSGA-II (CORNE; KNOWLES; OATES, 2000)(DEB et al., 2000)
Abordagens Meméticas	M-PAES (KNOWLES; CORNE, 2000)
Abordagens de busca local	(1+1)-PAES (KNOWLES; CORNE, 1999)
Fonte: Adaptado de (KNOWLES, 2002).	

Tabela 2 – Categorias por Seleção Escalar.

Categorias	Seleção Escalar
Abordagens baseada na população	AG com pesos nos cromossomos (HAJELA; LIN, 1992) Esquemas de Ponderação para AG (BENTLEY; WAKEFIELD, 1998)
Abordagens Meméticas	MOGLS (ISHIBUCHI; MURATA, 1996) RD-MOGLS (JASZKIEWICZ, 2002)
Abordagens de busca local	Procedimento TS (SERAFINI, 1994) (GANDIBLEUX; MEZDAOUI; FRÉVILLE, 1997) MOTS, SA Pareto, SA Multiobjetivo Método MOSA (ULUNGU et al., 1999)
Fonte: Adaptado de (KNOWLES, 2002).	

Tabela 3 – Categorias por Seleção de Critério.

Categorias	Seleção de Critério
Abordagens baseada na população	VEGA (SCHAFFER, 2014) ES (KURSAWE, 1991) PAES (SZMIT; BARAK, 2000)
Abordagens Meméticas	-
Abordagens de busca local	-
Fonte: Adaptado de (KNOWLES, 2002).	

dados do cromossomo) assim como diretamente computar valores objetivos associados, eles possuem uma considerável vantagem robusta que as tradicionais técnicas de busca para problemas multiobjetivos. Isto é, técnicas tradicionais podem impor restrições ou mapeamentos complexos no domínio do problema ou no domínio do modelo matemático do algoritmo em ordem para resolver o problema. Apesar de não ser uma técnica de solução robusta universal, AEMOs geralmente podem facilmente serem guiados por um domínio de informação do problema, não tendo que modificar o modelo de domínio do problema. Então, o processo de busca é fácil de desenvolver, entender e testar na sua forma nativa para uma dada aplicação (COELLO et al., 2007).

As Tabelas 4 a 7 ilustram em mais detalhes os principais algoritmos genéticos multiobjetivos propostos ao longo das décadas, suas abordagens, mecanismos de diversidade, se é ou não um algoritmo elitista, principais vantagens e desvantagens.

Tabela 4 – Principais AGMOs, mecanismos de diversidade e elitismo.

Algoritmo	Atribuição de aptidão	Mecanismo de diversidade	Elitismo
VEGA (SCHAFFER, 2014)	Cada subpopulação é avaliada em relação um objetivo diferente	Não	Não
MOGA (FONSECA; FLEMING, 1993)	Ranqueamento de Pareto	Compartilhamento de aptidão por nicho	Não
WBGA (HAJELA; LIN, 1992)	Média ponderada de objetivos normalizados	Nichos de pesos predefinidos	Não
NPGA (HORN; NAFPLIOTIS; GOLDBERG, 1994)	Seleção por Torneio	Quebra de níveis em seleção por torneio	Não
RWGA (MURATA; ISHIBUCHI et al., 1995)	Média ponderada de objetivos normalizados	Atribuição de pesos aleatoriamente	Sim
PESA (CORNE; KNOWLES; OATES, 2000)	Sem atribuição de aptidão	Densidade baseada nas células	Puro elitista

Fonte: Adaptado de (KONAK; COIT; SMITH, 2006).

Tabela 5 – Principais AGMOs, mecanismos de diversidade e elitismo.

Algoritmo	Atribuição de aptidão	Mecanismo de diversidade	Elitismo
PAES (KNOWLES; CORNE, 1999)	Dominância de Pareto usada para substituir um pai se o filho domina	Densidade baseada nas células como quebra de nível entre filhos e pai	Sim
NSGA (SRINIVAS; DEB, 1994)	Ranqueamento baseado em ordenamento não dominado	Compartilhamento de aptidão por nicho	Não
NSGA-II (DEB et al., 2002)	Ranqueamento baseado em ordenamento não dominado	Distância de aglomeração	Sim
SPEA (ZITZLER; THIELE, 1999)	Ranqueamento baseado no arquivamento externo de soluções não dominadas	Agrupamento para truncar populações externas	Sim
SPEA-2 (ZITZLER; LAUMANN; THIELE, 2001)	Força dos dominadores	Densidade baseada nos K vizinhos mais próximos	Sim
RDGA (LU; YEN, 2003)	Reduzido a um problema bi-objetivo com rank e densidade como objetivos	Densidade baseada em células de região proibida	Sim
DMOEA (YEN; LU, 2003)	Ranqueamento baseado em células	Densidade baseada em células adaptativas	Sim

Fonte: Adaptado de (KONAK; COIT; SMITH, 2006).

Tabela 6 – Principais AGMOs, vantagens e desvantagens.

Algoritmo	Vantagens	Desvantagens
VEGA (SCHAFFER, 2014)	Primeiro AGMO diretamente implementado	Tende a convergir para o extremo de cada objetivo
MOGA (FONSECA; FLEMING, 1993)	Extensão simples de um AG mono-objetivo	Geralmente convergência lenta
WBGA (HAJELA; LIN, 1992)	Extensão simples de um AG mono-objetivo	Dificuldades no espaço não convexos de objetivos
NPGA (HORN; NAFPLIOTIS; GOLDBERG, 1994)	Seleção muito simples	Problemas relacionados com o tamanho dos parâmetros
RWGA (MURATA; ISHIBUCHI et al., 1995)	Implementação fácil, eficiente	Dificuldades em espaços não convexos de objetivos
PESA (CORNE; KNOWLES; OATES, 2000)	Fácil de implementar, eficiente	Desempenho depende do tamanho das células

Fonte: Adaptado de (KONAK; COIT; SMITH, 2006).

Tabela 7 – Principais AGMOs, vantagens e desvantagens.

Algoritmo	Vantagens	Desvantagens
PAES (KNOWLES; CORNE, 1999)	Estratégia de escalada de mutação aleatória	Abordagem não baseada na população
NSGA (SRINIVAS; DEB, 1994)	Rápida convergência	Problemas relacionados ao tamanho do parâmetro do nicho
NSGA-II (DEB et al., 2002)	Eficiente, Único parâmetro, Bem testado	Distância de aglomeração funciona apenas em espaços objetivos
SPEA (ZITZLER; THIELE, 1999)	Bem testado, Sem parâmetros para agrupamento	Algoritmo de agrupamento complexo
SPEA-2 (ZITZLER; LAUMANN; THIELE, 2001)	SPEA melhorado, Garante que pontos extremos são preservados	Custo computacional de aptidão alto
RDGA (LU; YEN, 2003)	Atualização dinâmica de células, Robusto em relação ao número de objetivos	Dificuldade maior de implementação que outros algoritmos
DMOEA (YEN; LU, 2003)	Inclui técnicas eficientes para atualizar densidades de células	Dificuldade maior de implementação que outros algoritmos

Fonte: Adaptado de (KONAK; COIT; SMITH, 2006).

2.2.2 Algoritmo Genético de ordenamento não dominado (NSGA-II)

Nas últimas décadas, muitos algoritmos evolucionários multiobjetivo (AEMO) foram propostos, principalmente pela habilidade dos mesmos em encontrar soluções múltiplas Pareto-ótimo em uma única rodada de simulação, como por exemplo, os algoritmos PAES (KNOWLES; CORNE, 1999), SPEA (ZITZLER; THIELE, 1999), NSGA (SRINIVAS; DEB, 1994). Ao longo dos anos, as principais críticas referentes a estes algoritmos são (DEB et al., 2002):

1. Complexidade computacional alta de ordenamento não dominado: $O(MN^3)$, onde M é o número de objetivos e N é o tamanho da população. Isto faz, por exemplo, computacionalmente caros os algoritmos quando a população é grande. No algoritmo NSGA (primeiro proposto), a complexidade aparece por causa do procedimento complexo de ordenamento não dominado em todas as gerações.
2. Falta de elitismo: Resultados relevantes (RUDOLPH, 2001) (ZITZLER; DEB; THIELE, 2000) mostraram que o elitismo pode acelerar o desempenho significativamente dos algoritmos genéticos, o qual também pode ajudar prevenir a perda de boas soluções uma vez que elas sejam encontradas.
3. A necessidade de especificação do parâmetro de compartilhamento σ_{share} : Mecanismo tradicional de garantir a diversidade em uma população. O principal problema com o compartilhamento é que solicita a especificação de um parâmetro para o procedimento. É desejável um mecanismo de preservação da diversidade sem parâmetros.

Deb et al (2002)(DEB et al., 2002) propuseram uma versão melhorada do NSGA, e foi chamado de NSGA-II (Algoritmo genético de ordenamento não dominado), o qual busca amenizar as principais críticas dos seus predecessores fornecendo uma complexidade algorítmica $O(MN^2)$, também possui um operador de seleção que realiza combinações entre pais e filhos promovendo o cruzamento e selecionando os melhores (em relação a aptidão e espalhamento), gerando um processo natural de elitismo, e promovendo a diversidade através de uma métrica chamada distância de aglomeração, a qual não faz uso de parâmetro de compartilhamento.

2.2.2.1 Complexidade algorítmica

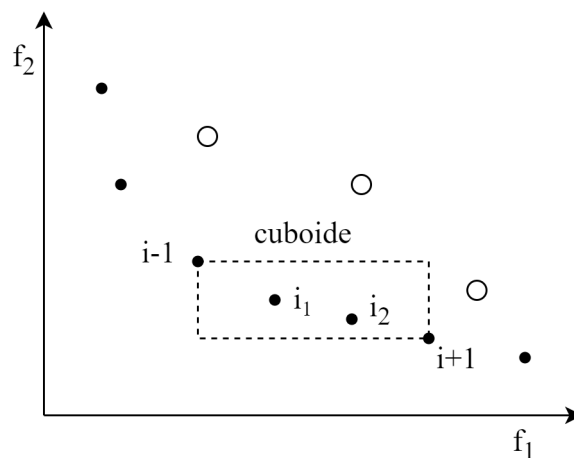
A primeira abordagem de ordenamento não dominado é um processo lento e preguiçoso. A fim de identificar as soluções da primeira fronteira não dominada numa população de tamanho N , cada solução pode ser comparada com todas as outras soluções na população para descobrir se é dominada. Este procedimento requer $O(MN)$ comparações para cada solução, onde M é o número de objetivos. Quando este processo continua para encontrar todos os membros do primeiro nível não dominado na população, a complexidade total é $O(MN^2)$. A complexidade no pior caso é quando existem N fronteiras e lá existe apenas uma solução em cada fronteira. Isto requer uma complexidade geral $O(MN^3)$. Deb et al.(2002)(DEB et al., 2002) propuseram uma abordagem de ordenamento não dominado a qual requer uma complexidade geral de $O(MN^2)$. Funcionamento do método, para cada solução calcula-se duas entidades:

1. Contagem de dominação n_p , o número de soluções as quais dominam a solução p ;
2. S_p , um conjunto de soluções que a solução p domina.

Este processo de comparações o qual método realiza, no pior caso, mantém-se a complexidade de $O(MN^2)$.

2.2.2.2 Distância de Aglomeração

Figura 4 – Distância de Aglomeração - Procedimento.



Fonte: Adaptado de (DEB et al., 2002).

A distância de aglomeração tem um papel importante na seleção de soluções para a próxima geração. O *NSGA-II* prioriza soluções não dominadas e soluções com maiores distâncias de aglomeração para garantir uma boa cobertura do espaço de busca. A Figura 4 ilustra um cuboide, e considera-se que nem todos os indivíduos na fronteira poderão sobreviver. Pontos extremos são mantidos a cada geração e, portanto, recebam uma distância de aglomeração infinita. Todas as outras soluções intermediárias são atribuídos valores de distâncias iguais a diferença absoluta normalizada nos valores de função de duas soluções adjacentes. A equação 2.1 descreve a distância de aglomeração do ponto i_1 .

$$CD_{i_1} = \left| \frac{f_m(i_1) - f_m(i_2)}{f_m(max) - f_m(min)} \right|. \quad (2.1)$$

O valor da distância de aglomeração geral é calculado como a soma dos valores de distância individual correspondente de cada objetivo. O processo que garante a diversidade no algoritmo escolhe as soluções que possuem a maior distância quando comparadas seu grau de proximidade com outra solução. O processo de escolha de uma solução não dominada pode ser então definido nas seguintes etapas, Assumindo que todo indivíduo i na população tem dois atributos:

1. Rank de não dominação (i_{rank});
2. Distância de aglomeração ($i_{distância}$).

Define-se uma ordem parcial como:

$$i < j \text{ se } (i_{rank} < j_{rank})$$

$$\text{ou } (i_{rank} = j_{rank})$$

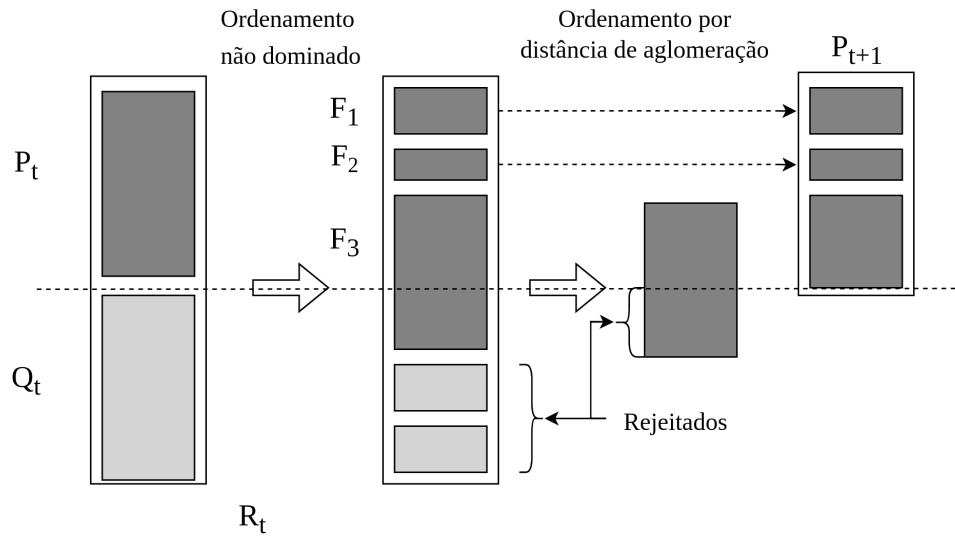
$$\text{e } (i_{distância} > j_{distância})$$

Procedimento realizado quando o propósito é um processo de minimizar as funções objetivos, o inverso se aplica caso o propósito seja de maximizar (DEB et al., 2002).

Com as etapas acima definidas, o algoritmo *NSGA-II* pode ser descrito. A Figura 5 ilustra os procedimentos para obtenção de soluções Pareto-ótimas não dominadas.

Seguindo os passos da Figura, Deb et al (2002) (DEB et al., 2002) definiram o funcionamento do algoritmo como segue: uma população aleatória P_0 de pais é gerada inicialmente, considera-se tamanho N . Ordena-se a população baseado no critério de não dominação. Cada solução é atribuído um valor de aptidão (ou classificação) igual ao seu nível de não dominação (1 é o melhor nível, 2 é o próximo melhor, e assim por diante). O algoritmo assume um

Figura 5 – Procedimentos do Algoritmo NSGA-II.



Fonte: Adaptado de (DEB et al., 2002).

processo de minimização (mas igualmente pode-se utilizar para maximização, depende dos objetivos). Primeiramente, os operadores genéticos são aplicados para geração da população Q_0 dos filhos (seleção por torneio, recombinação, mutação) também de tamanho N . O elitismo é introduzido comparando a população atual com as soluções não dominadas encontradas anteriormente. O procedimento é realizado primeiramente definindo uma população combinada $R_t = P_t \cup Q_t$ de tamanho $2N$. A população R_t é ordenada seguindo os critérios de não dominação, e portanto, garantindo o elitismo, já que a população atual e anterior estão incluídas. As fronteiras de solução não dominadas são encontradas, sendo F_1 contendo as melhores soluções combinadas das duas populações. Caso o tamanho N não seja alcançado na primeira fronteira não dominada, uma segunda fronteira F_2 é definida, seguindo o processo caso ainda o tamanho N de indivíduos não seja encontrado. As soluções das fronteiras já definidas compõem a população final P_{t+1} . O procedimento é continuado até que não seja mais possível acomodar mais soluções. Geralmente, a última fronteira F_n necessária para acomodar as últimas posições na nova população P_{t+1} possui mais soluções do que o tamanho N , e assim, com o propósito de preservar a diversidade no algoritmo, a comparação usando a métrica de distância de aglomeração é utilizada. A nova população P_{t+1} servirá como entrada para geração de uma nova população de filhos Q_{t+1} , e o processo segue até que um critério de parada seja atingido, normalmente número máximo de gerações ou convergência de aptidão.

2.3 MATERIAIS NANOFOTÔNICOS

Os materiais nanofotônicos são materiais altamente avançados que possuem propriedades ópticas únicas devido ao seu tamanho nanométrico. Estes materiais são formados por nanopartículas, como nanobastões, nanotubos e nanodiscos. Devido à sua escala de tamanho, estes materiais têm propriedades ópticas diferentes dos materiais convencionais, como a refração, a difração e a absorção de luz. Estas propriedades ópticas únicas permitem que tais materiais sejam usados em uma ampla variedade de aplicações, incluindo tecnologia da informação, terapia fototérmica, sensores, dispositivos ópticos etc (SHEN et al., 2000; JAIN et al., 2006).

Além disso, os materiais nanofotônicos também têm a capacidade de confinar a luz em dimensões nanométricas, o que é conhecido como confinamento óptico. Este confinamento pode ser usado para melhorar a eficiência de muitas aplicações envolvendo a luz, como a produção de sinal ou a geração de calor (JAIN et al., 2006; SHEN et al., 2000).

Entre os materiais nanofotônicos, os nanobastões de ouro são partículas primariamente interessantes pelo ponto de vista de suas propriedades ópticas, as quais dependem fortemente tanto do tamanho da partícula e sua forma. Tais propriedades ópticas estão relacionadas com a interação entre a constante dielétrica do metal e a componente de campo elétrico da radiação magnética incidente, os quais no caso de alguns metais, tais como ouro e prata, leva a fortes bandas de absorção características na parte visível do espectro. As propriedades ópticas de nanobastões de ouro são extremamente sensíveis às propriedades dielétricas do ambiente (PÉREZ-JUSTE et al., 2005).

O forte espalhamento de luz dessas nanopartículas é devido à sua forma anisotrópica. Anisotropia se refere à propriedade de um material apresentar diferentes propriedades físicas ao longo de diferentes eixos. No caso de nanobastões de ouro, a anisotropia é devida à sua forma alongada, que é caracterizada por um comprimento e largura significativamente diferentes entre si. Esta anisotropia resulta na absorção e espalhamento de luz em uma direção que depende da orientação do nanobastão, levando à forte dispersão de luz. (HU et al., 2006).

2.3.1 Alinhamento dinâmico de nanobastões de ouro

Nanoestruturas de ouro tem sido um assunto de pesquisa intensa pelas suas fascinantes propriedades de ressonâncias plasmônicas de superfície (RPS). Após uma luz incidente, cada nanobastão individual pode suportar oscilações coletivas de elétrons ao longo de suas dimensões

transversais e longitudinais. Essas RPS localizadas resultam em maior extinção em certos comprimentos de onda de luz. Em uma suspensão de nanobastões orientados aleatoriamente em relação à luz incidente, ambos os modos de superfície plasmônica longitudinal e superfície plasmônica transversal de cada nanobastão individual são excitados (GREYBUSH et al., 2019).

Ao contrário de moléculas anisotrópicas individuais, a anisotropia da suscetibilidade elétrica dos nanobastões de ouro é suficientemente grande para permitir o alinhamento por campos elétricos de luz incidente, e tendem a se alinhar na direção deste campo graças à sua alta polarizabilidade. Além disso, uma das grandes vantagens de se utilizar nanobastões é que as partículas não interagem entre si, ao contrário dos cristais líquidos. A dinâmica do alinhamento dos nanobastões de ouro pode ser controlada pelos parâmetros experimentais, como a concentração de partículas, a intensidade do campo elétrico, a viscosidade do meio, e a geometria característica da sua forma anisotrópica. Como consequência, o alinhamento, e consequentemente as propriedades ópticas de uma suspensão coloidal de nanobastões de ouro pode ser controlada por um campo elétrico, abrindo a porta para uma variedade de aplicações (FONTANA et al., 2016).

Uma das muitas métricas para se investigar um material nanofotônico, pode-se destacar a Absorbância. É uma medida da quantidade de luz absorvida por um material, geralmente em uma faixa específica do espectro eletromagnético, como a luz visível ou ultravioleta. Em materiais nanofotônicos, a absorbância é uma propriedade importante que pode ser controlada pelo tamanho, forma e distribuição das nanopartículas que compõem o material. A absorbância é influenciada pelas propriedades ópticas do material, como o índice de refração, e a dispersão de fase. Estas propriedades ópticas, por sua vez, são determinadas pelos modos de oscilação plasmônica nas superfícies das nanopartículas. A medida da absorbância em materiais nanofotônicos permite a investigação de suas propriedades ópticas e pode ser utilizada para ajustar sua resposta óptica para aplicações específicas (MENDELSBERG, 2012; JULURI et al., 2009).

3 REVISÃO DE LITERATURA

3.1 REVISÃO SISTEMÁTICA DA LITERATURA

Esta análise sistemática visa fornecer uma visão geral da literatura sobre as aplicações de técnicas e algoritmos de Inteligência Artificial (IA) no desenvolvimento e aprimoramento em Ciência dos Materiais, especificamente, materiais nanofotônicos, e como essas áreas do conhecimento se relacionam entre si.

O número de publicações acadêmicas vem aumentando em ritmo acelerado e tornando cada vez mais inviável se manter atualizado com tudo o que está sendo publicado, além disso, a ênfase nas contribuições empíricas resultou em fluxos de pesquisas volumosos e fragmentados. Isso dificulta a capacidade de acumular conhecimento e coletar ativamente evidências por meio de um conjunto de trabalhos de pesquisas anteriores. Portanto, as revisões de literatura estão cada vez mais assumindo um papel crucial na síntese de resultados de pesquisas para usar efetivamente a base de conhecimento existente, avançar uma linha de pesquisa e fornecer uma visão baseada em evidências sobre a prática de exercer e sustentar o julgamento e a experiência profissional (BRINER; DENYER et al., 2012; ROUSSEAU, 2012).

Os pesquisadores usam diferentes abordagens qualitativas e quantitativas de revisão da literatura para entender e organizar descobertas, dentre elas, a bibliometria tem o potencial de introduzir um processo de revisão sistemática, transparente e reprodutível baseado na medição estatística da ciência, dos cientistas ou da atividade científica. Ao contrário de outras técnicas, a bibliometria fornece análises mais objetivas e confiáveis. O avassalador volume de novas informações, desenvolvimentos conceituais e dados são o meio onde a bibliometria se torna útil por fornecer uma análise estruturada para um grande corpo de informações, para inferir tendências ao longo do tempo, temas pesquisados, identificar mudanças nas fronteiras das disciplinas, para detectar os pesquisadores e instituições mais prolíficos e apresentar o “quadro geral” de pesquisa existente. O uso de técnicas bibliométricas pode guiar o pesquisador aos mais importantes e relevantes artigos nas áreas de interesse. (ARIA; CUCCURULLO, 2017).

Aria et al.(2017)(ARIA; CUCCURULLO, 2017) desenvolveram uma técnica escrita na linguagem R que realiza todo o fluxo de trabalho do mapeamento científico, começando com a coleta de dados até a visualização dos dados, e disponibiliza uma ampla gama de técnicas estatísticas e gráficas para pesquisas quantitativas em bibliometria.

O termo bibliometria significa a aplicação de algoritmos matemáticos e métodos estatísticos

para analisar como está o desenvolvimento científico de determinadas áreas do conhecimento. O uso de técnicas bibliométricas pode orientar o pesquisador nos trabalhos mais relevantes e importantes nas áreas de interesse.

3.1.1 Protocolos e recomendações

A revisão sistemática foi conduzida seguindo a abordagem e as recomendações do relatório Preferred Reporting Items for Systematic Reviews and Meta-Analyses (PRISMA) 2020 de Page *et al* (2021)(PAGE *et al.*, 2021), e os resultados obtidos usando a ferramenta Bibliometrix, de Aria & Cuccurullo (2017)(ARIA; CUCCURULLO, 2017). Esta é uma ferramenta escrita em *R*, linguagem de programação muito utilizada para análises estatísticas. A abordagem *PRISMA* fornece um conjunto de diretrizes para ajudar os autores de revisões sistemáticas a garantir que sua pesquisa seja conduzida de forma clara, transparente e rigorosa. Seguir as recomendações do *PRISMA* pode ajudar a melhorar a qualidade e transparência da revisão sistemática. Para este estudo, as seções e subseções a seguir foram alinhadas com os procedimentos do *PRISMA*, garantindo um processo de revisão sistemática da literatura eficiente e otimizado, sendo capaz de recuperar os artigos mais relevantes a partir do conjunto de palavras-chave consideradas.

3.1.2 Questões relevantes para a pesquisa

A Tabela 8 busca estabelecer possíveis questões sobre os principais temas propostos, e criar problemáticas que serão naturalmente respondidas ao longo do fluxo de trabalho do mapeamento científico. Assim, a lista de todas as questões de pesquisa (QP) é apresentada. As QP não foram hierarquizadas em termos de importância, todas as questões se complementam, e portanto, não houve ordem sobre qual questão foi respondida primeiro.

3.1.3 Base de dados

A coleção foi compilada a partir das duas principais bases de dados bibliográficas, Clarivate Analytics Web of Science (WoS) e Scopus, alguns artigos e revisões foram recuperados da busca de citações. A WoS é considerada uma das plataformas de indexação de literatura mais confiáveis e técnicas, proficiente em introduzir os mais importantes campos de pesquisa científica e tecnológica. Scopus é um dos maiores bancos de dados de literatura revisada por

Tabela 8 – Lista e descrição das questões de pesquisa.

Questões de pesquisa	Descrição
QP#1	Houve um crescimento no número de aplicações de técnicas de IA em Ciência dos Materiais?
QP#2	Houve um crescimento no número de artigos citando aplicações de IA em Ciência dos Materiais?
QP#3	Quais abordagens de IA são mais relevantes a partir dos dados recuperados dos periódicos?
QP#4	Existe uma integração entre métodos de IA e algum tipo de material fotônico?
QP#5	Existe uma prevalência de uso de um ou mais métodos de IA em dispositivos fotônicos?
QP#6	Quais são os algoritmos de IA mais populares e relevantes aplicados em Ciência dos Materiais?
QP#7	Da produção científica anual, quais as tendências para os próximos anos?

pares. Foram formulados dois conjuntos de palavras-chave, conforme Tabela 9. O primeiro conjunto envolve palavras-chave relacionadas à área de Inteligência Artificial, e o segundo envolve palavras-chave relacionadas às áreas de Ciência dos Materiais, com foco em materiais nanofotônicos e ópticos. Uma busca inicial encontrou 2.075 resultados considerando as duas bases de dados, e esta busca inicial foi filtrada sob regras pré-determinadas para finalmente considerar apenas os documentos relacionados e alinhados com o objetivo desta revisão sistemática, conforme será estabelecido na subseção 3.1.4.

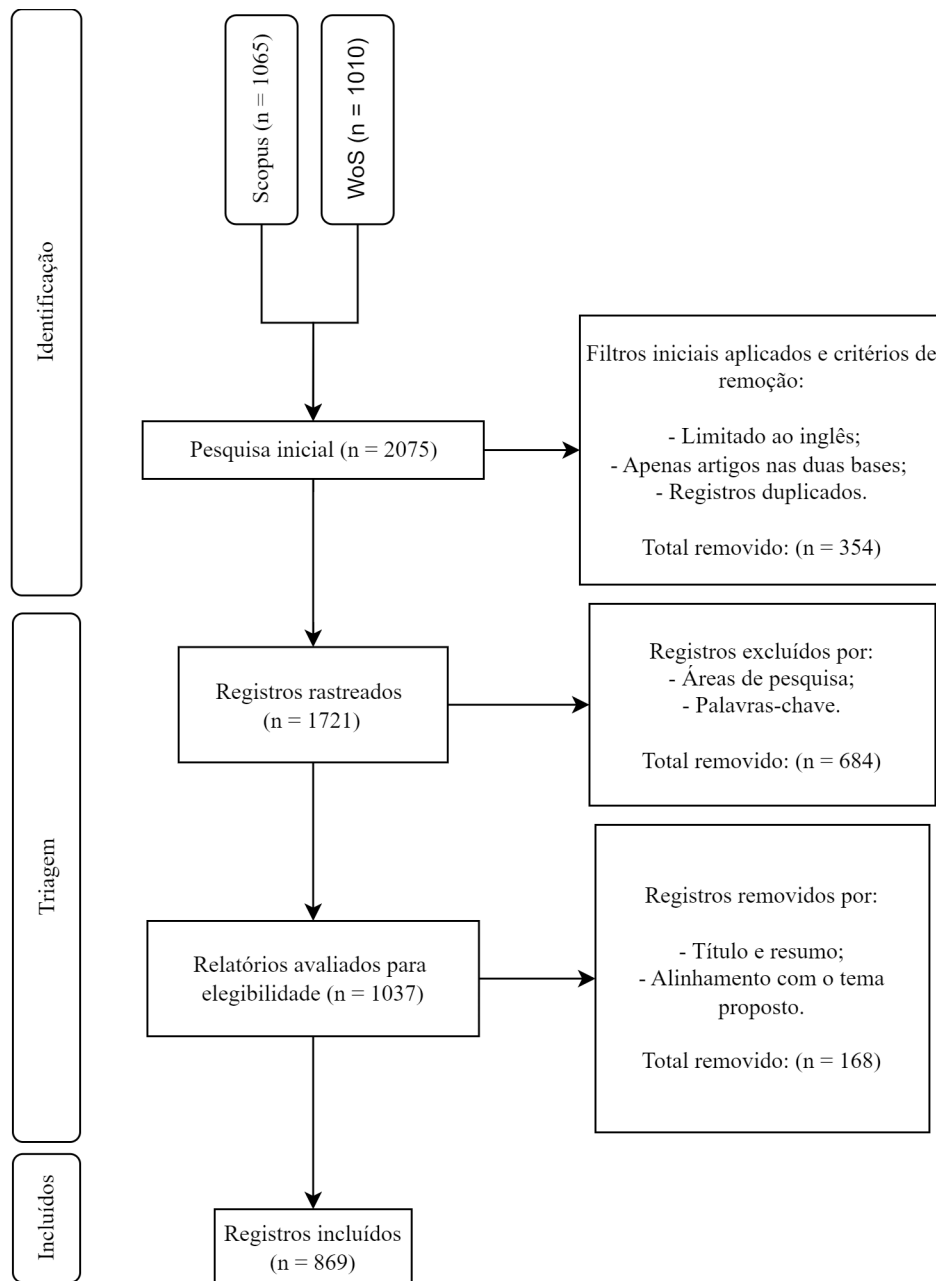
Tabela 9 – Palavras-chave.

IA palavras-chave	Ciência dos materiais palavras-chave
artificial intelligence; machine learning; deep learning; genetic algorithm; evolution algorithm; neural network*	photonic*; nanophotonic*; materials science plasmonic pixel*; intelligent materials subwavelength; optic; wave optic*

3.1.4 Filtragem do processo

Primeiro, um filtro foi usado para remover todos os documentos que não eram artigos nas duas bases de dados. Logo em seguida, foram feitas consultas adicionais para limitar as palavras-chave a apenas palavras relacionadas aos dois principais temas da pesquisa (Inteligência Artificial e Ciência dos Materiais), e apenas documentos escritos em inglês foram considerados. O último filtro foi o alinhamento com o tema proposto, no qual foram analisados manualmente mais de 1037 documentos. A revisão sistemática teve início em julho de 2022, e foi atualizada em julho de 2023, não houve limitação temporal inicial, e foram considerados artigos publicados até 2022. Critérios de consulta adicionais estão no Apêndice A. Após a aplicação de todos os critérios de filtro, um total de 869 artigos para a realização da revisão sistemática foi definido, a Figura 6 ilustra as etapas seguindo o fluxograma de acordo com o *PRISMA 2020*.

Figura 6 – Passos processo de filtragem.



Fonte: O autor (2023).

3.1.5 Bibliometrix e R-studio

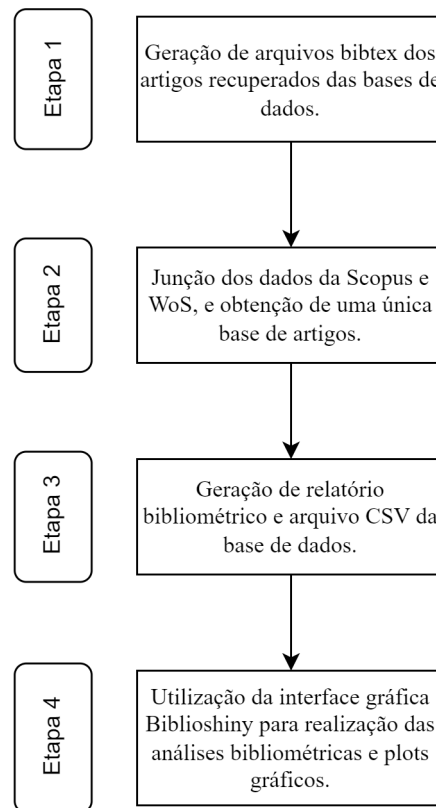
Um fluxo de trabalho de mapeamento científico completo pode ser dividido em cinco etapas, de acordo com Zupic *et al*(2015)(ZUPIC; ČATER, 2015):

1. Projeto de estudo;
2. Coleção de dados;
3. Análise de dados;
4. Visualização de dados;
5. Interpretação.

No projeto de estudo, as questões de pesquisa são definidas e o método bibliométrico apropriado é escolhido. Na etapa de coleta de dados, são selecionadas todas as bases de dados que contêm os dados bibliométricos, filtrados pelo conjunto de documentos principais e exportados os dados das bases de dados selecionadas. Na análise de dados, uma ou mais ferramentas de software bibliométricas ou estatísticas apropriadas são escolhidas. A quarta etapa consiste em fazer todas as análises necessárias através das ferramentas fornecidas pelo software escolhido na etapa anterior. A última etapa consiste em interpretar e descrever todos os achados.

A ferramenta *Bibliometrix* faz todo o fluxo de trabalho do mapeamento científico, desde a coleta de dados até a visualização dos dados, por isso, esta ferramenta de código aberto foi escolhida para realizar a revisão sistemática e fornecer todas as tabelas e gráficos que serão analisados. Para a realização dos plots gráficos, como gráficos de rede, gráficos de barras, gráficos de dispersão, tabelas, a *Bibliometrix* conta com uma interface gráfica na web, *Biblioshiny*, que permite para qualquer um que não tenha conhecimento de programação, em vez de gerar as análises por linha de comando no *R*, consiga com facilidade realizar análises bibliométricas. A Figura 7 resume todas as etapas realizadas desde a obtenção dos artigos até a realização das análises e obtenção dos resultados. A Figura 8 ilustra a interface gráfica da *Biblioshiny*.

Figura 7 – Fluxo de processo do Mapeamento científico.



Fonte: O autor (2023).

Figura 8 – Interface da Biblioshiny na web.

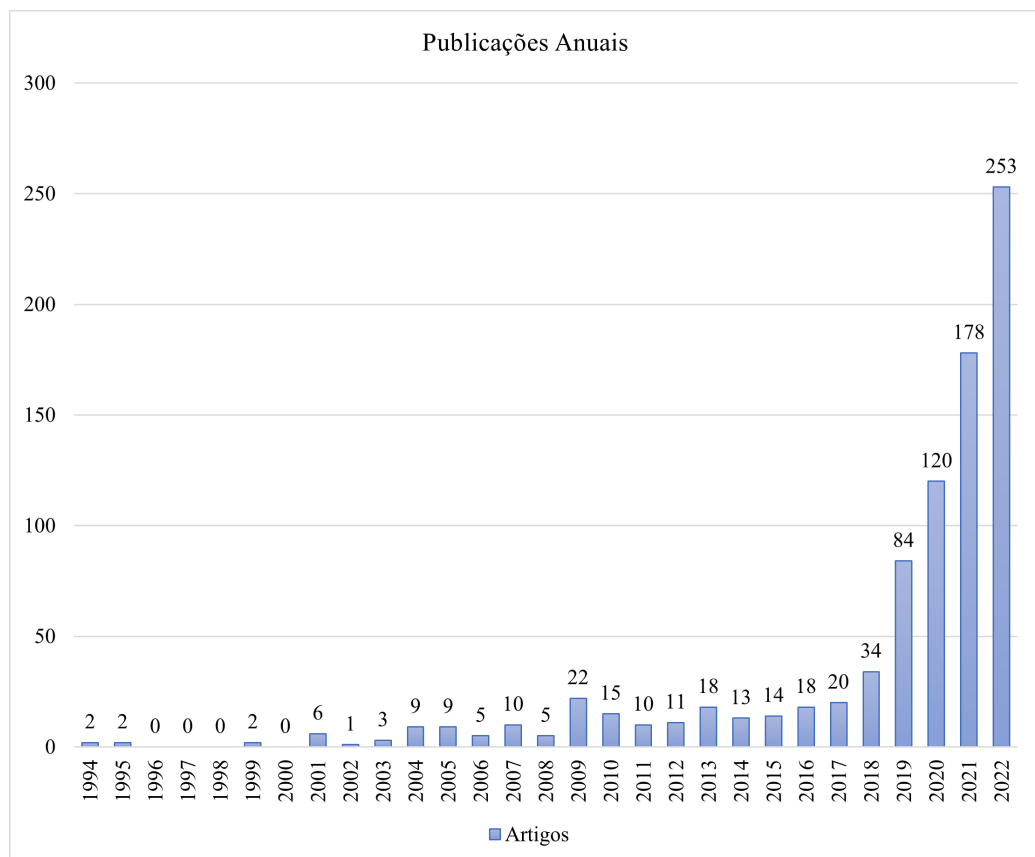


Fonte: O autor (2023).

3.1.6 Publicações globais e produção científica

A produção científica anual está resumida na Figura 9. Como pode ser observado, as publicações anuais de manuscritos envolvendo as áreas de Inteligência Artificial e Ciência dos Materiais vêm crescendo exponencialmente, considerando os últimos quatro anos (2019 – 2022). O período de 28 anos nessa busca, já que não há limitação de tempo nas consultas, mostra que o interesse por mais produção científica nessas áreas está em consonância com o aprimoramento do poder computacional. O desenvolvimento da análise e processamento de dados em Ciência dos Materiais acompanha a evolução da ciência, e da tecnologia ao longo dos séculos. É possível dividi-lo em três períodos de tempo, de 1994 a 2008 quase não há publicações, com média menor que quatro publicações, de 2009 a 2018 a média é próxima a dezoito artigos por ano, de 2019 até 2022 a média é de cerca de 158 artigos por ano. Esses números estão combinando artigos antigos, artigos estabelecidos e artigos atuais.

Figura 9 – Número de artigos publicados por ano.



Fonte: O autor (2023).

As principais informações sobre os dados podem ser vistas na Tabela 10 que confirma que há um crescimento no número de publicações ao ano em torno de 18.87%, o que justifica

estudos nesta combinação inicial de áreas no campo científico. A resposta à pergunta QP#2 é sim, que o número de artigos citando aplicações de IA em Ciência de Materiais tem crescido.

Tabela 10 – Informações principais sobre os dados.

Descrição	Resultados
Fontes (Jornais, Livros, etc)	244
Documentos	869
Taxa de crescimento anual %	18.87
Idade Média do Documento	4.52
Média de citações por documento	24.6
Referências	29413

Fonte: O autor (2023).

Os dez artigos mais citados em destaque são apresentados na Tabela 11. Os títulos destes comprovam que aplicações de IA em Ciência dos Materiais se faz presente em uma grande diversidade de áreas, como materiais Nanofotônicos, Plasmônicos, Metasuperfícies etc. Portanto, a resposta à pergunta QP#1 é sim, o número de aplicações de IA na Ciência dos Materiais tem crescido, como pode ser visto pela diversidade de títulos e possibilidades.

Tabela 11 – Artigos citados em destaque.

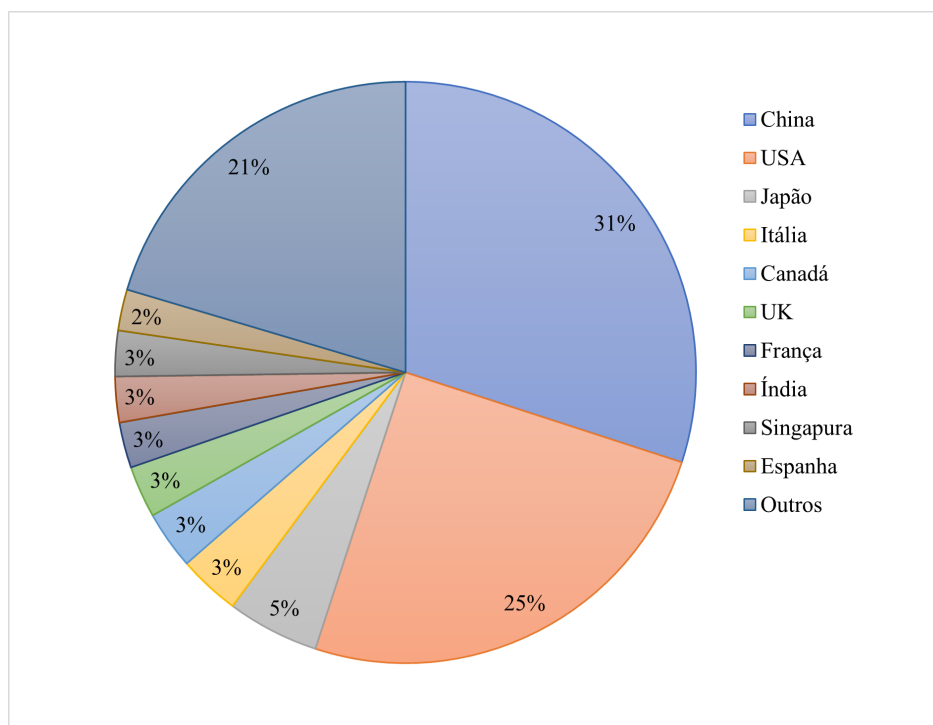
No.	Título	Jornal	Ano	vezes citado	Referências
1	Deep learning with coherent nanophotonic circuits	Nature Photonics	2017	1232	(SHEN et al., 2017)
2	All-optical spiking neurosynaptic networks with self-learning capabilities	Nature Photonics	2019	630	(FELDMANN et al., 2019)
3	Nanophotonic particle simulation and inverse design using artificial neural networks	Science Advances	2018	469	(PEURIFOY et al., 2018)
4	Deep-learning-enable on-demand Design of Chiral Metamaterials	ACS Nano	2018	467	(MA; CHENG; LIU, 2018)
5	Generative model for the inverse design of metasurfaces	Nano letters	2018	408	(LIU et al., 2018)
6	Photonics for artificial intelligence and neuromorphic computing	Nature Photonics	2021	399	(SHASTRI et al., 2021)
7	Deep learning in label-free cell classification	Scientific reports	2016	324	(CHEN et al., 2016)
8	Plasmonic nanostructure design and characterization via deep learning	Light: Science & Applications	2018	313	(MALKIEL et al., 2018)
9	11 Tops photonic convolutional accelerator for optical neural networks	Nature	2021	279	(XU et al., 2021)
10	Nonradiating photonics with resonant dielectric nanostructures	Nanophotonics	2019	243	(KOSHELEV et al., 2019)

Fonte: O autor (2023).

3.1.7 Distribuições das publicações

No total, 43 países estão contribuindo para o campo da Inteligência Artificial na Ciência dos Materiais. A Figura 10 ilustra o domínio de determinados países pelo número de publicações: China (603), EUA (503), Japão (103), Itália (69), Canadá (65), Reino Unido (65), França (51), Índia (51), Singapura (51), Espanha (46), outros (373). Não seria justificável comparar publicações por país, porém, aqui é possível ver a distribuição global e quais países estão mais bem posicionados para mostrar futuros avanços e tendências na área.

Figura 10 – Países mais influentes no número de publicações.

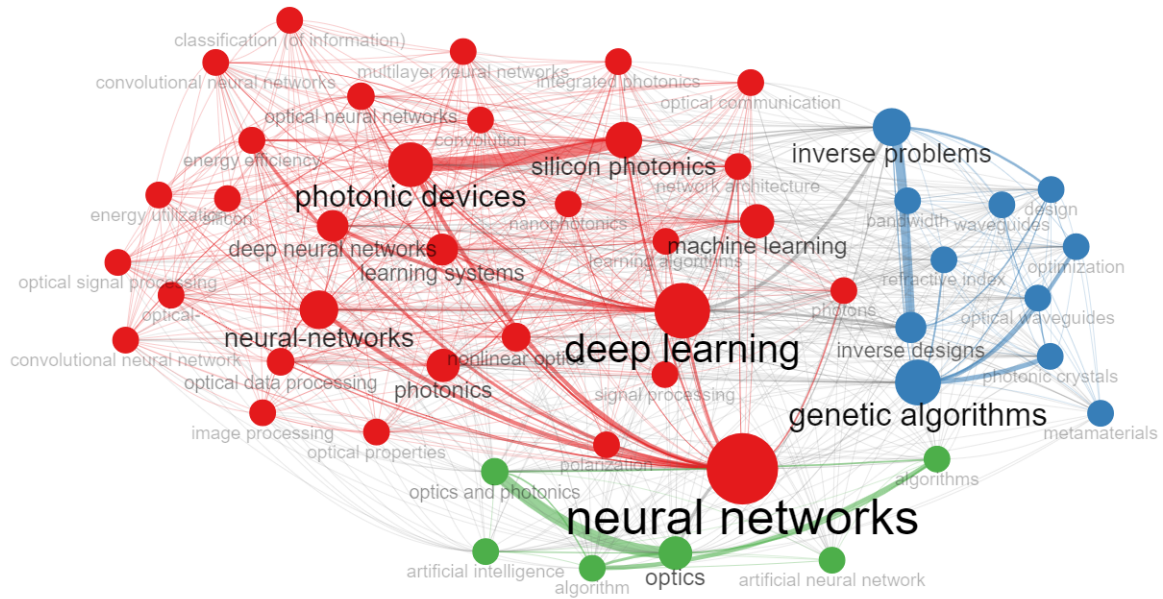


Fonte: O autor (2023).

A Figura 11 mostra uma rede de co-ocorrência, métrica muito utilizada em revisões sistemáticas. A partir das relações das palavras-chave, é possível investigar a estrutura do conhecimento de campos científicos. É uma métrica com o objetivo de mapear conexões poderosas entre as mais importantes palavras-chave baseado na frequência que aparecem em publicações. Quanto mais ocorrências registradas, maior será o tamanho da palavra na rede. Em destaque as palavras: deep learning, neural networks, genetic algorithms, photonic devices, inverse problems etc.

A Figura 12 ilustra o TreeMap das palavras-chave dos autores. As questões QP#3, QP#4 podem ser respondidas com a Tabela 11, Figuras 11 e 12. Os principais títulos recuperados

Figura 11 – Rede de Co-ocorrência.

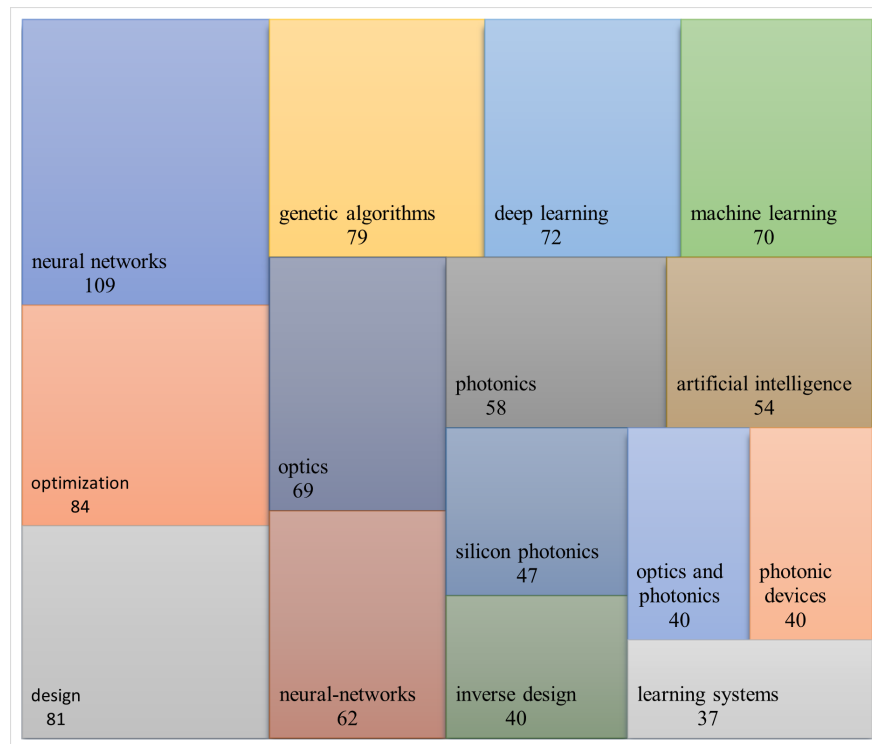


Fonte: O autor (2023).

tanto na tabela quanto nas figuras fazem referência a abordagens que utilizam técnicas de aprendizado profundo, redes neurais, algoritmos genéticos, assim como existe uma integração completa entre dispositivos ópticos e redes neurais, nanoestruturas plasmônicas, caracterização por aprendizado profundo, circuitos fotônicos integrados, dispositivos fotônicos etc. A questão QP#5 pode ser respondida através da Tabela 11, em que a abordagem de aprendizado profundo, pelo menos para os 10 artigos mais citados possui uma prevalência com esta abordagem, porém da rede de Co-ocorrência e TreeMap, fica evidente que outras abordagens como Algoritmos Genéticos também possui sua prevalência como abordagens de *IA* em materiais nanofotônicos.

As Tabelas 12 e 13 ilustram as principais métricas dos periódicos mais relevantes e dos autores mais relevantes, fatores de impacto, como *h_index*, *g_index*, *m_index*, citações totais e o número de artigos considerando os 869 artigos analisados. Não seria justificável comparar trabalhos recentes que ainda não tiveram tempo de si estabelecer e mostrar sua importância e relevância na área científica, com trabalhos consolidados, e que são referências. Assim, as tabelas aqui apresentadas têm apenas o efeito de ordenação da busca.

Figura 12 – TreeMap das palavras-chave mais relevantes.



Fonte: O autor (2023).

Tabela 12 – Fatores de impacto por jornal.

Jornal	h_index	g_index	m_index	Total Citações	Ano de publicação
IEEE J Sel Top Quantum Electron	14	24	2.00	580	2016
Optics express	14	28	1.00	851	2009
Nanophotonics	11	25	1.49	914	2012
Acs photonics	10	17	1.66	317	2017
Applied optics	10	15	0.35	232	1995
Optics letters	10	15	0.33	241	1993
Journal of lightwave technology	9	17	0.90	303	2013
Nature communications	8	11	1.60	203	2018
Optica	8	10	1.60	476	2018
Nature	6	8	0.75	38871	2015

Fonte: O autor (2023).

Tabela 13 – Fatores de impacto por autor.

Autor	h_index	g_index	m_index	Total Citações	Ano de publicação
PRUCNAL P	15	22	1.25	840	2011
TAIT A	13	17	1.30	769	2013
SHASTRI B	12	17	1.20	676	2013
DE L T	11	15	1.37	543	2015
NAHMIAS M	11	11	1.10	640	2013
ZHANG Y	8	16	1.60	283	2018
BRUNNER D	7	9	0.70	273	2013
BUENO J	7	8	1.40	330	2018
LI Y	7	12	0.50	196	2009
CHEN Y	6	10	0.54	176	2012

Fonte: O autor (2023).

4 FRAMEWORK

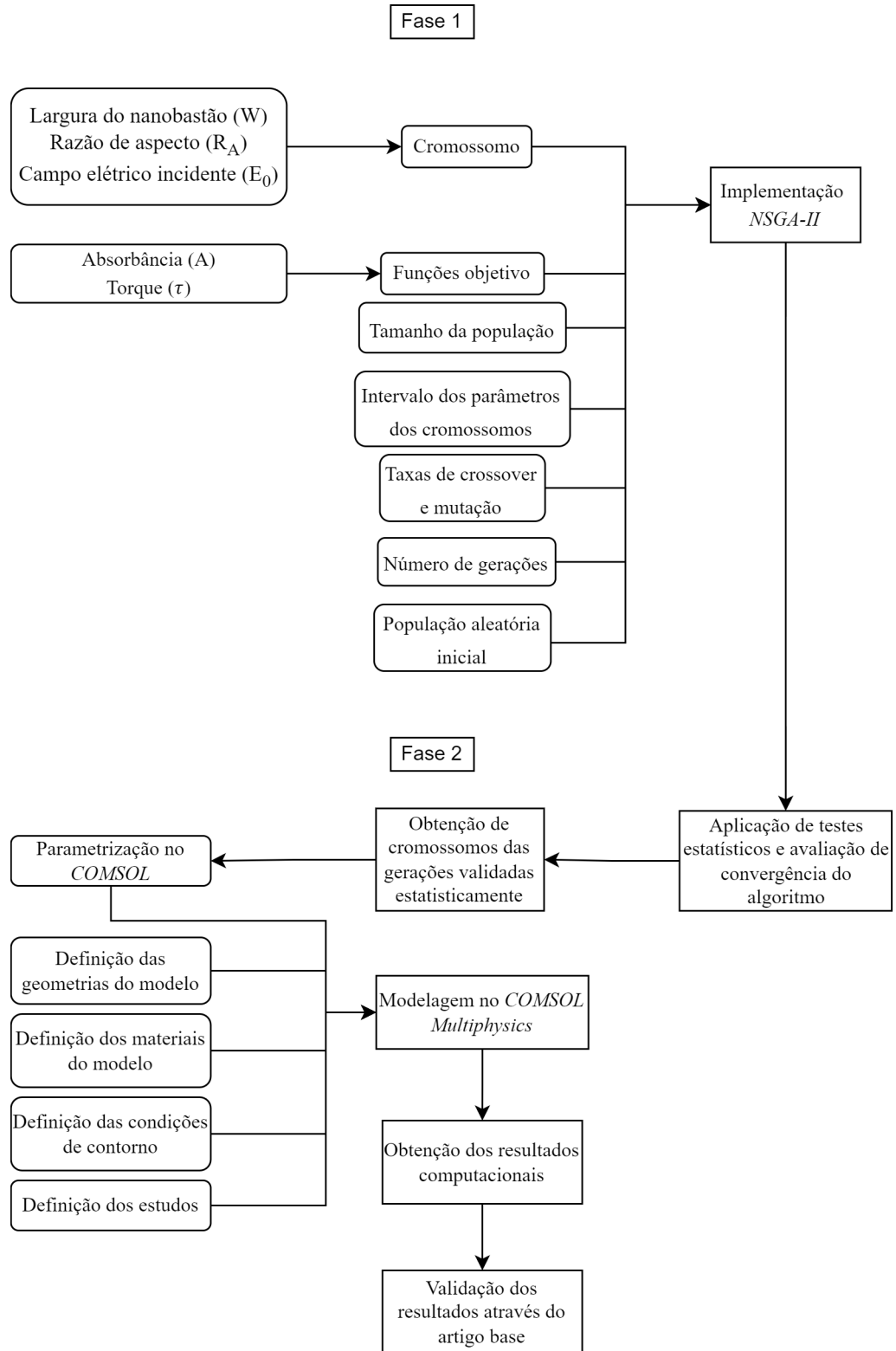
A framework necessária para que fosse possível realizar um processo de otimização dos nanobastões de ouro exige uma integração do algoritmo genético multiobjetivo escolhido e o software de elementos finitos, *COMSOL Multiphysics*, o qual não dispõe de uma *API* para que a integração ocorra. Os passos seguintes descrevem como seria a *API* ideal para que um processo de otimização ocorra:

- Fornecimento dos indivíduos da primeira geração do algoritmo genético multiobjetivo como parâmetros de entrada no *COMSOL Multiphysics*;
- O software de elementos finitos calcula as curvas de extinção, e a absorbância é encontrada para cada indivíduo;
- A partir da absorbância de cada indivíduo, o software calcula, a partir da equação da função objetivo, os parâmetros verdadeiros de todos os indivíduos da primeira geração;
- Os parâmetros que compõe a primeira geração serviriam como entrada da próxima geração, e todo processo se repetiria até um número máximo de gerações ou convergência.

Apesar da inviabilidade para a realização de um processo de otimização efetivo, os resultados obtidos na revisão sistemática realizada no capítulo anterior mostram que há um interesse crescente em aplicações de técnicas de *IA* no campo de materiais nanofotônicos, e que estudos envolvendo as duas áreas se encontram em fase inicial no campo científico. Portanto, investigações são promissoras, e a metodologia empregada das próximas seções trata de mostrar o que será realizado a fim de obter configurações de nanobastões em grande escala, e validar os resultados encontrados.

4.1 METODOLOGIA

Figura 13 – Metodologia utilizada.



Fonte: O autor (2023).

O fluxograma de processo da metodologia que será empregada para obtenção de nanobas-

tões de ouro pode ser visualizado na Figura 13. Na fase 1, foram definidos todos os parâmetros de entrada que servirão para a implementação do algoritmo genético multiobjetivo, em que o algoritmo genético de soluções não dominadas *NSGA-II* foi o escolhido, pois conforme postulado no capítulo 2, possui uma complexidade algorítmica $O(MN^2)$, também possui um operador de seleção que realiza um processo natural de elitismo, promovendo a diversidade através de uma métrica chamada distância de aglomeração, a qual não faz uso de parâmetro de compartilhamento, oferecendo vantagens competitivas no espalhamento de soluções frente aos seus antecessores. Na fase 2, testes estatísticos serão aplicados para avaliação da geração de convergência do algoritmo, e validação de gerações que forneçam diferença estatística entre gerações consecutivas ou diferentes, de tal modo que cromossomos com potencial de fornecer configurações que maximizem as propriedades dos nanobastões sejam selecionados como parâmetros de entrada no *COMSOL Multiphysics*. Todos os recursos de entrada necessários para modelagem no software de elementos finitos também são definidos, conforme explícito no fluxograma.

Na subseção 4.2.1, as equações das funções objetivo serão apresentadas, em que considerações importantes serão feitas para torná-la viáveis para serem utilizadas no *NSGA-II*. Desse modo, não se pode afirmar que as equações das funções objetivo são suficientes, e que o algoritmo genético multiobjetivo basta para uma completa caracterização, assim, a utilização do *COMSOL Multiphysics* se faz essencial junto com a validação das populações do algoritmo através de testes estatísticos.

Nas seções subsequentes, cada parâmetro do algoritmo genético multiobjetivo empregado será bem definido, assim como a realização de toda modelagem no software de elementos finitos.

4.2 ALGORITMO GENÉTICO E MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

O artigo *Dynamic Plasmonic Pixels* de Greybush *et al*(2019)(GREYBUSH *et al.*, 2019) foi o escolhido com o propósito de aplicar técnicas de *IA* para gerar um processo de produção em larga escala de nanobastões de ouro, visto que, o processo de sintetização em laboratório é muito custoso.

Os autores construíram um dispositivo óptico para controle da luz utilizando pixels plasmônicos dinâmicos, tal processo acontece através do alinhamento induzido por um campo elétrico em nanobastões plasmônicos em suspensões orgânicas, em que configurações de nanobastões

de ouro com e sem revestimento foram sintetizadas em laboratório. Greybush *et al* realizaram um processo comparativo das curvas de seções transversais de extinção dos nanobastões em diferentes configurações geométricas (comprimento, largura, razão de aspecto) e camadas de revestimento (Prata, dióxido de silício etc) dos resultados encontrados experimentalmente com os resultados encontrados via simulação no software de elementos finitos *COMSOL Multiphysics*.

Devido ao processo de não se ter uma indicação teórica de qual razão de aspecto produz nanobastões eficientes para sintetizar várias configurações, os autores se limitaram a analisar três configurações. A aplicação de um algoritmo genético de ordenamento não dominado tem o potencial de encontrar o conjunto com as melhores configurações não dominadas de nanobastões de ouro, a partir das funções objetivo definidas e indivíduos da população.

4.2.1 Parâmetros do algoritmo genético multiobjetivo NSGA-II

Seguindo as definições dos algoritmos genéticos, cada cromossomo da população é formado por um conjunto de genes, sendo cada gene um parâmetro do nanobastão de ouro. Dessa forma, cada cromossomo será formado por três genes que caracterizam bem os nanobastões, e os intervalos de cada gene foram definidos conforme valores mínimo e máximo em (GREYBUSH *et al.*, 2019). Os genes são:

- Largura do nanobastão - W definido no intervalo de [3 nm - 40 nm].
- Razão de aspecto - R_A definida no intervalo de [1.5 - 15].
- Campo elétrico da luz incidente - E definido no intervalo de [1 V/m - 10 V/m].

Para gerar as curvas de seção de extinção, a métrica de absorvância é essencial, pois mede a quantidade de luz absorvida por um material. Portanto, é um parâmetro chave para análise e totalmente relacionado com os parâmetros geométricos do nanobastão. A absorvância foi definida como uma das funções objetivo do algoritmo genético multiobjetivo.

A equação original da absorvância de nanobastões de ouro em suspensões orgânicas é uma expressão que depende da distribuição de probabilidade da orientação dos nanobastões, $P(\theta, t)$, que depende do ângulo θ , ângulo entre a direção do campo elétrico da luz incidente, da polarização da luz, do eixo longo dos nanobastões, e do tempo t . Desse modo, a distribuição das orientações dos nanobastões varia no tempo, tornando inviável utilizar a absorvância como

função objetivo no algoritmo genético já que não haveria possibilidade de gerar uma evolução das soluções de uma geração para a próxima. As considerações adiante foram feitas para tornar possível a utilização de uma formulação válida para a absorbância.

A absorbância de nanobastões de ouro em suspensão pode ser expressa como (ETCHEVERRY et al., 2017):

$$A(t) = \frac{\mu(t)fL}{\ln 10} \quad (4.1)$$

Onde L é comprimento na direção do eixo longitudinal, sendo igual a $W.R_A$ (largura e razão de aspecto), f é a fração de volume dos nanobastões, e $\mu(t)$ é o coeficiente de absorção. Conforme explicado anteriormente, $\mu(t)$ depende da distribuição de probabilidade da orientação dos nanobastões.

As seguintes sentenças estabelecem o que será feito para obter os resultados (ARAÚJO, 2018).

1. Assumindo que a forma das nanopartículas pode ser aproximada para um esferoide prolato, e aplicando o modelo de meio efetivo de Maxwell-Garnett, os coeficientes volumétricos de atenuação longitudinal e transversal podem ser reescritos em termos das propriedades ópticas macroscópicas do material do qual as nanopartículas são feitas e do meio no qual elas estão suspensas (BOHREN; HUFFMAN, 2008).
2. Assumindo que o torque atuante no sistema não tem componente na direção do campo, a distribuição azimutal de orientações será sempre uniforme, contribuindo com um valor constante após as integrações. Esta constante foi implicitamente incorporada na densidade de probabilidade $P(\theta, t)$.

Fonte: (ARAÚJO, 2018).

A partir das considerações assumidas acima, o coeficiente de absorção $\mu(t)$ pode ser simplificado em duas configurações particulares possíveis:

1. Luz polarizada paralelamente à direção do campo externo de alinhamento dos nanobastões.
2. Luz polarizada perpendicularmente à direção do campo externo de alinhamento dos nanobastões.

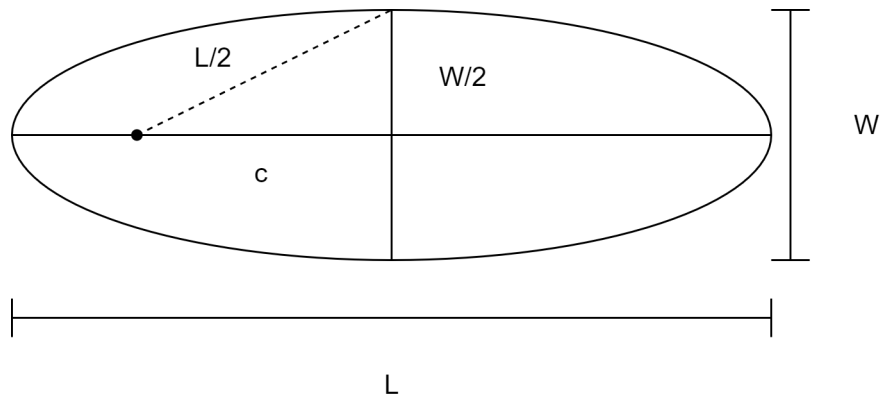
Os coeficientes volumétricos de atenuação nas direções longitudinal e transversal podem ser definidos como:

$$\mu_{T(L)} = \frac{k}{n_m} \text{Im}\{\varepsilon\} \left| \frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_m + L_{T(L)}(\varepsilon - \varepsilon_m)} \right|^2 \quad (4.2)$$

Onde n_m é o índice de refração do meio, ε_m é a constante dielétrica do meio (foi considerada o meio como sendo água), ε é a constante dielétrica do material (ouro), k é o número de onda, $\text{Im}\{\varepsilon\}$ denota a parte imaginária da constante dielétrica da partícula, e por fim, $L_T(L)$ são os fatores geométricos os quais são funções da excentricidade e do esferoide.

A excentricidade do esferoide pode ser aproximada a uma elipse, a Figura 14 demonstra o relacionamento dos parâmetros do nanobastão quando considerados na aproximação de uma elipse. Onde W e L são a largura e comprimento do nanobastão, respectivamente, e $L = WR_A$.

Figura 14 – Geometria aproximada do nanobastão.



Fonte: O autor(2023).

A equação clássica da excentricidade é definida como $e = \frac{c}{L/2}$, em que c é facilmente calculado a partir das relações pitagóricas, e finalmente pode-se chegar na seguinte equação final em função apenas da razão de aspecto:

$$e = \frac{\sqrt{R_A^2 - 1}}{R_A} \quad (4.3)$$

Os fatores geométricos são funções da excentricidade e do esferoide e são definidos como:

$$L_T = \frac{1 - e^2}{e^2} \left(\frac{1}{2e} \ln \frac{1 + e}{1 - e} - 1 \right) \quad (4.4)$$

$$L_L = \frac{1 - L_T}{2} \quad (4.5)$$

O número de onda k pode ser definido como:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (4.6)$$

Sendo λ o comprimento de onda atual da luz que incide.

Um parâmetro de ordem, S , quantifica o estado de alinhamento dos nanobastões. Se $S = 0$, o sistema se encontra totalmente aleatório, quando $S = 1$, todos os nanobastões encontram-se alinhados.

Por fim, o coeficiente de absorção a partir das equações acima definidas pode ser reescrito em função do parâmetro de ordem como (ARAÚJO, 2018):

$$\mu_1 = \frac{1}{3}[(\mu_L + 2\mu_T) + 2(\mu_L - \mu_T)S] \quad (4.7)$$

$$\mu_2 = \frac{1}{3}[(\mu_L + 2\mu_T) - (\mu_L - \mu_T)S] \quad (4.8)$$

Sendo μ_1 quando a polarização da luz é paralela à direção do campo e μ_2 quando é perpendicular à direção do campo. Para os cálculos no algoritmo genético multiobjetivo, uma polarização de luz perpendicular ao campo foi considerada.

Os valores dos índices de refração do meio, constantes dielétricas (meio e nanopartícula) e parte imaginária da nanopartícula foram obtidos a partir de uma base de dados que agrupa diferentes referências de artigos publicados, fornecendo uma forma prática de extrair informação confiável (POLYANSKIY, 2023). A fração volumétrica f na equação 4.1 pode ser estimada no intervalo de 0 a 1.

Além da absorbância, o torque que é gerado nos nanobastões na presença do campo elétrico foi considerado como função objetivo. Considera-se a aproximação de geração do torque como sendo contribuído apenas do dipolo elétrico induzido p , dado por:

$$p = \epsilon \Delta\alpha E(t) \quad (4.9)$$

Onde ϵ é a permissividade elétrica do meio, $\Delta\alpha$ é a diferença entre as polarizabilidades longitudinal e transversal do nanobastão de ouro.

$$\Delta\alpha = \alpha_L - \alpha_T \quad (4.10)$$

Considerando uma aproximação para o torque sofrido pelo nanobastão como apenas em função do dipolo elétrico acima, pode-se chegar na seguinte expressão final:

$$\tau = \epsilon \Delta \alpha E^2 \quad (4.11)$$

Considera-se a situação de torque máximo com o nanobastão perpendicular ao campo elétrico. Explicação para a equação acima:

- A polarizabilidade de um nanobastão pode ser apresentada considerando um sistema com três eixos principais mutuamente ortogonais x_1, x_2, x_3 e eixos unitários e_1, e_2, e_3 , sendo representada considerando uma forma tensorial por uma matriz diagonal:

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3 \end{bmatrix}$$

- Considera-se que a interação entre o campo elétrico e o nanobastão acontece do ponto de vista do nanobastão, e o sistema de coordenadas com os eixos unitários e_1, e_2, e_3 . Pode-se definir que o eixo maior do nanobastão se encontra na direção do eixo e_1 e sendo fixo, o eixo e_2 é definido de tal forma que o nanobastão e o campo elétrico estejam no mesmo plano, e assim, a componente ortogonal relativa ao eixo e_3 do campo elétrico seja nula. Fonte: (ARAÚJO, 2018)

A equação para $\alpha_L - \alpha_T$ pode ser definida como (LINK; MOHAMED; EL-SAYED, 1999)(ZANDE et al., 2000)(YU et al., 1997):

$$\alpha_{L,T} = \frac{V(\epsilon_p - \epsilon_m)}{\epsilon_m + L_{L,T}(\epsilon_p - \epsilon_m)} \quad (4.12)$$

Onde V é o volume do nanobastão, ϵ_p é a constante dielétrica do ouro, ϵ_m é a constante dielétrica do meio, $L_{L,T}$ os fatores geométricos longitudinais e transversais definidos nas equações 4.4 e 4.5 (CHON; INIEWSKI, 2018). Os valores para as constantes dielétricas podem ser obtidos utilizando o modelo clássico de Drude (DRUDE, 1902), e também tabelados (JOHNSON; CHRISTY, 1972).

As seguintes etapas e operadores descrevem a implementação do *NSGA-II*. O algoritmo foi implementado em *Python* e pode ser visualizado em detalhes no apêndice *B*.

Primeira Etapa:

- Definição do tamanho da população e intervalo dos valores de cada gene;

- Definição das taxas de crossover, mutação e número máximo de gerações;
- Inicialização da população inicial aleatoriamente.

Segunda Etapa:

- Inicialização do processo evolutivo considerando o número máximo de gerações;
- Avaliação dos valores de aptidão em cada geração;
- Seleção dos melhores indivíduos em cada geração;
- Determinação das soluções não dominadas que formam as fronteiras de pareto das melhores funções de aptidão até completar o tamanho da população;
- Determinação da população final de cromossomos em cada geração a partir das fronteiras de pareto de soluções não dominadas;
- Determinação dos valores de aptidão finais a partir das fronteiras de pareto.

Não foram feitas modificações no algoritmo *NSGA-II* original, portanto, os operadores do algoritmo são os mesmos conforme descrito na subseção 2.2.2.

4.2.2 Testes Estatísticos

Os testes estatísticos permitem avaliar se as diferenças observadas entre os resultados produzidos pelo algoritmo são estatisticamente significativas ou simplesmente resultado de variações aleatórias. Os seguintes testes estatísticos foram utilizados para avaliar a qualidade das configurações de nanobastões produzidas e garantir que o algoritmo esteja convergindo de maneira adequada:

- Teste de Mann-Whitney.
- Teste de Kruskal-Wallis.

Teste de Mann-Whitney: É um teste não paramétrico que pode ser usado para comparar a mediana de duas amostras independentes. Ele não requer que as amostras sigam uma distribuição normal e é adequado para dados contínuos não normalizados. Se o valor p calculado for menor que 0.05, então é possível rejeitar a hipótese nula, o que indica que as amostras têm

distribuições diferentes e que há evidências de que os indivíduos comparados têm desempenhos diferentes. Porém, se o valor p for maior do que 0.05, isso indica que não há evidências suficientes para rejeitar a hipótese nula, o que sugere que as amostras têm distribuições semelhantes (MANN; WHITNEY, 1947)(MCKNIGHT; NAJAB, 2010).

Teste de Kruskal-Wallis: O teste de Kruskal-Wallis é usado para comparar três ou mais amostras independentes e pode ser usado para avaliar a convergência do *NSGA-II* (MCKNIGHT; NAJAB, 2010)(OSTERTAGOVA; OSTERTAG; KOVÁČ, 2014).

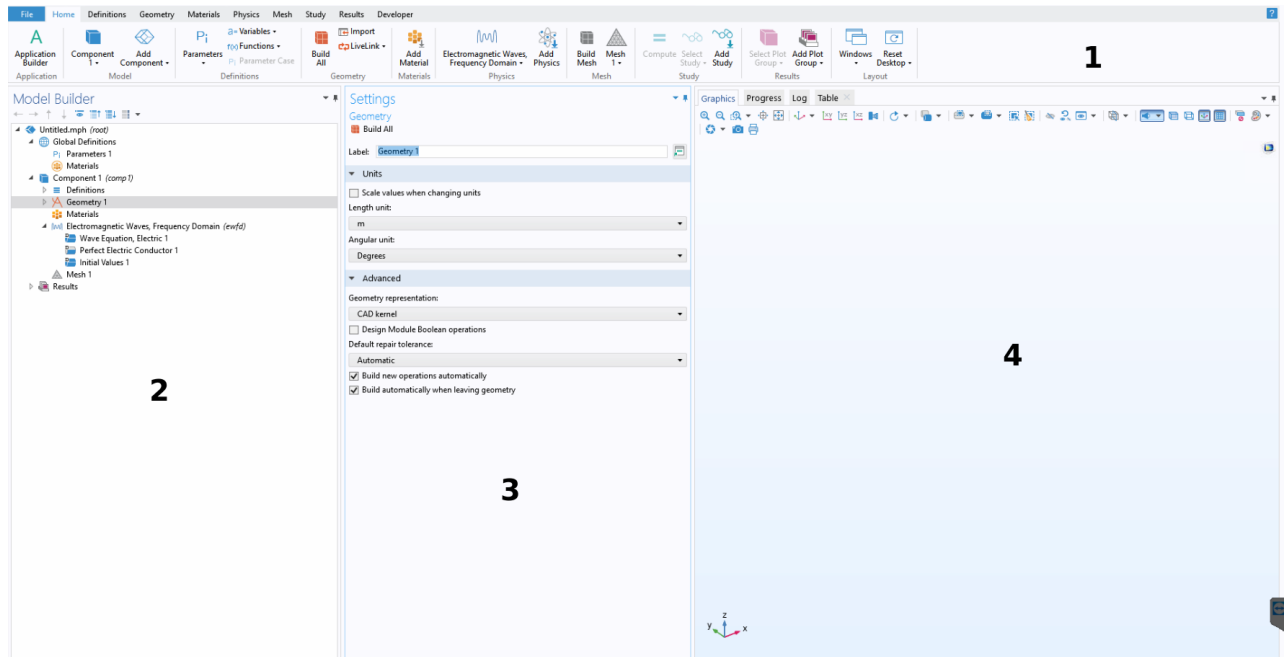
4.2.3 Modelagem no COMSOL Multiphysics

Uma breve descrição de como realizar a modelagem de nanobastões de ouro e obtenção das curvas de absorbância (espalhamento, absorção, e extinção) será feita com o objetivo de que o trabalho realizado possa ser reproduzido com facilidade.

Iniciado o *COMSOL* e na tela *New*, clique em *Model Wizard* e logo após selecione *3D* na seleção da dimensão espacial do problema. É necessário agora selecionar o módulo físico o qual realizará a análise do problema. Na tela *Select Physics*, é necessário expandir a opção *Optics* e em sequência a opção *Wave Optics*. Selecione a opção *Electromagnetic Waves, Frequency Domain (ewfd)* e clique em *Add*. Com esta interface adicionada, clique em *Study* e, na tela *Select Study*, selecione *Wavelength Domain* e clique em *Done*. A Figura 15 ilustra a interface inicial, e foi dividida em 4 interfaces para melhor entendimento, as quais podem ser definidas como:

1. Seção 1 é a *Toolbar*, a qual se caracteriza por fornecer a um controle geral, desde definição de parâmetros até computar o estudo requerido, é possível alternar nas abas para caracterização total do problema.
2. A seção 2 é o menu de navegação dos elementos do projeto. Este menu lista todos os elementos que já fazem parte do projeto. Nele, também é possível realizar algumas funcionalidades da *Toolbar*.
3. A seção 3 apresenta todas as propriedades (parâmetros) modificáveis dos objetos e elementos de projeto que estão selecionados.
4. A seção 4 exibe a geometria do problema estudado, além dos resultados, tanto na forma do próprio modelo, quanto na forma de gráficos e curvas. É possível rotacionar a

Figura 15 – Vista geral do COMSOL Multiphysics.



Fonte: O autor (2023).

geometria pressionando o botão esquerdo e movendo o mouse, e é possível transladar a geometria pressionando o botão direito e movendo o mouse.

A partir do modelo 3D com as propriedades ópticas bem definidas acima, o passo seguinte é definir os parâmetros do nanobastão de ouro. A Tabela 14 ilustra um exemplo dos parâmetros bem definidos. O modelo que será descrito foi fornecido por (GREYBUSH et al., 2019), e portanto, todos os resultados que serão obtidos se encontrarão alinhados com os resultados do artigo base. O preenchimento da tabela de parâmetros pode ser feito clicando em *Home (Toolbar)*, *Definitions* e então *Parameters*. A seção *Settings* será modificada, contendo agora a tabela preenchida com os parâmetros globais.

O *COMSOL Multiphysics* oferece uma variedade ampla de possibilidades para construção da geometria do problema. O modelo construído segue em linha com o qual foi fornecido pelo autor correspondente do artigo base. A Figura 16 adiante ilustra de forma geral como foi feita a escolha dos componentes geométricos do nanobastão.

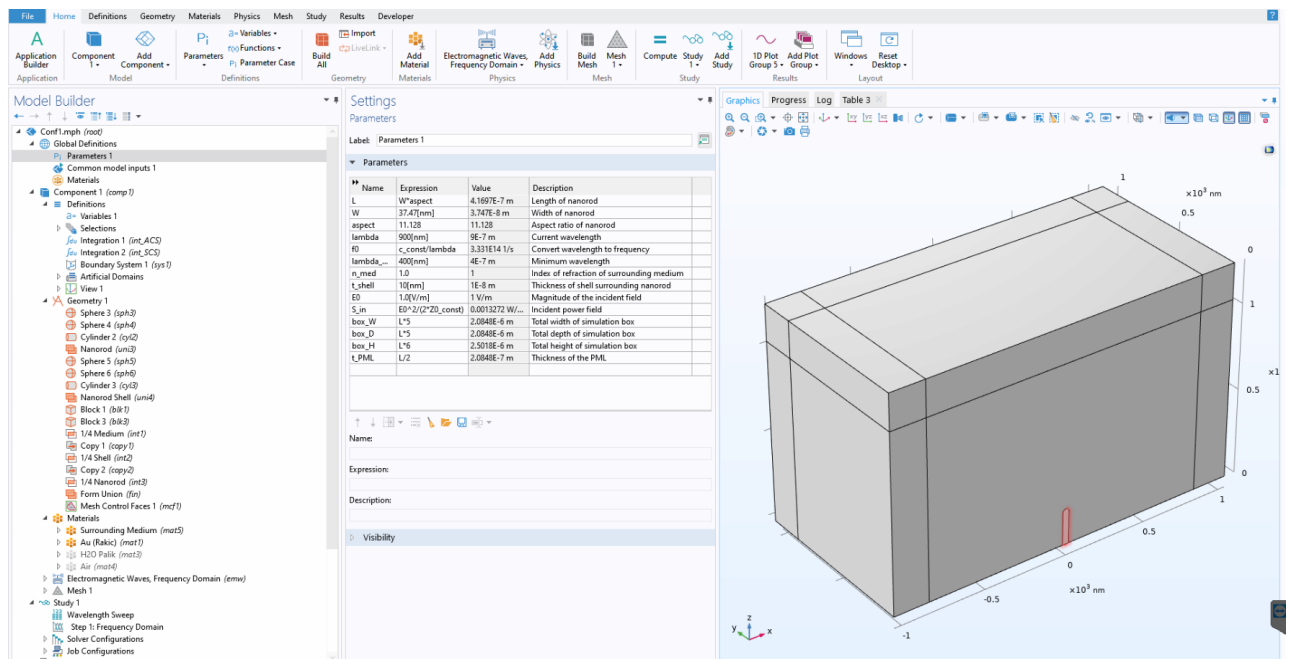
Na geometria do problema é possível visualizar, em destaque na cor vermelha, o nanobastão de ouro. O *COMSOL* é um software de elementos finitos que facilita a modelagem, e otimiza tempo de processamento espelhando o sólido completo. Na seção *Geometry 1*, apenas 1/4 do nanobastão foi necessário modelar, assim como a caixa de isolamento a qual se encontra inserido. O nanobastão, assim como sua a casca foram modelados realizando uma união de

Tabela 14 – Parâmetros do nanobastão de ouro

Nome	Expressão	Valor	Descrição
L	$W * Ra$	$2E^{-7}$ m	Comprimento do nanobastão
W	20[nm]	$2E^{-8}$ m	Largura do nanobastão
Ra	10	10	Razão de aspecto do nanobastão
lambda	1030[nm]	$1.03E^{-6}$ m	Comprimento de onda atual
f_0	$c_{const}/lambda$	$2.91E^{14}$ 1/s	Converte comprimento de onda para frequência
$lambda_{min}$	400 [nm]	$4E^{-7}$ m	Comprimento de onda mínimo
n_{med}	1.3	1.3	Índice de refração do meio
t_{shell}	10[nm]	$1E^{-8}$ m	Espessura da casca ao redor do nanobastão
E	1 [V/m]	1 V/m	Magnitude do campo incidente
S_{in}	$E^2/2Z_0$	0.00172 W/m ²	Campo de energia incidente
box_W	L*5	$1E^{-6}$ m	Largura da caixa de simulação
box_D	L*5	$1E^{-6}$ m	Profundidade da caixa de simulação
box_H	L*6	$1.2E^{-6}$ m	Altura da caixa de simulação
t_{PML}	L/2	$1E^{-7}$ m	Espessura do PML

Fonte: O autor(2023).

Figura 16 – Vista geral do COMSOL Multiphysics.



Fonte: O autor (2023).

superfícies cilíndricas e esféricas.

Com a plena visualização da estrutura, é preciso agora definir os domínios e as fronteiras

do problema. Assim, clicando em *Definitions (toolbar)* e depois em *Explicit* para definir os domínios físicos que serão a nanopartícula e sua casca. Em *label*, uma boa sugestão é nomear de *Physical Domains*. É necessário antes esconder com *Click and Hide* toda a caixa de simulação que abrange a nanopartícula. O complemento, também muito conhecido *PML Domains* é justamente tudo (caixa de simulação), exceto as superfícies que abrangem o *Physical Domains* e é feito clicando em *Complement*. Em *Input Entities* é necessário clicar em *Add no Selection to invert*, e assim selecionar *Physical Domains*. Um novo *explicit* é necessário, dessa vez selecionando apenas a nanopartícula. Para calcular as curvas de espalhamento, absorção e extinção, é preciso selecionar as superfícies da nanopartícula, isso é feito adicionando mais um *Explicit* e na opção *Geometric entity level* selecionar *Boundary*, e então selecionar todas as superfícies do nanobastão de ouro. Por fim, é necessário selecionar as superfícies internas e externas do *PML (perfect match layers)*, e isso é feito de forma semelhante como no passo anterior, selecionando todas as superfícies da caixa de simulação e alterando para *Boundary*, e a superfície interna o mesmo procedimento. Um último passo é selecionar a opção *Perfectly Matched Layer* em *Definitions* e escolher o *PML Domains*. Com os passos anteriores realizados, toda a geometria do problema estará definida.

O próximo passo é definir os materiais, procedimento simples o qual seleciona-se o ouro (*Au*) para a nanopartícula e todo o restante como *Surrounding Medium*.

O próximo passo é a caracterização do campo eletromagnético incidente e definição do eixo de polarização da luz. A Figura 17 ilustra o procedimento. A opção *Scattered field* é selecionado para campo espalhado e o eixo *Z* foi o escolhido para atuação do campo eletromagnético.

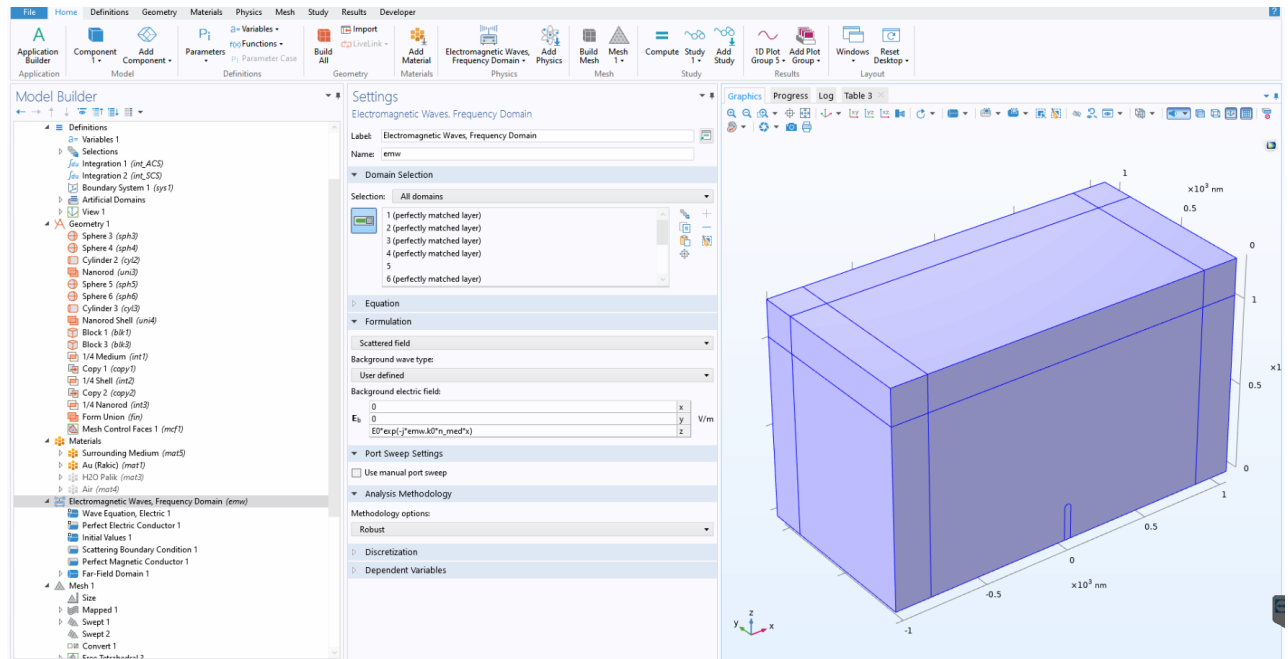
O passo seguinte é definir a condição *Scattering Boundary Condition 1*, e selecionar a etiqueta que referencia as superfícies internadas do PML definidas na etapa anterior.

O passo seguinte é a definição das malhas do modelo, a Figura 18 ilustra de forma geral como foi feita a definição em cada superfície, os tamanhos máximos e mínimos dos elementos, etc. O modelo da malha foi feito sem alterações em relação ao modelo fornecido pelo autor correspondente, já que não é o propósito do presente trabalho entrar em detalhes de métodos de elementos finitos.

O próximo passo é definir os estudos que serão realizados. Dois estudos foram definidos, *Parametric Sweep*, em que se define os passos de comprimento de onda que serão computados, e *Frequency Domain*, a qual é definido a frequência de domínio do problema.

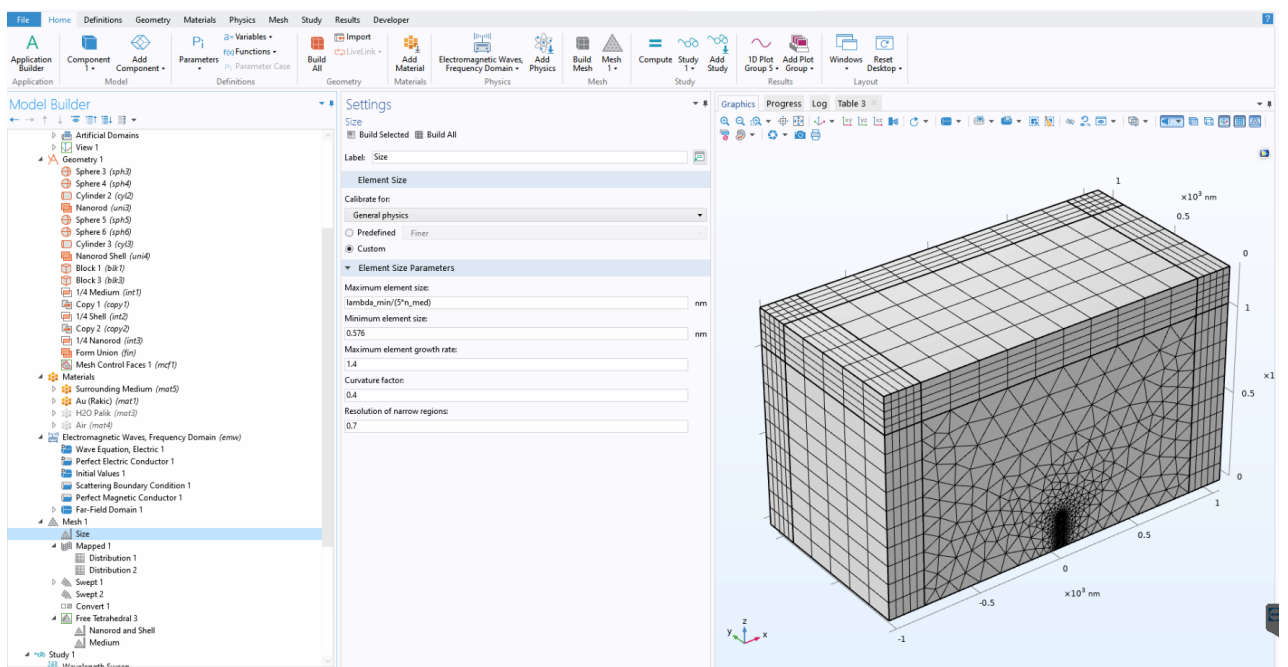
Para avaliar as secções transversais de espalhamento, absorção e extinção do modelo, é necessário definir as equações que governam o fenômeno físico, assim como definir duas

Figura 17 – Caracterização do campo eletromagnético.



Fonte: O autor (2023).

Figura 18 – Definição das malhas do modelo.



Fonte: O autor (2023).

integrações, uma no domínio da nanopartícula, e outra na superfície da nanopartícula. Os procedimentos similares são feitos na seção *Component 1, Definitions*, e por fim *Integrations*, selecionando *Domain* na primeira integração para domínio da nanopartícula, e *Boundary* para a superfície da mesma. O último procedimento é preencher as variáveis em *Component 1*, a

Tabela 15 ilustra as equações necessárias e que o *COMSOL* já as tem bem definidas em sua base de dados.

Tabela 15 – Equações de contorno do nanobastão de ouro.

Nome	Expressão	Unidade
ofact	$if(n_x * x + n_y * y + n_z * z \geq 0, 1, -1)$	
on_x	$n_x * ofact$	
on_y	$n_y * ofact$	
on_z	$n_z * ofact$	
scPoav	$(emw.relPoavx.on_x) + (emw.relPoavy.on_y) + (emw.relPoavz.on_z)$	W/m^2
Poav	$emw.Poavx * on_x + emw.Poavy * on_y + emw.Poavz * on_z$	W/m^2
ACS	$4 * int_{ACS}(emw.Qrh)/S_{in}$	m^2
SCS	$4 * int_{SCS}(scPoav)/S_{in}$	m^2
ECS	$ACS + SCS$	m^2
r	$\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$	m^2

Fonte: O autor(2023).

A maioria dos termos definidos na Tabela 15 já se encontram inseridos internamente no *COMSOL* por padrão, os termos int_{ACS} e int_{SCS} são as integrações definidas no passo anterior. Com isso, o modelo pode ser computado e as seções transversais de espalhamento, absorção e extinção podem ser calculadas e avaliadas.

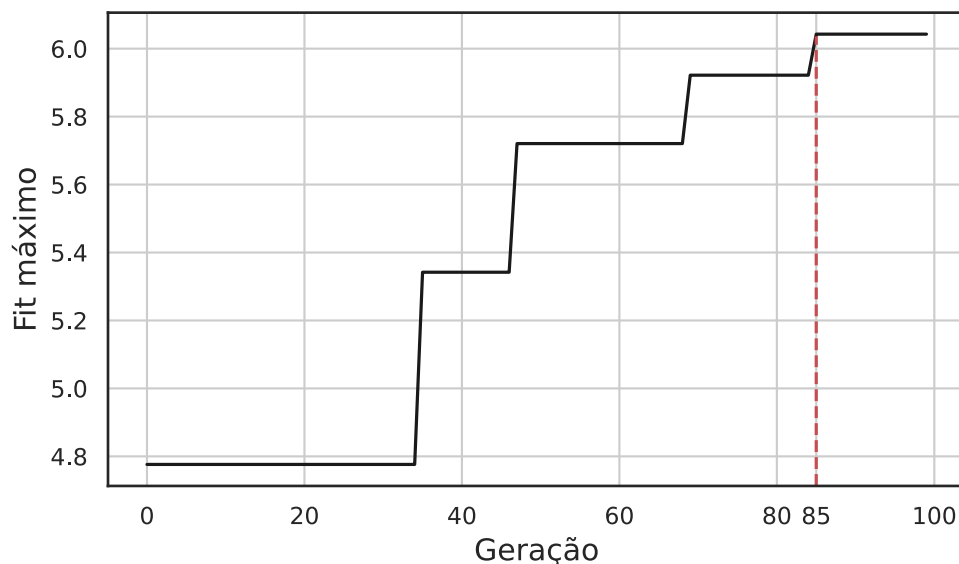
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 RESULTADOS NSGA-II

A determinação do tamanho da população e número de gerações foram feitos através de inúmeros testes variando os hiperparâmetros do algoritmo, como taxa de crossover, mutação, assim como o próprio tamanho da população e número de gerações, e após inúmeras iterações, foi observada a robustez das soluções considerando o tamanho da população de 150 indivíduos e 200 gerações. Estes testes foram necessários visto que o algoritmo trabalha em regime restrito de intervalos de valores para cada gene, e dessa forma, um número muito grande do tamanho da população e de gerações acima dos valores determinados foi observado que o algoritmo converge muito rápido sem gerar uma diversidade de soluções. Foi determinado um processo de seleção de indivíduos para maximização do valor da Absorbância e minimização do Torque gerado para formação da fronteira de pareto.

A Figura 19 ilustra uma função degrau para determinação da convergência das gerações. Foi definido o valor de aptidão máxima de absorbância de cada geração como critério. A convergência acontece na geração 85.

Figura 19 – Funções de Aptidão máximas de cada geração.

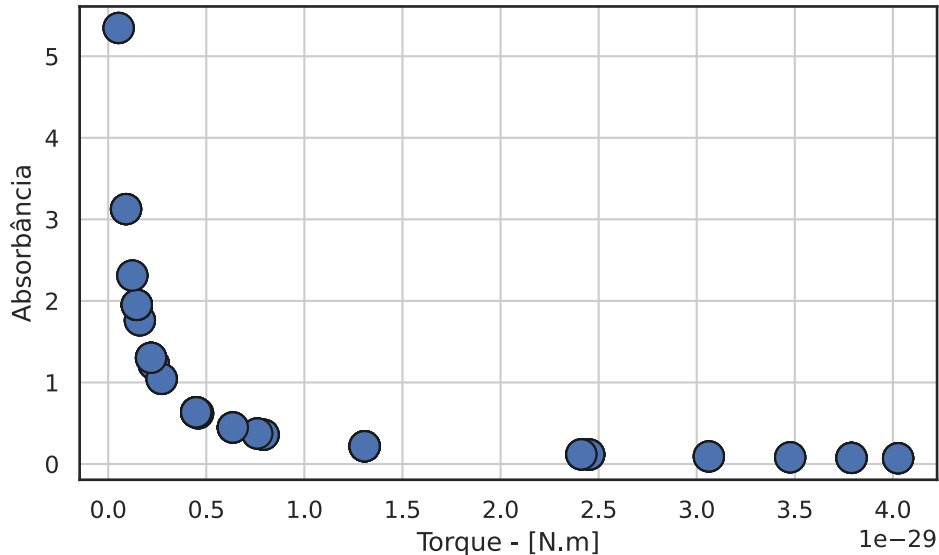


Fonte: O autor (2023).

Com a determinação da geração de convergência na população 85, a Figura 20 ilustra a fronteira de pareto que relaciona a maximização da Absorbância com a minimização do Torque sofrido pelos nanobastões de ouro no processo de alinhamento. O comportamento assintótico

característico é observado, assim como um espalhamento das melhores soluções gerado pelo algoritmo *NSGA-II*.

Figura 20 – Fronteira de pareto da geração de convergência.



Fonte: O autor (2023).

5.2 TESTES ESTATÍSTICOS E VALIDAÇÃO DAS GERAÇÕES

Realizar um plot das funções de aptidão máximas da Absorbância de cada geração não é uma métrica suficiente para afirmar que houve um processo de convergência, nem muito menos para encontrar as melhores soluções geradas pelo algoritmo genético multiobjetivo. A utilização de testes estatísticos é fundamental para validar os resultados de qualquer algoritmo de otimização, incluindo o *NSGA-II*.

As Tabelas 16 a 17 descrevem a estatística do teste e p-valor para cada teste de hipótese aplicado nas gerações do algoritmo. Foi considerado uma significância padrão a nível de 5%. A Tabela 16 apresenta os resultados obtidos do teste de Mann-Whitney.

Os resultados obtidos a partir do teste de Mann-Whitney estão alinhados com a função degrau, sugerindo que há diferenças estatísticas entre as populações iniciais, e portanto, as populações têm desempenhos diferentes. Valores altos da estatística do teste sugerem que os indivíduos das populações de gerações maiores possuem valores dos parâmetros maiores. Somente a partir da geração 80, o p-valor encontrado foi muito maior que o nível de significância de 5%, logo, não há evidências para rejeitar a hipótese nula, o que sugere que as distribuições são semelhantes, e que o desempenho das soluções dos nanobastões para as duas populações

Tabela 16 – Estatística do teste de Mann-Whitney.

Gerações	U1	U2	p-valor
20 e 40	7980.000	14520.000	0.000
40 e 60	9857.000	12643.000	0.000
60 e 80	10930.500	11569.500	0.024
80 e 85	13317.500	9182.500	0.532

Fonte: O autor(2023).

serão semelhantes.

A Tabela 17 apresenta os resultados encontrados no teste de Kruskal-Wallis. O p-valor encontrado ao comparar 3 gerações independentes das duas primeiras linhas sugere que pelo menos uma população no grupo de três possui distribuição diferente, e portanto, desempenho das soluções diferente, valores altos para estatística do teste reforçam a evidência que se tratam de distribuições diferentes e desempenhos maiores para gerações maiores. No teste Kruskal-Wallis um valor crítico da estatística pode ser encontrado consultando a tabela Qui-Quadrado (DODGE, 2008), o que se constata um valor de 5.99 para três grupos. Analisando o valor encontrado de 5.391 na última linha, e um p-valor maior que 5%, não há evidências para rejeitar a hipótese nula, e que também o desempenho das soluções das gerações não são estatisticamente significantes. O resultado se encontra alinhado com o teste anterior, o qual sugere que as populações 80 e 85 não possuem diferenças significativas entre seus indivíduos.

Tabela 17 – Estatística do teste de Kruskal-Wallis.

Gerações	Estatística	p-valor
20, 40 e 60	83.869	0.000
40, 60 e 80	35.606	0.000
60, 80 e 85	5.391	0.068

Fonte: O autor(2023).

A partir dos resultados obtidos dos testes de hipóteses aplicados, 5 configurações das gerações 20, 40, 60, 80 e 85 foram escolhidas e os valores para os parâmetros dos nanobastões

podem ser verificados nas Tabelas 18 e 19. Com isso, 25 configurações de nanobastões de ouro foram obtidos e serão modelados no software de elementos finitos *Comsol Multiphysics*.

Tabela 18 – Parâmetros do nanobastão - gerações 20, 40 e 60.

Geração	Configuração	W [nm]	RA	E0 [V/m]
20	1	4.88	14.91	1.105
	2	5.71	11.42	1.659
	3	6.044	12.12	3.08
	4	8.827	13.08	1.25
	5	9.38	12.75	1.87
40	1	14.95	13.53	1.65
	2	16.69	12.66	1.96
	3	17.27	11.84	1.008
	4	18.46	13.806	1.36
	5	19.57	13.53	1.65
60	1	20.89	14.82	1.026
	2	21.11	13.76	1.026
	3	21.6	12.46	1.026
	4	20.89	12.46	1.026
	5	21.6	13.08	1.026

Fonte: O autor(2023).

Tabela 19 – Parâmetros do nanobastão - gerações 80 e 85.

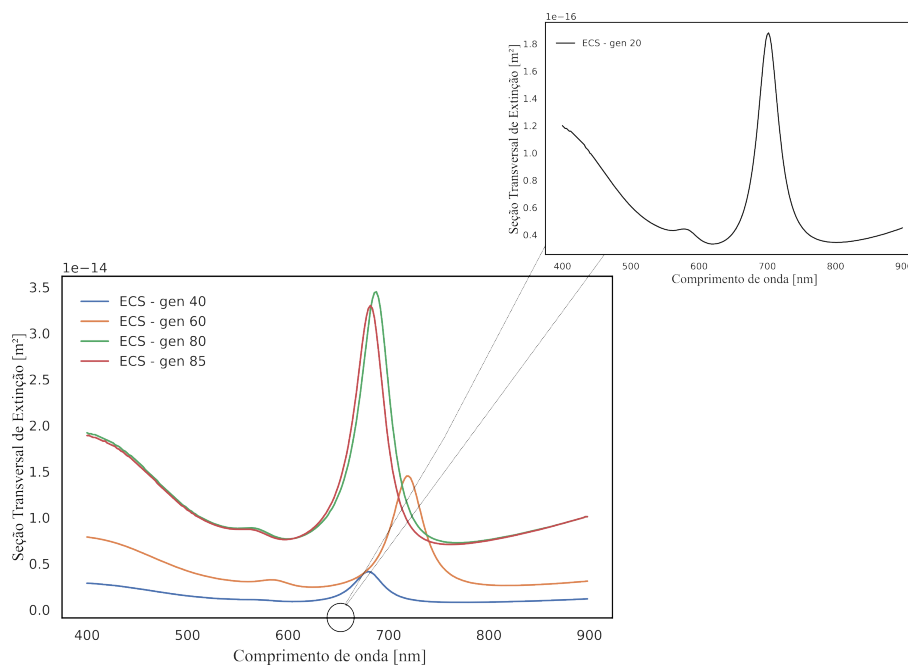
Geração	Configuração	W [nm]	RA	E0 [V/m]
80	1	31.208	13.53	1.026
	2	31.208	13.08	1.008
	3	32.62	11.84	1.008
	4	34.78	12.75	1.026
	5	34.78	13.08	1.008
85	1	31.208	12.46	1.02
	2	31.08	14.91	1.008
	3	32.62	11.84	1.007
	4	34.78	13.8	1.008
	5	39.34	13.08	1.008

Fonte: O autor(2023).

5.3 RESULTADOS COMSOL MULTIPHYSICS

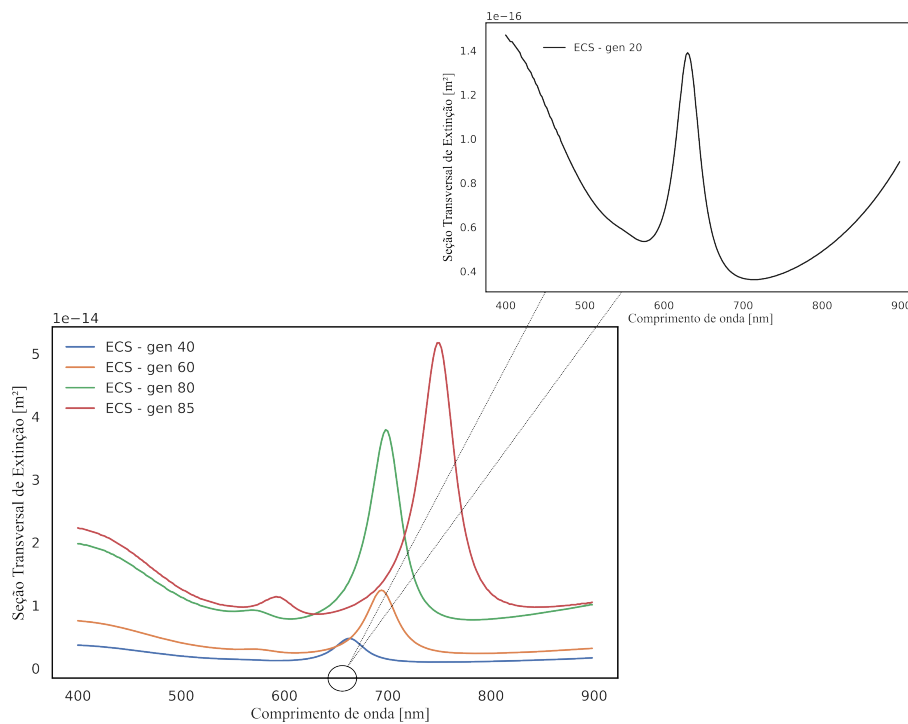
Os parâmetros das 25 configurações de nanobastões de ouro foram simulados no *Comsol Multiphysics*, e as curvas da seção transversal de extinção para cada configuração foram obtidas considerando somente o modo não alinhado, pois justamente na situação em que os nanobastões se encontram com orientações aleatórias em relação a luz incidente, a superfície plasmônica longitudinal, ou seja, a dimensão referente ao comprimento do nanobastão, apresenta um pico máximo de extinção, medida esta associada a eficiência de absorção de luz, conforme podem ser observados nas Figuras 21 a 25 adiante, em que mostram a evolução da seção transversal de extinção até a geração de convergência considerando as configurações 1 a 5 conforme Tabelas 18 e 19. A Figura 26 foi retirada dos resultados do artigo base para efeito de comparação dos resultados obtidos.

Figura 21 – Configuração 1 - gerações 20 a 85.



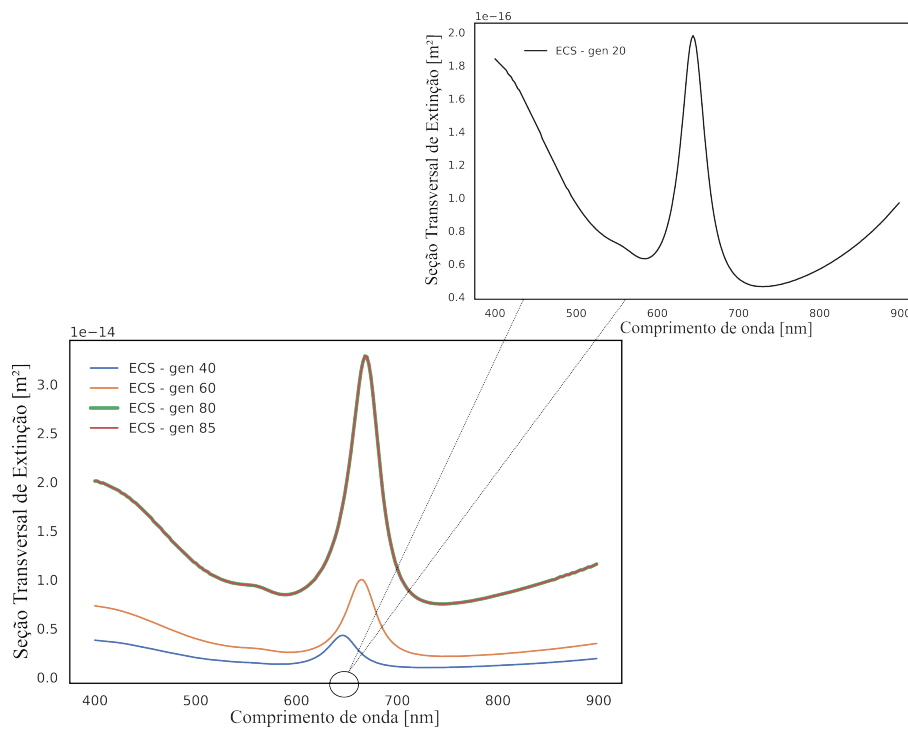
Fonte: O autor (2023).

Figura 22 – Configuração 2 - gerações 20 a 85.



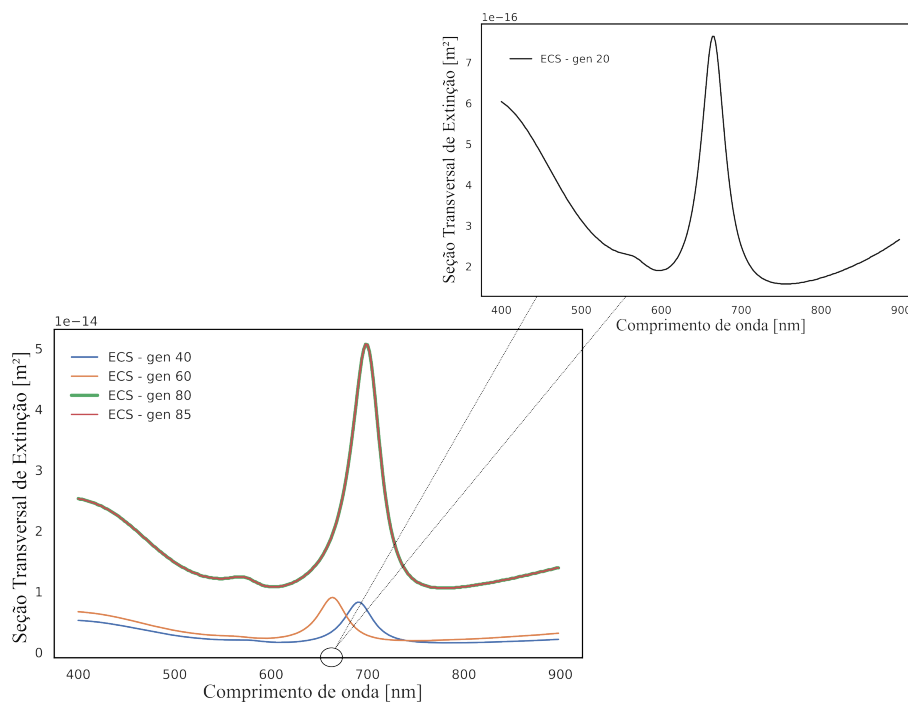
Fonte: O autor (2023).

Figura 23 – Configuração 3 - gerações 20 a 85.



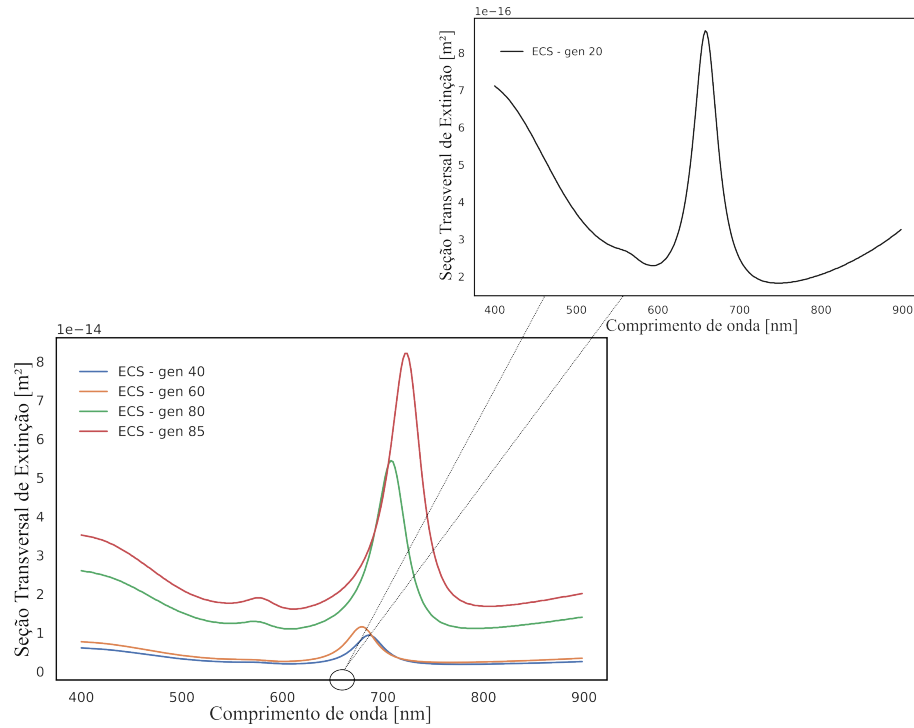
Fonte: O autor (2023).

Figura 24 – Configuração 4 - gerações 20 a 85.



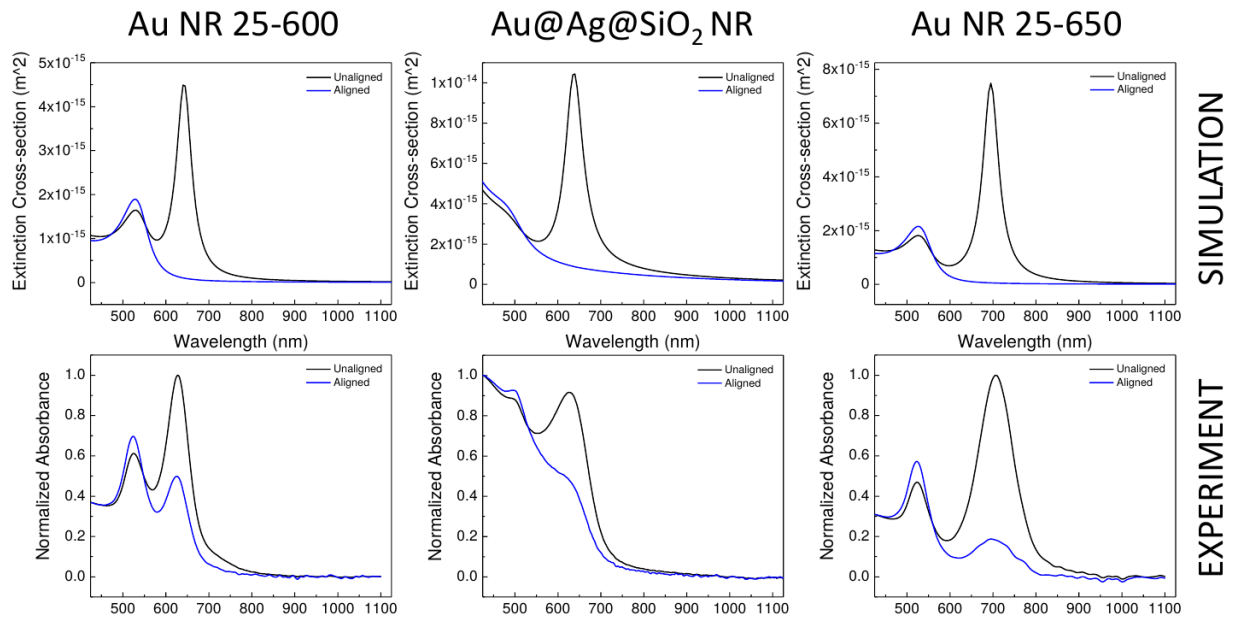
Fonte: O autor (2023).

Figura 25 – Configuração 5 - gerações 20 a 85.



Fonte: O autor (2023).

Figura 26 – Configurações de nanobastões do artigo base.



Fonte: Adaptado de (GREYBUSH et al., 2019).

As simulações foram realizadas sem camadas de revestimento nos nanobastões de ouro, portanto, somente as configurações *Au NR 25-600* e *Au NR 25-650* da Figura 26 podem ser comparadas, e somente o modo não alinhado. O processo de comparação dos resultados se

restringe em analisar a ordem de grandeza das curvas de extinção, já que o fenômeno físico de alinhamento dos nanobastões de ouro, assim como a obtenção das configurações via simulação em software de elementos finitos são trabalhos já consolidados na literatura. O modelo base de simulação no *Comsol Multiphysics* o qual todas as configurações foram obtidas foi fornecido pelo autor correspondente do artigo base (GREYBUSH et al., 2019), desse modo, não houve uma preocupação com hiperparâmetros de modelagem, com a análise restrita na aplicação do algoritmo genético multiobjetivo *NSGA-II*. A ordem de grandeza das seções transversais da Figura 26 do artigo base se encontram em 10^{-15} m^2 . Os resultados obtidos das Figuras 21 a 25 mostram uma evolução nos valores para as curvas de extinção dos nanobastões de ouro. Inicialmente, nas gerações 20 e 40 a ordem de grandeza dos valores para as curvas de extinção variam entre 10^{-16} m^2 e 10^{-15} m^2 , resultados alinhados com o processo evolutivo do algoritmo genético, em que já é esperado parâmetros dos indivíduos das primeiras populações piorados, pois o algoritmo se encontra no processo de encontrar o conjunto de soluções melhoradas ao longo das gerações. A partir da geração 60, a ordem de grandeza dos valores varia entre 10^{-15} m^2 e 10^{-14} m^2 , encontrando configurações com valores maiores para as curvas de extinção. As gerações 80 e 85 somente encontram valores para curvas de extinção com ordem de grandeza em 10^{-14} m^2 , e muito semelhantes entre si, o que comprova novamente as evidências estatísticas em relação ao desempenho de suas soluções.

6 CONCLUSÃO

A revisão sistemática foi capaz de fornecer uma visão ampla de aplicações de *IA*, como algoritmos de Aprendizado Profundo e Algoritmos Genéticos no aprimoramento e desenvolvimento da Ciência de Materiais, especificamente materiais Nanofotônicos. Os resultados estatísticos, e quantitativos encontrados deram justificativa e motivação para a aplicação do algoritmo genético multiobjetivo *NSGA-II* no artigo *Dynamic Plasmonic Pixels* de Greybush et al (2019)(GREYBUSH et al., 2019), com o propósito principal de investigação, visto que a combinação destas duas áreas se encontram em fase inicial no campo científico, como foi mostrado no número de publicações por ano, em que há um crescimento anual de 18.87%.

O algoritmo *NSGA-II* foi o escolhido, pois conforme investigação realizada no capítulo 2, este possui uma complexidade algorítmica $O(MN^2)$, também possui um operador de seleção que realiza um processo natural de elitismo, assim como promovendo a diversidade através de uma métrica chamada distância de aglomeração, a qual não faz uso de parâmetro de compartilhamento, oferecendo vantagens competitivas no espalhamento de soluções frente aos seus antecessores.

O algoritmo operou em regime restrito de intervalos de valores dos parâmetros, e principalmente das funções objetivo consideradas, pois foi necessário realizar aproximações para que fosse possível obter equações válidas para análise, assim como a inviabilidade de se construir uma Framework que integre os resultados do *NSGA-II* com o *Comsol Multiphysics*. Embora um processo de otimização direto não tenha sido realizado, a aplicação de um algoritmo genético para obtenção de nanobastões de ouro se mostrou efetivo, pois, devido ao processo evolutivo característico do algoritmo multiobjetivo, um espaço de soluções de parâmetros com valores de curvas de extinção melhorados para o modo não alinhado foi encontrado, os quais foram validados através de testes estatísticos, em que se constatou que as diferenças entre as gerações dos indivíduos do *NSGA-II* são estatisticamente significativas, e que há evidências de que os conjuntos de parâmetros (os quais compõem cada indivíduo numa população do algoritmo) comparados têm desempenhos diferentes. Apesar das restrições, foi possível obter configurações de nanobastões de ouro em grande escala, diminuindo os custos para produzir, visto que somente configurações dentro do espaço de soluções de convergência do algoritmo deverá ser escolhido, ou seja, somente indivíduos da população 85.

Caso uma enumeração completa de combinações de W, R_A, E fosse realizada, e sabendo

que as casas decimais importam, haveria um total de aproximadamente 5 trilhões de soluções, reforçando a importância e eficiência em se utilizar um *AGM*.

6.1 TRABALHOS FUTUROS

A partir dos resultados obtidos com o algoritmo genético *NSGA-II* e simulados no *COMSOL Multiphysics*, eis algumas recomendações de trabalhos futuros com objetivo de dá continuidade e aprofundamento aos resultados encontrados:

- Investigar na literatura outros algoritmos genéticos multiobjetivos mais recentes, promissores e comparar aos resultados encontrados com o algoritmo *NSGA-II*;
- Investigar na literatura funções objetivos relacionadas com nanopartículas de ouro que permitam uma discretização mais robusta e eficiente;
- Propor modelos de nanobastões mais otimizados através de uma modelagem com foco nos hiperparâmetros no *COMSOL Multiphysics*;
- Investigar na literatura artigos com razões de aspecto mais abrangentes para promover mais diversidade ao algoritmo genético definido.

REFERÊNCIAS

- ARAÚJO, L. D. F. *Estudo da dinâmica de Alinhamento de Nanobastões de Ouro sob Efeito de um Campo Elétrico Externo*. 11–16 p. Tese (Doutorado) — Puc-Rio, 2018.
- ARIA, M.; CUCCURULLO, C. bibliometrix: An r-tool for comprehensive science mapping analysis. *Journal of informetrics*, Elsevier, v. 11, n. 4, p. 959–975, 2017.
- ARROYO, J. E. C. et al. Heurísticas e metaheurísticas para otimização combinatoria multiobjetivo. *Campinas: UNICAMP*, 2002.
- BENTLEY, P. J.; WAKEFIELD, J. P. Finding acceptable solutions in the pareto-optimal range using multiobjective genetic algorithms. In: *Soft computing in engineering design and manufacturing*. [S.l.]: Springer, 1998. p. 231–240.
- BOHREN, C. F.; HUFFMAN, D. R. *Absorption and scattering of light by small particles*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.
- BRINER, R. B.; DENYER, D. et al. Systematic review and evidence synthesis as a practice and scholarship tool. *Handbook of evidence-based management: Companies, classrooms and research*, p. 112–129, 2012.
- CHEN, C. L.; MAHJOUBFAR, A.; TAI, L.-C.; BLABY, I. K.; HUANG, A.; NIAZI, K. R.; JALALI, B. Deep learning in label-free cell classification. *Scientific reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 6, n. 1, p. 21471, 2016.
- CHON, J. W.; INIEWSKI, K. *Nanoplasmonics: advanced device applications*. [S.l.]: CRC Press, 2018.
- COELLO, C. A. C.; LAMONT, G. B.; VELDHUIZEN, D. A. V. et al. *Evolutionary algorithms for solving multi-objective problems*. [S.l.]: Springer, 2007. v. 5.
- CORNE, D. W.; KNOWLES, J. D.; OATES, M. J. The pareto envelope-based selection algorithm for multiobjective optimization. In: SPRINGER. *International conference on parallel problem solving from nature*. [S.l.], 2000. p. 839–848.
- DEB, K.; AGRAWAL, S.; PRATAP, A.; MEYARIVAN, T. A fast elitist non-dominated sorting genetic algorithm for multi-objective optimization: Nsga-ii. In: SPRINGER. *International conference on parallel problem solving from nature*. [S.l.], 2000. p. 849–858.
- DEB, K.; PRATAP, A.; AGARWAL, S.; MEYARIVAN, T. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: Nsga-ii. *IEEE transactions on evolutionary computation*, IEEE, v. 6, n. 2, p. 182–197, 2002.
- DODGE, Y. *The concise encyclopedia of statistics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2008.
- DRUDE, P. Zur elektronentheorie der metalle. *Annalen der Physik*, WILEY-VCH Verlag Leipzig, v. 312, n. 3, p. 687–692, 1902.
- EIBEN, A. E.; SMITH, J. E. et al. *Introduction to evolutionary computing*. [S.l.]: Springer, 2003. v. 53.

- ETCHEVERRY, S.; ARAUJO, L. F.; COSTA, G. K. da; PEREIRA, J. M.; CAMARA, A. R.; NACIRI, J.; RATNA, B. R.; HERNÁNDEZ-ROMANO, I.; MATOS, C. J. de; CARVALHO, I. C. et al. Microsecond switching of plasmonic nanorods in an all-fiber optofluidic component. *Optica*, Optica Publishing Group, v. 4, n. 8, p. 864–870, 2017.
- FELDMANN, J.; YOUNGBLOOD, N.; WRIGHT, C. D.; BHASKARAN, H.; PERNICE, W. H. All-optical spiking neurosynaptic networks with self-learning capabilities. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 569, n. 7755, p. 208–214, 2019.
- FONSECA, C. M.; FLEMING, P. J. Multiobjective genetic algorithms. In: IET. *IEE colloquium on genetic algorithms for control systems engineering*. [S.l.], 1993. p. 6–1.
- FONSECA, C. M.; FLEMING, P. J. An overview of evolutionary algorithms in multiobjective optimization. *Evolutionary computation*, MIT Press, v. 3, n. 1, p. 1–16, 1995.
- FONTANA, J.; COSTA, G. K. da; PEREIRA, J. M.; NACIRI, J.; RATNA, B. R.; PALFFY-MUHORAY, P.; CARVALHO, I. C. Electric field induced orientational order of gold nanorods in dilute organic suspensions. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing LLC, v. 108, n. 8, p. 081904, 2016.
- GANDIBLEUX, X.; MEZDAOUI, N.; FRÉVILLE, A. A tabu search procedure to solve multiobjective combinatorial optimization problems. In: *Advances in multiple objective and goal programming*. [S.l.]: Springer, 1997. p. 291–300.
- GOLBERG, D. E. Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning. *Addison wesley*, v. 1989, n. 102, p. 36, 1989.
- GREYBUSH, N. J.; CHARIPAR, K.; GELDMEIER, J. A.; BAUMAN, S. J.; JOHNS, P.; NACIRI, J.; CHARIPAR, N.; PARK, K.; VAIA, R. A.; FONTANA, J. Dynamic plasmonic pixels. *ACS nano*, ACS Publications, v. 13, n. 4, p. 3875–3883, 2019.
- HAJELA, P.; LIN, C.-Y. Genetic search strategies in multicriterion optimal design. *Structural optimization*, Springer, v. 4, n. 2, p. 99–107, 1992.
- HORN, J. *The nature of niching: Genetic algorithms and the evolution of optimal, cooperative populations*. [S.l.]: University of Illinois at Urbana-Champaign, 1997.
- HORN, J.; NAFPLIOTIS, N.; GOLDBERG, D. E. A niched pareto genetic algorithm for multiobjective optimization. In: IEEE. *Proceedings of the first IEEE conference on evolutionary computation. IEEE world congress on computational intelligence*. [S.l.], 1994. p. 82–87.
- HORN, J. rey; NAFPLIOTIS, N.; GOLDBERG, D. E. Multiobjective optimization using the niched pareto genetic algorithm. *IlliGAL report*, v. 93005, p. 61801–2296, 1993.
- HU, M.; CHEN, J.; LI, Z.-Y.; AU, L.; HARTLAND, G. V.; LI, X.; MARQUEZ, M.; XIA, Y. Gold nanostructures: engineering their plasmonic properties for biomedical applications. *Chemical Society Reviews*, Royal Society of Chemistry, v. 35, n. 11, p. 1084–1094, 2006.
- ISHIBUCHI, H.; MURATA, T. Multi-objective genetic local search algorithm. In: IEEE. *Proceedings of IEEE international conference on evolutionary computation*. [S.l.], 1996. p. 119–124.

- JAIN, P. K.; LEE, K. S.; EL-SAYED, I. H.; EL-SAYED, M. A. Calculated absorption and scattering properties of gold nanoparticles of different size, shape, and composition: applications in biological imaging and biomedicine. *The journal of physical chemistry B*, ACS Publications, v. 110, n. 14, p. 7238–7248, 2006.
- JASZKIEWICZ, A. Genetic local search for multi-objective combinatorial optimization. *European journal of operational research*, Elsevier, v. 137, n. 1, p. 50–71, 2002.
- JOHNSON, P. B.; CHRISTY, R.-W. Optical constants of the noble metals. *Physical review B*, APS, v. 6, n. 12, p. 4370, 1972.
- JULURI, B. K.; LU, M.; ZHENG, Y. B.; HUANG, T. J.; JENSEN, L. Coupling between molecular and plasmonic resonances: effect of molecular absorbance. *The Journal of Physical Chemistry C*, ACS Publications, v. 113, n. 43, p. 18499–18503, 2009.
- KAUSHAL, S.; NANDA, S. S.; YI, D. K.; JU, H. Effects of aspect ratio heterogeneity of an assembly of gold nanorod on localized surface plasmon resonance. *The journal of physical chemistry letters*, ACS Publications, v. 11, n. 15, p. 5972–5979, 2020.
- KNOWLES, J.; CORNE, D. The pareto archived evolution strategy: A new baseline algorithm for pareto multiobjective optimisation. In: IEEE. *Proceedings of the 1999 congress on evolutionary computation-CEC99 (Cat. No. 99TH8406)*. [S.l.], 1999. v. 1, p. 98–105.
- KNOWLES, J. D. *Local-search and hybrid evolutionary algorithms for Pareto optimization*. Tese (Doutorado) — University of Reading Reading, 2002.
- KNOWLES, J. D.; CORNE, D. W. M-paes: A memetic algorithm for multiobjective optimization. In: IEEE. *Proceedings of the 2000 Congress on Evolutionary Computation. CEC00 (Cat. No. 00TH8512)*. [S.l.], 2000. v. 1, p. 325–332.
- KONAK, A.; COIT, D. W.; SMITH, A. E. Multi-objective optimization using genetic algorithms: A tutorial. *Reliability engineering & system safety*, Elsevier, v. 91, n. 9, p. 992–1007, 2006.
- KOSHELEV, K.; FAVRAUD, G.; BOGDANOV, A.; KIVSHAR, Y.; FRATALOCCHI, A. Nonradiating photonics with resonant dielectric nanostructures. *Nanophotonics*, De Gruyter, v. 8, n. 5, p. 725–745, 2019.
- KURSAWE, F. A variant of evolution strategies for vector optimization. In: SPRINGER. *International conference on parallel problem solving from nature*. [S.l.], 1991. p. 193–197.
- LINK, S.; MOHAMED, M. B.; EL-SAYED, M. Simulation of the optical absorption spectra of gold nanorods as a function of their aspect ratio and the effect of the medium dielectric constant. *The Journal of Physical Chemistry B*, ACS Publications, v. 103, n. 16, p. 3073–3077, 1999.
- LIU, Z.; ZHU, D.; RODRIGUES, S. P.; LEE, K.-T.; CAI, W. Generative model for the inverse design of metasurfaces. *Nano letters*, ACS Publications, v. 18, n. 10, p. 6570–6576, 2018.
- LU, H.; YEN, G. G. Rank-density-based multiobjective genetic algorithm and benchmark test function study. *IEEE transactions on evolutionary computation*, IEEE, v. 7, n. 4, p. 325–343, 2003.

MA, W.; CHENG, F.; LIU, Y. Deep-learning-enabled on-demand design of chiral metamaterials. *ACS nano*, ACS Publications, v. 12, n. 6, p. 6326–6334, 2018.

MALKIEL, I.; MREJEN, M.; NAGLER, A.; ARIELI, U.; WOLF, L.; SUCHOWSKI, H. Plasmonic nanostructure design and characterization via deep learning. *Light: Science & Applications*, Nature Publishing Group, v. 7, n. 1, p. 1–8, 2018.

MANN, H. B.; WHITNEY, D. R. On a test of whether one of two random variables is stochastically larger than the other. *The annals of mathematical statistics*, JSTOR, p. 50–60, 1947.

MCKIGHT, P. E.; NAJAB, J. Kruskal-wallis test. *The corsini encyclopedia of psychology*, Wiley Online Library, p. 1–1, 2010.

MCKNIGHT, P. E.; NAJAB, J. Mann-whitney u test. *The Corsini encyclopedia of psychology*, Wiley Online Library, p. 1–1, 2010.

MENDELSBERG, R. J. Localized surface plasmon resonance of degenerate semiconducting nanocrystal ensembles with various shape distributions. In: SPIE. *Nanophotonic Materials IX*. [S.l.], 2012. v. 8456, p. 7–17.

MURATA, T.; ISHIBUCHI, H. et al. Moga: multi-objective genetic algorithms. In: IEEE PISCATAWAY, NJ, USA. *IEEE international conference on evolutionary computation*. [S.l.], 1995. v. 1, p. 289–294.

OSTERTAGOVA, E.; OSTERTAG, O.; KOVÁČ, J. Methodology and application of the kruskal-wallis test. *Applied mechanics and materials*, Trans Tech Publ, v. 611, p. 115–120, 2014.

PAGE, M. J.; MOHER, D.; BOSSUYT, P. M.; BOUTRON, I.; HOFFMANN, T. C.; MULROW, C. D.; SHAMSEER, L.; TETZLAFF, J. M.; AKL, E. A.; BRENNAN, S. E. et al. Prisma 2020 explanation and elaboration: updated guidance and exemplars for reporting systematic reviews. *bmj*, British Medical Journal Publishing Group, v. 372, 2021.

PARK, J.; KIM, S.; NAM, D. W.; CHUNG, H.; PARK, C. Y.; JANG, M. S. Free-form optimization of nanophotonic devices: from classical methods to deep learning. *Nanophotonics*, De Gruyter, v. 11, n. 9, p. 1809–1845, 2022.

PÉREZ-JUSTE, J.; PASTORIZA-SANTOS, I.; LIZ-MARZÁN, L. M.; MULVANEY, P. Gold nanorods: synthesis, characterization and applications. *Coordination chemistry reviews*, Elsevier, v. 249, n. 17-18, p. 1870–1901, 2005.

PEURIFOY, J.; SHEN, Y.; JING, L.; YANG, Y.; CANO-RENTERIA, F.; DELACY, B. G.; JOANNOPOULOS, J. D.; TEGMARK, M.; SOLJAČIĆ, M. Nanophotonic particle simulation and inverse design using artificial neural networks. *Science advances*, American Association for the Advancement of Science, v. 4, n. 6, p. eaar4206, 2018.

POLYANSKIY, M. *RefractiveIndex Data Base*. 2023. Disponível em: <<http://refractiveindex.info/>>.

ROUSSEAU, D. M. *The Oxford handbook of evidence-based management*. [S.l.]: Oxford University Press, 2012.

- RUDOLPH, G. *Evolutionary search under partially ordered fitness sets*. [S.l.]: Universitätsbibliothek Dortmund, 2001.
- SCHAFFER, J. D. Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms. In: PSYCHOLOGY PRESS. *Proceedings of the first international conference on genetic algorithms and their applications*. [S.l.], 2014. p. 93–100.
- SERAFINI, P. Simulated annealing for multi objective optimization problems. In: *Multiple criteria decision making*. [S.l.]: Springer, 1994. p. 283–292.
- SHASTRI, B. J.; TAIT, A. N.; LIMA, T. Ferreira de; PERNICE, W. H.; BHASKARAN, H.; WRIGHT, C. D.; PRUCNAL, P. R. Photonics for artificial intelligence and neuromorphic computing. *Nature Photonics*, Nature Publishing Group UK London, v. 15, n. 2, p. 102–114, 2021.
- SHEN, Y.; FRIEND, C. S.; JIANG, Y.; JAKUBCZYK, D.; SWIATKIEWICZ, J.; PRASAD, P. N. *Nanophotonics: interactions, materials, and applications*. [S.l.]: ACS Publications, 2000. 7577–7587 p.
- SHEN, Y.; HARRIS, N.; SKIRLO, S.; PRABHU, M.; BAEHR-JONES, T.; HOCHBERG, M.; SUN, X.; ZHAO, S.; LAROCHELLE, H.; ENGLUND, D.; ENGLUND, D.; SOLJACIC, M. Deep learning with coherent nanophotonic circuits. *Nature Photonics*, v. 11, p. 441–446, 2017.
- SRINIVAS, N.; DEB, K. Multiobjective optimization using nondominated sorting in genetic algorithms. *Evolutionary computation*, MIT Press, v. 2, n. 3, p. 221–248, 1994.
- SRINIVAS, N.; DEB, K.; ROY, P.; MEHTA, S. Comparative study of vector evaluated ga and nsga applied to multiobjective optimization. In: *Proceedings of the symposium on genetic algorithms*. [S.l.: s.n.], 1995. p. 83–90.
- SZMIT, R.; BARAK, A. Evolution strategies for a parallel multi-objective genetic algorithm. In: *Proceedings of the 2nd Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation*. [S.l.: s.n.], 2000. p. 227–234.
- TELIKANI, A.; TAHMASSEBI, A.; BANZHAF, W.; GANDOMI, A. H. Evolutionary machine learning: A survey. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, ACM New York, NY, v. 54, n. 8, p. 1–35, 2021.
- ULUNGU, E. L.; TEGHEM, J.; FORTEMPS, P.; TUYTTENS, D. Mosa method: a tool for solving multiobjective combinatorial optimization problems. *Journal of multicriteria decision analysis*, Wiley Periodicals Inc., v. 8, n. 4, p. 221, 1999.
- WIECHA, P. R.; ARBOUET, A.; GIRARD, C.; LECESTRE, A.; LARRIEU, G.; PAILLARD, V. Evolutionary multi-objective optimization of colour pixels based on dielectric nanoantennas. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group UK London, v. 12, n. 2, p. 163–169, 2017.
- WOODWARD, R.; KELLEHER, E. J. Towards 'smart lasers': self-optimisation of an ultrafast pulse source using a genetic algorithm. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 6, n. 1, p. 1–9, 2016.

XU, X.; TAN, M.; CORCORAN, B.; WU, J.; BOES, A.; NGUYEN, T. G.; CHU, S. T.; LITTLE, B. E.; HICKS, D. G.; MORANDOTTI, R. et al. 11 tops photonic convolutional accelerator for optical neural networks. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 589, n. 7840, p. 44–51, 2021.

YEN, G. G.; LU, H. Dynamic multiobjective evolutionary algorithm: adaptive cell-based rank and density estimation. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, IEEE, v. 7, n. 3, p. 253–274, 2003.

YU, Y.-Y.; CHANG, S.-S.; LEE, C.-L.; WANG, C. C. Gold nanorods: electrochemical synthesis and optical properties. *The Journal of Physical Chemistry B*, ACS Publications, v. 101, n. 34, p. 6661–6664, 1997.

ZANDE, B. M. Van der; BÖHMER, M. R.; FOKKINK, L. G.; SCHÖNENBERGER, C. Colloidal dispersions of gold rods: synthesis and optical properties. *Langmuir*, ACS Publications, v. 16, n. 2, p. 451–458, 2000.

ZBIGNIEW, M. Genetic algorithms+ data structures= evolution programs. In: *Computational Statistics*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1996. p. 372–373.

ZHANG, H.; THOMPSON, J.; GU, M.; JIANG, X. D.; CAI, H.; LIU, P. Y.; SHI, Y.; ZHANG, Y.; KARIM, M. F.; LO, G. Q. et al. Efficient on-chip training of optical neural networks using genetic algorithm. *Acs Photonics*, ACS Publications, v. 8, n. 6, p. 1662–1672, 2021.

ZITZLER, E. *Evolutionary algorithms for multiobjective optimization: Methods and applications*. [S.l.]: Shaker Ithaca, 1999. v. 63.

ZITZLER, E.; DEB, K.; THIELE, L. Comparison of multiobjective evolutionary algorithms: Empirical results. *Evolutionary computation*, MIT Press, v. 8, n. 2, p. 173–195, 2000.

ZITZLER, E.; LAUMANN, M.; THIELE, L. Spea2: Improving the strength pareto evolutionary algorithm. *TIK-report*, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETH), Institut für Technische ... , v. 103, 2001.

ZITZLER, E.; THIELE, L. Multiobjective evolutionary algorithms: a comparative case study and the strength pareto approach. *IEEE transactions on Evolutionary Computation*, IEEE, v. 3, n. 4, p. 257–271, 1999.

ZUPIC, I.; ČATER, T. Bibliometric methods in management and organization. *Organizational research methods*, Sage Publications Sage CA: Los Angeles, CA, v. 18, n. 3, p. 429–472, 2015.

APÊNDICE A – MAPEAMENTO CIENTÍFICO

((TITLE-ABS-KEY ("artificial intelligence" OR "machine learning" OR "deep learning" OR "neural network*" OR "genetic algorithm*" OR "evolution algorithm*") AND TITLE-ABS-KEY ("photonic*" OR "nanophotonic*" OR "materials science" OR "plasmonic pixel*" OR "intelligent materials" OR "subwavelength") AND TITLE-ABS-KEY ("optic*" OR "wave optic*")) AND PUBYEAR < 2023 AND (LIMIT-TO (DOCTYPE , "ar")) AND (LIMIT-TO (LANGUAGE , "English")) AND (LIMIT-TO (SUBJAREA , "PHYS") OR LIMIT-TO (SUBJAREA , "ENGI") OR LIMIT-TO (SUBJAREA , "MATE") OR LIMIT-TO (SUBJAREA , "COMP") OR LIMIT-TO (SUBJAREA , "BIOC") OR LIMIT-TO (SUBJAREA , "MULT")) AND (LIMIT-TO (EXACT KEYWORD , "Neural Networks") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Genetic Algorithms") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Deep Learning") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Machine Learning") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Photonic Devices") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Photonics") OR LIMIT-TO (EXACT KEYWORD , "Silicon Photonics") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Optics") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Learning Systems") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Inverse Problems") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Artificial Intelligence") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Neural-networks") OR LIMIT-TO (EXACT KEYWORD , "Optics And Photonics") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Optimization") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Nonlinear Optics") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Deep Neural Networks") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Photonic Crystals") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Optical Neural Networks") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Optical Waveguides") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Inverse Designs") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Nanophotonics") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Neurons") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Optical Properties") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Algorithm") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Photons") OR LIMIT-TO (EXACT KEYWORD , "Genetic Algorithm") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Photonic Integrated Circuits") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Learning Algorithms") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Artificial Neural Network") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Integrated Photonics") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Convolutional Neural Networks") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Inverse Design") OR LIMIT-TO (EXACT KEYWORD , "Optical-") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Light") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Convolutional Neural Network") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Photonic Integration Technology") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Neural Networks, Computer") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Neural Network") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Plasmonics") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Machine-learning") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Spiking Neural Networks") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Recurrent Neural Networks") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Image Classification") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Nanostructures") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Network Layers") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Photonics Integrated Circuits") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Light Absorption") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Optical Design") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Optical Response") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Optical Systems") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Artificial Neural Networks") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD

, "Optical Devices") OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Optimization Algorithms"
) OR LIMIT-TO (EXACTKEYWORD , "Photonic Crystal Waveguide")))

APÊNDICE B – IMPLEMENTAÇÃO NSGA-II

```

1
2
3
4 1.phenotype - calcula os fenotipos dos cromossomos.
5 Exemplo: fenotipo de [1,0,1,0,1] = 21.
6
7 2. population - gera uma populacao com os valores decimais.
8
9 3. real_population - converte para numeros reais considerando os
10 intervalos de interesse de cada parametro.
11
12 4. crossover - realiza crossover a partir do numero de
13 cromossomos desejados, realizando um fatiamento nos genes
14 de forma aleatoria.
15
16 5. mutation - realiza processo semelhante ao crossover,
17 porem em relacao a populacao da operacao anterior.
18
19 6. evaluation - a partir das equacoes que se deseja maximizar
20 ou minimizar, uma avaliacao e feita calculando as funcoes
21 objetivos com a populacao final obtida.
22
23 7. crowding_calculation - calcula as distancias de aglomeracao,
24 quando necessario, considerando as propriedades estabelecidas
25 no algoritmo NSGA-II.
26
27 8. remove_using_crowding - remove solucoes que estejam com
28 distancias de aglomeracao muito proximas, levando em
29 consideracao o numero de solucoes faltantes para completar
30 a populacao.
31
32 9. pareto_front_finding - encontra as solucoes nao dominadas que
33 formam as fronteiras de pareto, gerando um ordenamento das
34 melhores funcoes objetivo ate completar o tamanho da populacao.
35
36 10. selection - Seleciona a populacao final considerando os
37 indices recuperados das fronteiras de pareto, e portanto,
38 as solucoes nao dominadas otimas, e a melhor populacao depois
39 de todas as geracoes definidas, logo, tem-se os melhores
40 parametros gerados.
41
42 def phenotype(chromosome):
43     decimal_bin = 0
44     for i, g in enumerate(chromosome):
45         decimal_bin += g * 2 ** (len(chromosome)-1-i)
46
47     return decimal_bin
48
49 def population(pop):
50     pop_decimal = []
51     for _, chromosome in enumerate(pop):
52         pop_decimal.append([phenotype(chromosome[0:12]),
53                             phenotype(chromosome[12:23]),
54                             phenotype(chromosome[23:])])
55     pop_decimal_np = np.asarray(pop_decimal)
56     return pop_decimal_np
57
58 def real_population(pop_decimal, w_h, w_l, ra_h
59 , ra_l, e0_h, e0_l):
60     real_population = []
61
62     for _, chromosome in enumerate(pop_decimal):
63         w = w_l + chromosome[0]*((w_h-w_l) / (2 ** 12 - 1))
64         ra = ra_l + chromosome[1]*((ra_h-ra_l) / (2 ** 11 - 1))
65         e0 = e0_l + chromosome[2]*((e0_h-e0_l)/(2 ** 10 -1))
66         real_population.append([w, ra, e0])
67     real_population_np = np.asarray(real_population)
68     return real_population_np
69
70 def crossover(pop, crossover_rate):
71     offspring = np.zeros((crossover_rate, pop.shape[1]))
72     for i in range(int(crossover_rate/2)):
73         r1 = np.random.randint(0, pop.shape[0])

```

```

74         r2 = np.random.randint(0, pop.shape[0])
75         while r1 == r2:
76             r1 = np.random.randint(0, pop.shape[0])
77             r2 = np.random.randint(0, pop.shape[0])
78         cutting_point = np.random.randint(1, pop.shape[1])
79         offspring[2*i, 0:cutting_point] = pop[r1,
80         0:cutting_point]
81         offspring[2*i, cutting_point:] = pop[r2,
82         cutting_point:]
83         offspring[2*i+1, 0:cutting_point] = pop[r2,
84         0:cutting_point]
85         offspring[2*i+1, cutting_point:] = pop[r1,
86         cutting_point:]
87
88     return offspring
89
90 def mutation(offspring, mutation_rate):
91     offspring_mutated = np.zeros((mutation_rate,
92     offspring.shape[1]))
93     for i in range(int(mutation_rate/2)):
94         r1 = np.random.randint(0, offspring.shape[0])
95         r2 = np.random.randint(0, offspring.shape[0])
96         while r1 == r2:
97             r1 = np.random.randint(0, offspring.shape[0])
98             r2 = np.random.randint(0, offspring.shape[0])
99
100         cutting_point = np.random.randint(0,
101         offspring.shape[1])
102         offspring_mutated[2*i] = offspring[r1]
103         offspring_mutated[2*i, cutting_point] = offspring[r2,
104         cutting_point]
105         offspring_mutated[2*i+1] = offspring[r2]
106         offspring_mutated[2*i+1, cutting_point] = offspring[r1,
107         cutting_point]
108     return offspring_mutated
109
110
111
112 def evaluation(final_pop, z0 = 376.73,
113 e_agua = 7.12e-10, K_agua = 78.3,
114 n_agua = 1.33, e_Aui = 1.7, e_Au = -32.719,
115 K_au = 15, S = 1,
116 f = 0.2, pi = 3.14, lb = 950e-9):
117
118     absorbance_obj = 0
119     torque_obj = 0
120     field_obj = 0
121     fitness_values = np.zeros((final_pop.shape[0], 2))
122
123     for i,ch in enumerate(final_pop):
124         if ch[1] < 1:
125             continue
126         L = ch[0]*ch[1]
127         e = (np.sqrt(ch[1]**2-1))/(ch[1])
128         Lt = ((1-e**2)/(e**2))*((1/2*e)*np.log((1+e)/(1-e)) - 1)
129         Ll = (1-Lt)/2 #fator transversal
130         k = 2*pi/lb #numero de onda
131         mi_T = (k/n_agua)*e_Aui*
132         (K_agua/(K_agua + Lt*(K_au-K_agua)))**2
133         mi_L = (k/n_agua)*e_Aui*
134         (K_agua/(K_agua + Ll*(K_au-K_agua)))**2
135         mi = (1/3)*((mi_L + 2*mi_T) - (mi_L - mi_T)*S)
136         V = pi * (ch[0]/2) ** 2 *
137         (L-ch[0]) + (4/3)*pi*(ch[0]/2) ** 3
138         alpha_L = (V*(K_au - K_agua))/(K_agua + Ll*
139         (K_au-K_agua))
140         alpha_T = (V*(K_au - K_agua))/(K_agua + Lt*
141         (K_au-K_agua))
142         delta_alpha = np.abs(alpha_L - alpha_T)
143
144         if ch[0] == 0.0:
145             continue
146         absorbance_obj += (ch[0]*ch[1]*f*mi)/(np.log(10))

```

```

147
148     field_obj += ((ch[2] ** 2)/(2*z0))
149
150     A = absorbance_obj / field_obj
151
152     fitness_values[i, 0] = A
153
154     fitness_values[i, 1] = field_obj
155
156     absorbance_obj = 0
157     field_obj = 0
158
159
160     return fitness_values
161
162
163 def crowding_calculation(fitness_values):
164     pop_size = len(fitness_values[:, 0])
165     fitness_value_number = len(fitness_values[0, :])
166     matrix_for_crowding = np.zeros((pop_size,
167
168     fitness_value_number))
169     normalized_fitness_values =
170     (fitness_values - fitness_values.min(0))/
171     fitness_values.ptp(0)
172
173     for i in range(fitness_value_number):
174         crowding_results = np.zeros(pop_size)
175         crowding_results[0] = 1
176         crowding_results[pop_size - 1] = 1
177         sorted_normalized_fitness_values =
178         np.sort(normalized_fitness_values[:,i])
179         sorted_normalized_values_index =
180         np.argsort(normalized_fitness_values[:,i])
181
182         crowding_results[1:pop_size - 1] =
183         (sorted_normalized_fitness_values[2:pop_size] -
184         sorted_normalized_fitness_values[0:pop_size - 2])
185         re_sorting = np.argsort(sorted_normalized_values_index)
186         matrix_for_crowding[:, i] =
187         crowding_results[re_sorting]
188
189     crowding_distance = np.sum(matrix_for_crowding, axis=1)
190
191     return crowding_distance
192
193
194 def remove_using_crowding(fitness_values,
195 number_solutions_needed):
196     pop_index = np.arange(fitness_values.shape[0])
197     crowding_distance = crowding_calculation(fitness_values)
198     selected_pop_index = np.zeros(number_solutions_needed)
199     selected_fitness_values = np.zeros((number_solutions_needed,
200     len(fitness_values[0, :])))
201     for i in range(number_solutions_needed):
202         pop_size = pop_index.shape[0]
203         solution_1 = rn.randint(0, pop_size - 1)
204         solution_2 = rn.randint(0, pop_size - 1)
205         if crowding_distance[solution_1] >=
206         crowding_distance[solution_2]:
207
208             selected_pop_index[i] = pop_index[solution_1]
209             selected_fitness_values[i, :] =
210             fitness_values[solution_1,:]
211             pop_index = np.delete(pop_index, (solution_1),
212             axis=0)
213             fitness_values = np.delete(fitness_values,
214             (solution_1), axis=0)
215             crowding_distance = np.delete(crowding_distance,
216             (solution_1), axis=0)
217         else:
218
219             selected_pop_index[i] = pop_index[solution_2]

```

```

220         selected_fitness_values[i, :] =
221         fitness_values[solution_2,:]
222         pop_index = np.delete(pop_index, (solution_2),
223         axis=0)
224         fitness_values = np.delete(fitness_values,
225         (solution_2), axis=0)
226         crowding_distance = np.delete(crowding_distance,
227         (solution_2), axis=0)
228
229     selected_pop_index = np.asarray(selected_pop_index,
230     dtype=int)
231
232     return selected_pop_index
233
234
235 def pareto_front_finding(fitness_values, pop_index):
236     pop_size = fitness_values.shape[0]
237     pareto_front = np.ones(pop_size, dtype=bool)
238     for i in range(pop_size):
239         for j in range(pop_size-1, -1, -1):
240             if fitness_values[j][0] >= fitness_values[i][0]
241             and fitness_values[j][1] > fitness_values[i][1]:
242                 pareto_front[i] = 0
243                 break
244
245     return pop_index[pareto_front]
246
247
248 def selection(pop, fitness_values, pop_size):
249
250     pop_index_0 = np.arange(pop.shape[0])
251     pop_index = np.arange(pop.shape[0])
252     pareto_front_index = []
253
254     while len(pareto_front_index) < pop_size:
255         new_pareto_front =
256         pareto_front_finding(fitness_values[pop_index_0, :],
257         pop_index_0)
258         total_pareto_size = len(pareto_front_index) +
259         len(new_pareto_front)
260
261         if total_pareto_size > pop_size:
262             number_solutions_needed = pop_size -
263             len(pareto_front_index)
264             selected_solutions =
265             remove_using_crowding(fitness_values
266             [new_pareto_front],
267             number_solutions_needed)
268             new_pareto_front = new_pareto_front
269             [selected_solutions]
270
271         pareto_front_index = np.hstack((pareto_front_index,
272         new_pareto_front))
273         remaining_index = set(pop_index) - set(pareto_front_index)
274         pop_index_0 = np.array(list(remaining_index))
275
276     selected_pop = pop[pareto_front_index.astype(int)]
277
278     return selected_pop

```