

SOLUÇÃO DO PROBLEMA INVERSO DE TRANSFERÊNCIA RADIATIVA EM MEIOS DE DUAS CAMADAS COM O ALGORITMO DE VAGALUMES E VARIAÇÕES

Rubens L. Cirino

Instituto de Matemática e Estatística – Dept. IV
Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ

Diego C. Knupp, Luiz Biondi Neto e Antônio J. Silva Neto

Instituto Politécnico – IPRJ – Nova Friburgo
Universidade do Estado do Rio de Janeiro - UERJ

Resumo: *A necessidade de solução de problemas de otimização exerce papel fundamental na solução de problemas inversos formulados implicitamente, onde a solução é obtida através da minimização de uma função objetivo dada pelo somatório dos resíduos entre as medidas experimentais e os valores previstos pelo modelo em função dos parâmetros sendo estimados. Neste trabalho, motivados por um problema inverso em transferência radiativa em um meio heterogêneo de duas camadas e também, pela heurística conhecida como algoritmo de vagalumes (Firefly Algorithm – FA), são apresentadas duas variações da versão canônica da heurística, que são aplicadas na minimização da função objetivo para solução do problema inverso de estimativa simultânea dos coeficientes de espalhamento e absorção formulado como um problema de estimativa de parâmetros. Os resultados obtidos com a versão canônica do algoritmo de vagalumes e as variações desenvolvidas neste trabalho são apresentados e criticamente comparados.*

1. INTRODUÇÃO

Os problemas inversos são geralmente formulados implicitamente [8], definindo-se uma função objetivo dada pela soma dos quadrados dos resíduos entre as medidas experimentais e os correspondentes valores calculados através do modelo direto, em função dos parâmetros que se deseja estimar. Assim, a solução do problema inverso se torna o problema de minimização da função objetivo definida. Dada a forma funcional da função objetivo, geralmente complexa e repleta de mínimos locais, o emprego direto de métodos determinísticos de otimização pode levar à não convergência da solução ou à estagnação em um dos mínimos locais. Métodos estocásticos de otimização, geralmente inspirados em comportamentos observados na natureza, têm se apresentado eficazes na identificação de mínimos globais [9], mesmo de funções complexas, dado um número suficientemente alto de iterações. O desenvolvimento paulatino na velocidade de processamento dos computadores vem permitindo tanto a utilização de métodos estocásticos de otimização quanto a proposição de modelos computacionais cada vez mais complexos em problemas de engenharia, motivando o desenvolvimento de novas heurísticas e suas aplicações em uma vasta gama de problemas.

O estudo de problemas inversos aplicados à transferência radiativa tem sido objeto de intensa pesquisa objetivando atender a diversas aplicações que vão desde a medicina até a indústria [1], onde geralmente se busca a realização de testes não invasivos/destrutivos. O grupo de pesquisa o qual os autores participam, publicou diversos trabalhos em transferência radiativa, onde se buscou comparar métodos estocásticos de otimização já estabelecidos, bem como testar novas propostas de hibridização e variações de métodos tradicionais [2,3,7]. Apenas para citar alguns exemplos, são abordados o PCA (*Particle Collision Algorithm*), Luus-Jaakola, PSO (*Particle Swarm Optimization*), o recozimento simulado, SA (*Simulated Annealing*), algoritmos genéticos, GA (*Genetic Algorithms*), otimização por colônia de formigas, ACO (*Ant Colony Optimization*), otimização extrema generalizada, GEO (*Generalized Extremal Optimization*), evolução diferencial, DE (*Differential Evolution*) e o algoritmo de vagalumes, FA (*Firefly Algorithm*) [4,9]. Cirino et al. [4] fazem uma comparação do algoritmo de vagalumes (FA) com

o PCA e o PSO em um problema com o albedo com dependência espacial em um meio de uma camada.

O presente trabalho está focado na proposição e análise de duas variações do algoritmo dos vagalumes para a solução de um problema em transferência radiativa em um meio heterogêneo de duas camadas. Serão estimados o coeficiente de espalhamento (σ_s) e o coeficiente de absorção (k_a) de ambas as camadas. O estudo investigativo deste trabalho tem aplicação em modelos climáticos, óptica hidrológica e sensoriamento remoto entre outros [6]. Com o intuito de se ter uma medida de desempenho das novas variações propostas neste trabalho, os resultados são criticamente comparados com a versão canônica do FA.

2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA E SOLUÇÃO DO PROBLEMA DIRETO

Considera-se um meio participante heterogêneo unidimensional de duas camadas absorvedor, espalhador e emissor, onde L_1 e L_2 representam a espessura das camadas 1 e 2 respectivamente (Figura 1). As paredes internas são refletoras difusas e estão sujeitas à incidência de intensidades de radiação [10].

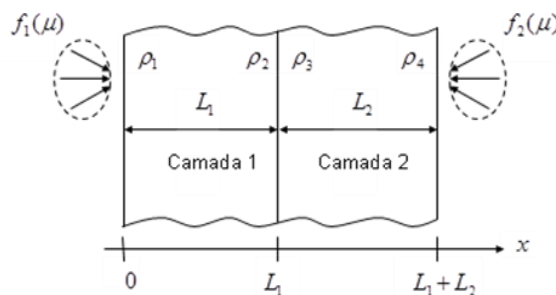


Figura 1: Representação esquemática de um meio participante composto de duas camadas, com superfícies internas refletoras difusas e submetido a uma radiação externa de intensidades $f_1(\mu)$ e $f_2(\mu)$ e ρ_j são as reflectividades difusas, com $j=1,\dots,4$.

Considerando espalhamento isotrópico e simetria azimutal, a equação de Boltzmann é utilizada para a representação matemática do problema direto, conforme apresentado a seguir:

Camada 1

$$\mu \frac{\partial I_1(x, \mu)}{\partial x} + \beta_1 I_1(x, \mu) = \frac{\sigma_{s1}}{2} \int_{-1}^1 I_1(x, \mu') d\mu'; \quad 0 < x < L_1, \quad -1 \leq \mu \leq 1 \quad (1a)$$

$$I_1(0, \mu) = f_1(\mu) + 2\rho_1 \int_0^1 I_1(0, -\mu') \mu' d\mu'; \quad \mu > 0 \quad (1b)$$

$$I_1(L_1, \mu) = (1 - \rho_3) I_2(L_1, \mu) + 2\rho_2 \int_0^1 I_1(L_1, \mu') \mu' d\mu'; \quad \mu < 0 \quad (1c)$$

Camada 2

$$\mu \frac{\partial I_2(x, \mu)}{\partial x} + \beta_2 I_2(x, \mu) = \frac{\sigma_{s2}}{2} \int_{-1}^1 I_2(x, \mu') d\mu'; \quad L_1 < x < L_1 + L_2, \quad -1 \leq \mu \leq 1 \quad (1d)$$

$$I_2(L_1, \mu) = (1 - \rho_2) I_1(L_1, \mu) + 2\rho_3 \int_0^1 I_2(L_1, -\mu') \mu' d\mu'; \quad \mu > 0 \quad (1e)$$

$$I_2(L_1 + L_2, \mu) = f_2(\mu) + 2\rho_4 \int_0^1 I_2(L_1 + L_2, \mu') \mu' d\mu'; \quad \mu < 0 \quad (1f)$$

onde μ é o cosseno do ângulo polar, I_i representa a intensidade da radiação na camada i com $i = 1$ ou 2 , $\beta_i = k_{ai} + \sigma_{si}$ é o índice de extinção total.

Quando a geometria das propriedades radiativas e as condições de contorno são conhecidas, o problema (1) pode ser resolvido, sendo calculados os valores para as intensidades de radiação $I_1(x, \mu)$, para $0 \leq x \leq L_1$ e $-1 \leq \mu \leq 1$ e $I_2(x, \mu)$, para $L_1 \leq x \leq L_1 + L_2$ e $-1 \leq \mu \leq 1$. Para solucionar o problema direto, foi utilizado o método das ordenadas discretas de Chandrasekhar. O ângulo polar e os domínios espaciais são discretizados. Os termos da integral do lado direito da equação (1) são substituídos por uma quadratura Gaussiana. Uma aproximação por diferenças finitas é utilizada para os termos do lado esquerdo da equação (1).

3. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA E SOLUÇÃO DO PROBLEMA INVERSO

Este trabalho objetiva obter as estimativas para o seguinte vetor de incógnitas:

$$\vec{Z} = \{\sigma_{s1}, k_{a1}, \sigma_{s2}, k_{a2}\}^T \quad (2)$$

utilizando as medidas experimentais da intensidade de radiação emergente nas superfícies de contorno em $x=0$ e $x=L_1 + L_2$, e também, na interface entre as duas camadas, isto é, $x=L_1$.

Neste trabalho, dados experimentais reais não estão disponíveis e as intensidades experimentais, Y_i , são então simuladas, calculando-se os valores da intensidade, I , com a solução do problema (1) usando os valores exatos dos parâmetros. Aos valores calculados da radiação, são adicionados ruídos aleatórios de uma distribuição normal com média zero, simulando erros experimentais:

$$Y_i = I_i(\vec{Z}_{exato}) + \sigma_e * r_i \quad (3)$$

onde r_i são números aleatórios de uma distribuição normal com média zero e desvio padrão unitário, e σ_e simula o desvio padrão dos erros de medição.

Considere que as medidas experimentais de radiação em ambos os contornos e na interface entre as camadas podem ser obtidos, com sensores externos e internos, respectivamente, em diferentes ângulos polares. Assim, temos à disposição Y_i , para $i=1, 2, 3, \dots, N_d$, onde N_d é o número total de dados experimentais, que é muito maior que o número de parâmetros a serem estimados ($N_{un}=4$). Este problema inverso pode, então, ser formulado como um problema de otimização, onde buscamos minimizar a função objetivo dada pelo somatório dos quadrados dos resíduos:

$$Q(\vec{Z}) = \sum_{i=1}^{N_d} [I_i(\vec{Z}) - Y_i]^2 = \vec{R}^T \vec{R} \quad (4)$$

Para a minimização da função objetivo dada pela eq. (4), neste trabalho, será utilizado o algoritmo de vagalumes, cuja descrição é dada em maiores detalhes a seguir.

3.1. Algoritmo de Vagalumes (*Firefly Algorithm* - FA)

Para uma melhor compreensão do algoritmo de vagalumes (FA) [11], 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. A intensidade de emissão de luz por parte de um vagalume é proporcional à função objetivo, porém a intensidade de luz percebida por um vagalume decai em função da distância entre os vagalumes. Logo, a intensidade percebida por um vagalume é dada por: $J(r) = J_0 e^{-\gamma r^2}$, em que J_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; γ é o parâmetro de absorção da luz pelo meio. Este trabalho irá utilizar o modelo tradicional do fator de atratividade que pode ser formulado como:

$$\beta = \beta_0 e^{-\gamma r^2} \quad (5)$$

onde β_0 é a atratividade para uma distância $r=0$, e pode ser fixado em $\beta_0=1$. Assim, a movimentação em um dado passo de tempo t de um vagalume i em direção a um melhor vagalume j é definida como:

$$x_i^t = x_i^{t-1} + \beta(x_j^{t-1} - x_i^{t-1}) + \alpha(rand - \frac{1}{2}) \quad (6)$$

onde o segundo termo do lado direito da equação insere o fator de atratividade enquanto o terceiro termo, regulado pelo parâmetro α , insere aleatoriedade no caminho percorrido pelo vagalume; $rand$ é um número aleatório de uma distribuição uniforme entre 0 e 1. O Pseudocódigo do algoritmo dos vagalumes (FA) é apresentado na Figura 2.

```

Início
Definir a função objetivo;
Definir os parâmetros  $n, \alpha, \gamma, \beta_0, MaxGerações$ ;
Gerar a população inicial de vagalumes  $x_i = (1, 2, \dots, n)$ ;
Para  $i=1$  até  $MaxGerações$ ;
    Calcular a intensidade  $I_i$  para  $x_i$  proporcionalmente à função objetivo;
    Para  $t=1$  até  $n$ ;
        Calcular o fator de atratividade  $\beta$  de acordo com  $e^{-\gamma r^2}$ ;
        Mover o vagalume  $i$  em direção aos vagalumes mais brilhantes.
        Verificar se o vagalume está dentro dos limites;
    Fim-Para
Fim-Para
Pós-processar e visualizar os resultados
Fim
    
```

Figura 2. Pseudocódigo do algoritmo de vagalumes.

A partir da versão canônica do algoritmo de vagalumes, foram desenvolvidas duas variações que serão brevemente descritas a seguir.

3.2. Estratégia Centro de Massa com Fuzzy (FAcom)

A abordagem de se usar o centro de massa de massa foi proposta por Gandomi e Alavi [5]. Este trabalho implementou uma versão da ideia onde os movimentos dos enxames de vagalumes estão atrelados ao posicionamento do centro de massa. O enxame, visto como uma área, possui um ponto central que é o seu centro de massa. Este é calculado utilizando-se o valor da função objetivo referente a cada vagalume. Quanto mais próximo um determinado vagalume estiver do centro de massa, maior será o bônus que irá receber. A ideia do bônus está associado ao conceito Fuzzy que veio de Becceneri [3]. Assim, estes bônus estão distribuídos em três zonas onde a intensidade de luz de um vagalume é comparada com a do que está no centro de massa. Dependendo da zona onde o vagalume analisado se encontra, ele receberá um coeficiente de absorção de luz γ , e um parâmetro de randomização α distinto. Tais diferenciações acabam gerando diferentes graus de atratividade β . A movimentação do vagalume, por sua vez, segue os mais brilhantes do grupo. Isso faz com que nas rodadas iniciais, nem sempre os vagalumes mais próximos dos mais brilhantes serão aqueles que irão ganhar um bônus extra. Com o passar das iterações há a tendência do centro de massa e do vagalume mais brilhante se deslocarem para a mesma região. Assim, os vagalumes que estiverem mais bem posicionados tanto em relação ao centro de massa, quanto ao vagalume mais brilhante serão os mais beneficiados.

3.3. Estratégia Epidemia (FAEP)

Esta estratégia baseia-se na ideia de se fazer com que haja uma predação [7], isto é, que haja uma “praga” que dizime um determinado percentual de vagalumes menos brilhantes (seleção natural) depois de um número predeterminado de gerações sem mudança no melhor valor encontrado para a função objetivo. A quantidade de vagalumes que é eliminada é repostada pela geração de novos vagalumes em posições aleatórias do domínio. Esta variante permite que novas posições dentro do domínio possam ser investigadas.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Considere um caso teste dado por um meio heterogêneo composto por dois planos paralelos com espalhamento isotrópico. Como a radiação externa é isotrópica podemos então definir que: $f_1(\mu) = A_1$ e $f_2(\mu) = A_2$. Assim, a radiação externa está ajustada para $A_1 = 0,3$ e $A_2 = 1,0$. A Tabela 1 apresenta os valores dos parâmetros do problema, utilizados no caso teste em consideração. Os dados utilizados na Tabela 1 estão baseados em Silva Neto e Becceneri [9]. A Tabela 2 apresenta os valores dos parâmetros utilizados em cada um dos algoritmos testados. Na Tabela 3 é apresentado um resumo dos resultados obtidos com o FA e suas variações aqui desenvolvidas, onde \vec{Z}_{exato} apresenta o valor exato, \vec{Z}_{pior} a pior estimativa e \vec{Z}_{melhor} a melhor estimativa. O desvio padrão está representado por σ_z e a média por μ_z . O coeficiente de variação é dado por $(\sigma_z / \mu_z) * 100\%$. Os parâmetros de execução dos algoritmos estão apresentados na Tabela 2. Os algoritmos foram implementados na linguagem C++ através do ambiente DevC++. Foram executados em um PC com processador Intel Core2 Duo CPU T6670 @2.20GHz, 2.96GB RAM, e sistema operacional Windows 7.0 de 32 bits. A execução completa (30 rodadas – Tabela 2), de cada um dos métodos, levou aproximadamente 44 horas.

Propriedade	Parâmetro	Legenda
L_1 (m)	0,8	Espessura da camada 1
L_2 (m)	3,2	Espessura da camada 2
σ_{s1} (m ⁻¹)	0,8	Coefficiente de espalhamento da camada 1
k_{a1} (m ⁻¹)	0,5	Coefficiente de absorção da camada 1
σ_{s2} (m ⁻¹)	0,9	Coefficiente de espalhamento da camada 2
k_{a2} (m ⁻¹)	0,3	Coefficiente de absorção da camada 2
ρ_1	0,1	Reflectividade difusa camada 1 lado esquerdo
ρ_2	0,0	Reflectividade difusa camada 1 lado direito
ρ_3	0,0	Reflectividade difusa camada 2 lado esquerdo
ρ_4	0,6	Reflectividade difusa camada 2 lado direito

Tabela 1: Valores para o caso de teste para o meio de duas camadas.

Os resultados apresentados na Tabela 3 mostram que a implementação da variação FAcom foi aquela que obteve a melhor estimativa do conjunto, com relação à função objetivo. O desvio padrão associado à função objetivo, também, foi o que apresentou a menor dispersão quando comparado com o do FAEP. Este fato levou, também, a que tenha obtido o menor coeficiente de variação do parâmetro no conjunto de amostragem para todos os parâmetros estimados. A versão canônica do FA apresentou, para o parâmetro da função objetivo, o pior resultado para o parâmetro \vec{Z}_{melhor} (uma ordem de grandeza de diferença para os demais) e, também, ficou com o pior resultado da amostragem. Verifica-se, também, que os coeficientes de variação da camada 2 apresentam melhores resultados que os da camada 1. A maior entrada de radiação pela camada 2 parece compensar a sua espessura óptica maior. A Figura 3 apresenta o gráfico de evolução da função objetivo para os melhores resultados encontrados no Caso teste, em cada estratégia, após todas as 30 execuções com a barra de erro associada ao desvio padrão.

A Figura 3 mostra que o FAc com convergiu rapidamente, com menos de 5 mil acessos à função objetivo, para uma posição de mínimo que só foi melhorada perto dos 30 mil acessos. A implementação do FA convergiu para o seu valor final, também, antes de concluírem 5 mil acessos à função objetivo. Este comportamento pode indicar que, neste caso, o algoritmo apresentou dificuldade na realização de uma busca fina na região do mínimo global. A versão FAEP seguiu o mesmo comportamento das demais versões, mas conseguiu melhorar sua estimativa após um longo período de estagnação.

Algoritmo	Parâmetro	Valor
TODOS	Número de rodadas	30
	Nível de ruído	até 3,5% ($\sigma_e = 0,002$)
	População	40
	Número de Gerações	800
FA	Coefficiente de aleatoriedade	0,2
	Coefficiente de absorção	1,0
FAcom	Varição do coeficiente de aleatoriedade	área 1 = 0,02, área 2 = 0,05 área 3 = 0,10, área 4 = 0,20
	Varição do coeficiente de absorção	área 1 = 0,20, área 2 = 0,50 área 3 = 0,80, área 4 = 1,00
FAEP	Coefficiente de aleatoriedade	0,2
	Coefficiente de absorção	1,0
	Percentual de eliminação	90%
	Frequência	20 gerações sem alteração

Tabela 2: Parâmetros utilizados nos testes para cada algoritmo.

\bar{Z}_{exato}	$\sigma_{s1} = 0,8$	$k_{a1} = 0,5$	$\sigma_{s2} = 0,9$	$k_{a2} = 0,3$	$Q(\bar{Z})$	
FA	\bar{Z}_{pior}	0,831	0,471	0,916	0,296	5,386E-05
	\bar{Z}_{melhor}	0,800	0,483	0,900	0,295	1,031E-05
	μ_Z	0,809	0,483	0,907	0,295	2,607E-05
	σ_Z	0,015	0,006	0,005	0,002	1,086E-05
	$(\sigma_Z / \mu_Z) * 100\%$	1,862	1,141	0,602	0,533	41,663
FAcom	\bar{Z}_{pior}	0,810	0,484	0,904	0,294	1,676E-06
	\bar{Z}_{melhor}	0,809	0,483	0,906	0,294	1,261E-06
	μ_Z	0,809	0,483	0,906	0,294	1,448E-06
	σ_Z	1,010E-03	4,048E-04	7,534E-04	1,890E-04	1,092E-07
	$(\sigma_Z / \mu_Z) * 100\%$	0,125	0,084	0,083	0,064	7,542
FAEP	\bar{Z}_{pior}	0,813	0,494	0,907	0,294	4,748E-05
	\bar{Z}_{melhor}	0,804	0,487	0,901	0,294	8,160E-06
	μ_Z	0,807	0,484	0,906	0,294	2,722E-05
	σ_Z	0,016	0,005	0,006	0,002	1,047E-05
	$(\sigma_Z / \mu_Z) * 100\%$	1,929	1,120	0,628	0,603	38,452

Tabela 3: Resultados de FA, FAc om, e FAEP para o Caso teste com erro de até 5%.

5. CONCLUSÕES

Neste trabalho foi feito um estudo comparativo envolvendo a heurística conhecida como algoritmo de vagalumes, FA (*Firefly Algorithm*), na minimização da função objetivo para solução de um problema inverso de estimativa de parâmetros em um problema inverso de transferência radiativa em um meio heterogêneo de duas camadas. Foram propostas duas variações a partir do algoritmo canônico. Os resultados mostram que, embora o algoritmo canônico seja muito competitivo, as estratégias propostas obtiveram resultados melhores dentro do contexto do teste proposto.

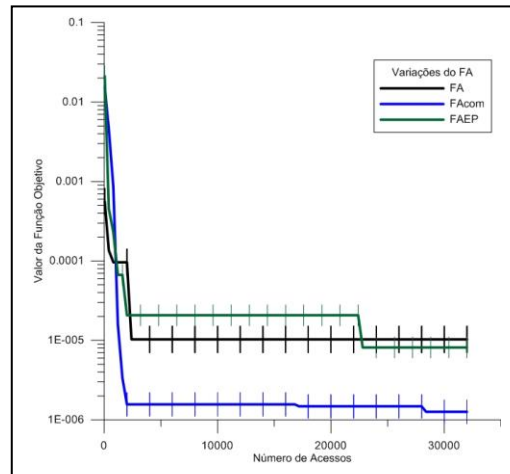


Figura 3: Evolução da função objetivo para \vec{Z}_{melhor} .

Agradecimentos

Os autores agradecem ao suporte financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq e da Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ.

Referências

- [1] Arridge, S.R., Optical tomography in medical imaging, inverse problems, v. 15, p. R41 – R93, 1999.
- [2] Becceneri, J. C.; Stephany, S.; Campos Velho, H. F.; Silva Neto, A.J., Solution of the inverse problem of radiative properties estimation with the particle swarm optimization technique, 14th Inverse Problems In Engineering Seminar, 2006.
- [3] Becceneri, J. C.; Sandri, S.; Campos Velho, H. F. et al., Fuzzy ant colony optimization for estimating chlorophyll concentration profile in offshore sea water, Inverse Problems in Science and Engineering, v. 16, 6, p. 705-715, 2008.
- [4] Cirino, R. L.; Knupp, D. C.; Silva Neto, A.J., Aplicação do algoritmo dos vagalumes na identificação simultânea da espessura óptica e albedo com variação espacial em um problema de transferência radiativa – CNMAC, 2012.
- [5] Gandomi, A. H.; Alavi, A. H., Krill herd: a new bio-inspired optimization algorithm. Commun Nonlinear Sci Numer Simulat, v. 17, p. 4831 – 4845, 2012.
- [6] Knupp, D. C., Silva Neto, A. J., An inverse analysis of the radiative transfer in a two-layer heterogeneous medium, Inverse Problems in Science and Engineering, p. 1-23, 2011.
- [7] Pacheco da Luz, E. F.; Becceneri, J. C.; Campos Velho, H. F., Algoritmo paralelo de vagalumes com predação na identificação de condição inicial na equação do calor – XV Simpósio de Pesquisa Operacional e Logística da Marinha, 2012.
- [8] Silva Neto, A. J. e Moura Neto, F. D., Problemas Inversos – Conceitos Fundamentos e Aplicações, Ed. UERJ, 2005.
- [9] Silva Neto, A. J. e Becceneri, J. C., Técnicas de Inteligência Computacional Inspiradas na Natureza – Aplicação em Problemas Inversos em Transferência Radiativa – Notas em Matemática Aplicada 2ª Edição – SBMAC – v. 41, 2012.
- [10] Soeiro, J. C. P. F.; Silva Neto, A.J., Inverse radiative transfer problems in two-layer participating media – III European Conference on Computational Mechanics Solids, Structures and Coupled Problems in Engineering, Lisboa, Portugal, 2006.
- [11] Yang, Xin-She, Nature-Inspired Metaheuristic Algorithms, Luniver Press, 2008.