

UNIVERSIDADE FEDERAL UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



DETERMINAÇÃO DE ESTADOS ESTACIONÁRIOS
USANDO PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SEQUENCIAL

CAROLINA ALARI FARIA

UBERLÂNDIA-MG

2018

UNIVERSIDADE FEDERAL UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

DETERMINAÇÃO DE ESTADOS ESTACIONÁRIOS
USANDO PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SEQUENCIAL

CAROLINA ALARI FARIA

Monografia de graduação apresentada à Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários para a aprovação na disciplina Trabalho de Conclusão de curso, do curso de Engenharia Química.

UBERLÂNDIA-MG

2018

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA MONOGRAFIA DA
DISCIPLINA TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO DE CAROLINA
ALARI FARIA APRESENTADA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE
UBERLÂNDIA, EM

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Fran Sérgio Lobato

Orientador – FEQUI/UFU

Prof. Dr. Érika Ohta Watanabe

FEQUI/UFU

Prof. Dr. Fábio de Oliveira Arouca

FEQUI/UFU

DEDICATÓRIA

Dedico este presente trabalho à Deus, e a todas as pessoas que contribuíram para o meu crescimento pessoal e profissional.

AGRADECIMENTOS

À Deus, por em momentos de dúvida, medo e angústia ter me amparado para que esse sonho fosse realizado e finalizado com todo esforço e dedicação que pude dar-lhe.

À todas as pessoas que contribuíram para o meu crescimento pessoal e profissional, pela compreensão, paciência e companheirismo nesta etapa final do curso e nos momentos de dúvida. Sou resultado da força e confiança de cada um de vocês.

Ao meu orientador e professor Fran Sérgio Lobato, pela dedicação, ajuda, apoio e aprendizado com este presente trabalho.

“Nenhum mal te atingirá, nenhum flagelo chegará à tua tenda, porque aos seus anjos ele mandou que te guardem em todos os teus caminhos. ” (Salmo 90 – 10)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	15
2.1	O Estado Estacionário.....	15
2.2	Metodologias para a Resolução de Sistemas Algébricos Não Lineares	15
2.2.1	Método de Newton	16
2.2.2	Método de Levenberg Marquardt	18
2.3	Problema de Otimização	19
2.3.1	Formulação Matemática	20
2.3.2	Classificação dos Métodos de Otimização	21
2.3.3	Programação Quadrática Sequencial	22
2.4	Bacias de Atração e Análise da Estabilidade.....	24
3	METODOLOGIA.....	26
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	27
4.1	Função Matemática Polinomial de Terceiro Grau	27
4.2	Função Matemática Polinomial de Quinto Grau	32
4.3	Reator CSTR.....	38
4.4	Reator Biológico	45
4.5	Resumo dos Principais Resultados	52
5	CONCLUSÕES.....	54
6	REFERÊNCIAS	56

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Autovalores e análise da estabilidade para o problema do polinômio de grau três (Fonte: Autoria própria).....	28
Tabela 2: Classificação de cores para o problema do polinômio de grau três (Fonte: Autoria própria).	28
Tabela 3: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau três considerando o MN (Fonte: Autoria própria).....	30
Tabela 4: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau três considerando o MLM (Fonte: Autoria própria).....	31
Tabela 5: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau três considerando o SQP (Fonte: Autoria própria).....	32
Tabela 6: Consolidado dos resultados obtidos para o problema do polinômio de grau três considerando o MN, o MLM e o SQP (Fonte: Autoria própria).	32
Tabela 7: Autovalores e análise da estabilidade para o problema do polinômio de grau cinco (Fonte: Autoria própria).....	33
Tabela 8: Classificação de cores para o problema do polinômio de grau cinco (Fonte: Autoria própria).	34
Tabela 9: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau cinco considerando o MN (Fonte: Autoria própria).....	35
Tabela 10: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau cinco considerando o MLM (Fonte: Autoria própria).....	36
Tabela 11: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau cinco considerando o SQP (Fonte: Autoria própria).	38
Tabela 12: Consolidado dos resultados obtidos para o problema do polinômio de grau cinco considerando o MN, o MLM e o SQP (Fonte: Autoria própria).	38
Tabela 13: Autovalores e análise da estabilidade para o problema do reator CSTR (Fonte: Autoria própria).....	40
Tabela 14: Classificação de cores para o problema do reator CSTR (Fonte: Autoria própria).	40
Tabela 15: Análise da convergência das raízes do problema do reator CSTR considerando o MN (Fonte: Autoria própria).....	41
Tabela 16: Análise da convergência das raízes do problema do reator CSTR considerando o MLM (Fonte: Autoria própria).....	43

Tabela 17: Análise da convergência das raízes do problema do reator CSTR considerando o SQP (Fonte: Autoria própria).....	44
Tabela 18: Autovalores e análise da estabilidade para o problema do reator biológico (Fonte: Autoria própria).....	45
Tabela 19: Classificação de cores para o problema do reator biológico (Fonte: Autoria própria).	46
Tabela 20: Análise da convergência das raízes do problema do reator biológico considerando o MN (Fonte: Autoria própria).....	47
Tabela 21: Análise da convergência das raízes do problema do reator biológico considerando o MLM (Fonte: Autoria própria).....	49
Tabela 22: Análise da convergência das raízes do problema do reator biológico considerando o SQP (Fonte: Autoria própria).....	51
Tabela 23: Consolidado dos resultados obtidos para o problema do reator biológico considerando o MN, o MLM e o SQP (Fonte: Autoria própria).	52
Tabela 24: Resumo dos resultados obtidos considerando o MN, o MLM e o algoritmo SQP.....	52

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Raízes para a função genérica $f(x)$ (Fonte:Autoria própria).....	16
Figura 2: Bacia de atração para o problema polinomial de terceiro grau usando o MN (Fonte: Autoria própria).....	29
Figura 3: Bacia de atração para o problema polinomial de terceiro grau usando o MLM para $\lambda=0$ (Fonte: Autoria própria).	30
Figura 4: Bacia de atração para o problema polinomial de terceiro grau usando o SQP (Fonte: Autoria própria).....	31
Figura 5: Bacia de atração para o problema polinomial de quinto grau usando o MN (Fonte: Autoria própria).....	35
Figura 6: Bacia de atração para o problema polinomial de quinto grau usando o MLM para $\lambda=0$ (Fonte: Autoria própria).	36
Figura 7: Bacia de atração para o problema polinomial de quinto grau usando o SQP (Fonte: Autoria própria).....	37
Figura 8: Bacia de atração para o problema do reator CSTR usando o MN (Fonte: Autoria própria).	41
Figura 9: Bacia de atração para o problema do reator CSTR usando o MLM para $\lambda=0,1$ (Fonte: Autoria própria).....	42
Figura 10: Bacia de atração para o problema do reator CSTR usando o MLM para $\lambda=1$ (Fonte: Autoria própria).....	42
Figura 11:Bacia de atração para o problema do reator CSTR usando o SQP (Fonte: Autoria própria).	43
Figura 12:Plano de fases para o problema do reator CSTR (Fonte: Autoria própria)..	44
Figura 13: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o MN (Fonte: Autoria própria).	46
Figura 14: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o MLM para $\lambda=0,001$ (Fonte: Autoria própria).	47
Figura 15: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o MLM para $\lambda=0,1$ (Fonte: Autoria própria).	48
Figura 16: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o MLM para $\lambda=1$ (Fonte: Autoria própria).	48

Figura 17: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o MLM para $\lambda=10$ (Fonte: Autoria própria).	49
Figura 18: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o SQP (Fonte: Autoria própria).	50
Figura 19: Plano de fases para o problema do reator biológico (Fonte: Autoria própria).	51

LISTA DE ABREVIATURAS

CSTR	<i>Continuous Stirred Tank Reactor</i>	s	Variável auxiliar
d_k	Direção de busca	SQP	<i>Sequential Quadratic Programming</i>
$f(x)$	Função objetivo	x	Variáveis de projeto
F	Sistemas de equações não lineares	x_A, x_B	Concentrações adimensionais dos componentes A e B
g	Restrições de desigualdade	α	Tamanho do passo de otimização
h	Restrições de igualdade	β	Adimensional que relaciona vazão e cinética da reação
H	Matriz Hessiana	γ	Temperatura adimensional
L	Função Lagrangeana	γ_c	Temperatura de referência
L_A	Função Lagrangeana Aumentada	θ	Parâmetro não-negativo
LM	Método de Levenberg-Marquardt	τ	Tempo adimensional
N	Método de Newton	Θ_R	Adimensional que relaciona propriedades do fluido
PO	Problema de Otimização	ΔE_R	Adimensional que relaciona a energia de ativação
q	Variável auxiliar	Δh_R	Adimensional que relaciona o calor de reação
λ	Parâmetro de amortecimento de Levenberg Marquardt	Γ	número de iterações necessárias para a convergência das raízes
μ	Coeficiente da taxa de crescimento específico.		

RESUMO

A determinação do estado estacionário em sistemas modelados por equações diferenciais ordinárias no tempo implica na resolução de sistemas algébricos. Na maioria das aplicações em engenharia estes são constituídos por equações não-lineares que devem ser resolvidas usando técnicas numéricas, como por exemplo, os Métodos de Newton e de Levenberg-Marquardt. Nas últimas décadas, o uso de técnicas de otimização tem-se mostrado uma alternativa interessante para a resolução de sistemas de equações algébricas. Para esta finalidade, o sistema de equações não lineares original é convertido em um problema de otimização equivalente, sendo o mesmo resolvido a partir da aplicação de metodologias específicas. Diante do que foi apresentado, esta contribuição tem por objetivo determinação do estado estacionário usando uma das mais tradicionais técnicas de otimização, a saber, Programação Quadrática Sequencial (*Sequential Quadratic Programming*). A metodologia proposta é aplicada em dois problemas matemáticos e em dois sistemas de engenharia química, um reator CSTR (*Continuous Stirred Tank Reactor*) não isotérmico e um reator biológico. Para avaliar a sensibilidade da solução obtida em relação à condição inicial considerada, foram elaborados os gráficos de bacias de atração para cada um dos estudos de caso propostos. Os resultados obtidos são comparados com aqueles obtidos pelos Métodos de Newton e de Levenberg-Marquardt. De forma geral observa-se que a metodologia proposta configura-se como uma alternativa para a determinação do estado estacionário. A metodologia SQP em comparação com as demais aplicadas neste trabalho mostrou-se eficiente na convergência das raízes, porém exige-se um maior esforço computacional.

Palavras-chave: Estado Estacionário, Otimização, Programação Quadrática Sequencial, Reatores Químicos e Bioquímicos.

ABSTRACT

The determination of steady state in systems modeled by ordinary differential equations in time requires the resolution of algebraic systems. In most engineering applications, these models are described by nonlinear equations that must be solved using numerical techniques, such as Newton and Levenberg-Marquardt Methods. In last years, the use of optimization techniques has shown to be an interesting alternative for solving algebraic equations systems. For this purpose, the original system (nonlinear equations) is transformed into an equivalent optimization problem, and this new problem is solved by applying specific methodologies. This contribution aims to determine the steady state in traditional chemical engineering by using Sequential Quadratic Programming. The proposed methodology is applied in two mathematical test cases and two chemical engineering (non-isothermal Continuous Stirred Tank Reactor and Biological Reactor). In order to evaluate the influence of initial condition in quality of solution, graphs of attraction basins are generated. The obtained results were compared with those obtained by using the Newton and Levenberg-Marquardt Methods. The results indicate that the proposed methodology is configured as an alternative to determine steady state. The SQP methodology compared to the others applied in this work, proved to be efficient in the convergence of the roots, but a greater computational effort is required.

Keywords: Stationary State, Optimization, Sequential Quadratic Programming, Chemical and Biological Reactors.

1 INTRODUÇÃO

No contexto industrial, a determinação do estado estacionário, também conhecido como regime permanente, configura-se como uma tarefa de grande importância, já que objetiva-se encontrar um ou mais pontos do processo que sejam interessantes, por exemplo, do ponto de vista da produtividade, da estabilidade ou de outro critério empregado para essa finalidade.

Conceitualmente, o estado estacionário pode ser definido como o instante de tempo para o qual as variáveis dependentes do sistema em análise (temperatura, pressão, volume, conversão, concentração, massa, entre outras) não mais dependem da variável independente, que neste caso é o tempo. Do ponto de vista matemático, isso implica que as derivadas das variáveis dependentes com relação ao tempo são todas iguais a zero. Assim, a partir da aplicação deste conceito, o sistema diferencial ordinário no tempo pode ser reduzido a um puramente algébrico, inerentemente não-linear devido à complexidade dos fenômenos envolvidos.

Tradicionalmente, estes modelos algébricos não-lineares têm sido resolvidos a partir da aplicação de métodos iterativos, como por exemplo, os Métodos de Newton e de Levenberg-Marquardt (CHAPRA, 2013; CONSTANTINIDES e MOSTOUFI, 1999). Nos últimos anos, as técnicas de otimização têm sido empregadas como ferramenta alternativa para a resolução de sistemas não lineares via transformação do problema original em um equivalente (PURCINA, 2010).

Diante do que foi apresentado, a presente contribuição tem por objetivo determinar o estado estacionário via aplicação de uma tradicional técnica de otimização, a saber, Programação Quadrática Sequencial - SQP (*Sequential Quadratic Programming*). Para essa finalidade, o problema original é convertido em um equivalente de otimização, em que se deseja obter o vetor de variáveis de projeto que minimizem o funcional proposto. Para avaliar a qualidade da metodologia proposta, dois problemas matemáticos e dois sistemas de engenharia química, a saber, um reator CSTR (*Continuous Stirred Tank Reactor*) não isotérmico e um reator biológico, são analisados. Além disso, para verificar a sensibilidade da solução obtida em relação à condição inicial considerada, foram elaborados os gráficos de bacias de atração para cada um dos estudos de caso propostos.

Este trabalho está estruturado como segue. O capítulo 2 apresenta uma breve revisão que contempla o conceito de estado estacionário, as metodologias para a resolução de sistemas de equações algébricas não lineares, a formulação matemática e a classificação do problema de otimização, com destaque para o algoritmo PQS, análise de estabilidade, plano de fases e bacias de atração. Já no capítulo 3 é apresentada a metodologia para a transformação do problema algébrico em um equivalente de otimização. Os resultados obtidos com a aplicação da metodologia proposta em diferentes estudos de caso são apresentados no capítulo 4. A última seção apresenta as conclusões deste trabalho.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 O Estado Estacionário

Como descrito anteriormente, a determinação do estado estacionário é de grande relevância nos processos, visto que é nesta condição que, efetivamente, o engenheiro tem interesse. Fisicamente, define-se estado estacionário como a condição em que a variável dependente em análise não mais é função da variável temporal (Bequette, 1998). Do ponto de vista matemático, a derivada da variável dependente com relação à variável independente é nula. Neste caso, uma equação ou um sistema de equações diferenciais ordinárias cuja variável independente é o tempo se transforma em uma equação ou um sistema de equações diferenciais algébrico (linear ou não linear), a partir da aplicação deste conceito.

2.2 Metodologias para a Resolução de Sistemas Algébricos Não Lineares

Como enfatizado na última seção, avaliar a condição de estado estacionário relacionado a uma equação diferencial ordinária implica em resolver uma equação algébrica, geralmente não linear devido à complexidade dos fenômenos que estas representam. Neste cenário, a seguir são apresentados conceitos para um bom entendimento deste trabalho.

Encontrar a raiz de uma $f(x)$ consiste em determinar todos os valores de x que fazem com que $f(x)$ seja igual a zero. Graficamente, a função genérica $f(x)$, apresentada na Figura 1, tem quatro raízes, a saber, A, B, C e D.

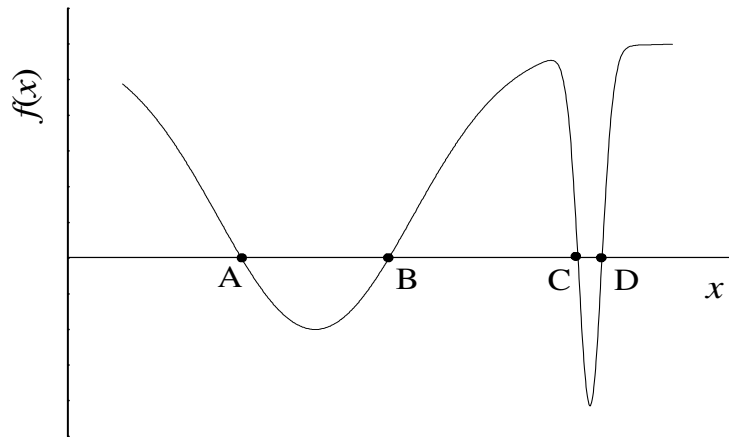


Figura 1: Raízes para a função genérica $f(x)$ (Fonte: Autoria própria).

Nesta figura, como o problema apresenta quatro soluções viáveis, deve-se analisar, do ponto de vista físico, se uma ou mais podem ser empregadas na prática. Por exemplo, caso essa raiz represente uma condição em que a concentração de um produto for negativa ou nula, implica que, fisicamente esta solução não é uma boa condição de operação, visto que deseja-se obter um produto, isto é; a concentração deve ser maior que zero.

Na literatura, várias são as técnicas propostas para a resolução de sistemas algébricos não lineares, que são o foco deste trabalho. Dentre estas pode-se citar algumas: *i)* substituição direta; *ii)* Bissecção; *iii)* Falsa posição; *iv)* Newton e *v)* Levenberg Marquardt.

Neste trabalho serão abordadas duas destas, a saber, o Método de Newton (MN) e o Método de Levenberg Marquardt (MLM).

2.2.1 Método de Newton

O MN, também conhecido como Newton-Raphson, é a abordagem mais empregada para a resolução de sistemas não lineares. A primeira aparição desta abordagem foi publicado em 1671 (CUNHA, 2000). Este pode ser demonstrado de várias formas, porém aqui será apresentada a sua derivação a partir da expansão de uma função em Série de Taylor. Assim, considere a aproximação da função $f(x)$ em torno do ponto de referência x_0 .

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \dots \quad (1)$$

em que:

$$f'(x) = \frac{\partial f(x)}{\partial x} \quad (2)$$

$$f''(x) = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial^2 x} \quad (3)$$

Negligenciando os termos a partir das derivadas de segunda ordem e supondo que x é raiz da equação ($f(x)=0$), obtêm-se:

$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) = 0 \quad (4)$$

e que pode ser explicitada para x , isto é:

$$x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (5)$$

Neste caso, como x_0 é um ponto de referência, adotado pelo usuário, dificilmente ele irá satisfazer a equação algébrica não linear, isto é; $f(x_0)$ dificilmente será igual a zero. Assim, naturalmente pode-se empregar a Equação (5) como sendo relação iterativa que será utilizada para a determinação da raiz x . A Equação (6) representa o MN para uma única equação não linear:

$$x^{k+1} = x_0^k - \frac{f(x_0^k)}{f'(x_0^k)} \quad (6)$$

em que k é a iteração corrente. Assim, partindo-se de uma estimativa inicial para a raiz, isto é; x_0 para $k=0$, a Equação (6) é utilizada para atualizar o valor de x em $k=1$. Este processo continua até que um determinado critério de parada seja satisfeito. Geralmente, adota-se como critério o erro cometido em duas iterações consecutivas, que pode ser em relação à função f ou em relação à variável x .

Em se tratando de problemas realísticos, os problemas não lineares que devem ser resolvidos apresentam mais de uma variável. Neste caso, tem-se um vetor que apresenta as funções e um vetor de variáveis que devem ser encontradas. Assim, considere o seguinte sistema de equações não lineares:

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{bmatrix} = 0 \quad (7)$$

em que n é a dimensão do sistema a ser resolvido e x é o vetor de incógnitas ($x=[x_1, x_2, \dots, x_n]$).

O MN pode ser facilmente expandido para o problema descrito acima. Neste caso, para um sistema de equações não lineares, o MN é escrito como:

$$x^{k+1} = x_0^k - \frac{F(x_0^k)}{J(x_0^k)} \quad (8)$$

em que J é a matriz Jacobiana, definida como sendo:

$$J(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (9)$$

Apesar da grande aplicabilidade do NM, uma de suas principais desvantagens é a possibilidade da matriz J se tornar singular, isto é; o determinante ser igual a zero (Bequette, 1998). Neste caso, se J é singular, implica que a sua inversa não pode ser obtida e o MN não pode ser aplicado.

2.2.2 Método de Levenberg Marquardt

Com o intuito de reduzir a chance da matriz J ser singular, o Método de Levenberg Marquardt (MLM) surge como uma espécie de MN melhorado (AWONTUDE e HORNE, 2012; IGLESIAS e DAWSON, 2013). Neste é realizada uma pequena modificação no MN original de forma a minimizar a chance da obtenção de uma matriz singular. Neste contexto, o MLM é apresentado como segue:

$$x^{k+1} = x_0^k - \frac{J^T(x_0^k)F(x_0^k)}{J^T(x_0^k)J(x_0^k) + \lambda I} \quad (10)$$

em que λ é o parâmetro de Levenberg Marquardt (geralmente arbitrado como sendo um número real maior que zero) e I é a matriz identidade, de n -ésima dimensão. Nesta equação, se λ for igual a zero, o MLM se torna o próprio MN.

O procedimento para a utilização do MLM é idêntico ao apresentado para o MN. Inicializa-se o processo iterativo a partir de um vetor com estimativas iniciais para a raiz, com um valor para λ e com a definição do critério de parada. Em seguida, aplica-se a Equação (10) para a atualização do vetor de incógnitas x em $k=1$.

De forma geral, a inclusão do parâmetro λ faz com que o MLM se distancie do MN. Neste cenário, a ideia é fazer com que no início do processo iterativo, o valor deste parâmetro seja diferente de zero e ao longo das iterações, este tenda a zero, de forma que o MLM se torne o próprio MN (IGLESIAS e DAWSON, 2013). Neste trabalho, adotou-se a seguinte relação para a atualização deste parâmetro:

$$\lambda = \frac{Erro}{Erro_{\max}} \quad (10)$$

em que $Erro$ e $Erro_{\max}$ representam o erro cometido na k -ésima e na primeira iterações, respectivamente. Assim, como o maior erro cometido é sempre na primeira iteração, pois este é em função da primeira atualização, o valor do parâmetro λ sempre diminui ao longo do processo iterativo, e, conseqüentemente, o MLM se torna o MN. O erro pode ser computado considerando, por exemplo, as avaliações da norma Euclidiana em duas iterações consecutivas, que pode ser em relação ao vetor F ou em relação à variável x .

2.3 Problema de Otimização

Intuitivamente, otimizar significa extrair o máximo potencial de um dado processo, isto é; encontrar a melhor configuração sem ter que testar todas as possibilidades envolvidas. Com frequência, a chave para resolver um problema de otimização está tanto na definição e parametrização do problema, quanto na escolha do método que melhor se adequará à sua solução (SARAMAGO, 1999). Do ponto de vista matemático, um problema de otimização consiste na minimização ou maximização de um escalar ($f(x)$) ou um vetor com M funções objetivo ($f(x)=[f_1(x) \ f_2(x) \ \dots \ f_M(x)]$) sujeito a um vetor com N variáveis de projeto ($x=[x_1 \ x_2 \ \dots \ x_N]$), a um vetor de restrições de desigualdade ($g=[g_1 \ g_2 \ \dots \ g_{ng}]$), a um vetor de restrições de igualdade ($h=[h_1 \ h_2 \ \dots \ h_{nh}]$) e aos limites inferior (x^{inf}) e superior (x^{sup}) relativos ao vetor de variáveis de projeto.

Os passos gerais para a análise e resolução de problemas de otimização são apresentados a seguir (VANDERPLAATS, 1999; EDGAR et al., 2001):

- PASSO 1: Análise do problema em questão de forma a identificar as variáveis dependentes e independentes do processo;
- PASSO 2: Especificação do critério a ser alcançado (função objetivo em termos das variáveis definidas anteriormente);
- PASSO 3: Uso de expressões matemáticas que validam o processo e relacionam variáveis de entrada e parâmetros. Inclusão das restrições de igualdade, desigualdade e laterais;
- PASSO 4: Se o problema é complexo, pode-se tentar quebrá-lo em problemas menores ou simplificar, suas equações através de hipóteses simplificadoras;
- PASSO 5: Aplicação de uma técnica de otimização conveniente;
- PASSO 6: Verificação das respostas, examinando a sensibilidade dos resultados a mudanças nos parâmetros do processo, do algoritmo e das hipóteses utilizadas na formulação do modelo.

Os passos 1, 2 e 3 tratam da fase da formulação matemática do problema, da determinação da função objetivo e das restrições. Pode-se, a partir do uso de hipóteses, tentar simplificar o problema em análise. Por exemplo, um sistema de equações diferenciais pode, sob determinadas condições, ser simplificado a um sistema de equações algébricas que, a priori, exige-se menor custo computacional para ser avaliado. Através da análise da sensibilidade de cada variável, pode-se decidir excluir algumas variáveis que não afetam tanto a função objetivo, ou então, pode-se excluí-las através da aplicação das restrições de igualdade. O quinto passo busca o ponto ótimo do problema. A eficiência de um problema de otimização e da técnica utilizada, dependerá da estimativa inicial aplicada. Já, o passo 6, ocorre a verificação do ponto ótimo através da análise de sensibilidade do mesmo em relação às várias mudanças aplicadas nos parâmetros do processo, do algoritmo e das hipóteses utilizadas na formulação do modelo (VANDERPLAATS, 1999; EDGAR et al., 2001; LOBATO, 2008).

2.3.1 Formulação Matemática

O problema de otimização pode ser enunciado matematicamente como sendo (VANDERPLAATS, 1999; EDGAR et al., 2001):

$$\min f(x) \tag{11}$$

$$\begin{aligned}
 g(x) &\leq 0 \\
 h(x) &= 0 \\
 x^{\inf} &\leq x \leq x^{\sup}
 \end{aligned}
 \tag{12}$$

Função Objetivo: critério com o qual o projeto é otimizado, sendo esta função das variáveis de projeto. A escolha da função objetivo é baseada na natureza do problema em análise, sendo que mais de um critério poderá ser definido, isto é; deve ser satisfeito simultaneamente (SINGIRESU, 2009).

Variáveis de Projeto: as variáveis de projeto é um vetor que contém todas as variáveis independentes do processo. Estas influenciam diretamente o valor da função objetivo (podem aumentar e/ou diminuir os valores da função objetivo). A depender do contexto (geralmente na matemática), também são denominadas de *variáveis de decisão* ou de *busca*.

Restrições: são relações que definem limitações onde a solução do problema de otimização será procurada. Estas podem ser classificadas em: *i*) restrições de desigualdade (restringem a região do espaço de projeto dentro do qual seu valor deve ser maior ou igual, menor ou igual a um valor pré-estabelecido); *ii*) restrições de igualdade (estabelecem uma região do espaço onde as variáveis de projeto conferem à restrição um valor pré-determinado) e *iii*) restrições laterais (delimitam uma faixa de variação para cada variável de projeto, isto é, determina os valores máximo e mínimo que as mesmas podem atingir).

2.3.2 Classificação dos Métodos de Otimização

Para resolver este tipo de problema, duas linhas de pesquisa podem ser adotadas, a saber: a Determinística (ou clássica) e a Não-Determinística (Não Clássica ou Heurística). Os Métodos Clássicos são fundamentados em princípios do Cálculo Diferencial e Integral, isto é; fazem uso de informações sobre o gradiente da função objetivo e das restrições para a determinação da direção de busca do ótimo. De forma geral, pode-se dizer que estes possuem como grande vantagem, rápida taxa de convergência quando uma “boa” estimativa inicial para o projeto é fornecida, o que implica em um menor número de avaliações da função objetivo. Contudo, estes métodos têm uma inabilidade intrínseca em lidar com mínimos locais. Como tais métodos investem todo esforço em um único ponto do espaço de projeto, ao se

depararem com mínimos locais não conseguem avançar, convergindo prematuramente para um mínimo local (VANDERPLAATS, 1999).

Por outro lado, os Métodos Não Clássicos são fundamentados em fenômenos naturais, físicos, químicos, biológicos ou em abordagens puramente estruturais (DEB, 2001; LOBATO, 2008). Nessa metodologia, a função objetivo é avaliada várias vezes, sendo possível trabalhar com vários pontos do espaço de projeto ao mesmo tempo (população de pontos candidatos à solução do problema de otimização) em uma iteração (geração), o que naturalmente eleva o custo computacional destes métodos (DEB, 2001; LOBATO, 2008). Entretanto, esta dificuldade é compensada pela menor probabilidade que estes métodos têm de se deixarem prender em mínimos locais, isto é, são reconhecidamente métodos de busca global (DEB, 2001).

Dentre os representantes mais eficientes da classe de Métodos Clássicos, o algoritmo de Programação Quadrática Sequencial, em inglês, *Sequential Quadratic Programming* – SQP, configura-se como um dos mais empregados para a resolução de problemas de engenharia e áreas afins. Na próxima seção será apresentado, em linhas gerais, os passos básicos para a aplicação desta metodologia em um PO.

2.3.3 Programação Quadrática Sequencial

O algoritmo SQP consiste na transformação de um problema de otimização não linear em um cuja finalidade é resolver uma sequência de problemas de otimização quadráticos. Um problema de programação quadrático (*Quadratic Programming* - QP) consiste de uma função objetivo (quadrática) e restrições algébricas (lineares). Assim, o SQP resolve um subproblema QP a cada iteração, de modo que ao final do processo, a solução deste problema coincida com a solução do problema original não linear. Neste contexto, a função objetivo, geralmente não linear, é transformada em uma equivalente e simplificada quadrática (não linear). Já as restrições são linearizadas.

Em linhas gerais, o algoritmo SQP pode ser descrito por três etapas básicas, a saber (COELHO e MARIANI, 2006):

- i) A determinação para uma aproximação para a matriz Hessiana referente à função Lagrangeana;
- ii) A obtenção do problema de programação quadrática;
- iii) A determinação da direção de busca usando uma metodologia apropriada.

Matematicamente, este pode ser enunciado como:

$$\min f(x) = \frac{1}{2} d_k^T H_k d_k + \nabla f(x_k)^T d_k \quad (13)$$

$$h(x_k) + \nabla h(x_k)^T d_k = 0 \quad (14)$$

$$x_{\min} \leq x_k + d_k \leq x_{\max} \quad (15)$$

em que d_k é a direção de busca, $h(x_k)$ é a restrição de igualdade, e H_k é a matriz Hessiana da função Lagrangeana na k -ésima iteração:

$$L(x, \lambda) = f(x) + h(x)^T \lambda \quad (16)$$

em que λ representam os multiplicadores de Lagrange. Na formulação apresentada, a cada iteração, uma aproximação da matriz H deve ser obtida numericamente. Para essa finalidade, os métodos do tipo quase-Newton são os mais interessantes do ponto de vista do custo computacional, pois estes evitam o cálculo direto da matriz H , reduzindo o número de manipulações algébricas e cálculos (FLETCHER, 1987). Para essa finalidade, no presente trabalho será empregado o método de Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno (BFGS) para a atualização da matriz H (VANDERPLAATS, 1999). A equação a seguir apresenta a relação que aproxima a matriz H considerando o BFGS:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{q_k q_k^T}{q_k^T s_k} - \frac{H_k^T s_k s_k^T H_k}{s_k^T H_k s_k} \quad (17)$$

$$s_k = x_{k+1} - x_k \quad (18)$$

$$q_k = \nabla L(x_{k+1}, \lambda_{k+1}) - \nabla L(x_k, \lambda_{k+1}) \quad (19)$$

Assim, para a k -ésima iteração do problema de programação quadrática, a direção d_k é determinada usando a Equação (18). A direção de busca é utilizada para determinar o novo valor do vetor x , isto é: $x_{k+1} = x_k + \alpha d_k$, onde α é o tamanho do passo na direção de d_k de modo a produzir a redução no valor da função objetivo Lagrangeana aumentada (L_A):

$$L_A(x, \lambda, \theta) = f(x) - \lambda^T h(x) + \frac{1}{2} \theta h(x)^T h(x) \quad (20)$$

em que θ é um escalar não-negativo.

Para encontrar um novo valor para o tamanho do passo, pode-se empregar, por exemplo, o BFGS. Este processo é repetido até que um determinado critério de parada seja satisfeito.

2.4 Bacias de Atração e Análise da Estabilidade

O estudo das bacias de atração nada mais é do que o estudo da convergência de um algoritmo. Matematicamente, um conjunto fechado de condições iniciais que se aproximam de um determinado atrator é chamado de bacias de atração (CONINK, 2002). Assim, uma bacia de atração pode ser construída através do estudo de convergência, por exemplo, de sistemas não lineares em que um conjunto de condições iniciais é empregado. Cada condição inicial evolui até encontrar ou não a solução correspondente. Neste caso, o caminho entre a condição inicial e a solução é denominado de órbitas que tendem ou não para algum conjunto de pontos atratores (CONINK, 2002).

Já a estabilidade de um ponto pode ser aferida pelo computo dos autovalores da equação característica. Matematicamente, os autovalores (β) de uma matriz A pode ser determinado via resolução da seguinte equação:

$$\det(\beta I - A) = 0 \quad (21)$$

em que I é a matriz identidade com dimensão igual ao número de incógnitas do problema. A partir da avaliação dos autovalores, se todos os mesmos forem negativos, o sistema é estável. Por outro lado, se pelo menos um destes for positivo, o sistema é dito instável (BEQUETTE, 1998). Para o caso em que o sistema em análise é não linear, a matriz A é a própria matriz Jacobiana.

Obter a solução desta equação é trivial para equações mais simples, como as de primeira, segunda e terceira ordens (que possuem solução analítica conhecida). Porém, se o polinômio for de quarta ordem ou superior, deve-se determiná-las numericamente. O Método de Routh (Routh, 1905) determinar se alguma das raízes é positiva (instável) sem necessariamente calcular as raízes da função característica (Routh, 1905). Esse método envolve toda a análise dos coeficientes do polinômio característico (*Routh Array*). O teste dos coeficientes nesta abordagem é conhecido como Critério de Estabilidade de Routh (*Routh Stability Criterion*), que é baseado na seguinte forma polinomial:

$$a_n \lambda^n + a_{n-1} \lambda^{n-1} + \dots + a_j \lambda + a_0 = 0 \quad (22)$$

Nesta abordagem assume-se que todos os coeficientes a_n são positivos. Se isto não for verdade, então multiplica-se esta Equação (22) por -1. A condição necessária para a estabilidade é que todos os coeficientes da Equação (22) sejam positivos. Se algum dos

coeficientes for negativo ou zero, então pelo menos um autovalor é positivo ou zero, mostrando-nos que a equação é instável. Porém, mesmo que todos os termos da Equação (22) sejam positivos não se pode afirmar que o sistema é estável.

No próximo capítulo é apresentada a metodologia considerada para a resolução de sistemas não lineares usando uma técnica de otimização.

3 METODOLOGIA

Conforme destacado anteriormente, este trabalho tem por objetivo propor e resolver um problema de otimização para fins da determinação de raízes em sistemas de equações não lineares. Para essa finalidade considere um sistema não linear composto por n equações:

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{bmatrix} = 0 \quad (23)$$

Neste caso, ao invés de considerar os tradicionais métodos para a resolução de sistemas não lineares, conforme visto no capítulo anterior como metodologia numérica, será empregado o algoritmo SQP. Assim, o problema original deve ser reescrito como um equivalente de otimização. Este pode ser facilmente convertido considerando a seguinte relação:

$$f(x) = \sum_{i=1}^n (F_i)^2 \quad (24)$$

Matematicamente, essa relação pode ser interpretada da seguinte forma. No sistema não linear deseja-se obter o valor do vetor x de modo que cada uma das i -ésimas equações F sejam iguais a zero. Alternativamente a este procedimento, pode-se obrigar o funcional f a ter o menor valor possível (por se tratar de equação com expoente par, o menor valor tem de ser obrigatoriamente muito próximo a zero). Assim, o somatório de todas as equações não lineares deve ser o mais próximo possível de zero, o que significa encontrar um valor de x que satisfaz o sistema de equações não lineares. Com o procedimento descrito, transformou-se um problema cujo objetivo é o de encontrar a solução de um sistema de equações algébricas em um equivalente de otimização.

No próximo capítulo são apresentados os resultados obtidos com a aplicação desta abordagem em uma série de estudos de caso.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a aplicação de cada uma das abordagens consideradas (algoritmo SQP, MN e o MLM), quatro estudos de caso são apresentados em sequência. Em cada análise foi realizado o estudo da convergência considerando diferentes condições iniciais para a geração das respectivas bacias de atração. Para essa finalidade, em todos os algoritmos, foram consideradas as mesmas condições iniciais considerando 1000 pontos igualmente espaçados, sendo que para cada problema o domínio considerado foi igual a: $[-22]$ para o primeiro estudo de caso, $[-1,7 \ 1,7]$ para o segundo estudo de caso, $[-10 \ 10]$ (exceto para o reator CSTR, onde foi utilizado o intervalo $[0 \ 10]$) para o terceiro estudo de caso e $[0 \ 5]$ para o último estudo de caso. Para finalizar o procedimento iterativo em cada uma das abordagens, considerou-se como critério de parada o valor da função objetivo ou da norma Euclidiana relativo ao sistema não-linear menor que 10^{-8} . Além disso, para o MN e para o MLM, foram consideradas as derivadas analíticas para a definição da matriz Jacobiana.

4.1 Função Matemática Polinomial de Terceiro Grau

Considere o seguinte polinômio $p(z) = z^3 - 1$ (SPENGLER, 2014). Fazendo $z = x + iy$ (x, y pertence aos números reais) e substituindo na equação do polinômio têm-se:

$$(x + iy)^3 - 1 = 0 \quad (25)$$

ou seja:

$$(x^3 + 3xy^2 - 1) + i(3x^2y - y^3) = 0 \quad (26)$$

Assim, a identidade acima é verificada para o seguinte sistema não linear:

$$x^3 + 3xy^2 - 1 = 0 \quad (27)$$

$$3x^2y - y^3 = 0 \quad (28)$$

Esse sistema apresenta três soluções, a saber: $(1;0)$, $\left(\frac{-1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$ e $\left(\frac{-1}{2}, \frac{-\sqrt{3}}{2}\right)$.

Inicialmente será realizada a análise da estabilidade referente às raízes do problema proposto. Neste contexto, o polinômio característico deve ser determinado, conforme a Equação (21), para que os autovalores (β) sejam computados. Assim, o polinômio

característico é dado pelo cálculo do determinante da seguinte matriz, computada em termos da Jacobiana:

$$\begin{pmatrix} \beta - (3x_1^2 - 3x_2^2) & 6x_1x_2 \\ -6x_1x_2 & \beta - (3x_1^2 - 3x_2^2) \end{pmatrix} \quad (29)$$

Substituindo o valor de cada raiz em x_1 e x_2 , o determinante da matriz referente a Equação (29) pode ser calculado. Além disso, a partir dos valores dos autovalores encontrados, pode-se analisar a estabilidade de cada uma das raízes deste problema. Na Tabela 1 são apresentados os respectivos autovalores para cada uma das raízes encontradas. Nesta tabela percebe-se que, como os sinais dos autovalores são opostos, todas as raízes encontradas são instáveis.

Tabela 1: Autovalores e análise da estabilidade para o problema do polinômio de grau três (Fonte: Autoria própria).

Solução ($x_1; x_2$)	Autovalores ($\lambda_1; \lambda_2$)	Análise
(1;0)	(3;3)	Instável
$\left(\frac{-1}{2}; \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$	$\left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2}I\sqrt{3}; -\frac{3}{2} - \frac{3}{2}I\sqrt{3}\right)$	Instável
$\left(\frac{-1}{2}; -\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$	$\left(-\frac{3}{2} + \frac{3}{2}I\sqrt{3}; -\frac{3}{2} - \frac{3}{2}I\sqrt{3}\right)$	Instável

Para avaliar a convergência da metodologia proposta, diferentes estimativas iniciais são consideradas. Neste caso, uma malha de 1000×1000 foi utilizada para a geração das bacias de atração. Para uma boa visualização dos resultados, na Tabela 2 é apresentado o mapa de cores considerado nesta análise.

Tabela 2: Classificação de cores para o problema do polinômio de grau três (Fonte: Autoria própria).

Solução	Referência de Cor
(1,0)	Vermelho
$\left(\frac{-1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$	Azul
$\left(\frac{-1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$	Verde
Diverge	Preto

Método de Newton

A Figura 2 apresenta a bacia de atração para o problema em análise considerando o MN. Nesta figura é possível observar que este problema apresenta três raízes simétricas e uma arquitetura bem particular para as bacias de atração, isto é; uma estimativa inicial que está próxima a uma determinada raiz não, necessariamente, converge para esta raiz. Além disso, ressalta-se que, apesar de todas as raízes serem instáveis, o MN consegue encontrar todas, isto é; a estabilidade não tem ligação com o desempenho do algoritmo de busca pelas raízes.

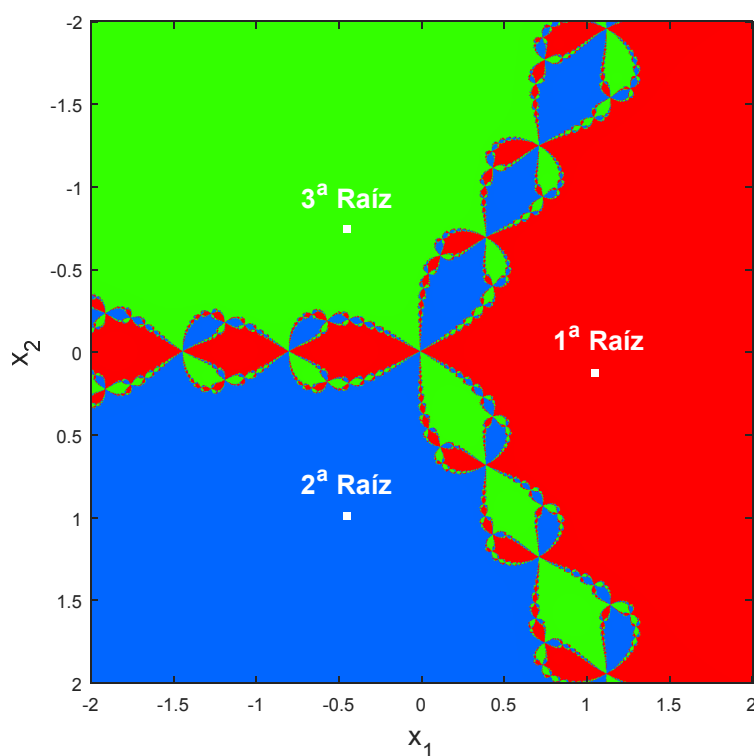


Figura 2: Bacia de atração para o problema polinomial de terceiro grau usando o MN
(Fonte: Autoria própria).

A Tabela 3 apresenta um resumo do percentual de convergência para cada uma das três raízes considerando o MN. Nesta tabela observa-se que o MN, para a malha considerada para a geração das bacias de atração, sempre convergiu para uma das raízes, sendo que a proporção, praticamente, foi de 1/3 para cada raiz. Isto se deve a simetria apresentada na Figura 2.

Tabela 3: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau três considerando o MN (Fonte: Autoria própria).

Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
35,2798 %/8	32,3601%/8	32,3601 %/8	0 %

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Método de Levenberg-Marquardt

A Figura 3 apresenta a bacia de atração para o problema em análise considerando o MN para o parâmetro de Levenberg-Marquardt (λ) igual a zero. Nesta situação, o MLM é o próprio MN, assim, essa a Figura 3 tem exatamente as mesmas características da Figura 2.

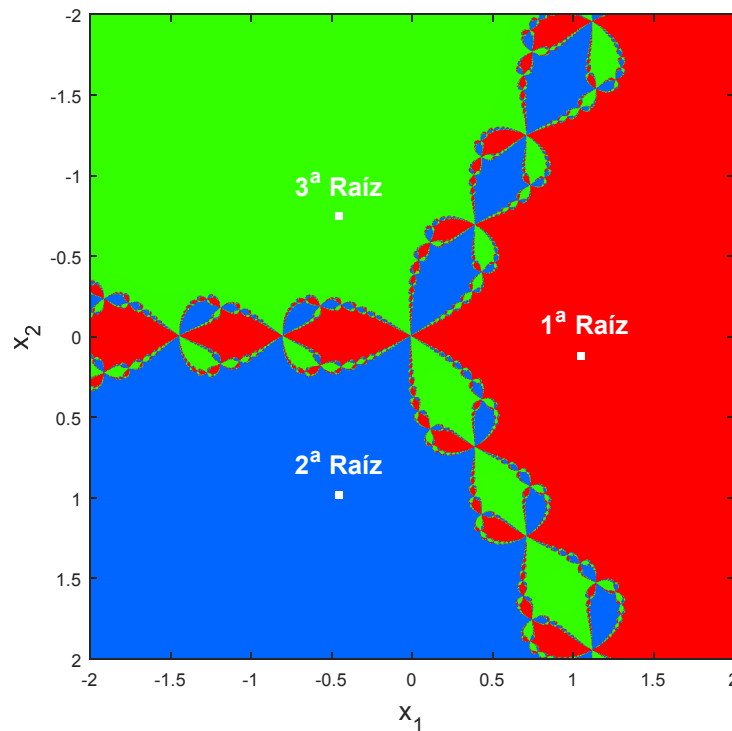


Figura 3: Bacia de atração para o problema polinomial de terceiro grau usando o MLM para $\lambda=0$ (Fonte: Autoria própria).

Para avaliar a influência do parâmetro λ na qualidade da solução obtida, a Tabela 4 apresenta a análise de convergência considerando diferentes valores para esse parâmetro. Nesta tabela é possível observar que, para estes parâmetros, não existem diferenças significativas no que tange a convergência, bem como o número de iterações requeridas pelo MLM. Além disso, para cada um destes parâmetros, também se observa uma pequena faixa de condições iniciais que não convergem. Todavia, ressalta-se que inclusão deste parâmetro, bem como o seu aumento, naturalmente, mudarão as

características de convergência do MN, apesar disto não ter sido observado nesta aplicação.

Tabela 4: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau três considerando o MLM (Fonte: Autoria própria).

λ	Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
0,001	35,5200%/7	32,2249%/7	32,2249%/7	0,0302%
0,1	35,5250%/7	32,2190%/7	32,2190%/7	0,0370%
1	35,5096%/7	32,2077%/7	32,2077%/7	0,0750%
10	35,4414%/8	32,1590%/8	32,1590%/8	0,0240%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Programação Quadrática Sequencial

A Figura 4 apresenta a bacia de atração para o problema em análise considerando o algoritmo SQP. Nesta figura observa-se uma arquitetura bem diferente das obtidas considerando o MN e o MLM. Esta diferença deve estar relacionada com a forma com que cada metodologia é proposta. Assim, como o SQP tem uma concepção conceitual bem diferente dos métodos iterativos para a resolução de sistemas não lineares, o mesmo encontrou maiores dificuldades para a obtenção da solução.

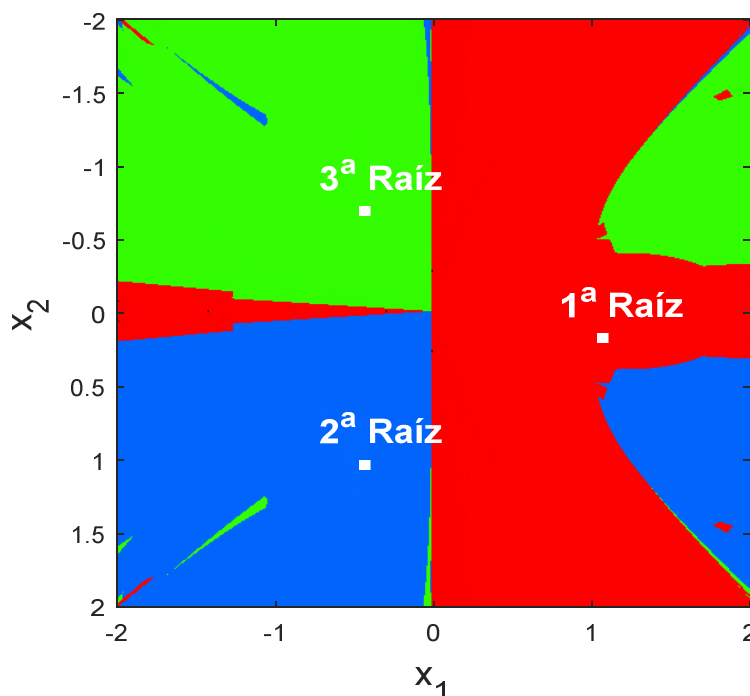


Figura 4: Bacia de atração para o problema polinomial de terceiro grau usando o SQP (Fonte: Autoria própria).

A Tabela 5 apresenta a análise de convergência considerando o algoritmo SQP. Nesta tabela observa-se que o SQP, em quase sua totalidade, convergiu para uma das três raízes, todavia, em proporções diferentes do MN e do MLM, e com um número superior de iterações quando comparado com as Tabelas 3 e 4.

Tabela 5: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau três considerando o SQP (Fonte: Autoria própria).

Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
40,6430%/43	29,6418%/40	29,6418 %/40	0,0734%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Já na Tabela 6 é apresentado um consolidado dos resultados obtidos pelas metodologias propostas para a resolução do problema em análise. Nesta observa-se que existe uma clara diferença no que tange o custo computacional entre as metodologias para a resolução de sistemas não lineares e pela técnica de otimização. Essa última requer um número bem superior de iterações média para a obtenção da solução do problema.

Tabela 6: Consolidado dos resultados obtidos para o problema do polinômio de grau três considerando o MN, o MLM e o SQP (Fonte: Autoria própria).

Metodologia	Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
MN	35,2798%/8	32,3601%/8	32,3601%/8	0%
MLM ($\lambda=0,001$)	35,5200%/7	32,2249%/7	32,2249%/7	0,0302%
SQP	40,6430%/43	29,6418%/40	29,6418%/40	0,0734%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

4.2 Função Matemática Polinomial de Quinto Grau

Considere o seguinte polinômio $p(z)=z^5-1$, conforme considerado por Spengler (2014). Assim como no estudo de caso anterior, fazendo $z = x + iy$ (x, y pertencente aos números reais) e substituindo na equação do polinômio têm-se o seguinte sistema de equações não lineares:

$$x^5 - 10x^3y^2 + 5xy^4 - 1 = 0 \quad (30)$$

$$5x^4y - 10x^2y^3 + y^5 = 0 \quad (31)$$

Esse sistema apresenta cinco soluções, a saber: $(1;0)$, $\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5-\sqrt{5})\right)\right)$, $\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5-\sqrt{5})\right)\right)$, $\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5+\sqrt{5})\right)\right)$ e $\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5+\sqrt{5})\right)\right)$.

Para realizar a análise de estabilidade, o polinômio característico deverá ser determinado (ver a Equação (21)) de modo que os autovalores (β) sejam calculados. Para essa finalidade, o polinômio característico é dado pelo cálculo do determinante da seguinte matriz, obtida considerando a Jacobiana do sistema de equações não lineares apresentado:

$$\begin{pmatrix} \beta - 5x_1^4 + 30x_1^2x_2^2 - 5x_2^4 & 20x_1^3x_2 - 20x_1x_2^3 \\ -20x_1^3x_2 + 20x_1x_2^3 & \beta - 5x_1^4 + 30x_1^2x_2^2 - 5x_2^4 \end{pmatrix} \quad (32)$$

Substituindo o valor de cada uma das cinco raízes no lugar de x_1 e x_2 , o determinante da matriz representada pela Equação (32) pode ser calculado, com posterior determinação dos autovalores. Na Tabela 7 são apresentados os respectivos autovalores para cada uma das raízes encontradas. Nesta tabela percebe-se que, como os sinais dos autovalores são opostos, todas as raízes encontradas são instáveis.

Tabela 7: Autovalores e análise da estabilidade para o problema do polinômio de grau cinco (Fonte: Autoria própria).

Solução ($x_1; x_2$)	Autovalores ($\lambda_1; \lambda_2$)	Análise
(1;0)	(5;5)	Instável
$\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5-\sqrt{5})\right)\right)$	$\left(-\frac{5}{4} - \frac{5\sqrt{5}}{4} + \frac{5}{4}I\sqrt{10-2\sqrt{5}}; -\frac{5}{4} - \frac{5\sqrt{5}}{4} - \frac{5}{4}I\sqrt{10-2\sqrt{5}}\right)$	Instável
$\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5-\sqrt{5})\right)\right)$	$\left(-\frac{5}{4} - \frac{5\sqrt{5}}{4} + \frac{5}{4}I\sqrt{10-2\sqrt{5}}; -\frac{5}{4} - \frac{5\sqrt{5}}{4} - \frac{5}{4}I\sqrt{10-2\sqrt{5}}\right)$	Instável
$\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5+\sqrt{5})\right)\right)$	$\left(-\frac{5}{4} + \frac{5\sqrt{5}}{4} + \frac{5}{4}I\sqrt{10+2\sqrt{5}}; -\frac{5}{4} + \frac{5\sqrt{5}}{4} - \frac{5}{4}I\sqrt{10+2\sqrt{5}}\right)$	Instável
$\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5+\sqrt{5})\right)\right)$	$\left(-\frac{5}{4} + \frac{5\sqrt{5}}{4} + \frac{5}{4}I\sqrt{10+2\sqrt{5}}; -\frac{5}{4} + \frac{5\sqrt{5}}{4} - \frac{5}{4}I\sqrt{10+2\sqrt{5}}\right)$	Instável

Para avaliar a convergência da metodologia proposta, foi considerada uma malha com 1000×1000 estimativas iniciais. O mapa de cores definido para a análise das bacias de atração é apresentado na Tabela 8.

Tabela 8: Classificação de cores para o problema do polinômio de grau cinco (Fonte: Autoria própria).

Solução	Referência de Cor
$(1,0)$	Vermelho
$\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5-\sqrt{5})\right)\right)$	Azul
$\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5-\sqrt{5})\right)\right)$	Verde
$\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5+\sqrt{5})\right)\right)$	Amarelo
$\left(\frac{1}{4}(-1-\sqrt{5}), \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(5+\sqrt{5})\right)\right)$	Ciam
Diverge	Preto

Método de Newton

A Figura 5 apresenta a bacia de atração para o polinômio de quinto grau considerando o MN. Nesta figura é possível observar a simetria entre as cinco raízes simétricas, bem como uma bacia de atração com uma arquitetura bem particular. Neste caso, assim como no problema anterior, uma estimativa inicial que está próxima a uma determinada raiz não, necessariamente, converge para esta raiz, isto é; tem-se que considerar o efeito do atrator. Além disso, ressalta-se que, apesar de todas as raízes serem instáveis, o MN consegue encontrar todas.

A Tabela 9 apresenta um resumo do percentual de convergência para cada uma das cinco raízes encontradas. Nesta tabela observa-se que o MN, para a malha considerada para a geração das bacias de atração, sempre convergiu para uma das raízes, sendo que a segunda e a terceira raízes foram as mais encontradas, seguidas pela quarta e quinta, e por último a primeira. Todavia, com proporções próximas, visto que o problema apresenta simetria.

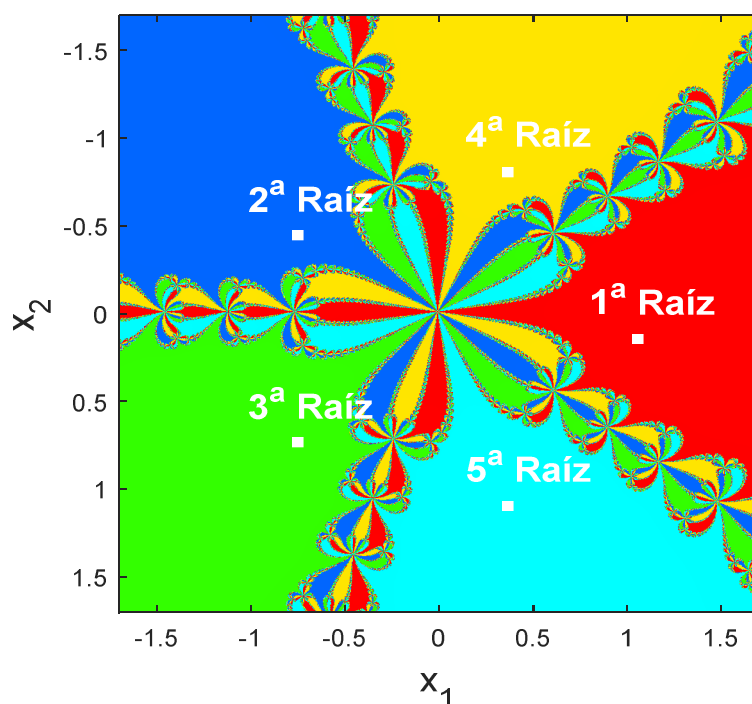


Figura 5: Bacia de atração para o problema polinomial de quinto grau usando o MN
(Fonte: Autoria própria).

Tabela 9: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau cinco considerando o MN (Fonte: Autoria própria).

Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Converge (4ªraiz)/ Γ	Converge (5ªraiz)/ Γ	Não Converge
17,7168%/12	21,5511%/12	21,5511%/12	19,5905%/11	19,5905%/11	0%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Método de Levenberg-Marquardt

A Figura 6 apresenta a bacia de atração para o problema em análise considerando o MN para o parâmetro de Levenberg-Marquardt (λ) igual a zero. Como esperado, a Figura 6 converge para a própria Figura 5, visto que o MLM para esse valor de λ é o próprio MN.

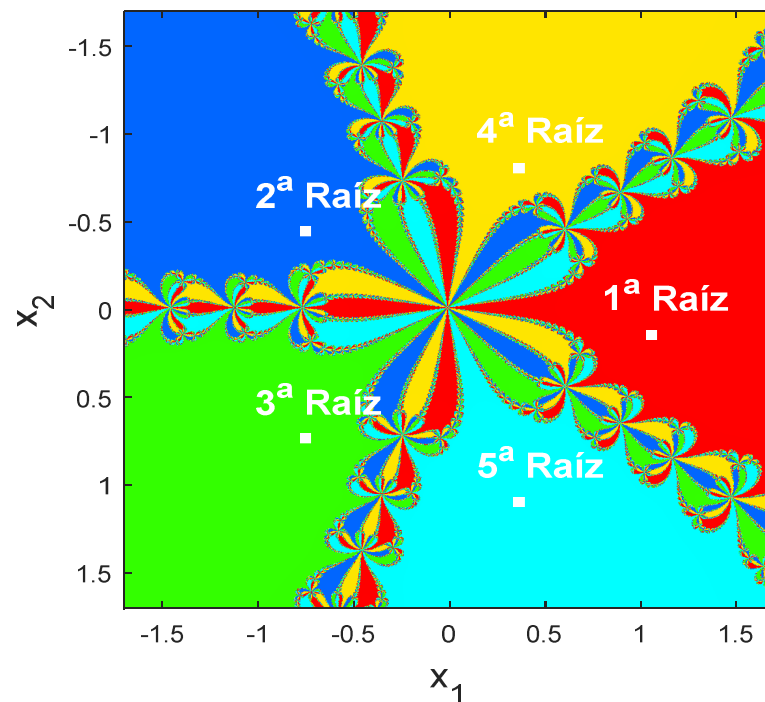


Figura 6: Bacia de atração para o problema polinomial de quinto grau usando o MLM para $\lambda=0$ (Fonte: Autoria própria).

A Tabela 10 apresenta a influência do parâmetro λ na qualidade da solução obtida. Nesta tabela é possível observar que, para estes parâmetros, foram observadas diferenças significativas no que tange a convergência para uma determinada raiz, bem como o número de iterações requeridas pelo MLM. Todavia, para o maior valor de λ , observou-se uma maior taxa de divergência. Isso se deve ao fato de que a inclusão deste fator tende a modificar as características do MN.

Tabela 10: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau cinco considerando o MLM (Fonte: Autoria própria).

λ	Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Converge (4ª Raiz)/ Γ	Converge (5ª raiz)/ Γ	Não Converge
0,001	17,9708%/9	20,8464%/9	20,8464%/9	19,7949%/9	19,7949%/9	0,7466%
0,1	17,8483%/8	20,7313%/8	20,7313%/8	19,6646%/8	19,6645%/8	1,3698%
1	17,8966%/9	20,7841%/8	20,7841%/8	19,7325%/9	19,7325%/9	1,0702%
10	17,5314%/9	20,4161%/8	20,4161%/8	19,3581%/9	19,3581%/9	2,9202%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Programação Quadrática Sequencial

A Figura 7 apresenta a bacia de atração para o polinômio de quinto grau via aplicação do algoritmo SQP. Nesta figura também se observa, assim como na primeira

aplicação, uma arquitetura bem diferente das obtidas considerando o MN e o MLM. Como mencionado anteriormente, tal discrepância entre as bacias deve estar relacionada com a forma de trabalho de cada uma das abordagens, isto é; o SQP atua em um problema que foi reescrito com um de otimização, diferentemente dos iterativos empregados para a resolução de sistemas não lineares. Todavia, ressalta-se que, definir uma estimativa inicial próxima a uma dada raiz não implica que a mesma será encontrada ao final do processo iterativo, pois depende da atratividade de cada raiz.

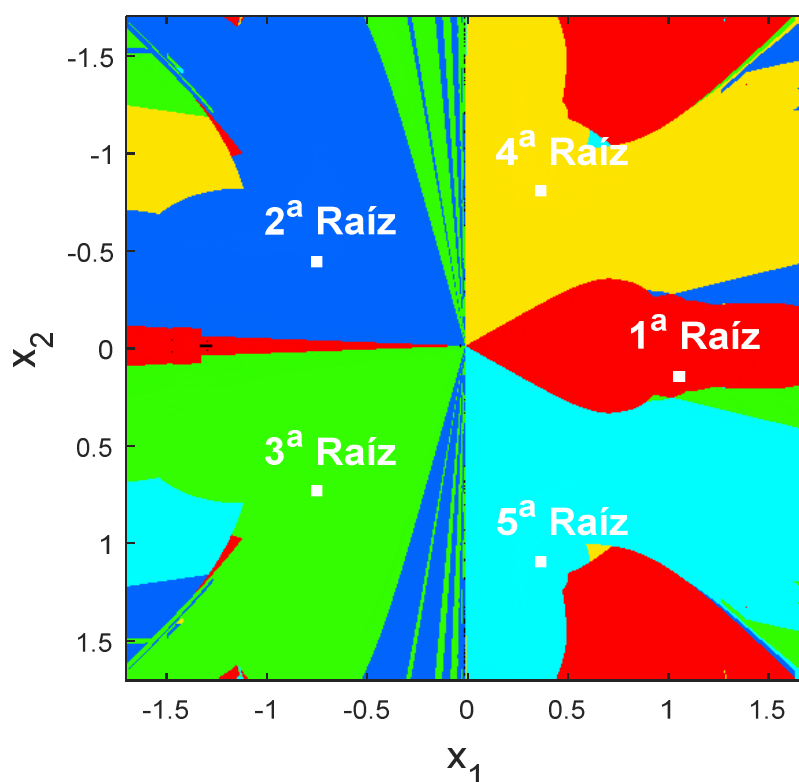


Figura 7: Bacia de atração para o problema polinomial de quinto grau usando o SQP
(Fonte: Autoria própria).

A Tabela 11 apresenta a análise de convergência considerando o algoritmo SQP. Nesta tabela observa-se que o SQP apresentou maior taxa de convergência para a quarta e quinta raízes, em seguida para a segunda e terceira e, por último para a primeira. Além disso, observa-se, quando comparado com o MN e o MLM, um número superior de iterações para a obtenção da solução deste problema.

Tabela 11: Análise da convergência das raízes do problema do polinômio de grau cinco considerando o SQP (Fonte: Autoria própria).

Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Converge (4ª raiz)/ Γ	Converge (5ª raiz)/ Γ	Não Converge
16,7912%/39	23,3872%/42	23,3872%/42	38,0501%/18	38,0501%/18	0,0424%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Já na Tabela 12 é apresentado um consolidado dos resultados obtidos pelas metodologias propostas para a obtenção das bacias de atração. Assim como na aplicação anterior, também se observa uma diferença em relação ao custo computacional para as metodologias empregadas. Sendo que os resultados obtidos pelo MLM são os que apresentaram menor custo, seguido pelo MN e finalmente pelo SQP. Também se destaca um aumento na taxa de divergência para o MLM para ($\lambda=0,001$) em relação as outras duas abordagens.

Tabela 12: Consolidado dos resultados obtidos para o problema do polinômio de grau cinco considerando o MN, o MLM e o SQP (Fonte: Autoria própria).

Método aplicado	Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Converge (4ª raiz)/ Γ	Converge (5ª raiz)/ Γ	Não Converge
MN	17,7168%/12	21,5511%/12	21,5511%/12	19,5905%/11	19,5905%/11	0%
MLM ($\lambda=0,001$)	17,9708%/9	20,8464%/9	20,8464%/9	19,7949%/9	19,7949%/9	0,7466%
SQP	16,7912%/39	23,3872%/42	23,3872%/42	38,0501%/18	38,0501%/18	0,0424%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

4.3 Reator CSTR

Considere um reator CSTR não isotérmico em que um reagente A é transformado em um produto B via uma reação exotérmica de primeira ordem em que a constante de reação é função da temperatura. O reator é resfriado pela ação de um fluido refrigerante em que a temperatura da camisa, praticamente, é mantida constante durante todo o processo. Matematicamente, o modelo adimensionalizado que representa o processo descrito é representado um sistema composto por equações de balanço de massa para os componentes A e B, bem como pela equação de balanço de energia dentro do reator (PINTO e LAGE, 2001):

$$\frac{dx_A}{d\tau} = 1 - x_A - \Theta_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (33)$$

$$\frac{dx_B}{d\tau} = -x_B + \Theta_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (34)$$

$$\frac{d\gamma}{d\tau} = (1-\gamma) + \beta(\gamma_c - \gamma) + \Theta_R \Delta h_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (35)$$

em que x_A e x_B representam as concentrações adimensionais de A e B, respectivamente, γ representa a temperatura adimensional, τ é tempo adimensional, Θ_R , ΔE_R , β , Δh_R e γ_c são grupos paramétricos definidos em função das propriedades do fluido, do tempo de residência, da cinética da reação e da temperatura, respectivamente, conforme discutido em detalhes por Pinto e Lage (2001).

No modelo acima, ressalta-se que o sistema representado pelas Equações (33) e (35) é desacoplado em relação à variável x_B . Assim, o processo pode ser simulado separadamente para as variáveis x_A e γ . De posse destes valores, pode-se determinar o correspondente perfil para a variável x_B . Além disso, para padronizar a apresentação dos resultados, será considerado que x_1 corresponde a x_A e que x_2 corresponde a γ .

Definindo os seguintes parâmetros (PINTO e LAGE, 2001): $\Theta_R=50$; $\Delta E_R=10$; $\beta=1$; $\Delta h_R=10$ e $\gamma_c=1$, o estado estacionário correspondente as Equações (33) e (35) é composto por três soluções, a saber: 1ª Raiz ([0,997430; 1,012852]); 2ª Raiz ([0,841829; 1,790857]) e 3ª Raiz ([0,111604; 5,441978]). Neste contexto, para realizar a análise de estabilidade, computa-se o polinômio característico em função da seguinte matriz, definida em função da Jacobiana do sistema não linear que define o estado estacionário:

$$\begin{pmatrix} \beta+1+50\exp\left(-\frac{10}{x_2}\right) & \frac{500x_1 \exp\left(-\frac{10}{x_2}\right)}{x_2^2} \\ -500\exp\left(-\frac{10}{x_2}\right) & \beta+2-\frac{500x_2 \exp\left(-\frac{10}{x_2}\right)}{x_2^2} \end{pmatrix} \quad (36)$$

Substituindo o valor de cada uma das três raízes no lugar de x_1 e x_2 , o determinante da matriz representada pela Equação (36) pode ser calculado, sendo obtido posteriormente os autovalores. Na Tabela 13 são apresentados os respectivos autovalores para cada uma das raízes encontradas. Nesta tabela percebe-se que a primeira e a terceira raízes são estáveis, visto que os todos os autovalores são negativos.

Já a segunda raiz tem um dos autovalores positivo, o que resulta em uma solução instável.

Tabela 13: Autovalores e análise da estabilidade para o problema do reator CSTR

(Fonte: Autoria própria).

Solução	Autovalores ($\lambda_1; \lambda_2$)	Análise
1ª Raiz	(-1,0034; -1,7486)	Estável
2ª Raiz	(2,6929; -0,9491)	Instável
3ª Raiz	(-3,0203; -4,9400)	Estável

Para avaliar a convergência da metodologia proposta, considera-se também uma malha com 1000×1000 estimativas iniciais e o mapa de cores, conforme a Tabela 14.

Tabela 14: Classificação de cores para o problema do reator CSTR (Fonte: Autoria própria).

Solução	Referência de Cor
1ª Raiz	Vermelho
2ª Raiz	Verde
3ª Raiz	Azul
Diverge	Preto

Método de Newton

A Figura 8 apresenta a bacia de atração para o problema do reator CSTR considerando o MN. Nesta figura é possível que, diferentemente dos problemas matemáticos, não existe uma simetria entre as raízes, devido à complexidade inerente que este tipo de problema apresenta. Além disso, conforme observado nesta figura e na Tabela 15, a maior parte das estimativas iniciais converge para a terceira raiz, mesmo aquelas estimativas muito próximas a primeira e a segunda raízes. Isto se deve a capacidade atrativa que a terceira raiz apresenta. Para este caso ressalta-se que o número médio de iterações requeridas para a obtenção da terceira raiz é superior aos requeridos para as outras raízes. Finalmente, também é possível observar que para valores da temperatura (x_2) próximas a zero para qualquer concentração do componente A (x_1) no domínio de $[-10, 10]$, existem inúmeras condições iniciais que divergem.

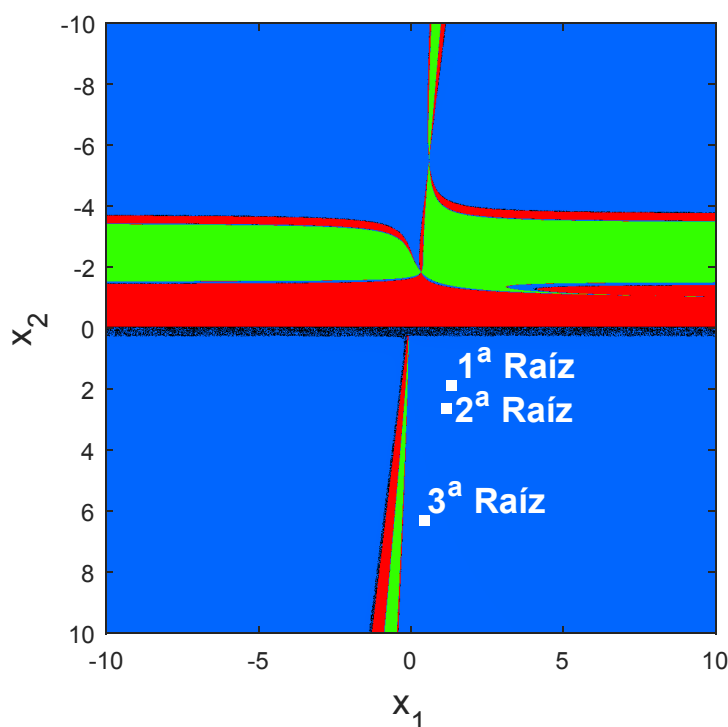


Figura 8: Bacia de atração para o problema do reator CSTR usando o MN (Fonte: Autoria própria).

Tabela 15: Análise da convergência das raízes do problema do reator CSTR considerando o MN (Fonte: Autoria própria).

Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
8,8506%/5	10,3192%/6	79,6209%/11	1,2088%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Método de Levenberg-Marquardt

As Figuras 9 e 10 apresentam as bacias de atração para o problema em análise considerando o MN para o parâmetro de Levenberg-Marquardt (λ) igual a 0,1 e 1, respectivamente. Na Figura 9 percebe-se uma certa similaridade com a Figura 8, todavia, com um número bem maior de estimativas iniciais que não convergem, conforme a Tabela 16. Este comportamento é ampliado para λ igual a 1, sendo possível observar que, a depender do valor deste parâmetro, o MLM pode convergir para raízes diferentes para mesma condição inicial.

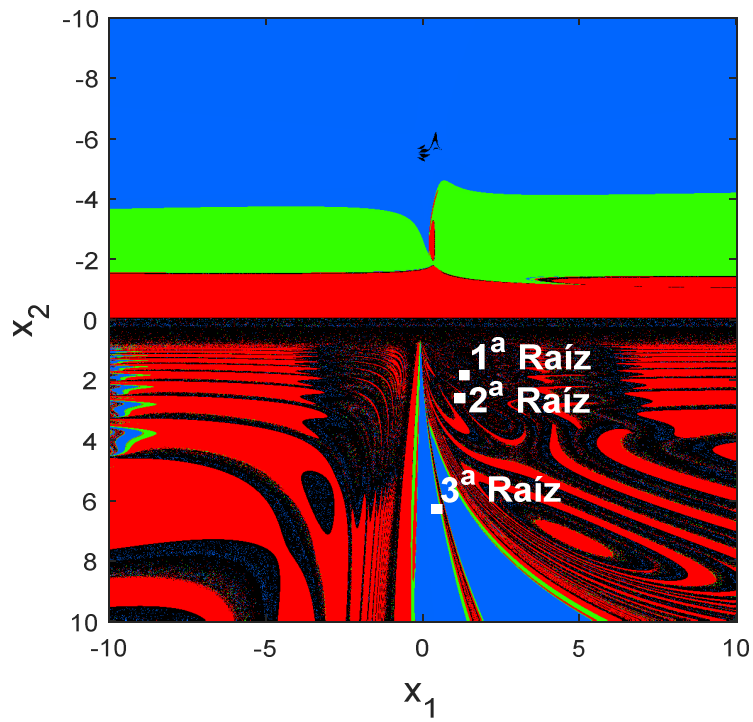


Figura 9: Bacia de atração para o problema do reator CSTR usando o MLM para $\lambda=0,1$
(Fonte: Autoria própria).

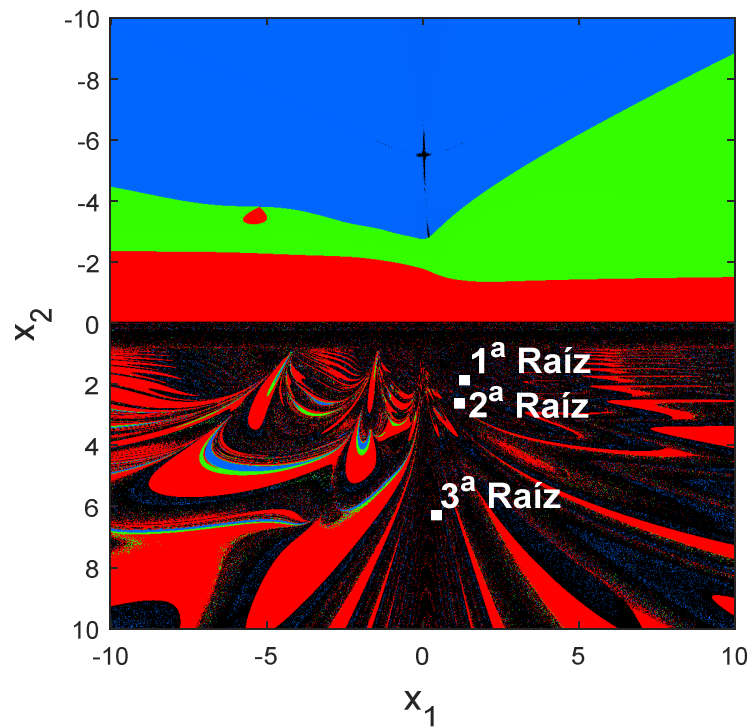


Figura 10: Bacia de atração para o problema do reator CSTR usando o MLM para $\lambda=1$
(Fonte: Autoria própria).

Tabela 16: Análise da convergência das raízes do problema do reator CSTR considerando o MLM (Fonte: Autoria própria).

λ	Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
0,001	29,1348%/14	11,3777%/7	36,8884%/12	22,5991%
0,1	27,6692%/14	13,1338%/8	35,9011%/11	23,2969%
1	23,1282%/13	15,8674%/10	28,2782%/17	32,7262%
10	28,9574%/14	18,4140%/11	18,9425%/17	33,6861%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Ressalta-se ainda nesta tabela que o aumento do parâmetro λ faz com que o MLM aumente o número de estimativas iniciais que divergem. Em termos do número de iterações requeridas, observa-se que o aumento deste parâmetro não resultou em maiores custos computacionais.

Programação Quadrática Sequencial

A Figura 11 apresenta a bacia de atração para o problema do reator CSTR via aplicação do algoritmo SQP considerando o intervalo [0 10].

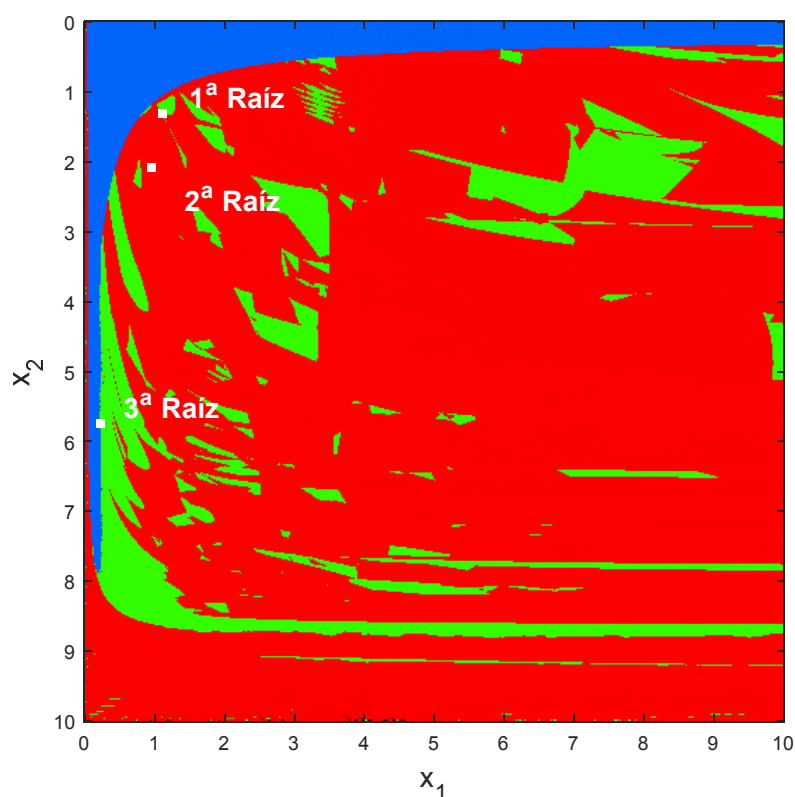


Figura 11: Bacia de atração para o problema do reator CSTR usando o SQP (Fonte: Autoria própria).

Nesta figura observa-se que, praticamente, todas as estimativas iniciais convergem para uma das raízes, conforme apresentado na Tabela 17.

Tabela 17: Análise da convergência das raízes do problema do reator CSTR considerando o SQP (Fonte: Autoria própria).

Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
80,1908%/50	12,5024%/52	7,3020%/76	0,0048%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Na Figura 12 é apresentado o plano de fases para esta aplicação. Para obter esta figura, o problema diferencial original foi simulado considerando diferentes condições iniciais de modo que, para cada uma, possa ser plotado as duas variáveis dependentes, a saber, x_1 (x_A) e x_2 (γ). Para essa finalidade utilizou-se o Método de Runge-Kutta 4ª Ordem 100 pontos de discretização. Nesta figura observa-se que, conforme a análise de estabilidade realizada e apresentada na Tabela 13, as linhas do plano não convergem para a segunda raiz, já que esta é instável. Já para a primeira e terceiras raízes, observa-se a convergências das linhas para as mesmas, visto que elas são estáveis. Neste caso, conforme as condições iniciais consideradas, a maioria das linhas do plano convergem para a primeira raiz

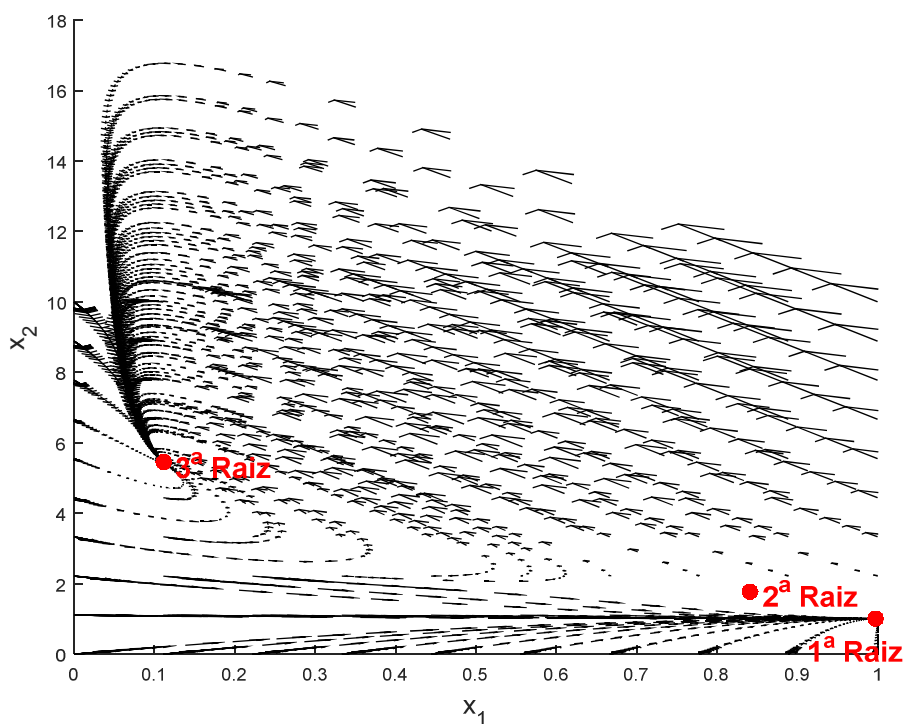


Figura 12: Plano de fases para o problema do reator CSTR (Fonte: Autoria própria).

4.4 Reator Biológico

O último estudo de caso consiste de um reator biológico, em que são considerados os seguintes modelos para a concentração de células e de substrato:

$$\frac{dx_1}{dt} = (\mu - D)x_1 \quad (37)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = D(x_{2f} - x_2) + \frac{\mu x_1}{Y} \quad (38)$$

$$\mu = \frac{\mu_{\max} x_2}{k_m + x_2 + k_i x_2^2} \quad (39)$$

em que x_1 é a concentração de células (biomassa), x_2 é a concentração de substrato, D é a taxa de diluição ($0,3 \text{ h}^{-1}$), μ é a cinética da reação (neste caso inibição por substrato), e que apresenta os seguintes parâmetros (BEQUETTE, 1998): x_{2f} (4 g/L), $\mu_{\max}$ ($0,53 \text{ h}^{-1}$), k_m ($0,12 \text{ g/L}$), Y ($0,4$) e k_i ($0,4545 \text{ L/g}$).

Considerando o problema em estado estacionário e esse conjunto de parâmetros, este apresenta três soluções: 1ª Raiz ($[0; 4]$), 2ª Raiz ($[0,995; 1,5302]$) e 3ª Raiz ($[1,5123; 0,1745]$). De posse destes valores, tem-se a seguinte matriz, definida em função da Jacobiana do sistema de equações não lineares:

$$\begin{pmatrix} \beta - \frac{0,53x_2}{0,12 + x_2 + 0,4545x_2^2} + 0,3 & -x_1 \left(\frac{0,53}{0,12 + x_2 + 0,4545x_2^2} - \frac{0,53x_2(1 + 0,9090x_2)}{(0,12 + x_2 + 0,4545x_2^2)^2} \right) \\ \frac{1,325x_2}{0,12 + x_2 + 0,4545x_2^2} & \beta + 0,3 + \left(\frac{1,325x_1}{0,12 + x_2 + 0,4545x_2^2} - \frac{1,325x_2x_1(1 + 0,9090x_2)}{(0,12 + x_2 + 0,4545x_2^2)^2} \right) \end{pmatrix} \quad (40)$$

Substituindo o valor de cada uma das três raízes no lugar de x_1 e x_2 , o determinante da matriz representada pela Equação (40) é calculado e, conseqüentemente, os autovalores, conforme apresentado na Tabela 18. Nesta tabela tem-se uma raiz instável, a segunda, por apresentar um dos autovalores positivo, enquanto que a primeira e a terceira raízes são estáveis, visto que os todos os autovalores são negativos.

Tabela 18: Autovalores e análise da estabilidade para o problema do reator biológico

(Fonte: Autoria própria).

Solução	Autovalores ($\lambda_1; \lambda_2$)	Análise
1ª Raiz	$(-0,1139; -0,3)$	Estável
2ª Raiz	$(0,1698; -0,3)$	Instável
3ª Raiz	$(-0,3; -2,2640)$	Estável

Na Tabela 19 é apresentado o mapa de cores considerado para a análise de convergência considerando, como os outros exemplos, uma malha com 1000×1000 pontos.

Tabela 19: Classificação de cores para o problema do reator biológico (Fonte: Autoria própria).

Solução	Referência de Cor
1ª Raiz	Vermelho
2ª Raiz	Verde
3ª Raiz	Azul
Diverge	Preto

Método de Newton

A Figura 13 apresenta a bacia de atração para o problema do reator biológico considerando o MN.

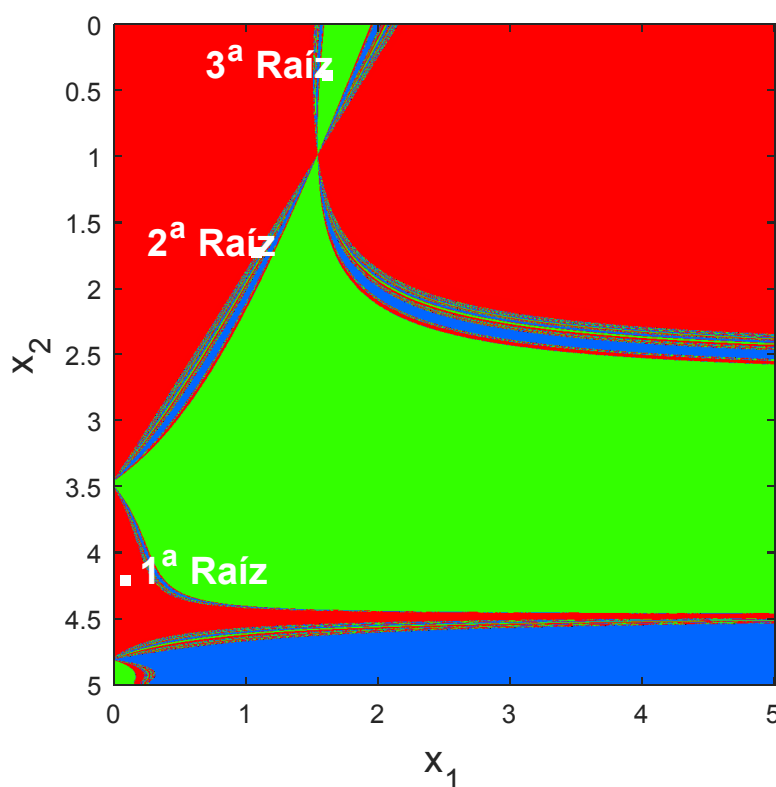


Figura 13: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o MN (Fonte: Autoria própria).

Nesta figura é possível verificar que a maioria das estimativas iniciais, cerca de aproximadamente 90% convergem para as duas primeiras raízes. Além disso, praticamente nenhuma estimativa inicial considerada divergiu, conforme pode ser observado na Tabela 20. Em termos do número médio de iterações, requeridas, em todas as execuções foram observadas, praticamente o mesmo valor para esse parâmetro.

Tabela 20: Análise da convergência das raízes do problema do reator biológico considerando o MN (Fonte: Autoria própria).

Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
47,4422%/7	41,9644%/6	10,5729%/7	0,0205%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Método de Levenberg-Marquardt

As Figuras 14 a 17 apresentam as bacias de atração para o problema do reator biológico considerando diferentes valores para o parâmetro de Levenberg-Marquardt (λ) [0,001 0,1 1 e 10].

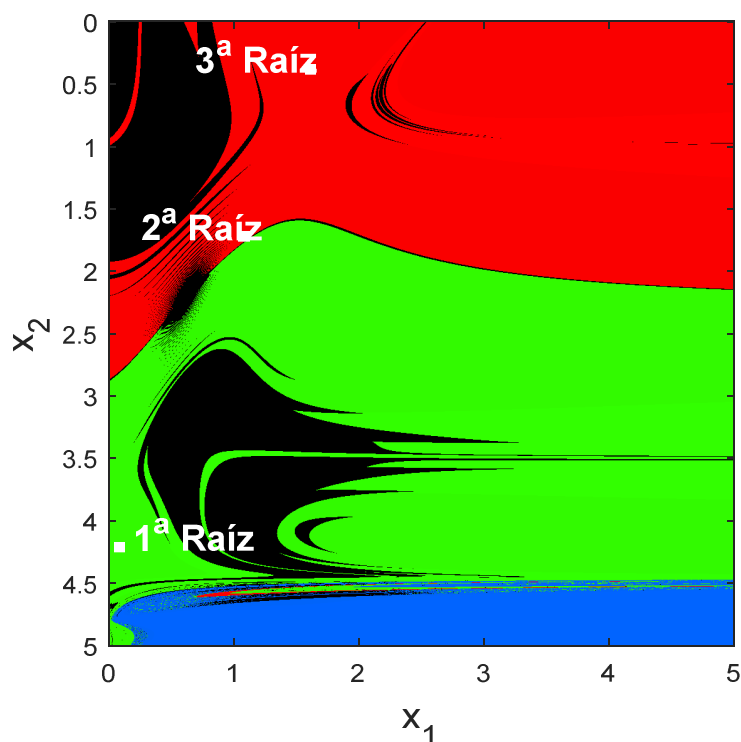


Figura 14: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o MLM para $\lambda=0,001$ (Fonte: Autoria própria).

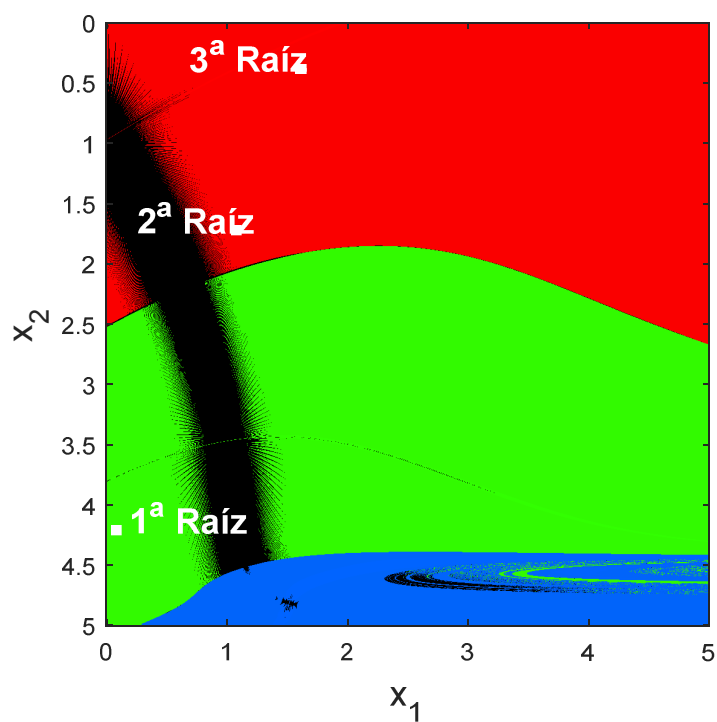


Figura 15: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o MLM para $\lambda=0,1$ (Fonte: Autoria própria).

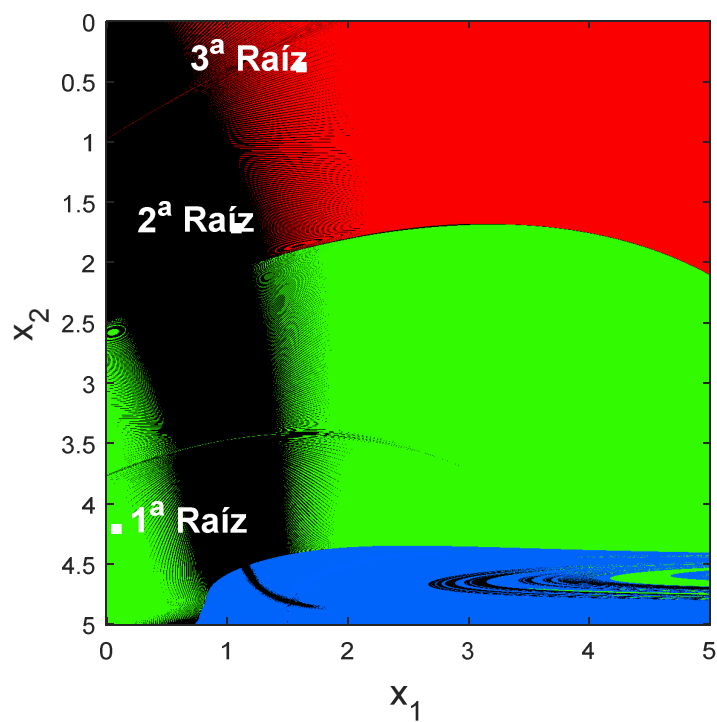


Figura 16: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o MLM para $\lambda=1$ (Fonte: Autoria própria).

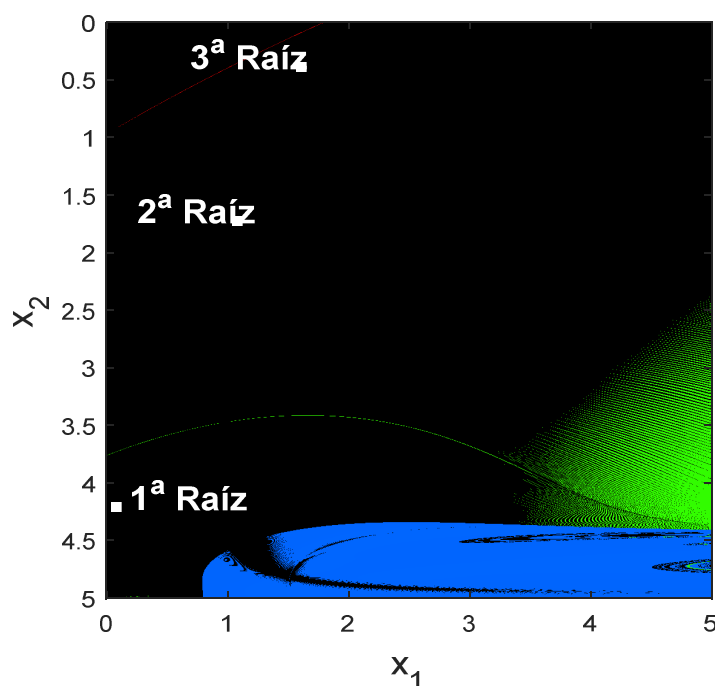


Figura 17: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o MLM para $\lambda=10$ (Fonte: Autoria própria).

Nestas figuras observa-se que, na medida em que esse parâmetro é incrementado, a taxa de divergência tende a aumentar, sendo que este percentual chega a aproximadamente 88%, como observado na Tabela 21. Para esta situação em particular, o aumento do parâmetro λ no MLM faz com que este tenha sérias dificuldades para encontrar a solução para cada condição inicial considerada. Também se ressalta que, a depender do valor deste parâmetro, o MLM pode convergir para raízes diferentes para mesma condição inicial ou até mesmo divergir.

Tabela 21: Análise da convergência das raízes do problema do reator biológico considerando o MLM (Fonte: Autoria própria).

λ	Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
0,001	33,5720%/14	40,8458%/14	8,5930%/29	16,9892%
0,1	39,0410%/33	42,4878%/32	9,0524%/40	9,4188%
1	26,2253%/60	39,8873%/45	8,6876%/42	25,1998%
10	0,0205%/24	4,0343%/59	8,7586%/29	87,1866%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Em termos do custo computacional associado a cada valor do parâmetro λ , observa-se valores flutuantes para cada uma das raízes. Assim, baseado nesta tabela, não é

possível afirmar que o aumento deste parâmetro irá ocasionar o incremento no número de iterações requeridas pelo método.

Programação Quadrática Sequencial

A Figura 18 apresenta a bacia de atração para o problema do reator biológico via aplicação do algoritmo SQP.

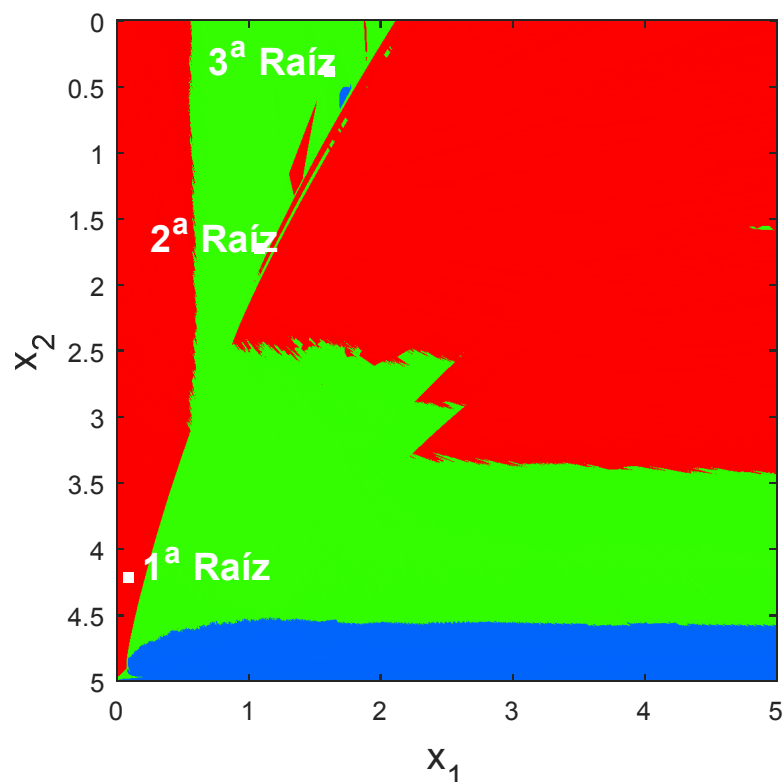


Figura 18: Bacia de atração para o problema do reator biológico usando o SQP
(Fonte: Autoria própria).

Nesta figura observa-se que mais da metade das estimativas iniciais convergem para a primeira raiz, cerca de 1/3 convergem para a segunda e, praticamente, as outras estimativas iniciais convergem para a terceira raiz. Em termos do número de iterações, observa-se, em média, o mesmo custo computacional para cada uma das raízes, conforme apresentado na Tabela 22.

Tabela 22: Análise da convergência das raízes do problema do reator biológico considerando o SQP (Fonte: Autoria própria).

Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
54,3446%/46	37,4216%/47	8,2165%/48	0,0173%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

Na Figura 19 é apresentado o plano de fases para o reator biológico. Assim como no problema anterior, para a geração destes perfis o problema diferencial foi simulado considerando diferentes condições iniciais. Para essa finalidade utilizou-se o Método de Runge-Kutta 4ª Ordem 100 pontos de discretização. Nesta figura observa-se que, como a segunda raiz é instável (ver a Tabela 18), as linhas do plano não convergem para esta, mas sim para as raízes que são estáveis, isto é; a primeira e terceiras raízes. Além disso, observa-se que a grande maioria das condições iniciais consideradas converge para a primeira raiz.

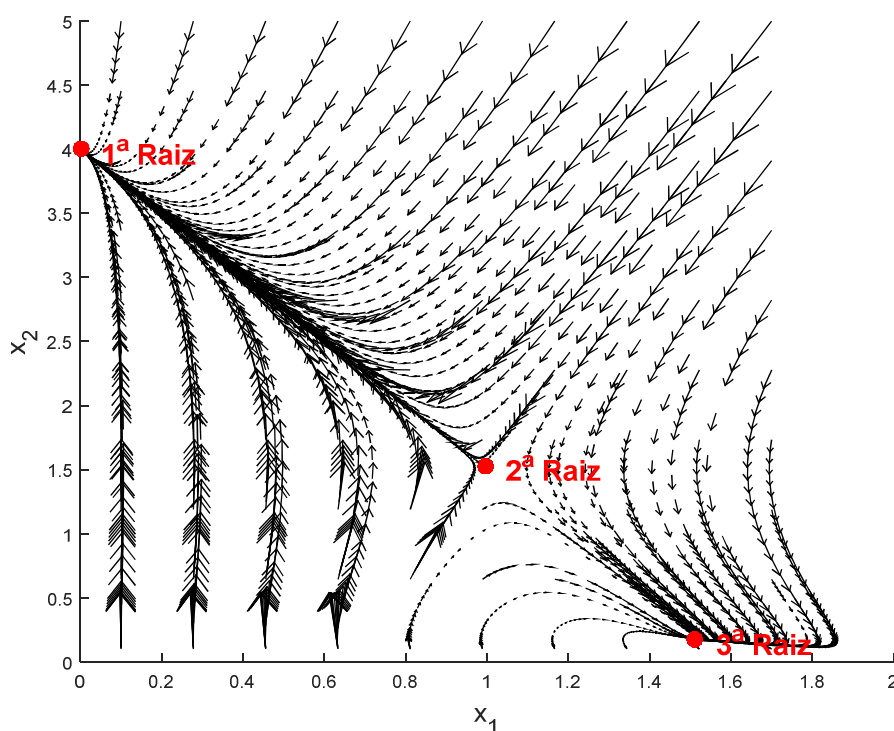


Figura 19: Plano de fases para o problema do reator biológico (Fonte: Autoria própria).

Já na Tabela 23 é apresentado um consolidado dos resultados obtidos. Em termos de convergência, os melhores resultados foram obtidos pelo MN e pelo SQP. Todavia, em termos do número de iterações requeridas para a resolução do problema, o custo computacional exigido pelo SQP é bem superior ao do MN. Além da maior taxa de

divergência, o MLM ($\lambda=0,1$) também teve um custo computacional bem superior ao MN e similar ao SQP.

Tabela 23: Consolidado dos resultados obtidos para o problema do reator biológico considerando o MN, o MLM e o SQP (Fonte: Autoria própria).

Método aplicado	Converge (1ª Raiz)/ Γ	Converge (2ª Raiz)/ Γ	Converge (3ª Raiz)/ Γ	Não Converge
MN	47,4422%/7	41,9644%/6	10,5729%/7	0,0205%
MLM ($\lambda=0,1$)	39,0410%/33	42,4878%/32	9,0524%/40	9,4188%
SQP	54,3446%/46	37,4216%/47	8,2165%/48	0,0173%

Γ é o número médio de iterações requeridas pelo método.

4.5 Resumo dos Principais Resultados

A Tabela 24 apresenta um resumo dos melhores resultados obtidos pelas abordagens consideradas.

Tabela 24: Resumo dos resultados obtidos considerando o MN, o MLM e o algoritmo SQP.

Estudo de Caso	MN/ Γ	MLM/ Γ	SQP/ Γ
Polinômio 3º grau	100%/8	99,9%/7	99,9%/40-43
Polinômio 5º grau	100%/12	99,4%/10	99,9%/39-42
Reator CSTR	98,8%/5-11	77,3%/7-15	99,9%/50-76
Reator Biológico	99,9%/6-7	90,3%/13-23	99,9%/46-48

Γ = número de iterações necessárias para a convergência das raízes.

Conforme observado nesta tabela, o MN foi a abordagem com melhor desempenho, visto que a taxa de convergência sempre foi próxima a 100%. O algoritmo SQP vem logo na sequência, com boa taxa de convergência, todavia ficando atrás do MN em termos do número de iterações requeridas. O MLM foi que apresentou pior resultado, em termos de convergência, para os estudos de caso de engenharia. De forma geral, pode-se concluir que, o algoritmo SQP pode ser empregado para a resolução de um sistema de equações não lineares. Todavia, deve-se ter em mente que, por se tratar de uma metodologia específica para um tipo de problema, seus resultados, pelo menos em termos do número de iterações é bem superior aos tradicionais métodos para a resolução de sistemas não lineares. Finalmente, é importante ressaltar que a qualidade da solução

obtida pelo SPQ é função do domínio considerado, sendo mais sensível do que o MN e o MLM.

5 CONCLUSÕES

O presente trabalho teve como objetivo a aplicação de uma técnica de otimização, o algoritmo SPQ, para a resolução de sistemas de equações não lineares que representam a condição de estado estacionário em sistemas clássicos de engenharia química, bem como compará-la a duas técnicas tradicionais, o MN e o MLM. Neste cenário, o problema original formado por equações algébricas não lineares foi convertido em um de otimização. Foram analisadas questões no que tange a convergência para cada uma das raízes, o número de iterações requeridas e a estabilidade das raízes. Para os problemas de engenharia formulados como uma simplificação de equações diferenciais ordinárias, também foram gerados os planos de fase.

De forma geral, para todos os estudos de caso analisados, tanto o MN quanto o SPQ foram as estratégias que apresentaram o melhor desempenho, isto é; em termos da convergência, sendo seguido pelo MLM. Em relação ao número de iterações, os métodos que são tradicionalmente empregados para a resolução de sistemas de equações não lineares apresentaram melhor desempenho em comparação com o algoritmo SPQ. Isto pode ser justificado pelo fato de que o algoritmo SPQ é uma abordagem proposta para resolver um problema de otimização, que é um bem diferente do original (sistema de equações não lineares). Apesar deste pior resultado, considera-se que o algoritmo SPQ é uma boa opção para a resolução de sistemas de equações não lineares. Com relação a forma das bacias de atração, pode-se concluir que, para cada uma das abordagens, a depender dos parâmetros empregados, a convergência para uma dada raiz ou até mesmo a divergência é afetada, conforme pode ser observado mais pronunciadamente para os estudos de caso em engenharia que, geralmente, não apresentam simetria.

Ao se analisar o plano de fases para os problemas de engenharia, observa-se que a condição inicial considerada para a simulação do modelo diferencial é fator preponderante para a convergência para uma ou outra raiz. Além disso, também se observa que uma solução instável não é um atrator, isto é; esta é “repelida” naturalmente. Neste caso, uma solução instável nunca será obtida na prática, mesmo que a condição inicial seja a própria solução instável.

Como sugestão de trabalhos futuros pretende-se avaliar a metodologia proposta em outros estudos de caso, bem como outros algoritmos de otimização. Além disso, avançar no estudo dos mecanismos de atratividade.

6 REFERÊNCIAS

1. AWONTUDE, A. A., HORNE, R., 2012. *An Improved Adjoint-Sensitivity Computation for Multiphase Flow Using Wavelets*. SPE J. 17 (2), 402–417.
2. BEQUETTE, WAYNE – *Process of Dynamics, Modeling, Analysis and Simulation* – Prentice Hall PTR, New Jersey, 1998.
3. CHAPRA, S. *Métodos Numéricos Aplicados com Matlab para Engenheiros e cientistas*, McGraw Hill, 3ª Edição, 2013.
4. COELHO, L. S., MARIANI, V. C. *Evolução Diferencial Híbrida com Programação Quadrática Aplicada ao Problema de Despacho Econômico de Energia Elétrica*. Revista Controle & Automação, v. 17 (4), 2006.
5. CONSTANTINIDES, A., MOSTOUFI, N. *Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications*, Pearson, First Edition, 1999.
6. CONINK, P. J. C. – *A Dinâmica Não Linear do Modelo de Quatro Ondas* – *Dissertação de Mestrado*, Curitiba, 2002.
7. CUNHA, M. C. C. *Métodos numéricos*. 2. ed. Campinas: Unicamp, 2000.
8. DEB, K. *Multi-objective Optimization using Evolutionary Algorithms*. Wiley International Series in Systems and Optimization, 498 pages, 2001.
9. EDGAR, T. F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L. S. *Optimization of Chemical Process*. Second edition. New York: McGraw-Hill Chemical Engineering Series, 2001.
10. IGLESIAS, M. A., DAWSON, C., 2013. *The regularizing Levenberg–Marquardt scheme for history matching of petroleum reservoirs*. Comput. Geosci. 17 (6), 1033–1053.
11. LOBATO, S. F. *Otimização Multiobjetivo para o Projeto de Sistemas de Engenharia*. Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Mecânica – FEMEC/UFU, 2008.
12. PINTO, J. C., LAGE, P. L. C. *Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química*, Editora E-Papers, 1ª Edição, 2001.

13. PURCINA, L. A. *Técnicas de Otimização Evolutiva Aplicadas à Solução de Grandes Sistemas Lineares*. Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, 2010.
14. SARAMAGO, S. F. P. *Métodos de Otimização Randômica: Algoritmos Genéticos e Simulated Annealing*. Minicurso do XXVI CNMAC, Uberlândia, MG, 1999.
15. RAO, S. S. *Engineering Optimization: Theory and Practice*, John Wiley & Sons, INC., 4 Ed, 2009.
16. VANDERPLAATS, G. N. *Numerical Optimization Techniques for Engineering Design*, Vanderplaats Research and Development, Inc., 3rd ed, 1999.

UNIVERSIDADE FEDERAL UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



CAROLINA ALARI FARIA

UBERLÂNDIA-MG

2018