

ALGORITMO PARALELO DE VAGA-LUMES COM PREDACÃO NA IDENTIFICAÇÃO DE CONDIÇÃO INICIAL NA EQUAÇÃO DO CALOR

Eduardo Fávero Pacheco da Luz

Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada (LAC)

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)

eduardo.luz@lac.inpe.br

Haroldo Fraga de Campos Velho

Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada (LAC)

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)

haroldo@lac.inpe.br

José Carlos Becceneri

Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada (LAC)

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)

becce@lac.inpe.br

Resumo

Este trabalho apresenta a aplicação de uma nova metaheurística para ambientes de computação paralela baseada no comportamento natural de vaga-lumes adicionado de um mecanismo de predação, associado ao auxílio de escape de ótimos locais. Temos sua aplicação na solução de um problema inverso de identificação de condição inicial na equação do calor. Os resultados obtidos, para casos de até 51 dimensões, demonstram a eficiência na recuperação do perfil assim como sua robustez, via obtenção de um baixo desvio padrão em diversos experimentos independentes.

Palavras-Chaves: Metaheurística; Otimização; Vaga-lumes; Problemas inversos; Equação do calor.

Abstract

This work presents the application of a new meta-heuristic for parallel environments based on the natural behaviour of fireflies added by a predation mechanism, associated to the escape of local optimum areas. We have its application on the solution of an inverse problem for identification of the initial condition in the heat equation. The obtained results, for cases up to 51 dimensions, demonstrates the efficiency in the recovery of the initial profile just as its strength, showed in a low standard deviation obtained in several independent experiments.

Keywords: Meta-heuristic; Optimization; Fireflies; Inverse problems; Heat equation.

1. INTRODUÇÃO

O rápido desenvolvimento de hardware capacitado a executar paralelamente diversos programas, seja em ambientes de memória compartilhada ou em ambientes de memória distribuída, vem junto com a necessidade de atualização dos algoritmos a serem utilizados na solução de problemas que cada vez mais tem sua complexidade aumentada.

Este trabalho apresenta a aplicação de um novo algoritmo paralelo baseado no comportamento de vaga-lumes com a adição de um mecanismo de predação que pode ser associado ao escape de regiões de ótimo local. Este novo algoritmo tem sua aplicação em ambientes de memória compartilhada, o que permite a divisão do trabalho entre múltiplos processos, possibilitando um ganho de desempenho temporal, assim como um ganho na qualidade da solução final.

Para demonstrar sua robustez, este trabalho apresenta a sua aplicação em um problema inverso para a estimação da condição inicial na equação do calor. Alguns casos de testes são apresentados e mesmo em situações de altas dimensões a qualidade obtida pelo algoritmo demonstra sua robustez e eficiência.

2. ALGORITMO PARALELO DE VAGA-LUMES COM PREDACÃO

O algoritmo de vaga-lumes (*Firefly Algorithm*, FA) foi proposto por Xin-She Yang na Universidade de Cambridge em 2007 [7]. Este algoritmo é essencialmente baseado na característica bioluminescente de vaga-lumes, insetos coleópteros notórios por suas emissões luminosas. Biólogos ainda não conseguiram determinar todas as utilidades que esta luminescência pode trazer ao vaga-lume, mas pelo menos três funções já foram identificadas:

- Uma ferramenta de comunicação assim como de atração para potenciais parceiros na reprodução;
- Uma isca para atração de eventuais presas;
- Um mecanismo de alerta para potenciais predadores: lembrando-os de que vaga-lumes tem um “gosto amargo”.

A primeira função advém do fato observado de que em determinadas espécies de vaga-lumes a taxa de intermitência e a intensidade das emissões luminosas é parte essencial do mecanismo que atrai ambos os sexos para o ritual de acasalamento. Na maioria dos casos, as fêmeas são atraídas pelo brilho emitido pelos machos. Outra característica observada nos vaga-lumes, quando da existência de uma grande quantidade destes em uma área comum, é o fenômeno de sincronização para a emissão dos flashes luminosos, evidenciando uma característica de auto-organização emergente [2].

Na implementação definida por Yang, posteriormente melhorada [8], três regras simplificadas foram usadas no funcionamento do algoritmo:

- Os vaga-lumes não possuem sexo, portanto qualquer vaga-lume poderá atrair ou ser atraído;
- A atratividade é proporcional ao brilho emitido e decai conforme aumenta a distância entre os vaga-lumes;
- O brilho emitido por um vaga-lume é determinado pela sua avaliação frente à função objetivo, i.e., quanto melhor avaliado, mais brilhante.

Nesta última regra, a intensidade de emissão de luz por parte de um vaga-lume é proporcional à função objetivo, i.e., $I(x) \propto J(x)$, porém a intensidade de luz percebida por um vaga-lume decai em função da distância entre os vaga-lumes, dada a absorção da luz pelo meio. Logo, a intensidade percebida por um vaga-lume é dada por:

$$I(r) = I_0 e^{-\gamma r^2} \quad (1)$$

Em que I_0 é a intensidade da luz emitida (equivalente ao valor da função objetivo); r é a distância Euclidiana entre os vaga-lumes i e j , sendo i o vaga-lume mais brilhante e j o vaga-lume menos brilhante; e γ é o parâmetro de absorção da luz pelo meio.

Desta maneira o fator de atratividade entre vaga-lumes, β , pode ser formulado como:

$$\beta = \beta_0 e^{-\gamma r^m} \quad (2)$$

E que β_0 é a atratividade para uma distância $r = 0$ e pode ser fixo em $\beta_0 = 1$; e m é o parâmetro de controle da influência da distância.

Assim, a movimentação em um dado passo de tempo t de um vaga-lume i em direção a um melhor vaga-lume j é definida como:

$$x_i^t = x_i^{t-1} + \beta(x_j^{t-1} - x_i^{t-1}) + \alpha(rand - \frac{1}{2}) \quad (3)$$

Em que, o segundo termo do lado direito da equação insere o fator de atratividade β enquanto que o terceiro termo, regulado pelo parâmetro α , regula inserção de certa aleatoriedade no caminho percorrido pelo vaga-lume, $rand$ é um número aleatório entre 0 e 1.

2.1. OPERADOR DE PREDACÃO

Tomando por base a terceira função da bioluminescência descrita anteriormente, que apresenta a capacidade de alertar potenciais predadores de que vaga-lumes tem um “gosto amargo”, pode-se assumir o caso em que os piores vaga-lumes são eliminados da população geral de vaga-lumes por um processo predatório baseado no valor da sua função objetivo.

Desta maneira, foi desenvolvida uma variante do *Firefly Algorithm* adicionado de um componente de seleção natural baseado em predação, doravante denominado *Firefly Algorithm with Predation* (FAP). Esta implementação pode seguir o esquema apresentado na figura a seguir:

Firefly Algorithm with Predation

Início

Definir a função objetivo $J(x)$, $x = (x_1, \dots, x_d)^T$

Definir os parâmetros n , α , γ , β_0 , $MaxGeracoes$, n_{selNat} , t_{selNat}

Gerar a população inicial de vaga-lumes x_i ($i = 1, 2, \dots, n$)

Para $t = 1$ até $MaxGeracoes$

Se t_{selNat}

Para $i = n_{selNat} + 1$ até n

Gera um novo vaga-lume

Fim-Para

Fim-Se

Calcular a intensidade da luz I_i para x_i proporcionalmente a $J(x_i)$

Para $i = 1$ até n

Calcular o fator de atratividade β de acordo com $e^{-\gamma r^2}$

Mover o vaga-lume i em direção aos vaga-lumes mais brilhantes

Verificar se o vaga-lume está dentro dos limites

Fim-Para

Fim-Para

Pós-processar e visualizar os resultados

Fim

Figura 1: Pseudocódigo para o algoritmo de Vaga-lumes com predação, esquema baseado na seleção natural.

Dois novos parâmetros são necessários para a implementação deste esquema de seleção natural: a quantidade de vaga-lumes que não serão predados, representada por n_{selNat} ; e a frequência com que o esquema de seleção natural será aplicada, representada por t_{selNat} .

Os novos vaga-lumes, em substituição aos indivíduos predados, são reinicializados em posições aleatórias dentro do espaço de busca e o algoritmo itera convencionalmente até o seu critério de parada final ou até que outro passo de predação seja ativado.

2.2. IMPLEMENTAÇÃO PARALELA DO FAP

O padrão OpenMP [5] foi usado para a implementação do algoritmo de vaga-lumes com predação em multiprocessadores por meio de múltiplas *threads* de um único processo. As diretivas explicitaram a divisão de trabalho nos laços relacionados às iterações dos vaga-lumes, i.e., a geração e evolução das soluções candidatas foi paralelizada. Assim, a denominação do algoritmo pode ser expandida para *parallel Firefly Algorithm with Predation* (pFAP).

O desenvolvimento de algoritmos que atuam em ambientes de memória compartilhada requer atenção especial para a garantia de que o acesso a variáveis, funções e sub-rotinas por diversas *threads* simultaneamente não gere resultados inconsistentes. Para as variáveis, a definição do escopo de acesso com diretivas OpenMP (principalmente se privada ou compartilhada) é necessária para evitar maiores problemas. Funções e sub-rotinas precisam ser escritas de forma a garantir que suas chamadas sejam *thread-safe*, i.e., prontas para acesso simultâneo por várias *threads*. Meta-heurísticas estocásticas como o pFAP são fortemente dependentes de geradores de números aleatórios e estas rotinas, geralmente bibliotecas prontas, precisam desta garantia para que a geração de números aleatórios ocorra sem problemas. O pFAP se valeu das rotinas fornecidas pela Intel Math Kernel Library (MKL) para a geração, *thread-safe*, dos números aleatórios usados durante sua execução [1].

Os resultados observados demonstram a viabilidade da utilização deste esquema de predação. Esta característica permite que o algoritmo escape de ótimos locais em um tempo menor do que sua versão canônica.

Aqui, apresentamos os resultados da aplicação do pFAP no problema inverso de identificação de condição inicial na equação do calor.

3. IDENTIFICAÇÃO DE CONDIÇÃO INICIAL NA EQUAÇÃO DO CALOR

O problema direto para a determinação da condição inicial da equação do calor consiste-se de um problema de condução de calor transiente em uma barra com alto coeficiente de difusividade, condições de fronteira adiabáticas e temperatura inicial dada por $f(x)$. A equação do calor tem formulação matemática dada por [3,4]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} &= \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} \quad \text{para } (x,t) \in \Omega \times \mathfrak{R}^+, \\ \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} &= 0 \quad (x,t) \in \partial\Omega \times \mathfrak{R}^+, \\ T(x,0) &= f(x) \quad (x,t) \in \Omega \times \{0\} \end{aligned} \quad (4)$$

Em que $T(x,t)$ é a temperatura; x é a variável espacial; t é a variável temporal; $f(x)$ é a condição inicial e todas são quantidades adimensionais no domínio $\Omega = (0;1)$.

A solução do problema direto dado pela Eq. (4) para uma dada condição inicial $f(x)$ é obtida explicitamente através de separação de variáveis [3,4]:

$$T(x, t) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\beta_m^2 t} \frac{X(\beta_m, x)}{N(\beta_m)} \int_0^1 X(\beta_m, x') f(x') dx', \quad (5)$$

Em que $\beta_m = m\pi$; $X(\beta_m, x) = \cos(\beta_m x)$ para $m = 0, 1, 2, \dots$; $N(\beta_0) = 1$ e $N(\beta_m) = 0,5$ para $m = 1, 2, \dots$.

O problema inverso para este caso consiste-se da determinação da distribuição inicial de temperatura $f(x)$ dada uma medida de temperatura T para um tempo $t = \tau > 0$. Este tipo de problema possui uma dificuldade intrínseca dada seu mal-condicionamento no sentido de ser um problema mal-posto violando a terceira condição de Hadamard [6].

A solução do problema inverso se dará através da resolução de um problema de mínimos quadrados,

$$\min_{J \in \Omega} \left\{ \|Af - T^{Obs}\|_2^2 + \eta \Lambda[f] \right\}, \quad (6)$$

Em que f é o perfil de temperatura inicial proposto; T^{Obs} é a temperatura medida a um tempo $\tau > 0$; e A é a matriz de transição de estados “com expressão obtida através do uso, em uma malha regular, do método integral (quadratura numérica), que se baseia em uma aproximação linear de f nos subintervalos de integração e que também considera a regra do trapézio” [3]:

$$A_{ij} = e^{-m^2 \pi^2 \tau} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\cos(m\pi x_j)}{N_m} \frac{1}{2} \cos(m\pi x_i) \Delta x, \quad (7)$$

Com $N_0 = 1$ e $N_m = 0,5$ para $m = 1, 2, \dots$; $x_i = (i-1)\Delta x$; e $x_j = (j-1)\Delta x$. A construção da matriz de transição de estados A ainda segue o esquema:

$$A = \begin{bmatrix} A_{1,1} & 2A_{1,2} & \cdots & 2A_{1,n} & A_{1,n+1} \\ A_{2,1} & 2A_{2,2} & \cdots & 2A_{2,n} & A_{2,n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ A_{n+1,1} & 2A_{n+1,2} & \cdots & 2A_{n+1,n} & A_{n+1,n+1} \end{bmatrix} \quad (8)$$

Como o problema é intrinsecamente mal-posto, como o demonstrado em [3], o uso de regularização é uma das estratégias para transformar o problema (Eq. 6) em um problema bem-posto [6]. A regularização pode ser vista como uma ferramenta de inserção de informação conhecida *a priori* que vem auxiliar a solução do problema. O operador de regularização Λ proposto por Tikhonov [6] foi o escolhido para este trabalho:

$$\Lambda[f] = \|f\|_2^2 \quad (9)$$

4. RESULTADOS OBTIDOS

Foi utilizado um perfil triangular de temperatura inicial, expressa pela equação abaixo:

$$f(x) = \begin{cases} 2x & \text{se } 0,0 < x \leq 0,5 \\ 2(1-x) & \text{se } 0,5 < x \leq 1,0 \end{cases} \quad (10)$$

Um exemplo da evolução temporal para o perfil triangular é apresentado na Figura 2.a e para simular a obtenção de dados via sensores, erro Gaussiano da ordem de 2% e

5% foi inserido como ruído (Figura 2.b).

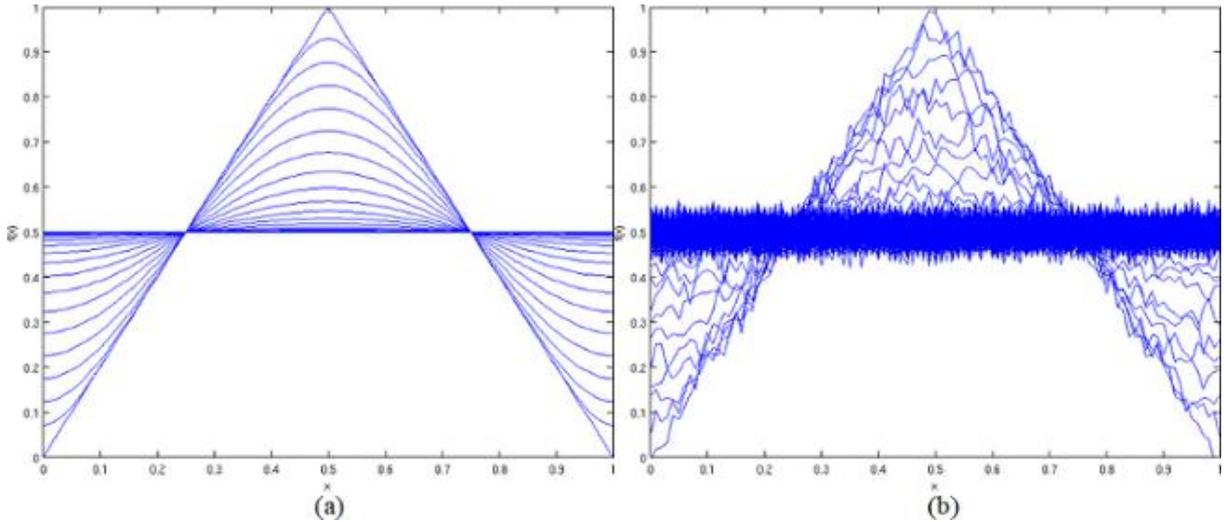


Figura 2: Evolução temporal do perfil inicial de temperatura triangular: (a) sem ruído; (b) com adição de 2% de ruído Gaussiano.

O número de pontos de discretização espacial, equivalente ao número de pontos no eixo x da barra, é variável e para este trabalho foram definidos três casos com 11, 21 e 51 pontos de discretização, equivalendo a resolver problemas de 11, 21 e 51 dimensões, respectivamente.

No primeiro caso, com 11 dimensões, o tempo de inversão adotado foi de $t = 10^{-4}$, com o uso de 40 vaga-lumes, i.e., uma população de 40 soluções candidatas, com 30 vaga-lumes sendo predados a cada 200 iterações. A condição de parada foi definida como sendo de 1000 iterações do algoritmo. Outros parâmetros são: $\alpha = 0,2$; $\gamma = 1,0$; $\beta_0 = 1,0$; e $m = 2$. Como operador de regularização, foi utilizado Tikhonov de ordem 0 com $\eta = 0,1$ atribuído empiricamente. Quatro *threads* foram usadas na execução do algoritmo, levando a uma carga de 10 vaga-lumes por *thread*.

A Figura 3 apresenta os resultados médios para a recuperação do perfil inicial com barra de erro para 25 experimentos independentes obtidos pelo pFAP.

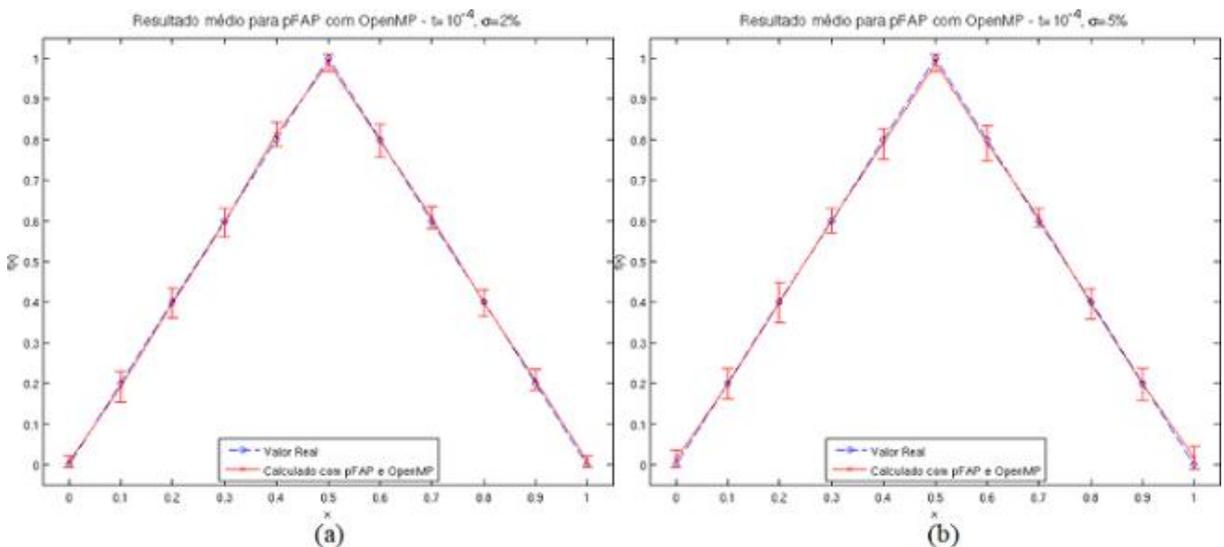


Figura 3: Recuperação do perfil inicial de temperatura com 11 dimensões obtida pelo pFAP para: (a) adição de 2% de erro; (b) adição de 5% de erro.

Para comparação, a Figura 4 apresenta os resultados obtidos pela inversão do primeiro caso, com 11 dimensões, via algoritmo canônico *Firefly Algorithm*, i.e., sem a adição

de predação.

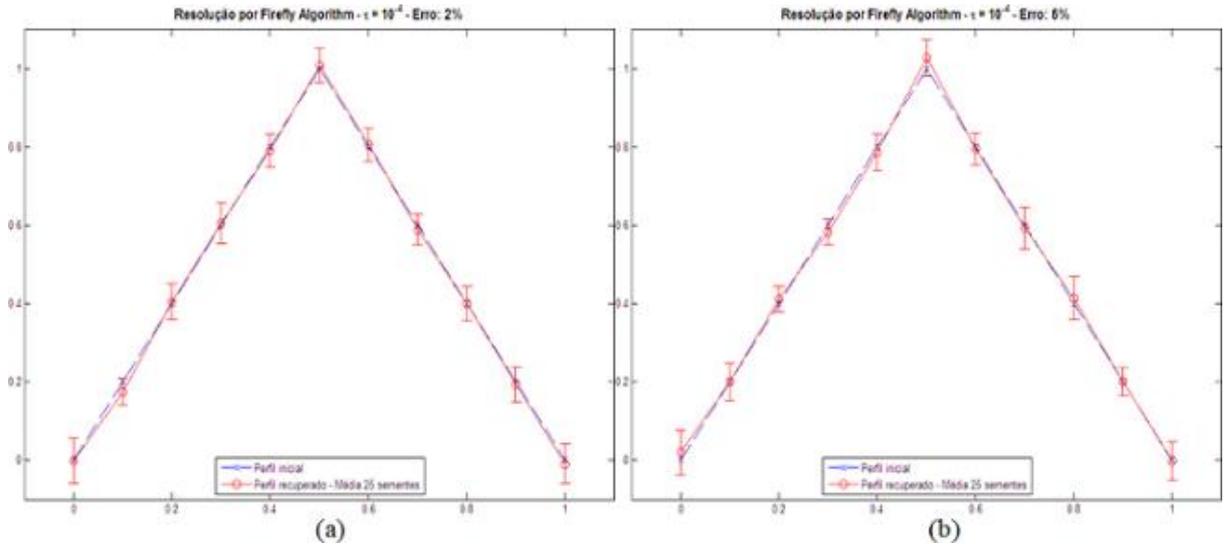


Figura 4: Recuperação do perfil inicial de temperatura com 11 dimensões obtida pelo FA canônico para: (a) adição de 2% de erro; (b) adição de 5% de erro.

Os resultados neste primeiro caso mostram um melhor ajuste da solução média obtida pelo pFAP, com uma barra de erro menor e com um melhor ajuste para a recuperação com 5% de erro.

No segundo caso, a reconstrução do perfil de temperatura foi feita usando 21 dimensões. O mesmo conjunto de parâmetros do caso 1 foi usado. A Figura 4 apresenta os resultados médios para 25 experimentos independentes obtidos pelo pFAP.

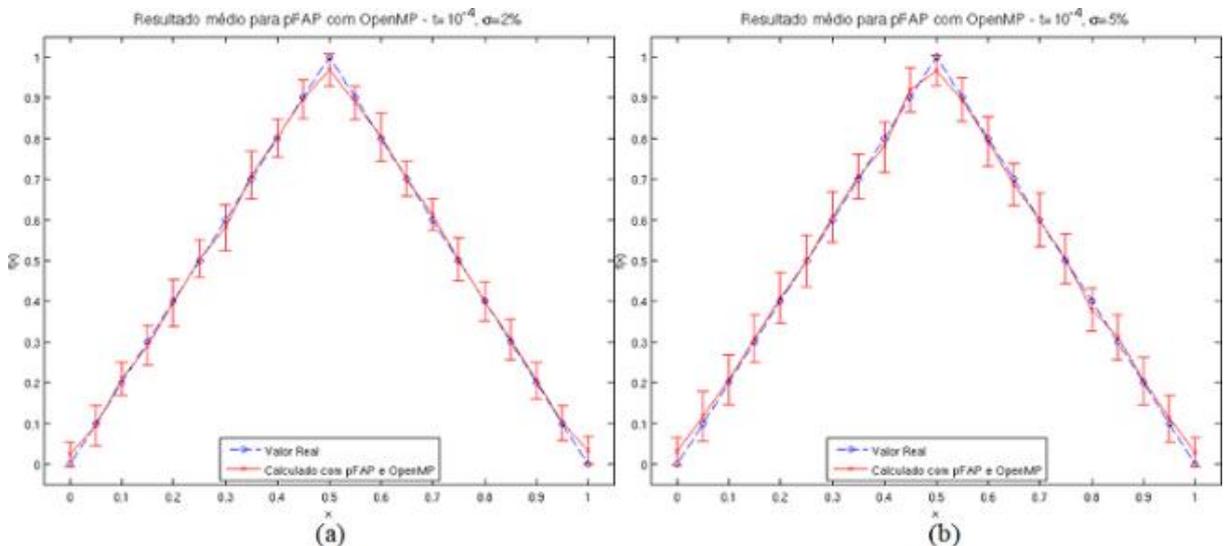


Figura 5: Recuperação do perfil inicial de temperatura com 21 dimensões obtida pelo pFAP para: (a) adição de 2% de erro; (b) adição de 5% de erro.

Para comparação, a Figura 6 apresenta os resultados obtidos pela inversão do segundo caso, com 21 dimensões, via algoritmo canônico *Firefly Algorithm*, sem a adição de predação.

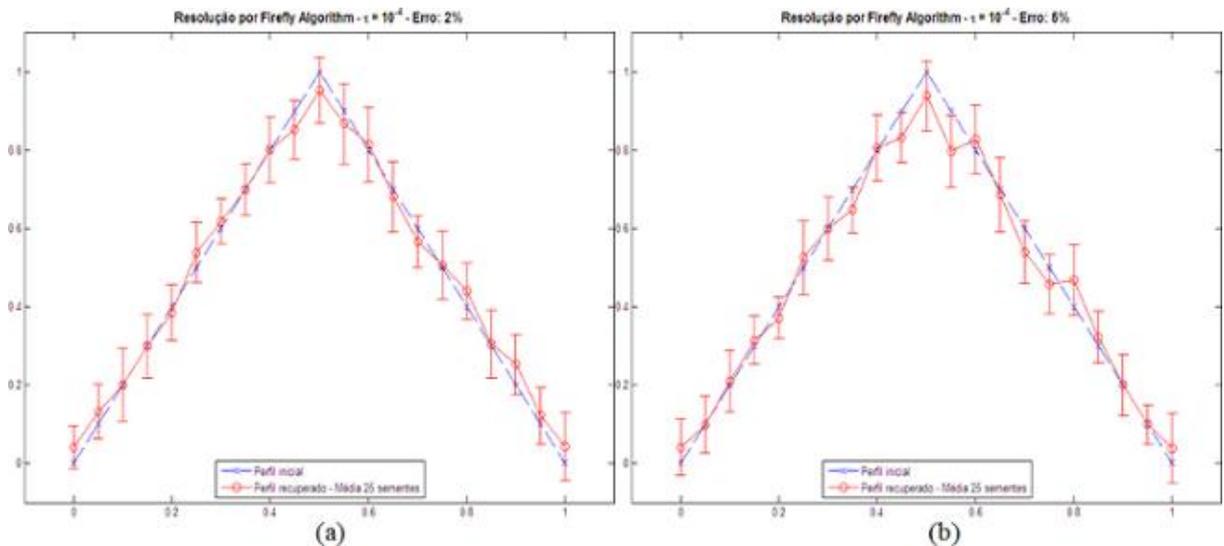


Figura 6: Recuperação do perfil inicial de temperatura com 21 dimensões obtida pelo FA canônico para: (a) adição de 2% de erro; (b) adição de 5% de erro.

Neste segundo caso a vantagem do pFAP, em especial seu mecanismo de predação já se mostra mais pronunciado, no caso com 5% de erro, além de um menor desvio padrão, a solução obtida pelo pFAP foi mais próxima do resultado exato.

O terceiro caso de teste para a recuperação do perfil inicial de temperatura foi configurado para atuação em 51 pontos de discretização, i.e., dimensões. Para refletir o aumento da complexidade inerente ao aumento das dimensões, foi necessário um ajuste no número de vaga-lumes (soluções candidatas) e na condição de parada. Neste caso, 200 vaga-lumes, com a predação de 180 a cada 500 iterações foram utilizados. A condição de parada foi definida para a execução de 50.000 iterações. A Figura 5 apresenta os resultados obtidos para o caso 3 com 2% e 5% de ruído.

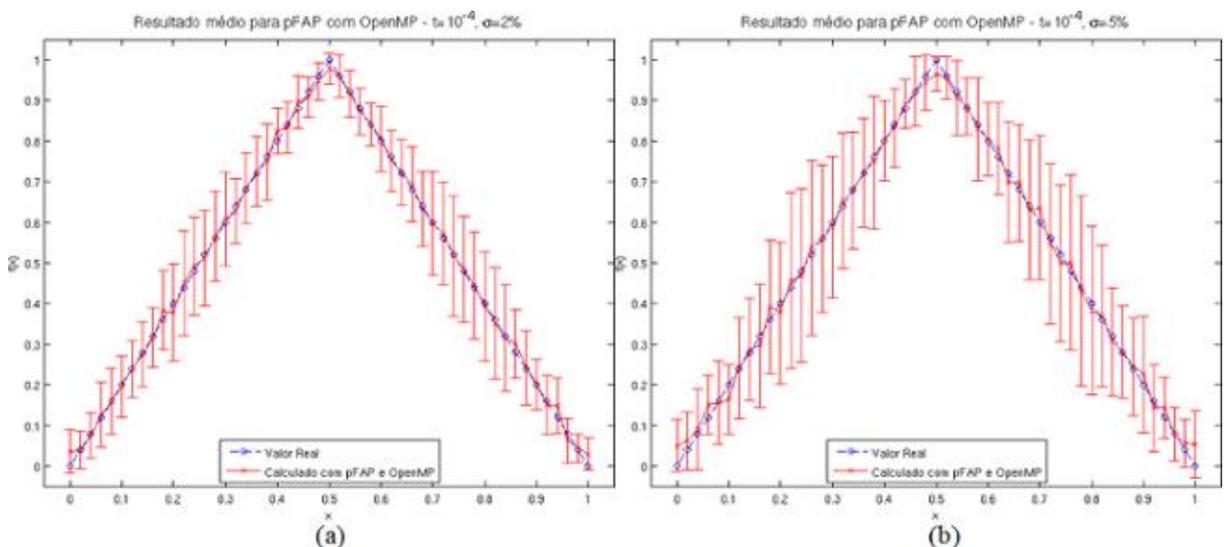


Figura 7: Recuperação do perfil inicial de temperatura com 51 dimensões obtida pelo pFAP para: (a) adição de 2% de erro; (b) adição de 5% de erro.

Para comparação, a Figura 6 apresenta os resultados obtidos pela inversão do segundo caso, com 21 dimensões, via algoritmo canônico *Firefly Algorithm*, sem a adição de predação.

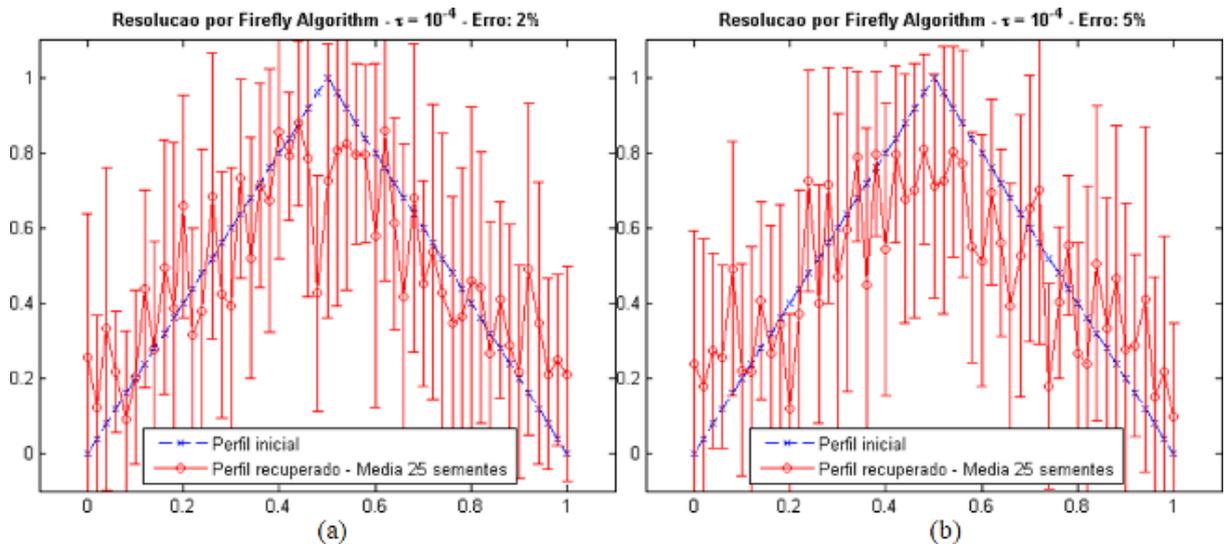


Figura 8: Recuperação do perfil inicial de temperatura com 51 dimensões obtida pelo FA para: (a) adição de 2% de erro; (b) adição de 5% de erro.

Neste último caso, as vantagens do pFAP se pronunciam, especialmente em comparação com a dificuldade de recuperação do perfil inicial com o algoritmo canônico.

Para todos os casos aqui apresentados, de 11, 21 e 51 dimensões, a recuperação do perfil inicial foi obtida com sucesso. Mesmo com a adição de ruído Gaussiano em níveis de 2% e 5%, a recuperação via pFAP se mostrou robusta. Para a recuperação de 51 dimensões com adição de 5% de ruído, o maior desvio padrão se justifica pela alta dimensionalidade, porém destaca-se o bom ajuste do resultado médio em comparação com as recuperações obtidas pelo algoritmo canônico.

5. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos pela aplicação do algoritmo paralelo de vaga-lumes com predação (pFAP) em comparação com a sua versão canônica (FA) demonstram a viabilidade e vantagem de sua aplicação em problemas inversos, matematicamente difíceis de se resolver, de altas dimensões.

Em baixas dimensões, os problemas com 11 e 21 pontos de discretização apresentaram além de ótimo ajuste ao resultado exato um baixo desvio padrão, ressaltando a robustez do método. Para o caso de 51 dimensões o resultado médio em uma condição de adição de 5% de ruído obteve bom ajuste à solução exata.

Seu desenvolvimento voltado para aplicação em ambientes computacionais paralelos de memória compartilhada apresenta vantagens dada a recente popularização destes, assim como o baixo preço de aquisição, elevando a chance de obtenção de uma melhor solução em um menor tempo computacional.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] INTEL. Intel math kernel library reference manual. Mkl 10.3 update 8. [S.l.], 2011. Disponível em: <http://software.intel.com/sites/products/documentation/hpc/mkl/mklman/mklman.pdf>.
- [2] LEWIS, S. M.; CRATSLEY, C. K. Flash signal evolution, mate choice, and predation in fireflies. *Annual Review of Entomology*, v. 53, p. 293-321, 2008. Disponível em: <http://www.annualreviews.org/doi/abs/10.1146/annurev.ento.53.103106.093346>.
- [3] MUNIZ, W. B. Um problema inverso em condução do calor utilizando métodos de regularização. Dissertação de Mestrado. Instituto de Matemática. UFRGS. 1999.

- [4] MUNIZ, W. B.; CAMPOS VELHO, H. F.; RAMOS, F. M. A comparison of some inverse methods for estimating the initial condition of the heat equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. Vol. 103, 1999, pp. 145-163.
- [5] OPENMP. OpenMP application program interface. Version 3.1. July 2011. Disponível em: <<http://www.openmp.org/mp-documents/OpenMP3.1.pdf>>.
- [6] TIKHONOV, A. N.; ARSENIN, V. Y. *Solutions of Ill-Posed Problems*, Winston and Sons: New York, 1977.
- [7] YANG, X.-S. *Nature-inspired metaheuristic algorithms*. Frome, UK: Luniver Press, 2008. 116 p.
- [8] YANG, X.-S. *Nature-inspired metaheuristic algorithms*. Second edition. Frome, UK: Luniver Press, 2010. 148 p.