

RECUPERAÇÃO DA CONDIÇÃO INICIAL DA EQUAÇÃO DO CALOR COM USO DA METAHEURÍSTICA *FIREFLY ALGORITHM* (FA)

Eduardo Fávero Pacheco da Luz

Pós-graduação em Computação Aplicada – CAP/INPE
 Av. dos Astronautas, 1.758 – Jd. Granja – São José dos Campos/SP, 1227-010
eduardo.luz@lac.inpe.br

José Carlos Becceneri, Haroldo Fraga de Campos Velho

Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada – LAC/INPE
 Av. dos Astronautas, 1.758 – Jd. Granja – São José dos Campos/SP, 1227-010
becce@lac.inpe.br haroldo@lac.inpe.br

Resumo: *A metaheurística Firefly Algorithm (FA), um método de otimização inspirado no comportamento de emissão de luzes por vaga-lumes, é descrita e aplicada a uma função teste e a um problema inverso de condução de calor. O problema inverso é formulado como um problema de otimização com restrições, com o objetivo de identificar a condição inicial. Os resultados demonstram grande robustez e precisão por parte do método.*

1. INTRODUÇÃO

A área de ciências térmicas tem contribuído muito para o desenvolvimento das ciências e das aplicações em problemas inversos [8, 9]. No início da era espacial, um problema desafiador era determinar a quantidade de calor gerada na re-entrada de uma espaçonave na atmosfera terrestre. Tecnicamente, este é um problema de estimação de condição de contorno [9]. Quando a dinâmica da condução do calor é modelada por uma equação parabólica, estimar condições de contorno é mais fácil do que estimar condição inicial, pois à medida que o tempo passa, a informação sobre a condição inicial contida no dado observado (temperatura medida) num tempo posterior vai degenerando exponencialmente com o tempo. De fato, estimar condição inicial em problemas parabólicos é um problema genuinamente mal posto, do ponto de vista matemático [10]. Desta forma, o desafio de estimar condição inicial em problemas de condução de calor é usado como um problema típico para testar novas metodologias para solução de problemas inversos. Este é o objetivo do presente artigo: testar uma nova meta-heurística na solução de problemas inversos.

A natureza vem constantemente fornecendo vários exemplos aos cientistas e engenheiros para ajudá-los na formulação de soluções em problemas recorrentes a diversas áreas do conhecimento. Alguns destes exemplos são baseados no comportamento animal, em que o processo evolutivo dotou alguns animais com ações que os permitem endereçar de forma adequada problemas que o ambiente apresenta, como no caso das formigas (busca por alimento), vaga-lumes (comportamento para acasalamento), pássaros (vôo em grupo), dentre outros.

A ciência da computação se tornou ferramenta imprescindível em aplicações e problemas científicos (como problemas de otimização e problemas inversos), com a incorporação de novas técnicas para produzir soluções desejadas. A inspiração para algoritmos de otimização baseada na emulação do comportamento animal é uma das técnicas promissoras, entre os algoritmos baseados em processos naturais.

A técnica do *Firefly Algorithm* (FA) é descrita e empregada para determinar o ponto que maximiza uma função teste e aplicada à identificação da condição inicial de um problema de condução do calor. Estimação de condição inicial em problemas parabólicos é um problema matematicamente difícil, como mencionado acima.

2. MODELO MATEMÁTICO

2.1. PROBLEMA DIRETO

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 perfil de temperatura inicial dado por $f(x)$. A equação do calor tem formulação matemática dada por [2,3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} &= \frac{\partial T(x,t)}{\partial t}, \quad \text{para } (x,t) \in \Omega \times R^+ \\ \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} &= 0 \quad (x,t) \in \partial\Omega \times R^+, \\ T(x,0) &= f(x) \quad (x,t) \in \Omega \times \{0\} \end{aligned} \quad (1)$$

em que $T(x,t)$ é a temperatura; x é a variável espacial ao longo da barra; t é a variável temporal; $f(x)$ é o perfil de temperatura dado como condição inicial ao longo de x e todas são quantidades adimensionais no domínio $\Omega = [0;1]$.

A solução do problema direto dado pela Eq. (3) para uma dada condição inicial $f(x)$ é obtida explicitamente através de separação de variáveis [2,3]:

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

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 $m = 1, 2, \dots$.

2.2. PROBLEMA INVERSO

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 [4].

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

$$\min_{J \in \Omega} \left\{ \|Af - T^{Obs}\|_2^2 + \eta \Lambda[f] \right\}, \quad (3)$$

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 sub-intervalos de integração e que também considera a regra do trapézio” [2]:

$$A_{ij} = e^{-m^2 \pi^2 \tau} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\cos(m\pi x_j)}{N_m} \frac{1}{2} \cos(m\pi x_i) \Delta x, \quad (4)$$

com $N_0 = 1$ e $N_m = 0,5$ para $m = 1, 2, \dots$; $x_i = (i-1)\Delta x$; e $x_j = (j-1)\Delta x$, com Δx representando a discretização usada no eixo x , sendo definido *a priori*, de acordo com o problema.

2.2.1. Regularização

Como o problema é intrinsecamente mal-posto, como o demonstrado em [2], o uso de regularização é uma das estratégias para transformar o problema (5) em um problema bem-posto [4]. A regularização pode ser vista como uma ferramenta de inserção de informação conhecida *a priori* que venha a auxiliar na solução do problema. O operador de regularização Λ proposto por Tikhonov [4] foi o escolhido para este trabalho:

$$\Lambda[f] = \|f\|_2^2 \quad (5)$$

3. FIREFLY ALGORITHM (FA)

O FA foi proposto por Xin-She Yang na Universidade de Cambridge em 2007 [1]. Este algoritmo é baseado na característica bioluminescente de vagalumes, insetos coleópteros notórios por suas emissões luminosas. Segundo Yang [1], a biologia ainda não tem um conhecimento completo para determinar todas as utilidades que esta luminescência pode trazer ao vagalume, mas pelo menos três funções já foram identificadas: (i) como uma ferramenta de comunicação e atração para potenciais parceiros na reprodução; (ii) como uma isca para atração de eventuais presas para o vagalume; (iii) como um mecanismo de alerta para potenciais predadores: lembrando-os de que vagalumes tem um “gosto amargo”.

A primeira função da bioluminescência advém do fato observado de que em determinadas espécies de vagalumes a taxa de intermitência e a intensidade dos flashes luminosos 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 vagalumes, 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 [1].

Para a implementação definida por Yang [1], três regras simplificadas foram criadas para delinear o funcionamento do algoritmo: (a) os vagalumes não possuem sexo, portanto qualquer vagalume poderá atrair ou ser atraído; (b) a atratividade é proporcional ao brilho emitido e decai conforme aumenta a distância entre os vagalumes (regra baseada em observação do comportamento animal); (c) o brilho emitido por um vagalume é determinado pela sua avaliação frente à função objetivo (i.e., quanto melhor avaliado, mais brilhante).

Para uma melhor compreensão do FA, duas características do algoritmo devem ser destacadas: como se dá a variação da intensidade da luz percebida pelo vagalume; e como é formulada a atratividade entre os vagalumes. Ainda segundo Yang [1], para simplificação do modelo, a atratividade de um vagalume é determinada pela intensidade da luz emitida, e a determinação da intensidade emitida é função de sua avaliação.

Assim, a intensidade de emissão de luz por parte de um vagalume é proporcional à função objetivo, i.e., $I(x) \propto J(x)$, porém a intensidade de luz percebida por um vagalume decai em função da distância entre os vagalumes, dada a absorção da luz pelo meio. Logo, a intensidade percebida por um vagalume é dada por: $I(r) = I_0 e^{-\gamma r^2}$, em que I_0 é a intensidade da luz emitida; r é a distância Euclidiana entre os vagalumes i e j , sendo i o vagalume mais brilhante e j o vagalume menos brilhante; e γ é o parâmetro de absorção da luz pelo meio. Desta maneira o fator de atratividade β pode ser formulado como:

$$\beta = \beta_0 e^{-\gamma r^2}, \quad (6)$$

em que β_0 é a atratividade para uma distância $r = 0$, e pode ser fixo em $\beta_0 = 1$.

A movimentação em um dado passo de tempo t de um vagalume i em direção a um melhor vagalume j é definida como:

$$x_i^t = x_i^{t-1} + \beta (x_j^{t-1} - x_i^{t-1}) + \alpha \left(rand - \frac{1}{2} \right), \quad (7)$$

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 vagalume, $rand$ é um número aleatório entre 0 e 1.

A posição de cada vagalume utilizado no FA (representada por x_i^t na Eq. 7) define uma solução candidata, i.e., um possível perfil inicial de temperatura $f(x)$, que é apresentado ao problema direto retornando um perfil final de temperatura, usado então para calcular a diferença quadrática (com a Eq. 3) e finalmente definindo se um vagalume é melhor do que outro, i.e., se uma solução candidata é melhor do que outra. O pseudocódigo do FA pode ser obtido em [1].

O FA, como toda a metaheurística empregada atualmente, possui certa quantidade de parâmetros a serem ajustados. Como o próprio nome explicita, o FA é um procedimento heurístico. Logo, muitas decisões são baseadas na experiência de quem o utiliza. Isso se aplica aos ajustes de parâmetros. Não existe um método exato para realizar tal tarefa. Tais ajustes podem implicar em um conhecimento maior do algoritmo, a interrelação dos diversos parâmetros e como os mesmos podem

estar relacionados com o problema sendo resolvido. Para uma melhor discussão sobre utilização de metaheurísticas, vide capítulo 4, seção 4.1.1 de [7].

Para resolver o problema descrito na seção 3, colocamos 20 vagalumes e realizamos 50 iterações. Os demais parâmetros utilizados encontram-se descritos na seção 4.

4. RESULTADOS

Os resultados apresentados nesta seção são referentes ao uso do FA para a minimização do problema inverso através da diferença de mínimos quadrados conforme a Eq. (4), i.e., o problema inverso com regularização.

Os parâmetros definidos para o FA, tais como os sugeridos pela literatura, foram: $n = 20$; $MaxGeracoes = 50$; $\alpha = 0,2$; $\beta_0 = 1,0$; $\gamma = 1,0$. O parâmetro de regularização escolhido foi $\eta = 0,001$, determinado numericamente.

Dois perfis iniciais de temperatura foram selecionados para a inversão, o primeiro triangular, e o segundo de crescimento quadrático (Figs. 1(a) e 1(b)). Ambos estão contidos no domínio $[0;1]$. O espaço de buscas para o FA é 40% maior, estando contido no domínio $[-0,2;1,2]$.

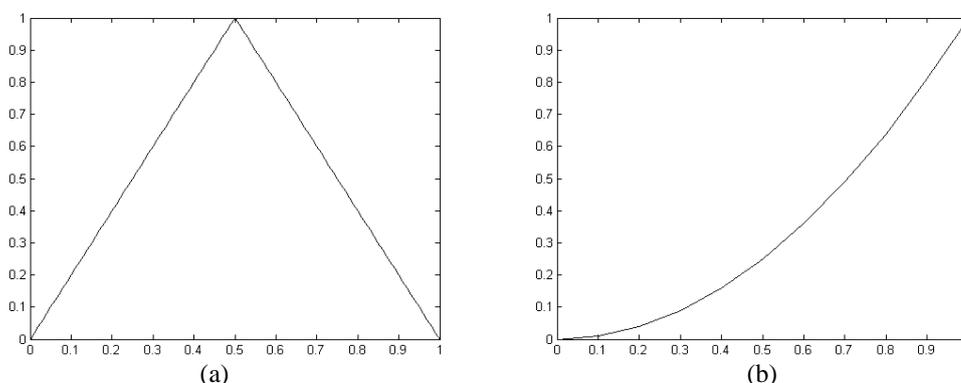


Figura 1: Perfis iniciais de temperatura: (a) triangular; (b) de crescimento quadrático.

O problema direto apresentado na Seção 3.1 foi executado com 11 pontos de discretização espacial para a obtenção dos perfis de temperatura T medidos em $\tau = 10^{-4}$ ou $\tau = 10^{-3}$. As medidas são sintéticas: temperaturas como calculadas pelo modelo direto acrescidas de ruído gaussiano, em níveis de 2% e 5%. Os resultados são apresentados nas figuras abaixo, sendo que as curvas de recuperação do FA são o resultado médio para 25 execuções com sementes geradoras de números aleatórios distintas. A barra de erro representa um desvio padrão para 25 execuções (em todas as figuras a seguir).

Os resultados demonstram grande robustez por parte do FA, tal como o demonstrado nas Tabelas 1 e 2 e com grande aderência dos resultados ilustrada pelas Figuras 2 e 3.

Tabela 1: Resultados médios e desvios padrões para 25 experimentos computacionais do FA na recuperação do perfil de temperatura triangular nos tempos $\tau = 10^{-4}$ e $\tau = 10^{-3}$ com 2% e 5% de ruído.

Exato	$\tau = 10^{-4}$				$\tau = 10^{-3}$			
	2% de erro		5% de erro		2% de erro		5% de erro	
	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão
0,00	-0,0007	0,0575	0,0201	0,0572	0,0231	0,0488	0,0386	0,04362
0,20	0,1741	0,0344	0,2001	0,0476	0,2042	0,0525	0,1831	0,05130
0,40	0,4053	0,0461	0,4123	0,0333	0,3986	0,0566	0,3953	0,04993
0,60	0,6048	0,0521	0,5827	0,0316	0,5923	0,0398	0,5660	0,03879
0,80	0,7899	0,0418	0,7860	0,0460	0,7835	0,0392	0,7791	0,04858
1,00	1,0076	0,0449	1,0283	0,0471	1,0167	0,0448	1,0552	0,04920
0,80	0,8059	0,0430	0,7947	0,0396	0,8119	0,0633	0,8242	0,04617
0,60	0,5893	0,0383	0,5929	0,0528	0,5931	0,0528	0,5828	0,05068
0,40	0,4002	0,0447	0,4146	0,0547	0,4163	0,0517	0,4062	0,05432
0,20	0,1938	0,0450	0,2010	0,0353	0,1730	0,0568	0,1832	0,05545
0,00	-0,0097	0,0501	-0,0018	0,0502	0,0149	0,0482	-0,0137	0,05762

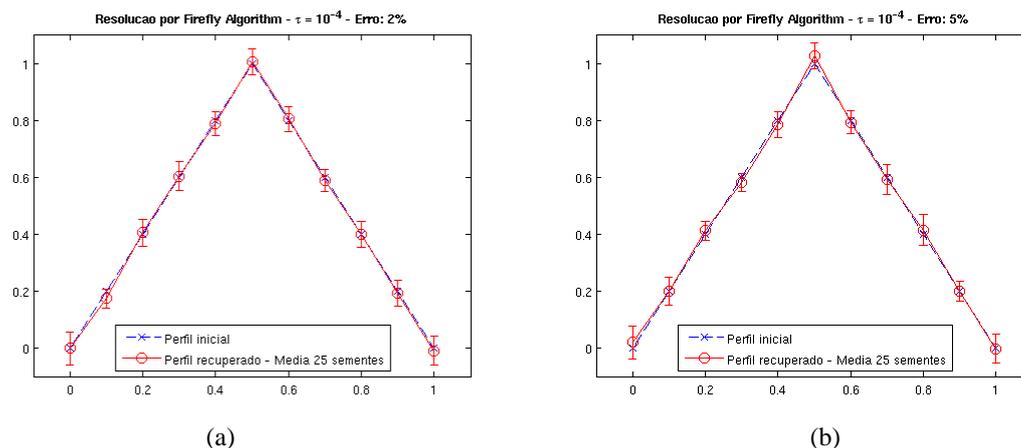


Figura 2: Recuperação dos perfis triangulares de temperatura com FA em 11 dimensões para $\tau = 10^{-4}$:
(a) 2% de ruído nos dados; (b) 5% de ruído nos dados.

Tabela 2: Resultados médios e desvios padrões para 25 experimentos computacionais do FA na recuperação do perfil de temperatura quadrático nos tempos $\tau = 10^{-4}$ e $\tau = 10^{-3}$ com 2% e 5% de ruído.

Exato	$\tau = 10^{-4}$				$\tau = 10^{-3}$			
	2% de erro		5% de erro		2% de erro		5% de erro	
	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão
0,00	0,0184	0,0485	0,0062	0,0468	0,0106	0,0480	0,0163	0,0482
0,01	0,0154	0,0426	0,0060	0,0452	0,0032	0,0560	-0,0124	0,0426
0,04	0,0296	0,0641	0,0459	0,0442	0,0379	0,0526	0,0375	0,0352
0,09	0,0917	0,0400	0,0919	0,0534	0,0775	0,0473	0,0701	0,0556
0,16	0,1573	0,0398	0,1479	0,0498	0,1486	0,0468	0,1248	0,0511
0,25	0,2560	0,0482	0,2744	0,0433	0,2949	0,0477	0,3027	0,0554
0,36	0,3539	0,0498	0,3615	0,0542	0,3683	0,0400	0,4019	0,0393
0,49	0,5015	0,0348	0,4938	0,0472	0,4741	0,0589	0,4825	0,0565
0,64	0,6397	0,0534	0,6401	0,0413	0,6571	0,0461	0,6885	0,0445
0,81	0,8074	0,0437	0,8005	0,0401	0,6857	0,0502	0,6949	0,0467
1,00	0,9927	0,0562	0,9714	0,0447	1,0581	0,0488	1,0292	0,0461

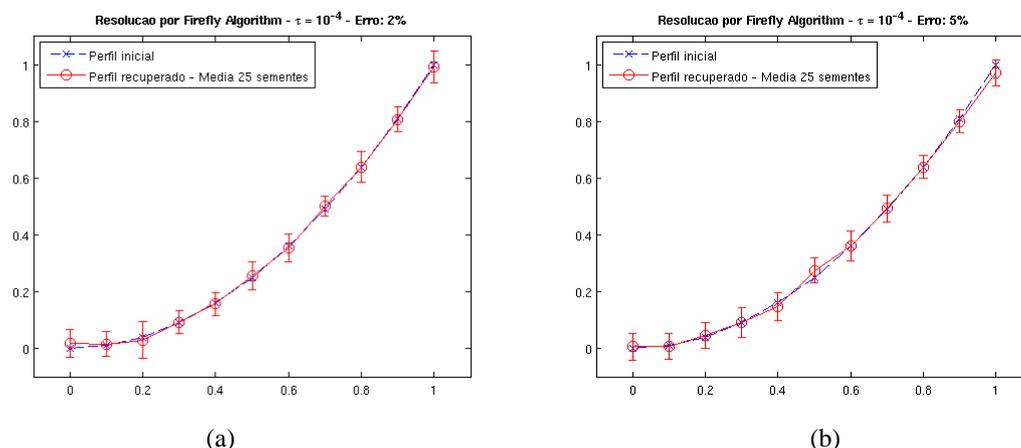


Figura 3: Recuperação dos perfis quadráticos de temperatura com FA em 11 dimensões para $\tau = 10^{-4}$:
(a) 2% de ruído nos dados; (b) 5% de ruído nos dados.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O *Firefly Algorithm* (FA), recém desenvolvido, baseado no comportamento de vagalumes, se mostrou uma ferramenta robusta e precisa em sua aplicação na minimização de um funcional associado a um problema inverso extremamente mal-condicionado de identificação de condição inicial da equação do calor. Esta nova metaheurística se mostra promissora e futuros trabalhos incluem os estudos para o desenvolvimento de variantes adaptadas a ambientes de processamento de alto desempenho, tal como já feito em [6].

6. AGRADECIMENTOS

Eduardo F. P. Luz agradece à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro a este trabalho através de bolsa de pós-graduação em nível de doutorado.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] YANG, X.-S. Firefly Algorithm. *Nature-Inspired Metaheuristic Algorithms*. Luniver Press: Cambridge, 2008.
- [2] MUNIZ, W. B. *Um problema inverso em condução do calor utilizando métodos de regularização*. Dissertação de Mestrado. Instituto de Matemática. UFRGS. 1999.
- [3] 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.
- [4] TIKHONOV, A. N.; ARSENIN, V. Y. *Solutions of Ill-Posed Problems*, Winston and Sons: New York, 1977
- [5] KIRKPATRICK, S.; GELLAT, C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by Simulated Annealing, *Science*, Vol. 220, N. 4598, 1983, pp. 671-680.
- [6] LUZ, E. F. P.; BECCENERI, J. C.; CAMPOS VELHO, H. F. A new multi-particle collision algorithm for optimization in a high-performance environment. *Journal of Computational Interdisciplinary Sciences*, Vol. 1, 2008, pp. 1-7.
- [7] BIONDI NETO, L.; BECCENERI, J. C.; SIMÕES DA SILVA, J. D.; LUZ, E. F. P.; SILVA NETO, A. J. Fundamentos de Otimização e Inteligência Artificial. In: *Técnicas de Inteligência Computacional Inspiradas na Natureza: Aplicação em Problemas Inversos em Transferência Radiativa*. Notas em Matemática Aplicada, ISSN 2175-3385, Volume 41, 2009.
- [8] BECK, J.V.; ARNOLD, K. J., "Parameter Estimation", John Wiley & Sons, 1977.
- [9] BECK, J. V.; BLACKWELL, B.; CLAIR JR., C. R., "Inverse Heat Conduction: Ill-Posed Problems", John Wiley & Sons, 1985.
- [10] MUNIZ, W. B.; RAMOS, F. M.; CAMPOS VELHO, H. F., Entropy- and Tikhonov-based Regularization Techniques Applied to the Backwards Heat Equation, *Computers & Mathematics with Applications*, 40(8/9), 2000, pp. 1071-1084.