



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



Resolução da Equação de Laplace aplicada a Problemas Diretos e Inversos de
Transferência de Calor por Condução

Adam Basílio

Uberlândia - MG

2019



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



Resolução da Equação de Laplace aplicada a Problemas Diretos e Inversos de
Transferência de Calor por Condução

Orientadores: Dr. Fábio de Oliveira Arouca
Dr. Fran Sérgio Lobato

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Uberlândia - MG

2019

Adam Basílio

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

B315r
2019 Basílio, Adam, 1991-
Resolução da equação de Laplace aplicada a problemas diretos e inversos de transferência de calor por condução [recurso eletrônico] / Adam Basílio. - 2019.

Orientador: Fábio de Oliveira Arouca.

Coorientador: Fran Sérgio Lobato.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Modo de acesso: Internet.

Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2019.331>

Inclui bibliografia.

Inclui ilustrações.

1. Engenharia química. 2. Calor - Transmissão. 3. Calor - Condução. 4. Problemas inversos (Equações diferenciais). I. Arouca, Fábio de Oliveira, 1977- (Orient.). II. Lobato, Fran Sérgio, 1976- (Coorient.). III. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. IV. Título.

CDU: 66.0

Maria Salete de Freitas Pinheiro - CRB6/1262



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química
Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 1K, Sala 206 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902
Telefone: (34)3239-4249 - www.ppgeq.feq.ufu.br - secppgeq@feq.ufu.br



ATA

Ata da defesa de DISSERTAÇÃO DE MESTRADO junto ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia.

DEFESA DE: Dissertação de Mestrado Acadêmico, 08/2019, PPGEQ

DATA: 15 de fevereiro de 2019 - 14:00

DISCENTE: 11712EQU001 - Adam Basílio

TÍTULO DO TRABALHO: Resolução de problemas diretos e inversos de transferência de calor por condução em geometrias irregulares

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: Desenvolvimento de Processos Químicos

LINHA DE PESQUISA: Processos de separação

PROJETO DE PESQUISA DE VINCULAÇÃO: Estudo da transferência de calor e massa em esferas de naftaleno

Às 14 horas do dia 15 de fevereiro do ano de 2019, na sala 1K228 - *Campus* Santa Mônica da Universidade Federal de Uberlândia, reuniu-se a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, assim composta: Professores Doutores: Márcio Aurélio da Silva - IMEPAC/Araguari; Ubirajara Coutinho Filho - PPGEQ/UFU; Fran Sérgio Lobato - FEQUI/UFU, coorientador e Fábio de Oliveira Arouca - PPGEQ/UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos, o presidente da mesa, Prof. Dr. Fábio de Oliveira Arouca, apresentou a Comissão Examinadora e o Candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir, o senhor presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos examinadores, que passaram a arguir o candidato. Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu os conceitos finais.

Em face do resultado obtido, a Banca Examinadora considerou o candidato Aprovado e estabeleceu novo título para o trabalho: Resolução da equação de Laplace aplicada a problemas diretos e inversos de transferência de calor por condução.

Esta defesa de Dissertação de Mestrado Acadêmico é parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre. O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, legislação e regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos às 16 horas e 25 minutos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.

Fábio de Oliveira Arouca - PPGEQ/UFU - Orientador

Fran Sérgio Lobato - FEQUI/UFU - Coorientador

Márcio Aurélio da Silva - IMEPAC/Araguari



Documento assinado eletronicamente por **Fabio de Oliveira Arouca, Professor(a) do Magistério Superior**, em 15/02/2019, às 16:31, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Fran Sergio Lobato, Professor(a) do Magistério Superior**, em 15/02/2019, às 16:32, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Márcio Aurélio da Silva, Usuário Externo**, em 15/02/2019, às 16:32, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ubirajara Coutinho Filho, Professor(a) do Magistério Superior**, em 15/02/2019, às 16:33, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0986452** e o código CRC **COCBB90C**.

Adam Basílio

Resolução da Equação de Laplace aplicada a Problemas Diretos e Inversos de
Transferência de Calor por Condução

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

BANCA EXAMINADORA

Dr. Fábio de Oliveira Arouca
(Orientador - PPGEQ/UFU)

Dr. Fran Sérgio Lobato
(Coorientador - PPGEM/UFU)

Dr. Ubirajara Coutinho Filho
(PPGEQ/UFU)

Dr. Mário Aurélio da Silva
(IMEPAC)

“Se um dia eu vi mais longe, foi por estar sobre ombros de gigantes”.

Issac Newton

AGRADECIMENTOS

Primeiramente gostaria de agradecer aos meus pais, José Roberto e Maria, por todo o apoio que me deram durante toda a minha vida e por sempre estarem ao meu lado. Ao meu irmão, Hedon, por toda a amizade e companheirismo de irmão mais velho.

Gostaria de agradecer também aos meus orientadores, Dr. Fábio de Oliveira Arouca e Dr. Fran Sérgio Lobato, por toda a vontade, dedicação e paciência em cada orientação técnica e em cada conselho, sempre buscando guiar-me pelo melhor caminho. Também quero agradecer a todos os professores da FEQUI-UFU que passaram pelo meu caminho e compartilharam seus conhecimentos em algum momento.

A todos os meus amigos, próximos ou distantes, novos, antigos e reencontrados, pelos momentos felizes que me proporcionaram e por todas as vezes que esta amizade renovou a vontade de seguir em frente.

Por fim, gostaria de agradecer à CAPES pelo apoio financeiro.

A todos, muito obrigado.

RESUMO

O estudo dos mecanismos de transferência de calor caracteriza uma área de grande interesse devido às inúmeras aplicações que podem ser desenvolvidas. Matematicamente, tais problemas são representados, geralmente, por equações diferenciais parciais que são associadas às respectivas condições de contorno e ao domínio de interesse. Em geral, a resolução destes problemas requer a aplicação de técnicas numéricas via discretização do contorno e de pontos internos do domínio de interesse, o que implica em um grande esforço computacional para a resolução do sistema resultante. Como alternativa para a redução do custo computacional, nos últimos anos vários trabalhos têm se dedicado ao estudo dos Métodos sem Malha (*Meshless/Meshfree Methods*). Basicamente, nestes métodos não há necessidade de gerar malhas em pontos internos do domínio, o que simplifica o tratamento de problemas com domínios que apresentam geometrias complexas, além da redução do custo computacional referente à necessidade de reconstrução, a cada iteração, da malha computacional. Todavia, os sistemas resultantes da aplicação deste tipo de metodologia são inerentemente mal condicionados, fazendo com que seja necessário a aplicação de técnicas de regularização para a obtenção de uma solução confiável. Diante do que foi apresentado, este trabalho tem por objetivo formular e resolver problemas diretos e inversos aplicados a equação de Laplace em estado estacionário e bi-dimensional com diferentes geometrias. Para essa finalidade considerase o Método das Soluções Fundamentais (MSF) como metodologia para a resolução do problema direto e o algoritmo de Evolução Diferencial (ED) como ferramenta de otimização para a resolução do problema inverso. Além disso, também se avaliou a influência dos parâmetros requeridos pelo MSF na qualidade da solução obtida e a metodologia empregada para o tratamento do mal condicionamento numérico. A partir dos resultados obtidos foi possível observar que o MSF foi capaz de obter resultados equivalentes quando comparado com o tradicional Método das Diferenças Finitas. Além disso, que o tamanho do raio requerido pelo MSF é um dos fatores que mais influencia a precisão da abordagem numérica e que a utilização de uma técnica de regularização é muito importante para a obtenção de uma solução confiável. Em relação ao problema inverso, foi possível concluir que os resultados obtidos com a associação entre o MSF, o algoritmo de ED e a Técnica de Regularização de Tikhonov foram considerados satisfatórios, visto que para diferentes níveis de ruídos, a metodologia proposta foi capaz de obter boas estimativas para as variáveis de projeto no problema inverso proposto.

Palavras-chave: Transferência de Calor por Condução, Problemas Diretos e Inversos, Método das Soluções Fundamentais, Métodos de Regularização, Evolução Diferencial.

ABSTRACT

The study of heat transfer mechanisms configures an area of great interest due to various applications that can be developed. Mathematically, these phenomena are usually represented by partial differential equations associated with initial and boundary conditions related to domain of interest. In general, the resolution of these problems requires the application of numerical techniques through the discretization of contour and internal points of domain considered, resulting in a great computational cost to solve the system obtained. As alternative to reduce the computational cost, in last years, various studies based on Meshless (Meshfree) Methods have been developed. Basically, in these methods there is no need to generate meshes at points inside the domain, simplifying the treatment of problems with complex geometries, as well the reduction of computational cost related to need to reconstruct the computational mesh in each iteration. However, the systems resulting from the application of this type of methodology are inherently ill-conditioned, being necessary the application of regularization techniques to obtain a reliable solution. In this contribution, the aim is to formulate and to solve direct and inverse problems applied to Laplace Equation in steady state and bi-dimensional system considering different geometries. For this purpose, the Method of Fundamental Solutions (MFS) is considered as methodology for solving the direct problem and the Differential Evolution (DE) algorithm as optimization tool for solving the inverse problem. In addition, the influence of parameters required by using MSF on quality of solution obtained and the methodology used for the treatment of ill-conditioned problems is also evaluated. From the obtained results it was possible to observe that the MFS was able to obtain equivalent results when compared to the Finite Differences Method. In addition, the size of radius required by MSF is one of factors that most influence the precision of numerical approach and the use of a regularization technique is very important for obtaining a reliable solution. In relation to inverse problem, it was possible to conclude that the results obtained by proposed methodology (MFS+DE+Tikhonov Regularization Technique) were considered satisfactory, as even with different levels of noise, good estimates for design variables in proposed inverse problem were obtained.

Key-words: Conduction Heat Transfer, Direct and Inverse Problems, Method of Fundamental Solutions, Regularization Methods, Differential Evolution.

SUMÁRIO

LISTA DE ILUSTRAÇÕES.....	I
LISTA DE TABELAS.....	III
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	IV
LISTA DE SÍMBOLOS	V
1 INTRODUÇÃO	6
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	10
2.1 PROBLEMAS DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA POR CONDUÇÃO... 10	
2.1.1 Modelagem matemática..... 10	
2.2 resolução de problemas de transferência de energia 13	
2.2.1 Métodos Baseados na Discretização do Domínio Interior e do Contorno 13	
2.2.1.1 Diferenças Finitas 15	
2.2.1.2 Elementos Finitos 16	
2.2.1.3 Volumes Finitos..... 17	
2.2.2 Métodos Baseados na Discretização do Contorno 19	
2.2.2.1 Elementos de Contorno 19	
2.2.2.2 Soluções Fundamentais 19	
2.2.3 Outros Métodos Numéricos para Solução de Problemas de Transferência de Energia..... 23	
2.2.4 Interpretação Geométrica dos Diferentes Métodos de Discretização..... 24	
2.3 inversa de penrose 26	
2.4 Técnicas de regularização..... 26	
2.4.1 Técnica de Regularização de Tikhonov..... 27	
2.4.2 Método da Decomposição em Valores Singulares 29	
2.4.3 Regularização por Variação Total 30	
2.5 o problema de otimização..... 30	
2.5.1 Conceitos Básicos..... 30	
2.5.1.1 Otimização Multi-objetivo 32	
2.5.2 Formulação matemática..... 34	
2.5.3 Classificação dos Métodos de Otimização 34	
2.5.4 Métodos Clássicos 34	
2.5.4.1 Métodos Heurísticos 38	

2.5.4.2	Evolução Diferencial (ED)	42
2.5.4.3	Tratamento de Restrições	54
2.6	problema inverso	56
2.7	considerações finais	57
3	METODOLOGIA.....	58
3.1	problema direto – transferência de calor bidimensional em estado estacionário	58
3.2	formulação matemática do msf.....	60
3.3	resolução do problema direto	62
3.3.1	MSF <i>versus</i> MDF	62
3.3.2	Influência da Técnica de Regularização na Qualidade da Solução	64
3.3.3	Análise de Sensibilidade Paramétrica	64
3.4	simulação considerando diferentes domínios	66
3.5	resolução do problema inverso	71
3.5.1	Determinação das Condições de Contorno com Cinco Variáveis.....	71
3.5.2	Determinação das Condições de Contorno com Dez Variáveis	72
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	73
4.1	resolução do problema direto	73
4.1.1	MSF versus MDF	73
4.1.2	Influência da Técnica de Regularização na Qualidade da Solução	76
4.1.3	Análise de sensibilidade paramétrica	77
4.1.3.1	Influência do Tipo e do Tamanho da Geometria Fictícia.....	78
4.1.3.2	Influência do número de Pontos de Colocação e Pontos Fonte.....	79
4.1.3.3	Influência do Número de Pontos Internos	80
4.2	Simulação considerando diferentes regiões de domínio.....	81
4.3	resolução do problema inverso	84
4.3.1	Determinação das Condições de Contorno com cinco variáveis.....	84
4.3.2	Determinação das Condições de Contorno com Dez Variáveis	88
5	CONCLUSÕES.....	91
5.1	Sugestões para trabalhos futuros	93
6	REFERÊNCIAS	94

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 - Condições de contorno hipotéticas de um típico problema de transferência de calor em geometria cúbica.....	12
Figura 2.2 - Identificação dos pontos utilizados no Método dos Volumes Finitos para os casos (a) bidimensional e (b) tridimensional.....	18
Figura 2.3 - Discretização utilizada nos métodos de (a) MDF (b) MEF (c) MEC e (d) MSF.....	25
Figura 2.4 - Estrutura da Curva L	28
Figura 2.5 - Restrições g_1 , g_2 e g_3 limitando o espaço de possibilidades das variáveis x_1 e x_2	31
Figura 2.6 - Exemplo de pontos de ótimo local e ótimo global.....	32
Figura 2.7 - Curva do Ótimo de Pareto	33
Figura 2.8 - Secção do intervalo de busca segundo o Método da Secção Áurea	38
Figura 2.9 - Fluxograma representativo do algoritmo de Evolução Diferencial.....	43
Figura 2.10 - Curva (a) 3D e (b) curvas de nível da função.....	44
Figura 2.11 - Exemplo da etapa de mutação baseado em um par de vetores.....	47
Figura 2.12 - Distribuição dos pontos da população após passadas (a) 10 iterações, (b) 20 iterações, (c) 30 iterações e (d) 40 iterações.....	51
Figura 2.13 - Distribuição empírica dos vetores candidatos para diferentes valores CR	53
Figura 3.1 - Geometria do problema de interesse.....	58
Figura 3.2 - Curvas de nível para o problema de interesse.....	59
Figura 3.3 - Problema de Laplace por um domínio V definido.....	60
Figura 3.4 - Construção geométrica fictícia para o problema de interesse.....	63
Figura 3.5 - Relação entre o lado L da geometria quadrada e o raio R da circunferência circunscrita.....	65
Figura 3.6 - Representação das regiões fictícias (a) circular e (b) quadrada.....	65
Figura 3.7 - Círculo	67
Figura 3.8 - $\frac{1}{4}$ de coroa circular.....	68
Figura 3.9 - Estrela	68
Figura 3.10 - Astróide.....	69
Figura 3.11 - Amoeba.....	69
Figura 3.12 - Coroa circular	70
Figura 4.1 - Distribuição de temperatura calculado: (a) MSF e (b) MDF.....	73
Figura 4.2 - Influência do MSF e do MDF na qualidade da solução	74

Figura 4.3 - Influência da Técnica de Regularização na qualidade da solução obtida...	77
Figura 4.4 - Influência do tipo e do tamanho da geometria fictícia na qualidade da solução obtida	78
Figura 4.5 - Influência do número de pontos (a) de colocação e (b) fonte na qualidade da solução obtida pelo MSF	79
Figura 4.6 - Influência do parâmetro β na qualidade da solução obtida: (a) MSF e (b) MSF-Tik	80
Figura 4.7 - Influência do número de pontos internos na qualidade da solução obtida pelo MSF	81
Figura 4.8 - Resultados obtidos pelo MSF nos diferentes domínios.....	82
Figura 4.9 - Informações conhecidas e desconhecidas do contorno no Problema Inverso com cinco variáveis	85
Figura 4.10 - Posições dos sensores de temperatura na placa plana.....	85
Figura 4.11 - Solução Analítica e Pontos Experimentais Sintéticos	87
Figura 4.12 - Informações conhecidas e desconhecidas do contorno no Problema Inverso com dez variáveis	89

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Aplicação de métodos numéricos em problemas de transferência de calor	14
Tabela 2.2 - Aproximação das primeira e segunda derivadas pelo MDF.....	16
Tabela 2.3 - Representação dos mecanismos de mutação do algoritmo de ED.	46
Tabela 2.4 - Exemplo da etapa de mutação em uma iteração do ED	48
Tabela 2.5 - Exemplo da etapa de cruzamento em uma iteração do ED	50
Tabela 3.1 - Intervalo de valores considerados na análise paramétrica.....	64
Tabela 3.2 - Configurações default dos parâmetros de entrada do MSF para cada novo domínio.....	67
Tabela 3.3 - Quantidade de pontos base aplicados em cada PD em função da geometria do novo domínio.....	70
Tabela 4.1 – Tempo de execução, em segundos, de cada método aplicado	75
Tabela 4.2 - Tempo de execução, em segundos, em função do método de solução	77
Tabela 4.3 - Erros absoluto e relativo encontrados em função da geometria do domínio e da quantidade base de pontos de colocação e fonte.....	83
Tabela 4.4 - Resultados obtidos para o Problema Inverso com cinco variáveis	88
Tabela 4.5 - Tempo de processamento em função do nível de ruído	88
Tabela 4.6 - Resultados obtidos para o Problema Inverso com dez variáveis.....	90

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CEC	Conferência Internacional em Computação Evolutiva
ED	Evolução Diferencial
EDP	Equação Diferencial Parcial
FA	Algoritmo da Colônia de Vagalumes
GA	Algoritmo Genético
GBA	Algoritmo do Criador Genético
ICEO	Concurso Internacional em Otimização Evolutiva
IP	Inversa de Penrose
MDF	Método das Diferenças Finitas
MDVS	Método da Decomposição em Valores Singulares
MEC	Método dos Elementos de Contorno
MEF	Método dos Elementos Finitos
MSF	Método das Soluções Fundamentais
MSF-Tik	Método das Soluções Fundamentais associado à Regularização de Tikhonov
MVF	Método dos Volumes Finitos
$N_{i n}$	Número de pontos internos
N_x	Número de pontos fonte
N_y	Número de ponto de colocação
PD	Problema Direto
PI	Problema Inverso
PSO	Algoritmo do Exame de Partículas
SA	Algoritmo de Recozimento Simulado
Tik	Técnica de Regularização de Tikhonov

LISTA DE SÍMBOLOS

∇^2	Operador diferencial de Laplace
Γ	Região fictícia aplicada no Método das Soluções Fundamentais
α	Parâmetros de Regularização de Tikhonov
β	Razão entre pontos fonte e pontos de colocação
δ	Função Delta de Dirac
κ	Número de condicionamento da matriz
μ	Coefficientes de ponderação do Método das Soluções Fundamentais
ϵ	Erro absoluto
ϵ_r	Erro relativo
ϕ	Solução analítica de uma função

1 INTRODUÇÃO

O estudo dos mecanismos de transferência de calor configura-se como um dos campos de grande interesse em engenharia e áreas afins. Isto se deve ao grande número de aplicações que podem ser desenvolvidas com o conhecimento deste tipo de fenômeno. Neste cenário, a difusão térmica é um dos três mecanismos de transferência de energia conhecidos e mais estudados. Apesar de ser um fenômeno estruturado a bastante tempo, até hoje a sua modelagem matemática representa desafios aos profissionais da área. O modelo de difusão térmica, que é oriundo da combinação do Teorema de Transporte de Reynolds com a Lei de Fourier, pode envolver aspectos relacionados com a geometria, com as propriedades físico-químicas dos meios envolvidos e com a fluidodinâmica. Aliado a estes fatores, também pode-se citar a dependência da temperatura com o tempo e com as coordenadas geométricas, que torna este problema complexo e com pouca chance de ser integrado analiticamente.

Na medida em que a complexidade dos problemas aumenta, observa-se o desenvolvimento e/ou aprimoramento de técnicas numéricas específicas para a resolução dos mesmos. Dentre estas pode-se citar os métodos baseados em malha (ou métodos de domínio), como por exemplo o Método das Diferenças Finitas (MDF) (Courant et al., 1928), o Método dos Volumes Finitos (MVF) (Patankar, 1980) e o Método dos Elementos Finitos (MEF) (Courant, 1943). Estes têm como princípio base a discretização do domínio do problema, isto é, fracionar o domínio original em subdomínios de forma que, uma região contínua transformasse em uma região discretizada, com pontos bem definidos. Essa abordagem possui como principal vantagem a substituição de uma equação diferencial parcial (EDP) que modela o fenômeno em análise, em um sistema equivalente constituído por equações diferenciais ordinárias (EDOs) ou, até mesmo, um sistema de equações algébricas (Kiusalaas, 2005). O contínuo desenvolvimento da capacidade de processamento dos computadores também é um fator importante na popularização destes métodos, visto que estudos de casos cada vez mais realísticos começaram a ser tratados. Por outro lado, esta classe de métodos possui uma grande desvantagem, a saber, o aumento do tempo de processamento com o aumento da complexidade e do nível de discretização do domínio do problema de interesse.

Como alternativa a este tipo de abordagem, a comunidade científica tem se dedicado ao desenvolvimento de metodologias que apresentem menor tempo de processamento, mas sem que qualidade da solução obtida seja prejudicada. Neste contexto, surgiram os métodos

denominados de *meshless*, *meshfree* ou métodos de contorno (Cheng; Cheng, 2005). Dentre estes destaca-se o Método das Soluções Fundamentais (MSF) (Kupradze; Aleksidze, 1964), cuja principal vantagem é a redução da dimensão do problema a ser integrado, visto que somente informações sobre o contorno do problema são considerados para a geração do sistema a ser resolvido. Na prática, se nenhuma informação sobre o interior do domínio considerado é utilizada para gerar o sistema a ser resolvido, o mesmo tende a ter uma menor dimensão em relação aos métodos que fazem uso da discretização de todo o domínio. Todavia, apesar desta aparente vantagem, a metodologia empregada para a geração do sistema de equações a ser resolvido pode resultar, a depender do nível de discretização do contorno, em um problema com mal condicionamento numérico (Hansen, 1992). Neste caso, a qualidade da solução obtida por este sistema pode ser comprometida. Para minimizar o efeito deste mal condicionamento, métodos de regularização (MR) tem sido empregado. De forma geral, o objetivo deste tipo de abordagem é permitir a obtenção de uma solução mesmo com um número de condição elevado, através da resolução de um problema de otimização no qual deseja-se encontrar a solução do problema ao mesmo tempo em que se obtém o parâmetro de regularização (Karageorghis et al., 2012).

No que tange a resolução de estudos de caso de engenharia e áreas afins, pode-se classificar os mesmos em duas grandes classes, a saber, os problemas diretos (PD) e os problemas inversos (PI) (Karageorghis et al., 2011). Os PD são aqueles que, conhecendo-se as todas as informações de entrada (parâmetros do modelo e condições inicial e de contorno), o vetor de variáveis dependentes pode ser obtido em função do vetor de variáveis independentes. Por exemplo, considere um sólido quente que possui uma face exposta para uma corrente de fluido fria e as demais faces estão em contato com um isolante térmico. Um problema direto típico consiste da determinação do perfil de temperatura em função das variáveis temporal e espacial conhecendo-se as dimensões do sólido, a condutividade térmica do sólido e do material isolante, a velocidade, a viscosidade, a condutividade térmica do fluido e o coeficiente de película entre o fluido e o sólido.

Já um PI consiste em, conhecendo-se informações sobre a saída do processo, determinar as condições de entrada (parâmetros e/ou condições inicial e de contorno) ou o modelo que rege o fenômeno em análise. Como exemplo deste tipo de problema considere a situação apresentada no exemplo anterior. Neste caso, deseja-se determinar, por exemplo, a condutividade térmica do sólido conhecendo-se medidas de temperatura em diferentes pontos do domínio de interesse.

Naturalmente, este tipo de problema requer a formulação e a resolução de um problema de otimização com no mínimo uma restrição, a saber, o domínio das variáveis de projeto.

Para resolver os problemas de otimização, duas são as abordagens tradicionalmente empregadas, a saber, a clássica (ou determinística) (Himmelblau et al., 2001) e a heurística (ou não-determinística) (Das; Suganthan, 2011). A primeira classe consiste no uso de informações sobre o gradiente da função objetivo e das restrições para a atualização de um candidato em potencial a solução do problema de otimização. Por outro lado, a heurística, além de não empregar nenhuma informação sobre o gradiente da função objetivo e das restrições para a resolução do problema de otimização, ainda faz uso de uma população de candidatos (pelo menos a grande maioria dos métodos). Apesar do inerente aumento de custo computacional requerido pelos métodos heurísticos, o contínuo desenvolvimento e aprimoramento da capacidade de processamento dos microcomputadores vem favorecendo, cada vez mais, o uso destes algoritmos.

Em linhas gerais, a grande maioria dos algoritmos que pertencem a classe dos métodos heurísticos são inspirados em observações de fenômenos que ocorrem na natureza (genética das populações, seleção natural, entre outros), ou em imitar o comportamento social de espécies (ritual de acasalamento de vagalumes ou a operação de uma colônia de abelhas) (Das; Suganthan, 2011). Como descrito anteriormente, a maioria destes algoritmos baseiam-se no uso de populações de candidatos à solução e, por isso, têm um custo computacional maior comparado à métodos clássicos. Além disso, a qualidade da solução obtida é função da semente e do gerador de números aleatórios considerados em cada abordagem. Por outro lado, como estes não fazem uso de informações do gradiente da função objetivo e das restrições, são capazes de escapar de ótimos locais, o que os torna bem atrativos no contexto da otimização.

Dentre estas metodologias heurísticas destaca-se algoritmo de Evolução Diferencial (ED) (Storn; Price, 1995). Isto se deve, entre outros fatores, ao grande número de trabalhos publicados em diferentes campos da ciência e da engenharia, o que comprova a sua eficácia, por ser uma abordagem de fácil concepção conceitual, e por ser de fácil implementação. Diferentemente de outros algoritmos heurísticos, o algoritmo de ED não é baseado em uma observação da natureza, sendo considerado um algoritmo puramente estrutural (Das; Suganthan, 2011). Em linhas gerais, esta estratégia se fundamenta no uso de operações vetoriais (soma e subtração) para a geração de candidatos à solução do problema de otimização.

Diante do que foi apresentado, este trabalho tem como objetivo principal formular e resolver um PD através da aplicação do MSF e um PI a ser resolvido combinando o algoritmo de ED com o MSF. O problema proposto se trata da transferência de energia por condução em estado estacionário bi-dimensional, representada pela equação de Laplace. Como objetivos específicos pode-se citar: *i)* realizar uma análise de sensibilidade no que tange os parâmetros e características do MSF; *ii)* avaliar a incorporação de MR para a resolução do PD associado ao problema de transferência de calor por condução; *iii)* resolver PD com diferentes níveis de complexidade (geometrias irregulares); *iv)* resolver PD com diferentes níveis de complexidade (geometrias irregulares);

Este trabalho está estruturado como segue. No Capítulo 2 são apresentados aspectos gerais no que tange conceitos relacionados ao problema de transferência de energia por condução. Também é apresentada uma breve revisão sobre os métodos numéricos utilizados para solução de EDPs, sobre a modelagem matemática do problema de otimização e a sua classificação, com destaque para o algoritmo de ED, como também as principais técnicas de regularização. No Capítulo 3 é descrito o problema de interesse, bem como a descrição das análises que serão realizadas. No Capítulo 4 são apresentados os resultados obtidos com a aplicação da metodologia proposta. Finalmente, as conclusões preliminares e as próximas etapas são apresentadas no último capítulo.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 PROBLEMAS DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA POR CONDUÇÃO

2.1.1 Modelagem matemática

A modelagem do processo de difusão térmica parte do Teorema do Transporte de Reynolds aplicado à conservação da energia (Bird et al., 2004), conforme a seguinte equação:

$$\frac{D}{Dt} \iiint \rho E dV = \iiint \left. \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} \right|_x dV + \iint (\rho E \vec{v}) \cdot \vec{n} dS \quad (2.1)$$

em que ρ é a massa específica do elemento de controle, E é a energia total, \vec{v} e o vetor velocidade das partículas e \vec{n} é o vetor normal à superfície onde ocorre a transferência de energia. O termo à esquerda da igualdade na Equação 2.1 representa a variação de energia total no volume material, que pode ser na forma de calor transferido, \vec{q} , calor gerado/consumido, G , trabalho realizado por forças de superfície, $\vec{\tau}$, ou trabalho realizado por forças de campo, \vec{b} , isto é:

$$\frac{D}{Dt} \iiint \rho E dV = \dot{q} + \dot{W} \quad (2.2a)$$

$$\dot{q} = - \iint \vec{q} \cdot \vec{n} dS + \iiint G dV \quad (2.2b)$$

$$\dot{W} = - \iint (\rho \vec{v}) \cdot \vec{n} dS - \iint \vec{\tau} \cdot \vec{v} \cdot \vec{n} dS + \iiint (\rho \vec{v}) \cdot \vec{b} dV \quad (2.2c)$$

Substituindo a Equações 2.2a-2.2c na Equação 2.1 e aplicando o Teorema da Divergência de Gauss, é possível reescrever a Equação 2.1 na forma:

$$\rho \frac{DE}{Dt} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) - \vec{\nabla} \cdot (\vec{\tau} \cdot \vec{v}) + \rho \vec{v} \cdot \vec{b} - \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + G \quad (2.3)$$

A Equação 2.3 recebe o nome de Lei da Conservação de Energia Total. No caso de difusão de calor em corpos sólidos, esta pode ser simplificada:

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + G \quad (2.4)$$

A Equação 2.4 é denominada de Lei da Difusão Térmica, em que T é a temperatura e C_p é a capacidade calorífica do corpo à pressão constante. O termo de transferência de calor, \vec{q} , é dado pela Lei de Fourier, o que permite reescrever a Equação 2.4:

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = k \vec{\nabla}^2 T + G \quad (2.5)$$

Em que k é a difusividade térmica do material. A velocidade de propagação de calor, causada pelo efeito de *atraso de fase*, geralmente é algo negligenciado nos modelos de transferência. No entanto, em alguns casos, como em sistemas que são aquecidos muito rapidamente, é importante levar em consideração esta informação. Nestes casos, a Equação 2.5 é acrescida pela taxa de propagação de calor acompanhada do tempo de relaxação, τ_r (Kaipio; Fox, 2011).

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = k \vec{\nabla}^2 T + G + \tau_r \frac{\partial q}{\partial t} \quad (2.6)$$

Para que o problema seja resolvido, é necessário a definição de uma condição inicial referente ao tempo e $2n$, condições de contorno no espaço, em que n representa a dimensão do problema ($n = 1, 2, 3$). De forma geral, para o elemento de controle descrito na Figura 2.1, as condições iniciais e de contorno são apresentadas como:

$$T(x, y, z, t) = T_i(x, y, z) \quad (2.7a)$$

$$T(0, y, z, t) = f(y, z, t) \quad T(L, y, z, t) = g(y, z, t) \quad (2.7b)$$

$$T(x, 0, z, t) = h(x, z, t) \quad T(x, W, z, t) = k(x, z, t) \quad (2.7c)$$

$$T(x, y, 0, t) = u(x, y, t) \quad T(x, y, H, t) = v(x, y, t) \quad (2.7d)$$

O operador ∇^2 que aparece na Equação 2.5 é chamado de Operador Laplaciano, definido como o divergente do gradiente de um potencial, e tem este nome justamente por surgir da Equação de Laplace. A Equação de Laplace é frequentemente encontrada na modelagem de fenômenos físicos, surgindo da associação entre o gradiente de um fenômeno com uma lei de conservação. Apesar de levar o nome de *Pierre-Simon Laplace* (1749-1827), que a apresentou em seu estudo sobre a mecânica celestial em 1782, esta equação pode ser rastreada até *Leonhard Euler* (1707-1783), que a aplicou no contexto da hidrodinâmica em 1755 (Cheng; Cheng, 2005).

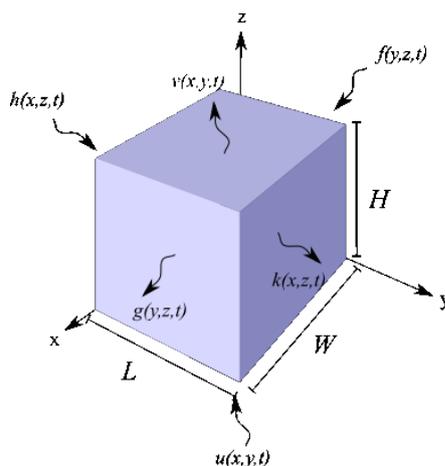


Figura 2.1 - Condições de contorno hipotéticas de um típico problema de transferência de calor em geometria cúbica

Na literatura especializada, inúmeros estudos no campo da transferência de calor podem ser encontrados. Bnilam e Al-Khoury (2016) apresentaram um problema de condução térmica transiente em um meio infinito sujeito a múltiplas fontes de calor cilíndricas com condições de contorno tanto de Neumann quanto de Dirichlet, ambas dependentes do tempo. Os autores solucionaram o problema de forma analítica com o uso das equações modificadas de Bessel e da Transformada Rápida de Fourier.

Peng e Liu (2016) propuseram uma nova técnica baseado na avaliação de imagens para detectar danos semelhantes à rachaduras baseado na solução de um problema inverso de condução de calor. Segundo os autores, a técnica envolve o uso de três componentes principais: uma análise térmica direta, um método de análise adjunta para eficiência de sensibilidade e um método conjugado para otimização de problemas inversos restritos.

Joachimiak e Cialkowski (2017) resolveram problemas diretos e inversos de condução térmica não linear utilizando a substituição de Kirchhoff. Os autores consideraram mudanças no coeficiente de condução térmica e calor específico dependente da temperatura. Para os problemas inversos, também foram consideradas a sensibilidade da solução em relação às medidas de temperatura e na posição dos termopares. Como exemplo de um estudo envolvendo o atraso de fase tem-se o trabalho de Kang et al. (2017). Os autores utilizaram medidas do atraso de fase para determinar se existiria, ou não, a formação de ondas de calor em um experimento de condução térmica em materiais como areia e carne de porco.

Recentemente, Zheng e Zhang (2018) estudaram problemas de condução de calor em materiais laminados através de simulações utilizando o Método de Contorno Singular. Para realizar os estudos, os autores dividiram as camadas em subdomínios de forma que cada subdomínio pudesse ser resolvido separadamente. Para interpolar os subdomínios e obter a solução final, foram aplicadas condições de continuidade nas interfaces.

2.2 RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA

A modelagem de problemas de engenharia é um processo inerentemente complexo, já que os fenômenos envolvidos são não lineares. Neste cenário, a resolução analítica destes problemas só é viável para estudos que apresentam determinadas características, oriundas da aplicação de hipóteses simplificadoras. Assim, para a obtenção da solução destes problemas faz-se necessário a aplicação de métodos numéricos. Diante do que foi apresentado, a presente seção tem o objetivo apresentar uma breve introdução as técnicas mais difundidas atualmente para a resolução de problemas modelados por equações diferenciais parciais. A Tabela 2.1 apresenta alguns dos trabalhos encontrados na literatura que aplicaram um ou mais de um tipo de mais de um método foi utilizado no mesmo problema, caracterizando o denominado *método híbrido*.

2.2.1 Métodos Baseados na Discretização do Domínio Interior e do Contorno

Do ponto de vista numérico, a resolução de problemas modelados por EDP pode ser obtida a partir da aplicação de dois tipos de abordagens, a saber, as que fazem uso da discretização de pontos contidos no contorno e no interior do domínio e as que fazem uso apenas da discretização de pontos contidos no contorno. A segunda classe é denominada de Métodos sem Malha (*Meshless Methods* ou *Meshfree Methods*). A presente seção tem por objetivo apresentar os principais representantes destas duas classes de metodologias.

Tabela 2.1 - Aplicação de métodos numéricos em problemas de transferência de calor.

Método	Aplicação	Referência
Diferenças Finitas - DF	Efeitos da transferência de calor reduzida em um fluido micropolar em convecção natural.	Kazimiers, e Drozd (2013)
	Simulação da secagem de uvas ao sol utilizando um modelo integrado de transferência de calor e massa.	Ramos et al. (2015)
Elementos Finitos – EF	Transferência de energia em reator de leito fixo para produção de hidrogênio.	Bulfin et al. (2012)
	Transferência de energia durante branqueamento e resfriamento d flores de brócolis.	Iribe-Salazar et al. (2015)
	Um método geral para resolver problemas inversos de transferência de energia multidimensional.	Duda (2016)
	Controle da transferência de energia em sensores de gás micro-termo-elétricos.	Goto et al. (2017)
	Análise da transferência de energia por radiação, condução e convecção laminar combinadas em sais fundidos.	Fuqiang et al. (2018)
Volumes Finitos – VF	EF-VF para a solução de problemas de transferência de energia por radiação.	Zhang et al. (2012)
	Transferência de energia em problemas inversos de geometria 1D e 3D.	Szyszkiewicz et al. (2013)
	Simulação do processo de transferência dinâmica de energia em trocadores de calor.	Saadi e Gomri (2012)
	Método preditivo-corretivo baseado em VF para simulação de fluxos turbulentos com cavitação.	Gnanaskandan e Mahesh (2015)
	VF em problemas de convecção-difusão-reação.	Xu (2018)
Elementos de Contorno – EC	Implementação do híbrid AIG*-EC em problemas de radiação em 2D.	Na et al. (2017)
	Implementação do híbrido AIG-EC em problemas de transferência de energia com condições de Robin.	Li et al. (2017b)
	Transferência de calor por radiação em microscopia térmica de varredura.	Nguyen et al. (2017)
	Resolução de problemas tridimensionais transientes por reciprocidade aplicando o EC.	Guo et al. (2017)

*AIG = Análise Isogeométrica

2.2.1.1 Diferenças Finitas

O Método das Diferenças Finitas (MDF) é uma das abordagens numéricas mais antigas já propostas para a resolução de equações diferenciais, com publicações datando, no mínimo, desde de 1850, como o trabalho de Hargreave (1850). Entretanto, a fundamentação teórica apresentada em 1928 por Courant, Friedrichs e Lewy foi um importante ponto de referência para o seu desenvolvimento ao longo dos anos que se seguiram, com ápice nas décadas de 50 e 60, impulsionada pelo advento dos microcomputadores (Courant et al., 1928; Thomée, 2001). Outro ponto que torna este tipo de abordagem bem atrativa é a sua simplicidade conceitual e de implementação.

Em linhas gerais, a aplicação desta abordagem inicializa-se com a discretização do domínio de interesse (de pontos pertencentes ao contorno e internos). Em seguida, reduz-se a complexidade do problema através da substituição das derivadas de uma variável, espacial e/ou temporal, por suas correspondentes numéricas, obtidas pela expansão da função em Série de Taylor (Maliska, 2004; Kiusalaas, 2005). Através do truncamento da expansão no termo desejado é possível criar aproximações lineares da função e ainda ter uma estimativa da ordem do erro cometido, servindo como análise da qualidade da aproximação. Tradicionalmente, o MDF apresenta três estratégias de discretização: as abordagens à frente, à ré e a central. Esta última é a que apresenta o menor erro entre as três, porém exige mais informações das vizinhanças, que nem sempre são conhecidas. A Tabela 2.2 mostra como são feitas as aproximações numéricas das derivadas de primeira e segunda ordem segundo o MDF clássico. Na tabela, h representa a distância entre dois pontos consecutivos da malha (Kiusalaas, 2005).

Substituindo todos os termos que contém derivadas, o problema original, modelado como por uma equação diferencial (ordinária ou parcial) é convertido em um equivalente modelado por um sistema de equações algébricas lineares (ou não lineares), cuja solução pode ser encontrada aplicando uma metodologia apropriada para cada tipo de sistema a ser resolvido.

É importante ressaltar que existem outras aproximações para as derivadas e que requerem mais termos da Série de Taylor (Kiusalaas, 2005).

2.2.1.2 Elementos Finitos

Com a contínua busca por melhores aproximações que implicam em soluções mais precisas, surgiu o Método dos Elementos Finitos (MEF), que teria sido proposto por Courant em 1941 em uma carta enviada à *American Mathematical Society* e publicada em 1943 (Courant, 1943). No entanto, a sua implementação computacional só seria apresentada na década de 50 (Thomée, 2001).

Tabela 2.2 - Aproximação das primeira e segunda derivadas pelo MDF.

Abordagem	1ª ordem	2ª ordem
À frente	$f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$	$f''(x) = \frac{f(x+2h)-2f(x+h)+f(x)}{h^2}$
Central	$f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$	$f''(x) = \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}$
À ré	$f'(x) = \frac{f(x)-f(x-h)}{h}$	$f''(x) = \frac{f(x)-2f(x-h)+f(x-2h)}{h^2}$

De forma geral, esse método numérico proposto para resolver uma equação ou um sistema de equações diferenciais consiste em dividir o domínio geométrico do problema de interesse em vários subdomínios, chamados de elementos, e que podem ser representados por meio de uma geometria mais simples do que a do problema original. Diferentemente do MDF, o MEF tem a intenção de resolver o sistema através da combinação linear de funções de aproximação. Quanto maior o número de funções de aproximação, menor é a complexidade da forma que estas podem assumir, porém, maior também é o esforço computacional. Desta forma, cada função de aproximação é ponderada por um coeficiente desconhecido, configurando o objetivo do MEF. Um estudo mais amplo sobre estas funções de aproximação pode ser encontrado em (Reddy, 2006).

Historicamente, o MDF foi mais aplicado a problemas de mecânica dos fluidos enfrentando, portanto, equações altamente não-lineares. Já o MEF, dentro da engenharia, esteve mais envolvido em problemas de elasticidade mecânica que, apesar de não apresentarem grandes complicações quanto à linearidade, frequentemente enfrentava dificuldades em relação à geometria dos problemas. Neste cenário, o MDF focou em dominar e/ou contornar as não-linearidades dos modelos, enquanto que o MEF foi se especializando no tratamento de problemas com geometrias complexas. Nota-se que ambas as técnicas desenvolveram

características valiosas na solução de problemas, mas as tentativas de acoplá-las não obtiveram sucesso até a década de 70 (Maliska, 2004).

2.2.1.3 Volumes Finitos

Outro método deste grupo de estratégias que consistem na discretização do contorno e de pontos interiores é o Método dos Volumes Finitos (MVF). Este tem como princípio a discretização da Equação 2.1, partindo do princípio físico da conservação entre os volumes de controle, o que fez com que esta abordagem fosse comumente encontrada nos *softwares* especializados em fluidodinâmica (Maliska, 2004). Assim, esta abordagem consiste em adaptar a equação diferencial de interesse para ser reescrita na forma da Equação 2.8a. Na equação, X é a variável independente, a_p , a_i e são os coeficientes que surgem da implementação e relacionam as constantes da equação (se houver) com a distância entre os pontos da malha e b e são os coeficientes que surgem da implementação e relacionam as constantes da equação (se houver) com a distância entre os pontos da malha e X . O sistema de Equações 2.8a-2.8f mostra como foram calculados cada termo da aproximação. O subscrito θ indica o chute inicial do processo iterativo. Os coeficientes k_i ($i = n, s, e, w, f, b, c, p$) representam constantes que podem surgir ao implementar o método em um problema específico. Mais detalhes sobre cada termo e sobre a implementação do método podem ser encontrados em (Patankar, 1980; Maliska, 2004; Versteeg; Malalasekera, 2007).

$$a_p X_p = \sum a_i X_i + b; \quad i = n, s, e, w, f, b \quad (2.8a)$$

$$a_n = \frac{k_n \Delta y \Delta x}{h_n} \quad (2.8b)$$

$$a_s = \frac{k_s \Delta y \Delta x}{h_s} \quad (2.8c)$$

$$a_e = \frac{k_e \Delta y \Delta z}{h_e} \quad (2.8d)$$

$$a_w = \frac{k_w \Delta y \Delta z}{h_w} \quad (2.8e)$$

$$a_f = \frac{k_f \Delta z \Delta x}{h_f} \quad (2.8f)$$

$$a_b = \frac{k_b \Delta z \Delta x}{h_b} \quad (2.8g)$$

$$b = k_c \Delta x \Delta y \Delta z + a_p^0 X_p^0 \quad (2.8h)$$

$$a_p = a_n + a_s + a_e + a_w + a_f + a_b + a_p^0 - k_p \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.8i)$$

$$\Delta x = h_e + h_w \quad (2.8j)$$

$$\Delta y = h_f + h_b \quad (2.8k)$$

$$\Delta z = h_n + h_s \quad (2.8l)$$

Na Figura 2.2a observa-se quatro células de uma malha aplicada a uma superfície. Estas células se encontram nos pontos N, S, E, W e P. Um volume fictício é gerado em torno no ponto P, que é o ponto de interesse, cujos vértices coincidem com o centro das células vizinhas. Cada aresta deste volume está a uma distância h_i ($i = n, s, e, w$) do segmento de reta paralelo à aresta e que passa pelo ponto P. Este conceito pode ser facilmente reduzido para o caso unidimensional, considerando apenas uma das direções em questão \overline{WE} ou \overline{NS} ou estendido para o caso tridimensional, como pode ser visto na Figura 2.2b. Neste último caso, uma nova direção \overline{FB} é adicionada para representar uma novo dimensão.

Assim como nos métodos de malhas anteriores, o MVF permite que o problema de interesse seja resolvido no centro de cada célula e interpolado, frequentemente por partes ou linearmente, para gerar o resultado total no volume.

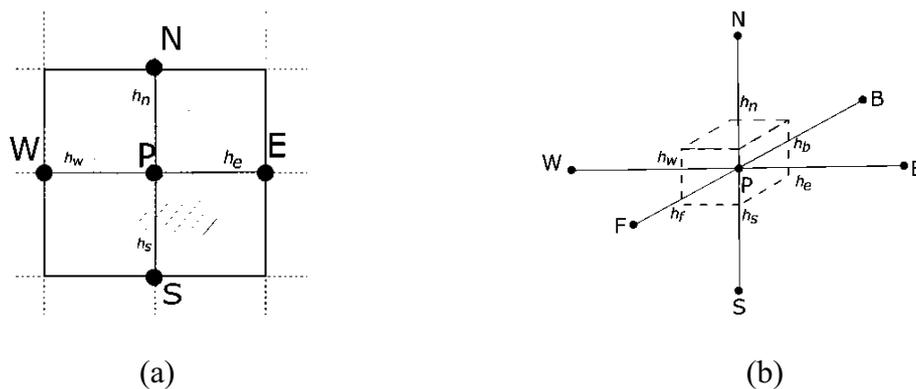


Figura 2.2 - Identificação dos pontos utilizados no Método dos Volumes Finitos para os casos (a) bidimensional e (b) tridimensional.

2.2.2 Métodos Baseados na Discretização do Contorno

Como descrito anteriormente, as abordagens apresentadas fazem parte dos denominados *métodos de domínio* e são caracterizados pela geração de uma malha de elementos no contorno e no domínio do problema de interesse. Já os denominados métodos de contorno têm como principal característica a discretização apenas do contorno, isto é, não requerem a discretização de pontos internos do domínio do problema de interesse (Cheng; Cheng, 2005). O estudo deste tipo de abordagem inicializou-se no século XX e, assim como os métodos baseados na discretização de pontos interiores do domínio, foi impulsionado pelo desenvolvimento e aprimoramento dos microcomputadores. Como estes métodos exigem um menor custo computacional em relação aos que exigem a discretização do interior do domínio, é fácil entender qual a motivação para estudá-los, principalmente quando se trata da sua aplicabilidade no projeto de sistemas de engenharia.

2.2.2.1 Elementos de Contorno

O Método dos Elementos de Contorno (MEC) funciona de forma semelhante ao MEF, pois faz uso de combinações de equações candidatas para a aproximação do problema, porém, nesta abordagem, os elementos são gerados apenas nos contornos. Este método é uma variação de uma classe de técnicas conhecidas como Técnicas de Equações Integrais de Contorno (Bouchon; Sánchez-Sesma, 2007). Seu mecanismo é análogo aos outros métodos comentados até então, isto é: *i*) realizar a discretização do contorno; *ii*) utilizar esta discretização para calcular as informações desconhecidas no contorno; *iii*) empregar as informações calculadas no contorno e nas equações governantes para resolver o problema em qualquer ponto do domínio. Descrições completas e detalhes deste método, assim como outros métodos de contorno, podem ser encontradas em Gipson (1987).

2.2.2.2 Soluções Fundamentais

O Método das Soluções Fundamentais (MSF), também conhecido como Método da Superposição (Burgess; Mahajerin, 1984), Método de Colocação no Contorno (Levin; Tal,

1986), Método de Simulação de Potencial (Amano, 1994), Método da Superposição, Método Desingularizado, Método das Colocações Fundamentais ou Método da Simulação de Cargas (Gorzelańczyk; Kolodziej, 2008), foi introduzido por Kupradze e Aleksidze (1964) para resolver problemas diferenciais parciais homogêneos. Este tem como base conceitual a definição de uma combinação linear de soluções fundamentais (funções de aproximação), o qual é empregado para a obtenção de um sistema algébrico baseado nas informações da região que define o problema associado a um domínio fictício (definido pelo usuário da técnica). Assim, o problema original é transformado em um equivalente em que se deseja determinar os coeficientes que ponderam as soluções fundamentais. Neste sentido, apenas informações conhecidas do problema (condições iniciais e de contorno) são utilizadas para a geração desse sistema algébrico.

Segundo Medeiros (2005) e Ogata et al. (2011), o MSF apresenta as seguintes vantagens: *i)* é fácil de programar; *ii)* seu custo computacional é baixo, quando comparado com outras técnicas numéricas como, por exemplo, o MDF; *iii)* se os parâmetros da função forem bem escolhidos, o método tem boa precisão e; *iv)* evita a integração singular através da definição de uma superfície de pontos fictícios. Por outro lado, o MSF apresenta como principais desvantagens: *i)* a necessidade de se conhecer ao mesmo tempo uma solução fundamental; *ii)* o mal condicionamento numérico resultante da sua formulação matemática e; *iii)* a influência da escolha da superfície a ser empregada no método. Cabe ressaltar que, para a última, foi demonstrado por Bogomolny (1985) que a melhor escolha para problemas 2D é um círculo e para problemas 3D é uma esfera, sendo observado a melhora dos resultados, em termos de precisão, para raios crescentes. Outro ponto a se destacar é a forma como é realizada a localização dos pontos fictícios. Segundo Patterson e Sheikh (1983) e Medeiros (2005), esta escolha pode ser feita a partir da fixação dos pontos em posições pré-estabelecidas do domínio definido ou da determinação da posição de cada ponto através da resolução de um problema de otimização. Já Young et al. (2008) propuseram um procedimento sistemático para localizar os pontos fonte em termos dos pontos de colocação, do centro geométrico do domínio computacional e de um parâmetro empregado para a localização dos pontos fonte.

Para a aplicação do MSF é necessário o uso de uma Solução Fundamental. Uma Solução Fundamental é definida como a função F que satisfaça a Equação 2.9 abaixo. É importante frisar que a Solução Fundamental não necessariamente irá satisfazer as condições de contorno de um dado problema.

$$LF(x) = \delta(x) \quad (2.9)$$

Em que L representa um operador diferencial e δ representa a função Delta de Dirac. Se F satisfaz a equação acima, diz-se que F é Solução Fundamental de L . Então, para um problema do tipo:

$$L\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)u = f \quad (2.10)$$

A solução u da Equação 2.10 pode ser obtida através da operação de convolução entre as funções F , da Equação 2.9, e f , da Equação 2.10 (Reeve, 2013). Reeve (2013) traz um breve histórico de como foram sendo descobertas as principais Soluções Fundamentais que são conhecidas hoje.

Como descrito anteriormente, cada tipo de equação diferencial requer um tipo específico de solução fundamental para que o MSF possa ser empregado. A seguir são apresentadas algumas das soluções fundamentais conhecidas e que são vastamente encontradas na literatura.

- Operador de Laplace - $\nabla^2 u = 0$:

1D $F = -\frac{1}{2}|x|$ (Reeve, 2013)

2D $F = -\frac{1}{2\pi}\ln|x|$ (Valle, 2007)

3D $F = -\frac{1}{4\pi|x|}$ (Valle, 2007)

- Operador de Helmholtz - $\nabla^2 u + k^2 u = 0$:

2D $F = \frac{i}{4}H_0^{(1)}(k|x|)$ (Valle, 2007)

3D $F = -\frac{e^{-i k|x|}}{4\pi|x|}$ (Valle, 2007)

- Operador de Helmholtz modificado - $\nabla^2 u - k^2 u = 0$:

1D $F = e^{k|x|}$ (Ramos, 2016)

2D $F = -\frac{1}{2\pi}K_0(k|x|)$ (Valle, 2007)

3D
$$F = -\frac{e^{-k|x|}}{4\pi|x|}$$
 (Valle, 2007)

- Equação do calor - $\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \nabla^2 u = 0$:

nD
$$F = \frac{H_e(t)}{(4a^2\pi t)^{\frac{n}{2}}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{4a^2 t}\right)$$
 (Reeve, 2013; Ramos, 2016)

- Equação da onda - $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a^2 \nabla^2 u = 0$:

1D
$$F = \frac{1}{2a} H_e\left(t - \frac{|x|}{c}\right)$$
 (Reeve, 2013)

3D
$$F = \frac{\delta(t - |x|)}{4\pi|x|}$$
 (Reeve, 2013)

Nas equações acima, $H_0^{(1)}$ representa a Função de Hänkel do primeiro tipo de ordem zero, K_0 representa a Função de Bessel modificada do segundo tipo de ordem zero, H_e representa a função de Heaviside e ∇^2 representa o operador de Laplace $\left(\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$.

Apesar do MSF ter sido proposto para resolver uma determinada classe de equações diferenciais parciais, as homogêneas, hoje em dia esta poderosa ferramenta numérica tem sido empregada para resolver problemas diferenciais com diferentes níveis de complexidade. Exemplos de aplicações deste método que podem ser encontrados na literatura incluem detecção de espaços vazios em um pseudocontorno móvel (Karageorghis et al., 2012), tomografia de impedância elétrica (Heravi et al., 2014), a solução de problemas do tipo Signorini diretos e inversos (Karageorghis et al., 2015), identificação de fontes de calor transientes (Kuo et al., 2016), solução da Equação de Helmholtz modificada (Tian et al., 2017), problemas inversos de transferência de energia transiente (Islam; Ismail, 2017), problemas elásticos não lineares (Askour et al., 2018), dentre vários outros.

2.2.3 Outros Métodos Numéricos para Solução de Problemas de Transferência de Energia

Os métodos citados acima são frequentemente encontrados na literatura, mas não são os únicos capazes de resolver problemas diferenciais envolvendo transferência de energia. Outras abordagens existentes para este tipo de problema incluem: Método multipolo (Bennet et al., 1987); e o Método de Iteração Variacional - *VIM* (He, 1999).

- Método multipolo: Bennet et al. (1987) apresentam um problema de transferência de calor composto por dois cilindros coaxiais, sendo que o cilindro interno possui, em seu interior, n outros cilindros. Para a solução do problema, os autores propuseram um método que faz uma aproximação da temperatura exata de acordo com a Equação 2.11. Na Equação, T_0 representa a temperatura inicial, W_{no} , W_{nj} e W_{cj} são os multipolos de ordem j , r_{pn}^j e r_c^{-j} são fatores para correção dimensional e P_n , P_{nj} e P_{cj} são os coeficientes de cada multipolo. Os termos W_{no} , W_{nj} , W_{cj} , P_{nj} e P_{cj} são complexos e, por isso, o funcional $Re[\cdot]$ indica que são consideradas apenas as partes reais. Os autores também apresentam as definições matemáticas de cada um destes termos.

$$T = T_0 + Re \left[\sum_{n=1}^N P_n W_{no} + \sum_{n=1}^N \sum_j P_{nj} r_{pn}^j W_{nj} + \sum_j P_{cj} r_c^{-j} W_{cj} \right] \quad (2.11)$$

Este método também foi aplicado com sucesso em outros trabalhos disponíveis na literatura. Os mais recentes incluem a estimação e validação experimental da resistência térmica de poços de perfuração (Go et al., 2014); o cálculo da resistência térmica de poços de trocadores de calor em tubo-U (Javed; Spitler, 2017); a resolução de problemas de condução de energia (Wang et al., 2016); a resolução de sistemas não-lineares de transferência de energia com propriedades termofísicas variando com o tempo (Wang et al., 2018a).

- Método de Iteração Variacional: Este método foi proposto por He (1999) via modificação do Método do Multiplicador de Lagrange, gerando a Equação 2.12.

$$u_{n+1}(x) = u_n(x) + \int_0^x \lambda [Lu_n(\psi) + N\tilde{u}(\psi) - g(\psi)] d\psi \quad (2.12)$$

em que λ é o multiplicador de Lagrange que pode ser determinado via otimização segundo a Teoria Variacional (He, 1999), L é um operador linear, N é um operador não-linear e g é a equação não-homogênea do problema, $u_o(x)$ é a aproximação inicial e $\tilde{u}(x)$ é considerada uma variante restrita ($\delta\tilde{u}_n = 0$).

Trabalhos da literatura que aplicaram com sucesso esta técnica incluem o estudo numérico da transferência de energia em tecido humano durante tratamento térmico em temperatura elevada (Gupta et al., 2013); a identificação de uma fonte de calor dependente do tempo em equações parabólicas (Zhou; Wu, 2004); a solução numérica de equações de reação-difusão (Wu et al., 2015; WazWaz, 2017) e outras aplicações em transferência de energia (Zhou et al., 2017).

2.2.4 Interpretação Geométrica dos Diferentes Métodos de Discretização

Na Figura 2.3 é possível observar a diferença entre os dois tipos de abordagens (com e sem a discretização de pontos internos do domínio) considerando o MDF, o MEF e dois dos principais representantes da classe de métodos sem malha, a saber, o Método dos Elementos de Contorno (MEC) e o Método das Soluções Fundamentais (MSF). Nas Figuras 2.3a e 2.3b observa-se que a geometria complexa do domínio foi dividida em diversas células menores retangulares e triangulares, respectivamente. O problema de interesse é resolvido em cada célula e interpolado para resultar na solução final. Este tipo de abordagem, apesar de intuitiva, tem elevado custo computacional, uma vez que o mesmo sistema de equações deve ser resolvido diversas vezes. Outro problema destes métodos é o tempo requerido para se gerar uma boa malha, capaz de representar corretamente o domínio. A etapa de geração de malha é, frequentemente, citada como a que demanda maior tempo de trabalho e a parte mais onerosa dentro da modelagem numérica (Cheng; Cheng, 2005).

Por outro lado, o MEC consiste na discretização apenas do contorno, o que reduz uma dimensão do problema. Por exemplo, no Figura 2.3c, o que antes era um problema bidimensional para os métodos de malha, agora é um problema unidimensional (ao longo da linha do contorno) para o MEC. A abordagem do MEC consiste em unir dois pontos em um segmento, ou elemento, que é associado a um potencial de magnitude desconhecido. Os

elementos são integrados ao longo do contorno e os potenciais são calculados de forma a atender as condições de contorno (Cheng; Cheng, 2005).

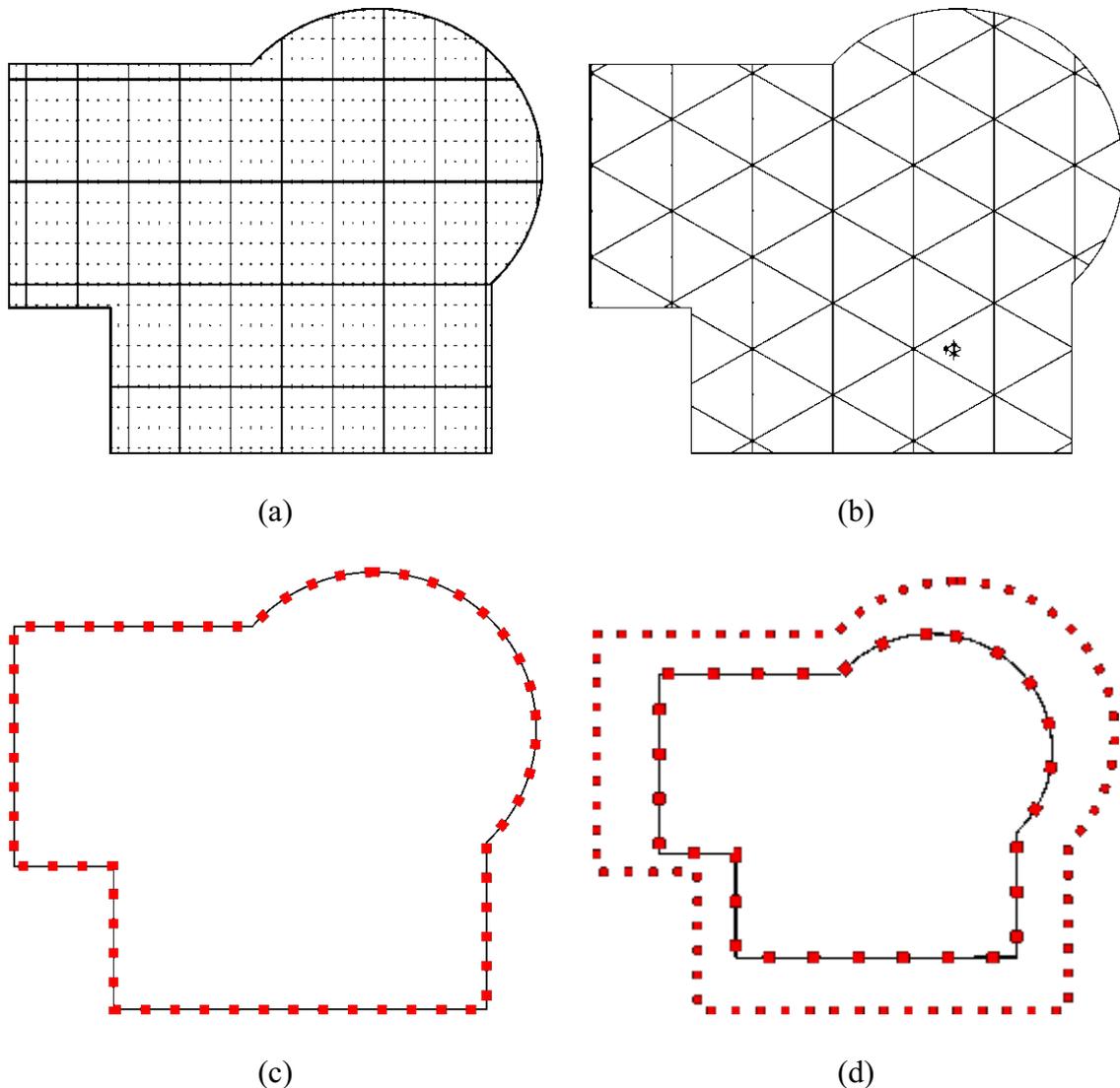


Figura 2.3 - Discretização utilizada nos métodos de (a) MDF (b) MEF (c) MEC e (d) MSF.

Já no caso da Figura 2.3d, nota-se a existência de uma superfície externa ao contorno. Esta é a principal característica que representa o MSF que, assim como o MEC, não utiliza informações do domínio para resolver as equações diferenciais de interesse. No lugar das integrais, o MSF combina pontos discretizados na geometria fictícia, chamados de pontos fonte, e na geometria do problema, chamados de pontos de colocação, para substituir a EDP por um sistema algébrico (Ramos, 2016).

De forma geral, a utilização de quaisquer um dos métodos sem malha pode resultar em um sistema algébrico que apresente mal condicionamento numérico. Assim, se o problema

for bem condicionado pode-se empregar, por exemplo, a Inversa de Penrose (IP). Por outro lado, se o problema for mal condicionado, deve-se aplicar técnicas de regularização, como a Técnica de Regularização de Tikhonov, o Método da Decomposição em Valores Singulares ou a Regularização por Variação Total. A seguir são apresentados uma breve descrição de cada uma destas técnicas.

2.3 INVERSA DE PENROSE

Sendo um sistema linear $Ax = b$ em que A é a matriz de coeficientes, b é o vetor de termos independentes x é o vetor de incógnitas. Se A não for uma matriz quadrada, as técnicas tradicionais não podem ser aplicadas. Assim, a abordagem da Inversa de Penrose (IP), proposta por Penrose (1955) consiste de um procedimento desenvolvido para resolver sistemas lineares cuja matriz A é retangular. Neste método, considere a matriz A^+ , que é solução do sistema algébrico a seguir:

$$AA^+A = A \quad (2.13a)$$

$$A^+AA^+ = A^+ \quad (2.13b)$$

$$(AA^+)^T = AA^+ \quad (2.13c)$$

$$(A^+A)^T = A^+A \quad (2.13d)$$

Nas Equações 2.13a a 2.13d, A^+ é chamada de matriz pseudoinversa ou IP ou Inversa de Moore-Penrose. Penrose (1955) provou que existe apenas uma matriz A^+ $m \times n$ que satisfaz o sistema acima, para qualquer que seja a matriz A . Assim, a matriz A^+ pode ser determinada pela Equação 2.14 abaixo (Courrieu, 2005):

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T \quad (2.14)$$

2.4 TÉCNICAS DE REGULARIZAÇÃO

A aplicação do MEC e do MSF pode fazer com que o sistema resultante seja mal condicionado, isto é, pequenas perturbações nos dados de entrada causam grandes perturbações nos dados de saída (Tikhonov; Arsenin, 1977), isto é, a solução de um sistema mal condicionado

tende a ser imprecisa. Do ponto de vista matemático, para investigar a estabilidade numérica de sistemas de equações algébricas lineares, a literatura especializada utiliza número de condição (κ) (Turing, 1948), definido para uma matriz quadrada não singular A como sendo:

$$\kappa(A) = \frac{\|A\|}{\| \text{inv}(A) \|} \quad (2.15)$$

Em que $\| \cdot \|$ representa a norma (Euclidiana, Frobenius, entre outras) e o operador $\text{inv}(\cdot)$ representa a inversa, no caso da matriz A . Conforme destacado por Drombosky et al. (2009), se κ for aproximadamente igual a unidade, a matriz A é considerada bem condicionada. Por outro lado, se κ for muito maior que a unidade, a matriz A é considerada mal condicionada. Assim, como o valor de κ aumenta com o incremento da dimensão do sistema, se o mesmo for mal condicionado, a resolução numérica do mesmo poderá ser comprometida (Tikhonov; Arsenin, 1977).

Para minimizar o efeito do mal condicionamento numérico na solução do sistema resultante da aplicação do MSF ($Ax = b$, em que A é a matriz de coeficientes constantes, b é o vetor de termos independentes e x é o vetor de incógnitas), a seguir são apresentadas as Técnicas de Regularização, cuja intenção é substituir esta matriz por outra, equivalente ou aproximada, que seja bem condicionada. Na prática, esta substituição tem como objetivo suavizar a determinação inversa, permitindo que uma solução mais precisa seja obtida.

2.4.1 Técnica de Regularização de Tikhonov

A Técnica de Regularização de Tikhonov (Tik) consiste em substituir a matriz original por um problema de otimização no qual se deseja minimizar o funcional J (Chen et al., 2008):

$$\min J = \|A\mu - b\|^2 + \alpha \|\mu\|^2 \quad (2.16)$$

Em que $\alpha (> 0)$ é o parâmetro de regularização de Tikhonov. Conforme descrito por Muniz (1999), a regularização pode ser interpretada como um procedimento que muda a abordagem por mínimos quadrados através da adição de termos que pretendem reduzir flutuações no vetor μ , flutuações estas que são inerentes a problemas mal condicionados.

Conforme descrito por Chen et al. (2008), minimizar o funcional J é equivalente a obter a solução do seguinte sistema de equações lineares:

$$(A^T A + \alpha I) = A^T b \quad (2.17)$$

Para que a Tik possa ser aplicada, faz-se necessário a determinação do parâmetro α . Para essa finalidade o Método da Curva L configura-se como uma das abordagens mais utilizadas (Hansen, 1992). Esta é definida como a curva contínua em que a seguinte condição é verificada:

$$L = \{ \|A\mu_\alpha - b\|, \|\mu_\alpha\| : \forall \alpha > 0 \} \quad (2.18)$$

Para α fixo, pode-se computar as normas de $A\mu - b$ e de μ . Assim, a curva L pode ser plotada (em escala logarítmica) como um conjunto de todos os pontos das normas residuais (abscissa) e as normas de solução (ordenada) de modo que $\alpha > 0$. A curva L exibe o compromisso entre a minimização do erro de perturbação e do erro de regularização. Uma boa escolha para esse parâmetro correspondente a uma solução regularizada perto do canto (corner) da curva L , que pode ser considerado como o ponto no qual a curva L assume o seu valor mínimo. Um exemplo da curva L pode ser visto na Figura 2.4, em que uma boa escolha para o parâmetro de regularização (λ) é um valor contido no intervalo entre 10^{-8} e 10^{-10} .

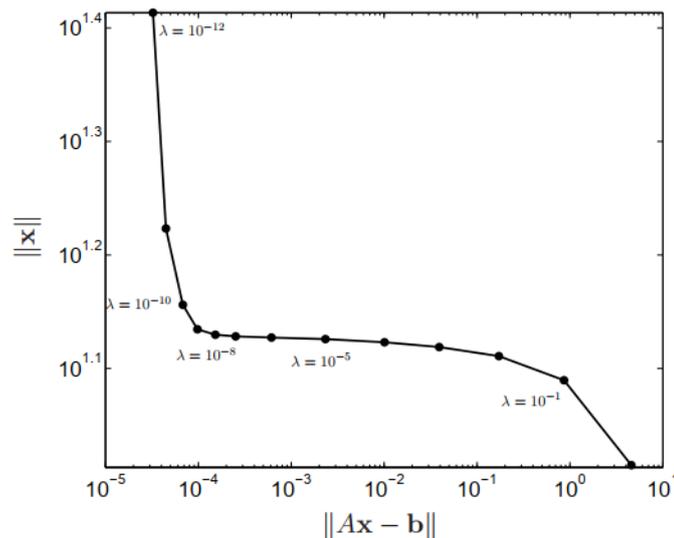


Figura 2.4 - Estrutura da Curva L . Fonte: Reeve (2013).

Dentre os trabalhos listados na literatura que fazem uso da Tik, pode-se citar a estimação de parâmetros hemodinâmicos a partir de ressonância magnética de perfusão (Ying et al., 2015), a análise do limite de erro ótimo em um problema inverso da equação de difusão com tempo fracionário (Wang et al., 2015), a regularização híbrida utilizando os métodos de Tikhonov e de variação total em tomografia elétrica (Song et al., 2015), em reconstrução de imagens via tomografia de capacitância elétrica baseado em transformações espectrais do Laplaciano (Guo et al., 2016), na confecção de imagens com distribuição de densidade em 3D de prótons em plasma (Li; Wang, 2016), na estimação de parâmetros para identificação de fontes de emissão de gases nocivos via acoplamento da Tik com o AEP (Ma et al., 2017), na regularização em problemas inversos de transferência de energia com simetria radial (Djerrar et al., 2017), na identificação dinâmica de cargas em estruturas estocásticas (Wang et al., 2018a), na solução do problema inverso de difusão espacial-fracionária via Regularização Fracionária de Tikhonov (Zheng; Zhang, 2018).

2.4.2 Método da Decomposição em Valores Singulares

Este método aproxima uma matriz A mal-condicionada por um produto de matrizes bem-condicionadas utilizando as informações dos valores singulares de A , conforme a seguinte relação:

$$A = U\Lambda V^T \quad (2.19)$$

Em que U e V são matrizes ortonormais $m \times r$ e Λ é uma matriz diagonal $r \times r$, em que r representa o posto, ou *rank* da matriz. As colunas da matriz U são formadas pelos autovetores de AA^T , as colunas de V correspondem aos autovetores de $A^T A$. Já Λ é formada pela raiz quadrada dos autovalores não-nulos de AA^T e $A^T A$, (Oliveira, 2016). No sistema $Ax = b$, substituindo A por 2.19, a solução pode ser encontrada pela Equação 2.20 (Valle, 2007):

$$x = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\lambda_i} v_i \quad (2.20)$$

Em que o subíndice i indica as colunas das respectivas matrizes (Noschese; Reichel, 2014).

2.4.3 Regularização por Variação Total

Este método, semelhantemente a Tik, soma um termo de penalização ao termo de resíduo do sistema, de acordo com a Equação 2.21 (Song et al., 2015; González et al., 2017):

$$\min J = \frac{1}{2} \|A\mu - b\|^2 + \lambda \int_{\Omega} \sqrt{|\nabla\mu|^2 + \beta} dx \quad (2.21)$$

Em que $\lambda > 0$ e $\beta \geq 0$ são parâmetros de regularização.

Este método foi aplicado com sucesso em trabalhos como na reconstrução da topografia de uma montanha (Dou; Han, 2012), na amplificação do sinal de imagens com ruídos (Xu et al., 2015) na detecção de infravermelho ofuscado (Wang et al., 2017d), na identificação da condutividade elétrica via tomografia de impedância elétrica (Hinze et al., 2018).

2.5 O PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO

2.5.1 Conceitos Básicos

A otimização consiste na melhoria do que já existe, buscando aumentar a eficiência do objeto de estudo, porém de forma que não seja necessário testar todas as possibilidades envolvidas (Himmelblau et al., 2001). Matematicamente, este conceito se traduz em encontrar o ponto em que uma função que representa o objetivo (*Fobj*) apresente um valor mínimo ou máximo, isto é; o ponto ótimo, dentro do intervalo busca de interesse, além de respeitar todas as restrições que, por ventura, o problema tenha. As restrições representam limitações que, de alguma maneira, são impostas de forma a delimitar a região onde a solução ótima deverá ser encontrada, conforme representado na Figura 2.5. Na figura, observa-se três curvas g_1 , g_2 e g_3

atuando como restrições. As interseções destas curvas criam a superfície de valores possíveis para as variáveis de projeto x_1 e x_2 , representada pela área hachurada. Estas restrições podem ser de naturezas diversas. Por exemplo, as operações de raiz quadrada e de divisão impõem restrições matemáticas aos valores das variáveis. Se a função objetivo busca modelar uma troca térmica, as restrições devem levar em consideração mudanças de fases ou possíveis reações químicas. Orçamentos, prazos e custos são exemplos de restrições de natureza econômica que também podem surgir (Himmelblau et al., 2001).

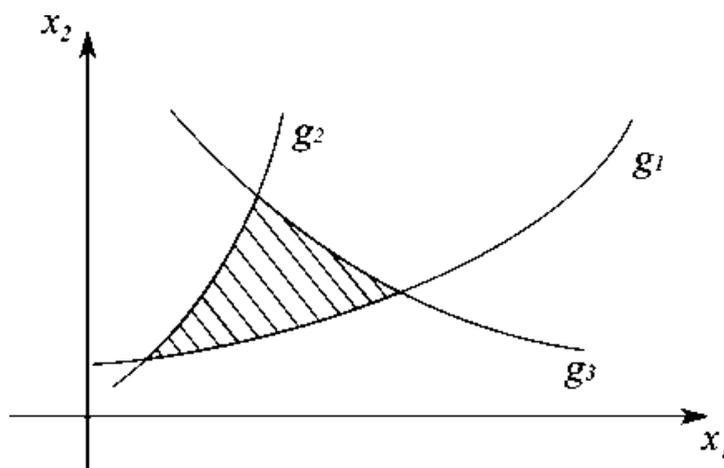


Figura 2.5 - Restrições g_1 , g_2 e g_3 limitando o espaço de possibilidades das variáveis x_1 e x_2 .

Uma vez que $\min(F_{obj}) = \max(-F_{obj})$, um problema de otimização qualquer pode sempre ser anunciado como um problema de minimização, sem perdas por generalização. O ponto ótimo possui a propriedade de ter uma inclinação nula (a derivada da função no ponto ótimo é igual a zero). É baseado nesta propriedade que surgiram os primeiros métodos de otimização. Entretanto, como pode ser visto na Figura 2.6, existe um problema que deve sempre ser considerado quando se está tentando otimizar uma função genérica y .

Nesta figura pode-se observar o gráfico de uma função genérica $y = f(x)$ definida no intervalo x_1, x_4 . Na figura estão destacados quatro pontos: A, B, C e D. Apesar de o ponto C ser aquele com maior valor da função objetivo, todos os pontos possuem derivada nula. Por este motivo, define-se como ótimo local os pontos em que a derivada é nula, mas a função não assume o seu valor máximo (ou mínimo) e como ótimo global onde a derivada é nula e a função assume o seu valor máximo (ou mínimo).

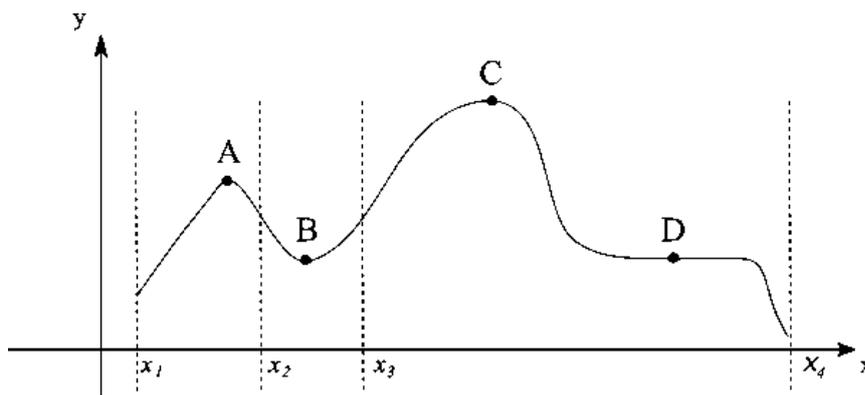


Figura 2.6 - Exemplo de pontos de ótimo local e ótimo global

Dessa forma diz-se que, no intervalo $[x_1, x_2]$, A é máximo local. Da mesma forma, no intervalo $[x_2, x_3]$, B é mínimo local. No entanto, se for considerar todo o domínio da função, ou seja, o intervalo $[x_1, x_4]$, nenhum destes dois pontos seria o ótimo global, uma vez que a função atinge valores maiores que A e menores que B em outras posições. Diz-se, porém, que C é o ponto máximo global pois, ao longo de todo o domínio, este é o valor máximo que a função $y = f(x)$ consegue alcançar. Da mesma forma, o ponto em que $y_4 = f(x_4)$ é o mínimo global, ou seja, o menor valor possível para y dentro do intervalo. Por fim, ressalta-se que o ponto D , apesar de ter derivada nula, não é ponto de máximo ou de mínimo, mas sim de inflexão (Vanderplaats, 1984).

2.5.1.1 Otimização Multi-objetivo

Projetos modernos de engenharia frequentemente envolvem a otimização de várias funções simultaneamente, definindo a *otimização multi-objetivo*. Este tipo de problema tem caráter conflitante, isto é, a melhora em um dos objetivos faz com que os outros piorem os seus valores. Portanto, o conceito de ponto ótimo aplicado aos problemas mono-objetivo não é diretamente extensível aos problemas multi-objetivos. Nestes casos, a otimização se preocupa em encontrar um conjunto de pontos compromisso, e que formam a solução do problema de otimização multi-objetivo (Deb, 2001).

O conceito adotado pela literatura para caracterizar a solução de um problema de otimização multi-objetivo foi inicialmente proposto por Francis Ysidro Edgeworth, sendo o mesmo atualizado por Vilfred Pareto (Edgeworth, 1881; Pareto, 1986). O Postulado de

Edgeworth-Pareto, ou simplesmente Postulado de Pareto, define um ponto x^* como ótimo se "nenhum critério utilizado pode melhorar a solução, sem piorar pelo menos um outro critério" (Osyczka, 1984; Eschenauer et al., 1990). Para exemplificar esta definição, considere a Figura 2.7 na qual deseja-se maximizar a função f_1 e minimizar a função f_2 .

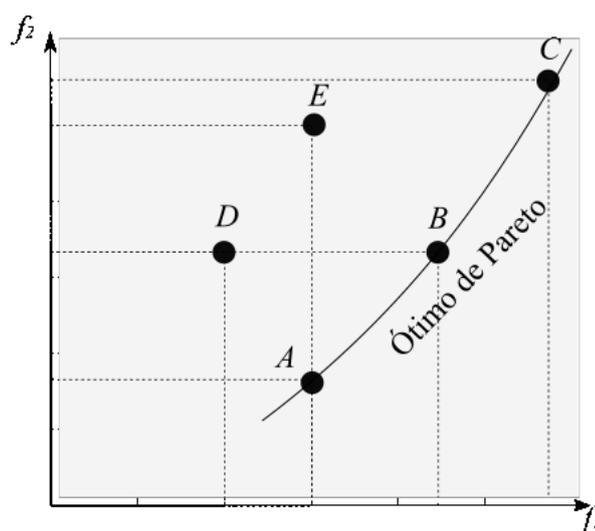


Figura 2.7 - Curva do Ótimo de Pareto.

Nesta figura observa-se uma região com possíveis respostas (A, B, C, D e E) para as funções f_1 e f_2 , respectivamente. Observando-se o par de pontos A e E nota-se que, para um mesmo f_1 , existem duas opções para f_2 . Como se deseja o menor valor possível de f_2 , diz-se que o ponto A domina o ponto E. A mesma situação acontece entre os pontos B e D pois, neste caso, o ponto B representa uma escolha com um f_1 maior que o ponto D. Já o ponto C não compete com nenhuma outra possibilidade. Neste exemplo, os pontos A, B e C formam uma curva de possibilidades de projeto, mas não há como dizer qual, dentre estes três pontos, é o melhor. Nesta etapa, a escolha entre eles fica a critério do compromisso que o tomador de decisão aceita assumir em relação aos valores de f_1 e f_2 . Por isso, diz-se que estes três pontos são, do ponto de vista matemático, igualmente ótimos. A região de pontos igualmente ótimos é denominada de Região do Ótimo de Pareto ou Curva de Pareto.

Para este tipo de problema deseja-se alcançar duas métricas, a saber, a convergência (capacidade de obter a solução do problema) e diversidade (obtenção de pontos bem espalhados em relação à Curva de Pareto) (Deb, 2001).

2.5.2 Formulação matemática

O problema de otimização pode ser estruturado matematicamente como (Vanderplaats, 1984):

$$\min[f_i(X_j)], \quad i = 1, \dots, n \quad (2.22a)$$

$$g_l(X_j) \leq 0, \quad l = 1, \dots, L \quad (2.22b)$$

$$h_k(X_j) = 0, \quad k = 1, \dots, K \quad (2.22c)$$

$$X_j^{\min} \leq x \leq X_j^{\max}, \quad j = 1, \dots, m \quad (2.22d)$$

Em que f_i representa o vetor que contém m funções objetivo (se $n > 1$, o problema é multi-objetivo, caso contrário é mono-objetivo). X_j representa o vetor de variáveis de projeto (busca, decisão ou independentes), h_k representa o vetor com restrições de igualdade, g_l representa o vetor com as restrições de desigualdade, X_j^{\min} e X_j^{\max} representam os limites inferior e superior que cada variável de projeto pode assumir, respectivamente.

2.5.3 Classificação dos Métodos de Otimização

Os métodos de otimização podem ser classificados em dois grandes grupos: os métodos clássicos (ou determinísticos) e os métodos heurísticos (não-determinísticos). Estes últimos fazem parte de um ramo da computação denominado de *computação evolutiva* desde 1990, mas que teve seus primeiros passos dados ainda na década de 1950 (Das; Suganthan, 2011). A seguir é apresentada uma breve revisão sobre alguns dos mais importantes métodos de otimização clássicos e heurísticos.

2.5.4 Métodos Clássicos

Os métodos de otimização clássicos têm como principal característica o uso de informações sobre o gradiente da função objetivo e das restrições para a atualização de um candidato a solução do problema de otimização. Em linhas gerais, todo e qualquer método de

otimização consiste na determinação da direção de busca (S) e do quanto caminhar nesta direção (α) conforme a seguinte relação (Vanderplaats, 1984):

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k S^k \quad (2.23)$$

Em que k é a iteração corrente. Assim, a partir da determinação da direção de busca, o problema original, geralmente multi-dimensional, é convertido em um equivalente mono-dimensional em que a única incógnita é o tamanho do passo α . Na prática, resolver um problema de otimização consiste em resolver um problema de busca mono-dimensional. Para essa finalidade, a seguir são apresentados alguns das principais metodologias para a determinação da direção de busca S .

- Método da Máxima Descida

Este método consiste do uso do gradiente da função objetivo para a definição da direção de busca S . Portanto, devido ao sinal negativo de S , este método naturalmente aponta para a direção de máxima descida fazendo a simples substituição de S por $-\nabla f$ (Vanderplaats, 1984; Himmelblau et al., 2001):

$$S^k = -F^k \quad (2.24)$$

Em que $F(x^k)$ é o vetor que representa o gradiente da função objetivo avaliada em x^k .

- Método de Fletcher-Reeves

O Método de Fletcher-Reeves (MFR) consiste em atualizar a direção de busca S a parti da seguinte relação (Vanderplaats, 1984):

$$S^k = -\nabla F^k + S^{k-1} \left(\frac{(F^k)^T F^k}{(F^{k-1})^T F^{k-1}} \right) \quad (2.25)$$

Em que $F(x^k)$ é o gradiente da função objetivo avaliada em x^k . Neste caso, o método exige que o usuário forneça uma matriz S inicial (ou aplique, por exemplo, na primeira iteração o Método da Máxima Descida). A partir da segunda iteração, a matriz é atualizada segundo a Equação 2.25.

- Método de Newton

O Método de Newton (MN) consiste do uso de informações sobre o gradiente e a matriz Hessiana da função objetivo original, de acordo com a seguinte relação:

$$x^{k+1} = x^k - F(x^k)H^{-1}(x^k) \quad (2.26)$$

- Métodos de *Quasi-Newton*

Este método consiste em aproximar as informações contidas na matriz Hessiana a partir do uso de informações sobre o gradiente da função objetivo F , conforme a seguinte relação (Himmelblau et al., 2001):

$$H(x^k) = \frac{F(x^k) - F(x^P)}{x^k - x^P} \quad (2.27)$$

Em que x^P é um vetor com valores de referência fornecido pelo usuário. Assim, substituindo essa informação (Equação 2.27) na Equação 2.26 obtém-se:

$$x_j^{k+1} = x_j^k - \frac{F(x_j^k)(x^k - x^P)}{F(x^k) - F(x^P)} \quad (2.28)$$

- Método de Levenberg-Marquardt

Como pode ser observado no MN, existe a possibilidade de ocorrer singularidades caso o determinante da matriz Hessiana seja igual a zero ou muito próximo deste valor. Com o intuito de minimizar a chance do aparecimento de singularidades, o Método de Levenberg-Marquardt foi proposto. Este consiste em uma pequena modificação do MN de modo que um novo parâmetro seja acrescentado, a saber, o parâmetro de Levenberg-Marquardt (λ), como pode ser visto na Equação 2.29:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{H(x^k)F(x^k)}{H(x^k)^2 + \lambda I} \quad (2.29)$$

Em que I é a matriz identidade de mesma ordem que o sistema original. Assim, para evitar singularidades, λ deve ser definido de forma com que o determinante do denominador não seja igual a zero. Cabe ressaltar que se λ for igual a zero, esse método se torna o próprio MN.

- Método das Variáveis Métricas

Uma outra opção para a aproximação da Matriz H é dado pelo Método das Variáveis Métricas (MVM):

$$H^{k+1} = H^k + \Theta^k \quad (2.30a)$$

$$\Theta^k = \left(\frac{\sigma + \theta\tau}{\sigma^2} \right) pp^T + \left(\frac{\theta - 1}{\tau} \right) H^k yy^T H^k - \frac{\theta}{\sigma} (H^k yp^T + p(H^k y)^T) \quad (2.30b)$$

$$p = x^k - x^{k-1} \quad (2.30c)$$

$$y = F(x^k) - F(x^{k-1}) \quad (2.30d)$$

$$\sigma = p^T y \quad (2.30e)$$

$$\tau = y^T H^k y \quad (2.30f)$$

Na equação acima, se $\theta = 0$ tem-se o método conhecido na literatura DFP, que recebe esse nome a partir dos nomes de seus autores: Davidon, Fletcher e Powell. Caso $\theta = 1$, o método é conhecido como Método BFGS, cujo nome também vem de seus autores, Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno (Vanderplaats, 1984; Himmelblau et al., 2001).

Com o problema original multi-dimensional sendo convertido em um equivalente monodimensional, faz-se necessário a resolução do mesmo. Para essa finalidade, a seguir são apresentadas as principais abordagens para a resolução de problemas monodimensionais, a saber, o Método da Bisseção (MB), o Método da Secção Áurea (MSA) e o Método da Aproximação Polinomial (MAP).

- Método da Bisseção

Este método consiste em, considerando um problema definido no intervalo $x \in [a, b]$, calcular o ponto médio $c = (a + b)/2$ de modo a dividir o intervalo original em dois: $[a, c]$ e $[c, b]$. Em seguida, verifica-se em qual destes o valor da função objetivo assume o melhor valor para a otimização do problema. Assim, o intervalo de busca é reduzido pela metade em cada iteração. Este processo é repetido até que o intervalo de busca seja tão pequeno quanto se queira, de forma que os pontos deste intervalo atendam ao critério de parada.

- Método da Secção Áurea

Este método utiliza o mesmo mecanismo do anterior, com a diferença que o intervalo é reduzido com relação ao parâmetro áureo (τ), definido como: (Vanderplaats, 1984):

$$\tau = \frac{\sqrt{5}}{2} - \frac{1}{2} = 0,6181 \dots \quad (2.31)$$

Assim, a cada iteração, o intervalo de busca é reduzido proporcionalmente em 62% ou 38%, como pode ser observado na Figura 2.8. Segundo este método, o intervalo [a,c] descrito pela figura foi seccionado nos intervalos [a,b] e [b,c]. Os intervalos são analisados em relação à existência de um ponto ótimo, selecionando aquele cuja existência for confirmada e descartando-se o outro.



Figura 2.8 - Secção do intervalo de busca segundo o Método da Secção Áurea.

- Método da Aproximação Polinomial

Este método consiste em aproximar a função objetivo original f por um polinômio p de ordem n . Conhecendo-se a função objetivo pode-se, através da definição da ordem, avaliar f em determinados pontos do domínio de interesse de forma a gerar um sistema, cuja solução representa os coeficientes deste polinômio. Assim, caso o polinômio represente satisfatoriamente a função objetivo original, pode-se utilizar o mesmo para obter uma solução aproximada do problema original, isto é, ao invés de buscar a solução com a função f , obtém-se a solução em termos de p , cujas operações são relativamente mais simples do que a função original (Vanderplaats, 1984; Himmelblau et al., 2001).

2.5.4.1 Métodos Heurísticos

Os métodos heurísticos, frequentemente chamados também de não-determinísticos, constituem um grupo de estratégias de otimização que são fundamentados em fenômenos ou observações que acontecem na natureza. A principal diferença entre um método clássico e um método heurístico é que o primeiro é determinístico enquanto que o último é fortemente baseado

na aleatoriedade, sendo estes, geralmente, baseados em população. Além disso, os algoritmos heurísticos não utilizam quaisquer informações sobre o gradiente da função objetivo e das restrições para a atualização da população. Esta característica tem uma implicação prática, caso um ótimo local seja encontrado, o mesmo pode ser descartado caso um outro ponto, de melhor valor de função objetivo, seja encontrado, o que não acontece com os métodos clássicos. A seguir são listados alguns dos principais métodos heurísticos, com destaque para o algoritmo de Evolução Diferencial (ED).

- Algoritmo Genético (GA)

O Algoritmo Genético (GA) configura a metodologia mais difundida dentre todos os algoritmos heurísticos. Esta abordagem se baseia no conceito biológico de evolução das espécies, teorizado por Darwin (1859). A partir da ideia de evolução, John Holland e David E. Goldberg idealizaram, em 1989, um algoritmo que buscasse a melhoria de uma função baseado na informação de gerações anteriores. Dessa forma, o GA aplica as ideias de adaptação ao meio, seleção natural e mutação para explorar o espaço de busca afim de encontrar o ponto ótimo (Michalewicz, 1998). O algoritmo começa com a geração de uma população inicial (de forma aleatória) com N candidatos à solução que, por analogia com o processo de seleção natural, é chamado de cromossomo. Cada candidato é, analogamente, um gene e cada gene recebe um valor, os alelos. Cada cromossomo é testado diante da função objetivo para avaliar sua qualidade, ou sua adaptação.

A cada iteração, ou geração no contexto heurístico, existem três mecanismos de seleção aleatória que pressionam a geração atual e passar sua carga genética para as gerações posteriores. Na natureza, os indivíduos mais adaptados têm maiores chances de sobreviver e passar seus genes adiante. Este fato é simulado no mecanismo de reprodução, em que cada indivíduo recebe uma classificação de acordo com o valor da função objetivo e, os mais adaptados, têm maiores chances de serem selecionados para se reproduzirem. O cruzamento é o mecanismo responsável pela troca de informação genética entre pares de candidatos. Por fim, a mutação é o mecanismo que simula a chance de ocorrer uma alteração genética aleatória em um indivíduo. Terminados estes processos, uma nova geração de filhos surge e são testados com relação ao valor da função objetivo. A nova população passa a ser, então, uma combinação entre a geração

de pais e a geração de filhos, de forma que os mais adaptados têm maiores chances de serem selecionados.

Dentre as inúmeras aplicações desta tradicional técnica de otimização, destacam-se: a otimização estrutural de nanopartículas de uma liga metálica de Pt-Pd-Rh (Liu et al., 2016), a proposta de um híbrido de GA com decomposição de fases para resolver o problema de layout de um estabelecimento com área desigual (Paes et al., 2017), a otimização de um isótopo de grafeno para minimização da condutividade térmica (Davier et al., 2017), a modelagem de camadas de difusão gasosa em fibras curvas (Didari et al., 2017), o planejamento de experimentos de caracterização de uma metaloproteína termoestável (Borzakurt et al., 2018), o uso o GA para melhorar a previsão de derramamento de óleo (Guo et al., 2018) e o uso de GA híbrido adaptável na solução de problemas de agendamento (Zhang et al., 2018).

- Algoritmo de Colônia de Vagalumes (ACV)

Este algoritmo, proposto por Xin-She Yang em seu livro *Nature-Inspired Metaheuristic Algorithms* é inspirado no uso da bioluminescência durante o processo de acasalamento de vagalumes como sistemática para a atualização de uma população em cada geração. O algoritmo assume as seguintes hipóteses: 1) os vagalumes não possuem sexo, assim qualquer vagalume pode atrair e ser atraído; 2) a atratividade de um vagalume é proporcional ao brilho emitido e decai com a distância; 3) o brilho emitido por um vagalume é determinado pela sua avaliação diante à função objetivo (Yang, 2008).

Dentre as inúmeras aplicações do ACV pode-se citar o desenvolvimento de um novo método híbrido de Algoritmo Competitivo imperialista (ICA), Funções de base radial (RBF) e ACV para predição no recebimento de sinais de indicadores de intensidade em redes sem fio (Shidrokh et al., 2016), a obtenção de um modelo híbrido integrado para predição da velocidade do vento (Deo et al., 2018), a otimização na distribuição na estocagem de lotes de produtos (Elkhechafi et al., 2018), a otimização utilizando volumes de dados (Wang et al., 2018b), e a modelagem do processo de floculação em processamento de minerais (Qi et al., 2018).

- Algoritmo de Enxame de Partículas (AEP)

Este algoritmo busca simular o comportamento social de pássaros, conforme proposto por Mahmood et al. (2018). Nesta abordagem, cada indivíduo, ou partícula, é associado a uma posição e uma velocidade dentro do espaço de busca e pode mover-se livremente. A cada iteração, as posições e velocidades de cada partícula são atualizadas baseadas em coeficientes de aceleração e inércia fornecidos pelo usuário.

Como aplicações deste algoritmo pode-se citar o projeto de turbinas eólicas (Cheng et al., 2016), a parametrização de um reservatório de hidreto gasoso (Hou et al., 2016), o projeto de sustentabilidade baseado em simbiose industrial (Ren et al., 2016), a otimização dos parâmetros de processos morfológicos em sistemas de escaneamento a laser (Pathak; Singh, 2017), a identificação de comportamento de motoristas embriagados (Li et al., 2017a), a redução da emissão de carbono em uma planta farmacêutica (Su et al., 2017), a otimização da ignição de pastilhas de isótopos de hidrogênio (Livari et al., 2017), e a otimização da distribuição de posicionamento de turbinas marítimas para a produção de energia (Wi et al., 2018).

- Algoritmo de Recozimento Simulado (ARS)

O ARS é um método proposto por Kirkpatrick et al. (1983) e Cerny (1985) e é baseado no processo de recristalização durante o resfriamento gradual de uma liga metálica. Neste processo, os átomos do metal naturalmente migram para um estado em que a energia interna do sistema seja mínima, mesmo que durante a migração sejam alcançados estados de maior energia. O ARS busca imitar este comportamento via aplicação de modificações aleatórias nos pontos em análise. Se a modificação levar a uma melhor adaptação (um melhor valor de função objetivo), a mesma é mantida. Caso contrário, a depender da avaliação de uma certa probabilidade, ela pode ser descartada. Esta probabilidade depende principalmente da temperatura, que segue uma função de resfriamento definida pelo usuário (Tavares et al., 2011).

Exemplos de aplicações dessa técnica envolvem a minimização do consumo de energia de uma linha de processo com robôs (Li et al., 2016), a transição de fases em reconstrução filogenética (Strobl; Barker, 2016), a simulação molecular dinâmica das estruturas de superfície da hidroxiapatita (Wu et al., 2016), a otimização de vasos de

pressão (Alcántar et al., 2017a; Alcántar et al., 2017b), a otimização de uma extensão de rede de hidrômetros (Chebbi et al., 2017), a seleção de redes de irrigação sustentáveis (Pérez-Sánchez et al., 2018), a otimização das propriedades de absorção de som da espuma de poliuretano (Zhu et al., 2018).

2.5.4.2 Evolução Diferencial (ED)

Neste trabalho será dado um destaque ao algoritmo ED, proposto por Kenneth Storn e Rainer Price em 1995. Este algoritmo foi originalmente desenvolvido para solucionar o Problema de Ajuste Polinomial de Chebychev (Storn; Price, 1995). Em linhas gerais, este algoritmo consiste na atualização da população via realização de operações vetoriais (soma e subtração). Dentre as principais vantagens do algoritmo de ED destacam-se: *i*) a sua fácil implementação, *ii*) a sua concepção conceitual simples, *iii*) a capacidade de estruturação em arquitetura paralela, *iv*) a habilidade de escapar de mínimos locais e *v*) a sua versatilidade, pois pode ser implementado para solucionar vários tipos de problemas de diferentes graus de complexidade, além de problemas multi-objetivo (Lobato et al., 2011).

Em 1996, o algoritmo de ED foi colocado à prova no Primeiro Concurso Internacional em Otimização Evolutiva, que aconteceu na Conferência internacional em Computação Evolutiva (ICEO-CEC). Neste evento, o algoritmo alcançou a colocação de terceiro lugar, como o melhor algoritmo evolutivo da competição, visto que os dois primeiros lugares foram ocupados por algoritmos não-evolutivos que tiveram desempenho mais rápido que o algoritmo de ED. Nos anos seguintes o algoritmo de ED continuou a aparecer em novas edições das competições do CEC, juntamente com variações do método original. Nestas edições subsequentes, o algoritmo e suas variações tiveram desempenhos consistentes, sempre garantindo posições de destaque nas colocações, o que incluem (CEC, 2018): segundo e terceiro lugares em otimização de parâmetros reais (na edição de 2005), o primeiro lugar em otimização de parâmetros reais restritos (na edição de 2006), o segundo lugar em otimização multi-objetivo (na edição de 2007), o terceiro lugar em otimização em larga escala (na edição de 2008), o primeiro lugar em computação evolutiva em ambientes dinâmicos e com incertezas (na edição de 2009), o primeiro e o quarto lugares em otimização com parâmetros reais restritos (na edição de 2010) e segundo e terceiros lugares em otimização de problemas com aplicações reais (na edição de 2011).

O usuário do algoritmo de ED deve fornecer o seguinte conjunto de informações para sua execução: o número de parâmetros a serem estimados (D), o tamanho da população (NP), a taxa (ou fator) de perturbação (F), a probabilidade de cruzamento ($CR \in [0, 1]$), a função objetivo (F_{obj}), o critério de parada (CP), os limites inferior (L) e superior (U) para cada variável de projeto, respectivamente, e o vetor de parâmetros do modelo em análise (y), caso exista.

A Figura 2.9 apresenta as etapas necessárias para a execução do algoritmo de ED. As mesmas são apresentadas em sequência.

- Inicialização

O algoritmo se inicia com a geração de NP candidatos à solução do problema de otimização contidos no intervalo $[L, U]$, com dimensão igual a D , de acordo com a Equação 2.32:

$$x_j^i = x_L^i + rand(x_U^i - x_L^i) \quad (2.32)$$

Em que o termo x_{ij} refere-se ao j -ésimo elemento do vetor i e $rand$ é um número aleatório com distribuição normal no intervalo $[0,1]$ (Lobato et al., 2011). Esta equação garante que os candidatos gerados estão dentro dos limites inferior e superior estabelecidos.

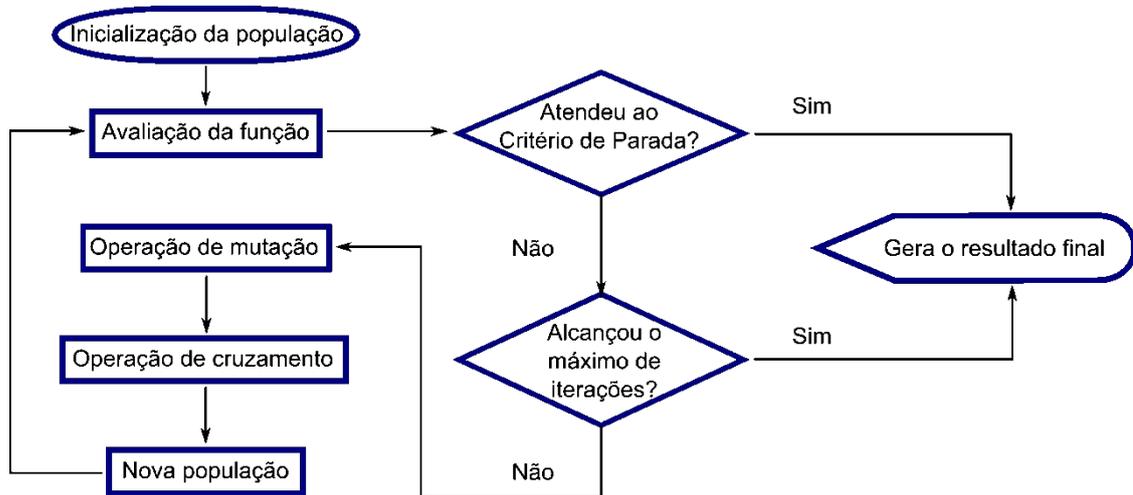


Figura 2.9 - Fluxograma representativo do algoritmo de Evolução Diferencial.

A Figura 2.10 apresenta um exemplo da distribuição considerando a Equação 2.32 para a seguinte FO :

$$FO = x \sin(4x) + 1.1y \sin(2y) \quad (2.33)$$

A Figura 2.10a apresenta o comportamento de FO no intervalo $x = [0 \ 10]$ e $y = [0 \ 10]$. Já a Figura 2.10b mostra as curvas de nível desta função juntamente com os pontos aleatórios gerados na etapa de inicialização do DE. Os pontos (círculos pretos) representam os candidatos gerados considerando $NP = 20$, $F = 0,5$ e $CR = 0,6$.

Para dar seqüência ao algoritmo de ED, a população de candidatos é avaliada quanto a sua adequação, sendo identificados os melhores valores da geração corrente. Em seguida, esta população passará pelas operações de mutação e cruzamento, que tem o objetivo de promover perturbações na população corrente.

Para tentar acelerar o processo de convergência, a literatura especializada apresenta algumas técnicas de inicialização com o objetivo de encontrar regiões do domínio que têm maiores chances de conter o mínimo global. O primeiro trabalho nesta linha foi o Método de Aprendizagem Baseado no Valor Oposto (OBL), originalmente proposto por (Tizhoosh, 2005), onde se aplica o conceito de candidato oposto para buscar o melhor candidato à solução entre os dois: o candidato direto e o candidato oposto. Segundo Pattanaik et al. (2017), se x é o candidato direto, gerado a partir da Equação 2.32, então o candidato oposto \bar{x} é definido como:

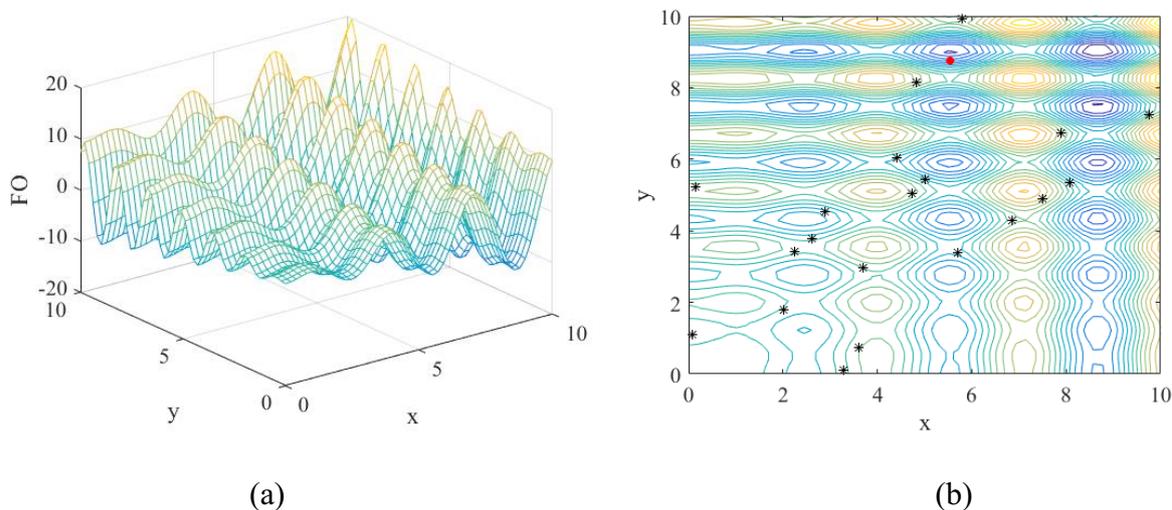


Figura 2.10 - Curva (a) 3D e (b) curvas de nível da função $FO = x \sin(4x) + 1.1y \sin(2y)$ no intervalo $x = [0 \ 10]$, $y = [0 \ 10]$.

$$\bar{x}_j^i = x_L^i + x_U^i - x_j^i \quad (2.34)$$

Esta técnica consiste em avaliar, simultaneamente, o ajuste entre os candidatos x e \bar{x} . Se $f(\bar{x}) < f(x)$, então o candidato direto pode ser substituído pelo seu oposto. Acoplado ao DE, este algoritmo é chamado na literatura de ODE (Opposition-based Differential Evolution). Melo e Delbem (2012) propuseram utilizar o algoritmo de *Smart Sampling* (SS), que aplica técnicas de auto-aprendizado para identificar regiões com maior probabilidade de se encontrar o mínimo global. Segundo estes autores, as principais vantagens desse algoritmo são a drástica redução de avaliações da função e, principalmente, a de se um algoritmo independente e que pode ser facilmente acoplado ao método de otimização de preferência do usuário. Apesar de útil, o SS encontra suas principais dificuldades e problemas multimodais e de grandes dimensões (Melo; Delbem, 2012; Das; Suganthan, 2016). Já Poikolainen et al. (2015) propuseram uma abordagem diferente para o mesmo objetivo. Os autores aplicaram um procedimento que denominaram de inicialização baseada em grupos de população, que consiste em gerar uma população candidata através de um processo em três estágios, a saber: 1) os indivíduos selecionados aleatoriamente de uma população passam por dois algoritmos de busca - um por movimentação e o outro é o algoritmo de Rosenbrock; 2) a solução das buscas do passo anterior são aglomeradas por um algoritmo de aglomeração por média e; 3) os melhores indivíduos de cada aglomerado são salvos para formar a população inicial.

- Mutações

A operação de mutação é o que diferencia o algoritmo de ED de outras estratégias evolutivas. Trata-se de uma operação vetorial em que um novo candidato será gerado a partir das informações de dois ou mais candidatos da população atual. Esta operação é convencionalmente representada de forma DE/ $X/Y/Z$, em que X representa o vetor que será perturbado, Y indica a quantidade de pares de candidatos que serão utilizados na perturbação e Z indica o tipo de cruzamento que será realizado. A Tabela 2.3 apresenta o mecanismo de mutação propostos por Storn e Price (1995), bem como sua representação convencional. Vale lembrar que a estratégia 7 é tida como *default*.

Tabela 2.3 - Representação dos mecanismos de mutação do algoritmo de ED.

Estratégia	Mecanismo de Mutação	Nomenclatura
1	$x^{j+1} = x_{best}^j + F(x_{k1}^j - x_{k2}^j)$	De/best/1/exp
2	$x^{j+1} = x_{k3}^j + F(x_{k1}^j - x_{k2}^j)$	De/rand/1/exp
3	$x^{j+1} = x_{old}^j + F(x_{best}^j - x_{old}^j) + F(x_{k1}^j - x_{k2}^j)$	De/rand-to-best/2/exp
4	$x^{j+1} = x_{best}^j + F(x_{k1}^j - x_{k2}^j) + F(x_{k3}^j - x_{k4}^j)$	De/best/2/exp
5	$x^{j+1} = x_{k5}^j + F(x_{k1}^j - x_{k2}^j) + F(x_{k3}^j - x_{k4}^j)$	De/rand/2/exp
6	$x^{j+1} = x_{best}^j + F(x_{k1}^j - x_{k2}^j)$	De/best/1/bin
7	$x^{j+1} = x_{k3}^j + F(x_{k1}^j - x_{k2}^j)$	De/rand/1/bin
8	$x^{j+1} = x_{old}^j + F(x_{best}^j - x_{old}^j) + F(x_{k1}^j - x_{k2}^j)$	De/rand-to-best/2/bin
9	$x^{j+1} = x_{best}^j + F(x_{k1}^j - x_{k2}^j) + F(x_{k3}^j - x_{k4}^j)$	De/best/2/bin
10	$x^{j+1} = x_{k5}^j + F(x_{k1}^j - x_{k2}^j) + F(x_{k3}^j - x_{k4}^j)$	De/rand/2/bin

Nesta tabela, x_{best} indica o ponto com melhor ajuste até o momento, x_{old} indica o ponto com o menor ajuste (ponto mais antigo), e os subscritos k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 são índices aleatórios mutuamente exclusivos. A estratégia DE/rand/1 é usada com mais frequência pois possui alta capacidade para encontrar o mínimo global e simplicidade. Estratégias baseadas nos melhores valores, como a DE/best/1 ou DE/best-to-rand/1, conseguem superar a velocidade de convergência e a precisão da estratégia aleatória, mas são menos indicadas para problemas multimodais pois elas apresentam maiores chances de cair mínimos locais (Pahner; Hameyer, 2000; Gamperle et al., 2002; Mezura-Montes et al., 2006). De acordo com Zhang e Xie (2003) e Qin et al. (2009), estratégias que utilizam mais de um par de candidatos aumentam o poder exploratório do algoritmo, mantendo as características de velocidade de convergência e precisão em relação ao uso aleatório ou do melhor valor.

A Figura 2.11 exemplifica o processo de mutação da estratégia DE/rand/1.

Três candidatos são selecionados aleatoriamente na população atual (quadrados), sendo combinados para formar um novo candidato (círculo). Neste processo, é somado a um candidato x_{k1}^j a diferença entre os candidatos x_{k2}^j e x_{k3}^j , ponderada pelo fator de perturbação F , gerando um novo candidato x^{j+1} .

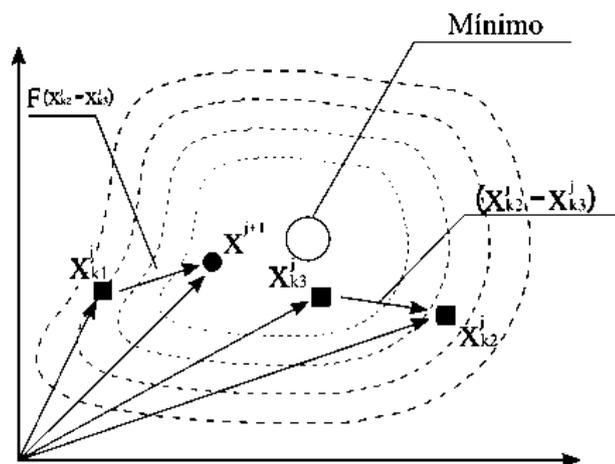


Figura 2.11 - Exemplo da etapa de mutação baseado em um par de vetores.

Após a aparição do algoritmo de ED, novas técnicas foram associadas à etapa de mutação com o objetivo de buscar um melhor desempenho, mas nenhuma ainda se destacou como a melhor dentre as demais (Das; Suganthan, 2011). Awad et al. (2017) desenvolveram o método MOnDE (*Multiobjective normalized Differential Evolution* para melhorar o desempenho da estratégia DE/rand-to-best, passando a ser denominada de DE/randto-n best através da normalização dos indivíduos em termos de ajuste das funções objetivos de interesse no problema multi-objetivo. Nesta proposta, os autores observaram uma maior velocidade na convergência, bem como maior probabilidade de se produzir soluções melhores com esta nova estratégia. Wang et al. (2018b) utilizaram o conceito de ranqueamento de elite para propor o algoritmo IMSaDE (*Improved Mutation Strategy adaptative Differential Evolution*). Nesta variante, os indivíduos da população são avaliados em relação à função objetivo e, a partir disto, duas sub-populações são geradas: uma contendo os indivíduos com melhor ajuste (população de elite) e a outra contendo os demais indivíduos. Em seguida, é aplicado a estratégia DE/rand/2 de forma que seja utilizado um indivíduo de cada população em cada par de vetores. O intuito deste método é de melhorar a capacidade de exploração da operação de mutação escolhida.

Para exemplificar a etapa de mutação foi gerada a Tabela 2.4 que apresenta um exemplo do processo utilizando a Equação 2.33 como base. A Tabela mostra a população inicial e uma iteração i , quais os candidatos que foram selecionados para mutação, seguindo a estratégia 7 da Tabela 2.3, e os novos candidatos gerados para continuar nas próximas gerações. Também é mostrado o valor da Função Objetivo para cada um dos candidatos.

Tabela 2.4 - Exemplo da etapa de mutação em uma iteração do ED em uma população de $NP = 5$ e $F=0,8$.

População Inicial		Candidatos selecionados			Nova população		FO
x^i	y^i	k_1	k_2	k_3	x^i	y^i	
9,5354	1,6280	5	2	1	0,8117	5,7157	-5,9222
9,7045	5,9700	3	2	1	2,8468	2,8740	-2,8536
2,4023	0,7030	4	1	2	2,9158	5,9644	-6,1949
3,0004	8,1354	5	1	3	4,3336	4,0072	-0,0024
0,7610	3,5447	5	2	4	4,0346	2,9099	-1,5076

- Cruzamento

Após a aplicação do operador de mutação, entra em ação o operador de cruzamento (que pode ser do tipo binário ou do tipo exponencial). No caso binário, é gerado um valor aleatório $rand$ no intervalo $[0,1]$. O candidato será aceito se $rand$ for menor que CR , caso contrário, será rejeitado, como representado na Equação 2.35 (López-Cruz, 2002).

$$u^{j,G} = \begin{cases} x^{j+1}, & \text{se } rand \leq CR \text{ ou } j = j_{rand} \\ x^j, & \text{se } rand > CR \end{cases} \quad (2.35)$$

Se for dada preferência pela opção exponencial, primeiramente é escolhido um valor inteiro n , de forma aleatória, no intervalo $[1,D]$. Este termo indica a posição no vetor de candidatos onde o processo de cruzamento terá início. Outro valor inteiro L , no mesmo intervalo $[1,D]$ é escolhido para indicar a quantidade de pontos que serão cruzados. A escolha de L é feita utilizando o seguinte algoritmo generalizado (Das; Suganthan, 2016):

$$L = 0; DO\{L = L + 1\}; WHILE (rand \leq CR) AND (L \leq D)$$

Com os parâmetros n e L selecionados, o cruzamento acontece da seguinte forma:

$$\begin{aligned} u_i^j &= x_i^{j+1} \text{ para } i = [n; n + L - 1] \\ u_i^j &= x_i^j \text{ para } i < n \cup i > n + L - 1 \end{aligned} \quad (2.36)$$

Zaharie (2009) argumenta que estes dois métodos, apesar de populares, não são rotacionalmente invariantes, o que torna o algoritmo de ED menos efetivo na solução de uma ampla gama de estudos de caso. Por outro lado, eliminar a operação de cruzamento pode ter efeitos negativos em problemas multimodais. (Zaharie, 2009) realizou um estudo teórico da influência da etapa de cruzamento no comportamento do algoritmo de ED. Neste contexto, diferentes técnicas de cruzamento, incluindo o cruzamento binomial e o exponencial e variações destas foram analisadas. Segundo este autor, a principal diferença entre as variações de cruzamento binomial e cruzamento exponencial se encontram principalmente na distribuição do número de indivíduos alterados e também no fato de o cruzamento exponencial ser mais sensível à dimensão do problema.

Uma terceira opção de cruzamento, chamada de contínua ou aritmética, faz uma combinação linear entre o vetor original, x_i^j , e o vetor modificado pela mutação, x_i^{j+1} , para gerar o novo vetor candidato, com o auxílio do que é chamado de coeficiente de combinação, k_i , que pode tanto ser constante ou randômico, no intervalo $[0,1]$. A combinação acontece segundo a equação abaixo (Das; Suganthan, 2011):

$$u_i^j = x_i^j + k_i(x_i^j - x_i^{j+1})$$

Price et al. (2005) ainda propuseram outra forma de cruzamento através da estratégia *DE/rand/1/either-or*. Nesta estratégia existe uma probabilidade p_f do novo vetor candidato ser formado somente por indivíduos que sofreram apenas mutação e uma chance $1 - p_f$ de o vetor ser formado por indivíduos que passaram pelo cruzamento (Das; Suganthan, 2011).

$$\begin{aligned} U_i^j &= x_i^j + F(x_2^j - x_3^j) \text{ se } \text{rand}(0,1) < p_f \\ U_i^j &= x_0^j + k(x_1 + x_2 - 2x_0) \end{aligned} \quad (2.37)$$

Continuando o exemplo de aplicação iniciada na etapa de mutação, a Tabela 2.5 apresenta o resultado após o processo de cruzamento. A Tabela traz a população inicial gerada na etapa de inicialização, a população gerada após a etapa de mutação, o valor aleatório gerado para ser comparado com CR e a nova população que segue para a próxima geração do algoritmo. A Tabela também traz os valores de FO para cada um dos candidatos da nova população.

Tabela 2.5 - Exemplo da etapa de cruzamento em uma iteração do ED em uma população de $NP = 5$, $F = 0,5$ e $CR = 0,6$.

População inicial		População pós-mutação		$Rand$	Nova Propulação		FO
x^i	y^i	x^i	y^i		x^i	y^i	
9,5354	1,6280	0,8517	5,7158	0,6139	9,5354	1,6280	3,8787
9,7045	5,9700	2,4869	2,8740	0,2839	2,4869	2,8740	-2,8536
2,4023	0,7030	2,9158	5,9644	0,5081	2,9158	5,9644	-6,1949
3,0004	8,1354	4,3336	4,0072	5,3888	4,3336	4,0072	0,0244
0,7671	3,5447	4,0346	0,2910	0,0521	4,0346	0,2910	-1,5076

- Seleção

Seguindo as etapas de mutação e cruzamento, o novo vetor candidato gerado é avaliado em respeito a F_{obj} e estes são comparados com os valores das populações anteriores. Em geral, são selecionados os melhores ajustes em relação à função objetivo até o dado momento, caso seja gerado um número aleatório e este seja menor que a probabilidade de cruzamento CR . Neste contexto, permite-se que um candidato com valor de função objetivo que não está entre os melhores valores, sobreviva, pelo menos para a próxima geração.

O processo apresentado continua até que um determinado critério de parada seja satisfeito. O mais adotado é o número máximo de gerações. Todavia, outros critérios como por exemplo intervenção humana, tempo de processamento, avaliação da homogeneidade da população também podem ser adotados (Lobato et al., 2011).

A Figura 2.12 apresenta a distribuição dos pontos do vetor candidato ao longo de diferentes números de iterações. A figura foi gerada usando como base a Equação 2.33, com $NP = 20$; $F = 0,5$, $CR = 0,6$. O ponto mínimo encontrado após mil iterações foi $(x^*, y^*) = (9, 038992; 8, 668189)$ e $F^*_{obj} = -18, 554721$. Os círculos pretos representam os pontos da população e o ponto vermelho destaca o ponto com menor valor da função objetivo.

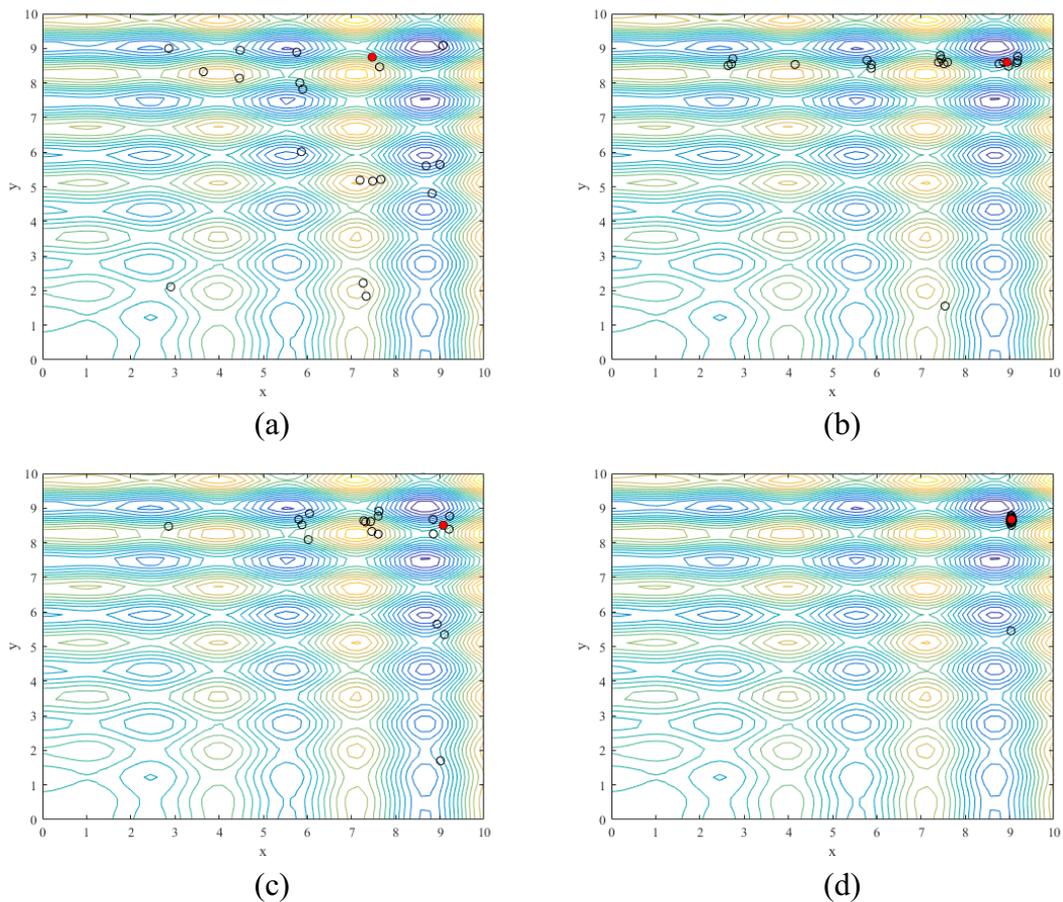


Figura 2.12 - Distribuição dos pontos da população após passadas (a) 10 iterações, (b) 20 iterações, (c) 30 iterações e (d) 40 iterações.

- Atualização dos Parâmetros de Controle do algoritmo de ED

Existem três parâmetros de controle no algoritmo de ED: o tamanho da população (NP), a taxa de perturbação (F) e a probabilidade de cruzamento (CR). A qualidade da solução está diretamente relacionada à escolha destes parâmetros e, portanto, é importante dar a devida atenção a cada um deles. Apesar de sugestões dos idealizadores do algoritmo, a melhor forma de se ajustar estes parâmetros ainda é um assunto em aberto na literatura. Por exemplo, Storn e Price (1995) e Das e Suganthan (2011) parecem concordar que um valor razoável para NP seria entre $5D$ e $10D$, isto é; o tamanho da população seria função da dimensão do problema a ser resolvido. No entanto, Storn e Price (1995) argumentam que, para $NP > 40$, o aumento do valor de NP não trás benefícios significativos na convergência do problema, independente da quantidade de parâmetros. Já Das e Suganthan (2016) acredita existir poucos estudos relacionados no tema.

Possíveis valores para F se encontram na faixa $[0,4, 1]$, sendo $F = 0,5$ citado como uma boa escolha inicial (Das; Suganthan, 2011). Ainda, existem duas abordagens para a seleção de F de forma aleatória. Na primeira técnica é gerado um F_i para cada parâmetro D . A segunda técnica consiste em gerar um F_j num intervalo $[0, 1]$ cada vez que um novo vetor candidato é gerado. Esta última técnica mostrou ser capaz de melhorar significativamente o comportamento de convergência de problemas contendo ruídos (Price et al., 2005).

Em relação a CR , argumenta-se que existem duas regiões distintas onde pode-se encontrar os melhores valores. Para problemas em que as variáveis são separáveis, baixos valores de CR , na faixa de $(0, 0,2)$, podem acelerar a convergência enquanto que, para problemas em que as variáveis são dependentes umas das outras, valores de CR entre $(0,9, 1,0)$ apresentam melhores resultados (Das; Suganthan, 2011). Este fato acontece pois foi observado que valores baixos de CR causam o deslocamento dos candidatos em linhas ortogonais aos eixos, ao passo que maiores valores de CR tendem a aumentar a dispersão dos novos candidatos. Este efeito pode ser observado na Figura 2.13, que mostra a distribuição dos vetores candidatos à solução de um problema após 200 iterações para três escolhas diferentes de CR ($CR = 0$; $CR = 0,5$; $CR = 1,0$).

Zhao et al. (2016) destaca o fato que algumas estratégias aplicadas na geração de novos candidatos são boas para uma busca global, enquanto que outras estratégias apresentam melhores desempenhos no ajuste fino da busca. Fan et al. (2017) também utilizaram as distribuições de Cauchy e normal para adaptar os parâmetros de controle na variante proposta por eles, prior knowledge DE, ou PKDE. A intenção dos autores foi de minimizar as chances de convergência prematura nos estágios iniciais e acelerar a convergência para o mínimo global. A variante NSSDE (neighbor search self-adaptative DE) proposta por Gou et al. (2017) combina estratégias auto-adaptativas com informações aleatórias para ajustar os parâmetros F e CR . De acordo com a proposta, cada indivíduo i é associado a um valor F_i^t e CR_i^t . Durante a etapa de mutação, fator NF_i^t é gerado a partir de uma tomada de decisão baseada em um valor aleatório $rand(0,1)$ e o mesmo ocorre durante a etapa de cruzamento para o fator $NC R_i^t$, como pode ser visto a seguir:

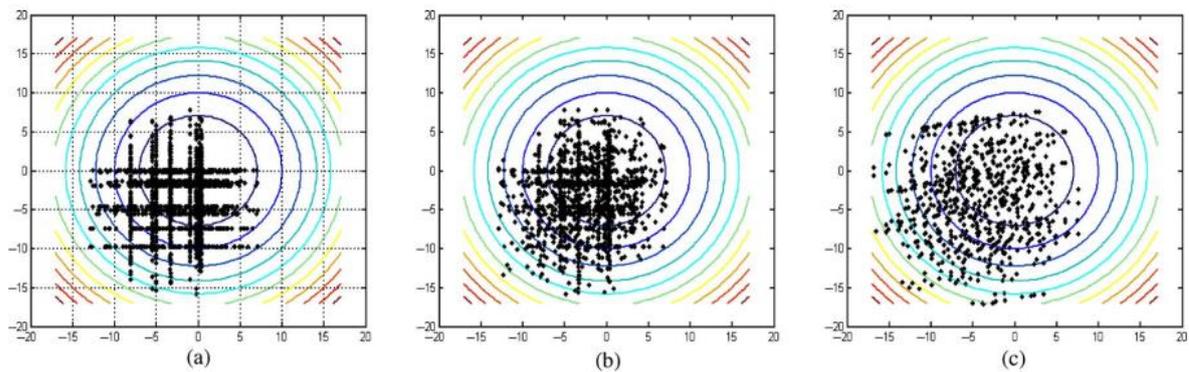


Figura 2.13 - Distribuição empírica dos vetores candidatos para três diferentes valores CR . (a) $CR = 0$, (b) $CR = 0,5$, (c) $CR = 1,0$. Fonte (Das; Suganthan, 2011).

$$NF_i^t = \begin{cases} 0,2 + 0,2rand(0,1), & \text{se } rand(0,1) < 0,1 \\ F_i^t, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$NCR_i^t = \begin{cases} 0,8 + 0,2rand(0,1), & \text{se } rand(0,1) < 0,1 \\ CR_i^t, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

As possibilidades de aplicação do algoritmo de ED são vastas e a cada ano a estratégia se torna mais popular. Das e Suganthan (2011) publicou um trabalho de revisão em que foram analisados vários aspectos do algoritmo, incluindo: 1) influência dos parâmetros de controle do algoritmo, tanto nos casos de parâmetros fixos quanto nos casos de parâmetros auto-adaptativos; 2) novas estratégias de inicialização, mutação e cruzamento; 3) a otimização com variáveis binárias e/ou discretas; 4) a sua utilização no contexto da computação paralela; 5) em problemas multiobjetivo; 6) em problemas restritos e 7) em aplicações encontradas na literatura até aquele ano. Chen et al. (2015) publicaram um estudo sobre a reconfiguração de órbita de satélites. Lobato et al. (2016) publicaram trabalhos sobre a determinação de uma estratégia ótima para administração de medicamentos no tratamento de tumores. Xavier et al. (2016) estimaram parâmetros cinéticos no processo de pirólise da casca de macadâmia. Alvarenga et al. (2016) estimaram os parâmetros cinéticos de pirólise de embalagens cartonadas. Chellaswamy e Ramesh (2016) também estimaram parâmetros em um processo usando células solares. Simhadri et al. (2016) aplicaram o algoritmo de ED escolhendo a morfologia ótima de gel em separação por eletroforese. No contexto multi-objetivo, pode-se citar o projeto pás de turbinas de vento (Wang et al., 2017b), a seleção de características em reconhecimento facial (Mlakar et al., 2017), a minimização dos custos anuais de um trocador de calor do tipo casco-e-tubo

(Vasconcelos-Segundo et al., 2017), a estimação de parâmetros em uma planta de energia híbrida (Sarmah et al., 2017), o projeto de um filtro de sinal multipropósitos utilizando híbrido de DE com vagalumes (Dash et al., 2017), o estudo do algoritmo DE como ferramenta de seleção para características em imagens médicas (Baig et al., 2017), e a otimização de localização e tamanho de unidades geradoras de energias renováveis para redução de custos com combustíveis fósseis (Rasid et al., 2017). Também se destaca o dimensionamento de sistema de geração de energia híbrido eólico e a diesel (Ramli et al., 2018), a análise e otimização de uma planta de energia solar com múltiplos sistemas de geração (Rashidi; Khorshidi, 2018) e a otimização de redes de trocadores de calor utilizando uma hibridização entre GA e ED (Aguitoni et al., 2018).

2.5.4.3 Tratamento de Restrições

Em geral, os métodos de otimização foram propostos inicialmente para o tratamento de problemas sem restrições. Neste caso, em um estudo de caso que apresente restrições, a função objetivo pode ser reescrita em termos de um novo termo denominado de penalidade. Este tem como função penalizar toda e qualquer violação, caso o candidato a solução do problema de otimização, não atenda uma ou mais restrições. Assim, se o problema original restrito puder ser convertido em um equivalente irrestrito, os métodos de otimização podem ser facilmente empregados da forma como foram concebidos. Como exemplos de métodos de penalidade pode-se citar:

- Método da Penalidade Interior ou Método de Barreira

$$\min \Phi(X, rp) = f(X) + rp \sum_l \left(-\frac{1}{g_l(X)} \right) + rp \sum_k h_k(X)^2 \quad (2.38)$$

Em que $\Phi(X)$ é a função pseudo-objetivo e rp é o parâmetro de penalidade, cuja função é amplificar o efeito da penalidade. Neste método, sempre que $h_k(X) \neq 0$, é somado um valor positivo na função pseudo-objetivo o que, automaticamente, piora o resultado. E relação às equações de desigualdade, o termo do meio da Equação 2.38 cria uma assíntota paralela ao eixo de $\Phi(X)$ no ponto em que $g_l = 0$. Assim, sempre que $g_l(X) \rightarrow 0$, $\Phi(X) \rightarrow \infty$. É fácil perceber que quando $rp \rightarrow 0$, $\Phi \rightarrow f$, portanto, valores baixos de rp tendem a melhorar a resposta do

problema. Porém, se rp for baixo, é possível que alguma restrição seja violada sem ser punida. Por este motivo, geralmente rp recebe um valor alto, que vai sendo reduzido gradativamente a cada iteração (Vanderplaats, 1984; Himmelblau et al., 2001).

- Método da Penalidade Exterior

$$\min \Phi(X, rp) = f(X) + rp \sum_l \max[0, g_l(X)]^2 + rp \sum_k h_k(X)^2 \quad (2.39)$$

O termo $\max(0, g_l(X))$ indica que será selecionado o maior valor entre os dois argumentos, a saber, o zero e g_l . Dessa forma, sempre que $g_l(X) > 0$, esse termo é somado à Φ , o que eleva o valor da função pseudo-objetivo. O mesmo ocorre sempre que $h_k(X) \neq 0$. Neste método, quanto maior o valor de rp , mais amplificada é a penalidade. Todavia, dependendo do método de otimização escolhido para resolver o problema equivalente sem restrições, um rp muito alto pode levar à ocorrência de singularidades (Vanderplaats, 1984; Himmelblau et al., 2001). Assim, esta abordagem é inicializada com rp como sendo igual a unidade, sendo incrementado ao longo das iterações.

- Método dos Multiplicadores de Lagrange

$$\min A(X, rp, \lambda) = f(X) + \sum_l (\lambda_l \phi_l - rp \phi_l)^2 + \sum_k \lambda_k h_k(X) + rp(h_k(X))^2 \quad (2.40a)$$

$$\phi_l = \max\left(g_l(X), -\frac{\lambda_l}{2rp}\right) \quad (2.40b)$$

$$\lambda_l = \lambda_l + 2rp \max\left(g_l, \frac{\lambda_l}{2rp}\right) \quad (2.40c)$$

$$\lambda_k = \lambda_k + 2rp h_k \quad (2.40d)$$

Em que A é a função objetivo associada ao Método dos Multiplicadores de Lagrange (MML) e λ é o vetor de multiplicadores de Lagrange. Conforme destacado anteriormente, um valor elevado de rp pode fazer com que o MPE não seja capaz de encontrar a solução do problema. Para superar esta desvantagem, o MML foi proposto como alternativa. Nesta abordagem, o MPE é aplicado a um funcional L (Vanderplaats, 1984; Himmelblau et al., 2001).

2.6 PROBLEMA INVERSO

Os problemas numéricos podem ser classificados, em relação ao seu objetivo, em duas grandes categorias, a saber, os Problemas Diretos (PD) e os Problemas Inversos (PI). Na primeira classe, todas as informações necessárias para a simulação do fenômeno em análise são conhecidas (parâmetros físicos e químicos referentes aos materiais, dados sobre os equipamentos empregados e as condições inicial e de contorno). Assim, de posse destas informações, o problema pode ser resolvido e os perfis referentes ao vetor de variáveis dependentes podem ser obtidos. Por outro lado, quando não se conhece alguma informação de entrada, pode-se formular e resolver um PI. Neste caso, a partir de informações sobre a saída do processo, pode-se formular um problema de otimização para resgatar informações sobre as informações de entrada e/ou sobre o modelo em análise (Karageorghis et al., 2011).

A formulação de um PI é definida com base na minimização de um funcional que relaciona as informações oriundas, geralmente, de observações experimentais do fenômeno em estudo e as respectivas previsões teóricas de um modelo matemático que descreva este fenômeno (Rainieri et al., 2011). Neste caso, deseja-se obter o vetor de variáveis de projeto que minimizem o erro cometido. Este vetor de variáveis de projeto pode ter significado físico ou não, sendo estes os fatores que permitem tornar esse funcional mais próximo de zero quanto possível.

Matematicamente, o PI pode ser formulado como segue:

$$\min S(P) = [Y - T(P)]^T [Y - T(P)] \quad (2.41)$$

Em que S é o funcional que deve ser minimizado, P é o vetor de variáveis de projeto que devem ser estimadas considerando um conjunto Y contendo dados experimentais e os preditos pelo modelo T .

Como pode ser observado, um PI é um caso particular da classe de problemas de otimização gerais. Assim, qualquer uma das técnicas apresentadas anteriormente para resolver um problema de otimização pode ser empregada para a obtenção do vetor P .

Em se tratando de problemas inversos em transferência de calor, a aplicação das Equações 2.5-2.7a podem envolver a avaliação da influência do tipo de material na difusão térmica, o mapeamento da distribuição de temperatura, a avaliação da difusão com o tempo, a

determinação das condições inicial e de contorno, a geometria ou a determinação do tempo necessário para que um processo entre em regime permanente, entre outras possibilidades. Problemas inversos de transferência de energia são atrativos pois permitem o estudo do fenômeno em ambientes que dificultam ou impossibilitam a realização de medidas diretas ou em situações em que estas medidas estão atreladas a um custo elevado. Os problemas recentes envolvendo condutividade térmica, por exemplo, abordam materiais híbridos ou compósitos, uma vez que as propriedades físicas deste tipo de material variam com a composição. Ghafir et al. (2009) estudaram células de combustível automobilístico a base de hidretos metálicos e apontaram para o fato que a condutividade térmica das células seria constantemente alterada na medida em que o combustível fosse sendo consumido. Isto impossibilita a sua determinação experimental e também afeta a eficiência do equipamento, uma vez que a disponibilidade de hidrogênio varia com o tempo. Outro exemplo são problemas relacionados com o coeficiente de película. A obtenção experimental deste parâmetro não é uma tarefa trivial, pois se a superfície estiver exposta para um fluido em movimento, esta medida se torna ainda mais complicada, visto que o coeficiente passa a depender fortemente de vários fatores. Por este motivo, a medição do coeficiente de película, quando possível, é feita de forma indireta (Mottin, 2015). Outros campos que sofrem com problemas similares incluem veículos espaciais de reentrada, interior de câmaras de combustão, estimação de parâmetros termofísicos (condutividade térmica, coeficiente de película, resistência térmica), identificação de fontes e/ou sumidouros de calor, recuperação de informações do contorno cujo acesso esteja dificultado ou impossibilitado e determinação de propriedades radioativas (Udayraj et al., 2015).

2.7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O presente capítulo teve como objetivo apresentar aspectos relacionados: *i*) a formulação matemática de problemas de transferência de calor, *i* *ii*) de técnicas numéricas com e sem o uso de malhas oriundas da discretização de pontos internos do domínio de interesse, *iii*) uma breve revisão sobre as técnicas de regularização, *iv*) a descrição conceitual e matemática do problema de otimização com destaque para o algoritmo de ED e *v*) a relação entre o problema de otimização e um PI.

O Capítulo 3 será dedicado a apresentação dos procedimentos adotados neste trabalho para a simulação de PD e a resolução de PI.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo, o problema de transferência de calor por condução de interesse será apresentado. Além disso, será detalhado o MSF para o problema em questão, bem como serão apresentados os procedimentos empregados para a realização de um conjunto de análises no que tange a resolução dos PD e PI propostos. Os algoritmos foram implementados em um computador com Windows 8.1, processador Intel(R) Core(TM) i7-3537U CPU @ 2,00GHz com 6,00 GB de memória RAM e utilizando a linguagem MATLAB™.

3.1 PROBLEMA DIRETO – TRANSFERÊNCIA DE CALOR BIDIMENSIONAL EM ESTADO ESTACIONÁRIO

Considere um processo de condução de calor bidimensional em estado estacionário, sem geração de energia, cujo domínio é uma placa quadrada com dimensões $[0,5; 1,5] \times [0,5; 1,5]$ (cm) e cujas condições de contorno (CC_p , $p=1, \dots, 4$) são dadas na Figura 3.1. Partindo da Equação 2.5 e desconsiderando os termos de geração de energia e de dependência no tempo, o problema é simplificado para a Equação de Laplace.

$$\nabla^2 \phi(X) = 0 \tag{3.1}$$

O diagrama mostra um domínio quadrado no plano cartesiano com eixos x e y . O interior do quadrado é rotulado com a equação $\nabla^2 \phi = 0$. As quatro bordas do quadrado são rotuladas como CC_1 (base), CC_2 (lado direito), CC_3 (topo) e CC_4 (lado esquerdo). As bordas CC_1 , CC_2 e CC_3 são representadas com hachuras, enquanto CC_4 é apenas uma linha sólida.

Figura 3.1 - Geometria do problema de interesse.

Considerando um problema em duas dimensões ($X = [x, y]$), obtêm-se:

$$\nabla^2 \phi(X) = 0; \forall x \in [0,5; 1,5] \text{ e } \forall y \in [0,5; 1,5] \quad (3.2)$$

Cujas condições de contorno são definidas como:

$$\begin{aligned} CC_1 &\equiv \frac{\partial \phi}{\partial y}(x, y) = \frac{\partial u}{\partial y}(x, y), & \forall y = 0,5 \text{ e } 0,5 \leq x \leq 1,5 \\ CC_2 &\equiv \frac{\partial \phi}{\partial x}(x, y) = \frac{\partial u}{\partial x}(x, y), & \forall x = 0,5 \text{ e } 0,5 \leq y \leq 1,5 \\ CC_3 &\equiv \phi(x, y) = u(x, y), & \forall y = 0,5 \text{ e } 0,5 \leq x \leq 1,5 \\ CC_4 &\equiv \phi(x, y) = u(x, y), & \forall x = 0,5 \text{ e } 0,5 \leq y \leq 1,5 \end{aligned} \quad (3.3)$$

Em que $u(x, y)$ é definido como sendo (Liu, 2009):

$$u(x, y) = \exp\left(\frac{x}{x+y}\right) \cos\left(\frac{y}{x+y}\right) \quad (3.4)$$

A Figura 3.2 apresenta as curvas de nível que representam a distribuição de temperatura considerando o domínio especificado, bem como as condições de contorno definidas a partir da solução analítica.

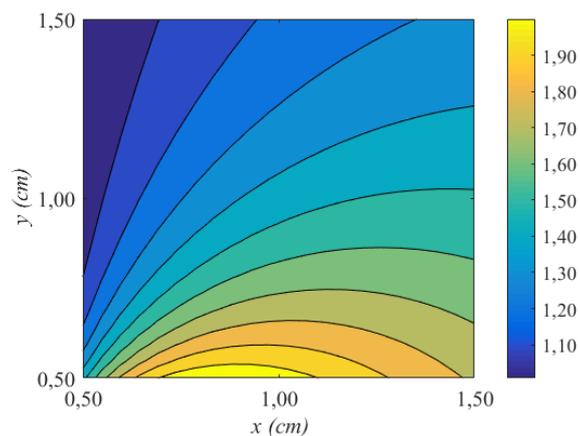


Figura 3.2 - Curvas de nível para o problema de interesse.

Conforme descrito anteriormente, um dos objetivos deste trabalho é a avaliação do MSF como metodologia para a resolução desta equação diferencial parcial. Neste contexto, a seguir é apresentado a descrição do método numérico, com destaque para o problema em análise.

3.2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO MSF

Nesta seção será apresentada a formulação matemática do MSF para o problema em análise. Para essa finalidade, imagine uma região qualquer no espaço onde ocorra uma transferência de calor bidimensional em estado estacionário, conforme a Figura 3.3. Nesta figura o domínio V representa a região do espaço onde ocorre o fenômeno físico. Este domínio é delimitado por dois contornos, S_1 e S_2 , respectivamente. No contorno S_1 é conhecida a temperatura da superfície. No contorno S_2 é conhecido o fluxo térmico através da superfície.

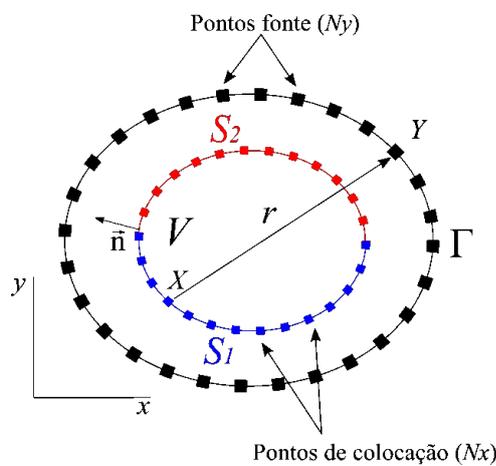


Figura 3.3 - Problema de Laplace por um domínio V definido com limite $S = S_1 \cup S_2$, com x pontos de colocação em S e y pontos fonte em Γ .

Tal situação pode ser modelada utilizando a Equação de Laplace abaixo:

$$\nabla^2 \phi(X) = 0; \forall X \in V \quad (3.5)$$

Sujeito as seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} \phi(X) &= \bar{\phi}(X), \quad \forall X \in S_1; \\ \phi(X) &= \frac{\partial \phi}{\partial n}(X) = \bar{q}(X), \quad \forall X \in S_2; \end{aligned} \quad (3.6)$$

Em que X é o vetor de variáveis independentes ($X = [x, y]$), ϕ representa a temperatura, $S = S_1 \cup S_2$ delimita o domínio definido por V e \vec{n} é o vetor normal a S .

Para aplicar o MSF, considera-se uma região fictícia Γ externa ao contorno e, em sequência, discretiza-se Γ em m pontos, chamados de pontos fonte e o contorno S em n pontos, chamados de pontos de colocação. De acordo com a definição de Solução Fundamental apresentada no capítulo anterior, se uma função F é Solução Fundamental da Equação 3.5, então:

$$\phi(X) = \sum_{j=1}^{N_y} F(X, Y_j) \mu_j \quad (3.7)$$

Em que F é a solução fundamental para o problema de Laplace, definida como sendo (Valle, 2007; Reeve, 2013; Ramos, 2016):

$$F(X, Y_j) = -\frac{1}{2\pi} \ln(r) \quad (3.8)$$

Em que r é a distância entre x e y (ver a Figura 3.3), e μ_j é a intensidade desconhecida das fontes no vetor que contém os pontos fonte Y_j . Se F é solução do problema em análise, esta função deve satisfazer as condições de contorno, isto é:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{i=1}^{N_x} F(X_i, Y_j) \mu_j &= \bar{\phi}_v, \quad \text{se } X_i \in S_1; \\ \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \frac{\partial F}{\partial n}(X_i, Y_j) \mu_j &= \bar{q}_v, \quad \text{se } X_i \in S_2; \end{aligned} \quad (3.9)$$

Finalmente, o seguinte sistema linear padrão de equações é formado após a aplicação das equações que definem as condições de contorno em todos os pontos de colocação X_i ($i = 1, 2, \dots, N_x$):

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1N_x} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2N_x} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N_x1} & a_{N_x2} & \dots & a_{N_xN_x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_{N_x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{N_x} \end{bmatrix} \rightarrow A\mu = b \quad (3.10)$$

Nesta equação, A é a matriz que contém os coeficientes a_{ij} ($i, j=1, 2, \dots, N_x$), μ é vetor que contém os termos desconhecidos e b é o vetor que contém as informações referentes as condições de contorno. O sistema acima pode ser resolvido de maneira simples utilizando, por exemplo, qualquer um dos métodos existentes para a resolução de sistemas lineares. Uma vez determinados os valores do vetor μ , o valor do potencial em qualquer ponto no interior do domínio V ou em S pode ser avaliado usando a função de aproximação (Equação 3.7).

Em resumo, o problema foi resolvido de acordo com os seguintes passos:

- Caracterização do problema de interesse (domínio/geometria, dimensões e condições);
- Definição dos parâmetros do MSF (número de pontos de colocação, número de pontos fonte, número de pontos internos e tipo de geometria fictícia utilizada);
- Construção da geometria do problema e caracterização das condições de contorno;
- Construção da geometria fictícia;
- Definição do sistema algébrico a ser resolvido;
- Resolução do sistema algébrico resultante da aplicação do MSF. Neste caso, o problema pode ser bem condicionado, sendo o mesmo resolvido pela IP ou mal condicionado, o que implique na utilização de técnicas de regularização, conforme descrito no capítulo anterior;
- Predição da solução nos pontos internos do domínio;
- Obtenção do erro (caso o problema tenha solução analítica);
- Impressão dos resultados.

3.3 RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DIRETO

3.3.1 MSF *versus* MDF

Para avaliar a qualidade da solução obtida pelo MSF, o resultado deste foi comparado com a solução analítica e com o resultado encontrado pelo Método das Diferenças Finitas (MDF) explícito.

O PD foi resolvido utilizando diferentes valores para o número de pontos fonte (N_x) e números de pontos de colocação (N_y) (mas de forma que $N_x = N_y$). Estes foram variados entre 20 e 100 pontos em intervalos de 4 pontos. Este intervalo de 4 pontos é necessário pois desejava-se manter uma quantidade igual de pontos em cada lado do quadrado. Além disso, foi utilizado um raio de 2 cm para a geometria fictícia. O MDF foi aplicado utilizando uma malha quadrada com iguais quantidades de pontos nos eixos das abscissas e ordenadas, isto é, $N_x = N_y$ e a quantidade de pontos também variou de 20 a 100 pontos, em intervalos de 4 pontos.

Para essa finalidade foi considerado como critério de comparação o somatório do erro absoluto (ϵ) computado entre a solução analítica (u) e a numérica (ϕ) nas direções x e y , como descrito na Equação 3.11.

$$\epsilon = \sum_i \sum_j |\phi(x_i, y_j) - u(x_i, y_j)| \quad (3.11)$$

A Figura 3.4 apresenta a disposição dos pontos de colocação no domínio (que definem o quadrado), dos pontos fonte (que definem o círculo) e dos pontos internos (pontos que serão utilizados para resgatar as informações no interior do domínio).

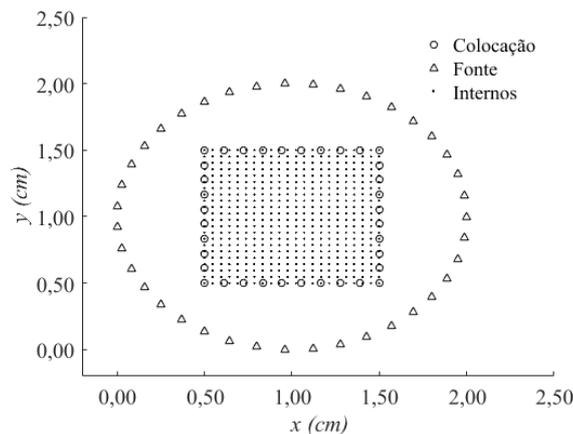


Figura 3.4 - Construção geométrica fictícia para o problema de interesse ($N_x = N_y$, $N_{in} = 500$, $R = 1$ cm).

3.3.2 Influência da Técnica de Regularização na Qualidade da Solução

Para esta análise foram comparadas as soluções encontradas pelo MSF com e sem o uso de métodos de regularização. Dois métodos tradicionais foram selecionados para esta análise, a saber, a Tik e o MDVS. As soluções encontradas foram analisadas em termos de erro absolutos segundo a Equação 3.11 e do condicionamento da matriz A . Os parâmetros utilizados nesta análise são os seguintes: N_x variando na faixa de [20, 100] em intervalos de 4 unidades ($N_x = N_y$) e raio de 2 cm e 500 pontos internos.

3.3.3 Análise de Sensibilidade Paramétrica

Também foram analisados os parâmetros de entrada do MSF (número de pontos fonte, número de pontos de colocação, número de pontos internos, geometria da região fictícia, entre circular e quadrada e distância euclidiana entre o contorno e a região fictícia). Para este fim, cada um dos parâmetros sofreu uma variação específica, listado na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Intervalo de valores considerados na análise paramétrica.

Parâmetro em análise	Intervalo
Geometria (circunferência; quadrada)	$R = [2, 3, 4, \dots, 50]$
Pontos de colocação	$N_x = [20, 24, 28, \dots, 100]$
Pontos fonte	$N_y = [20, 24, 28, \dots, 100]$
Pontos internos	$N_{in} = [100, 200, 300, \dots, 1000]$

Nos casos em que foram considerados a geometria quadrada, a forma geométrica foi construída como um quadrado inscrito em uma circunferência de raio R , como pode ser visto na Figura 3.5. Dessa forma, a base de comparação das duas geometrias propostas foi o raio da circunferência do caso circular com o raio da circunferência que circunscreve o quadrado do segundo caso.

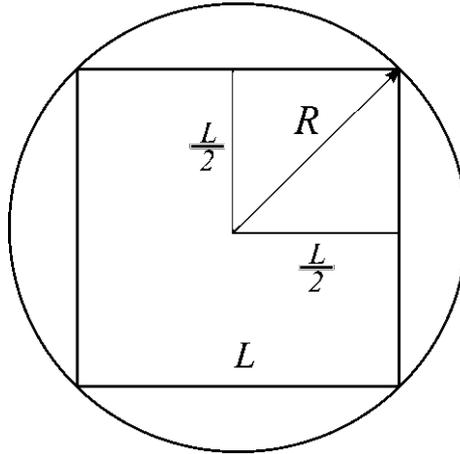


Figura 3.5 - Relação entre o lado L da geometria quadrada e o raio R da circunferência circunscrita.

Dessa forma, os pontos fonte e colocação ficaram distribuídos de acordo com o que pode ser observado na Figura 3.6.

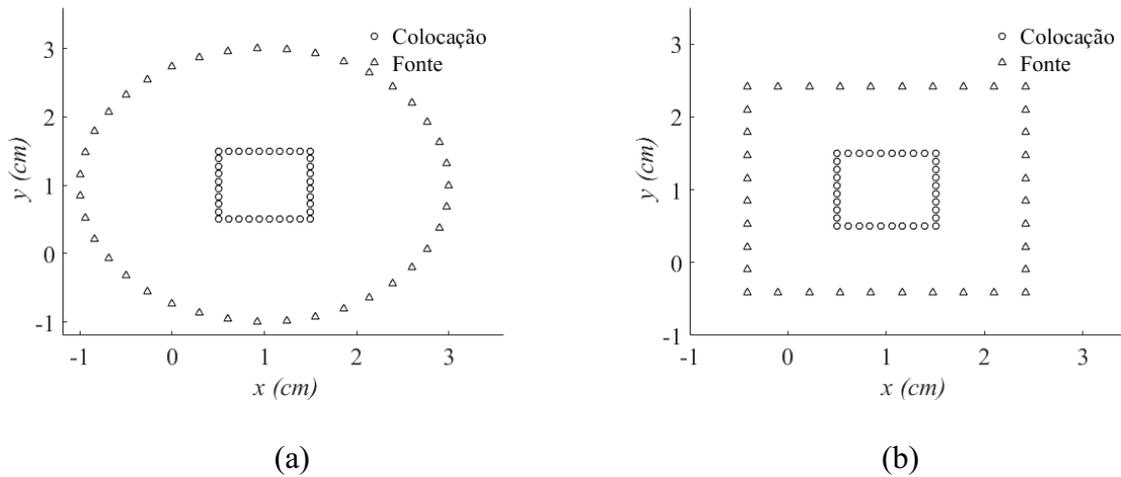


Figura 3.6 - Representação das regiões fictícias (a) circular e (b) quadrada no caso de $N_x = 40 = 40$ e $R = 2$ cm.

Para avaliar a influência da quantidade de pontos, tanto de colocação quanto fonte, o número de pontos de colocação (N_x) foi variado enquanto que o número de pontos de fonte (N_y) foi mantido constante e igual a 40 e vice-versa. Também foi avaliada a influência da razão entre N_y e N_x , calculando N_y a partir de um fator de proporção β , tal que $N_y = \beta N_x$, para diferentes valores de β e N_x . A qualidade da solução foi calculada pela Equação 3.11.

3.4 SIMULAÇÃO CONSIDERANDO DIFERENTES DOMÍNIOS

A presente seção tem por objetivo aplicar o MSF considerando domínios diferentes da geometria quadrada. Para essa finalidade são considerados os seguintes domínios: *i*) círculo de raio 2 cm; *ii*) 1/4 de coroa circular com 1 cm de espessura; *iii*) estrela simétrica com 2,5 cm de altura e de comprimento; *iv*) astróide de diâmetros internos igual a 6 cm; *v*) uma geometria do tipo amoeba e *vi*) uma coroa circular (círculo com cavidade).

Para cada um destes problemas foram aplicadas as mesmas hipóteses empregadas no primeiro problema direto. Dessa forma, o fenômeno envolvido continua sendo representado pela Equação de Laplace em 3.2, cuja solução analítica é dada pela Equação 3.4. Cada um destes domínios foi dividido em quatro regiões que foram associadas com as mesmas condições de contorno, conforme a Equação 3.3. Cabe ressaltar que, para a coroa circular, o domínio da parte interior também foi dividido em quatro regiões, cujas condições de contorno são dadas pela seguinte equação:

$$\begin{aligned}
 CC_5 &\equiv \frac{\partial \phi}{\partial y}(x, y) = \frac{\partial u}{\partial y}(x, y) \\
 CC_6 &\equiv \frac{\partial \phi}{\partial y}(x, y) = \frac{\partial u}{\partial x}(x, y) \\
 CC_7 &\equiv \phi(x, y) = u(x, y) \\
 CC_8 &\equiv \phi(x, y) = u(x, y)
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

As Figuras 3.7 a 3.11 apresentam os domínios em análise, bem como as regiões onde as condições de contorno foram aplicadas.

Para cada uma dessas geometrias, o MSF foi aplicado para simular a distribuição de temperatura considerando os parâmetros apresentados na Tabela 3.2. Na tabela, R_f é o raio da geometria fictícia considerada, que neste caso foi um círculo.

Além destas simulações, os PDs também foram executados aplicando pequenas variações na quantidade de pontos base (pontos de colocação e pontos fonte), de acordo com o que pode ser visto na Tabela 3.3.

Tabela 3.2 - Configurações default dos parâmetros de entrada do MSF para cada novo domínio.

N_x	N_y	N_{in}	R_f (cm)	Regularização
40	40	160	3	Tik
80	40	150	2	Tik
40	40	560	2	Tik
40	40	600	4	Tik
40	40	480	3	Tik
40	40	440	$3^{(1)} / 0,5^{(2)}$	Tik

⁽¹⁾Raio externo; ⁽²⁾Raio interno

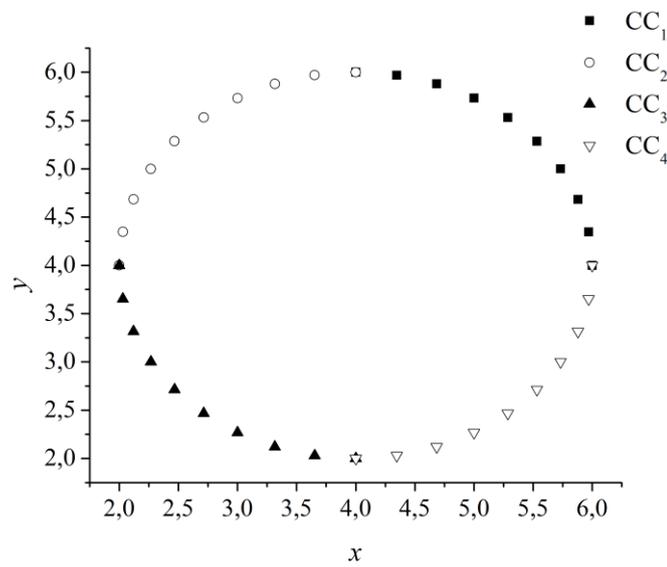


Figura 3.7 - Círculo.

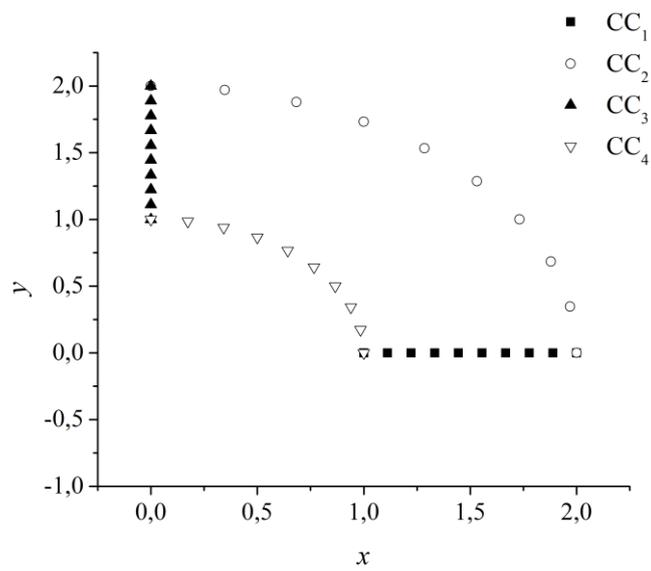


Figura 3.8 - $\frac{1}{4}$ de coroa circular.

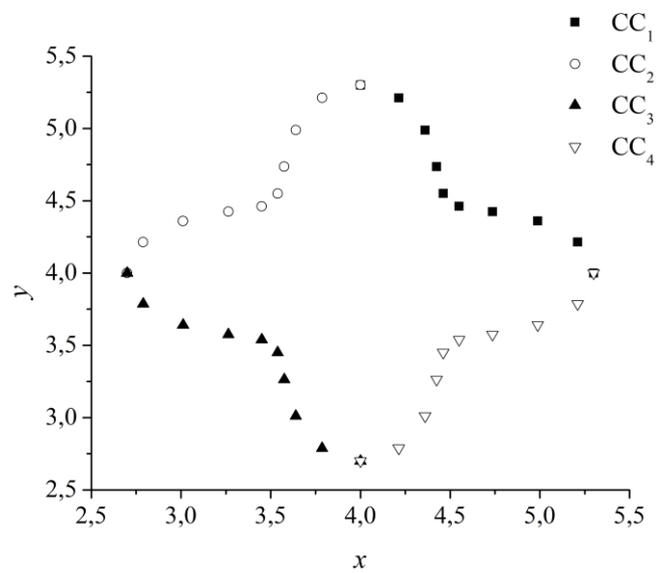


Figura 3.9 - Estrela.

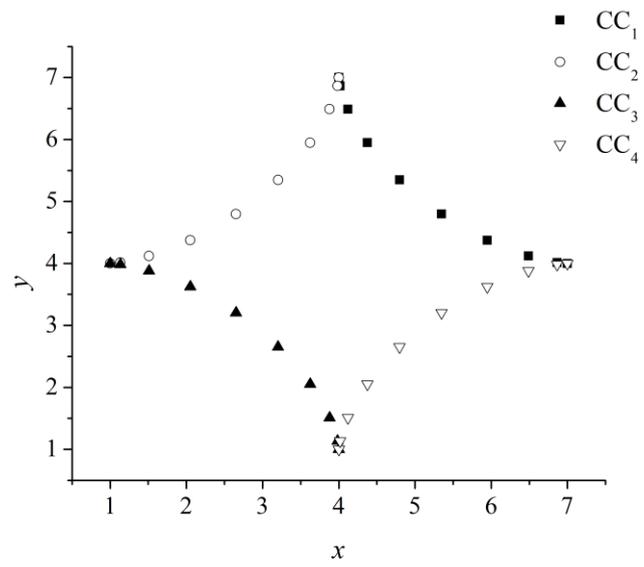


Figura 3.10 - Astróide.

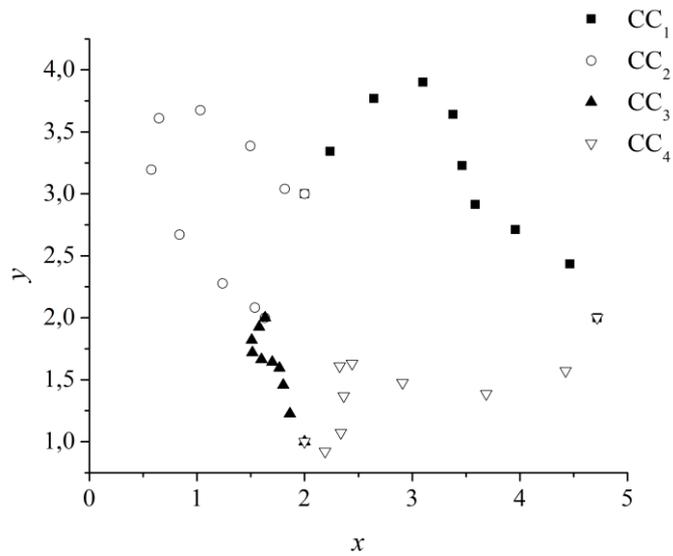


Figura 3.11 - Amoeba.

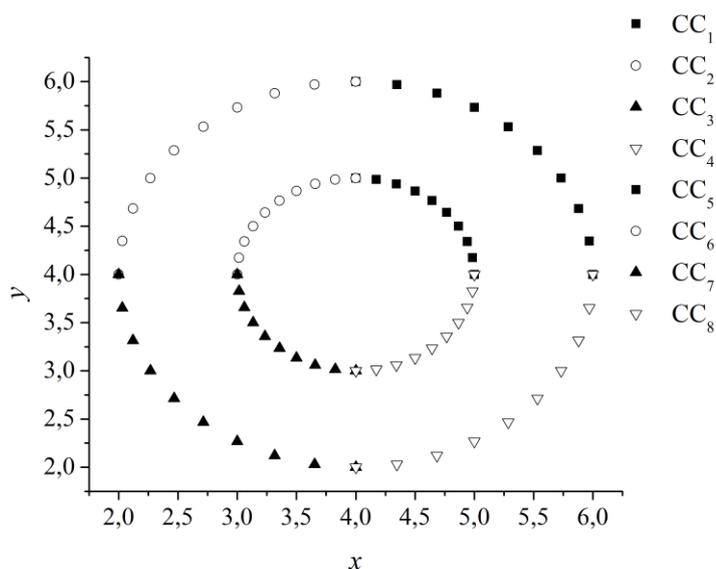


Figura 3.12 - Coroa circular.

Tabela 3.3 - Quantidade de pontos base aplicados em cada PD em função da geometria do novo domínio.

Domínio	N_x	N_y	Domínio	N_x	N_y
	20	20		20	20
Círculo	40	40	Astróide	40	40
	60	60		60	60
$\frac{1}{4}$ de coroa circular	40	40	Amoeba	20	20
	80	40		40	40
	120	40		60	60
Estrela	20	20	Coroa circular	20	20
	40	40		40	40
	60	60		60	60

Os experimentos descritos foram avaliados em relação aos erros absoluto (ϵ) e relativo (ϵ_r) e ao número de condicionamento (κ). O erro absoluto foi definido e calculado de acordo com a Equação 3.11. O erro relativo foi definido como a razão entre o erro absoluto ϵ e a número de pontos internos N_{in} considerados, como descrito na Equação 3.13.

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{N_{in}} \quad (3.13)$$

3.5 RESOLUÇÃO DO PROBLEMA INVERSO

3.5.1 Determinação das Condições de Contorno com Cinco Variáveis

O PI consiste na obtenção das condições de contorno, definidos em $y = 0,5$ e em valores específicos ao longo do eixo x , isto é; $x = [0, 75 \ 1, 00 \ 1, 25]$, de modo a minimizar o somatório do erro quadrático entre o perfil de temperatura experimental e computados.

Como não são conhecidos pontos experimentais, a Equação 3.4 foi avaliada nos pontos citados para a geração de pontos experimentais sintéticos (PES), considerando a seguinte relação:

$$PES = PS + sd(2rand(0,1) - 1) \quad (3.14)$$

Em que o termo PS refere-se ao dado calculado a partir da solução analítica conhecida, $rand(0, 1)$ representa um número aleatório gerado no intervalo $(0,1)$ e sd representa o nível do ruído ($sd = [0 \ 2, 5\% \ 5\% \ 10\%]$). Cabe ressaltar que foi utilizada a semente igual a zero para a geração dos dados experimentais com cada faixa de ruído. Dessa forma, a Função Objetivo para este problema é definida por:

$$FO = |PES - PS| \quad (3.15)$$

Assim, para a geração dos pontos experimentais sintéticos foram consideradas as seguintes condições: $CC_{1,2} (x=0,61, y=0,5) = 1,8530$; $CC_{1,4} (x=0,83, y=0,5) = 2,0581$; $CC_{1,6} (x=1,05, y=0,5) = 2,0240$; $CC_{1,8} (x=1,27, y=0,5) = 1,9022$ e $CC_{1,10} (x=1,50, y=0,5) = 1,7868$.

Para resolver o PD foram considerados os seguintes parâmetros: $N_x = N_y = 40$, $N_{in} = 33$, uma circunferência de raio igual a 2 como geometria fictícia e a Tik como estratégia para regularização. Já para resolver o PI foram considerados os seguintes parâmetros: população com 50 candidatos, taxa de perturbação igual a 0,8, probabilidade de cruzamento igual a 0,8, estratégia 7 e 500 gerações. Cabe ressaltar que o algoritmo de ED foi executado 10 vezes considerando diferentes sementes para inicializar o gerador de número aleatórios para a apresentação dos resultados.

Em resumo, o passo a passo para a resolução do PI é descrito a seguir:

- Inicialmente define-se os parâmetros de entrada do algoritmo de ED (tamanho da população, número de gerações, probabilidade de cruzamento, taxa de perturbação, estratégia para a geração de candidatos em potencial, número de variáveis de projeto e função objetivo);
- No caso da função objetivo, deve-se definir os parâmetros considerados para a resolução do PD usando o MSF (número de pontos fonte, de colocação e internos, raio e tipo de técnica de regularização empregada). Além disso, também deve-se definir o conjunto de pontos experimentais, bem como se existe ruído nos mesmos, de forma que a função objetivo possa ser avaliada;
- A seguir, executa-se o algoritmo de ED um número finito de vezes para que informações estatísticas (melhor valor, valor médio e desvio padrão em relação as variáveis de projeto e a função objetivo) possam ser apresentadas.

3.5.2 Determinação das Condições de Contorno com Dez Variáveis

Este mesmo problema foi estendido, na sequência, para o caso de um total de dez condições de contorno desconhecidas. Além das cinco primeiras já consideradas, foram também assumidos como incógnitas as condições nos pontos $CC_{3,2}$, $CC_{3,4}$, $CC_{3,6}$, $CC_{3,8}$ e $CC_{3,10}$. Para a geração dos dados com ruído foram considerados $CC_{3,2} (x=0,61, y=1,5) = 1,0615$; $CC_{3,4} (x=0,83, y=1,5) = 1,1586$; $CC_{3,6} (x=1,05, y=1,5) = 2,2348$; $CC_{3,8} (x=1,27, y=1,5) = 1,2873$ e $CC_{3,10} (x=1,50, y=1,5) = 1,3188$.

No Capítulo 4 o são apresentados e discutidos os resultados obtidos com a aplicação da metodologia proposta.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos com a aplicação da metodologia aplicada no estudo de caso proposto no capítulo anterior.

4.1 RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DIRETO

4.1.1 MSF versus MDF

Nesta seção, a qualidade da solução obtida pelo MSF na solução da Equação de Laplace aplicada à transferência de energia por condução em estado estacionário bi-dimensional será comparada com o MDF. Cabe ressaltar que, como o problema proposto tem solução analítica, ambos os métodos também foram comparados com a mesma, conforme a Equação 3.11.

A Figura 4.1 representa a distribuição de temperatura calculada utilizando o MSF 4.1a, para os dados default apresentados no capítulo anterior, e para o MDF 4.1b, na qual também foi utilizado o mesmo número de pontos de discretização para a geração da malha e posteriormente o sistema linear a ser resolvido considerando a Inversa de Penrose.

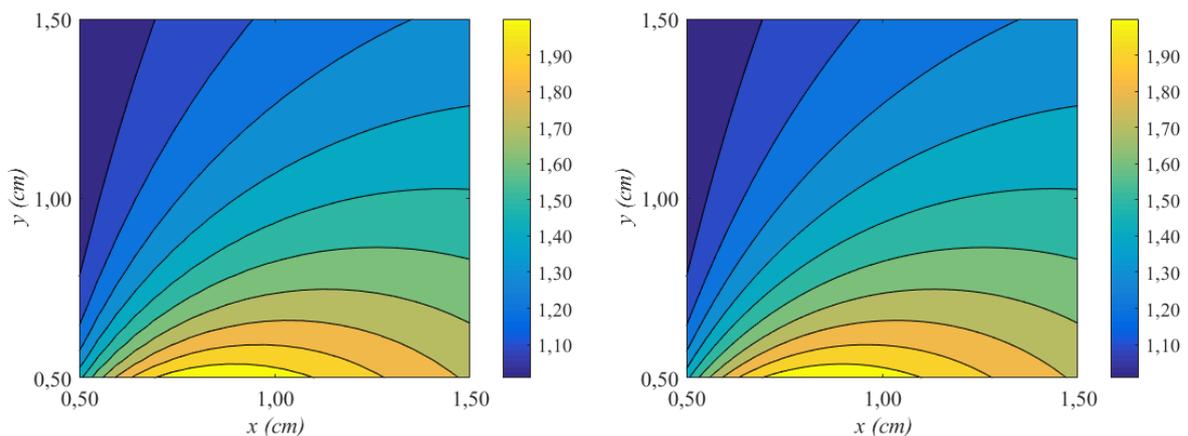


Figura 4.1 - Distribuição de temperatura calculado: (a) MSF ($N_x = 40$, $N_y = 40$, $N_{in} = 500$, $R = 2$, Geometria fictícia = Círculo) e (b) MDF ($N_x = N_y = 40$).

Nesta figura percebe-se que, para o conjunto de parâmetros de entrada considerados, ambos os métodos foram capazes de obter a solução do problema sem grandes dificuldades, já que, visualmente, não é possível notar nenhuma diferença significativa entre essas figuras.

A Figura 4.2 apresenta a influência da dimensão do sistema a ser resolvido em cada um dos métodos em relação ao parâmetro de mal condicionamento (κ) da matriz de coeficientes encontrados por cada um dos métodos e ao erro (ϵ) cometido.

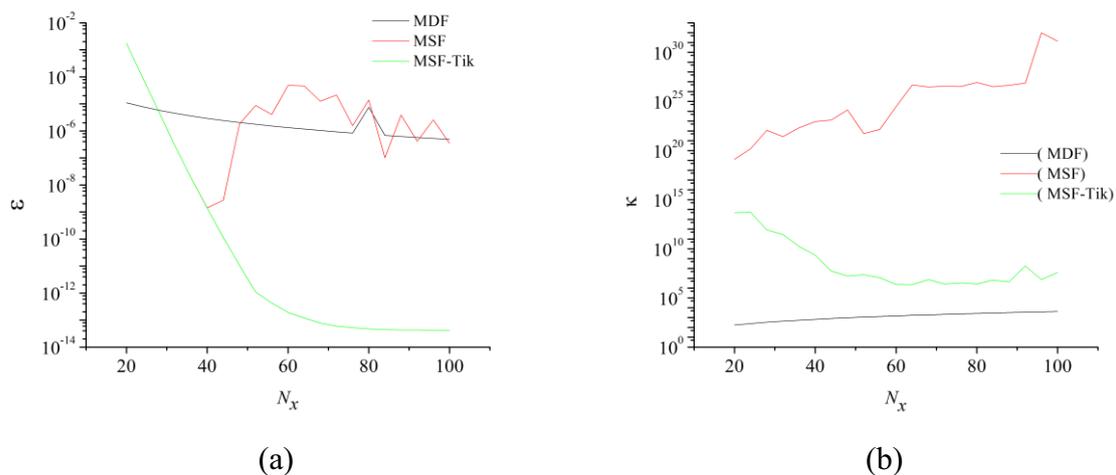


Figura 4.2 - Influência do MSF e do MDF na qualidade da solução: (a) κ e (b) ϵ ($N_x = N_y$, $N_{in} = 500$, $R = 2$, Geometria = Círculo).

Na Figura 4.2a observa-se que o aumento da dimensão do sistema implica, como esperado, no aumento do valor do parâmetro κ para o MDF e para o MSF. Todavia, a ordem de magnitude entre os dois métodos é bem diferente. Isto se deve ao fato de que, para o problema em análise, a metodologia proposta no MDF para a geração do sistema a ser resolvido não fez com que o sistema se torna mal condicionado, mesmo que o valor de κ aumente com o incremento da dimensão do problema em análise. Outro ponto interessante observado na Figura 4.2a é que, ao se utilizar o MSF associado à Tik, abreviada como MSF-Tik, constata-se que a inclusão da técnica de regularização fez com que, primeiramente, κ sempre tivesse um menor valor em relação ao caso em que a técnica de regularização não era empregada (MSF). Além disso, com o aumento da dimensão do problema, o valor de κ diminui, ressaltando a relevância de empregar uma técnica de regularização para tratar problemas com mal condicionamento numérico. Este comportamento está em concordância com o observado por Tikhonov e Arsenin (1977), visto que só faz sentido matemático aplicar a Tik em problemas com mal

condicionamento numérico, e que neste caso, é potencializado pelo aumento da dimensão do problema. Assim, quanto maior for o valor de κ , mais indicado é a aplicação da Tik.

Já a Figura 4.2b pode-se observar que, de forma geral, o aumento da dimensão do problema a ser resolvido implica na redução do erro cometido. Este comportamento está de acordo com o esperado visto que, o aumento do número de pontos na malha (internos como o MD ou no contorno como o MSF e como o MSF-Tik), aumenta o refinamento e, conseqüentemente a precisão da solução até um número onde esse aumento não fará mais diferença (saturação numérica). Neste caso, para o MSF-Tik observa-se um decaimento significativo do erro com o aumento de N_x , bem como a sua saturação para valores de N_x acima de, aproximadamente, 60 pontos. Assim, conforme comentado anteriormente, a inclusão da Tik fez com que o valor de κ fosse reduzido com o aumento da dimensão, o que favorece a obtenção de uma solução mais precisa.

Complementando as análises realizadas até o momento, a Tabela 4.1 apresenta o tempo que foi necessário para resolver cada problema na configuração default. Nesta tabela fica claro uma das principais vantagens da aplicação do MSF em relação ao MDF: o custo computacional. O MSF foi capaz de resolver o PD em uma fração de segundos, mesmo no caso com uma maior quantidade de pontos. O MDF, no entanto, apesar de ter conseguido resolver o problema com sucesso, o custo computacional foi significativamente maior que o MSF. O refinamento da malha aumentou consideravelmente o tempo de execução. O acréscimo da técnica de regularização, apesar de ter aumentado o tempo médio de execução, não resultou em um grande impacto em relação ao custo computacional do método.

Tabela 4.1 – Tempo de execução, em segundos, de cada método aplicado ($N_{in} = 500$, geometria fictícia: círculo de raio 2 cm).

Método numérico	N_x	N_y	Tempo (s)
MDF	40	40	4,3
	100	100	350
MSF	40	40	0,01
	100	100	0,01
MSF-Tik	40	40	0,05
	100	100	0,06

É importante ressaltar que os resultados obtidos com o MSF (sem a associação com a Tik) demonstram uma tendência que, por vezes, é alterada para uma dada condição de entrada (N_x). Neste caso, tal comportamento oscilatório provavelmente está relacionado ao elevado valor do número de condição do problema a ser resolvido, o que faz com que a solução obtida sem a inserção de uma técnica de regularização possa ser imprecisa. Além disso, há que se ressaltar que o maior tempo de processamento associado ao MDF em relação ao MSF também se deve ao custo requerido pelo algoritmo numérico empregado para a resolução do sistema linear gerado pelo MDF, diferentemente do MSF que faz uso de uma estratégia diferente para a resolução do sistema linear gerado. Assim, para a análise do tempo total de processamento, todas estas questões devem ser avaliadas para uma comparação justa entre as abordagens estudadas. Finalmente, indicar um bom valor para N_x de modo que o menor erro seja obtido sem o uso de uma técnica de regularização não é uma tarefa trivial, visto o comportamento oscilatório observado na Figura 4.2b.

4.1.2 Influência da Técnica de Regularização na Qualidade da Solução

Na análise que se segue foi avaliada a influência do uso de dois métodos de regularização, a saber, a Técnica de Regularização de Tikhonov com o MSF (MSF-Tik) e o Método da Decomposição em Valores Singulares com o MSF (MSF-MDVS) na qualidade da solução do problema proposto.

A Figura 2.5 apresenta a influência da técnica de regularização na qualidade dos resultados, bem como a sua comparação com o MSF sem o uso deste tipo de abordagem.

Na Figura 2.5a observa-se que ambas as técnicas de regularização reduziram o valor do parâmetro de mal-condicionamento com o aumento da dimensão em relação ao MSF, sendo que a Tik foi capaz de obter melhores valores do que o MDVS. Já no MSF (sem o uso de uma técnica de regularização), conforme esperado, o aumento da dimensão implica no aumento do valor do parâmetro de mal condicionamento numérico. Ao se analisar o erro cometido (ver a Figura 2.5b observa-se que, em relação ao MSF, o erro flutua em torno de, aproximadamente 10^{-5} . Já para as abordagens MSF-Tik e MSF-MDVS observa-se que ambas reduzem o valor do erro cometido com o aumento da dimensão do problema. Além disso, ambas saturam em

aproximadamente, 60 pontos. Todavia, ressalta-se uma oscilação do MDVS em torno deste valor.

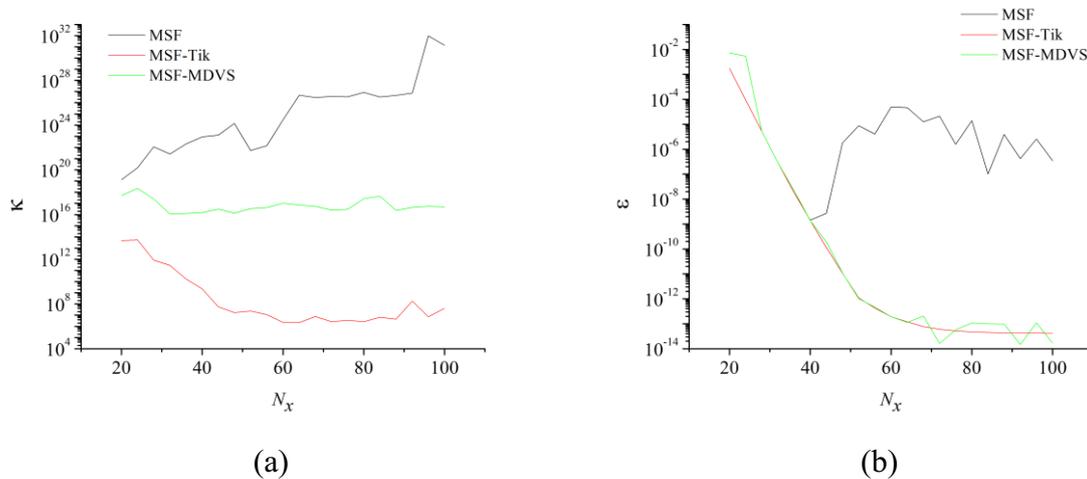


Figura 4.3 - Influência da Técnica de Regularização na qualidade da solução obtida: (a) κ e (b) ϵ ($N_{in} = 500$, $R = 2$, Geometria = Circulo).

Para saber se a implementação de uma técnica de regularização tem algum impacto no custo computacional do algoritmo, a Tabela 4.2 apresenta o tempo de execução, em segundos, de cada método utilizando a configuração default. Fica claro que, apesar de haver uma pequena alteração no tempo médio, este não é elevado o suficiente a ponto de contrapor o benefício adquirido através da regularização.

Tabela 4.2 - Tempo de execução, em segundos, em função do método de solução ($N_x = 40$, $N_y = 40$, $N_{in} = 500$, geometria fictícia: círculo de raio 2 cm).

Método Aplicado	Tempo (s)
MSF	0,04
MSF-Tik	0,05
MSF-MDVS	0,01

4.1.3 Análise de sensibilidade paramétrica

Esta seção tem como objetivo avaliar a influência de alguns dos parâmetros do MSF (geometria fictícia, número de pontos fonte, de colocação e internos) na qualidade da solução obtida.

4.1.3.1 Influência do Tipo e do Tamanho da Geometria Fictícia

A Figura 4.4 apresenta a influência do tipo e do tamanho da geometria empregada (quadrado ou círculo) na qualidade da solução obtida pelo MSF com e sem associação com Tik. Cabe enfatizar que, para o caso da geometria fictícia quadrada, o raio expressa o raio da circunferência que circunscribe o quadrado.

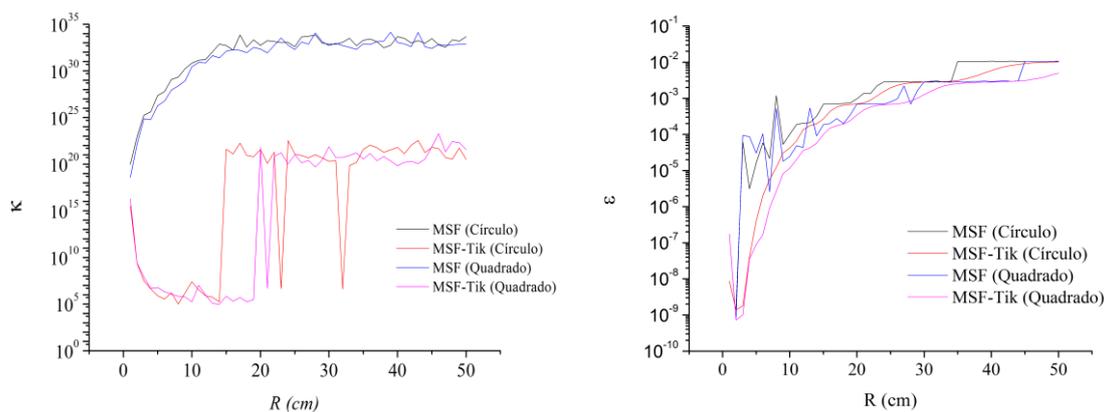


Figura 4.4 - Influência do tipo e do tamanho da geometria fictícia na qualidade da solução obtida: (a) κ e (b) ϵ ($N_x = N_y = 40$, $N_{in} = 500$).

Na Figura 4.4a observa-se que o aumento do raio da geometria considerada (quadrado ou círculo) faz com que o valor do parâmetro de mal condicionamento numérico aumente no MSF e diminua no MSF-Tik, respectivamente. Este resultado está em concordância com o observado na seção anterior. A partir de um raio de, aproximadamente 15 cm, observa-se uma flutuação no valor do parâmetro de mal condicionamento numérico, sendo que para o MSF-Tik aplicado a uma geometria fictícia do tipo círculo, o seu valor aumentou. Já para o MSF-Tik aplicado a uma geometria fictícia do tipo quadrado, o valor do parâmetro de mal condicionamento numérico também oscilou para alguns valores do raio, mas manteve-se no limiar inferior. Para estes casos, apesar do valor do parâmetro κ flutuar, este ainda se manteve em um patamar inferior aos observados quando não foi considerado a inserção da técnica de regularização.

Já na Figura 4.4b observa-se que, para o estudo de caso em análise, a precisão do método tende a aumentar a medida que a fronteira fictícia se aproxima do contorno original, isto é, para menores valores do raio da região fictícia. Nos casos onde não são empregadas técnicas de

regularização observou-se uma flutuação na precisão do MSF. Já quando se utiliza a técnica de regularização essa flutuação é minimizada, sendo que neste caso pode-se dizer que existe um ponto de mínimo, isto é, tem-se um valor ótimo para o raio que, em cada tipo de geometria fictícia, se tenha a um valor mínimo para o erro absoluto. Assim, recomenda-se empregar um raio, independentemente da geometria fictícia, cujo valor seja próximo ao limite que define o domínio do problema de interesse.

4.1.3.2 Influência do número de Pontos de Colocação e Pontos Fonte

A Figura 4.5 apresenta a influência do número de pontos de colocação (N_x) e de pontos fonte (N_y) na qualidade da solução obtida pelo MSF. Na Figura 4.5a nota-se que a Tik foi capaz de estabilizar o erro calculado a partir de $N_x \geq 40$, seguindo a tendência esperada da curva. Já na Figura 4.5b, observa-se que a técnica de regularização não causou nenhum efeito na curva. Em ambos os casos, no entanto, nota-se que, nas proximidades de 40 pontos (fontes ou de colocação), o comportamento da curva muda, saindo de um comportamento próximo do linear e entrando em uma tendência constante.

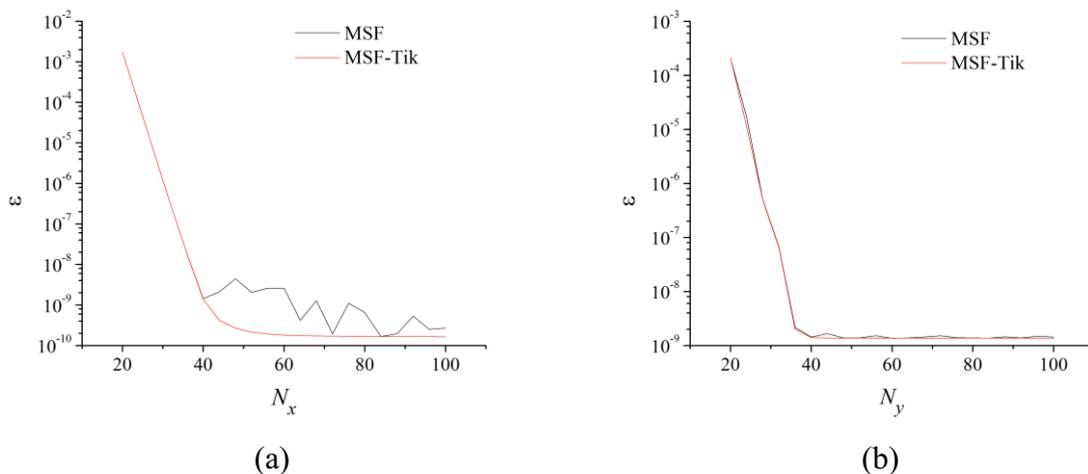


Figura 4.5 - Influência do número de pontos (a) de colocação e (b) fonte na qualidade da solução obtida pelo MSF ($N_{in} = 500$, $R = 2$, Geometria = Círculo).

A Figura 4.6 apresenta a influência do parâmetro β , definido como sendo a razão entre o número de pontos de colocação e o número de pontos fonte, no erro cometido pelo MSF e pelo MSF-Tik.

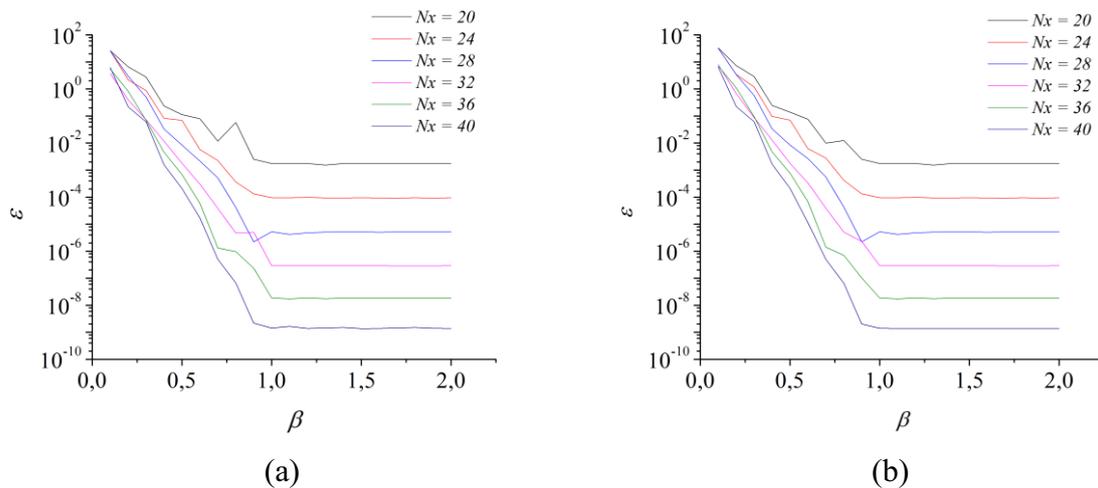


Figura 4.6 - Influência do parâmetro β na qualidade da solução obtida: (a) MSF e (b) MSF-Tik ($N_{in} = 500$, $R = 2$, Geometria = Círculo).

Nesta figura observa-se que o erro diminui de forma contínua com o aumento do valor do parâmetro β até um ponto ($\beta \geq 1$) em que o erro se estabiliza, isto é, nenhuma melhoria na precisão é obtida. Neste caso, existe uma relação entre os números de pontos de colocação e de pontos fonte que fazem com que o erro seja mínimo.

4.1.3.3 Influência do Número de Pontos Internos

A Figura 4.7 apresenta a influência do número de pontos internos (pontos utilizados para avaliar a solução no interior do domínio) na qualidade da solução obtida pelo MSF.

Nesta figura percebe-se que o erro tende a aumentar com o aumento do número de pontos internos. Isto acontece pela definição do erro, isto é, o somatório referente ao erro absoluto cometido em cada ponto analisado. Assim, para um mesmo conjunto de parâmetros de entrada do MSF, quanto mais pontos internos são utilizados na análise, maior a quantidade de parcelas a serem somadas no cálculo do erro.

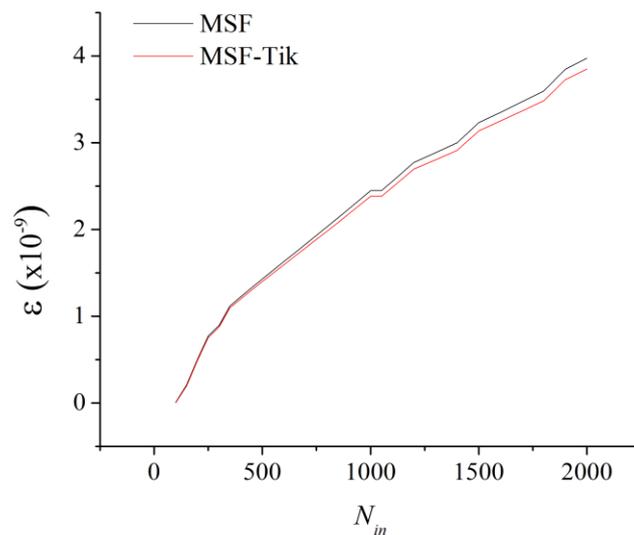


Figura 4.7 - Influência do número de pontos internos na qualidade da solução obtida pelo MSF ($N_x = N_y = 40$, $R = 2$, Geometria = Círculo).

4.2 SIMULAÇÃO CONSIDERANDO DIFERENTES REGIÕES DE DOMÍNIO

Para avaliar a capacidade do MSF na resolução de problemas com diferentes domínios, a presente seção apresenta os resultados obtidos considerando os domínios descritos no Capítulo 3. As Figuras 4.8a a 4.8f apresentam as distribuições de temperatura simuladas em cada um desses novos domínios, considerando os parâmetros também definidos no Capítulo 3.

Quando comparadas com a Figura 3.2, é possível observar uma mesma tendência de distribuição, ou seja, a parte inferior do domínio apresenta as maiores temperaturas, e a energia se difunde em formato de leque, até a parte superior mais à esquerda, onde estão as menores temperaturas. Esta observação demonstra que o MSF teve êxito em resolver o problema, mesmo em diferentes domínios, regulares ou irregulares.

Além das configurações da Tabela 3.2, os PDs também foram executados variando-se a quantidade de pontos de colocação e pontos fonte, mas de forma que $N_x = N_y$ para todos os casos, exceto para o caso de $\frac{1}{4}$ de coroa circular. Os demais parâmetros referentes ao MSF foram mantidos constantes e iguais aos apresentados na 3.2. Os resultados desta análise são apresentados na Tabela 4.3 abaixo.

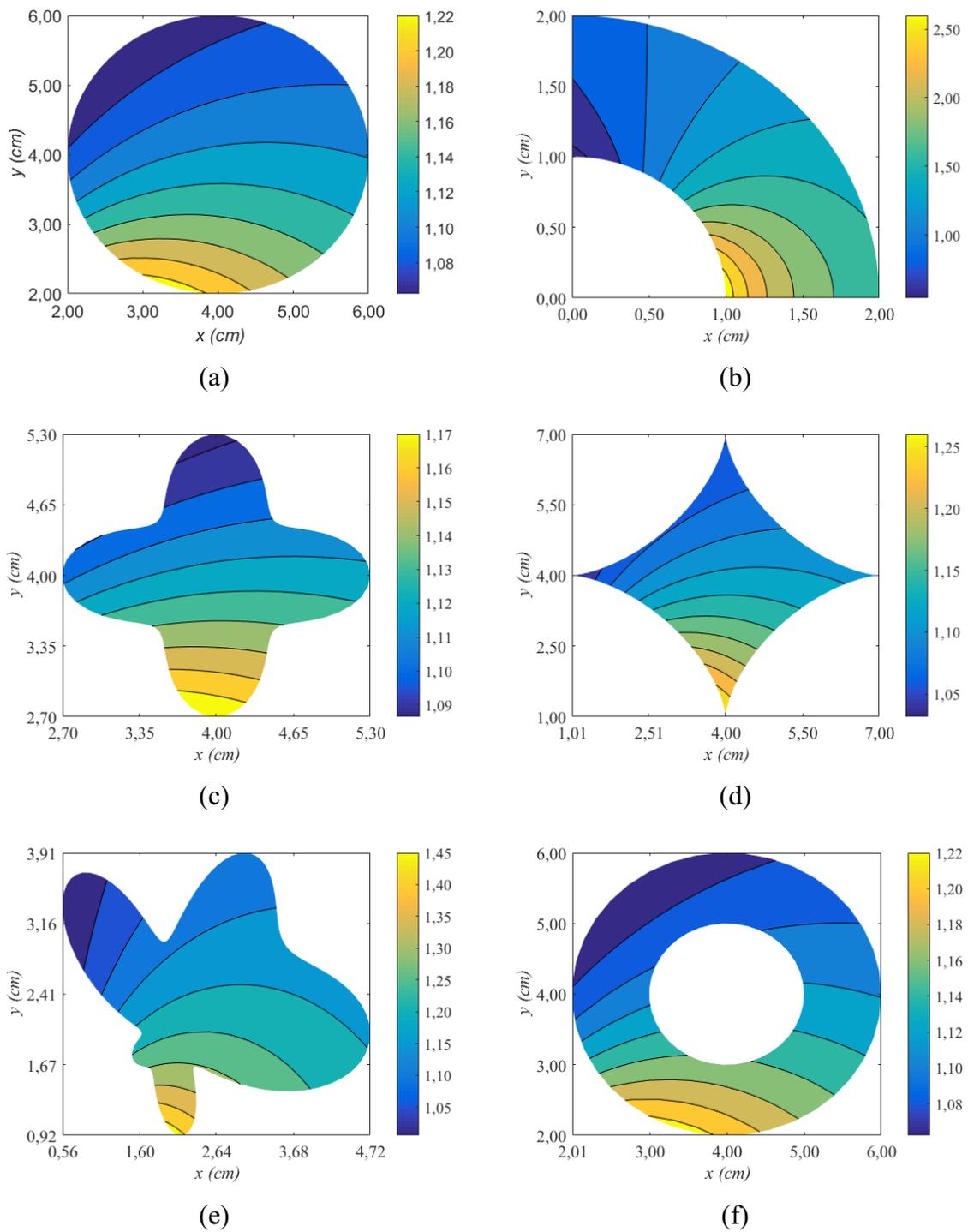


Figura 4.8 - Resultados obtidos pelo MSF nos diferentes domínios em formato de (a) círculo (b) 1/4 de coroa circular (c) estrela (d) astróide (e) amoeba (f) coroa circular utilizando as configurações da Tabela 3.2.

Tabela 4.3 - Erros absoluto e relativo encontrados em função da geometria do domínio e da quantidade base de pontos de colocação e fonte.

Geometria do domínio	Pontos	ϵ	ϵ_r	κ
Círculo	20	$1,2543 \times 10^{-7}$	$6,2714 \times 10^{-9}$	$2,3224 \times 10^{16}$
	40	$3,0203 \times 10^{-15}$	$7,5508 \times 10^{-17}$	$5,8561 \times 10^{14}$
	60	$1,0991 \times 10^{-17}$	$1,8318 \times 10^{-19}$	$3,4198 \times 10^{12}$
¼ de coroa circular	40	$1,8697 \times 10^4$	$1,2464 \times 10^2$	$2,7814 \times 10^{12}$
	80	$8,0471 \times 10^{-5}$	$5,3647 \times 10^{-7}$	$2,5743 \times 10^5$
	120	$3,3656 \times 10^{-5}$	$2,2437 \times 10^{-7}$	$2,1468 \times 10^5$
Estrela	20	$2,3269 \times 10^{-9}$	$1,1635 \times 10^{-10}$	$1,2107 \times 10^{16}$
	40	13351×10^{-15}	$3,3376 \times 10^{-17}$	$2,1425 \times 10^{13}$
	60	$5,4240 \times 10^{-25}$	$9,0400 \times 10^{-27}$	$5,2395 \times 10^{12}$
Astróide	20	$5,2790 \times 10^{-7}$	$2,6395 \times 10^{-8}$	$5,7765 \times 10^{15}$
	40	$3,5936 \times 10^{-14}$	$8,9840 \times 10^{-16}$	$1,7575 \times 10^{13}$
	60	46247×10^{-21}	$7,7078 \times 10^{-23}$	$1,1180 \times 10^{11}$
Amoeba	20	$1,4367 \times 10^{-2}$	$7,1836 \times 10^{-4}$	$5,0715 \times 10^{16}$
	40	$1,0855 \times 10^{-4}$	$2,7138 \times 10^{-6}$	$6,4399 \times 10^8$
	60	$5,5415 \times 10^{-7}$	$9,2358 \times 10^{-9}$	$8,8756 \times 10^7$
Coroa Circular	20	$1,5614 \times 10^{-7}$	$7,8068 \times 10^{-9}$	$2,8685 \times 10^{17}$
	40	$3,6933 \times 10^{-15}$	$9,233 \times 10^{-17}$	$5,8919 \times 10^{14}$
	60	$2,0707 \times 10^{-22}$	$3,4512 \times 10^{-24}$	$5,6879 \times 10^{13}$

Quanto ao mal-condicionamento da matriz, observou-se que o valor máximo encontrado para κ foi da ordem de 10^{17} , semelhante ao que foi observado na análise de sensibilidade realizada. Este fato leva a conclusão que o mal-condicionamento, após o uso de uma técnica de regularização, sofre pouca influência da geometria do domínio, pelo menos para os considerados.

Em relação aos demais resultados apresentados na Tabela 4.3, observou-se uma dificuldade do MSF em resolver o PD quando associado com o domínio da ¼ de coroa. Este foi o único caso em que não foi possível seguir o padrão dos outros domínios em relação à quantidade de pontos fonte e de colocação. Observou-se que, ao se tentar o resolver o problema com uma quantidade de pontos semelhantes aos demais, o resultado encontrado para a

distribuição de temperatura não estava condizente com o calculado a partir da solução analítica, evidenciado pelos altos valores dos erros calculados. Este impasse foi resolvido aumentando-se a quantidade de pontos base. Por este motivo também que este caso foi o que apresentou os menores valores do índice de mal-condicionamento.

Para o caso da geometria do tipo círculo, notou-se que os erros absoluto e relativo foram baixos, mesmo para uma pequena quantidade de pontos. Este comportamento também pode ser observado para os formatos estrela e astróide. No entanto, estes casos também apresentaram os maiores valores de mal-condicionamento.

Em relação à geometria amoeba, o MSF também foi capaz de encontrar uma solução precisa, apesar dos maiores valores dos erros obtidos. Ainda foi observado que, apesar da complexidade da geometria, o valor de κ ficou numa posição intermediária entre as geometrias mais simples (círculo, estrela e astróide) e a $\frac{1}{4}$ de coroa circular.

Ao ser analisado o problema que apresenta uma cavidade (coroa circular), o MSF conseguiu apresentar um desempenho que está em concordância com os observados para outros domínios.

4.3 RESOLUÇÃO DO PROBLEMA INVERSO

4.3.1 Determinação das Condições de Contorno com cinco variáveis

O problema inverso proposto nesta seção, conforme a descrição detalhada apresentada no Capítulo 3, consiste na determinação das condições de contorno em y igual a 0,5 e $x = [0,63, 0,83, 1,05, 1,27, 1,50]$ cm: $CC_{1,2}$, $CC_{1,4}$, $CC_{1,6}$, $CC_{1,8}$ e $CC_{1,10}$ de forma minimizar o erro cometido considerando pontos experimentais sintéticos definidos no interior do domínio de interesse. A Figura 4.9 identifica no domínio onde localizam-se os pontos nos quais não são conhecidos os valores do contorno.

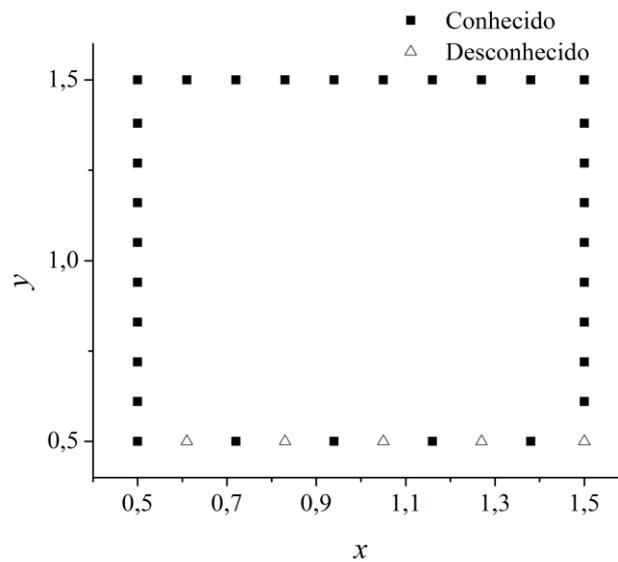


Figura 4.9 - Informações conhecidas e desconhecidas do contorno no Problema Inverso com cinco variáveis.

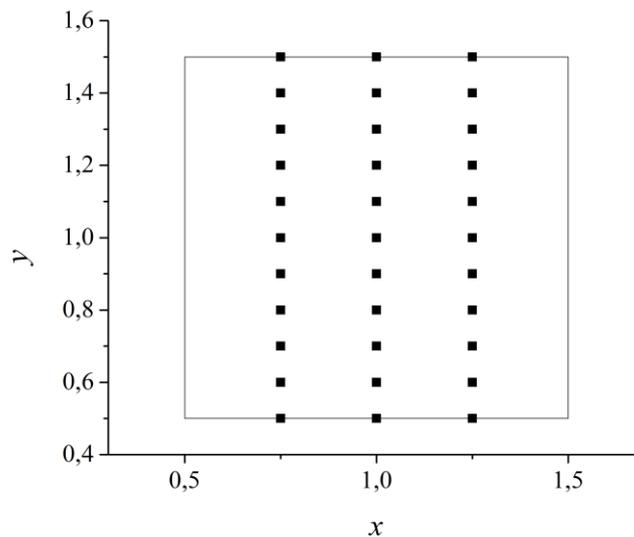


Figura 4.10 - Posições dos sensores de temperatura na placa plana.

A localização dos pontos internos empregados para a geração dos pontos experimentais sintéticos (sensores numéricos) é apresentado na Figura 4.10. Nesta observa-se que foram adotadas três diferentes posições em x ([0,75 1,0 1,25] cm) e onze diferentes posições em y ([0,5 0,6 0,7 0,8 0,9 1,0 1,1 1,2 1,3 1,4 1,5] cm).

Conhecendo-se a localização dos sensores, pode-se, a partir da solução analítica (Equação 3.4), determinar o valor das condições de contorno para estes pontos.

Para a representação dos erros que são inerentes em qualquer procedimento experimental, a solução analítica, avaliada nos pontos onde estão localizados os sensores, foi acrescida de um ruído com diferentes níveis de amplitude, conforme a Equação 3.14. Para essa finalidade, diferentes valores para o desvio padrão sd ([2,5% 5% 10%]) foram considerados.

A Figura 4.11 apresenta os pontos experimentais sintéticos (pontos discretizados) obtidos considerando diferentes valores para o desvio padrão e a mesma semente (igual a zero) para a inicialização do gerador de números aleatórios. Nesta figura também são apresentadas as distribuições de temperatura referentes a solução analítica (linhas).

Nestas figuras percebe-se que, na medida em que se aumenta o nível de ruído (sd), distância entre os pontos experimentais sintéticos e a curva analítica é aumentada. No entanto é possível notar também que, mesmo com a implementação destes ruídos, os pontos experimentais seguiram uma mesma linha de tendência.

Formulado o PI, o próximo passo consiste na definição dos parâmetros considerados para a resolução do mesmo. Assim, no algoritmo de ED considerou-se os seguintes parâmetros: tamanho da população (50), número máximo de gerações (500), taxa de perturbação (0,8), probabilidade de cruzamento (0,8) e a sétima estratégia para a geração de candidatos em potencial.

Já para a resolução do PD, foram usados os seguintes parâmetros: número de pontos fonte (40), número de pontos de colocação (40), número de pontos internos (33), círculo como geometria fictícia, raio (2 cm). Para o tratamento do mal condicionamento foi utilizada a Técnica de Regularização de Tikhonov. Para avaliar o erro cometido com a aplicação da metodologia proposta, definiu-se o erro relativo (*Erro*):

$$Erro(\%) = \frac{|FO_{teórico} - FO_{numérico}|}{FO_{teórico}} \quad (4.1)$$

Em que $FO_{teórico}$ e $FO_{numérico}$ representam os valores das funções objetivo calculadas a partir do conhecimento da solução analítica e do valor do parâmetro sd , respectivamente.

A Tabela 4.4 apresenta os resultados obtidos considerando dez execuções do algoritmo de ED e diferentes valores para o parâmetro sd .

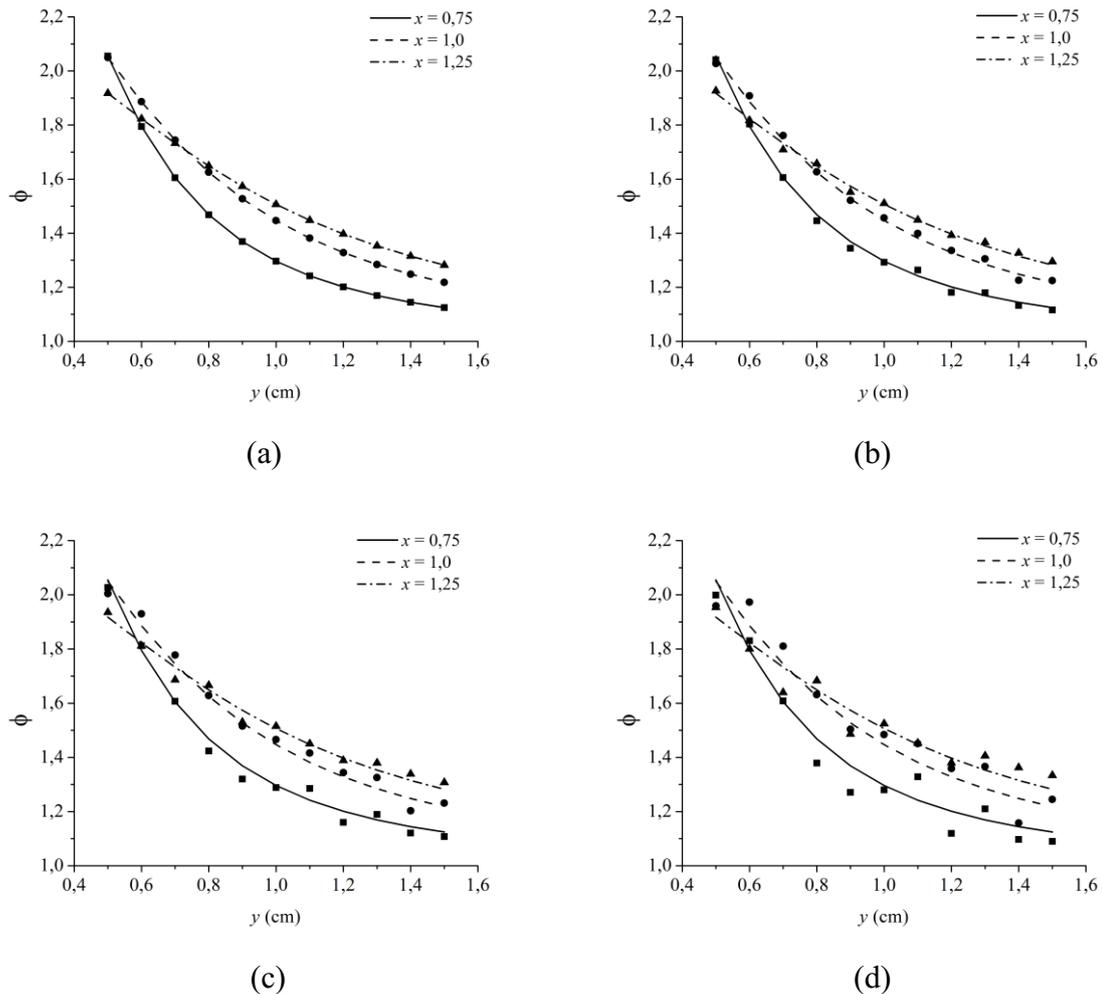


Figura 4.11 - Solução Analítica e Pontos Experimentais Sintéticos para (a) $sd=0\%$ (b) $sd=2,5\%$ (c) $sd=5\%$ e (d) $sd=10\%$ ($D = 5$, $NP = 50$, $F = 0,8$, gerações = 500).

Com os resultados reportados na Tabela 4.4 observa-se que, para o caso em que não se considera ruído nos pontos experimentais sintéticos ($sd = 0\%$), o valor da função objetivo computado pelo algoritmo de ED ($FO_{\text{numérico}}$) sempre foi próximo a zero. Na medida em que o valor de sd aumenta, o valor $FO_{\text{teórico}}$ também aumenta. Isto se deve ao fato de que quanto maior for o valor de sd , maiores são os erros associados a cada medida, o que afeta o valor final de ($FO_{\text{numérico}}$). Neste caso, com o aumento do parâmetro sd , tem-se a obtenção de boas estimativas para o vetor de variáveis de projeto $CC_{1,i} = (i = 2, 4, \dots, 10)$. Em relação ao valor teórico da função objetivo, observa-se que a metodologia proposta sempre foi capaz de obter boas estimativas para $FO_{\text{numérico}}$ quando comparado com o valor teórico $FO_{\text{teórico}}$, conforme observado pelos valores do parâmetro *Erro*. Em relação ao custo computacional, a Tabela 4.5 apresenta o tempo requerido para a resolução do PI para cada um dos ruídos considerados.

Como pode ser observado, o tempo requerido médio foi, aproximadamente, o mesmo para todos os casos. No entanto, para o primeiro caso em que se considera o ruído igual a zero, observa-se um maior tempo. Este aumento no valor do tempo pode ser justificado pela precisão requerida pelo algoritmo de ED para a resolução deste estudo de caso.

Tabela 4.4 - Resultados obtidos para o Problema Inverso com cinco variáveis.

	0%	2,5%	5%	10%
$CC_{1,2}$	$1,85 \pm 2 \times 10^{-4}$	$1,97 \pm 8 \times 10^{-4}$	$1,94 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,92 \pm 2 \times 10^{-1}$
$CC_{1,4}$	$2,09 \pm 8 \times 10^{-5}$	$1,98 \pm 1 \times 10^{-3}$	$2,03 \pm 5 \times 10^{-2}$	$2,20 \pm 2 \times 10^{-1}$
$CC_{1,6}$	$2,02 \pm 5 \times 10^{-5}$	$2,08 \pm 1 \times 10^{-3}$	$2,02 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,75 \pm 3 \times 10^{-1}$
$CC_{1,8}$	$1,90 \pm 4 \times 10^{-5}$	$1,88 \pm 5 \times 10^{-4}$	$1,90 \pm 1 \times 10^{-2}$	$2,01 \pm 1 \times 10^{-1}$
$CC_{1,10}$	$1,79 \pm 5 \times 10^{-4}$	$1,54 \pm 2 \times 10^{-3}$	$1,60 \pm 2 \times 10^{-1}$	$1,55 \pm 9 \times 10^{-2}$
$FO_{numérico}$	$2,82 \times 10^{-8(1)}$	$6,71 \times 10^{-3}$	$2,68 \times 10^{-2}$	$1,09 \times 10^{-1}$
	$3 \times 10^{-9(2)}$	$2,0 \times 10^{-8}$	4×10^{-4}	1×10^{-3}
$FO_{teórico}$	0	0,0070	0,0281	0,1124
$Erro(\%)^{(3)}$	0	4,1429	4,6263	3,0249

⁽¹⁾Médio, ⁽²⁾sd, ⁽³⁾calculado a partir do valor médio de cada condição de contorno.

Tabela 4.5 - Tempo de processamento em função do nível de ruído ($F = 0,8$, $CR = 0,8$, $NP = 50$, gerações = 500).

Nível de ruído (%)	Tempo (s)
0	233
2,5	221
5	222
10	225

4.3.2 Determinação das Condições de Contorno com Dez Variáveis

Para avaliar a capacidade do algoritmo de ED considerando mais variáveis de projeto, na Figura 4.12 são listadas informações conhecidas (quadrados pretos) e desconhecidas (triângulos abertos) para a formulação de um novo PI em que são consideradas dez variáveis de projeto, isto é, dez informações desconhecidas no contorno.

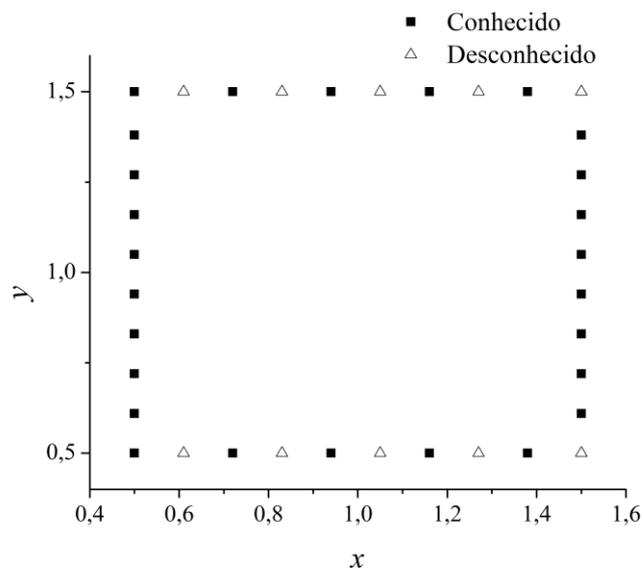


Figura 4.12 - Informações conhecidas e desconhecidas do contorno no Problema Inverso com dez variáveis.

A Tabela 4.6 apresenta os resultados obtidos considerando o algoritmo de ED para o segundo PI.

Os resultados apresentados demonstram um claro aumento na dificuldade do algoritmo de ED em resolver um problema com mais variáveis de projeto, evidenciado pelo aumento no erro percentual calculado. A maior quantidade de variáveis a serem estimadas naturalmente aumenta a dificuldade do problema a ser resolvido, conforme evidenciado por Storn e Price (1995). Ainda nesta tabela observa-se uma tendência na diminuição do *Erro* com o aumento do nível de ruído. Acredita-se que este comportamento ocorreu devido ao maior nível de espalhamento dos *PES*, o que, de alguma forma, pode ter contribuído para a formulação de um PI com pouca margem para a flutuação do vetor de variáveis de projeto.

Tabela 4.6 - Resultados obtidos para o Problema Inverso com dez variáveis.

	0%	2,5%	5%	10%
$CC_{1,2}$	$1,859 \pm 2 \times 10^{-2}$	$2,003 \pm 6 \times 10^{-3}$	$1,980 \pm 2 \times 10^{-2}$	$2,001 \pm 3 \times 10^{-2}$
$CC_{1,4}$	$2,082 \pm 2 \times 10^{-3}$	$1,952 \pm 6 \times 10^{-3}$	$2,011 \pm 4 \times 10^{-2}$	$1,999 \pm 6 \times 10^{-2}$
$CC_{1,6}$	$2,021 \pm 1 \times 10^{-2}$	$2,101 \pm 4 \times 10^{-3}$	$2,005 \pm 1 \times 10^{-1}$	$1,973 \pm 1 \times 10^{-1}$
$CC_{1,8}$	$1,906 \pm 1 \times 10^{-1}$	$1,888 \pm 2 \times 10^{-3}$	$1,965 \pm 3 \times 10^{-2}$	$1,981 \pm 4 \times 10^{-2}$
$CC_{1,10}$	$1,826 \pm 5 \times 10^{-2}$	$1,852 \pm 4 \times 10^{-3}$	$1,652 \pm 6 \times 10^{-2}$	$1,657 \pm 9 \times 10^{-2}$
$CC_{3,2}$	$1,705 \pm 4 \times 10^{-2}$	$1,548 \pm 9 \times 10^{-8}$	$1,548 \pm 2 \times 10^{-7}$	$1,548 \pm 0,0$
$CC_{3,4}$	$1,604 \pm 3 \times 10^{-2}$	$1,503 \pm 3 \times 10^{-4}$	$1,438 \pm 7 \times 10^{-3}$	$1,435 \pm 2 \times 10^{-7}$
$CC_{3,6}$	$1,481 \pm 2 \times 10^{-2}$	$1,636 \pm 1 \times 10^{-7}$	$1,620 \pm 3 \times 10^{-2}$	$1,625 \pm 2 \times 10^{-2}$
$CC_{3,8}$	$1,394 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,373 \pm 5 \times 10^{-4}$	$1,485 \pm 3 \times 10^{-2}$	$1,533 \pm 0,0$
$CC_{3,10}$	$1,309 \pm 3 \times 10^{-2}$	$1,206 \pm 8 \times 10^{-3}$	$1,242 \pm 8 \times 10^{-2}$	$1,292 \pm 9 \times 10^{-2}$
$FO_{numérico}$	$3,26 \times 10^{-6(1)}$	$6,28 \times 10^{-3}$	$2,53 \times 10^{-2}$	$1,03 \times 10^{-1}$
	$6 \times 10^{-6(2)}$	7×10^{-7}	4×10^{-4}	9×10^{-4}
$FO_{teórico}$	0	0,0070	0,0281	0,1124
$Erro(\%)^{(3)}$	0	10,29	9,96	8,36

⁽¹⁾Médio, ⁽²⁾sd, ⁽³⁾calculado a partir do valor médio de cada condição de contorno.

5 CONCLUSÕES

O presente trabalho teve como objetivo a resolução de problemas diretos e inversos em transferência de calor por condução modelado pela Equação de Laplace em estado estacionário e bi-dimensional considerando o Método das Soluções Fundamentais, a Técnica de Regularização de Tikhonov e o algoritmo de Evolução Diferencial. O problema inverso proposto consistiu na determinação das condições de contorno via minimização do somatório do erro quadrático entre os pontos simulados pelo modelo e os pontos experimentais sintéticos considerando diferentes níveis de ruído.

Para validar o MSF, primeiramente este foi comparado com um método clássico da literatura, a saber, o MDF. Em termos da qualidade da solução e do tempo requerido para a resolução do mesmo, os resultados obtidos pelo MSF foram superiores pelo Método das Diferenças Finitas (MDF).

- Resgatando os objetivos específicos que foram citados no Capítulo 1, tem-se:

Realizar uma análise de sensibilidade no que tange os parâmetros e características do MSF. Para atingir esse objetivo foi realizada uma análise de sensibilidade envolvendo a geometria da região fictícia, a quantidade de pontos de colocação, pontos fontes e pontos internos. Inicialmente, foi avaliada a influência do tipo de geometria fictícia considerada (quadrado ou círculo). Neste caso foi possível observar que ambas tiveram desempenho similares. Todavia, a depender do tamanho do raio da geometria escolhida, pode-se aumentar o valor do parâmetro mal-condicionamento numérico (κ), como observado para a geometria circular para um raio superior a aproximadamente 15 cm. Apesar disto, destaca-se que os resultados obtidos mesmo com o aumento no valor do parâmetro κ foram superiores aos obtidos pelo MSF. Em relação ao número de pontos de colocação (N_x) e fonte (N_y) pode-se observar que existe uma relação ótima entre estes parâmetros de forma que o menor erro possível ocorre nos casos em que $N_x = N_y$. Finalmente, em relação ao número de pontos internos (N_{in}), observa-se que, fixando os outros parâmetros, o aumento no valor deste parâmetro leva, naturalmente, ao aumento do erro cometido. Isto se deve ao fato de que o aumento do valor do parâmetro N_{in} , implica que mais pontos devem ser avaliados, o que resulta no aumento do erro associado. É importante ressaltar que, para cada ponto em particular, o aumento do valor do parâmetro N_{in} a capacidade de predição.

- Avaliar a incorporação de um Método de Regularização para a resolução do PD associado ao problema de transferência de calor

Para atingir este objetivo, foi avaliada a influência da escolha da metodologia empregada para a regularização. Neste caso, avaliou-se duas abordagens, a saber, a Técnica de Tikhonov associado com o MSF (MSF-Tik) e o Método da Decomposição em Valores Singulares com o MSF (MSF-MDVS). A partir destes resultados pode-se observar que ambas têm desempenho similares, mas superiores ao MSF (sem a presença de técnicas de regularização). Além disso, também foi possível constatar que a inclusão da técnica de regularização permitiu a obtenção de resultados com menor erro, em relação ao MSF e ao MDF. Assim, considera-se importante a associação de técnicas de regularização em estudos que apresentem mal condicionamento numérico. A inclusão de uma técnica de regularização também mostrou ser eficiente em conter oscilações no cálculo do erro.

- Resolver o PD com diferentes níveis de complexidade (outras geometrias)

Para atingir este objetivo, foram considerados sete domínios diferentes para o problema, a saber: quadrado, círculo, 1/4 de coroa, estrela, astróide, amoeba e coroa circular. Em todos os casos, o MSF-Tik foi capaz de convergir para uma solução similar à encontrada pela Solução Analítica, provando que o método é robusto e eficiente. No entanto, algumas geometrias foram mais sensíveis às definições dos parâmetros e requereram ajustes para que fosse obtida uma solução com um erro aceitável.

- Avaliar a aplicabilidade do algoritmo de ED em diferentes PIs

Ao se avaliar os resultados obtidos com a resolução do problema inverso, pode-se concluir que o algoritmo de Evolução Diferencial foi capaz de encontrar a solução ótima do problema sem a presença de ruído nos pontos experimentais sintéticos ($sd=0\%$). Já para os casos em que se considera ruído ($sd=2,5\%$, $sd=5\%$ e $sd=10\%$), o algoritmo foi capaz de obter boas estimativas para o vetor de variáveis de projeto quando trabalhando com cinco variáveis. Ao aumentar a complexidade do PI adicionando-se mais cinco variáveis, observa-se um aumento no erro percentual em relação ao valor teórico da função objetivo.

Em relação ao custo computacional, o maior impacto foi observado quando foram comparados o método de solução clássico, MDF, com o método proposto neste trabalho, MSF. A implementação de uma técnica de regularização, no caso de um PD mostrou não ter um impacto negativo no custo computacional.

5.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como continuidade deste trabalho sugere-se:

- Resolver problemas modelados considerando outros termos na equação de conservação de energia, bem como a sua aplicação em outras geometrias;
- Resolver problemas em escalar maiores que as utilizadas;
- Trabalhar com modelos transientes;
- Avaliar a inserção de ferramentas para a análise de robustez e confiabilidade para a determinação das variáveis de projeto no problema inverso;
- Trabalhar com dados experimentais reais.

6 REFERÊNCIAS

- AGUITONI, M. C.; PAVÃO, L. V.; SIQUEIRA, P. H.; JIMÉNEZ, L.; RAVAGNANI, M. A. S. S.; Heat exchanger network synthesis using genetic algorithm and differential evolution. *Computer & Chemical Engineering*, v. 117, p. 82-86, 2018. Disponível em: DOI: 10.1016/j.compchemeng.2018.06.005
- ALCÁNTAR, V.; LEDESMA, S.; ACEVES, S. M.; LEDESMA, E.; SALDAÑA, A.; Optimization of type iii pressure vessels using genetic algorithm and simulated annealing. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 42, n. 31, p. 20125–20132, 2017a. Disponível em: DOI:10.1016/j.ijhydene.2017.06.146.
- ALCÁNTAR, V.; M., ACEVES, S.; LEDESMA, E.; LEDESMA, S.; AGUILERA, E.; Optimization of type 4 composite pressure vessels using genetic algorithms and simulated annealing. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 42, n. 24, p. 15770–15781, 2017b. Disponível em: DOI:10.1002/app.46426.
- ALVARENGA, L. M.; XAVIER, T. P.; BARROZO, M. A. S.; BACELOS, M. S.; LIRA, T. S.; Determination of activation energy of pyrolysis of carton packaging wastes and its pure components using thermogravimetry. *Waste Manag*, v. 53, p. 68–75, 2016. Disponível em: DOI:10.1016/j.wasman.2016.04.015.
- AMANO, K.; A charge simulation method for the numerical conformal mapping of interior, exterior and doubly connected domains. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 53, p. 353–370, 1994. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0377-0427\(94\)90063-9](https://doi.org/10.1016/0377-0427(94)90063-9).
- AN, Z.; YU, T.; BUI, T. Q.; WANG, C.; TRINH, N. A.; Implementation of isogeometric boundary element method for 2-d steady heat transfer analysis. *Advances in Engineering Software*, v. 116, p. 36–49, 2017. Disponível em: DOI: [10.1016/j.advengsoft.2017.11.008](https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2017.11.008).
- ASKOUR, O.; TRI, A.; BRAIKAT, B.; ZAHROUNI, H.; POTIER-FERRY, M.; Method of fundamental solutions and high order algorithm to solve nonlinear elastic problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 89, p. 25–35, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2018.01.007>.

- AWAD, N.; MOSTAFA, A.; REHAB, D.; Multi-objective differential evolution based on normalization and improved mutation strategy. *Natural Computing*, v. 16, n. 4, p. 661–675, 2017. Disponível em: [10.1007/s11047-016-9585-y](https://doi.org/10.1007/s11047-016-9585-y).
- BAIG, M. Z.; ASLAM, N.; SHUM, H. P. H.; ZHANG, L.; Differential evolution algorithm as a tool for optimal feature subset selection in motor imagery EEG. *Expert Systems with Applications*, v. 90, p. 184–195, 2017. Disponível em: DOI: [10.1016/j.eswa.2017.07.033](https://doi.org/10.1016/j.eswa.2017.07.033).
- BENNET, J.; CLAEISSON, J.; HELLSTÖM, G.; Multipole method to compute the conductive heat flows to and between pipes in a composite cylinder. [S.l.: s.n.], 1987. 1-46 p. BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Transport Phenomena*. 2nd. ed. John Wiley & Sons Inc., 2004. Disponível em: ISBN: 0-471-41077-2.
- BNILAM, N.; AL-KHOURY, R.; Transient heat conduction in an infinite medium subjected to multiple cylindrical heat sources: An application to shallow geothermal systems. *Renewable Energy*, v. 97, p. 145–154, 2016. Disponível em: DOI:[10.1016/j.renene.2016.05.069](https://doi.org/10.1016/j.renene.2016.05.069).
- BOGOMOLNY, A.; Fundamental solutions method for elliptic boundary value problems. *Society for Industrial and Applied Mathematics Journal*, v. 22, p. 644–669, 1985. Disponível em: <https://doi.org/10.1137/0722040>.
- BORZKURT, E.; PEREZ, M. A. S.; HOVIUS, R.; BROWNING, N. J.; ROTH LISBERGER, U.; Genetic algorithm based design and experimental characterization of a highly thermostable metalloprotein. *Journal of the American Chemical Society*, v. 140, n. 13, p. 4517–4521, 2018. Disponível em: DOI:[10.1021/jacs.7b10660](https://doi.org/10.1021/jacs.7b10660).
- BOUNCHON, M.; SÁNCHEZ-SESMA, F. J.; Boundary integral equations and boundary elements methods in elastodynamics. *Advances in Geophysics*, v. 48, p. 157–189, 2007. Disponível em: [10.1016/S0065-2687\(06\)48003-1](https://doi.org/10.1016/S0065-2687(06)48003-1).
- BULFIN, B.; MURPHY, B. E.; LÜBBEN, O.; KRASNIKOV, S. A.; SHVETS, I. V.; Finite element method simulations of heat flow in fixed bed solar water splitting redox reactors. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 37, p. 10028–10035, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.03.163>.

- BURGESS, G.; MAHAJERIN, E.; A comparison of the boundary element and superposition methods. *Computers and Structures*, v. 19, n. 5-6, p. 697–705, 1984. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0045-7949\(84\)90169-X](https://doi.org/10.1016/0045-7949(84)90169-X).
- CEC, Benchmarks. 2018. Disponível em: http://www.ntu.edu.sg/home/epnsugan/index_files/cec-benchmarking.htm.
- CERNY, V. A.; thermodynamic approach to the traveling salesman problem: an efficient simulation. *Journal of Optimization Theory and Applications*, v. 45, p. 41–51, 1985. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF00940812>.
- CHEBBI, A.; BARGAOUI, Z. K.; ABID, N.; CUNHA, M. C.; Optimization of a hydrometric network extension using specific flow, kriging and simulated annealing. *Journal of Hydrology*, v. 555, p. 971–982, 2017. Disponível em: DOI:10.1016/j.jhydrol.2017.10.076.
- CHELLASWAMY, C.; RAMESH, R.; Parameter extraction of solar cell models based on adaptive differential evolution algorithm. *Renewable Energy*, v. 97, p. 823–837, 2016. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.renene.2016.06.024>.
- CHEN, C. S.; KARAGEORGHIS, A.; SMYRLIS, Y. S.; The Method of Fundamental Solutions – A Meshless Method. Atlanta: Dynamic Publishers, 2008. p. 266-267.
- CHEN, Y.; MAHALEC, V.; CHEN, Y.; LIU, X.; HE, R.; SUN, K.; Reconfiguration of satellite orbit for cooperative observation using variable-size multi-objective differential evolution. *European Journal of Operational Research*, v. 242, p. 10–20, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ejor.2014.09.025>.
- CHENG, A. H. D.; CHENG, D. T.; Heritage and early history of the boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 29, p. 268–302, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2004.12.001>.
- CHENG, J.; YANG, R.; MA, R.; LI, J.; Design optimization of wind turbine tower with lattice-tubular hybrid structure using particle swarm algorithm. *Structural Design of Tall and Special Buildings*, v. 25, n. 15, p. 743–758, 2016. Disponível em: DOI:10.1002/tal.1281.
- COURANT, R.; Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations. *Bull. Amer. Math. Soc*, v. 49, p. 1–23, 1943. Disponível em: <https://projecteuclid.org/euclid.bams/1183504922>.

- COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H.; Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Math. Ann.*, v. 100, p. 32–74, 1928. Disponível em: 10.1007/BF01448839.
- COURRIEU, P.; Fast computation of Moore-Penrose inverse matrices. *Neural Information Processing - Letters and Reviews*, v. 8, n. 2, p. 25–29, 2005. Disponível em: doi: 10.1017/S0305004100030401.
- DARWIN, C.; *On the origin of species by means of natural selection, or preservation of favoured races in the struggle for life*. London: John Murray, 1859.
- DAS, S.; SUGANTHAN, P. N.; Differential evolution: A survey of the state-of-the-art. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, v. 15, p. 4–31, 2011. Disponível em: 10.1109/TEVC.2010.2059031.
- DAS, S.; SUGANTHAN, P. N.; Recent advances in differential evolution – an updated survey. *Swarm and Evolutionary Computation*, v. 27, p. 1–30, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.swevo.2016.01.004>.
- DASH, J.; DAM, B.; SWAIN, R.; Design of multipurpose digital fir double-band filter using hybrid firefly differential evolution algorithm. *Applied Soft Computing*, v. 59, p. 529–545, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.asoc.2017.06.025>.
- DAVIER, M.; GANAPATHYSUBRAMANIAN, B.; BALASUBRAMANIAN, G.; Optimizing isotope substitution in graphene for thermal conductivity minimization by genetic algorithm driven molecular simulations. *Applied Physics Letters*, v. 110, n. 13, 2017. Disponível em: DOI:10.1063/1.4979315.
- DEB, K.; *Multi-objective optimization using Evolutionary Algorithms*. 1st. ed. New York, USA: John Willey & sons, 2001.
- DEO, R. C.; GHORBANI, M. A.; SAMADIANFARD, S.; MARASENI, T.; BILGILI, M.; BIAZAR, M.; Multi-layer perceptron hybrid model integrated with the firefly optimizer algorithm for windspeed prediction of target site using a limited set of neighboring reference station data. *Renewable Energy*, v. 116, p. 309–323, 2018. Disponível em: DOI:10.1371/journal.pone.0151355.

- DIDARI, S.; WANG, Y.; HARRIS, T. A. L.; Modeling of gas diffusion layers with curved fibers using a genetic algorithm. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 42, n. 36, p. 23130–23140, 2017. Disponível em: DOI:10.1016/j.ijhydene.2017.07.198.
- DJERRAR, I.; ALEM, L.; CHORFI, L.; Regularization method for the radially symmetric inverse heat conduction problem. *Boundary Value Problems*, v. 159, p. 1–14, 2017. Disponível em: DOI:10.1186/s13661-017-0890-x.
- DOU, Y-X.; HAN, B.; Total variation regularization for the reconstruction of a mountain topography. *Applied Numerical Mathematics*, v. 62, n. 1, p. 1–20, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2011.09.004>.
- DROMBOSKY, T. W.; MEYER, A. L.; LING, L.; Applicability of the method of fundamental solutions. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 33, n. 5, p. 637–643, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2008.10.007>.
- DUDA, P. A.; general method for solving transient multidimensional inverse heat transfer problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 93, p. 665–673, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.09.029>.
- EDGEWORTH, F. Y.; *Mathematical Physics*. 1st. ed. London, England: C. Keagan Paul & Co., 1881.
- ELKHECHAFI, M.; BENMAMOUN, Z.; HACHIMI, H.; AMINE, A.; ELKETTANI, Y.; Firefly algorithm for supply chain optimization. *Lobachevskii Journal of Mathematics*, v. 39, n. 3, p. 355–367, 2018. Disponível em: DOI:10.1134/S1995080218030125.
- ESCHENAUER, H.; KOSKI, J.; OSYCZKA, A.; *Multicriteria Design Optimization - Procedures and Applications*. 1st. ed. Berlin Hidelberg: Springer-Velag, 1990.
- FAN, Q.; YAN, X.; XUE, Y. Prior knowledge guided differential evolution. *Soft Computing*, v. 21, n. 22, p. 6841–6858, 2017. Disponível em: 10.1007/s00500-016-2235-6.
- FUQIANG, W.; HUIJIAN, J.; HAO, W.; ZIMING, C.; JUANYU, T.; YUAN, Y.; YUHANG, S.; WEIJIE, Z.; Radiative, conductive and laminar convective coupled heat transfer analysis of molten salts based on finite element method. *Applied Thermal Engineering*, v. 131, p. 19–29, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2017.11.133>.

- GAMPERLE, R.; MULLER, S. D.; KOUMOUTSAKOS, P.; A parameter study for differential evolution. [s.n.], 2002. 293-298 p. Disponível em: 10.1109/TEVC.2008.927706.
- GHAFIR, M. F. A.; BATCHA, M. F. M.; RAGHAVAN, V. R.; Prediction of the thermal conductivity of metal hydrides – the inverse problem. *International journal of hydrogen energy*, v. 34, p. 7125–7130, 2009. Disponível em: doi:10.1016/j.ijhydene.2008.06.033.
- GIPSON, G. S.; *Boundary elements fundamentals: basic concepts and recent developments in the Poisson equation*. Topics in engineering. Boston - USA: Computational Mechanics Publications, 1987.
- GNANASKANDAN, A.; MAHESH, K.; A numerical method to simulate turbulent cavitating flows. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 70, p. 22–34, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2014.11.009>.
- GO, G-H.; LEE, S-R.; YOON, S.; PARK, H.; PARK, S.; Estimation and experimental validation of borehole thermal resistance. *KSCE Journal of Civil Engineering*, v. 18, n. 4, p. 992–1000, 2014. Disponível em: DOI:10.1007/s12205-014-0454-x.
- GONZÁLEZ, G.; KOLEHMAINEN, V.; SEPPÄNEN, A.; Isotropic and anisotropic total variation regularization in electrical impedance tomography. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 74, n. 3, p. 564–576, 2017. Disponível em: DOI:10.1016/j.camwa.2017.05.004.
- GORZELANCZYK, P.; KOŁODZIEJ, J.; A. Some remarks concerning the shape of the source contour with application of the method of fundamental solutions to elastic torsion of prismatic rods. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 32, p. 64–75, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2007.05.004>.
- GOTO, T.; ITOH, T.; AKAMATSU, T.; SASAKI, Y.; SATO, K.; SHIN, W.; Heat transfer control of micro-thermoelectric gas sensor for breath gas monitoring. *Sensors and Actuators B: Chemical*, v. 249, p. 571–580, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.snb.2017.03.113>.
- GOU, Z.; LIU, G.; LI, D.; SHENWEN, W.; Self-adaptive differential evolution with global neighborhood search. *Soft Computing*, v. 21, n. 13, p. 3759–3768, 2017. Disponível em: 10.1007/s00500-016-2029-x.

- GUO, S.; LI, X.; ZHANG, J.; BIN, G.; HUANG, W.; A triple reciprocity method in Laplace transform boundary element method fo three-dimensional transient heat conduction problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 114, p. 258–267, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.06.073>.
- GUO, W.; JIANG, M.; LI, X.; REN, B.; Using a genetic algorithm to improve oil spill prediction. *Marine Pollution Bulletin*, v. 135, p. 386–396, 2018. Disponível em: DOI:10.1016/j.marpolbul.2018.07.026.
- GUO, Z. H.; KAN, Z.; LV, D. C.; SHAO, F. Q.; Regional regularization method for ECT based on spectral transformation of laplacian. *Review of Scientific Instruments*, v. 87, n. 10, 2016. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4965811>.
- GUPTA, P. K.; SINGH, J.; RAI, K. N.; A numerical study on heat transfer in tissues during hyperthermia. *Mathematical and Computer Modelling*, v. 57, n. 5-6, p. 1018–1037, 2013. Disponível em: DOI:10.1016/j.mcm.2011.12.050.
- HANSEN, P. C.; Analysis of discrete ill-posed problems by means of the l-curve. *JSIAM Review*, v. 34, n. 4, p. 561–580, 1992. Disponível em: <https://doi.org/10.1137/1034115>.
- HARGREAVE, C. J.; General methods in analysis for the resolution of linear equations in finite differences and linear differential equations. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, v. 140, p. 261–286, 1850. Disponível em: <https://www.jstor.org/stable/pdf/108437.pdf>.
- HE, J-H.; Variational iteration method — a kind of non-linear analytical technique: some examples. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, v. 34, p. 699–708, 1999. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0020-7462\(98\)00048-1](https://doi.org/10.1016/S0020-7462(98)00048-1).
- HERAVI, M. A.; MARIN, L.; SEBU, C.; The method of fundamental solutions for complex electrical impedance tomography. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 46, p. 126–139, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2014.04.022>.
- HIMMELBLAU, D. M.; EDGAR, T. F.; LASDON, L. S.; Optimization of chemical processes. [S.l.]: McGraw-Hill, 2001.
- HINZE, M.; KALTENBACHER, B.; QUYEN, T.; Identifying conductivity in electrical impedance tomography with total variation regularization. *Numerische Mathematik*, v. 138, n. 3, p. 723–765, 2018. Disponível em: DOI:10.1007/s00211-017-0920-8.

- HOU, J.; XIA, Z.; LI, S.; ZHOU, K.; LU, N.; Operation parameter optimization of a gas hydrate reservoir developed by cyclic hot water stimulation with a separated-zone horizontal well based on particle swarm algorithm. *Energy*, v. 96, p. 581–591, 2016. Disponível em: DOI:10.1016/j.energy.2015.12.066.
- IRIBE-SALAZAR, R.; CARO-CARRALES, J.; HERNÁNDEZ-CALDERÓN, O.; ZAZUETANIEBLA, J.; GUTIÉRREZ-DORADO, R.; CARRAZCO-ESCALANTE, M.; VÁZQUEZ-LÓPEZ, Y.; Heat transfer during blanching and hydrocooling of broccoli florets. *Journal of Food Science*, v. 80, n. 12, p. E2274–85, 2015. Disponível em: 10.1111/1750-3841.13109.
- ISLAM, S-U; ISMAIL, S.; Meshless collocation procedures for time-dependent inverse heat problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 113, p. 1157–1167, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.06.028>.
- JAVED, S.; SPITLER, J.; Accuracy of borehole thermal resistance calculation methods for grouted single u-tube ground heat exchangers. *Applied Energy*, v. 187, p. 790–806, 2017. Disponível em: DOI:10.1016/j.apenergy.2016.11.079.
- JOACHIMIAK, M.; CIALKOWSKI, M.; Non-linear unsteady inverse boundary problem for heat conduction equation. *Archives of Thermodynamics*, v. 38, n. 2, p. 81–100, 2017. Disponível em: DOI:10.1515/aoter-2017-0011.
- KAIPIO, J.P.; FOX, C.; The bayesian framework for inverse problems in heat transfer. *Heat Transfer Engineering*, v. 32, p. 718–753, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/01457632.2011.525137>.
- KANG, Z.; ZHU, P.; GUI, D>; WANG, L. A.; method for predicting thermal waves in dual-phase-lag heat conduction. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 115, p. 250–257, 2017. Disponível em: DOI:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.07.036.
- KARAGEORGHIS, A.; LESNIC, D.; MARIN, L.; A survey of applications of the MFS to inverse problems. *Inverse Problems and Science Engineering*, v. 19, n. 3, p. 309–336, 2011. Disponível em: DOI:10.1080/17415977.2011.551830.
- KARAGEORGHIS, A.; LESNIC, D.; MARIN, L.; A moving pseudo-boundary method of fundamental solutions for void detection. *Numerical Methods for Partial Differential*

- Equations, v. 39, n. 2, p. 935–960, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/num.21739>.
- KARAGEORGHIS, A.; LESNIC, D.; MARIN, L.; The method of fundamental solutions for solving direct and inverse Signorini problems. Numerical Methods for Partial Differential Equations, v. 151, p. 11–19, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2015.01.002>.
- KAZIMIERS, R.; DROZDZ, A.; The effect of reduced heat transfer in a micropolar fluid in natural convection. Archives of Thermodynamics, v. 34, n. 3, p. 45–59, 2013. Disponível em: 10.2478/aoter-2013-0014.
- KIRKPATRICK, S.; GELATT, C. D.; VECCHI, M P.; Optimization by simulated annealing. Science, v. 220, n. 4598, p. 671–680, 1983. Disponível em: DOI:10.1126/science.220.4598.671.
- KIUSALAAS, J.; Numerical Methods in Engineering with MATLAB. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005.
- KUO, C-L.; LIU, C-S.; CHANG, J-R.; The modified polynomial expansion method for identifying the time dependent heat source in two-dimensional heat conduction problems. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 92, p. 658–664, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.09.025>.
- KUPRADZE, V. D.; ALEKSIDZE, M. A.; The method of functional equations for the approximate solution of certain boundary value problems. Zh. vych. mat., v. 4, n. 2, p. 683–715, 1964. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(64\)90006-0](https://doi.org/10.1016/0041-5553(64)90006-0).
- LEVIN, D.; TAL, A.; A boundary collocation method for the solution of a flow problem in a complex three-dimensional porous medium. International Journal for Numerical Methods in Fluids, v. 6, p. 611–622, 1986. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/flid.1650060904>.
- LI, M.; WANG, W.; RANJITKAR, P.; CHEN, T.; Identifying drunk driving behavior through a support vector machine model based on particle swarm algorithm. Advances in Mechanical Engineering, v. 9, n. 6, 2017. Disponível em: DOI:10.1177/1687814017704154.
- LI, P.; LIU, J.; LIN, G.; ZHANG, P.; XU, B.; A combination of isogeometric technique and scaled boundary element method for the solution of the steady-state heat transfer problems

- in arbitrary plane domain with robin boundary. *Engineering Analysis and Boundary Elements*, v. 82, p. 43–56, 2017. Disponível em: [10.1016/j.enganabound.2017.05.006](https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2017.05.006).
- LI, X.; WANG, Y.; Proton imaging of 3d density distribution for dense dt plasmas using regularization method. *Laser and Particle Beams*, v. 34, n. 2, p. 210–218, 2016. Disponível em: DOI:10.1017/S0263034616000021.
- LI, Z.; TANG, Q.; ZHANG, L.; Minimizing energy consumption and cycle time in two-sided robotic assembly line systems using restarted simulated annealing algorithm. *Journal of Cleaner Production*, v. 135, p. 508–522, 2016. Disponível em: DOI: 10.1016/j.jclepro.2016.06.131.
- LIU, C-S. Improving the ill-conditioning of the method of fundamental solutions for 2d Laplace equations. *Tech Science Press*, v. 851, n. 1, p. 1–17, 2009.
- LIU, T-D.; XU, L-Y.; SHAO, G-F.; TU, N-N.; TAO, J-P.; WEN, Y-H. Structural optimization of Pt-Pd-Rh trimetallic nanoparticles using improved genetic algorithm. *Journal of Alloys and Compounds*, v. 663, p. 466–473, 2016. Disponível em: DOI:10.1016/j.jallcom.2015.12.146.
- LIVARI, A. A.; MALEKYNIA, B.; LIVARI, A. A.; Particle swarm optimization algorithm for ignition of hydrogen isotopes (deuterium–tritium) pellets. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 42, n. 14, p. 9099–9106, 2017. Disponível em: DOI:10.1016/j.ijhydene.2016.05.151.
- LOBATO, F. S.; MACHADO, V. S.; STEFFEN-JR, V.; Determination of an optimal control strategy for drug administration in tumor treatment using multi-objective optimization differential evolution. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, v. 131, p. 51–61, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cmpb.2016.04.004>.
- LOBATO, F. S.; STEFFEN-JR, V.; SILVA-NETO, A.; Resolução de problemas inversos em processos difusivos e transferência radiativa usando o algoritmo de evolução diferencial. [S.l.]: Omnipax Editora, 2011. 173-196 p. ISBN 9788564619043.
- LÓPEZ-CRUZ, I. L. Efficient Evolutionary Algorithms for Optimal Control. Wageningen, Holanda: Wageningen University and Research, 2002. Tese de doutorado. Disponível em: <http://library.wur.nl/WebQuery/wurpubs/fulltext/198419>.

- MA, D.; TAN, W.; ZHANG, Z.; HU, J.; Parameter identification for continuous point emission source based on Tikhonov regularization method coupled with particle swarm optimization algorithm. *Journal of Hazardous Materials*, v. 325, p. 239–250, 2017. Disponível em: DOI:10.1016/j.jhazmat.2016.11.071.
- MAHMOOD, M.; MATHAVAN, S.; RHAMAN, M.; A parameter-free discrete particle swarm algorithm and its application to multi-objective pavement maintenance schemes. *Swarm and Evolutionary Computation*, p. 1–19, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.swevo.2018.03.013>.
- MALISKA, C. R.; *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. 2. ed. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 2004.
- MEDEIROS, G. C.; *O Método das Soluções Fundamentais para Problemas da Elasticidade Linear*. [S.l.: s.n.], 2005.
- MELO, V. V.; DELBEM, A. C. B.; Investigating smart sampling as a population initialization method for differential evolution in continuous problems. *Information Sciences*, v. 193, p. 36–53, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ins.2011.12.037>.
- MEZURA-MONTES, E.; VELAZQUEZ-REYES, J.; COELLO-COELLO, C. A. Modified differential evolution for constrained optimization. *IEEE Congress on Evolutionary Computation*, p. 25–32, 2006. Disponível em: 10.1109/CEC.2006.1688286.
- MICHALEWICZ, Z.; *Evolutionary Computation for Non-Linear Programming Problems*. [S.l.: s.n.], 1998.
- MLAKAR, U.; FISTER, I.; BREST, J.; POTOČNIK, B.; Multi-objective differential evolution for feature selection in facial expression recognition systems. *Expert Systems With Applications*, v. 89, p. 129–137, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2017.07.037>.
- MOTTIN, S.; The solution of the Laplace equation with the robin boundary conditions: Applications to inverse problems. 2015. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1503.05476>.
- MUNIZ, W. B.; *Problema Inverso em Condução de Calor Utilizando Métodos de Regularização*. Instituto de Matemática, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1999. Dissertação de mestrado. Disponível em: <http://www.lume.ufrgs.br/handle/10183/127016>.

- NGUYEN, K. L.; MERCHIER, O.; CHAPUIS, P. O.; Near-field radiative heat transfer in scanning thermal microscopy computed with boundary element method. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, v. 202, p. 154–167, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2017.07.021>.
- NOSCHESSE, S.; REICHEL, L.; A modified truncated singular value decomposition method for discrete ill-posed problems. *NUMERICAL LINEAR ALGEBRA WITH APPLICATIONS*, v. 21, p. 813–822, 2014. Disponível em: DOI:10.1002/nla.1938.
- OGATA, H.; CHIBA, F.; USHIJIMA, T.; A new theoretical error estimate of the method of fundamental solutions applied to reduced wave problems in the exterior region of a disk. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 235, p. 3395–3412, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cam.2011.01.042>.
- OLIVEIRA, J. S.; A Decomposição em Valores Singulares: Teoria e Aplicações. Universidade Federal de Belo Horizonte, 2016. Disponível em: <http://hdl.handle.net/1843/EABA-ABFP82>.
- OSYCZKA, A.; Muticriterion Optimization in Engineering with Fortran Programs. 1st. ed. England: Ellis Horwood Limited, 1984.
- PAES, F. G.; PESSOA, A. A.; VIDAL, T.; A hybrid genetic algorithm with decomposition phases for the unequal area facility layout problem. *European Journal of Operational Research*, v. 256, n. 3, p. 742–756, 2017. Disponível em: DOI:10.1016/j.ejor.2016.07.022.
- PAHNER, U.; HAMEYER, K.; Adaptive coupling of differential evolution and multiquadrics approximation for the tuning of the optimization process. *IEEE Trans Magn*, v. 36, p. 25–32, 2000. Disponível em: 10.1109/20.877621.
- PARETO, V.; Cours D' Economie Politique. Vol I and II. 1st. ed. F. Rouge, Lausanne, France: [s.n.], 1986. Disponível em: <https://doi.org/10.1177/000271629700900314>.
- PATANKAR, S. V.; Numerical heat transfer and fluid flow. 1. ed. [S.l.]: Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- PATHAK, V. K.; SINGH, A. K.; Optimization of morphological process parameters in contactless laser scanning system using modified particle swarm algorithm. *Measurement*, v. 109, p. 27–35, 2017. Disponível em: DOI:10.1016/j.measurement.2017.05.049.

- PATTANAİK, J. K.; BASU, M.; DASH, D. P.; Opposition-based differential evolution for hydrothermal power system. *Protection and Control of Modern Power Systems*, v. 2, n. 2, 2017. Disponível em: DOI: 10.1186/s41601-017-0033-5.
- PATTERSON, C.; SHEIKH, M. A.; A Modified Trefftz Method for Three Dimensional Elasticity in Boundary Elements. [S.l.]: ED. C. A. Brebbia Springer Verlag, 1983. P. 427-437.
- PENG, T.; LIU, Y.; 3D crack-like damage imaging using a novel inverse heat conduction framework. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 102, p. 426–434, 2016. Disponível em: DOI:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.06.018.
- PENROSE, R.; A generalized inverse for matrices. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 51, p. 406–413, 1955. Disponível em: doi:10.1017/S0305004100030401.
- POIKOLAINEN, I.; NERI, F.; CARAFFINI, F.; Cluster-based population initialization for differential evolution frameworks. *Information Sciences*, v. 297, p. 216–235, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ins.2014.11.026>.
- PRICE, K. V.; STORN, R.; LAMPNINEN, J.; A Practical Approach to Global Optimization. [S.l.]: Springer, 2005. p.118.
- PÉREZ-SÁNCHEZ, M.; SÁNCHEZ-ROMERO, F. J.; LÓPEZ-JIMÉNEZ, P. A.; RAMOS, H. M.; Pats selection towards sustainability in irrigation networks: Simulated annealing as a water management tool. *Renewable Energy*, v. 116, p. 234–249, 2018. Disponível em: DOI:10.1016/j.renene.2017.09.060.
- QI, C.; FOURIE, A.; CHEN, Q.; TANG, X.; ZHANG, Q.; GAO, R.; Data-driven modelling of the flocculation process on mineral processing tailings treatment. *Journal of Cleaner Production*, v. 196, p. 505–516, 2018. Disponível em: DOI:10.1016/j.jclepro.2018.06.054.
- QIN, A. K.; HUANG, V. L.; SUGANTHAN, P. N.; Differential evolution algorithm with strategy adaption for global numerical optimization. *IEEE Trans Evol Comput*, v. 13, p. 398–417, 2009. Disponível em: 10.1109/TEVC.2008.927706.
- RAINIERI, S.; BAZZOLI, F.; PAGLIARINI, G.; Modeling approaches applied to the thermal response test: A critical review of the literature. *HVAC&R Research*, v. 17, n. 6, p. 977–990, 2011. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1080/10789669.2011.610282>.

- RAMLI, M. A. M.; BOUCHEKARA, H. R. E. H.; ALGHAMDI, S.; Optimal sizing of pv/wind/diesel hybrid microgrid system using multi-objective self-adaptive differential evolution algorithm. *Renewable Energy*, v. 121, p. 400–411, 2018. Disponível em: 10.1016/j.renene.2018.01.058.
- RAMOS, I. N.; BRANDÃO, T. R. S.; SILVA, C. L. M.; Simulation of solar drying of grapes using an integrated heat and mass transfer model. *Renewable Energy*, v. 81, p. 896–902, 2015. Disponível em: 10.1016/j.renene.2015.04.011.
- RAMOS, M. R. C.; Aplicações do método das soluções fundamentais em problemas de difusão. Universidade Federal da Paraíba, 2016. Dissertação de Mestrado. Disponível em: <http://tede.biblioteca.ufpb.br:8080/handle/tede/8933>.
- RASHIDI, H.; KHORSHIDI, J.; Exergoeconomic analysis and optimization of a solar based multigeneration system using multiobjective differential evolution algorithm. *Journal of Cleaner Production*, v. 170, p. 978–990, 2018. Disponível em: 10.1016/j.jclepro.2017.09.201.
- RASID, M. M.; MURATA, J.; TAKANO, H.; Fossil fuel cost saving maximization: Optimal allocation and sizing of renewable-energy distributed generation units considering uncertainty via clonal differential evolution. *Applied Thermal Engineering*, v. 114, p. 1424–1432, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.10.030>.
- REDDY, J. N.; An Introduction to the Finite Element Method. 3. ed. [S.l.]: McGraw-Hill, 2006.
- REEVE, T. H.; The method of Fundamental Solutions for some direct and inverse problems. Birmingham - UK: School of Mathematics, Engineering and Physical Sciences, University of Birmingham, 2013. Doctor thesis. Disponível em: <http://etheses.bham.ac.uk/4278/>.
- REN, J.; LIANG, H.; DONG, L.; SUN, L.; GAO, Z.; Design for sustainability of industrial symbiosis based on energy and multi-objective p-article swarm optimization. *Science of the Total Environment*, v. 562, p. 789–801, 2016. Disponível em: DOI: 10.1016/j.scitotenv.2016.04.092.
- SAADI, M. S.; GOMRI, R.; Investigation of dynamic heat transfer process through coaxial heat exchangers in the ground. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 42, p. 18014–18027, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.03.106>.

- SARMAH, P.; GOGOI, T. K.; DAS, R.; Estimation of operating parameters of a soft integrated combined power cycle using differential evolution based inverse method. *Applied Thermal Engineering*, v. 119, p. 98–107, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2017.03.060>.
- SHIDROKH, G.; WAN, H. H.; AISHA-HASSAN, A. H.; SEYED, A. S.; MOHAMMAD, H. A.; OMAR, M. Z.; A novel rssi prediction using imperialist competition algorithm (ICA), radial basis function (RBF) and firefly algorithm (FFA) in wireless networks. *PLoS ONE*, v. 11, n. 7, p. 1–25, 2016. Disponível em: DOI:10.1016/j.renene.2017.09.078.
- SIMHADRI, J.; ARCE, P. E.; STRETZ, H.; Choosing the optimal gel morphology in electrophoresis separation by a differential evolution approach (DEA). *Braz. J. Chem. Eng.*, v. 33, p. 123–131, 2016. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1590/0104-6632.20160331s20150032>.
- SONG, X.; XU, Y.; DONG, F.; A hybrid regularization method combining Tikhonov with total variation for electrical resistance tomography. *Flow Measurement and Instrumentation*, v. 46, p. 268–275, 2015. Disponível em: DOI:10.1016/j.flowmeasinst.2015.07.001.
- STORN, R.; PRICE, K.; Differential Evolution: A simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces. Berkeley, USA, 1995. Disponível em: <https://www1.icsi.berkeley.edu/~storn/tr-95-012.ps.gz>.
- STROBL, M. A. R.; BARKER, D.; On simulated annealing phase transitions in phylogeny reconstruction. *Molecular Phylogenetics and Evolution*, v. 101, p. 46–55, 2016. Disponível em: DOI:10.1016/j.ympev.2016.05.001.
- SU, Q.; YANG, W.; LIU, Y.; Optimization of carbon emission considering production planning at enterprise level. *Journal of Cleaner Production*, v. 162, p. 635–645, 2017. Disponível em: DOI:10.1016/j.jclepro.2017.06.092.
- SZYSZKIEWICZ, K.; DZIEMBAJ, P.; FILIPEK, R.; Heat transfer and inverse problems; selected cases in 1d and 3d geometries. *Archives of Metallurgy and Materials*, v. 58, p. 9–18, 2013. Disponível em: DOI:10.2478/v10172-012-0143-z.
- TAVARES, R. S.; MARTINS, T. C.; TSUZUKI, M. S. G.; Simulated annealing with adaptive neighborhood: A case study in off-line robot path planning. *Expert Systems With*

Applications, v. 38, n. 4, p. 2951–2965, 2011. Disponível em: DOI:10.1016/j.eswa.2010.08.084.

THOMÉE, V.; From finite differences to finite elements: A short story of numerical analysis of partial differential equations. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 128, p. 1–54, 2001. Disponível em: <https://core.ac.uk/download/pdf/82644440.pdf>.

TIAN, Z.; LI, Z-C.; HUANG, H-T.; CHEN, C. S.; Analysis of the method of fundamental solutions for the modified Helmholtz equation. Applied Mathematics and Computation, v. 305, p. 262–281, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.amc.2017.01.063>.

TIKHONOV, A. N.; ARSENIN, V. Y.; Solutions of ill-posed problems. John Willey, New York, v. 21, n. 2, p. 266–267, 1977. Disponível em: <https://doi.org/10.1137/1021044>.

TIZHOOSH, H. R.; Opposition-Based Learning: A New Scheme for Machine Intelligence. [s.n.], 2005. 695-701 p. International Conference on Computational Intelligence for Modelling, Control and Automation and International Conference on Intelligent Agents, Web Technologies and Internet Commerce. Disponível em: 10.1109/CIMCA.2005.1631345.

TURING, A. M.; Rounding-off errors in matrix processes. Quart. J. Mech. Appl. Math, v. 1, p. 287–308, 1948. Disponível em: <https://doi.org/10.1093/qjmam/1.1.287>.

UDAYRAJ, K. M.; PRABAL, T.; APURBA, D.; ALAGIRUSAMY, R.; Performance analysis and feasibility study of ant colony optimization, particle swarm optimization and cuckoo search algorithms for inverse heat transfer problems. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 89, p. 359–378, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.05.015>.

VALLE, M. F.; Estimativa de coeficientes de transferência de calor em uma placa via método das soluções fundamentais. Instituto Militar de Engenharia, 2007. Dissertação de Mestrado. Disponível em: http://www.ime.eb.mil.br/arquivos/teses/se4/mec2007/mec_Dissertacao_2007_Marcus_Valle_23042007.pdf.

VANDERPLAATS, G. N.; Numerical optimization techniques for engineering design with applications. [S.l.]: McGraw-Hill, 1984.

- VASCONCELOS-SEGUNDO, E. H.; AMOROSO, A. L.; MARIANI, V. C.; COELHO, L. S.; Economic optimization design for shell-and-tube heat exchangers by a Tsallis differential evolution. *Applied Thermal Engineering*, v. 111, p. 143–151, 2017. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.09.032>.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W.; An Introduction to computational fluid dynamics: The Finite volume method. 2. ed. [S.l.]: Longman Group LTD, 2007.
- WANG, G.; LV, C.; CHEN, H.; WAN, S.; ZHANG, D.; A multiple model adaptive inverse method for nonlinear heat transfer system with temperature-dependent thermophysical properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 118, p. 847–856, 2018. Disponível em: DOI:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.11.027.
- WANG, H.; WANG, W.; CUI, L.; SUN, H.; ZHAO, J.; WANG, Y.; XUE, Y.; A hybrid multi-objective firefly algorithm for big data optimization. *Applied Soft Computing Journal*, v. 69, p. 806–815, 2018. Disponível em: DOI:10.1016/j.asoc.2017.06.029.
- WANG, J-G; WEI, T.; ZHOU, Y-B.; Optimal error bound and simplified Tikhonov regularization method for a backward problem for the time-fractional diffusion equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 279, p. 277–292, 2015. Disponível em: DOI:10.1016/j.cam.2014.11.026.
- WANG, L.; WANG, T.; WU, J.; CHEN, G.; Multi-objective differential evolution optimization based on uniform decomposition for wind turbine blade design. *Energy*, v. 120, p. 346–361, 2017b. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2016.11.087>.
- WANG, L-J.; LIU, J.; XIE, Y.; GU, Y.; A new regularization method for the dynamic load identification of stochastic structures. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 76, n. 4, p. 741–759, 2018. Disponível em: DOI:10.1016/j.camwa.2018.05.013.
- WANG, S.; LI, Y.; YANG, H.; LIU, H.; Self-adaptive differential evolution algorithm with improved mutation strategy. *Soft Computing - A Fusion of Foundations, Methodologies and Applications*, v. 22, n. 10, p. 3433–3448, 2018. Disponível em: 10.1007/s00500-017-2588-5.
- WANG, X.; PENG, Z.; KONG D.; ZHANG, P.; HE, Y.; Infrared dim target detection based on total variation regularization and principal component pursuit. *Image and Vision Computing*, v. 63, p. 1–9, 2017d. Disponível em: DOI:10.1016/j.imavis.2017.04.002.

- WANG, Z.; GU, Y.; CHEN, W.; Fast-multipole accelerated regularized meshless method for large-scale isotropic heat conduction problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 101, p. 461–469, 2016. Disponível em: DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.05.064.
- WAZWAZ, A-M.; Solving the non-isothermal reaction-diffusion model equations in a spherical catalyst by the variational iteration method. *Chemical Physics Letters*, v. 679, p. 132–136, 2017. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2017.04.077>.
- WI, G-W.; WU, H.; WANG, X-Y.; ZHOU, Q-W.; LIU, X-M.; Tidal turbine array optimization based on the discrete particle swarm algorithm. *China Ocean Engineering*, v. 32, n. 3, p. 358–364, 2018. Disponível em: DOI: 10.1007/s13344-018-0037-6.
- WU, G.; ERIC, W. M.; LI, G.; Numerical solutions of the reaction-diffusion equation. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, v. 25, n. 2, p. 265–271, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1108/HFF-04-2014-0113>.
- WU, H.; XU, D.; YANG, M.; ZHANG, X.; Surface structure of hydroxyapatite from simulated annealing molecular dynamics simulations. *Langmuir: the ACS journal of surfaces and colloids*, v. 32, n. 18, p. 4643–4652, 2016. Disponível em: DOI: 10.1021/acs.langmuir.5b04667.
- XAVIER, T. P.; LIBARDI, B. P.; LIRA, T. S.; BARROZO, M. A. S.; Fluid dynamics analysis for pyrolysis of macadamia shell in a conical spouted bed. *Powder Technology*, v. 299, p. 210–216, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.05.034>.
- XU, J.; CHANG, Z.; FAN, J.; ZHAO, X.; WU, X.; WANG, Y.; Noisy image magnification with total variation regularization and order-changed dictionary learning. *EURASIP Journal on Advances in Signal Processing*, v. 41, p. 1–13, 2015. Disponível em: DOI:10.1186/s13634-015-0225-y.
- XU, M.; A modified finite volume method for conversion-diffusion-reaction problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 117, p. 658–668, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.10.003>.
- YANG, X-S.; *Nature-Inspired metaheuristics algorithms*. 1st. ed. London, UK: Luniver Press, 2008.

- YING, L.; MINGJIE, G.; RENJIE, H.; YAZI, R.; HUAN, L.; LEI, G.; GUIZHI, X.; Hemodynamic parameter estimation from magnetic resonance perfusion imaging with the Tikhonov regularization method. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 51, n. 11, p. 1–4, 2015. Disponível em: DOI:10.1109/TMAG.2015.2442617.
- YOUNG, D. L.; TSAI, C. C.; W., CHEN C.; M., FAN C.; The method of fundamental solutions and condition number analysis for inverse problems of laplace equation. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 55, p. 1189–1200, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2007.05.015>.
- ZAHARIE, D.; Influence of crossover on the behavior of differential evolution algorithms. *Applied Soft Computing*, v. 9, p. 1126–1138, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.asoc.2009.02.012>.
- ZHANG, H.; XIE, J.; GE, J.; ZHANG, Z.; ZONG, B.; A hybrid adaptively genetic algorithm for task scheduling problem in the phased array radar. *European Journal of Operational Research*, p. 1–11, 2018. Disponível em: DOI:10.1016/j.ejor.2018.07.012.
- ZHANG, L.; ZHAO, J. M.; LIU, L. H.; WANG, S. Y.; Hybrid finite/volume element method for radiative heat transfer in graded index media. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, v. 113, p. 1826–1835, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.04.020>.
- ZHANG, W. J.; XIE, X. F.; Depso: hybrid particle swarm with differential evolution operator. *IEEE international conference systems man and cybernetics*, p. 3816–3821, 2003. Disponível em: 10.1109/ICSMC.2003.1244483.
- ZHAO, Z.; YANG, J.; HU, Z.; CHE, H.; A differential evolution algorithm with self-adaptive strategy and control parameters based on symmetric latin hypercube design for unconstrained optimization problems. *European Journal of Operational Research*, v. 250, n. 1, p. 30–45, 2016. Disponível em: 10.1016/j.ejor.2015.10.043.
- ZHENG, G-H.; ZHANG, Q-G.; Solving the backward problem for space-fractional diffusion equation by a fractional Tikhonov regularization method. *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 148, p. 37–47, 2018. Disponível em: DOI:10.1016/j.matcom.2017.12.005.
- ZHOU, G.; WU, B.; Identifying a time-dependent heat source with nonlocal boundary and over determination conditions by the variational iteration method. *International Journal of*

Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, v. 24, n. 7, p. 1545–1552, 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1108/HFF-01-2013-0034>.

ZHOU, Y.; PANG, S.; CHONG, G.; YANG, X.; XU, X.; LI, X.; A variational iteration method integral transform technique for handling heat transfer problems. Thermal Science, v. 21, p. 555–561, 2017. Disponível em: DOI:10.2298/TSCI17S1055Z.

ZHU, T.; CHENG, S.; ZHU, W.; WANG, Y.; Optimization of sound absorption property for polyurethane foam using adaptive simulated annealing algorithm. Journal of Applied Polymer Science, v. 135, n. 26, 2018. Disponível em: DOI:10.1016/j.jhydene.2017.03.032.