



IMPLEMENTAÇÃO DE ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO COM ENXAME DE PARTÍCULAS

L. C. G. GONÇALES¹ e C. B. B. COSTA¹

¹ Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Engenharia Química
E-mail para contato: leonardo.gloeden@hotmail.com

RESUMO – Desde 2009, o grupo de pesquisadores em simulação de processos do Departamento de Engenharia Química (DEQ) da UFSCar vem desenvolvendo uma biorrefinaria virtual de cana-de-açúcar no simulador nacional EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*) com o objetivo de avaliar a viabilidade econômica, operacional e ambiental da implementação de novas tecnologias de produção de bioetanol a partir da biomassa de cana-de-açúcar, que devem estar integradas à tecnologia de produção de bioetanol de primeira geração e de bioenergia. Nesse sentido, surgiu a necessidade de que a plataforma de simulação dispusesse de uma ferramenta de otimização multiobjetivo. Este trabalho apresenta a implementação de um algoritmo de otimização multiobjetivo com enxame de partículas (MOPSO), que faz uso da distância inter-partículas na seleção do líder das partículas durante o processo de busca. O algoritmo foi avaliado segundo métricas propostas na literatura e se mostrou muito eficaz na otimização de multifunções em que conhecia a Frente Ótima de Pareto (solução do problema). As métricas mostraram que o algoritmo encontrou muitas partículas pertencentes à verdadeira Frente Ótima de Pareto e uma boa capacidade de exploração no intervalo delimitado das variáveis otimizadas.

1. INTRODUÇÃO

O bioetanol representa uma das alternativas energéticas mais importantes da atualidade e o Brasil é líder mundial de produção de cana-de-açúcar, a matéria-prima mais econômica para a produção desse biocombustível. Portanto, o desenvolvimento de tecnologias e programas que visam ampliar e otimizar a produção de bioetanol são de imensa importância para o país. Nesse cenário, a produção de bioetanol a partir da biomassa de cana-de-açúcar tem grande potencial, mas as tecnologias em desenvolvimento para sua produção devem ser avaliadas e otimizadas segundo multicritérios, de caráter econômico, operacional e ambiental.

Otimização multiobjetivo de processos químicos tem recebido atenção considerável nos últimos anos. Foi particularmente impulsionada pela disponibilidade de tecnologias eficientes de base populacional, que têm uma clara vantagem para a geração de ótimos de Pareto bem distribuídos e melhores soluções em relação aos métodos clássicos (Sedenka e Zbynek, 2010). O foco principal destes estudos tem sido encontrar o conjunto de soluções



ótimas de Pareto ou Frente Ótima de Pareto, que fornece uma explicação qualitativa dos papéis e dos resultados das variáveis-decisão e a melhor ponderação entre os objetivos.

O Departamento de Engenharia Química (DEQ) da UFSCar vem desenvolvendo uma biorrefinaria virtual de cana-de-açúcar no simulador nacional EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*) com o objetivo de avaliar a viabilidade econômica, operacional e ambiental da implementação de novas tecnologias de produção de bioetanol a partir da biomassa de cana-de-açúcar. Para que essa avaliação seja conseguida, vários problemas de otimização podem ser formulados.

O algoritmo de Enxame de Partículas (PSO) para otimização mono-objetivo está implementado na plataforma de simulação EMSO. No entanto, surgiu a necessidade de que a plataforma de simulação dispusesse de uma ferramenta de otimização multiobjetivo, podendo otimizar critérios de processo aliados a critérios econômicos e ambientais.

Este trabalho apresenta o algoritmo de otimização multiobjetivo com enxame de partículas (MOPSO) escolhido para ser implementado no EMSO. Trata-se do algoritmo desenvolvido por Raquel e Naval (2005), que se utiliza da distância inter-partículas (*crowding distance*) na seleção do líder das partículas durante seu voo na busca pela soluções ótimas. A capacidade exploratória do algoritmo, a quantidade de soluções verdadeiramente ótimas encontradas e o espalhamento das soluções são avaliadas e discutidas em problemas *benchmark* de otimização multiobjetivo em que os respectivos ótimos de Pareto são conhecidos.

2. OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO COM PSO

Um problema geral de otimização multiobjetivo de minimização pode ser escrito da seguinte forma: encontre o vetor $\vec{x}^* = [x_1^*, \dots, x_n^*]^T$ que satisfaz o vetor de inequações $\mathbf{g}(\vec{x})$, que representa as k restrições de desigualdade,

$$g_i(\vec{x}^*) \leq 0 \quad i = 1, 2, 3, \dots, k \quad (1)$$

o vetor $\mathbf{h}(\vec{x})$, que representa as p restrições de igualdade,

$$h_i(\vec{x}^*) = 0 \quad i = 1, 2, 3, \dots, p \quad (2)$$

e minimiza o vetor de M funções-objetivo,

$$\vec{f}(\vec{x}) = [f_1(\vec{x}), f_2(\vec{x}), \dots, f_M(\vec{x})]^T \quad i = 1, 2, 3, \dots, M \quad (3)$$

onde $\vec{x}^* = [x_1^*, \dots, x_n^*]^T$ é o vetor de variáveis-decisão.

As Eq. (1)-(3) exibem uma representação matemática de um problema geral de otimização multiobjetivo, onde um vetor de soluções deve satisfazer tanto as condições de igualdade quanto as de desigualdade e minimizar o vetor de funções-objetivo. O desafio está em como solucionar esse problema uma vez que, comumente, apresentam-se objetivos



conflitantes. Estende-se, portanto, o conceito de ótimo, através dos conceitos de dominância e não-dominância. Se a solução x_2 for melhor em todos os objetivos que a solução x_1 , diz-se que x_2 domina x_1 . Entretanto, se a solução x_2 é pior do que x_1 em um pelo menos um único objetivo, então x_2 não domina x_1 e, em x_2 sendo melhor do que x_1 em pelo menos um objetivo, x_1 não domina x_2 .

O conjunto das soluções que não são dominadas por qualquer outra solução é chamado de conjunto ótimo de Pareto (Sedena e Zbynek, 2010). Portanto uma solução ótima é aquela não-dominada por nenhuma outra solução do espaço de busca de variáveis e denomina-se Frente Ótima de Pareto o conjunto formado por todas as soluções não-dominadas do espaço de busca (Abraham *et al.*, 2005).

Nas abordagens da literatura que estendem o PSO para problemas multiobjetivos segundo a otimalidade de Pareto, há a utilização de partículas como líderes, de modo a preferir partículas não-dominadas a partículas dominadas (Sierra e Coello Coello, 2006). Em problemas de otimização multiobjetivo, cada partícula pode ter um conjunto de líderes diferente, dos quais apenas um é selecionado para atualizar a sua posição. Esse conjunto de líderes é normalmente selecionado a partir de um repositório, chamado de arquivo externo (Sierra e Coello Coello, 2006). O repositório armazena as soluções não-dominadas até então e é atualizado nas iterações, sendo a resposta final do algoritmo o repositório com as soluções não-dominadas encontradas durante toda a execução.

```
Início
  Inicializar enxame
  Inicializar líderes no arquivo externo
  Qualificar (líderes)
  g=0
  Enquanto g < gmax
    Para cada partícula
      Selecionar líder
      Atualizar posição (Vôo)
      Mutação
      Avaliação
      Atualizar pbest
    Fim
    Atualizar líderes no arquivo externo
    Qualificar (líderes)
  g++
  Fim
  Exibir resultados no arquivo externo
Fim
```

Figura 1 – Algoritmo Geral de MOPSO (Sierra e Coello Coello, 2006).

Um algoritmo de MOPSO geral pode ser escrito como na Figura 1. Primeiramente, a população é inicializada e, em seguida, um conjunto de líderes é gerado com as partículas não-dominadas do enxame até então. Então os líderes são avaliados por alguma medida



qualitativa para selecionar um líder para todo o enxame. A cada geração, um líder é escolhido e ele auxiliará na exploração das partículas. No *loop* principal do algoritmo, para cada partícula é selecionado um líder pertencente ao repositório externo. Com a posição do líder local, do líder de todo enxame e com a posição anterior da partícula, é realizada a alteração da posição da partícula (vôo). A maioria das propostas MOPSO também inclui um operador de mutação após cada exploração de cada geração. Após a mutação são avaliados os valores das funções-objetivo correspondentes aos valores das variáveis. Assim, é comparado o líder local da partícula *pbest* com a nova posição da partícula e, se esta dominar aquela, então o *pbest* é atualizado. Dessa forma, todo o repositório é atualizado.

A seleção e atualização de líderes (como o algoritmo escolhe um líder dentre as soluções não-dominadas e como seleciona as soluções que permanecerão no arquivo externo na próxima iteração), a forma com que o algoritmo cria novas soluções e como explora efetivamente o espaço viável são, no entanto, características que variam de algoritmo para algoritmo.

3. PRINCIPAIS FERRAMENTAS DO ALGORITMO DE RAQUEL E NAVAL (2005)

Apesar de os MOPSO se comportarem de forma geral parecida, existem muitas diferenças no funcionamento das etapas da execução. A seguir estão abordadas as principais ferramentas do algoritmo proposto por Raquel e Naval (2005).

3.1. Estimador de Densidade do Vizinho mais Próximo

O principal objetivo do estimador de densidade do vizinho mais próximo é proporcionar maior capacidade de exploração por parte do enxame ao selecionar como líderes partículas com vizinhanças menos populosas (Raquel e Naval, 2005). Esse estimador é utilizado principalmente nas etapas de qualificação das partículas não-dominadas encontradas (líderes), em que são determinados os líderes locais e os líderes globais a cada iteração. O estimador determina as distâncias populacionais entre as duas partículas mais próximas do arquivo de soluções não-dominadas e, com estes valores, determina os líderes que estão em regiões menos populosas, com o intuito de que num próximo vôo aquela região seja melhor explorada na busca por ótimos. A estimativa de densidade populacional é calculada a partir de um conjunto de soluções não-dominadas organizadas em ordem crescente de valores da função-objetivo. Nesse conjunto é feita uma média da distância das duas soluções vizinhas mais próximas. Assim, menores valores do estimador de densidade populacional representam soluções com vizinhança mais populosa.

3.2. Seleção de Líderes

No Enxame de Partículas Multiobjetivo com Distância Populacional (MOPSO-CD), o líder global das partículas do enxame é selecionado dentre as soluções não-dominadas com os valores mais altos do estimador de densidade populacional a partir da parte superior do repositório (10% das partículas) de soluções não-dominadas. Este é organizado em ordem decrescente de valores do estimador de densidade populacional, o que permite que, ao ser escolhido um líder da parte superior do arquivo, as partículas do enxame avancem para as



soluções não-dominadas que estão em áreas menos exploradas no espaço-objetivo (Raquel e Naval, 2005).

Além disso, sempre que o arquivo está cheio, o estimador de densidade populacional é novamente utilizado para a seleção de qual solução será substituída no arquivo. Isto promove diversidade entre as soluções armazenadas no arquivo, uma vez que soluções que estão em áreas mais populosas são mais suscetíveis à substituição (Raquel e Naval, 2005).

3.3 Mutação

Segundo os autores (Raquel e Naval, 2005), o operador de mutação do MOPSO foi adaptado para melhorar a capacidade exploratória do algoritmo, inicialmente realizando mutação em toda a população, mas diminuindo sua atuação ao longo do tempo. Basicamente, o operador de mutação gera valores aleatórios dentro do espaço de busca e substitui esses valores em uma das variáveis de algumas partículas do enxame, gerando uma mudança brusca em seu andamento. Segundo os autores, isso é útil em termos de evitar convergência prematura devido a ótimos locais existentes em alguns problemas de otimização que podem estagnar o enxame.

3.4 Tratamento de Restrições

Com o intuito de lidar com as restrições envolvidas no problema de otimização multiobjetivo, o MOPSO-CD adaptou o mecanismo de tratamento de restrições usado pelo NSGA-II (*Nondominated Sorting Genetic Algorithm*) devido à sua simplicidade de avaliar a viabilidade e a não-dominância de soluções quando comparadas. A solução i restrita domina uma solução j se qualquer uma das seguintes condições for verdadeira:

- A solução i é viável e solução j não.
- Ambas as soluções i e j são inviáveis, mas i tem menor grau de violação de restrição.
- Ambas as soluções i e j são viáveis e a solução i domina a solução j .

4. MÉTRICAS AVALIADORAS

A fim de permitir uma avaliação quantitativa do desempenho do algoritmo de otimização multiobjetivo, três questões são normalmente levadas em consideração: a maximização do número de soluções na frente ótima encontrada; a minimização da distância entre a frente ótima produzida pelo algoritmo e a verdadeira Frente Ótima de Pareto (supondo que sua localização seja conhecida) e; a maximização do espalhamento das soluções na frente ótima encontrada. A avaliação quantitativa do desempenho do algoritmo foi feita, neste trabalho, segundo três métricas, discutidas a seguir.

4.1. Distância Geracional (GD)

O conceito de Distância Geracional foi introduzida por Van Veldhuizen e Lamont, (1998) (*apud* Coello Coello *et al.*, 2004) como uma forma de estimar o quão longe os



elementos estão, no conjunto de vetores não-dominadas encontrados até então, do conjunto de Pareto ótimo verdadeiro, sendo definido pela Equação (4)

$$GD = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n d_i^2}}{n} \quad (4)$$

em que n é o número de soluções não-dominadas encontradas e d_i é a distância euclidiana (medida no espaço objetivo) entre cada uma destas partículas e o membro mais próximo do conjunto ótimo de Pareto verdadeiro. Um valor de nulo de GD indica que todos os elementos são gerados no conjunto ótimo de Pareto. Vale ressaltar que para se utilizar esse critério de avaliação, a Frente Ótima de Pareto do problema avaliado deve ser conhecida.

4.2. Espaçamento (SP)

Nesse critério, se deseja medir a propagação (distribuição) de todos os vetores não-dominados encontrados. Para avaliar o quão bem distribuídas são as soluções, Schott (1995) propôs uma métrica que mede a distância entre os vetores vizinhos não-dominados, definida pela Equação (5)

$$SP \triangleq \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\bar{d} - d_i)^2} \quad (5)$$

em que $d_i = \min_j (|f_1^i(\vec{x}) - f_1^j(\vec{x})| + |f_2^i(\vec{x}) - f_2^j(\vec{x})| \dots |f_m^i(\vec{x}) - f_m^j(\vec{x})|)$, $i, j = 1, \dots, n$, \bar{d} é a média de todos os d_i , e n é o número de vetores não-dominados encontrados (corresponde ao número de soluções não-dominadas). Um valor de zero para esta métrica indica que todos os membros da frente ótima são espaçados de forma equidistante.

4.3 Taxa de erro (ER)

Essa métrica, dada pela Equação (6) foi proposta por Van Veldhuizen, 1999 (*apud* Coello Coello *et al.*, 2004) para indicar a porcentagem de soluções (dos vetores não-dominadas encontrados) que não são membros do verdadeiro conjunto ótimo de Pareto

$$ER = \frac{\sum_{i=1}^n e_i}{n} \quad (6)$$

em que n é o número de vetores, no atual conjunto de vetores não-dominados disponível, $e_i = 0$ se o vetor i é um membro do conjunto ótimo de Pareto e, caso contrário $e_i = 1$. Deve então ficar claro que ER nulo indica um comportamento ideal, significando que todos os vetores gerados pelo algoritmo pertencem ao conjunto ótimo de Pareto.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Apresentam-se aqui dois problemas benchmark de otimização multiobjetivo, compostos de funções matemáticas, e seus respectivos resultados, avaliados pelas métricas citadas. Os testes foram realizados a partir de uma população de 100 partículas, probabilidade de mutação de 50% (em metade do número total de iterações a mutação foi aplicada), tamanho do arquivo externo de 500 e 100 gerações de vôo do enxame, com 5 réplicas.

O primeiro problema de otimização multiobjetivo adotado foi desenvolvido por Deb (1999), Equações (7)-(9)

$$\text{Minimizar: } f_1(x_1, x_2) = x_1 \quad (7)$$

$$\text{Minimizar: } f_2(x_1, x_2) = \frac{g(x_2)}{x_1} \quad (8)$$

$$g(x_2) = 2.0 - \exp\left\{-\left(\frac{x_2 - 0.2}{0.004}\right)^2\right\} - 0.8 \exp\left\{-\left(\frac{x_2 - 0.6}{0.4}\right)^2\right\} \quad (9)$$

O espaço de busca é definido por $0,1 \leq x_1, x_2 \leq 1,0$. A Frente Ótima de Pareto desse problema é conhecida. O problema apresenta pontos de mínimo local para valores próximos de $x_2 \cong 0,6$ e pontos de mínimo global para $x_2 \cong 0,2$.

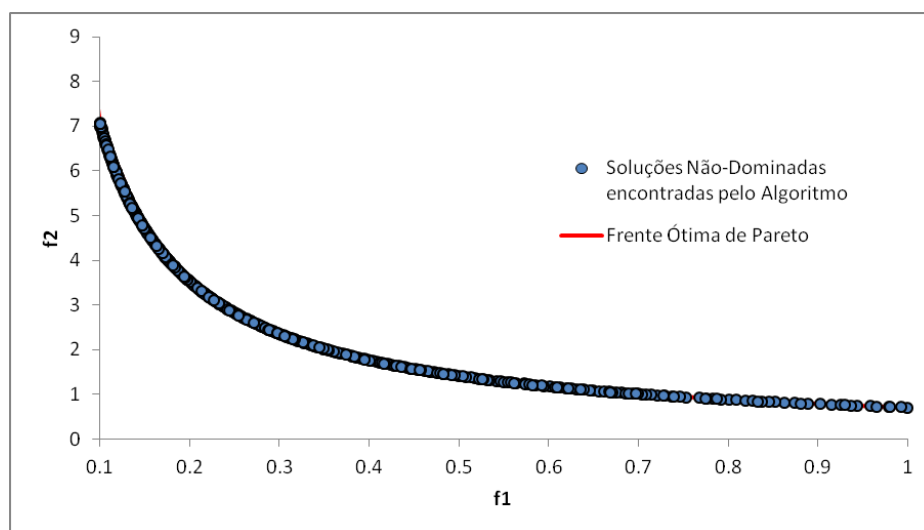


Figura 2 – Otimização do problema proposto por Deb (1999).

Tabela 1 – Resultado das métricas para o problema proposto por Deb (1999)

<i>GD</i>	<i>1.94E-04</i>
<i>SP</i>	<i>2.51E-05</i>
<i>ER</i>	<i>0.0</i>
<i>ND</i>	<i>500</i>

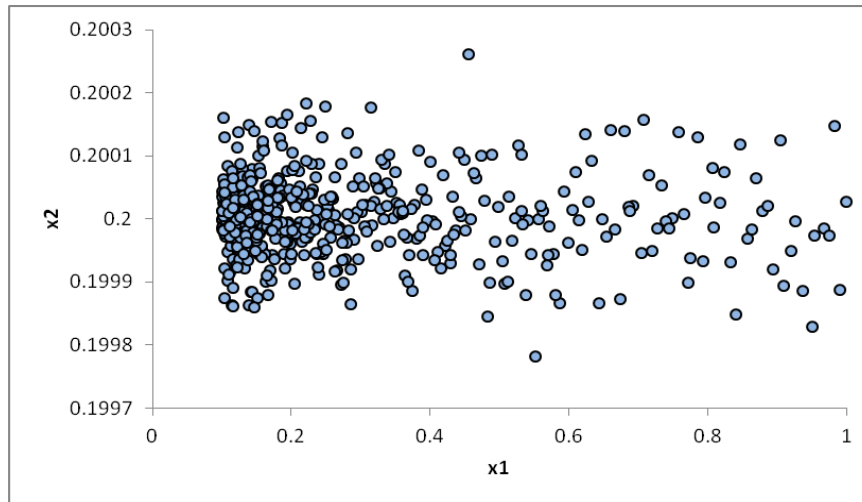


Figura 3 – Soluções não-dominadas encontradas para o problema proposto por Deb (1999).

As Figuras 2 e 3 apresentam, respectivamente, o espaço de funções e de busca para as soluções não dominadas encontrada pelo algoritmo. A Figura 2 apresenta ainda a Frente Ótima de Pareto (praticamente encoberta pelas soluções não-dominadas encontradas). Já a Tabela 1 traz os valores médios (nas 5 réplicas) das métricas avaliadoras e o número de partículas não-dominadas (ND) encontradas. Pode-se verificar que para este problema o algoritmo não apresentou dificuldades em encontrar a Frente Ótima Verdadeira, uma vez que não houve taxa de erro, a distância geracional foi muito baixa, indicando alta proximidade da frente produzida com a verdadeira Frente de Pareto. Além do mais, o baixo valor de espaçamento indica uniformidade no espalhamento das partículas não-dominadas. Vale ressaltar que o número de partículas não-dominadas também foi muito alto, já que todo o repositório foi preenchido (ND = 500). Ademais, pode-se verificar na Figura 3 que os valores das variáveis das partículas para x_2 se acumulam realmente em 0,2 onde se localiza o ótimo global do problema, enquanto x_1 se distribui melhor ao longo do intervalo determinado. O tempo de execução do código foi de 22,3 segundos.

O segundo problema de otimização multiobjetivo adotado foi desenvolvido por Okabe *et al.* (2003), representado pelas Equação (10)-(11).

$$\text{Minimizar: } f_1(x_1, x_2, x_3) = x_1 \quad (10)$$

Minimizar:

$$f_2(x_1, x_2, x_3) = 1 - \frac{(x_1 + \pi)^2}{4\pi^2} + |x_2 - 5 \cos(x_1)|^{\frac{1}{3}} + |x_3 - 5 \sin(x_1)|^{\frac{1}{3}} \quad (11)$$

O espaço de busca é definido por $-\pi < x_1, x_2, x_3 < \pi$. O problema tem a Frente Ótima de Pareto verdadeira representada por uma curva dada por $f_2 = 3 - \frac{(f_1 + \pi)^2}{4\pi^2}$ e $f_1 \in [-\pi, \pi]$. A configuração gráfica dos resultados está apresentada na Figura 4 enquanto os valores médios das métricas avaliadoras e o número de partículas não-dominadas estão na Tabela 2. Para este

caso não se graficaram os valores das três variáveis x_1 , x_2 , x_3 , uma vez que seria de difícil visualização.

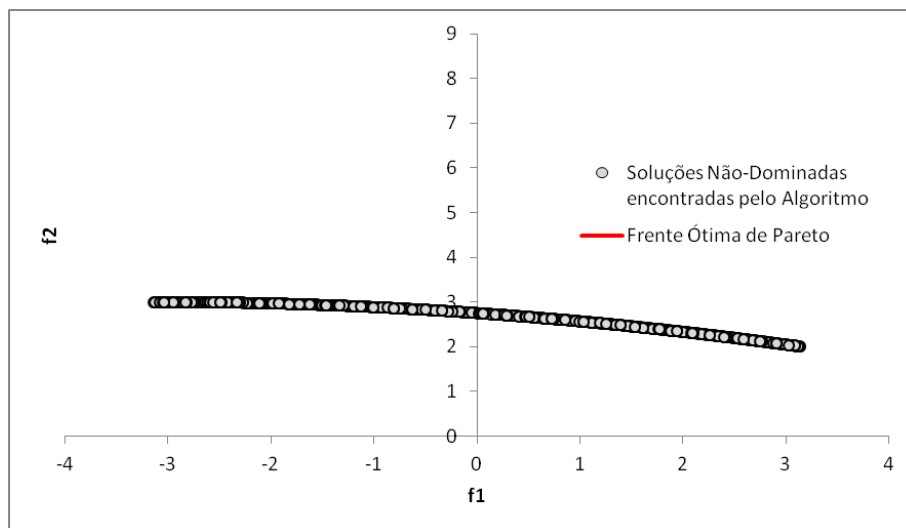


Figura 4 – Otimização do problema proposto por Okabe *et al.* (2003).

Tabela 2 - Resultado das Métricas para o Problema proposto por Okabe *et al.* (2003)

<i>GD</i>	<i>0.0</i>
<i>SP</i>	<i>2.31E-05</i>
<i>ER</i>	<i>0.0</i>
<i>ND</i>	<i>500</i>

O algoritmo novamente foi muito preciso em encontrar a verdadeira Frente Ótima de Pareto. Praticamente, toda a curva foi preenchida com as 500 partículas não-dominadas encontradas. O valor de distância geracional foi da ordem de 10^{-23} , ou seja, a distância entre a Frente de Pareto e a frente produzida é praticamente nula. A taxa de erro foi também nula, não havendo nenhum membro não pertencente ao ótimo de Pareto. A uniformidade do espalhamento do conjunto também foi mantida e com um valor de SP muito próximo ao problema anterior. O tempo de execução do código foi de 75,5 segundos.

Vale ressaltar que, para ambos os problemas considerados, a Frente Ótima de Pareto está praticamente toda ocupada pelas soluções não-dominadas encontradas pelo algoritmo. O espalhamento das soluções é muito eficaz graças às ferramentas de dispersão do algoritmo: mutação e a escolha de melhores locais de cada partícula e melhor global usando a ferramenta de densidade populacional.

6. CONCLUSÃO

Algoritmos com enxame de partículas para otimização multiobjetivo são muito eficientes para o mapeamento das soluções ótimas possíveis. Este trabalho exibiu a elevada capacidade de otimização do algoritmo multiobjetivo MOPSO-CD de Raquel e Naval (2005),



que apresentou ótima capacidade exploratória e elevado número de partículas pertencentes ao ótimo de Pareto. O algoritmo mostrou-se robusto na otimização, não apresentando soluções fora do espaço de busca e com taxas de erro muito próximas ao zero. Esse foi, portanto, o algoritmo selecionado para implementação no EMSO, para utilização não só com a biorrefinaria virtual, mas com qualquer outro processo.

7. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a FAPESP e o CNPq pelo apoio financeiro.

REFERÊNCIAS

- ABRAHAM, A., JAIN, L., GOLDBERG, R.. *Evolutionary Multiobjective Optimization - Theoretical Advances and applications*. Springer, 2005.
- COELLO COELLO C. A., PULIDO, G. T., e LECHUGA, M. S. Handling multiple objectives with particle swarm optimization. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 8(3): 256–279, 2004.
- DEB, K. *Multi-objective genetic algorithms: problem difficulties and construction of test problems*. *Evolutionary Computing*, vol. 7, 205–230, 1999.
- OKABE T., JIN Y., OLHOFFER M. e SENDHOFF B. On Test Functions for Evolutionary Multi-Objective Optimization. Honda Research Institute Europe GmbH, 2262-2269, 2003.
- RAQUEL, C. R. e NAVAL, Jr. P. C. An effective use of crowding distance in multiobjective particle swarm optimization. In *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO-2005)*, 257–264, 2005.
- SEDENKA, V.; ZBYNEK, R. Critical comparison of Multi-objective Optimization Methods: Genetic Algorithm versus Swarm Intelligence. *Radioengineering*, v. 19, 369-377, 2010.
- SCHOTT, J. R.. *Fault tolerant design using single and multicriteria genetic algorithm optimization*, Massachusetts Institute of Technology, Master Thesis, 1995.
- SIERRA, M. R. e COELLO COELLO, C. A. Multi-Objective Particle Swarm Optimizers: A Survey of the State-of-the-Art. *International Journal of Computational Intelligence Research*. 2(3): 287–308, 2006.
- VAN VELDHUIZEN, D. A. *Multiobjective evolutionary algorithms: Classifications, analyzes, and new innovations*. Air Force Institute of Technology, Tese, 1999.
- VAN VELDHUIZEN, D. A. e LAMONT, G. B. *Multiobjective evolutionary algorithm research: A history and analysis*, Comunicação interna – Dep. Elec. Comput. Eng, Air Force Institute of Technology, 1998.