



08 a 11 de Outubro de 2018  
Instituto Federal Fluminense  
Búzios - RJ

## COMPARAÇÃO ESTATÍSTICA ENTRE DUAS VARIANTES DO MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO DE COLISÃO DE PARTÍCULAS

**Ane Élida Nogueira Frauches Almoia**<sup>1</sup> - anefrauches@gmail.com

**Antônio J. Silva Neto**<sup>1</sup> - ajsneto@iprj.uerj.br

**Wagner Figueiredo Sacco**<sup>3</sup> - wagner.sacco@ufopa.edu.br

<sup>1</sup>Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico - Nova Friburgo, RJ, Brazil

<sup>2</sup>Universidade Federal do Oeste do Pará - Santarém, PA, Brazil

**Resumo.** *Algumas variantes do algoritmo de colisão de partículas (Particle Collision Algorithm - PCA) vêm sendo propostas, e entre elas, o algoritmo de colisão de partículas com Hooke-Jeeves e o algoritmo de colisão de partículas com seção de choque. A ideia central deste artigo é utilizar-se de ferramentas estatísticas não-paramétricas a fim de comparar as taxas de sucesso quando estas duas variantes são expostas a problemas de natureza e complexibilidade distintas. Para isso, foi utilizado o teste dos postos sinalizados de Wilcoxon para determinar se estatisticamente um algoritmo apresenta um desempenho melhor do que o outro. Foram utilizadas funções teste desenvolvidas para o estudo do desempenho de métodos de otimização, bem como problemas modelados por sistemas de equações algébricas não-lineares. Ambos os algoritmos foram capazes de produzir resultados satisfatórios para as funções teste. Mas quando submetidos à segunda classe de problemas, seus desempenhos foram aparentemente distintos.*

**Palavras-chave:** *algoritmo de colisão de partículas, comparação estatística, estatística não-paramétrica*

### 1. INTRODUÇÃO

Um problema de otimização consiste na minimização ou maximização de uma determinada função objetivo, sendo esta dependente de um número finito de variáveis. Algoritmos de otimização metaheurísticos são considerados promissores em problemas que apresentam elevada complexidade, devido a sua capacidade de evitar os mínimos locais graças à presença de uma componente aleatória. O algoritmo de colisão de partículas (PCA) (Sacco et al., 2006; Sacco & Oliveira, 2005) foi inspirado na física de colisão de partículas nucleares (Duderstadt & Hamilton, 1976), com ênfase nos comportamentos de espalhamento e absorção. Algumas variantes deste método vêm sendo propostas, entre elas o método híbrido que combina o PCA com o algoritmo de busca Hooke-Jeeves (HJPCA) (Rios-Coelho et al., 2010) e o algoritmo de colisão de partículas com seção de choque (CSPCA) (Sacco & Rios-Coelho, 2016), que, con-

forme indica o nome, incorpora o conceito de seção de choque (Duderstadt & Hamilton, 1976) ao algoritmo PCA.

Já foi provado por meio do *No free lunch theorem* (Wolpert & Macready, 1997), que não existe um único algoritmo universalmente eficiente. Com isso, a comunidade de aprendizado de máquina tem utilizado os métodos estatísticos como uma forma de comparar e validar os algoritmos desenvolvidos (Demsar, 2006). Como não se conhece exatamente a distribuição dos dados em questão, o melhor caminho é a utilização dos métodos não-paramétricos (Wackerly et al., 2014).

Neste trabalho, os algoritmos HJPCA e CSPCA serão aplicados a problemas *benchmark* e será empregado o teste não-paramétrico dos postos sinalizados de Wilcoxon, para determinar se existe alguma diferença significativa de desempenho entre os dois algoritmos em questão.

## 2. PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO CONSIDERADOS

Neste trabalho utilizou-se um conjunto de funções algébricas que apresentam comportamentos diferenciados, que as tornam capazes de cobrir todos os tipos de dificuldades encontradas em problemas de otimização global (Hedar & Fukushima, 2006). Essas funções são apresentadas na Tabela 1. Além disso, utilizou-se também um conjunto de problemas que são modelados por meio de equações algébricas não-lineares, entre eles estão incluídos alguns problemas práticos de estimação de parâmetros, que se utilizam de métodos de otimização para a obtenção da solução desejada. Tais problemas são apresentados a seguir.

### *Equilíbrio químico com 10 variáveis (EQ10)(Meintjes & Morgan, 1990)*

Este problema se refere à combustão de propano ( $C_3H_8$ ) no ar ( $O_2$  e  $N_2$ ) a fim de formar dez produtos. A reação química gera um sistema de dez equações e dez variáveis apresentado a seguir:

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1 = n_1 + n_4 - 3 \\ f_2 = 2n_1 + n_2 + n_4 + n_7 + n_8 + n_9 + 2n_{10} - R \\ f_3 = 2n_2 + 2n_5 + n_6 + n_7 - 8 \\ f_4 = 2n_3 + n_9 - 4R \\ f_5 = K_5 n_2 n_4 - n_1 n_5 \\ f_6 = K_6 n_2^{1/2} n_4^{1/2} - n_1^{1/2} n_6 \left(\frac{p}{n_T}\right)^{1/2} \\ f_7 = K_7 n_1^{1/2} n_2^{1/2} - n_4^{1/2} n_7 \left(\frac{p}{n_T}\right)^{1/2} \\ f_8 = K_8 n_1 - n_4 n_8 \left(\frac{p}{n_T}\right) \\ f_9 = K_9 n_1 n_3^{1/2} - n_4 n_9 \left(\frac{p}{n_T}\right)^{1/2} \\ f_{10} = K_{10} n_1^2 - n_4^2 n_{10} \left(\frac{p}{n_T}\right) \end{array} \right.$$

$$\text{onde: } \left\{ \begin{array}{l} n_T = \sum_{i=1}^{10} n_i \\ p = 40 \text{ atm} \\ R = 10 \\ K_5 = 0,193 \\ K_6 = 0,002597 \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} K_7 = 0,003448 \\ K_8 = 0,00001799 \\ K_9 = 0,0002155 \\ K_{10} = 0,00003846 \end{array} \right.$$

A região de busca deste problema é  $[0, 100]$  e o mínimo global, ou seja,  $f(x^*) = 0$ , ocorre quando  $x^* = (2,910; 3,960; 19,987; 0,0898; 0,0236; 0,0007; 0,0324; 0,0004; 0,0260; 0,0356)$ .

Tabela 1: Funções teste para estudo de desempenho de métodos de otimização

Nome e Referência	Definição	Espaço de Busca	Mínimo global
Branin (Dixon & Szego, 1978)	$f(x) = a(x_2 - bx_1^2 + cx_1 - r)^2 + s(1 - t) \cos(x_1) + s$ $a = 1, b = 5.1/(4\pi^2), c = 5/\pi, r = 6, s = 10, t = 1/(8\pi)$	$[-5; 15]$	$f(x^*) = 0.397887$ $x^* = (-\pi; 12, 275), (\pi; 2, 275),$ $(9, 42478; 2.475)$
Easom (Michalewicz, 1996)	$f(x) = -\cos(x_1) \cos(x_2) \exp(-(x_1 - \pi)^2 - (x_2 - \pi)^2)$	$[-100, 100]$	$f(x^*) = -1$ $x^* = (\pi; \pi)$
Goldstein-Price (Dixon & Szego, 1978)	$f(x) = [1 + (x_1 + x_2 + 1)^2(19 - 14x_1 + 3x_1^2 - 14x_2 + 6x_1x_2 + 3x_2^2)] \times [30 + (2x_1 - 3x_2)^2(18 - 32x_1 + 12x_1^2 + 48x_2 - 36x_1x_2 + 27x_2^2)]$	$[-2, 2]$	$f(x^*) = 3$ $x^* = (0; -1)$
Rosenbrock (More et al., 1943)	$f(x) = \sum_{i=1}^{d-1} [100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2]$	$[-5, 5]$	$f(x^*) = 0$ $x^* = (1; \dots; 1)$
Zakharov (Hedar & Fukushima, 2006)	$f(x) = \sum_{i=1}^d x_i^2 + \left(\sum_{i=1}^d 0.5ix_i\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^d 0.5ix_i\right)^4$	$[-5, 10]$	$f(x^*) = 0$ $x^* = (0; \dots; 0)$
Shubert (Levy & Montalvo, 1985)	$f(x) = 1 + (x_1 + x_2 + 1)^2(19 - 14x_1 + 3x_1^2 - 14x_2 + 6x_1x_2 + 3x_2^2)$	$[-10, 10]$	$f(x^*) \approx -186,7309$ $x^* \approx (-7, 0835; 4, 8580),$ $(-7, 0835; -7, 7083), (-1, 4251; -7, 0835),$ $(5, 4828; 4, 8580), (-1, 4251; -0, 8003),$ $(4, 8580; 5, 4828), (-7, 7083; -7, 0835),$ $(-7, 0835; -1, 4251), (-7, 7083; -0, 8003),$ $(-7, 7083; 5, 4828), (-0, 8003; -7, 7083),$ $(-0, 8003; -1, 4251), (-0, 8003; 4, 8580),$ $(-1, 4251; 5, 4828), (5, 4828; -7, 7083),$ $(4, 8580; -7, 0835), (5, 4828; -1, 4251),$ $(4, 8580; -0, 8003)$

Continua na próxima página

Tabela 1 – Funções teste para estudo de desempenho de métodos de otimização (continuação)

Nome e Referência	Definição	Espaço de Busca	Mínimo global
Hartmann (Dixon & Szego, 1978)	$f_{n,m}(x) = - \sum_{i=1}^m \alpha_i \exp(- \sum_{j=1}^n A_{ij}^{(n)} (x_j - P_{ij}^{(n)})^2)$ $\alpha = (1.0, 1.2, 3.0, 3.2)$ $A^{(3)} = \begin{pmatrix} 3.0 & 10 & 30 \\ 0.1 & 10 & 35 \\ 3.0 & 10 & 30 \\ 0.1 & 10 & 35 \end{pmatrix}$ $P^{(3)} = 10^{-4} \begin{pmatrix} 3689 & 1170 & 2673 \\ 4699 & 4387 & 7470 \\ 1091 & 8732 & 5547 \\ 381 & 5743 & 8828 \end{pmatrix}$ $A^{(6)} = \begin{pmatrix} 10 & 3 & 17 & 3.50 & 1.7 & 8 \\ 0.05 & 10 & 17 & 0.1 & 8 & 14 \\ 3 & 3.5 & 1.7 & 10 & 17 & 8 \\ 17 & 8 & 0.05 & 10 & 0.1 & 14 \end{pmatrix}$ $P^{(6)} = 10^{-4} \begin{pmatrix} 1312 & 1696 & 5569 & 124 & 8283 & 5886 \\ 2329 & 4134 & 8307 & 3736 & 1004 & 9991 \\ 2348 & 1451 & 3522 & 2883 & 3047 & 6650 \\ 4047 & 8828 & 8732 & 5743 & 1091 & 381 \end{pmatrix}$	[0, 1]	$n = 3, m = 4$ $f_{3;4}(x^*) \approx -3,86278$ $x^* \approx (0, 114614; 0, 555649; 0, 852547)$  $n = 6, m = 4$ $f_{6;4}(x^*) \approx -3,32237$ $x^* \approx (0, 20169; 0, 150011; 0, 476874; 0, 275332; 0, 311652; 0, 6573)$
Shekel (Dixon & Szego, 1978)	$f_{4,m}(x) = - \sum_{i=1}^m [(x - a_i)^T (x - a_i) + c_i]^{-1}$ $a = \begin{pmatrix} 4,0 & 4,0 & 4,0 & 4,0 \\ 1,0 & 1,0 & 1,0 & 1,0 \\ 8,0 & 8,0 & 8,0 & 8,0 \\ 6,0 & 6,0 & 6,0 & 6,0 \\ 7,0 & 3,0 & 7,0 & 3,0 \\ 2,0 & 9,0 & 2,0 & 9,0 \\ 5,0 & 5,0 & 3,0 & 3,0 \\ 8,0 & 1,0 & 8,0 & 1,0 \\ 6,0 & 2,0 & 6,0 & 2,0 \\ 7,0 & 3,6 & 7,0 & 3,6 \end{pmatrix}$ $c = ( 0,1 \quad 0,2 \quad 0,2 \quad 0,4 \quad 0,4 \quad 0,6 \quad 0,3 \quad 0,7 \quad 0,5 \quad 0,5 )$	[0, 10]	$m = 5$ $f_{4,5}(x^*) \approx -10,1532$ $x^* = (4; 4; 4; 4)$  $m = 7$ $f_{4,7}(x^*) \approx -10,4029$ $x^* = (4; 4; 4; 4)$  $m = 10$ $f_{4,10}(x^*) \approx -10,5364$ $x^* = (4; 4; 4; 4)$

### **Equilíbrio químico (EQ) (Meintjes & Morgan, 1990)**

O problema apresentado anteriormente pode ser reduzido para um sistema de cinco equações e cinco variáveis conforme apresentado a seguir:

$$\begin{cases} f_1 = x_1x_2 + x_1 - 3x_5 \\ f_2 = 2x_1x_2 + x_1 + x_2x_3^2 + R_8x_2 - Rx_5 + 2R_10x_2^2 + R_7x_2x_3 + R_9x_2x_4 \\ f_3 = 2x_2x_3^2 + 2R_5x_3^2 - 8x_5 + R_6x_3 + R_7x_2x_3 \\ f_4 = R_9x_2x_4 + 2x_4^2 - 4Rx_5 \\ f_5 = x_1(x_2 + 1) + R_{10}x_2^2 + x_2x_3^2 + R_8x_2 + R_5x_3^2 + x_4^2 + 1 + R_6x_3 - R_7x_2x_3 + R_9x_2x_4 \end{cases}$$

$$\text{Onde: } \begin{cases} R = 10 \\ R_5 = 0,193 \\ R_6 = 0,002597/\sqrt{40} \\ R_7 = 0,003448/\sqrt{40} \end{cases} \begin{cases} R_8 = 0,00001799/40 \\ R_9 = 0,0002155/\sqrt{40} \\ R_{10} = 0,00003846/\sqrt{40} \end{cases}$$

A região de busca deste problema é  $[0, 100]$  e o mínimo global, ou seja,  $f(x^*) = 0$ , ocorre quando  $x^* = (0,0031; 34,59; 0,0650; 0,8594; 0,0369)$ .

### **Potencial de Lennard-Jones (LJ) (Floudas & Pardalos, 1999)**

O problema de otimização dos aglomerados de Lennard-Jones (LJ) é um problema de dois corpos usado para simular o aglomerado de gases raros com átomos pesados, como por exemplo o argônio, o xenônio e o criptônio. A energia potencial LJ entre dois átomos com uma distância  $r$  é dada pela equação:  $LJ(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6}$ . A energia potencial total  $V$  de um grupo de  $N$  átomos é dado por:  $V = \sum_{i < j} LJ(r_{ij})$  onde  $r_{ij}$  é a distância Euclidiana entre os átomos  $i$  e  $j$ .

A região de busca  $\Omega$  é dada por:  $\Omega = \bigcup_i \Omega_i$  onde

$$\Omega_i = \begin{cases} [0, 4], & \text{se } i = 1 \text{ ou } 2 \\ [0, \pi], & \text{se } i = 3 \\ [-4 - \frac{1}{4} \lfloor \frac{i-4}{3} \rfloor, 4 + \frac{1}{4} \lfloor \frac{i-4}{3} \rfloor], & \text{se } i = 4, \dots, 3N - 6. \end{cases}$$

Esse problema apresenta um mínimo global dependente do número de átomos. A seguir são mostrados os mínimos globais utilizados neste trabalho:

$N = 3$  : Energia = -3,000000

$N = 4$  : Energia = -6,000000

$N = 5$  : Energia = -9,103852

$N = 6$  : Energia = -12,7121

### **Problema do fígado de porco (PFP)(Ali et al., 1996)**

O problema do fígado de porco é um problema de estimação de parâmetros formulados sob uma ótica de otimização. A função logarítmica de verossilhança a ser maximizada está representada pela equação:

$$f(k_m, \epsilon^2, \sigma_1, \dots, \sigma_5, V_{max_1}, \dots, V_{max_5}) = - \sum_{i=1}^5 (n_i \ln \sigma_i + R_i^2 / (2\sigma_i^2))$$

Os dados são analisados utilizando a técnica estatística Bayesiana, sendo o erro de  $\ln V_{ij}$  normalmente distribuído. Com isso tem-se a equação:  $R_i^2(V_{max_i}, k_m, \epsilon^2) = \sum_{j=1}^{n_i} (\ln V_{ij} - \ln \hat{V}_{ij})^2$ .

Os valores de  $\hat{V}_{ij}$  são encontrados ao resolver o sistema de equações não-lineares mostrado na equação:

$$\frac{V_{max_i}}{\hat{V}_{ij}} \left( 1 - \left( \epsilon^2 \frac{V_{max_i}}{2F_i k_m} \right) / \left[ 1 + \frac{\hat{V}_{ij}/F_i k_m}{\exp\{(V_{max_i} - \hat{V}_{ij})\}/F_i k_m} - 1 \right]^2 \right) = \frac{k_m}{\hat{c}_{ij}} + 1$$

$$\hat{c}_{ij} = \frac{c_{ij} - \bar{c}_{ij}}{\ln(c_{ij}/\bar{c}_{ij})}$$

onde:

$V_{ij}$  são as medidas experimentais das taxas de eliminação para o j-ésimo experimento no i-ésimo fígado de porco (pig liver),  $k_m$  é a constante e Michaelis para a interação da enzima-substrato,  $\epsilon^2$  é o coeficiente de variação para as propriedades dos capilares,  $\sigma_i$  é o desvio padrão para cada fígado de porco  $i$ ,  $V_{max_i}$  é a taxa máxima de eliminação do fígado inteiro,  $n_i$  é o número de experimento no i-ésimo fígado de porco,  $F_i$ ,  $c_{ij}$  e  $\bar{c}_{ij}$  são as constantes conhecidas associadas com o j-ésimo experimento para o i-ésimo fígado de porco.

Este problema apresenta  $f^* = 59,8403$  como seu mínimo global quando  $k_m = 0,2247$  e  $\epsilon^2 = 0,1689$  e a estimação das demais variáveis são: (0,035; 0,091; 0,051; 0,060; 0,031; 0,398; 0,428; 0,604; 0,457; 0,738).

#### **Estimação de parâmetros de um experimento fertilizador (ExpF) (Hartley, 1961)**

A ideia é ajustar os dados experimentais em uma lei exponencial, descrita através da equação  $y = k_1 + k_2 \exp(k_3 x)$ , onde a variável  $y$  representa um campo de trigo correspondentes a seis taxas de aplicação de fertilizante  $x$ , em escala codificada. Os parâmetros a serem estimados através de um problema de mínimos quadrados são representados pelas variáveis  $k_1$ ,  $k_2$  e  $k_3$ .

A região de busca deste problema é  $k_1 = [-10^5, 10^5]$ ,  $k_2 = [-10^5, 10^5]$  e  $k_3 = [-10^2, 10^2]$  e apresenta  $f^* = 11390,23$  como mínimo global quando  $k_1 = 523,3$ ,  $k_2 = -159,9$  e  $k_3 = -0,1997$ .

#### **Ajuste exponencial com 4 parâmetros (AExp) (Nielsen, 2000)**

O problema apresentado pela equação abaixo foi formulado para simular um problema exponencial de ajuste de dados a partir de dados experimentais da variável  $y_i$ .

$$f_i(x) = y_i - (x_3 \exp^{x_1 t_i} + x_4 \exp^{x_2 t_i})$$

$$t_i = 0,02i$$

A região de busca deste problema é  $[-100, 100]$  e apresenta  $f(x^*) = 0,005$  como mínimo global quando  $x^* = (-4; -5; 4; -4)$

### **3. DESCRIÇÃO DAS VARIANTES DO MÉTODO DE COLISÃO DE PARTÍCULAS UTILIZADAS**

#### **PCA canônico**

Este algoritmo foi inspirado pelas reações de colisão nuclear, especialmente o espalhamento e a absorção. O espalhamento ocorre quando um nêutron é espalhado através da colisão com um núcleo alvo. Já a absorção ocorre quando o nêutron é absorvido pelo núcleo alvo.

Primeiramente, deve-se escolher aleatoriamente uma configuração inicial e então ocorrerá a sua modificação a fim de gerar uma configuração nova. A função objetivo das duas configurações

é comparada de forma a determinar se a nova configuração apresenta melhor resultado. Em caso positivo, esta configuração terá suas regiões exploradas aleatoriamente através da função “*Exploitation*”. Caso contrário, o algoritmo seguirá realizando uma nova mudança para a configuração antiga. Este passo é chamado de “*Scattering*”. O PCA pode ser considerado um algoritmo de Metropolis (Metropolis et al., 1953), já que uma nova solução de pior qualidade que a melhor corrente pode ser aceita com uma certa probabilidade, com o intuito de evitar a convergência para mínimos locais. A seguir é apresentado o pseudocódigo do PCA em sua versão canônica.

---

**Algoritmo 1** Pseudocódigo do algoritmo de colisão de partículas canônico.

---

```
1:  $OldConfig \leftarrow random(range)$ 
2: enquanto critério de parada não for satisfeito faça
3:    $NewConfig \leftarrow random(range)$ 
4:   se  $f(NewConfig) > f(OldConfig)$  então
5:      $OldConfig \leftarrow NewConfig$ 
6:     Exploitation() - busca em uma vizinhança da solução atual -
7:   senão
8:     Scattering() - gera um novo candidato de forma aleatória -
9:   fim se
10: fim enquanto
```

---

#### ***PCA com Hooke-Jeeves - Hooke-Jeeves PCA***

O método de Hooke-Jeeves (Hooke & Jeeves, 1961) é um método determinístico de busca direta que realiza dois tipos de busca: uma busca exploratória e uma busca de padrões.

O algoritmo inicia-se em um ponto  $x_0$  e as soluções nas direções positiva e negativa são comparadas para encontrar o melhor ponto  $x_1$ . Caso a solução encontrada  $x_1$  seja melhor do que  $x_0$ ,  $x_1$  passará a ser utilizado como base para a próxima iteração. Caso não seja possível encontrar nenhum ponto melhor do que  $x_0$ , é reduzido o passo, através de  $\alpha$ , e é feito o movimento utilizando um passo menor, sendo este maior do que  $\epsilon$ .

No HJPCA, a etapa de “*Exploitation*” passará a ser realizada pelo Hooke-Jeeves. Ou seja, toda vez que a solução da nova configuração apresentar um resultado melhor do que a configuração antiga, este resultado será utilizado como ponto inicial para o método determinístico escolhido. Este algoritmo será responsável por realizar uma busca local por uma solução ainda melhor que a corrente.

#### ***PCA com seção de choque - Cross Section PCA***

O algoritmo inicia-se com a geração de  $NP$  pontos no espaço de busca, que irão caracterizar as suas regiões da mesma maneira que a seção de choque atua em um reator nuclear. Estes pontos são gerados a partir do gerador Sobol (Sobol, 1967) e são ordenados de acordo com o seus valores da função objetivo. A solução tentativa será gerada pela Eq. (1), inspirada pelo mecanismo de mutação encontrado no método de evolução diferencial (Storn & Price, 1997), onde *atual* é a solução corrente e  $x_{r1}$  e  $x_{r2}$  são pontos do espaço de busca escolhidos aleatoriamente dentre aqueles gerados inicialmente pela sequência de Sobol. Se a solução *teste* obtida for melhor que *atual*, procede-se com a busca local pelo Hooke-Jeeves tal qual no HJPCA.

$$teste \leftarrow atual + F(x_{r1} - x_{r2}) \quad (1)$$

No CSPCA, a etapa de “*Scattering*” se dá pela probabilidade de escolha da melhor solução pela técnica “*rank weighting*” (Haupt & Haupt, 2004).

#### 4. RESULTADOS

Os métodos de otimização utilizados neste trabalho foram implementados em linguagem C. Todos os experimentos foram realizados em um PC com processador Intel® Core™ i5-2410M CPU @ 2.30GHz, com 8,00 GB de RAM, rodando em um ambiente Windows 10 Home. Os códigos foram compilados com o Dev-C++. Para a parte estocástica, foi utilizado o gerador pseudoaleatório denominado Mersenne Twister, desenvolvido por Matsumoto e Nishimura (1998).

Os métodos de otimização foram rodados cem vezes utilizando como critério de parada a Eq. (2), onde  $f(x^*)$  é o mínimo global conhecido,  $f(x)$  é o melhor valor até a iteração corrente, o coeficiente  $\epsilon_1 = 10^{-4}$  corresponde ao erro relativo e  $\epsilon_2 = 10^{-6}$  corresponde ao erro absoluto (Siarry et al., 1997).

$$|f(x^*) - f(x)| \leq \epsilon_1 |f(x^*)| + \epsilon_2 \quad (2)$$

No algoritmo de Hooke-Jeeves, presente em ambos os métodos, utilizou-se  $\epsilon = 10^{-6}$  e  $\alpha = 0,8$ .

Os resultados relacionados à taxa percentual de sucesso dos algoritmos são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2- Taxa de sucesso dos métodos de otimização

	HJPCA	CSPCA		HJPCA	CSPCA
Branin	100%	100%	Shekel-07	100%	100%
Easom	100%	100%	Shekel-10	100%	100%
Goldsten-Price	100%	100%	EQ10	95%	8%
Rosenbrock-02	100%	100%	EQ	77%	100%
Rosenbrock-05	100%	100%	LJ-3	100%	100%
Rosenbrock-10	100%	100%	LJ-4	100%	100%
Zakharov-05	100%	100%	LJ-5	100%	100%
Zakharov-10	100%	100%	LJ-6	100%	100%
Shubert	100%	100%	PFP	100%	100%
Hartmann-03	100%	100%	ExpF	100%	100%
Hartmann-06	100%	100%	AExp	99%	100%
Shekel-05	100%	100%			

Na suíte de testes de funções proposta por Hedar e Fukushima (2006), que, na tabela, vai da função Branin até a Shekel-10, ambos os algoritmos apresentaram 100% de taxa de sucesso para todas as funções, a despeito desse conjunto ser bastante desafiador (Hedar & Fukushima, 2006).

Os problemas “Equilíbrio químico” e “Equilíbrio químico com 10 variáveis” são *benchmarks* para resolução de sistemas não-lineares. O HJPCA obteve o seu pior desempenho no primeiro problema, enquanto o CSPCA obteve o seu pior desempenho no segundo problema.

O problema “Ajuste exponencial com 4 parâmetros” é um problema inverso de estimação de parâmetros que se utiliza da otimização como mecanismo de busca na sua solução. Para este problema, o HJPCA obteve um resultado inferior ao do CSPCA, porém bem próximo (99% contra 100%).



Ao analisar os resultados, o CSPCA se mostra aparentemente mais robusto. Entretanto, tal fato se torna duvidoso devido à grande margem apresentada para o problema “*Equilíbrio químico com 10 variáveis*”. Sendo assim, tornou-se necessária a utilização de métodos estatísticos não-paramétricos para determinar se existe um método mais eficiente do que o outro.

O teste dos postos sinalizados de Wilcoxon é a alternativa não-paramétrica ao teste t-pareado e serve para indicar estatisticamente se duas amostras representam duas diferentes populações (Mcdonald, 2014).

A hipótese nula ( $H_0$ ) afirma que a diferença mediana entre os pares é zero, ou seja, que não existe diferenças significativas entre as amostras.

Primeiramente deve-se calcular a diferença de resultados entre as amostras e seu valor absoluto deve ser ordenado do menor para o maior. Com isso, assume-se posto um àquele com a menor diferença absoluta. Caso haja diferenças iguais, deve-se considerar o valor médio entre os postos. Caso a primeira amostra tenha sido melhor do que a segunda, o posto adquirirá o sinal positivo ( $R^+$ ), caso contrário sinal negativo ( $R^-$ ). Soma-se todos os postos com sinais positivos e os postos com sinais negativos. Caso a diferença entre as amostras seja zero, metade do valor de seu posto deve ser somado a  $R^+$  e metade a  $R^-$ . Chama-se de  $T$  o menor valor entre  $R^+$  e  $R^-$ . Caso  $T$  seja menor ou igual ao valor de distribuição de Wilcoxon para  $N$  conjuntos de dados, indicará que estatisticamente existem diferenças significativas entre os métodos de otimização empregados nos testes.

Ao realizar o teste dos postos sinalizados de Wilcoxon, foi obtido o valor  $T = 128$ . O valor crítico encontrado na tabela é igual a 73. Com isso pode-se concluir que existem evidências estatísticas suficientes para sugerir que não há diferenças significativas entre os métodos HJPCA e CSPCA.

## 5. CONCLUSÃO

Este trabalho apresentou duas variantes do algoritmo de colisão de partículas: o algoritmo de colisão de partículas com Hooke-Jeeves (HJPCA) e o algoritmo de colisão de partículas com seção de choque (CSPCA). Ambos algoritmos foram utilizados para resolver uma série de problemas teste a fim de determinar suas taxas de sucesso em cada problema. Com os resultados obtidos, tornou-se possível utilizar da estatística não-paramétrica para determinar se uma variante é mais robusta estatisticamente do que a outra. A estatística não-paramétrica precisou ser usada para evitar um resultado erroneamente tendencioso a um dos métodos, visto que nos três problemas onde ambos não obtêm 100% de sucesso, o CSPCA vence em dois e o HJPCA em um; porém com grande margem (95% a 8%). Após os testes, constatou-se que ambos os métodos são estatisticamente iguais no que diz respeito à eficiência em resolução de problemas.

### *Agradecimentos*

Os autores agradecem o apoio financeiro da FAPERJ, do CNPq e da CAPES.

## REFERÊNCIAS

Ali, M. M., Storey, C., Torn, A. (1996), “Application of some recent stochastic global optimization algorithms to practical problems”, TUCS Technical Report No 47.

- Demsar, J. (2006), “Statistical comparisons of classifiers over multiple data sets”, *Journal of Machine Learning*, vol 7, 1-30.
- Dixon, L., Szegö, G. (1978), “Towards global optimization 2”, North-Holland Pub. Co.
- Floudas, C., Pardalos, P. (1999), “Handbook of test problems in local and global optimization”, Springer.
- Hartley, H. O. (1961), “The modified gauss-newton method for the fitting of non-linear regression functions by least squares”, *Technometrics*, vol 3, n 2, 269–280.
- Haupt, R. L., Haupt, S. E. (2004), “Practical genetic algorithms”, John Wiley & Sons, Inc.
- Hedar, A. R., Fukushima, M. (2006), “Tabu search directed by direct search methods for nonlinear global optimization”, *European Journal of Operational Research*, vol 170, 329-346.
- Hooke, R., Jeeves, T. A. (1961), “Direct search solution of numerical and statistical problems”, *Journal of the ACM*, vol 8, n 2, 212-229.
- Levy, A. V., Montalvo, A. (1985), “The tunneling algorithm for the global optimization of functions”, *Jornal Sci. Stat. Comput.*, vol 6, 15-29.
- Matsumoto, M., Nishimura, T. (1998), “Mersenne Twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator”, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation (TOMACS)*, vol 8, n 1, 3–30.
- McDonald, J. H. (2014), “Handbook of Biological Statistics”, Sparky House Publishing.
- Meintjes, K., Morgan, A. P. (1990), “Chemical equilibrium systems as numerical test problems”, *ACM Trans. Math. Softw.*, vol 16, n 2, 143-151.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Teller, M. N., Teller, E. (1953), “Equations of state calculations by fast computing machines”, *J. Chem. Phys.*, vol 21, 1087-1092.
- Michalewicz, Z. (1996), “Genetic algorithms + data structures = evolution programs”, Springer Verlag.
- More, J., Garbow, B., Hillstom, K. (1943), “Testing unconstrained optimization software”, *ACM Trans. Math. Software*, vol 7, 17-41.
- Nielsen, H. (2000), “UCTP - Test problems for unconstrained optimization”, Informatics and Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, DTU.
- Sacco, W. F., Rios-Coelho, A. C., Henderson, N. (2010), “A Metropolis algorithm combined with Hooke-Jeeves local search method applied to global optimization”, *Applied Mathematics and Computation*, vol 217, 843-853.
- Sacco, W. F., Oliveira, C. R. E. (2005), “New Stochastic Optimization Algorithm based on Particle Collision”, *Transactions of the American Nuclear Society*.
- Sacco, W. F., Oliveira, C. R. E., Pereira, C. M. N. A. (2006), “Two stochastic optimization algorithms applied to nuclear reactor core design”, *Progress in Nuclear Energy*, vol 58, n 6, 525-539.
- Sacco, W. F., Rios-Coelho, A. C. (2016), “A new metropolis optimisation method, the cross-section particle collision algorithm: Some preliminary results”, *International Journal of Nuclear Energy, Science and Technology*, vol 10, 59-71.
- Siarry, P., Berthiau, G., Durdin, F. and Haussy, J. (1997), “Enhanced simulated annealing for globally minimizing functions of many-continuous variables”, *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, vol 23, n 2, 209–228.
- Sobol, I. (1967), “On the distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals”, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, vol 7, n 4, 86-112.
- Storn, R., Price, K. (1997), “Differential evolution - a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces”, *Journal of Global Optimization*, vol 11, n 4, 341-359.
- Wackerly, D., Mendenhall, W., Scheaffer, R. (2014), “Mathematical Statistics with Applications”, Cengage Learning.
- Wolpert, D., Macready, W. (1997), “No free lunch theorems for optimization”, *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, vol 1, n 1, 67-82.

## STATISTICAL TEST TO COMPARE TWO VARIANTS OF THE PARTICLE COLLISION ALGORITHM

**Abstract.** Two variants of the Particle Collision Algorithm, the Hooke-Jeeves Particle Collision Algorithm (HJPCA) and the Cross-Section Particle Collision Algorithm (CSPCA), are presented. The main idea of this paper is to use a non-parametric statistics tool, the Wilcoxon signed-rank test in order to compare these two variants applied to benchmark problems, including complex test functions, non-linear systems and parameter-estimation problems. Both HJPCA and CSPCA were able to find the minimum global for the test functions. However, a different performance was noticed for the other set of problems.

**Palavras-chave:** Particle Collision Algorithm, statistical comparison, nonparametric statistics