



UMA ABORDAGEM DE INTELIGÊNCIA DE EXAME PARA ANÁLISE DE REGRESSÃO DE CURVAS DE RESSONÂNCIA DE PLÁSMON DE SUPERFÍCIE EM OTTO CHIPS

Trabalho de Conclusão de Curso

Engenharia da Computação

Adonais Luna Pereira da Silva
Orientador: Prof. Sergio Campello Oliveira



**Universidade de Pernambuco
Escola Politécnica de Pernambuco
Graduação em Engenharia de Computação**

ADONIAS LUNA PEREIRA DA SILVA

**UMA ABORDAGEM DE INTELIGÊNCIA
DE EXAME PARA ANÁLISE DE
REGRESSÃO DE CURVAS DE
RESSONÂNCIA DE PLÁSMON DE
SUPERFÍCIE EM OTTO CHIPS**

Monografia apresentada como requisito parcial para obtenção do diploma de Bacharel em Engenharia de Computação pela Escola Politécnica de Pernambuco – Universidade de Pernambuco.

Recife, julho de 2020.

Adonias Luna Pereira da Silva

Uma abordagem de inteligência de enxame para análise de regressão de curvas de ressonância de plásmon de superfície em Otto chips/ Adonias Luna Pereira da Silva – Recife – PE, Brasil, julho 2020-29 p.

Orientador: Sergio Campello Oliveira

Trabalho de Conclusão de Curso – Engenharia da Computação

Escola Politécnica de Pernambuco

Universidade de Pernambuco, julho de 2020

1. PSO 2. Ressonância de plásmon de superfície 3. Otto Chip I. Prof. Sergio Campello Oliveira. II. Universidade de Pernambuco. III. Escola politécnica, IV. Título

MONOGRAFIA DE FINAL DE CURSO

Avaliação Final (para o presidente da banca)*

No dia 15/7/2020, às 15h00min, reuniu-se para deliberar sobre a defesa da monografia de conclusão de curso do(a) discente **ADONIAS LUNA PEREIRA DA SILVA**, orientado(a) pelo(a) professor(a) **SÉRGIO CAMPELLO OLIVEIRA**, sob título A swarm intelligence approach for regression analysis of surface plasmon resonance curves in Otto chips, a banca composta pelos professores:

BRUNO JOSÉ TORRES FERNANDES (PRESIDENTE)
SÉRGIO CAMPELLO OLIVEIRA (ORIENTADOR)

Após a apresentação da monografia e discussão entre os membros da Banca, a mesma foi considerada:

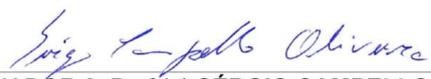
Aprovada Aprovada com Restrições* Reprovada

e foi-lhe atribuída nota: 10,0 (Dez)

*(Obrigatório o preenchimento do campo abaixo com comentários para o autor)

O(A) discente terá 07 dias para entrega da versão final da monografia a contar da data deste documento.


AVALIADOR 1: Prof (a) **BRUNO JOSÉ TORRES FERNANDES**


AVALIADOR 2: Prof (a) **SÉRGIO CAMPELLO OLIVEIRA**

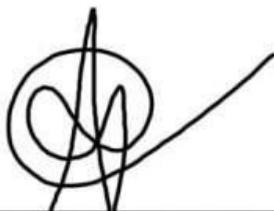
AVALIADOR 3: Prof (a)

* Este documento deverá ser encadernado juntamente com a monografia em versão final.

Autorização de publicação de PFC

Eu, **ADONIAS LUNA PEREIRA DA SILVA** autor(a) do projeto de final de curso intitulado: **A swarm intelligence approach for regression analysis of surface plasmon resonance curves in Otto chips**; autorizo a publicação de seu conteúdo na internet nos portais da Escola Politécnica de Pernambuco e Universidade de Pernambuco.

O conteúdo do projeto de final de curso é de responsabilidade do autor.



ADONIAS LUNA PEREIRA DA SILVA



Orientador(a): **Sérgio Campello Oliveira**

Coorientador(a):



Prof, de TCC: **Daniel Augusto Ribeiro Chaves**

Data: 15/7/2020

Resumo

O uso da configuração de Otto, como alternativa à de Kretschmann, na construção de sensores de ressonância de plásmon de superfície (RPS) é uma área de pesquisa pouco desenvolvida. Recentemente, uma versão de um dispositivo baseado na configuração de Otto, batizado de chip Otto, foi fabricada. Procedimentos de regressão podem ser usados para ajudar na caracterização do chip através do ajuste dos parâmetros do modelo da curva de reflectância. No entanto, como em qualquer procedimento de regressão clássico, o palpite inicial deve estar próximo o suficiente da solução final para evitar a convergência para um mínimo local. Uma abordagem alternativa ao procedimento clássico de regressão é o uso de técnicas computacionais inspiradas em enxames. Inteligência de enxame, como esta área da ciência da computação é conhecida, tem sido usada com sucesso por engenheiros em diversos problemas de otimização. Um algoritmo proeminente é o Particle Swarm Optimization (PSO), que se destaca por seu baixo custo computacional, simplicidade de implementação e alta eficiência na busca de soluções ótimas globais. Este trabalho descreve o uso de PSO na análise de regressão de curvas experimentais de RPS. Foi demonstrado que a técnica de PSO produz melhores resultados quando comparada com os métodos clássicos de análise de regressão

Abstract

The use of the Otto configuration, as an alternative to Kretschmann's, in the construction of Surface Plasmon Resonance (SPR) sensors is an underdeveloped research area. Recently, a version of an Otto based device, baptized as Otto chip, was manufactured. Regression analysis procedures can be used to help the chip characterization by adjusting parameters of the model reflectance curve. However, as in any classical regression procedure, the initial guess must be close enough to the final solution to avoid convergence to a local minimum. An alternative approach to the classical regression procedure is the use of computational techniques inspired on swarms. Swarm intelligence, as this area of computer science is known, has successfully been used by engineers in various optimization problems. One prominent algorithm is the Particle Swarm Optimization (PSO) that stands out for its low computational cost, simplicity of implementation and high efficiency on finding global optimum solutions. This paper describes the use of PSO in regression analysis of experimental SPR curves. It was shown that the PSO technique yields better results when compared with classical regression analysis methods

Sumário

Índice de Figuras	9
Índice de Tabelas	10
Tabela de Siglas	11
Capítulo 1: Introdução	12
Capítulo 2: Metodologia	16
Capítulo 3: Resultados	18
Capítulo 4: Conclusões	21
Bibliografia	22
Anexo A: Cópia artigo Original	24
Anexo B: Carta de Aceitação	28

Índice de Figuras

Figura 1. Configuração de Otto	13
Figura 2. Exemplo de uma curva de reflectância de um chip Otto de ouro, medido à 975,1 nm. [3]	14
Figura 3. Taxa de redução do erro versus número de iterações utilizando PSO com 500 partículas e fator de constrição.	17
Figura 4. Comparação entre as melhores curvas para os dados experimentais da Figura 1.	19

Índice de Tabelas

Tabela 1. Parâmetros obtidos do PSO e do método baseado em gradiente. μ :
Média, σ : Desvio padrão

Tabela de Siglas

RPS - Ressonância de plásmon de superfície

nm - Nanômetro

PSO - Particle swarm optimization (otimização de enxame de partículas)

LASER - Light amplification by stimulated emission of radiation (Amplificação da luz por emissão estimulada de radiação)

gbest - Global best (Melhor global)

pbest - Personal best (Melhor pessoal)

Capítulo 1

Introdução

A ressonância de plasmons de superfície (RPS) [1] é um mecanismo de transdução que tem sido usado com sucesso para detectar mudanças nas estruturas de interface. Existem várias configurações nas quais a RPS ocorre, dentre elas está a configuração Otto, utilizada no chip Otto [3]. O chip Otto é uma estrutura multicamadas com um gap de ar entre o vidro e a superfície metálica.

Devido à pequena dimensão do gap, o processo de fabricação do chip Otto é suscetível a erros, por isso sua caracterização [8] é muito importante antes de seu uso como sensor. Esta caracterização pode ser feita medindo a dependência angular da curva de reflectância e usando regressão não linear para extrair constantes ópticas e valores estruturais do chip multicamada Otto, contudo a convergência do procedimento é fortemente dependente do ponto de partida.

Este artigo examina o uso da Otimização de Enxame de Partículas (PSO) [6] para minimizar o erro quadrático entre curvas experimentais e teóricas. Os resultados mostram que a PSO produz melhores resultados que os métodos clássicos em todas as curvas experimentais investigadas.

1.1 RPS

O esquema para excitação de plasmons de superfície na configuração de Otto é mostrado na *Figura 1*. Um raio laser incidente atinge a estrutura multicamada fazendo um ângulo θ . A dependência angular da RPS pode ser observada pela diminuição na intensidade da luz refletida, como mostrado na *Figura 2* [8].

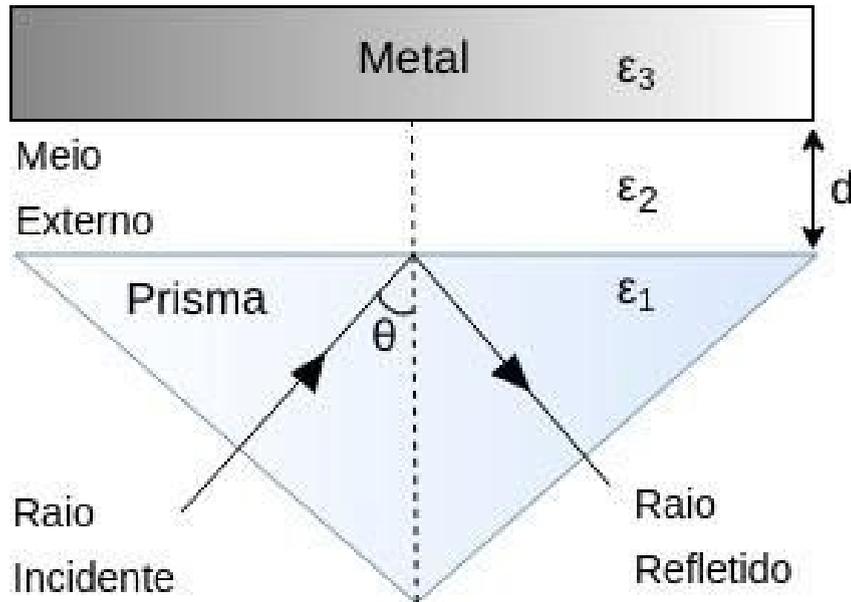


Figura 1. Configuração de Otto

A curva de reflectância experimental é obtida variando o ângulo de incidência θ , usando um refletômetro automatizado [8] previamente desenvolvido. A reflexão teórica R_{theo} é dada por [2],

$$R_{theo} = \left| \frac{r_{12} + r_{23} \exp(-2jk_2d)}{1 + r_{12}r_{23} \exp(-j2k_2d)} \right|^2$$

Os coeficientes r são dados por [2]

$$r_{i,i+1} = \frac{\varepsilon_{i+1}k_i - \varepsilon_i k_{i+1}}{\varepsilon_{i+1}k_i + \varepsilon_i k_{i+1}}$$

com

$$k_i = k_0[\varepsilon_i - \varepsilon_1(\sin\theta)^2]^{\frac{1}{2}}$$

onde d é a espessura do gap ilustrado na Figura 1 e ε_i é permissividade complexa da camada i e k_i o número de onda na camada i .

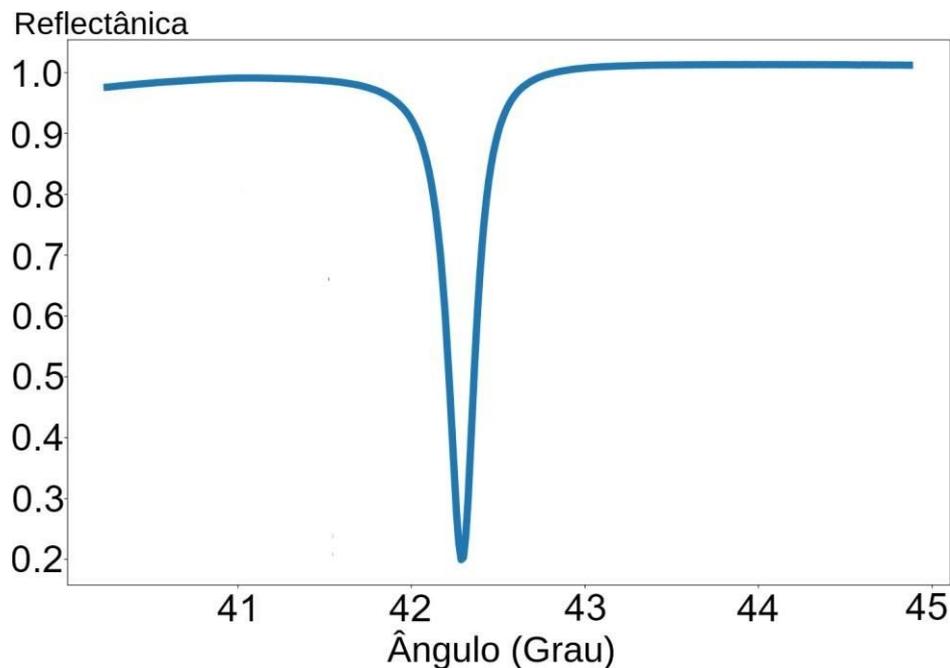


Figura 2. Exemplo de uma curva de reflectância de um chip Otto de ouro, medido à 975,1 mm. [3]

1.2 Particle Swarm Optimization

PSO é um algoritmo inspirado no comportamento social de bandos de aves em busca de comida [6]. É um algoritmo baseado na população em que as possíveis soluções são representadas como partículas. As posições das partículas são os valores dos parâmetros da função objetivo e o foco é encontrar a melhor posição que a otimize.

As partículas possuem quatro atributos: (I) um vetor de posição no espaço de busca; (II) um vetor de velocidade, responsável por guiar e controlar o movimento das partículas; (III) a melhor posição encontrada ao longo do processo de busca das partículas; (IV) e a melhor posição global obtida entre todas as partículas [6], [14].

O PSO é dependente da topologia de comunicação, ou seja, como as partículas compartilham informações umas com as outras [10]. Uma topologia de comunicação bem conhecida é a global, na qual as partículas têm suas posições atualizadas de acordo com suas melhores posições individuais (*pbest*) e a melhor

posição encontrada pelo enxame como um todo (*gbest*) . Essa topologia leva a uma convergência rápida e pode ser uma boa abordagem para problemas com poucos mínimos locais [5]. O PSO é dependente de seu comportamento de velocidade e, neste trabalho, foram utilizados a inércia [4] e o fator de constrição Clerc [9].

Capítulo 2

Metodologia

As refletâncias experimentais foram obtidas de um chip Otto com três camadas: prisma de vidro BK7, gap de ar e um filme de ouro [8]. O efeito de RPS foi observado em 20 pontos diferentes neste chip. A reflectância foi medida para 350 ângulos θ diferentes de incidência para cada ponto.

2.1 Função Fitness

Os parâmetros da função de otimização são a espessura do gap de ar d e a permissividade complexa do ouro ε_3 , onde $\varepsilon_3 = \varepsilon' + j\varepsilon''$. A função fitness pode então ser representada por

$$\Delta(d, \varepsilon', \varepsilon'') = \sum_{j=1}^J (R_{theo}(\theta_j, \varepsilon', \varepsilon'', d) - R_{expj})^2$$

onde $J = 350$ é o número de ângulos incidentes medidos no experimento e R_{expj} é o valor da reflectância experimental no ângulo θ_j .

2.2 Determinação dos parâmetros

Um conjunto de número de partículas {30, 50, 100, 200, 300, 400, 500}, um conjunto de números de iterações {30, 50, 100} e algumas estratégias de inércia: constante [14], fator de constricção [9], aleatório [11], recozimento simulado [12], caótico [13] e linear decrescente [7] foram testados para identificar a melhor configuração de algoritmo ser utilizada.

Para cada combinação de número de partículas, número de iterações e de estratégia de inércia, foram feitas 100 execuções do PSO para todos os 20 pontos do chip Otto. O erro médio e a variância das configurações foram comparados. Os testes mostraram que a configuração com 500 partículas,

número de iterações maior ou igual a 30 e Clerc, como a estratégia de inércia, têm a menor variância e o menor erro médio.

Para determinar o número apropriado de iterações, foi analisada a redução percentual do erro, conforme ilustrado na *Figura 3*. Como pode ser observado na figura, o valor do erro cai para 0,0001% após a iteração 30. Dado esse comportamento, definimos o valor para o número de iterações como 30.

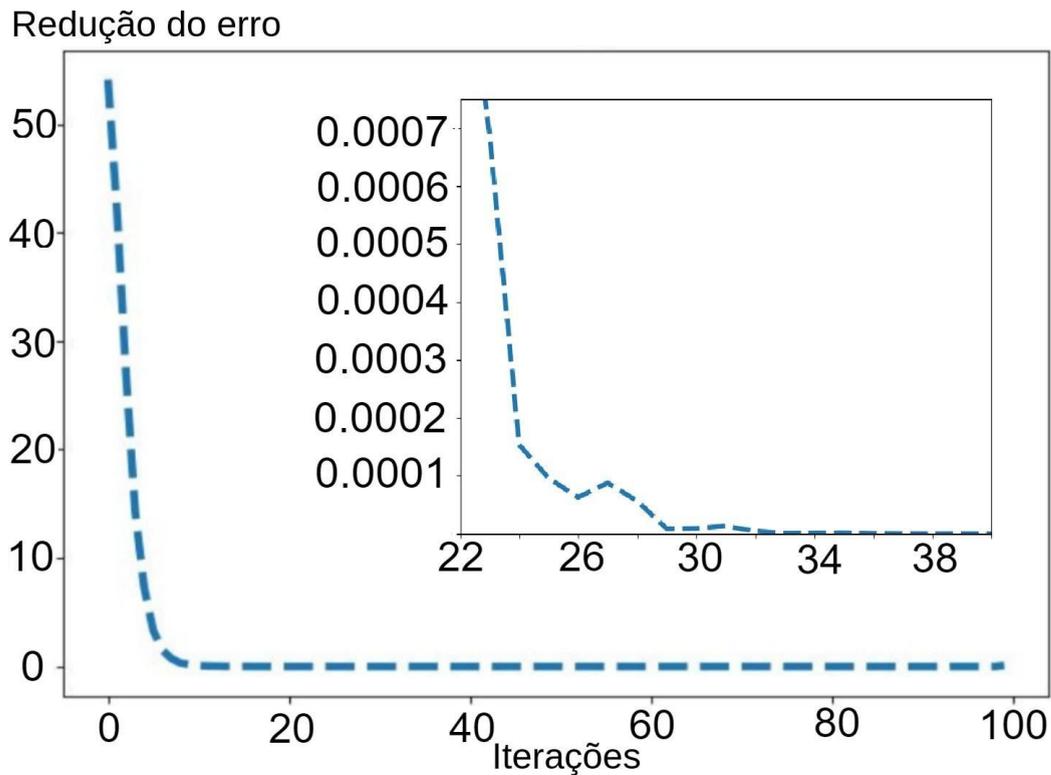


Figura 3. Taxa de redução do erro versus número de iterações utilizando PSO com 500 partículas e fator de constrição.

Capítulo 3

Resultados

O método baseado em gradiente para regressão não linear atualmente usado para minimizar o erro quadrático médio entre dados experimentais e a função fitness gera dois conjuntos de parâmetros de possíveis soluções [3].

Com a finalidade de comparar o desempenho do PSO com a regressão gradiente convencional, 100 execuções do PSO foram realizadas em um conjunto de dados diferente daquele usado para determinar a melhor configuração PSO. A configuração escolhida foi a com 30 iterações, 500 partículas e fator de constrição por conta de sua menor variância e erro médio.

Em 13 pontos, todas as 100 execuções de PSO encontraram erros menores do que aqueles de ambas as soluções do método de regressão de gradiente. Nos outros 7 pontos foram encontrados erros menores em pelo menos em 91 execuções do PSO.

Uma vez que os experimentos realizem 100 execuções do PSO para cada ponto e selecione o melhor resultado delas, o PSO alcançou melhores resultados para todos os 20 pontos de chip da Otto investigado. O erro quadrático encontrado pelo PSO foi, no melhor dos casos, 10,27 vezes menor e, no pior dos casos, 1,86 vezes menor do que o obtido pela abordagem de regressão gradiente. A *Figura 4* ilustra uma comparação direta, para os dados experimentais da *Figura 2* na qual, na melhor execução, o PSO encontrou um erro de 0,0054 enquanto os dois

baseados em gradiente encontraram erros de 0,0555 e 0,0445

Reflectância

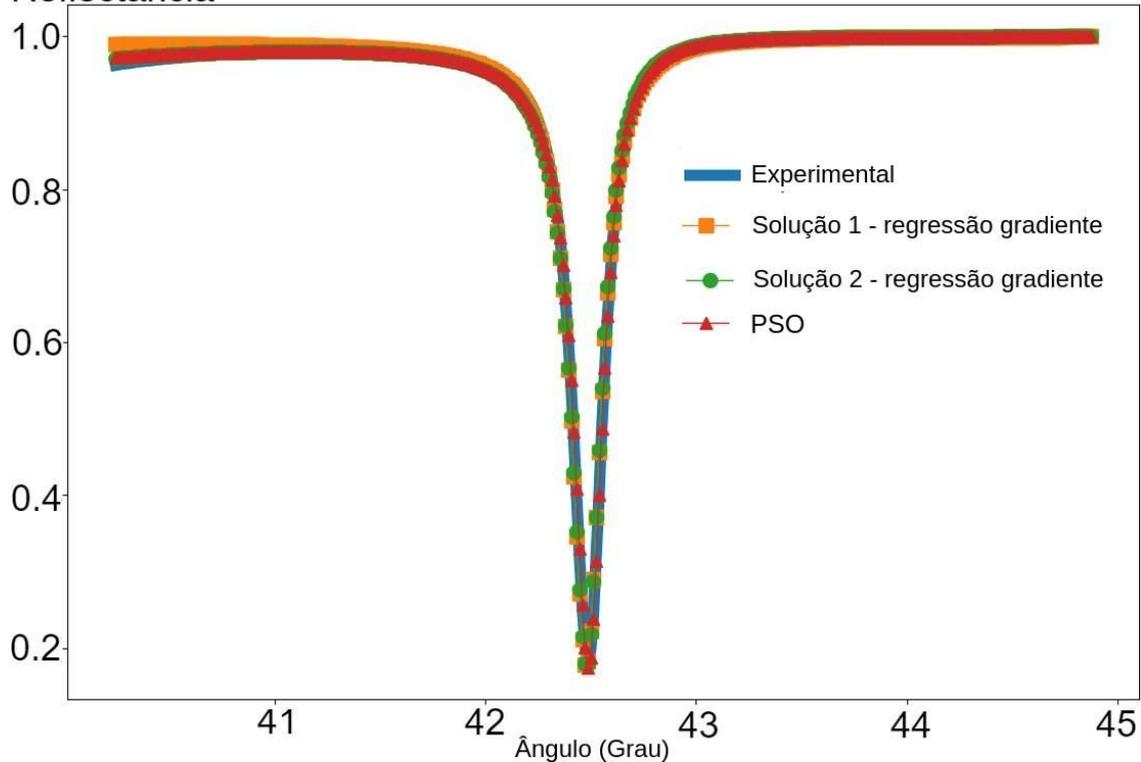


Figura 4. Comparação entre as melhores curvas para os dados experimentais da Figura 1.

A Tabela I lista os resultados médios obtidos das soluções do método baseado em gradiente e PSO. Os resultados sugerem que o PSO tende a encontrar valores de parâmetros entre os valores das duas soluções de métodos baseados em gradientes. O erro quadrático encontrado pelo PSO é, em média, duas vezes menor que os métodos clássicos usados anteriormente.

Parâmetro/Método	Solução		PSO
	Gradiente 1	Gradiente 2	
$\mu(-\epsilon')$	26.7	27.4	26.9
$\sigma(-\epsilon')$	2.1	2.3	2.0
$\mu(-\epsilon'')$	0.6	1.7	1.3

$\sigma(-\varepsilon'')$	0.2	0.3	0.4
$\mu(d)$	1.6	1.9	1.8
$\sigma(d)$	0.03	0.1	0.2
$\mu(\text{erro quadrático})$	0.4	0.4	0.2

Tabela 1. Parâmetros obtidos do PSO e do método baseado em gradiente. μ : Média, σ : Desvio padrão

Capítulo 4

Conclusões

Tradicionalmente, a abordagem do PSO é empregada em problemas de otimização. Neste artigo, adaptamos a abordagem para aplicação na análise de regressão de dispositivos Otto, minimizando o erro quadrático entre valores teóricos e experimentais das curvas de RPS geradas por esses dispositivos.

Ao contrário do método convencional de regressão gradiente, a abordagem do PSO não requer um palpite inicial como ponto de partida. Esse recurso permite a realização de regressão para uma ampla variedade de formas de curva, incluindo aquelas com um efeito de ressonância mal definido. Nesses casos, um palpite inicial para o conjunto de parâmetros é difícil de estimar, por sua vez, gerando uma convergência ruim ou nenhuma.

Com a abordagem PSO, por outro lado, uma solução global pode ser encontrada, e a automação do procedimento pode ser empregada para a análise de regressão de muitas curvas experimentais.

Neste primeiro estudo, o PSO foi aplicado para encontrar apenas uma solução. Sabe-se que existem dois conjuntos de parâmetros que produzem soluções próximas para o problema de regressão [3]. Trabalhos futuros visam abranger a abordagem para obter os dois conjuntos de solução.

Uma vez que a PSO tenha mostrado maior precisão e dada a sua capacidade única de encontrar resultados, mesmo para curvas de RPS mal definidas, pode-se concluir que a abordagem PSO representa uma excelente ferramenta para caracterização em lote de dispositivos Otto chips.

Bibliografia

[1] A. Otto, "Spectroscopy of surface polaritons by attenuated total reflections," Optical Properties of solids, New Developments, B. O. Seraphin.Ed, North-Holland, Amsterdam (1975), Ch.13.

[4] E. Fontana, "Analysis of optical surfaces by means of surface plasmon spectroscopy," in IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, vol. 45, no. 2, pp. 399-405, April 1996. doi: 10.1109/19.492755

[2] E. Fontana, J. Kim, I. Llamas-Garro and G. O. Cavalcanti, "Microfabricated Otto chip device for surface plasmon resonance-based optical sensing," Appl. Opt., vol. 54, no. 31, pp. 9200-9204, 2015.

[14] Eberhart RC, Shi Y. Comparing inertia weights and constriction factors in particle swarm optimization. In Proceedings of the 2000 congress on evolutionary computation. CEC00 (Cat. No. 00TH8512) 2000 Jul 16(Vol. 1, pp. 84-88). IEEE

[13] Engelbrecht AP. Particle swarm optimization: Global best or localbest?. In 2013 BRICS congress on computational intelligence and 11th Brazilian congress on computational intelligence 2013 Sep 8 (pp. 124-135). IEEE.

[5] J. Kennedy and R. Eberhart, "Particle swarm optimization," Proceedings of ICNN'95 - Intl. Conf. on Neural Networks, Perth, Australia, 1995, pp. 1942-1948 vol.4.

[12] J. Xin, G. Chen and Y. Hai, "A Particle swarm optimizer with multi-stage linearly- decreasing inertia Weight," 2009 Intl. Joint Conf. on Comput. Sciences and Optimization, Sanya, Hainan, 2009, pp. 505-508.

[3] Y. Lee, S. Sim, M. R. N. Santos, G. F. Fernandes, I. Llamas-Garro, E. Fontana and J. Kim, "Reflectance Analysis of the Otto Chip Using an Automated Reflectometer," 2018 Intl. Conf. on Opt. MEMS and Nanophotonics, Lausanne, Switzerland, 2018, pp. 1-2.

[8] M. Clerc and J. Kennedy, "The particle swarm-explosion, stability, and convergence in a multidimensional complex space," IEEE Trans. on Evol. Comput., pp. 58-73, Vol.6, No.1, 2002.

- [7] R.C. Eberhart, J. Kennedy, "A new optimizer using particle swarm theory," Proc. of 6th Symp. on Micro Machine and Human Sci., Nagoya, Japan, 1995, pp. 39-43.
- [9] R. C. Eberhart and Y. Shi, "Tracking and optimizing dynamic systems with particle swarms," Proc. of the 2001 Congress on Evol. Comput., Seoul, South Korea, 2001, pp. 94-100, vol. 1.
- [10] W. Al-Hassan, M. B. Fayek and S. I. Shaheen, "PSOSA: An Optimized Particle Swarm Technique for Solving the Urban Planning Problem," 2006 Intl. Conf. on Computer Eng. and Systems, Cairo, Egypt, 2006, pp. 401-405.
- [11] Y. Feng, G. Teng, A. Wang and Y. Yao, "Chaotic Inertia Weight in Particle Swarm Optimization," 2nd. Intl. Conf. on Innovative Comput., Inf. and Control, Kumamoto, Japan, 2007, pp. 475-475.
- [6] Y. Shi and R. Eberhart, "A modified particle swarm optimizer," 1998 IEEE Intl. Conf. on Evolut. Comput. Proc., Anchorage, USA, 1998, pp. 69-73.

Anexo A: Cópia artigo Original

Esse trabalho é uma tradução e reformatação de artigo originalmente publicado em na conferência imoc 2019 desenvolvido por Adonias Luna Pereira da Silva, Manoel Alves de Almeida Neto, Sergio Campello Oliveira, Gustavo Oliveira Cavalcanti, e Eduardo Fontana com referência .

A swarm intelligence approach for regression analysis of surface plasmon resonance curves in Otto chips

Adonias Luna Pereira da Silva
Escola Politécnica de Pernambuco
Universidade de Pernambuco
Recife, Brazil
alps@ecomp.poli.br

Manoel Alves de Almeida Neto
Escola Politécnica de Pernambuco
Universidade de Pernambuco
Recife, Brazil
maan@ecomp.poli.br

Sérgio Campello Oliveira
Escola Politécnica de Pernambuco
Universidade de Pernambuco
Recife, Brazil
sergio.campello@upe.br

Gustavo Oliveira Cavalcanti
Escola Politécnica de Pernambuco
Universidade de Pernambuco
Recife, Brazil
gustavooc@poli.br

Eduardo Fontana
Departamento de Eletrônica e Sistemas
Universidade Federal de Pernambuco
Recife, Brazil
fontana@ufpe.br

Abstract—The use of the Otto configuration, as an alternative to Kretschmann's, in the constriction of Surface Plasmon Resonance (SPR) sensors is an underdeveloped research area. Recently, a version of an Otto based device, baptized as Otto chip, was manufactured. Regression analysis procedures can be used to help the chip characterization by adjusting parameters of the model reflectance curve. However, as in any classical regression procedure, the initial guess must be close enough to the final solution to avoid convergence to a local minimum. An alternative approach to the classical regression procedure is the use of computational techniques inspired on swarms. Swarm intelligence, as this area of computer science is known, has successfully been used by engineers in various optimization problems. One prominent algorithm is the Particle Swarm Optimization (PSO) that stands out for its low computational cost, simplicity of implementation and high efficiency on finding global optimum solutions. This paper describes the use of PSO in regression analysis of experimental SPR curves. It was shown that the PSO technique yields better results when compared with classical regression analysis methods.

Index Terms—particle swarm optimization, surface plasmon resonance, Otto chip, PSO, regression analysis

I. INTRODUCTION

Surface plasmon resonance (SPR) [1] is a transduction mechanism that has successfully been used to detect changes in interface structures. There are several configurations in which SPR occurs, among them there is the Otto configuration, used in the Otto chip [2]. The so-called Otto chip is a multilayer structure with an air gap between glass and metal surface. Due to the small gap dimension, Otto chip manufacturing

Research developed with the support of UPE and UFPE and sponsored by CAPES and CNPq.

978-1-7281-3099-6/19/\$31.00 ©2019 IEEE

process is susceptible to errors, so its characterization [3] is very important before its use as a sensor. This characterization can be done by measuring the angular reflectance curve and using non-linear regression analysis to extract optical constants and structural values of the multilayer Otto Chip, but convergence of the procedure is strongly dependent on the starting point. This paper examines the Particle Swarm Optimization (PSO) [5] usage to minimize the quadratic error between experimental and theoretical curves. Results show that PSO yields better results than classical methods in all experimental curves investigated.

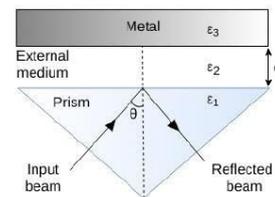


Fig. 1. Otto configuration.

II. SPR

The scheme for excitation of surface plasmons in the Otto configuration is shown in Fig. 1. An incident laser beam strikes the multilayer structure at an angle θ . The angular dependence of the SPR can be observed by a decrease in the intensity of the reflected light, as shown in Fig. 2 [3].

The experimental reflectance curve is obtained by varying the incidence angle θ , using an automated reflectometer [3] previously developed. The theoretical reflectance R_{theo} is given by [4],

$$R_{theo} = \left| \frac{r_{12} + r_{23} \exp(-2jk_2d)}{1 + r_{12}r_{23} \exp(-j2k_2d)} \right|^2. \quad (1)$$

The r coefficients are given by [4]

$$r_{i,i+1} = \frac{\varepsilon_{i+1}k_i - \varepsilon_i k_{i+1}}{\varepsilon_{i+1}k_i + \varepsilon_i k_{i+1}}, \quad (2)$$

with

$$k_i = k_0[\varepsilon_i - \varepsilon_1(\sin\theta)^2]^{\frac{1}{2}}. \quad (3)$$

where d is the gap thickness illustrated in Fig. 1, ε_i is the complex permittivity of the i^{th} layer and k_i the wavenumber on the i^{th} layer.

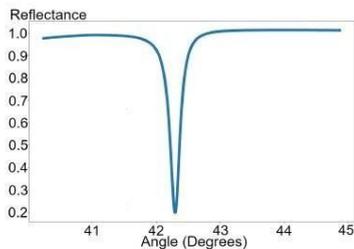


Fig. 2. Example of a reflectance curve of a gold Otto chip, measured at 975.1 nm. [3]

III. PARTICLE SWARM OPTIMIZATION - PSO

PSO is an algorithm inspired by the social behaviour of flocks of birds searching for food [5]. It is a population-based algorithm in which possible solutions are represented as particles. Particle positions are parameter values of the objective function, and the focus is to find the best location that optimizes it. The particles have four attributes: (i) a vector of position in the search space; (ii) a velocity vector, responsible for guiding and controlling particles movement; (iii) the best position found along particles' own searching process; (iv) and the global best position obtained from all particles [5] and [6].

The PSO approach is dependent on the communication strategy in which defines how the particles share information to each other [7]. A well-known communication topology is the Global one, in which the particles have their positions updated according to their best individual positions ($pbest$) and the best position found by the swarm as a whole ($gbest$). This topology leads to a fast convergence and can be a good approach for problems with little local minimal [13]. PSO is dependent on its velocity behavior and in this paper, inertia [14] and *Clerc* constriction factor [8] were used.

IV. EXPERIMENTS

The experimental reflectances were obtained from an Otto chip with three layers: BK7 glass prism, air gap and gold metal film [3]. The SPR effect was observed at 20 different points on this chip. The reflectance was measured for 350 different incidence angles θ for each point.

A. Fitness function

Optimization fitness function parameters are the air gap thickness d and the gold complex permittivity ε_3 , where $\varepsilon_3 = \varepsilon' + j\varepsilon''$. The fitness function then can be represented by

$$\Delta(d, \varepsilon', \varepsilon'') = \sum_{j=1}^J (R_{theo}(\theta_j, \varepsilon', \varepsilon'', d) - R_{expj})^2, \quad (4)$$

where $J = 350$ is the number of incidence angles measured on the experiment and R_{expj} is the experimental reflectance at the incidence angle θ_j .

B. Determination of the PSO parameters

A set of number of particles $\{30, 50, 100, 200, 300, 400, 500\}$, a set of number of iterations $\{30, 50, 100\}$ and some strategies for inertia: constant [6], constriction factor [8], random [9], simulated annealing [10], chaotic [11] and linear decreasing [12] were tested to identify the best algorithm settings to be used. For each number of particles, number of iteration and inertia strategy combination, as a initial experiment, 100 runs of the PSO, were performed for all the 20 Otto chip points. The average error and variance of the configurations were compared. The tests showed that the settings with 500 particles, number of iteration higher or equal than 30 and constriction factor, as the inertia strategy, have the lowest variance and lowest average error. To determine the appropriate number of iterations, the percentage reduction of the error was analyzed, as illustrated in Fig. 3. As can be observed in the figure, the error value falls to under of 0.0001% after the 30th iteration. Given this behavior, we set the value for the number of iterations as 30.

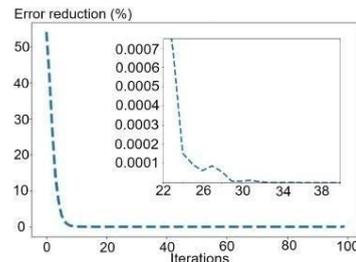


Fig. 3. Error reduction rate versus number of iterations using PSO with 500 particles and constriction factor.

V. RESULTS

The gradient based method for nonlinear regression currently used to minimize the mean square error between experimental data and the fitness function generates two sets of parameters of possible solutions [2].

In order to compare the performance of the PSO with the conventional gradient regression, 100 runs of the PSO were performed on a data set different from that used to determine

the best PSO configuration. The chosen configuration was 30 iteration, 500 particle and constriction factor because its lowest variance and average error. At 13 points, all 100 PSO runs have found errors smaller than those of both solutions from the gradient regression method. In the other 7 points small errors were found at least in 91 PSO runs. Once experiments execute 100 runs of PSO for each point and chooses the best result of them, the PSO method has achieved better results for all 20 Otto chip points investigated. The quadratic error found by PSO was, in the best case, 10.27 times smaller and, in the worst case, 1.86 times lower than that obtained by the gradient regression approach. Fig. 4 illustrates a direct comparison, for the experimental data of Fig. 2 in which the the best execution of PSO found an error of 0.0054 while the two gradient-based found 0.0555, 0.0445 errors.

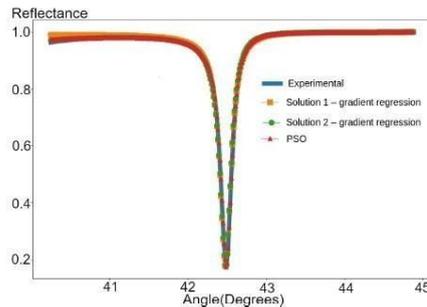


Fig. 4. Comparison between best-fit curves for the experimental data of Fig. 2.

Table I lists the mean results obtained from gradient based method solutions and PSO. Results suggest that PSO tends to find parameters value between the values from the two solutions of gradient based methods. The quadratic error found by PSO has a mean two times lower than classical methods previously used.

TABLE I
PARAMETERS OBTAINED FROM PSO AND GRADIENT BASED SOLUTIONS

Parameter/Method	Gradient sol. 1	Gradient sol. 2	PSO
$\mu(-\varepsilon')$	26.7	27.4	26.9
$\sigma(-\varepsilon')$	2.1	2.3	2.0
$\mu(\varepsilon'')$	0.6	1.7	1.3
$\sigma(\varepsilon'')$	0.2	0.3	0.4
$\mu(d)$	1.6	1.9	1.8
$\sigma(d)$	0.03	0.1	0.2
μ (quadratic error)	0.4	0.4	0.2

μ : Mean, σ : Standard deviation

VI. CONCLUSION

Traditionally, the PSO approach is employed in optimization problems. In this article, we adapted the approach for application in the regression analysis of Otto chip devices, by minimizing the quadratic error between theoretical and experimental values of the SPR curves generated by these

devices. Different from the conventional gradient regression method, the PSO approach does not require an initial guess as starting point. This feature allows performing regression for a wide range of curve shapes, including those with a poorly defined resonance effect. In these cases an initial guess for the set of parameters is difficult to estimate, in turn, yielding poor convergence, or none at all. With the PSO approach, on the other hand, a global solution can be found, and automation of the procedure can be employed for the regression analysis of a large number of experimental curves. In this first study, the PSO was applied to finding only one solution. It is well known that there are two sets of parameters that yield close solutions for the regression problem [2]. Future works aim on extending the approach to obtain the two solution sets.

Once that PSO has shown to yield better precision and given its unique capability of finding results, even for poorly defined SPR curves, one can conclude that the PSO approach represents an excellent tool for batch characterization of Otto chip devices.

REFERENCES

- [1] A. Otto, "Spectroscopy of surface polaritons by attenuated total reflections," *Optical Properties of solids*, New Developments, B. O. Seraphin, Ed, North-Holland, Amsterdam (1975), Ch.13.
- [2] E. Fontana, J. Kim, I. Llamas-Garro and G. O. Cavalcanti, "Microfabricated Otto chip device for surface plasmon resonance-based optical sensing," *Appl. Opt.*, vol. 54, no. 31, pp. 9200-9204, 2015.
- [3] Y. Lee, S. Sim, M. R. N. Santos, G. F. Fernandes, I. Llamas-Garro, E. Fontana and J. Kim, "Reflectance Analysis of the Otto Chip Using an Automated Reflectometer," 2018 Int. Conf. on Opt. MEMS and Nanophotonics, Lausanne, Switzerland, 2018, pp. 1-2.
- [4] E. Fontana, "Analysis of optical surfaces by means of surface plasmon spectroscopy," in *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 45, no. 2, pp. 399-405, April 1996. doi: 10.1109/19.492755
- [5] J. Kennedy and R. Eberhart, "Particle swarm optimization," *Proceedings of ICNN'95 - Intl. Conf. on Neural Networks*, Perth, Australia, 1995, pp. 1942-1948 vol.4.
- [6] Y. Shi and R. Eberhart, "A modified particle swarm optimizer," 1998 *IEEE Intl. Conf. on Evolut. Comput. Proc.*, Anchorage, USA, 1998, pp. 69-73.
- [7] R.C. Eberhart, J. Kennedy, "A new optimizer using particle swarm theory," *Proc. of 6th Symp. on Micro Machine and Human Sci.*, Nagoya, Japan, 1995, pp. 39-43.
- [8] M. Clerc and J. Kennedy, "The particle swarm-explosion, stability, and convergence in a multidimensional complex space," *IEEE Trans. on Evol. Comput.*, pp. 58-73, Vol.6, No.1, 2002.
- [9] R. C. Eberhart and Y. Shi, "Tracking and optimizing dynamic systems with particle swarms," *Proc. of the 2001 Congress on Evol. Comput.*, Seoul, South Korea, 2001, pp. 94-100, vol. 1.
- [10] W. Al-Hassan, M. B. Fayek and S. I. Shaheen, "PSOSA: An Optimized Particle Swarm Technique for Solving the Urban Planning Problem," 2006 *Intl. Conf. on Computer Eng. and Systems*, Cairo, Egypt, 2006, pp. 401-405.
- [11] Y. Feng, G. Teng, A. Wang and Y. Yao, "Chaotic Inertia Weight in Particle Swarm Optimization," 2nd *Intl. Conf. on Innovative Comput., Inf. and Control*, Kumamoto, Japan, 2007, pp. 475-475.
- [12] J. Xin, G. Chen and Y. Hai, "A Particle swarm optimizer with multi-stage linearly-decreasing inertia Weight," 2009 *Intl. Joint Conf. on Comput. Sciences and Optimization*, Sanya, Hainan, 2009, pp. 505-508.
- [13] Engelbrecht AP, Particle swarm optimization: Global best or local best?. In 2013 BRICS congress on computational intelligence and 11th Brazilian congress on computational intelligence 2013 Sep 8 (pp. 124-135). IEEE.
- [14] Eberhart RC, Shi Y. Comparing inertia weights and constriction factors in particle swarm optimization. In Proceedings of the 2000 congress on evolutionary computation. CEC00 (Cat. No. 00TH8512) 2000 Jul 16 (Vol. 1, pp. 84-88). IEEE.

Anexo B: Carta de Aceitação

7/11/2020 E-mail de Engenharia de Computação - POLI/UPE - [IMOC'2019] Your paper #1570558484 ('A swarm intelligence a...



Adonias Luna <alps@ecomp.poli.br>

[IMOC'2019] Your paper #1570558484 ('A swarm intelligence approach for regression analysis of surface plasmon resonance curves in Otto chips')

(imoc2019@imoc2019.com) <imoc2019=imoc2019.com@edas.info>

19 de agosto de 2019 20:07

Responder a: imoc2019@imoc2019.com

Para: Adonias L P da Silva <alps@ecomp.poli.br>, Sergio Oliveira <scampello@ecomp.poli.br>, Gustavo Cavalcanti <gustavooc@poli.br>, Manoel Neto <maan@ecomp.poli.br>, Eduardo Fontana <fontana@ufpe.br>

Dear Mr. Adonias da Silva:

Congratulations! Your paper #1570558484 ('A swarm intelligence approach for regression analysis of surface plasmon resonance curves in Otto chips') submitted to IMOC'2019 has been accepted for POSTER PRESENTATION and will be included in the conference proceedings.

Your camera-ready manuscript, along with the copyright form, must be submitted by Sep 27, 2019. Further instructions on: i) Advanced Program with assigned Poster Sessions; and ii) using PDF eXpress to convert your source file to IEEE Xplore-compatible PDF file will follow soon.

When preparing the camera-ready version of your paper, please address the reviewer's comments and suggestions provided below.

<https://edas.info/showPaper.php?m=1570558484>.

Regular Paper Review 1

Technical Correctness: Assess the technical content and the solidity of the work

Flaws but Easy to Correct (3)

Relevance: How relevant is the paper to this conference?

Relevant (3)

Presentation: Assess the quality of the presentation.

Readable (3)

Contribution: Assess the originality of the work and its contribution to the area of research

Variation of a known concept (3)

Competence: Please assess your familiarity with the subject matter of the paper

Familiar with this area of research (3)

Strengths: What are the most important reasons to accept this paper?

The paper presents an analysis of the fitness of an Otto SPR detector to its theoretical response. Overall, it is a technical work, but with limited impact, though it can fit the conference

Weaknesses: What are the most important reasons NOT to accept this paper?

The work has not too much impact in the field, as it analyzes the match of SPR curves with their theory

Recommendation: State your recommendation regarding the acceptance/rejection of the paper.

Weak accept (3)

Regular Paper Review 2

<https://mail.google.com/mail/u/0?ik=1cdb58d52b&view=pt&search=all&permmsgid=msg-f%3A1642338506213093429&simpl...> 1/3

7/11/2020 E-mail de Engenharia de Computação - POLI/UPE - [IMOC'2019] Your paper #1570558484 ('A swarm intelligence a...

Technical Correctness: Assess the technical content and the solidity of the work

Flaws but Easy to Correct (3)

Relevance: How relevant is the paper to this conference?

Relevant (3)

Presentation: Assess the quality of the presentation.

Readable (3)

Contribution: Assess the originality of the work and its contribution to the area of research

Variation of a known concept (3)

Competence: Please assess your familiarity with the subject matter of the paper

Outside main area of research (1)

Strengths: What are the most important reasons to accept this paper?

The paper proposes a swarm intelligence approach for regression analysis of surface plasmon resonance curves in Otto chips. The article is interesting and shown that the PSO technique was better than classical regression analysis methods.

Weaknesses: What are the most important reasons NOT to accept this paper?

In Chapter 2 1- In theoretical reflectance given by [3],

- what is the meaning of ki and $k0$?
- No mathematical formulations found in reference [3]. 2 - Improve and standardize the layout of figures 2, 3 and 4, regarding:
- The position of the X and Y labels;
- Text size of labels and numbers on each axis. 3 - In which literature are theoretical data available?

In Chapter 3 1 - Insert reference that explains this communication topology and the reason for using it in this article "A well-known communication topology is the Global one, in which the particles have their positions updated according to their best individual positions (pbest) and the best position found by the swarm as a whole (gbest)." 2 - Insert reference that proves the statement: "This topology leads to a fast convergence, but in some cases, it can converge to a local minimum and get trapped on it." 3 - Correct the word construction for constriction. 4 - The cited reference [7] does not refer to 'inertia weight', only constriction factors. 5 - Justify the use of inertia weight and constriction factors. In topic B of chapter 3: 6 - The reference [7] does not mention strategy for inertia, but for constriction factor. 7 - Instead of referring to the constriction factor, it refers to Clerc. Because? 8 - Justify the number of PSO runs. 9 - In figure 3 it is impossible to see that in iteration 30 the percentage reduction of the error falls to 0.0001%. Correction Suggestion: Take advantage of the space available in the figure to plot the section of interest making it possible to view the information.

In the Chapter 5 1 - In reference [3] there is no indication or description of a gradient-based method for nonlinear regression. No parameter sets are presented in this reference. Which reference shows the results of gradient regression based methods? 2 - In Figure 4, assign a different style and marker to each plotted data set. This improves and facilitates the viewing and understanding of content. 3 - The Figure 4 leads to the understanding that the purpose was only to show that the PSO performs the same task as the already consolidated methods. For this reason, it is important to show at least the maximum error obtained by the PSO and the maximum error obtained by the gradient regression methods for comparison, validation and pointing out the advantages of the presented method. 4 - Change the table title indicating that these are the average values obtained for the parameters.

In the Chapter 6 1 - In "It is well known that there are two sets of parameters that yield close solutions for the regression problem." What is the reference? 2 - The following text, "Several configurations of the PSO approach, on global topology, were tested and the configuration with 500 particles, 30 iterations and Clerc inertia have shown to be more efficient due to its smaller variance and average error. The PSO was able to find errors lower than those of the conventional, gradient-based, nonlinear regression method for all 20 chip points.", should be in the comments of the results.

Recommendation: State your recommendation regarding the acceptance/rejection of the paper.

Weak accept (3)

<https://mail.google.com/mail/u/0?ik=1cdb58d52b&view=pt&search=all&permmsgid=msg-f%3A1642338506213093429&simpl...> 2/3

7/11/2020 E-mail de Engenharia de Computação - POLI/UPE - [IMOC'2019] Your paper #1570558484 ('A swarm intelligence a...

Regards,
Moisés Renato Nunes Ribeiro, TPC Chair
Nuno Borges Carvalho, TPC Chair

<https://mail.google.com/mail/u/0?ik=1cdb58d52b&view=pt&search=all&permmsgid=msg-f%3A1642338506213093429&simpl...> 3/3