

ESTRATÉGIA DE OTIMIZAÇÃO DE CUSTO COMPUTACIONAL PARA PROBLEMAS DE COMPETIÇÃO DE ESPÉCIES

Edilson Fernandes de Arruda

Programa de Engenharia de Produção, Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós Graduação
e Pesquisa em Engenharia, Universidade Federal do Rio de Janeiro
Cidade Universitária, Centro de Tecnologia, Bloco F, sala 103, Ilha do Fundão. Caixa
Postal 68507, Rio de Janeiro RJ, 21941-972
Email: EFARRUDA@PO.COPPE.UFRJ.BR

Claudia Mazza Dias

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ)
Instituto Multidisciplinar, Departamento de Tecnologias e Linguagens - DTL, Nova Iguaçu
Av. Governador Roberto Silveira, s/n, Moquetá -Nova Iguaçu, RJ - Brasil
Email: CMZDBR@YAHOO.COM

RESUMO

Este trabalho propõe uma estratégia de otimização que visa minimizar o custo computacional do cálculo de soluções de sistemas descritos por equações diferenciais. São desenvolvidos algoritmos adaptativos de refinamento para problemas de competição entre espécies descritos, por exemplo, pelas equações de Lotka e Volterra. Os resultados mostram que a implementação da estratégia proposta resulta em uma economia significativa de custo computacional.

PALAVRAS CHAVE: Otimização, Competição de Espécies, Diferenças Finitas.

Área Principal: AG & MA - PO na Agricultura e Meio Ambiente.

ABSTRACT

This paper proposes an optimization strategy that aims at minimizing the computational cost of solving differential equation systems. We propose adaptive grid refining algorithms for inter-species competition problems described, for instance, by Lotka and Volterra equations. The results suggest that the implementation of the proposed strategies results in significant computational cost reduction.

KEYWORDS: Optimization, Computational Cost, Inter-Species Competition, Finite Differences.

Main Area: AG & MA - OR in Agriculture and Environment.

1 Introdução

No mundo atual, os problemas envolvendo equações diferenciais encontram aplicação em diferentes áreas do conhecimento. Dentre os campos nos quais tais conhecimentos podem ser empregados encontram-se, por exemplo, problemas biológicos e de meio ambiente. Assim sendo, a abordagem desses problemas deve apresentar um caráter multidisciplinar, envolvendo conhecimentos na área de fenômenos de transporte, sistemas de controle, modelagem numérica e computacional, etc. Estas competências serão aplicadas no desenvolvimento de simuladores numéricos voltados para a resolução de problemas de competição de espécies com otimização do custo computacional.

Em particular, pretende-se abordar neste trabalho uma formulação matemática composta por um conjunto de equações diferenciais ordinárias que descrevem o problema de competição de espécies, como uma aplicação das metodologias de controle desenvolvidas. Tais equações podem ser solucionadas por meio de algoritmos linearmente convergentes. Entretanto, por se tratar de um problema contínuo, a solução exata dificilmente pode ser encontrada em tempo finito. Assim, opta-se por definir uma tolerância a priori e resolve-se um problema discreto aproximado, cuja solução encontra-se a uma distância inferior à tolerância da solução do problema contínuo original. Assim, a busca de uma aproximação discreta para o problema original é parte da formulação. Entretanto, frequentemente a definição da aproximação discreta é efetuada de maneira arbitrária. No presente trabalho, define-se a busca de uma solução a certa tolerância da solução original como um problema de otimização, cujo objetivo é minimizar o esforço computacional (tempo de computação) requerido para se alcançar a solução desejada.

Para a otimização do custo computacional utiliza-se, no presente trabalho, resultados de (Almudevar e Arruda, 2012), que provam que a taxa ótima de refinamento de um algoritmo aproximado com convergência linear é numericamente igual à taxa de convergência do algoritmo. A taxa de convergência do algoritmo é estimada como sendo a norma do erro relativo entre as soluções de modelos aproximados sucessivos. Para efeito de comparação, utiliza-se uma estratégia de refinamento que consiste em duplicar-se o tamanho da malha a cada iteração. Tal estratégia, proposta por Chow e Tsitsiklis (1991), é ótima em termos de complexidade de pior caso para um problema de otimização estocástica e é bastante utilizada na prática. A comparação realizada no presente artigo sugere que a estratégia proposta no presente artigo tem desempenho melhor que aquela sugerida por Chow e Tsitsiklis (1991), o que pode ser esperado em virtude dos resultados reportados por Almudevar e Arruda (2012).

2 Modelo Matemático

O Modelo Presa-Predador modela a relação entre indivíduos de duas espécies diferentes. A relação de predação ocorre quando os indivíduos de uma espécie (predadores) caçam os indivíduos da segunda espécie (presas) como alimento. Como consequência, essa relação tem grande impacto no número de indivíduos de ambas as espécies. Os matemáticos Alfred James Lotka (1880-1949) e Vito Volterra (1890-1940) desenvolveram paralelamente (1925 e 1926, respectivamente) os trabalhos pioneiros na modelagem e análise desse comportamento, considerando espécies que interagem e coabitam na mesma região. Assim, o número de indivíduos da população de presas depende diretamente da quantidade de indivíduos da população de predadores, e vice-versa.

A relação entre presas e predadores obedece às seguintes expressões (Murray, 1993):

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= \alpha N - \beta NP \\ \frac{dP}{dt} &= \gamma \beta NP - \delta P.\end{aligned}\tag{1}$$

Na equação acima: $N(t)$ é a população de presas em um instante t ; $P(t)$ é a população de predadores em um instante t ; α é a taxa intrínseca de crescimento das presas; β é a taxa de sucesso da caça; γ é a taxa de transformação da energia em novos indivíduos (predadores); e δ é a taxa de mortalidade dos predadores.

Vamos entender melhor o funcionamento do sistema da Eq. (1). Supondo que a alimentação das presas é abundante, não há restrições para sua reprodução, logo temos um crescimento exponencial para essa população na ausência de predadores. A variação do número de presas é então proporcional ao tamanho da população e a um termo de interação entre as populações. Esse termo representa a morte por predação e aparece com sinal negativo na equação correspondente às presas. Ele depende do tamanho das populações de predadores e presas e também de uma taxa de predação relacionada com a habilidade do predador em caçar sua presa. Este mesmo termo de interação aparece com sinal positivo na equação referente aos predadores já que representa o ganho energético para essa população que decorre da predação. Neste caso, o termo possui a constante que representa a porcentagem de energia geradora de novos indivíduos, ou seja ele representa a reprodução dos predadores. Como não se considera no modelo outra forma de morte dos predadores além da morte natural, se a população das presas for nula, a população de predadores decrescerá exponencialmente até a extinção da espécie. Note que a Eq. (1) descreve um sistema não-linear que não apresenta solução analítica geral. Para a solução do sistema adotaremos seu tratamento através de métodos numéricos.

Para o modelo de Lotka-Volterra o sistema segue uma trajetória fechada em torno de um ponto crítico, ou seja, as soluções do sistema são periódicas ao longo do tempo, o que nem sempre é muito realista. O modelo prevê que as presas apresentam um crescimento exponencial na ausência de predadores. Logo, $N \rightarrow \infty$ quando $t \rightarrow \infty$.

Pierre François Verhulst, matemático belga (1804–1849), criou um modelo no qual a população cresce até um limite máximo sustentável, ou seja, ela cresce mas tende a se estabilizar devido a disponibilidade limitada de recursos *apud* (Murray, 1993). Assim, seu modelo matemático incorporou a queda do crescimento da população sujeito a um fator inibidor de crescimento.

O modelo considera que a taxa de morte natural é proporcional ao quadrado do número de indivíduos presentes em um dado instante. A chamada equação logística tem a forma:

$$\frac{dN}{dt} = \alpha N - \nu N^2,\tag{2}$$

sendo ν a taxa de mortalidade. Combinando as equações (1) e (2), temos:

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= \alpha N - \beta NP - \nu N^2 \\ \frac{dP}{dt} &= \gamma \beta NP - \delta P.\end{aligned}\tag{3}$$

2.1 Solução das Equações

Para resolver os sistemas de equações descritos na seção anterior lançaremos faremos uso de métodos numéricos. Tais métodos nos fornecem a solução aproximada do problema que,

em geral, não apresenta solução analítica. Considera-se aproximações das derivadas através do Método das Diferenças Finitas, veja (Cunha, 2000).

2.2 Método das Diferenças Finitas - MDF

No MDF as derivadas das funções são aproximadas pela diferença entre os valores da solução discreta. As soluções aproximadas são obtidas através da série de Taylor (Burden e Faires, 2008).

Seja $x_0 \in \mathbb{R}$ e defina-se $h \in \mathbb{R}^+$ como o passo da malha, de forma que $x_i = x_0 \pm ih$; $i = 1, \dots, n$. Ou seja, o domínio é discretizado em um conjunto x_i de n pontos, definido por uma malha de passo h , para a qual são calculadas as aproximações das derivadas da função.

Considere a série de Taylor,

$$P_n(x) = y(x) + y'(x)(x - x_0) + \frac{y''(x)}{2!}(x - x_0)^2 + \frac{y'''(x)}{3!}(x - x_0)^3 + \dots + \frac{y^n(x)}{n!}(x - x_0)^n. \quad (4)$$

A série pode ser reescrita na forma:

$$y(x + h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2 y''(x)}{2!} + \dots + \frac{h^n y^n(x)}{n!}. \quad (5)$$

Considerando uma aproximação linear ($n = 1$), e agrupando os termos de ordem superior no erro da série, de modo que:

$$y(x + h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2 y''(\xi)}{2!}, \quad x \leq \xi \leq x + h, \quad (6)$$

obtem-se

$$y'(x) = \frac{y(x + h) - y(x)}{h} - \frac{hy''(\xi)}{2}, \quad x \leq \xi \leq x + h. \quad (7)$$

Esta aproximação da derivada $y'(x)$ é conhecida como *fórmula avançada* para a discretização da derivada de $y(x)$ ou ainda *diferença progressiva* (do inglês *forward*) (Burden e Faires, 2008).

Por outro lado, a Eq. (4) pode ainda ser reescrita como:

$$y(x - h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2 y''(x)}{2!} - \dots + \frac{h^n y^n(x)}{n!}. \quad (8)$$

Procedendo de forma análoga ao caso anterior, pode-se chegar ao seguinte resultado:

$$y'(x) = \frac{y(x) - y(x - h)}{h} + \frac{hy''(\xi)}{2}, \quad x - h \leq \xi \leq x. \quad (9)$$

A equação é conhecida como *fórmula atrasada* de $y'(x)$ ou *diferença regresiva* (*backward*). Para ambos os casos, ou seja, (7) e (9), o último termo corresponde ao erro da aproximação que é da ordem $O(h)$.

Acrescendo-se mais um termo ($n = 2$) na série de Taylor, temos:

$$y(x + h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2 y''(x)}{2!} + \frac{h^3 y'''(\xi_1)}{3!}, \quad x \leq \xi_1 \leq x + h,$$

$$y(x - h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2 y''(x)}{2!} - \frac{h^3 y'''(\xi_2)}{3!}, \quad x - h \leq \xi_2 \leq x.$$

Subtraindo-se as duas equações anteriores, temos:

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} - \frac{h^2 y'''(\xi)}{3!}, \quad x-h \leq \xi \leq x+h, \quad (10)$$

Note que, na equação acima, o erro na aproximação é da ordem de $O(h^2)$. A expressão (10) é conhecida como *diferenças centradas*.

3 Estratégia de Otimização

A fim de se obter uma precisão desejada otimizando-se, ao mesmo tempo, o custo computacional (tempo de computação) para se chegar à referida precisão, o presente trabalho propõe o uso de uma estratégia adaptativa de refinamento da malha x_i . Estratégia essa que refina o passo de malha iterativamente, de modo a fazer um melhor uso dos recursos computacionais.

Considere um algoritmo iterativo linear na forma

$$V_{k+1}(x) = TV_k(x), \quad x \in S, \quad (11)$$

sendo $|S|$ a cardinalidade do conjunto de pontos considerados e V_0 o ponto inicial. A fim de simplificar o cálculo do sistema acima, pode-se redefinir o algoritmo na forma:

$$V_{k+1}(x) = \tilde{T}_k V_k(x), \quad x \in S, \quad (12)$$

sendo que o operador \tilde{T}_k , $k \geq 0$ é uma aproximação do operador T , tal que

$$\|TV_k(x) - \tilde{T}_k V_k(x)\| < u_k. \quad (13)$$

Cabe ressaltar que \tilde{T}_k é um operador aproximado cuja utilização gera uma economia de custo computacional em relação ao emprego do operador T . O preço dessa economia é a inserção de um erro, limitado superiormente pela sequência u_k , $k \geq 0$. Para gerar uma economia computacional o operador \tilde{T}_k pode utilizar uma malha mais esparça no caso de um sistema de equações diferenciais, por exemplo.

Note que a precisão das equações (7), (9) e (10) é definida pelo valor do passo de malha h . Assim, estas podem ser simplificadas ao se utilizar uma malha com menos pontos (maior h), o que gera uma economia computacional. Por outro lado, uma malha com menos pontos gera um erro maior, cuja magnitude é limitada e é função do passo de malha utilizado. Dessa forma, os conceitos presentes no algoritmo da Eq. (12) podem ser utilizados no cálculo computacional das equações de modelos de presa-predador abordadas no presente trabalho. O objetivo do trabalho é obter a melhor forma de refinamento do passo de malha, de forma que o custo computacional na obtenção de uma precisão desejada seja minimizado.

Com relação à aplicação de operadores na forma da Eq. (12), foi demonstrado por Almudevar e Arruda (2012) que um modo de se decrescer a sequência de erros inseridos u_k para algoritmos de convergência linear é fazendo-se:

$$u_{k+1} \propto r u_k, \quad (14)$$

sendo r a taxa de convergência do algoritmo linear. Com esse decrescimento, o algoritmo aproximado converge para a solução exata do problema de forma ótima com respeito ao custo computacional.

O presente trabalho utiliza os resultados de (Almudevar e Arruda, 2012) para o problema de solução das equações do modelo presa-predador por meio do método diferenças

finitas. O objetivo é minimizar o custo computacional da solução do sistema, observando-se uma precisão desejada. Os resultados descritos em (Almudevar e Arruda , 2012) são utilizados diretamente nos modelos de diferenças progressivas e regressivas, Eq. (7) e (9), dado que as referidas equações são lineares. Para o modelo de diferenças centradas (Eq. (10)), utiliza-se $u_{k+1} \propto \sqrt{r}u_k$. A raiz quadrada é utilizada para adequar os métodos, uma vez que os resultados em (Almudevar e Arruda , 2012) foram derivados para algoritmos lineares.

A taxa de convergência em (14) é estimada, para o nosso problema, como o resíduo entre duas soluções de malhas sucessivas. Enquanto o resíduo for maior que a tolerância, continua-se refinando a malha. Dessa forma, na k -ésima iteração dos métodos de *diferenças progressivas* e *diferenças regressivas*, um passo de malha h_k será aplicado, de modo que:

$$h_{k+1} = r_k h_k,$$

com $h_0 = h_{\max}$ e $r_0 \triangleq \frac{1}{2}$. Note que h_{\max} é um parâmetro do algoritmo e que r_k , $k > 0$, representa o resíduo entre as soluções correspondentes aos passos de malha h_k e h_{k-1} . Para o método de *diferenças centradas*, que é de ordem 2, utiliza-se

$$h_{k+1} = \sqrt{r_k} h_k,$$

com $h_0 = h_{\max}$ e $r_0 = \frac{1}{4}$.

4 Experimentos Numéricos

Para melhor observar a estratégia que queremos usar neste trabalho precisamos de um método adaptativo de refinamento de malha estático. Embora as estratégias adaptativas sejam encontradas atualmente em maior número em publicações voltadas para o tratamento de equações diferenciais parciais (ver (Ahmed e Monaquel , 2011), (Wise, 2010), (Kwak e Lee , 2004)), encontra-se também trabalhos no contexto de equações diferenciais ordinárias como em (Jameson, 1983) e (Mavriplis, 1990). Entretanto, ao contrário do método aqui proposto, esses métodos são puramente empíricos e não abordam diretamente o problema de minimização do custo computacional.

Vamos construir um primeiro método usando MDF com diferenças progressivas e a seguinte estratégia de refinamento. Partimos do princípio de que $h_{\max} = h_0$. Além disso, $h > h_{\min}$. Então, enquanto o resíduo (diferença entre a solução atual e a anterior), $r >$ tolerância, fazemos $h_{k+1} = 0,5 h_k$, sendo k a iteração atual. Esse método não foi escolhido ao acaso. Trata-se de um método ótimo em termos de complexidade computacional de pior caso para um problema de otimização estocástica, ver (Chow e Tsitsiklis, 1991), bastante implementado na prática em algoritmos adaptativos para a solução de modelos de equações diferenciais parciais.

Usando esta estratégia de refinamento na solução por diferenças progressivas para o problema de Lotka-Volterra (1) com $\alpha = 1$, $\beta = 0,2$, $\delta = 0,5$ e $\gamma\beta = 0,04$ e considerando também as soluções iniciais $N(0) = 5$ e $P(0) = 2$, temos o resultado apresentado na Figura 1, para $h_{\max} = 0,01$, $h_{\min} = 0,001$ e $tol = 0,001$.

A Figura 2 mostra o espaço de fase, a relação entre presas e predadores, para este exemplo. Foram necessárias 6 malhas até atingir a tolerância, sendo que a última malha teve 80 000 pontos ($h = 6,25 \times 10^{-4}$). No total, cada função, N e P , foi avaliada 155.005 vezes durante todo o processo.

Nosso trabalho agora é testar a estratégia de refinamento ótimo, segundo a qual $h = r \cdot h$. Repetimos então nosso experimento, com os mesmos dados do teste anterior, obtendo os

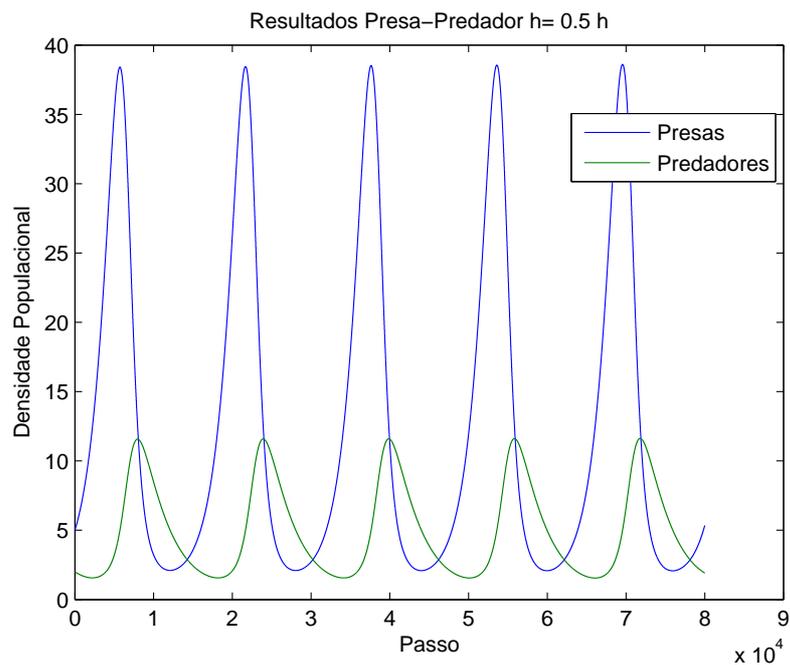


Figura 1: Presa-Predador com Refinamento $h = 0,5 h$

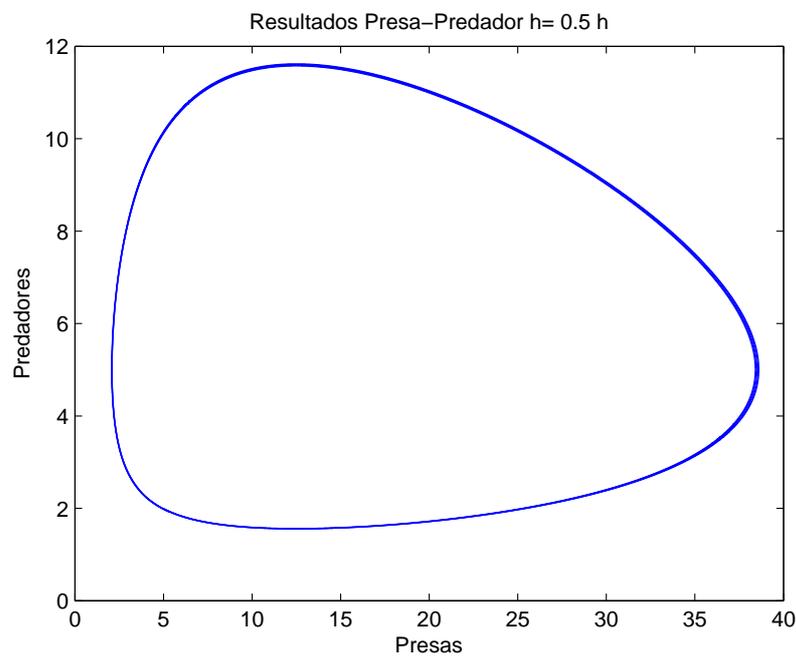


Figura 2: Espaço de Fase para o Problema Presa-Predador com refinamento $h = 0,5 h$.

resultados da Figura 3. Novamente foram geradas 6 malhas, mas neste caso, a última malha teve 50.000 pontos ($h = 0,001$). No total, as funções foram calculadas 105.005 vezes. Temos então uma economia de 37,5% no número de operações, e conseqüentemente, no tempo de processamento.

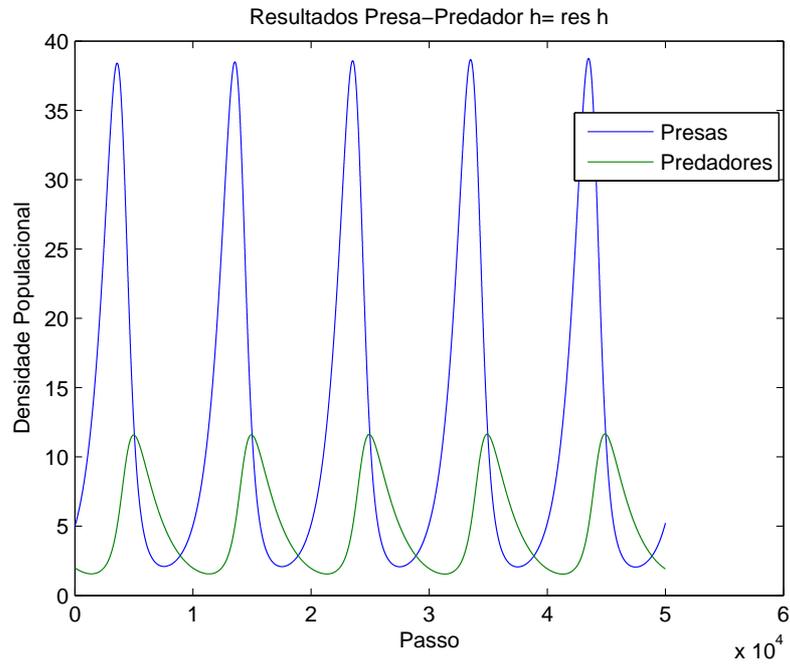


Figura 3: Presa-Predador com Refinamento Ótimo.

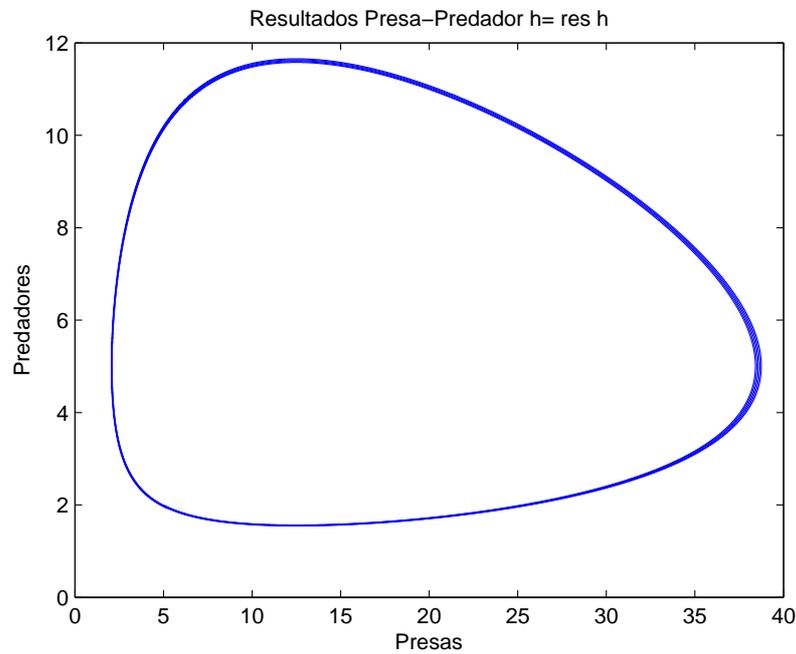


Figura 4: Espaço de Fase para Presa-Predador com Refinamento Ótimo.

Vamos agora trabalhar com o modelo logístico, descrito na Eq. (3) com $\alpha = 1$, $\beta = 0,2$, $\mu = 0,01$, $\gamma = 0,2$ e $\delta = 0,5$. Os resultados para o refinamento $h = 0,5 h$ se encontram na Figura 5.

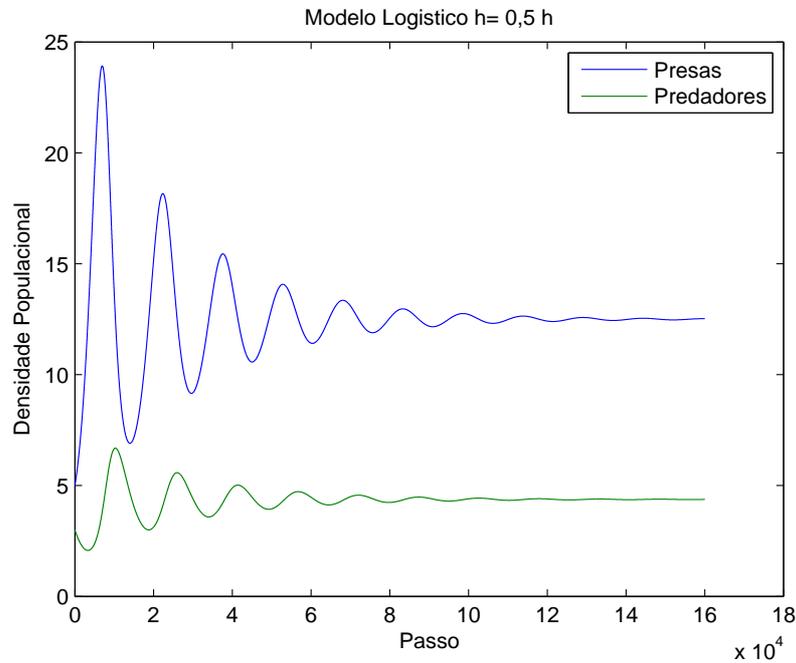


Figura 5: Modelo Logístico com $h = 0,5 h$.

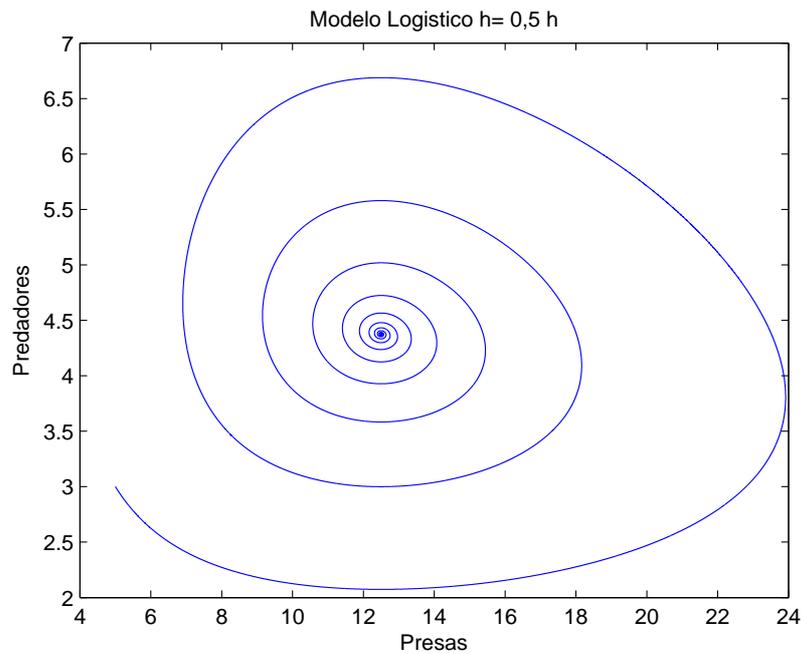


Figura 6: Espaço de Fase para Modelo Logístico com $h = 0,5 h$.

Foram geradas 6 malhas, sendo que a última com 16.000 pontos ($h = 6,25 \times 10^{-4}$). Cada função foi avaliada 310.005 vezes. Podemos observar o espaço de fase correspondente nas Figuras 7 e 8.

Na sequência, testamos a estratégia de refinamento ótimo para o problema. Apresentamos na Figura 7 os resultados.

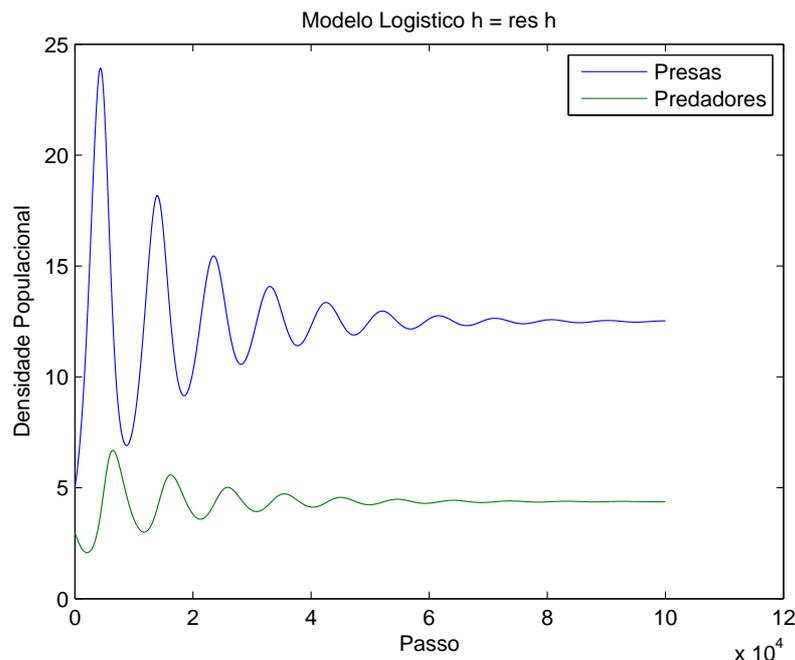


Figura 7: Modelo Logístico com Refinamento Ótimo

Novamente foram geradas 6 malhas, a última com 10.000 pontos ($h = 0,001$). As funções, neste exemplo, foram avaliadas 210.005 vezes, cada. Sendo assim, a economia foi de 37,5% no número de avaliações necessárias. Observe ainda a semelhança nos resultados, especialmente comparando as Figuras 6 e 8 que apresentam os espaços de fase.

Este exemplo foi também testado com o tratamento numérico por diferenças centradas, obtendo-se resultados semelhantes.

5 Conclusões

Este trabalho apresentou uma estratégia adaptativa ótima de simples implementação baseada no cálculo do resíduo entre soluções sucessivas para o problema de competição entre espécies, modelado matematicamente por conjuntos de equações diferenciais ordinárias, conhecidos como problema presa-predador e modelo logístico de competição. Para os exemplos testados os resultados se mostraram eficientes, preservando a qualidade das soluções e apresentando uma economia significativa de custo computacional. Trata-se de uma estratégia interessante, que preserva a qualidade das soluções ao mesmo tempo em que minimiza o tempo computacional necessário para o cálculo destas.

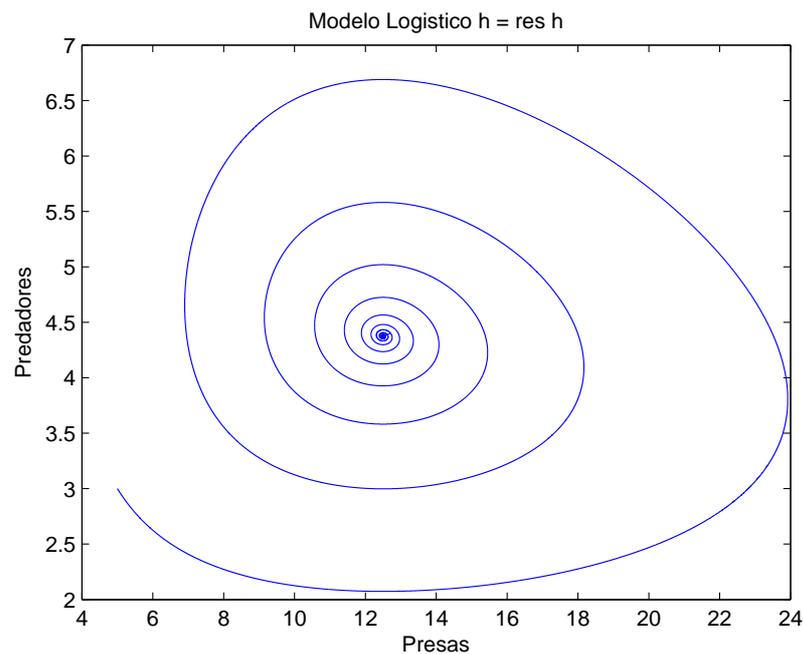


Figura 8: Espaço de Fase para Modelo Logístico com Refinamento Ótimo.

Referências

- Ahmed., B. S., Monaquel, S.J., 2011. Multigrid Method for Solving 2D-Poisson Equation with Sixth Order Finite Difference Method, *International Mathematical Forum*, Vol. 6(55), pp.2729 - 2736
- Almudevar, A., Arruda, E.F., 2012. Optimal Approximation Schedules for a Class of Iterative Algorithms, With an Application to Multigrid Value Iteration. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 57(12), pp.3132-3146, doi: 10.1109/TAC.2012.2203053
- Burden, R. L., Faires, J. D., 2008. *Análise Numérica*. Cengage Learning, 2a Ed.
- Chow, C., Tsitsiklis, J.N., 1991. An optimal one-way multigrid algorithm for discrete-time stochastic control, *IEEE Transactions on Automatic Control*, 36(8), pp.898 -914.
- Cunha, M. C., 2000. *Métodos Numéricos*. 2a Ed.,UNICAMP.
- Jameson, A., 1983, Solution of the Euler equation for two Dimensional Transonic Flow by a Multigrid Method, *Applied Mathematics and Computation*, 13, pp. 327-355.
- Kwak, D. Y., Lee, J. S., 2004. Multigrid analysis for higher order finite difference scheme, *Journal of Numerical Mathematics*, 12, (4), pp. 285-296.
- Martins, M.V.C., 2006. *Simulação Computacional de Sistemas Dinâmicos*. Monografia de Graduação em Ciência da Computação. Universidade Federal de Lavras, MG.
- Mavriplis, D. J., 1990, Accurate multigrid solution of the Euler equations on unstructured and adaptive meshes, *AIAA Journal*, 28(2), pp. 213-221.
- Murray, J.D., 1993. *Mathematical Biology*. *Biomathematics Texts*, vol. 19, Springer, 2nd ed., 1993.

Wise, S.M., 2010, Unconditionally Stable Finite Difference, Nonlinear Multigrid Simulation of the Cahn-Hilliard-Hele-Shaw System of Equations, *Journal of Scientific Computing*, 44 (1), pp. 38 - 68.

Zill, D. G., 2011. *Equações Diferenciais com Aplicações em Modelagem*. Cengage Learning, 2a Ed., 2011.