

Hibridização do algoritmo de colisão de partículas com o método *Extrem*

Aline C. Soterroni* **Eduardo F. P. Luz[†]**

Pós-graduação em Computação Aplicada, CAP, INPE

12227-010, São José dos Campos, SP

E-mail: aline.soterroni@lac.inpe.br, eduardo.luz@lac.inpe.br

Fernando M. Ramos¹ **Haroldo F. Campos Velho¹**

José C. Becceneri¹ **Roberto L. Galski²**

¹Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada, LAC, INPE

²Centro de Controle de Satélites, CCS, INPE

12227-010, São José dos Campos, SP

E-mail: fernando@lac.inpe.br, haroldo@lac.inpe.br, becce@lac.inpe.br, galski@ccs.inpe.br

RESUMO

O algoritmo de colisão de partículas (*Particle Collision Algorithm*, PCA) foi apresentado por W. Sacco e colaboradores [1] tendo inspiração no algoritmo de recozimento simulado (*Simulated Annealing*, SA) [2]. A construção do algoritmo também tem suas raízes na física das reações de colisão de partículas em um reator nuclear, com grande ênfase nos comportamentos de espalhamento (*scattering*) e absorção (*absortion*). Seu uso tem sido comprovadamente eficaz em diversos casos de otimização, tanto em problemas de teste (*benchmark*) quanto em aplicações reais [3, 4, 5].

A estrutura de funcionamento do PCA leva em consideração a escolha de uma solução inicial, denominada *OldConfig*, que sofre uma modificação através de uma função de perturbação estocástica levando à construção de uma solução candidata denominada *NewConfig*. Os valores das duas soluções são calculados através da função objetivo e imediatamente comparadas. Desta maneira a solução candidata pode ser aceita, ou não, dependendo de seu valor frente a solução anterior. No caso de uma melhor solução ser obtida, esta solução é aceita (caracterizando o comportamento de absorção) e um esquema de exploração local é ativado. Dentro da função de exploração local, pequenas perturbações estocásticas são aplicadas à solução com o objetivo de executar uma busca local. Se uma melhor solução for encontrada, esta é adotada por *OldConfig*. Caso a nova solução dada por *NewConfig* não seja aceita, um esquema do tipo Metropolis [6] é posto em prática, ativando assim o comportamento de espalhamento. Este esquema estocástico visa garantir que não haja convergência prematura para mínimos locais.

Neste trabalho, apresentamos um algoritmo híbrido auxiliar que visa substituir o esquema estocástico de busca local do PCA pelo algoritmo de otimização estática denominado *Extrem* [7]. O *Extrem* é um algoritmo de ordem zero, ou seja, não requer o cálculo de derivadas da função objetivo, e que busca o ótimo (mínimo ou máximo) de uma função de várias variáveis sujeita, ou não, a restrições de igualdade e desigualdade.

Ao transitar para a busca local, o PCA restringe a sua região de atuação para uma pequena região do espaço de busca viável. Com a hibridização, o método *Extrem* deverá atuar sobre essa

*bolsista de doutorado CNPq

[†]bolsista de doutorado CAPES

pequena região e para isso precisará apenas de um ponto, que pode ser o último ponto fornecido pela etapa estocástica do PCA, e uma direção, inicialmente unitária.

No algoritmo *Extrem* são construídas direções ortogonais com o auxílio do processo de ortogonalização de Gram-Schmidt, e são realizadas buscas unidimensionais por meio de interpolação parabólica em cada uma dessas direções. O tamanho do passo sofre modificações ao longo das iterações com o objetivo de diminuir em regiões próximas ao ótimo. As condições de parada são atingidas se a variação do valor da função objetivo ou a variação dos argumentos dos pontos obtidos entre um estágio e outro do método são menores ou iguais a uma determinada tolerância, ou se o número máximo de iterações for alcançado.

Resultados iniciais mostram boa convergência do *Extrem* em funções teste, assim como uma significativa redução do número de avaliações da função objetivo em comparação com a busca local realizada pelo PCA.

Trabalhos futuros incluem a extensão desta hibridização para o algoritmo de colisão de múltiplas partículas (*Multi-Particle Collision Algorithm*, M-PCA), variante desenvolvida para ambientes de alto desempenho [8].

Palavras-chave: *Otimização, Algoritmo de Colisão de Partículas, Método Extrem, Hibridização*

Referências

- [1] W. F. Sacco e C. R. E. A. Oliveira, A new stochastic optimization algorithm based on a particle collision metaheuristic, *Proceedings of the 6th World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization*, WCSMO, Rio de Janeiro, 2005.
- [2] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt e M. P. Vecchi, Optimization by simulated annealing, *Science*, **220** (1983), 671-680.
- [3] W. F. Sacco, C. R. E. Oliveira e C. M. N. A. Pereira, Two stochastic optimization algorithms applied to nuclear reactor core design, *Progress in Nuclear Energy*, **48** (2006), 525-539.
- [4] W. F. Sacco, H. Alves Filho e C. M. N. A. Pereira, Cost-based optimization of a nuclear reactor core design: a preliminary model, *Proceedings of the 2007 International Nuclear Atlantic Conference*, ABEN, Santos, 2007.
- [5] W. F. Sacco, C. M. F. Lapa, C. M. N. A. Pereira e H. A. Alves Filho, A Metropolis algorithm applied to a nuclear power plant auxiliary feedwater system surveillance tests policy optimization, *Progress in Nuclear Energy*, **50** (2008), 15-21.
- [6] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller, Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, *The Journal of Chemical Physics*, v. 6, **21** (1953), 1087-1092.
- [7] H. G. Jacob, An engineering optimization method with application to STOL-aircraft approach and landing trajectories, *NASA TN D-6978*, A-4323 (1972).
- [8] E. F. P. Luz, J. C. Becceneri e H. F. Campos Velho, A new multi-particle collision algorithm for optimization in a high-performance environment, *Journal of Computational Interdisciplinary Sciences*, **1** (2008), 1-7.