

problemas ZDT2 e ZDT3 somente na Fig. 8.67, o aumento do número de indivíduos não resulta necessariamente na melhora das métricas.

Apesar do comportamento apresentado na Fig. 8.67, onde se esperava que apesar do aumento do número de avaliações da função objetivo houvesse diminuição dos valores das métricas, os valores obtidos pelo MODE são considerados bons quando comparados com o algoritmo NSGA II (convergência da métrica e diversidade métrica da ordem de 8×10^{-4} e 0,46, respectivamente (DEB, 2001)).

• Influência do Número de Gerações - N_{gen}

Parâmetros utilizados pelo MODE: $N=50$, $F=0,8$, $r=0,9$, $p_c=0,8$, $R=10$ e $N_{gen}=\{50\ 100\ 150\ 200\ 250\ 300\ 400\ 500\}$.

A Figura 8.70 apresenta a média e o desvio padrão da Convergência Métrica.

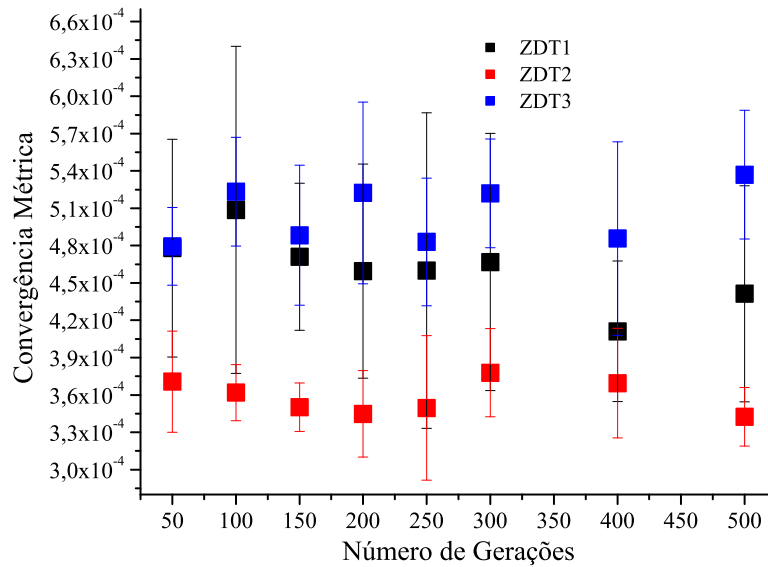


Figura 8.70: Convergência métrica × número de gerações.

A média e o desvio padrão da Distância Geracional e da Diversidade Métrica são apresentados nas Figs. 8.71 e 8.72, respectivamente.

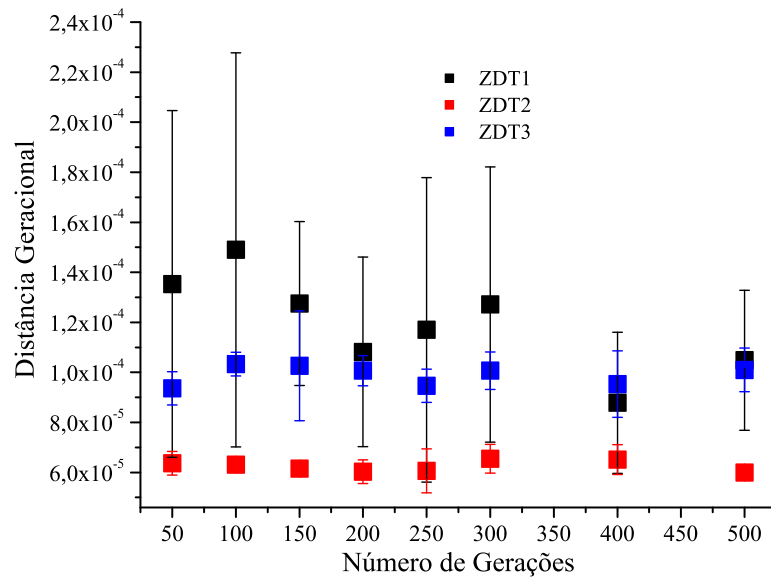


Figura 8.71: Distância geracional $\times$ número de gerações.

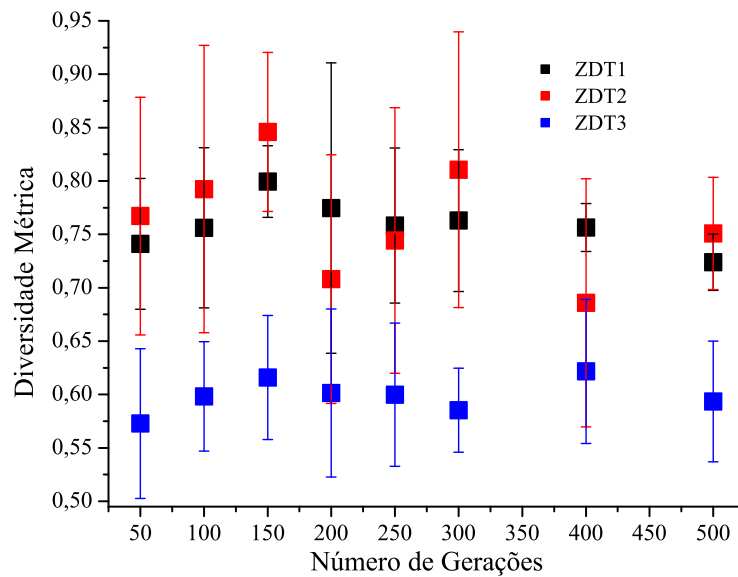


Figura 8.72: Diversidade métrica $\times$ número de gerações.

Pode-se observar nas Figs. 8.70 a 8.72 que o aumento do número de gerações não produz uma melhora significativa nos valores das métricas. Além disso, para a convergência métrica e a distância métrica, o problema que apresenta os melhores resultados é o ZDT2. Já para a diversidade métrica, o melhor resultado é o da função ZDT3.

Nesta seção foi constatado que o uso de um número elevado de indivíduos ou de gerações não necessariamente produz melhorias nas métricas. Além disso, aconselha-se o uso de uma população com 20 indivíduos e com 100 gerações para um novo estudo de

caso; taxa de redução entre 0,1 e 1,0; probabilidade de cruzamento maior que 0,1; taxa de perturbação conforme aqueles recomendados por Storn e Price (1995) ($0,2 \leq F \leq 2,0$) e número de pseudo-curvas igual a 10 (HU et al., 2006). Deve ser destacado que o número de pseudo-curvas e outras estratégias para a geração de candidatos em potencial não foram analisados neste trabalho.

8.4 Conclusões Preliminares

De um modo geral, em todos os casos analisados neste capítulo, as aproximações da curva de Pareto encontradas se mostraram no mínimo equivalentes às aquelas fornecidas por outros trabalhos (ZITZLER et al., 2000; DEB, 2001; CASTRO, 2001; SILVA, 2004) para o tratamento de funções matemáticas com diferentes graus de complexidade. Em alguns casos, pode-se observar um maior número de avaliações da função objetivo obtido pelo MODE quando comparado com o NSGA II devido à incorporação da estratégia de refinamento.

A incorporação do operador de exploração das vizinhanças no algoritmo de Evolução Diferencial original faz com que praticamente dobre o número de avaliações da função objetivo. Esse comportamento é esperado devido à necessidade de avaliação dos vizinhos gerados durante a aplicação desse operador. Assim como mencionado por Hu et al. (2006), qualquer procedimento que realize algum tipo de refinamento está sujeito ao aumento do número de avaliações da função objetivo, como por exemplo, se verifica no algoritmo de Recozimento Simulado, quando comparado com o algoritmo de Evolução Diferencial, para problemas com um único objetivo (LOBATO et al., 2007b). Todavia deve ser salientado que esse efeito pode ser amenizado através da redução do número de indivíduos na população ou do número máximo de gerações, conforme mostrado na análise de sensibilidade destes parâmetros.

Neste trabalho foi considerado um número de indivíduos *default*, uma vez que é utilizado por diversos autores (DEB, 2000; DEB, 2001; ZITZLER et al., 2000; ABBASS et al., 2001; ANGIRA; BABU, 2005) para a resolução das funções matemáticas. Isso foi feito apesar da literatura destacar como uma das principais características do algoritmo de Evolução Diferencial o menor número de indivíduos na população em relação a outros algoritmos evolutivos. Neste sentido, procurou-se apenas a comparação do algoritmo proposto com outras metodologias evolutivas, sem se preocupar com a determinação de um número mínimo de indivíduos necessários para a obtenção de uma aproximação satisfatória do ótimo de Pareto.

As métricas de comparação utilizadas se mantiveram, no mínimo, dentro da mesma

ordem de grandeza quando comparadas com os resultados apresentados por Deb (2001) e Zitzler et al. (2000). Além disso, deve ser destacado que, assim como mencionado por Castro (2001) e por Silva (2004), os algoritmos estudados por Zitzler et al. (2000) não foram bem sucedidos quando aplicados nos problemas ZDT4 e ZDT6.

Outro ponto interessante a ser destacado é a utilização da penalização proposta por Castro (2001) para problemas com restrições de desigualdade. Assim como observado pelo autor, pode-se notar que com apenas algumas execuções do algoritmo, a magnitude dos objetivos pode ser estimada e com isso são escolhidos os valores dos fatores de penalidade utilizados durante o processo evolutivo. Em todos os problemas com restrições essa abordagem conseguiu atender as restrições que foram impostas.

No próximo capítulo, o algoritmo MODE será aplicado a problemas clássicos de engenharia e áreas afins.

APLICAÇÕES EM ENGENHARIA E ÁREAS AFINS

Com o objetivo de avaliar o desempenho do MODE em problemas mais realísticos, neste capítulo serão tratados problemas de engenharia e áreas afins. Tais estudos de caso são constituídos por equações algébricas, algébrico-diferenciais ou integro-diferenciais e descrevem problemas de grande interesse no meio acadêmico e industrial.

9.1 Problemas de Projetos Estruturais

9.1.1 Problema de uma Viga em Balanço

Considere o problema de uma viga em balanço submetida a uma carga Q , cuja estrutura é mostrada a seguir:

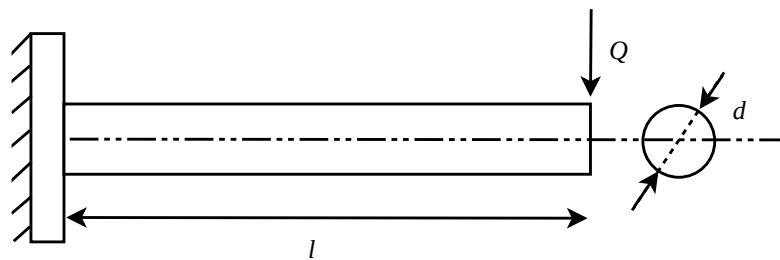


Figura 9.1: Projeto de uma viga em balanço (Reproduzido de Deb (2001)).

O objetivo é a obtenção das variáveis de projeto caracterizadas pelo diâmetro (d) e

pelo comprimento (l), com o intuito de minimizar o peso (f_1) e a deflexão da extremidade à direita (f_2), dados por:

$$\begin{cases} \min f_1 = \rho \frac{\pi d^2}{4} l \\ \min f_2 = \delta = \frac{64 Q l^3}{3 E \pi d^4} \\ g_1 \equiv \frac{32 Q l}{\pi d^3} \leq S_y \\ g_2 \equiv \delta \leq \delta_{max} \end{cases} \quad (9.1)$$

onde $10 \text{ mm} \leq d \leq 50 \text{ mm}$, $200 \text{ mm} \leq l \leq 1000 \text{ mm}$, $\rho=7800 \text{ kg/m}^3$, $Q=1 \text{ kN}$, $E=207 \text{ GPa}$, $S_y=300 \text{ MPa}$ e $\delta_{max}=5 \text{ mm}$.

Fisicamente sabe-se que, com relação ao primeiro objetivo, se existir uma redução das dimensões d e l , o peso da viga será mínimo, contudo a viga não será suficientemente rígida. Por outro lado, se a viga for minimizada somente com relação à deflexão final, a solução acarretará em dimensões grandes, isto é, o peso próprio do sistema se torna grande demais. Dessa maneira, esse caso se caracteriza pela presença de objetivos conflitantes.

Os parâmetros utilizados pelo MODE são apresentados na Tab. 9.1.

Tabela 9.1: Parâmetros utilizados no problema do projeto de uma viga em balanço.

Parâmetro	MODE
N_{gen}	100
N	30
p_c	0,85
F	0,50
R	10
r	0,90

Os extremos da curva de Pareto são mostrados na Tab. 9.2.

Tabela 9.2: Soluções da curva de Pareto para o projeto de uma viga em balanço.

Parâmetro	Unidade	SOLUÇÃO			
d	mm	18,94	50,0	21,20	34,08
l	mm	200,0	200,0	200,0	200,0
f_1	kg	0,44	3,06	0,58	1,43
f_2	mm	2,05	0,03	1,21	0,20

A população inicial e a solução obtida pelo MODE, com 6030 avaliações da função

objetivo, comparada ao Método da Soma Ponderada, são apresentadas nas Figs 9.2 e 9.3, respectivamente.

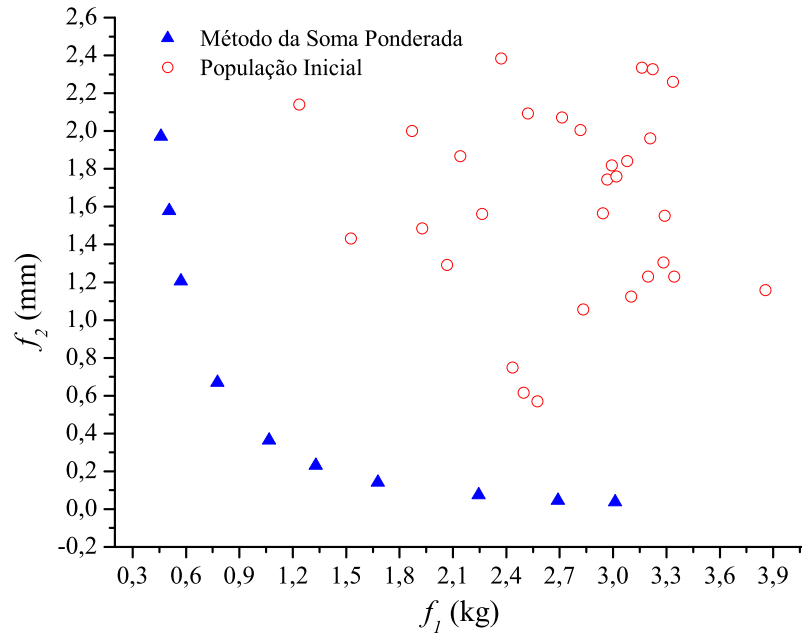


Figura 9.2: População inicial para o projeto de uma viga em balanço.

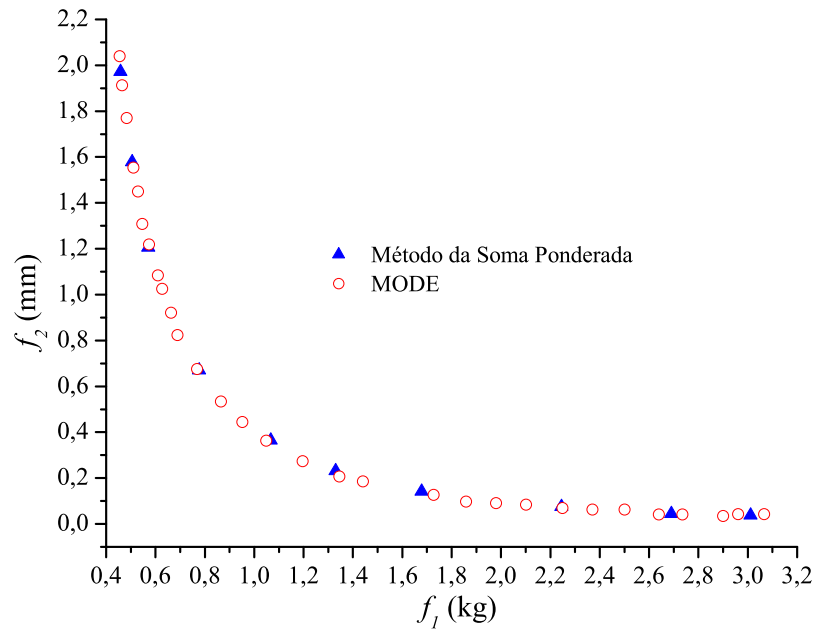


Figura 9.3: Curva de Pareto para o projeto de uma viga em balanço.

9.1.2 Problema de Duas Barras

O problema do projeto de duas barras sujeito ao carregamento de uma força concentrada foi estudado originalmente por Palli et al. (1999). Essa estrutura é apresentada na Fig. 9.4:

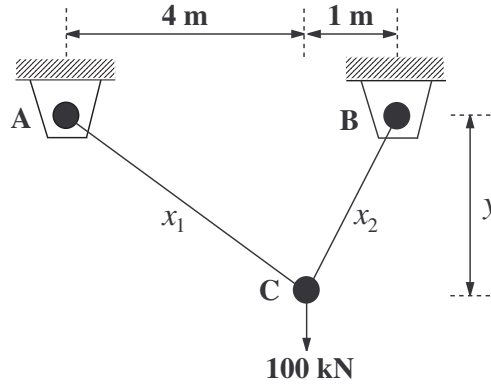


Figura 9.4: Estrutura do problema de duas barras (Reproduzido de Deb (2001)).

onde y é a distância vertical entre B e C (em m), x_1 e x_2 são as áreas da seção transversal de AC e BC em m^2 . Desta forma, o problema de otimização consiste da minimização da tensão nas barras AC e BC e da minimização do volume destas barras.

Matematicamente, as funções objetivo são definidas como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min f_1 = x_1 \sqrt{16 + y^2} + x_2 \sqrt{1 + y^2} \\ \min f_2 = \max(\sigma_{AC}, \sigma_{BC}) \\ g_1 \equiv \max(\sigma_{AC}, \sigma_{BC}) \leq 10^5 \\ \sigma_{AC} = \frac{20 \sqrt{16 + y^2}}{yx_1} \\ \sigma_{BC} = \frac{80 \sqrt{1 + y^2}}{yx_2} \end{array} \right. \quad (9.2)$$

onde $1 \text{ m} \leq y \leq 3 \text{ m}$ e $0 \text{ m}^2 \leq x_1, x_2 \leq 0,01 \text{ m}^2$.

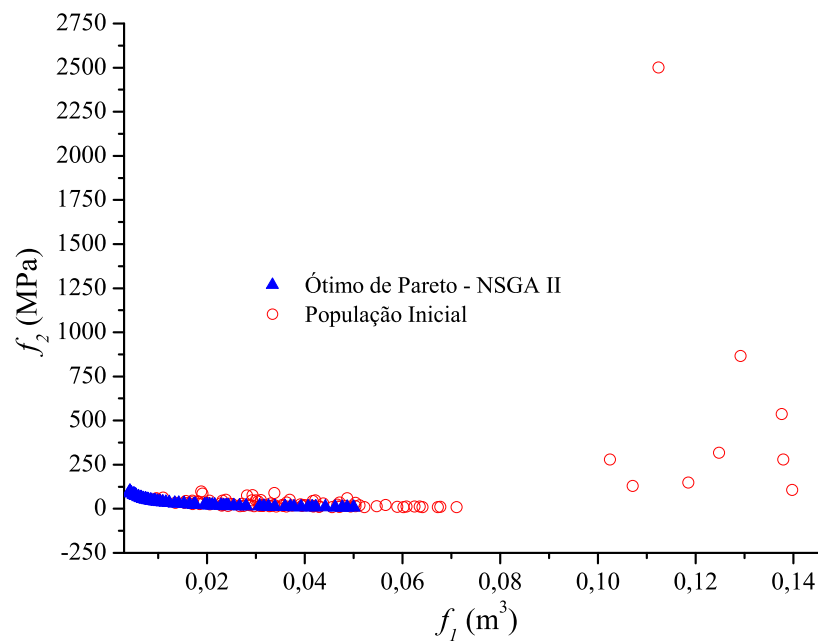
O trabalho de Palli et al. (1999) apresenta um conjunto de Pareto constituído apenas por cinco soluções, com os seguintes valores extremos para os objetivos: $(0,004455 \text{ m}^3, 89983 \text{ kPa})$ e $(0,004833 \text{ m}^3, 83268 \text{ kPa})$. Deb (2001), através do uso do NSGA II, resolveu o mesmo problema encontrando os seguintes valores extremos para os objetivos: $(0,00407 \text{ m}^3, 99755 \text{ kPa})$ e $(0,05304 \text{ m}^3, 8439 \text{ kPa})$.

Os parâmetros utilizados pelo MODE são apresentados na Tab. 9.3.

Tabela 9.3: Parâmetros utilizados na resolução do problema de duas barras.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	250	100
N	100	50
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

As Figuras 9.5 e 9.6 apresentam a população inicial e a solução obtida pelo algoritmo MODE, respectivamente.

**Figura 9.5:** População inicial para o problema de duas barras.

Deve ser destacado que foram feitas 20100 e 25100 avaliações da função objetivo para o MODE e o NSGA II, respectivamente.

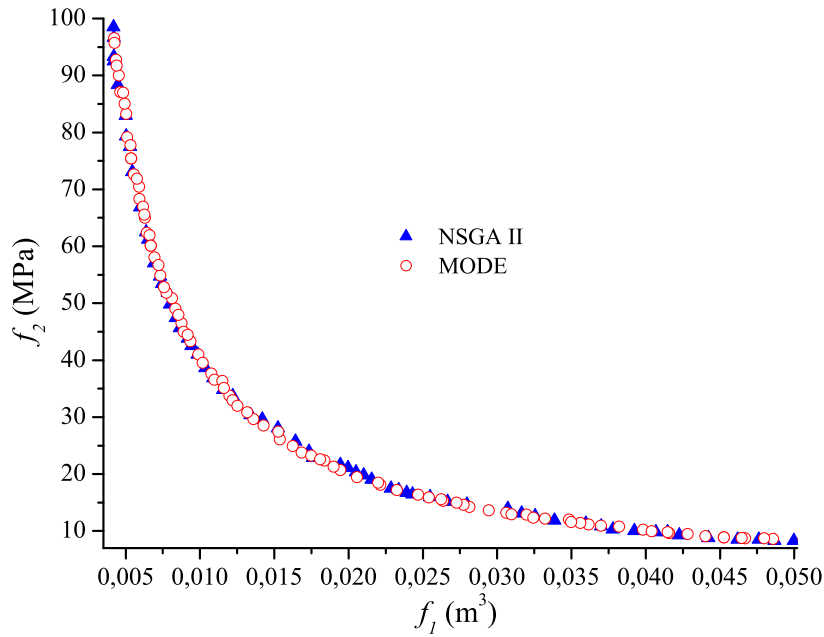


Figura 9.6: Curva de Pareto para o problema de duas barras.

9.1.3 Problema da Viga I

O objetivo desse problema é a determinação do conjunto ótimo de Pareto decorrente da otimização multi-objetivo da viga com seção I apresentada a seguir:

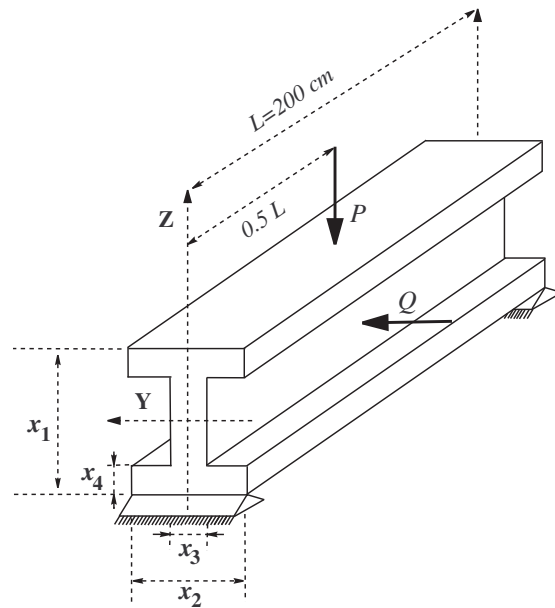


Figura 9.7: Viga com seção I (Reproduzido de Castro (2001)).

As propriedades da viga e os valores das cargas são (CASTRO, 2001):

- Módulo de *Young* (E) igual a 2×10^4 kN/cm²;
- Tensão de projeto da viga (σ) igual a 16 kN/cm²;
- Carga vertical (P) e carga horizontal (Q), aplicadas no ponto médio da viga, iguais a 600 kN e 50 kN, respectivamente.

As variáveis de projeto, x_1 , x_2 , x_3 e x_4 , são as dimensões da viga, cujas magnitudes não devem violar as restrições: $10 \text{ cm} \leq x_1 \leq 80 \text{ cm}$, $10 \text{ cm} \leq x_2 \leq 50 \text{ cm}$, $0,9 \text{ cm} \leq x_3 \leq 5 \text{ cm}$ e $0,9 \text{ cm} \leq x_4 \leq 5 \text{ cm}$. Além disso, o problema considera a restrição de projeto:

$$\frac{M_{\mathbf{Y}}}{W_{\mathbf{Y}}} + \frac{M_{\mathbf{Z}}}{W_{\mathbf{Z}}} \leq \sigma \quad (9.3)$$

onde $M_{\mathbf{Y}}$ (30000 kN cm) e $M_{\mathbf{Z}}$ (25000 kN cm) são os momentos máximos nas direções $\mathbf{Y}$ e $\mathbf{Z}$; $W_{\mathbf{Y}}$ e $W_{\mathbf{Z}}$ são os módulos resistentes da seção nas direções $\mathbf{Y}$ e $\mathbf{Z}$, e σ é a tensão limite estabelecida. Os módulos resistentes são calculados pelas seguintes expressões:

$$W_{\mathbf{Y}} = \frac{x_3(x_1 - 2x_4)^3 + 2x_2x_4(4x_4^2 + 3x_1(x_1 - 2x_4))}{6x_1} \quad (9.4)$$

$$W_{\mathbf{Z}} = \frac{(x_1 - 2x_4)x_3^3 + 2x_4x_2^3}{6x_2} \quad (9.5)$$

Os objetivos a serem minimizados são a área da seção transversal (em cm²) e o deslocamento estático máximo (em cm), dados respectivamente por:

$$\begin{cases} \min f_1 = 2x_2x_4 + x_3(x_1 - 2x_4) \\ \min f_2 = \frac{PL^3}{48EI} \end{cases} \quad (9.6)$$

onde o momento de inércia I é calculado segundo a relação:

$$I = \frac{x_3(x_1 - 2x_4)^3 + 2x_2x_4(4x_4^2 + 3x_1(x_1 - 2x_4))}{12} \quad (9.7)$$

Os parâmetros utilizados pelo PMOGA e pelo MODE são apresentados na Tab. 9.4. Algumas soluções da curva de Pareto são apresentadas na Tab. 9.5, com 15030 avaliações pelo MODE e no mínimo 25050 avaliações pelo PMOGA (já que nesse algoritmo é realizado refinamento da solução).

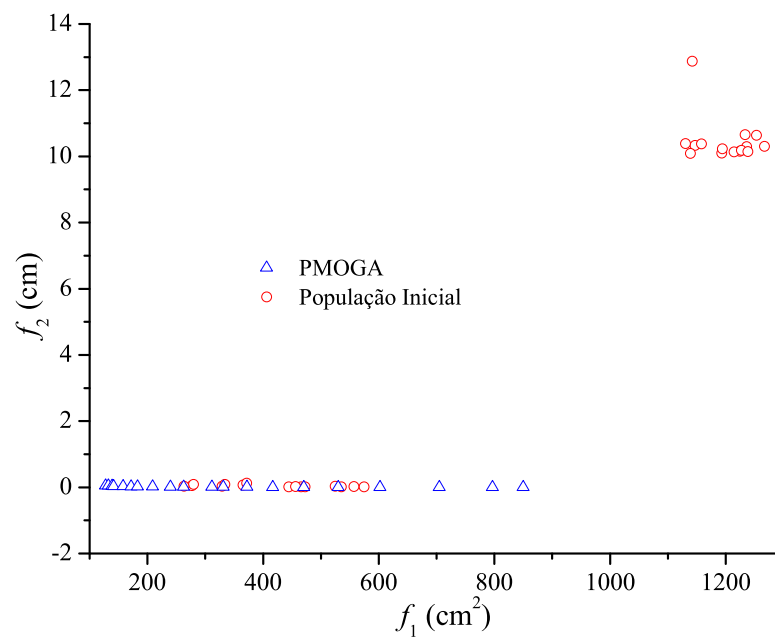
A população inicial e a solução obtida pelo MODE, comparada com a obtida pelo PMOGA, são apresentadas nas Figs. 9.8 e 9.9, respectivamente.

Tabela 9.4: Parâmetros utilizados na resolução do problema da viga I.

Parâmetro	ALGORITMO	
	PMOGA	MODE
N_{gen}	500	250
N	50	30
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

Tabela 9.5: Soluções da curva de Pareto para o projeto de uma viga I .

Parâmetro	Unidade	SOLUÇÃO	
x_1	cm	63,60	80,00
x_2	cm	40,00	50,00
x_3	cm	0,90	5,00
x_4	cm	0,90	5,00
f_1	cm ²	127,59	850,00
f_2	cm	0,0566	0,0059

**Figura 9.8:** População inicial para o problema da viga I.

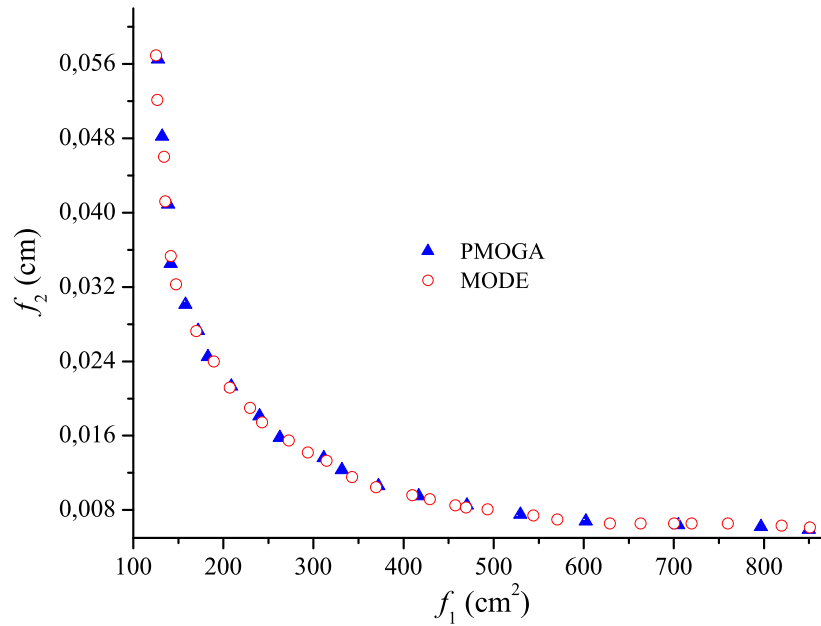


Figura 9.9: Curva de Pareto para o problema da viga I.

9.1.4 Problema da Viga Soldada

O próximo caso consiste numa viga submetida a uma força F em sua extremidade e que precisa ser soldada a um outro componente estrutural satisfazendo as condições de estabilidade e às limitações de projeto, objetivando a minimização do custo da viga (f_1) e do deslocamento da extremidade livre da viga (f_2). As quatro variáveis de projeto, espessura da solda (h), comprimento da solda (l), largura da viga (t) e espessura da viga (b), são indicadas na Fig. 9.10:

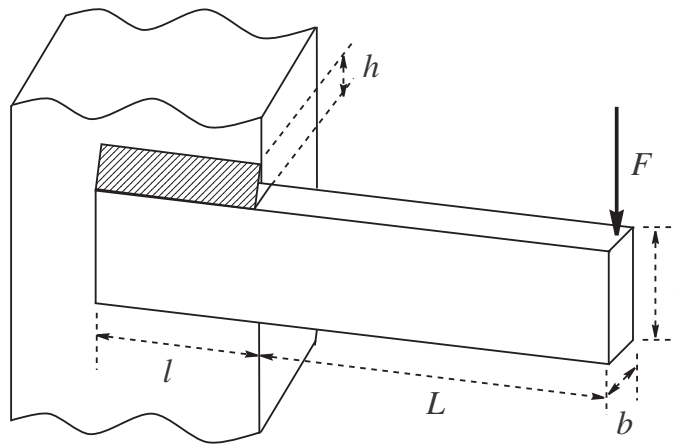


Figura 9.10: Viga soldada (Reproduzido de Castro (2001)).

Assim, os objetivos deste problema são definidos como (CASTRO, 2001):

$$\begin{cases} \min f_1 = 1,10471h^2l + 0,04811tb(L + l) \\ \min f_2 = \frac{4FL^3}{t^3bE} \end{cases} \quad (9.8)$$

sujeito às seguintes restrições:

$$\tau - \tau_{max} \leq 0 \quad (9.9)$$

$$\sigma - \sigma_{max} \leq 0 \quad (9.10)$$

$$F - P_c \leq 0 \quad (9.11)$$

$$\frac{4FL^3}{t^3bE} - u_{max} \leq 0 \quad (9.12)$$

$$h - b \leq 0 \quad (9.13)$$

para $0,125 \text{ in} \leq h$, $b \leq 5 \text{ in}$, $l \geq 0,1 \text{ in}$, $t \leq 10 \text{ in}$. Na Equação (9.8), os coeficientes 1,10471 e 0,04811 estão relacionados ao custo do material por unidade de volume.

As duas primeiras restrições garantem que a tensão de cisalhamento e a tensão normal desenvolvidas ao longo do apoio da viga sejam respectivamente menores que as tensões permissíveis de cisalhamento (τ_{max}) e normal (σ_{max}) do material. A terceira restrição garante que o esforço resistente (ao longo da direção de t) da viga seja maior que a carga aplicada F . A quarta restrição é um limite máximo (u_{max}) para o deslocamento na extremidade da viga. Já a quinta restrição garante que a espessura da viga não seja menor que a espessura da solda.

Os dados adotados para o problema são (CASTRO, 2001): $F = 6000 \text{ lb}$, $\tau_{max} = 13600 \text{ psi}$, $E = 30 \times 10^6 \text{ psi}$, $\sigma_{max} = 30000 \text{ psi}$, $u_{max} = 0,25 \text{ in}$ e $L = 14 \text{ in}$.

As tensões e os termos das expressões anteriores são dadas por:

$$\tau = \sqrt{\tau_1^2 + \tau_2^2 + \frac{l\tau_1\tau_2}{\sqrt{0,25(l^2 + (h+t)^2)}}} \quad (9.14)$$

$$\tau_1 = \frac{6000}{\sqrt{2}hl} \quad (9.15)$$

$$\tau_2 = \frac{6000(14 + 0,5l)\sqrt{0,25(l^2 + (h+t)^2)}}{2(0,707hl(\frac{l^2}{12} + 0,25(h+t)^2))} \quad (9.16)$$

$$\sigma = \frac{504000}{t^2b} \quad (9.17)$$

$$P_c = 64746.022(1 - 0,0282346t)tb^3 \quad (9.18)$$

Os parâmetros utilizados pelo PMOGA e pelo MODE são apresentados na Tab. 9.6.

Tabela 9.6: Parâmetros utilizados na resolução do problema da viga soldada.

Parâmetro	ALGORITMO	
	PMOGA	MODE
N_{gen}	500	250
N	200	50
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

A população inicial e a solução obtida pelo MODE são apresentadas nas Figs. 9.11 e 9.12, respectivamente.

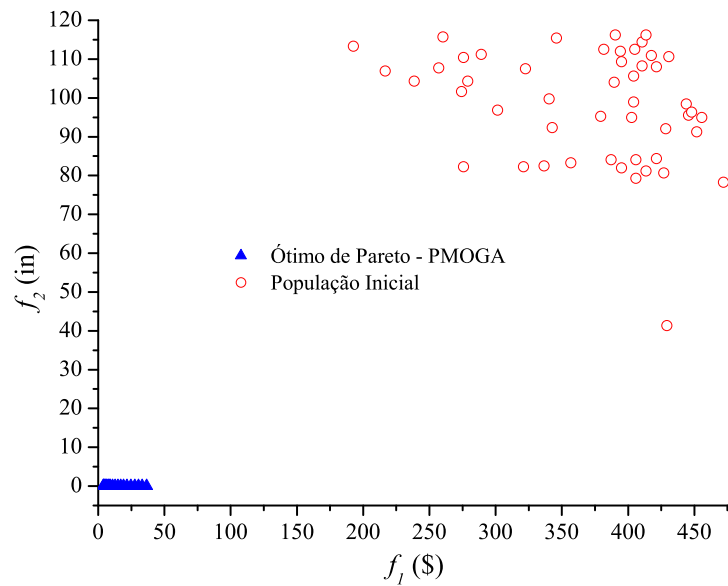


Figura 9.11: População inicial para o problema da viga soldada.

Algumas soluções da curva de Pareto são apresentadas na Tab. 9.7, com 25050 avaliações pelo MODE e no mínimo 100200 avaliações pelo PMOGA (já que nesse algoritmo é realizado refinamento da solução).

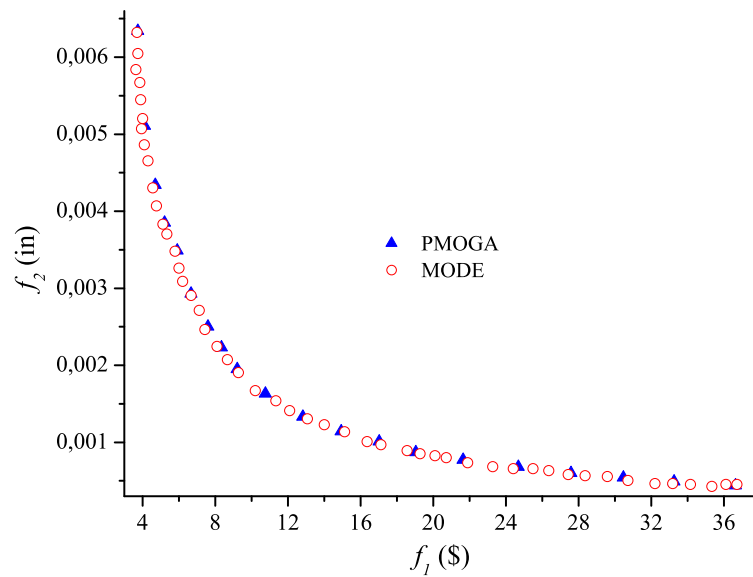


Figura 9.12: Curva de Pareto para o problema da viga soldada.

Tabela 9.7: Soluções da curva de Pareto para o projeto de uma viga soldada.

Parâmetro	Unidade	SOLUÇÃO	
h	in	0,392	1,183
l	in	2,886	0,749
t	in	9,300	10,0
b	in	0,432	5,0
f_1	\$	3,741	36,630
f_2	in	0,0062	0,0004

9.2 Problemas Inversos

O problema de identificação de parâmetros, ou problema inverso, surge da necessidade de obtenção de parâmetros de modelos teóricos de forma que esses possam ser utilizados para simular o comportamento do sistema para diferentes condições de operação.

Tradicionalmente, o problema de estimação de parâmetros é tratado por técnicas de otimização, sendo formulado com um único objetivo. Geralmente todos os objetivos são combinados em uma única função, por meio de fatores de ponderação. A abordagem mais apropriada para o problema, no entanto, seria o enfoque multi-objetivo, uma vez que o procedimento de estimação requer geralmente a satisfação simultânea de várias exigências que podem ser conflitantes (SILVA, 2004).

Com o intuito de testar o MODE para o problema de estimação de parâmetros, serão estudados quatro processos: *a)* o resfriamento e secagem de material particulado, para

obtenção do coeficiente global de transferência de calor; *b*) obtenção de parâmetros cinéticos dos modelos de crescimento de células, de substrato e de produto no processo de fermentação batelada; *c*) estimação de propriedades radiativas em mecanismo de transferência de calor por radiação e condução e *d*) estimação de parâmetros cinéticos e de transferência de calor em um secador rotativo industrial.

Deve ser destacado que, a partir do presente momento, os modelos passam a ser constituídos por equações algébrico-diferenciais ou integro-diferenciais com uma ou mais variáveis independentes, o que exige o acoplamento de um *solver* para a resolução desse sistema de equações. Neste sentido, serão utilizados o Método de *Runge-Kutta* de 4^a-5^a ordem e o Método de Colocação Normal para essa finalidade.

9.2.1 Estimação do Coeficiente de Transferência de Calor em Leito Deslizante

Esse problema foi proposto por Silva (2004) a partir do trabalho de Sartori (1986). De uma forma geral, o processo consiste de um leito deslizante com fluxos cruzados, constituído por um trocador de calor de geometria retangular, como ilustrado abaixo pelo esquema simplificado da unidade piloto em leito deslizante contínuo:

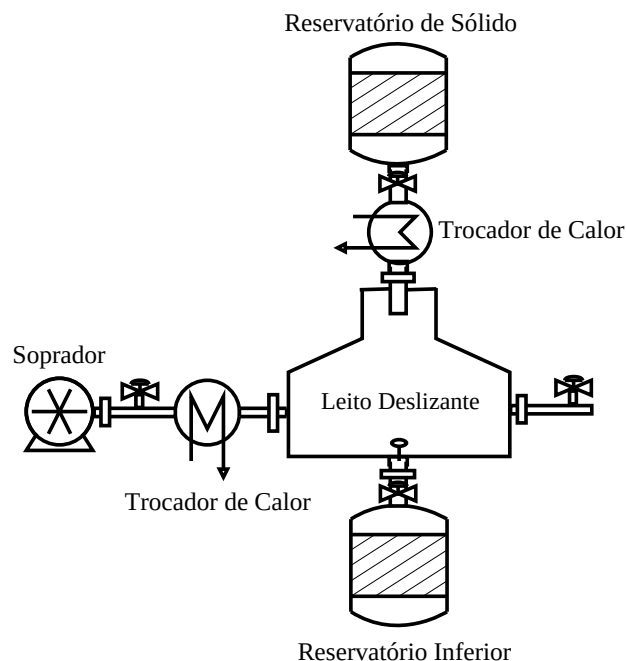


Figura 9.13: Fluxograma simplificado da unidade piloto de leito deslizante (Reproduzido de Sartori (1986)).

De maneira resumida, tem-se que o ar é alimentado na região central do secador,

através de um distribuidor de gás que garante uma injeção uniforme e bem distribuída da fase gasosa no secador. Uma válvula agulha controla a vazão de ar. O sólido particulado é alimentado no trocador a partir de um reservatório superior e descarregado em um reservatório inferior. O escoamento do sólido entre os reservatórios superior e inferior ocorre pela ação da força gravitacional (SARTORI, 1986; SILVA, 2004).

► *O Modelo matemático*

O modelo matemático para descrever o mecanismo de transferência de calor, em regime estacionário, foi proposto por Sartori (1986). Tal modelo considera a convecção através das superfícies das partículas sólidas como o mecanismo dominante na transferência de calor entre as fases. Além desta consideração, algumas suposições básicas adicionais foram consideradas, de modo a simplificar a elaboração do modelo (SARTORI, 1986):

- perfis planos de velocidade nas fases gás e sólido;
- perfis planos de temperatura nas regiões de entrada das fases gás e sólido;
- isolamento térmico das paredes do sistema;
- transferência de calor na direção perpendicular ao escoamento em cada fase desprezível em relação à transferência de calor na direção dos escoamentos;
- propriedades homogêneas do leito;
- escoamentos unidirecionais em ambas as fases;
- propriedades físico-químicas constantes ao longo do leito.

A partir das hipóteses descritas acima, obtém-se o seguinte sistema de equações para a fase gasosa e sólida, respectivamente:

$$Cp_g G_g \frac{\partial T_g}{\partial x} + hS(T_g - T_s) = 0 \quad (9.19)$$

$$Cp_s G_s \frac{\partial T_s}{\partial z} + hS(T_s - T_g) = 0 \quad (9.20)$$

sujeito às condições de contorno:

$$T_g(0, z) = T_{go} \text{ e } T_s(x, 0) = T_{so} \quad (9.21)$$

onde G_g é a velocidade mássica superficial do gás de secagem, G_s é a velocidade mássica superficial do sólido, Cp_g e Cp_s são os calores específicos do gás e do sólido, h é o coeficiente global de transferência de calor entre o sólido e o gás, T_g e T_s são as temperaturas do gás e do sólido, e T_{go} e T_{so} , são as respectivas condições de contorno para a temperatura, x é a

coordenada na direção do escoamento de gás e z é a coordenada na direção do escoamento de sólido, correspondente à altura do leito. A área superficial das partículas por unidade de volume do leito, S , é a definida como

$$S = \frac{6(1 - \varepsilon)}{\phi D_p} \quad (9.22)$$

onde ε é a porosidade do leito, ϕ é a esfericidade das partículas e D_p é o diâmetro das partículas.

A Tabela 9.8 apresenta os parâmetros físico-químicos do sólido e do gás, além das condições operacionais do processo.

Tabela 9.8: Propriedades do sólido e do gás e condições operacionais.

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
ε (-)	$3,778 \times 10^{-1}$	Cp_s (Cal/g°C)	0,53
ϕ (-)	0,9	Cp_g (Cal/g°C)	0,25
D_p (cm)	0,6	ρ (g/cm ³)	1,17
T_{go} (°C)	39,8	T_{so} (°C)	60
G_g (gs/cm ²)	$8,63 \times 10^{-2}$	G_s (gs/cm ²)	$4,38 \times 10^{-2}$

O problema de otimização proposto por Silva (2004) envolve a minimização da soma dos quadrados dos desvios entre os valores medidos das temperaturas, $T_{g \text{ exp}}$ e $T_{s \text{ exp}}$, e os valores previstos pelo modelo, T_g^k e T_s^k , para os N dados experimentais. O coeficiente de transferência de calor, h , é a variável de projeto, e deverá ser otimizado no intervalo $0 \text{ cal/cm}^2\text{s}^\circ\text{C} \leq h \leq 10^{-2} \text{ cal/cm}^2\text{s}^\circ\text{C}$. Dessa maneira, o problema de estimação de parâmetros é formulado como:

$$\begin{cases} \min f_1 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (T_{g \text{ exp}}^k - T_g^k)^2 \\ \min f_2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (T_{s \text{ exp}}^k - T_s^k)^2 \end{cases} \quad (9.23)$$

onde $T_{g \text{ exp}}^k$ e $T_{s \text{ exp}}^k$ são os valores medidos das temperaturas para a fase gasosa e sólida, respectivamente. T_g^k e T_s^k são as temperaturas da fase gasosa e sólida, respectivamente, dadas pelo modelo.

Os parâmetros utilizados na resolução desse caso através do MOGA I e do MODE são apresentados na Tab. 9.9.

Tabela 9.9: Parâmetros utilizados na resolução do problema da estimação do coeficiente global de transferência de calor em leito deslizante.

Parâmetro	ALGORITMO	
	MOGA I	MODE
N_{gen}	32	30
N	20	20
p_c	0,75	0,75
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

A solução normalizada obtida pelo MODE, comparada à do MOGA I é apresentada na Fig. 9.14. É importante destacar-se que nessa figura estão representados os valores adimensionalizados de f_1 ($f_1/f_{1\min}$) e de f_2 ($f_2/f_{2\min}$) com relação a seus valores mínimos ($f_{1\min}$ e $f_{2\min}$).

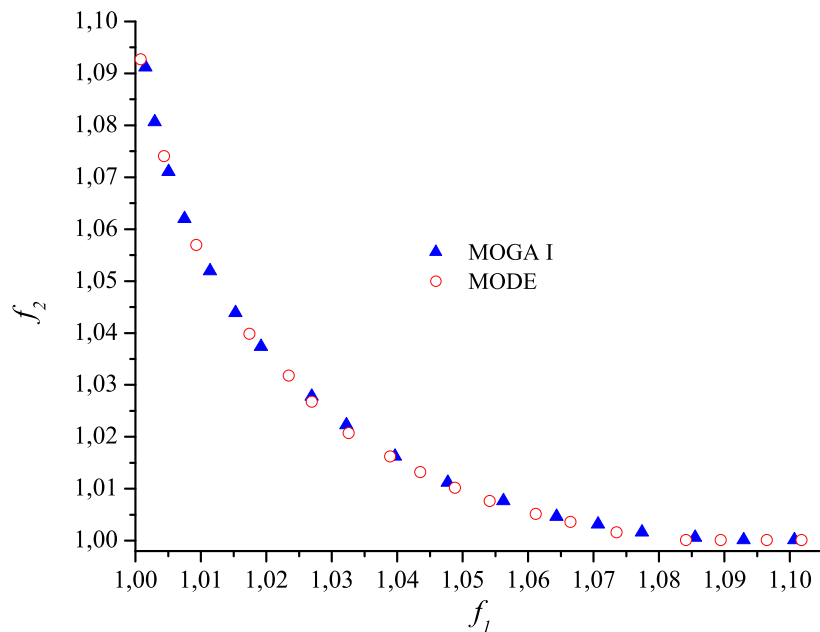


Figura 9.14: Curva de Pareto para o problema da estimação da transferência de calor.

O algoritmo MODE avaliou 1620 vezes as funções objetivo para a obtenção da curva de Pareto apresentada na Fig.9.14.

As Figuras 9.15 a 9.18 apresentam alguns perfis para T_s e T_g , para h igual a $3,348 \times 10^{-3} \text{ cal/cm}^2\text{s}^\circ\text{C}$.

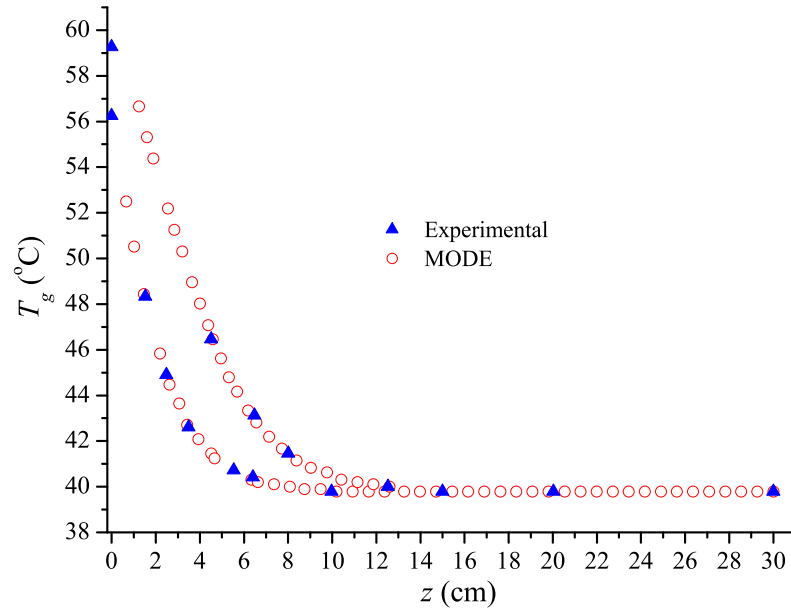


Figura 9.15: Perfis de T_g no plano $x=1,5$ cm em função da altura do secador.

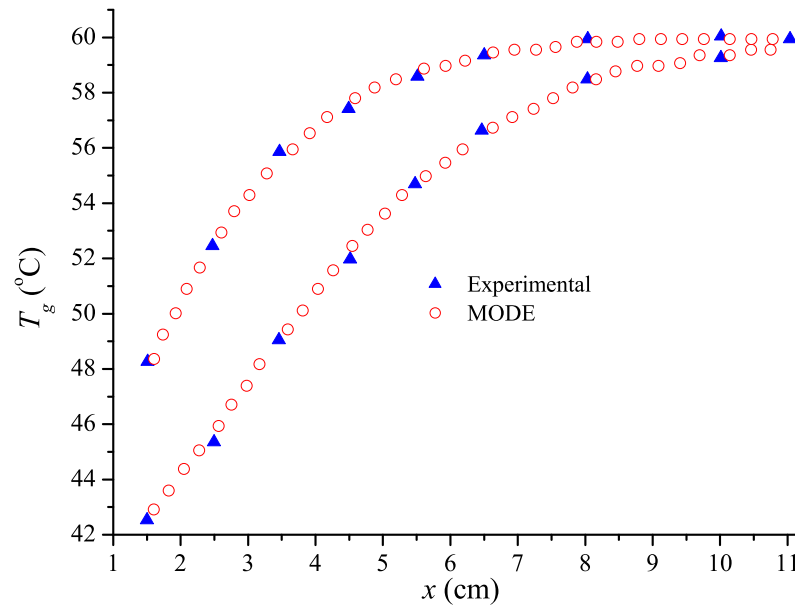


Figura 9.16: Perfis de T_g no plano $z=1,5$ cm em função da posição do secador.

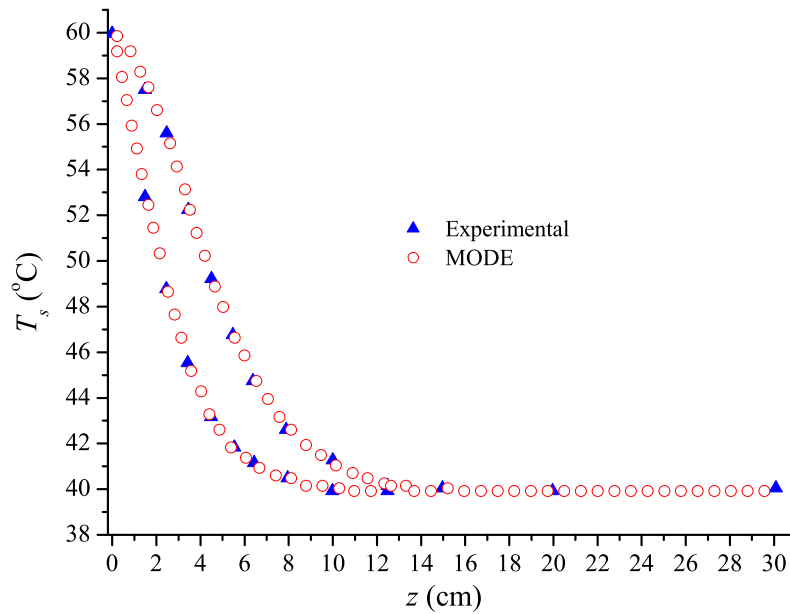


Figura 9.17: Perfis de T_s no plano $x=1,5$ cm em função da altura do secador.

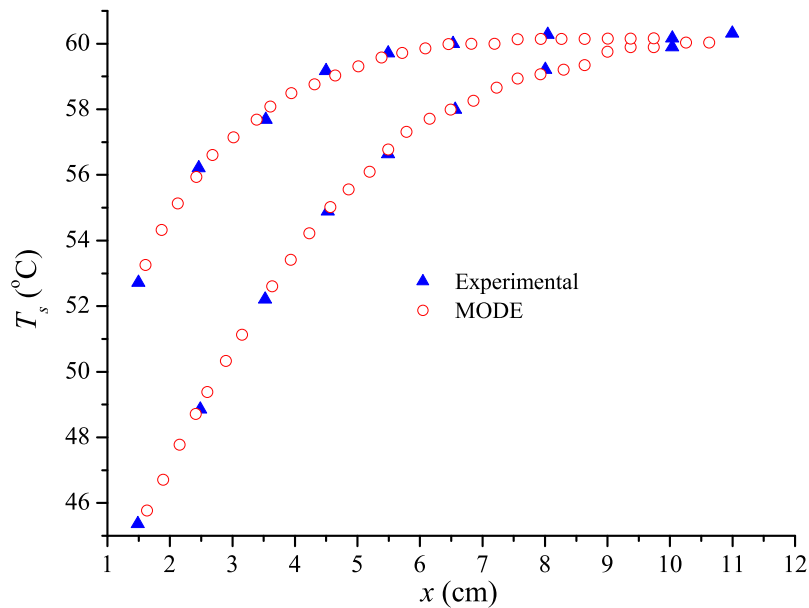


Figura 9.18: Perfis de T_s no plano $z=1,5$ cm em função da posição do secador.

9.2.2 Estimação de Parâmetros Cinéticos no Processo de Fermentação Batelada

Para a estimação de parâmetros cinéticos em bio-processos de engenharia, inúmeros tipos de modelos cinéticos que descrevem quantitativamente o comportamento de sistemas biológicos têm sido propostos e otimizados (MODAK et al., 1986; MODAK; LIM, 1989; FU;

BARFORD, 1993; WANG; CHENG, 1999; WANG et al., 2001; KAPADI; GUDI, 2004; LOBATO et al., 2006). Tradicionalmente, métodos baseados em gradientes têm sido empregados para estimação de parâmetros (BALTES et al., 1994; CAZZADOR; LUBENOVA, 1995). Contudo, recentemente, Wang et al. (2001) aplicaram o algoritmo de Evolução Diferencial para a estimação de parâmetros cinéticos em um processo de fermentação batelada para a produção de etanol e glicerol usando *Saccharomyces diastaticus* LORRE 316.

Para esse propósito, seja um processo conduzido em um biorreator de mistura perfeita que opera em regime de batelada, como apresentado na Fig. 9.19:

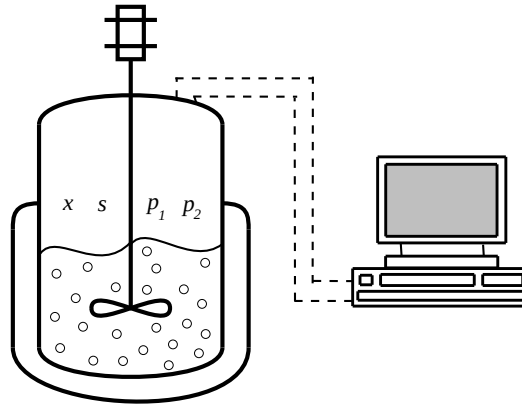


Figura 9.19: Biorreator para fermentação de etanol (Reproduzido de Wang et al. (2001)).

As equações que descrevem o crescimento de microorganismos, o consumo de glucose e a formação dos produtos são dadas por:

$$\frac{dx}{dt} = r_x \quad x(0) = x_o \quad (9.24)$$

$$\frac{ds}{dt} = r_s \quad s(0) = s_o \quad (9.25)$$

$$\frac{dp_1}{dt} = r_{p_1} \quad p_1(0) = p_{1o} \quad (9.26)$$

$$\frac{dp_2}{dt} = r_{p_2} \quad p_2(0) = p_{2o} \quad (9.27)$$

onde x é a concentração de células, s é a concentração de glucose (substrato), p_1 é concentração de etanol e p_2 é a concentração de glicerol. x_o , s_o , p_{1o} , p_{2o} são as concentrações iniciais de células, de glucose, de etanol e de glicerol, respectivamente. As taxas de reação para a célula, glucose, etanol e glicerol são dadas, respectivamente, por:

$$r_x = \mu x \quad (9.28)$$

$$r_s = -\frac{q_{p_1}}{Y_{p_1/s}}x - \frac{q_{p_2}}{Y_{p_2/s}}x \quad (9.29)$$

$$r_{p_1} = q_{p_1} x \quad (9.30)$$

$$r_{p_2} = q_{p_2} x \quad (9.31)$$

onde $Y_{p_1/s}$ e $Y_{p_2/s}$ são os fatores de rendimento de etanol e de glicerol, respectivamente. Os modelos cinéticos para o crescimento específico de células e para a formação dos produtos são expressas, respectivamente, por (WANG et al., 2001):

$$\mu = \frac{\mu_m s}{K_s + s + s^2/K_{sI}} \frac{K_{p_1}}{K_{p_1} + p_1 + p_1^2/K_{p_1I}} \frac{K_{p_2}}{K_{p_2} + p_2 + p_2^2/K_{p_2I}} \quad (9.32)$$

$$q_{p_1} = \frac{\nu_{p_1} s}{K'_s + s + s^2/K'_{sI}} \frac{K'_{p_1}}{K'_{p_1} + p_1 + p_1^2/K'_{p_1I}} \quad (9.33)$$

$$q_{p_2} = \frac{\nu_{p_2} s}{K''_s + s + s^2/K''_{sI}} \frac{K'_{p_2}}{K'_{p_2} + p_2 + p_2^2/K'_{p_2I}} \quad (9.34)$$

A Equação (9.32) considera a inibição por glicose, etanol e glicerol. Contudo, a formação de etanol e glicerol não está somente associada ao crescimento microbiano (Eq. (9.30) e Eq. (9.31)), mas também é inibido através da glicose (Eq. (9.33) e Eq. (9.34)).

Como se pode observar, existem 19 parâmetros que devem ser calculados a partir dos pontos experimentais. A estimação matemática dos parâmetros do modelo é baseada na minimização das quantidades que podem ser mensuradas. Dessa maneira, Wang et al. (2001) formulou o problema de minimização através do método dos mínimos quadrados, como descrito a seguir:

$$J = \frac{1}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} t_j \left(\frac{(x_{exp}(t_j) - x(t_j))^2}{x_{expmax}^2} + \frac{(s_{exp}(t_j) - s(t_j))^2}{s_{expmax}^2} + \frac{(p_{1exp}(t_j) - p_1(t_j))^2}{p_{1expmax}^2} + \frac{(p_{2exp}(t_j) - p_2(t_j))^2}{p_{2expmax}^2} \right) \quad (9.35)$$

onde N_p é o número de pontos amostrados; $x_{exp}(t_j)$, $s_{exp}(t_j)$, $p_{1exp}(t_j)$ e $p_{2exp}(t_j)$ são as medidas experimentais; $x(t_j)$, $s(t_j)$, $p_1(t_j)$ e $p_2(t_j)$ são as concentrações calculadas usando o modelo; e x_{expmax} , s_{expmax} , $p_{1expmax}$ e $p_{2expmax}$ são as concentrações experimentais máximas.

O problema proposto foi resolvido utilizando uma população com 5 indivíduos, probabilidade de cruzamento de 0,5 e taxa de perturbação gerada randomicamente ([0, 1]). Os valores dos parâmetros obtidos foram: $\mu_m=0,6397$ (-); $K_s=4,895$ (g/L); $K_{p_1}=90,35$ (g/L); $K_{p_2}=10,0$ (g/L); $\nu_{p_1}=3,429$ (-); $K'_s=17,45$ (g/L); $K'_{p_1}=460,4$ (g/L); $\nu_{p_2}=1,748$ (-); $K''_s=499,4$ (g/L); $K'_{p_2}=32,26$ (g/L); $K_{sI}=1115,1$ (g/L); $K_{p_1I}=12,89$ (g/L); $K_{p_2I}=12,45$ (g/L); $K'_{sI}=110,3$ (g/L); $K'_{p_1I}=3,71$ (g/L); $K''_{sI}=27,78$ (g/L); $K'_{p_2}=0,3797$ (g/L); $Y_{p_1/s}=0,505$

(-) e $Y_{p2/s}=0,1955$ (-).

No contexto dessa tese, esse problema foi transformado em um problema multi-objetivo a partir da quebra da métrica original da seguinte maneira:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min f_1 = \frac{1}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} \left(\frac{(x_{exp}(t_j) - x(t_j))^2}{x_{expmax}^2} \right) \\ \min f_2 = \frac{1}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} \left(\frac{(s_{exp}(t_j) - s(t_j))^2}{s_{expmax}^2} \right) \\ \min f_3 = \frac{1}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} \left(\frac{(p_{1exp}(t_j) - p_1(t_j))^2}{p_{1expmax}^2} \right) \\ \min f_4 = \frac{1}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} \left(\frac{(p_{2exp}(t_j) - p_2(t_j))^2}{p_{2expmax}^2} \right) \end{array} \right. \quad (9.36)$$

Assim o problema consiste na obtenção dos parâmetros cinéticos (μ_m , K_s , K_{p1} , K_{p2} , ν_{p1} , K'_s , K'_{p1} , ν_{p2} , K''_s , K'_{p2} , K_{sI} , K_{p1I} , K_{p2I} , K'_{sI} , K'_{p1I} , K''_{sI} , K'_{p2} , $Y_{p1/s}$ e $Y_{p2/s}$) através da minimização de f_1 , f_2 , f_3 e f_4 sujeito às equações Eq. (9.24)- Eq.(9.34). Os limites para os parâmetros foram definidos a partir dos resultados obtidos por Wang et al. (2001) (os limites inferior e superior das variáveis são tomados como sendo 50 % abaixo e 75 % acima dos valores obtidos para um objetivo, respectivamente).

A Tabela 9.10 apresenta os parâmetros utilizados no NSGA II e no MODE.

Tabela 9.10: Parâmetros usados na resolução do problema do fermentador batelada.

Parâmetro	ALGORITMO MODE
N_{gen}	2000
N	30
p_c	0,9
F	0,50
R	10
r	0,90

As curvas de Pareto obtidas para os objetivos são apresentadas nas Figs. 9.20 a 9.25.

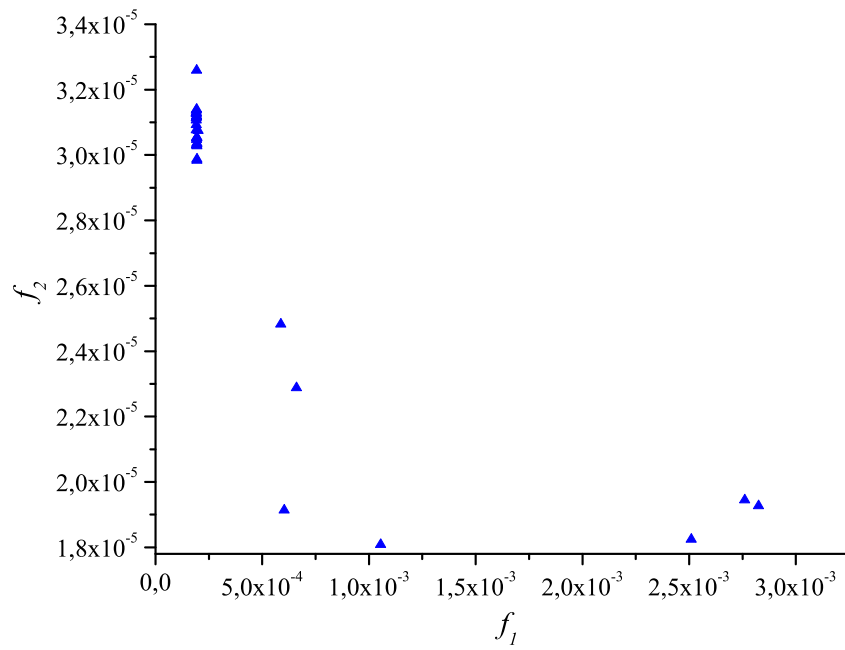


Figura 9.20: $f_1 \times f_2$ para o problema da fermentação em reator batelada.

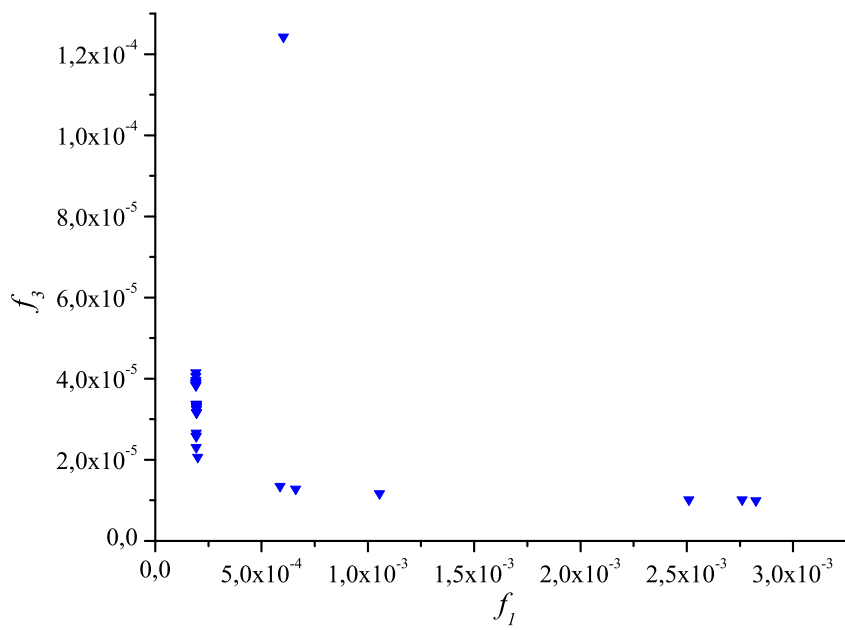


Figura 9.21: $f_1 \times f_3$ para o problema da fermentação em reator batelada.

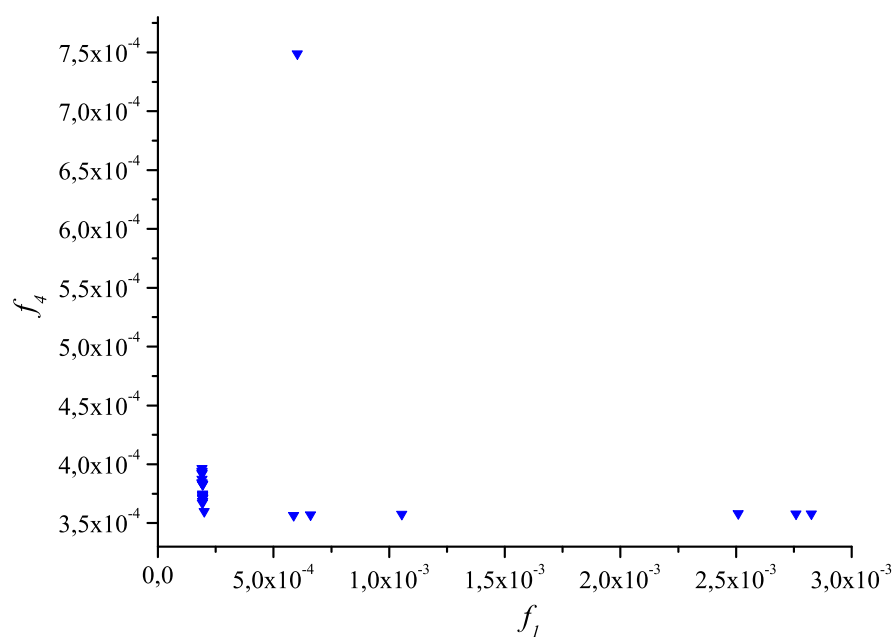


Figura 9.22: $f_1 \times f_4$ para o problema da fermentação em reator batelada.

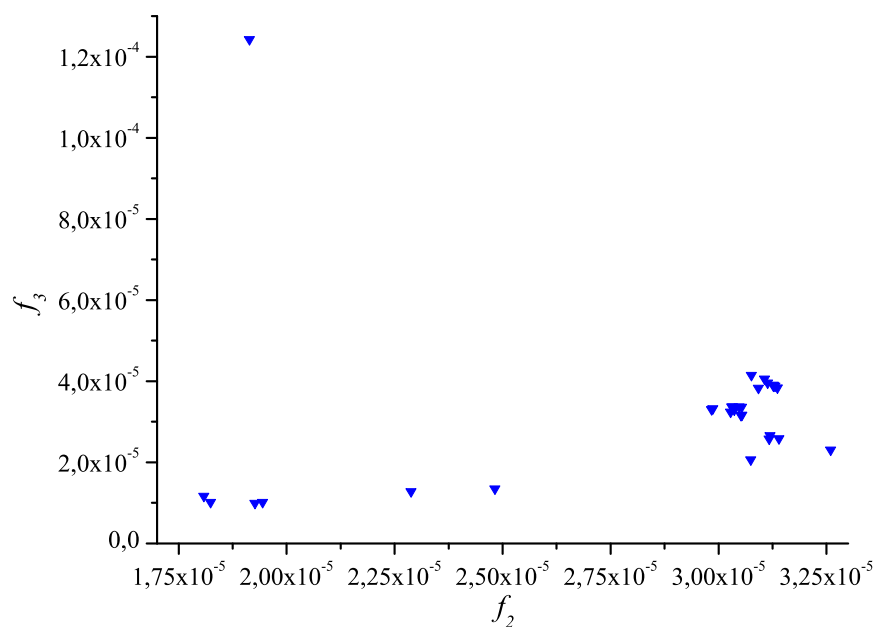


Figura 9.23: $f_2 \times f_3$ para o problema da fermentação em reator batelada.

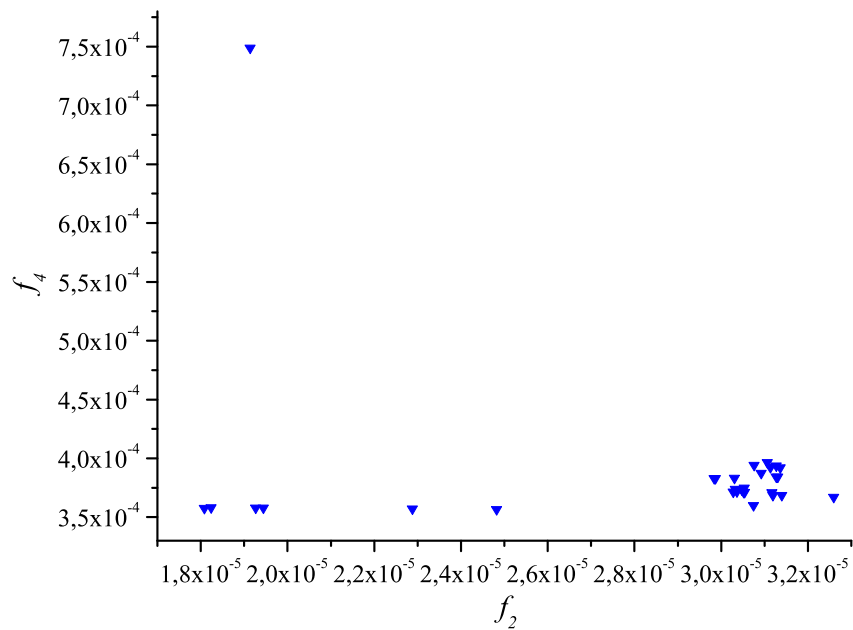


Figura 9.24: $f_2 \times f_4$ para o problema da fermentação em reator batelada.

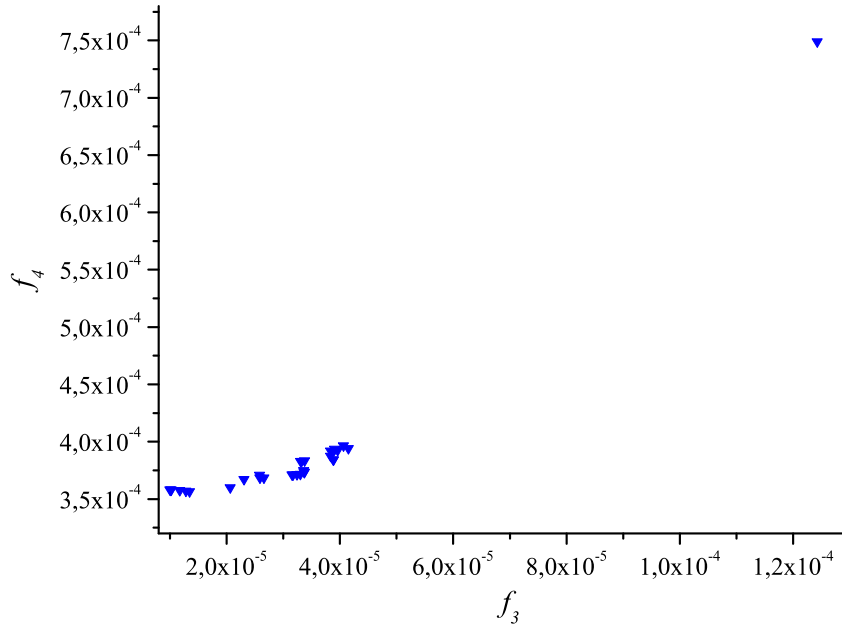
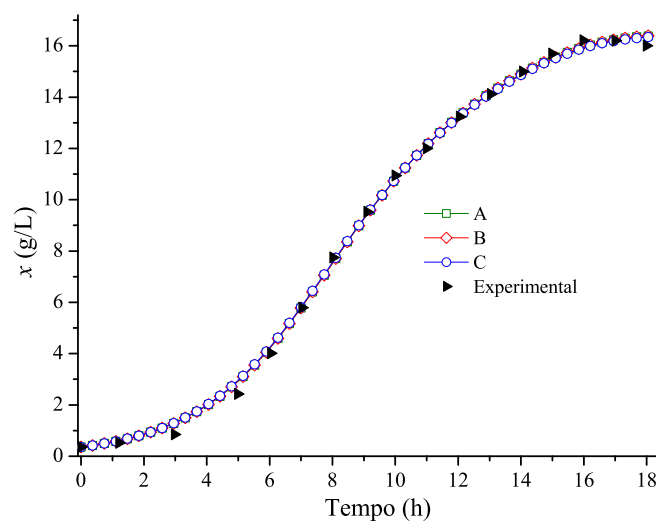


Figura 9.25: $f_3 \times f_4$ para o problema da fermentação em reator batelada.

Algumas soluções da curva de Pareto são apresentadas na Tab. 9.11. As Figuras 9.26 a 9.29 apresentam os perfis das variáveis de estado para os pontos mostrados nesta tabela.

Tabela 9.11: Soluções de Pareto para o problema da fermentação batelada.

Parâmetro	Unidade	SOLUÇÃO		
		A	B	C
μ_m	-	0,515469	0,515558	0,517563
K_s	g/L	6,403747	6,404613	6,376951
K_{p_1}	g/L	118,7724	118,5580	114,7582
K_{p_2}	g/L	11,36426	11,36934	11,23812
ν_{p_1}	-	3,343416	3,337400	3,316194
K'_s	g/L	22,54687	22,61220	22,78332
K'_{p_1}	g/L	628,2264	627,9976	629,4639
ν_{p_2}	-	1,072412	1,080729	1,113056
K''_s	g/L	467,4483	469,0964	480,4529
K'_{p_2}	g/L	38,39507	38,39052	38,40627
K_{sI}	g/L	1416,335	1418,105	1433,536
K_{p_1I}	g/L	16,63674	16,66969	16,96759
K_{p_2I}	g/L	7,287944	7,303986	7,287944
K'_{sI}	g/L	99,65441	99,54452	98,25799
K'_{p_1I}	g/L	3,376817	3,376531	3,377174
K''_{sI}	g/L	42,35832	42,42371	42,83564
K'_{p_2I}	g/L	0,664264	0,664475	0,620357
$Y_{p_1/s}$	-	0,513406	0,513273	0,506199
$Y_{p_2/s}$	-	0,203097	0,203173	0,209744
$f_1 \times 10^3$	-	0,191620	0,192743	0,200776
$f_2 \times 10^3$	-	0,031067	0,030307	0,030745
$f_3 \times 10^3$	-	0,040610	0,033749	0,020662
$f_4 \times 10^3$	-	0,396610	0,383409	0,360121

**Figura 9.26:** Perfis de concentração de células.

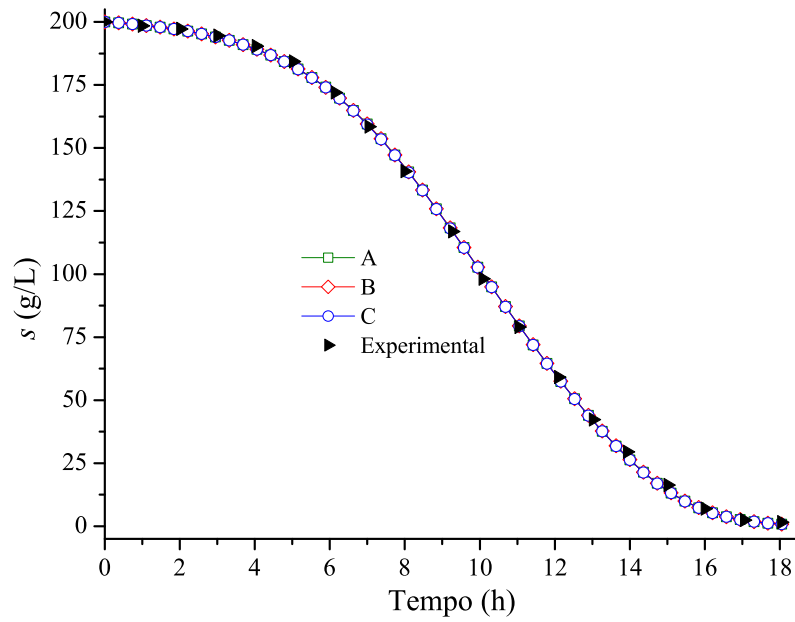


Figura 9.27: Perfis de concentração de glucose.

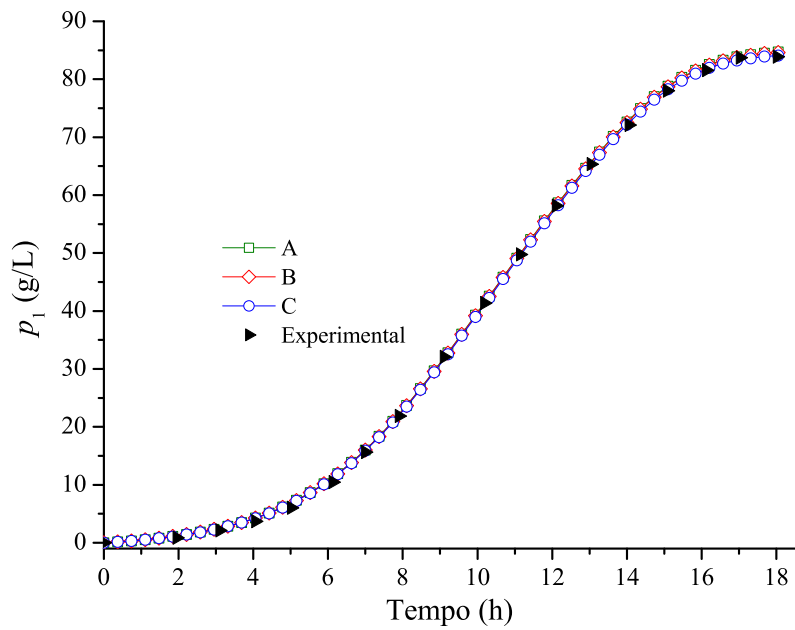


Figura 9.28: Perfis de concentração de etanol.

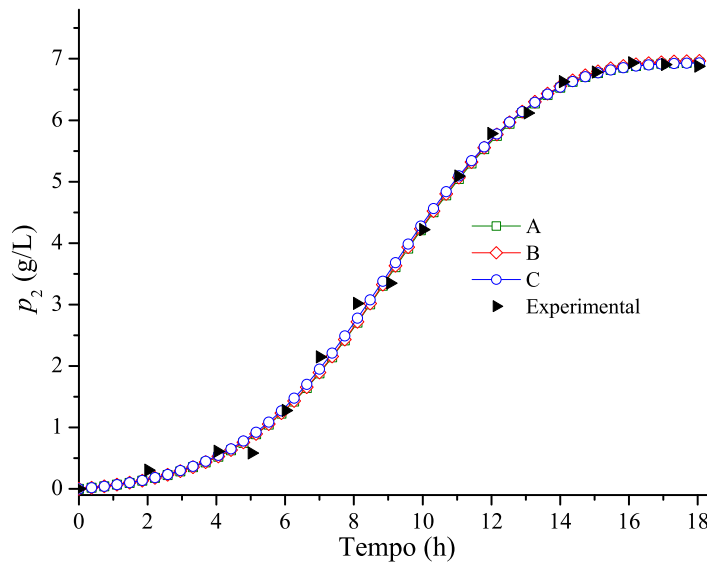


Figura 9.29: Perfis de concentração de glicerol.

É importante ressaltar que o número elevado de gerações utilizado pelo MODE, totalizando 120030 avaliações da função objetivo, foi necessário para assegurar uma boa qualidade na aproximação observada nas figuras anteriores.

9.2.3 Estimação de Parâmetros Radiativos e Térmicos

Considere a situação representada na Fig. 9.30. Uma placa plana feita de um material espalhador isotrópico (o espalhamento não depende do ângulo) em um meio participante, isto é; um meio que absorve e espalha radiação, cinza, com superfícies transparentes e sujeita à radiação externa isotrópica incidente na superfície de $\tau=0$.

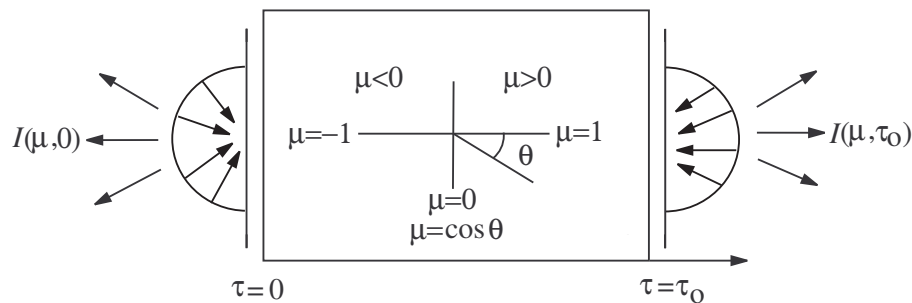


Figura 9.30: Transferência de calor por condução e radiação térmica em um meio participante (Reproduzido de Silva Neto e Moura Neto (2005)).

O modelo que descreve o fenômeno de transferência radiativa é dado por (OZISIK, 1973; SILVA NETO; MOURA NETO, 2005):

$$\mu \frac{\partial I}{\partial \tau}(\mu, \tau) + I(\mu, \tau) = H(\theta) + \frac{\omega}{2} \int_{-1}^1 I(\mu', \tau) d\mu' \quad (9.37)$$

com $I(\mu, 0) = A_1 = 1$ para $\mu > 0$ e $I(\mu, \tau_0) = A_2 = 0$ para $\mu < 0$ e $0 \leq \tau \leq \tau_0$ e $-1 \leq \mu \leq 1$.

$I(\mu, \tau)$ é a intensidade da radiação, τ é a variável óptica espacial, μ é o cosseno do ângulo polar formado entre a direção do feixe de radiação e o eixo τ , ω é o albedo de espalhamento simples que representa a relação entre a radiação espalhada e a radiação absorvida, e τ_0 é a espessura óptica do meio.

O mecanismo de transferência de calor por condução unidimensional, em regime permanente é dado pela relação:

$$\frac{d^2 \theta}{d\tau^2}(\tau) - \frac{1 - \omega}{N} (\theta^4(\tau) - G(\tau)) = 0 \quad (9.38)$$

onde

$$G(\tau) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I(\mu', \tau) d\mu' \quad (9.39)$$

$$H(\tau) = (1 - \omega)\theta^4(\tau) \quad (9.40)$$

e sujeito às seguintes condições de contorno: $\theta(0) = 1$ e $\frac{d\theta}{d\tau} \Big|_{(\tau=\tau_0)} = 0$.

$\theta(\tau)$ é temperatura adimensional, H é o termo fonte relacionado à temperatura no meio, N é o parâmetro de condução-radiação.

O problema inverso acoplado (condução+radiação) é definido como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min f_1 = \sum_{i=1, \mu_i < 0}^n (I_{cal}(\mu_i, 0) - I_{exp}(\mu_i, 0))^2 + \sum_{j=1, \mu_j > 0}^n (I_{cal}(\mu_j, \tau_0) - I_{exp}(\mu_j, \tau_0))^2 + \\ \quad + \sum_{j=1, \tau_k \in \Omega}^{2n} (I_{cal}(\mu_j, \tau_k) - I_{exp}(\mu_j, \tau_k))^2 \\ \min f_2 = (\theta_{cal}(0) - \theta_{exp}(0))^2 + (\theta_{cal}(\tau_0) - \theta_{exp}(\tau_0))^2 + \sum_{k=1, \tau_k \in \Omega}^n (\theta_{cal}(\tau_k) - \theta_{exp}(\tau_k))^2 \end{array} \right. \quad (9.41)$$

onde ζ_{cal} e ζ_{exp} ($\zeta = [I, \theta]$) são as grandezas calculadas e experimentais, respectivamente. O espaço de projeto adimensional é definido como: $0,5 < \tau_0 < 1,25$, $0,7 \leq \omega \leq 1,0$ e $0,02 < N < 0,08$ (SILVA NETO; MOURA NETO, 2005) e Ω pertencente ao conjunto $\{0,65$

0,80 0,95 1,10 1,2}.

Devido ao fato de não se dispor de dados experimentais, optou-se, conforme utilizado por Silva Neto e Moura Neto (2005) e Chalhoub et al. (2007) em se utilizar os valores $\tau_0=1,0$, $\omega=0,9$ e $N=0,05$ para a geração dos “dados experimentais” sintéticos através da resolução do problema direto. Erros de medida serão considerados através de acréscimo de um ruído à solução calculada através da seguinte relação:

$$\xi_{exp} = \xi_{cal} + r_i \sigma \quad (9.42)$$

onde ξ_{cal} e ξ_{exp} ($\xi = [I \ \theta]$) são os valores calculados usando $\tau_0=1,0$, $\omega=0,9$ e $N=0,05$, r_i é um número randômico entre -1 e 1 e σ é o desvio padrão associado ao procedimento experimental.

A resolução do problema direto consiste dos seguintes passos:

- discretização da variável espacial μ , utilizando os seguintes valores: $\{-0,9983 -0,9830 -0,9426 -0,8765 -0,7864 -0,6750 -0,5451 -0,4003 -0,2446 -0,0823 0,0823 0,2446 0,4003 0,5451 0,6750 0,7864 0,8765 0,9426 0,9830 0,9983\}$ (CHALHOUB et al., 2007);
- em seguida faz-se uso da Quadratura de Gauss-Legendre para aproximar a integral da Eq. (9.37), obtendo assim um sistema de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's) de valor de contorno (n pontos para $\mu < 0$, que apresentam condição de contorno em $\tau = \tau_0$ e n pontos para $\mu > 0$ que apresentam condição de contorno em $\tau = 0$). Ao sistema de EDO's é aplicada a técnica de colocação normal em 10 pontos.

A Tabela 9.12 apresenta os parâmetros utilizados pelo NSGA II (2265 avaliações da função objetivo) e MODE (1815 avaliações da função objetivo).

Tabela 9.12: Parâmetros usados no problema de transferência de calor por radiação e condução.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	150	60
N	15	15
p_c	0,9	0,9
p_m	0,02	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

A população inicial e a curva de Pareto são apresentadas nas Figs. 9.31 e 9.32, respectivamente, para o problema com desvio padrão nulo ($\sigma=0$).

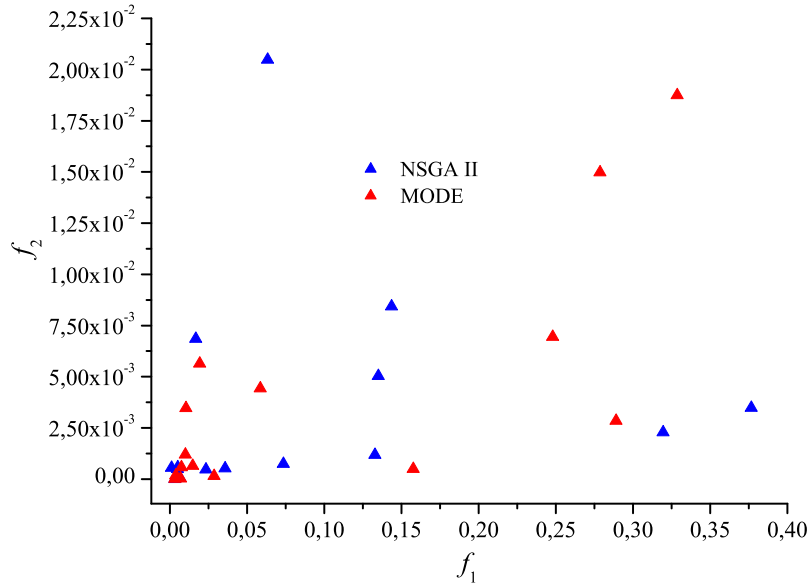


Figura 9.31: População inicial para o problema de transferência de calor por radiação e condução sem ruído.

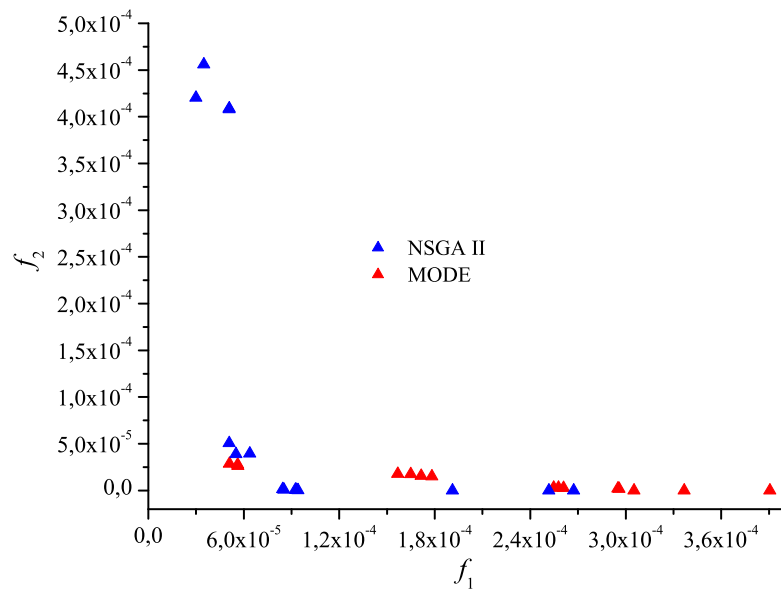


Figura 9.32: Curva de Pareto para o problema de transferência de calor por radiação e condução sem ruído.

Alguns pontos da curva de Pareto são mostrados na Tab. 9.13. As Figs. 9.33 e 9.34 apresentam os perfis de intensidade de radiação e de temperatura para $\tau_0 = 0,9898$, $\omega = 0,8928$ e $N = 0,0535$ (valores médios entre todos os indivíduos da população).

Tabela 9.13: Curva de Pareto para o problema de transferência de calor por radiação e condução sem ruído.

τ_0	ω	N	f_1	f_2
$9,8453 \times 10^{-1}$	$8,8779 \times 10^{-1}$	$5,3508 \times 10^{-2}$	$3,9068 \times 10^{-4}$	$1,4457 \times 10^{-14}$
$9,9749 \times 10^{-1}$	$9,0042 \times 10^{-1}$	$5,4736 \times 10^{-2}$	$5,0977 \times 10^{-5}$	$2,8443 \times 10^{-5}$
$9,9134 \times 10^{-1}$	$8,9543 \times 10^{-1}$	$5,4887 \times 10^{-2}$	$1,7814 \times 10^{-4}$	$1,4970 \times 10^{-5}$
$9,8666 \times 10^{-1}$	$8,8859 \times 10^{-1}$	$5,1677 \times 10^{-2}$	$2,5479 \times 10^{-4}$	$3,0579 \times 10^{-6}$
$9,9741 \times 10^{-1}$	$8,9986 \times 10^{-1}$	$5,4785 \times 10^{-2}$	$5,6417 \times 10^{-5}$	$2,6240 \times 10^{-5}$
$9,9251 \times 10^{-1}$	$8,9602 \times 10^{-1}$	$5,5095 \times 10^{-2}$	$1,5669 \times 10^{-4}$	$1,7666 \times 10^{-5}$
$9,8495 \times 10^{-1}$	$8,8940 \times 10^{-1}$	$5,2876 \times 10^{-2}$	$3,3682 \times 10^{-4}$	$7,4722 \times 10^{-11}$
$9,8580 \times 10^{-1}$	$8,8968 \times 10^{-1}$	$5,2793 \times 10^{-2}$	$3,0521 \times 10^{-4}$	$5,0254 \times 10^{-9}$
$9,8656 \times 10^{-1}$	$8,8856 \times 10^{-1}$	$5,1777 \times 10^{-2}$	$2,6091 \times 10^{-4}$	$2,7138 \times 10^{-6}$
$9,8574 \times 10^{-1}$	$8,8831 \times 10^{-1}$	$5,2050 \times 10^{-2}$	$2,9518 \times 10^{-4}$	$1,9045 \times 10^{-6}$
$9,9226 \times 10^{-1}$	$8,9576 \times 10^{-1}$	$5,5137 \times 10^{-2}$	$1,6494 \times 10^{-4}$	$1,7296 \times 10^{-5}$
$9,9156 \times 10^{-1}$	$8,9564 \times 10^{-1}$	$5,4880 \times 10^{-2}$	$1,7152 \times 10^{-4}$	$1,5467 \times 10^{-5}$
$9,8574 \times 10^{-1}$	$8,8831 \times 10^{-1}$	$5,2069 \times 10^{-2}$	$2,9590 \times 10^{-4}$	$1,8583 \times 10^{-6}$
$9,9712 \times 10^{-1}$	$9,0013 \times 10^{-1}$	$5,4760 \times 10^{-2}$	$5,6138 \times 10^{-5}$	$2,7699 \times 10^{-5}$
$9,8659 \times 10^{-1}$	$8,8858 \times 10^{-1}$	$5,1711 \times 10^{-2}$	$2,5782 \times 10^{-4}$	$2,9221 \times 10^{-6}$

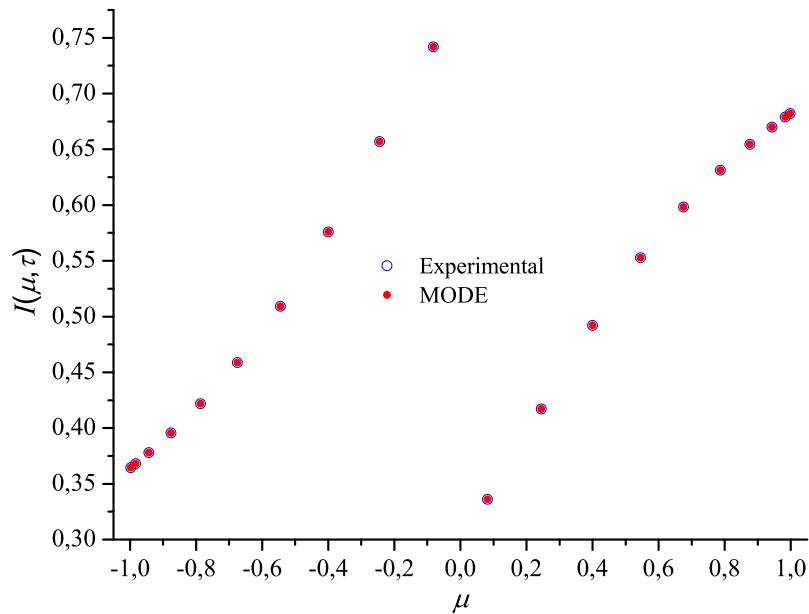


Figura 9.33: Perfil de intensidade de radiação.

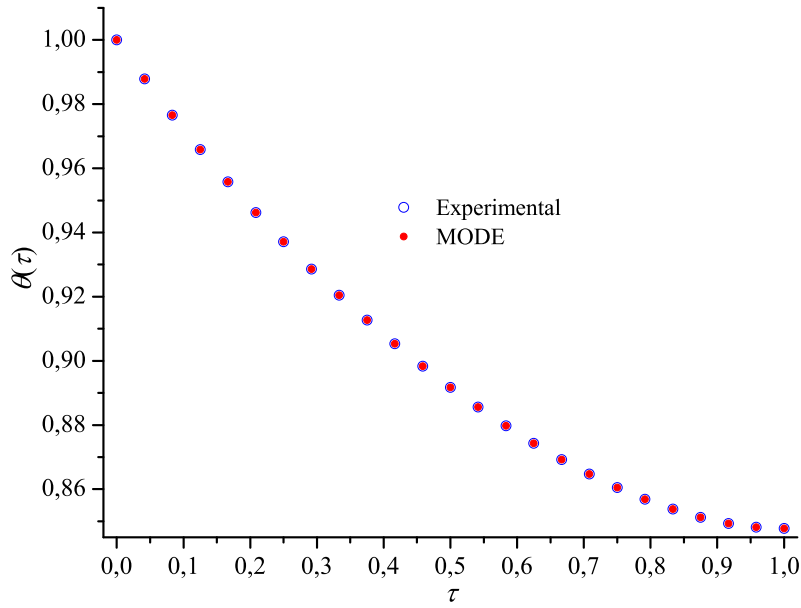


Figura 9.34: Perfil de temperatura para o problema de transferência de calor por radiação.

As Figuras 9.35 e 9.36 apresentam os perfis da intensidade da radiação para diferentes valores do cosseno do ângulo polar μ com relação à variável óptica τ .

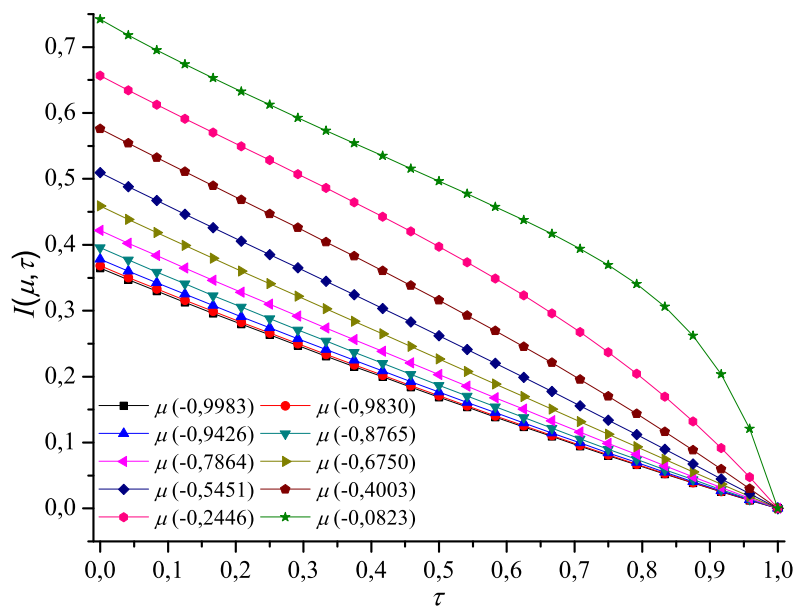


Figura 9.35: Perfis da intensidade da radiação para diferentes valores do cosseno do ângulo polar μ (<0) com relação à variável óptica τ .

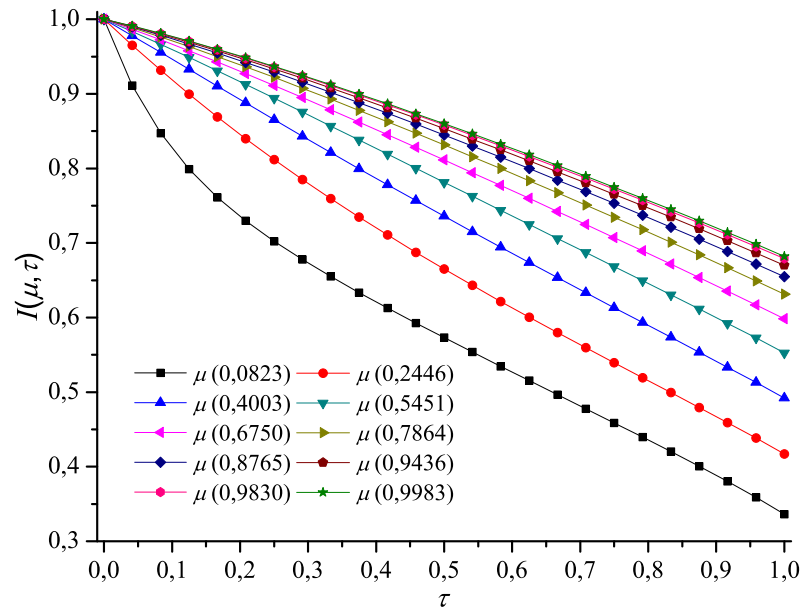


Figura 9.36: Perfis da intensidade da radiação para diferentes valores do cosseno do ângulo polar μ (>0) com relação à variável óptica τ .

A Figura 9.37 apresenta a curva de Pareto considerando desvio padrão (σ) igual a 10%, isto é, a presença de ruído nos pontos experimentais sintéticos.

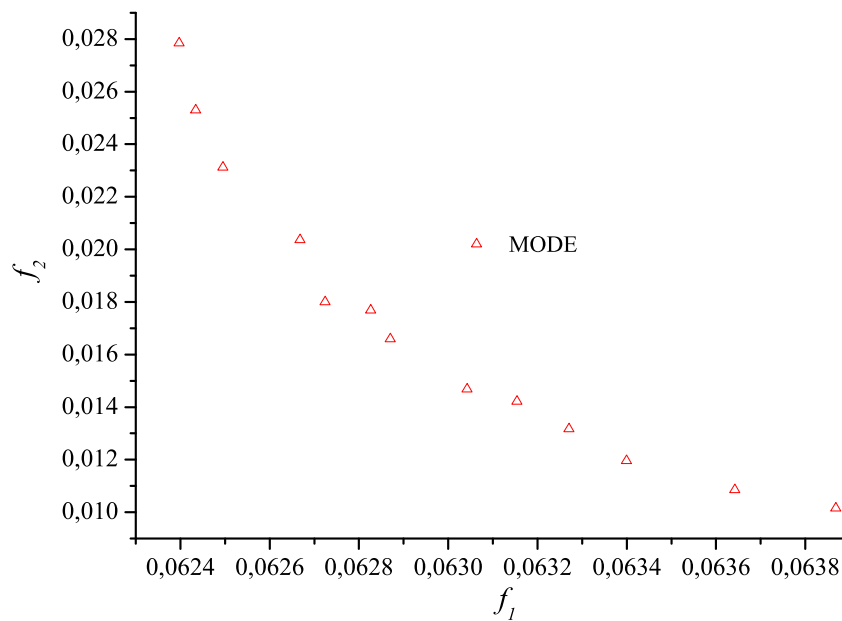


Figura 9.37: Curva de Pareto para o problema de transferência de calor por radiação e condução com ruído ($\sigma=10\%$).

Como era de se esperar, a presença de ruído faz com que a ordem de grandeza dos objetivos aumente em comparação com o perfil apresentado na Fig. 9.32.

9.2.4 Estimação de Parâmetros Cinéticos em um Secador Rotativo

De forma geral, sabe-se que a operação de secagem utiliza os mecanismos de condução, convecção ou radiação para a transferência de energia de uma fonte de calor para o material a ser seco. Essa fonte de calor pode ser um gás quente ou até mesmo uma superfície metálica. No mecanismo de secagem convectiva, o calor sensível de um meio gasoso (fonte de calor) é fornecido para a superfície do material por convecção. O agente de secagem que flui através ou ao longo do corpo também remove a água evaporada e a transporta para fora do secador, o que configura o conhecido modelo a duas fases (KIRANOUDIS et al., 1997).

Tradicionalmente, os secadores podem ser de três tipos básicos: a correia transportadora, o leito fluidizado e o secador rotativo. Todos esses tipos são amplamente utilizados na indústria química em operações de desidratação de materiais que vão de alimentos a minerais inorgânicos (KIRANOUDIS et al., 1997; ARRUDA, 2008).

O modelo a duas fases considera uma fase gasosa composta por ar seco mais água no estado de vapor e uma fase sólida composta por sólido seco mais água no estado líquido. Assim, os processos simultâneos de transferência de calor e massa se desenvolvem entre uma fase gasosa e uma sólida, em que apenas um componente se transfere entre elas, como apresentado esquematicamente na Fig. 9.38 para o secador rotativo com cascadeamento.

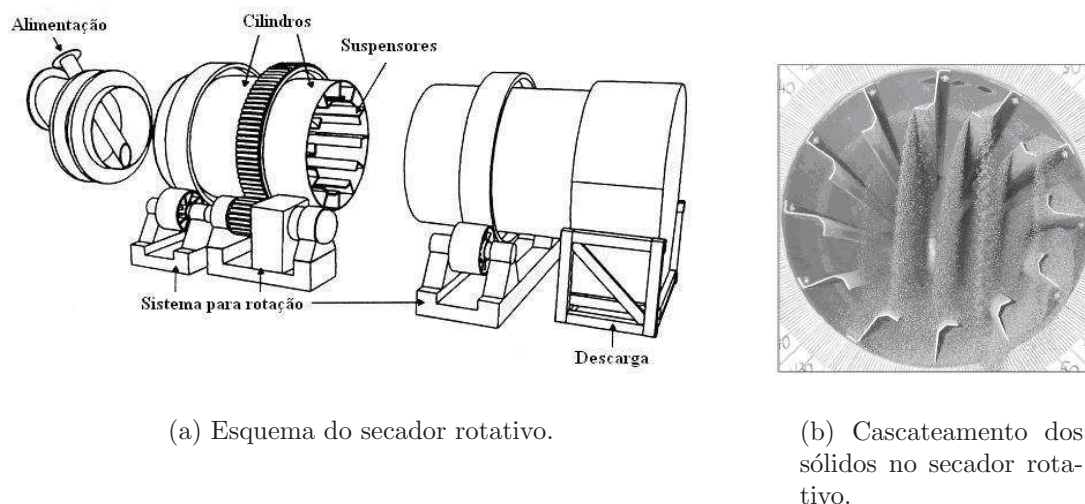


Figura 9.38: Secador rotativo com cascadeamento (Reproduzido de Arruda (2008)).

A modelagem matemática de secadores objetivando o projeto e análise desses processos de transferência têm sido tema de pesquisas ao longo das últimas décadas. Dentre um dos trabalhos mais relevantes, pode-se citar Sartori (1986), que estudou o mecanismo de transferência de calor em leito deslizante e Massarani e Valença (1996) com a extensão do trabalho de Sartori, analisando diversos tipos de configurações para o secador (cruzado, contra corrente, concorrente e a combinação delas) aplicados à secagem de milho.

No contexto deste trabalho, seja o modelo de secador rotativo desenvolvido por Arruda (2008) com o objetivo de estimar os perfis de temperatura e umidade do sólido e do ar de secagem em secadores rotativos de contato direto descrito esquematicamente na Fig. 9.39:

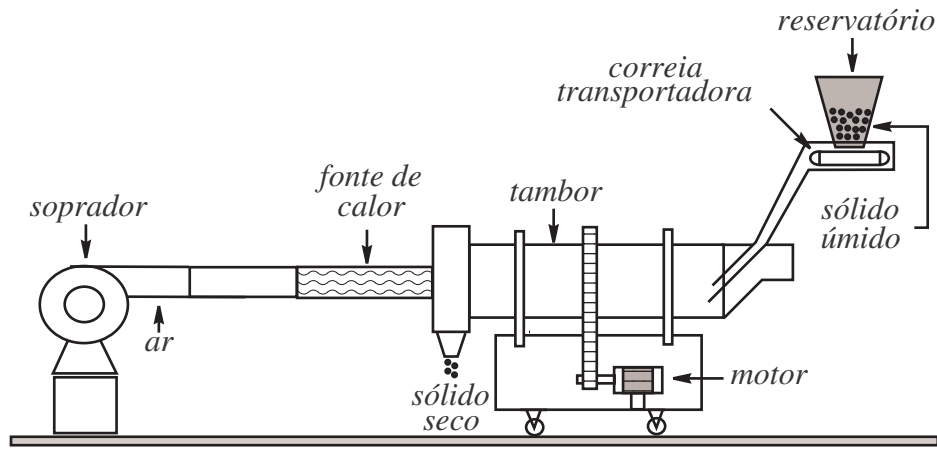


Figura 9.39: Esquema da unidade piloto do secador rotativo (Reproduzido de Arruda (2008)).

A partir das hipóteses utilizadas por Arruda (2008), o modelo proposto para previsão dos perfis de umidade e temperatura do sólido e do ar de secagem no interior do secador rotativo operando em contracorrente é composto pelo seguinte sistema de equações:

$$\frac{dW}{dz} = -\frac{R_w H}{G_f} \quad (9.43)$$

$$\frac{dM}{dz} = -\frac{R_w H}{G_S} \quad (9.44)$$

$$\frac{dT_f}{dz} = \frac{(UaV(T_f - T_S) + R_w H(\lambda + Cp_v T_f) + U_P \pi D L(T_f - T_{amb}))}{G_f(Cp_f + WCp_v)} \quad (9.45)$$

$$\frac{dT_S}{dz} = \frac{(UaV(T_f - T_S) + R_w H C p_l T_S - R_w H(\lambda + Cp_v(T_f - T_S)))}{G_S(Cp_S + MCp_l)} \quad (9.46)$$

onde C_p é o calor específico (kJ/kg°C), D é o diâmetro interno do tambor (m), G é a vazão mássica (kg/s), h é a Entalpia (kJ/kg), H é a carga total do secador (kg), L é o comprimento total do tambor (m), M é a umidade do sólido (kg/kg), R_w é a taxa

de secagem (s^{-1}), S é a área da seção transversal do tambor (m^2), T é a temperatura ($^{\circ}C$), T_{amb} é a temperatura ambiente ($^{\circ}C$), Ua é o coeficiente de transferência volumétrico ($kJ/sm^3^{\circ}C$), V é o volume do tambor (m^3), W é a umidade absoluta do ar (kg/kg), x é a coordenada cartesiana, t é o tempo de residência (s), λ é calor latente de vaporização da água (kJ/kg) e os subscritos são: f para fluido, s para sólido, l para líquido e v para vapor.

As condições de contorno: $T_f(1) = T_{fo}$, $T_s(0) = T_{so}$, $W(1) = W_o$ e $M(0) = M_o$.

A taxa de secagem local é dada por:

$$-R_w = \frac{(MR - 1)(M_o - M_{eq})}{t} \quad (9.47)$$

A umidade adimensional MR é dada pela equação de Page (PAGE, 1949):

$$MR = \exp \left(-A \exp \left(\frac{-B}{T_f} \right) t^C \right) \quad (0 \leq t \leq TR) \quad (9.48)$$

A umidade de equilíbrio M_{eq} é dada pela equação de Halsey modificada (OSBORN et al., 1989), com parâmetros obtidos a partir dos dados experimentais para o material particulado utilizado.

$$M_{eq} = \left(\frac{-\exp(-0,0445T_s - 2,0795)}{\ln(UR)} \right)^{0,6969} \quad (9.49)$$

O coeficiente de transferência volumétrico e o coeficiente de perda de calor são dados pelas seguintes equações:

$$Ua = k(G_f)^m (G_s)^n \quad (9.50)$$

$$U_P = k_P (G_f)^{m_P} \quad (9.51)$$

O problema inverso é definido como:

$$\begin{cases} \min f_1 = \frac{1}{M^{max}} \sum_{i=1}^n (M^{cal} - M^{exp})^2 \\ \min f_2 = \frac{1}{T_s^{max}} \sum_{i=1}^n (T_s^{cal} - T_s^{exp})^2 + \frac{1}{T_f^{max}} \sum_{i=1}^n (T_f^{cal} - T_f^{exp})^2 \end{cases} \quad (9.52)$$

onde Ω^{max} ($\Omega = \{M \ T_s \ T_f\}$) é o maior valor experimental observado para a variável Ω .

Nesse estudo de caso, deseja-se estimar os parâmetros cinéticos A , B e C da Eq. 9.48 e os coeficientes de perda de calor k_P e m_P da Eq. 9.51. As variáveis de projeto não devem violar as restrições: $-10 \text{ s}^{-1} \leq A \leq 500 \text{ s}^{-1}$, $-10 \text{ }^\circ\text{C} \leq B \leq 500 \text{ }^\circ\text{C}$, $-10 (-) \leq C \leq 500 (-)$, $-10 \text{ kJ}/(\text{kg m}^2\text{ }^\circ\text{C}) \leq k_P \leq 500 \text{ kJ}/(\text{kg m}^2\text{ }^\circ\text{C})$, $-10 (-) \leq m_P \leq 500 (-)$.

O material particulado utilizado no processo de secagem é o fertilizante do tipo SSP (superfosfato simples) com composição aproximada de 16 a 24% de P_2O_5 solúvel em água, 7 a 8 % de ácidos livres, água e outros componentes.

A Tabela 9.14 apresenta as condições de operação e os parâmetros físico-químicos do sólido e do gás.

Tabela 9.14: Condições operacionais do secador rotativo.

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
$M_o(z=0) (-)$	0,138	$W_o(z=1) (-)$	0,004	$T_s(z=0) (^\circ\text{C})$	25,0
$T_f(z=1) (^\circ\text{C})$	74,6	$UR (-)$	0,190	$Cp_s (\text{kJ}/(\text{kg}^\circ\text{C}))$	1,025
$Cp_f (\text{kJ}/(\text{kg}^\circ\text{C}))$	1	$Cp_l (\text{kJ}/(\text{kg}^\circ\text{C}))$	4,186	$Cp_v (\text{kJ}/(\text{kg}^\circ\text{C}))$	1,172
$S (\text{m}^2)$	πr^2	$r (\text{m})$	0,15	$MMar (\text{g/gmol})$	28,9
$R (\text{atm m}^3/(\text{mol K}))$	$8,2 \times 10^{-5}$	$P (\text{atm})$	0,91	$L (\text{m})$	1,40
$V (\text{m}^3)$	LS	$D (\text{m})$	$2r$	$T_{amb} (^\circ\text{C})$	35
$a (^\circ)$	3	$Yqmedio (-)$	0,209	$TR (\text{s})$	327

A Tabela 9.15 apresenta os parâmetros utilizados pelo NSGA II e MODE, ambos com 6020 avaliações da função objetivo durante o processo evolutivo.

Tabela 9.15: Parâmetros usados no problema do secador rotativo.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
$Ngen$	300	150
N	20	20
p_c	0,9	0,9
p_m	0,02	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

As Figuras 9.40 e 9.41 apresentam a população inicial e a curva de Pareto obtida pelo MODE comparada com o NSGA II, respectivamente.

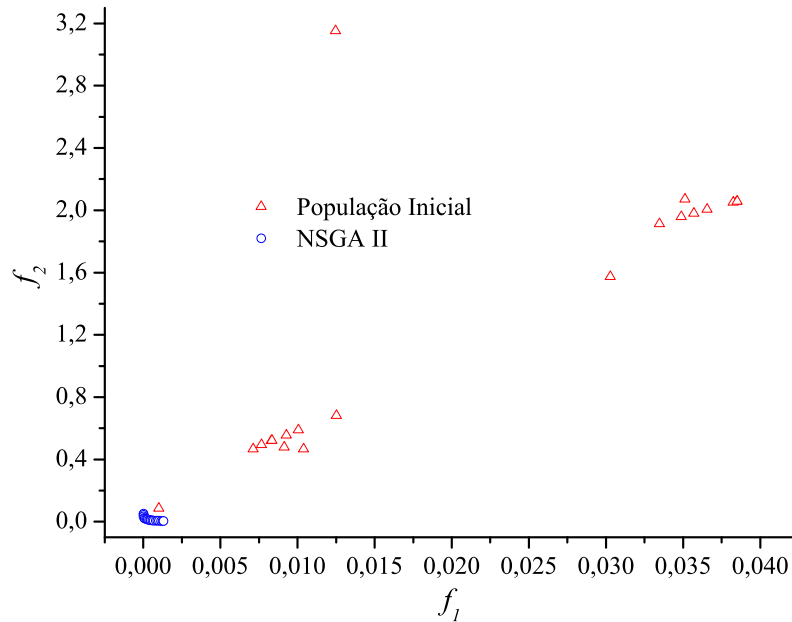


Figura 9.40: População inicial para o secador rotativo.

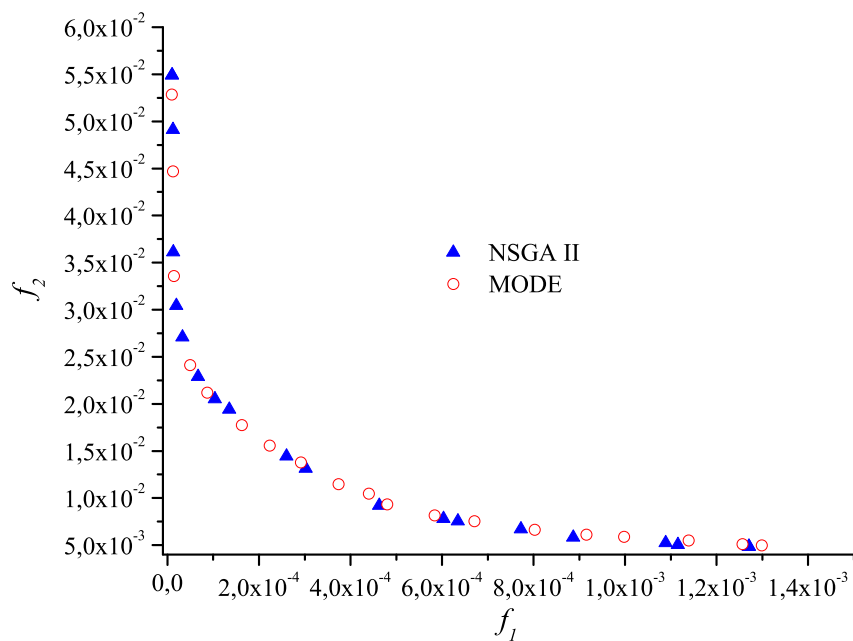


Figura 9.41: Curva de Pareto para o secador rotativo.

Alguns pontos da curva de Pareto são mostrados na Tab. 9.16.

Tabela 9.16: Algumas soluções da curva de Pareto para o secador rotativo.

Parâmetros	SOLUÇÃO		
	A	B	C
A	36,592768	94,182154	47,802962
B	330,31360	362,29594	340,34763
C	-0,0908827	-0,1037183	-0,1155361
k_P	16,550591	19,579543	42,194195
m_P	2,7448927	2,9842189	3,3418705
f_1	0,0012707	0,0000101	0,0004620
f_2	0,0048586	0,0549104	0,0092075

As Figuras 9.42 e 9.43 apresentam os perfis de umidade e temperatura para as soluções na Tab. 9.16. É importante observar nas Figs. 9.42 e 9.43 que um bom valor para f_1 (ponto B) não necessariamente leva a uma boa aproximação para o objetivo f_2 . Similarmente isso também é observado para o ponto A com relação a f_2 , ressaltando a natureza conflitante do problema em questão. O ponto C por sua vez, de certa forma “pondera” melhor o compromisso de minimizar tanto f_1 quanto f_2 .

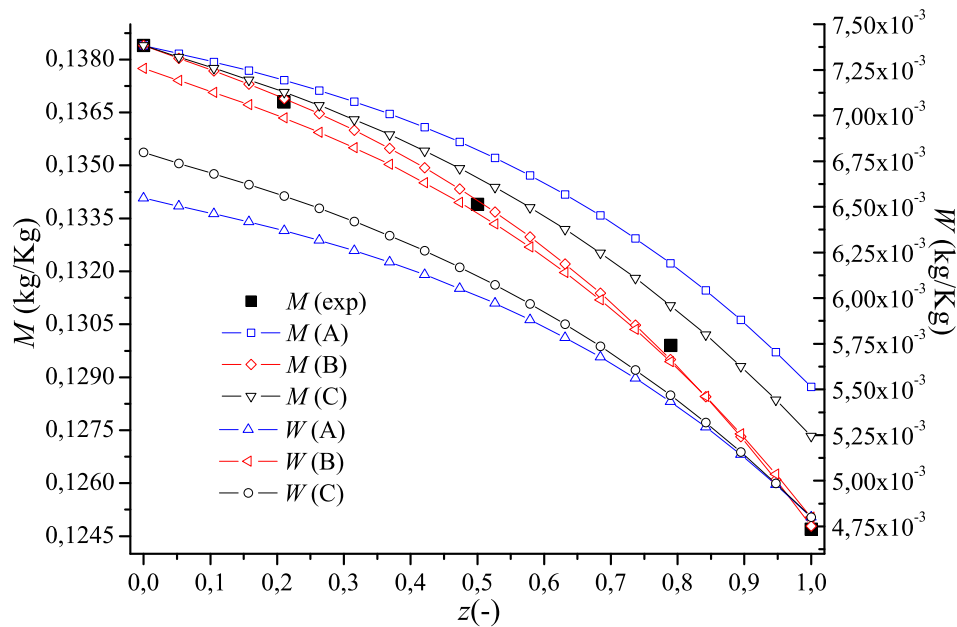


Figura 9.42: Alguns perfis de umidade do secador rotativo.

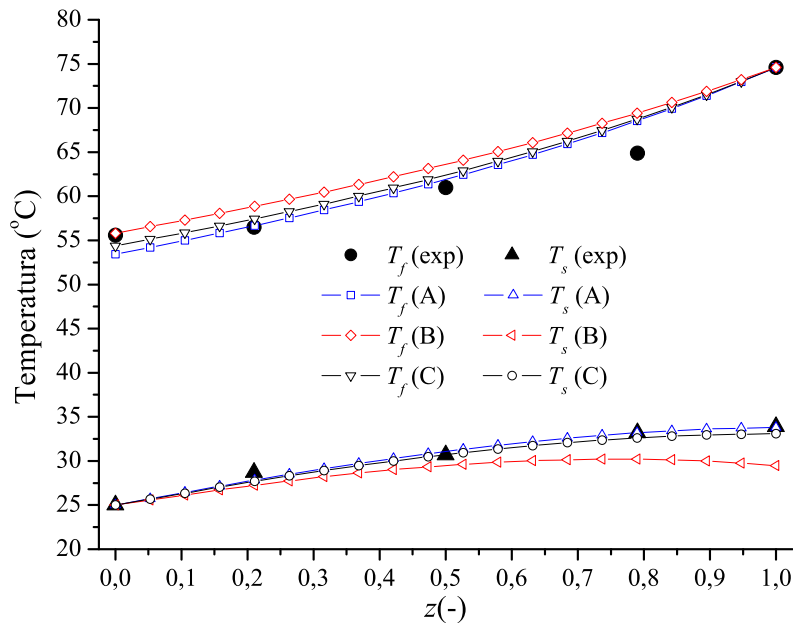


Figura 9.43: Alguns perfis de temperatura do secador rotativo.

9.3 Problemas de Controle Ótimo

O Problema de Controle Ótimo (PCO) com índice flutuante é conhecido na literatura pela dificuldade na obtenção do perfil da variável de controle que minimize um determinado índice de desempenho. A medida dessa dificuldade pode ser mensurada a partir do conceito de índice diferencial. Segundo Brenan et al. (1996), “o índice diferencial é o número mínimo de vezes que um sistema de equações algébrico-diferenciais deve ser diferenciado para se obter um sistema de equações diferenciais”. Do ponto de vista matemático, sabe-se que essa flutuação do índice causa sérios problemas numéricos, e que não existe nenhum algoritmo capaz de resolver o problema com flutuação de índice (BRENAN et al., 1996).

Comumente, pode-se enumerar algumas possibilidades que se apresentam durante a resolução de um problema de controle ótimo: se não existir flutuação do índice diferencial, isto é, o índice do sistema é sempre igual a 1, geralmente, o sistema é de fácil resolução. Por outro lado, se existe a flutuação do índice diferencial, esta pode ser devido à presença de restrição de desigualdade, que em algum momento se tornará ativa, ou devido à linearidade da variável de controle. Nas situações onde existe flutuação do índice diferencial, faz-se necessária a determinação de uma estratégia para obtenção da variável de controle e do cálculo dos instantes ou eventos em que essa flutuação ocorre (LOBATO, 2004).

Recentemente, algumas estratégias para a determinação de estratégias de controle e a localização dos eventos podem ser destacadas (LOBATO, 2004; PFEIFER et al., 2006; LOBATO et al., 2006). Mais detalhes sobre essas dificuldades podem ser obtidos nos trabalhos de Bryson e Ho (1975), Feehery (1998) e Lobato (2004).

Os três próximos casos refletem as principais dificuldades encontradas durante a solução de PCO. No primeiro, o índice diferencial do sistema, durante todo o processo, é 1. A grande dificuldade desse caso é a presença de duas variáveis de controle. No segundo, é estudado um problema linear na variável de controle, o que faz com que o índice diferencial seja flutuante. O terceiro caso é uma extensão do problema clássico de *Jacobson & Lele* com um único objetivo. Neste caso, a flutuação do índice diferencial se deve à ativação de uma restrição de desigualdade no estado.

9.3.1 PCO com Duas Variáveis de Controle

O problema consiste na manipulação das taxas de alimentação de glicose e indutor para a produção de proteína induzida por bactéria recombinante. O processo é conduzido em um biorreator de mistura perfeita que opera em regime batelada alimentada, como apresentado na Fig. 9.44:

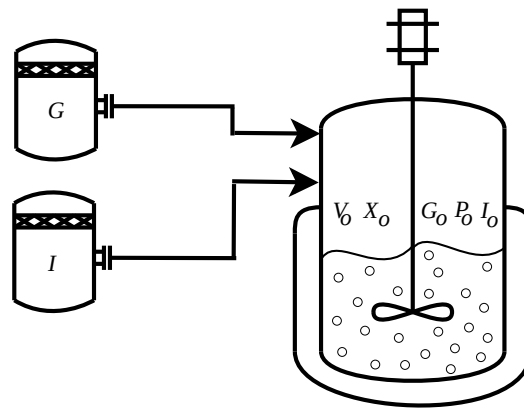


Figura 9.44: Biorreator de polimerização de proteína (Reproduzido de Silva (2004)).

Neste processo, a glicose e o indutor são alimentados constantemente no reator. Estes compostos são consumidos pelas células do substrato para a produção de proteína. Dessa maneira, espera-se que as concentrações de glicose e indutor decaiam ao longo do processo, enquanto que as concentrações de células e de proteína devem aumentar significativamente. Um aumento no volume de biomassa é também esperado, devido à produção de proteína e a proliferação das células (SILVA, 2004).

A formulação matemática da cinética do processo foi desenvolvida por Tholudur et al. (2000). Os balanços de massa de células, glicose e proteína, e o balanço de massa global são dados por:

$$\frac{dV}{dt} = q_G + q_I \quad V(0) = V_o \quad (9.53)$$

$$\frac{d(VX)}{dt} = \mu XV \quad X(0) = X_o \quad (9.54)$$

$$\frac{d(VG)}{dt} = q_G G_f - \frac{\mu XV}{Y} \quad G(0) = G_o \quad (9.55)$$

$$\frac{d(VI)}{dt} = q_I I_f - r_1 XV \quad I(0) = I_o \quad (9.56)$$

$$\frac{d(VP)}{dt} = r_P XV \quad P(0) = P_o \quad (9.57)$$

onde X , G , I e P são as concentrações de massa de células, glicose, indutor e proteína, respectivamente, e V , o volume de biomassa no reator. G_f e I_f são as concentrações de alimentação de glicose e de indutor, e q_G e q_I , as respectivas taxas de alimentação. Y é o rendimento da biomassa no substrato, r_I é a taxa específica de inativação do indutor, r_P , a taxa específica de produção de proteína, e μ é a taxa específica de crescimento de células dadas por:

$$r_1 = \frac{r_{1max} I}{K_{CI} + I} \quad (9.58)$$

$$r_P = \frac{r_{Pmax} G}{K_{CP} + G} \left(\frac{f_{Io} + I}{K_I + I} \right) \quad (9.59)$$

$$\mu = \frac{\mu_{Pmax} G}{K_{CG} + G} \left(\frac{s_I + p_1 I}{s_I + p_2 I} \right) \quad (9.60)$$

A Tabela 9.17 apresenta os parâmetros e condições operacionais do processo.

Tabela 9.17: Condições operacionais do processo da produção de proteína.

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
K_{CG} (g/L)	1,2	μ_{max} (h ⁻¹)	0,55
K_{CP} (g/L)	6,2	r_{1max} (h ⁻¹)	1,0
K_{CI} (g/L)	9,0	r_{Pmax} (h ⁻¹)	1,0
K_I (g/L)	0,03	s_I (-)	0,3
f_{Io} (g/L)	0,0008	p_1 (L/g)	2,5
Y (g/g)	0,45	p_2 (L/g)	7,0
G_f (g/dm ³)	10,0	G_o (g/dm ³)	10,0
t_f (h)	15,0	X_o (g/dm ³)	0,1
V_o (dm ³)	0,5	P_o (g/dm ³)	0,0

A formulação do problema de otimização foi proposto por Silva (2004). Este consiste da maximização da produção de proteína e a minimização da quantidade total de indutor consumido no processo:

$$\begin{cases} f_1 = \max_{q_G, q_I, I_o, I_f} P(t_f)V(t_f) \\ f_2 = \min_{q_G, q_I, I_o, I_f} I(t_f) \int_0^{t_f} q_I dt + V_o I_o \end{cases} \quad (9.61)$$

Além disso, são consideradas restrições na quantidade de indutor disponível para o processo, $I_{Total} (\leq 3 \text{ g})$, e o volume final de biomassa, V , deve ser superior a 10 dm^3 :

$$I_{Total} \leq 3 \text{ g} \quad (9.62)$$

$$V(t_f) \geq 10 \text{ dm}^3 \quad (9.63)$$

com $0 \text{ g/dm}^3 \leq I_o, I_f \leq 1 \text{ g/dm}^3$ e $0 \text{ dm}^3/\text{h} \leq q_G, q_I \leq 1 \text{ dm}^3/\text{h}$.

A Tabela 9.18 apresenta os parâmetros utilizados no MOGA I e no MODE.

Tabela 9.18: Parâmetros usados na resolução do problema da produção de proteína.

Parâmetro	ALGORITMO	
	MOGA I	MODE
N_{gen}	446	250
N	20	20
p_c	0,9	0,9
p_m	0,02	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

É importante destacar que nesse problema as variáveis de controle q_I e q_G foram tomadas como sendo constantes em cada elemento de tempo, o que do ponto de vista da Teoria de Controle Ótimo, elimina a flutuação do índice diferencial durante a integração do sistema algébrico-diferencial (BRYSON; HO, 1975; FEEHERRY, 1998; LOBATO, 2004).

A curva de Pareto obtida com 10020 avaliações da função objetivo é comparada com a obtida por Silva (2004) na Fig. 9.45.

Alguns pontos da curva de Pareto são mostrados na Tab. 9.19.

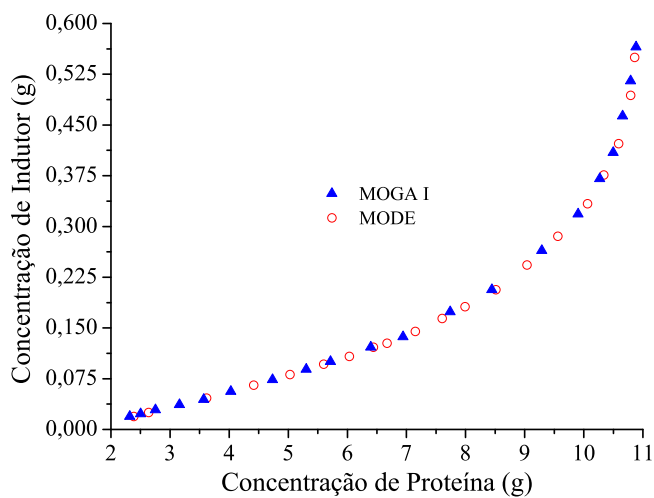


Figura 9.45: Curva de Pareto para o processo da produção de proteína.

Tabela 9.19: Algumas soluções da curva de Pareto.

Parâmetro	Unidade	SOLUÇÃO		
		A	B	C
I_o	g/dm ³	0,0	0,000053	0,000188
I_f	g/dm ³	0,006884	0,029506	0,046674
$q_{G,1}$	dm ³ /h	0,936960	0,941892	0,990058
$q_{G,2}$	dm ³ /h	0,910775	0,945225	0,878636
$q_{G,3}$	dm ³ /h	0,997638	0,998091	0,995012
$q_{G,4}$	dm ³ /h	0,764349	0,799975	0,782377
$q_{G,5}$	dm ³ /h	0,880831	0,875212	0,746557
$q_{G,6}$	dm ³ /h	0,969282	0,973880	0,953456
$q_{G,7}$	dm ³ /h	0,630564	0,649346	0,545336
$q_{G,8}$	dm ³ /h	0,482515	0,501572	0,448277
$q_{G,9}$	dm ³ /h	0,679694	0,661402	0,562116
$q_{G,10}$	dm ³ /h	0,242481	0,216387	0,238274
$q_{I,1}$	dm ³ /h	0,305105	0,305271	0,305535
$q_{I,2}$	dm ³ /h	0,001108	0,036108	0,002866
$q_{I,3}$	dm ³ /h	0,006831	0,114377	0,009849
$q_{I,4}$	dm ³ /h	0,404045	0,402251	0,405253
$q_{I,5}$	dm ³ /h	0,748941	0,715624	0,736829
$q_{I,6}$	dm ³ /h	0,026140	0,054131	0,158745
$q_{I,7}$	dm ³ /h	0,675239	0,670128	0,835799
$q_{I,8}$	dm ³ /h	0,123934	0,044131	0,164031
$q_{I,9}$	dm ³ /h	0,008855	0,003728	0,026581
$q_{I,10}$	dm ³ /h	0,439575	0,452562	0,418316
f_1	g	2,662921	6,461836	8,384158
f_2	g	0,028277	0,123811	0,214501

As Figuras 9.46 a 9.49 apresentam os perfis das variáveis V , X , G e P , respectivamente, para os pontos apresentados na Tab. 9.19. Os perfis médios das variáveis de controle, para todos os pontos da curva de Pareto, são mostrados na Fig. 9.50.

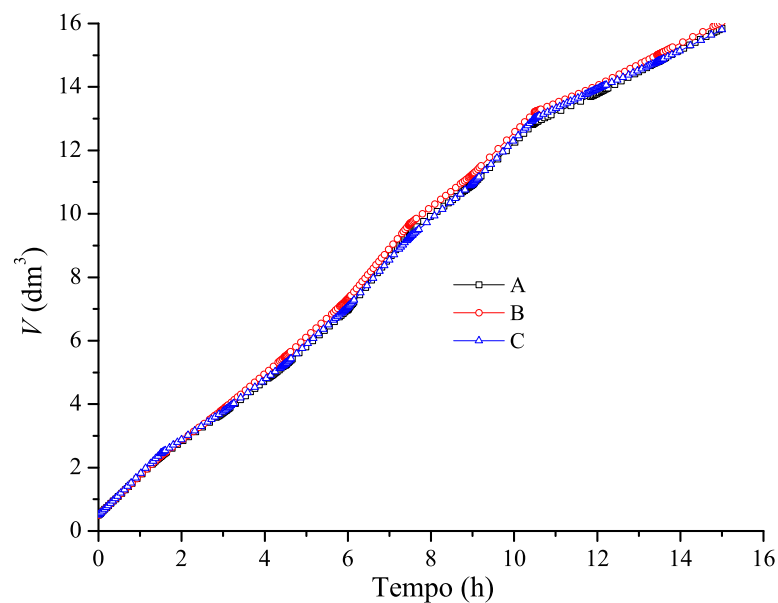


Figura 9.46: Perfis de volume.

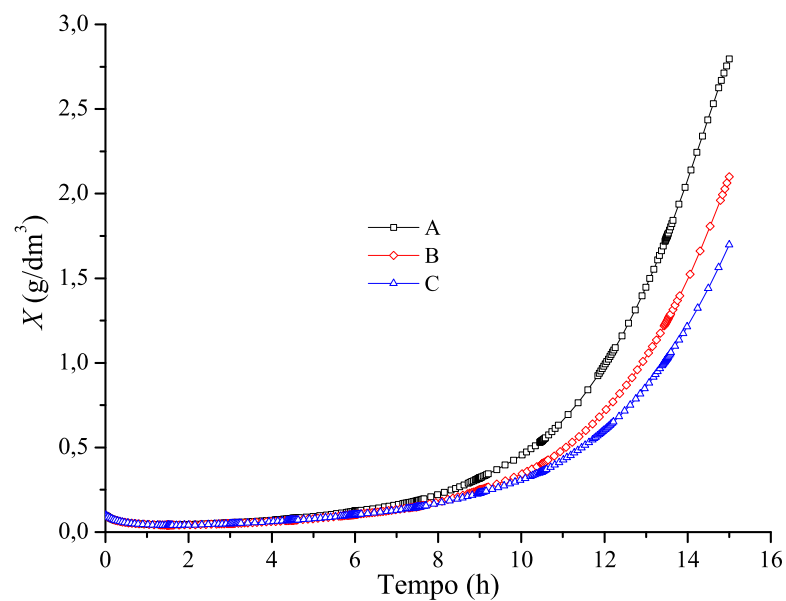


Figura 9.47: Perfis de concentração de células.

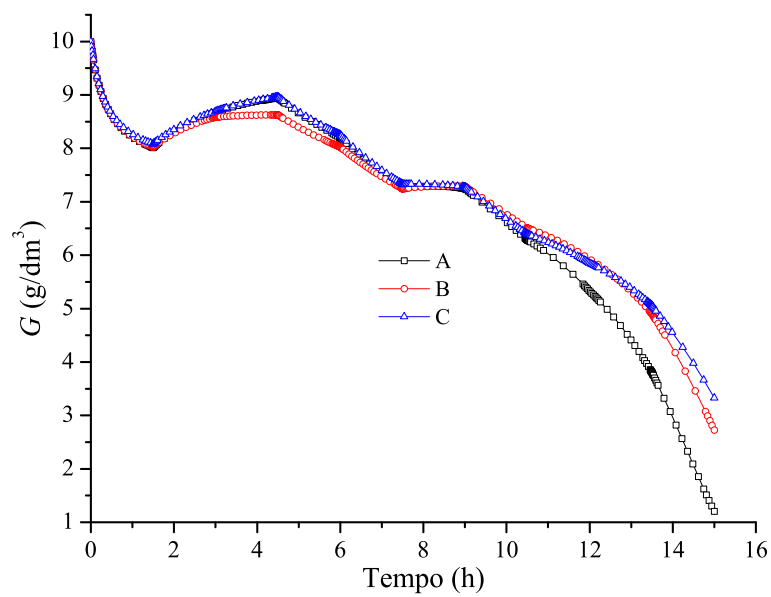


Figura 9.48: Perfis de concentração de glicose.

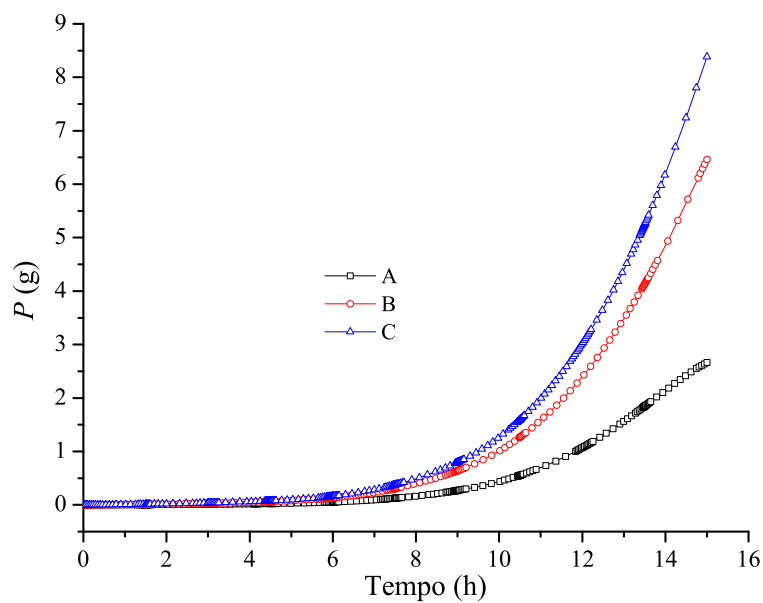


Figura 9.49: Perfis de produção de produto.

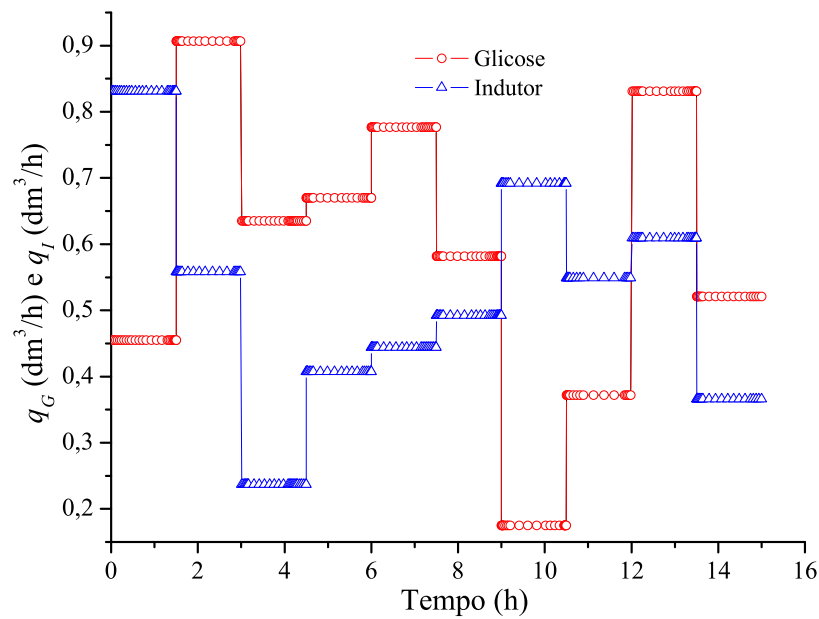


Figura 9.50: Perfis médios de alimentação de glicose e de indutor.

9.3.2 O Problema da Fermentação em Batelada Alimentada

Seja o processo conduzido em um biorreator de mistura perfeita que opera em regime de batelada alimentada, como apresentado na Fig. 9.51:

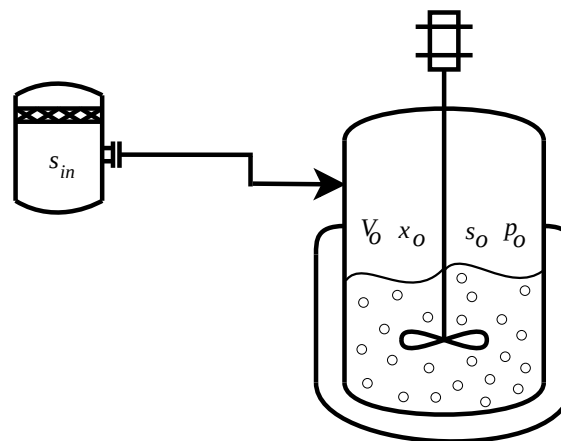


Figura 9.51: Biorreator para fermentação de etanol (Reproduzido de Sarkar e Modak (2005)).

As equações que descrevem o crescimento de microorganismos, o consumo de substrato e a formação do produto, para o processo de batelada alimentada, são dadas por:

$$\frac{dx}{dt} = \mu x - u \frac{x}{V} \quad x(0) = x_o \quad (9.64)$$

$$\frac{ds}{dt} = -\sigma x + u \frac{(s_F - s)}{V} \quad s(0) = s_o \quad (9.65)$$

$$\frac{dp}{dt} = \pi x - u \frac{p}{V} \quad p(0) = p_o \quad (9.66)$$

$$\frac{dV}{dt} = u \quad V(0) = V_o \quad (9.67)$$

$$V \leq V_{max} \quad (9.68)$$

$$u_{min} \leq u \leq u_{max} \quad (9.69)$$

onde x é a concentração de células (g/L), s é a concentração de substrato (g/L), p é concentração do produto (g/L), V o volume do reator (L) e u é o fluxo de alimentação de substrato no reator. x_o , s_o , p_o e V_o são as concentrações iniciais de células, de substrato, de produto e volume do reator, respectivamente; μ é taxa de crescimento de células, σ é a taxa de consumo de substrato e π a taxa de formação de produto.

Este estudo de caso considera o processo de fermentação de *lysine*, cujos modelos para as equações das taxas foram propostas por Ohno et al. (1976):

$$\mu = 0,125s \quad (9.70)$$

$$\sigma = \frac{\mu}{0,135} \quad (9.71)$$

$$\pi = -384\mu^2 + 134\mu \quad (9.72)$$

As restrições impostas a esse processo são:

$$V \leq 20 \text{ L} \quad (9.73)$$

$$0 \leq u \leq 2 \text{ L/h} \quad (9.74)$$

As condições iniciais são: $x(0)=0,02$ g/L, $s(0)=2,8$ g/L, $p(0)=0$ g/L, $V(0)=5$ L. A concentração de substrato (s) na corrente de alimentação (s_F) é 2,8 g/L.

O problema multi-objetivo, proposto por Sarkar e Modak (2005), consiste da maximização da produtividade, definida como a taxa entre a quantidade de produto formado e o tempo total de operação, e a maximização do rendimento do processo, expressa como a taxa entre a quantidade de produto formada e a quantidade de substrato adicionada.

Tais funções são definidas matematicamente como:

$$\begin{cases} f_1 = \max_{u(t), t_{s1}, t_{s2}, t_f} \left(\frac{p(t_f)V(t_f)}{t_f} \right) \\ f_2 = \max_{u(t), t_{s1}, t_{s2}, t_f} \left(\frac{p(t_f)}{\int_0^{t_f} s_F u dt} \right) \end{cases} \quad (9.75)$$

sujeitas às equações Eq. (9.64)- Eq.(9.67), às taxas dadas por Eq. (9.70)- Eq.(9.72) e às restrições Eq. (9.73)- Eq.(9.74).

Modak e Lim (1986) mostraram que esse problema apresenta três fases: na primeira, a variável de controle é u_{min} (índice diferencial igual a 1); na segunda, a variável de controle é dada por $u_{singular}$ (índice diferencial igual a 3); e na terceira, a variável de controle é u_{min} (índice diferencial igual a 1). Os autores obtiveram $u_{singular}$ através da aplicação do Princípio Mínimo de *Pontryagin* (BRYSON; HO, 1975), dado por:

$$u_{singular} = \frac{xV\mu}{0,135(s_F - s)} \left(1 + \frac{0,135V}{\Omega} \right) \quad (9.76)$$

onde $\Omega = -\frac{xV\mu(\pi''\mu' - \pi'\mu'')}{\mu'(\mu\pi' - \mu'\pi)}$. Os superescritos ' e '' indicam derivadas de primeira e de segunda ordem com relação ao substrato s .

Definida a estratégia de controle, tem-se como variáveis de projeto t_{s1} e t_{s2} , que definem o instante da mudança de estratégia de controle e t_f , que é o tempo de operação. As variáveis de projeto não devem violar as restrições: $9 \text{ h} \leq t_{s1} \leq 12 \text{ h}$, $15 \text{ h} \leq t_{s2} \leq 50 \text{ h}$ e $15 \text{ h} \leq t_f \leq 50 \text{ h}$.

Este problema foi resolvido por Sarkar e Modak (2005) através do uso do algoritmo NSGA II. A Tabela 9.20 apresenta os parâmetros utilizados no NSGA II e no MODE.

Tabela 9.20: Parâmetros utilizados na resolução do problema do fermentador batelada alimentada.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	1000	800
N	200	100
p_c	0,9	0,9
p_m	0,02	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

A curva de Pareto obtida, comparada com a literatura é apresentada na Fig. 9.52:

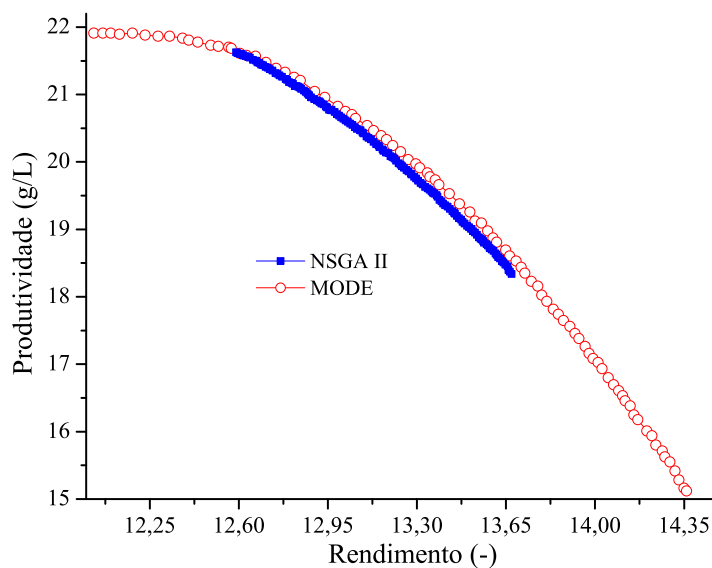


Figura 9.52: Curva de Pareto para o problema da fermentação em reator batelada alimentada.

Alguns pontos da curva de Pareto são mostrados na Tab. 9.21.

Tabela 9.21: Algumas soluções da curva de Pareto.

Parâmetro	Unidade	SOLUÇÃO		
		A	B	C
Eventos	(h)	9,0000	10,6306	12,0000
		26,3732	33,3637	43,4204
Tempo de Operação	(h)	31,1207	39,5067	46,9986
Produtividade	(g/L)	21,6778	17,4884	15,0945
Rendimento	(-)	12,6398	13,9075	14,3510

As Figuras 9.53 a 9.56 apresentam os perfis das variáveis de estado x , s , p e V , respectivamente, para os pontos apresentados na Tab. 9.21. A variável de controle, para os mesmos pontos, é mostrada na Fig. 9.57.

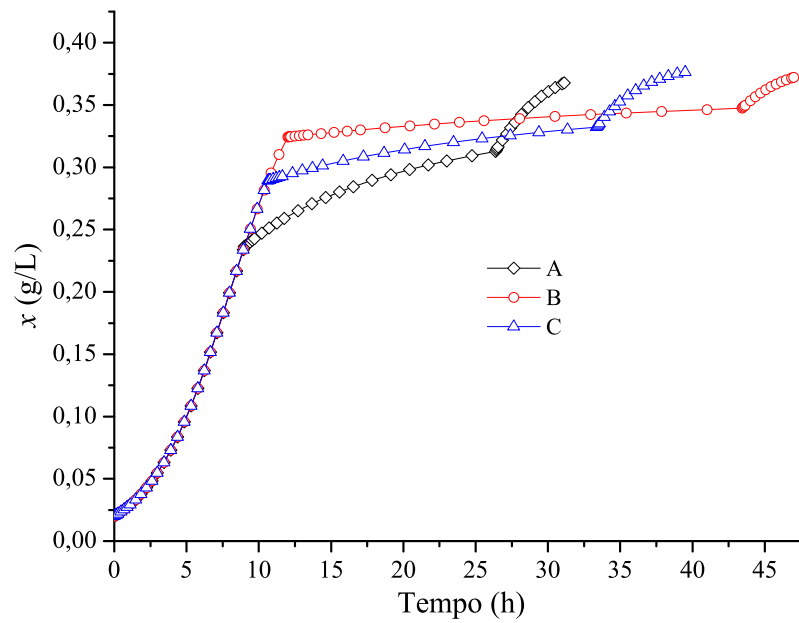


Figura 9.53: Perfis de concentração de células.

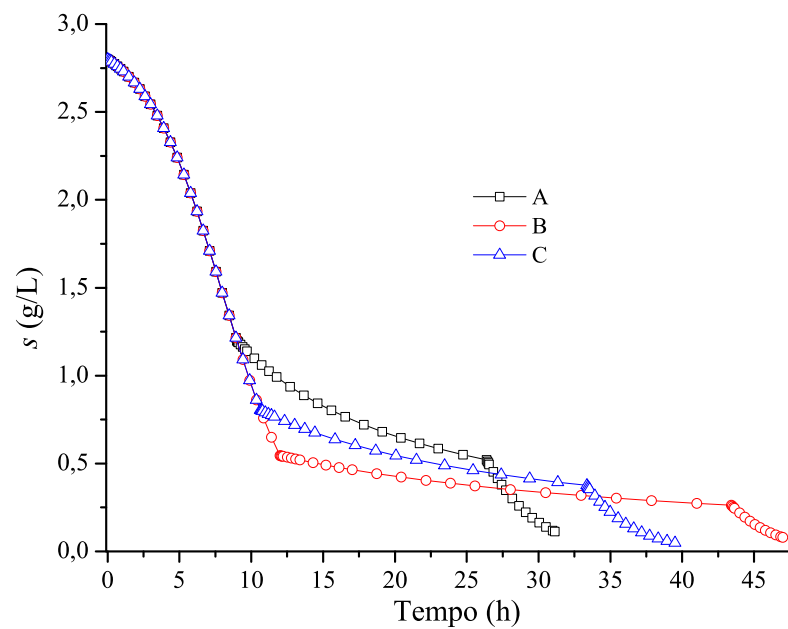


Figura 9.54: Perfis de concentração de substrato.

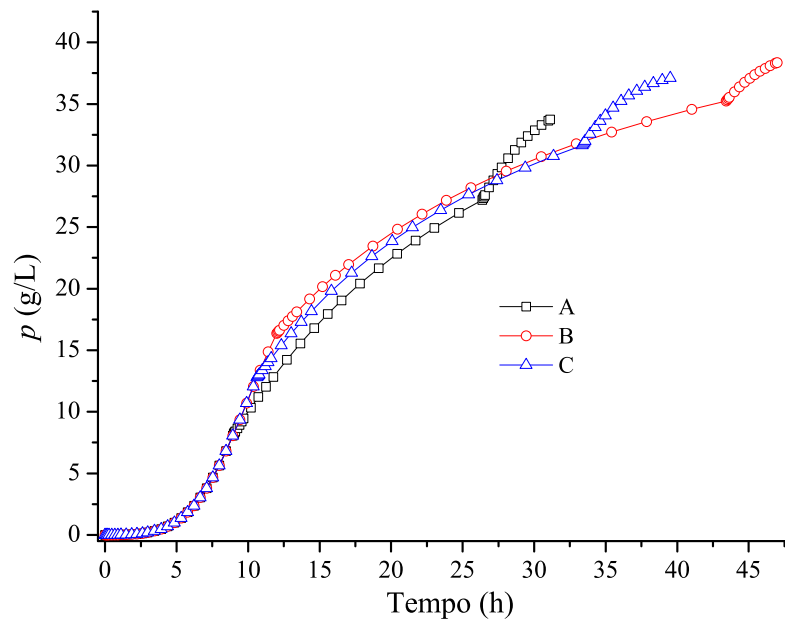


Figura 9.55: Perfis de concentração de produto.

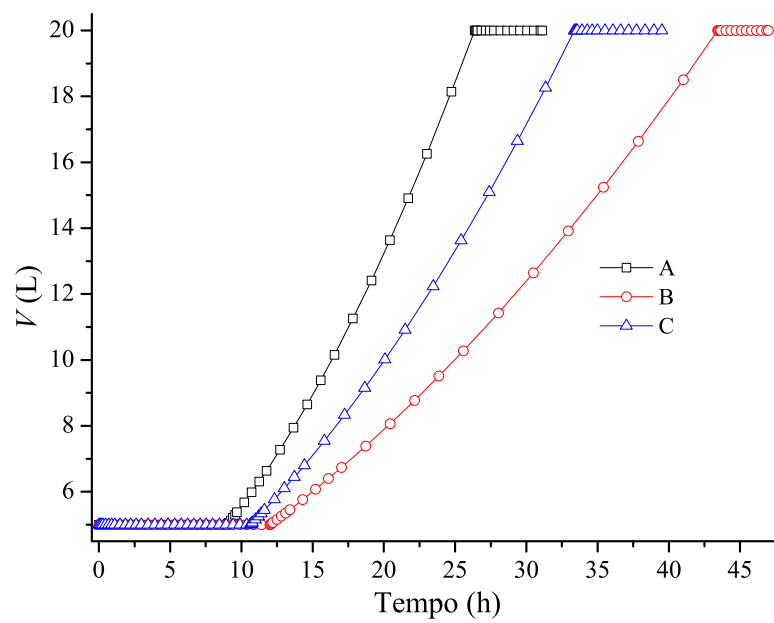


Figura 9.56: Perfis de volume do reator.

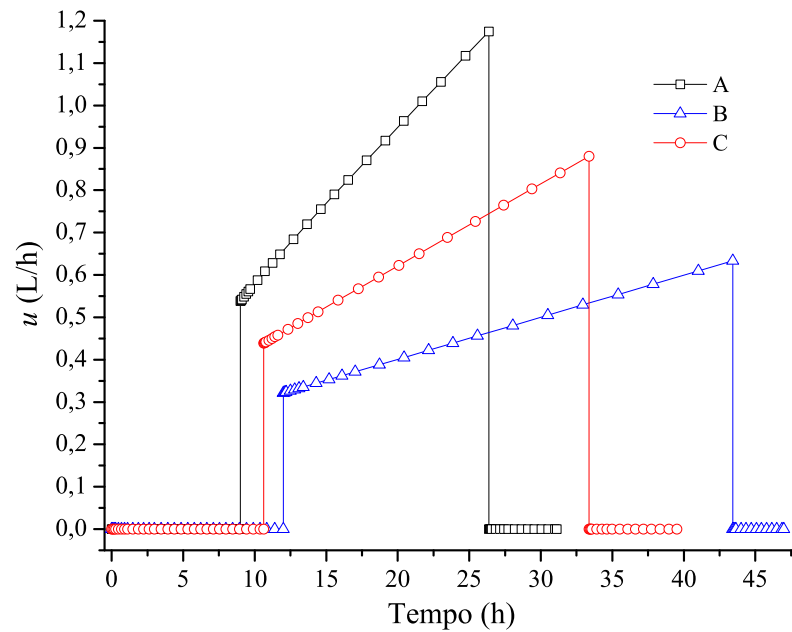


Figura 9.57: Perfis de fluxo de alimentação.

A partir da análise das figuras acima, pode-se observar que a produtividade é uma função que diminui com o tempo de operação, já o rendimento é uma função que aumenta com o decorrer do tempo de operação, o que caracteriza, evidentemente, um problema com objetivos conflitantes. Fisicamente, na primeira fase, a concentração de células cresce rapidamente. Na segunda fase ou fase singular, a taxa de alimentação é aumentada com o intuito de permitir a formação de produtos neste intervalo. Na última fase, o volume máximo do reator é alcançado, fazendo com que o fluxo de alimentação seja cortado, isto é, o processo volta a ser do tipo batelada. Segundo Sarkar e Modak (2005), são necessárias cerca de 50 gerações para uma prévia localização da região onde se encontram os eventos e tempo de operação, o que também pode ser observado através da aplicação do MODE. Como consequência disso, tem-se um número de avaliações muito grande para o NSGA II (200200 avaliações) e para o MODE (160100 avaliações) para o refinamento das soluções. Pode-se observar ainda que o MODE consegue obter um melhor perfil para a curva de Pareto, em termos de convergência e de diversidade.

9.3.3 O Problema de *Jacobson & Lele*

O Problema de *Jacobson & Lele* (JACOBSON; LELE, 1969) é sem sombra de dúvida, um dos estudos de caso mais interessantes da área de controle. Sua concepção é puramente matemática e apresenta uma restrição de desigualdade apenas em função de variáveis de

estado que se torna ativa ou não em determinados instantes de tempo. Isto representa um desafio para qualquer pesquisador da área de controle, sendo ao longo das últimas décadas resolvido através de inúmeras metodologias: Jacobson e Lele (1969) transformaram o problema com restrição em um problema irrestrito através da introdução de uma variável de folga à restrição de desigualdade. As condições necessárias foram obtidas ao problema irrestrito obtendo um problema de valor de contorno algébrico diferencial, cuja solução foi encontrada através do método de *Runge Kutta* de 4ª ordem. A identificação dos eventos foi conseguida através do acompanhamento da variável de folga durante a integração. Mehra e Davis (1972) utilizaram o método do Gradiente Conjugado acoplado ao Método de Penalidade, e obtiveram a solução do problema. Logo em seguida, em 1973, Neuman and Sem (NEUMAN; SEN, 1973), através do uso de *splines* cúbicas, encontraram um melhor valor de função objetivo comparada à de Mehra e Davis (1972), todavia sem a garantia de atendimento da restrição de desigualdade na segunda fase. Logsdon e Biegler (1989) utilizaram discretização por colocação em elementos finitos através da aproximação de *Lagrange* para o tratamento desse problema. Souza (2007) resolveu o problema através de uma metodologia que alia as vantagens das funções de regularização com códigos numéricos específicos para a resolução de problemas com índice superior em equações algébrico-diferenciais sem a necessidade de redefini-lo como índice 1 em cada fase. Recentemente, Lobato et al. (2008a), obtiveram a solução do problema de *Jacobson & Lele*, através da aplicação do Princípio Mínimo de *Pontryagin*, em função das condições de contorno das variáveis de estado, controle e variáveis adjuntas e dos eventos t_{s1} e t_{s2} . Com essas expressões algébricas foi possível a obtenção da função objetivo em função dos eventos e dessas condições de contorno. Com isso, transformou-se o problema de controle ótimo original em um problema de otimização simples, cujas variáveis a serem determinadas são os eventos.

O problema de *Jacobson & Lele* é definido como:

$$\min_{u(t)} J = \int_0^1 (x_1^2 + x_2^2 + 0,005u^2) dt \quad (9.77)$$

sujeito a

$$\dot{x}_1 = x_2 \quad x_1(0) = 0 \quad (9.78)$$

$$\dot{x}_2 = -x_2 + u \quad x_2(0) = -1,5 \quad (9.79)$$

$$x_{var} \leq 8(t - 0,5)^2 - 0,5 \quad (9.80)$$

onde x é o vetor de variáveis de estado, u é a variável de controle. Se $var=1$, implica que o problema é de índice 3 e se $var=2$, o índice é 2. Deve ser ressaltado que, na literatura, somente no trabalho de *Feehery* (FEEHERY, 1998) pode ser encontrada uma restrição na

variável de controle ($-3 \leq u \leq 15$). Outra variação que pode ser encontrada é uma pequena modificação na Eq. (9.79) ($\dot{x}_2 = x_2 + u$) (VASSILIADIS, 1993).

Sabe-se que a presença da variável de estado na restrição de desigualdade implicará no aumento do índice diferencial do sistema, quando essa restrição se tornar ativa (JACOBSON; LELE, 1969; LOGSDON; BIEGLER, 1989).

A Tabela 9.22 apresenta os resultados obtidos ao longo das últimas décadas.

Tabela 9.22: Valores dos eventos e da função objetivo.

Referência	t_{s1} (-)	t_{s2} (-)	J
Jacobson e Lele (1969)	$\approx 0,37$	$\approx 0,68$	0,164
Mehra e Davis (1972)	$\approx 0,30$	$\approx 0,70$	0,178
Neuman e Sen (1973)	-	-	0,16946
Logsdon e Biegler (1989)	0,28	0,70	0,1698
Feehery (1998)	$\approx 0,27$	$\approx 0,70$	0,169832
Souza (2007)	-	-	0,1706
Lobato et al. (2008a)	0,282348	0,700834	0,169851

No contexto multi-objetivo, a função objetivo original foi particionada da seguinte maneira:

$$\min_{u(t), t_{s1}, t_{s2}} f_1 = \int_0^1 (x_1^2 + x_2^2) dt \quad (9.81)$$

$$\min_{u(t), t_{s1}, t_{s2}} f_2 = \int_0^1 0,005u^2 dt \quad (9.82)$$

Com o intuito de garantir que o valor da variável de estado x_2 seja igual à calculada pela restrição de igualdade (durante a ativação da restrição de igualdade) uma nova função objetivo é definida:

$$\min_{u(t), t_{s1}, t_{s2}} f_3 = \sum_j \left(x_2^j - (8(t_j - 0,5)^2 - 0,5) \right)^2 \text{ para } t_{s1} \leq t_j \leq t_{s2} \quad (9.83)$$

A dificuldade inerente nesse problema é a determinação dos perfis de controle em cada fase. Sabe-se que durante a ativação da restrição de desigualdade, o controle pode ser obtido através da diferenciação da Eq. (9.80). Entretanto, nas outras duas fases (primeira e terceira) esse perfil é dependente das variáveis adjuntas (FEEHERY, 1998; LOBATO, 2004; LOBATO et al., 2008a). A fim de resolver o problema sem a utilização do Princípio de Mínimo de Pontryagin, será utilizada a função obtida por Lobato et al. (2008a) com coeficientes a serem determinados durante o processo de otimização. Assim

sendo, tem-se a estratégia definida por fases:

$$u = \begin{cases} B_1 \exp(t) + C_1 \exp(\gamma_1 t) + D_1 \exp(-\gamma_1 t) & \text{se } 0 \leq t < t_{s1} \\ x_2 + 16t - 8 & \text{se } t_{s1} \leq t < t_{s2} \\ B_2 \exp(t) + C_2 \exp(\gamma_2 t) + D_2 \exp(-\gamma_2 t) & \text{se } t_{s2} \leq t \leq 1 \end{cases} \quad (9.84)$$

onde B_1 , B_2 , C_1 , C_2 , D_1 , D_2 , γ_1 e γ_2 são coeficientes a serem determinados.

A continuidade na variável de controle, nas 3 fases, pode ser garantida da seguinte maneira:

$$u_{primeirafase} = u_{segundafase} \\ B_1 \exp(t_{s1}) + C_1 \exp(\gamma_1 t_{s1}) + D_1 \exp(-\gamma_1 t_{s1}) = x_2 + 16t_{s1} - 8 \quad (9.85)$$

$$u_{segundafase} = u_{terceirafase} \\ x_2 + 16t_{s2} - 8 = B_2 \exp(t_{s2}) + C_2 \exp(\gamma_2 t_{s2}) + D_2 \exp(-\gamma_2 t_{s2}) \quad (9.86)$$

Além disso, segundo Lobato et al. (2008a), a aplicação do Princípio Mínimo de *Pontryagin* permite concluir que em $t = 1$, a variável de controle é nula. Portanto, para garantir essa condição, deve-se escrever:

$$B_2 \exp(1) + C_2 \exp(\gamma_2) + D_2 \exp(-\gamma_2) = 0 \quad (9.87)$$

A resolução das Eq.(9.85)-Eq.(9.87) para quaisquer três coeficientes, garante o atendimento dessas três condições.

A Tabela 9.23 apresenta os parâmetros utilizados no MODE.

Tabela 9.23: Parâmetros utilizados na resolução do problema do *Jacobson & Lele* multi-objetivo.

Parâmetro	ALGORITMO MODE
N_{gen}	600
N	50
p_c	0,9
p_m	-
F	0,50
R	10
r	0,90

Alguns pontos da curva de Pareto são mostrados na Tab. 9.24.

Tabela 9.24: Algumas soluções da curva de Pareto.

Parâmetro	Unidade	SOLUÇÃO		
		A	B	C
t_{s1}	-	0,282785	0,282799	0,282553
t_{s2}	-	0,693000	0,693038	0,706527
B_1	-	0,100248	0,100128	0,100245
C_1	-	-0,074915	-0,073431	-0,07342
D_1	-	15,384533	15,397699	15,517521
γ_1	-	14,082560	14,173032	14,184715
B_2	-	-0,080365	-0,080323	-0,080214
$C_2 \times 10^7$	-	1,229477	1,228727	1,228197
$D_2 \times 10^{-4}$	-	6,426341	6,485900	6,495485
γ_2	-	14,150908	14,283557	14,109627
f_1	-	0,120813	0,118595	0,115295
f_2	-	0,051578	0,051699	0,053569
$f_3 \times 10^6$	-	0,000000	1,696735	0,1539406

A Figura 9.58 apresenta a curva de Pareto obtida com 60050 avaliações da função objetivo. As Figuras 9.59, 9.60 e 9.61 apresentam os perfis das variáveis de estado x_1 , x_2 e do controle u , para os pontos da Tab. 9.24, respectivamente.

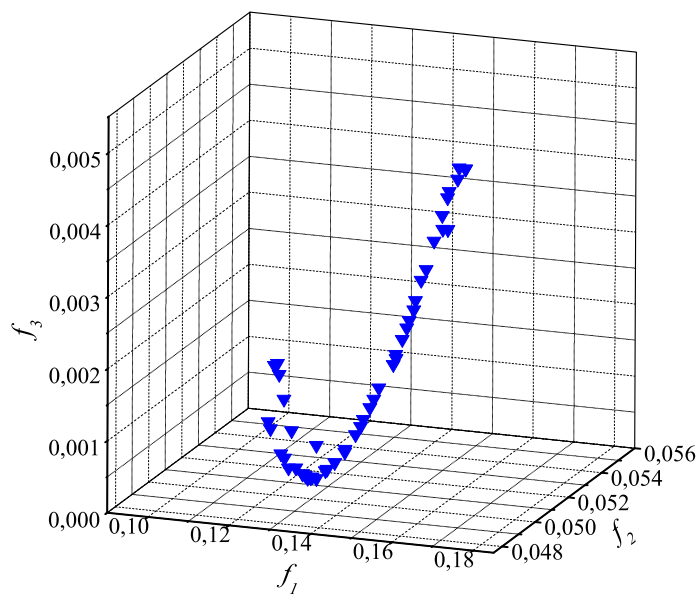


Figura 9.58: Curva de Pareto para o problema *Jacobson & Lele*.

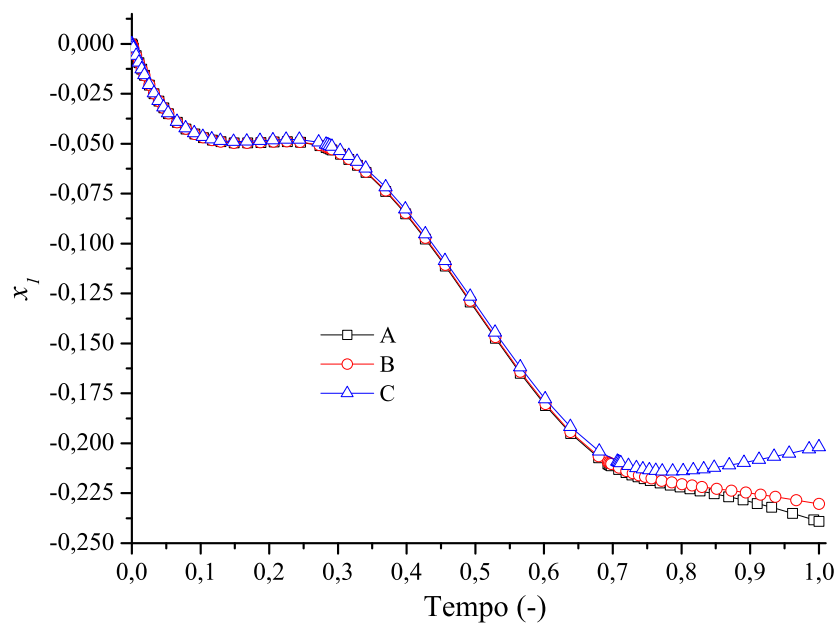


Figura 9.59: Perfis da variável de estado x_1 .

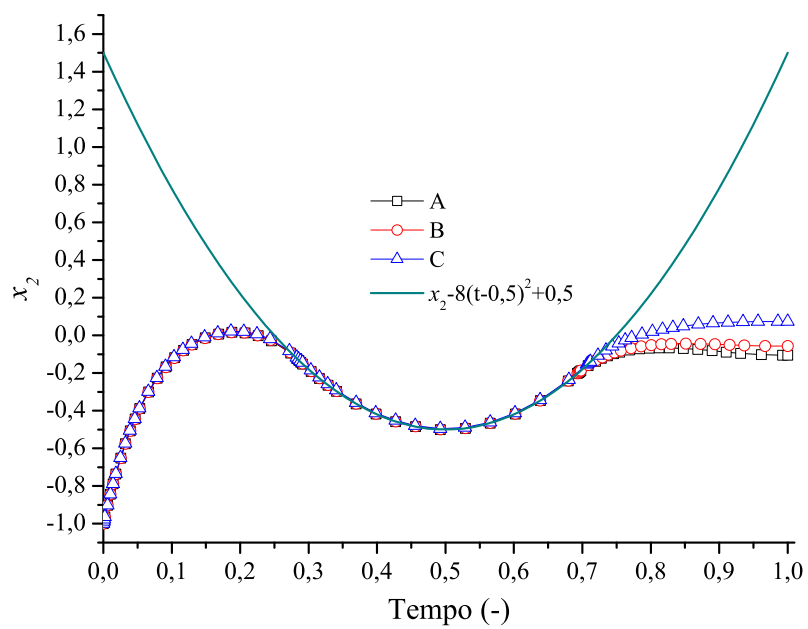


Figura 9.60: Perfis da variável de estado x_2 .

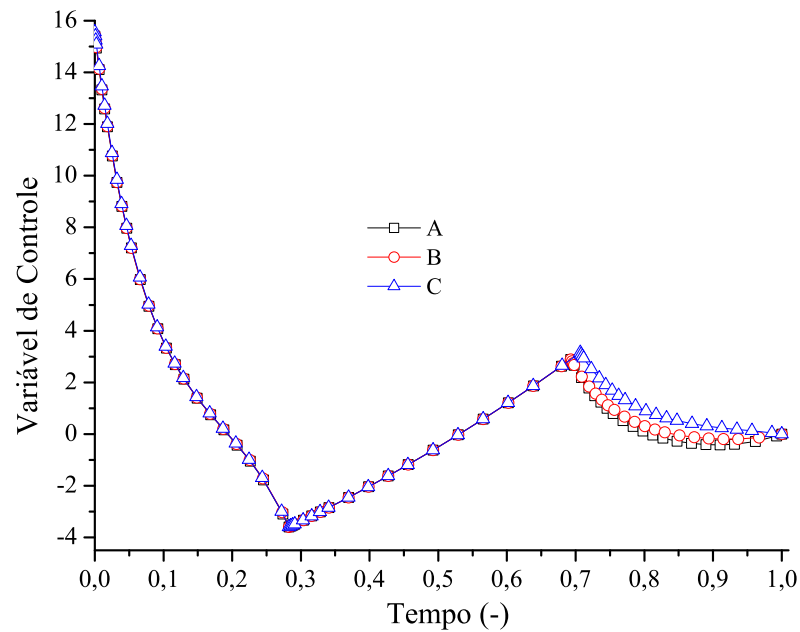


Figura 9.61: Perfis da variável de controle.

Um aspecto interessante a ser destacado neste caso é que a solução do problema formulado como multi-objetivo tende para a solução do problema formulado com um único objetivo. Isto claramente pode ser observado analisando a Fig. 9.60, onde o primeiro evento é escolhido de tal forma que a restrição de desigualdade fique ativa o mais rápido possível, sem que descontinuidades nessas variáveis sejam permitidas. Já para a determinação do segundo evento, é necessário que ao final deste, se tenha a menor área sobre a curva. Além disso, deve ser ressaltado que as condições necessárias oriundas da aplicação do Princípio Mínimo de *Pontryagin* são satisfeitas.

9.4 Problemas com Variáveis de Projeto Inteiras e Discretas

Até o presente momento foram estudados problemas que apresentam variáveis contínuas. Entretanto, encontra-se freqüentemente situações cujos projetos fazem uso de variáveis discretas, inteiras ou binárias (sistema liga-desliga). Neste sentido, os próximos estudos de caso deste trabalho buscam validar a metodologia descrita na seção 7.2.10 para o manuseio de problemas que apresentam esse tipo de variáveis.

9.4.1 O Problema do Projeto de Engrenagens

Seja o conjunto de quatro engrenagens apresentado na figura 9.62:

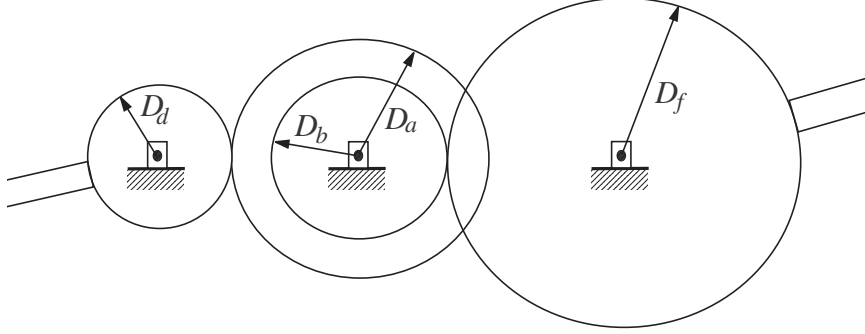


Figura 9.62: Projeto de um sistema de engrenagens (Reproduzido de Deb (2001)).

Deseja-se projetar um sistema de engrenagens com diâmetros D_i ($i=a, b, d$ e f) para alcançar uma relação específica entre as mesmas, permitindo uma melhor dirigibilidade entre o motorista e a coluna de direção, dada pela minimização do erro entre o valor calculado e a relação de engrenagem ($1/6,931$) conhecida (KANNAN; KRAMER, 1994).

Esse problema foi originalmente estudado por Kannan e Kramer (1994) considerando como único objetivo a minimização do erro, sendo posteriormente tratado no enfoque multi-objetivo por Deb (2001), através da incorporação de um outro objetivo, a minimização do maior diâmetro obtido entre as 4 engrenagens. Desta maneira, os objetivos a serem considerados neste estudo de caso são:

$$\begin{cases} \min f_1 = \left(\frac{1}{6,931} - \frac{D_d D_b}{D_a D_f} \right)^2 \\ \min f_2 = \max(D_d, D_b, D_a, D_f) \end{cases} \quad (9.88)$$

onde os diâmetros D_d , D_b , D_a e D_f são valores inteiros e que pertencem ao intervalo entre 10 cm e 60 cm. Os parâmetros utilizados pelo NSGA II e MODE são apresentados na Tab. 9.25. A população inicial é mostrada na Fig. 9.63.

Tabela 9.25: Parâmetros utilizados no problema de projeto de engrenagens.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	200	100
N	100	50
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

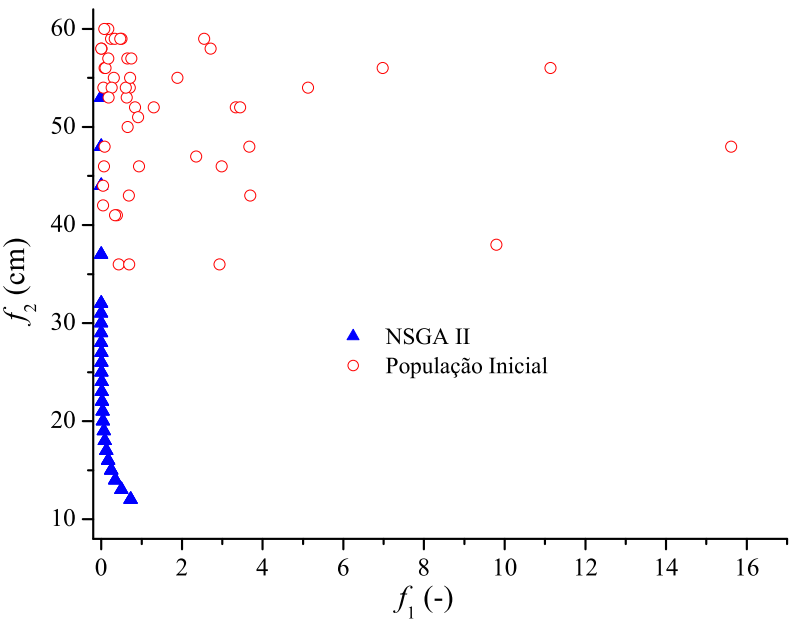


Figura 9.63: População inicial para o projeto de engrenagens.

A Tabela 9.26 apresenta alguns pontos da curva de Pareto obtida pela MODE.

Tabela 9.26: Pontos da curva de Pareto para o problema de projeto de.

D_d (cm)	D_b (cm)	D_a (cm)	D_f (cm)	f_1 (-)	f_2 (cm)
12	12	12	12	$7,32257 \times 10^{-1}$	12
12	12	20	20	$4,65354 \times 10^{-2}$	20
12	12	37	27	$1,82738 \times 10^{-8}$	37

A Figura 9.64 apresenta a comparação entre as soluções obtidas pelo MODE, com 10050 avaliações da função objetivo, e o algoritmo NSGA II, com 20100 avaliações da função objetivo.

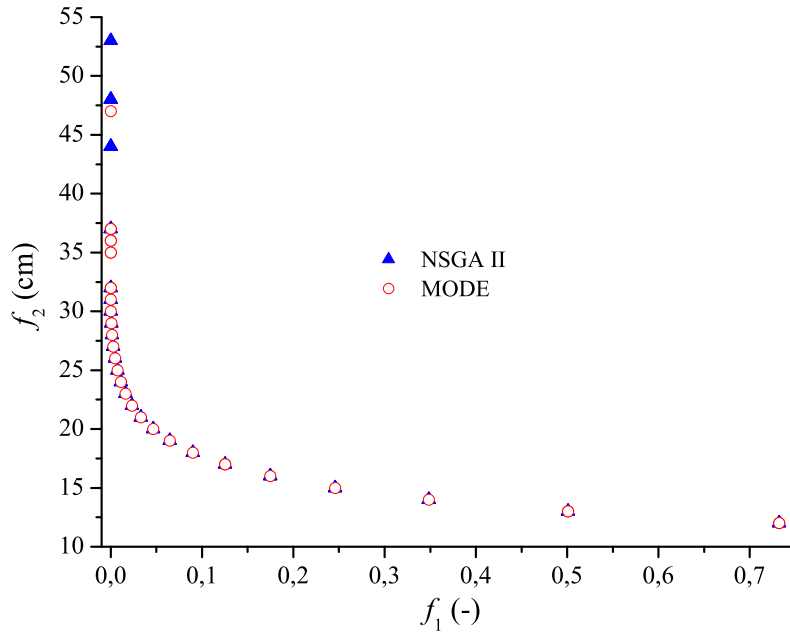


Figura 9.64: Curva de Pareto para o problema de projeto de engrenagens.

9.4.2 O Problema do Projeto de uma Mola

A compressão helicoidal de uma mola precisa ser projetada para minimização do volume e da tensão. Neste caso, são identificadas três variáveis: o número de molas (N), o diâmetro da mola (D) e o diâmetro médio da espira formada pela mola (d). N é uma variável inteira, d é uma variável discreta, fornecida pela Tab. 9.27 (KANNAN; KRAMER, 1994) e D é uma variável contínua.

Tabela 9.27: Diâmetros de mola, em polegadas, fornecidos pela ASTM.

0,0090	0,0095	0,0104	0,0118	0,0128	0,0132
0,0140	0,0150	0,0162	0,0173	0,0180	0,0200
0,0230	0,0250	0,0280	0,0320	0,0350	0,0410
0,0470	0,0540	0,0630	0,0720	0,0800	0,0920
0,1050	0,1200	0,1350	0,1480	0,1620	0,1770
0,1920	0,2070	0,2250	0,2440	0,2630	0,2630
0,3070	0,3310	0,3620	0,3940	0,4375	0,5000

As expressões para o volume e tensão são descritas a seguir:

$$\begin{cases} \min f_1 = 0,25\pi^2 d^2 D(N+2) \\ \min f_2 = \frac{8KP_{max}D}{\pi d^3} \end{cases} \quad (9.89)$$

sujeito às seguintes restrições de projeto:

$$l_{max} - \frac{P_{max}}{k} - 1,05(N+2)d \geq 0 \quad (9.90)$$

$$d - d_{min} \geq 0 \quad (9.91)$$

$$D_{max} - (d + D) \geq 0 \quad (9.92)$$

$$C - C_{max} \geq 0 \quad (9.93)$$

$$\delta_{pm} - \delta_p \geq 0 \quad (9.94)$$

$$\frac{P_{max} - P}{k} - (\delta w) \geq 0 \quad (9.95)$$

$$S - \frac{8KP_{max}D}{\pi d^3} \geq 0 \quad (9.96)$$

$$V_{max} - 0,25\pi^2 d^2 D(N+2) \geq 0 \quad (9.97)$$

Os parâmetros do modelo são (KANNAN; KRAMER, 1994; DEB, 2001): $S=189$ lb/in², $P=300$ lb, $P_{max}=1000$ lb, $l_{max}=14$ in, $d_{min}=0,2$ in, $D_{max}=3$ in, $\delta_w=1,25$ in, $\delta_{pm}=6$ in, $C_{max}=3$, $C=D/d$, $k=d^4/8ND^3$, $\delta_p=P/k$, $K=\frac{4C-1}{4C-4} + \frac{0,615d}{D}$ e $5 (-) \leq N \leq 24 (-)$.

Os parâmetros utilizados pelo NSGA II e MODE são apresentados na Tab. 9.28.

Tabela 9.28: Parâmetros utilizados na resolução do problema do projeto de uma mola.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	250	100
N	50	50
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

A Tabela 9.29 apresenta alguns pontos da curva de Pareto obtido pelo MODE com 10050 avaliações da função objetivo e 12550 avaliações obtidas pelo NSGA II.

Tabela 9.29: Alguns pontos da curva de Pareto para o problema do projeto de uma mola.

N (-)	d (in)	D (in)	f_1 (in)	f_2 (lb/in ²)
5	0,307	1,619	2,690	187053
24	0,500	1,865	24,189	61949

A população inicial e a solução obtida pelo MODE são apresentadas nas Figs. 9.65 e 9.66, respectivamente.

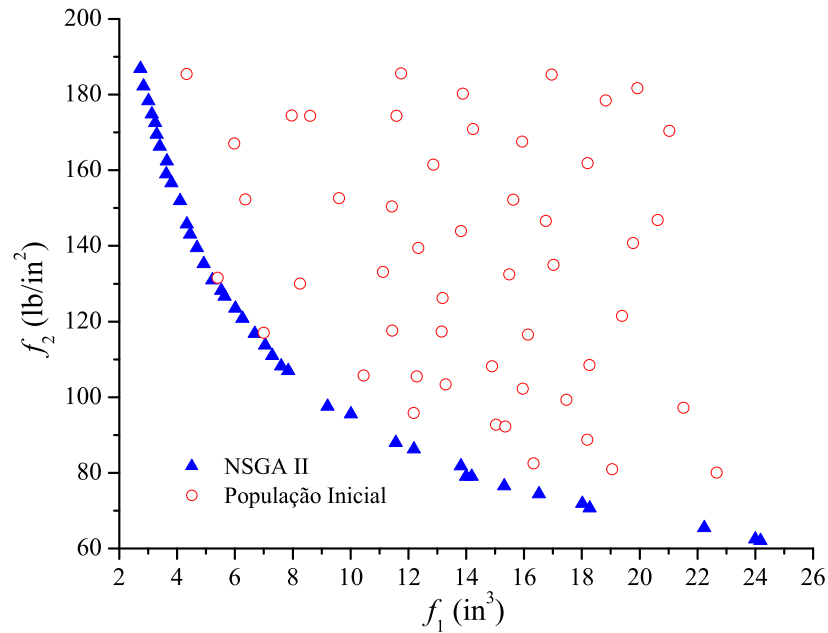


Figura 9.65: População inicial para o problema do projeto de uma mola.

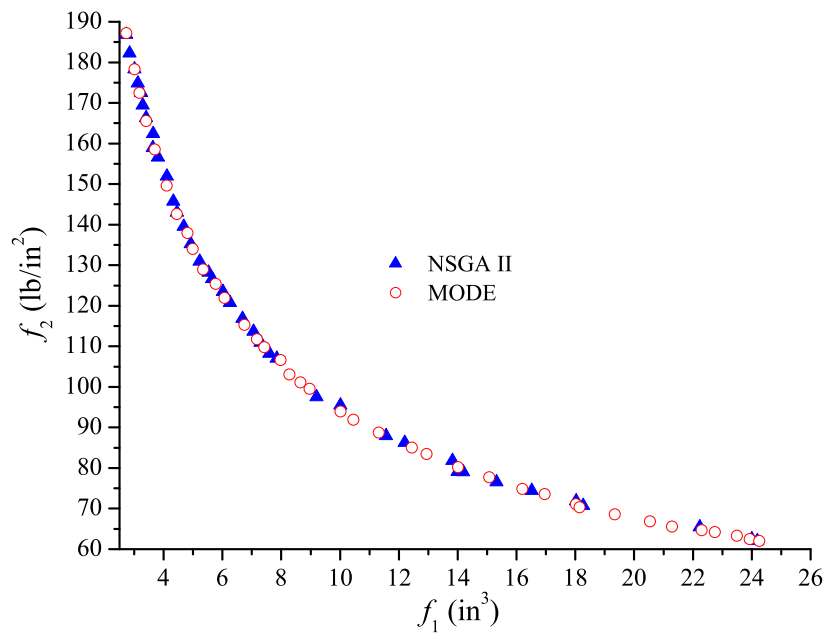


Figura 9.66: Curva de Pareto para o problema do projeto de uma mola.

9.4.3 O Problema da Viga Discreta

Seja o problema clássico do projeto de uma viga representada na figura 9.67.

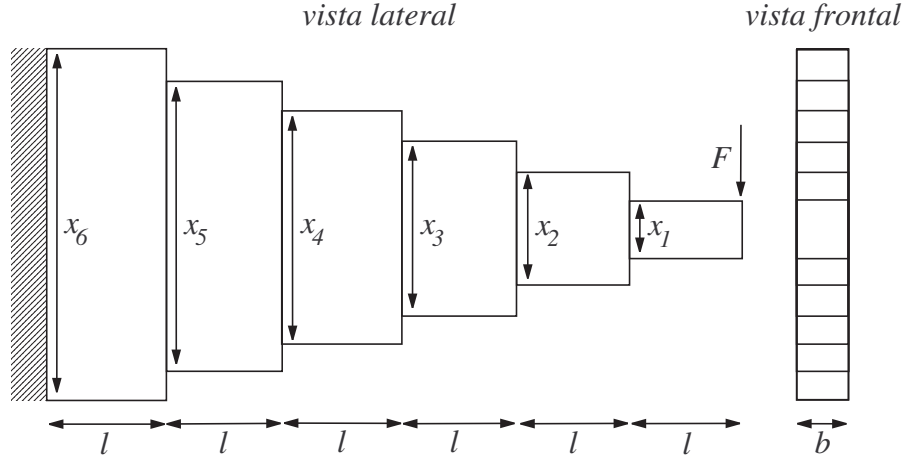


Figura 9.67: Problema do projeto de um viga discreta (Reproduzido de Coelho (2004)).

O objetivo aqui é a minimização do volume e do descolamento vertical da viga submetida à aplicação de uma força em sua extremidade, definidos como:

$$\begin{cases} \min f_1 = bl \sum_{n=1}^6 x_n \\ \min f_2 = \frac{Fl^3}{3E} \left(\frac{1}{I_1} + \sum_{n=2}^6 \frac{n^3 - (n-1)^3}{I_n} \right) \end{cases} \quad (9.98)$$

onde x_n é a altura do n -enésimo componente da viga, b e l são largura e comprimento da viga, respectivamente. E é o módulo de *Young*, F a força aplicada na extremidade livre do sistema e I_n o momento de inércia de cada componente da viga, dado por $I_n = \frac{bx_n^3}{12}$ ($n = 1, \dots, 6$).

Esse caso apresenta as seguintes restrições de projeto:

$$\frac{Fnl}{bx_n^2} \leq \sigma_g \quad n = 1, \dots, 6 \quad (9.99)$$

$$x_{n+1} - x_n \geq 0 \quad n = 2, \dots, 6 \quad (9.100)$$

onde σ_g é a tensão máxima permitida. Nesse problema, apenas valores discretos são permitidos para a altura dos componentes da viga: $x_n \in \{12, 13, 14, \dots, 32\}$ (mm) ($n=1, \dots, 6$).

Cabe ressaltar que o trabalho de Coelho (2004) apresenta apenas o valor de E ($2,06 \times 10^5$ N/mm²). Com o intuito de obter a curva de Pareto foram arbitrados os seguintes valores: $l=1,5$ mm, $b=1,5$ mm, $F=5000$ N e $\sigma_g=1500$ N/mm².

Os parâmetros utilizados pelo NSGA II e MODE são apresentados na Tab. 9.30.

Tabela 9.30: Parâmetros utilizados na resolução do problema viga discreta.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	100	50
N	50	25
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

A população inicial e a solução obtida pelo MODE são apresentadas nas Figs. 9.68 e 9.69, respectivamente.

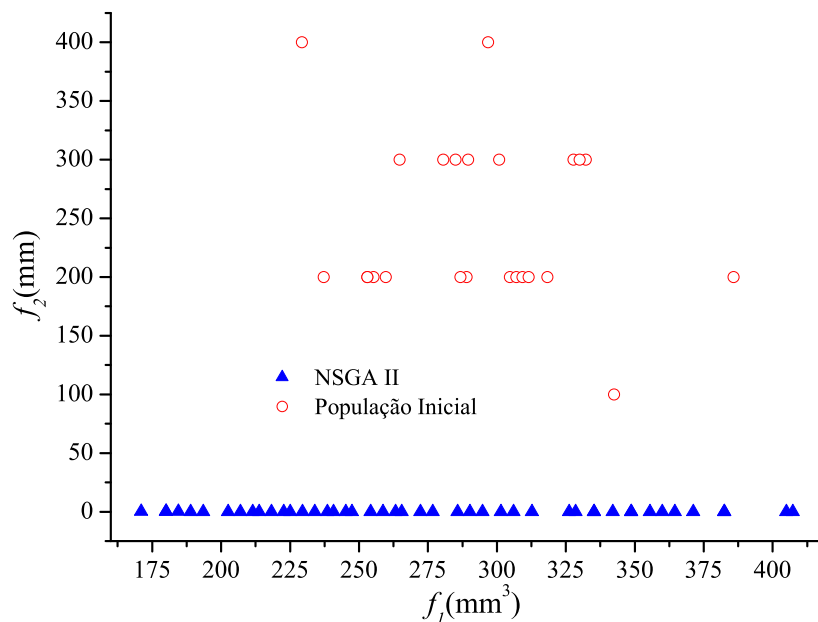


Figura 9.68: População inicial para o projeto da viga discreta.

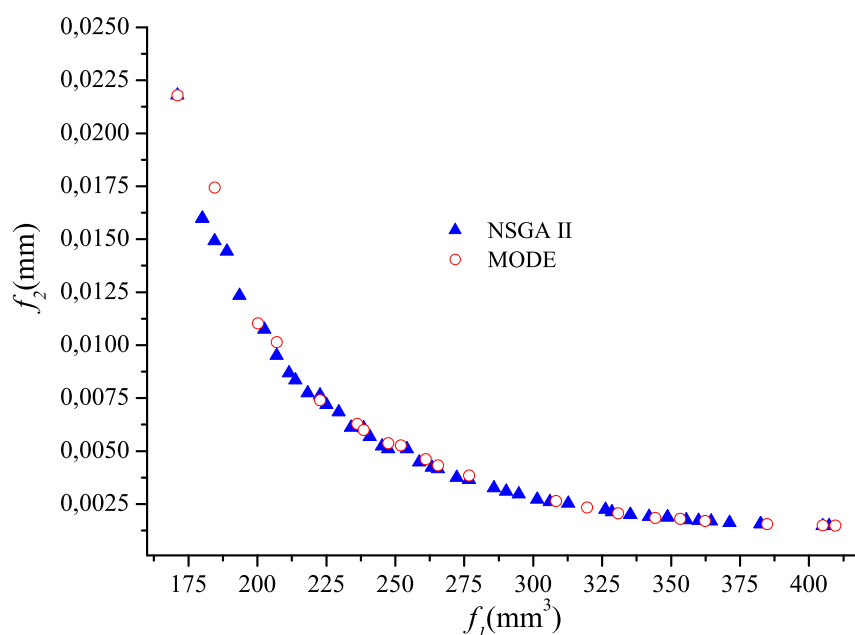


Figura 9.69: Curva de Pareto para o problema do projeto da viga discreta.

Deve ser destacado que o elevado número de gerações utilizado nesse problema, que aparentemente é simples, se deve à dificuldade no atendimento das restrições dadas pela Eq. (9.100). Isto faz com que sejam necessárias 2525 avaliações da função objetivo pelo MODE e 5050 avaliações pelo NSGA II.

A Tabela 9.31 apresenta alguns pontos da curva de Pareto obtida pela MODE.

Tabela 9.31: Alguns pontos da curva de Pareto para o problema da viga discreta.

x_n ($n=1,..,6$) (mm)						f_1 (mm^3)	f_2 (mm)
12	12	13	13	13	13	171,00	0,0218
13	13	14	14	19	19	207,01	0,0101
17	23	26	31	32	32	362,25	0,0017
25	30	31	32	32	32	409,50	0,0015

De posse dos resultados obtidos para os casos com variáveis discretas e contínuas pode-se concluir que a metodologia descrita na seção 7.2.10 e utilizada para o tratamento desse tipo de variáveis se mostrou uma alternativa interessante.

9.5 Problemas de Engenharia Química

9.5.1 Projeto Ótimo de uma Coluna de Destilação

De maneira geral, pode-se afirmar que todos os processos químicos e petroquímicos exigem a separação dos componentes pertencentes a fases distintas. Tal mecanismo de separação não é trivial, já que existe interação entre os componentes da mistura. No meio industrial, uma das estratégias mais empregadas para essa finalidade é a separação por destilação. Nesse processo físico, a separação de cada um dos componentes se dá pela diferença das temperaturas de ebulição.

A Figura 9.70 apresenta esquematicamente uma coluna de destilação com N estágios.

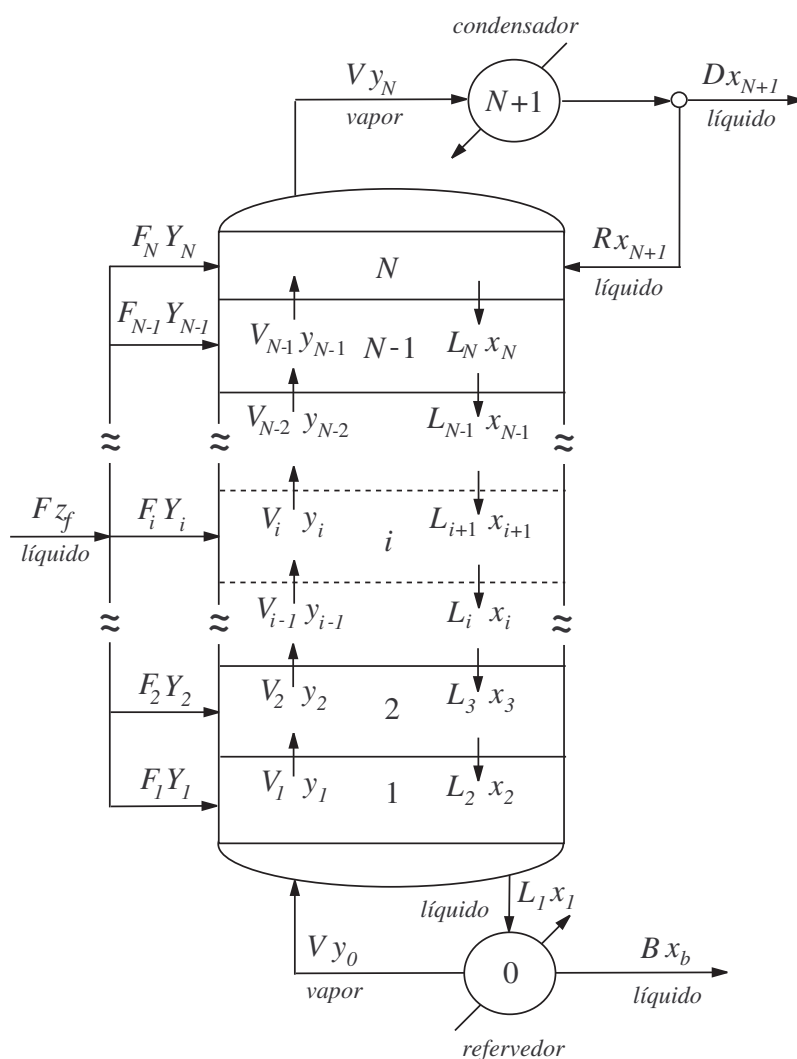


Figura 9.70: Estrutura geral de uma coluna de destilação (Reproduzido de Bansal et al. (2003)).

Nesta estrutura, pode-se destacar a coluna de destilação, onde efetivamente acontece a transferência de massa; o refeedor, onde a corrente de líquido é aquecida para a realimentação da coluna, e o condensador, onde a corrente de vapor é resfriada e retornada para a coluna a uma razão de refluxo.

A coluna de destilação é alimentada com uma vazão F de composição molar conhecida, onde z_f é a taxa de perturbação do sistema, D é a vazão de destilado, B é a vazão de fundo, L é a vazão de líquido, R é a vazão de refluxo, V é a vazão do fluido de aquecimento do refeedor, x_i e y_i são as frações mássicas da fase líquida e da fase vapor, respectivamente (os subscritos b e 0 se referem ao refeedor) e Y é uma variável de decisão, que indicará em qual estágio ou prato da coluna a alimentação será feita.

A descrição matemática do processo de separação por destilação, neste estudo de caso, considera as seguintes hipóteses (BANSAL et al., 2003): volatilidade relativa (α) constante, equilíbrio de fases, *Hold-up* de líquido (H_p) constante e *Hold-up* de vapor desprezível ($V_i = V$, $i = 1, \dots, N$) e queda de pressão também desprezível.

A partir das hipóteses descritas acima, as equações de balanço de massa são apresentadas a seguir.

✓ *Balanço de massa no estágio i :*

$$H_p \frac{dx_i}{dt} = L_{i+1}x_{i+1} - L_i x_i + V(y_{i-1} - y_i) + FY_i z_f \quad i = 1, \dots, N - 1 \quad (9.101)$$

✓ *Balanço no refeedor:*

$$10H_p \frac{dx_b}{dt} = L_1 x_1 - V y_0 - B x_b \quad (9.102)$$

✓ *Balanço no estágio N - alimentação da vazão de refluxo R :*

$$H_p \frac{dx_N}{dt} = -L_N x_N + V(y_{N-1} - y_N) + FY_N z_f + R x_{N+1} \quad (9.103)$$

✓ *Balanço no condensador:*

$$10H_p \frac{dx_{N+1}}{dt} = V(y_N - x_{N-1}) \quad (9.104)$$

✓ *Balanço global no refeedor:*

$$0 = L_1 - V - B \quad (9.105)$$

✓ *Balanço global no estágio i :*

$$0 = L_{i+1} - L_i + FY_i \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (9.106)$$

✓ *Balanço global no estágio N :*

$$0 = -L_N + FY_N + R \quad (9.107)$$

✓ *Balanço global no condensador:*

$$0 = V - D - R \quad (9.108)$$

✓ *Equilíbrio líquido-vapor:*

$$y_0 = \frac{\alpha x_b}{1 + (\alpha - 1)x_b} \quad (9.109)$$

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad i = 1, \dots, N \quad (9.110)$$

✓ *Razão de perturbação na alimentação:*

$$z_f = 0,54 - 0,09 \exp(-10t) \quad (9.111)$$

O problema multi-objetivo consiste na determinação da vazão do fluido de aquecimento no refeedor (V), da vazão de refluxo (R) e da localização do prato de alimentação (Y_i , $i=1, \dots, N$), em uma coluna com dois componentes, tal que a composição na saída do condensador (x_{N+1}) seja maximizada e que a composição na saída do refeedor (x_b) ao final do tempo de operação seja minimizada:

$$\begin{cases} \min f_1 = -x_{N+1}(t_f) \\ \min f_2 = x_b(t_f) \end{cases} \quad (9.112)$$

sujeito aos balanços de massa (Eq. (9.101)-Eq. (9.111)) e às restrições de projeto

$$g_1 \equiv 0,90 - x_{N+1}(t_f) \leq 0 \quad (9.113)$$

$$g_2 \equiv x_b(t_f) - 0,10 \leq 0 \quad (9.114)$$

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad (9.115)$$

Deve ser destacado que $Y_i \in \{0, 1\}$ ($i=1, \dots, N$). Assim, se Y_i for igual a 1, implica que o i -ésimo estágio será alimentado com vazão de alimentação F . Já as outras duas variáveis de projeto não devem violar os limites: $0 \text{ kmol/min} \leq V \leq 2 \text{ kmol/min}$ e $0 \text{ kmol/min} \leq R \leq 2 \text{ kmol/min}$.

A Tabela 9.32 apresenta os parâmetros e condições operacionais do processo. Já os parâmetros utilizados pelo NSGA II e MODE são apresentados na Tab. 9.33.

Tabela 9.32: Condições operacionais do problema da coluna de destilação.

Parâmetro	Valor	Unidade
N	30	-
α	2,5	-
H_p	0,175	kmol/min
F	1	kmol/min
t_f	400	min
$x_i(t=0)$ ($i=1, \dots, N$)	0	-
$x_b(t=0)$	0	-

Tabela 9.33: Parâmetros utilizados na resolução do problema da coluna de destilação.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	30	20
N	50	10
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90
r_p	2	2

A população inicial e a solução obtida pelo MODE, com 410 avaliações da função objetivo, comparada com o NSGA II, com 1550 avaliações da função objetivo, e com o Método da Soma Ponderada (MSP), são apresentadas nas Figs. 9.71 e 9.72, respectivamente.

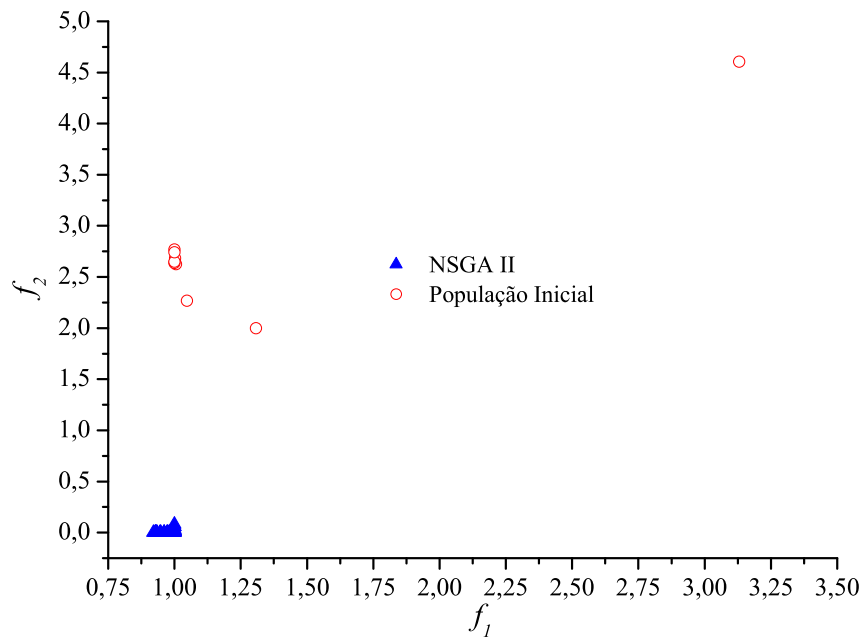


Figura 9.71: População inicial para o problema da coluna de destilação.

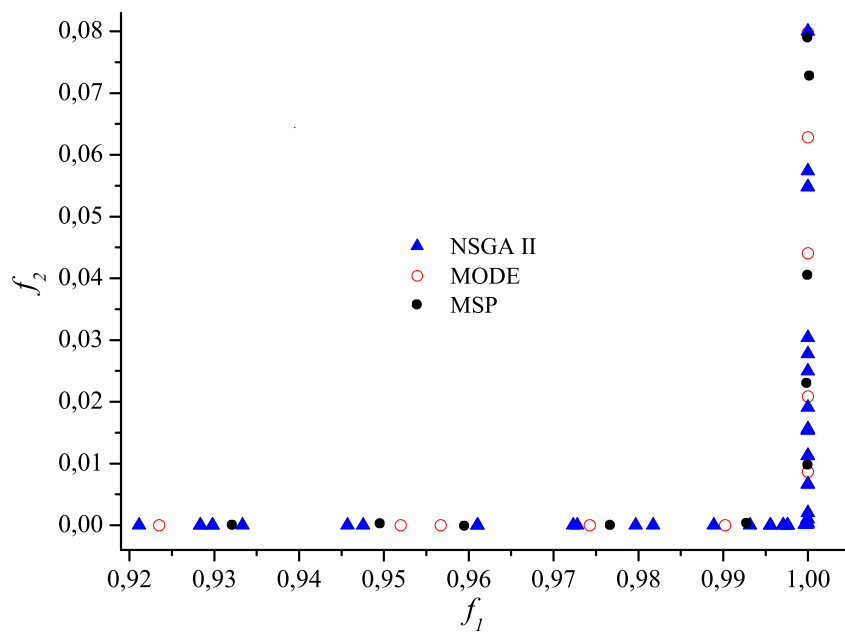


Figura 9.72: Curva de Pareto para o problema da coluna de destilação.

A Tabela 9.34 apresenta alguns pontos da curva de Pareto obtido pelo MODE. Nessa tabela é possível observar o caráter conflitante dos objetivos.

Tabela 9.34: Alguns pontos da curva de Pareto para o problema da coluna de destilação.

Ponto	V (kmol/min)	R (kmol/min)	Estágio de Alimentação	f_1 (-)	f_2 (-)
A	1,925519	1,340782	27	0,923492	$4,007013 \times 10^{-9}$
B	1,991645	1,482480	8	0,999999	$6,282713 \times 10^{-2}$
C	1,658039	1,093586	26	0,956677	$4,145719 \times 10^{-8}$

A Figura 9.73 apresenta as composições obtidas a partir da simulação da solução B. Nesta simulação fica claro como a composição varia ao longo dos estágios da coluna e que na metade do tempo de simulação utilizado o processo entra em regime estacionário.

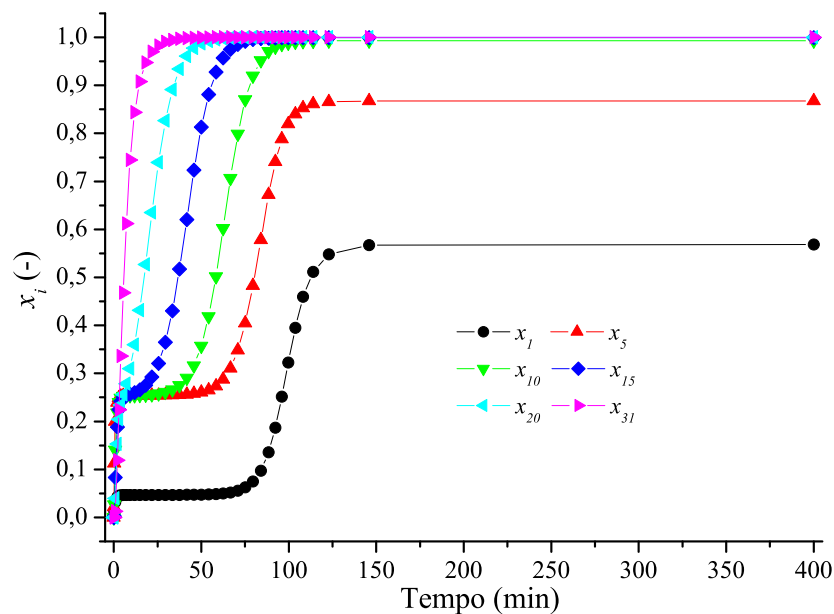


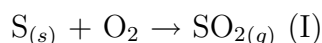
Figura 9.73: Perfis de composição na coluna de destilação obtidos a partir da simulação da solução B.

9.5.2 Otimização de um Reator Não-Adiabático para a Produção de SO₃

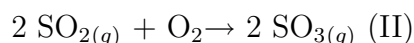
O ácido sulfúrico (H₂SO₄) é sem sombra de dúvida o produto mais utilizado na indústria química. Sua importância tem a ver com as inúmeras aplicações, tais como na indústria de petróleo, na remoção de impurezas da gasolina e óleos; na fabricação de explosivos; na fabricação de outros ácidos; é empregado como catalisador em outros processos químicos e na indústria de fertilizantes, para converter o fosfato normal de cálcio insolúvel em fosfato ácido solúvel (SHREVE; BRINK, 1980).

O ácido sulfúrico é produzido a partir de enxofre (S), oxigênio (O₂) e água (H₂O) por um processo de contato, catalisada por pentóxido de vanádio (V₂O₅).

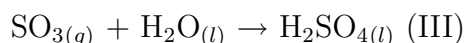
Na primeira etapa, o enxofre é queimado no ar, produzindo dióxido de enxofre.



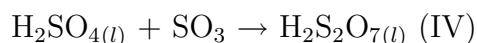
O dióxido de enxofre, por sua vez, é oxidado formando o trióxido de enxofre com o uso de oxigênio e na presença de um catalisador de pentóxido de vanádio:



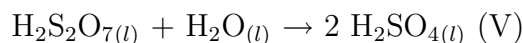
Finalmente, o trióxido de enxofre é lavado com água ou uma solução de ácido sulfúrico, resultando a formação de uma solução de ácido sulfúrico 98-99%:



A dissolução direta de SO₃ em água é impraticável por causa da natureza exotérmica da reação. Assim, o SO₃ é absorvido em H₂SO₄ para formar *oleum* (H₂S₂O₇), que é então diluído, com a formação de ácido sulfúrico.



O *oleum* reage com água para formar H₂SO₄ concentrado.



No processo descrito, a conversão de SO₂ em SO₃ é altamente dependente da temperatura, pressão, vazão de alimentação, entre outros fatores (FOGLER, 1999). Neste sentido,

é necessário o estudo das condições operacionais no processo de obtenção de SO_3 a partir da reação II.

A Figura 9.74 apresenta o reator com n_{tubos} tubos contendo o catalisador V_2O_5 e com alimentação (11 % SO_2 , 10 % O_2 e 79 % N_2).

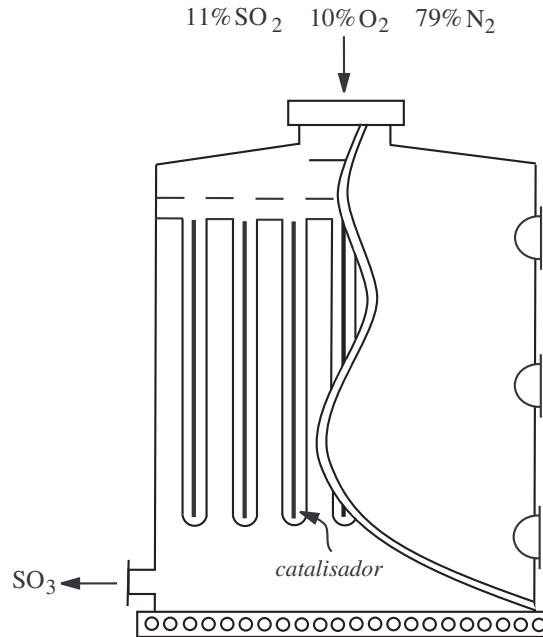
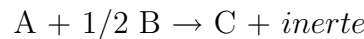


Figura 9.74: Reator para conversão de SO_2 em SO_3 (Reproduzido de Fogler (1999)).

O processo de produção de SO_3 é descrito matematicamente por equações de balanço de massa, de energia e pressão, como apresentado a seguir.

Esquemáticamente, a reação II pode ser escrita como sendo



onde $\text{A} \equiv \text{SO}_2$, $\text{B} \equiv \text{O}_2$, $\text{C} \equiv \text{SO}_3$ e $\text{inerte} \equiv \text{N}_2$.

✓ *Relação estequiométrica:*

$$P_i = P_{Ao} \frac{(\theta_i + \nu_i X) T}{(1 + \epsilon X) P_o} \quad (9.116)$$

onde P é a pressão do componente i ($i = [\text{A}, \text{B} \text{ e } \text{C}]$), $\theta_i \equiv \frac{F_{io}}{F_{Ao}}$, ν_i é o coeficiente estequiométrico do componente i , $\epsilon \equiv \sum_{i=1}^3 \nu_i \frac{F_{Ao}}{F_T}$, F_i é o fluxo mássico do componente i , F_T é o fluxo mássico total do sistema e X é a conversão.

✓ *Balanço de massa: equação de projeto baseado na massa de catalisador W :*

$$F_{Ao} \frac{dX}{dW} = -r_A \quad X(0) = 0 \quad (9.117)$$

onde $-r_A$ é a taxa de reação dada por:

$$-r_A = \begin{cases} k \left(0,848 - \frac{0,012}{K_P^2} \right) & \text{se } X < 0,05 \\ k \sqrt{\frac{1-X}{X}} \left(\left(\frac{0,2 - 0,11X}{1 - 0,055X} \right) \frac{P}{P_o} - \left(\frac{X}{(1-X)K_p} \right)^2 \right) & \text{se } X > 0,05 \end{cases} \quad (9.118)$$

O parâmetro k é dado por (FOGLER, 1999):

$$k = \exp \left(\frac{-176008}{T} - (110,1 \log(T) + 912,8) \right) \quad (9.119)$$

onde k é expresso em lbmol SO₂/(lbcat s atm) e T é a temperatura dada em R.

K_P é dado por:

$$K_P = \exp \left(\frac{42311}{RcT} - 11,24 \right) \quad (9.120)$$

onde K_P é dado em atm^{-0,5} e Rc é a constante dos gases ideais.

✓ *Balanço de energia:*

$$\frac{dT}{dW} = \frac{4U/(\rho_b D)(T_{amb} - T) + (-r_A)(-\Delta H_{RX})}{F_{Ao}(\sum \theta_i C_{p_i} + X \Delta C_p)} \quad T(0) = T_o \quad (9.121)$$

onde U é o coeficiente de transferência de calor, ρ_b é a densidade do catalisador, D é o diâmetro dos n_{tubos} tubos, T_{amb} é a temperatura ambiente.

A capacidade calorífica (C_p), em Btu/(lbmol R), é dada por:

$$C_{pA} = 7,208 + 5,633 \times 10^{-3}T - 1,343 \times 10^{-6}T^2 \quad (9.122)$$

$$C_{pB} = 5,731 + 2,323 \times 10^{-3}T - 4,886 \times 10^{-7}T^2 \quad (9.123)$$

$$C_{pC} = 8,511 + 9,517 \times 10^{-3}T - 2,325 \times 10^{-6}T^2 \quad (9.124)$$

$$C_{p_{inerte}} = 6,248 + 8,778 \times 10^{-4}T - 2,13 \times 10^{-8}T^2 \quad (9.125)$$

Assim, o parâmetro $\sum \theta_i C p_i$ é:

$$\sum \theta_i C p_i = 57,23 + 0,014T - 1,94 \times 10^{-6}T^2 \quad (9.126)$$

O calor de reação ΔH_{RX} , considerando como referência a temperatura de 1260 R, é calculado como:

$$\begin{aligned} \Delta H_{RX} = & -42,471 - 1,563(T - 1260) + 1,36 \times 10^{-3}(T^2 - 1260^2) + \\ & -2,459 \times 10^{-3}(T^3 - 1260^3) \end{aligned} \quad (9.127)$$

O calor total, em relação à massa de catalisador W utilizada, é calculado por:

$$Q = \int_0^{W_f} 4U/(\rho_b D)(T_{amb} - T)dW \quad (9.128)$$

✓ *Queda de pressão:*

$$\frac{dP}{dW} = -\frac{GTP_o(1-\phi)(1+\epsilon X)}{\rho_b A_c \rho_o T_o P D_p g_c \phi^3} \left(\frac{150(1-\phi)\mu}{D_p} + 1,75G \right) \quad P(0) = P_o \quad (9.129)$$

onde G é a vazão mássica por unidade de área, ϕ é a esfericidade, ρ_o é a densidade da mistura, g_c é um fator de correção de unidades, D_p é o diâmetro, A_c é a área da seção transversal e μ a viscosidade da mistura.

O problema multi-objetivo consiste na determinação da vazão de alimentação do reator (F_T), da pressão inicial (P_o) e da temperatura inicial (T_o), que maximize a conversão de SO_2 em SO_3 e que minimize o calor trocado entre o reator e o meio:

$$\begin{cases} \min f_1 = -X(W_f) \\ \min f_2 = Q \end{cases} \quad (9.130)$$

sujeito aos balanços de massa, energia e pressão (Eq. (9.116)-Eq. (9.129)), e considerando o seguinte espaço de projeto: $7000 \text{ lb mol/h} \leq F_T \leq 9000 \text{ lb mol/h}$, $1,8 \text{ atm} \leq P_o \leq 3,2 \text{ atm}$ e $1000 \text{ R} \leq T_o \leq 2000 \text{ R}$.

Os parâmetros e condições operacionais são apresentados na Tab. 9.35.

Tabela 9.35: Parâmetros e condições operacionais para o problema do reator não-adiabático (FOGLER, 1999) .

Parâmetro	Unidade	Valor
ϵ	(-)	-0,055
θ_i ($i = A, BeC$)	(-)	F_{io}/F_{Ao}
W_f	lbcat/tubo	28,54
n_{tubos}	(-)	4631
ϕ	(-)	0,45
ρ_o	lb/ft ³	0,054
ρ_b	lb/ft ³	33,8
D_p	ft	0,015
μ	lb/(ft h)	0,090
U	Btu/(h ft ² R)	10
A_c	ft ²	0,0422
g_c	lb/ft ³	$4,17 \times 10^8$
R_c	Btu/(lb mol R ft)	1,987

Os parâmetros utilizados pelo NSGA II e MODE são apresentados na Tab. 9.36.

Tabela 9.36: Parâmetros utilizados na resolução do problema do reator não-adiabático.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	50	25
N	30	15
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

A população inicial e a solução obtida pelo MODE, com 765 avaliações da função objetivo, comparada com o NSGA II, com 1530 avaliações da função objetivo, são apresentadas nas Figs. 9.75 e 9.76, respectivamente.

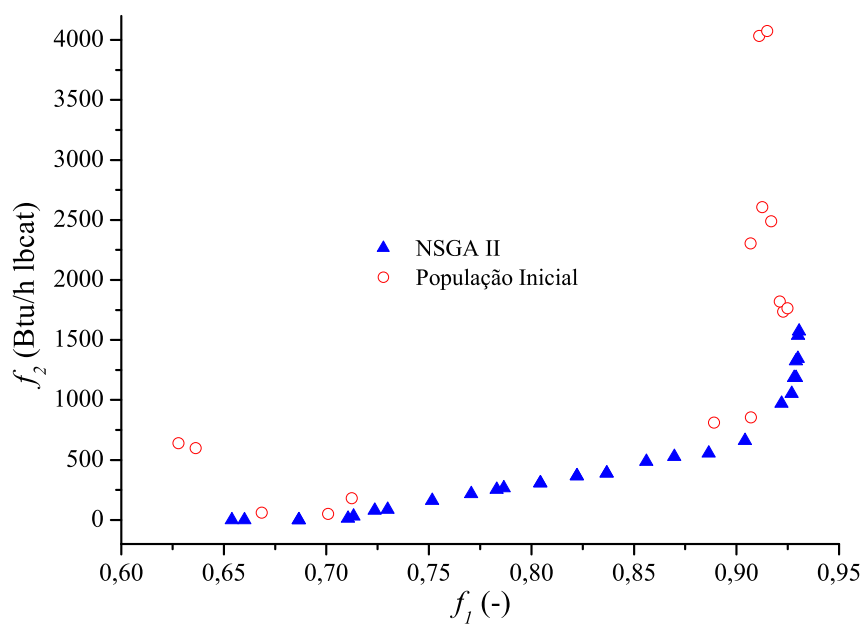


Figura 9.75: População inicial para o problema do reator não-adiabático.

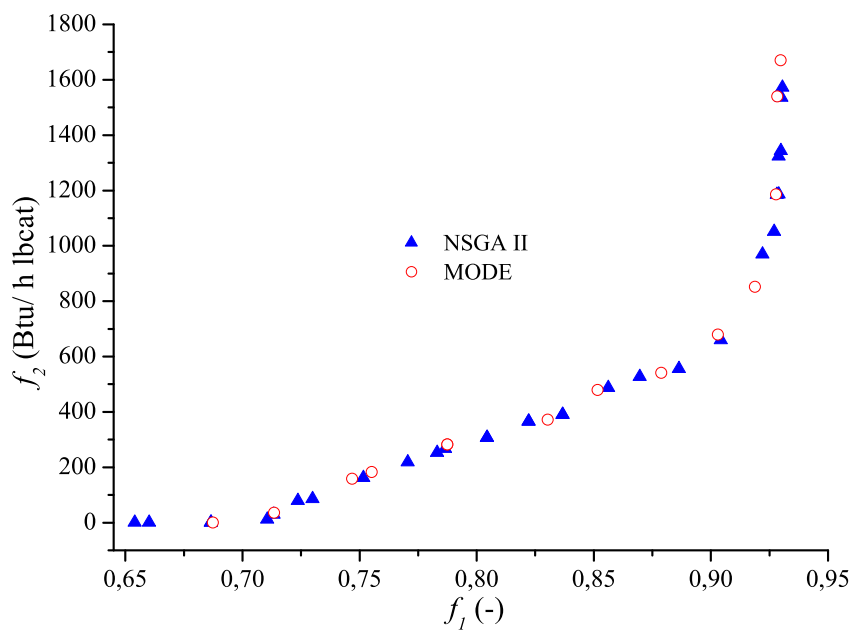


Figura 9.76: Curva de Pareto para o problema do reator não-adiabático.

A Tabela 9.37 apresenta alguns pontos da curva de Pareto obtidos pelo MODE.

Tabela 9.37: Alguns pontos da curva de Pareto para o problema do reator não-adiabático.

Ponto	F_T (lb mol/h)	P (atm)	T_o (R)	f_1 (-)	f_2 (Btu/ h lbcats)	L (\$/h)
A	7872,0	3,0	1236,0	0,68735	0,10741	11606,34
B	7002,6	3,0	1534,7	0,92980	1670,38	13966,22
C	7209,5	3,0	1509,5	0,92827	1540,40	14355,33

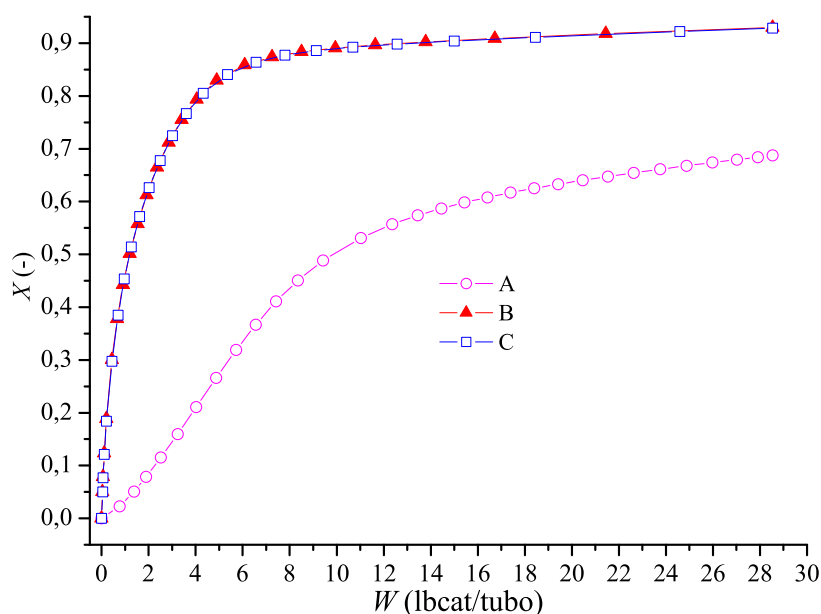
Na tabela acima é utilizado como critério de comparação, visando avaliar a melhor solução da curva de Pareto, o lucro (L). Este é definido como sendo o preço de venda do produto C (SO_3) menos o custo das correntes de alimentação A (SO_2) e B (O_2):

$$L = (F_{Ao}(\theta_C + X))Pv_C n_{tubos} - (F_{Ao} - F_{Ao}(1 - X))Pc_A n_{tubos} + \\ - (F_{Bo} - F_{Ao}(\theta_B - 1/2X))Pc_B n_{tubos} \quad (9.131)$$

onde $Pc_A=55,6$ \$/lb; $Pc_B=36,8$ \$/lb e $Pv_C=93,5$ \$/lb (valores baseados no trabalho de Babu et al. (2005)).

Neste sentido, a melhor solução tomando como base o critério acima é o ponto C.

Os perfis para a conversão, pressão e temperatura para os pontos A, B e C, são apresentados nas Figs. 9.77, 9.78 e 9.79, respectivamente.

**Figura 9.77:** Perfis de conversão de SO_2 para o problema do reator não-adiabático.

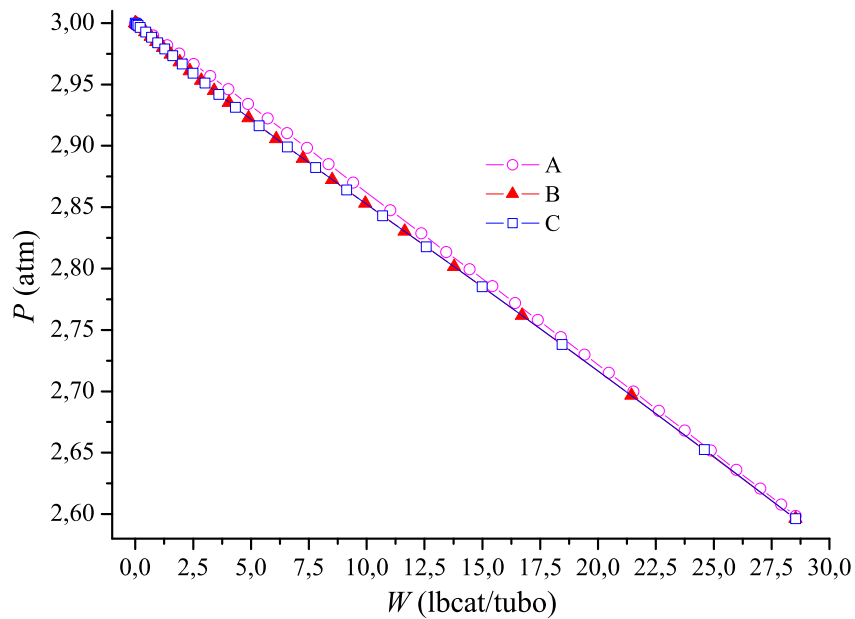


Figura 9.78: Perfis de pressão para o problema do reator não-adiabático.

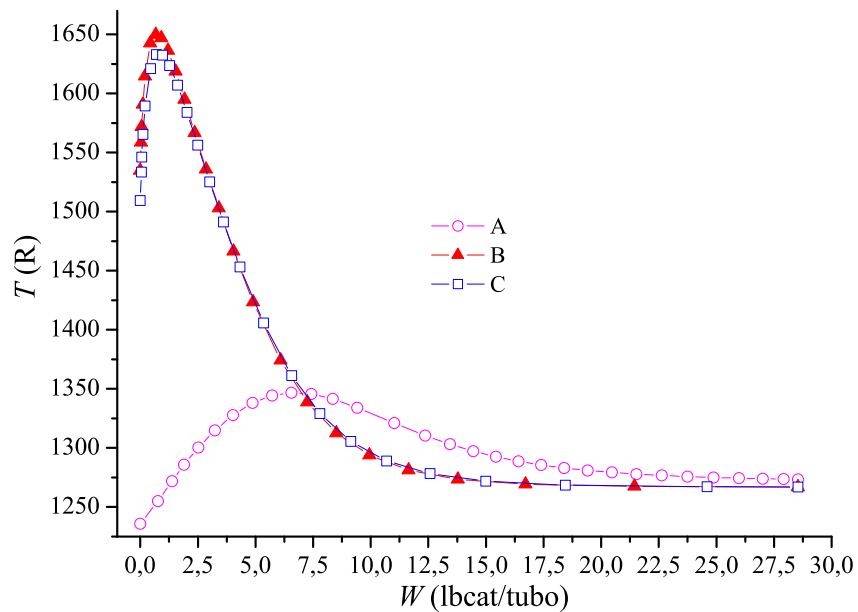


Figura 9.79: Perfis de temperatura para o problema do reator não-adiabático.

Deve ser enfatizado que foi utilizada, para comparação entre as soluções da curva de Pareto, uma função custo simplificada, isto é, sem considerar o custo energético utilizado no processo, entre outros eventuais custos. Neste sentido, procurou-se apresentar uma alternativa para a escolha de um projeto a ser implementado em condições reais. Outro ponto a se considerar é a inclusão de um novo objetivo, neste caso a maximização do lucro na elaboração do problema de otimização multi-objetivo.

9.5.3 Otimização das Condições Operacionais de um Reator PFR com Reações em Paralelo

O reator PFR (*Plug-Flow Reactor*) é comumente empregado em processos industriais. Este consiste de um tubo cilíndrico como mostrado na Fig. 9.80, onde F_j é o fluxo molar do componente j que é continuamente consumido ao longo do comprimento, segundo a cinética de reação vigente.

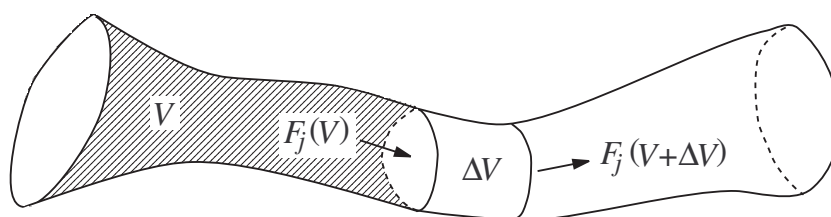
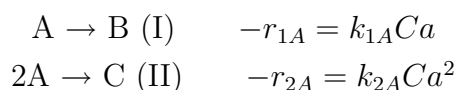


Figura 9.80: Reator PFR (Reproduzido de Fogler (1999)).

A maioria dos processos químicos são constituídos por reações principais (desejáveis) e por reações secundárias (indesejáveis). A formação de reações secundárias pode ser amenizada a partir da escolha de condições operacionais como temperatura, pressão e concentração. Uma das maneiras de mensurar a formação de reações secundárias é o conceito de seletividade global. Segundo Fogler (1999), a seletividade global é definida como sendo a relação entre o fluxo molar do componente que se deseja obter e o fluxo molar do componente indesejável. Dessa forma, neste trabalho é elaborado um problema de otimização multi-objetivo aplicado a reações em paralelo ocorrendo em um reator PFR.

Sejam as reações em fase gasosa:



onde r_{1A} e r_{2A} são as taxas das reações I e II, respectivamente, Ca é a concentração da espécie A e k_{1A} e k_{2A} são as constantes de reação dadas por:

$$k_{1A} = 10 \exp \left(\frac{8000}{Rc} \left(\frac{1}{300} - \frac{1}{T} \right) \right) \quad (9.132)$$

$$k_{2A} = 0,09 \exp \left(\frac{18000}{Rc} \left(\frac{1}{300} - \frac{1}{T} \right) \right) \quad (9.133)$$

onde k_{1A} é dada em s^{-1} e k_{2A} dada em $\text{dm}^3/(\text{mol s})$ e Rc é a constante dos gases ideais.

✓ *Relações estequiométricas:*

$$Ca = C_{To} \left(\frac{Fa}{F_T} \right) \left(\frac{T_o}{T} \right) \quad (9.134)$$

$$Cb = C_{To} \left(\frac{Fb}{F_T} \right) \left(\frac{T_o}{T} \right) \quad (9.135)$$

$$Cc = C_{To} \left(\frac{Fc}{F_T} \right) \left(\frac{T_o}{T} \right) \quad (9.136)$$

$$F_T = Fa + Fb + Fc \quad (9.137)$$

✓ *Balanço de massa para cada componente:*

$$\frac{dFa}{dV} = -r_{1A} + r_{2A} \quad Fa(0) = Fa_o \quad (9.138)$$

$$\frac{dFb}{dV} = -r_{1A} \quad Fb(0) = Fb_o \quad (9.139)$$

$$\frac{dFc}{dV} = -\frac{1}{2}r_{2A} \quad Fc(0) = Fc_o \quad (9.140)$$

✓ *Balanço de energia:*

$$\frac{dT}{dV} = \frac{Ua(T_{amb} - T) + (-r_{1A})(-\Delta H_{R1}) + (-r_{2A})(-\Delta H_{R2})}{FaC_{pa} + FbC_{pb} + FcC_{pc}} \quad T(0) = T_o \quad (9.141)$$

onde Ua é o coeficiente de transferência térmica, T_{amb} é a temperatura ambiente, ΔH_{R1} e ΔH_{R2} são os calores de reação e C_{pi} são os calores específicos do componente i .

O problema multi-objetivo consiste na determinação da vazão de alimentação de cada uma das espécies no reator (Fa_o , Fb_o e Fc_o) e da temperatura inicial (T_o), que maximize a conversão do reagente A e que maximize a seletividade global, isto é, a maximização do produto B (desejável) e minimização do produto C (indesejável):

$$\begin{cases} \min f_1 = -\left(1 - \frac{Fa}{Fa_o}\right) \\ \min f_2 = -\frac{Fb}{Fc} \end{cases} \quad (9.142)$$

sujeito aos balanços de massa e energia (Eq. (9.132)-Eq. (9.141)), e considerando o seguinte espaço de projeto: $100 \text{ mol/s} \leq Fa_o \leq 300 \text{ mol/s}$, $0 \text{ mol/s} \leq Fb_o \leq 10 \text{ mol/s}$, $0 \text{ mol/s} \leq Fc_o \leq 10 \text{ mol/s}$ e $400 \text{ °C} \leq T_o \leq 600 \text{ °C}$.

Os parâmetros e condições operacionais são apresentados na Tab. 9.38 (FOGLER, 1999).

Tabela 9.38: Parâmetros e condições operacionais do reator PFR.

Parâmetro	Unidade	Valor
ΔH_{R1}	J/mol	-20000
ΔH_{R2}	J/mol	-60000
C_{pa}	J/(mol °C)	90
C_{pb}	J/(mol °C)	90
C_{pc}	J/(mol °C)	180
Ua	J/(m ³ s °C)	4000
T_{amb}	°C	100
ϕ	(-)	0,45
C_{To}	mol/dm ³	0,01
V	dm ³	1
Rc	J/(mol K)	8,314

Os parâmetros utilizados pelo NSGA II e MODE são apresentados na Tab. 9.39.

Tabela 9.39: Parâmetros utilizados na resolução do problema do reator PFR com reações em paralelo.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	200	150
N	50	25
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

A população inicial e a solução obtida pelo MODE, com 7525 avaliações da função objetivo, comparada com o NSGA II, com 10050 avaliações da função objetivo, são apresentadas nas Figs. 9.81 e 9.82, respectivamente.

A Tabela 9.40 apresenta alguns pontos da curva de Pareto obtidos pelo MODE.

Os perfis para os fluxos molares e temperatura para os pontos A e B são apresentados nas Figs. 9.83 a 9.86, respectivamente.

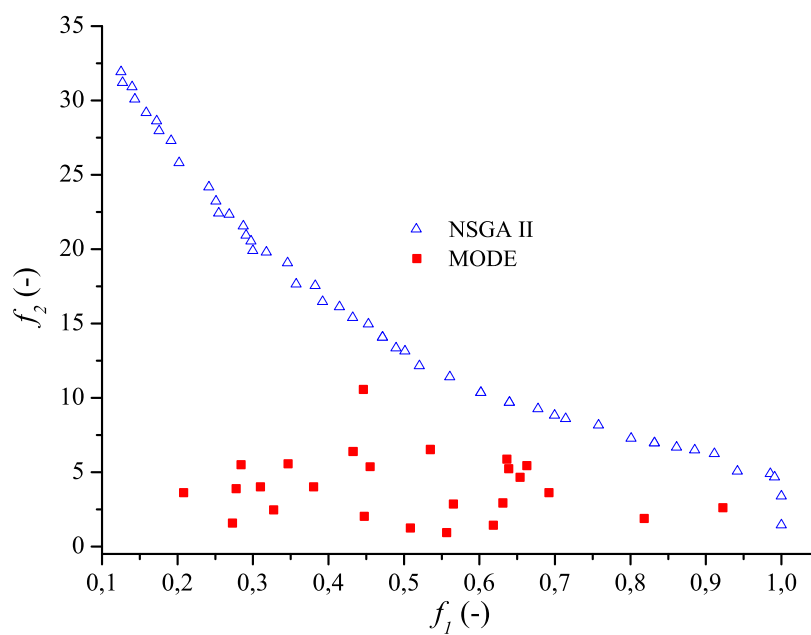


Figura 9.81: População inicial para o problema do reator PFR com reações em paralelo.

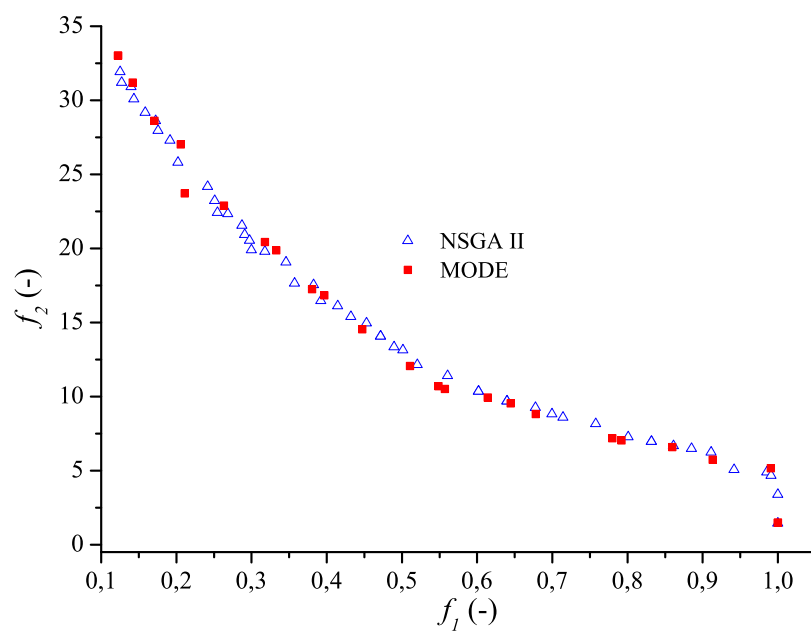


Figura 9.82: Curva de Pareto para o problema do reator PFR com reações em paralelo.

Tabela 9.40: Alguns pontos da curva de Pareto para o problema do reator PFR com reações em paralelo.

Ponto	Fa_o (mol/s)	Fb_o (mol/s)	Fc_o (mol/s)	T_o (°C)	f_1 (-)	f_2 (-)
A	102,8470	7,3856	8,4310	449,9494	1,0000	1,4925
B	297,9528	9,7144	0,0126	400,0142	0,1224	33,0121

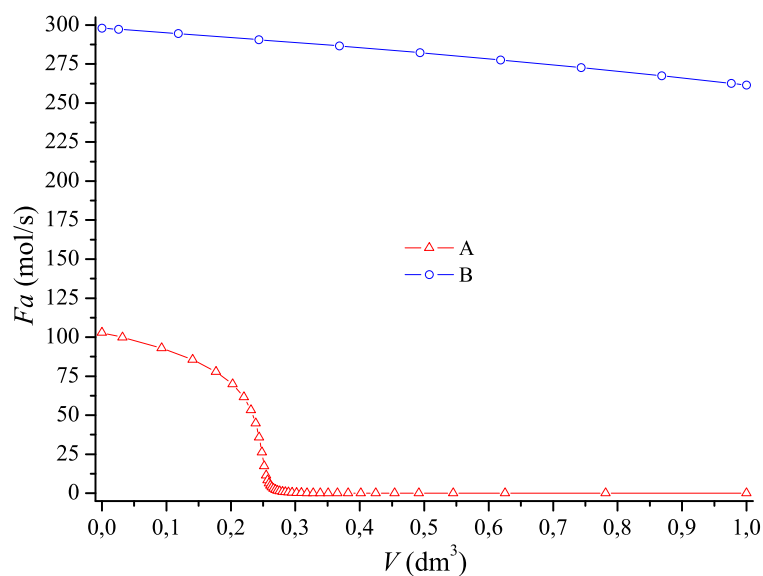


Figura 9.83: Fa para o problema do reator PFR com reações em paralelo.

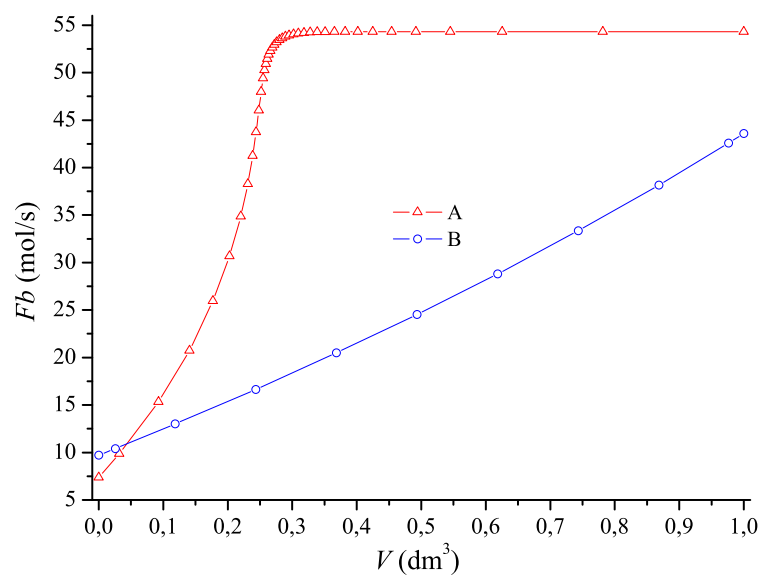


Figura 9.84: Fb para o problema do reator PFR com reações em paralelo.

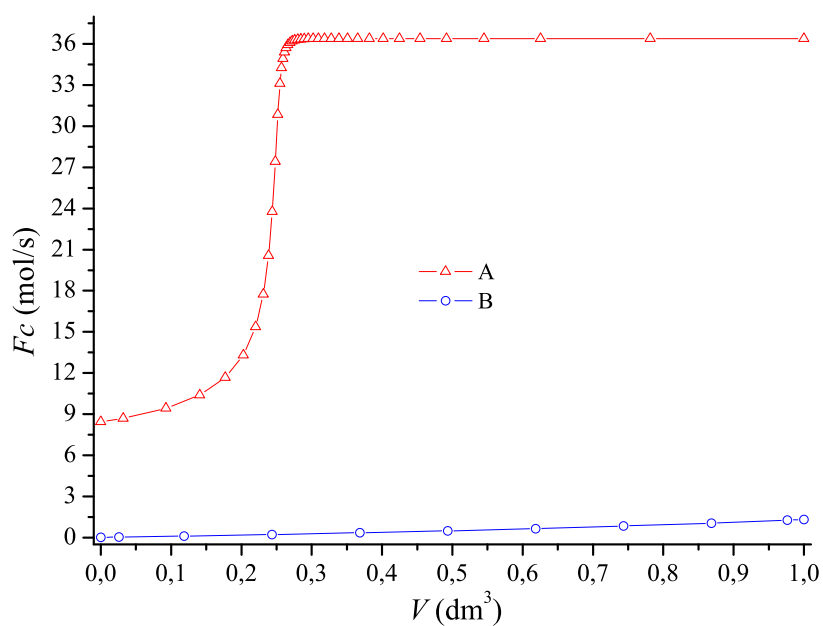


Figura 9.85: F_c para o problema do reator PFR com reações em paralelo.

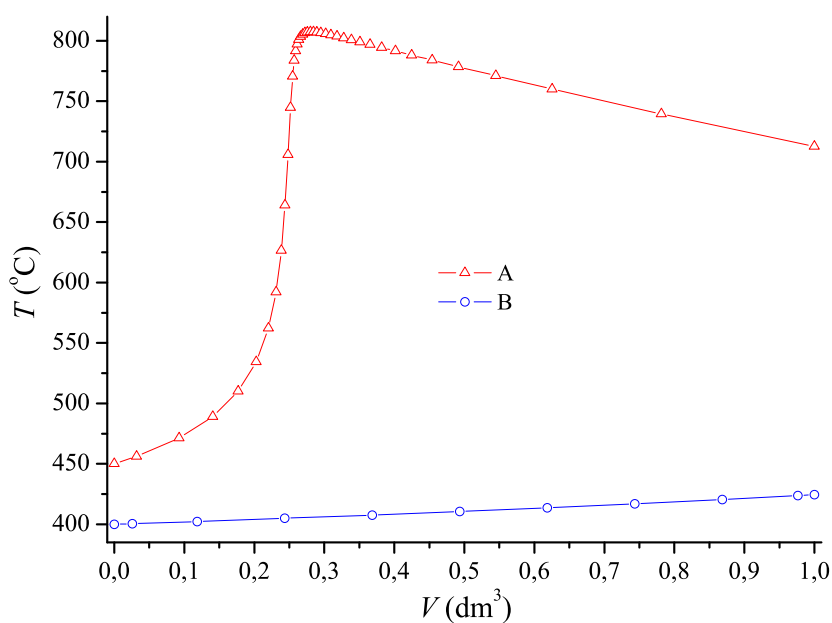


Figura 9.86: Temperatura para o problema do reator PFR com reações em paralelo.

A análise destes gráficos mostra o caráter conflitante que existe no atendimento de cada um dos objetivos. Além disso, uma pequena variação da temperatura implica em uma alta seletividade e baixa conversão. Por outro lado, altas conversões são favorecidas por altas temperaturas.

9.6 Otimização de Sistemas Reais usando Meta-Modelos

Os problemas reais de engenharia sempre envolvem a interação entre várias disciplinas como fluido-dinâmica, transferência de calor, elasticidade, eletromagnetismo, dinâmica, entre outras. De forma geral, estes problemas multidisciplinares são reconhecidos por apresentarem características geométricas complexas, móveis e deformáveis, presença do regime de turbulência e, devido às não linearidades, podem apresentar mínimos locais (DULIKRAVICH et al., 1999). Tais características contribuem para um alto custo computacional relacionado com a simulação, devido ao refinamento e/ou atualização da malha utilizada, o que é mais pronunciado no contexto de otimização (MALISKA, 2004).

O projetista tem em mãos três ferramentas básicas para desenvolver o projeto ou analisar o problema real: a análise analítica, a numérica e a experimentação em laboratório. Os dois primeiros métodos formam a classe dos métodos teóricos, pois ambos objetivam resolver o modelo matemático. Já a experimentação em laboratório tem como grande vantagem o fato de tratar o problema em sua configuração real. Contudo, esta geralmente é caracterizada pelo alto custo experimental, e muitas vezes não pode ser realizada por questões de segurança, como no caso de reatores nucleares, ou pela dificuldade da reprodução das condições reais, como por exemplo, na simulação de escoamentos supersônicos (MALISKA, 2004).

Já a modelagem matemática de processos reais é de grande importância, pois estes modelos podem ser utilizados como substitutos do sistema real porque, ou é impraticável construir múltiplas versões (protótipos) do sistema real, ou têm custos elevados, ou têm outras limitações proibitivas de experimentação com o sistema real (SANTOS, 2002).

Neste sentido, apesar do modelo de simulação ser mais simples que o sistema real, pode ser bastante complicado, em termos de custo computacional, a realização de inúmeras execuções do programa de simulação para um grande número de combinações de variáveis de entrada. Alternativamente, como forma de superar este inconveniente, pode-se construir uma relação matemática mais simples que o modelo original, relacionando a entrada e a saída do modelo de simulação com um número relativamente pequeno de ensaios “experimentais” (MYERS, 1971; BOX et al., 1978). Este “modelo” do modelo de simulação é denominado meta-modelo (BARTON, 1992).

A Figura 9.87 ilustra a elaboração de meta-modelos a partir do sistema real e do modelo de simulação.

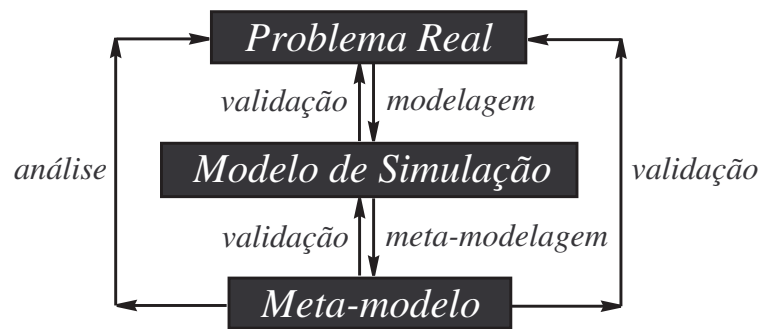


Figura 9.87: Meta-modelo, modelo de simulação e problema real (Reproduzido de Santos (2002)).

Segundo Barton (1992) as principais características de um meta-modelo são:

- *Evidenciar*: os meta-modelos podem expor, mais claramente que o modelo de simulação, a natureza fundamental das relações entre os dados e resultados do sistema, sendo utilizados para verificação e validação do modelo mais complexo que lhe deu origem (modelo de simulação);
- *Identificar*: os meta-modelos podem ser utilizados para identificar os parâmetros do sistema que mais afetam o seu desempenho;
- *Experimentar*: podem ser muito úteis para responder a questões do tipo “o que acontece se?” porque utilizam menos recursos computacionais que os modelos de simulação;
- *Inverter*: um meta-modelo permite responder a questões “inversas” que seriam de difícil resposta sem o seu auxílio devido ao tempo de computação excessivo gasto pelo modelo de simulação.

De forma geral, conhecendo-se as características das respostas obtidas em um determinado ensaio, se torna mais fácil a escolha de uma dada aproximação matemática. Contudo, a escolha do meta-modelo deve atender a algumas características básicas (SANTOS, 2002):

- Capacidade de captar a essência do problema a partir da forma do meta-modelo;
- Capacidade de caracterizar a precisão através de intervalos de confiança, testes de hipóteses, etc;
- Robustez de previsão;
- Facilidade no cálculo da função ajustada;

- Estabilidade numérica dos cálculos e, conseqüentemente, robustez em previsões para pequenas mudanças nos parâmetros que definem essa função.

Dentre os meta-modelos mais empregados na literatura, o mais utilizado devido a sua simplicidade, é a aproximação polinomial por superfície de resposta com contribuições lineares, cruzadas, quadráticas e cúbicas (MYERS, 1971; BOX et al., 1978):

$$Y_{sr} = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j \neq i, j > i}^n \beta_{i+j+1} x_i x_j + \sum_{i=1}^n \beta_{2n+i} x_i^2 + \sum_{i=1}^n \beta_{3n+i} x_i^3 \quad (9.143)$$

onde β_i são os coeficientes da aproximação polinomial, x_i são as variáveis de projeto codificadas e Y_{sr} é a resposta do sistema analisado. Um estudo abrangente sobre as tendências recentes em meta-modelagem e suas aplicações podem ser encontradas em Fang et al. (2005) e Viana (2008).

Um ponto importantíssimo quando se trata de meta-modelagem é o critério utilizado para a garantia de empregabilidade da aproximação obtida. Dessa forma a confiabilidade no modelo ajustado depende de uma criteriosa análise estatística. Neste sentido são descritas a seguir algumas técnicas estatísticas empregadas para prever a adaptação de um meta-modelo ao sistema real (MYERS, 1971; BOX et al., 1978; VIANA, 2008):

☞ F_{stat} - F estatístico:

$$F_{stat} = \frac{(SST - SSE)/p}{SSE/(n - p - 1)} \quad (9.144)$$

onde SSE é o somatório dos erros quadráticos $\left(SSE = \sum_{i=1}^n (f_i - f'_i)^2 \right)$, SST é o somatório dos desvios quadráticos $\left(SST = \sum_{i=1}^n (f_i - \bar{f})^2 \right)$, n o número de experimentos e p é o números de termos não constantes do meta-modelo. f_i é o valor da resposta medida, f'_i é o valor da resposta obtida a partir do meta-modelo e $\bar{f}$ é o valor médio da resposta f .

☞ R^2 - coeficiente de correlação calculado como:

$$R^2 = 1 - \frac{SSE}{SST} \quad (9.145)$$

☞ R_{adj}^2 - coeficiente de correlação ajustado:

$$R_{adj}^2 = 1 - (1 - R^2) \frac{n - 1}{n - p - 1} \quad (9.146)$$

☞ $RMSE$ - erro quadrático médio:

$$RMSE = \sqrt{\frac{SSE}{n - p - 1}} \quad (9.147)$$

☞ $PRESS$ - somatório dos erros preditos:

$$PRESS = \sum_{i=1}^n (f_i - f_i^*)^2 \quad (9.148)$$

onde f_i^* é o valor calculado no i -ésimo ponto de projeto considerando o meta-modelo com $n-1$ pontos, sendo que o ensaio i é excluído.

☞ R_{pred}^2 - coeficiente de correlação predito seguindo a análise $PRESS$:

$$R_{pred}^2 = 1 - \frac{PRESS}{SST} \quad (9.149)$$

Desta maneira, a metodologia empregada para a resolução de problemas reais através de meta-modelos é apresentada na Fig. 9.88 e descrita nas seguintes etapas:

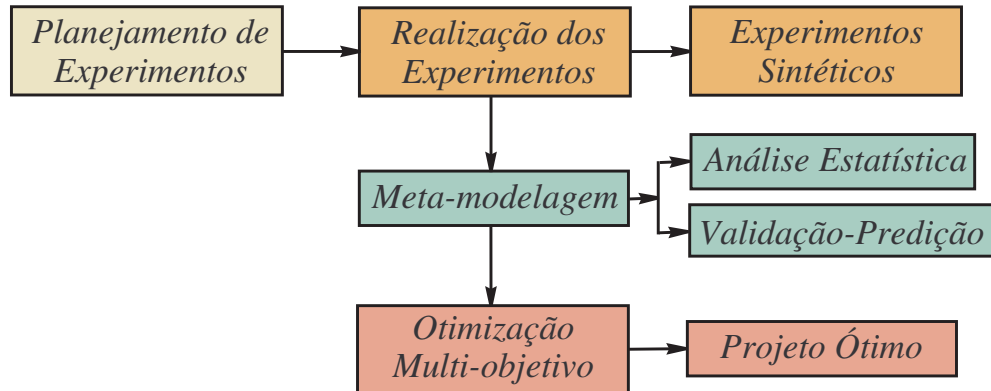


Figura 9.88: Etapas da resolução do problema real usando meta-modelos.

- ❶ elaboração do planejamento de experimentos a partir da escolha das variáveis independentes relevantes no sistema analisado;
- ❷ escolha do meta-modelo para cada uma das saídas observadas (variáveis dependentes);
- ❸ realização dos ensaios “experimentais” (em laboratório ou a partir de um modelo de simulação);

- ④ obtenção dos coeficientes do meta-modelo proposto;
- ⑤ análise estatística e validação dos resultados obtidos;
- ⑥ elaboração do problema de otimização multi-objetivo.

Com o intuito de se aplicar a metodologia descrita anteriormente, serão utilizados dois estudos de caso para essa finalidade. O primeiro é a otimização de um robô industrial com um mecanismo de balanceamento usando mola. Já o segundo caso trata de um problema de interação fluido-estrutura com um grau de liberdade.

9.6.1 Projeto Ótimo de um Robô Industrial

Considera-se o modelo de um corpo rígido de um robô como apresentado na Fig. 9.89, na qual um mecanismo de mola hidráulica é usado para balanceamento do braço AB (HERVE, 1986; ESCHENAUER et al., 1990).

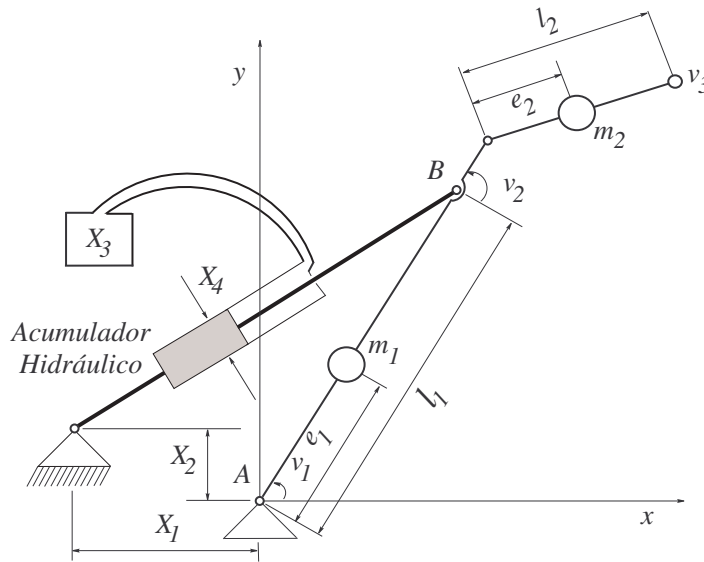


Figura 9.89: Robô industrial com mecanismo de mola hidráulica (Reproduzido de Eschenauer et al. (1990)).

Neste sistema dinâmico, as variáveis de projeto que afetam o balanceamento do braço são: a localização do mecanismo de mola em relação à base do robô (X_1 e X_2 em metros), a pressão no acumulador hidráulico (X_3 em MPa) e o diâmetro do cilindro (X_4 em metros). Já o bom desempenho do robô depende dos seguintes critérios: o torque estático na haste

do motor de direção (y_1), o trabalho executado pelo motor (y_2) e a força estática na junta A (y_3).

Devido as dificuldades descritas na seção 9.6, será utilizada uma técnica de meta-modelagem para a obtenção dos critérios y_i ($i=1, \dots, 3$).

O Planejamento de Experimentos

Com intuito de fazer com que todas as variáveis estejam dentro da mesma ordem de grandeza, são consideradas as seguintes codificações (ESCHENAUER et al., 1990):

$$x_1 = \frac{X_1}{0,01} \quad (9.150)$$

$$x_2 = \frac{X_2 - 0,30}{0,04} \quad (9.151)$$

$$x_3 = \frac{X_3 - 3,3}{0,3} \quad (9.152)$$

$$x_4 = \frac{X_4 - 0,037}{0,003} \quad (9.153)$$

Deve ser destacado que, neste estudo de caso, não foram realizadas simulações, e sim utilizados os dados apresentados no trabalho de Eschenauer et al. (1990), com base nos parâmetros listados na Tab. 9.41.

Tabela 9.41: Parâmetros usados nas simulações do problema do projeto ótimo de um robô industrial.

	Descrição	Valor	Unidade
m_1	massa do braço	254,4	kg
m_2	massa do antebraço	105,3	kg
l_1	comprimento do braço	1,0	m
l_2	comprimento do antebraço	1,35	m
e_1	distância do centro de gravidade até o braço	0,52	m
e_2	distância do centro de gravidade até o antebraço	0,53	m
v_3	carregamento máximo de carga	80	kg
	número de molas	2	-

O planejamento de experimentos e as saídas obtidas foram extraídos do trabalho de Eschenauer et al. (1990) e são apresentados na Tab. 9.42.

O Meta-Modelo

Deseja-se minimizar a diferença entre as saídas (y_i , $i=1, \dots, 3$) e os valores obtidos por

Tabela 9.42: Planejamento de experimentos e resposta obtida para o problema do projeto ótimo de um robô industrial.

Ensaio	x_1	x_2	x_3	x_4	X_1	X_2	X_3	X_4	y_1	y_2	y_3
1	1	1	1	1	0,01	0,34	3,6	0,040	3546,7	16652,3	4405,4
2	-1	1	1	1	-0,01	0,34	3,6	0,040	3684,1	17443,4	4552,4
3	1	-1	1	1	0,01	0,26	3,6	0,040	1960,5	13648,9	3042,8
4	-1	-1	1	1	-0,01	0,26	3,6	0,040	1727,8	14200,7	2736,7
5	1	1	-1	1	0,01	0,34	3,0	0,040	2606,3	13788,4	3510,8
6	-1	1	-1	1	-0,01	0,34	3,0	0,040	2720,9	14447,8	3611,5
7	1	-1	-1	1	0,01	0,26	3,0	0,040	1828,5	11856,7	3433,9
8	-1	-1	-1	1	-0,01	0,26	3,0	0,040	1746,0	11884,0	3168,5
9	1	1	1	-1	0,01	0,34	3,6	0,034	2053,8	10851,3	3034,0
10	-1	1	1	-1	-0,01	0,34	3,6	0,034	1886,5	10851,3	2824,2
11	1	-1	1	-1	0,01	0,26	3,6	0,034	2452,1	10581,8	3895,2
12	-1	-1	1	-1	-0,01	0,26	3,6	0,034	2438,7	10851,8	3752,3
13	1	1	-1	-1	0,01	0,34	3,0	0,034	1977,5	9761,6	3456,0
14	-1	1	-1	-1	-0,01	0,34	3,0	0,034	1954,6	9761,6	3205,6
15	1	-1	-1	-1	0,01	0,26	3,0	0,034	2827,7	9762,0	4270,2
16	-1	-1	-1	-1	-0,01	0,26	3,0	0,034	2816,5	9762,0	4169,2
17	1	0	0	0	0,01	0,30	3,3	0,037	1880,4	11411,5	3178,2
18	-1	0	0	0	-0,01	0,30	3,3	0,037	1694,0	11411,5	2857,2
19	0	1	0	0	0,00	0,34	3,3	0,037	2154,7	11685,6	3053,5
20	0	-1	0	0	0,00	0,26	3,3	0,037	2084,2	11409,8	3528,7
21	0	0	1	0	0,00	0,30	3,6	0,037	1935,6	12054,9	2813,7
22	0	0	-1	0	0,00	0,30	3,0	0,037	1785,7	10764,7	3248,1
23	0	0	0	1	0,00	0,30	3,3	0,040	2087,1	13966,0	3066,5
24	0	0	0	-1	0,00	0,30	3,3	0,034	2189,5	10305,7	3526,9

cada um dos meta-modelos ($y_{i\ sr}$, $i=1, \dots, 3$):

$$Y_{sr} = \begin{cases} \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_4 x_4 + \beta_5 x_1^2 + \dots + \beta_8 x_4^2 + \beta_9 x_1 x_2 + \beta_{10} x_1 x_3 + \\ + \beta_{11} x_1 x_4 + \beta_{12} x_2 x_3 + \beta_{13} x_2 x_4 + \beta_{14} x_3 x_4 \end{cases} \quad (9.154)$$

onde β_i são os coeficientes da aproximação polinomial ($i=0, \dots, 14$), x_i ($i=1, \dots, 4$) são as variáveis de projeto codificadas e Y_{sr} ($Y_{sr}=[y_{1\ sr} \ y_{2\ sr} \ y_{3\ sr}]$) é a resposta do meta-modelo.

Para o ajuste de cada um dos meta-modelos, foi utilizado o método SQP (Programação Quadrática Sequencial, ver o capítulo 4) com 10000 configurações iniciais de projeto, geradas randomicamente dentro do espaço de projeto de $-10000 \leq \beta_i \leq 10000$ ($i=0, \dots, 14$). Os coeficientes do meta-modelo ajustado e os parâmetros estatísticos utilizados para a análise da qualidade da solução obtida são apresentados na Tab. 9.43.

Tabela 9.43: Coeficientes polinomiais para o problema do projeto ótimo de um robô industrial.

Coeficiente	$y_{1\ sr}$	$y_{2\ sr}$	$y_{3\ sr}$
β_0	1838,779	11416,08	3023,202
β_1	25,80000	-127,7555	74,93887
β_2	150,1722	626,9777	-19,11667
β_3	79,00558	852,6444	-56,50556
β_4	72,83334	1966,616	-33,61668
β_5	-51,57915	-4,583422	-5,502169
β_6	280,6708	131,6167	267,8979
β_7	21,87080	-6,283291	7,697942
β_8	299,5208	719,7667	273,4979
β_9	-25,10001	-37,58753	-37,68124
β_{10}	17,12497	-57,88750	-0,268739
β_{11}	-9,474989	-109,9749	-23,76873
β_{12}	159,4625	126,2749	165,4312
β_{13}	497,3625	654,5875	454,0812
β_{14}	172,6625	367,4625	162,9937
R^2	0,973316	0,990621	0,873555
R^2_{adj}	0,931808	0,976032	0,696863
F_{stat}	23,448848	67,902679	4,441239
$RMSE$	141,62452	328,28349	295,00784
$PRESS$	165,09740	458,68598	321,14454
R^2_{pred}	0,791487	0,782145	0,605898

Nesta tabela, os parâmetros estatísticos mostram que o meta-modelo utilizado representa, satisfatoriamente, a dinâmica do processo no espaço de projeto usado. Contudo deve ser destacado o “elevado” valor de $RMSE$, devido a ordem de grandeza das saídas obtidas, o que faz com que resíduo observado seja também alto. Apesar do valor do parâmetro R^2_{pred} , para a saída $y_{3\ sr}$, não ser o mais indicado, este foi considerado aceitável.

Desta forma, os modelos obtidos com o ajuste serão considerados para a otimização multi-objetivo.

A Formulação Matemática do Problema Inverso

O problema de otimização multi-objetivo consiste na obtenção das variáveis de projeto x_i ($i=1, \dots, 4$), que minimizem os funcionais $y_{i\ sr}$ ($i=1, \dots, 3$) (ESCHENAUER et al., 1990):

$$\begin{cases} \min f_1 = y_{1\ sr} \\ \min f_2 = y_{2\ sr} \\ \min f_3 = y_{3\ sr} \end{cases} \quad (9.155)$$

dado o espaço de projeto para as variáveis codificadas: $-1 \leq x_i \leq 1$ ($i=1, \dots, 4$).

Os parâmetros utilizados pelo NSGA II e MODE são apresentados na Tab. 9.44.

Tabela 9.44: Parâmetros utilizados na resolução do problema do projeto ótimo de um robô industrial.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	100	50
N	50	25
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

A curva de Pareto obtida pelo MODE, com 2525 avaliações da função objetivo, é apresentada na Fig. 9.90.

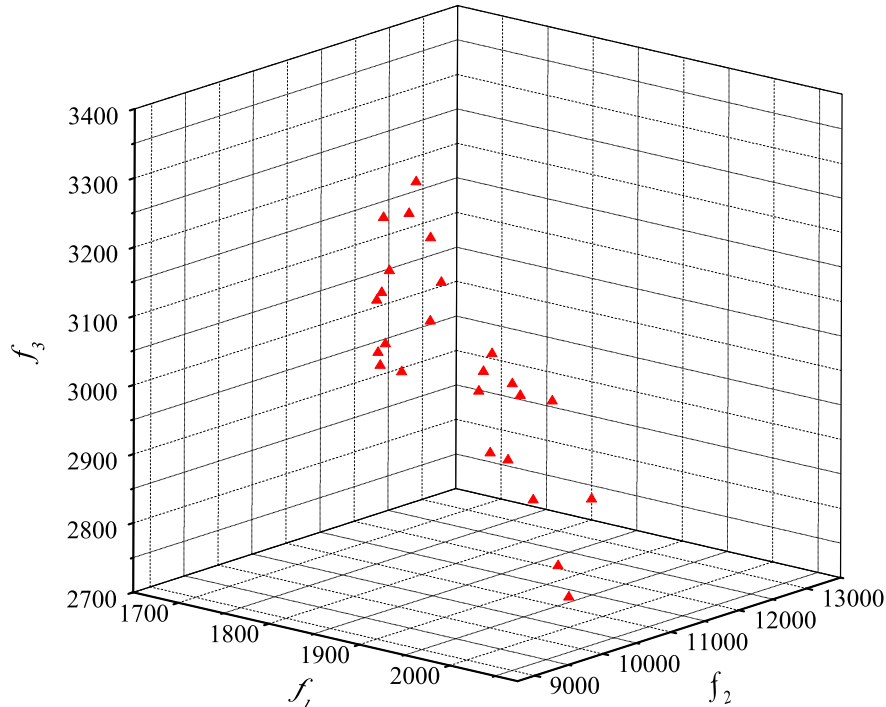


Figura 9.90: Curva de Pareto para o problema do projeto ótimo de um robô industrial usando o MODE.

Já as projeções das soluções obtidas pelo MODE e do NSGA II, com 5100 avaliações

da função objetivo, em cada um dos espaços de objetivos, são apresentadas nas Figs. 9.91 a 9.93.

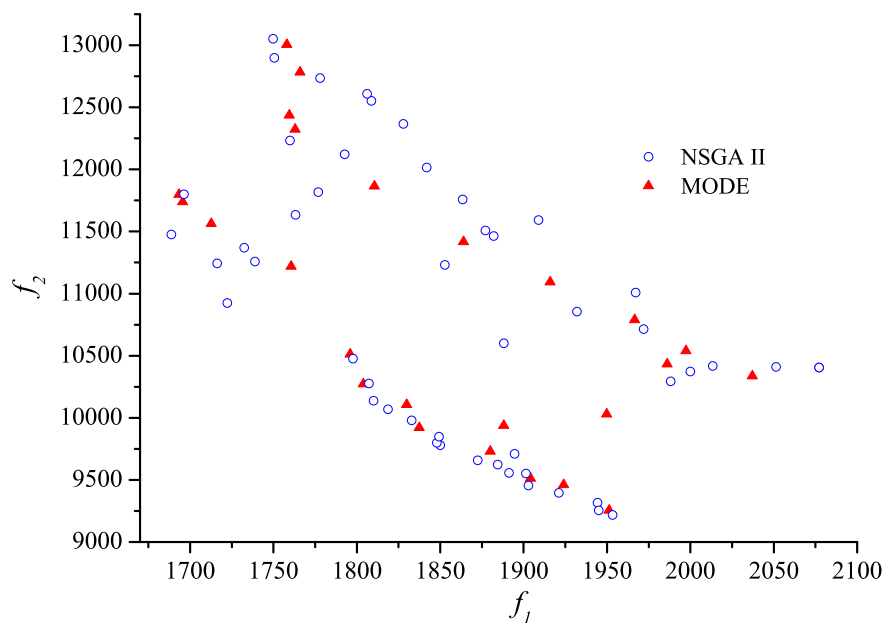


Figura 9.91: $f_1 \times f_2$ para o problema do projeto ótimo de um robô industrial.

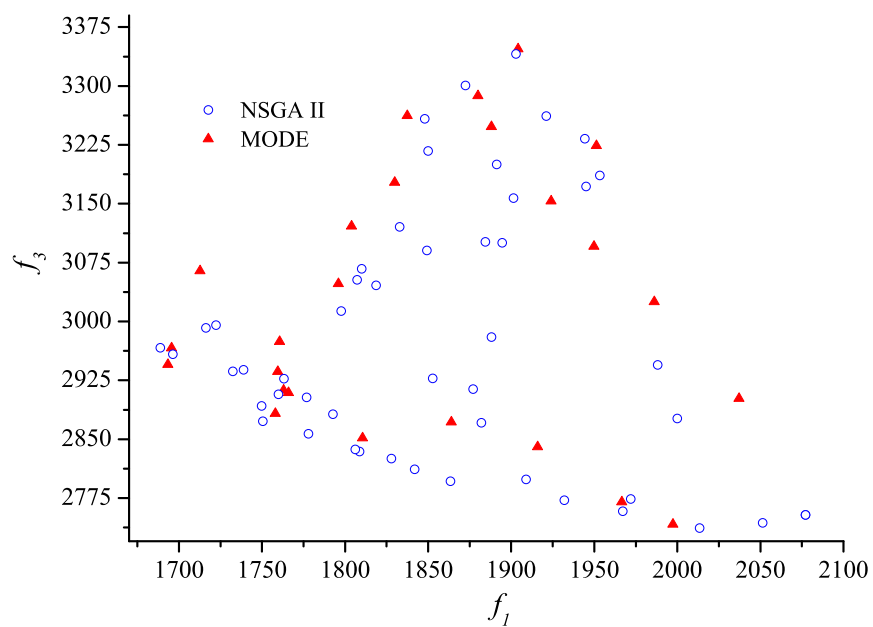


Figura 9.92: $f_1 \times f_3$ para o problema do projeto ótimo de um robô industrial.

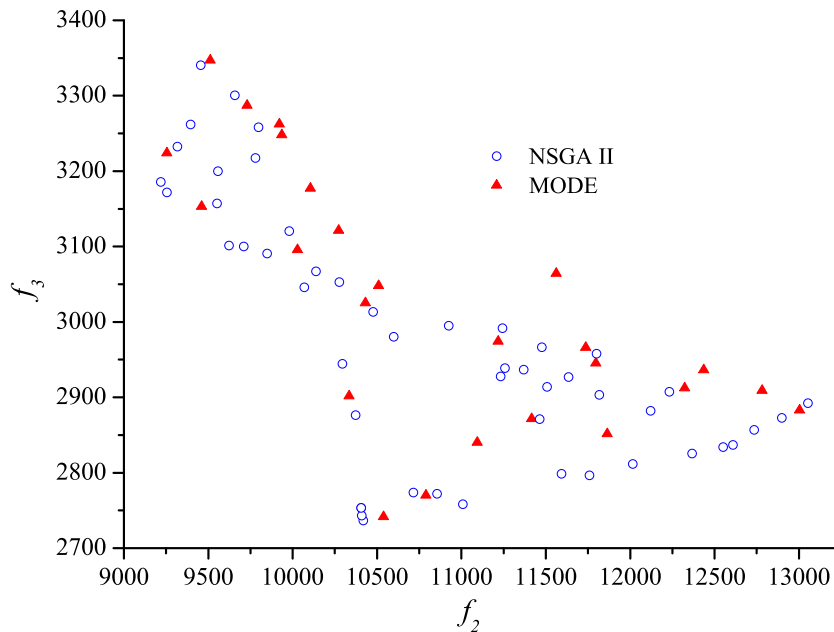


Figura 9.93: $f_2 \times f_3$ para o problema do projeto ótimo de um robô industrial.

A Tabela 9.45 apresenta alguns pontos da curva de Pareto obtida pelo MODE.

Tabela 9.45: Alguns pontos da curva de Pareto para o problema de projeto de um robô industrial.

$x_1 \times 10^3$	x_2	x_3	$x_4 \times 10^2$	$f_1 \times 10^{-3}$	$f_2 \times 10^{-4}$	$f_3 \times 10^{-3}$
-9,884251	0,273287	3,010553	3,942148	1,693341	1,179752	2,945129
-3,509709	0,329328	3,002003	3,402464	1,951270	0,925504	3,223932
1,637939	0,3267639	3,596830	3,420791	1,997313	1,053904	2,741547

9.6.2 O Problema de Interação Fluido-Estrutura

De maneira geral, pode-se dizer que toda e qualquer estrutura existente está submetida a um escoamento. Desta forma, nem sempre se pode desprezar o efeito dessa interação. Por exemplo, os pilares de sustentação de uma ponte estão sempre “sofrendo” o efeito do escoamento, através da geração de vórtices. Tais interações dão origem a vibrações na estrutura, o que poderá ocasionar sérios danos sob determinadas condições de escoamento. A continuidade desse processo de formação e transporte regular de vórtices pode ocasionar considerável carga dinâmica nos corpos (SILVA, 2008).

Devido à natureza do equacionamento que rege o fenômeno de interação fluido-estrutura, a sua solução é caracterizada por elevada complexidade computacional. A geração de

malhas para o fluido e a estrutura nem sempre é trivial e, além disso, é propensa a inserir severos erros nos balanços de massa entre seus nós elementares, podendo implicar sérias inconsistências físicas (CAMPREGHER, 2005). Tradicionalmente, outro fator que aumenta significativamente o tempo computacional é a necessidade de remalhagem.

Nos últimos anos, o desenvolvimento de metodologias mais sofisticadas para o tratamento do problema de interação fluido-estrutura aliado ao aprimoramento dos computadores, vem permitindo a simulação desse tipo de problema. Dentre essas metodologias, o acoplamento entre o Método da Fronteira Imersa e o Modelo Físico Virtual (LIMA E SILVA, 2002) se apresenta como uma alternativa viável para essa finalidade.

Com o intuito de avaliar o algoritmo MODE em um problema real de maior porte, será considerado um problema de interação fluido-estrutura com um grau de liberdade (1 GDL), modelado como um sistema massa-mola-amortecimento, e resolvido através do Método da Fronteira Imersa. Mais detalhes sobre o Método da Fronteira Imersa aplicado neste contexto pode ser obtido no trabalho de Silva (2008).

O Problema de Interação Fluido-Estrutura com um Grau de Liberdade

Seja um cilindro bidimensional de massa m e diâmetro D , preso em uma mola linear de rigidez K e fator de amortecimento c , imerso em um fluido com velocidade v_∞ , como apresentado na Fig. 9.94.

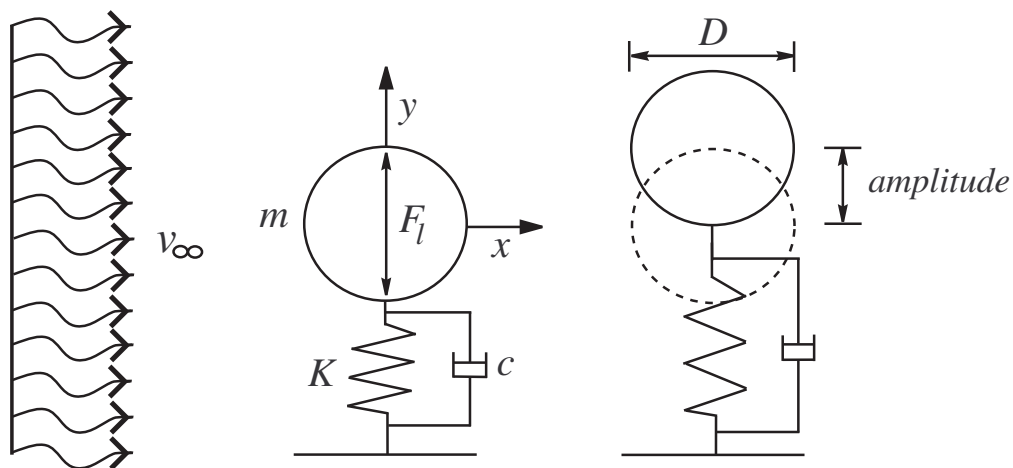


Figura 9.94: Representação esquemática do sistema massa-mola-amortecimento para 1 GDL (Reproduzido de Silva (2008)).

Caso a presença do fluido seja desconsiderada, o cilindro é livre para responder à força que atuará sobre ele. Porém, ao se considerar o fluido, o deslocamento do cilindro será limitado pela mola na direção perpendicular ao escoamento incidente e com restrições

de deslocamento na outra direção. Nesse caso, o cilindro atua como um corpo rígido, movimentando-se através do fluido, sendo restrito pelo suporte elástico.

Devido ao movimento de fricção entre a estrutura e o fluido, será produzida uma força viscosa. Esta força pode ser representada como uma força de amortecimento proporcional à velocidade do movimento da estrutura, numa abordagem simplificada.

Considerando como única força atuante a força de sustentação F_l , oriunda do fluido, a força restauradora da mola e incluindo um amortecimento linear, a equação do movimento é dada pela Eq. (9.156), obtida da segunda lei de Newton.

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} + c \frac{dy}{dt} + Ky = F_l \quad (9.156)$$

onde y é o deslocamento transversal do cilindro. A Eq. (9.156) inclui a ação de força da inércia devido à massa, da força restauradora devido à mola e da força de amortecimento viscoso, as quais somadas irão se opor à força de excitação F_l (SILVA, 2008).

A Solução do Problema Direto

No presente trabalho, o problema direto de interação fluido-estrutura foi resolvido através do acoplamento entre o Método da Fronteira Imersa e o Modelo Físico Virtual (LIMA E SILVA, 2002). As interações entre o fluido e a estrutura (o cilindro) foram consideradas através das equações de Navier-Stokes e do sistema massa-mola-amortecedor. Fisicamente sabe-se que o cilindro é deslocado de sua posição de equilíbrio devido à ação das forças exercidas pelo fluido e retorna a sua posição original devido às forças restauradoras atuantes sobre ele, introduzindo assim oscilações na estrutura no fluido (estas interações desempenham uma importante função na determinação do comportamento da estrutura e no desenvolvimento do escoamento na esteira) (SILVA, 2008).

Assim, o método utilizado se baseia nas equações de Navier-Stokes acrescidas de um termo de força, responsável por assegurar que o fluido perceba a existência da interface, realizando assim a troca de informações entre o fluido e a estrutura. Nesta abordagem, faz-se uso de duas malhas, uma euleriana, para o escoamento, e uma lagrangiana, para a interface imersa. Tais malhas são geometricamente independentes e acopladas através de um termo fonte de força, o que permite o estudo de escoamentos sobre geometrias simples, complexas e até mesmo móveis e deformáveis, sem a necessidade de remalhagem (SILVA, 2008).

O código para a resolução do problema de interação fluido-estrutura foi desenvolvido por Lima e Silva (2002) para o estudo de escoamentos incompressíveis, bidimensionais, isotérmicos e transientes sobre interfaces estacionárias e móveis. Oliveira (2006b) atualizou o código para o tratamento de escoamentos turbulentos sobre geometrias móveis e

deformáveis. Posteriormente, Silva (2008) utilizou o código desenvolvido para simulações com cilindros estacionários em diferentes configurações geométricas e diferentes razões de espaçamento entre os centros dos mesmos e para as simulações com o cilindro montado elasticamente como mostrado na Fig. 9.94.

As equações de Navier-Stokes foram discretizadas utilizando diferenças finitas centradas de segunda ordem no espaço e discretizações temporais de Adams-Bashforth e Runge-Kutta, ambas de segunda ordem. O acoplamento pressão-velocidade foi feito através do Método do Passo Fracionado (CHORIN, 1968).

O programa de simulação apresenta como respostas o coeficiente de arrasto (C_d), o coeficiente de sustentação (C_l), o deslocamento (y) e a amplitude máxima (A) do cilindro, definidos como:

$$C_d \equiv \frac{F_d}{0,5\rho v_\infty^2 D} \quad (9.157)$$

$$C_l \equiv \frac{F_l}{0,5\rho v_\infty^2 D} \quad (9.158)$$

onde F_d é a força de arrasto e ρ a densidade.

O Planejamento de Experimentos e a Simulação Numérica

No problema apresentado, as variáveis independentes relevantes são: o número de Reynolds (Re), a razão de massa (m^*) e a velocidade reduzida (V_r), definidos como:

$$Re = \frac{Dv_\infty\rho}{\mu} \quad (9.159)$$

$$m^* = \frac{m}{\rho\pi R^2 L} \quad (9.160)$$

$$V_r = \frac{v_\infty}{f_n D} \quad (9.161)$$

onde R é o raio do cilindro com diâmetro D , L é o comprimento do cilindro, μ é a viscosidade cinemática e f_n é a frequência natural do cilindro.

De forma geral, as variáveis independentes de um sistema qualquer podem apresentar ordens de grandeza muito distintas entre si. Assim, deve-se codificar as variáveis para a obtenção do planejamento de experimentos (MYERS, 1971; BOX et al., 1978). Definindo como limites para as variáveis independentes $8000 \leq Re \leq 80000$, $1 \leq m^* \leq 30$ e

$1 \leq V_r \leq 16$. As variáveis codificadas x_i ($i=1, \dots, 3$) são definidas como:

$$x_1 = \frac{Re - 44000}{28000} \quad (9.162)$$

$$x_2 = \frac{V_r - 8,5}{6} \quad (9.163)$$

$$x_3 = \frac{m^* - 15}{11} \quad (9.164)$$

Para todas as simulações foi considerada uma malha de 400×300 pontos e um domínio de $40D \times 30D$. As coordenadas do cilindro são $16,5D$ na direção x e $15D$ na direção y . Deve ser enfatizado que o cilindro é considerado rígido e é permitido o seu movimento apenas na direção transversal ao escoamento.

A Tabela 9.46 apresenta as entradas e as respectivas saídas obtidas pelas simulações via o planejamento de experimentos elaborado.

Tabela 9.46: Planejamento de experimentos e resposta obtida para o problema de interação fluido-estrutura.

Ensaio	x_1	x_2	x_3	Re	V_r	m^*	C_d	C_l	y	A
1	-1	-1	-1	16000	2,5	4	1,3724	1,0506	0,0476	0,0813
2	1	-1	-1	72000	2,5	4	1,3887	1,0650	0,0487	0,0801
3	-1	1	-1	16000	14,5	4	1,0770	0,3197	0,0616	0,3383
4	1	1	-1	72000	14,5	4	1,0510	0,3254	0,0632	0,2511
5	-1	-1	1	16000	2,5	26	1,1949	0,5281	0,0042	0,0086
6	1	-1	1	72000	2,5	26	1,1904	0,5213	0,0040	0,0080
7	-1	1	1	16000	14,5	26	1,1358	0,4694	0,0168	0,1420
8	1	1	1	72000	14,5	26	1,1310	0,4699	0,0412	0,1877
9	0	0	0	44000	8,5	15	1,0936	0,4237	0,0632	0,1566
10	$-\alpha$	0	0	9968,8	8,5	15	1,1144	0,4504	0,0550	0,1273
11	α	0	0	78031,2	8,5	15	1,0885	0,4289	0,0690	0,1557
12	0	$-\alpha$	0	44000	1,207	15	1,2032	0,5155	0,0013	0,0017
13	0	α	0	44000	15,792	15	1,0891	0,4496	0,0398	0,1888
14	0	0	$-\alpha$	44000	8,5	1,630	1,0050	0,2107	0,2871	0,5360
15	0	0	α	44000	8,5	28,369	1,1079	0,4715	0,0537	0,0836

O valor de α ($\alpha=1,2154$) apresentado nesta tabela é escolhido de maneira a deixar a matriz de variância e covariância diagonal (o denominado planejamento ortogonal), o que elimina todas as correlações entre as variáveis de projeto (MYERS, 1971; BOX et al., 1978).

O Meta-Modelo

O meta-modelo utilizado para a representação das variáveis dependentes codificadas é:

$$Y_{sr} = \begin{cases} \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_1 x_2 + \beta_5 x_1 x_3 + \beta_6 x_2 x_3 + \beta_7 x_1^2 + \dots \\ + \beta_9 x_3^2 + \beta_{10} x_1^3 + \dots + \beta_{12} x_3^3 \end{cases} \quad (9.165)$$

onde β_i são os coeficientes da aproximação polinomial, x_i ($i=1, \dots, 3$) são as variáveis de projeto codificadas e Y_{sr} ($Y_{sr}=[C_{d\ sr} \ C_{l\ sr} \ y_{sr} \ A_{sr}]$) é a resposta do meta-modelo.

Para o ajuste dos meta-modelos foi utilizado o método SQP (Programação Quadrática Seqüencial, ver o capítulo 4) com 10000 configurações iniciais de projeto, geradas randomicamente dentro do espaço de projeto de $-2000 \leq x_i \leq 2000$ ($i=1, \dots, 3$). Os coeficientes do polinômio e os parâmetros estatísticos utilizados são apresentados na Tab. 9.47.

Tabela 9.47: Coeficientes polinomiais para o problema da interação fluido-estrutura.

Coeficiente	$C_{d\ sr}$	$C_{l\ sr}$	y_{sr}	A_{sr}
β_0	1,047801	0,327348	0,101778	0,188200
β_1	0,014977	0,023877	-0,001654	-0,041333
β_2	-0,192463	-0,554798	-0,002891	0,123253
β_3	-0,180409	-0,523549	0,141269	0,223945
β_4	0,046498	0,097437	-0,035504	-0,043796
β_5	0,076759	0,126479	-0,063562	-0,073382
β_6	0,016034	0,030724	0,037879	0,065327
β_7	-0,005324	-0,000173	0,003137	-0,005063
β_8	0,000049	-0,003299	0,002687	0,016212
β_9	0,064325	0,170050	0,002663	-0,014312
β_{10}	-0,017351	-0,022151	0,005018	0,036196
β_{11}	0,098513	0,357222	0,012678	-0,033114
β_{12}	0,150785	0,427050	-0,160632	-0,272383
R^2	0,975989	0,979130	0,957977	0,982269
R_{adj}^2	0,831925	0,853916	0,705844	0,875884
F_{stat}	6,774715	7,819621	3,799495	9,233210
$RMSE$	0,044283	0,090587	0,036733	0,047428
$PRESS$	0,396302	1,700671	0,276447	0,367719
R_{pred}^2	0,825812	0,844742	0,690949	0,865951

Os parâmetros estatísticos R^2 , R_{adj}^2 e F_{stat} apresentados nesta tabela mostram que o meta-modelo usado representa, satisfatoriamente, o fenômeno estudado, dentro do espaço de projeto. Além disso, o valor de R_{pred}^2 obtido mostra uma boa capacidade de predição

de um ponto contido no espaço de projeto.

A Formulação Matemática do Problema Inverso

Com os meta-modelos validados estatisticamente, o próximo passo consiste na formulação de um problema inverso objetivando a obtenção das condições operacionais Re , V_r e m^* que minimizem a diferença entre os valores experimentais obtidos pelo modelo de simulação ($C_{d\ exp}$, $C_{l\ exp}$, y_{exp} e A_{exp}) (pontos “experimentais”) e os calculados pelos meta-modelos ($C_{d\ sr}$, $C_{l\ sr}$, y_{sr} e A_{sr}). Neste sentido, o problema multi-objetivo é definido como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min f_1 = \sum_{i=1}^n (C_{d\ exp}^i - C_{d\ sr}^i)^2 \\ \min f_2 = \sum_{i=1}^n (C_{l\ exp}^i - C_{l\ sr}^i)^2 \\ \min f_3 = \sum_{i=1}^n (y_{exp}^i - y_{sr}^i)^2 \\ \min f_4 = \sum_{i=1}^n (A_{exp}^i - A_{sr}^i)^2 \end{array} \right. \quad (9.166)$$

com o seguinte espaço de projeto para as variáveis codificadas: $-1,2857 \leq x_1 \leq 1,2857$; $-1,2500 \leq x_2 \leq 1,2500$ e $-1,2727 \leq x_3 \leq 1,3636$.

Os parâmetros utilizados pelo NSGA II e MODE são apresentados na Tab. 9.48.

Tabela 9.48: Parâmetros utilizados na resolução do problema de interação fluido-estrutura.

Parâmetro	ALGORITMO	
	NSGA II	MODE
N_{gen}	100	50
N	50	25
p_c	0,85	0,85
p_m	0,05	-
F	-	0,50
R	-	10
r	-	0,90

As soluções obtidas pelo MODE, com 2525 avaliações da função objetivo, comparadas com o NSGA II, com 5100 avaliações da função objetivo, são apresentadas nas Figs. 9.95 a 9.100.

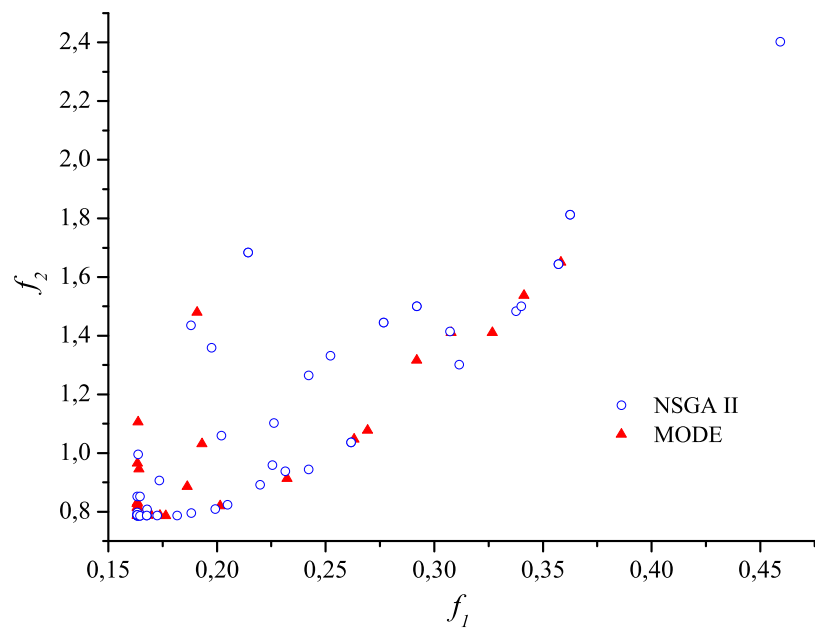


Figura 9.95: $f_1 \times f_2$ para o problema de interação fluido-estrutura.

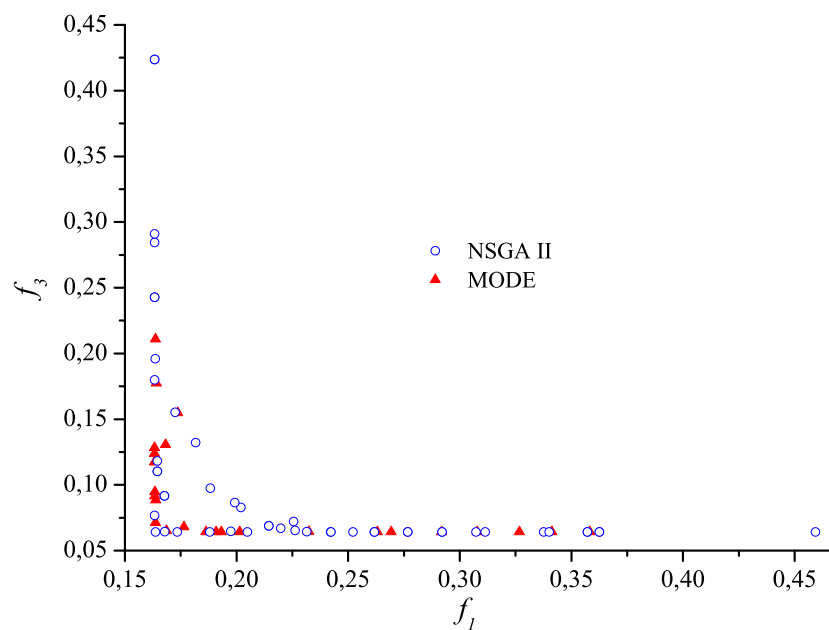


Figura 9.96: $f_1 \times f_3$ para o problema de interação fluido-estrutura.

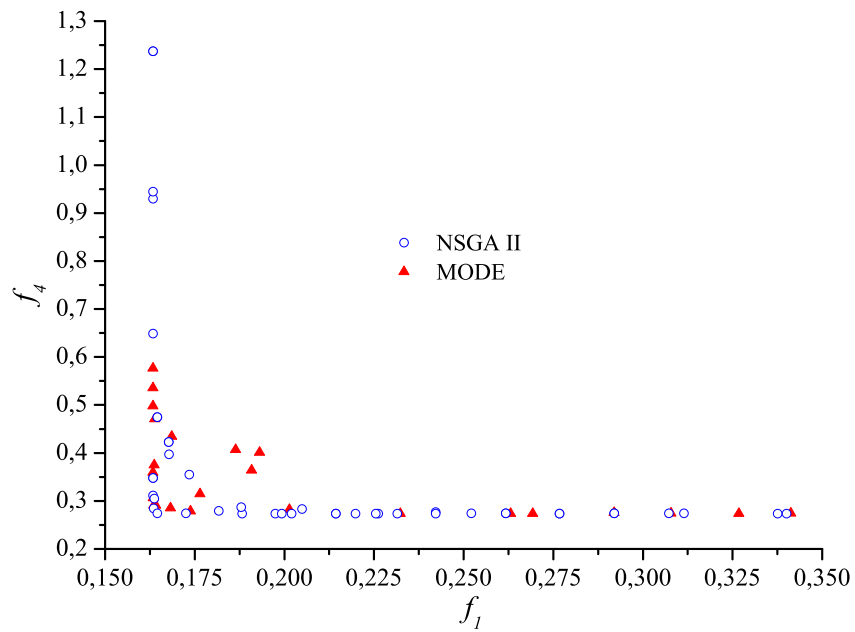


Figura 9.97: $f_1 \times f_4$ para o problema de interação fluido-estrutura.

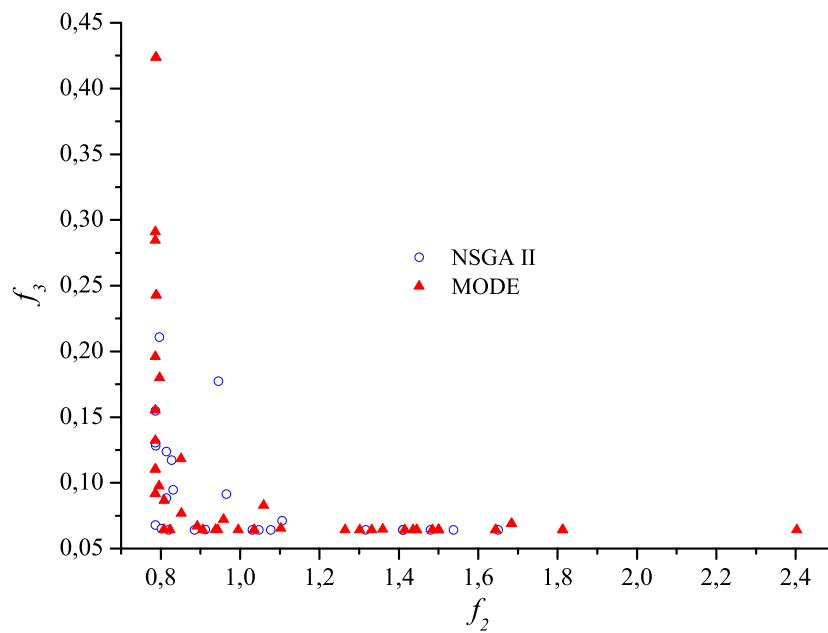


Figura 9.98: $f_2 \times f_3$ para o problema de interação fluido-estrutura.

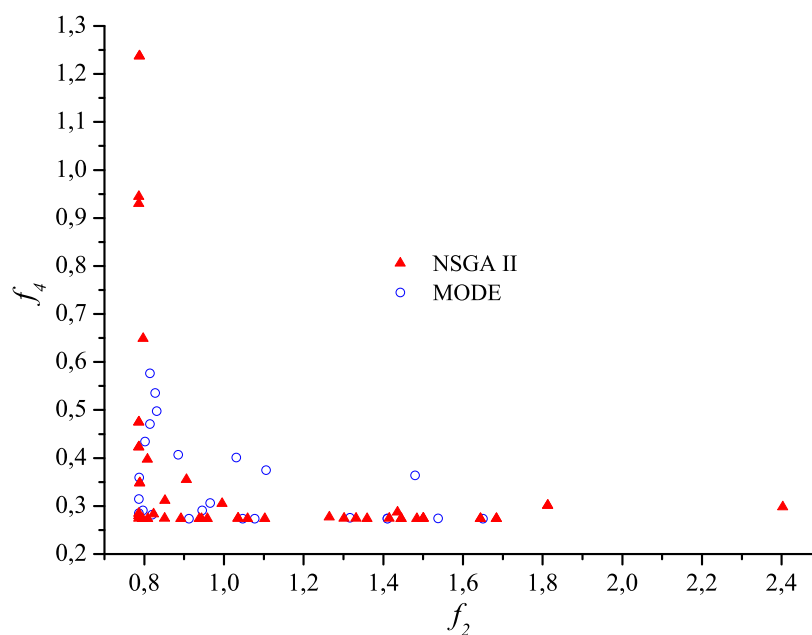


Figura 9.99: $f_2 \times f_4$ para o problema de interação fluido-estrutura.

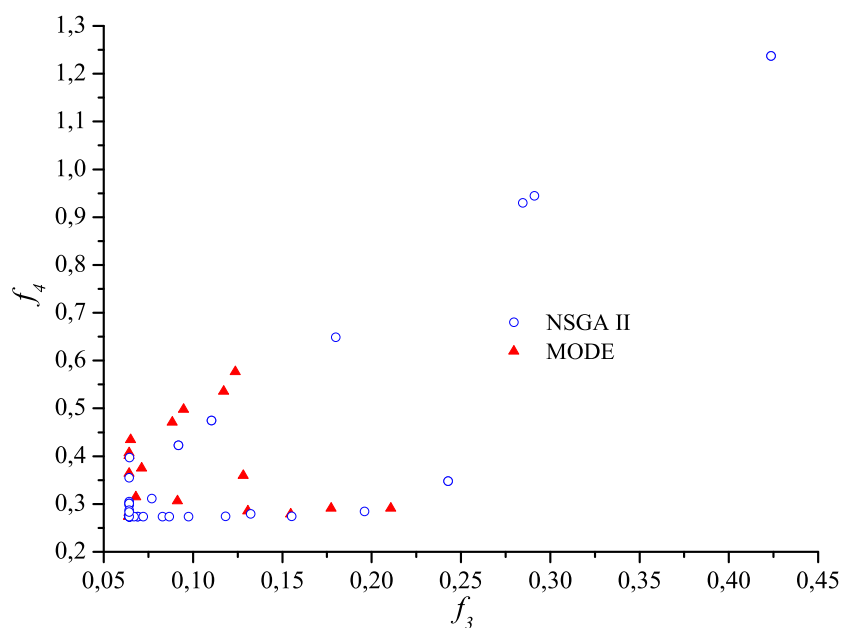


Figura 9.100: $f_3 \times f_4$ para o problema de interação fluido-estrutura.

A Tabela 9.49 apresenta alguns pontos da curva de Pareto obtida pelo MODE.

Tabela 9.49: Alguns pontos da curva de Pareto para o problema de interação fluido-estrutura.

Re	V_r	m^*	f_1	f_2	f_3	f_4
27661,75	8,547993	28,592740	0,163889	0,814247	0,088307	0,470572
25759,91	15,294567	11,160082	0,173778	0,786440	0,154749	0,278703
52218,11	9,516564	8,813770	0,201414	0,819883	0,064223	0,281749
33069,79	9,548234	10,453358	0,232343	0,912256	0,064384	0,273797

De maneira geral, a utilização de meta-modelos para a representação de sistemas reais no contexto de otimização apresentou resultados satisfatórios. É claro que a qualidade do meta-modelo é de suma importância para o sucesso do procedimento. Assim é importante (sempre que possível) testar outras aproximações, de tal forma que o melhor modelo, do ponto de vista estatístico, seja escolhido. Deve-se salientar que os resultados obtidos através de meta-modelagem não podem ser extrapolados para fora do espaço de projeto.

9.7 Conclusões Preliminares

Neste capítulo foram resolvidos vários problemas de otimização com diferentes graus de complexidade. Estes abrangem estudos de caso com restrições algébricas, algébrico-diferenciais e integro-diferenciais, casos onde são consideradas variáveis binárias, inteiras ou discretas, além das aplicações utilizando meta-modelagem. Uma avaliação dos resultados obtidos em todos os exemplos abordados mostra que a metodologia proposta para o tratamento de problemas de otimização multi-objetivos, usando como base o algoritmo de Evolução Diferencial, se configura como uma alternativa viável para essa finalidade, conforme evidenciado pela comparação com algoritmos evolutivos, como o NSGA II e com o Método da Soma Ponderada. O fato da metodologia ter demonstrado eficiência no tratamento de uma ampla gama de problemas diretos e inversos permite concluir que a técnica pode ser considerada genérica, ou seja, independe do tipo de problema abordado.

A título ilustrativo, a Tab. 9.50 apresenta o tempo de processamento gasto pelo algoritmo MODE para cada um dos estudos de caso da seção sobre problemas de projetos estruturais, considerando as versões implementadas em MATLAB® e C.

Como pode ser observado nesta tabela, a escolha do ambiente de programação por si só representa um “ganho” em termos de custo computacional na implementação de qualquer algoritmo. Neste sentido, para uma comparação minuciosa dos resultados obtidos por quaisquer algoritmos, faz-se necessário que características como plataforma de programa-

Tabela 9.50: Tempo de processamento para os problemas de projetos estruturais.

Problema	Subseção	Ambiente de programação	
		MATLAB [®]	C
Viga em Balanço	9.1.1	21,2 s	< 1 s
Duas Barras	9.1.2	36,5 s	< 1 s
Viga I	9.1.3	46,5 s	< 1 s
Viga Soldada	9.1.4	106,7 s	< 2 s

ção e desempenho do microcomputador sejam considerados antes de elaborar conclusões definitivas a respeito da eficiência do otimizador proposto.

É claro que o tempo de processamento é uma medida a ser melhorada sempre em qualquer procedimento numérico de engenharia. Contudo, o número de avaliações da função objetivo é, sem sombra de dúvida, uma medida muito mais importante e definitiva na comparação entre quaisquer abordagens, já que esta não depende da plataforma de programação ou do desempenho do microcomputador utilizado. Evidentemente, um número menor de avaliações da função objetivo significa sempre redução do custo computacional e, conseqüentemente, do tempo de processamento.

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

 esforço investido hoje em dia no desenvolvimento de estratégias evolutivas se deve à capacidade que estas possuem no tratamento de problemas reais, à habilidade de escapar de soluções ótimas locais e ao aprimoramento de ferramentas computacionais. Tal processo torna possível o manuseio de problemas cada vez mais próximos da realidade. Neste sentido, são apresentadas neste capítulo as conclusões deste trabalho, assim como sugestões para trabalhos futuros, à luz da perspectiva de novos avanços nesta área de pesquisa.

10.1 Conclusões

O algoritmo de Evolução Diferencial surge como uma boa alternativa para superar os algoritmos genéticos clássicos, em termos do tempo de processamento e de simplicidade conceitual (STORN; PRICE, 1995; BABU et al., 2005; ANGIRA; BABU, 2005). Dessa forma, foi desenvolvido nesta tese o programa MODE (*Multi-objective Optimization Differential Evolution*), que é fundamentado na extensão do algoritmo de Evolução Diferencial, proposto por Storn e Price (1995) e inicialmente formulado para o tratamento de problemas com um único objetivo, para problemas com múltiplos objetivos. Tal extensão consiste, principalmente, do acoplamento de dois novos operadores ao algoritmo de Evolução Diferencial original: o ordenamento das curvas de Pareto por meio de *rank* e a exploração das vizinhanças de candidatos em potencial.

Com relação ao mecanismo de exploração das vizinhanças, foi constatado que, apesar do aumento do número de avaliações da função objetivo que este proporciona, e das vizinhanças dependerem apenas do número de pseudo-curvas, consegue-se melhorar as métricas utilizadas para comparação das soluções obtidas. Já o mecanismo de ordena-

mento das soluções por *rank*, assim como destacado na literatura (DEB, 2001), se mostrou de extrema importância para garantir a diversidade das soluções na população.

Um aspecto interessante a ser discutido no algoritmo proposto é o aumento da população durante o processo evolutivo, tendo por consequência o aumento do número de avaliações da função objetivo. Em uma única geração tem-se: N indivíduos da população atual e N candidatos em potencial gerados, constituindo assim uma população com $2N$ indivíduos, dentre os quais apenas N indivíduos não-dominados são considerados para a geração de N vizinhos. Desse modo, será necessária a avaliação desses N indivíduos com relação aos objetivos. Contudo, deve-se ressaltar que em qualquer estratégia evolutiva tal avaliação é necessária para se definir novas direções de busca. Todavia, essa desvantagem pode ser amenizada quando se utiliza um menor número de indivíduos na população.

Uma questão que surge diz respeito à utilização de um número maior de indivíduos na população em um outro algoritmo multi-objetivo, como por exemplo o NSGA II, ao invés de utilizar o MODE, que faz uso de geração de vizinhos. Em primeiro lugar, deve ficar claro que são duas abordagens totalmente distintas. No caso do MODE, são gerados candidatos nas vizinhanças das soluções que participarão do processo de refinamento ou busca local das soluções existentes na geração atual. Já o aumento do número de indivíduos em um outro algoritmo evolutivo, por exemplo no NSGA II, implica simplesmente no aumento de candidatos potenciais dentro do espaço de busca das variáveis de projeto, o que não conduz a um refinamento das soluções não-dominadas na geração corrente. A incorporação da estratégia de refinamento em qualquer algoritmo implica naturalmente em um aumento no tempo de processamento, pois como mencionado no Capítulo 8, mais comparações terão de ser realizadas.

Na literatura, o parâmetro mais utilizado para confrontar os resultados obtidos pelas metodologias evolutivas para o tratamento dos problemas de otimização com um ou mais objetivos é o número de gerações, apesar de existirem outras alternativas como visto na seção 7.2.9. O tempo de execução do algoritmo, na maioria dos trabalhos, infelizmente nem é relatado. Isto induz a pensar em um tempo de processamento elevado, apesar deste estar necessariamente relacionado ao *software* empregado e às características do computador utilizado nos cálculos. Sem dúvida, o menor tempo de processamento se torna uma meta a ser sempre melhorada em qualquer algoritmo, já que os Métodos Não Determinísticos exigem um número elevado de avaliações da função objetivo. Neste contexto, o critério utilizado para a comparação entre o MODE e outros algoritmos foi o número de gerações e o número de avaliações da função objetivo. Neste sentido, o procedimento numérico proposto nesta tese consegue reduzir o número de gerações, com relação aos relatados na literatura, sem aumentar o número de avaliações da função objetivo em muitos casos analisados. Além disso, observa-se que não houve perda na qualidade da solução

aproximada, com relação às métricas empregadas, quando comparado com os resultados obtidos por algoritmos clássicos.

Com relação aos parâmetros utilizados no algoritmo MODE, a seção 8.3 mostrou que um número elevado de indivíduos ou de gerações não necessariamente produz melhorias nas métricas. De acordo com a experiência adquirida com a resolução dos estudos de caso, aconselha-se, para um novo estudo de caso, o uso de uma população com 20 indivíduos, 100 gerações, faixa de 0,1 a 1,0 para a taxa de redução, probabilidade de cruzamento maior que 0,3, taxa de perturbação conforme aqueles recomendados por Storn e Price (1995) ($0,2 \leq F \leq 2,0$) e número de pseudo-curvas igual a 10, como sugerido por Hu et al. (2006). Deve ser destacado que o número de pseudo-curvas e outras estratégias para a geração de candidatos em potencial não foram analisados neste trabalho. Neste sentido, na resolução dos estudos de caso de problemas de engenharia, foi considerado o mesmo conjunto de parâmetros no algoritmo MODE e no NSGA II, exceto para o número de indivíduos na população e do número de gerações, que variaram caso a caso. Desta forma buscou-se, com esse conjunto de parâmetros, resolver uma ampla gama de problemas com características distintas. Além disso, a função penalidade utilizada para o tratamento de restrições de desigualdade se mostrou adequada já que, conforme destacado por Castro (2001), em poucas execuções o(s) valor(es) do(s) fator(es) de penalidade pode(m) ser definido(s).

Cabe ressaltar que, individualmente, os operadores utilizados na elaboração do algoritmo desenvolvido não foram propostos neste trabalho. Contudo, o acoplamento de todas estas ferramentas de busca constitui um algoritmo de otimização que pode ser considerado novo, pelo menos dentre daqueles que foram investigados na literatura. Além disso, a utilização da metodologia estrutural, isto é o uso de Evolução Diferencial, representa uma contribuição no que diz respeito ao desenvolvimento de algoritmos multi-objetivos, já que, em termos de dissertações e teses, um número modesto de trabalhos, em comparação com os Algoritmos Genéticos, por exemplo, têm sido propostos.

10.1.1 Contribuições

A partir do presente estudo, podem-se citar as principais contribuições:

- ☞ Organização do material disponível na literatura para o tratamento de problemas de otimização multi-objetivos, dando ênfase ao tipo de metodologia de resolução, ao tratamento de restrições e às mais recentes inovações dos algoritmos apresentados na literatura;

- ☞ Desenvolvimento de um algoritmo multi-objetivo baseado na técnica de Evolução Diferencial, no qual é possível acompanhar todo o processo evolutivo, a cada geração, a partir dos relatórios que são gerados;
- ☞ Apresentação uma ampla gama de problemas matemáticos clássicos com solução analítica e de uma série de problemas de engenharia, visando assim comprovar a potencialidade, eficácia e robustez do algoritmo proposto e formar um banco de dados para futuras comparações com outros algoritmos.

10.1.2 Resultados

Conforme comentado acima, os resultados apresentados neste trabalho foram obtidos a partir da utilização de uma ampla gama de problemas clássicos de matemática e de engenharia, formando um banco de dados visando a validação da metodologia proposta nesta tese.

Os problemas matemáticos apresentados são formados por uma série de funções clássicas, dentre as quais podemos destacar as funções ZDT, que possuem solução analítica e são extensivamente utilizados para a validação de algoritmos evolutivos propostos na literatura. Tais problemas foram escolhidos de forma a representar as principais dificuldades encontradas nos problemas de otimização: convexidade, concavidade, presença de inúmeros ótimos locais, espaço de busca descontínuo nas variáveis de projeto e no espaço de objetivos, espaço de busca tendencioso. Outras funções matemáticas com mais de dois objetivos também foram utilizadas como estudo de caso, com destaque para a função 5OBJ com 5 objetivos. Também foram abordados problemas matemáticos com restrições de caminho através da incorporação de um método de penalização.

De uma forma geral, os resultados obtidos para essas funções matemáticas mostram que, para os parâmetros considerados no processo evolutivo, qualitativamente as soluções são, no mínimo, equivalentes às encontradas na literatura com relação ao ótimo de Pareto. Observa-se também que, quantitativamente, as métricas utilizadas estão na mesma ordem de grandeza das obtidas por Zitzler et al. (2000), contudo necessitando de um número menor de gerações.

No Capítulo 8 foi realizada a análise de sensibilidade da incorporação do operador de exploração de vizinhanças e de alguns dos parâmetros do algoritmo MODE. Foram utilizadas para essa finalidade as funções ZDT1, ZDT2 e ZDT3. A análise dos resultados mostra primeiramente que a incorporação do operador para a exploração das vizinhanças melhorou os valores das métricas de desempenho com relação ao algoritmo NSGA II e também com relação ao algoritmo de Evolução Diferencial sem o acoplamento desse

operador. Em segundo lugar, com relação à análise de sensibilidade de parâmetros do algoritmo MODE, para os casos estudados, este se mostrou eficaz com relação à variação dos parâmetros considerados nesta análise, como destacado na seção 8.3.

No Capítulo 9, o algoritmo MODE foi aplicado em problemas de engenharia de diferentes níveis de dificuldade. Inicialmente foram estudados quatro casos clássicos de projeto estrutural, constituídos apenas por restrições algébricas. Estes apresentaram bons resultados com relação a curva de Pareto obtida na literatura.

A próxima classe de problemas que foram abordados são os denominados problemas inversos ou problemas de estimação de parâmetros. Neste sentido, foram estudados quatro casos: estimação de coeficientes de transferência de calor em leito deslizante sujeito a um sistema de equações diferenciais de valor no contorno; estimação de parâmetros cinéticos no processo de fermentação batelada, com a resolução de um sistema de equações algébrico-diferenciais; estimação de parâmetros radiativos e térmicos, com a resolução de um sistema de equações composto por uma equação diferencial na temperatura e uma equação integro-diferencial para a intensidade da radiação, e a estimação de parâmetros cinéticos em um secador rotatório, sujeito a um sistema de equações de valor no contorno algébrico-diferenciais. Em todos os estudos de caso foi possível observar a natureza conflitante entre os objetivos ao se analisar os resultados obtidos. Isso mostra que não basta atender satisfatoriamente apenas um dos objetivos.

Em seguida foram tratados os Problemas de Controle Ótimo. Do ponto de vista matemático, estes constituem estudos de caso desafiadores por demandarem a obtenção do perfil da variável de controle que minimiza ou maximiza um determinado índice de desempenho. As dificuldades associadas a esses problemas se devem ao fato da ativação e/ou desativação de restrições de desigualdade durante o processo de integração ou pela presença de arcos singulares oriundos de processos onde a variável de controle é linear no sistema algébrico-diferencial e no índice de desempenho (LOBATO, 2004). Tais características causam no sistema a variação do índice diferencial, isto é, a necessidade de um passo de integração muito pequeno, o que impossibilita a resolução do sistema algébrico-diferencial (BRENAN et al., 1996). Neste sentido, foram estudados três casos que reúnem as dificuldades citadas anteriormente. No primeiro problema, foi abordado um reator de polimerização de proteínas com a presença de duas variáveis de controle, que foram definidas constantes por elementos de integração, fazendo com que o índice diferencial nesse caso sempre fosse igual a 1. No segundo caso, foi estudado um problema clássico de biotecnologia, o processo de fermentação batelada alimentada, que naturalmente é um problema de índice flutuante devido à natureza linear da variável de controle. A resolução deste consiste na obtenção na denominada função identificadora de fases (LOBATO, 2004), que faz com que o problema seja redefinido por fases, todas de índice 1. O último

caso apresentado consiste na redefinição do problema clássico de Jacobson & Lele (JACOBSON; LELE, 1969). Este inicialmente foi formulado como um problema com um único objetivo com flutuação do índice devido à presença de uma restrição de desigualdade em função apenas das variáveis de estado. Cabe ressaltar que a solução desse problema através do uso da Abordagem Indireta (BRYSON; HO, 1975; LOBATO, 2004) é extremamente difícil, devido às descontinuidades nas variáveis adjuntas destacadas por Lobato et al. (2008a). Neste trabalho, a função objetivo de Jacobson & Lele original foi reescrita, além da definição de um novo objetivo que garante o atendimento da restrição de desigualdade durante a ativação desta restrição. Em cada uma das fases foram propostas funções para a aproximação do estado e da variável de controle a partir do trabalho de Lobato et al. (2008a).

Com o intuito de testar o MODE em problemas com variáveis inteiras e discretas foram estudados três casos típicos de engenharia, utilizando para essa finalidade, a metodologia apresentada na seção 7.2.10. Apesar de sua simplicidade, os resultados obtidos para os estudos de caso considerados foram muito interessantes. Deve-se ressaltar que um estudo mais detalhado a respeito dessa sistemática deve ser realizado antes de qualquer conclusão definitiva.

Pode-se também destacar as soluções obtidas pelo MODE no projeto ótimo de uma coluna de destilação. Neste estudo foram consideradas variáveis de projeto contínuas e uma variável de projeto discreta que fornece a localização do prato ou estágio em que a coluna deverá ser alimentada para a maximização e minimização da fração mássica da mistura binária no topo e na base da coluna, respectivamente. Também foi estudada a otimização de um reator não-adiabático sujeito a restrições de balanço de massa, energia e pressão, no qual objetivou-se a maximização da conversão de dióxido em trióxido de enxofre e a minimização do calor total trocado entre o reator e o meio ambiente em uma das etapas do processo clássico de produção de ácido sulfúrico. Neste estudo foi definida uma função lucro simplificada para avaliar qual configuração, dentre as soluções da curva de Pareto, deve ser implementada na prática. O último caso dessa classe de problemas consiste na otimização de um reator PFR onde acontecem reações em paralelo com formação de um produto indesejável. As funções objetivo se associaram à maximização do reagente e à maximização da seletividade global, buscado-se minimizar a formação do produto indesejável.

Os últimos dois estudos de caso desta tese ilustram a aplicação do algoritmo MODE em problemas de maior complexidade em termos de tempo de processamento computacional, a saber um robô industrial e um problema de interação fluido-estrutura com um grau de liberdade. Em ambos os casos, foi necessário utilizar técnicas de meta-modelagem para a construção de um modelo reduzido em decorrência da dificuldade de análise do

problema. Para isso, foram elaborados planejamentos experimentais com a conseqüente simulação para a obtenção das saídas. Os meta-modelos obtidos em cada um dos estudos de caso foram considerados satisfatórios para a finalidade de aplicação neste trabalho. Contudo, faz-se necessário um estudo mais abrangente, com relação à escolha do meta-modelo, assim como sugerido por Viana (2008).

De maneira geral, pode-se dizer que o desempenho do algoritmo MODE, em todos os casos estudados, foi satisfatório quando comparado com pelo menos um algoritmo evolutivo em várias aplicações. Neste sentido, pode-se dizer que o MODE se mostrou uma ferramenta robusta para o tratamento de problemas de otimização multi-objetivo sujeito a equações algébricas, algébrico-diferenciais e integro-diferenciais.

10.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

A seqüência deste trabalho consiste dos seguintes passos:

- ✎ Desenvolver uma interface gráfica, permitindo uma interação amigável entre o usuário e o algoritmo MODE;
- ✎ Aplicar o algoritmo desenvolvido em problemas realísticos de engenharia de grande dimensão e complexidade;
- ✎ Estudar a influência dos operadores para geração de candidatos em potencial e a exploração de estratégias para a atualização dos parâmetros evolutivos como metodologias baseadas em diversidade da população e modelos caóticos de busca;
- ✎ Explorar outros mecanismos para a geração das vizinhanças;
- ✎ Analisar a influência de estratégias para a atualização dos parâmetros do algoritmo proposto na qualidade da curva de Pareto obtida;
- ✎ Utilizar dados experimentais reais para a geração dos meta-modelos, verificando em seguida a eficiência dos códigos utilizados na solução dos problemas inversos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AARTS, E. H.; KORST, J. H. *Simulated Annealing and Boltzmann Machines: A Stochastic Approach to Combinatorial Optimization and Neural Computing*. First edition. UK: John Wiley & Sons, 1989.
- ABBASS, H. A.; SARKER, R.; NEWTON, C. Pde: A pareto-frontier differential evolution approach for multi-objective optimization problems. In: *Proceedings of the 2001 Congress on Evolutionary Computational*. USA: IEEE, 2001.
- ALATAS, B.; AKIN, E.; OZER, A. B. Chaos embedded particle swarm optimization algorithms. *Chaos, Solutions and Fractals*, article in press. 2008.
- ALI, M. M.; TORN, A. Population set-based global optimization algorithms: Some modifications and numerical studies. *Computers and Operations Research*, v. 31, p. 1703–1725, 2004.
- ALVES, M. J.; CLIMACO, J. An interactive method for multiobjective problems using simulated annealing and tabu search. *Journal of Heuristics*, v. 6, p. 385–403, 2000.
- ANDERSON, J. *Multi-objective Optimization in Engineering Design*. Tese (Doutorado) — Institute of Technology Linkopings Universitet, 2001.
- ANGIRA, R.; BABU, B. V. Non-dominated sorting differential evolution (nsde): An extension of differential evolution for multiobjective optimization. In: *Proceedings of the 2nd Indian International Conference on Artificial Intelligence*. India: IICAI-05, 2005.
- ANGIRA, R.; SANTOSH, A. Optimization of dynamic systems: A trigonometric differential evolution approach. *Computers and Chemical Engineering*, v. 31, p. 1055–1063, 2007.
- ANHOR, K. P.; AYDALLIS, J.; GUNSH, G. H.; LAMONT, G. B. Extending the computer defense immune system: Network intrusion detection, with a multiobjective evolutionary programming approach. In: *First International Conference on Artificial Immune Systems (ICARIS 2002)*. University of Kent at Canterbury, UK, September 2002: Timmis J. and Bentley P. J. (eds), 2002.

- ARRUDA, E. B. *Comparação do Desempenho do Secador Rotofluidizado com o Secador Rotatório Convencional: Secagem de Fertilizantes*. Tese (Doutorado) — Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, 2008.
- ARRUDA, E. B.; LOBATO, F. S.; BARROZO, M. A. S.; STEFFEN JR, V. Estimation of drying parameters in rotary dryers using differential evolution. In: *6th International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice - ICIPE*. Dourdan - França: Inverse Problems, 2008.
- ATHAN, T. W.; PAPALAMBROS, P. Y. A note on weighted criteria methods for compromise solutions in multi-objective optimization. *Eng. Optimization*, v. 27, n. 3, p. 155–176, 1996.
- BABU, B. V.; ANBARASU, B. Multi-objective differential evolution (mode): An evolutionary algorithm for multi-objective optimization problems (moops). In: *Proceedings of International Symposium and 58th Annual Session of IChE*. Indian: CHEMCON-2005, 2005.
- BABU, B. V.; ANGIRA, R. Optimization of thermal cracker operation using differential evolution. In: *Proceedings of International Symposium and 54th Annual Session of IChE*. Indian: CHEMCON-2001, 2001.
- BABU, B. V.; CHAKOLE, P. G.; MUBEEN, J. H. S. Multiobjective differential evolution (mode) for optimization of adiabatic styrene reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 60, p. 4822–4837, 2005.
- BALTES, M.; SCHNEIDER, R.; STURM, C.; REUSS, M. Optimal experimental design for parameter estimation in unstructured growth models. *Biotechnology Programming*, v. 10, p. 480–491, 1994.
- BANSAL, V.; SAKIZLIS, V.; ROSS, R.; PERKINS, J. D.; PISTIKOPOULOS, E. N. New algorithms for mixed-integer dynamic optimization. *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, p. 647–668, 2003.
- BARTON, R. R. Metamodels for simulation input-output relations. In: *Proceedings of the Winter Simulation Conference*. New York: J. J. Swain, D. Goldsman, R. C. Crain and J. R. Wilson (eds), 1992.
- BAYKASOGLU, A.; OWEN, S.; GINDY, N. A tabu search based approach to find the pareto optimal set in multiple objective optimisation. *Journal of Engineering Optimization*, v. 31, p. 731–748, 1999.
- BIEGLER, T. Solution of dynamic optimization problems by successive quadratic programming and orthogonal collocation. *Computers and Chemical Engineering*, v. 8, p. 243–248, 1984.
- BINH, T. T.; KORN, U. Moes: A multi-objective evolution strategy for constrained optimization problems. In: *Proceedings of the Third International Conference on Genetic Algorithms*. USA: CH, 1997.
- BONISSONE, P. P.; CHEN, Y. T.; GOEBEL, K.; KHEDKAR, P. S. Hybrid soft computing systems: Industrial and commercial applications. *Proceedings of the IEEE*, v. 87, n. 9, p. 122–128, 1999.

- BOX, G. E. P.; HUNTER, W. G.; HUNTER, J. S. *Statistics for Experiments - an Introduction to Design, Data Analysis and Model Building*. First edition. New York: John Wiley & Sons, 1978.
- BOYCHUK, L. M.; OVCHINNIKOV, V. O. Principal methods of solution multicriterial optimization problems. *Soviet Automatic Control*, v. 6, p. 1–4, 1973.
- BRAGA, C. G. *O Uso de Algoritmos Genéticos para Aplicação em Problemas de Otimização de Sistemas Mecânicos*. Dissertação (Mestrado) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, 1998.
- BRENAN, K. E.; CAMPBELL, S. L.; PETZOLD, L. R. *Numerical Solution of Initial Value Problems in Differential Algebraic Equations*. First edition. SIAM Philadelphia: Classics in Applied Mathematics, 1996.
- BREST, J.; GREIMER, S.; BOSKOVI, B.; MERNIK, B. M.; ZUMER, V. Self-adapting control parameters in differential evolution: A comparative study on numerical benchmark problems. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, v. 2, p. 82–102, 2006.
- BRIDGMAN, P. W. *Dimensional Analysis*. First edition. New Haven: Yale University Press, 1922.
- BRYSON, A. E.; HO, Y. C. *Applied Optimal Control*. First edition. Washington: Hemisphere Publishing, 1975.
- BUTKEWITSCH, S. *Otimização de Sistemas Mecânicos: Ferramenta de Engenharia de Conceção*. Dissertação (Mestrado) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG., 1998.
- CAMPREGHER, R. *Modelagem Matemática Tridimensional para Problemas de Interação Fluido-Estrutura*. Tese (Doutorado) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG., 2005.
- CARVALHO, D. R.; FREITAS, A. A. Um algoritmo imunológico para descobrir regras para pequenos disjuntos em data mining. In: *Anais do II Congresso Brasileiro de Computação*. Itajaí, SC, Brasil: Departamento de Computação, 2002.
- CASTRO, L. N.; TIMMIS, J. *An Introduction to Artificial Immune Systems: A New Computational Intelligence Paradigm*. First edition. New York: Springer-Verlag, 2002.
- CASTRO, R. E. *Otimização de Estruturas com Multi-Objetivos via Algoritmos Genéticos*. Tese (Doutorado) — Departamento de Engenharia Civil - COPPE/UFRJ, 2001.
- CAZZADOR, L.; LUBENOVA, V. Nonlinear estimation of specific growth rate for aerobic fermentation processes. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 47, p. 626–634, 1995.
- CHALHOUB, E. S.; CAMPOS VELHO, H. F.; SILVA NETO, A. J. A comparison of the one-dimensional radiative transfer problem solutions obtained with the monte carlo method and three variations of the discrete ordinates method. In: *Proceedings in 19th International Congress of Mechanical Engineering*. 5 a 9 de Novembro, Brasília - DF: ABMC, 2007.

- CHARNES, A.; COOPER, W. W. *Management Models and Industrial Applications of Linear Programming*. First edition. Chapter 6, Appendix B, Basic Existence Theorems and Goal Programming: John Wiley & Sons, 1961.
- CHORIN, A. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematical Computing*, v. 22, p. 745–762, 1968.
- COELHO, L. S. *Fundamentos, Potencialidades e Aplicações de Algoritmos Evolutivos*. Segunda edição. São Carlos - SP: Notas em Matemática Aplicada, 2003.
- COELHO, L. S.; MARIANI, V. C. Combining of chaotic differential evolution and quadratic programming for economic dispatch optimization with valve-point effect. *IEEE Transactions on Power Systems*, v. 21, n. 2, p. 989–996, 2006.
- COELHO, L. S.; MARIANI, V. C. Use of chaotic sequence in a biologically inspired algorithm for engineering design optimization. *Expert Systems with Applications*, article in press. 2008.
- COELHO, R. F. *Multi-Criteria Optimization with Expert Rules for Mechanical Design*. Tese (Doutorado) — Université Libre de Bruxelles, Faculté des Sciences Appliquées, 2004.
- CORANA, A.; MARCHESI, M.; MARTINI, C.; RIDELLA, S. Minimizing multimodal functions of continuous variables with the simulated annealing algorithm. *ACM Transactions on Mathematical Software*, v. 13, p. 262–280, 1987.
- CORNE, D. W.; JERRAM, N. R.; KNOWLES, J. D.; OATES, M. J. Pesa-ii: Region-based selection in evolutionary multiobjective optimization. In: *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference, Morgan Kaufmann Publishers*. San Francisco - California: L. Spector, E. D. Goodman, A. Wu, W. Langdon, H.-M. Voigt, M. Gen, S. Sen, M. Dorigo, S. Pezeshk, M. H. Garzon e E. Burke (eds), 2001.
- CORNE, D. W.; KNOWLES, J. D.; OATES, M. J. The pareto envelope-based selection algorithm for multiobjective optimization. In: *Proceedings of the Parallel Problem Solving from Nature VI Conference, Springer. Lecture Notes in Computer Science*. Paris - France: M. Schoenauer, K. Deb, G. Rudolph, X. Yao, E. Lutton, J. J. Merelo e H.-P. Schwefel (eds), 2000.
- CORTES, C. N.; COELLO, C. C. A. Multiobjective optimization using ideas from the clonal selection principle. In: *Proceedings, Lecture Notes in Computer Science 2723. Springer Verlag, 158-170*. Genetic and Evolutionary Computation - GECCO 2003: Cantu-Paz E. Foster J. A., Deb K., David, L. Rajkumar R. (eds), 2003.
- DAS, I.; DENNIS, J. E. A closer look at drawbacks of minimizing weighted sums of objectives for pareto set generation in multicriteria optimization problems. *Structural Optimization*, v. 14, n. 4, p. 63–69, 1997.
- DEB, K. *Multi-Objective Genetic Algorithms: Problems Difficulties and Construction of Test Functions*. First edition. New York: John Wiley & Sons, 1998.
- DEB, K. An efficient constraint handling method for genetic algorithms. *Computational Methods Applications Mechanical Engineering*, v. 18, p. 311–318, 2000.

- DEB, K. *Multi-Objective Optimization using Evolutionary Algorithms*. First edition. New York: John Wiley & Sons, 2001.
- DEB, K.; AGRAWAL, S.; PRATAB, A.; MEYARIVAN, T. *A Fast Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm for Multi-Objective Optimization: NSGA-II*. Kanpur - India, 2000.
- DEB, K.; GOEL, T. Controlled elitist non-dominated sorting genetic algorithms for better convergence. In: *Proceedings of the First International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization*. USA: pp 67-81, 2001.
- DIAS, J. S.; ZIMMERMANN, A. C.; BORGES, P. S.; BARRETO, J. M. Aprendizado e evolução: de lamarck a baldwin. In: *V Simpósio Brasileiro de Redes Neurais*. Belo Horizonte: Departamento de Computação, 1998.
- DOERNER, K.; GUTJAHR, W. J.; HARTL, R. F.; STRAUSS, C.; STUMMER, C. Ant colony optimization in multiobjective portfolio. In: *Proceedings of the 4th Metaheuristics International Conference, July 16-20, 2001, 243-248*. USA: Souza J. P. (ed), MIC2001, 2001.
- DOERNER, K.; GUTJAHR, W. J.; HARTL, R. F.; STRAUSS, C.; STUMMER, C. Pareto ant colony optimization: A metaheuristic approach to multiobjective portfolio selection. *Annals of Operations Research*, v. 8, p. 99-112, 2004.
- DORIGO, M.; MANIEZZO, V.; COLORNI, A. *Positive Feedback as a Search Strategy*. Politecnico di Milano, Italy., 1991.
- DORIGO, M.; STUTZLE, T. *Ant Colony Optimization*. First edition. ISBN 0-262-04219-3: The MIT Press, 2004.
- DULIKRAVICH, G. S.; MARTIN, T. J.; DENNIS, B. H.; FOSTER, N. F. *Multidisciplinary Hybrid Constrained GA Optimization*. John Wiley & Sons, 1999.
- EBERHART, R. C.; KENNEDY, J. A new optimizer using particle swarm theory. In: *Proceedings of the Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science*. , Nagoya - Japan: pp. 39-43, 1995.
- EDGAR, T. F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L. S. *Optimization of Chemical Process*. Second edition. New York: McGraw-Hill Chemical Engineering Series, 2001.
- EDGEWORTH, F. Y. *Mathematical Physics*. First edition. London, England: P. Keagan, 1881.
- EHRGOTT, M.; GANDIBLEUX, A. Approximative solution methods for multiobjective combinatorial optimization. *Sociedad de Estadística e Investigación Operativa*, v. 12, p. 1-89, 2004.
- ESCHENAUER, H.; KOSKI, J.; OSYCZKA, A. *Multicriteria Design Optimization - Procedures and Applications*. First edition. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1990.
- FAN, H. Y.; LAMPINEN, J. A trigonometric mutation operation to differential evolution. *Journal of Global Optimization*, v. 27, p. 105-129, 2003.

- FANG, H.; RAIS-ROHANI, M.; LUI, Z.; HORSTEMEYER, M. F. A comparative study of metamodeling methods for multiobjective crashworthiness optimization. *Computers and Structures*, v. 83, p. 2121–2136, 2005.
- FEEHERY, W. F. *Dynamic Optimization with Path Constraints*. Tese (Doutorado) — Massachusetts Institute of Technology, 1998.
- FOGLER, H. S. *Elements of Chemical Reaction Engineering*. Third edition. PTR: Prentice Hall, 1999.
- FONSECA, C. M.; FLEMING, P. J. Genetic algorithms for multiobjective optimization: Formulation, discussion and generalization. In: *Proceedings of the Fifth International Conference on Genetic Algorithms*. USA: Gen93, 1993.
- FONSECA, C. M.; FLEMING, P. J. An overview of evolutionary algorithms in multiobjective optimization. *Evolutionary Computation Journal*, v. 3, n. 1, p. 1–16, 1995.
- FU, P. C.; BARFORD, J. P. Non-singular optimal control for fed-batch fermentation processes with a differential-algebraic system model. *Journal Process Control*, v. 3, n. 2, p. 211–218, 1993.
- GAMPERLE, R.; MULLER, S. D.; KOUMOUTSAKOS, P. A parameter study for differential evolution. *Advances in Intelligent Systems, Fuzzy Systems, Evolutionary Computation*, v. 10, p. 293–298, 2002.
- GANDIBLEUX, X.; MEZDAOUI, N.; FREVILLE, A. A tabu search procedure to solve multiobjective combinatorial optimization procedures. In: *Advances in Multiple Objective and Goal Programming, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems 455, 291–300*. Springer Verlag: Caballero R. Ruiz F. and Steuer R. (eds), 1997.
- GISVOLD, K. M.; MOE, J. A method for nonlinear mixed integer programming and its application to design problems. *ASME Journal of Engineering for Industry*, v. 94, n. 1, p. 353–364, 1972.
- GLOVER, F. Heuristics for integer programming using surrogate constraints. *Decision Science*, v. 8, p. 156, 1977.
- GOEL, T.; DEB, K. Hybrid methods for multi-objective evolutionary algorithm. [http : //www.lania.mx/ ccoello/EMOO](http://www.lania.mx/ccoello/EMOO) acessado em 15/07/2006. 2001.
- GOLDBERG, D. E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. First edition. USA: Adison-Wesley, 1989.
- GRAVEL, M.; PRICE, W. L.; GAGNE, C. Scheduling continuous casting of aluminium using a multiple objective ant colony optimization metaheuristic. *European Journal of Operational Research*, v. 143, p. 218–229, 2002.
- HAIMES, Y. Y.; HALL, W. A. Multiobjective in water resources systems analysis: The surrogate worth trade-off method. *Wat. Resources Res.*, v. 10, p. 615–624, 1974.
- HAJELA, P.; LIN, C. Genetic search strategies in multicriterion optimal design. *Structural Optimization*, v. 4, n. 2, p. 99–107, 1992.

- HANSEN, M. P. Tabu search for multiobjective optimization: Mots. In: *Proceedings of the 13th International Conference on Multi Criteria Decision Making*. Cape Town - South Africa: MCDM97, 1997.
- HAUPT, R. L.; HAUPT, S. E. *Practical Genetic Algorithms*. First edition. INC.: John Wiley & Sons, 1998.
- HERTZ, A.; JAUMARD, B.; IBEIRO, C. C.; FRANCO FILHO, W. P. A multi-criteria tabu search approach to cell formation problems in group technology with multiple objectives. *Operations Research*, v. 28, p. 303–328, 1994.
- HERVE, J. M. Design of spring mechanism for balancing the weight of robots. In: *Proceedings of the 6th Symposium on Theory and Practice of Robots and Manipulators*. Cracow - Poland: Robot86, 1986. v. 1.
- HOLLAND, J. H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. First edition. Ann Arbor: University of Michigan Press, 1975.
- HORN, J.; NAFPLIOTIS, N.; GOLDBERG, D. E. A niched pareto genetic algorithm for multiobjective optimization. In: *Proceedings of the First IEEE Conference on Evolutionary Computation*. Florida - USA: IEEE World Congress on Computational Intelligence, 1994.
- HU, X.; COELLO, C. A. C.; HUANG, Z. A new multi-objective evolutionary algorithm: Neighborhood exploring evolution strategy. [http : //www.lania.mx/ ccoello/EMOO](http://www.lania.mx/ccoello/EMOO) acessado em 15/07/2006. 2006.
- HU, X.; HUANG, Z.; WANG, Z. Hybridization of the multi-objective evolutionary algorithms and the gradient-based algorithms. [http : //www.lania.mx/ ccoello/EMOO](http://www.lania.mx/ccoello/EMOO) acessado em 15/07/2006. 2003.
- HUNT, J.; KING, C.; COOKE, D. Immunizing against fraud. *IEEE Colloquium on Knowledge Discovery and Data Mining*, v. 96, n. 198, p. 209–222, 1996.
- IGNIZIO, J. P. *Goal Programming and Extensions*. First edition. Massachusetts: Lexington Books, 1976.
- IREDI, S.; MERKLE, D.; MIDDENDORF, M. Bi-criterion optimization with multi colony ant algorithms. In: *First International Conference on Evolutionary Multicriterion Optimization, Lecture Notes in Computer Science 1993*. Springer Verlag: Zitzler E., Deb K., Thiele L., Coello Coello C. A and Corne D. (eds), 2001.
- ISHIBUCHI, H.; YOSHIDA, T. Implementation of local search in hybrid multi-objective genetic algorithms: A case study on flowshop scheduling. [http : //www.lania.mx/ ccoello/EMOO](http://www.lania.mx/ccoello/EMOO) acessado em 15/07/2006. 2003.
- JACOBSON, D. H.; LELE, M. M. A transformation technique for optimal control problems with a state variable inequality constraint. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 14, n. 5, p. 457–464, 1969.
- JUTLER, H. Liniejnaja modal z nieskolkimi cllevymi funkcjami (linear model with several objective functions). *Ekonomika i Matematiceckije Metody*, v. 3, p. 397–406, 1967.

- KANNAN, B. K.; KRAMER, S. N. An augmented lagrange multipler based method for mixed integer discrete continuous optimization and its applications to mechanical design. *Journal of Mechanical Design*, v. 116, n. 2, p. 405–411, 1994.
- KAPADI, M. D.; GUDI, R. D. Optimal control of fed-batch fermentation involving multiple feeds using differential evolution. *Process Biochemistry*, v. 39, p. 1709–1721, 2004.
- KENNEDY, J.; EBERHART, R. C. Particle swarm optimization. In: *Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks*. Piscataway: NJ: IEEE Service Center, pp. 1942–1948, 1995.
- KIRANOUDIS, C. T.; MAROULIS, Z. B.; MARINOS-KOURIS, D. Modeling and optimization of fluidizad bed and rotary dryers. *Drying Technology*, v. 42, p. 3030–3040, 1997.
- KIRKPATRICK, S.; GELATT, C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by simulated annealing. *Science*, v. 220, p. 671–680, 1983.
- KNOWLES, J. D.; CORNE, D. W. Approximating the nondominated front using the pareto archived evolution strategy. *Evolutionary Computation*, v. 8, n. 2, p. 149–172, 2000.
- KOSKI, J. Defectiveness of weighting method in multicriterion optimization of structures. *Commun. Applications Numeric Methods*, v. 1, n. 1, p. 333–337, 1985.
- KURPATI, A.; AZARM, S. Immune network simulation with multiobjctive genetic algorithms for multidisciplinary design optimization. *Engineering Optimization*, v. 33, p. 245–260, 2000.
- KURSAWE, F. A variant of evolution strategies for vector optimization. In: *Proceedings of the Parellel Problem Solving fron Nature I*, pp. 193–197. USA: PPSN, 1990.
- LAGARROS, N. D.; PAPADRAKAKIS, M.; KOKOSSALAKIS, G. Structural optimization using evolutionary algorithms. *Computers and Structures*, v. 80, p. 571–589, 2002.
- LAND, A. H.; DOIG, A. An automatic method of solving discrete programming problems. *Econometrica*, v. 28, n. 2, p. 297–320, 1960.
- LEAL, M. F. *Otimização do Comportamento Dinâmico de Veículos usando Superfície de Resposta*. Dissertação (Mestrado) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG., 2001.
- LEE, S. M. *Goal Programming for Decision Analysis*. First edition. Philadelphia: Auerbach Publishers, 1972.
- LIMA E SILVA, A. *Desenvolvimento e Implementação de uma Nova Metodologia para Modelagem de Escoamentos sobre Geometrias Complexas: Método da Fronteira Imersa com Modelo Físico Virtual*. Tese (Doutorado) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG., 2002.

- LOBATO, F. S. *Abordagem Mista para Problemas de Otimização Dinâmica*. Dissertação (Mestrado) — Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG., 2004.
- LOBATO, F. S.; OLIVEIRA-LOPES, L. C.; MURATA, V. V. Optimal feed policy for fed-batch fermentation with events identification based on switching structures. In: *Proceedings of the XXII IACChE (CIIQ) 2006/V CAIQ*. Buenos Aires - Argentina: IACChE/CAIQ, 2006.
- LOBATO, F. S.; OLIVEIRA-LOPES, L. C.; MURATA, V. V. Indirect approach in the solution of differential-algebraic optimal control problems. *Optimal Control Applications and Methods*, 2008a. In press.
- LOBATO, F. S.; OLIVEIRA-LOPES, L. C.; STEFFEN JR, V. Uma abordagem evolutiva baseada em modelos caóticos de busca associado ao algoritmo de evolução diferencial. In: *17º POSMEC - Simpósio do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica*. Uberlândia - MG: FEMEC/UFU, 2007a.
- LOBATO, F. S.; SILVA NETO, A. J.; STEFFEN JR, V. Um estudo comparativo usando evolução diferencial e recozimento simulado aplicado a um problema inverso de transferência radiativa. In: *X Encontro de Modelagem Computacional*. Nova Friburgo - Rio de Janeiro: IPRJ, 2007b.
- LOBATO, F. S.; SILVA NETO, A. J.; STEFFEN JR, V. Solution of inverse radiative transfer problems in two-layer participating media with differential evolution. In: *International Conference on Engineering Optimization - EngOpt*. Rio de Janeiro - Brasil: UFRJ, 2008b.
- LOBATO, F. S.; STEFFEN JR, V. Uma metodologia híbrida para otimização usando evolução diferencial e programação seqüencial quadrática. In: *CD ROM do VII Simpósio de Mecânica Computacional - SIMMEC*. Araxá - MG: DEM, 2006.
- LOBATO, F. S.; STEFFEN JR, V. Engineering system design with multi-objective differential evolution. In: *Proceedings in the 19th International Congress of Mechanical Engineering - COBEM*. Brasília - DF: ABCM, 2007.
- LOGSDON, J. S.; BIEGLER, L. T. Accurate solution of differential-algebraic optimization problems. *Ind Eng. Chem. Res.*, v. 28, n. 1, p. 89–101, 1989.
- LOPES, S. G. B. C. *Bio-Genética, Evolução, Ecologia*. Primeira edição. São Paulo - SP: Editora Saraiva, 2002.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Primeira edição. São Paulo - SP: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S/A, 2004.
- MARIANI, V. C.; LIMA, A. G. B.; COELHO, L. S. Apparent thermal diffusivity estimation of the banana during drying using inverse method. *Journal of Food Engineering*, v. 85, p. 569–579, 2008.
- MARIANO, C. E.; MORALES, E. *A Multiple Objective Ant-q Algorithm for the Design of Water Distribution Irrigation Networks*. Mexico, 1999. Technical Report.

- MARLER, R. T.; ARORA, J. S. Survey of multi-objective optimization methods for engineering. *Structural Multidisciplinary Optimization*, v. 26, n. 1, p. 369–395, 2004.
- MASSARANI, G.; VALENÇA, G. C. Avaliação de secadores em fluxos concorrentes e contracorrentes. In: *Anais do ENEMP, Vol I*, p. 225–230. Uberlândia - MG: FEQUI/UFU, 1996.
- MEHRA, R. K.; DAVIS, R. E. A generalized gradient method for optimal control problems with inequality constraints and singular arcs. *IEEE Trans. Autom. Control*, v. 17, n. 5, p. 69–79, 1972.
- MESQUITA, L.; KAMAT, M. P. Optimization of stiffened laminated composite plates with frequency constraints. *Engineering Optimization*, v. 11, p. 77–88, 1987.
- MESSAC, A. Physical programming: Effective optimization for computational design. *AIAA Journal*, v. 34, n. 2, p. 149–158, 1996.
- METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, E.; TELLER, A. H. Equations of state calculations by fast computing machines. *Journal of Chemical Physics*, v. 21, p. 1087–1092, 1953.
- MICHALEWICZ, Z.; DEB, K.; SCHMIDT, M.; STIDEN, T. *Evolutionary Algorithms for Engineering Applications*. First edition. Evolutionary Algorithms in Engineering and Computer Science, Edited by Miettinen, K; Neittaanmaki, P.; Makela, M. M. e Periaux, J.: John Wiley & Sons, 1999.
- MICHALEWICZ, Z.; JANIKOW, C. Z. Handling constraints in genetic algorithms. In: *Proceedings of the 4th International Conference on Genetic Algorithms*, pp. 151–157. Gen91: Morgan Kaufmann, 1991.
- MICHALEWICZ, Z.; LOGAN, T.; SWAMINATHAN, S. Evolutionary operators for continuous convex parameter spaces. In: *Proceedings of the 3rd Annual Conference on Evolutionary Programming*, pp. 84–97. Gen94: World Scientific, 1994.
- MICHALEWICZ, Z.; NAZHIYATH, G. Genecop 3: A co-evolutionary algorithm for numerical optimization problems with non-linear constraints. In: *Proceedings of the 2nd IEEE International Conference on Evolutionary Computation*, pp. 647–651. IEEE Press: Fogel, D. B. (eds), 1995.
- MODAK, J. M.; LIM, H. Feedback optimization of fed-batch fermentation. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 30, p. 528–540, 1986.
- MODAK, J. M.; LIM, H. Simple non-singular control approach to fed-batch fermentation optimisation. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 33, n. 1, p. 11–15, 1989.
- MODAK, J. M.; LIMA, H. C.; TAYEB, Y. J. General characteristics of optimal feed rate profiles for varies fed-batch fermentation processes. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 28, n. 6, p. 396–1407, 1986.
- MURATA, T.; ISHIBUCHI, H. Moga: Multi-objective genetic algorithms. In: *Proceedings of the 1995 IEEE International Conference on Evolutionary Computation*. Perth WA - Australia: IEEE, 1995.

-
- MYERS, R. H. *Response Surface Methodology*. First edition. Allyn and Bacon Inc.: Boston, 1971.
- NEUMAN, C. P.; SEN, A. A. A suboptimal control algorithm for constrained problems using cubic splines. *Automatica*, v. 9, p. 601–613, 1973.
- NOBAKHTI, A.; WANG, H. A self-adaptive differential evolution with application on the alstom gasifier. In: *Proceedings of the 2006 American Control Conference Minneapolis, June, 14-16*. Minnesota - USA: American Control, 2006.
- NULSSEALM, K.; TAVALAGE, J. Trade-off cut approach to multiple objective optimization. *Operations Research*, v. 6, p. 1424–1435, 1980.
- OHNO, H.; NAKANISHI, E.; TAKAMATSU, T. Optimal control of a semi-batch fermentation. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 18, p. 847–864, 1976.
- OLIVEIRA, F. C. G.; BORGES, J. A. F. Avaliação da rigidez torsional de uma estrutura veicular tipo space frame pelo método de elementos finitos com estudo de caso. In: *16 PosMec - Simpósio de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, de 11 à 13 de Dezembro de 2006*. Uberlândia - MG: FEMEC/UFU, 2006.
- OLIVEIRA, G. T. S. *Estudo e Aplicações da Evolução Diferencial*. Dissertação (Mestrado) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG., 2006a.
- OLIVEIRA, J. E. S. *Método da Fronteira Imersa Aplicado à Modelagem Matemática e Simulação Numérica de Escoamentos Turbulentos Sobre Geometrias Móveis e Deformáveis*. Tese (Doutorado) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG., 2006b.
- OLIVEIRA, L. S. *Uma Contribuição ao Estudo dos Métodos de Otimização Multi-objetivo*. Dissertação (Mestrado) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG., 2005a.
- OLIVEIRA, P. J. *Otimização de Trajetórias de Robôs com Estrutura Paralela*. Tese (Doutorado) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG, 2005b.
- OPPENHEINER, K. R. A proxy approach to multi-attribute decision making. *Management Science*, v. 15, p. 309–333, 1978.
- OSBORN, G. S.; WHITE, G. M.; SULAIMAN, A. H.; WELTON, L. R. Predicting equilibrium moisture proportions of soybeans. *Transactions of the ASAE*, v. 32, p. 2109–2113, 1989.
- OSY CZKA, A. An approach to multicriterion optimization problems for engineering design. *Comp. Methods in Applied Mech. and Eng.*, v. 15, p. 309–333, 1978.
- OSY CZKA, A. *Multicriterion Optimization in Engineering with Fortran Programs*. First edition. England: Ellis Horwood Limited, 1984.
- OSY CZKA, A.; KUNDU, S. A new method to solve generalized multi-criteria optimization problems using the simple genetic algorithm. *Structural Optimization*, v. 10, n. 2, p. 94–99, 1995.

- OZISIK, M. N. *Radiation Transfer and Interactions with Conduction and Convection*. First edition. New York: John Wiley & Sons, 1973.
- PAGE, G. E. *Factors Influencing the Maximum Rates of Air Drying Shelled Corn in Thin-Layer*. Dissertação (Mestrado) — Indiana-USA, Purdue University., 1949.
- PAHNER, U.; HAMEYER, K. Adaptive coupling of differential evolution and multi-quadratics approximation for the tuning of the optimization process. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 36, p. 1047–1051, 2000.
- PALLI, N.; AZRAM S. MCCLUSKEY, P.; SUNDARARAJAN, R. An interactive multi-stage ϵ -inequality constraint method for multiple objectives decision making. *ASME Journal of Mechanical Design*, v. 120, n. 4, p. 678–686, 1999.
- PARETO, V. *Cours D'Economie Politique*. First edition. França: Vol I and II, F. Rouge, Lausanne, 1896.
- PARSOPOULOS, K. E.; VRAHATIS, M. N. Particle swarm optimization method in multiobjective problems. In: *Proceedings of the ACM Symposium on Applied Computing 2002*. New York: SAC 2002, 2002.
- PFEIFER, A. A.; LOBATO, F. S.; MURATA, V. V. Development of an algorithm of search of events of optimal control problems with index fluctuation. In: *Proceedings of the XXII IACChE (CIIQ) 2006/V CAIQ*. Buenos Aires - Argentina: IACChE/CAIQ, 2006.
- PHAM, D. T.; KARABOGA, D. *Intelligent Optimization Techniques*. First edition. New York: Springer Verlag A. I. Series, 2000.
- POWELL, D.; SKOLNICK, M. M. Using genetic algorithms in engineering design optimization with non-linear constraints. In: *Proceedings of the 5th International Conference on Genetic Algorithms*, pp. 424–430. USA: Morgan Kaufmann, 1993.
- PRICE, K. V.; STORN, R. M.; LAMPINEN, J. A. *Differential Evolution - A Practical Approach to Global Optimization*. First edition. Natural Computing Series: Springer Verlag, 2005.
- QIAN, W.; LI, A. Adaptive differential evolution algorithm for multiobjective optimization problems. *Applied Mathematics and Computation*, v. 5, p. 12–25, 2008.
- QIN, A. K.; SUGANTHAN, P. N. Self-adaptive differential evolution algorithm for numerical optimization. In: *Proceedings of the 2005 Congress on Evolutionary Computation*. USA: Gen05, 2005.
- RAY, T.; TAI, K.; SEOW, K. C. An evolutionary algorithm for multiobjective optimization. *Engineering Optimization*, v. 33, p. 399–424, 2001.
- ROJAS, J. E.; VIANA, F. A. C.; RADE, D. A.; STEFFEN JR, V. Identification of external loads in mechanical systems through heuristic-based optimization methods and dynamic responses. *Latin American Journal of Solids and Structures*, v. 1, n. 3, p. 297–318, 2004.

-
- ROMERO, C. *Handbook of Critical Issues in Goal Programming*. First edition. New York: Oxford, Uk. Pergamon, Press, 1991.
- SALUKVADZE, M. E. On existence of solution in problems of optimization under vector valued criteria. *Journal of Optimization Theory and Applications*, v. 12, p. 203–217, 1974.
- SANDGREN, E. Nonlinear integer and discrete programming in mechanical design optimization. *ASME, Journal of Mechanical Design*, v. 112, p. 223–229, 1990.
- SANTOS, M. I. C. S. R. *Construção de Metamodelos de Regressão Não Linear para Simulação de Acontecimentos Discretos*. Tese (Doutorado) — Instituto Superior Técnico - Universidade Técnica de Lisboa, 2002.
- SARAMAGO, S. F. P. *Métodos de Otimização Randômica: Algoritmos Genéticos e Simulated Annealing*. Notas em Matemática Aplicada, Volume 6, SBMAC, São Carlos - SP., 1999.
- SARAVANANA, R.; RAMABALANB, S.; BABU, P. D. Optimum static balancing of an industrial robot mechanism. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, v. 4, p. 12–24, 2008.
- SARKAR, D.; MODAK, J. M. Pareto-optimal solutions for multi-objective optimization of fed-batch bioreactors using nondominated sorting genetic algorithm. *Chemical Engineering Science*, v. 60, p. 481–492, 2005.
- SARMA, P. V. L. N.; REKLAITIS, G. V. Optimization of a complex chemical process using an equation oriented model. *Mathematical Programming Study*, v. 20, n. 12, p. 113–160, 1982.
- SARTORI, D. J. M. *Transferência de Calor em Leito Deslizante*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, Faculdade de Engenharia Química, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1986.
- SCHAFFER, J. D. *Multiple Objective Optimization with Vector Evaluated Genetic Algorithms*. Tese (Doutorado) — Vanderbilt University, 1984.
- SCHAFFER, J. D. *Combinations of Genetic Algorithms with Neural Networks or Fuzzy Systems*. First edition. Piscataway - NJ: Computational Intelligence: Imitating Life, Edited by Zurada, J. M.; Marks II, R. J. and Robinson, C. J., IEEE Press, 1994.
- SCHMIT, L. A. Structural design by systematic synthesis. In: *Proceedings, 2nd Conference on Electronic Computation*. pp. 105–122: ASCE, New York, 1960.
- SCHOENAUER, M.; XANTHAKIS, Z. Constrained ga optimization. In: *Proceedings of the 5th International Conference on Genetic Algorithms*, pp. 573–580. USA: Gen93, 1993.
- SERAFINI, P. Simulated annealing for multiobjective optimization problems. In: *Proceedings of the X International Conference on Multiple Criteria Decision Making*. pp. 87–96: Taipei - Taiwan, 1992.

- SHELOKAR, P. S.; ADHIKARI, S.; VAKIL, R.; JAYARAMAN, V. K.; KULKARNI, B. D. Multiobjective ant algorithm: Combination of strength pareto fitness assignment and thermodynamic clustering. *Foundations of Computing and Decision Sciences*, v. 25, p. 213–230, 2000.
- SHREVE, R. N.; BRINK, J. A. *Indústrias de Processos Químicos*. Primeira edição. Editora GD: Guanabara Dois, 1980.
- SILVA, A. R. *Modelagem Matemática de Interação Fluido-Estrutura utilizando o Método da Fronteira Imersa*. Tese (Doutorado) — Departamento de Engenharia Mecânica - FEMEC/UFU, 2008.
- SILVA, C. M. *Desenvolvimento de um Algoritmo de Otimização Multiobjetivo usando Algoritmos Genéticos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2004.
- SILVA, L. N. C. *Engenharia Imunológica: Desenvolvimento e Aplicação de Ferramentas Computacionais Inspiradas em Sistemas Imunológicos Artificiais*. Tese (Doutorado) — Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, UNICAMP, Campinas, SP, 2001.
- SILVA NETO, A. J.; MOURA NETO, F. D. *Problemas Inversos - Conceitos Fundamentais e Aplicações*. Primeira edição. Rio de Janeiro - RJ: ED UERJ, Editora da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2005.
- SOCHA, K. Aco for continuous and mixed-variable optimization. In: *Proceedings in Fourth International Workshop on Ant Colony Optimization and Swarm Intelligence*. Brussels - Belgium: Optimization Group, 2004.
- SOLICH, R. Zadanie programowania liniowego z wieloma funkcjami celu (linear programming problem with several objective functions). *Przegląd Statystyczny*, v. 16, p. 24–30, 1969.
- SOMAYAJI, A.; HOFMEYER, S.; FORREST, S. Principles of a computer immune system. In: *Submitted to New Security Paradigms*. USA: <http://www.cs.unm.edu/forrest/papers.html>, 1997.
- SOUZA, D. F. S. *Abordagem Algébrico-Diferencial na Otimização Dinâmica de Processos*. Tese (Doutorado) — Departamento de Engenharia Química - COPPE/UFRJ, 2007.
- SRINIVAS, N.; DEB, K. Multiobjective optimization using nondominated sorting in genetic algorithms. *Evolutionary Computation*, v. 2, n. 3, p. 221–248, 1994.
- STADLER, W. Caveats and boons of multicriteria optimization. *Microcomput. Civ. Eng.*, v. 10, n. 1, p. 291–299, 1995.
- STORN, R. System design by constraint adaptation and differential evolution. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, v. 3, p. 22–34, 1999.
- STORN, R.; PRICE, K. Differential evolution: A simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces. *International Computer Science Institute*, v. 12, p. 1–16, 1995.

- TANAKA, M. Ga-based decision support system for multi-criteria optimization. In: *Proceedings of the International Conference Multi-Criterion Optimization*. pp. 111-125.: EMO, 1995.
- TAVAZOEI, M. S.; HAERI, M. Comparison of different one-dimensional maps as chaotic search pattern in chaos optimization algorithms. *Applied Mathematics and Computation*, v. 187, n. 5, p. 1076–1085, 2007.
- THOLUDUR, A.; RAMIREZ, W. F.; MCMILLAN, J. D. Interpolated parameter functions for neural network models. *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, p. 2545–2553, 2000.
- TICONA, W. G. C. *Aplicação de Algoritmos Genéticos Multi-Objetivo para Alinhamento de Sequências Biológicas*. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC-USP, São Carlos - SP, 2003.
- ULUNGU, E. L.; TEGHEM, J. Heuristic for multi-objective combinatorial optimization problems with simulated annealing. In: *Proceedings at the EURO XII Conference*. Helsinki: THC, 1992.
- VANDERPLAATS, G. N. *Numerical Optimization Techniques for Engineering Design*. Third edition. USA: VR D INC. Colorado Springs, 1999.
- VAN KAMPEN, A. H. C.; STROM, C. S.; BUYDENS, L. M. C. Lethalization, penalty and repair functions for constrained handling in the genetic algorithm methodology. In: *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, pp. 55-68. USA: Gen96, 1996.
- VASCONCELOS, J. A.; SALDANHA, R. R.; KRAHENBUHL, L.; NICOLAS, A. Genetic algorithm coupled with a deterministic method for optimization in eletromagnetics. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 33, p. 1860–1863, 1999.
- VASSILIADIS, V. *Computational Solution of Dynamic Optimization Problems with General Differential-Algebraic Constraints*. Tese (Doutorado) — University of London, 1993.
- VENTER, G.; SOBIESKI, J. S. Particle swarm optimization. In: *Proceedings of the 43rd AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference*. Denver - USA: AIAA, 2002.
- VIANA, F. A. C. *Simple Optimization Toolbox - User's Guide*. Second Version, 2006.
- VIANA, F. A. C. *Surrogate Modeling Techniques and Heuristic Optimization Methods Applied to Design and Identification Problems*. Tese (Doutorado) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, 2008.
- VIANA, F. A. C.; STEFFEN JR, V. Ant colony optimization applied to discrete-continuous problems. In: *CD ROM do VII Simpósio de Mecânica Computacional - SIMMEC*. Araxá - MG: DEM, 2006.
- WALZ, F. M. An engineering approach: Hierarchical optimization criteria. *IEEE Trans Automatic Control*, v. 12, p. 179–191, 1967.

- WANG, F. S.; CHENG, W. M. Simultaneous optimization of feeding rate and operation parameters for fed-batch fermentation process. *Biotechnology Prog.*, v. 15, p. 949–952, 1999.
- WANG, F. S.; SU, T. L.; JANG, H. J. Hybrid differential evolution for problems of kinetic parameter estimation and dynamic optimization of an ethanol fermentation process. *Industry Engineering Chemical Research*, v. 40, p. 2876–2885, 2001.
- WIERZBICHI, A. P. On the use of penalty functions in multiobjective optimization. In: *Proceedings of the International Symposium on Operations Research*. pp. 12-20: Mannheim, 1978.
- XUE, F. *Multi-objective Differential Evolution: Theory and Applications*. Tese (Doutorado) — Rensselaer Polytechnic Institute, 2004.
- YAN, L. *New Algorithm of Global Optimization for Process System - Line-up Competition Algorithm*. Tese (Doutorado) — Beijing University of Chemical Technology, Beijing, 1998.
- YANG, D.; LI, G.; CHENG, G. Comparison of different one-dimensional maps as chaotic search pattern in chaos optimization algorithms. *Chaos, Solutions and Fractals*, v. 34, n. 8, p. 1366–1375, 2007.
- YEN, G. G.; LU, H. Dynamic multiobjective evolutionary algorithm: Adaptive cell-based rank and density estimation. *IEEE Transactions Evolutionary Computation*, v. 7, n. 3, p. 253–274, 2003.
- YOO, J.; HAJELA, P. Immune network simulations in multicriterion design. *Structural Optimization*, v. 18, p. 85–94, 1999.
- ZAHARIE, D. Critical values for the control parameters of differential evolution algorithms. In: *Proceedings of the 8th International Conference on Soft Computing*. USA: EMD, 2002.
- ZAHARIE, D. Control of population diversity and adaptation in differential evolution algorithms. In: *Proc. of Mendel 2003, 9th Internat. Conference on Soft Computing*. pp. 123-129: R. Matouek, P. Omera (eds.), 2003.
- ZITZLER, E.; DEB, K.; THIELE, L. Comparison of multiobjective evolutionary algorithms: Empirical results. *Evolutionary Computation Journal*, v. 8, n. 2, p. 125–148, 2000.
- ZITZLER, E.; LAUMANN, M.; THIELE, L. *SPEA II: Improving the Strength Pareto Evolutionary Algorithm*. Zurich - Switzerland, 2001. Computer Engineering and Networks Laboratory (TIK), Swiss Federal Institute of Technology (ETH) Zurich, Gloriastrasse 35, CH-8092.
- ZITZLER, E.; THIELE, L. *An Evolutionary Algorithm for Multiobjective Optimization: The Strength Pareto Approach*. TIK-Report No. 43, 1998.

APÊNDICES

Apêndice A - Arquivos de Entrada e Saída do Algoritmo MODE

Este apêndice apresenta o arquivo de entrada `input_data.dat` (caso o usuário escolha essa opção durante a execução) e os arquivos de saída `*.dat` do algoritmo MODE.

Para essa finalidade será utilizado o problema P1 (DEB, 2001):

$$\begin{cases} \min f_1 = x_1 \\ \min f_2 = \frac{1 + x_2}{x_1} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

com $x_1 \in [0, 1]$ e $x_2 \in [0, 3]$. O ótimo de Pareto corresponde a $0,1 \leq x_1 \leq 1$ e $x_2 = 0$.

Os parâmetros utilizados pelo MODE são apresentados na Tab. A.1.

Tabela A.1: Parâmetros utilizados na resolução do problema P1.

Parâmetro	MODE
N_{gen}	10
N	5
p_c	0,8
F	0,8
R	2
r	0,90

O arquivo de entrada `input_data.dat` apresenta a seguinte estrutura:

exemplo

```
5
10
2
2
0
0,1 1
0 3
0,8
0,8
2
0,9
0,999
```

onde cada linha corresponde ao:

Name of the optimization problem, *nameproblem*

Population size, N

No. of generations, N_{gen}

No. of functions, $nfunc$

No. of design variables, $Nvar$

No. of constraints, Nc

Lower and upper limits of design variable 1, $limit[1][0]$ $limit[1][1]$

Lower and upper limits of design variable 2, $limit[2][0]$ $limit[2][1]$

...

Lower and upper limits of design variable $Nvar$, $limit[Nvar][0]$ $limit[Nvar][1]$

Perturbation factor, F

Cross-over probability, ρ_c

No. of pseudo-curves, R

Reduction rate, r

Random seed, *seed*

A seguir são apresentados os arquivos de saída do MODE.

Arquivo de saída report.dat:

```
*****
*
*      MODE - Multi-Objective Optimization Differential Evolution
*
*
*      Implemented by Fran Sergio Lobato
*
*      Version 1.0 - 07/04/2007
*
*****
```

Mon Oct 01 19:30:40 2007

```
*****
File output: it presents details of evolutionary process
*****
```

```
*****
Evolutionary Process Parameters
*****
Name of the Optimization Problem: exemplo
Population Size: 5
No. of Generations: 10
No. of Functions: 2
No. of Constraints: 0
No. of Design Variables: 2
Design Variable No.: 1
Lower Limits on 1th Variable: 0,100000
Upper Limits on 1th Variable: 1,000000
Design variable No.: 2
Lower Limits on 2th Variable: 0,000000
Upper Limits on 2th Variable: 3,000000
Cross-over Probability: 0,800000
Perturbation Factor: 0,800000
No of Pseudo-Curves: 2
Reduction Rate: 0,900000
Random Seed: 0,999000
*****
```

```
*****
-----
Generation No. -> 1
-----
variables (2)  fitness (2)  rank    cublen
-----
0,200450 1,935332    0,2005  14,6437 1 0,000000
0,329161 2,709383    0,3292  11,2692 1 0,000000
```

```

0,442371 1,318775 0,4424 5,2417 1 0,000000
0,817097 2,570012 0,8171 4,3691 2 0,000000
0,757001 0,320869 0,7570 1,7449 1 0,000000

```

```

-----
Generation No. -> 2

```

```

-----
variables (2)  fitness (2)  rank    cublen
-----
0,757001 0,320869 0,7570 1,7449 1 1260,042
0,200450 0,934342 0,2005 9,6500 1 6,514887
0,714129 1,950771 0,7141 4,1320 1 3,811464
0,100000 0,184342 0,1000 11,843 1 1260,042
0,264129 0,450771 0,2641 5,4927 1 4,650215

```

```

-----
Generation No. -> 3

```

```

-----
variables (2)  fitness (2)  rank    cublen
-----
0,757001 0,320869 0,7570 1,7449 1 1075,700
0,200450 0,934342 0,2005 9,6500 1 4,671464
0,264129 0,450771 0,2641 5,4927 1 6,499233
0,100000 0,000000 0,1000 10,000 1 75,70011
0,100000 0,000000 0,1000 10,000 1 1000,100

```

```

-----
Generation No. -> 4

```

```

-----
variables (2)  fitness (2)  rank    cublen
-----
0,200450 0,934342 0,2005 9,6500 1 4,671464
0,264129 0,450771 0,2641 5,4927 1 6,499233
0,100000 0,000000 0,1000 10,000 1 66,68043
0,663304 0,000000 0,6633 1,5076 1 1066,330
0,100000 0,000000 0,1000 10,000 1 1000,100

```

```

-----
Generation No. -> 5

```

```

-----
variables (2)  fitness (2)  rank    cublen
-----
0,200450 0,934342 0,2005 9,6500 1 6,378098
0,100000 0,000000 0,1000 10,000 1 66,68043
0,663304 0,000000 0,6633 1,5076 1 1066,330
0,264129 0,000000 0,2641 3,7860 1 7,793454
0,100000 0,000000 0,1000 10,000 1 1000,100

```

```

-----
Generation No. -> 6

```

```

-----
variables (2)  fitness (2)  rank    cublen

```

```

-----
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 77,74142
0,264129 0,000000    0,2641   3,7860 1 3,362488
0,150943 0,000000    0,1509   6,6250 1 6,378098
0,743664 0,000000    0,7437   1,3447 1 1074,366
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 1000,050
-----

```

Generation No. -> 7

```

-----
variables (2)  fitness (2)  rank    cublen
-----
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 74,36644
0,743645 0,000000    0,7436   1,3447 1 1000,000
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 1000,000
0,743704 0,000000    0,7437   1,3447 1 74,36644
0,124177 0,000000    0,1242   8,0530 1 3,425929
-----

```

Generation No. -> 8

```

-----
variables (2)  fitness (2)  rank    cublen
-----
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 74,36644
0,743664 0,000000    0,7437   1,3447 1 1074,366
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 1000,000
0,389932 0,000000    0,3899   2,5646 1 4,048349
0,325000 0,750000    0,3250   5,3846 1 3,723569
-----

```

Generation No. -> 9

```

-----
variables (2)  fitness (2)  rank    cublen
-----
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 74,36644
0,743664 0,000000    0,7437   1,3447 1 1074,366
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 6,512267
0,286719 0,000000    0,2867   3,4877 1 6,788417
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 1000,186
-----

```

Generation No. -> 10

```

-----
variables (2)  fitness (2)  rank    cublen
-----
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 89,30397
0,100000 0,000000    0,1000  10,000 1 1000,000
0,286719 0,000000    0,2867   3,4877 1 3,585228
0,893040 0,000000    0,8930   1,1198 1 1089,303
0,144289 0,000000    0,1443   6,9305 1 6,698986
-----

```

```
*****
Cpu time (in seconds) = 0.000000
Number of Function Evaluation = 105
*****
```

Arquivo de saída initial_population.dat:

```
*****
Initial Population (x(1) ... x(2), f(1) ... f(2))
*****
0,757001    0,320869    0,7570    1,7449
0,329161    2,709383    0,3292    11,269
0,442371    1,318775    0,4424    5,2417
0,817097    2,570012    0,8171    4,3691
0,757001    0,320869    0,7570    1,7449
*****
```

Arquivo de saída pareto.dat:

```
*****
Non-dominated Solutions - Curve of Pareto (f(1) ... f(2))
*****
0,100000    10,00000
0,286719    3,487733
0,144289    6,930532
0,921151    1,085598
0,100000    10,00000
*****
```

Arquivo de saída variable.dat:

```
*****
Feasible Variable_vectors at last generation (x(1) ... x(2))
*****
0,100000    0,000000
0,286719    0,000000
0,144289    0,000000
0,921151    0,000000
0,100000    0,000000
*****
```

Arquivo de saída rank.dat:

```
***** Rank at Generation 1 *****
Rank old ranks      new ranks      rankratio
1          4          5          0,555556
2          1          0          0,000000
***** Rank at Generation 2 *****
Rank old ranks      new ranks      rankratio
1          5          5          0,500000
***** Rank at Generation 3 *****
Rank old ranks      new ranks      rankratio
1          5          5          0,500000
***** Rank at Generation 4 *****
Rank old ranks      new ranks      rankratio
1          5          5          0,500000
***** Rank at Generation 5 *****
Rank old ranks      new ranks      rankratio
1          5          5          0,500000
***** Rank at Generation 6 *****
Rank old ranks      new ranks      rankratio
1          5          5          0,500000
***** Rank at Generation 7 *****
Rank old ranks      new ranks      rankratio
1          5          5          0,500000
***** Rank at Generation 8 *****
Rank old ranks      new ranks      rankratio
1          5          5          0,500000
***** Rank at Generation 9 *****
Rank old ranks      new ranks      rankratio
1          5          5          0,500000
***** Rank at Generation 10 *****
Rank old ranks      new ranks      rankratio
1          5          5          0,500000
*****
```

Arquivo de saída grankrec.dat:

```
*****
Generation no. = 1
RANK      No of Individuals
1          6
2          7
3          2
*****
Generation no. = 2
RANK      No of Individuals
```

```

1          7
2          6
3          2
*****
Generation no. = 3
RANK      No Of Individuals
1          9
2          4
3          2
*****
Generation no. = 4
RANK      No Of Individuals
1          8
2          3
3          2
4          1
5          1
*****
Generation no. = 5
RANK      No Of Individuals
1          11
2          3
3          1
*****
Generation no. = 6
RANK      No Of Individuals
1          14
2          1
*****
Generation no. = 7
RANK      No Of Individuals
1          15
*****
Generation no. = 8
RANK      No Of Individuals
1          13
2          2
*****
Generation no. = 9
RANK      No Of Individuals
1          14
2          1
*****
Generation no. = 10
RANK      No Of Individuals
1          14
2          1

```

Arquivo de saída fitness.dat:

File fitness: it presents variables, objectives function and constraints

Generation Number -> 1

Variable_vector (1:2) Fitness_vector (3:4)

0,757001 0,320869 0,757001 1,744871

0,200450 0,934342 0,200450 9,649998

0,714129 1,950771 0,714129 4,131987

0,100000 0,184342 0,100000 11,84342

0,264129 0,450771 0,264129 5,492664

Generation Number -> 2

Variable_vector (1:2) Fitness_vector (3:4)

0,757001 0,320869 0,757001 1,744871

0,200450 0,934342 0,200450 9,649998

0,264129 0,450771 0,264129 5,492664

0,100000 0,000000 0,100000 10,00000

0,100000 0,000000 0,100000 10,00000

Generation Number -> 3

Variable_vector (1:2) Fitness_vector (3:4)

0,200450 0,934342 0,200450 9,649998

0,264129 0,450771 0,264129 5,492664

0,100000 0,000000 0,100000 10,00000

0,663304 0,000000 0,663304 1,507604

0,100000 0,000000 0,100000 10,00000

Generation Number -> 4

Variable_vector (1:2) Fitness_vector (3:4)

0,200450 0,934342 0,200450 9,649998

0,100000 0,000000 0,100000 10,00000

0,663304 0,000000 0,663304 1,507604

0,264129 0,000000 0,264129 3,786031

0,100000 0,000000 0,100000 10,00000

Generation Number -> 5

Variable_vector (1:2) Fitness_vector (3:4)

0,100000 0,000000 0,100000 10,00000

```

0,264129  0,000000  0,264129  3,786031
0,150943  0,000000  0,150943  6,625014
0,743664  0,000000  0,743664  1,344693
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
*****
                                Generation Number -> 6
Variable_vector (1:2) Fitness_vector (3:4)
*****
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
0,743664  0,000000  0,743664  1,344693
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
0,743664  0,000000  0,743664  1,344693
0,124177  0,000000  0,124177  8,053015
*****
                                Generation Number -> 7
Variable_vector (1:2) Fitness_vector (3:4)
*****
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
0,743664  0,000000  0,743664  1,344693
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
0,389932  0,000000  0,389932  2,564553
0,325000  0,750000  0,325000  5,384615
*****
                                Generation Number -> 8
Variable_vector (1:2) Fitness_vector (3:4)
*****
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
0,743664  0,000000  0,743664  1,344693
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
0,286719  0,000000  0,286719  3,487733
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
*****
                                Generation Number -> 9
Variable_vector (1:2) Fitness_vector (3:4)
*****
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
0,286719  0,000000  0,286719  3,487733
0,893040  0,000000  0,893040  1,119771
0,144289  0,000000  0,144289  6,930532
*****
                                Generation Number -> 10
Variable_vector (1:2) Fitness_vector (3:4)
*****
0,100000  0,000000  0,100000  10,00000
0,286719  0,000000  0,286719  3,487733
0,144289  0,000000  0,144289  6,930532

```

```
0,921151    0,000000    0,921151    1,085598
0,100000    0,000000    0,100000    10,00000
*****
```

Arquivo de saída metrics.dat:

```
*****
                        Convergence Metrics
*****
Convergence Metric    Generational Distance    Diversity Metric
      0,002095                0,001511                1,006134
*****
```

Apêndice B - Artigos Publicados e Submetidos

Lobato, F. S., Machado, V. S., Steffen Jr, V., “*Optimal Protocol for a Mathematical Tumor Model with Immune Resistance and Drug Therapy using Differential Evolution*”. **International Journal of Biomedical Engineering and Technology** (Submetido para publicação).

Silva, A. R., Lobato, F. S., Barrozo, M. A. S., Silva, A., Steffen Jr, V., “*Multi-objective Optimization and Meta-modelling Techniques Applied to the Solution of a Fluid-Structure Interaction Problem*”. **Computers & Structures** (Submetido para publicação).

Lobato, F. S., Steffen Jr, V., “*A New Multi-objective Optimization Algorithm Based on Differential Evolution and Neighborhood Exploring Evolution Strategy*”. **Computational and Applied Mathematics** (Submetido para publicação).

Lobato, F. S., Arruda, E. B., Barrozo, M. A. S., Steffen Jr, V., “*Modelling and Optimization of Inverse Rotary Dryer Problem using Differential Evolution*”. **Brazilian Journal of Chemical Engineering** (Submetido para publicação).

Lobato, F. S., Silva-Neto, A. J., Steffen Jr, V., “*A Comparative Study of the Application of Differential Evolution and Simulated Annealing in Inverse Radiative Transfer Problems*”. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences** (Submetido para publicação).

Lobato, F. S., Steffen Jr, V., “*Algoritmo de Luus-Jaakola Aplicado a um Problema Inverso de Fermentação Batelada Alimentada*”. **TEMA - Tendências em Matemática Aplicada e Computacional** (Submetido para publicação).

Oliveira Filho, R. H., Lobato, F. S., Duarte, M. A. V., Steffen Jr, V., (2008), “*Estimação de Parâmetros de um Filtro Adaptativo utilizado como Ferramenta para Controle de Qualidade em Linha de Montagem de Câmbios Automotivos através da Técnica de Evolução Diferencial*”. **V Congresso Nacional de Engenharia Mecânica** - Salvador-Brasil.

Arruda, E. B., Lobato, F. S., Barrozo, M. A. S., Steffen Jr, V., (2008), “*Estimation of Drying Parameters in Rotary Dryers using Differential Evolution*”. **6th International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice - ICIPE**, Dourdan-França.

Lobato, F. S., Silva-Neto, A. J., Steffen Jr, V., (2008), “*Solution of Inverse Radiative Transfer Problems in Two-Layer Participating Media with Differential Evolution*”. **International Conference on Engineering Optimization - EngOpt**, Rio de Janeiro-

Brasil.

Lobato, F. S., Steffen Jr, V., (2007), “*Engineering System Design with Multi-objective Differential Evolution*”. 19th **International Congress of Mechanical Engineering - COBEM**, Brasília-Brasil.

Lobato, F. S., Oliveira-Lopes, L. C., Murata, V. V., Steffen Jr, V., (2007), “*Evolução Diferencial Aplicada à Solução de Problemas de Controle Ótimo com Restrições de Desigualdade*”. **X Encontro de Modelagem Computacional**, Nova Friburgo-Brasil.

Lobato, F. S., Murata, V. V., Oliveira-Lopes, L. C., Steffen Jr, V., (2007), “*Solution of Multi-objective Optimal Control Problems with Index Fluctuation using Differential Evolution*”. 6th **Brazilian Conference on Dynamics, Control and Their Applications - DINCON**, São José do Rio Preto-Brasil.

Lobato, F. S., Oliveira-Lopes, L. C., Steffen Jr, V., (2007), “*Uma Abordagem Evolutiva Baseada em Modelos Caóticos de Busca Associado ao Algoritmo de Evolução Diferencial*”. 17^o **POSMEC - Simpósio do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica**, Uberlândia-Brasil.

Lobato, F. S., Oliveira-Lopes, L. C., Murata, V. V., Steffen Jr, V., (2006), “*Resolução de Problemas de Controle Ótimo Multi-objetivo via Abordagem Indireta*”. 16^o **POSMEC - Simpósio do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica**, Uberlândia-Brasil.

Lobato, F. S., Steffen Jr, V., (2006), “*Uma Metodologia Híbrida para Otimização usando Evolução Diferencial e Programação Quadrática Seqüencial*”. **VII Simpósio de Mecânica Computacional - SIMMEC**, Araxá-Brasil.

Apêndice C - Sobre o Autor



Fran Sérgio Lobato nasceu em Araguari-MG, em 1976. Obteve o Título de Engenheiro Químico em 2002, na Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia, onde concluiu sua Dissertação de Mestrado, que tinha como enfoque a Teoria de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial, em 2004. Em 2008 concluiu o Doutorado sobre otimização multi-objetivo de sistemas de engenharia usando como ferramenta o Algoritmo de Evolução Diferencial, na Faculdade de Engenharia Mecânica da

Universidade Federal de Uberlândia. Atualmente, além de desenvolver trabalhos na Faculdade de Engenharia Química, como pesquisador colaborador, está engajado em projetos de otimização de estruturas complexas na Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia. Tem como principais áreas de interesse: a Teoria de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial com Índice Flutuante, com aplicações em áreas diversas, principalmente em problemas biotecnológicos; Métodos de Otimização Clássicos, Evolutivos e Híbridos, com maior ênfase em Algoritmos Genéticos e Evolução Diferencial; Problemas Multi-objetivos; Matemática Aplicada a sistemas diversos, além de estudos sobre a incorporação de mecanismos adaptativos aos algoritmos evolutivos, como Modelos Caóticos de Busca.

Contato: franpi22@yahoo.com.br

Curriculum Vitae: <http://lattes.cnpq.br/7640108116459444>