

OPTIMIZACION DE LA POSICION DE LAS FUENTES EN EL METODO DE LAS SOLUCIONES FUNDAMENTALES UTILIZANDO LA TECNICA DE “SIMULATED ANNEALING”

A.P. Cisilino

División Soldadura y Fractomecánica - INTEMA
Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata - CONICET
Av. Juan B. Justo 4302 - (7600) Mar del Plata, Argentina
email: cisilino@fi.mdp.edu.ar / FAX: +54 (223) 4810066

B. Sensale

Instituto de Estructuras y Transporte
Facultad de Ingeniería, Universidad de la República
J. Herrera y Reissig 665 – 11300 Montevideo, Uruguay
email: sensale@fing.edu.uy

RESUMEN

La posición de las fuentes es un aspecto clave para el Método de las Soluciones Fundamentales. Este aspecto resulta especialmente relevante al analizar problemas que exhiben algún tipo de singularidad su solución, ya que ninguna combinación lineal de fuentes arbitrariamente colocadas puede asegurar la obtención de una aproximación razonable a la solución. Este trabajo investiga la utilización de un algoritmo de “Simulated Annealing” para la optimización de la posición de las fuentes en problemas con singularidades. El algoritmo consiste en esencia una búsqueda aleatoria adaptiva que permite movimientos ascendentes controlados por un criterio probabilístico que evita los mínimos locales. La metodología propuesta es ilustrada en la solución de dos problemas, y sus resultados comparados con los de un algoritmo de optimización analítico. El algoritmo de “Simulated Annealing” se muestra como herramienta atractiva para abordar el problema planteado, alcanzando una alta tasa de éxito en la solución de problemas para los que los algoritmos analíticos fallan.

ABSTRACT

The placement of source points constitutes a key issue for the Method of the Fundamental Solutions. In particular, for problems with singularities of any kind the determination of the optimal placement of source points becomes relevant, as no linear combination of arbitrarily located source points can assure a reasonable approximation to the solution. This paper investigates the use of a “Simulated Annealing” algorithm in the optimal placement of source points in singular problems. The algorithm is essentially an iterative random search with adaptive moves along the coordinate directions. It permits uphill moves under the control of a probabilistic criterion, thus tending to avoid the first local minima encountered. The proposed methodology is employed with two of test problems. Results are compared to those of an analytical optimisation routine and their relatively merit and disadvantages discussed. Simulated annealing it is shown to be an attractive option for the optimisation of singular problems, with a high rate of success, and able to solve problems for which analytical optimisation routines fail.

INTRODUCCION

El Método de las Soluciones Fundamentales (MFS) a reaparecido en la literatura, habiéndose reportado resultados de muy alta calidad utilizando un número relativamente reducido de grados de libertad. El método ha encontrado aplicación en diversos campos, tales como problemas de potencial, acústica, elasticidad y problemas biarmónicos [1]. El MFS puede ser asimilado a una formulación indirecta del Método de los Elementos de Contorno o una variedad del método de Trefftz. La idea básica es aproximar la solución mediante la combinación lineal de soluciones fundamentales dadas por fuentes colocadas fuera del dominio del problema [2]. Las ventajas del método son la sencillez de su implementación y su adaptabilidad.

La posición de las fuentes en el MFS puede ser preasignada o determinada al mismo tiempo que los coeficientes de la combinación lineal. Los esquemas más sencillos del MFS utilizan fuentes fijas (preasignadas) con la solución calculada utilizando mínimos cuadrados o colocación en puntos sobre el contorno. La mayoría de los trabajos con aplicaciones ingenieriles utilizan la versión del MFS con fuentes fijas, pero esto no siempre garantiza que la solución calculada converge a la exacta con el incremento del número de fuentes. Esta es el caso de problemas con singularidades, para los que una combinación lineal de fuentes arbitrarias no puede garantizar una aproximación razonable de la solución del problema. El MFS con fuentes móviles fue considerado por diversos autores [1]. La mayoría de los esquemas propuestos utilizan algoritmos analíticos de optimización para determinar la posición de las mismas. En todos los casos la posición inicial de las fuentes se muestra como un detalle importante para la convergencia de estos algoritmos, al tender los mismos al primer mínimo local que encuentran.

Se investiga en este trabajo la aplicación de un algoritmo de Simulated Annealing (SA) para optimizar la posición de las fuentes en problemas del tipo Laplace y Poisson con singularidades en su solución. Se presentan soluciones para dos ejemplos las que son discutidas y comparadas con las obtenidas utilizando un algoritmo de optimización analítico.

FORMULACION DEL MFS PARA PROBLEMAS DE LAPLACE

Consideremos un problema de potencial en dos dimensiones, siendo su ecuación de gobierno

$$\nabla^2 u = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (1)$$

sujeto a las condiciones de contorno $u_i = \bar{u}_i$ en I_1 y $\frac{\partial u}{\partial n} = \bar{q}$ en I_2 . Utilizando el MFS se puede escribir para un punto P_i sobre el contorno

$$u(P_i) \approx \tilde{u}(a, P_i, Q) = a_1 u^*(P_i, Q_1) + a_2 u^*(P_i, Q_2) + \dots + a_N u^*(P_i, Q_N) = \mathbf{a}^T \mathbf{u}^*(P_i, Q) \quad (2)$$

de la que se deduce

$$q(P_i) \approx \tilde{q}(a, P_i, Q) = \frac{\partial \tilde{u}(a, P_i, Q)}{\partial n} = \mathbf{a}^T \mathbf{q}^*(P_i, Q) \quad (3)$$

donde u^* es la solución fundamental de (1), $u^* = 1/2 \cdot \pi \log(r)$; y r es la distancia entre los puntos de colocación P_i y puntos fuente Q_j , y \mathbf{a} es un vector con los coeficientes a ser determinados.

De acuerdo a Karageorghis y Fairweather[3], los coeficientes \mathbf{a}_i y las posiciones de los puntos fuente Q son seleccionados de forma tal de minimizar el cuadrado de los residuos de las condiciones de contorno

$$F(a, Q) = \sum_i^{M_1} |u_i - \tilde{u}|^2 + \sum_i^{M_2} |\bar{q}_i - \tilde{q}|^2 \quad (4)$$

donde M_1 y M_2 son los números de puntos ubicados sobre los contornos I_1 y I_2 respectivamente.

POSICION OPTIMA DE LOS PUNTOS FUENTE

Como fue ya antes señalado, no existe garantía de que la solución del MSF sea siempre convergente con el incremento del número de puntos fuente para problemas con singularidades en su solución. Consideremos por ejemplo la solución del problema de Laplace sobre un dominio circular Ω con condiciones de contorno de Dirichlet dadas por $u(P)=1/\log(r_0)$, donde r_0 es la distancia desde un punto P sobre el contorno a un punto X_0 como se muestra en la Figura 1. Supongamos al mismo tiempo que las fuentes se encuentran distribuidas sobre el contorno Γ . Es evidente que resultará imposible obtener una función con valor infinito en la posición de X_0 a partir de la combinación lineal de fuentes sobre Γ , sin importar el número de estas. La convergencia podrá solo alcanzarse si Γ se encuentra más próximo a Γ que X_0 , o si una de las fuentes es colocada exactamente en la posición de X_0 . Desafortunadamente la posición de las singularidades no es conocida a priori en problemas de aplicación práctica.

En el MSF con fuentes móviles no solo los coeficientes de la combinación lineal, sino que también la posición de las fuentes son determinadas mediante la minimización de la función de costo (4). Esto lleva a la solución de un sistema de ecuaciones no lineal, el que tradicionalmente ha sido resuelto utilizando algoritmos de optimización analíticos. Aunque exitosos, se encuentra que la posición inicial de las fuentes resulta determinante para su convergencia (see Fairweather et al. [1]). Si la función de costo presenta oscilaciones o mesetas estos algoritmos se detienen en el primer mínimo detectado, por lo que no resultan adecuados para determinar los mínimos absolutos de la función.

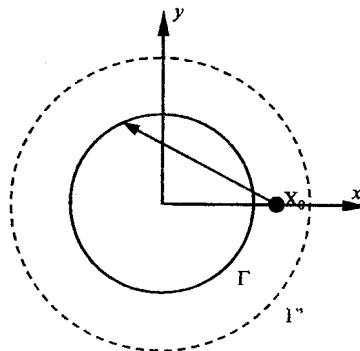


Figura 1: Problema de Laplace sobre un dominio circular y con una singularidad cercana al contorno.

EL ALGORITMO DE ANNEALING ALGORITHM

Las bases del algoritmo de "simulated annealing" se encuentran en la termodinámica, específicamente en la descripción del proceso de enfriamiento de un metal fundido. Luego de un enfriamiento lento (annealing), el metal alcanza un nivel de energía menor. En esta condición, las fluctuaciones inherentes del material le permiten escapar de un mínimo local en el nivel de energía para alcanzar un mínimo absoluto. Por otro lado, si el metal es enfriado muy rápidamente (templado) el mismo no podrá escapar de un mínimo local en su nivel de energía, por lo que eventualmente el material terminará el proceso con una energía mayor que el metal enfriado en forma lenta.

La rutina de SA empleada en este trabajo corresponde a la implementación de Goffe, Ferrier y Rogers [4] y se encuentra disponible en la Internet en el sitio Netlib. Los parámetros iniciales del proceso de minimización de la función de costo $f(X)$ son T_0 , la temperatura inicial; X , el vector de parámetros; y V , el vector con la magnitud de las fluctuaciones de X . Como primer paso se realiza la evaluación de la

función de costo $f(X)$ para los valores iniciales de X y su valor es almacenado. A continuación un nuevo juego de parámetros X' , es construido al variar el elemento j de X ,

$$x'_j = x_j + w \cdot v_j \quad (5)$$

donde w es un número aleatorio en el rango $[-1,1]$. Un nuevo valor de la función de costo f' es entonces calculado. Si f' es menor que f , X' es aceptado, X es actualizado con los valores de X' , y el algoritmo tiene un movimiento descendente, con el valor de f' como el mejor valor obtenido hasta el momento. Por otro lado, si el valor de f' es mayor o igual que f , el criterio de Metropolis decide sobre la aceptación del nuevo resultado (este criterio está basado en consideraciones termodinámicas). De esta forma se evalúa la función

$$p = e^{(f'-f)/T} \quad (6)$$

y el resultado es comparado con p' , un número aleatorio en el rango $[0,1]$. Si p es mayor que p' , la nueva solución es aceptada, X es actualizado con X' , y el algoritmo tiene un movimiento ascendente. En el caso contrario X' es descartado. Son dos los factores que disminuyen la probabilidad de un movimiento ascendente: la disminución de la temperatura y mayores diferencias entre los valores de la función. Además es importante notar que la decisión sobre la aceptación de los movimientos ascendentes incorpora un elemento aleatorio.

Luego de completar N_S ciclos sobre todos los elementos de X (todos los parámetros ' N ' son fijados por el usuario), la magnitud de las fluctuaciones V es ajustada de forma que el 50% de todos los movimientos sean aceptados con el objetivo de examinar a la función en forma exhaustiva. Si un porcentaje mayor son aceptados para x_j , entonces el valor del elemento correspondiente de V es incrementado. Para una dada temperatura, esto incrementa el número de movimientos aceptados y disminuye el porcentaje de movimientos rechazados. Luego de N_T iteraciones sobre los N_S ciclos la temperatura T es reducida. La nueva temperatura está dada por

$$T' = s_T \cdot T \quad (7)$$

donde el parámetro s_T está comprendido entre $[0,1]$. Una temperatura menor hace los movimientos descendentes menos probables, de forma tal que el número de rechazos se incrementa y los valores de V disminuyen. La condición de parada del algoritmo está dada por la comparación los valores óptimos de $f(x)$ alcanzados en los últimos N_e pasos de reducción de temperatura. Si la diferencia entre los mismos se mantiene menor que una dada tolerancia ϵ se considera que se ha encontrado un mínimo absoluto y el algoritmo se detiene.

IMPLEMENTACION

Al utilizar el algoritmo de SA antes descrito en la optimización de la posición de las fuentes para aplicaciones del MSF en dos dimensiones, el vector de parámetros, X , está dado por las $n=2N$ coordenadas de las fuentes, Q_j . Al mismo tiempo la expresión (4) constituye la función de costo $f(X)$. Con la excepción de la temperatura inicial, T_0 , el parámetro de reducción de la temperatura, s_T , y el número de iteraciones, N_T , todos los otros parámetros del algoritmo fueron tomados según lo sugerido por Corana et al[5]. Así, el número de ciclos $N_S=20$, y el número de valores de la función de costo considerados en la condición de parada $N_e=4$. Por otro lado, los valores sugeridos por Corana et al.[5] para $N_T = \max(100, 5N)$, y $s_T=0.85$ se encontraron muy conservativos (ver Goffe et al.[4]), por lo que fueron dejados libres para experimentar en los ejemplos considerados.

La selección de la temperatura inicial, T_0 , merece una consideración especial. Si la temperatura inicial es demasiado baja, la magnitud de las fluctuaciones, V , resultará muy pequeña y en consecuencia el área de la función que contiene el mínimo de la función puede ser omitida. En el otro extremo, si la temperatura inicial es muy alta, V resultará muy grande y un área demasiado extensa es analizada con un excesivo costo computacional. La metodología sugerida por Goffe et al [4] es empleada en este trabajo para la determinación de T_0 . La misma se vale de una corrida preliminar del programa en la

que la temperatura inicial se fijada arbitrariamente alta (por ejemplo 10^7), mientras que el parámetro de reducción de la temperatura, $s_T=0.1$. El objetivo de este análisis es el de rápidamente encontrar una temperatura para la cual la magnitud de las fluctuaciones, V , se ajusta al área de búsqueda.

EJEMPLOS

Conducción estacionaria de calor en un cilindro hueco

Se considera en este ejemplo la conducción estacionaria de calor en un cilindro hueco con temperaturas u_1 y u_2 en sus paredes interior y exterior respectivamente (ver Figura 2a). Las condiciones de simetría permiten reducir el modelo a un cuarto de la geometría del cilindro al imponer las condiciones de contorno apropiadas. Estas son dadas en la Figura 2b, junto con la posición de los 17 puntos de colocación utilizados sobre el contorno del modelo (los puntos en las esquinas son dobles). La solución del problema está dada por

$$u = u_1 - \frac{\ln(r/R_1)}{\ln(R_2/R_1)} (u_1 - u_2) \quad (8)$$

la que consiste de un término constante y un término singular, este último con de la forma $\log(1/r)$.

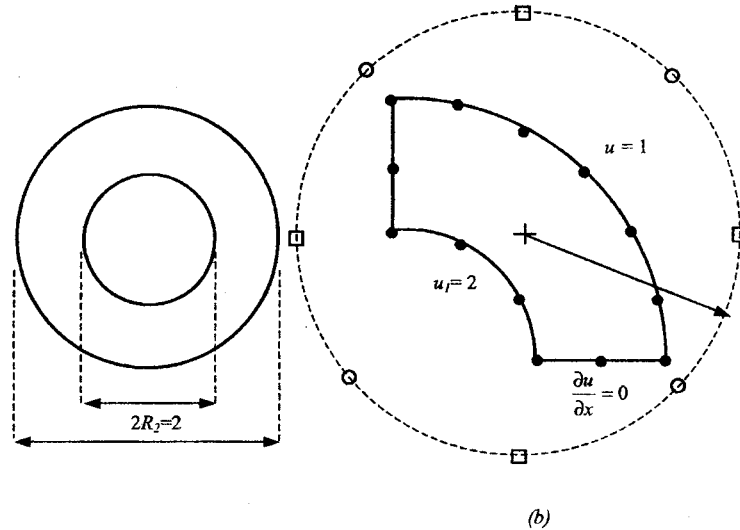


Figura 2: Conducción de calor estacionaria en un cilindro hueco: (a) geometría del problema, (b) detalles del modelo.

Los resultados obtenidos son mostrados en la Tabla 1 al utilizar $N=4$ y $N=8$ fuentes, y distintas combinaciones de valores de s_T y N_T . El área de búsqueda para la posición óptima de las fuentes fue seleccionada como un cuadrado de dimensiones de 20×20 . La posición inicial de las fuentes fue dada en forma aleatoria, realizándose diez análisis en cada caso. La tolerancia para la condición de parada fue fijada en $\varepsilon=10^{-6}$ y la temperatura inicial $T_0=0.5$. Fueron considerados exitosos aquellos análisis para los que el residuo en las condiciones de contorno (ver ecuación 11) resultaron menores a 10^{-5} . Puede observarse que el porcentaje de éxito se mantuvo siempre por encima del 70%. Con la excepción del caso $s_T=0.50$, los resultados no exhiben mayores diferencias al emplear 4 u 8 fuentes.

Los resultados de SA son comparados con los obtenidos utilizando la rutina de optimización analítica LMDIF[6], utilizada por Karageorghis y Fairweather[3]. Siguiendo las sugerencias de Ref.[3] las

fuentes fueron en este caso inicialmente distribuidas en forma uniforme alrededor del dominio del problema, sobre una circunferencia centrada en el baricentro del mismo (ver Figura 2b). Para los casos con $N=4$, dos disposiciones angulares de las fuentes fueron analizadas. Las mismas están indicadas con los símbolos (O) y (□) en la Figura 2b. Cuarenta análisis fueron realizados en cada uno de los casos, con $N=4$ y $N=8$, en los que el radio R de las circunferencias utilizadas para ubicar la posición inicial de las fuentes variaron en el rango $0.74 < R/R_f < 2.1$. Como se muestra en la Tabla 1, existe una fuerte dependencia en el comportamiento de LMDIF con la posición inicial de las fuentes para el caso $N=4$. Para las posiciones iniciales de las fuentes dadas por los símbolos (□) sólo uno de los 40 análisis resultó exitoso ($R/R_f=1.06$), mientras que 34 de 40 análisis fueron exitosos cuando las posiciones iniciales estuvieron dadas por los símbolos (O). La tasa de éxito para $N=8$ fue 50%.

Es importante señalar que en todos los casos de análisis exitosos los ambos algoritmos fueron capaces de situar una de las fuentes en el centro del cilindro, posición que coincide con la de la singularidad en la solución analítica (ver ecuación (8)).

Tabla 1: Resultados para el problema de conducción estacionaria de calor en un cilindro hueco.

N	N _T	s _r =0.10		s _r =0.25		s _r =0.50	
		Success	Eval	Success	Eval	Success	Eval
4	5	7/10	12230	8/10	12801	8/10	21601
	10	9/10	18312	10/10	27841	9/10	41423
8	5	7/10	16641	9/10	22757	10/10	39041
	10	10/10	32961	10/10	47041	10/10	79041
LMDIF N=4 (O) Tasa de éxito: 1/40 Número de evaluaciones: 1020 (□) Tasa de éxito: 34/40 Número de evaluaciones: 269 N=8 Tasa de éxito: 20/40 Número de evaluaciones: 722							

Problema de torsión en un sector circular

El problema de torsión de un sector circular dado por $\Omega = \{x-1)^2 + y^2 < 1\} \setminus \{x^2 + y^2 < 1\}$ (ver Figura 3) es analizado en este ejemplo. Considerando el modelo de Saint Venant la función tensión u está dada por

$$\nabla^2 u = 4 \quad (9)$$

con condiciones de contorno de Dirichlet $u=0$ sobre el contorno I :

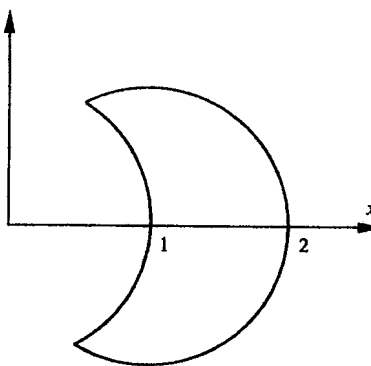


Figure 3: Problema de torsión en un sector circular

La solución exacta del problema

$$u = \frac{(x-1)^2 + y^2 - 1(x^2 + y^2 - 1)}{x^2 + y^2} \quad (10)$$

exhibe una singularidad de la forma $1/r$ en $(0,0)$.

Para resolver la ecuación de Poisson dada en (13) utilizando el MSF, la formulación del problema debe ser adaptada de forma de incorporar el término no homogéneo en la misma. De esta forma

$$u = \hat{u} + u^p \quad (11)$$

donde \hat{u} satisface la ecuación (1) con condiciones de contorno dadas por

$$\hat{u}(P_i) = \bar{u}(P_i) - u^p(P_i). \quad (12)$$

El problema dado por la expresión (12) puede ser resuelto para \hat{u} utilizando los procedimientos descriptos en las secciones anteriores. La solución particular en el caso el ejemplo en cuestión está dada por $u^p = x^2 + y^2$.

La Tabla 2 muestra los resultados obtenidos utilizando 34 puntos de colocación sobre el contorno del problema y una temperatura inicial $T_0=0.5$. Cada resultado corresponde al promedio de 10 análisis. En este caso es importante la mejora en la precisión de la solución al incrementar el número de fuentes de 4 a 8. Al mismo tiempo, y como fue también observado en otros ejemplos, los resultados resultan más sensibles al número de iteraciones por ciclo N_T que al coeficiente de reducción de temperatura s_T .

Los resultados obtenidos con la rutina LMDIF fueron muy pobres. Los resultados reportados en la Tabla 2 corresponden a mejor obtenido luego de 40 análisis, en los que de igual forma que en el ejemplo anterior, las fuentes fueron inicialmente ubicadas sobre recintos circulares centrados en $(1,0)$.

N	N_T	$s_T=0.10$		$s_T=0.25$		$s_T=0.50$	
		Residuo	Num eval	Residuo	Num eval	Residuo	Num eval
4	1	$0.57 \cdot 10^{-3}$	11203	$0.71 \cdot 10^{-3}$	8177	$0.56 \cdot 10^{-4}$	5761
	5	$0.26 \cdot 10^{-4}$	12081	$0.37 \cdot 10^{-4}$	16241	$0.11 \cdot 10^{-4}$	21440
	10	$0.32 \cdot 10^{-4}$	19841	$0.25 \cdot 10^{-4}$	28641	$0.21 \cdot 10^{-4}$	41281
8	1	$0.13 \cdot 10^{-5}$	5548	$0.12 \cdot 10^{-5}$	5441	$0.42 \cdot 10^{-6}$	7894
	5	$0.22 \cdot 10^{-6}$	17441	$0.16 \cdot 10^{-6}$	23681	$0.11 \cdot 10^{-6}$	39521
	10	$0.15 \cdot 10^{-6}$	34561	$0.43 \cdot 10^{-7}$	47361	$0.53 \cdot 10^{-7}$	79361
LMDIF (Mejores resultados) N=4 Residuo $0.11 \cdot 10^{-1}$ Número de evaluaciones: 37 N=8 Residuo $0.15 \cdot 10^{-2}$ Número de evaluaciones: 2376							

Tabla 2: Resultados para el problema de torsión en un sector circular

CONCLUSIONES

Se investigó en este trabajo la aplicación de un algoritmo de Simulated Annealing (SA) para la determinación de la posición óptima de las fuentes en la solución de problemas con singularidades utilizando en Método de las Soluciones Fundamentales (MSF). El algoritmo de SA demostró una alta tasa de éxito, siendo capaz de resolver problemas para los cuales algoritmos de optimización analítica fallan. Muy buenos resultados fueron obtenidos utilizando un número reducido de fuentes y un coeficiente de reducción de temperatura relativamente bajo ($s_T=0.1$). Al mismo tiempo, el número de iteraciones por ciclo, N_T , demostró en muchos casos una influencia marcada sobre los resultados.

La desventaja del algoritmo de SA es su elevado costo computacional. Sin embargo el uso combinado de algoritmos de SA y algoritmos de optimización analítica se ve como una potente alternativa. Así el algoritmo de SA podría ser empleado en las primeras etapas del proceso de optimización con el objeto

de estudiar el comportamiento global de la función, para luego utilizar los algoritmos de optimización analítica en la etapa de optimización más fina. De esta forma se combinan los beneficios de ambas metodologías.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo a sido financiado por el PICT 12-04586 de la Agencia Nacional de Promoción Científica de la República Argentina y la Universidad de la República Oriental del Uruguay.

REFERENCIAS

- [1] Fairweather G. and Karageorghis A., *The method of fundamental solutions for elliptic boundary value problems*, Advances in Comp. Mathematics, 9, 69-95, (1998)
- [2] Kita E. and Kamiya N., *Treffiz method: an overview*, Advances in Engineering Software, 24, 3-12, (1995)
- [3] Karageorghis A. and Fairweather G., *The method of fundamental solutions for the numerical solution of the biharmonic equation*, J. Comput. Phys., 69,434-459, (1987)
- [4] Goffe W.L., Ferrier G.D. and Rogers J., *Global Optimization of Statistical Functions with Simulated Annealing*, Journal of Econometrics, 60,65-99,(1994)
- [5] Corana A., Marchesi M., Martini C., and Ridella S., *Minimizing Multimodal Functions of Continuous Variables with the Simulated Annealing Algorithm*, ACM Transactions on Mathematical Software, 13,262-280,(1987)
- [6] Gargow B.S., Hillstron K.E. and Moré J.J., MINPACK Project, Argonne National Laboratory, USA, (1980)