



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS
LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO, PROJETO E CONTROLE AVANÇADO

Otimização de um Reator Industrial de Produção de Álcool Cíclico Utilizando Algoritmos Genéticos

Autor: Igor Ricardo de Souza Victorino

Orientador: Professor Doutor Rubens Maciel Filho

Tese de doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do Título de Doutor em Engenharia Química.

Campinas – São Paulo
29 de Agosto de 2005

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

M338a Victorino, Igor Ricardo de Souza
Otimização de um reator industrial de produção de
álcool cíclico utilizando algoritmos genéticos / Igor
Ricardo de Souza Victorino.--Campinas, SP: [s.n.],
2005.

Orientador: Rubens Maciel Filho
Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Otimização. 2. Algoritmos genéticos. 3. Álcool -
Industria. 4. Reatores químicos – Simulação
(Computadores). 5. Catalisadores. 6. Catálise
heterogênea. I. Maciel Filho, Rubens. II. Universidade
Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia
Química. III. Título.

Titulo em Inglês: Optimization of an industrial reactor of cyclic alcohol
production using genetic algorithms

Palavras-chave em Inglês: Optimization, Cyclic alcohol, Genetic
algorithms, Chemical reactors, Catalytic reactors

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora: Elias Basile Tambourgi, Denis Jose Schiozer, José
Luiz Boldrini, Eduardo Coselli Vasco de Toledo

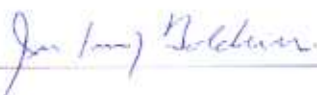
Data da defesa: 29/08/2005

Tese de doutorado defendida por Igor Ricardo de Souza Victorino e aprovada em
29 de Agosto de 2005 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Rubens Maciel Filho – Orientador

FEQ/UNICAMP



Prof. Dr. José Luis Boldrini- Examinador 1

IMECC/UNICAMP



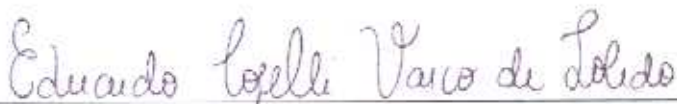
Prof. Dr. Denis José Schiozer- Examinador 2

FEM/UNICAMP



Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi -Examinador 3

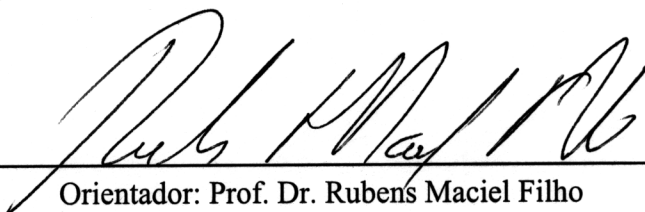
FEQ/UNICAMP



Prof. Dr. Eduardo Coselli Vasco de Toledo- Examinador 4

PESQUISADOR/UNICAMP

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de doutorado em Engenharia Química.



Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

“Agradeço a Deus e Dedico esse trabalho para minha querida esposa Veronica que tanto me proporcionou incentivo, compreensão, apoio, muito carinho e amor, principalmente nos momentos mais difíceis que vivemos. Sua presença foi, e é primordial para minha vida. Obrigado meu Amor por sua existência”.

Agradecimentos

Agradeço àquele sem o qual nada existiria, e que sempre esteve comigo, mesmo antes do meu nascimento: Naquele que tudo pode e me fortalece sempre meu Deus.

À minha querida esposa que sempre esteve ao meu lado, apoiando, incentivando, e sendo muito compreensiva nas nossas dificuldades. Aprendemos muito com as adversidades e problemas e hoje a nossa relação é profundo amor.

Aos meus queridos pais por me trazerem a este mundo, pela educação, amor, e incentivo ao estudo e o desenvolvimento em uma carreira profissional. Mesmo com tantas dificuldades sempre procuraram o melhor e a prosperidade a mim e meus irmãos. Eu os amo muito.

Aos meus irmãos que embora, tenham entendido pouco a minha vida, respeitam e são pessoas importantes na minha formação. Sei que desejam o melhor para mim e eu da mesma forma a eles. Também amo muito eles.

Ao professor Rubens Maciel Filho, que foi a pessoa que apostou em minha carreira, e em minha capacidade, quando não tinha ninguém por perto, foi ele quem me deu essa grande oportunidade profissional, mostrando humanidade, respeito, amizade e muito profissionalismo. Muito Obrigado Professor, de coração.

A Professora Maria Regina, esposa do Professor Rubens, por ter sido uma grande educadora e amiga, a qual teve grande contribuição em meus conhecimentos e formação e como seu esposo é uma pessoa de muito profissionalismo e sensibilidade.

Ao meu grande amigo Agremis que é um grande colaborador que vem me ajudando há muito tempo com sua inteligência, paciência (que paciência....) e dedicação, qualidades que pude aprender, apreciar e conviver. Eu considero como irmão. É uma pessoa que tenho maior apreço por tudo que fez por mim e a retribuição é inimaginável.

A minha nova família, composta por Maria Elisa, Rita, Adéli, Beatriz e família, Magali e família pela preocupação, carinho e respeito.

A Adéli, por ser uma menina doce e amável e ainda por ser a minha mais nova sobrinha, quase irmã, quase cunhada, quase filha.

Aos meus queridos sobrinhos Carolina, Rafael e Ian, os quais me preocupo muito, mas que são motivo de muita alegria e felicidade. Espero poder ser um exemplo extremamente positivo, de luta, dedicação, profissionalismo, decência e honestidade para eles.

Aos meus amigos do LOPCA, Delba, Mylene, Sebastião, Luis Meleiro, Rogério Favinha, Edvaldo, Cristiano, Renata, Aline, Cláudia e todos os outros companheiros que me ajudaram sempre que podiam tanto no aspecto profissional e acadêmico como nas relações de amizade. E a todos os amigos que passaram pelo LOPCA ou pela Faculdade de Engenharia Química e conviveram comigo durante minha estada nesta grande escola. Agradeço àqueles que de forma direta ou indiretamente contribuíram para minha formação e aperfeiçoamento pessoal e profissional.

Ao meu amigo Eduardo Coselli, conhecido como Ursão, pela grande ajuda e informações de grande utilidade para meu desenvolvimento acadêmico e profissional. Além, é claro, de ser uma ótima pessoa e amigo.

Ao amigo João Vicente, popularmente conhecido como Macieira, por sua grande amizade e confiança e que hoje está residindo em Aracajú. Ao amigo José Wilson por sua amizade.

A todos os professores do departamento que nos ensinaram e compartilharam suas amizades, além de todos os professores da Faculdade de Engenharia Química da Unicamp que só acrescentaram em minha vida.

Aos amigos que não mais se encontram nesta vida, pois acredito que “a morte não extingue, transforma” o meu muito obrigado.

Resumo

Nas últimas décadas, com o aumento da competitividade do mercado mundial (redução de custos, preços, aumento da produtividade e eficiência dos processos produtivos), houve um grande interesse em aperfeiçoar e otimizar os diversos processos de variadas plantas químicas existentes. Várias técnicas clássicas de otimização vêm sendo utilizadas para tal objetivo, mas muitas dessas se tornaram ineficientes principalmente quando a complexidade do problema vem se tornando cada vez maior, onde várias questões são abordadas como: número elevado de variáveis dos processos, a não linearidade dos modelos, que fornecem inúmeras soluções possíveis, mas não resolvendo os casos de interesse ou não sendo as ideais. Como alternativa uma nova classe de algoritmos, os chamados algoritmo genéticos (uma categoria dos algoritmos evolucionários) vêm aparecendo e sendo aplicados em diversos casos de otimização, atingido grande popularidade nos últimos anos. Os AGs têm apresentado grande potencialidade e habilidade para resolver problemas de otimização de grande complexidade em diversos campos, incluindo a Engenharia Química. Neste trabalho o principal objetivo é utilizar esta técnica (dos AGs) em um exemplo relacionado a um reator industrial de produção de Álcool Cíclico (AC) otimizando parâmetros operacionais.

O Álcool Cíclico é uma importante matéria-prima na produção de nylon tendo grande interesse comercial. A intenção é mostrar que a técnica é adequada para maximização da produção de AC, obtendo bons resultados com melhoramentos dos parâmetros operacionais (redução de catalisador, redução da temperatura do processo e/ou redução das correntes totais de refrigerante), além de se atentar para as questões ambientais como controle de reagentes não reagidos com extrema toxicidade. Os resultados são promissores mostrando o aumento do desempenho do processo (aumento considerável na produção do AC) com alterações dos parâmetros operacionais analisados.

Esses resultados são excelentes mostrando alto desempenho na produtividade de AC (aumento considerável na produção de AC) com alterações nos parâmetros operacionais analisados. Esses resultados evidenciam que esta nova técnica utilizada é muito promissora e de grande aplicabilidade, não somente para equipamentos individuais, como esse estudo, mas em processos inteiros, podendo ser representados por modelos confiáveis, além de poderem ser aplicados em tempo real, através do controle, manutenção ou melhoria do processo produtivo.

Abstract

In the last decades, with the increase of the competitiveness of the world market (reduction of costs, prices, increase of the productivity and efficiency of the productive processes) there was a great interest in to improve and to optimize the several processes of chemical industries. Several optimization classic techniques have been used with that aim, but many of those techniques are not efficientf, mainly when the complexity of the problem is very larger, where several subjects are approached as: high number of variables of the processes, the non-linearity of the models, that supply several possible solutions, therefore not solving the interest cases. As alternative, a new class algorithms, denominated of genetic algorithms (a evolutionary algorithms category) being applied in several optimization cases, reaching great popularity in the last years. The Genetic Algorithms (GAs) have presented great potentiality and ability to solve complex optimization problems in several fields, including the Chemical Engineering.

In this work, the main objective is to use this technique (GAs) in an example related to a Cyclic Alcohol (CA) production industrial reactor, optimizing some important operational parameters. The Cyclic Alcohol is an important material for the nylon, of great commercial interest. The interest of this work is to show that the genetic algorithms technique can be useful to CA production maximization, obtaining good results with improvements of the operational parameters (catalyst reduction, reduction of the temperature of the process and/or reduction of the total cooling fluid). Some cares should be considered, mainly when reactants emissions (main reactant) happen in high concentrations causing damages to the environmental, needing to control these emissions because high toxicity.

The results are excellent, showing high performance in the CA productivity (considerable increase CA production) with changes in operational parameters analyzed. Those results evidence that this new technique is very promising and great applicability, not only for individual equipments, as this study case (production reactor), but in complete and complex processes that can be represented by a reliable model besides to be applicable in real time, through control, maintenance and improvement of the production process.

Sumário

Dedicatória	i
Agradecimentos	ii
Resumo	iv
Abstract	v
Sumário	vi
Nomenclatura.....	xv
 Capítulo I – Introdução	 1
I.1 Introdução	1
I.2 Objetivos	2
I.3 Principais Contribuições	3
I.4 Etapas do Estudo	4
 Capítulo II - Algoritmos Genéticos – Teoria e Fundamentos.....	 7
II.1 Introdução aos Algoritmos Genéticos – Teoria e Fundamentos.....	7
II.2 Vantagens e Desvantagens dos Algoritmos Genéticos.....	20
II.2.1 Vantagens dos Algoritmos Genéticos.....	20
II.2.2 Desvantagens dos Algoritmos Genéticos.....	22
II.3 Histórico – Bases Biológicas – Darwin Versus Lamark.....	22
II.3.1 A Teoria da Evolução Natural.....	26
II.3.2 Seleção Natural.....	28
II.3.3 Precursores e Origens dos Algoritmos Genéticos.....	29
II.4 Definições Básicas - Terminologia.....	32
II.5 Representação dos Parâmetros.....	35
II.6 Critérios para Implantação dos Algoritmos Genéticos.....	35
II.7 Estruturação dos Algoritmos Genéticos.....	37
II.8 Parâmetros Genéticos.....	41
II.9 Mecanismos de Amostragem de Populações.....	42
II.10 Funcionamento dos Algoritmos Genéticos.....	44
II.10.1 Processo Evolutivo dos Algoritmos Genéticos.....	45

II.10.2 Hipóteses dos Blocos de Construção.....	47
II.10.3 Teorema Fundamental dos Algoritmos Genéticos.....	48
II.10.4 Teorema dos Esquemas – Validade dos Algoritmos Genéticos.....	52
II.10.5 Paralelismo Implícito.....	55
II.10.6 Visão Geométrica dos Esquemas.....	58
II.11 Aspectos Principais dos Algoritmos Genéticos.....	59
II.11.1 Codificação dos Parâmetros.....	59
II.11.1.1 Codificação Binária.....	59
II.11.1.2 Codificação Gray.....	60
II.11.1.3 Codificação Real.....	61
II.11.1.4 Codificação Binária Versus Real.....	62
II.11.2 Geração da População Inicial.....	63
II.11.3 Avaliação da População.....	63
II.11.4 Tipos de Seleção.....	64
II.11.4.1 Descrição Formal de um Método de Seleção.....	65
II.11.4.2 Seleção Proporcional Via Método da Roleta.....	75
II.11.4.3 Seleção Estocástica.....	77
II.11.4.4 Seleção por Ordenação ou Rank: Linear e Exponencial.....	77
II.11.4.5 Seleção por Torneio.....	86
II.11.4.6 Seleção por Elitismo.....	93
II.11.4.7 Estado Fixo - Steady State.....	94
II.11.4.8 Outros Métodos de Seleção.....	95
II.12 Reprodução e Operadores para Algoritmos Genéticos.....	95
II.12.1 Modelos e Operadores.....	96
II.12.2 Recombinação – Mutação.....	97
II.12.2.1 Recombinação ou Cruzamento.....	98
II.12.2.1.1 Operadores de Recombinação Genotípica.....	99
II.12.2.1.2 Operadores de Recombinação Fenotípica.....	103
II.12.2.1.3 Operadores para Algoritmos Genéticos em Codificação Real.....	104
II.12.2.1.4 Operadores de Recombinação Específicos.....	105
II.12.2.2 Mutação.....	106
II.12.2.2.1 Mutação nos Algoritmos Genéticos.....	106

II.12.2.2.2 Operadores Característicos.....	107
II.13 A Diversidade nos Algoritmos Genéticos.....	109
II.14 Técnicas para Melhoria da Convergência dos Algoritmos Genéticos.....	110
II.14.1 Escalonamento.....	111
II.14.2 Variação Dinâmica de Probabilidades.....	111
II.14.3 Formação de Nichos.....	112
II.14.4 Redução do Espaço de Busca.....	113
II.14.5 Elitismo.....	113
II.15 Seleção das Funções de Avaliação e Aptidão.....	114
II.16 Outras Estratégias Ligadas aos Algoritmos Genéticos.....	117
II.16.1 Tratamento das Restrições.....	117
II.16.2 Função de Desempenho com Valores Positivos.....	119
II.16.3 Transformando Problemas de Minimização em Maximização.....	119
II.16.4 Problemas com Múltiplos Objetivos.....	120
II.16.5 Hibridização.....	121
II.16.6 Paralelismo nos Algoritmos Genéticos.....	121
II.16.6.1 Modelo de Farming.....	123
II.16.6.2 Modelo Ilha.....	124
II.16.6.3 Modelo da Vizinhança (Difusão).....	124
II.16.6.4 Time de Algoritmos.....	126
II.16.7 Sistemas Adaptativos.....	127
II.16.8 População Inicial Distribuída Uniformemente.....	127
II.17 Trabalhos sobre Algoritmos Genéticos Aplicados em Processos Químicos.....	128
Capítulo III - Descrição do Processo Reacional.....	159
III.1 Descrição do Processo Reacional - Reator de Álcool Cíclico.....	159
III.1.1 Modelagem Matemática do Reator de Álcool Cíclico.....	162
III.1.1.1 Balanço de Massa.....	166
III.1.1.2 Balanço de Energia para o Fluido Reagente.....	168
III.1.1.3 Balanço de Energia para o Fluido Refrigerante.....	169
III.1.1.4 Cálculo Flash.....	170
III.1.1.5 Descrição do Cálculo da Temperatura de Entrada do Refrigerante.....	172

III.1.1.6 Descrição do Cálculo da Pressão de Entrada do Refrigerante.....	173
III.1.1.7 Queda de Pressão.....	173
III.1.1.8 Transferência de Calor.....	178
III.1.1.9 Coeficiente Global de Transferência de Calor.....	188
III.2 Cálculo das Propriedades Físico-Químicas.....	189
III.2.1 Propriedades Físico-Químicas.....	190
Capítulo IV - Procedimentos para Otimização.....	201
IV.1 Procedimentos para Otimização.....	201
IV.1.1 Introdução.....	201
IV.1.2 Considerações para Otimização do Reator de Álcool Cíclico.....	205
IV.1.3 Procedimento para o Cálculo dos Perfis do Modelo do Reator.....	206
IV.1.4 Procedimento para a Otimização do Modelo do Reator.....	207
IV.1.5 Determinação e Codificação dos Parâmetros.....	210
IV.1.6 Sistemas de Produção a Otimizar.....	211
IV.1.7 Definição do Tamanho das Sub-Séries e Total do Cromossomo.....	215
IV.1.8 Critérios Adotados para Otimização.....	219
IV.2 Análise e Influência dos Parâmetros do Código Genético.....	223
IV.2.1 Análise da Influência do Tamanho Populacional, da Forma de Cruzamento e das Taxas de Cruzamento.....	224
IV.2.2 Análise da Influência das Taxas de Mutação Uniforme e de Arraste e da Busca em Nichos.....	224
IV.2.3 Análise da Influência das Taxas de Mutação de Arraste Mantendo a Mutação Uniforme Fixa e Sem Utilização de Busca em Nichos.....	225
IV.2.4 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Mantendo a Mutação de Arraste Fixa e Sem Utilização de Busca em Nichos.....	225
IV.2.5 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Não Utilizando Mutação de Arraste e Com Utilização de Busca em Nichos.....	225
IV.2.6 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Não Utilizando Mutação de Arraste e Sem Utilização de Busca em Nichos.....	226
IV.2.7 Análise dos Perfis dos Melhores Casos Otimizados em Comparação Com a Situação Não Otimizada.....	226

Capítulo V - Resultados da Otimização.....	227
V.1 Resultados da Otimização.....	227
V.1.1 Análise do Nível 1 de Produção de Álcool Cíclico.....	229
V.1.2 Análise da Influência do Tamanho Populacional, da Forma de Cruzamento e das Taxas de Cruzamento na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 1 de Produção.....	229
V.1.3 Análise da Influência das Taxas de Mutação Uniforme e de Arraste e da Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 1 de Produção.....	239
V.1.3.1 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Com Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 1 de Produção.....	239
V.1.3.2 Análise da Influência da Taxa de Mutação de Arraste Com Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 1 de Produção.....	247
V.1.3.3 Análise da Influência da Taxa de Mutação de Arraste Mantendo a Mutação Uniforme Fixa e Sem Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 1 de Produção.....	254
V.1.3.4 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Mantendo a Mutação de Arraste Fixa e Sem Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 1 de Produção.....	258
V.1.3.5 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Não Utilizando Mutação de Arraste e Com Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 1 de Produção.....	263
V.1.3.6 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Não Utilizando Mutação de Arraste e Sem Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 1 de Produção.....	267
V.1.4 Síntese das Análises do Nível 1 de Produção.....	271
V.2 Análise do Nível 2 de Produção de Álcool Cíclico.....	278
V.2.1 Análise da Influência do Tamanho Populacional, da Forma de Cruzamento e das Taxas de Cruzamento na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 2 de Produção.....	280
V.2.2 Análise da Influência das Taxas de Mutação Uniforme e de Arraste e da Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 2 de	

Produção.....	289
V.2.2.1 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Com Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 2 de Produção.....	290
V.2.2.2 Análise da Influência da Taxa de Mutação de Arraste Com Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 2 de Produção.....	297
V.2.2.3 Análise da Influência da Taxa de Mutação de Arraste Mantendo a Mutação Uniforme Fixa e Sem Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 2 de Produção.....	304
V.2.2.4 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Mantendo a Mutação de Arraste Fixa e Sem Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 2 de Produção.....	309
V.2.2.5 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Não Utilizando Mutação de Arraste e Com Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 2 de Produção.....	313
V.2.2.6 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Não Utilizando Mutação de Arraste e Sem Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 2 de Produção.....	317
V.2.3 Síntese das Análises do Nível 2 de Produção.....	321
V.3 Análise do Nível 3 de Produção de Álcool Cíclico.....	329
V.3.1 Análise da Influência do Tamanho Populacional, da Forma de Cruzamento e das Taxas de Cruzamento na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 3 de Produção.....	330
V.3.2 Análise da Influência das Taxas de Mutação Uniforme e de Arraste e da Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 3 de Produção.....	340
V.3.2.1 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Com Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 3 de Produção.....	341
V.3.2.2 Análise da Influência da Taxa de Mutação de Arraste Com Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 3 de Produção.....	347
V.3.2.3 Análise da Influência da Taxa de Mutação de Arraste Mantendo a Mutação Uniforme Fixa e Sem Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 3 de Produção.....	354

V.3.2.4 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Mantendo a Mutação de Arraste Fixa e Sem Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 3 de Produção.....	358
V.3.2.5 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Não Utilizando Mutação de Arraste e Com Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 3 de Produção.....	362
V.3.2.6 Análise da Influência da Taxa de Mutação Uniforme Não Utilizando Mutação de Arraste e Sem Utilização de Busca em Nichos na Produtividade de Álcool Cíclico do Nível 3 de Produção.....	367
V.3.3 Síntese das Análises do Nível 3 de Produção.....	371
V.4 Discussão dos Resultados.....	379
Capítulo VI - Conclusões e Recomendações para Trabalhos Futuros.....	383
VI.1 Conclusões.....	383
VI.2 Recomendações para Trabalhos Futuros.....	387
Capítulo VII – Referências Bibliográficas.....	391
VII.1 Referências Bibliográficas.....	391
Apêndice I - Computação Natural.....	423
AI.1 Computação Natural.....	423
AI.1.1 Recozimento Simulado.....	424
AI.1.2 Fractais.....	424
AI.1.3 Sistemas Complexos.....	425
AI.1.4 Vida Artificial.....	427
AI.1.5 Inteligência Artificial.....	428
AI.2 Inteligência Computacional.....	430
AI.2.1 Redes Neurais Artificiais.....	431
AI.2.2 Lógica Fuzzy.....	431
AI.2.3 Agentes Autônomos.....	432
AI.2.4 Computação Evolutiva.....	432
AI.2.4.1 Algoritmos Genéticos.....	436

AI.2.4.2 Estratégias Evolutivas (Evolucionárias ou de Evolução).....	437
AI.2.4.3 Programação Evolutiva ou Evolucionária.....	437
AI.2.4.4 Sistemas Classificadores.....	438
AI.2.4.5 Programação Genética.....	438
AI.2.4.6 Estratégias de Colônia.....	439
AI.3 Conclusão.....	439
Apêndice II - Otimização e Métodos.....	441
AII.1 Introdução à Otimização.....	441
AII.2 Programação Matemática.....	443
AII.2.1 Programação Linear.....	449
AII.2.2 Programação Não-Linear.....	450
AII.2.2.1 Otimização sem Restrições.....	451
AII.2.2.2 Otimização com Restrições.....	452
AII.2.2.2.1 Otimização com Restrições de Igualdade.....	453
AII.2.2.2.1.1 Método do Lagrangiano.....	454
AII.2.2.2.1.2 Método da Penalidade.....	457
AII.2.2.2.1.3 Método do Lagrangiano Aumentado (MLA).....	458
AII.2.2.2.2 Otimização com Restrições de Desigualdade.....	459
AII.2.2.2.2.1 Métodos da Penalidade.....	460
AII.2.2.2.2.2 Método do Lagrangiano Aumentado.....	461
AII.2.2.2.3 Otimização com Restrições Mistas.....	462
AII.2.2.2.3.1 Método da Penalidade.....	462
AII.2.2.2.3.2 Método do Lagrangiano Aumentado.....	463
AII.2.3 Programação Multi-Objetivos.....	464
AII.3 Otimização de Processos Químicos e Métodos de Otimização mais Aplicados.....	465
AII.3.1 Método da Programação Quadrática Sucessiva.....	471
AII.3.2 Resolução de Problemas de Programação Não-Linear em Processos Químicos.....	473
AII.3.2.1 Método da Programação Linear Sucessiva.....	473
AII.3.2.2 Métodos das Funções Penalidades.....	474

AII.3.2.3. Métodos de Gradiente Projetado e Gradiente Reduzido.....	474
AII.3.2.4 Métodos dos Lagrangianos Aumentados.....	475
AII.4 Conclusão.....	476
 Apêndice III - Produção de Álcool Cíclico - Reatores Trifásicos.....	 477
AIII.1 Introdução.....	477
AIII.2 Processo de Produção do Álcool Cíclico a Partir da Hidrogenação do Álcool Benzílico.....	477
AIII.3 Reatores Trifásicos.....	481
AIII.3.1 Introdução.....	481
AIII.3.2 Ocorrência dos Reatores Trifásicos.....	482
AIII.3.3 Tipos de Reatores Trifásicos.....	485
AIII.3.3.1 Reatores com Sólidos em Movimento.....	486
AIII.3.3.2 Reatores com Sólidos Estacionários.....	488
AIII.3.4 Comparação entre Reatores com Partículas Estacionárias e com Partículas em Movimento.....	490
AIII.3.5 Vantagens e Desvantagens dos Reatores Trifásicos.....	492
AIII.3.6 Fenômenos Fundamentais em Reatores Trifásicos.....	493
AIII.3.7 Modelagem Matemática de Reatores Trifásicos.....	497
 Apêndice IV - Rotinas e Sub-Rotinas do Código Genético.....	 503
AIV.1 Rotinas e Sub-Rotinas.....	503

Nomenclatura

Símbolo	Significado	Unidade
$\nu_i's$	Coefficiente estequimétrico das espécies	
a	Constante cinética da reação principal	
A_1	Fator pré-exponencial da constante cinética k_1	(mol/(min.g))
A_2	Fator pré-exponencial da constante cinética k_2	(mol/(min.g))
A_3	Fator pré-exponencial da constante cinética k_3	(mol/(min.g))
$A_{E,3}$	Área de troca térmica em relação ao diâmetro D_{3e}	(m ²)
$A_{I,3}$	Área de troca térmica em relação ao diâmetro D_{3i}	(m ²)
b	Constante cinética da reação secundária	
c_{cat}	Concentração de catalisador	kg/m ³
cp_G	Capacidade calorífica do gás do fluido reagente	kcal/(m ² .h.°C)
cp_L	Capacidade calorífica da mistura líquido-sólido do fluido reagente	kcal/(m ² .h.°C)
cp_R	Capacidade calorífica do fluido refrigerante	kcal/(m ² .h.°C)
D_1	Diâmetro do tubo 1 do módulo tubular	(m)
D_2	Diâmetro do tubo 2 do módulo tubular	(m)
D_3	Diâmetro do tubo 3 do módulo tubular	(m)
D_4	Diâmetro do tubo 4 do módulo tubular	(m)
E'_1	Relacionado com a energia de ativação de k_1	(°C)
E'_2	Relacionado com a energia de ativação de k_2	(°C)
E'_3	Relacionado com a energia de ativação de k_3	(°C)
$F_{at,A}$	Efetividade da reação principal	(-)
$F_{at,B}$	Efetividade da reação secundária	(-)
F_{A0}	Fluxo molar de álcool benzílico na entrada do reator	(mol/min)
F_{B0}	Fluxo molar de álcool cíclico na entrada do reator	(mol/min)
F_{-e}	Parâmetro relacionado com o equilíbrio líquido-vapor do fluido reacional	(-)
F_G	Fluxo molar da fase gasosa (reagentes)	(mol/min)
F_L	Fluxo molar da suspensão líquido-sólida (reagentes)	(mol/min)

F_d	Fator de desvio relativo do critério de Hanika	(-)
ΔH_1	Calor de reação da reação principal	(kcal/kmol)
ΔH_2	Calor de reação da reação secundária	(kcal/kmol)
$Han1$	Primeiro fator do critério de Hanika	(-)
$Han2$	Segundo fator do critério de Hanika	(-)
$h_{E,3}$	Coeficiente de troca térmica entre o fluido reagente e a caldeira, do lado da caldeira	(kcal/(°C.h.m ²))
$h_{I,3}$	Coeficiente de troca térmica entre o fluido reagente e a caldeira, do lado do fluido reagente	(kcal/(°C.h.m ²))
H_V	Calor latente de vaporização	(j/kg)
k_1	Constante cinética da reação principal	(mol/(min.g))
X	Conversão da reação	
T_{R0}	Temperatura de alimentação do refrigerante	(°C)
$\left(\frac{dp}{dz}\right)_f$	Queda de pressão por fricção	$\left(\frac{kgf / cm^2}{m}\right)$
$\left(\frac{dp}{dz}\right)_a$	Queda de pressão aceleracional	$\left(\frac{kgf / cm^2}{m}\right)$
$\left(\frac{dp}{dz}\right)_g$	Queda de pressão gravitacional	$\left(\frac{kgf / cm^2}{m}\right)$
$TQ2$	Tanque de armazenamento	
$TQ3$	tanque de mistura	
$TQ1$	tanque de separação de produtos da reação e do catalisador	
TC	Trocador de calor	
RX	Reator	
k_2	Constante cinética da reação principal	(mol/(min.g))
k_3	Constante cinética da reação secundária	(mol/(min.g))
K	Constante cinética da reação principal	(-)
MM	Peso molecular	(kg/kmol)
P	Pressão ao longo do reator	(kg/cm ²)
P_{ca}	Pressão de operação da caldeira	(kg/cm ²)
P_c	Pressão crítica da água	(kg/cm ²)

P_r	Pressão reduzida de operação (P^{ca}/P_c)	(-)
P_S	Pressão de vapor da suspensão (reagente) à temperatura T	(kg/cm ²)
P_S^{ca}	Pressão de saturação do fluido na caldeira à temperatura de operação da caldeira	(kg/cm ²)
$P_{S,4}$	Pressão de saturação do fluido na caldeira à $T_{w,4}$	(kg/cm ²)
$Q_{ri's}$	Vazão mássica de fluido refrigerante	(kg/h)
Q_{cat}	Vazão mássica de catalisador	(kg/h)
R_{eAB}	Taxa de reação de consumo de álcool benzílico (reação principal)	(mol/(min.m ³))
R_{eAC}	Taxa de reação de formação de álcool cíclico (reação secundária)	(mol/(min.m ³))
R_w	Resistência à transferência de calor por condução ao longo do módulo tubular	(h.°C/kcal)
T	Temperatura do fluido reacional ao longo do módulo tubular	(°C)
T_O	Temperatura do fluido reacional na entrada do reator	(°C)
T_R	Temperatura do fluido refrigerante ao longo do módulo tubular	(°C)
T_s	Temperatura de saturação da caldeira	(°C)
$T_{w,4}$	Temperatura da parede do tubo 4	(°C)
U_1	Coeficiente global de troca térmica entre a região tubular (fluido reagente) e a região anular interna (fluido refrigerante)	(kcal/(m ² .h.°C))
U_2	Coeficiente global de troca térmica entre a 2ª região anular (fluido refrigerante) e a região anular externa (fluido reagente)	(kcal/(m ² .h.°C))
U_3	Coeficiente global de troca térmica entre a região anular externa (fluido reagente) e a caldeira	(kcal/(m ² .h.°C))
x_A	Fração molar de álcool benzílico na fase líquida	(-)
x_B	Fração molar de álcool cíclico na fase líquida	(-)
x_A^c	Conversão da reação para o álcool benzílico	(-)
x_B^c	Conversão da reação para o álcool cíclico	(-)

z	Posição ao longo do módulo anular	(m)
p_A	Pressão parcial do gás sobre o líquido ou solução	(atm)
A^*	Concentração do soluto no líquido em equilíbrio	(mol/L)
H	Constante da lei de Henry	(atm.L/mol)
ALife	Artificial Life ou Vida Artificial	

Letras Gregas

λ	Condutividade térmica	(kcal/(m.h.°C))
ρ	Densidade	(kg/m ³)
σ	Tensão superficial	(kg/s ²)
μ	Viscosidade dinâmica	(cP)

Superescritos:

ca	Referente a caldeira
vap	Referente a pressão, temperatura de saturação do líquido

Subscritos:

AB	Referente ao Álcool Benzílico
AC	Referente ao Álcool Cíclico
C	Referente ao Alcano Cíclico ou Cicloalcano
e	Referente ao diâmetro externo do tubo
Ideal	Referente ao cálculo do equilíbrio líquido vapor ideal
i	Referente ao diâmetro interno do tubo
G	Referente à fase gasosa
j	Referente ao módulo tubular
L	Referente à fase líquida

$L(x, \lambda)$	Função Lagrangiana
$P(x, \xi)$	Função de Penalidade
$A(x, \lambda, \xi)$	Lagrangiano Aumentado

SGA	Algoritmo genético básico (Simple Genetic Algorithm)

H	Representação do esquema
$o(H)$	Ordem do esquema
$f(H)$	Função de desempenho
n_{pop}	Número de indivíduos totais da população
f_{med}	Médias de desempenhos da população
ℓ	Estrutura de comprimento ou comprimento do cromossomo ou da cadeia de caracteres
$\delta(H)$	Comprimento de definição (descreve a distância entre as posições fixas nas posições extremas)
m	Número de representantes
p_{sel}	Probabilidade de seleção
S	Cadeia de caracteres
p_d	Probabilidade de destruição do esquema
p_c	Probabilidade de cruzamento ou taxa de cruzamento

Código Genético

<i>Fitness</i>	Avaliação da resposta (qualidade)
<i>strings</i>	Séries de bits (cromossomos ou indivíduos)
npz	Tamanho da população inicial ou população inicial
npopsiz	Tamanho da população inicial ou população inicial
Un	Forma de cruzamento uniforme
UP	Forma de cruzamento em um ponto
TxCz	Taxa de cruzamento

IA	Inteligência Artificial
IC	Inteligência Computacional
CE	Computação Evolutiva
AG	Algoritmos Genético
AGs	Algoritmos Genéticos
GA	Genetic Algorithm
AEs	Algoritmos Evolucionários

EES	Estratégias Evolucionárias ou Evolutivas
PE	Programação Evolucionária ou Evolutiva
PG	Programação Genética
CA	Cyclic alcohol
BA	Benzilic alcohol
C	Cycloalkane

Capítulo I

Introdução

I.1 INTRODUÇÃO

A indústria química mundial, nos últimos 15 anos vem sofrendo mudanças significativas devido ao aumento de custo e de energia e as regulamentações ambientais inerentes. Várias modificações nos procedimentos de projeto e condições de operação das plantas químicas têm sido implementadas para redução dos custos e restrições aos processos. Muitos técnicos e profissionais do setor acreditam que no futuro as atenções serão voltadas para melhoria da eficiência e lucratividade, antes das expansões das plantas. Uma das ferramentas mais importantes a ser implementada é a otimização, aliada a computadores de alto desempenho, o tamanho e complexidade dos problemas podem ser resolvidos por técnicas de otimização, tornando problemas complexos e de difícil solução possíveis de serem solucionados, indicando planejamento, caminhos e diretrizes, aos quais podem ajudar em um melhor desempenho dos variados processos químicos.

Nos tempos atuais, em nosso país, os mercados vêm se tornando cada vez mais competitivos nos seus diversos seguimentos, a abertura comercial global condiciona a entrada de produtos estrangeiros com preços altamente competitivos, ou em muitos casos se não a maioria, com preços bem menores em relação ao produto equivalente nacional, a demanda por produtos que requerem alta qualidade, levando-se em conta as questões ambientais (maior rigor nas leis), fez aumentar o interesse das indústrias nacionais em

melhorar a qualidade e o desempenho dos processos químicos existentes com a tarefa de realização de otimização destes para tornar o produto nacional competitivo à altura de seus concorrentes estrangeiros considerando todos os aspectos de legalidade, qualidade e custos.

Os algoritmos de otimização têm atingido um grau de maturidade em anos recentes devido às evoluções extensivas das técnicas propostas em uma larga faixa de problemas. Várias técnicas vêm sendo utilizadas, com sucesso ou não, mas entre todas estas, uma das mais recentes e que vem se destacando e sendo muito aplicada no cenário industrial e em engenharia, é a técnica dos Algoritmos Genéticos (AGs).

Os Algoritmos Genéticos são uma ferramenta de pesquisa e otimização, os quais trabalham diferentemente comparados aos métodos clássicos. Esta técnica é uma versão computacional da teoria da evolução natural e da genética das espécies. Por causa desta larga aplicabilidade, facilidade de utilização e perspectiva global, os AGs têm sido aplicados de forma crescente em vários problemas complexos nos últimos anos, principalmente na área industrial.

I.2 OBJETIVOS

O objetivo principal deste trabalho foi a adaptação e aplicação de um código genético (Algoritmos Genéticos) acoplado ao modelo do reator de produção de Álcool Cíclico (AC), ou seja, desenvolvimento de uma estratégia de otimização do modelo reacional. A partir do desenvolvimento desta estratégia realizar o processo de otimização de parâmetros operacionais de um reator de produção de Álcool Cíclico de interesse a partir da hidrogenação de um Álcool Benzílico (AB), levando-se em consideração os limites desses parâmetros, as restrições relacionadas a reagentes não consumidos e subprodutos como taxas máximas permitidas e condições de operacionalidade do reator. Pretende-se a partir deste estudo específico de acoplamento (entre o código genético e o modelo reacional do Álcool Cíclico), criar uma metodologia a ser adaptada e aplicada em outros processos

químicos utilizando este código genético e que permita seu acoplamento e junção a outros modelos, não só em estado estacionário como da forma dinâmica em diversos processos.

Em particular, este processo foi escolhido por diversos fatores entre os quais:

- Este tipo de Álcool Cíclico é matéria prima para a produção de diversos produtos de grande interesse comercial, como o nylon;
- O reator de produção deste específico processo de produção do Álcool Cíclico é multifásico e complexo;
- Um grande gasto energético na unidade, principalmente no reator (associado a pressões e temperaturas elevadas de operação) e questões ambientais são de grande consideração e importância.

Neste estudo, além da otimização dos parâmetros operacionais, pretende-se analisar os parâmetros inerentes aos algoritmos genéticos considerados neste código genético que podem influenciar no desempenho da produção do Álcool Cíclico de interesse (AC). Os modelos são escolhidos de forma a reproduzirem dados industriais utilizando modelos simples, tipo de mistura.

I.3 PRINCIPAIS CONTRIBUIÇÕES

Ressalta-se neste trabalho o desenvolvimento de uma nova metodologia de otimização (código de otimização) para um reator químico complexo como alternativa às metodologias clássicas existentes com o objetivo de melhorar a produtividade.

Neste contexto é feito um ajuste dos parâmetros operacionais dos modelos matemáticos considerados para produção de Álcool Cíclico utilizando dados do processo das diferenciadas etapas produtivas. Além de favorecer ao meio científico, com evidências

práticas de melhoria no desempenho do reator, a possibilidade de implementação em outros processos reacionais dos mais diversos encontrados na indústria química.

Uma análise das influências dos parâmetros genéticos no desempenho do reator, com possibilidade de aumento da produção.

Apesar de ser aplicado em um reator (um equipamento apenas), a técnica pode se estender à aplicabilidade para outros equipamentos de processo, bem como sua aplicação em um processo maior (global) contendo não só, equipamentos reacionais mas todo o conjunto produtivo de um processo industrial, como equipamentos de operações unitárias entre outros.

I.4 ETAPAS DO ESTUDO

A organização do trabalho ocorre da seguinte forma:

No Capítulo II, a revisão bibliográfica inicia-se com a descrição da técnica dos Algoritmos Genéticos (AGs), destinado a explicar e descrever de forma completa, mecanismo, funcionamento destes algoritmos e todos os operadores que estão envolvidos no funcionamento desta técnica, alternativas para melhorar o desempenho, situações híbridas e outras, sendo complementada pelos Apêndices I e II que relatam uma introdução e descrição das áreas da computação natural, mostrando as ramificações e qual parte se inserem os estudos dos Algoritmos Genéticos dentro do universo da Inteligência Computacional (Apêndice I) e as técnicas de otimização (métodos de otimização), normalmente utilizadas na Engenharia Química e em diversos trabalhos de pesquisa nos últimos anos (métodos convencionais de resolução de problemas não lineares) (Apêndice II).

O Capítulo III, da revisão bibliográfica, faz uma descrição sobre o processo reacional de produção do Álcool Cíclico de interesse (processo industrial), fazendo-se uma discussão do modelo matemático do reator considerado, baseado no modelo proposto por Santana e Maciel Filho (1995), descrevendo os principais fenômenos do reator, a modelagem matemática envolvida (balanço de massa, energia e de momento), todas equações pertinentes ao processo reacional e todos os cálculos das propriedades físicas das substâncias envolvidas no processo. O complemento relacionado ao processo completo para a produção deste álcool (unidades e sub-unidades) é apresentado de forma sintetizada e se encontra no Apêndice III com uma introdução e conhecimentos básicos sobre reatores trifásicos.

O Capítulo IV apresenta a descrição dos procedimentos para otimização, com os casos de estudo e as estratégias que são adotadas para realização da otimização dos parâmetros operacionais do reator de produção de Álcool Cíclico com o objetivo de aumento da produção, sendo neste caso definido a seleção de alguns parâmetros dos Algoritmos Genéticos que podem influenciar o desempenho do reator. A complementação deste capítulo referenciando algumas sub-rotinas do código de otimização utilizado encontra-se no Apêndice IV.

No Capítulo V são apresentados os resultados obtidos pelas otimizações dos parâmetros operacionais do reator com os Algoritmos Genéticos, levando-se em conta as diversas estratégias adotadas no estudo, relacionadas aos parâmetros genéticos enfocando a análise de alguns destes parâmetros de importância e os perfis e desempenhos reacionais dos principais produtos, sub-produtos e reagentes do processo reacional, principalmente do Álcool Cíclico, com o objetivo de melhorar o desempenho do reator quando relacionado ao aumento de produção concomitantemente com diminuição de custos relacionados à diminuição de sub-produtos e reagentes tóxicos.

No Capítulo VI são apresentados as conclusões do estudo, pertinentes a esta etapa do trabalho e as sugestões, prognósticos e cronograma para serem realizados na apresentação final do trabalho e para outros trabalhos futuros.

No Capítulo VII são apresentadas as referências bibliográficas onde foram obtidos todas as informações e assuntos desta dissertação.

Por último tem-se a seção de apêndices que serve como complemento de diversos assuntos mencionados nos diversos capítulos de revisão bibliográfica.

Capítulo II

Algoritmos Genéticos – Teoria e Fundamentos

II.1 INTRODUÇÃO AOS ALGORITMOS GENÉTICOS – TEORIA E FUNDAMENTOS

Desde o surgimento da humanidade, o homem tem se servido das características e princípios existentes na natureza com o objetivo de criar objetos e outras situações que lhe favoreçam na vida diária (Silva (2001)). As grandes empresas dominam os mercados e esse domínio é relacionado aos produtos altamente competitivos e de grande concorrência. Estas corporações promovem a busca de soluções que conduzam a um melhor aproveitamento de recursos, menores custos, alto desempenho entre outras variantes (Soares (1997)). Outras criações estão representadas por máquinas, métodos e técnicas que tem como objetivo a melhoria em sua vivência neste planeta. Exemplos típicos podem ser citados de invenções como: aviões imitando as características dos pássaros, submarinos como sistemas de imersão semelhantes aos dos peixes, dentre outros (Castro (1999; 2001) e Silva (2001)).

Recentemente são utilizadas técnicas inspiradas na natureza ou na biologia de uma forma geral, como as Redes Neurais fundamentadas no funcionamento do cérebro humano fornecendo aos computadores a denominada “Inteligência Artificial” comentada no Apêndice I, bem como outras áreas de estudo como a Computação Natural e áreas correlatas.

O projeto genoma iniciado há alguns anos, onde objetiva realizar o mapeamento de todos os genes do corpo humano para identificar bilhões de seqüências genéticas de cromossomos tem como intenção conhecer e pode prevenir, antes do nascimento, a possibilidade de cada ser humano desenvolver doenças de cunho hereditário, procurando dessa forma, evitá-las através de terapias genéticas ou agir, interferindo no estilo de vida do portador da mutação (Castro (1999; 2001) e Silva (2001)).

Pesquisas relativas às clonagens vêm sendo realizadas, causando debates e controvérsias, principalmente na aplicação desses conhecimentos. Muitos dessas aplicações práticas ligadas às doenças (forma de curá-las) promovem grandes vantagens, mas devido à possibilidade de criação e surgimento de novas doenças, mutações e outros fatores, por ainda não dominarem plenamente a técnica, vêm causando muita descrença e dúvidas na realização prática desses estudos.

As técnicas clássicas de otimização são bem difundidas e muito utilizadas sendo muito confiáveis possuindo aplicações nos diversos campos da engenharia e de outras ciências. Porém estas técnicas podem apresentar algumas dificuldades numéricas e problemas de robustez relacionados com a falta de continuidade das funções a serem otimizadas ou de suas restrições, funções não convexas, multi-modalidade, existência de ruídos nas funções, necessidade crescente de se trabalhar com valores discretos para determinadas variáveis, existência de mínimos e máximos locais, etc.. Por estes motivos, os estudos de métodos heurísticos, com busca randômica controlada por critérios probabilísticos, vêm aparecendo como uma forte tendência nos últimos anos, principalmente devido ao avanço dos recursos computacionais, pois um fator limitante destes métodos é a necessidade de um número elevado de avaliações da função objetivo (Schwefel e Taylor (1994)). Uma breve descrição das principais técnicas de otimização não lineares utilizadas na área de Engenharia Química são apresentadas no Apêndice II.

A metodologia dos Algoritmos Genéticos que são mecanismos de buscas, baseados nos processos de seleção natural de luta pela vida e da genética de populações.

Trata-se de um método pseudo-aleatório, por isso diz-se que é um método com procedimento exploração inteligente, em uma região de parâmetros codificados (Braga (1998)).

O surgimento dos Algoritmos Genéticos ocorreu por volta de 1950 quando vários biólogos usavam técnicas computacionais para simulação de sistemas biológicos. Entre 1960 e 1970, na Universidade de Michigan, dirigido por John Holland (1975), iniciou-se o estudo de Algoritmos Genéticos. Em seu livro de 1975 “Adaptation in Natural and Artificial Systems”, Holland apresentou os Algoritmos Genéticos como uma abstração da evolução biológica, proporcionando assim toda a sua base teórica (Mitchell (1999)). Segundo Goldberg (1989), os dois principais objetivos da pesquisa de Holland eram: abstrair e explicar rigorosamente os processos adaptativos dos sistemas naturais, e desenvolver softwares de sistemas artificiais capazes de simular a robustez (Goldberg (1989) ou em Bornholdt e Sneppen (2000)) dos mecanismos dos sistemas naturais. David Goldberg (1989) apresentou a solução de problemas complexos de engenharia utilizando os Algoritmos Genéticos, o que promoveu a popularidade do método entre os pesquisadores.

Inspirados na teoria de Darwin (descrita no tópico 2.4), apresentada através de seu livro “Origem das Espécies”, onde uma população de indivíduos, durante várias gerações, desenvolve-se segundo os princípios da Seleção Natural e da “sobrevivência do mais apto”, os AGs são capazes de desenvolver soluções para problemas do mundo real, tais como problemas de busca e otimização (Beasley et al. (1993)).

De acordo com Goldberg (1989), os Algoritmos Genéticos são algoritmos de busca baseados nos mecanismos de seleção natural e genética. Haupt et al. (1998) apresentam os Algoritmos Genéticos como uma área da Computação Evolucionária, que modela processos biológicos para otimizar funções de custo complexas.

Segundo definição de Koza (1990; 1992) e também mencionada por Lehrer (2000), um Algoritmo Genético é um algoritmo matemático que funciona de forma paralela

transformando populações de objetos matemáticos individuais em novas populações fazendo-se uso de operações genéticas (reprodução ou recombinação, e a reprodução proporcional à adaptabilidade), que é o princípio da sobrevivência do mais apto ou mais adaptado, estabelecido por Darwin.

Esta nova técnica é utilizada para resolução de problemas de otimização em diversas áreas, principalmente nas áreas de engenharia ligadas à indústria. Seu emprego vem acontecendo em substituição, ou em conjunto com as técnicas tradicionais (métodos clássicos).

O entendimento do processo de “busca” é definido por Goldberg (1989) e Mitchell (1999) na caracterização dos Algoritmos Genéticos funcionalmente como algoritmos de busca. Existem pelo menos três significados para busca dentro da Ciência da Computação, que são:

- Busca por Dados Armazenados (Search for Stored Data);
- Busca por Caminhos até os Objetivos (Search for Paths to Goals);
- Busca por Soluções (Search for Solutions). Os Algoritmos Genéticos são enquadrados para solução desta maneira de busca.

A diferenciação entre os Métodos de Busca por Dados Armazenados e por Caminhos até os Objetivos é bem definida. O primeiro método considera problemas que necessitam de alguma forma de informações que estão armazenadas em determinado dispositivo, por exemplo, o primeiro nome de uma pessoa para conseguir encontrar o seu endereço e telefone. No segundo, a informação pesquisada não está explicitamente armazenada em algum lugar, pois as soluções vão sendo geradas no decorrer do processo de busca.

Os métodos que trabalham em busca de soluções candidatas em sua totalidade funcionam basicamente da mesma maneira, pois têm que inicialmente gerar um conjunto de soluções candidatas (potenciais), e em seguida, realizar avaliações de tais soluções conforme o critério proposto de avaliação estabelecido (denominado de *Fitness*), e em fase posterior, decidir quais das soluções podem ser mantidas e quais podem ser descartadas, e por fim, promover variabilidades através da utilização de algum tipo de operador (operadores) nas soluções candidatas sobreviventes. A Figura 2.1 exemplifica as classes de técnicas de buscas.

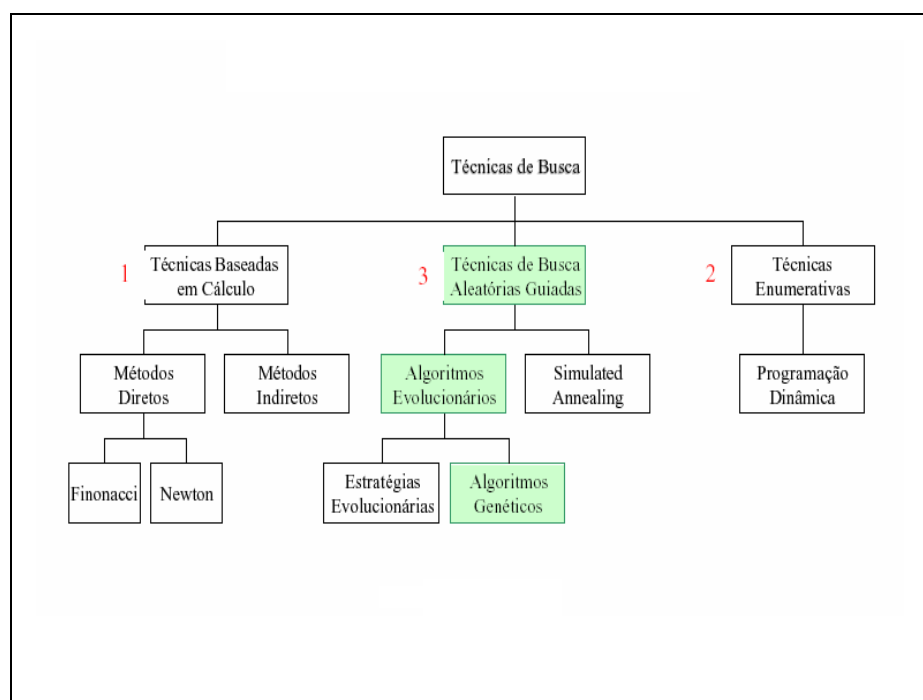


Figura 2.1 – Fluxograma das classes de técnicas de busca.

Os métodos clássicos de busca e otimização comparados aos Algoritmos Genéticos demonstram inúmeras dificuldades quando se defrontam com problemas complexos. A principal dificuldade aumenta quando um mesmo algoritmo é aplicado para resolução de vários problemas de natureza diversa. Isto ocorre devido ao fato que cada método clássico é designado para resolver eficientemente apenas uma classe particular de problemas. Por isso esses métodos não têm a capacidade de atender uma grande faixa de problemas defrontados por projetistas e pesquisadores. Além disso, a maioria dos métodos clássicos não possui perspectivas globais e frequentemente convergem para soluções ótimas

locais. Uma outra dificuldade é a inabilidade de serem utilizados eficientemente em um ambiente de computação paralela. Os métodos clássicos são em série por natureza na sua maioria, além de serem lentos, principalmente em problemas complexos. Resumidamente, as técnicas de pesquisa são classificadas em Goldberg (1989) e definidas como:

- **Técnicas Baseadas em Cálculo** – técnicas que ao longo do tempo foram amplamente estudadas, e são subdivididas em duas categorias: diretas e indiretas, e exemplificadas a seguir:
 1. **Diretas** – nessa categoria, buscam ótimos locais realizando “saltos” na função e movimentam-se na direção relacionada ao gradiente local (informações da função como derivadas de primeira e/ou de segunda ordem). Isto é simplesmente a noção de Subida de Encosta (Hill Climbing) (Mitchell et al. (1994)) onde para encontrar o melhor local, basta “subir a função” na direção mais íngreme possível.
 2. **Indiretas** – essa técnica busca extremos locais através da solução de um conjunto de equações não-lineares, resultante do gradiente da função objetivo igual a zero. Isto é a generalização de pontos extremos do cálculo elementar.

As Técnicas Baseadas em Cálculo possuem alguns aspectos que podem ser considerados determinantes na sua falta de robustez. Os dois métodos, direto e indireto, são locais em seu escopo. O “ótimo” de busca é o melhor na vizinhança do ponto atual onde é iniciado o processo (Goldberg (1989)).

- **Técnicas Enumerativas** – são técnicas completamente diretas procurando a(s) solução (ões) pesquisando sequencialmente cada ponto do espaço de busca (finito ou infinito discretizado) um de cada vez. Tais métodos não apresentam robustez, devido a sua ineficiência. Uma destas técnicas é conhecida como Programação dinâmica;

- **Técnicas Dirigidas por Pesquisa Aleatória** – essas técnicas ganharam muita popularidade, a partir do momento que os pesquisadores reconheceram as falhas e limitações das Técnicas Baseadas em Cálculo e nas Técnicas Enumerativas. A utilização da aleatoriedade como uma ferramenta no processo de busca guiada, é estranho, entretanto, a natureza fornece muitos exemplos, e os AGs são um exemplo deste tipo de procedimento de busca que utiliza a aleatoriedade como guia através de uma busca exploratória, e da codificação do espaço de busca;
1. **Simulated Annealing** - técnicas baseadas no processo termodinâmico para dirigir a pesquisa para o estado de mínima energia;
 2. **Algoritmos Evolucionários** - técnicas baseadas nos princípios de seleção natural, onde se subdividem em: Estratégias Evolucionárias, Algoritmos Genéticos e Programação Evolutiva. Neste capítulo dar-se-á ênfase aos Algoritmos Genéticos.

De acordo com Castro (2001) e Silva (2001) é impossível mapear todos os problemas existentes dentro de um eixo ordenado, entretanto, com uma representação abstrata desta forma e a adoção da eficiência com que os métodos resolvem cada problema individualmente atribuídos ao eixo das ordenadas, seria possível determinar as curvas indicativas da “**aplicabilidade x eficiência**” dos métodos disponíveis (Figura 2.2).

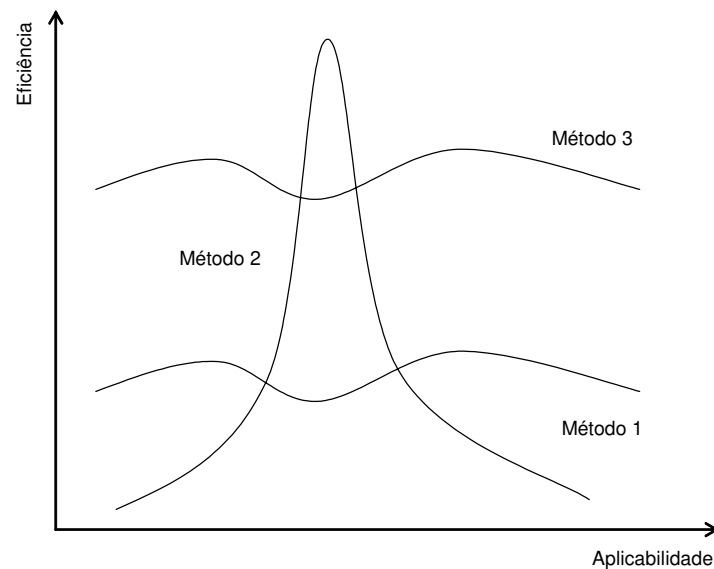


Figura 2.2 - Aplicabilidade em Problemas versus Eficiência de resolução dos métodos, baseado em Castro (2001) e Silva (2001).

Nessa representação gráfica da Figura 2.2 são identificados três tipos extremos de métodos, os quais foram ilustrados:

- **Método 1** → pouco eficiente para a totalidade dos problemas existentes;
- **Método 2** → altamente eficiente para uma faixa de problemas, entretanto, pouco eficientes ou nem aplicáveis para a maior parte deles;
- **Método 3** → razoavelmente eficiente para a totalidade dos problemas existentes.

A partir desse contexto, os algoritmos genéticos se aproximariam da terceira classe de métodos, não sendo mais eficientes que aqueles projetados especificamente para determinado problema tratado. Contudo, perturbações no problema original não trariam nenhum prejuízo, mas possivelmente, a inutilidade de outros métodos.

Os AGs empregam uma estratégia de busca paralela e estruturada, mas aleatória, esforçando-se em direção a descoberta de indivíduos (parâmetros) que fornecem alta

aptidão, ou seja indivíduos mais adaptados, que em linguagem matemática seria encontrar seus valores que maximizam ou minimizam uma função representativa do problema relacionado com seu objetivo específico. Uma das principais características é de não encontrarem uma única solução (indivíduo), mas uma população deles ou ainda àqueles que são potenciais para efetivá-las, caracterizando-se como métodos estocásticos de procura e seleção. Na prática implementa-se facilmente um AG com o simples uso de *strings* de bits ou caracteres para representar os cromossomos (indivíduos) e, com operações de manipulação de bits podemos implementar os operadores genéticos, que são descritos nos tópicos posteriores. Na Figura 2.3, verifica-se a simplicidade para representação de um cromossomo, onde é composto por oito genes, por meio de uma *string* de valores binários.

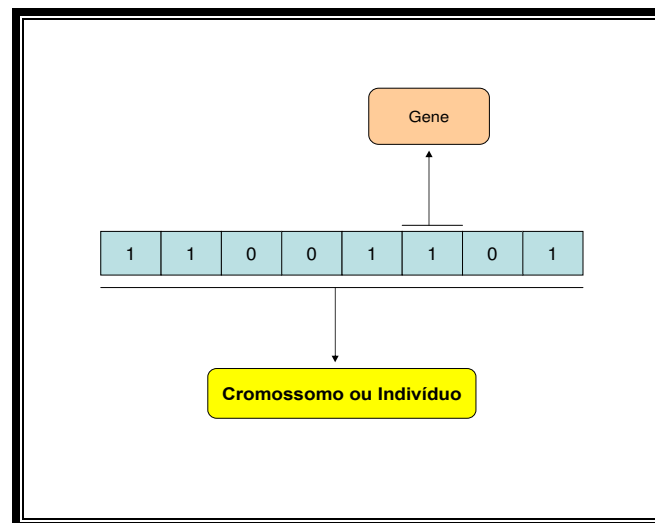


Figura 2.3 - Exemplo de representação de um cromossomo de genes binários.

Há uma combinação entre a sobrevivência dos mais aptos com a troca de informação de uma forma estruturada, ocorrendo de forma aleatória, mas direcionada. Nesta situação, o processamento e a forma de funcionamento dos AGs consiste na transformação de uma população de indivíduos ou população inicial (soluções candidatas), formando um genoma, onde cada um dos indivíduos possui seu valor de **aptidão ou adequação** associado, em uma nova geração de indivíduos utilizando os princípios de Darwin de reprodução e sobrevivência, levando em conta sempre o processo evolutivo em que os melhores sobrevivem e continuam sempre evoluindo. A seleção natural garante que os cromossomos mais aptos gerem descendentes nas populações futuras. A criação de

populações geneticamente mais adequadas sempre conduz à situação desejada, onde através do prisma biológico, pode ser visto como uma população de indivíduos com as melhores características de sobrevivência (mais adaptados e resistentes), e pelo lado da otimização, a solução do problema que é analisado (através da maximização ou minimização de uma ou mais funções). A etapa de seleção promove a manutenção de uma população diversificada, e previne que os melhores indivíduos não sejam perdidos ou desapareçam da população, onde são conduzidos às transformações genéticas (operações genéticas). Eles podem ser automaticamente colocados na geração seguinte através de um mecanismo denominado de reprodução elitista (seleção elitista) ou realizarem competições entre si.

Após a escolha dos mais aptos as operações genéticas são realizadas visando encontrar os melhores indivíduos após várias gerações. Essas transformações são denominadas de operadores genéticos conhecidos como cruzamento e mutação (e ainda podem ser subdivididos em outros operadores). São bastante conhecidos e utilizados em diversos trabalhos, embora existam outros descritos como, por exemplo, o de inversão. Esses operadores asseguram que a nova geração seja diferente e melhor que a antecessora e assim por diante, mantendo algumas características dos progenitores. O cruzamento é responsável pela troca de material genético dos cromossomos geradores. Nessa etapa as chances de perpetuação das características ideais durante o processo aumentam devido aos progenitores com altos graus de adaptações poderem se reproduzir com maior frequência e as mutações que promovem certa variação e podem provocar certas alterações benéficas ou não aos cromossomos. Este ciclo é repetido inúmeras vezes.

Apesar de serem aleatórios, os AGs são um método de busca direcionada, pois exploram informações históricas para encontrar novos pontos onde se visa melhorar o desempenho. É importante ressaltar que os AGs não descaracterizam sua população primária, mas a fazem evoluir, objetivando encontrar indivíduos melhores ou ótimos locais até a obtenção de indivíduos (soluções) que sejam considerados melhores, sendo mais evoluídos e em consequência mais adequados ao problema (ótimo global). Durante cada geração, os princípios de seleção e reprodução são dependentes da complexidade do problema e dos recursos computacionais disponíveis.

Os algoritmos são computacionalmente simples e poderosos, não sendo limitados pelo espaço de busca relacionados à continuidade ou a existência de derivadas. Em problemas reais as buscas encontram inúmeras dificuldades, principalmente com descontinuidades, etc., onde métodos que tenham forte dependência de restrições de continuidade e existência de derivadas possuem aplicabilidade em problemas de domínio limitado. Nos próximos tópicos são abordados com mais detalhes o funcionamento e variabilidades dos AGs, os diversos tipos de operadores genéticos, os parâmetros genéticos de importância para aplicação dessa técnica.

Em síntese os Algoritmos Genéticos, juntamente com Estratégias Evolucionárias (EEs) e Programação Evolutiva (PE) são métodos que simulam, através de algoritmos, os processos da evolução natural (biológica) visando, principalmente, resolver problemas de otimização de grande complexidade. Estes algoritmos podem ser vistos como uma representação matemática – algorítmica das teorias de Darwin e da genética, chamada de a nova sintaxe da teoria da evolução, cujos principais postulados podem ser resumidos:

- A evolução é um processo que opera sobre os cromossomos do organismo e não sobre o organismo que os carrega. Desta maneira, o que ocorrer com o organismo, durante sua vida, não se reflete sobre seus cromossomos. Entretanto, o inverso não é verdadeiro: os cromossomos do organismo fazem parte de um projeto e promovem um reflexo direto sobre as características desse organismo (o indivíduo é a decodificação de seus cromossomos);
- A seleção natural é o elo entre os cromossomos e o desempenho que suas estruturas decodificadas (o próprio organismo). O processo de seleção natural faz com que, aqueles cromossomos, que decodificaram organismos mais bem adaptados ao seu meio ambiente (função de aptidão), sobrevivam e reproduzam mais do que aqueles que decodificam organismos menos adaptados;
- O processo de reprodução é o ponto através do qual a evolução se caracteriza. Mutações podem causar diferenças entre os cromossomos dos pais e de seus filhos. Além disso, processos de recombinação (“cruzamento ou crossover”) podem

ocasionar mudanças significativas nos cromossomos dos filhos em relação aos dos seus progenitores, uma vez que há combinações de materiais cromossômicos de dois genitores.

Os Algoritmos Genéticos ocupam lugar de destaque entre os paradigmas da Computação Evolucionária (CE) devido a várias razões (Serrada (1996)), dentre as quais:

- Paradigma mais completo da CE, pois englobam de forma simples e natural todos os conceitos nela contidos, e junto com as Redes Neurais, os mais utilizados de toda a Computação Natural;
- Os resultados são bastante aceitáveis, relativos à precisão e recursos empregados (fácil implementação em computadores domésticos de porte médio), para diversos tipos de problemas complexos de difícil resolução por outros métodos;
- São muito flexíveis, aceitam sem grandes dificuldades uma infinidade de alterações na sua implementação e permitem fácil hibridação (vantagem importante no caso de aprendizagem) inclusive com técnicas não relacionadas à CE;
- Em relação aos outros paradigmas da CE, são os que exigem menor conhecimento específico do problema em questão para o seu funcionamento, o que os torna altamente versáteis e, além disso, agregam conhecimento específico com pouco esforço.

A literatura sobre AGs descreve inúmeras aplicações que obtiveram pleno sucesso, mas existem também outros casos onde o desempenho dos AGs não foram satisfatórios. Então, dado um determinado problema a ser resolvido, como podemos saber se os AGs são um bom método para solucioná-lo?

Em geral, os AGs têm sido mais usados para solução de funções de otimização, nas quais se mostram muito eficientes e confiáveis. Mas, como é de se esperar, nem todos os problemas podem ter resultados bons, satisfatórios ou mesmo ser representados

adequadamente para o uso das técnicas dos AGs. A recomendação geral para implementação dos Algoritmos Genéticos é levar em conta as seguintes características relativas ao problema, antes de tentar o uso das referidas técnicas, Goldberg (1989):

- O espaço de busca (possíveis soluções) do problema em questão deve estar delimitado dentro de uma faixa de valores;
- As soluções devem poder ser codificadas facilmente para uma boa implementação no computador, devem ter uma representação em formato de um código genético. Os AGs não trabalham diretamente com o domínio do problema e sim com representações dos seus elementos;
- Variedade na população inicial, ou seja, deve-se ter uma diversidade suficiente para permitir ao algoritmo realizar combinações de características para produção de novas e promissoras soluções;
- Existência de um método que possa medir a qualidade de uma solução potencial. Deve-se tornar possível a definição de uma função de aptidão (adaptabilidade, adequação ou *fitness*) que nos indique quão boa ou ruim é uma determinada resposta (maximização ou minimização conforme o caso estudado);
- Algum critério de escolha de soluções que permaneçam na população ou são retirados dela;
- Determinado procedimento de combinação de soluções com objetivo de gerar novos indivíduos na população, introduzindo modificações em algumas dessas, mantendo a diversidade da população (permitindo a geração de soluções inovadoras) para serem avaliadas pelo critério de seleção dos indivíduos mais aptos, ocorrendo até se atingir o objetivo proposto.

Cabe ainda ressaltar que os AGs são métodos de busca:

- Cega: não tem conhecimento específico do problema a ser resolvido, tendo como guia apenas a função objetivo (direcionamento de maximização ou minimização);

- **Múltipla:** executa busca simultânea em um conjunto de candidatos;
- **Estocástica (aleatória):** Combinam em proporção variável regras probabilísticas e determinísticas. Esse conceito refere tanto as fases de seleção como as de reprodução.

II.2 VANTAGENS E DESVANTAGENS DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

II.2.1 VANTAGENS DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

Os Algoritmos Genéticos têm sido empregados, como já abordado anteriormente, em problemas complexos de otimização em que, muitas vezes, os métodos tradicionais não são eficientes ou não funcionam. Algumas vantagens dos AGs são:

- A vantagem principal dos AGs ao trabalharem com o conceito de população, ao contrário de muitos outros métodos que trabalham com um só ponto, é que eles encontram segurança na qualidade;
- Tendo uma população de pontos bem adaptados, reduz-se a possibilidade de alcançar um falso ótimo (falsos ótimos);
- Os AGs conseguem em grande parte de sua amplitude ignorar de forma simples informações que não constituam parte do objetivo, enquanto outros métodos se baseiam fortemente nesse tipo de informação e, em problemas nos quais a informação necessária não está disponível ou se apresenta de difícil acesso, onde os métodos tradicionais falham;
- Funcionam tanto como parâmetros contínuos como discretos ou através de uma combinação deles;
- Realizam buscas simultâneas em várias regiões do espaço de busca, pois trabalham com uma população e não com um único ponto;

- Utilizam informações de perdas ou ganhos e não derivadas ou outro conhecimento auxiliar;
- Realizam otimização de um grande número de variáveis, onde estas, possuindo ou não funções objetivos com superfícies complexas e complicadas, reduzindo a incidência de mínimos locais. São flexíveis para trabalhar com restrições arbitrárias e otimizar múltiplas funções com objetivos conflitantes;
- São fáceis de serem implementados em computadores. Possuem boa adaptabilidade a computadores paralelos (categoria de computação paralela ou algoritmos concorrentes);
- O desenvolvimento ocorre através de uma codificação do conjunto de parâmetros e não com os próprios parâmetros;
- Fornecem uma lista de parâmetros ótimos e não uma simples solução;
- Trabalham com dados gerados experimentalmente e são tolerantes a ruídos e dados incompletos;
- São moduladores e portáteis, no sentido que o mecanismo de evolução é separado da representação particular do problema considerado. Assim, eles podem ser transferidos de um problema para outro;
- São facilmente hibridizados com outras técnicas heurísticas;
- São robustos e aplicáveis a uma grande variedade de problemas;
- São mais resistentes a se prenderem a ótimos locais;
- Apresentam um bom desempenho para uma grande escala de problemas.

Apesar dessas inúmeras vantagens, os AGs não são eficientes para muitos problemas. São bastante lentos e não raro ainda estão avaliando a população inicial enquanto muitos métodos de “subida de encosta”, por exemplo, já têm encontrado a solução. O principal campo de aplicação dos AGs estão relacionados a problemas complexos, com múltiplos mínimos/máximos e para os quais não existe um algoritmo de otimização eficiente conhecido para resolvê-los.

II.2.2 DESVANTAGENS DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

As principais desvantagens dos Algoritmos Genéticos são:

- Dificuldade para achar o ótimo global exato;
- Requerem um grande número de avaliações das funções de aptidão e suas restrições;
- Funções com alto custo de avaliação da função objetivo, não sendo eficiente para soluções com comportamento simples, assim o processo de avaliação é mais lento próximo aos ótimos locais;
- Grandes possibilidades de configurações podendo complicar a resolução.

II.3 HISTÓRICO – BASES BIOLÓGICAS – DARWIN VERSUS LAMARK

A seleção natural é apenas um dos elementos da adaptação se unindo a outros elementos de relação entre organismo e ambiente e a questão da hereditariedade. A idéia da hereditariedade vem se difundindo rapidamente, desde as primeiras observações para demonstrações experimentais dos mecanismos envolvidos, onde o início ocorreu a partir da segunda metade do século XIX (Burns e Bottino (1989)). As primeiras idéias referentes ao assunto surgiram a mais de 6000 anos. Por volta de 500 a.C. (época de Aristóteles), onde filósofos gregos propuseram que vapores derivados de vários órgãos uniam-se através de uma força revitalizadora do sêmen, que era interpretado como sangue altamente purificado. Essas idéias tiveram grande influência na cultura da humanidade por cerca de 2000 anos. Neste período acreditava-se que o sexo era determinado pela procedência do líquido seminal no homem (considerado do sexo masculino se era originário do testículo direito e do sexo feminino se fosse do testículo esquerdo). A mulher era considerada apenas uma incubadeira.

Foram os gregos Anaximandro (séc. VI a.C.), Empédocles (V a.C.) e Aristóteles (IV a.C.), os pioneiros para compreensão da história da vida. Entretanto, conforme suas possibilidades, as referidas contribuições estavam mais voltadas para a descrição da natureza de forma intuitiva do que para o conhecimento dos mecanismos de funcionamento.

Anaxágoras (500-428 a.C.) chegou a supor que as espécies de animais domésticos derivavam de similares selvagens. Entretanto, faltavam aos gregos, técnicas e materiais de pesquisa com as quais pudessem ultrapassar os limites da especulação e imaginação.

As imagens do mundo dos filósofos orientais e da Grécia clássica foram dominadas por concepções estáticas ou cíclicas do tempo. Parmênides acreditava que as mudanças que ocorriam no mundo eram ilusões dos sentidos. Outros acreditavam que as mudanças eram cíclicas e se repetem indefinidamente como o dia e a noite. Platão, no século IV a.C. conheceu uma síntese mais sutil dessas especulações segundo a qual aquilo que se observa no mundo não passa de sombras de arquétipos perfeitos.

Com o início do cristianismo, ganhou espaço a idéia da espécie fixa: cada ser vivo era teologicamente interpretado como “Padrão da Criação”. A forma era fruto de um ato divino, um reflexo do próprio poder do Criador sendo imutável em si mesma.

Santo Agostinho (354-430 d.C) fez a primeira objeção contra essa teoria, afirmando que ser a intervenção divina compatível com um mundo capaz de desenvolver-se, “da mesma maneira que no grão estão contidas de forma invisível todas as partes da futura árvore”. Essa idéia, nascida da observação do desenvolvimento individual, manteve-se confusa quanto ao fenômeno da evolução das espécies.

Em 1672 descobriu-se o óvulo, pelo pesquisador holandês Graaf, sendo de grande importância para indicação que as fêmeas dos mamíferos também apresentavam ovulação,

indicando uma maior significância da mulher no processo reprodutivo. Em 1675, o holandês Von Leeuwenhoek descobriu o espermatozóide, onde a partir de então vigorou a idéia absurda do homúnculo (defendia-se que o embrião já estaria em sua forma final, onde ganharia proporções maiores durante a gestação, mas perdurava a dúvida de onde era originado, do óvulo ou do espermatozóide).

No século XVIII os geólogos começaram a perceber que a Terra era muito antiga, pois as rochas sedimentares tinham sido depositadas em épocas diferentes. Os fósseis eram considerados como restos de catástrofes naturais (inundações e vulcanismos).

Em 1788 James Hustton desenvolveu a teoria do uniformitarismo, segundo a qual os mesmos processos são responsáveis por eventos passados, atuais e futuros de modo que a Terra poderia ser muito antiga. Esta teoria teve grande influência para o entendimento das mudanças geológicas e biológicas ocorridas no planeta.

Na mesma época, outros cientistas diziam que novas espécies poderiam ser geradas não apenas de criações sucessivas, mas também através de geração espontânea, a partir da matéria inanimada ou através de potencialidades latentes que poderiam estar de forma adormecida em cada indivíduo.

O monge agostiniano, Gregor Mendel em 1866, foi o precursor das primeiras idéias acerca da hereditariedade, onde estudou o problema de forma lógica, escolhendo material adequado concentrando-se em poucas características contrastantes, realizou um programa de cruzamentos controlados e sugeriu que fatores causais (hoje denominados de genes) eram os responsáveis pelos efeitos observados. Mendel apresentou resultados revolucionários, chegando perto da compreensão real da hereditariedade (faltando apenas a explicação dos mecanismos celulares envolvidos), sendo necessários mais 30 anos para aceitação da comunidade científica sobre a importância de seus estudos. As leis de seleção natural de Darwin provocaram intensos debates dificultando a assimilação dos resultados de Mendel.

Desde Darwin em 1859, a teoria da evolução vem sendo a principal idéia que abrange as diversas áreas da biologia, pois faz a distinção dos sistemas biológicos dos demais sistemas físicos e químicos (Darwin (1994; 1996)).

A teoria da evolução natural não faz apenas a previsão da ocorrência de variações sucessivas em relação aos indivíduos de uma determinada espécie mas indica também a forma de variação que conduzem o organismo de forma a adaptar-se melhor ao meio, tendo como ponto forte e determinante a possibilidade de explicar o processo adaptativo ao contrário da teoria Lamarckista (Jean Baptiste de Lamarck, naturalista francês, 1744–1829) que não explicava o processo de adaptação. Mas mesmo assim, até o início do século XX, as idéias e explicações das duas correntes ainda não estavam bem entendidas.

Lamarck defendia que as características adquiridas pelos indivíduos durante o ciclo de vida eram provenientes da herança direta e Darwin propôs que a seleção natural em conjunto com a diversidade poderia explicar melhor a evolução. Portanto Darwin além de defender sua teoria defendendo os fatores predominantes do processo evolutivo, não descartava a teoria de Lamarck (embora, considerava de menor importância).

A teoria Lamarckista foi aceita até que Weismann em 1893 publicou um trabalho constatando que organismos superiores apresentam dois tipos de células denominadas de germinativas e somáticas. A primeira é responsável pela passagem de informações genéticas aos descendentes e o segundo tipo responsável pela composição dos organismos em partes não diretamente associadas à reprodução. Sua contribuição é evidenciada pela impossibilidade das informações adquiridas pelas células somáticas sejam transmitidas aos descendentes pelas células germinativas.

A argumentação de Weismann pode ser explicada em base molecular através dos princípios da biologia molecular: a informação pode passar de DNA para DNA, e de DNA para proteína, mas não de proteína para DNA. A informação pode ser representada pela sequência básica do DNA que por sua vez é transmitida para moléculas novas de DNA na

replicação, especificando a sequência de aminoácidos das proteínas na etapa de tradução. A informação passada pelo DNA para proteínas através do RNA dificulta o argumento, não alterando a essência. Com esta situação, e assumindo que os ácidos nucleicos representam a única forma de transmissão de informações entre as gerações promovendo implicações fundamentais para o processo evolutivo. Essas mudanças necessitam de alterações dos ácidos nucleicos (por exemplo, via mutação) devido a isso são essencialmente acidentais e não adaptativas (teoria neodarwinista).

II.3.1 A TEORIA DA EVOLUÇÃO NATURAL

As teorias de *Charles Darwin* (1809-1882), em meados do século XIX, revolucionaram todo o pensamento sobre a evolução da vida e de nossas origens, provocando e incentivando grandes discussões a respeito de uma teoria científica já debatida. Em seus dois livros - *Sobre a Origem das Espécies por Meio da Seleção Natural* (1859), e *A Descendência do Homem e Seleção em Relação ao Sexo* (1871) - Darwin defendia que o homem, e todos os seres vivos são resultados do processo evolutivo.

Em seus estudos, Darwin concluiu que nem todos os organismos que nascem, sobrevivem ou (o que é mais importante) reproduzem-se. Os indivíduos com mais oportunidades de sobrevivência (mais adaptados) seriam aqueles com características e condições mais apropriadas para enfrentar as condições ambientais. Esses indivíduos teriam maior probabilidade de reproduzir-se e gerarem descendentes. Nessas condições as variações favoráveis possuíam a tendência de serem preservadas e as desfavoráveis, destruídas.

O processo seletivo é muito longo, na natureza, e constante ao longo das diversas gerações, através das quais as espécies podem sofrer diversificações, tornando-se mais adaptadas ao ambiente em que vivem. A partir de então surgia o conceito de *Seleção Natural*, que foi a grande contribuição de Darwin à teoria da evolução.

Darwin propôs o mecanismo de evolução em seis etapas:

- Os indivíduos de uma mesma espécie apresentam muitas variações na forma e na fisiologia;
- A maior parte dessas variações é transmitida aos descendentes nas subseqüentes gerações;
- Ocorreria um crescimento exponencial das populações caso todos os indivíduos de uma espécie se reproduzissem;
- A escassez ou limitações dos recursos naturais promove uma competição pela sobrevivência entre os indivíduos de uma população e seus descendentes. Por isso apenas os mais aptos (minoria) sobrevivem e geram descendentes. As características dos indivíduos (hereditárias) são transmitidas aos descendentes e determinam sua sobrevivência e reprodução diferencial;
- O processo de seleção natural fornece para as espécies (indivíduos) a condição de estarem cada vez mais adaptadas.

A explicação de Darwin para o exemplo de indivíduos mais adaptados pode ser enunciada através do exemplo das girafas. O aumento do pescoço das girafas ocorreu através de inúmeras gerações sendo, essencialmente, muito simples. Em uma população primária de girafas, algumas delas possuíam pescoços maiores do que outras. Devido a esta situação, muitas delas passaram a ter maiores oportunidades de alimentação (conseqüentemente maior chance de sobreviver), quando a partir do momento em que ocorreu escassez de alimento próximo ao solo.

As girafas com pescoços mais curtos foram morrendo e se extinguindo. O processo se repetiu por várias gerações e, assim, os animais que possuíam maiores pescoços foram prevalecendo, aumentando gradativamente sua frequência.

O principal problema enfrentado pela teoria Darwiniana foi a ausência de uma explicação satisfatória que relatasse sobre a origem e a transmissão das variações dos indivíduos.

Darwin sofreu com as críticas por não conseguir provar sua teoria adequadamente, a situação foi contornada com a redescoberta das Leis de Mendel e das Mutações. Mas mesmo assim é considerado que a teoria moderna da evolução se deve mais a Darwin do que a qualquer outro cientista, e seu conceito de seleção natural continua válido até nos dias atuais.

II.3.2 SELEÇÃO NATURAL

Charles Darwin apresentou a idéia básica dos processos de seleção natural, que foi um dos maiores avanços no meio científico. O mecanismo de seleção natural das espécies impõe certa ordem ao processo de evolução.

O processo seletivo caracteriza-se, em primeira instância pela obtenção de variedade genética sendo realizada ao acaso. Já a segunda parte, a seleção ocorre e de uma determinada importância é imposta pelos fatores do meio ambiente.

Através da seleção natural, a frequência de um gene que determina alguma forma de vantagem promove o aumento gradativo da população. Essa vantagem conferida pelo gene pode ter influência em um tempo maior de sobrevivência do indivíduo, promovendo assim um aumento na quantidade de descendentes gerados. Pode ocorrer uma maior fertilidade do indivíduo que, mesmo tendo menos tempo de vida, pode deixar um número maior de descendentes que outros indivíduos que estejam competindo no ambiente. E por último, o gene pode aumentar a sua frequência caso tenha condições de fornecer ao indivíduo maior capacidade de se proteger. Assim, mesmo gerando menos descendentes, suas chances de atingir o período reprodutivo são maiores.

Um outro exemplo clássico do processo de seleção natural são as mariposas de Manchester (Inglaterra), fato ocorrido na época da Revolução Industrial. Antes do processo de industrialização, existia na cidade de Manchester uma população de mariposas de asas brancas, tendo essas alguns mutantes de asas negras. Os principais predadores (pássaros) atacavam principalmente a espécie mutante (asas negras), pois as mariposas de asas brancas se camuflavam facilmente nos troncos das árvores revestidos de líquens brancos.

Contudo, com a industrialização, a fuligem ocasionou a morte dos líquens, se depositando nos troncos deixando-os escuros. A partir de então, as mariposas escuras passaram a ter mais vantagem devido à camuflagem que puderam se dispor, obtendo assim maior probabilidade de sobrevivência e aumentando a sua descendência. As mariposas brancas, ao contrário, por estarem mais visíveis sobre os troncos escuros passaram a ser destruídas pelos seus predadores, diminuindo suas estimativas de vida e, em consequência gerando menos descendentes. Através de inúmeras gerações, as mariposas negras aumentaram sua frequência chegando a representar praticamente toda a população (cerca de 90%), adaptada, ao novo ambiente.

II.3.3 PRECURSORES E ORIGENS DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

A primeira tentativa de representação, por meio de um modelo matemático, da teoria de Darwin, surgiu com o livro *The Genetic Theory of Natural Selection*, escrito pelo biólogo evolucionista R. A. Fisher. A evolução era tal como a aprendizagem, uma forma de adaptação, se diferenciando apenas na escala de tempo. Em vez do processo estar fixado a uma vida, este era resultado de várias gerações. Como era feita em paralelo por um conjunto de organismos, tornava-se mais poderosa que a aprendizagem.

A seguir, John Holland dedicou-se ao estudo de processos naturais adaptáveis, pesquisou e iniciou uma nova técnica denominada de Algoritmos Genéticos em meados da década de 60. Ele desenvolveu os AGs em conjunto com seus alunos e colegas da Universidade de Michigan nos anos 60 e 70, com o objetivo de estudar formalmente o

fenômeno da adaptação como ocorre na natureza, e desenvolver modelos em que os mecanismos da adaptação natural pudessem ser importados para os sistemas computacionais.

David E. Goldberg, aluno de Holland, a partir dos anos 80 obteve seu primeiro sucesso em aplicação industrial com AGs. Desde então esta técnica vem sendo utilizada para solucionar problemas de otimização e aprendizado de máquinas. Esses algoritmos simulam processos naturais de sobrevivência e reprodução das populações, que são essenciais no processo evolutivo. Na natureza, indivíduos de uma mesma população competem entre si, buscando principalmente a sobrevivência, seja através da busca de recursos como alimentos, ou visando à reprodução. Os indivíduos mais aptos possuem maior probabilidade de gerar descendentes, do que os menos aptos.

Como resultado do seu trabalho, em 1975, Holland edita *Adaptation in Natural and Artificial Systems* (Holland (1975)) e, em 1989, David L. Goldberg publica *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning* (Goldberg (1989)), hoje considerados os livros mais importantes sobre AGs.

John Holland, que no princípio dos anos 70, acreditou na possibilidade de resolver alguns problemas através de processos evolutivos semelhantes aos observados na Natureza. O processo de evolução das espécies ainda não é compreendido na sua totalidade, apesar de algumas das suas características serem conhecidas. Sabe-se que a evolução acontece ao nível dos *cromossomos*, constituídos por *genes*, e que um indivíduo pode ser entendido como a decodificação dos seus cromossomos. À constituição genética de um organismo dá-se o nome de *genótipo* e a manifestação física que resulta de um específico genótipo e da sua interação com o meio ambiente designa-se por *fenótipo*. Os objetivos das pesquisas de Holland foram:

- Resumir e explicar rigorosamente os processos adaptativos dos sistemas naturais;

- Projetar e desenvolver sistemas artificiais (software) que retém os mecanismos importantes dos sistemas naturais (copiam ou tentam se assemelhar aos mecanismos naturais já estudados e desenvolvidos).

Essas aproximações têm conduzido importantes descobertas em ambas as ciências natural e artificial, onde a primeira abordagem e publicação foram em 1975 (Holland (1975)). A partir de então, muitos de seus seguidores e pesquisadores realizaram vários trabalhos sobre este assunto (De Jong (1975); Michthell (1996); Michalewicz (1996); entre muitos outros). A maior razão da grande popularidade nos diversos trabalhos é a perspectiva global, a extensa e larga aplicabilidade dessa técnica.

Holland definiu os Algoritmos Genéticos (AGs) como algoritmos de otimização estocásticos que trabalham de forma “aleatória orientada” de acordo com regras probabilísticas baseadas numa analogia com os mecanismos da genética natural. Estes mecanismos, de funcionamento simples, revelaram-se eficazes na resolução de problemas complexos.

Após a publicação dos trabalhos de Holland e Goldberg, muito se evoluiu, principalmente em relação à aplicação dos AGs nas mais vastas áreas do conhecimento, como demonstram as várias referências já citadas. Muitos trabalhos também foram realizados com o objetivo de tornar o método mais eficiente.

Existem muitas críticas aos AGs, onde as principais referem-se à incerteza da obtenção da solução ótima e ao grande número de avaliações da função objetivo que se faz necessário para obter a solução.

Um algoritmo genérico que possa representar um Algoritmo Genético é descrito na seqüência:

1. Criação de uma população de n cromossomos;
2. Avaliação de cada cromossomo da população;
3. Escolha de m pares de cromossomos;
4. Criação $2m$ novos cromossomos através da reprodução dos m pares de cromossomos;
5. Eliminação k cromossomos da população ($m \leq 2m$);
6. Avalia os novos cromossomos e insere k na população;
7. Se o critério de término foi atingido, pára e devolve o melhor cromossomo; caso contrário volta ao item 3.

II.4 DEFINIÇÕES BÁSICAS - TERMINOLOGIA

No campo da biologia, a teoria da evolução condiciona ao meio ambiente a capacidade de seleção em cada geração, promovendo o surgimento de seres vivos mais adaptados de uma determinada população. Durante a etapa de reprodução, ocorrem, fenômenos como mutação e cruzamentos, principalmente, que atuam sobre o material genético armazenado nos cromossomos.

Os Algoritmos Genéticos é uma forma de imitação (ou semelhança) desses fenômenos, o que explica porque esses algoritmos possuem muitos termos originários da biologia. A seguir apresenta-se uma seqüência de nomes para descrição dos termos principais encontrados na literatura, tais como:

- **Cromossomo e Genoma:** Em biologia, a definição de genoma vem a ser o conjunto completo de genes de um organismo. Um genoma pode ter vários cromossomos. Os cromossomos são um conjunto genes, e nos AGs, os dois representam a estrutura de dados que codifica uma solução para um determinado problema, ou seja, um cromossomo ou genoma representa um simples ponto do espaço de busca;

- **Gen ou Gene:** A biologia descreve como a unidade de hereditariedade que é transmitida pelo cromossomo e que controla as características do organismo. Em AGs, é um parâmetro codificado no cromossomo, ou um elemento do vetor que representa o cromossomo;
- **Indivíduo:** um simples membro da população. Nos AGs, um indivíduo é formado pelo cromossomo e sua aptidão;
- **Genótipo:** na biologia, representa a composição genética contida no Genoma. Nos AGs, representa a informação contida no cromossomo ou genoma;
- **Fenótipo:** nos AGs, representa o objeto, estrutura ou organismo construído a partir das informações do genótipo. É o cromossomo decodificado. Por exemplo, considere que o cromossomo codifica parâmetros como as taxas de reação em um projeto de reatores químicos, ou as conexões e pesos de uma Rede Neural. O fenótipo seria a concentração do produto final ou sua pureza;
- **Alelo:** representa uma das formas alternativas de um gene, é o que retrata a biologia, nos AGs, representa os valores que o gene pode assumir. Por exemplo, um gene que representa o parâmetro cor de um objeto poderia ter o alelo de cor azul, preto, verde, etc.;
- **Epistasia:** interação entre genes do cromossomo, ou seja, quando um valor de gene tem influência em um valor de outro gene. Problemas com alta epistasia são difíceis de solução por AGs;
- **Mutação:** em biologia é a variação devido a alteração da constituição hereditária com aparecimento de uma nova variedade em qualquer espécie viva. Na linguagem em AGs modificação aleatória do cromossomo visando gerar novas possíveis soluções à explorar;
- **Reprodução:** em biologia significa multiplicação de novos indivíduos a partir de outros de mesma espécie. Em AGs, cruzamento (crossover) vem a ser uma troca de segmentos dos cromossomos (strings - séries) selecionados;
- **População:** na biologia é o conjunto de cromossomos e em AGs as soluções as quais representam esses cromossomos;

- **Seleção Natural:** na linguagem biológica como já citado anteriormente é o mecanismo que garante aos indivíduos mais aptos, maiores chances de reprodução; fertilidade diferencial na natureza que favorece indivíduos que se adaptam melhor ao meio ambiente e tende a eliminar os piores (menos adaptados). Em AGs o processo seletivo é determinado pela aptidão (fitness) do indivíduo. Quanto maior sua aptidão maiores as chances de gerar descendentes. Indivíduos com aptidões baixas representam soluções indesejáveis no momento da avaliação;
- **Geração:** fase que representa uma determinada população de indivíduos quando gerada no mesmo período e em AGs representa o número da iteração que é executado pelo algoritmo;
- **Operações Genéticas:** transformações que ocorrem sobre os indivíduos (cromossomos). As mais conhecidas são recombinação ou cruzamento e mutação;
- **Espaço de Busca ou Região Viável:** é o conjunto, espaço ou região que contém as soluções possíveis do problema a ser otimizado. Deve ser delimitado e caracterizado pelas restrições representadas por funções que definem de forma viável as soluções do problema a ser resolvido;
- **Função Objetivo ou de Avaliação:** é a função que se deseja realizar o processo de otimização. Esta função possui um valor numérico (ou informação numérica) do desempenho de cada cromossomo na população. Essa deve ser bem representativa em relação às características do problema que o Algoritmo Genético necessita para realizar seu processamento visando o objetivo que lhe é peculiar, sendo expressa normalmente como $F = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, onde $x_1, x_2, \dots, x_n$ são as variáveis que o algoritmo procura determinar para otimizar F . Essa função objetivo é em princípio, calculada para cada cromossomo i da população. Também é conhecida como função de ajuste ou fitness.

II.5 REPRESENTAÇÃO DOS PARÂMETROS

O Algoritmo Genético processa populações de cromossomos aos quais representam estruturas de dados, geralmente sendo vetores ou séries de bits que nada mais são do que possíveis soluções do problema a ser otimizado. Normalmente a representação é da forma haplóide (um cromossomo por indivíduo), onde os trabalhos utilizando AGs são realizados, mas existe ainda a possibilidade de associar-se mais de um cromossomo a cada indivíduo, analogamente ao que ocorre na biologia.

Em geral, um cromossomo representa um conjunto de parâmetros da função objetivo, onde a resposta é maximizada ou minimizada. O espaço de busca é conjunto de todas as possibilidades (configurações) que os cromossomos assumem. Para um determinado cromossomo que representa um número n de parâmetros de uma função, o espaço de busca e investigação possui n dimensões. O conjunto de todas as configurações que o cromossomo pode assumir forma seu espaço de busca. Quando existem vários parâmetros envolvidos em um problema, esses são representados na mesma cadeia de bits, com cada um ocupando seu espaço. Cada cromossomo fornece um valor característico (aptidão ou adaptabilidade), referente à função objetivo, onde esse valor nada mais é do que uma forma de avaliação da solução, ou seja, o quanto esta pode ser considerada melhor ou pior.

II.6 CRITÉRIOS PARA IMPLANTAÇÃO DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

Para implantação dos AGs, necessita-se definir de forma correta os seguintes métodos e critérios (Serrada (1996)):

- Critério de codificação: tendo em vista que os AGs trabalham com manipulação de *strings* (séries ou indivíduos) de determinados alfabetos (representação), deve-se

especificar a codificação com a qual se faz corresponder cada ponto do domínio do problema com um Gene ou conjunto de Genes do Cromossomo;

- Critério de tratamento dos indivíduos não factíveis: nem sempre é possível estabelecer uma correspondência ponto-a-ponto entre o domínio do problema e o conjunto de *strings* binárias (ou de outro alfabeto utilizado) usadas para resolvê-lo. Como consequência, nem todas as *strings* (indivíduos ou séries) codificam indivíduos válidos do espaço de busca e devem ser habilitados determinados procedimentos úteis para distingui-las;
- Critério de inicialização: refere-se a como deve ser construída a população inicial com a qual se inicia o AG;
- Critério de parada: devem ser determinadas as condições nas quais se considera que o AG encontrou uma solução aceitável ou tenha fracassado no processo de busca e não faça sentido continuar;
- Funções de avaliação e aptidão: deve ser determinada a função de avaliação mais apropriada para o problema, assim como a função de aptidão que utiliza o AG para resolvê-lo;
- Operadores Genéticos: denominação dada aos operadores utilizados para proceder com a reprodução. Todo AG faz uso de pelo menos três operadores genéticos (levando em conta o AG básico): seleção, cruzamento e mutação. É claro que estes não são os únicos possíveis e além de tudo admitem variações. A seleção não é considerada como um operador genético para vários autores;
- Critérios de Seleção: a seleção deve dirigir o processo de busca em favor dos indivíduos mais aptos ou mais adequados para o objetivo requerido. Isto pode ser feito de várias maneiras como, por exemplo, por amostragem direta, por amostragem aleatória simples ou por amostragem estocástica, como pode ser visto mais adiante.
- Critério de Substituição: os critérios com que se selecionam os criadores não necessariamente têm que ser os mesmos usados para selecionar os sobreviventes, logo há necessidade de especificá-los separadamente. Alguns exemplos são:

1. Substituição Imediata: os descendentes substituem seus progenitores;
2. Substituição por Fator Cheio: os descendentes substituem aqueles membros da população mais parecidos com eles;
3. Substituição por Inserção: são selecionados para serem eliminados membros da população de criadores (geralmente os piores), os quais são substituídos pelos descendentes;
4. Substituição por Inclusão: os descendentes são somados aos n progenitores em uma única população e nesta, são selecionados os n melhores;
5. Parâmetros de Funcionamento: Os AGs necessitam que certos parâmetros de funcionamento sejam atribuídos (tamanho da população, probabilidades de aplicação dos operadores genéticos e precisão da codificação).

A seleção de um ou outro método ou critério acima depende não apenas do tipo de problema a ser resolvido, mas também de que não sejam violados certos requisitos imprescindíveis ao bom funcionamento do AGs.

II.7 ESTRUTURAÇÃO DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

a) Algoritmo Genético “Genérico ou Básico”

Seguindo o conceito anteriormente descrito juntamente com a representação da Figura 2.4, pode-se descrever o algoritmo mais detalhado que foi proposto por Holland onde é conhecido na literatura como Simple Genetic Algorithm ou Standard Genetic Algorithm ou simplesmente pela sigla **SGA** (Barbosa (1996)). O algoritmo é apresentado na Figura 2.4:

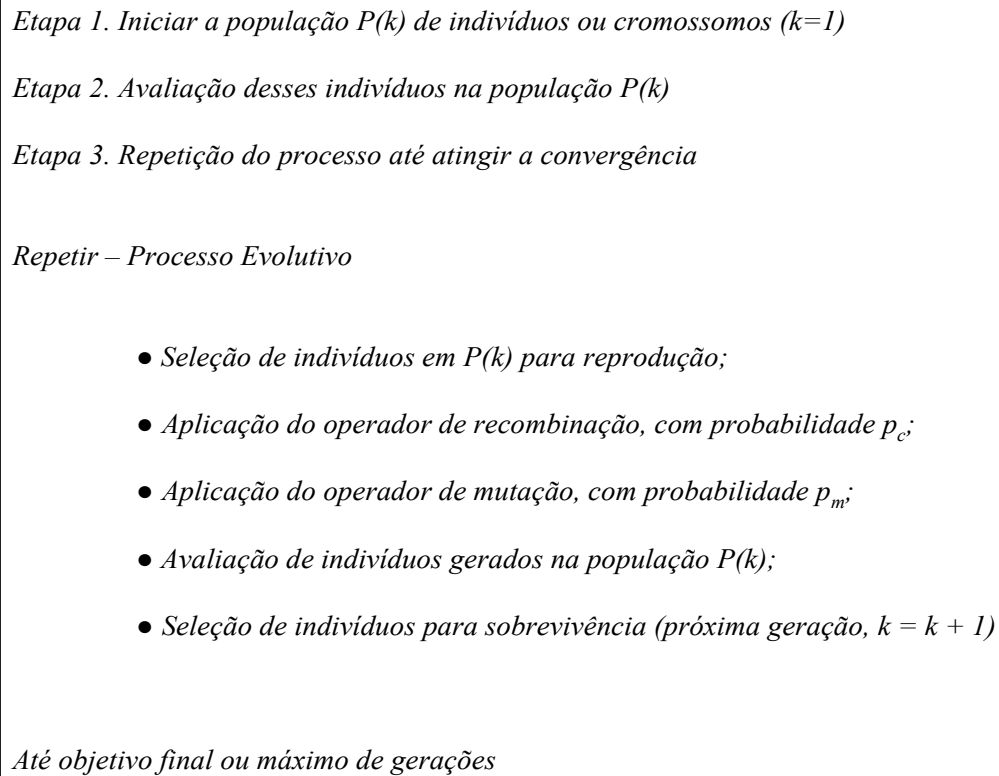


Figura 2.4 - Representação do Algoritmo Genético Básico.

Várias são as formas de representações da estrutura dos Algoritmos Genéticos, tendo como variações a aplicação de determinados procedimentos e operadores, contudo existem mais duas estruturas que são muito consideradas e utilizadas (Barbosa (1996); Penadillos (1997)). Estas são representadas pelas Figuras 2.5 e 2.6, respectivamente. Essas novas formas de representação são os dois tipos extremos de Algoritmos Genéticos os quais são conhecidos na literatura como “*geracional*” e “*em regime*” (*steady-state*).

b) Algoritmo Genético “Geracional”

Neste extremo do algoritmo, a população inteira é substituída por novos indivíduos gerados pelo processo de seleção e aplicação dos operadores genéticos e assim as seguintes etapas são realizadas na sequência apresentada pela Figura 2.5:

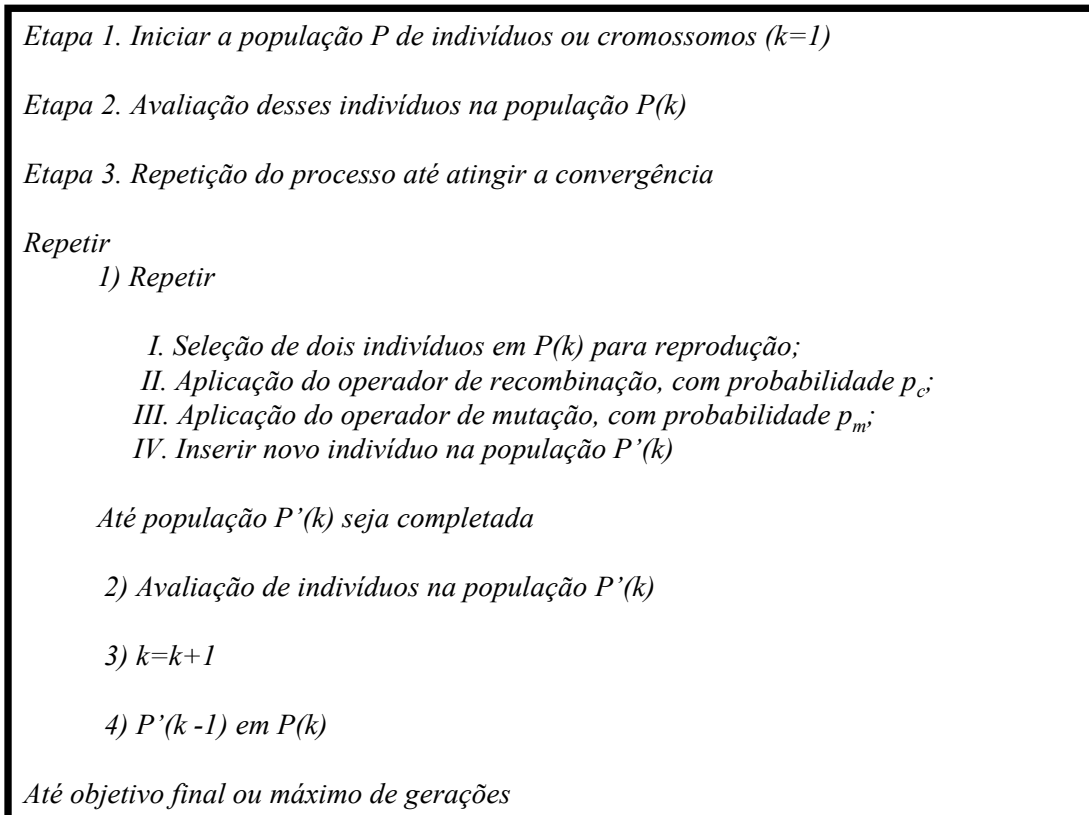


Figura 2.5 - Representação do Algoritmo Genético Geracional.

Deve-se observar que como toda a geração de progenitores é na sua totalidade substituída por uma outra mais nova de descendentes, não existe “convivência” havendo assim a perda de bons indivíduos no processo. Por esta razão, especialmente em problemas de otimização, é freqüentemente empregado p procedimentos de elitismo, onde o(s) melhor(es) indivíduo(s) de uma geração é (são) preservado(s): uma ou mais cópias são passadas diretamente para a geração seguinte.

c) Algoritmo Genético “Em Regime” ou “Em Steady-State”

Nesta outra forma de representação do extremo do algoritmo, apenas um único indivíduo é criado de cada vez e, depois de sua avaliação, onde é inserido na população em substituição a algum outro elemento, por exemplo, o pior de todos já existentes. Caso ele seja pior que todos aqueles já existentes então nada é alterado e procede-se para obtenção

de uma nova criação de indivíduos. Com o objetivo de facilitar a comparação do indivíduo gerado com os indivíduos já existentes na população, uma forma de ordenação é realizada dentro da população, assim o indivíduo gerado é comparado apenas com o último indivíduo do ordenamento, caso seja superior a ele, assume sua posição correspondente no ordenamento, sendo o último eliminado pela seleção natural. A Figura 2.6 apresenta o algoritmo:

Etapa 1. Iniciar a população $P(k)$ de indivíduos ou cromossomos ($k=1$)

Etapa 2. Avaliação desses indivíduos na população $P(k)$

Etapa 3. Repetição do processo até atingir a convergência

Repetir

1) Seleção dos operadores genéticos;

2) Seleção de indivíduos para reprodução;

3) Aplicação do operador genético selecionado;

4) Avaliação dos indivíduos gerados;

5) Selecionar um indivíduo i para sobreviver;

6) Se i é melhor que o pior elemento de $P(k)$ então inserir i em $P(k)$ de acordo com seu “ranking”

Até objetivo final ou máximo de gerações

Figura 2.6 - Representação do Algoritmo Genético em Regime ou em Steady-State.

Entre estes dois extremos de algoritmos situam-se outros que somente uma parte da população é substituída: “progenitores” e “descendentes” podem vir a coexistir. Outros esquemas de reprodução também podem ser encontrados na literatura.

II.8 PARÂMETROS GENÉTICOS

É importante também, analisar de que maneira alguns parâmetros influem no comportamento dos Algoritmos Genéticos, para que se possa estabelecê-los ou utilizá-los de forma adequada conforme as necessidades do problema e dos recursos disponíveis. São listados a seguir alguns parâmetros genéticos utilizados:

- **Tamanho Populacional:** O tamanho da população determina o número de cromossomos na população, afetando diretamente o desempenho global e a eficiência dos AGs. Com uma população pequena o desempenho pode cair, pois deste modo a população fornece uma pequena cobertura do espaço de busca do problema. Uma grande população geralmente fornece uma cobertura representativa do domínio do problema, além de prevenir convergências prematuras para soluções locais ao invés de globais. No entanto, para se trabalhar com grandes populações, são necessários maiores recursos computacionais, ou que o algoritmo trabalhe por um período de tempo muito maior.
- **Taxa de Cruzamento:** Quanto maior for esta taxa, mais rapidamente novas estruturas são introduzidas na população. Mas se esta for muito alta, a maior parte da população é substituída, e neste caso pode-se perder estruturas de alta aptidão. Com um valor baixo, o algoritmo pode tornar-se muito lento. O tipo de cruzamento a ser utilizado determina a forma como procede a troca de segmentos de informação entre os pares de cromossomos selecionados para cruzamento. Mais adiante são descritos alguns tipos de cruzamento utilizados, mas deve-se levar em conta que existem muitas outras escolhas disponíveis para usuários de AGs. O ideal seria testar diversos tipos de cruzamento em conjunto com as outras configurações do AG em uso para verificar qual apresenta um melhor resultado. Em inúmeras aplicações com AGs a grande maioria da faixa utilizada destes valores (faixa de taxa de cruzamento) encontra-se em torno de 0,5 e 0,9.
- **Taxa de Mutação:** Determina a probabilidade em que uma mutação pode ocorrer. A mutação é utilizada para dar nova informação para a população e também para

prevenir que a população se sature com cromossomos semelhantes (convergência prematura). Uma baixa taxa de mutação previne que uma dada posição fique estagnada em um valor, ou em uma determinada região do espaço de busca. Com uma taxa muito alta a busca se torna essencialmente aleatória além de elevar muito, a possibilidade de que uma boa solução seja destruída. A melhor taxa de mutação depende do tipo de aplicação, mas para a maioria dos casos está entre 0,001 e 0,1.

II.9 MECANISMOS DE AMOSTRAGEM DE POPULAÇÕES

Após decidir como pode ser realizada a codificação de um AG (forma de representação do problema com números binários, reais ou outros alfabetos), o passo seguinte é decidir como o AG atua para seleção de indivíduos (cromossomos), ou seja, como deve ser a escolha de indivíduos na população que gerem os descendentes para a próxima geração.

Os mecanismos de amostragem são bastante variados, sendo que, entre eles, se destacam três grupos principais segundo o grau de influência da aleatoriedade no processo:

- **Amostragem direta:** seleção de um subconjunto de indivíduos da população mediante um critério fixo, no estilo de "os n melhores", "os n piores", "aleatórios", etc..
- **Amostragem aleatória simples:** é determinada a mesma probabilidade para todos os elementos da população, de serem selecionados para a amostra.
- **Amostragem estocástica:** são atribuídas probabilidades de seleção ou pontuações aos elementos da população com base na sua função de aptidão ou avaliação. Existem muitos mecanismos de amostragem estocástica, que são escolhidos de acordo com a sua aplicação. Dentre os quais alguns são descritos a seguir:

1. **Por sorteio:** as pontuações são consideradas estritamente como probabilidades de seleção para formar a amostra, a qual é constituída realizando n ensaios de uma variável aleatória com uma distribuição de probabilidades determinada. Para ilustrar, considera-se a existência de uma população de 4 indivíduos $P = \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$, e digamos que o resultado da função de aptidão ou avaliação de cada indivíduo seja, respectivamente $p_1 = 0,1; p_2 = 0,4; p_3 = 0,2; p_4 = 0,6$. A seqüência de etapas seriam:

- a. Calcular as pontuações acumuladas da seguinte forma:

$$q_0 = 0,6$$

$$q_1 = p_1 = 0,1$$

$$q_2 = p_1 + p_2 = 0,5$$

$$q_3 = p_1 + p_2 + p_3 = 0,7$$

$$q_4 = p_1 + p_2 + p_3 + p_4 = 1,3$$

- b. Gerar um número aleatório simples z , o qual a termo de exemplo considera-se $z = 0,556$.
- c. Por meio do número gerado aleatoriamente, eleger o indivíduo que se encaixe na regra: $q_{j-1} < z < q_j$. No nosso exemplo, o indivíduo selecionado seria o x_3 , pois: $q_{3-1} < z < q_3$, ou seja, $0,5 < 0,556 < 0,7$.

Para realizar a amostragem por sorteio de n indivíduos, devemos apenas modificar os últimos dois passos anteriores da seguinte forma:

- 2.a. Gerar n números aleatórios simples $z_j (\forall j = 1, \dots, n)$.

- 3.a. Para cada $j = 1, \dots, n$ se escolhe o indivíduo x_j que verifique a regra pré-determinada $q_{j-1} < z_j < q_j$.

2. **Por restos:** a cada indivíduo x_j é atribuído diretamente $[p_i \times k]$ locais na amostra. Frequentemente os indivíduos dividem os locais vagos em função das suas pontuações. A distribuição costuma ser por sorteio (ver item anterior) e então se diz "amostragem estocástica por restos". Continuando com o exemplo

proposto, a x_4 é atribuído um local na amostra; o indivíduo que ocupa o outro local é selecionado por sorteio, pela geração de um número aleatório simples z e há uma comparação de seu valor com as pontuações acumuladas q_j , seguindo a mesma regra anterior ($q_{j-1} < z_j < q_j$).

3. **Universal ou por roleta:** inicialmente proposto por Holland (Holland (1975)) e Goldberg, (Goldberg (1989)). É um método bastante simples, onde cada indivíduo da população é representado proporcionalmente ao seu índice de aptidão. Assim, os indivíduos com alta aptidão recebem uma porção maior da roleta, enquanto que os de baixa aptidão ocupam uma porção relativamente menor. Deste modo, realiza-se o lançamento N vezes da roleta, dependendo do tamanho da população, e escolhe-se para a população temporária aqueles indivíduos por ela sorteados.
4. **Por torneio:** neste método simples cada elemento da amostra é selecionado elegendo o melhor indivíduo de um conjunto de z elementos tomados aleatoriamente na população base; isto é repetido um número de vezes necessárias para completar a amostra. O melhor valor dos indivíduos que competem é designado e o indivíduo que o possui é selecionado. O valor do parâmetro z costuma ser um valor inteiro pequeno em relação ao tamanho total da população base, sendo em geral dois ou três.

Existem na literatura vários métodos de seleção que são utilizados em diversos trabalhos científicos e muitos deles foram desenvolvidos para características específicas em cada tipo de problema analisado.

II.10 FUNCIONAMENTO DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

A resposta que é normalmente dada sobre o comportamento dos AG foi apresentada por John Holland, em sua obra “Adaptation in Natural and Artificial Systems”, já citada anteriormente. Nesse livro, ele desenvolveu uma série de argumentos com o

objetivo de explicar como os Algoritmos Genéticos podem resultar em uma busca robusta e complexa através de amostras da superfície do espaço de busca.

Segundo Mitchell (1996), a teoria tradicional dos AGs assume que eles trabalham através de descoberta, ênfase, e recombinação de bons “blocos construtores” de solução em um alto grau de paralelismo. A idéia é que boas soluções tendem ser compostas de bons blocos construtores.

Esta parte do trabalho tem como objetivo apresentar os tópicos: o teorema fundamental dos AG, comumente chamado de Teorema dos Esquemas (Schemata Theorem), um exemplo prático do processamento dos esquemas, a quantidade útil de esquemas que são processados pelo AG, a Hipótese dos Blocos Construtivos ou Construtores (Building Blocks Hypothesis), o Problema da Decepção e a visão dos esquemas como hiperplanos, conforme podemos ver na seqüência. A seguir são descritos o funcionamento e o processo evolutivo dos Algoritmos Genéticos e como é o processamento de busca (os tópicos subseqüentes são baseados no trabalho de Teixeira (2004), Soares (1997) e Goldberg (1989)).

II.10.1 PROCESSO EVOLUTIVO DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

Através da procura por semelhanças na codificação dos indivíduos que possuem bons desempenhos, os AGs evoluem na direção de pontos ótimos. O entendimento do processo e mecanismo de busca procura analisar o indivíduo de uma forma mais ampla atribuindo na codificação binária um determinado caráter denominado como auxiliar, ou coringa (don't care), o símbolo “*”, que pode assumir os dois valores pertinentes a este tipo de codificação, 0 ou 1. Desta maneira a estrutura formada por $\{0, 1, *\}$ é denominado ser um esquema (H). Em uma estrutura de comprimento ℓ , através da codificação binária, obtém-se 2^ℓ cadeias de caracteres e $(2+1)^\ell$ esquemas distintos (Goldberg (1989) e Holland (1975); e Soares (1997)).

Um esquema H descreve um conjunto de cadeias de caracteres possuindo semelhanças em algumas posições específicas. Supondo-se que uma cadeia de caracteres de codificação binária tenha um comprimento $\ell = 4$, sendo assim um esquema H_1 poderia ser representado por $**11$, e este representaria as cadeias de caracteres 0011, 0111, 1011, 1111, e cada cadeia de caracteres possíveis significariam uma instância do esquema.

Determinadas características relacionadas às posições fixas são muito importantes na análise do desempenho desses esquemas. Uma das primeiras características relativas aos esquemas é a ordem, $o(H)$, que significa a quantidade de posições fixas. Dessa forma, pode-se dizer que o esquema $*010$ possui ordem 3. Outra característica fundamental é o comprimento de definição, $\delta(H)$, que descreve a distância entre as posições fixas nas posições extremas. O esquema $H_2 = **01*$ tem $\delta(H_2) = 4 - 3 = 1$, o esquema $H_3 = ****1$ tem $\delta(H_3) = 0$, $H_4 = 0**10$ tem $\delta(H_4) = 4$. Outro fator de muita importância ao esquema é relacionado ao desempenho $f(H)$, sendo medido pela média aritmética do ajuste (ou valor de aptidão) entre todas as instâncias para uma dada população e geração que é analisada.

A partir da definição de esquema, outras definições são consideradas pela importância da análise do mecanismo de pesquisa dos AGs. Uma delas descreve a **Hipótese dos Blocos de Construção e o Teorema Fundamental dos AGs**, descritos por Goldberg (1989) e Holland (1975). Esses tópicos descrevem a viabilidade de existência de um esquema e em consequência um conjunto de cadeias de caracteres, que se disponibilizam para efeitos básicos como a reprodução, cruzamento e mutação que são descritos na sequência.

II.10.2 HIPÓTESES DOS BLOCOS DE CONSTRUÇÃO

O desempenho dos AGs fica mais evidente quando a população considerada é analisada pela perspectiva de esquemas. Esquemas de pequeno comprimento de definição, de baixa ordem e com alto desempenho são amostrados e recombinados, formando cadeias de caracteres de valores de aptidão altos. Desta forma reduz-se a complexidade do problema. O objetivo é construir indivíduos fortes a partir dos melhores existentes, ao invés de tentar a recombinação de cadeias de caracteres quaisquer. Esquemas curtos, de baixa ordem e desempenho acima da média, se juntam como blocos de construção (building blocks), formando uma estrutura maior e melhor. A teoria dos esquemas fornece aos mesmos a possibilidade de investigação e busca em regiões ao invés de atuarem em apenas um único ponto. Por isso deve-se entender bem a representatividade de um determinado esquema na amplitude do espaço a ser investigado. Sabe-se que o número máximo de cadeias de caracteres diferentes no código binário é 2^ℓ , e considerando um esquema qualquer com uma posição fixa, ou seja, $o(H)=1$. O espaço a ser atingido, no processo de busca é $2^{\ell-1}/2^\ell$, ou seja, 50%. Com o aumento da ordem para 2, a região de abrangência cai para 25% e assim por diante. Conclui-se que um esquema pode abranger e mapear $2^{\ell-o(H)}/2^\ell$ do espaço total de busca.

Os blocos de construção são de extrema importância na fase inicial dos AGs, que tem como objetivo encontrar a região onde se encontra a solução global. Em outra fase, de convergência final, as cadeias de caracteres compartilham praticamente o mesmo código genético, em consequência os mesmos esquemas de alto desempenho. A partir de então, os esquemas não mais contribuem com significância nos blocos de construção.

II.10.3 TEOREMA FUNDAMENTAL DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

A definição do **Teorema Fundamental dos Algoritmos Genéticos** é desenvolvida apenas para o SGA (Simple Genetic Algorithm desenvolvido por Holland), onde o método de seleção é o da roleta, o cruzamento é o de um ponto de corte, e a mutação é realizada verificando-se a probabilidade para cada alelo de cada indivíduo. Para utilização de outros métodos de seleção, cruzamento e mutação, as formulações do teorema são obtidas de forma análoga.

Seguindo o algoritmo básico dos AGs, observa-se que no princípio há a geração de uma população aleatória, a seguir os membros da população são submetidos aos processos reprodutivos que englobam o cruzamento e a mutação. Os indivíduos são avaliados e determina-se qual deles possuem oportunidades de participarem das gerações seguintes (sobreviverem ou desaparecerem). Um esquema H , conforme apresentado por Goldberg (1989) e Holland (1975), pode explicar que as propriedades dos esquemas proporcionam mecanismos para discutir e classificar as semelhanças entre as cadeias de caracteres. Conceitos como, comprimento de definição e ordem de um esquema, facilitam a análise dos efeitos diversos da reprodução e dos outros operadores genéticos sobre os “building blocks”, dentro da população.

Supõe-se que em uma dada geração t , um determinado esquema particular H , possua m representantes, esta situação é descrita da seguinte forma: $m = m(H, t)$ e na geração $t+1$ quantos representantes vão existir? Durante o processo reprodutivo uma cadeia de caracteres é copiada de acordo com a probabilidade de seleção p_{sel} que é proporcionada pelo seu desempenho f_i , diante de todos os desempenhos encontrados na população, $\sum f_i$, ou seja, $p_{sel} = f_i / \sum f_i$. A analogia, para os esquemas, é descrita da seguinte forma: $p_{sel} = f(H) / \sum f_i$, onde $f(H)$ é o desempenho médio das instâncias do esquema. Na geração $t+1$, n_{pop} (número de indivíduos totais da população) indivíduos são

selecionados, esperando-se ter $m(H, t+1) = m(H, t) * n_{pop} * p_{sel} = f(H) / \sum f_i$ que são os representantes de H . Além dessas definições sabe-se que a médias de desempenhos da população f_{med} é definida como $f_{med} = \sum f_i / n_{pop}$, ficando o valor de $m(H, t+1)$ a ser obtido da Equação 2.1.

$$m(H, t+1) = m(H, t) \frac{f(H)}{f_{med}} \quad (2.1)$$

A análise da Equação 2.1 verifica a possibilidade de estimar o crescimento ou decréscimo de um determinado esquema particular depois de um certo número de gerações. Esta questão pode ser definida através de um esquema H com desempenho $f(H) = f_{med} + c * f_{med}$, onde c é uma constante durante t gerações, ficando reescrita da seguinte maneira:

$$m(H, t+1) = m(H, t) \frac{f_{med} + c * f_{med}}{f_{med}} = m(H, t) * (1 + c) \quad (2.2)$$

Iniciando-se com $t=0$ e observando o que acontece com a equação 2.2 na geração t , a ação da reprodução sobre os esquemas possui forma exponencial, como apresentado pela Equação 2.3:

$$m(H, t) = m(H, 0) * (1 + c)^t \quad (2.3)$$

Da Equação 2.1 verifica-se que o número de esquemas aumenta dependendo da razão entre os desempenhos médios de suas instâncias e da população, neste caso apenas o efeito da reprodução foi levado em consideração.

O processo reprodutivo determina a sobrevivência de alguns indivíduos (e com quantas cópias) e quem desaparece. Apenas com a reprodução novas regiões não são

exploradas, devido ao não surgimento de novos indivíduos, além de não haver troca de informações entre os indivíduos, devido a não favorecer interação entre eles. O operador que favorece e promove a interação entre os membros da população é o cruzamento. Para o entendimento de como os esquemas são afetados pelo cruzamento, adota-se uma cadeia de caracteres S , com $\ell = 10$, e dois esquemas H_1 e H_2 , ambos com ordem igual a dois, mas possuindo comprimentos de definição $\delta(H_1) = 7$ e $\delta(H_2) = 1$, como pode ser observado a seguir na exemplificação:

$$\begin{array}{rcl} S & = & 1 \ 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 0 \\ H_1 & = & * \ * \ 1 \ * \ * \ * \ * \ * \ * \ 0 \\ H_2 & = & * \ 0 \ 1 \ * \ * \ * \ * \ * \ * \ * \end{array}$$

O ponto de corte no cruzamento é uma escolha feita aleatoriamente entre 1 e $\ell - 1$. Se a cadeia de caracteres S for escolhida para realização do cruzamento, o esquema H_2 tem maiores chances de sobrevivência ao cruzamento, pois este só é desfeito se o corte ocorrer entre as posições 2 e 3, enquanto que H_1 pode ser destruída se o corte ocorrer entre as posições 3 e 10. Por esse fato a probabilidade de destruição p_d de H_2 é $1/9$, enquanto que para H_1 é $p_d = 7/9$. Sintetizando, $p_d = \delta(H)/(\ell - 1)$. Normalmente utiliza-se a probabilidade de sobrevivência p_s ao invés de p_d , desta forma $p_s = 1 - p_d$ ou $p_s = 1 - \delta(H)/(\ell - 1)$. O processo de cruzamento só ocorre com uma dada probabilidade p_c (com valores entre 0 e 1), que é considerada. Caso o cruzamento é realizado entre duas cadeias de caracteres representantes de um mesmo esquema H , este jamais é destruído. Em termos matemáticos $p_d = p_c * \delta(H)/(\ell - 1)$, e como o cruzamento pode ser realizado entre representantes de um mesmo esquema $p_d \leq p_c * \delta(H)/(\ell - 1)$, conduzindo a $p_s \geq 1 - p_c * \delta(H)/(\ell - 1)$.

A ação em conjunto da reprodução e cruzamento (eventos independentes) é obtida multiplicando-se os dois eventos, da seguinte maneira:

$$m(H, t+1) \geq m(H, t) \frac{f(H)}{f_{med}} \left[1 - p_c \frac{\delta(H)}{(\lambda - 1)} \right] \quad (2.4)$$

Essa expressão evidencia perfeitamente, que se um determinado esquema possui um desempenho acima da média da população e um pequeno comprimento de definição, com grande probabilidade este esquema vai se reproduzir. No processo reprodutivo, os indivíduos com maior aptidão (mais aptos) têm maiores chances de serem selecionados, enquanto que no cruzamento é realizada a troca de material genético entre os variados indivíduos da população. Após várias gerações que se passam, os indivíduos podem apresentar o mesmo código genético, impossibilitando o processo de exploração de novas regiões ou mesmo aperfeiçoar o material genético que pode ter sido perdido em alguma das operações. A partir deste ponto ocorre a mutação que supre esta deficiência.

Na mutação cada bit da cadeia de caracteres pertencentes a cada indivíduo da população está sujeito ao processo através de uma probabilidade p_m . Cada alelo simples tem uma probabilidade $p_s = 1 - p_m$, e como cada mutação é estatisticamente independente, a probabilidade de sobrevivência para um dado esquema em particular é apresentado como produto das probabilidades para cada posição fixa, ou seja a probabilidade de sobrevivência de um esquema com ordem $o(H)$ é $p_s = (1 - p_m)^{o(H)}$. Para $p_m \ll 1$, o que normalmente acontece, podendo se aproximar à relação anterior para $p_s = 1 - o(H) * p_m$. Em consequência tem-se a Equação 2.5:

$$m(H, t+1) \geq m(H, t) \frac{f(H)}{f_{med}} \left[1 - p_c \frac{\delta(H)}{(\lambda - 1)} - p_m * o(H) \right] \quad (2.5)$$

Esta última equação permite a formulação dos efeitos seleção/reprodução, cruzamento e mutação sobre o número de esquemas esperados para a próxima geração.

A hipótese de construção de blocos se concretiza, definindo que esquemas com altos desempenhos, comprimento de definição pequeno e ordem baixa são os melhores candidatos a perseverarem. A equação 2.5 recebe a denominação de **Teorema dos Esquemas** ou **Teorema Fundamental dos Algoritmos Genéticos**.

II.10.4 TEOREMA DOS ESQUEMAS – VALIDADE DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

A representação matemática do **Teorema dos Esquemas (Teoria Fundamental dos Algoritmos Genéticos)** descreve e demonstra com clareza quais esquemas possuem maiores oportunidades de passar ou não para a próxima geração. A validade da equação pode ser mostrada através do ponto de vista de esquemas, como:

$$\begin{aligned} H_1 &= 1 \quad * \quad * \quad * \quad * \\ H_2 &= 1 \quad * \quad 0 \quad * \quad * \\ H_3 &= * \quad 1 \quad * \quad * \quad 0 \\ H_4 &= * \quad * \quad * \quad 0 \quad 1 \\ H_5 &= * \quad 1 \quad * \quad 0 \quad * \end{aligned}$$

A verificação do desempenho dos esquemas em relação aos membros da população torna-se mais compreensível através das Tabelas 2.1 e 2.2 desenvolvidas e adaptadas de Soares e Vasconcelos (1996):

Tabela 2.1 - Análise de desempenho dos esquemas H1-H5 na geração inicial (t=0).

Número	Indivíduo	x	$f_i = f(x)$	$f_i/\Sigma f$ (%)	f_i/f_{med}	Inteiro(f_i/f_{med})
1	01101	13	26	21,67	0,87	1
2	11000	24	48	40,00	1,60	2
3	10010	18	36	30,00	1,20	1
4	00101	5	10	08,33	0,33	0
Soma	-	-	120	100,0	4,00	4
Média	-	-	30	25,00	1,00	1
Máximo	-	-	48	40,00	1,60	2
Esquema	$m(H, t=0)$		$f(H)$	$\delta(H)$		$o(H)$
1****	2		42	0		1
1*0**	2		42	2		2
*1**0	1		48	3		2
***01	2		18	1		2
*1*0*	2		37	2		2

Neste exemplo mostrado pela Tabela 2.1, $p_c = 1$, $p_m = 0,01$, $f_{med} = 30$ e $\ell = 5$.

Desta forma o Teorema Fundamental dos Algoritmos Genéticos, descrito pela equação 2.5 fica da forma:

$$m(H, t+1) = m(H, t) \frac{f(H)}{30} \left[1 - \frac{\delta(H)}{30} - 0,01 * o(H) \right] \quad (2.6)$$

Realizando a substituição de $m(H, t)$, $f(H)$, $\delta(H)$ e $o(H)$ referentes aos valores da Tabela 2.1, são obtidas as estimativas de quantidade de cada esquema para a geração seguinte e o resultado se encontra na Tabela 2.2, onde é observado que o esquema H_1 possui um alto desempenho médio, tendo um comprimento $\delta(H) = 0$ e $o(H) = 1$, possuindo grandes condições de aumentar o número de cópias. No caso do esquema H_2 , este possui um desempenho igual ao de H_1 , entretanto a probabilidade que exista separação de suas respectivas posições fixas é determinada por $\delta(H_2)/(\ell - 1) * 100 = 50\%$. Durante o processo de cruzamento, nesta exemplificação, o corte da cadeia ocorre entre o ponto 2 e 3, promovendo a separação do esquema, entretanto as cadeias de caracteres escolhidas para formarem o par para o cruzamento eram representantes deste esquema, evitando sua destruição e procurando manter as características originais. O esquema H_3 obteve duas cópias devido à reprodução da cadeia de caracteres (indivíduo 2). Ao ser levada ao cruzamento, houve rompimento, mas o mesmo cruzamento que a desfez a reconstruiu.

Portanto, é importante ressaltar que o cruzamento não adiciona novas características, mas explora as existentes. O esquema H_4 possui um baixo desempenho mediano, mas tem $\delta(H_4) = 1$ que contribuiu com sua sobrevivência para a geração seguinte. Por último tem-se o esquema H_5 , com desempenho mediano e comprimento de definição longo que obteve cópias pelo mesmo motivo que no caso H_2 .

Tabela 2.2 - Avaliação da estimativa de alguns esquemas para a geração t=1.

Número	Indivíduo	x	$f_i = f(x)$	$f_i/\Sigma f$ (%)	f_i/f_{med}	Inteiro(f_i/f_{med})
1	01000	8	16	10,13	0,41	0
2	11101	29	58	36,71	1,47	1
3	11010	26	52	32,91	1,32	1
4	10000	16	32	20,25	0,81	1
Soma	-	-	158	100,0	4,01	3
Média	-	-	39,5	25,00	1,00	0,75
Máximo	-	-	58	36,71	1,47	1
Esquema	Indivíduos que continham $H(t=0)$		Indivíduos que contém $H(t=1)$		$M(H,t=1)$	Quantidade real em t=1
1****	2;3		2;3;4		2,77	3
1*0**	2;3		3;4		1,34	2
*1**0	2		1;3		0,37	2
***01	1;4		2		0,88	1
*1*0*	1;2		1;2		1,18	2

Pode-se concluir que utilizando o cruzamento como o único ponto de corte, a mutação com pequena taxa de probabilidade e o método da roleta como mecanismo de seleção, o Teorema Fundamental dos Algoritmos Genéticos, que vem representado pela Equação 2.5, foi desenvolvido pela perspectiva dos esquemas e a partir desta equação nota-se que esquemas curtos de baixa ordem e alto valor de aptidão, são fortes soluções parciais para o problema e através disso, possuem grandes oportunidades de continuarem se desenvolvendo nas gerações subseqüentes, nas quais pelas combinações dessas soluções, os AGs vão promovendo o surgimento de novas soluções, os chamados blocos de construção (building blocks).

O mecanismo dos AGs trabalha com montagem de blocos parciais (soluções parciais) reduzindo a complexidade de problemas como um todo.

II.10.5 PARALELISMO IMPLÍCITO

Em cada geração o Algoritmo Genético processa um número de indivíduos, os quais são determinados como tamanho da população inicial (n_{pop}), que o transforma em um poderoso método de busca e procura, sendo verificado de forma paralela (n_{pop}^3) esquemas. Esse resultado de extrema importância recebeu a denominação de Paralelismo Implícito. Esta estimativa de n_{pop}^3 esquemas por n_{pop} indivíduos foi desenvolvida por Goldberg (1989), sendo estudado na sequência.

Ao iniciar-se a estimativa do número de esquemas processados de forma paralela deve-se conhecer a capacidade de formação dos indivíduos e esquemas correlatos de qualquer código. Para variadas formas de codificação, identificando k como o número de alelos diferentes e ℓ o comprimento da cadeia de caracteres, existem k^ℓ possibilidades diferentes de construção das cadeias de caracteres e $(k+1)^\ell$ números de esquemas. Cada cadeia específica representa k^ℓ esquemas diferentes, ou seja, a cadeia de caracteres 11111 representa todos os esquemas possíveis formados pelos caracteres 1 e *, por este fato em uma determinada população de n_{pop} indivíduos existem de k^ℓ a $n_{pop} * k^\ell$ esquemas realizando competições simultaneamente.

Considera-se uma determinada população n_{pop} cadeias de caracteres binários de comprimento ℓ , além disso, considere também apenas os esquemas sobreviventes com probabilidade maior que p_s , onde esta possui um valor fixo (constante). Nesta situação adotada apenas esquemas com taxa de destruição $p_d < 1 - p_s$. Assumindo a operação de cruzamento com apenas um único ponto de corte e uma taxa de mutação pequena é observado apenas os esquemas com comprimento $\ell_s < p_d(\ell - 1) + 1$. Isto é verificado através da consideração inicial de por uma probabilidade de cruzamento igual a 1. Assim, a probabilidade de destruição de um determinado esquema promovido pela ação do

cruzamento é definida como $p_d < \frac{\delta(H)}{(\ell-1)}$. O valor de $\delta(H) = \ell_s - 1$ relacionado a valores de ℓ_s , tais que, $\ell_s > (\ell-1)p_d + 1$ aumentam a probabilidade de destruição. Com isso, na obtenção de $p_d < 1 - p_s$, leva em conta somente os esquemas que possuem comprimentos $\ell_s < p_d(\ell-1) + 1$.

Através de um comprimento de um esquema específico, estima-se um determinado limite inferior para o número de esquemas que é processado por uma população inicial de indivíduos gerados aleatoriamente. Nessa estimativa, é contado o número de esquemas de comprimento ℓ_s ou menor e a partir de então, é multiplicado pelo tamanho da população.

A primeira etapa a ser processada, supõe-se a intenção de contar todos os esquemas de comprimento de definição $\ell_s = 5$ ou menor no seguinte indivíduo de comprimento $\ell_s = 10$.

1 0 1 1 1 0 0 0 1 0

A primeira etapa consiste no cálculo do número de esquemas na primeira célula considerando como fixo o quinto bit, ou seja, deseja-se que todos os esquemas fiquem da forma:

1 0 1 1 1 0 0 0 1 0 → # # # # 1 * * * * *

onde o símbolo “*” representa os caracteres 0 e 1. O símbolo # representa os valores fixos de 0 ou 1, ou “*”. Há $2^{(\ell_s-1)}$ valores distintos e representantes destes esquemas devido à $\ell_s - 1 = 4$ posições que podem ser bits fixos ou “*”. A contagem do número total é realizada deslizando-se pela região selecionada uma posição a cada vez.

O total de deslizamentos é definido por $\ell - \ell_s + 1$ e, portanto, o número de esquemas de comprimento igual ou menor a ℓ_s em uma única cadeia de caracteres é obtida por $2^{(\ell_s - 1)} * (\ell - \ell_s + 1)$. A segunda etapa dessa estimativa é obtida fazendo-se a multiplicação de $2^{(\ell_s - 1)} * (\ell - \ell_s + 1)$ pelo número de indivíduos da população n_{pop} , obtendo o valor $n_{pop} * 2^{(\ell_s - 1)} * (\ell - \ell_s + 1)$. O resultado é superestimado, considerando que existem muitas duplicatas de esquemas de baixa ordem em populações grandes. Para tornar este resultado mais compatível e adequado, deve-se considerar $n_{pop} = 2^{\ell_s / 2}$. A distribuição do número de esquemas é feita de forma binomial, concluindo-se que todos os esquemas com comprimento menor ou igual a ℓ_s , metade possui ordem entre $\ell_s / 2$ e ℓ_s e metade com ordem menor que $\ell_s / 2$. Contando apenas os esquemas de ordem mais elevada, é feita uma estimativa de um limite inferior do número de esquemas como se segue:

$$n_s \geq n_{pop} * 2^{\lambda_s - 2} (\lambda - \lambda_s + 1) \quad (2.7)$$

Esta equação difere do valor que foi superestimado por um fator de $1/2$ e, além disso, a restrição do tamanho da população para o valor particular $2^{\ell_s / 2}$ resulta na expressão:

$$n_s \geq \frac{n_{pop}^3 (\lambda - \lambda_s + 1)}{4} \quad (2.8)$$

Desde que $n_s = \text{constante} * n_{pop}^3$, deduz-se que o número de esquemas é proporcional ao cubo do tamanho da população. Por isso, na geração de início, quando há o processamento dos n_{pop} indivíduos ocorrem paralelamente o processamento de n_{pop}^3 esquemas diferenciados.

Na verdade os Algoritmos Genéticos promovem uma avaliação dos desempenhos de todos os n_{pop} membros da população que é analisada sempre de geração em geração, mas analisam também de forma implícita n_{pop}^3 esquemas que nada mais é do que o Paralelismo Implícito.

II.10.6 VISÃO GEOMÉTRICA DOS ESQUEMAS

A dificuldade de entendimento a respeito do Paralelismo Implícito, com os quais os Algoritmos Genéticos trabalham, fez com que uma nova forma de verificação viesse para tal entendimento. Essa forma é através de uma visão geométrica dos esquemas em um espaço de busca. Considerando esquemas de comprimento $\ell = 3$ e um espaço de busca tridimensional como pode ser verificado na Figura 2.7.

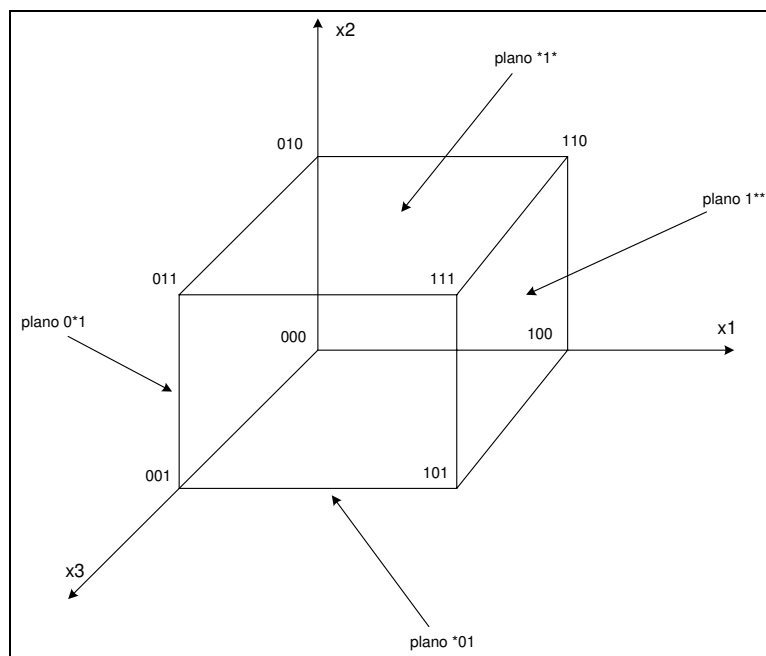


Figura 2.7 - Visão geométrica dos hiperplanos (baseado em Soares (1997)).

Os esquemas com ordem 3 definem pontos específicos no espaço, e esquemas com a ordem 2 definem linhas de possíveis soluções. Os planos de um espaço são os esquemas de ordem 1, enquanto que o espaço total é coberto por esquema de ordem 0, ou ***.

Para espaços superiores a dimensões em 3D a visão geométrica torna-se impossibilitada, mas pode ser generalizada para n dimensões, formando hiperplanos. Os AGs cortam os hiperplanos na procura de um melhor desempenho.

Uma das conclusões que se pode tirar é que a representação da cadeia de caracteres sendo representada através dos esquemas consegue entender que o procedimento de busca de uma solução ótima é feito com uma exploração dos diversos esquemas semelhantes, onde pode ser observado na Figura 2.7 que apresenta graficamente as similaridades dos esquemas conduzindo as mais variadas regiões. Detalhes deste tópico são apresentados por Mitchell (1996), Goldberg (1989) e Holland (1975).

II.11 ASPECTOS PRINCIPAIS DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

II.11.1 CODIFICAÇÃO DOS PARÂMETROS

Existem três tipos de codificação utilizados com mais frequência: a codificação Binária, a codificação Gray e a codificação Real, entre outras como pode ser observado na Tabela 2.3 e 2.4.

II.11.1.1 CODIFICAÇÃO BINÁRIA

O código binário foi o primeiro a ser explorado por causa de sua analogia direta com a genética natural. Como seu próprio nome diz, este código utiliza números binários,

ou seja, apenas conjuntos de 0 e 1 para representar as variáveis. Um indivíduo com codificação binária é representado da seguinte forma:

$$X = [010101 \quad 1101 \quad \dots \quad X_{n \text{ Var}}],$$

Onde cada variável é representada por um conjunto de bits (genes). O número de bits pode ser diferente para cada variável, estando relacionado à precisão requerida. Por exemplo, se os limites de uma variável estão entre -2 e 2 e a precisão é de quatro casas decimais, tem-se 40 000 divisões. Portanto a variável deverá ter 16 bits ($2^{15} = 32\,768$; $2^{16} = 65\,536$) para ser corretamente representada. Se o indivíduo tem 10 variáveis e todas têm a mesma precisão, seria representado por um vetor de 160 bits.

Existem algumas dificuldades em trabalhar com a codificação binária. Uma delas é o fato que, para se ter uma precisão alta, deve-se representar o indivíduo por um vetor muito extenso. Outro problema é a presença de *Hamming cliffs*, que são grandes diferenças nas cadeias de bits que codificam dois números inteiros próximos (Goldberg (1989)). Esta dificuldade fica evidente quando, por exemplo, se realiza uma perturbação nos bits mais significativos da variável. Esta perturbação pode causar um grande deslocamento da variável no universo de busca, o que nem sempre é desejado. Para se evitar este último problema pode-se utilizar o código Gray.

II.11.1.2 CODIFICAÇÃO GRAY

Na codificação Gray, como na codificação binária, utilizam-se apenas cadeias de 0 e 1 para representar as variáveis. A diferença está na facilidade de operação. Isto ocorre devido à propriedade de semelhança existente na cadeia codificada que representa números inteiros adjacentes (Mitchell (1996)). Pode-se esclarecer melhor isto através da Tabela 2.3.

Tabela 2.3 - Comparação entre o código binário e o código Gray.

Números Decimais	0	1	2	3	4	5	6	7
Código Binário	0	1	10	11	100	101	110	111
Código Gray	0	1	11	10	110	111	101	100

Com a utilização do código Gray, uma pequena taxa de perturbação ajuda na convergência final dos AGs, enquanto que no binário poderia ampliar a região de exploração. Com isso pode-se verificar que o código Gray favorece a precisão da solução, mas pode levar a um ótimo local. Já o código binário se torna mais “livre” para explorar novas regiões e localizar o ótimo global, mas o refinamento da solução torna-se mais difícil.

II.11.1.3 CODIFICAÇÃO REAL

A codificação real trabalha diretamente com números reais. Isto é muito prático quando se trabalha com variáveis reais por natureza e se usa uma linguagem de programação que lida diretamente com números reais. Entretanto, tal codificação torna os métodos de troca de informações genéticas mais complexas. Como exemplo de indivíduo com codificação real pode-se ter:

$$X = [0,744 \quad 18,356 \quad \dots \quad X_{n \text{ Var}}]$$

A maioria dos trabalhos desenvolvidos utiliza a codificação binária, onde cada cromossomo é um vetor composto por zero e uns, com cada bit representando um gene do mesmo. Cada indivíduo de uma população representa um candidato em potencial à solução do problema de otimização. No Algoritmo Genético clássico proposto por Holland (1975), os indivíduos são codificados em arranjos binários de tamanho fixo. A motivação para utilização da codificação binária vem da teoria dos esquemas (schemata theory), utilizada com relativo sucesso descrevendo como os Algoritmos Genéticos funcionam. Estudos desenvolvidos por Holland (1992) declararam que haveria benefício para o desempenho do

algoritmo maximizar o paralelismo implícito inerente ao Algoritmo Genético, e demonstra que um alfabeto binário maximiza o paralelismo implícito.

Em muitas aplicações práticas de otimização numérica, a utilização da codificação binária pode levar a um desempenho insatisfatório. Em otimizações com parâmetros reais, os Algoritmos Genéticos com representação inteira ou real (ponto flutuante), normalmente apresentam desempenhos superiores que a binária.

Além das formas de codificação vistas até o momento, outras representações dos Algoritmos Genéticos também são utilizadas nos diversos problemas. Essa variedade de formas de codificação é apresentada conforme a Tabela 2.4 de acordo com o método de solução que é utilizado. Normalmente se aplicam três formas de representação para as soluções de um Algoritmo Genético em problemas numéricos (como no caso deste trabalho) que são as representações binária, real ou em ponto flutuante e inteira.

Tabela 2.4 - Descrição das formas de representação dos vários métodos de solução.

Método de Solução	Representação
Numérico	Binário, Real e Inteiro
Ordem	Lista
Grupo	Vetor
Inteiro	Inteiro
Misto	Real e Lista, outros

II.11.1.4 CODIFICAÇÃO BINÁRIA VERSUS REAL

Outra análise realizada é relacionada às simulações computacionais, onde é feita comparações nos desempenhos dos algoritmos genéticos entre a codificação binária e a real ou ponto flutuante aplicados a um problema de controle. Nos estudos de Michalewicz (1996) é declarado que representações binárias promovem um desempenho pobre quando aplicadas em problemas numéricos com alta dimensionalidade e onde grandes precisões são requeridas.

Fogel (1994) argumentou que apenas o espaço de busca ou alta dimensionalidade não pode determinar o desempenho e eficiência dos algoritmos, principalmente sem levar em conta a escolha da representação. Espaços de busca de dimensão elevada podem muitas vezes serem explorados eficientemente, enquanto que espaços de busca de dimensões menores podem apresentar muitas dificuldades. Fogel concorda que a maximização do paralelismo implícito nem sempre produz um ótimo desempenho. Portanto a codificação é uma das etapas mais importantes na definição de um Algoritmo Genético. Uma codificação aplicada de forma errada pode conduzir a problemas de convergência prematura do algoritmo. A estrutura de um cromossomo deve representar uma solução como um todo, e deve ser o mais simples possível. De uma forma geral não se pode afirmar sobre qual tipo de codificação seja a melhor, toda escolha deve ser analisada de acordo com o problema a ser analisado.

II.11.2 GERAÇÃO DA POPULAÇÃO INICIAL

A população inicial de indivíduos ou cromossomos é na maioria das vezes realizada de forma aleatória, embora existam ocasiões onde é mais apropriada uma seleção heurística da mesma, introduzindo logo de início, um ou mais indivíduos “tendenciosos”, como por exemplo, soluções aproximadas conhecidas contendo algum tipo de informação prévia. Diversos trabalhos realizados comprovam que a inicialização não é crítica, desde que a população inicial contenha cromossomos suficientemente variados (população diversificada) (Cantú (1995); Goldberg (1989)).

II.11.3 AVALIAÇÃO DA POPULAÇÃO

A avaliação da população é realizada pela função de aptidão, que deve indicar a “qualidade” de cada indivíduo na população. Para problemas de otimização ela está intimamente ligada à função objetivo que se deseja encontrar os extremos. Para problemas de maximização, por exemplo, a função de aptidão pode ser tomada como uma modificação

da função objetivo: $f(x) = g(x) + C$, onde C é uma constante introduzida para os casos onde o processo de seleção exige que a aptidão seja positiva. Com o processo natural de evolução, os indivíduos passam a ter aptidões cada vez mais semelhantes entre si, podendo ser necessário aumentar a pressão de seleção pela adoção de alguma estratégia da seguinte forma: $f(x) = h(g(x))$, com uma certa função h escolhida convenientemente.

Não existe a necessidade de realizar o cálculo das derivadas da função objetivo e conseqüentemente, um algoritmo genético pode ser utilizado também sem nenhuma modificação para otimizar funções não diferenciáveis.

Outro fato relevante é que a aptidão pode variar ao longo do processo evolutivo, de maneira dinâmica e estocástica, imprecisa, e mesmo subjetiva, no caso de algumas aplicações específicas (como música, por exemplo).

É preciso lembrar, entretanto, que a escolha da função de aptidão é para a maioria das aplicações, a etapa crítica do processo, já que ela deve ser avaliada para cada cromossomo de cada população dentro do processo evolutivo.

II.11.4 TIPOS DE SELEÇÃO

O processo de seleção tem como princípio básico o da “sobrevivência dos melhores indivíduos”, onde os cromossomos com melhores valores de aptidão recebem uma maior probabilidade de serem copiados para um novo conjunto denominado população temporária, de onde são aleatoriamente escolhidos para reprodução. Em contrapartida, os indivíduos com baixa aptidão são descartados da população conforme a pressão de seleção dos esquemas utilizados.

Segundo Whitley (1994), a operação referente ao processo seletivo seleciona cromossomos da população para a etapa de reprodução, utilizando quase que sempre a adaptabilidade do cromossomo, de modo que os indivíduos com maior aptidão (mais aptos) sejam selecionados um maior número de vezes, como ocorre nos mecanismos da seleção natural. Na prática computacional esta população temporária não é literalmente formada, isto é, os indivíduos já são diretamente selecionados da população aos pares para a reprodução, sendo seus herdeiros colocados na próxima geração.

Mitchell (1999) descreveu que o processo de seleção deve ser sintonizado com os processos de cruzamento e de mutação. Os métodos de seleção que se prevalecem muito fortes são sinônimos de predominância na população, de indivíduos com valores de adaptação com forte caráter sub-ótimo reduzindo assim a diversidade necessária para imprimir mudanças e progressos na população. De forma contrária, métodos muito fracos promovem certa lentidão no processo evolucionário.

Goldberg (1989) cita que o operador de seleção é uma versão artificial do processo de seleção natural, só que nesta situação a sobrevivência é daquele mais apto entre criaturas representadas por seqüência de caracteres (string).

Inúmeros esquemas de seleção (Teixeira (2004) baseados em Blickle e Thiele (1995)) já foram propostos e implementados na prática dos Algoritmos Genéticos, alguns não sendo biologicamente plausíveis. Na seqüência, alguns dos mais empregados são discutidos.

II.11.4.1 DESCRIÇÃO FORMAL DE UM MÉTODO DE SELEÇÃO

Este tópico foi baseado no trabalho de Teixeira (2004) e Blickle e Thiele (1995) descreveu e apresentou os métodos de seleção com base na distribuição do *fitness* da população antes e depois da seleção. Assume-se que o processo de seleção, $\omega : J^N \rightarrow J^N$,

e a posterior troca de material genético entre os indivíduos, $\Xi: J^N \rightarrow J^N$, seja através de cruzamento, mutação, ou outra forma, são realizados de forma seqüencial.

A seleção, inicialmente, cria uma população intermediária $P'(T)$, e após, são aplicados os operadores genéticos nos indivíduos dessa população, com uma determinada probabilidade p , e assim gerar a próxima população.

Para o processo seletivo, somente o valor de *fitness* $f: J \rightarrow R$ dos indivíduos é considerado. Portanto, o estado da população é completamente descrito em função do valor do *fitness* de todos os indivíduos J_N . Apenas um número finito de valores de *fitness* existem $f_1, \dots, f_n$ ($n \leq N$), onde N é a representação da quantidade de soluções candidatas (tamanho da população), e a situação da população pode ser muito bem descrita pelos valores $s(f_i)$ que são a representação das ocorrências dos valores de *fitness* f_i na população $P = \{J_1, J_2, \dots, J_N\}$.

A função $s: R \rightarrow Z_0^+$ atribui a cada valor de *fitness* $f \in R$ o número de indivíduos na população $P \in J^N$ contendo este valor de *fitness*. O parâmetro s é denominado de **Distribuição da Fitness da População P** , sendo assim, possível descrever dentro das possibilidades, um método de seleção Ω como uma função que promove uma transformação de uma distribuição de *fitness* s em uma nova distribuição de *fitness* s' :

$$s' = \Omega(s, \text{par\_list}) \quad (2.9)$$

onde, par_list é uma lista de parâmetros opcional do método de seleção.

Devido ao caráter probabilístico dos métodos de seleção, deve-se utilizar a **Distribuição de *Fitness* Esperada** Ω^* após aplicação do método de seleção Ω para distribuição de *fitness* s . Assim, observa-se que:

$$\Omega^*(s, par\_list) = E(\Omega(s, par\_list)) \quad (2.10)$$

A notação $s^* = \Omega^*(s, par\_list)$ é utilizada como abreviação.

Observa-se que é possível calcular a **Variância da Distribuição** resultante conforme na seqüência:

$$\sigma^2 = s^* \left(1 - \frac{s^*}{N} \right) \quad (2.11)$$

onde $s^*(f_i)$ significa o número de indivíduos que são esperados com valor de *fitness* f_i após a seleção. Este valor é obtido a partir de N experimentos “selecionando um indivíduo da população utilizando um determinado mecanismo de seleção”. Desta forma, a probabilidade de seleção de um indivíduo ser selecionado com valor de *fitness* f_i é fornecida por:

$$p_i = \frac{s^*(f_i)}{N} \quad (2.12)$$

Para cada valor de *fitness* existe um processo (Processo de Bernoulli) mencionado por Lipschutz (1972), onde “um indivíduo com *fitness* f_i é selecionado”. Como a variância desse processo com N tentativas é dada através da expressão:

$$\sigma^2 = Np(1 - p) \quad (2.13)$$

A variância da distribuição é obtida utilizando p_i .

Obtêm-se a variância realizando o método de seleção com N experimentos de forma independente. Existe a possibilidade de redução da variância quase por completo através do uso de algoritmos mais sofisticados para seleção dos indivíduos (Baker (1985)).

Outra situação considerável é relacionada com a distribuição de *fitness* cumulativa, onde seja n o número de valores de *fitness* únicos e $f_1 < \dots < f_{n-1} < f_n$ ($n \leq N$) a ordenação dos valores de *fitness* com f_i descrevendo o pior valor do mesmo presente na população P e f_n especificando o melhor valor de *fitness* na população. O valor de $S(f_i)$ representa o número de indivíduos com o valor de *fitness* f_i , e é denominada de **Distribuição de Fitness Cumulativa**, ou seja:

$$S(f_i) = \begin{cases} 0 & : i < 1 \\ \sum_{j=1}^{j=i} s(f_j) & : 1 \leq i \leq n \\ N & : i > n \end{cases} \quad (2.14)$$

A distribuição do *fitness* $s(f)$ pode ser descrita através de uma distribuição de *fitness* contínua $\bar{s}(f)$, havendo permissão de algumas propriedades descritas na seqüência. Antes de enunciá-las, é necessário assumir valores contínuos distribuídos de forma contínua. O domínio da função $s(f)$ é $f_0 < f \leq f_n$. A próxima função representa a **Distribuição de Fitness Cumulativa Contínua**.

$$\bar{s}(f) = \int_{f_0}^f s(x) dx \quad (2.15)$$

Um exemplo de uma distribuição de *fitness* contínua, possui uma distribuição Gaussiana, $G(\mu, \sigma)$, onde:

$$G(\mu, \sigma)(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (2.16)$$

onde a distribuição $\bar{s}_G(f) = NG(\mu, \sigma)(f)$, com $\sigma=30$, $\mu=100$, $N=1000$, e $f_0 = -\infty$, $f_n = +\infty$, e pode ser observada pela Figura 2.8 na sequência. E a distribuição cumulativa representada na Figura 2.9.

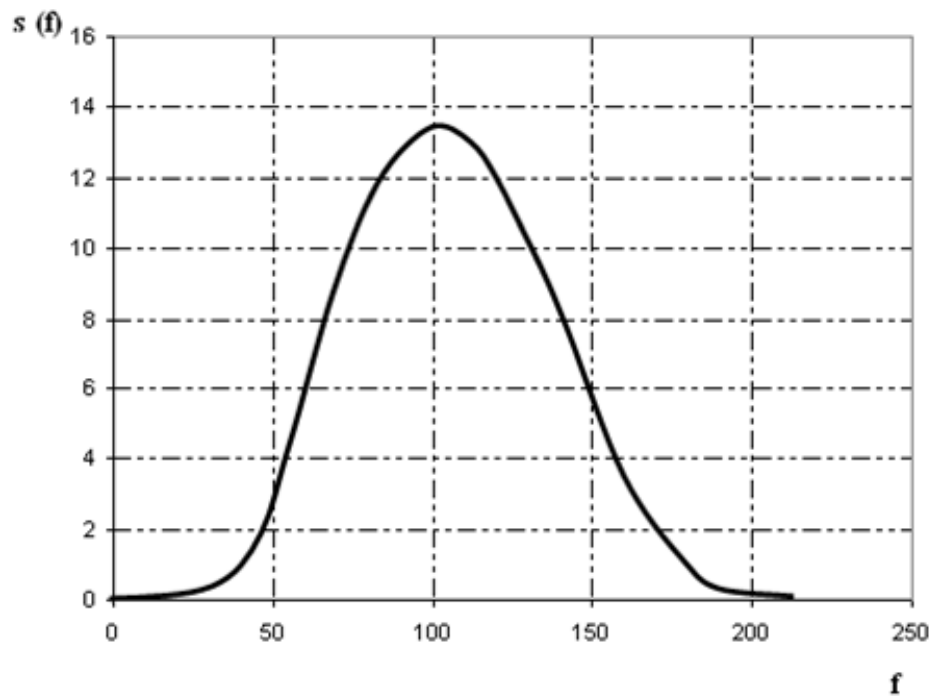


Figura 2.8 - Distribuição de fitness $\bar{s}_G(f)$ adaptada de Bickel e Thiele (1995).

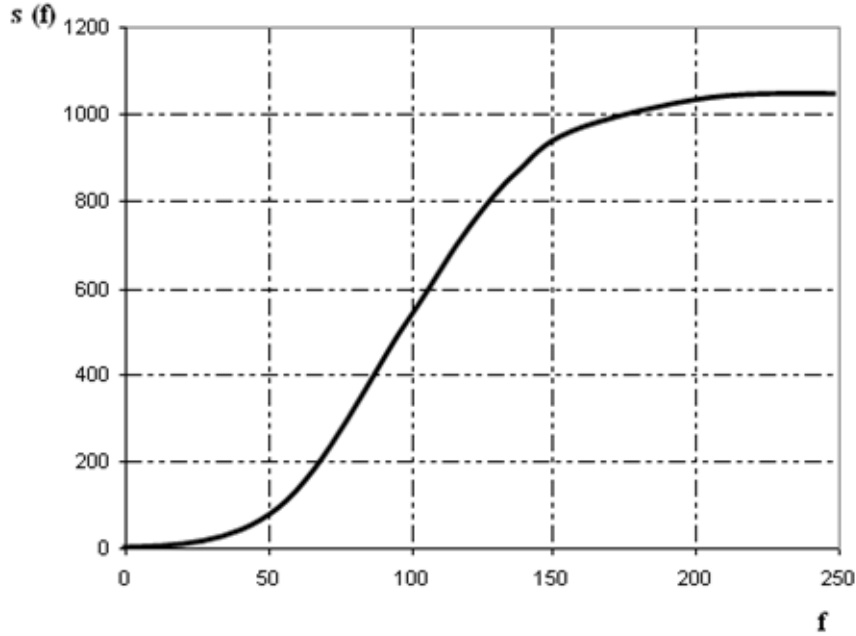


Figura 2.9 - Distribuição de fitness cumulativa $\bar{s}_G(f)$ adaptada em Bickel e Thiele (1995).

Algumas propriedades relacionadas à Distribuição de *Fitness* são apresentadas e servem de base para a comparação dos vários métodos de seleção. São elas:

- Média da Fitness** – $\bar{M}$ representa a média da fitness de uma população antes da aplicação da operação de seleção, e $\bar{M}^*$ a média esperada depois da operação de seleção. A descrição de M e M^* encontra-se na sequência respectivamente:

$$\bar{M} = \frac{1}{N} \int_{f_0}^{f_n} \bar{s}(f) f df \quad (2.17)$$

$$\bar{M}^* = \frac{1}{N} \int_{f_0}^{f_n} \bar{s}^*(f) f df \quad (2.18)$$

- b. **Variância do Fitness** – a variância σ^2 representa a variância da distribuição de *fitness* $s(f)$ antes do processo seletivo, e $(\sigma^*)^2$ a variância da distribuição $\bar{S}^*(f)$ depois da seleção, na seqüência:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \int_{f_0}^{f_n} \bar{s}(f) (f - \bar{M})^2 df = \frac{1}{N} \int_{f_0}^{f_n} f^2 \bar{s}(f) df - \bar{M}^2 \quad (2.19)$$

$$(\sigma^*)^2 = \frac{1}{N} \int_{f_0}^{f_n} \bar{s}^*(f) (f - \bar{M}^*)^2 df = \frac{1}{N} \int_{f_0}^{f_n} f^2 \bar{s}^*(f) df - \bar{M}^{*2} \quad (2.20)$$

Fazendo-se uma observação da diferença dessa variância para a variância da distribuição de *fitness* apresentada na expressão 2.11, em variância da distribuição.

- c. **Taxa de Reprodução** – $\bar{R}(f)$ exemplifica a relação do número de indivíduos com certo valor de *fitness* f antes e após do processo seletivo.

$$\bar{R}(f) = \begin{cases} \frac{\bar{S}^*(f)}{\bar{s}(f)} : \bar{s}(f) > 0 \\ 0 : \bar{s}(f) = 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

Para aplicação de um método de seleção razoável, deve haver um favorecimento dos melhores indivíduos associando a eles uma taxa de reprodução $\bar{R}(f) > 1$ e adotando uma espécie de punição aos indivíduos com baixo desempenho através de uma taxa de reprodução $\bar{R}(f) < 1$.

- d. **Perda da Diversidade** – durante as fases do processo seletivo, indivíduos com baixos desempenhos são substituídos por cópias de indivíduos melhores. Essa ocorrência permite que uma determinada quantidade de material genético presente

nos indivíduos ruins seja perdida. O número de indivíduos que são substituídos ocorre devido à força da “perda da diversidade”.

A perda da diversidade p_d representa a proporção de indivíduos da população que não são selecionados durante a fase de seleção. Se a taxa de reprodução $\bar{R}(f)$ sofre um aumento lento em f , a perda da diversidade de um método de seleção é definida como:

$$p_d = \frac{1}{N} (\bar{S}(f_z) - \bar{S}^*(f_z)) \quad (2.22)$$

Onde, f_z representa o valor de *fitness* para uma taxa de reprodução $\bar{R}(f)=1$. A perda da diversidade deve ocorrer da forma mais lenta possível. Caso essa perda seja muito rápida, pode ocorrer um grande risco de uma convergência prematura.

- e. **Pressão Seletiva / Intensidade de Seleção** – este termo é utilizado em diferentes aspectos e por diferentes propriedades dos métodos de seleção (Goldberg e Deb (1991)). A mudança na média do *fitness* da população durante a ocorrência da seleção é uma medida considerável para a pressão seletiva.

Nos estudos da genética das populações, a “pressão seletiva” foi introduzida para obtenção de uma medida normalizada, e menos (pouco) dimensionada. A principal idéia é medir a evolução do progresso da operação de seleção através da chamada “seleção diferencial”, ou seja, a diferença entre a média do *fitness* da população antes e depois do processo seletivo. Realizando a divisão da “seleção diferencial” pela baixa variância do *fitness* da população, encontra-se uma medida menos dimensionada que é almejada, denominada de pressão seletiva.

A pressão seletiva de um método de seleção Ω para a distribuição de *fitness* $s(f)$ é definida como:

$$I = \frac{\overline{M}^* - \overline{M}}{\overline{\sigma}} \quad (2.23)$$

Assim, a pressão seletiva tem dependência da distribuição de *fitness* da população inicial. Desta maneira, variadas distribuições de *fitness* promovem a origem de diferentes pressões seletivas para o mesmo método de seleção. Sendo assim, para efeito de comparação entre os métodos seletivos necessita utilizar uma mesma distribuição inicial.

A utilização da distribuição Gaussiana normalizada $G(0,1)$ como a distribuição de *fitness* inicial, conduz ao conceito da “Pressão Seletiva Padrão”, I_Ω representando o valor médio esperado da população após a aplicação do método de seleção Ω à distribuição Gaussiana normalizada $G(0,1)(f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{f^2}{2}}$.

$$I_\Omega = \int_{-\infty}^{+\infty} f \overline{\Omega}^*(G(0,1))(f) df \quad (2.24)$$

O valor de *fitness* médio efetivo de uma distribuição Gaussiana com baixo μ e variância σ^2 pode ser obtido normalmente através de $\overline{M}^* = \sigma I + \mu$.

- f. **Variância da Seleção** – a variância de seleção é análoga à descrição da pressão seletiva, mas neste tópico vale ressaltar a nova variância da distribuição de *fitness* após a seleção.

A variância da seleção é a esperada de forma normalizada da distribuição de *fitness* de uma população, após a aplicação do método de seleção Ω na distribuição de *fitness* $s(f)$:

$$V = \frac{(\bar{\sigma}^*)^2}{\bar{\sigma}^2} \quad (2.25)$$

Define-se variância da seleção padronizada (V_Ω) que é a variância esperada normalizada da distribuição de *fitness* da população após a aplicação do método de seleção Ω na Distribuição Gaussiana Normalizada $G(0,1)$. Sendo assim temos:

$$V_\Omega = \int_{-\infty}^{+\infty} (f - I_\Omega)^2 \bar{\Omega}^* (G(0,1))(f) df \quad (2.26)$$

Esta equação equivale a:

$$V_\Omega = \int_{-\infty}^{+\infty} f^2 \bar{\Omega}^* (G(0,1))(f) df - I_\Omega^2 \quad (2.27)$$

Deve-se ressaltar a diferença existente entre a “variância da seleção” e a “perda da diversidade”, onde esta última indica a proporção de indivíduos que não são selecionados, sem considerar os seus valores de *fitness*. A variância da seleção padronizada é definida com a nova variância da distribuição de *fitness* assumindo uma distribuição de *fitness* Gaussiana inicialmente. Dessa forma, a variância da seleção igual a um, indica que a variância não sofreu mudança durante o processo de seleção. O menor valor para V_Ω é zero, o que significa que a variância dos valores de *fitness* da população após o processo de seleção é igual a zero.

Os tópicos na sequência deste capítulo, apresentam cinco dos principais métodos de seleção: Seleção Proporcional via Método da Roleta, Estocástica, Ordenação ou Rank (Linear e Exponencial), Seleção por Torneio, Seleção por Elitismo, Estado Fixo. E por fim, alguns outros métodos mais simples e menos utilizados.

II.11.4.2 SELEÇÃO PROPORCIONAL VIA MÉTODO DA ROLETA

Foi proposto e implantado por Holland (1975), um método que considera que cada indivíduo da população possui uma representação proporcional aos seus níveis ou valores de aptidão. É uma metodologia muito utilizada na atualidade, apesar de apresentar algumas deficiências que são descritas mais adiante. O método é exemplificado através de uma população de seis cromossomos cujo valor de aptidão é dado por uma função qualquer $f_i = f(x_i)$, conforme mostrado na Tabela 2.5.

Tabela 2.5 - Valores de exemplo para ilustrar seleção por roleta.

Cromossomo (nº)	String	Aptidão	% do total
1	0 1 0 1 1 0 1	45	13,2
2	1 0 1 1 0 0 1	89	26,1
3	1 1 1 1 1 0 1	125	36,7
4	0 0 1 0 1 0 1	21	6,2
5	0 1 1 0 1 0 0	52	15,2
6	0 0 0 1 0 0 1	9	2,6
	Total	341	100,0

A forma de quantificar a probabilidade p_i do i -ésimo indivíduo da população vir a ser selecionado para reprodução é o cálculo proporcional ao seu valor da função de aptidão. Uma possível implementação seria: $p_i = f_i / \sum_{i=1}^n f_i$, onde f_i é assumida positiva, N é o tamanho da população e p_i é o valor da probabilidade de um determinado indivíduo i . Com os valores percentuais constantes na quarta coluna da Tabela 2.5, elabora-se a roleta constante da Figura 2.10. Esta roleta gira por seis vezes para efetuar a seleção da população auxiliar (amostra) levando-se em conta que os indivíduos com maior área na roleta, têm conseqüentemente, maiores chances de serem selecionados mais vezes que os indivíduos menos aptos.

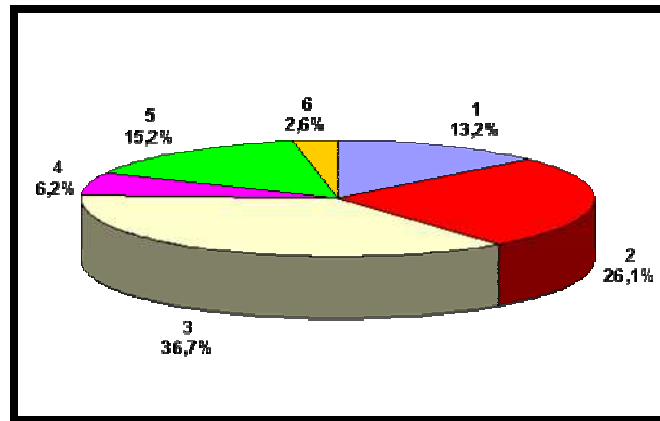


Figura 2.10 - Representação gráfica da roleta probabilística.

Apesar da grande aplicabilidade desta metodologia algumas falhas relevantes de funcionamento são verificadas, entre elas destaca-se uma alta variância, podendo levar a um elevado número de cópias de um bom cromossomo, o que faz diminuir a diversidade da população, causando convergência prematura do algoritmo para uma solução não desejada. Por outro lado, quando a evolução está avançada, onde as aptidões não diferem muito entre si, observa-se uma estagnação do algoritmo, isto é, uma baixa pressão de seleção entre aptidões parecidas. É um modelo fortemente dependente da escala da função de aptidão. Um algoritmo de aplicação deste método pode ser encontrado em Blickle e Thiele (1995).

Como relatado em Castro (2001), este modelo também é fortemente dependente da escala da função de aptidão. Como exemplo, seja uma população de 10 indivíduos com valores de aptidão sequenciais de 11 (melhor) a 1 (pior). A probabilidade de seleção do melhor indivíduo é $p_m \approx 16,6\%$ e da pior $p_p = 1,5\%$. Caso haja uma translação de 100 unidades na função de aptidão de todos os indivíduos, as probabilidades assumem agora: $p'_m \approx 10,4\%$ e $p'_p \approx 9,5\%$. Deste modo, observa-se que as probabilidades do melhor e do pior indivíduo se tornam quase idênticas.

Esta propriedade indesejável provocou o surgimento e desenvolvimento de vários métodos de escalonamento, tais como: escalonamento estático linear, dinâmico linear, exponencial, logaritmo e truncamento sigma. Outro método utilizado para abrandar esta

característica é realizar a seleção acima (***over selection***) de certa porcentagem dos melhores indivíduos, isto é, forçar que 80 %, por exemplo, dos selecionados sejam tomados dos 20 % melhores indivíduos da população.

II.11.4.3 SELEÇÃO ESTOCÁSTICA

Este método parece realizar melhor o processo de reprodução e apresenta o seguinte procedimento: calcula-se diretamente o número esperado de cópias para cada cromossomo: $E_i = N.p_i$, onde N é o tamanho da população e a parte inteira de E_i designada por $\text{int}(E_i)$ é o número esperado de cópias: $I_i = \text{int}(E_i)$, deste modo, o cromossomo i é copiado I_i vezes na população temporária.

Calcula-se a seguir o resíduo: $R_i = E_i - I_i$, que apresenta a probabilidade do cromossomo ser copiado novamente. Por exemplo, um cromossomo para o que $E_i = 2,75$ é copiado duas vezes, e pode ser copiado novamente com uma probabilidade de 0,75 (Castro (2001)).

II.11.4.4 SELEÇÃO POR ORDENAÇÃO OU RANK: LINEAR E EXPONENCIAL

Este método é uma alternativa à seleção proporcional (método da roleta) e tem como objetivo a prevenção de rápida convergência. Baker (1985) descreve que os indivíduos da população são ordenados de acordo com o seu valor de aptidão (*fitness*), e o valor esperado para cada indivíduo depende de sua ordenação ou posição, ao invés do valor absoluto de sua aptidão, ou seja, todos os indivíduos são ordenados segundo o valor decrescente (Blickle e Thiele (1995)) de seus valores de *fitness*, isto é $f_i \geq f_j$, para $i < j$.

O método de seleção por ordenação é apresentado com base na distribuição de probabilidade utilizada (Blickle e Thiele (1995)). Assim, tem-se: a forma linear e exponencial respectivamente.

a. Método de Seleção por Ordenação Linear

Nesta situação a probabilidade de um indivíduo vir a ser selecionado é determinada conforme sua posição ou ordenação em uma listagem, onde ao pior indivíduo é atribuída a posição um (1), e ao melhor a última posição. Sendo assim:

$$p_i = \frac{1}{N} \left(\eta^- + (\eta^+ - \eta^-) \frac{i-1}{N-1} \right) \quad (2.28)$$

com $i \in \{1, \dots, N\}$. A fração $\frac{\eta^-}{N}$ é definida como a probabilidade do pior indivíduo ser selecionado, e $\frac{\eta^+}{N}$ é a probabilidade do melhor indivíduo ser selecionado. Como o tamanho da população é mantido constante, as condições $\eta^+ = 2 - \eta^-$ e $\eta^- \geq 0$ devem ser satisfeitas. É importante observar que todos os indivíduos assumem posições diferentes na listagem, valores diferentes, de probabilidade de seleção, mesmo possuindo valores de *fitness* iguais.

Nos trabalhos de Koza (1992) e Blickle e Thiele (1995), a probabilidade é determinada por um fator de multiplicação r_m que determina o gradiente da função linear.

A expressão (2.28) apresentada anteriormente é possível, pela expressão de $\eta^- = \frac{2}{r_m + 1}$ e

$\eta^+ = \frac{2}{r_m - 1}$. O algoritmo que representa esta forma de seleção é descrito em Blickle e

Thiele (1995).

Observou-se que este método exige a necessidade da ordenação da população, portanto a complexidade do algoritmo está em função da complexidade do método utilizado para a ordenação, isto é: $O(N \log N)$. A distribuição de *fitness* a ser encontrada após a realização do método de seleção, com η^- na distribuição s é:

$$\Omega_R^* = (s, \eta^-)(f_i) = s^*(f_i) = s(f_i) \frac{N\eta^- - 1}{N - 1} + \frac{1 - \eta^-}{N - 1} (S(f_i)^2 - S(f_{i-1})^2) \quad (2.29)$$

A determinação da taxa de reprodução neste método de seleção é computada através da seguinte expressão, onde os indivíduos com menos aptidão apresentam um valor menor de taxa de reprodução $\bar{R}(f_0) = \eta^-$ e os indivíduos com maior aptidão apresentam um valor maior da taxa de reprodução $\bar{R}(f_n) = 2 - \eta^- = \eta^+$.

$$\bar{R}_R(f) = \eta^- + 2 \frac{1 - \eta^-}{N} \bar{S}(f) \quad (2.30)$$

A perda da diversidade $P_{d,R}(\eta^-)$ é obtida através da seguinte equação:

$$P_{d,R}(\eta^-) = (1 - \eta^-) \frac{1}{4} \quad (2.31)$$

Ressalta-se que a importância da “perda da diversidade” independe da distribuição inicialmente determinada. O cálculo da pressão seletiva neste método de seleção por *rank* linear pode ser realizado através da expressão:

$$I_R(\eta^-) = (1 - \eta^-) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \quad (2.32)$$

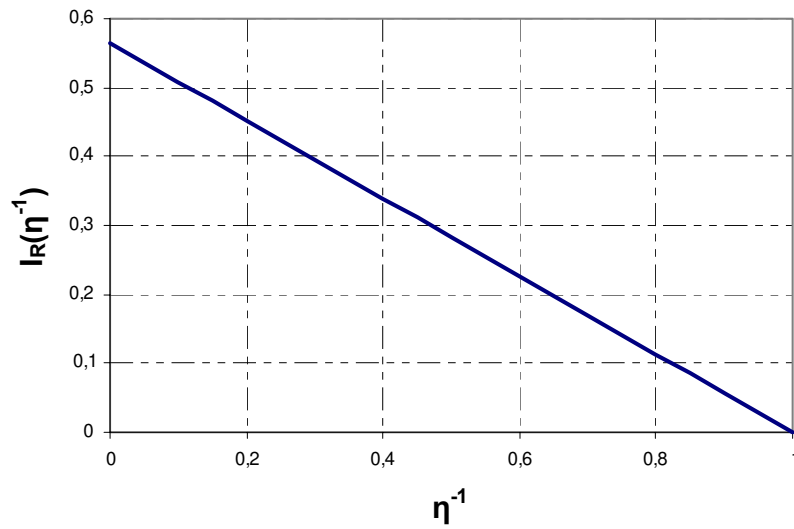


Figura 2.11 – Representa a pressão seletiva para o método de seleção por ordenação linear (Blickle e Thiele (1995)).

A variância da seleção por ordenação determina-se da seguinte forma:

$$V_R(\eta^{-1}) = 1 - \frac{(1 - \eta^{-1})^2}{\pi} = 1 - I_R(\eta^{-1})^2 \quad (2.33)$$

A Figura 2.12 descreve a variância da seleção por ordenação linear.

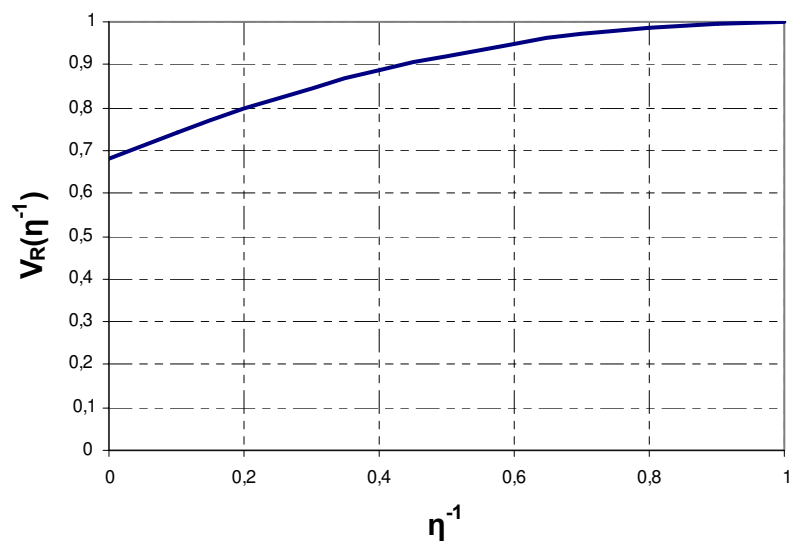


Figura 2.12 – Referente à variância da seleção para o método de seleção por rank linear (Blickle e Thiele (1995)).

b. Método de Seleção por Ordenação Exponencial

Este método de seleção difere do anterior (ordenação linear) devido ao fato da posição dos indivíduos na relação ser determinada de forma exponencial. A base do expoente é o parâmetro c , onde $0 < c < 1$.

Como no subitem anterior (a), a posição N da relação é atribuída ao melhor indivíduo, e a posição um (1) ao pior indivíduo desta mesma população. Portanto a probabilidade de cada indivíduo ser selecionado é fornecida pela expressão:

$$p_i = \frac{c^{N-1}}{\sum_{j=1}^N c^{N-j}} \quad (2.34)$$

onde $i \in \{1, \dots, N\}$.

O somatório $\sum_{j=1}^N c^{N-j}$ normaliza a probabilidade assegurando que $\sum_{i=1}^N p_i = 1$. Como

$\sum_{j=1}^N c^{N-j} = \frac{c^{N-1}}{c-1}$, a equação acima pode ser reescrita da seguinte forma:

$$p_i = \frac{c-1}{c^{N-1}} c^{N-1} \quad (2.35)$$

onde $i \in \{1, \dots, N\}$. O algoritmo é similar ao método de ordenação linear, apenas tendo como diferenciação a forma de cálculo das probabilidades (Blickle e Thiele (1995)).

A distribuição de *fitness* esperada após a realização da operação de seleção por ordenação exponencial com c na distribuição é determinada por:

$$\Omega_E^*(s, c, N)(f_i) = s^*(f_i) = N \frac{c^N}{c^{N-1}} c^{-s(f_i)} (c^{s(f_i)-1}) \quad (2.36)$$

O termo $\bar{s}(f)$ é a distribuição de *fitness* contínua da população. A distribuição de *fitness* esperada após a realização da operação de seleção por ordenação exponencial $\bar{\Omega}_E$ com c na distribuição $\bar{s}$ fica da seguinte forma:

$$\bar{\Omega}_E^*(\bar{s}, c)(f) = \bar{s}^*(f) = N \frac{c^N}{c^{N-1}} \ln c \bar{s}(f) c^{-\bar{s}(f)} \quad (2.37)$$

Para eliminação da dependência com relação ao tamanho da população N faz-se necessário introduzir uma variável $\alpha = c^N$. Assim, tem-se:

$$\bar{\Omega}_E^*(s, \alpha)(f) = \bar{s}^*(f) = N \frac{\alpha \ln \alpha}{\alpha - 1} \bar{s}(f) \alpha^{-\frac{\bar{s}(f)}{N}} \quad (2.38)$$

A taxa de reprodução para este método de seleção é representada pela expressão:

$$\bar{R}_E(f) = \frac{\alpha \ln \alpha}{\alpha - 1} \alpha^{-\frac{\bar{s}(f)}{N}} \quad (2.39)$$

onde identifica que o pior indivíduo tem o mais baixo valor de taxa de reprodução $\bar{R}(f_0) = \frac{\alpha \ln \alpha}{\alpha - 1}$, e o melhor indivíduo tem o maior valor $\bar{R}(f_n) = \frac{\ln \alpha}{\alpha - 1}$ para esta

propriedade. Portanto, o motivo da introdução da variável α , é obtida naturalmente através da expressão $\frac{\bar{R}(f_0)}{\bar{R}(f_n)} = \alpha$, descrevendo a razão entre as taxas de reprodução do pior e do

melhor indivíduo. Nota-se que quando $c < 1$ e, portanto, $c^N \ll 1$ para altos valores de N , ou seja, os números de interesse para α variam de $10^{-20}, \dots, 1$.

A perda da diversidade $P_{d,E}(\alpha)$ para este método de seleção é:

$$P_{d,E}(\alpha) = \frac{1 - \ln \frac{\alpha - 1}{\alpha \ln \alpha}}{\ln \alpha} - \frac{\alpha}{\alpha - 1} \quad (2.40)$$

sendo representada pela Figura 2.13.

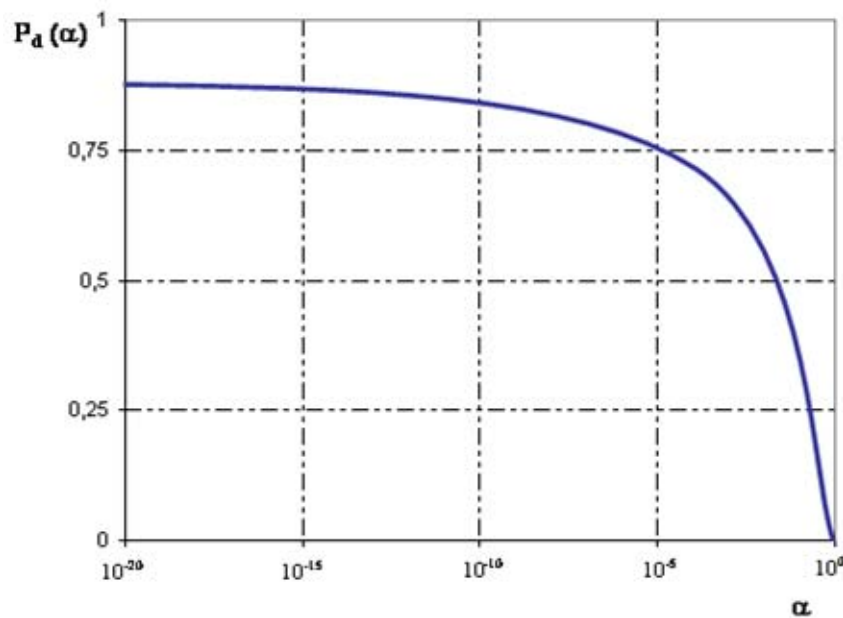


Figura 2.13 – Representa a perda da diversidade para o método de seleção por ordenação exponencial (Blickle e Thiele (1995)).

O cálculo da pressão seletiva e variância da seleção são difíceis para este método de seleção, portanto o cálculo é restringido apenas ao cálculo numérico.

Uma expressão aproximada pode ser obtida através da programação genética para regressão simbólica (Blickle e Thiele (1995)). A pressão seletiva pode ser aproximada, com margem de erro menor do que 6 %, com $\alpha \in [10^{-20}, 0,8]$, por:

$$I_E(\alpha) \approx 0,588 \frac{\ln \ln \frac{\pi}{\alpha}}{3,69 \alpha} \quad (2.41)$$

A Figura 2.14 descreve a pressão seletiva.

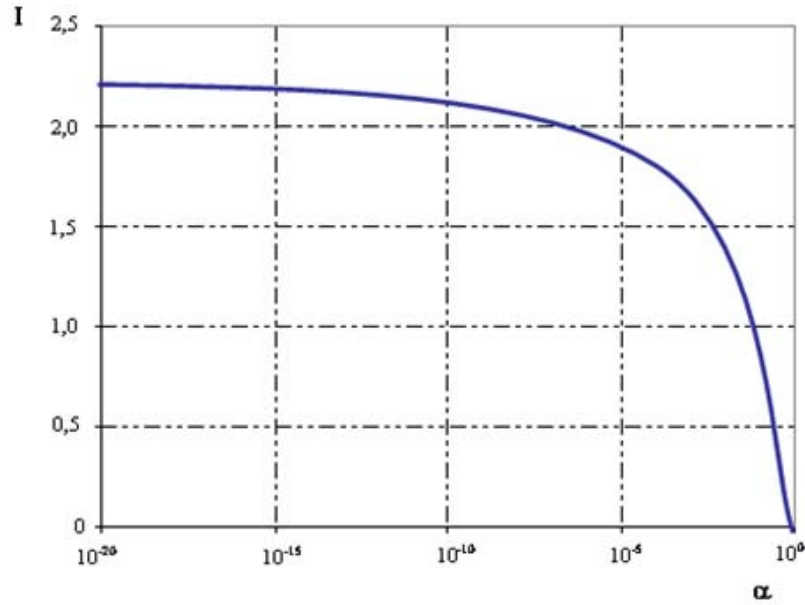


Figura 2.14 – Referente à pressão seletiva para o método de seleção por ordenação exponencial (adaptado de Blickle e Thiele (1995)).

A variância da seleção pode ser obtida aproximadamente, com uma margem de erro inferior a 5 %, para $\alpha \in [10^{-20}, 0,8]$, através de:

$$V_E(\alpha) \approx \ln \left(1,2 + \frac{2,8414}{2,225 \alpha - \ln \alpha} \right) \quad (2.42)$$

A variância da seleção é definida pela Figura 2.15, na sequência.

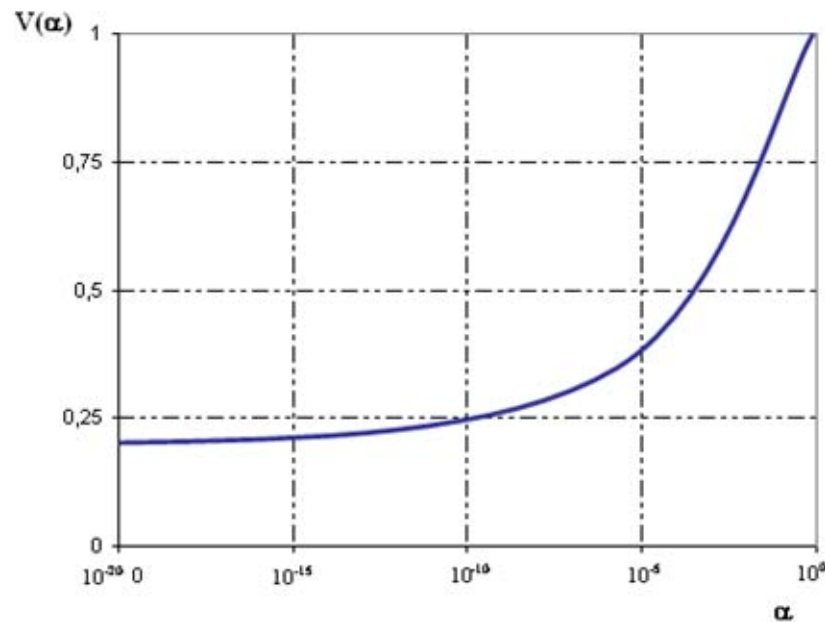


Figura 2.15 – Referente à variância da seleção para o método de seleção por ordenação exponencial (adaptado de Blickle e Thiele (1995)).

As principais vantagens do modelo por ordenamento são:

- Não causa convergência prematura, já que nenhuma solução tem $N_i \gg 1$;
- Não permite estagnação, porque mesmo quando a evolução está bastante avançada $N_i \neq N_2 \neq \dots$;
- Não é necessária uma aptidão explícita, pois para ordenar os indivíduos apenas a habilidade de comparação dos mesmos é suficiente.

Como desvantagens destacam-se:

- Esforço computacional para ordenamentos constantes;
- Difícil análise teórica de convergência;

- Nenhum fundamento biológico existente.

II.11.4.5 SELEÇÃO POR TORNEIO

Na essência o método funciona iniciando com uma determinada quantidade de indivíduos que é selecionada e após, o melhor indivíduo deste grupo pré-selecionado é copiado para uma população intermediária, e assim o procedimento é repetido por um número de vezes atribuído (Blickle e Thiele (1995)).

Conforme estudos de Von Zuben (2002), a seleção por torneio é um dos mais refinados processos de seleção, permitindo ajustar a pressão seletiva.

A seleção é feita em função do número de vitórias (ou melhores desempenhos de determinados indivíduos) de cada indivíduo em q competições contra oponentes escolhidos de forma aleatória na população. A vitória é atribuída àquele que apresentar maior *fitness*, comparado com a do seu oponente.

Para propósitos práticos, $q \geq 10$ conduz a uma forte pressão seletiva, enquanto que valores de q , no intervalo $(3 \leq q \leq 5)$ sofrem fraca pressão seletiva. Para $q = 1$, tem-se essencialmente uma busca aleatória e para $q \rightarrow \infty$, simplesmente a seleção por ordem de *fitness*, sem nenhuma aleatoriedade.

Algumas vantagens devem ser ressaltadas na aplicação deste tipo de seleção, tais como:

- Não acarreta convergência prematura;
- Combate à estagnação;

- Não há esforço computacional extra, tal como ordenamentos;
- Aptidão explícita é desnecessária;
- Inspiração biológica do processo.

De uma forma geral, o torneio ocorre entre dois indivíduos de cada vez, mas pode ocorrer uma generalização deste caso pela inserção de uma variável onde especifica a quantidade de indivíduos participantes do torneio, que normalmente é denominada de Tamanho do Torneio. O algoritmo é apresentado por Blickle e Thiele (1995).

A distribuição de *fitness* esperada para este método de seleção, após a realização da operação de seleção por torneio, com o Tamanho do Torneio t , é obtida através da equação apresentada a seguir:

$$\Omega_T^*(s, t)(f_i) = s^*(f_i) = N \left(\left(\frac{S(f_i)}{N} \right)^t - \left(\frac{S(f_{i-1})}{N} \right)^t \right) \quad (2.43)$$

Fazendo-se uso de uma distribuição de *fitness* discreta, torna-se possível obter a distribuição de *fitness* apresentada na Figura 2.16, isso ocorre após aplicar o método de seleção sem torneio, com um valor de dez para o tamanho do torneio. Além disso, para a distribuição de *fitness* esperada, são apresentadas duas representações gráficas para $s^*(f) - \sigma_s(f)$ e $s^*(f) + \sigma_s(f)$, assim a distribuição originada através de uma rodada do torneio vai variar em um dado intervalo, este denominado de Intervalo de Confiança, com uma probabilidade de 68 %.

Na Figura 2.16 é possível verificar o resultado esperado da distribuição de *fitness* e o intervalo de confiança de 68 %, após a aplicação do método de seleção por torneio, com o tamanho do torneio igual a dez.

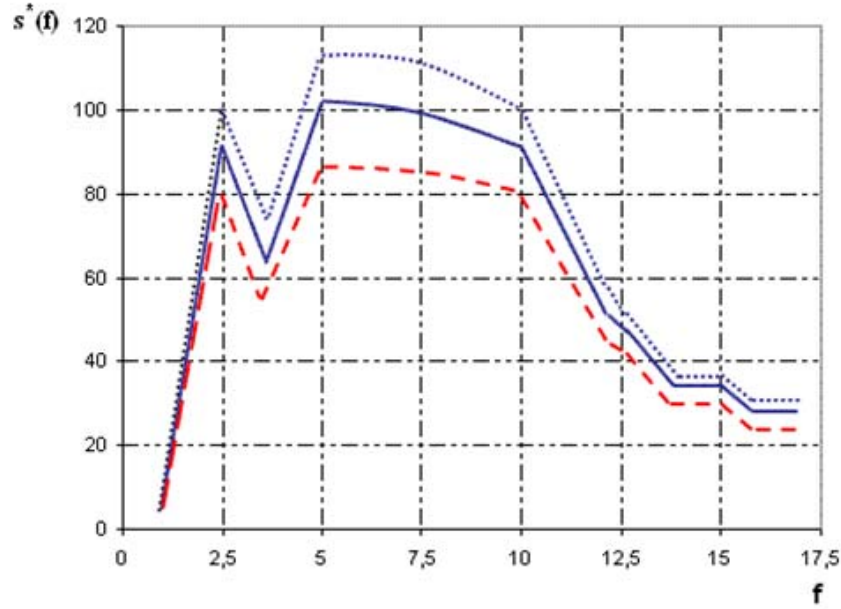


Figura 2.16 – Representação da distribuição de fitness e intervalo de confiança de 68%, com $t=10$ (baseado em Bickel e Thiele (1995)).

A distribuição de *fitness* esperada após a aplicação deste método de seleção, com o tamanho do torneio igual a t , é obtido pela seguinte expressão:

$$\overline{\Omega}_T^*(\bar{s}, t)(f_i) = \bar{s}^*(f_i) = t \bar{s}(f) \left(\frac{\bar{s}(f)}{N} \right)^{t-1} \quad (2.44)$$

Uma interessante propriedade deste método de seleção é com relação à concatenação de algumas fases do processo de seleção. Assume-se arbitrariamente uma população com uma distribuição de *fitness* $\bar{s}$. Primeiramente, é aplicado o método de seleção de torneio com um tamanho do torneio t_1 a essa população, e após, aplica-se novamente o método, só que na população resultante e com um tamanho do torneio t_2 . A obtenção da função de distribuição de *fitness* ao final do processo é a mesma que é obtida no caso do tamanho do torneio $t_1 t_2$, aplicado à mesma distribuição de *fitness* $\bar{s}$.

Seja $\bar{s}$ uma distribuição de *fitness* contínua e $t_1, t_2 > 1$ dois tamanhos do torneio, é obtido a seguinte equação para representar a concatenação dos torneios.

$$\overline{\Omega}_T^*(\overline{\Omega}_T^*(\bar{s}, t_1), t_2)(f) = \overline{\Omega}_T^*(\bar{s}, t_1 t_2)(f) \quad (2.45)$$

A taxa de reprodução para este método de seleção pode ser verificada através da seguinte equação:

$$\bar{R}_T(f) = \frac{\bar{s}^*(f)}{\bar{s}(f)} = t \left(\frac{\bar{S}(f)}{N} \right)^{t-1} \quad (2.46)$$

Para este método de seleção, os indivíduos com valores de *fitness* pequenos têm uma taxa de reprodução bem próxima a zero, e os indivíduos que têm um valor mais alto de *fitness* apresentam um valor para a taxa reprodutiva igual a t .

A perda da diversidade é obtida pela expressão:

$$P_{d,T}(t) = t^{\frac{-1}{t-1}} - t^{\frac{-1}{t-1}} \quad (2.47)$$

e a Figura 2.17 descreve a perda da diversidade.

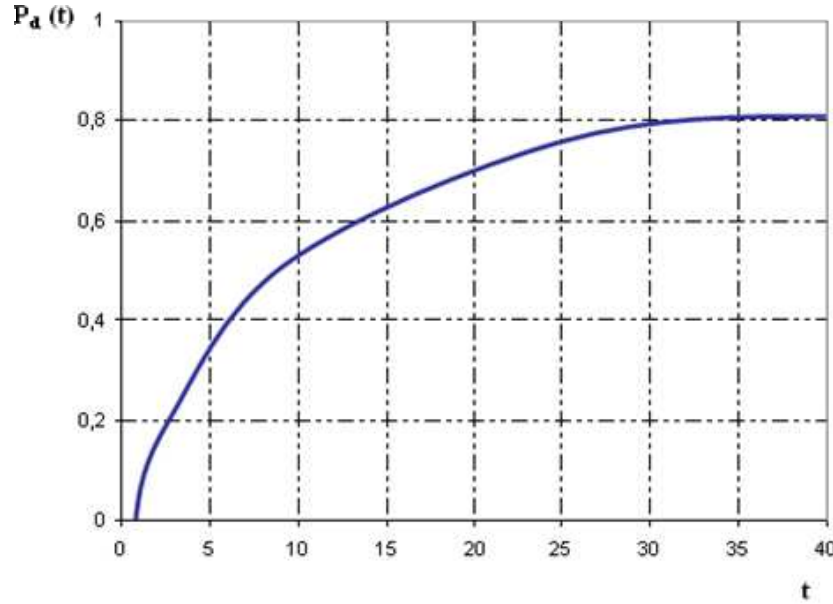


Figura 2.17 – Representa a perda de diversidade para o método de seleção por torneio (adaptado de Blickle e Thiele (1995)).

Observa-se que, conforme o aumento do valor para o tamanho do torneio, o número de indivíduos perdidos também aumenta. Em torno da metade da população é perdida, quando o tamanho do torneio considerado é igual a cinco, por exemplo.

O cálculo da pressão seletiva neste método é determinado, necessitando-se encontrar a média do valor de *fitness* da população após a realização da operação de seleção, com a distribuição Gaussiana $G(0,1)$ definida na sequência:

$$I_T(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} tx \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2}{2}} \left(\int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}} dy \right)^{t-1} dx \quad (2.48)$$

A solução dessa integral pode ser encontrada analiticamente para os casos de $t = 1, \dots, 5$, ou seja:

$$I_T(1) = 0 \quad (2.49)$$

$$I_T(2) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \quad (2.50)$$

$$I_T(3) = \frac{3}{2\sqrt{\pi}} \quad (2.51)$$

$$I_T(4) = \frac{6}{\pi\sqrt{\pi}} \arctan \sqrt{2} \quad (2.52)$$

$$I_T(5) = \frac{10}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{2\pi} \arctan \sqrt{2} - \frac{1}{4} \right) \quad (2.53)$$

Para valores de tamanho de torneio maiores, a Equação 2.48 é evoluída através de uma integração numérica. Mas, uma expressão de forma explícita pode não existir. Em torneios menores, a aproximação proporciona resultados satisfatórios.

Sendo assim, tem-se:

$$I_T(t)^k \approx \sqrt{c_k \left(\ln(t) - \ln(I_T(t))^{t-1} \right)} \quad (2.54)$$

com $I_T(t)^0 = 1$ e k a profundidade recursiva.

O cálculo das constantes c_k é muito difícil. Levando-se em consideração $k = 2$ em uma aproximação, a equação a seguir, que é aproximada a equação 2.48, é obtida com um erro relativo de menos de 2,4 %, para $t \in [2, 5]$. Para um valor de tamanho de torneio maior que cinco ($t > 5$), o erro relativo é menor que 1%.

$$I_T(t) \approx \sqrt{2 \left(\ln(t) - \ln \left(\sqrt{I_T(t)^{k-1}} 4,14 \ln(t) \right) \right)} \quad (2.55)$$

A Figura 2.18 descreve a situação para um tamanho do torneio variando de 1 a 30.

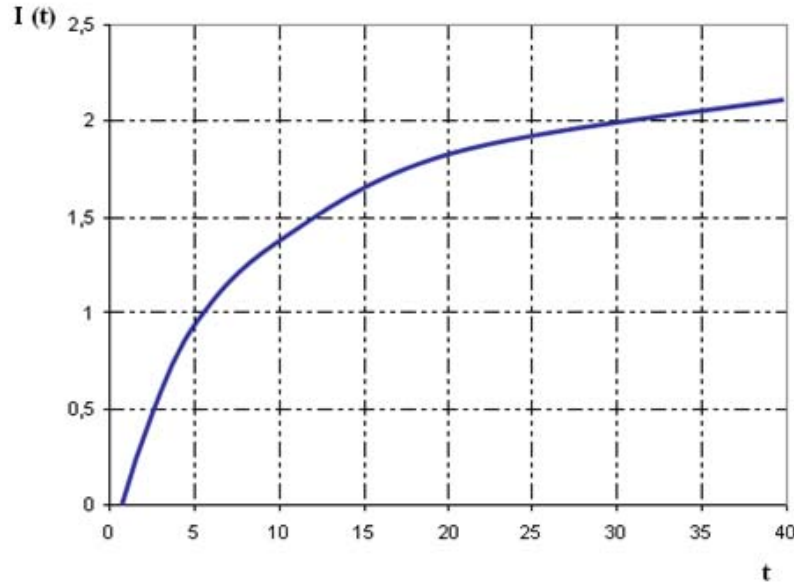


Figura 2.18 – Representa a pressão seletiva com o tamanho do torneio variando de 1 a 30 (adaptado de Blickle e Thiele (1995)).

Para determinar a variância da seleção é necessário resolver a seguinte equação:

$$V_T(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} t(x - I_T(t))^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left(\int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}} dy \right)^{t-1} dx \quad (2.56)$$

Já para um torneio binário, ou seja, com o tamanho do torneio igual a dois, tem-se:

$$V_T(2) = 1 - \frac{1}{\pi} \quad (2.57)$$

A variância da seleção pode ser resolvida através de uma integral numérica. A variância da seleção depende do tamanho do torneio t , conforme pode ser observado na Figura 2.19.

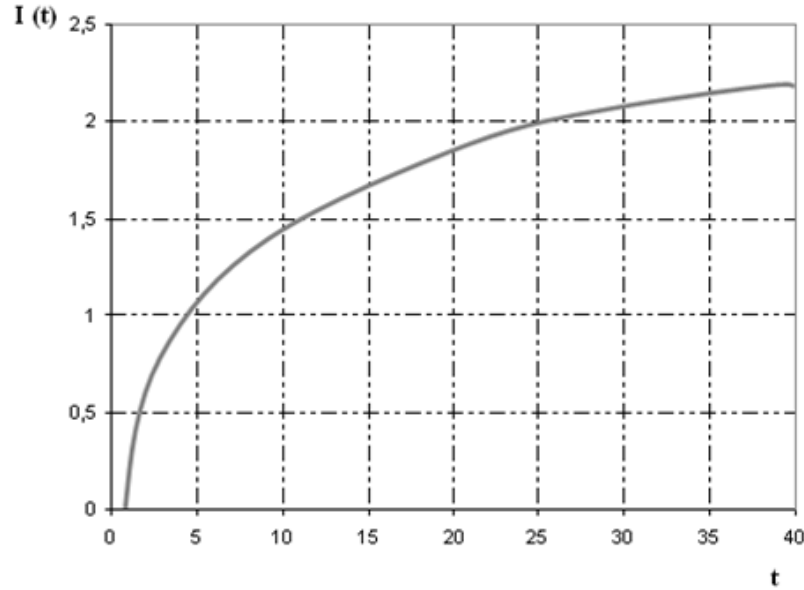


Figura 2.19 – Representa a variância da seleção com o tamanho do torneio variando de 1 a 30 (adaptado de Blickle e Thiele (1995)).

Para obter uma aproximação analítica para a variância da seleção, é necessário efetuar uma regressão simbólica utilizando o método de otimização através da programação genética Blickle e Thiele (1995). A seguir, a expressão aproxima o valor da variância da seleção, com um erro relativo menor do que 1,6 %, para $t \in \{1, \dots, 30\}$.

$$V_T(t) \approx \sqrt{\frac{2,05 + t}{3,14 t^{\frac{3}{2}}}} \quad (2.58)$$

II.11.4.6 SELEÇÃO POR ELITISMO

O modelo de seleção elitista normalmente é ligado a outros métodos de seleção, na tentativa de se aumentar a velocidade de convergência do algoritmo, bem como em aplicações onde possa ser necessário o seu emprego.

Este processo simplesmente copia N ($N \geq 1$) melhores indivíduos da população corrente para a próxima geração, garantindo que estes cromossomos não sejam destruídos nas etapas de recombinação e mutação.

Na maioria das implementações, normalmente, pelo menos o elitismo do melhor indivíduo é utilizado. A principal vantagem deste método é o fato dele garantir a convergência, ou seja, caso o ótimo global seja descoberto durante o processo de busca, o algoritmo genético deve convergir para tal solução.

Sua desvantagem é a possibilidade de forçar a busca, pela presença de mais uma cópia do melhor indivíduo, na direção de algum ponto ótimo local que tenha sido descoberto antes do global, embora normalmente um algoritmo genético escape de tais armadilhas.

Uma alternativa é guardar separadamente a melhor solução encontrada durante a evolução, para no final da execução designá-la como indivíduo encontrado, mesmo que ele não esteja presente na última geração da execução.

II.11.4.7 ESTADO FIXO - STEADY STATE

De acordo com Mitchell (1999), a maioria dos Algoritmos Genéticos descritos na literatura é “generacional”, isto é, cada geração de uma nova população, é constituída totalmente por indivíduos, filhos, gerados a partir de outros indivíduos, pais, de uma geração anterior.

Neste método de seleção (Estado Fixo), apenas alguns indivíduos são substituídos a cada geração. E normalmente, é substituído um pequeno grupo daqueles indivíduos que

são os menos aptos, por indivíduos gerados a partir das operações de cruzamento e mutação dos mais aptos.

II.11.4.8 OUTROS MÉTODOS DE SELEÇÃO

Conforme foi dito anteriormente, existe uma infinidade de mecanismos de seleção para os AGs, e nesta seção são apresentados mais alguns desses métodos, entre eles:

- a. **Seleção por diversidade** – neste método de seleção, os mais diversos indivíduos da população são selecionados. Podem ser adotados critérios adicionais relacionados ao valor de *fitness*;
- b. **Seleção Bi-classista** – neste método, os “P %” melhores indivíduos e os “100 – P%” piores indivíduos são selecionados;
- c. **Seleção Aleatória** – são selecionados aleatoriamente N indivíduos da população. Podemos subdividir este mecanismo de seleção em:
 - **Salvacionista** – seleciona o melhor indivíduo e os outros aleatoriamente;
 - **Não-salvacionista** – seleciona aleatoriamente todos os indivíduos.

A partir da próxima seção são abordados os operadores genéticos de cruzamento, inversão e mutação.

II.12 REPRODUÇÃO E OPERADORES PARA ALGORITMOS GENÉTICOS

As etapas de reprodução normalmente se dividem em três passos, o primeiro é relacionado ao processo de seleção (já mencionado nos tópicos anteriores) que não introduz novos indivíduos na população temporária, apenas os chamados progenitores, que servem

como pais para a nova geração, composta pelos filhos. Como passo inicial, toda a população temporária é agrupada aleatoriamente por pares para gerar um conjunto de $N/2$ progenitores potenciais. No processo de reprodução, deve-se aplicar um operador genético sobre os progenitores de forma a gerarem novos indivíduos.

Após aplicação do método seletivo são utilizados os operadores de recombinação ou cruzamento e o de mutação, finalizando e formando o ciclo reprodutivo criando novos indivíduos que passarão novamente por todo processamento do algoritmo, até que um determinado critério ou qualidade das soluções seja atingido. Nos próximos itens são apresentados os principais operadores de recombinação e mutação, e qual tipo de problemas são normalmente aplicados.

Os operadores genéticos têm como objetivo primordial realizar a transformações de uma população no decorrer de várias e sucessivas gerações para obtenção de uma nova população, na qual o conjunto de indivíduos ou um desses possua melhores características fornecendo um bom resultado, que satisfaçam as necessidades e/ou os critérios de desempenho, ou ainda os supere. Os operadores genéticos são extremamente necessários para diversificação da população mantendo as características das adaptações que são adquiridas pelas gerações antecessoras.

II.12.1 MODELOS E OPERADORES

Existem três modelos principais dentro da computação evolutiva, onde cada qual utiliza operadores de recombinação e/ou mutação de formas distintas. Esses são:

- Estratégias evolutivas (Rechenberg (1973));
- Programação evolutiva (Fogel et al. (1966)) e;
- Algoritmos genéticos (Holland (1975)).

As estratégias evolutivas, inicialmente propostas com o objetivo de solucionar problemas de otimização de parâmetros (discretos ou contínuos), empregam um operador de mutação adaptativa e um operador de recombinação. A programação evolutiva, voltada originalmente para construção de máquinas com número finito de estados aplicadas à tarefas de previsão, utiliza apenas o operador de mutação. A operação de recombinação não é realizada, pois a própria mutação pode produzir perturbações como de uma recombinação. Os algoritmos genéticos, que visam formalizar e explicar matematicamente processos de adaptação em sistemas naturais e desenvolver sistemas artificiais análogos aos da natureza, fazem uso de ambos operadores: recombinação e mutação.

Como é conhecido, os três principais tipos de algoritmos evolutivos (AEs) variam consideravelmente com respeito a representação, seleção, gerenciamento da população e, é claro, o uso da recombinação e mutação. É importante destacar que a importância dos dois operadores varia fortemente em relação aos AEs. Na programação evolutiva enfatiza-se a mutação, enquanto que nos algoritmos genéticos a recombinação é mais relevante. Já nas estratégias evolutivas, ambos os operadores são usados intensamente (Spears (1998)).

II.12.2 RECOMBINAÇÃO - MUTAÇÃO

Embora alguns pesquisadores (Goldberg (1989) e Holland (1975)) considerem a recombinação como o operador de busca mais poderoso, isto não é uma verdade absoluta, pois a própria comunidade da programação evolutiva usa apenas e estritamente a mutação sem nenhuma recombinação. Fogel e Atmar (1990) argumentam que a mutação é o operador mais poderoso (Hornby (1996)).

Portanto não se pode afirmar conclusivamente qual dos operadores é mais importante. Pode-se afirmar que ambos têm papéis relevantes e importantes em diversos tipos de problemas, sendo o uso de um e/ou outro operador mais adequado em algumas situações específicas. Na verdade, é interessante enxergar a mutação e a recombinação, não como mecanismos “adversários”, mas sim como complementares um do outro.

II.12.2.1 RECOMBINAÇÃO OU CRUZAMENTO

Embora Holland não tenha sido o primeiro a sugerir a recombinação em algoritmos genéticos (Fraser (1957); Fogel et al. (1966)), ele foi o primeiro a enfatizar teoricamente este operador. Segundo Holland um sistema adaptativo precisa, freqüentemente, testar e incorporar propriedades estruturais associadas a um melhor desempenho. O objetivo do operador é encontrar novas estruturas que têm alta probabilidade de causar melhorias significativas no desempenho do sistema (Spears (1998)). A recombinação é o operador responsável por trocar e combinar características dos pais durante o processo de reprodução, permitindo que as próximas gerações herdem essas características. A idéia é que os novos indivíduos descendentes podem ser melhores que seus pais se eles herdarem as melhores características de cada pai progenitor (Cazangi e Figueiredo (2002)).

Desde a criação das teorias evolutivas, muitos operadores de recombinação diferentes vêm sendo desenvolvidos e aplicados. A característica mais comum entre os diversos operadores é o fato de selecionarem dois indivíduos (chamados pais) e gerarem dois novos indivíduos (chamados descendentes) por meio da mistura de valores dos seus genes (Hornby (1996)).

Hornby classifica os operadores de recombinação em duas diferentes classes: recombinação genotípica e recombinação fenotípica. Na primeira, cada indivíduo possui a codificação para cada variável de uma solução e o algoritmo evolutivo (AE) processa a codificação. Por exemplo, um vetor que representa um valor real para um problema pode consistir em uma seqüência de 1's e 0's. Portanto, na representação genotípica, os indivíduos armazenam os valores para as variáveis e o AE processa estes valores.

Já na representação fenotípica, para o mesmo problema, um vetor consistiria de uma seqüência de valores reais (e não uma codificação binária destes valores). A recombinação nos Algoritmos Genéticos (AGs) é, geralmente, genotípica. As estratégias

evolutivas (e alguns trabalhos com AGs) trabalham com valores reais e não codificações deles (recombinação fenotípica).

II.12.2.1.1 OPERADORES DE RECOMBINAÇÃO GENOTÍPICA

No grupo de algoritmos evolutivos, os algoritmos genéticos trabalham mais freqüentemente no espaço genotípico. A seguir são apresentados os operadores de recombinação mais comuns.

- **Cruzamento em Um Ponto**

Este foi um dos primeiros operadores desenvolvidos por Holland. Seu mecanismo de operação é bastante simples. Dados dois pais, uma posição do cromossomo (maior que zero e menor que o número total de genes) é escolhida aleatoriamente como ponto de corte, de modo que os segmentos a partir deste ponto sejam trocados. Um exemplo é mostrado na Figura 2.20, onde dois pais foram selecionados para recombinação.

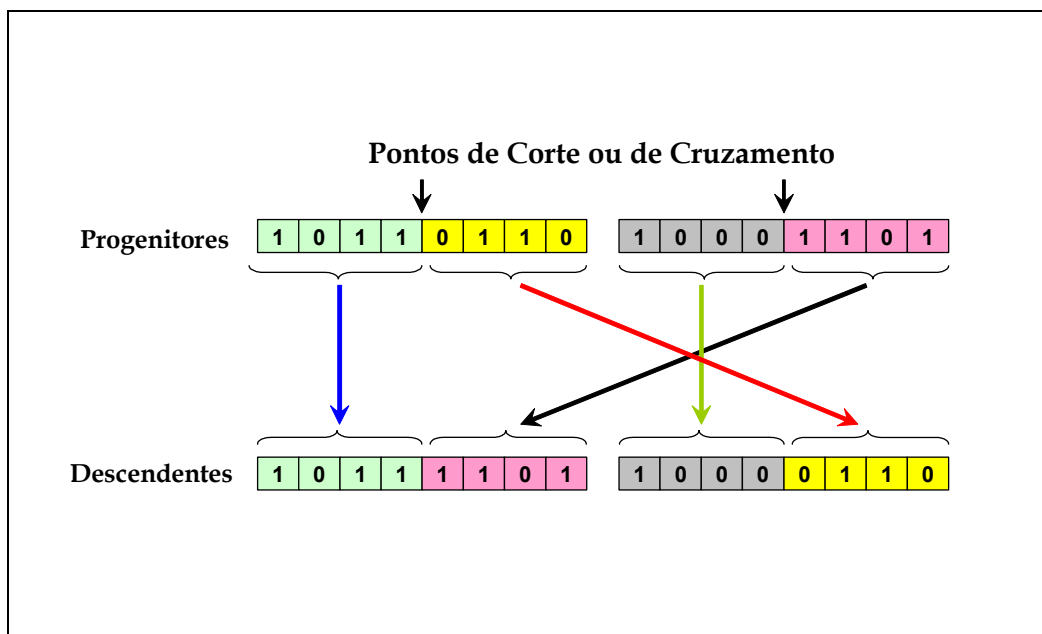


Figura 2.20 – Representação da forma de cruzamento em um ponto.

Em (Eshelman et al. (1989)), descobriu-se que o cruzamento de um ponto é acometido de graves polarizações. Isto é, no caso de apenas alguns genes em um indivíduo serem bons, propiciando a ele um valor de aptidão (*fitness*) alto, os demais genes (mesmo não sendo bons) são propagados pela população. Além disso, blocos de genes são facilmente quebrados, blocos curtos quase sempre sobrevivem.

- **Cruzamento em Dois ou Múltiplos Pontos**

O mecanismo é análogo ao operador anterior sendo que, ao invés de haver um ponto de corte, existem dois ou mais pontos escolhidos aleatoriamente. O cruzamento de dois pontos foi estudado originalmente em (Cavichio (1970)) e mais tarde o cruzamento multi-pontos foi investigado em (De Jong (1975) e Spears e De Jong (1991)). Esta foi a maneira encontrada de evitar e reduzir a polarização no processo de recombinação. Na Figura 2.21 é mostrado como é feito o cruzamento de dois pontos, trocando os segmentos dos indivíduos em três partes.

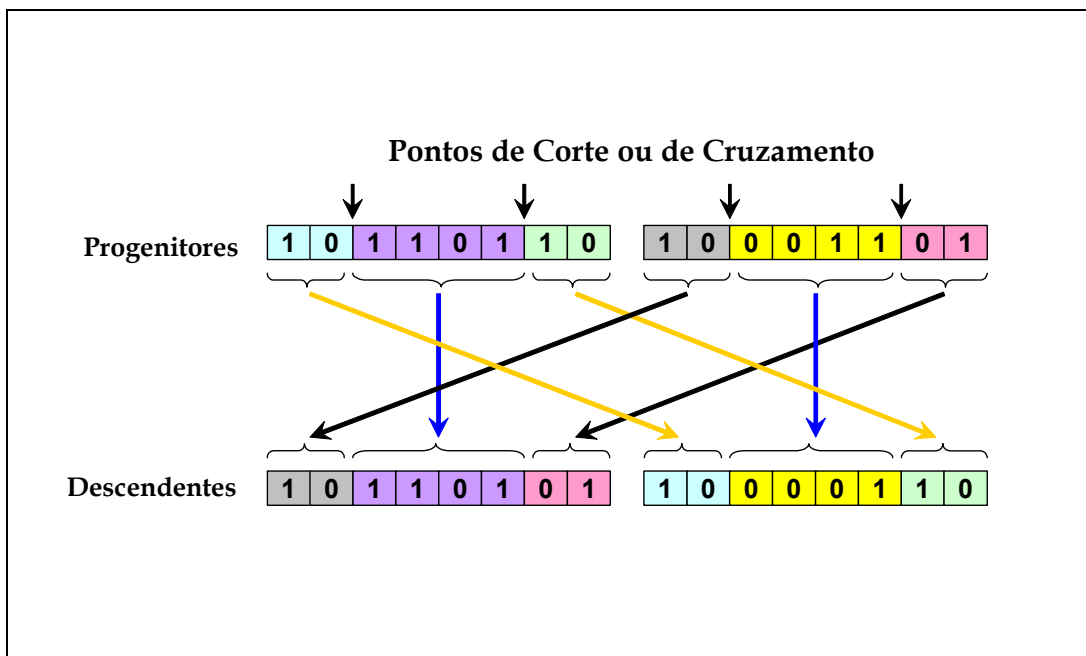


Figura 2.21 - Representação da forma de cruzamento em dois pontos.

- **Cruzamento Segmentado**

O cruzamento segmentado foi desenvolvido por Eshelman e seus colaboradores (Eshelman *et al.* (1989)) como uma variação do cruzamento de múltiplos pontos. Neste operador, não existem pontos de corte, cada gene do cromossomo pai é testado e, caso seja selecionado segundo uma dada probabilidade, é trocado pelo respectivo gene do outro pai.

- **Cruzamento Uniforme**

Este operador foi usado primeiramente em Ackley (1987). Neste caso cada gene do descendente é criado copiando o gene correspondente de um dos pais, escolhido de acordo com uma máscara de cruzamento gerada aleatoriamente. Onde houver 1 na máscara de cruzamento, o gene correspondente é copiado do primeiro pai e, onde houver 0 copia-se do segundo. O processo é repetido com os pais trocados para produzir o segundo descendente. Uma nova máscara de cruzamento é criada para cada par de pais. Um exemplo pode ser visto na Figura 2.22.

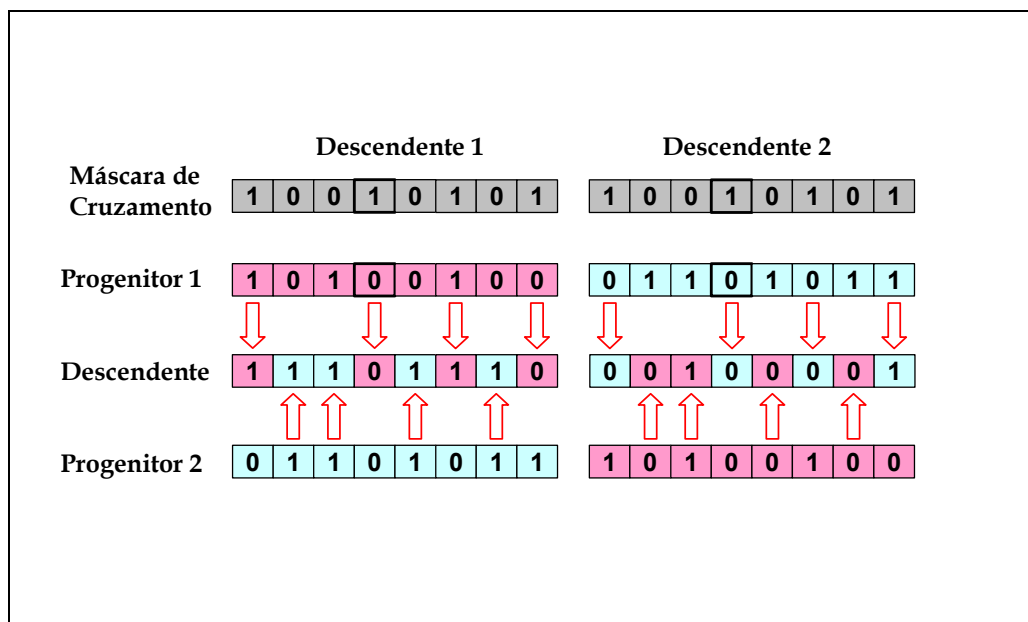


Figura 2.22 – Representação da forma de cruzamento uniforme.

O número de pontos de troca de informação não é fixo, mas em geral é igual a $(L-1)/2$, (onde L é o número de genes do cromossomo). Isto foi concluído em Eshelman et al. (1989), ficando demonstrado que aumentando (não excessivamente) o número de pontos de corte a polarização diminui.

- **Outros Operadores de Cruzamento**

Todos os operadores de cruzamento, exceto o uniforme, sofrem de relevantes graus de polarização. Visando reduzir essa polarização Holland desenvolveu um operador de inversão que reordena os genes. Esta idéia não tem sido usada, a não ser no cruzamento *shuffle* (Eshelman et al. (1989)).

Existe ainda um operador de cruzamento chamado “*bit-based simulated*” que utiliza toda a população para gerar os novos indivíduos (Syswerda (1993)). Na verdade este não é um operador legítimo de recombinação, mas sim um operador simulado. Isto se justifica, pois, ao invés de haver uma mistura de genes entre pais, o operador usa a frequência em que os genes aparecem na população para, estocasticamente, criar novos indivíduos.

Eshelman et al.(1989), descreve diversos experimentos com vários operadores de cruzamento. Os resultados indicam que o operador de pior desempenho é o cruzamento de um ponto, entretanto, não há nenhum operador de cruzamento que apresente um desempenho superior aos demais em todos os casos.

Pode-se concluir que a partir desses resultados que cada operador de cruzamento é particularmente eficiente para um determinado conjunto de problemas e pode ser extremamente ineficiente para outros.

II.12.2.1.2 OPERADORES DE RECOMBINAÇÃO FENOTÍPICA

Baseado no trabalho de Hornby (1996), as estratégias evolutivas (EEs) têm trabalhado no espaço fenotípico, fornecendo assim diversos operadores de recombinação fenotípica. No entanto, também a comunidade dos algoritmos genéticos (AGs) tem desenvolvido operadores fenotípicos devido ao fato de que, nos últimos anos, o uso de codificações mais próximas à realidade do problema tem aumentado bastante.

- **Operadores para EEs**

Em Bäck et al. (1991), Bäck (1996) e Bäck et al. (2000a; 2000b) vários operadores de recombinação para EEs são apresentados, sendo alguns deles citados na Tabela 2.6. Para todo $x_i \in x$:

Tabela 2.6 - Operadores de recombinação para EEs.

Número	Formato	Tipo
1	$x_i = p_{a,i} \text{ ou } p_{b,i}$	discreta
2	$x_i = (p_{a,i} + p_{b,i}) / 2$	intermediária
3	$x_i = \delta p_{a,i} + (1 - \delta) p_{b,i} \quad 0 \leq \delta \leq 1$	intermediária generalizada
4	$x_i = p_{b,i}$	pan-mixia* discreta
5	$x_i = (p_{a,i} + p_{b,i}) / 2$	pan-mixia* intermediária
6	$x_i = \delta p_{a,i} + (1 - \delta) p_{b,i} \quad 0 \leq \delta \leq 1$	pan-mixia* intermediária generalizada

*pan-mixia, segundo o dicionário Aurélio, significa, em uma população, acasalamento não seletivo ou aleatório que resulta num alto grau de uniformidade genotípica.

Os termos p_a e p_b representam os indivíduos pais ou progenitores e x é um descendente. Os valores $p_{a,i}$, $p_{b,i}$ e x_i referem-se ao i -ésimo gene do indivíduo. Os operadores 2 e 3 pretendem aproveitar o caso em que um progenitor está de um lado do pico (solução ótima) e o outro progenitor do lado oposto. Uma desvantagem de um

operador de recombinação estritamente interpolador é que áreas fora da vizinhança atual da população não podem ser alcançadas. Os operadores 4, 5 e 6 são operadores de recombinação de pan-mixia*; o primeiro progenitor (p_a) é sempre o mesmo para todos os genes, enquanto o segundo progenitor (p_{bi}) é escolhido para cada gene. Com este tipo de recombinação, todos os genes da população estão disponíveis para criação de novos indivíduos.

II.12.2.1.3 OPERADORES PARA ALGORITMOS GENÉTICOS EM CODIFICAÇÃO REAL

Os primeiros operadores de recombinação para AGs que trabalhavam com codificações reais não praticavam modificações nos genes, mas sim os trocavam (Fogel e Atmar (1990)) – semelhante à recombinação discreta (1). Por este motivo eles operavam como se fossem operadores de recombinação genotípica.

Um dos primeiros operadores de recombinação a fazer mais que somente troca de genes é chamado “*Davis’ averaging crossover*” (Davis (1991)), que realizava a média de alguns genes (semelhante à recombinação 2). A seguir surgiu um operador mais generalizado que o anterior chamado “*Radcliffe’s flat crossover*” (Radcliffe (1990)), o qual a extensão dos valores dos descendentes percorre uniformemente os valores dos progenitores (equivalente à recombinação 3).

Há ainda outro caso onde ambos os progenitores estão do mesmo lado do pico (ótimo), sendo que uma extrapolação do valor de um progenitor pode levar ao ótimo. Em Wright (1991) foram examinados e desenvolvidos operadores de recombinação para codificações reais que tratam os indivíduos como pontos no espaço euclidiano. O “*linear crossover*” foi criado para escapar de problemas onde somente troca de genes produzem indivíduos de baixo *fitness*. Este operador se apossa dos valores de p_1 e p_2 e o descendente resultante recebe o melhor de:

$$\frac{1}{2}p_1 + \frac{1}{2}p_2$$

$$\frac{3}{2}p_1 - \frac{1}{2}p_2$$

$$\frac{1}{2}p_1 + \frac{3}{2}p_2$$

Em Eshelman e Schaffer (1993) é definido um operador de recombinação chamado “*blend crossover*”, BLX- α . O operador BLX- α possui similaridades com os operadores de combinação “flat” e “linear”. Ele trata os indivíduos como pontos e gera descendentes entre um progenitor e o outro, até extrapolando um deles às vezes. Além disso, os descendentes são construídos com pontos tirados da reta que passa pelos dois progenitores, com igual probabilidade durante o intervalo de $p_1 - \alpha$ até $p_2 + \alpha$. A capacidade de extrapolar possibilita a um algoritmo evolutivo, usando apenas recombinação, de alcançar pontos fora da vizinhança atual da população (algo que não é possível somente com recombinação interpoladora). Outra vantagem é que o equilíbrio entre convergência e divergência pode ser controlado por meio do valor de α .

II.12.2.1.4 OPERADORES DE RECOMBINAÇÃO ESPECÍFICOS

Complementando a descrição dos operadores anteriormente apresentados, ainda existem muitos operadores desenvolvidos especificamente para certos problemas ou codificações, que possuem características particulares e que devem ser tratados a parte. Por exemplo, um problema muito conhecido é do caixeiro viajante, para o qual foram criados diversos operadores de recombinação. Outros exemplos são os casos da programação genética (Koza (1992)), onde os indivíduos são programas computacionais, ou máquinas de estado finito na programação evolutiva (Fogel et al. (1966)).

Existe ainda um operador de cruzamento chamado “*bit-based simulated*” que utiliza toda a população para gerar os novos indivíduos (Syswerda (1993)). Na verdade este não é um operador legítimo de recombinação, mas sim um operador simulado. Isto se justifica, pois, ao invés haver uma mistura de genes entre progenitores, o operador usa a frequência em que os genes aparecem na população para, estocasticamente, criar novos indivíduos.

II.12.2.2 MUTAÇÃO

A mutação é um operador responsável pela a introdução e manutenção da diversidade genética na população (Holland (1975)). Este operador trabalha alterando arbitrariamente um ou mais componentes de uma estrutura escolhida entre a descendência, logo após o cruzamento, fornecendo dessa forma meios para a introdução de novos elementos na população. Assim, a mutação assegura que a probabilidade de se chegar a qualquer ponto do espaço de busca não será zero. O operador de mutação é aplicado aos indivíduos com uma probabilidade dada pela taxa de mutação ρ_m .

Independente de qual tipo de algoritmo evolutivo, o operador de mutação terá sempre a função de realizar modificações nas soluções de forma a evitar a estagnação delas em uma única região do espaço de busca. Com isso é possível explorar o espaço de maneira mais completa e vasta, evitando que o algoritmo fique preso a ótimos locais, por exemplo.

II.12.2.2.1 MUTAÇÃO NOS ALGORITMOS GENÉTICOS

Nos algoritmos genéticos, o operador de mutação tem a função de realizar alterações em um ou mais genes de um cromossomo a partir de seu estado inicial. Isto possibilita o aparecimento de novos indivíduos na população, o que torna o algoritmo genético capaz de encontrar soluções distintas das já conhecidas.

A mutação é um mecanismo importante nos AGs pois previne a estagnação da população em ótimo local, provocando o aumento da diversidade. A mutação ocorre durante o processo evolutivo segundo uma determinada probabilidade (geralmente bem pequena). Caso a probabilidade de mutação seja muito alta, a busca torna-se essencialmente aleatória.

II.12.2.2.2 OPERADORES CARACTERÍSTICOS

- **Troca de bit:** operador de mutação que simplesmente inverte o valor de um dado gene pelo seu alelo (0 vai para 1 e 1 vai para 0). Este operador é compatível somente com codificações binárias.
- **Vizinhança:** operador que substitui o valor de um dado gene por valores escolhidos aleatoriamente, de uma vizinhança acima ou abaixo do valor atual. Podem ser utilizadas em codificações inteira ou em ponto flutuante (real).
- **Não uniforme:** operador que realiza mutação segundo uma probabilidade dinâmica, isto é, uma probabilidade que diminui de acordo com o aumento do número de gerações. Neste caso o operador evita a estagnação da população nos estágios iniciais do AG e permite um refinamento das soluções nos estágios finais da evolução. Este operador pode ser usado com quaisquer codificações.
- **Uniforme:** operador de mutação que substitui o valor de um gene escolhido com um valor aleatório uniforme selecionado dentro de um intervalo de valores pré-determinados. O operador de mutação uniforme é compatível com codificações inteira e ponto flutuante.
- **Gaussiana:** operador de mutação que adiciona um valor aleatório de acordo com uma distribuição gaussiana ao valor de um determinado gene. Caso o novo valor fique fora dos limites pré-estabelecidos ele é arredondado ou aproximado. Este operador funciona com codificações inteira e ponto flutuante.

Como foi visto no item Parâmetros Genéticos, geralmente se utiliza uma taxa de mutação pequena, justamente por ser um operador genético secundário.

A Figura 2.23 ilustra o processo de mutação em um indivíduo da descendência.

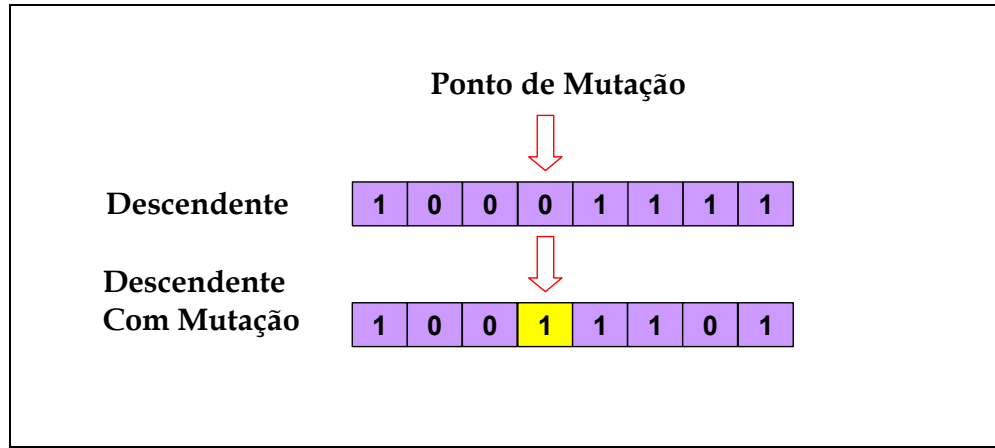


Figura 2.23 – Representação do operador de mutação.

A ocorrência de mutação em determinado gene é dada pela taxa de mutação a qual normalmente, possui um valor pequeno ($\rho_m \in [0...1]$) sendo alguns dos valores mais comumente usados $\rho_m = 0,001$ e $\rho_m = 0,01$. Nas últimas pesquisas constatou-se que o desempenho dos AGs tende a decrescer em populações de tamanho relativamente grande ($n > 200$) usando grande probabilidade de mutação $\rho_m = 0,05$ e em populações de tamanho pequeno ($n < 200$) combinadas com pequena probabilidade de mutação ($\rho_m < 0,02$) (Bäck (1996)).

Como foi verificado a mutação, em geral, se restringe à inversão do valor de certos bits, determinada aleatoriamente com base em uma taxa de probabilidade. Assim temos, para melhor compreensão, que para cada indivíduo de comprimento $\ell_x = \{m_1, \dots, m_n\}$ aplicando o operador de mutação passaremos a ter um indivíduo $\ell_{xp_n} = \{m'_1, \dots, m'_n\}$, tal que

$$m'_i = \begin{cases} m_i & , se \ z_i > \rho_m \\ 1 - m_i & , se \ z_i \leq \rho_m \end{cases}$$

onde m'_i representa o bit, do indivíduo, que está sendo avaliado para mutação e z_i é um número aleatório ($z_i \in [0.....1]$) atribuído a ele para comparação com a taxa de mutação ρ_m .

Dessa forma, aplicando a regra acima, é obtida a inversão de bit (no caso de indivíduos compostos por *strings* binárias) sempre que o valor de z_i atribuído a m_i' for menor ou igual a ρ_m ; caso contrário o bit permanece inalterado.

II.13 A DIVERSIDADE NOS ALGORITMOS GENÉTICOS

Um ponto fundamental para o bom funcionamento de um AG é a existência de diversidade entre os indivíduos. Ou seja, deve existir certo grau de diversidade entre as aptidões dos indivíduos que compõe o conjunto de possíveis soluções, pois do contrário, com um conjunto de indivíduos muito semelhantes, o operador de cruzamento perde em muito a capacidade de troca de informações úteis entre os indivíduos da população o que faz a busca em certos casos progredir muito lentamente ou praticamente estacionar (estagnação).

A necessidade de controlar a diversidade dentro de uma determinada população tem como um dos seus maiores obstáculos, a necessidade de populações finitas e não muito grandes. Caso contrário poderia se tornar não aplicável na prática, uma técnica de AG, visto que, controlar uma população muito grande, a qual tenha cálculos muito complexos para determinar a aptidão, poderia ocasionar um esforço computacional muito grande. Devemos lembrar que o esforço computacional é relativo ao tipo de aplicação, pois, por exemplo, se tratando do controle de um robô móvel que dependa de respostas em tempo real para desvio de obstáculos, um atraso de 1 segundo na tomada de uma decisão pode ser catastrófico.

Em suma, para que a seleção seja efetiva, a população deve conter, a todo instante, uma variedade de aptidões, o que, como foi visto com relação ao tamanho da população, implica também em não ter uma disparidade muito grande de aptidões, pois costuma afetar negativamente a diversidade da população. Para melhor entendimento, devemos conhecer também dois conceitos intrinsecamente ligados com a diversidade que são a Convergência e a Pressão Seletiva, os quais são explicados na sequência.

II.14 TÉCNICAS PARA MELHORIA DA CONVERGÊNCIA DOS ALGORITMOS GENÉTICOS

As ferramentas para melhoria da convergência dos AGs têm dois objetivos principais. O primeiro é evitar a convergência prematura do método e o segundo é acelerar a busca pela solução ótima. Numa primeira análise, tais requisitos parecem ser antagônicos. Mas, na verdade, possuem uma relação de cooperação que determina a eficiência dos AGs. A convergência prematura é prejudicial porque se pode ficar preso a um mínimo local. Para evitar isto, foram desenvolvidas ferramentas a medida que, a diversidade genética diminui e os indivíduos tornam-se muito parecidos, agem causando perturbações na população ou no método de seleção. Surgiram então as técnicas de escalonamento, variação dinâmica de probabilidades, formação de nichos, redução do espaço de busca e elitismo.

Acelerar a busca pelo ótimo é necessário, pois os AGs são um método custoso devido ao grande número de avaliações da função de mérito. Para isto, usam-se ferramentas como a redução do espaço de busca e o elitismo, por exemplo.

Levando em conta, a termo de exemplo, um AG de população finita, a convergência ocorre quando um ou mais indivíduos assumem um valor de aptidão muito superior aos demais (super indivíduo - fato que ocorre mais frequentemente no início do processo quando um determinado indivíduo pode ser privilegiado em relação ao resto da população que pode apresentar aptidões medíocres), tendo assim maiores chances de sobreviver e reproduzir, ao ponto de poder até mesmo, tomar conta da população com sua descendência. Este fenômeno é chamado de evolução em avalanche, ou seja, por serem privilegiados os super indivíduos em uma população finita, a diversidade diminui e isso faz com que na geração seguinte se favoreçam ainda mais os indivíduos mais aptos até o momento que eles dominam por completo a população, o que termina acarretando uma convergência prematura do AG geralmente em direção a um sub-ótimo. O único momento em que este tipo de fenômeno é aceitável e até mesmo desejável é nas fases tardias da evolução, ou seja, quando o AG já tenha localizado corretamente a solução ótima.

II.14.1 ESCALONAMENTO

Entre os métodos de seleção mais utilizados está o da roleta (já relatado anteriormente). Este método de seleção pode em alguns casos conduzir os AGs para a convergência prematura, ou seja, pode-se ficar preso a um máximo (ou mínimo) local. Isto acontece porque, quando da criação dos indivíduos, geralmente eles possuem um valor de aptidão baixo. Quando entre estes indivíduos aparece um com aptidão muito alta, pode acontecer que muitas cópias dele sejam criadas. Isto é, ele ocupa uma área muito grande na roleta e, conseqüentemente pode ser selecionado muitas vezes. Se este indivíduo corresponder a um mínimo ou máximo local, a probabilidade de se ficar preso nesta região é alta.

Para evitar este problema uma das saídas seria fazer o escalonamento da população, que consiste em limitar o número de cópias de um mesmo indivíduo na próxima geração. O escalonamento é descrito em detalhes em Goldberg (1989).

II.14.2 VARIAÇÃO DINÂMICA DE PROBABILIDADES

A variação dinâmica de probabilidades tem o mesmo objetivo do escalonamento, ou seja, evitar a convergência prematura. O que esta ferramenta faz é utilizar a medida de diversidade genética da população para medir o grau de semelhança entre os indivíduos. Se o grau de semelhança for alto, alteram-se as probabilidades de cruzamento e mutação (*pcross* e *pmu* respectivamente).

Especificamente, reduz-se *pcross* e aumenta-se *pmut*, aumentando-se assim a inserção de material genético novo na população. Se a situação for contrária, ou seja, se os indivíduos estiverem muito dispersos, aumenta-se *pcross* e reduz-se *pmut*. Existem inúmeras técnicas para fazer estas variações, como as apresentadas por Srinivas e Patnaik (1994) e Soares e Vasconcelos (1996).

II.14.3 FORMAÇÃO DE NICHOS

Na natureza, define-se nicho como uma pequena parte do ambiente, onde as populações vivem relativamente isoladas. Por isso, acabam adquirindo características próprias, formando subespécies. Este isolamento pode melhorar o processo de evolução.

Nos AGs é possível utilizar o mesmo conceito. Pode-se trabalhar com sub-populações ocasionando assim o aparecimento e o desenvolvimento de características próprias (e novas). Isto é interessante, pois se estaria explorando melhor diferentes áreas do universo de busca, aumentando assim o conhecimento a respeito do problema.

Existem técnicas bem conhecidas para a implementação desta ferramenta. As mais utilizadas são a função de partilha (Goldberg (1989)) e o SSS (*Simple Subpopulation Schemes*), proposto por Spears (1998).

A função de partilha mede o “grau de vizinhança”, ou seja, quantifica a proximidade de um indivíduo em relação aos outros no universo de busca. Neste caso, o operador de seleção analisaria o indivíduo por sua aptidão aparente relativa somente à aptidão de seus vizinhos, ou seja, de uma sub-população local.

Já o SSS consiste em criar sub-populações desde o início do processo, de modo que cada indivíduo da população receba uma “etiqueta” que indica qual sub-população pertence. Da mesma forma que ocorre com a função partilha de Goldberg, os indivíduos são selecionados de acordo com sua aptidão aparente. Neste trabalho foi utilizada uma sub-rotina considerando a exploração em nichos.

II.14.4 REDUÇÃO DO ESPAÇO DE BUSCA

À medida que o número de gerações vai sucedendo e que a população vai melhorando, “caminha-se” na direção do objetivo. Para se encurtar este “caminho”, utiliza-se a redução do espaço de busca. Esta redução é feita do seguinte modo: primeiramente seleciona-se o melhor indivíduo da população corrente. A partir deste indivíduo obtém-se uma nova população fazendo pequenas perturbações aleatórias em suas variáveis, gerando assim novos indivíduos. Com isto, passa-se a explorar somente a região onde está inserido o melhor indivíduo.

Deve-se tomar o cuidado de só começar a fazer as reduções do espaço de busca no final do processo de gerações, quando a população já se organizou em torno do objetivo. Se isto não for respeitado, o risco da convergência prematura será grande. Esta técnica é discutida em Soares (1997) e Vasconcelos et al. (1995; 1997).

II.14.5 ELITISMO

Já mencionado anteriormente (item II.11.4.6), é o método mais utilizado para melhorar a convergência dos AGs. Ele foi primeiramente introduzido por Kenneth De Jong (1975), e é uma adição aos vários métodos de seleção que força os AGs a reter um certo número de "melhores" indivíduos em cada geração. Tais indivíduos podem ser perdidos se eles não forem selecionados para reprodução ou se eles forem destruídos por cruzamento ou mutação. Muitos pesquisadores têm encontrado no elitismo vantagens significativas para a performance dos AGs (Mitchell (1996)).

O Elitismo consiste basicamente de realizar a etapa de seleção em duas partes:

1. Se seleciona uma elite de r membros entre os melhores da população inicial, os quais são incorporados diretamente à população final, sem passar pela população auxiliar.
2. A população auxiliar é selecionada entre os $n - r$ membros restantes da população inicial.

Em geral, a elite tem um tamanho reduzido (1 ou 2 para $(n = 50)$) e a sua amostragem pode ser direta (os r melhores) ou por sorteio (os r melhores entre os s melhores da população). O esquema gráfico do Elitismo pode ser visualizado na Figura 2.24.

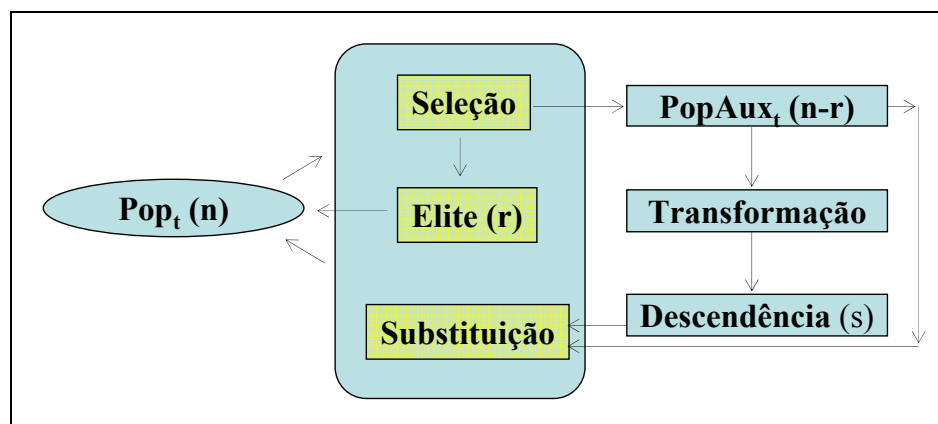


Figura 2.24 - Esquema do processo de elitismo.

II.15 SELEÇÃO DAS FUNÇÕES DE AVALIAÇÃO E APTIDÃO

As funções de avaliação e de aptidão devem ser elaboradas tendo em vista o tipo de problema a ser resolvido, ou seja, para cada problema teremos, na grande maioria dos casos, que criar novas funções para atribuição dos valores de aptidão aos indivíduos componentes da população.

Torna-se necessário diferenciar função de aptidão e função de avaliação para fazer que as avaliações assumam valores positivos e para controlar a densidade da população.

Inicialmente, a função de avaliação coincide com o objetivo de maximizar, isso sem esquecer que nem sempre é fácil especificar numericamente o objetivo.

Uma vez que a função deve ser de fácil manipulação prática, pode ocorrer, em determinadas circunstâncias, que exista um objetivo claramente definido, mas a determinação explícita de seu valor para cada indivíduo é complicada. Em tal situação, não se pode tomar esse objetivo como função de avaliação, visto que seria inoperante.

Dado que os AGs maximizam atitudes, se admite por padrão que se maximiza o objetivo. Em certos casos pode ser mais prático determinar o problema como sendo de minimização de um determinado objetivo.

Uma vez selecionada a função de avaliação, é construída a função de aptidão deslocando-a e escalonando-a convenientemente. Sendo que o deslocamento tem, por finalidade principal, fazer com que a função de aptidão retorne valores positivos, o procedimento mais utilizado para tornar as avaliações positivas é o da *janela de deslocamento*, o qual consiste em deslocar as avaliações da seguinte forma:

$$Aptidão(x) = F - Evol(x), \forall x \in P$$

onde F é um limite superior para as avaliações, ou seja $(\forall t), \forall x \in P, Aptidão(x(t)) \leq F$.

Como não é habitual conhecer antecipadamente a faixa de valores que vai ser assumida pela função de aptidão, é preferível ir adaptando dinamicamente o valor de F da seguinte forma: $Aptidão(x(t)) = F_{\max}(t) - Evol(x(t))$, $(\forall x(t)) \in P(t)$, onde $F_{\max}(t)$ é a aptidão máxima de qualquer indivíduo avaliado até a iteração imediatamente anterior, $t - 1$.

Então, se o valor de $F_{\max}(t)$ não está suficientemente próximo da máxima aptidão da presente geração, pode ocorrer um retardamento na busca e até mesmo uma estagnação. Isto ocorre devido à perda da diversidade na população, pois se $F_{\max}(t)$ possui um valor muito superior que qualquer avaliação atual, as correspondentes aptidões serão todas muito parecidas, se reduzirá a pressão seletiva em direção dos melhores indivíduos e a busca estagnar-se-á, podendo ocorrer deriva genética. Para melhor entendimento, supõe-se que o valor de $F_{\max}(t) = 100$ e que no presente instante a população só apresenta indivíduos com valores de avaliação entre 5 e 10. Usando $Aptidão(x(t)) = F_{\max}(t) - Evol(x(t))$, $(\forall x(t)) \in P(t)$ obtém-se valores de aptidão variando entre 90 e 95, o que, por exemplo, na hora da distribuição na roleta, não diferenciaria muito os melhores indivíduos. Mas se $F_{\max}(t) = 15$, tem-se uma faixa de aptidões variando entre 5 e 10 o que, segundo a expressão usada antes, fornece para o indivíduo mais apto um valor que seria o dobro do valor do menos apto, o que melhoraria o processo de discriminação de aptidões.

Pelo apresentado, nota-se ser conveniente fazer uma atualização periódica do valor de $F_{\max}(t)$ visando evitar a perda da diversidade. Uma das formas de controlar a diversidade é o uso de uma função de aptidão diferente da função de avaliação, o que é conhecido como *escalonamento* da função de avaliação. Com o escalonamento se tenta evitar um fenômeno com causas opostas ao anterior, mas que produz efeitos semelhantes: é o fenômeno já comentado da convergência prematura em direção a super indivíduos.

Segundo Goldberg (Goldberg (1989)), desde o estudo pioneiro de De Jong, o escalonamento dos valores da função objetivo tem se tornado uma prática amplamente aceita. Isto tem sido feito para manter os níveis apropriados de competição durante uma simulação. Sem escalonamento, existe a tendência de que uns poucos super indivíduos dominem o processo de seleção. Neste caso, os valores da função objetivo devem ser sub-escalonados para evitar que tais indivíduos ocupem a população. Mais tarde, quando a população tiver convergido quase em sua totalidade, a competição entre os membros da população é menos intensa e a solução tende a evoluir de forma errada. Neste caso os

valores da função objetivo devem ser sobre-escalados para acentuar as diferenças entre os membros da população com o fim de continuar favorecendo os melhores membros.

II.16 OUTRAS ESTRATÉGIAS LIGADAS AOS ALGORITMOS GENÉTICOS

II.16.1 TRATAMENTO DAS RESTRIÇÕES

Segundo Castro (2001) os algoritmos genéticos, inicialmente foram aplicados em problemas de otimização sem restrições obtendo-se ótimos resultados, mas em pouco tempo muitos problemas exigiam a utilização da técnica na resolução de problemas com restrições.

Uma forma de restrição muito comum é a limitação da variável a um determinado intervalo onde essa restrição é fundamental para a delimitação da região de procura para os AGs, recebendo a denominação de irrestritos, os problemas que possuem este tipo de restrição. Além da restrição anterior, em outros problemas em que algumas outras condições devem ser satisfeitas para que a solução tenha validade. Para contornar essas situações, um procedimento seria a execução da avaliação de cada um dos integrantes da população, e se algum destes não for viável, deve-se procurar outro para substituí-lo até que se encontre. Este procedimento de resolução de problemas com restrições promove um grande esforço computacional, sendo mais dificultoso, encontrar um ponto viável quanto encontrar a melhor solução. Uma maneira alternativa seria o acoplamento de funções de restrição à função objetivo, transformando um problema restrito em irrestrito, como as transformações dos métodos de penalidade.

Os métodos de penalidade transformam problemas com restrições em outros sem restrições pela simples operação de acoplamento de uma função de penalidade, que possui todas as restrições violadas. As restrições podem ser de igualdade e desigualdade

resultando em uma função pseudo-objetivo. Conforme a descrição do problema de minimização na sequência tem-se:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Minimizar} & f(x_1, x_2, \dots, x_N) \\
 \text{Sujeito a} & g_j(x) \geq 0 \quad j = 1, 2, \dots, J \\
 & h_k(x) = 0 \quad k = 1, 2, \dots, K \\
 & x_i^{(L)} \leq x_i \leq x_i^{(U)} \quad i = 1, 2, \dots, N
 \end{array}$$

onde $f(x)$ é a função objetivo e $g(x)$ e $h(x)$ representam todas as funções de restrições de desigualdade e igualdade respectivamente. O problema sofre uma transformação e se apresenta da seguinte forma:

$$\Omega(x, r) = f(x) + r * P(x),$$

onde $\Omega(x, r)$ é a função pseudo-objetivo, $P(x)$ é a função de penalidade e r um parâmetro de penalidade.

A função de penalidade, primeiramente penaliza a função objetivo quando há violação das restrições chamada de Método de Penalidade Exterior (Bazaraa e Shetty (1979); Luenberger (1971) e Vanderplaats (1984)), ficando da forma:

$$P(x) = \sum_{j=1}^m \left\{ \max[0, g_j(x)] \right\}^2 + \sum_{k=1}^l [h_k(x)]^2,$$

sendo que o primeiro somatório tem significado do maior valor entre 0 e $g_j(x)$.

II.16.2 FUNÇÃO DE DESEMPENHO COM VALORES POSITIVOS

O desempenho dos integrantes da população é devido a função de desempenho, onde no processo de seleção os resultados dessa função são utilizados compondo a população, ficando sujeita aos operadores genéticos. A maioria dos métodos de seleção utiliza-se de dados estatísticos, dependentes dos valores do desempenho de cada indivíduo, e por isso tenta-se evitar que a função, alvo da otimização, tenha valores menores que zero, implicando valores negativos para os valores de probabilidade, que não existe. Mais detalhes desta técnica pode ser encontrado em Soares (1997).

II.16.3 TRANSFORMANDO PROBLEMAS DE MINIMIZAÇÃO EM MAXIMIZAÇÃO

Normalmente os AGs trabalham em termos de maximização, mas em muitas situações há a necessidade de minimização das funções objetivo. Para esta situação uma alternativa simples é realizada, transformando um problema de maximização em minimização da seguinte forma: $f(x) = \frac{1}{\Omega(x, r) + \varepsilon}$, onde a constante ε possui um valor definido ligeiramente superior ao módulo do valor mínimo de $\Omega(x, r)$, caso $\Omega(x, r) \leq 0$, ou ligeiramente superior ao negativo do mínimo de $\Omega(x, r)$, quando $\Omega(x, r) > 0$. Outra maneira de utilizar a constante ε é definindo-a como sendo um valor positivo de pequena magnitude (sugestão: $\varepsilon \in [10^{-3}, 10^{-8}]$) para todo $\Omega(x, r) \geq 0$. Assim quanto menor for $\Omega(x, r)$, maior será $f(x)$ (Soares (1997), Vasconcelos et al. (1995; 1997)).

Uma segunda opção seria redimensionar $\Omega(x, r)$ em relação a um valor $C_{\max}$ como no seguinte conjunto de equações:

$$\begin{cases} f(x) = C_{\max} - \Omega(x, r), & \text{se } \Omega(x, r) < C_{\max} \\ f(x) = 0 & \Omega(x, r) \geq C_{\max} \end{cases}$$

O parâmetro $C_{\max}$ pode ser constante, ou então variar ao longo das gerações. O valor inicial de $C_{\max}$ após vários testes de $\Omega(x, r)$. A transformação da função objetivo em uma função desempenho, onde as características principais da função original são constantes, é de extrema importância para a convergência dos AGs. Segundo Soares (1997) que sugere, dentre os métodos apresentados, a utilização das funções de penalidade para considerar as restrições, o do acréscimo de $C_{\min}$ evitando a possibilidade da função $\Omega(x, r)$ adquirir valores negativos, e a transformação de um problema de minimização em um de maximização pela metodologia da inversão de $\Omega(x, r)$.

II.16.4 PROBLEMAS COM MÚLTIPLOS OBJETIVOS

Vários problemas reais são formulados por uma coleção de objetivos a serem extremizados, os quais são muitas vezes conflitantes entre si. Porém, em muitas destas aplicações são realizadas simplificações no problema original de forma a combinar vários objetivos numa única função. Ou ainda escolhendo-se aquele que dentre os objetivos do problema requer prioridade de extremização que normalmente é relacionado ao custo.

Nos últimos anos vêm aumentando os estudos na área da otimização multi-objetivos, trazendo como consequência o desenvolvimento de métodos matemáticos para tal tarefa, bem como seus estudos e conhecimentos pelo meio técnico. Em Neves (1997) é apresentado um exemplo de aplicação multi-objetivos em projeto de pontes, pois além da minimização do custo ou peso é de fundamental importância a maximização das frequências naturais de vibração da estrutura para melhorar o seu desempenho dinâmico. Observa-se que estes objetivos são conflitantes, já que para menores pesos, menores são as frequências naturais de vibração e maiores os riscos de colapso estrutural por efeito de ressonância.

Um método matemático utilizado para a otimização multi-objetivos é a programação objetiva (Ignizio (1976); Ignizio (1982) e Michell (1996)), que é bastante

interativo para o usuário e de crescente utilização, embora, por se tratar de um método matemático não apresenta garantias de obtenção de extremos globais, além de ser um método hierárquico com solução única.

Como os Algoritmos Genéticos trabalham com uma população de soluções, eles são naturalmente adequados para a determinação simultânea de várias soluções Pareto-ótimas, isto é, soluções não dominadas (Horn e Nafpliotis (1993)).

II.16.5 HIBRIDIZAÇÃO

Uma alternativa para melhorar o funcionamento dos algoritmos Genéticos é a hibridização (Eldred (1998) e, Yang e Douglas (1998)), estratégia que visa acoplar algoritmos distintos com a finalidade de tirar o melhor proveito de cada um deles. Assim é possível acoplar-se aos Algoritmos Genéticos, por exemplo, qualquer outro método matemático para efetuar uma busca local mais agressiva. Esta alternativa híbrida resultante apresenta a capacidade evolucionária de uma grande exploração global da região viável aliada a uma eficiência nas buscas locais.

II.16.6 PARALELISMO NOS ALGORITMOS GENÉTICOS

Os AGs são habitualmente considerados algoritmos implicitamente paralelos, sendo esta característica um dos seus pontos fortes. Atualmente existe uma procura cada vez maior por algoritmos que, além de resolver os problemas de forma aceitável, também os resolvam de um modo que seja paralelizável, pois cada vez mais a tendência está voltada para a utilização de sistemas paralelos. Os AGs possuem uma estrutura computacional altamente paralelizável. Assim, se for analisado a estrutura de um AG chegamos às seguintes conclusões:

- Cada cromossomo da população tem uma qualidade Q , que pode ser avaliada independentemente de qualquer outro fator;
- Cada operador e operação genética são independentes, pelo que podem ser aplicados em qualquer ordem, sequencial ou não, a qualquer elemento da população.

Observando mais uma vez a natureza, chega-se à conclusão que nela todos os processos são paralelos, ou seja, os processos sequenciais é que não são naturais. Basta imaginar que neste momento, em qualquer parte do mundo, existem crianças nascendo, lutas pela sobrevivência, pessoas morrendo, e muitas outras atividades, sem que exista um ponto comum de controle. Pode-se interferir diretamente ou não no que se passa, mas não existe ninguém com um conhecimento global do estado atual do mundo e acima de tudo ninguém consegue interferir ou controlar tudo o que acontece.

Uma das áreas de maior investigação nos AGs tem sido sobre o modo como podem ser efetivamente paralelizados, tendo surgido desse esforço um grande conjunto de possíveis implementações. O que todas estas diferentes implementações têm demonstrado é que, o importante não é apenas o algoritmo em si, mas sim o conjunto do algoritmo, os problemas para que vai ser utilizado, a sua parametrização e o equipamento que vai servir de base à execução do AG.

Embora estes já fossem fatores essenciais nos algoritmos sequenciais, o que se observou é que surgiram muitos algoritmos que eram bons em determinadas situações, piores em outras e com pequenas variações de parâmetros e/ou nos problemas, onde tudo poderia se inverter. Foram ainda acrescentados mais fatores a um problema que já não era simples. Assim, se poderia ter um excelente algoritmo para executar em um conjunto de transputers, que se fosse executado numa rede de workstations já não seria tão bom, ou vice-versa, mas dependendo também da parametrização e do problema.

O primeiro modelo, que vai ser descrito, é a evolução natural do modelo sequencial, que embora não seja dos mais eficientes, tem algumas vantagens em algumas utilizações especiais. São ainda apresentados dois outros modelos, que ao longo dos últimos anos se têm mostrado especialmente eficazes que são o modelo Ilha e o modelo da Vizinhança, tendo cada um deles os seus pontos fortes.

Um fator muito interessante nos AGs paralelos, é a possibilidade de que as soluções paralelas sejam, não apenas obtidas mais rapidamente, mas também tenham normalmente uma melhor qualidade que as soluções sequenciais (Projeto ISIS ou ISIS Group).

II.16.6.1 MODELO DE FARMING

Este modelo (chamado de Farming devido à analogia com uma fazenda em que existem várias tarefas para fazer e várias pessoas para executá-las, controladas por um capataz) segue uma estrutura do tipo “Mestre-Escravos”, e é uma evolução quase natural do AG sequencial. Assim, neste modelo tem-se um processo “Mestre” que supervisiona a população e faz a seleção dos cromossomos em que se vai atuar. A partir da altura em que é feita a seleção, entrega o trabalho a um dos N processos “Escravos”, que executam os operadores genéticos, avaliam os cromossomos gerados e depois devolvem os cromossomos ao processo “Mestre”, enquanto este já entregou mais trabalho a outros “Escravos”.

Tem o inconveniente de ser necessário centralizar a seleção e obrigar a comunicar os parâmetros para os “Escravos” atuarem e depois os resultados para o “Mestre”. No entanto, em sistemas que esta comunicação seja feita muito rapidamente, como em sistemas de memória partilhada, a solução é bastante aceitável. Tem ainda problemas de escalabilidade, pelo que o seu uso obriga a calcular com rigor a quantidade de processos “Escravos” que será razoável ter, de modo que o processo “Mestre” possa funcionar sem sobrecarga.

II.16.6.2 MODELO ILHA

Observação de ambientes naturais isolados como as ilhas, tem demonstrado que algumas das espécies que surgem são especialmente adaptadas às particularidades dos seus ambientes, em contraste com populações equivalentes, mas em ambientes mais abertos, em que todos os membros têm acesso a todos os outros membros.

Estas observações levaram ao surgimento de novas arquiteturas e operadores que melhoravam os AGs paralelos para além do ganho puro de desempenho, que em conjunto com as considerações relativas à possibilidade de variadas populações concorrentes poderem gerar uma melhor solução do que a atingida com apenas uma população, levaram à construção de um modelo que aproveita ambas as vantagens. Aproveita os ganhos na obtenção de soluções com a melhor qualidade das soluções.

Este modelo é o chamado modelo Ilha, devido à fonte inspiradora do conceito. Assim, o algoritmo sequencial fica dividido numa série de Ilhas (populações), que comunicam entre si as melhores soluções. No resto do tempo, estão trabalhando para melhorar as soluções internas da ilha. Este modelo, entretanto, mantém a estrutura sequencial do AG, apenas sendo adicionados os operadores para fazer a migração dos elementos entre as diferentes ilhas, não existindo um verdadeiro paralelismo no algoritmo.

II.16.6.3 MODELO DA VIZINHANÇA (DIFUSÃO)

Consiste em dividir todo o AG, de modo a conseguir conduzir mais longe o paralelismo. Para tal, é feita a mesma divisão da população pelos vários processadores, mas em vez de usar o conceito de ilha para se fazer a migração, estabelece-se uma vizinhança com a qual é feito o processo normal de seleção e reprodução.

Este é o modelo da Vizinhança (East e Macfarlane (1993) e Schleuter (1990)), também conhecido por modelo de Difusão, pois os bons cromossomos vão se difundindo gradualmente pelos vários processadores. Como exemplo, uma população de 100 elementos, pode-se imaginar uma grade de 10 x 10 e dizer que cada uma das células tem uma vizinhança, a qual por questões de velocidade, seria composta pelos elementos imediatamente à sua volta na arquitetura usada. Esta vizinhança vai ser usada para selecionar quais dos cromossomos vão ser utilizados para gerar o novo cromossomo.

Depois é necessário substituir o cromossomo atual pelo cromossomo que acabou de se gerar. Esta fase de substituição é bastante crítica, pois se o elemento for substituído por um elemento com pior qualidade o algoritmo sai muito afetado.

Este algoritmo, tal como o modelo Ilha, também pode ser visto na Natureza, pois é uma aproximação daquilo que acontece quando se aumenta o tamanho de uma Ilha. Imagine que a evolução dos animais numa ilha é relativamente independente da evolução dos animais nas ilhas vizinhas, sendo ocasionalmente feita a emigração de alguns animais.

Como analisado, este modelo funciona bem, e tem a vantagem de em cada Ilha poderem aparecer animais mais adaptados à ilha em questão. Agora, suponha que em vez de uma ilha pequena, em que cada elemento da população pode comunicar com qualquer outro, e passando para uma situação em que a ilha é tão grande que se torna impossível a comunicação entre todos os elementos da população. Aí o que aparece é a criação de nichos de população, como as aldeias, em que cada elemento tem maior probabilidade de encontrar o seu par na sua aldeia, mas uma probabilidade menor de encontrá-lo numa aldeia próxima e uma probabilidade ainda menor de encontrar o par numa aldeia longínqua.

Este modelo além de ter as mesmas vantagens do modelo da Ilha, tem também a seu favor o fato de ser extremamente paralelizável, pois as operações a nível, de cada célula são muito simples, além de que não é necessária comunicação a grandes distâncias. Embora este seja o modelo que parece ter mais facilidade em ser aplicado para grande número de

processadores, tem, no entanto o problema de ser de grão muito fino. Em cada processador apenas fica um cromossomo, sendo os cromossomos vizinhos transmitidos para o processador atual para a seleção e reprodução. Caso se opte por passar este modelo para um grão médio, acumulando vários cromossomos em cada processador, pode-se optar por fazer o escalonamento de vários processos por processador, cada um atendendo a um cromossomo ou elaborar um algoritmo seqüencial em cada nodo, que atenda a cada um dos pontos da grade que controla.

Toda a estrutura deste algoritmo assenta num grande grau de comunicação entre as várias partes da população, quer seja com um cromossomo por processador quer sejam vários cromossomos por processador. No caso de estar sendo utilizado um sistema cujas comunicações sejam muito rápidas, este modelo obtém performances equivalentes ao modelo da ilha. No entanto, não é adequado a sistemas com comunicações mais lentas, como através de uma rede Ethernet.

II.16.6.4 TIME DE ALGORITMOS

É uma estratégia recente compreendendo as anteriores. O procedimento é tentar resolver o problema com mais de um algoritmo semelhante à técnica de hibridização, com a diferença de que a operação se dá paralelamente, onde todos os algoritmos vão realizando as buscas ao mesmo tempo, ao contrário do que ocorria, ou seja, o procedimento de cada algoritmo ocorria separadamente e numa determinada seqüência dentro do processo geral (um determinado algoritmo processava até um certo momento de acordo com o desenvolvimento do problema e a partir de então outro tomava seu lugar e assim por diante). Nesta categoria, os algoritmos podem ter, entre si, uma linha de comunicação com alguns objetivos pré-definidos como: intervalos de tempo, número de iterações, critérios de convergência, número de gerações entre outros que podem ser definidos. Os conjuntos de critérios são condicionados às características do problema e os algoritmos empregados.

O time de algoritmos fornece resultados surpreendentes, indicando possibilidade de resolução para problemas que antes não podiam ser resolvidos por algoritmos isolados além de serem observados a diminuição do tempo e o número de iterações das simulações. A aplicação para resolução de sistemas de equações não-lineares utilizando o método de Newton e o método dos gradientes conjugados são observados nos trabalhos de Báran et al. (1996); Barán (1993).

II.16.7 SISTEMAS ADAPTATIVOS

É uma técnica que não assume valores fixos e determinados para os parâmetros de configuração dos algoritmos genéticos, onde funções mais elaboradas promovem a variabilidade desses parâmetros ao longo do processamento evolutivo. Também é condicionado por alguns critérios pré-definidos. O processo adaptativo possui duas principais características, sendo uma delas o objetivo de melhoria da eficiência dos algoritmos além de torná-los mais robustos às diversas aplicações.

A realização desse processamento é feita de maneira estática, onde são escolhidos parâmetros, funções e/ou operadores no início do algoritmo sendo conduzidos até ao final da execução do mesmo. Outra observação feita atualmente é relacionada ao processo ser executado de forma dinâmica, permitindo dentro do contexto evolutivo, que o próprio algoritmo faça a seleção dos parâmetros de configuração e/ou os parâmetros genéticos, além de realizar a adaptação da função objetivo principalmente quando há muitas restrições e/ou penalidades que são utilizadas de acordo com os desempenhos apresentados (Hinterding et al. (1982)).

II.16.8 POPULAÇÃO INICIAL DISTRIBUÍDA UNIFORMEMENTE

É uma estratégia simples em que como o próprio título descreve o processo realiza uma distribuição uniforme da população inicial pelo espaço de busca obtendo maior

confiabilidade na descoberta dos extremos globais e melhorando a velocidade de convergência do algoritmo utilizado (Silva e Barbosa (1998)).

II.17 TRABALHOS SOBRE ALGORITMOS GENÉTICOS APLICADOS EM PROCESSOS QUÍMICOS

Beckers et al. (1996) desenvolveram experimentos de ressonância magnética nuclear multi-dimensional, que é um excelente meio de revelar a estrutura tridimensional de bio-macromoléculas em solução. Entretanto a pesquisa espacial na análise conformacional destas, usando dados de ressonância magnética nuclear é complexa, sendo necessário a utilização de técnicas de otimização global.. Este trabalho utiliza um algoritmo genético que otimiza um ajuste entre o efeito do espectro nuclear experimental em duas dimensões e os correspondentes espectros calculados por outras formas, tornando um intensivo procedimento computacional. A rapidez no desempenho foi atingida realizando-se uma execução em paralelo do algoritmo, isto é, criando pequenas sub-populações, sendo processadas em diferentes estações. O bom comportamento das amostras foi obtido pela inicialização de cada sub-população aleatoriamente e a introdução de operadores de migração. Em posteriores substituições o melhor desempenho individual de uma sub-população com o pior de uma outra sub-população são verificados depois de um número pré-determinado de gerações. Um algoritmo genético paralelo desenvolvido utilizou um software denominado HYDRA (ambiente de programação para paralelizar um algoritmo genético para análises conformacionais) para uma análise conformacional dos ácidos nucleicos. Foi evidenciado uma considerável redução no tempo computacional com esse algoritmo genético paralelo obtendo-se as soluções adequadas. É um método que descreve uma ferramenta simples e rápida em análises conformacionais de bio-macromoléculas, obtendo-se bons resultados.

Chung e Hwang (1996) desenvolveram um moderno e novo sistema de otimização e para um projeto de extrusão. A otimização das variáveis do projeto foi conduzida pelo algoritmo genético, onde os valores convenientes são desenvolvidos por um modelo de

análise, baseados nos elementos finitos. A pesquisa foi aplicada para determinação de modelos ótimos de secagem considerando diversas funções objetivo. Os algoritmos genéticos combinados com métodos de elementos finitos foram propostos para otimizar modeladores de secagem por extrusão. O principal método se baseia na possibilidade de acomodar algumas funções objetivo demonstradas neste trabalho, onde estas atingem um máximo na pressão de secagem. Através deste ponto de vista, essas aproximações obtidas por este método possuem uma vantagem em relação a outros métodos tradicionais, sendo esperado a sua ampla utilização em trabalhos futuros, de acordo com o aumento da demanda para controle de qualidade em partes de difícil extrusão, e que certamente induz aos projetistas analisar outras funções objetivos. A rápida convergência foi atingida dentro das primeiras 200 interações. Por isso, a menos que, não se fixe o ponto ótimo teórico, que parece desnecessário, a proximidade deste ponto pode ser encontrada sem consumo de tempo computacional e, além disso, esse tempo pode ser reduzido drasticamente se múltiplas CPUs são empregadas simultaneamente. Este trabalho visa servir como uma grande ferramenta no campo de projetos de processos e controle em extrusões.

Fraga e Matias (1996) estudaram a síntese e otimização de um sistema de destilação não ideal usando um algoritmo genético paralelo. A síntese automatizada de seqüências de separação de misturas não ideais foi recentemente estudada e compreendida. A necessidade de ter procedimentos adequados para estimativas de propriedades físicas de forma rigorosa, com estruturas complexas conduz a especificação de um problema de programação não linear, onde a função objetivo e a região factível não são convexas. O trabalho descreve o uso de procedimentos de otimização estocásticos (algoritmos genéticos), para otimização de seqüências pré-selecionadas de unidades de destilação para separação de três componentes de mistura azeotrópica. Pela determinação da estrutura em termos das unidades desejadas, o problema de otimização foi reduzido para cada projeto das unidades relevantes, escolhendo-se as condições apropriadas de operação, e encontrando a rede ótima de troca de calor. Para o manuseio do alto esforço computacional requerido, esta implementação utiliza computadores em forma de uma rede de estações de trabalho. Os resultados foram promissores.

Lewin (1996) pesquisou o acréscimo da ação feed-forward em um sistema de controle de processos, regulado com objetivo de diminuir o efeito de uma perturbação medida na saída do processo, em consequência reduzindo-se a ação requerida do controle feedback. O algoritmo genético foi aplicado para otimizar as funções objetivo derivadas em termos do custo da perturbação do controlador feed-forward modificado. As hipóteses estatísticas testadas permitiram que os parâmetros críticos do controle feed-forward possam ser identificados e seus valores ótimos computados. O uso deste método foi apresentado em problemas típicos de projetos de controle multi-variável. Este trabalho descreveu o mapa de contorno de custos de perturbação, com objetivo de gerar tipos de funções objetivos apropriadas para diversas situações de projetos de controle. Concluiu-se que é um método com grande potencial a ser utilizado.

Moros et al. (1996) realizaram pesquisas utilizando um algoritmo genético para gerar estimativas iniciais de parâmetros para um modelo cinético de um processo catalítico de desidrodimerização oxidativa do metano. O objetivo foi promover valores iniciais adequados para uma combinação aplicada de um processo de integração e um algoritmo de estimativa de parâmetros não linear de convergência local. A influência dos parâmetros de controle deste AG (número de indivíduos, taxas de mutação e métodos de seleção) foi estudada. Adicionalmente foram estudados os parâmetros do modelo cinético para dois diferentes catalisadores de PbO/alumina. Concluiu-se que o método adotado pode ser utilizado para uma estimativa dos valores dos parâmetros do modelo em um modelo matemático de maior complexidade. Houve diminuição do tempo computacional e confiabilidade das soluções dos parâmetros do modelo.

Heyen e Kalitventzeft (1997) estudaram e desenvolveram uma metodologia para otimização de uma operação para redução do uso de energia em plantas de produção. A intenção era melhorar o uso da energia em processos industriais otimizando a operação das plantas. O primeiro passo foi construir uma sintonia fina de modelos de escalas locais de plantas de produção de intensa energia e de redes de distribuição de utilidades de energia e calor combinados (calor, energia, resfriamento), e posteriormente otimizá-los utilizando várias técnicas numéricas. Os modelos detalhados foram sintonizados na base de dados

atuais da planta. Eles foram usados para calcular a eficiência dos balanços de energia, e por isso identificar fontes de desperdício de energia. Finalmente foi otimizado o uso de energia pelo ajuste das condições operacionais em uma escala de tempo média. A economia de energia ficou na faixa de 5%-10% obtidas para um processo energético intenso, onde uma baixa percentagem representa uma quantidade considerável.

Pantel et al. (1997) realizaram pesquisas e ressaltaram uma metodologia aplicada em dois estágios para resolução de tarefas considerando várias situações propostas. O primeiro passo envolve o desenvolvimento de um modelo discreto de simulação para representar dinamicamente o comportamento de um sistema de produção. Já que muitos problemas relacionados a processos em batelada pertencente a uma família de problemas classificados como algoritmos de otimização probabilística (tal como conformações moleculares e algoritmos evolucionários) representam uma boa alternativa para resolver problemas combinatoriais de grande escala. No segundo passo dessa aproximação foi investigada a metodologia dos algoritmos genéticos para resolução de diversos problemas relacionados a processos em batelada, onde este algoritmo foi desenvolvido para minimização do tempo de residência médio para produzir um ajuste nas ordens das funções representativas dos processos em batelada em plantas de multi-propósito e multi-objetivo. A evolução da função objetivo foi fornecida por seus acoplamentos com o modelo de simulação discreta embutido em laços de otimização. Os resultados computacionais descreveram que o uso desta aproximação pode ajudar significativamente a melhoria da eficiência do sistema de produção. O esforço computacional necessário ao problema deve ser discutido quando aplicados em problemas de grandes dimensões. Várias soluções têm sido testadas e sugestionadas em alguns casos para reduzir o número de simulações discretas solicitadas no programa por uma escolha guiada pelos parâmetros do algoritmo genético, via procedimentos de aprendizagem desses parâmetros. Os resultados obtidos fornecem condições para que sejam aplicados em outros campos de estudo, principalmente em química fina.

Upreti e Deb (1997) pesquisaram um procedimento tendo como objetivo desenvolver um projeto ideal (ótimo) em um reator de síntese de amônia usando a técnica

dos algoritmos genéticos. Esta nova metodologia foi escolhida, por causa da bem sucedida aplicação em muitos problemas de otimização em engenharia. Embora existam outros estudos relacionados à projetos ótimos em reatores de síntese de amônia, alguns desses ignoraram determinados termos da formulação da função objetivo, onde a solução ótima não se iguala a solução obtida usando outras técnicas de otimização. Este trabalho inclui alguns desses termos e aplica a técnica de algoritmo genético para encontrar o comprimento ótimo do reator. Esta pesquisa atingiu outros aspectos relativos ao projeto do reator de amônia, além de incluir um termo na formulação da função objetivo, o qual foi ignorado por alguns autores (Murase et al. (1970) e Edgar e Himmelblau (1989)). Os resultados ótimos obtidos com as formulações revisadas estão de acordo com as práticas industriais documentadas. Além disso, algoritmos genéticos foram considerados adequados em projetos de reatores encontrados como multi-modais de natureza. Os resultados são muito promissores e sugestionam o uso desses algoritmos em tarefas de otimização em sistemas semelhantes.

No trabalho de Willis et al. (1997), foi desenvolvida uma metodologia de programação utilizando algoritmo genético em modelos de sistemas empíricos aplicados a sistemas de processos químicos. O desempenho das regressões simbólicas em programação genética foi observado, determinando a estrutura e complexidade de um modelo. Inicialmente os estudos se concentraram no desenvolvimento de programação de algoritmo genético em um modelo em estado estacionário, depois a metodologia foi estendida no desenvolvimento de um modelo dinâmico. A utilidade foi demonstrada pelo desenvolvimento de estimativas deduzidas dos modelos para dois processos típicos: para uma coluna de destilação a vácuo e um extrusor utilizados em indústrias alimentícias.

Wolf e Moros (1997) estudaram e desenvolveram uma metodologia para estimar as constantes de taxa de reações catalíticas heterogêneas sem a suposição das etapas de determinação das taxas superficiais, fornecendo uma estimativa inicial para essas constantes de taxa de uma cinética química não linear proposta, utilizando um algoritmo genético. A estrutura particular do AG adaptada ao problema foi introduzida. A taxa e a certeza da convergência dos procedimentos de estimativa foram analisadas ilustrando a

estratégia proposta pelo exemplo do modelo cinético do acoplamento oxidativo catalítico do metano aos hidrocarbonetos C_2 . Neste exemplo a estimativa da probabilidade máxima das constantes da taxa foi encontrada usando as estimativas iniciais obtidas pelo AG, otimizadas pelo algoritmo Nelder-Mead. Os resultados evidenciam que o procedimento de otimização proposto suporta a estimativa das constantes de taxa de modelos cinéticos sem a suposição das etapas de determinação da taxa.

Dadone e VanLandingham (1998) fizeram a implementação PLC (Programmable Logic Controller) com um algoritmo genético para otimização do controlador em processos químicos, especificamente uma planta química com o objetivo de aumentar a lucratividade (em regime permanente) mantendo as condições operacionais estáveis. O processo consiste de um conjunto de duas reações químicas exotérmicas. Uma prática comum é projetar um controlador pelas observações da planta (experimentos) e otimizar alguns parâmetros por tentativa e erro. Neste trabalho os autores propuseram utilizar um algoritmo genético para automação de um procedimento exploratório. O processo é controlado por um PLC e um AG foi acoplado a este controlador e usado para uma otimização do desempenho do mesmo. Boas soluções foram encontradas e, além disso, o AG pode ser facilmente programado no PLC e reutilizado para diferentes plantas com a necessidade de codificação das séries e reprogramação da avaliação dos ajustes ou função de adaptação.

Friese et al. (1998) utilizou um algoritmo evolucionário (algoritmo genético) para o cálculo de parâmetros dos grupos de contribuição para predição das propriedades termodinâmicas. A computação de parâmetros para tais modelos de contribuição com objetivo de prever propriedades termodinâmicas normalmente conduz a um problema de otimização de multi-parâmetros. Os parâmetros do modelo são calculados usando um método de regressão e aplicando certos critérios de erro. Uma função objetivo complexa foi aplicada, na qual um algoritmo de otimização procura encontrar um mínimo global. Os algoritmos simplex ou gradientes são suficientes para melhorar os modelos de contribuição de grupos. Entretanto se os modelos possuírem termos complexos, como a soma de expressões exponenciais, a pesquisa do global ou um ótimo de melhor qualidade igualmente torna-se dificultosa. Os algoritmos evolucionários representam a possibilidade

de resolução de problemas deste tipo e em muitos casos o uso de princípios biológicos em problemas de otimização rende resultados satisfatórios. Um método de otimização utilizando algoritmo genético e estratégias evolucionárias foi programado e testado com um modelo de contribuição de grupo baseado no cálculo de entalpia (EBGCM). Os resultados obtidos com esses procedimentos foram comparados com outros obtidos pelo algoritmo simplex. Um sistema de teste foi criado e a função objetivo foi examinada em detalhes. Um grande número de parâmetros para o arranjo dos algoritmos evolucionários oferece inúmeras possibilidades para promover melhorias.

Garrard e Fraga (1998) estudaram redes de trocadores de massa que são utilizadas em indústrias químicas com o objetivo de reduzir as correntes de desperdícios gerados em uma planta para um nível aceitável de diminuição de custos. Para encontrar a rede ótima, o processo é muito dificultoso devido a não-convexidade das representações matemáticas do problema. Este trabalho descreveu uma alternativa para aproximação de síntese de redes de trocadores de massa e suas regenerações utilizando algoritmos genéticos. A principal intenção da aproximação pelos algoritmos genéticos tem sido a definição de uma codificação para os problemas de síntese das redes de trocas que determinam a estrutura e as trocas de massas atuais simultaneamente. Esta situação foi atingida pela definição de uma codificação que não requer a solução de equações não-lineares como parte de uma avaliação consistente. Com isso foi capacitado de resolver inerentemente problemas não-lineares e não-convexos de forma efetiva e consistente. A estrutura da rede é codificada usando aproximações multi-nível. Incluindo os atuais trocadores de massa, fluxos de correntes, e divisões na estrutura genética que conduz adequadamente a um espaço de pesquisa enriquecido.

Vários exemplos da literatura têm sido estudados. Para problemas não-convexos e não lineares, a aproximação dos algoritmos genéticos foi descrita para gerar soluções que melhoram aquelas citadas na literatura. Para os problemas de minimização, os algoritmos genéticos possuem boas aproximações para encontrar um ótimo consistente. O uso de métodos de otimização semelhantes aos algoritmos genéticos são adequados em vários problemas, onde a metodologia evolucionária forneceu boas indicações para melhoria do

processo, tornando possível incorporar simultaneamente sínteses de trocas de calor e massa nas redes de trocadores.

Gross e Roosen (1998) otimizaram um processo industrial completo fazendo uso da técnica dos algoritmos genéticos. Este trabalho descreve o uso desses algoritmos para uma otimização de parâmetros simultâneos em processos de síntese em um programa modular ambiental. O simulador comercial ASPEN PLUSTM foi integrado para determinação do valor da função objetivo. O modelo MANANGERTM foi utilizado para uma definição confortável do problema gráfico. As simulações e os cálculos dos custos exploram a eficiência completa da modelagem do processo sem a necessidade de simplificações devido às restrições impostas pelo método de otimização. A melhor solução não se perde pela aplicação dos modelos não refinados. Os resultados mostraram que os algoritmos evolucionários são adequados na otimização do processo, além da forte redução do tempo computacional.

Hanagandi e Nikolaou (1998) utilizaram uma aproximação híbrida para otimização global utilizando um algoritmo de “clustering” em uma pesquisa genética estruturada. O estudo se concentrou em encontrar soluções para sínteses de configurações ótimas de bombas. O interesse deste trabalho foi a otimização global usando os algoritmos genéticos. Foi proposta uma sinergia entre a técnica de análise de cluster, a otimização global estocástica e o AG para executar a otimização global. Esta sinergia minimiza a busca em excesso ao redor do ótimo local e aumenta a capacidade do AG explorar novas áreas no espaço exploratório. A metodologia proposta demonstrou um desempenho superior quando comparada com o AG simples.

Harding et al. (1998) trabalharam com o planejamento da produção de hidrocarbonetos utilizando os algoritmos genéticos. Os hidrocarbonetos produzidos são de um grupo de óleos de campos de gás. Deve-se decidir a melhor estratégia de gerenciamento para a exploração de cada fonte de petróleo, tipicamente essa é a estratégia que maximiza o retorno econômico. Em particular o planejamento da produção deve ser escolhido,

especificando taxas de extração no tempo de vida do reservatório. Disto, decisões sobre construção das facilidades de processamento e linhas de dutos são projetadas. Uma aproximação quantitativa para a pesquisa do melhor planejamento de produção requer a construção de um modelo matemático o qual deve se representativo capturando as características dos reservatórios para predizer os custos e lucros de algum planejamento. O objetivo era maximizar a rede de valores presentes totais (NPV). O AG foi aplicado com operadores de crossover específicos ao problema obtendo-se um grande sucesso nesta aplicação.

Keith et al. (1998) realizaram estudos para redução de um modelo cinético utilizando algoritmos genéticos como técnica de otimização. Extensas redes reacionais demonstram dificuldades na simulação e controle quando o tempo computacional é limitado. Este trabalho apresentou a proposta de uma nova aproximação simplificando redes reacionais que formulam um modelo. Duas formulações de redução do modelo cinético e suas codificações foram consideradas, uma delas envolvendo a eliminação de reações e outra a eliminação de espécies. O método AG foi aplicado para reduzir uma rede de 18 reações e 10 espécies e a qualidade das soluções obtidas foram avaliadas pela comparação com as soluções globais encontradas usando o registro completo. As duas formulações foram resolvidas para uma rede de 32 reações e 18 espécies. Em termos computacionais a metodologia com AG oferece algumas vantagens na análise da sensibilidade global quando o problema de redução do modelo é bem definido. Entretanto, se requerimentos de adequação do modelo e os critérios de erro não são prontamente especificados e/ou a rede é de tamanho pequeno a moderado, a análise de sensibilidade é provavelmente uma melhor aproximação.

Lewin et al. (1998) estudaram e desenvolveram um método generalizado para síntese de redes de trocadores de calor (HENs) baseado nos algoritmos genéticos. O uso do algoritmo foi demonstrado na solução de problemas simples de síntese HEN, na qual a recuperação máxima da energia (MER) é desejada para uma corrente intensa. Como resultado, o problema de otimização paramétrico era uma LP (linear programming) e foi resolvido em duas etapas: (a) a estrutura da HEN foi determinada pelo AG, e (b) o calor

levado da unidade, onde são fixados pelo algoritmo Simplex para encontrar MER são utilizados pelo AG para o ajuste da taxa. Foi proposta uma representação da estrutura HEN fisicamente significativa podendo ser manipulada pelos operadores genéticos e sendo apropriada para otimização paramétrica pelo algoritmo Simplex. O algoritmo HEN-AG gera boas soluções até mesmo para problemas em grandes escalas. Em todos os casos os resultados foram tão bons ou melhores do que àqueles obtidos na literatura.

Löhl et al. (1998) desenvolveram um estudo sequencial de operações em batelada para um processo de produção acoplado utilizando a comparação entre duas metodologias: dos algoritmos genéticos e da programação matemática. O caso estudado neste trabalho é relacionado à indústria de polímeros, onde a planta analisa dois diferentes tipos de poliestireno em diversas frações de grãos. O processo de produção é dividido dentro das etapas principais de preparação do material bruto, polimerização e terminando na suspensão de poliestireno nas linhas de produção operadas continuamente e separadas dentro de diferentes frações de grãos para o estoque final. A contribuição da aplicação da técnica dos algoritmos genéticos foi muito favorável e de grande utilidade, principalmente quando os planejamentos possuem muitas restrições, a atenção especial ficou por conta do manuseio dessas restrições em diferentes níveis de implementação do algoritmo. A qualidade dos resultados e os respectivos desempenhos numéricos foram discutidos e comparados com o algoritmo de programação matemática, e concluiu-se que a técnica dos AGs é muito vantajosa.

Park e Froment (1998) aplicaram um algoritmo genético híbrido tendo como objetivo estimar parâmetros em modelos cinéticos detalhados pertencentes a uma reação catalítica heterogênea. Pesquisas em cinética química de reações catalíticas heterogêneas requerem estimativas das taxas e coeficientes de equilíbrio por regressões não lineares. Problemas de otimização de parâmetros são encontrados devido a não linearidade dos modelos e limitações dos algoritmos de otimização, os quais são baseados nos métodos tradicionais. A função objetivo baseada em modelos não lineares e dados experimentais, freqüentemente contém mais do que um mínimo e os métodos tradicionais são altamente propensos a conduzirem resoluções locais. A utilização do AG tinha a intenção de

encontrar o mínimo global apesar da grande extensão dos parâmetros e da existência desses mínimos locais na região de busca do parâmetro. O efeito da utilização do AG (seu desempenho) na melhoria dos parâmetros foi estudado em detalhes. Para a função objetivo considerada neste estudo, uma combinação de baixa probabilidade de crossover com uma alta probabilidade de mutação foram necessárias para um bom desempenho do AG.

O desempenho do AG foi devido a uma forte dependência dos parâmetros de execução do AG. Um algoritmo híbrido (algoritmo genético híbrido) baseado nas interações de execução do AG deduzido pelo otimizador Levenberg-Marquardt foi desenvolvido. Esse algoritmo híbrido se mostrou muito eficiente e eficaz, produziu um balanço próprio entre convergência e a diversidade, sendo sustentado completamente pela execução do AG. Comparados com as técnicas tradicionais, os AGs fornecem um alto potencial para encontrar o mínimo global, embora o desempenho ser fortemente dependente dos parâmetros dos AGs.

Pham (1998) pesquisou um método evolucionário que foi proposto para otimização de determinados processos químicos considerando restrições. Independentemente das transformações clássicas, crossover e mutação de arraste (pequena mutação), fez-se o uso de vários operadores reprodutíveis, como: substituições, igualdades, extrapolações e permutas. Uma taxa de mutação adaptativa foi utilizada contra paralisações em pontos locais. O método foi extremamente útil para resolução de problemas dinâmicos envolvendo vetores dependentes do tempo, com restrições, semelhantes àqueles originados em controle de processos e transferências de calor de forma inversa. Em adição, o método resolve consideravelmente as dificuldades dos problemas-teste semelhantes às funções de Shwefel e Griewangk melhores do que alguns métodos já conhecidos. Este método foi testado em base teórica e prática e desempenhou bem em ambas as situações. A grande possibilidade de escolha de operadores conduziu a bons resultados e desempenhos em problemas deste tipo.

Polifke et al. (1998) desenvolveram um processo de otimização de coeficientes de taxa de mecanismos cinéticos simplificados utilizando a metodologia dos algoritmos genéticos. O objetivo da otimização foi igualar a liberação de calor ou a rede das taxas de produção das espécies de um mecanismo cinético simplificado e de um detalhado. O AG foi proposto para conduzir o procedimento com um mínimo de exigências. As aplicações de sistemas de dois e três estágios otimizados para chamas de metano laminar pré-misturadas apresentaram resultados promissores: perfil de temperatura, das espécies principais e também dos máximos de valores das espécies intermediárias junto com àquelas obtidas com o mecanismo cinético detalhado. Os mecanismos otimizados são numericamente robustos e eficientes, a flexibilidade e a facilidade da utilização fizeram que as aproximações apresentadas neste trabalho, serem apropriadas para a modelagem numérica de combustão em situações de interesse técnico.

Pullan (1998) pesquisou e descreveu uma codificação real implementando algoritmo genético paralelamente para encontrar uma estrutura de mínima energia global para um modelo molecular vinculado de duas dimensões. Inicialmente partindo-se de uma estrutura randomicamente gerada, o algoritmo genético foi adequado para encontrar a energia mínima conformacional para a maior parte das estruturas contendo entre dois e sessenta e um átomos. A importância dos operadores genéticos na construção e do domínio do problema foi demonstrada pela comparação do desempenho deste algoritmo genético com resultados obtidos por outros algoritmos do mesmo tipo e outros métodos de otimização. Os resultados foram altamente satisfatórios e obteve-se um mínimo global para moléculas consistindo de 2 a 55 átomos. O método foi bem sucedido para moléculas com 37 átomos, mas atingiu melhores resultados para moléculas com 61 átomos. O algoritmo genético obteve bom desempenho para encontrar esse mínimo usando inicialmente conformações randômicas.

Gupta, R. e Gupta, S. (1999) realizaram um estudo para otimização de um sistema reacional industrial em semi-batelada, de produção de nylon-6, utilizando a técnica dos algoritmos genéticos. As soluções ótimas multi-objetivo de Pareto para três diferentes graus de nylon-6 produzidos nesse reator foram obtidas usando o algoritmo adaptado (Non-

Dominated Sorting Genetic Algorithm – NSGA). As duas funções objetivo minimizadas foram: o tempo de reação total e a concentração do dímero cíclico indesejado na corrente de produto. Enquanto que simultaneamente conseguiu-se atingir os valores desejados da conversão do monômero e o número médio do comprimento da cadeia. As variáveis de controle utilizadas são: a abertura da válvula fracional e a temperatura do fluido na jaqueta. O estudo apresentou uma considerável melhoria na operação industrial. Os valores ótimos encontrados da concentração do dímero cíclico no produto foram inferiores. A técnica é completamente geral podendo ser estendida e aplicada em outros sistemas de reatores.

Santos e Dourado (1999) aplicaram um algoritmo genético em uma otimização global de energia e produção em processos industriais. Nestes processos ocorrem exigências crescentes para um gerenciamento eficiente de todos os fatores que podem reduzir os custos operacionais necessitando de uma metodologia de otimização global multi-objetivo capacitando a geração de estratégias ótimas, executando as restrições requeridas. Neste trabalho o AG foi desenvolvido e aplicado para designação de todas as seções de produção de uma trituração particular de polpa de papel e na indústria de papel como um todo, otimizando os custos de energia e as mudanças na taxa de produção. Este sistema foi planejado para implementar toda manutenção de fechamento forçado ou programado, como as reduções impostas nas taxas de produção.

Wehrens et al. (1999) estudaram um critério recente de otimização utilizando os algoritmos genéticos, descrevendo a cobertura de pesquisa e solução de espaços além da reprodutibilidade de ambos, que são aplicados em combinação com projetos experimentais para um ajuste fino dos parâmetros e aptidão das funções do algoritmo genético na otimização da estrutura de um heptapeptídio. Uma série de influências dos parâmetros investigados foram reveladas por esse critério. Devido a isso sugeriram a aplicação deste, os quais não são baseados nos convenientes valores da população final, quando se desenvolveu o algoritmo genético. Foi mostrado que são facilmente adaptáveis aos problemas específicos. Este trabalho evidenciou que o algoritmo genético utilizado para otimização é de grande utilidade. Os critérios são definidos em termos gerais tornando-os possíveis para mudar suas implementações de acordo com a aplicação a ser realizada,

devido a esta possibilidade podem ser aplicados a uma série de problemas de diferentes características. Em resumo, o critério de qualidade produz medidas para comparar o desempenho de caminhos dos métodos de otimização, independente da implementação do critério de evolução. Isto em curso produz dentro de um comportamento do método de otimização e fornece a possibilidade de um ajuste fino dos dados em combinação com os métodos do projeto experimental.

Bhaskar et al. (2000) efetuaram a otimização de um reator industrial de politereftalato de etileno (PET) de filme seco utilizando um modelo pré-validado. As duas funções objetivo a serem minimizadas foram: as concentrações do ácido e do grupo vinil terminal no produto. Esses são os dois produtos laterais indesejados produzidos no reator. O problema de otimização incorporou uma restrição para produção do polímero tendo um valor desejado do grau de polimerização (DP). Adicionalmente, a concentração do dietileno glicol e do grupo no produto, é restringida dentro de uma faixa de valores. As variáveis de decisão possíveis para o problema são: a pressão do reator, temperatura, concentração do catalisador, tempo de residência da massa reacional no reator e a velocidade de rotação do agitador. A técnica de Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm (NSGA) foi utilizada para resolução deste problema de otimização multi-objetivo. Descobriu-se que este algoritmo é incapaz de convergir para as soluções ideais quando duas ou mais variáveis de decisão são utilizadas e necessárias para execução dos diversos códigos para obtenção das soluções. Este trabalho apresentou um excelente teste para futuros algoritmos de otimização multi-objetivos.

O NSGA falha no sentido de fornecer a resposta correta quando em uma aplicação individual, particularmente quando as diversas variáveis de decisão são utilizadas. Para o reator de filme seco PET, foram obtidas soluções de Pareto não dominada sempre que a temperatura é mantida constante e não é utilizada como uma variável de decisão. Ao contrário, um único ponto ótimo global é obtido quando a temperatura é medida como uma das variáveis de decisão, pois seu efeito nas duas funções objetivo é dominante.

Engell et al. (2000) utilizaram um algoritmo (AG) para um planejamento on-line de uma planta em batelada de polímeros. Uma característica não padronizada do problema é um alto grau de produção acoplada. Nenhum dos diferentes produtos pode ser produzido separadamente e somente suas proporções relativas podem ser influenciadas pela escolha de procedimentos a serem realizados nas polimerizações. As partes contínuas e descontínuas da planta são conectadas por uma mistura de estágios, as quais fornecem uma característica fortemente não linear das equações envolvidas. Uma modelagem matemática rigorosa conduz a um problema de grande dimensão, não convexo, com forte não linearidade (Mixed Integer Nonlinear Problem – MINLP). A aplicação do AG deve ser atenta para o manuseio das restrições no nível genético para assegurar que a maior parte dos indivíduos possa representar possíveis planejamentos. A qualidade do planejamento e do desempenho numérico ou o algoritmo foram discutidos e comparados com o modelo do algoritmo de programação matemática descrito em Schultz et al. (1998). O planejamento foi realizado em uma planta em batelada de produção de polímeros baseada no trabalho de Pekny et al. (1998). A qualidade das soluções obtidas foi comparável àquela obtida pela programação matemática. O tempo necessário de execução computacional foi moderado e o esforço da modelagem foi relativamente baixo comparado à programação matemática. A praticidade e a qualidade das soluções podem ser avaliadas por funções complexas de custo utilizando execuções de simulação, promovendo a utilidade do algoritmo em planejamento on-line.

Sahin et al. (2000) aplicaram a tecnologia dos algoritmos genéticos para determinação dos coeficientes de transferência de massa e seus desvios padrões relativos. O coeficiente de transferência de massa constante de reação superficial e a ordem da taxa de reação foram calculados pela aplicação deste algoritmo. Esta análise forneceu as estimativas dos parâmetros como novos dados que são registrados e conseqüentemente rendem a variabilidade dos parâmetros. Neste estudo os desvios ocorridos não excedem 0,9% dentro da contagem da taxa de crescimento de cristais da equação estudada e o obtido experimentalmente sendo representado por outra equação. Este novo método proposto foi comparado com outras metodologias anteriores para os casos de cristais de NiSO_4 e $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ em um cristalizador de leito fluidizado. O método foi aplicado com alta

eficiência obtendo-se bons resultados (estimativas dos coeficientes) do que aqueles obtidos por outras metodologias. Esta técnica indica a possibilidade de aplicação para outras equações de cristalização que não podem ser resolvidas com certa facilidade.

Yu et al. (2000) desenvolveram um novo algoritmo híbrido combinando dois algoritmos: o genético e o recozimento simulado (Simulated Annealing – SA) para otimização de sistemas de grande escala de integração energética, os quais possuem grandes dificuldades para tal objetivo quando eram utilizados os algoritmos tradicionais. Um processo químico foi considerado, sendo composto de sub-sistemas de reações, separação, recuperação de calor e utilidades que possuem forte interações uns com os outros. A resolução da integração energética é dificultosa a nível do processo como um todo promovendo problemas para otimização. Para isso desenvolveu-se um AG melhorado pelo uso de um crossover ortogonal e operadores efetivos, e o AG melhorado foi efetivamente combinado com um algoritmo SA para evitar convergência prematura. Os resultados dos cálculos numéricos exemplificaram que o novo algoritmo convergiu rapidamente em relação aos algoritmos (AG e SA) quando atuam sozinhos, e possuem muito mais possibilidades de localizar o ótimo global. A prova da convergência foi evidenciada neste trabalho. Bons resultados foram atingidos para melhoria da eficiência do processo total.

Zhao et al. (2000) realizaram a otimização das condições operacionais de um reator fluidizado de craqueamento (Fluidized Catalytic Cracking – FCC) de grande importância na indústria de processamento de petróleo, onde foi baseada em redes neurais artificiais (Artificial Neural Networks – ANN) e algoritmos genéticos para modelagem do processo com mecanismos complexos e não conhecidos e a conseqüente otimização. Além disso, um AG modificado com uma série de mutação adaptativa foi proposta para a busca da localização do ótimo com mais rapidez. Do ponto de vista da economia, torna-se necessário a melhoria da razão de conversão da alimentação através do ajuste das condições de operação. Os resultados foram altamente satisfatórios na investigação evidenciando facilidade e efetividade do método sugerido e particularmente demonstrou que essa

metodologia tinha condições de encontrar os valores ótimos com mais rapidez do que o AG tradicional.

Zuo e Wu (2000) desenvolveram uma otimização em tempo semi-real e o controle de um sistema de fermentação de batelada alimentada. Nesse estudo utilizou-se redes neurais híbridas (Hybrid Neural Networks – HNN) e o algoritmo genético. O sistema de fermentação é o cultivo do *Bacillus thuringiensis* (Bt) para produção thuringiensin, o qual é um bio-inseticida da maior exotoxina do *Bacillus thuringiensis*. O sistema de cultivo foi modelado dentro de um modelo de redes neurais híbridas, que servem um domínio de exploração do algoritmo genético para determinação da taxa ótima de alimentação. A otimização em tempo médio real foi conduzida utilizando o modelo HNN e as variáveis de estado medidas para re-otimizar o sistema em uma hora. Os resultados foram excelentes, havendo um grande aumento na produção da exotoxina.

Rajesh et al. (2001) trabalharam no desenvolvimento de uma metodologia de otimização multi-objetivo de plantas industriais de hidrogenação. A operação eficaz desse tipo de planta é um ponto crítico fundamental para a conservação de energia na área de refino de petróleo e na indústria de fertilizantes. Para alcançar as metas “ótimas” das condições operacionais (ocasionando melhoria no desempenho da unidade), estas devem ser identificadas. Neste trabalho uma determinada planta industrial foi simulada utilizando um modelo rigoroso do processo para reformadores de vapor e conversores de troca. Uma adaptação do Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm (NSGA) foi empregada para executar a otimização multi-objetivo e avaliar o desempenho da unidade. De forma simultânea foi realizada a maximização do produto juntamente com as taxas de fluxo de vapor exportadas representando as duas funções objetivo, considerando uma taxa de alimentação fixa de metano para a unidade analisada. Para uma configuração especificada da planta, os ajustes ótimos de Pareto das condições operacionais são obtidos por NSGA com grande sucesso para diferentes condições de processo.

Rangaiah (2001) realizou estudos sobre a evolução do algoritmo genético (AG) e a técnica de recozimento simulado (SA – Simulated Annealing) para problemas de equilíbrio e estabilidade de fases. Cálculos de equilíbrio de fase requerem a minimização global da energia livre e a análise de estabilidade de fases entre outros. Neste trabalho, as duas técnicas de otimização global estocásticas foram avaliadas e comparadas em problemas desta classe. Exemplos típicos e modelos termodinâmicos diferentes foram considerados. Os resultados descreveram que o AG é geralmente mais eficiente e confiável do que SA para cálculos de equilíbrio de fases. Ambas as técnicas exibiram pouca confiabilidade para localização do mínimo global das funções de energia livre para alguns sistemas complexos de equilíbrio de fases (multifásicos), para isto um AG híbrido incorporado ao SA foi proposto e sua capacidade de melhoria foi apresentada, mas a principal limitação foi o aumento significativo do tempo de processamento, por isso tornaram-se necessários algumas melhorias.

Os resultados dos problemas de estabilidade de fases evidenciaram que AG foi capaz de localizar o mínimo global com 100% de confiabilidade em todos os exemplos verificados. Os resultados não são afetados quando uma fase não existente é incluída no cálculo de equilíbrio de fase. De uma forma geral observou-se que o AG oferece grandes benefícios principalmente pela independência do modelo, fácil implementação e mínimo tempo de processamento quando comparado com as técnicas globalmente convergentes encontrados na literatura. Para o caso de minimização da energia livre por AG foi recentemente usado para regressão de parâmetros de interação binária em um modelo de Lennard–Jones para misturas de fluidos.

Os resultados serviram como meta para o operador designar, na ordem, a obtenção do melhor custo efetivo de operação destas plantas. A predição das condições operacionais ótimas para estas unidades é muito dificultosa devido ao número elevado de variáveis de decisão com inúmeras interdependências que são complexas. Informações valiosas como a quantidade de exigência de combustível para cada caso operacional também foi disponibilizada permitindo a realização de uma escolha inteligente entre os vários pontos

operacionais disponíveis. As operações em condições pré-definidas reduzem os custos operacionais da planta, aumentando a produtividade e lucratividade.

Ziyang et al. (2001) otimizaram parâmetros de adsorção e cinéticos da síntese do metil terc-butil éter do álcool terc-butil e metanol. O metil terc-butil éter (MTBE) um agente de mistura de alta octanagem para motores a gasolina foi produzido pela reação direta de álcool terc-butil (TBA) com o metanol utilizando uma resina de troca iônica denominada de Amberlyst 15, a qual age como catalisador e adsorvente.

Os experimentos foram executados em um reator de leito fixo em uma temperatura na faixa de 318–328 K utilizando uma entrada de pulso retangular e medindo os perfis de eluição de TBA, MTBE e água. Um modelo matemático baseado em uma cinética quase homogênea foi desenvolvido. Os parâmetros cinéticos como as constantes de equilíbrio de adsorção da água, TBA e MTBE em metanol juntos com suas dependências na temperatura foram determinadas pela sintonização dos resultados de simulação para ajustar os dados experimentais utilizando a técnica de otimização dos algoritmos genéticos. O modelo foi validado usando a adsorção sintonizada e as taxas dos parâmetros para predição de outros resultados experimentais. A cinética mencionada neste trabalho foi obtida em condições livres para as resistências de transferências de massa interna e externa. A entalpia e entropia de adsorção obtidas de Arrhenius constituíram grande consistência comparado aos estudos termodinâmicos.

Huang et al. (2002) estudaram e desenvolveram um projeto de um catalisador para oxidação do metano acoplado pelo uso de redes neurais artificiais e um algoritmo genético híbrido. Essa nova metodologia de projeto de catalisador foi desenvolvida para simulações das relações entre os componentes do catalisador e o desempenho catalítico do mesmo. Para o aumento da eficiência do projeto do catalisador, um novo AG híbrido testado por TSP foi gerado para otimização global para o projeto ótimo. Uma estratégia de projeto multi-rotacional foi descrita, a metodologia foi aplicada para projeto de catalisador multi-componente para acoplamento do metano oxidativo, onde alguns dos melhores

catalisadores, nos quais o rendimento do hidrocarboneto C_2 foi maior do que 25% do que tinha sido projetado. O trabalho demonstrou que a nova metodologia do projeto de catalisador é altamente eficiente.

Immanuel e Doyle (2002) trabalharam com a geração em circuito aberto de um perfil de alimentação ótimo para controlar uma distribuição de tamanhos de partículas (PSD) desejada em um processo de co-polimerização emulsificada em semi-batelada de acetato vinílico e acrilato butílico, onde a técnica dos algoritmos genéticos foi utilizada como estratégia de otimização. O modelo do processo baseado em um balanço populacional foi utilizado para esta proposição. A etapa final do PSD obtida nesses experimentos combinou com o objetivo requerido apesar das incertezas do modelo e perturbações do processo.

O exame da evolução do PSD no ponto final forneceu informações úteis para estratégias de controle feedback. A razão de um surfactante em relação ao monômero total utilizado em um procedimento de produção é proporcional àqueles usados em produções industriais, por este fato validando o objetivo em relação ao PSD. Na prática industrial, uma batelada típica estende-se entre 2 e 7 horas. Esses estudos foram restritos em 2 horas de batelada e um baixo conteúdo de sólidos para minimização do produto manufaturado de coagulação. O alvo da PSD é uma distribuição bimodal, a qual possui massa comparável em ambos os modos, mas o número de partículas no modo de tamanho menor é superior em ordem de magnitude do que o modo de tamanho maior. Por isso a escolha da função objetivo é crítica. Fornecendo esta PSD como alvo para o otimizador tem-se a vantagem de que a distribuição é conhecida e atingível (isto é, uma solução das equações do modelo para um dado conjunto de condições) e que a solução ótima é conhecida a priori.

Serra et al. (2002) pesquisaram uma nova técnica para o desenvolvimento de um catalisador de isomerização de parafinas leves a baixa temperatura com melhorias na resistência à água e enxofre por métodos combinatórios. Essas técnicas combinatórias (alta preparação completa de catalisador e sistemas de testes, e um algoritmo genético), tiveram

como objetivo pesquisar um novo catalisador mais resistente para o problema em questão. Após de três ciclos do catalisador observou-se que este não somente é mais ativo e seletivo, mas muito mais resistente à desativação pela água e enxofre. Os resultados foram reproduzidos em uma planta piloto e a estabilidade foi demonstrada.

Stephan e Chase (2002) utilizaram os algoritmos genéticos como um auxílio na modelagem de leitos de filtração profundos (Deep Bed Filtration – DBF). Este tipo de operação (DBF) é muito dinâmica, onde processos complexos envolvendo a captura e a liberação de partículas finas dentro de um meio poroso é dependente do estado químico da fase líquida. Este trabalho apresentou um modelo geral para perda de permeabilidade dentro de um processo DBF e então aplicou-se o modelo para o sistema específico de recuperação secundário de óleo. O uso do AG permitiu a determinação de parâmetros do modelo baseados em um ajuste eficiente de dados experimentais. A explicação, benefícios e desenvolvimento da codificação do AG foram incluídos. Os resultados encontrados pelo modelo do processo ($> 97\%$ de eficiência para perda de permeabilidade) foram maiores do que 90% . O formato do AG permitiu uma fácil adaptação deste modelo para representação de outros sistemas de filtragem e promoveu a elucidação do benefício da tecnologia dos algoritmos genéticos em fenômenos de transporte.

Altinten et al. (2003) desenvolveram um trabalho que envolveu o controle ótimo de temperatura de um reator jaquetado de polimerização em batelada de radicais livres pelo método de controle fuzzy com auxílio dos algoritmos genéticos. A variável manipulada foi escolhida como o calor fornecido pelo aquecedor imerso. Uma das etapas desse estudo foi gerar conjuntos de membros da função do controle fuzzy e a relação da matriz usando AG, a qual pode ser facilmente implementada e sendo um método eficiente para problemas de otimização. A função de ajuste para o AG foi escolhida como a integral dos valores absolutos dos erros (Integral Absolute Value of Error – IAE). Pelo uso dos parâmetros fuzzy obtidos nos três diferentes perfis de temperatura ótimos, a eficiência do controlador fuzzy com os algoritmos genéticos foi examinada por simulação e comparada com os dados experimentais. Observou-se que o AG é muito útil para sintonizar o controlador fuzzy eficientemente para situações diversas e assim controlar a temperatura do reator de

polimerização. Os resultados evidenciaram a descoberta dos melhores parâmetros do controlador. A partir dos resultados experimentais verificou-se a grande utilidade do controlador na aproximação dos perfis reais de temperatura do reator.

Dedieu et al. (2003) se direcionaram para o desenvolvimento de uma metodologia em dois estágios para um projeto e ajuste de uma planta em batelada multi-objetivo, de acordo com critérios múltiplos. Em um nível mais elevado (problema principal), um algoritmo genético multi-objetivo (MOGA) foi implementado para gerenciamento e controle do problema de diversas estruturas da planta. Em um nível inferior (problema secundário), um simulador de evento discreto (DES) avalia a viabilidade técnica das configurações propostas. Os princípios básicos do DES são recordados primeiramente, desenvolvendo um MOGA baseado em combinações de um algoritmo genético de objetivo único (SOGA) e de um procedimento do tipo de Pareto (PS). Primeiramente, dois critérios (custo de investimento e um número de diferentes tamanhos para unidades da planta) foram considerados. Então partindo da melhor solução no que diz respeito ao custo de investimento encontrado na fase do projeto, a planta foi adaptada para dobrar a produção. Em termos de custo de investimento, esta nova solução rendeu uma economia significativa comparado com a planta adaptada, ratificando o bom desempenho da técnica utilizada.

Kasat e Santosh (2003) realizaram uma otimização multi-objetivo utilizando algoritmos genéticos, considerando o processo de craqueamento catalítico com leito fluidizado (FCCU) de uma unidade industrial. Este tipo de otimização em operações industriais utilizando os AGs e seus variantes necessitam de um tempo e esforço computacional muito grande e por isso foi realizado uma adaptação na tentativa de diminuição deste problema. Essa adaptação foi inspirada na genética natural, sendo baseada no conceito dos saltos de genes (JG;transposons). O algoritmo genético com codificação binária elitista e classificação não dominada (NSGA-II) foi adaptado e o novo código NSGA-II-JG foi utilizado como alternativa para obtenção de soluções da otimização multi-objetivo proposta pelos autores da unidade industrial citada (FCCU).

O tempo de processamento foi reduzido em cinco vezes quando esta nova técnica foi introduzida (NSGA-II-JG) em comparação com a técnica NSGA-II. Foram comparadas com soluções de problemas de otimização com dois objetivos, semelhantes para o FCCU. O método NSGA-II-JG também forneceu melhores características de convergência e expansão dos pontos ótimos de Pareto para dois problemas de otimização multi-objetivos mais simples, estudados neste trabalho. Realmente, em um problema onde vários ótimos de Pareto co-existem, o novo código forneceu um correto ajuste do ótimo global, enquanto que o código original (codificação binária NSGA-II) convergiu para Paretos locais. Esta adaptação prova ser de valor considerável por resolver outros problemas que requerem intensos esforços computacionais em engenharia química. Foi deduzido que o aumento da diversidade pelo operador JG compensa a mesma provocada pelo elitismo.

Kian e Sorensen em 2003 desenvolveram um método robusto aplicado em um projeto e operação integrados de destilação em batelada por meio de um dimensionamento ótimo de coluna. A flexibilidade do processo e as metodologias operacionais foram obtidas e baseadas em intercâmbios econômicos complexos entre investimento de capital, renda de produção e custos de utilidade.

A estrutura estocástica proposta que utiliza um algoritmo genético com uma estratégia de função de penalidade para se obter uma coluna com desempenho ótimo e lucrativo atingiu suas finalidades com grande êxito em diversos projetos de colunas considerando diferentes cenários (configurações habituais e/ou complexas). Neste estudo incluiu-se a separação de misturas binárias e/ou multicomponentes com um ou mais objetivos, dado um conjunto de especificações de projetos e exigências de separação, ou seja, o número ótimo de estágios, refeedores devidos, os perfis de refluxo, recuperação de produto, intervalos de tempo de cada tarefa de destilação, distribuição do processo e número de bateladas que podem ser envolvidos. Os resultados foram positivos indicando que esta metodologia é de muita valia para ser aplicada em problemas semelhantes.

Em 2003, Mitra e Gopinath realizaram um trabalho para otimização multi-objetivo de uma operação de um moedor industrial utilizando a versão elitista dos algoritmos genéticos denominada de Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm (NSGA II). Esta versão foi adaptada para otimizar uma operação de um moedor industrial de uma planta de beneficiamento de zinco. Foram identificadas duas funções consideradas como objetivo neste estudo: (i) o processamento da operação de moagem é maximizado (maximização da produtividade) e (ii) a percentagem que passa de uma das frações de tamanho de maior consideração é também maximizada para assegurar a operação de flotação que segue no circuito de moagem. Simultaneamente foi determinado que o produto de moagem possa satisfazer todas as exigências de qualidade, e também uma possível perturbação mínima na seqüência do circuito de flotação, pela manutenção de duas classes de tamanhos e a percentagem do produto sólido moído, além da circulação da carga do circuito de moagem dentro dos limites especificados (restrições) pelo usuário.

Neste estudo três variáveis de decisão foram utilizadas: a taxa de fluxo de minério sólido e duas taxas de fluxo de água em dois compartimentos (primário e secundário) cada um destes presentes em cada uma das unidades de estágios de classificação. Soluções ótimas (igualmente competitivas - ajuste de Pareto) foram obtidas devido às exigências conflitantes entre os dois objetivos sem violação das restrições consideradas. Essas restrições são manuseadas utilizando a técnica do operador de seleção por torneio dos algoritmos genéticos, o qual permitiu ao processo libertar-se da exigência de sintonização de parâmetros de penalidade que pertencem a determinadas funções. A implementação da tecnologia proposta apresentou grandes benefícios industriais. As soluções de Pareto encontradas são utilizadas como uma ferramenta para o controle do circuito de moagem sendo resolvido por um algoritmo de controle de processo avançado (MPC, por exemplo). Os benefícios industriais diretos são enormes. Mais uma vez evidenciando que a técnica com os algoritmos genéticos promoveu excelentes resultados.

Sarimveis et al. (2003) desenvolveram um trabalho considerando um novo método para extrair informações de entrada e saída dados de um determinado processo. A metodologia proposta produz modelos de rede neurais de uma função base radial dinâmica

(RBF) baseados em um algoritmo genético especialmente projetado para auto-configurar as estruturas das redes e obter os parâmetros do modelo. As novas técnicas de treinamento de redes RBF formularam um problema completo de otimização que inclui a estrutura da rede dentro de um conjunto de variáveis livres que são utilizadas para minimização e predição de erros. Esta é uma aproximação diferente comparada com os métodos locais de busca empregados por outros mecanismos da seleção da estrutura, que são frequentemente confinados a mínimos locais. Uma outra vantagem do método proposto foi a requisição de apenas uma única execução do algoritmo para se obter a estrutura ótima da rede ao contrário das técnicas padrão de treinamento RBF, onde o modelo produzido é selecionado por tentativa e erro. A eficácia do método é evidenciada com o desenvolvimento de modelos dinâmicos para dois conjuntos de dados: dados simulados de um reator tanque agitado contínuo (CSTR) e os dados verdadeiros coletados de um digestor de Kamyr, que é um reator complexo utilizado na indústria de papel. Bons resultados foram obtidos neste trabalho indicando grande aplicabilidade da técnica evolucionária em tais modelos.

Em 2003, Subramani et al. estudaram uma forma de otimizar sistemas reativos Varicol e SMB utilizando a técnica dos algoritmos genéticos. Esta técnica foi utilizada simulando um sistema composto por um reator de leito móvel (SMBR) voltado para síntese direta de éter metil-t-butil (MTBE) a partir do álcool t-butil (TBA) e do metanol (processo Varicol – variação do processo SMB). A otimização foi multi-objetivo com duas ou três funções representativas do problema, sendo executada como estágio do processo para SMBR e os sistemas Varicol onde as eficiências foram comparadas. O problema de otimização envolveu um grande número de variáveis de decisão, onde essas são contínuas, tais como taxas de fluxo em várias seções e o comprimento das colunas, e as variáveis discretas como o número de colunas e suas respectivas configurações. As soluções ótimas de Pareto foram obtidas e observou-se que um sistema Varicol de cinco colunas possui melhor desempenho do que o sistema equivalente (cinco colunas) de SMBR e comportou-se de forma igual a um outro sistema composto de seis colunas SMBR em relação à pureza e rendimento de MTBE, e mínimo consumo de eluente. Esta inferência é importante já que permitiu a redução dos custos fixos e operacionais e contribuiu para um aumento de pureza, rendimento do produto e conversão desejada do reagente limitante. O estado da arte da

técnica de Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm (NSGA) que permite o manuseio de problemas complexos para otimização foi empregada.

Foi a primeira vez que não somente o potencial de separação de Varicol se estendeu aos sistemas de reação, mas também foi otimizado para múltiplos objetivos. Os sistemas simulados de leitos móveis (SMB) receberam grande atenção nos últimos anos, particularmente no setor de especialidades químicas e na separação de drogas quirais. Os pesquisadores verificaram as grandes vantagens que o SMB oferece para produção de compostos de alta pureza que possuem extremas dificuldades de separação. As pesquisas vêm mostrando as possibilidades de desenvolvimento de projetos mais detalhados de scale-up. O objetivo foi atingir as condições operacionais ótimas para o projeto em questão, além de prover melhorias para novos projetos SMB, como foi observado. Em síntese o método teve grande aplicabilidade e bom desempenho, promovendo muitas melhorias e economia.

Em 2003, Vijande et al. analisaram a aplicação de algoritmos genéticos para estimar os parâmetros de interação carbonato-álcool do modelo de contribuição do grupo Nitta-Chao, onde os cálculos foram realizados utilizando uma base de dados atualizada de equilíbrio líquido-vapor, coeficientes de atividade a diluição infinita, entalpias molares e volumes molares em excesso respectivamente de misturas binárias de 1-alkanol-carbonato. Para todas as propriedades (volume molar, entalpia molar, energia de Gibbs molar todas em excesso e coeficiente de atividade a diluição infinita), este ajuste de parâmetros melhorou a precisão das predições com notável aperfeiçoamento na habilidade em estimar entalpias em excesso. Também pela primeira vez, um algoritmo genético foi usado para determinar os parâmetros característicos, sendo um método alternativo e confiável de otimização com uma grande possibilidade de suporte para identificar mínimos globais de funções objetivo, evitando dependências de escolhas arbitrárias de um ajuste de valores iniciais, o qual constitui em uma das principais deficiências de outros métodos de otimização.

Yan et al. (2003) desenvolveram uma forma de otimizar as condições operacionais baseados nos modelos RBF-PLS. Um novo algoritmo genético incluindo uma variável

denominada de Chaos-Genetic Algorithm (CGA) foi proposta neste trabalho. Para ilustrar o desempenho de CGA, esta técnica foi empregada para otimizar as condições operacionais de um processo de isomerização de hidrocarbonetos aromáticos (AHI) modelados pelas funções de base radiais (RBF) acoplados com a técnica parcial dos mínimos quadrados (PLS). Devido à natureza da variável, isto é, pseudo-aleatória e irregular, o processo evolucionário do CGA realiza sub-gerações individualmente em um espaço definido e contorna os indivíduos prematuros destas sub-gerações. O desempenho do CGA foi demonstrado através de dois exemplos e comparados com o método tradicional dos algoritmos genéticos (TGA). Os resultados evidenciaram um desempenho superior de CGA em relação ao TGA e além disso, a maior probabilidade de encontrar o valor ótimo global pelo uso da técnica CGA do que utilizando TGA.

Yao et al. (2003) realizaram uma pesquisa com o objetivo de se obter parâmetros cinéticos adequados para um sistema complexo de reações envolvendo a síntese de um derivado etílico utilizando um algoritmo evolucionário híbrido com a técnica de recozimento simulado-genético (Genetic-Simulated-Annealing Algorithm). Nesta nova metodologia o algoritmo genético tradicional (AG) foi modificado com uma multi-estratégia adaptativa de recozimento-crossover-mutação em vez de uma estratégia simples. A evolução multi-padrão foi adaptada para melhorar a eficiência de busca. Este algoritmo híbrido não somente evitou problemas de ótimos locais, mas mostrou uma alta precisão nas estimativas e uma melhor convergência do que o algoritmo genético tradicional. Pelo uso deste algoritmo, os parâmetros cinéticos para a síntese do éter etil terc-amil de etanol e álcool terc-amílico sobre uma resina de troca catiônica fortemente ácida (Ambelist 15 (A-15)) como catalisador foi estimado com grande eficácia. Os resultados obtidos utilizando parâmetros obtidos do algoritmo evolucionário híbrido estão em concordância com os dados experimentais.

Yee et al. (2003) pesquisaram uma forma de otimização multi-objetivo para um reator industrial de produção de estireno, utilizando um algoritmo genético denominado Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm (NSGA). Várias funções objetivo (duas e três) a conhecer: produção, rendimento e seletividade do estireno foram consideradas para

reatores de vapores injetados de estireno. O ótimo de Pareto, conjunto de boas soluções, foi obtido devido a um efeito conflitante da temperatura de alimentação do etil benzeno ou da taxa de fluxo. Os resultados fornecem uma extensa faixa de condições de operação ótimas, das quais, um ponto de operação adequado pode ser selecionado, sendo baseado em requerimentos específicos da planta.

Vários problemas de otimização multi-objetivo para reatores de injeção de vapores de estireno e adiabáticos foram formulados e solucionados pelo ajuste ótimo de Pareto NSGA obtendo grande eficácia para todas as considerações. Os resultados evidenciaram que a taxa de produção, o rendimento e seletividade, além da lucratividade podem ser melhorados quando comparados com as condições operacionais presentes. Como esperado, a operação de injeção de vapor foi melhor do que o caso adiabático. Os valores ótimos obtidos são em geral, valores para o entendimento e estudos por parte dos engenheiros para operacionalização dos reatores, selecionando as melhores condições operacionais para satisfazer os objetivos especificados. A experiência evidenciou que valores adequados para esses parâmetros têm que ser, selecionados completamente por diversos ensaios e freqüentemente fornecem soluções próximas da ótima.

Berning et al. (2004) estudaram um arranjo complexo referente à um processo químico industrial envolvendo uma produção em batelada. Esta aplicação descreve a inclusão de uma rede de plantas produtivas com cronogramas de produção interdependentes, multi-estágios produtivos, multi-objetivos e cadeias de produção. O trabalho focalizou três aspectos distintos: (i) um planejamento da solução obtida a partir de um otimizador baseado na técnica dos algoritmos genéticos, (ii) um mecanismo colaborativo para planejamento entre as plantas envolvidas, e (iii) uma ferramenta para atualização do manual e mudanças no planejamento. O adaptador artificialmente produz simultaneamente o algoritmo de otimização considerando o caminho da produção alternativa, facilitando a seleção do mesmo como os parâmetros específicos do produto e dos reagentes e o dimensionamento das bateladas, além do ajuste e lucratividade no período. A interface do usuário suporta o cronograma da produção monitorada graficamente e forneceu vantagens para mudanças no manual para o planejamento da

produção, investigação de diversos cenários e dúvidas relacionadas ao mercado. Os resultados obtidos demonstraram um caminho prático para planejamento de problemas complexos nas indústrias de processos químicos que envolvem produções em batelada.

O sucesso dessa implementação tem conduzido benefícios qualitativos e quantitativos, havendo aumento na satisfação e estabilidade dos clientes sem sacrificar a flexibilidade nas mudanças no planejamento da produção. Além disso, tem reduzido diversos conflitos, e melhorado a comunicação entre diferentes funções de serviços. O procedimento de solução tende a (i) melhorar a utilização de fontes de matéria-prima adequadas, (ii) reduzir os inventários programados e (iii) minimizar a própria violação de dados. Esse modelo de planejamento permite (i) transparência, (ii) informação compartilhada no arranjo de produção, (iii) redução no tempo de resposta para reagentes a montante ou a jusante, (iv) suporte ao sistema para gerenciamento de conflitos, (v) monitoramento e análise de arranjos da produção anteriores de modelos integrados, e (vi) melhor utilidade de inventários adequados de forma global entre muitas outras vantagens.

Em 2004, os pesquisadores Detchasit Prakotpol e Thongchai Srinophakun estudaram uma nova técnica de otimização utilizando algoritmos genéticos. O estudo considerava águas efluentes de um processo industrial tendo como objetivo a minimização deste desperdício reutilizando a água descartada do processo em questão. O código desenvolvido (programa computacional) foi testado em um processo que possui um determinado número das operações utilizando água para remoção de uma quantidade fixa de contaminantes. O objetivo foi encontrar um mínimo consumo de água, para cada configuração da rede. Estas configurações alternativas dão uma ampla visão da análise do sistema. A melhor conformação de rede de utilização da água conduz a um tratamento mínimo e consumo destas. O modelo de otimização foi formulado para contaminantes individuais e múltiplos em uma miscelânea de classes de problemas de programação não linear (MINLP). Neste modelo, há um conjunto de restrições de igualdade e balanços mássicos que são direcionados pelos algoritmos genéticos atingindo uma solução possível. O programa desenvolvido foi através da ferramenta Matlab. A interface gráfica foi criada para realização de um programa fácil e conveniente. Depois da entrada de dados das

condições do processo, o programa formula o modelo resolvendo automaticamente, obtendo-se resultados convenientes.

Sarkar e Modak (2004) realizaram um estudo sobre otimização de bioreatores em batelada alimentada utilizando a técnica dos algoritmos genéticos. Esse procedimento de otimização foi desenvolvido para determinação dos perfis de alimentação de substrato para uma operação ótima desses bioreatores. O conhecimento do problema específico gerou através de rigorosas aplicações da teoria de controle ótimo a possibilidade para formular o ajuste das variáveis de decisão que representam os aspectos quantitativos e qualitativos do perfil da taxa de alimentação. Um algoritmo genético desenvolvido com operadores genéticos adequados foi usado para gerar estes perfis. De acordo com essa teoria, a melhor sequência de alimentação consiste na análise desta em níveis máximos, intermediários ou mínimos. Além disso, o intervalo singular da concentração do substrato é mantido constante somente para uma classe limitada de problemas, e em geral, a concentração do substrato varia durante esse intervalo.

A taxa de alimentação no intervalo foi expressa como variáveis de estado de uma função não linear e poucos parâmetros não conhecidos (dois ou três). Por isso, a hipótese de parte da função ser constante ou linear para taxas de alimentação foi completamente evitada. Conseqüentemente o número de variáveis pesquisadas é significativamente reduzido. A evolução ótima dos parâmetros desconhecidos habilita determinar os intervalos singulares das taxas de alimentação como uma lei de controle feedback não linear expressa em termos das variáveis de estado isoladas. Esta representação requer a combinação de diferentes conjuntos de operadores de crossover e mutação.

Como resultado dessas características, o algoritmo proposto produziu a taxa de alimentação como uma função contínua do tempo. A eficiência do algoritmo foi demonstrada pela resolução de dois problemas de controle da literatura: (1) produção de proteína secretada e (2) produção de massa celular de levedura. Cinética complexa e condições iniciais diferentes influenciam fortemente os perfis da taxa de alimentação ótima

para os dois problemas. O algoritmo prediz de forma qualitativa e quantitativa os perfis de controle ótimo corretos e os resultados foram promissores e estão em conformidade com a literatura. O método proposto é flexível o bastante para ser estendido para problemas multi-variáveis.

Capítulo III

Descrição do Processo Reacional

III.1 DESCRIÇÃO DO PROCESSO REACIONAL - REATOR DE ÁLCOOL CÍCLICO

Toda descrição do processo e do sistema reacional considerado neste trabalho e apresentado neste capítulo tem como base nos estudos de reatores trifásicos, onde a descrição com mais detalhes e respectivas referências encontram-se no Apêndice III.

Os estudos dos reatores trifásicos podem ser considerados reduzidos quando são comparados com reatores homogêneos ou reatores bifásicos. Grande parte das pesquisas encontradas e publicadas na literatura relaciona-se com o estudo cinético experimental de reações ocorrendo em sistemas trifásicos, tendo como interesse principal o estabelecimento de uma taxa intrínseca de reação.

O equipamento principal do processo estudado é o reator de hidrogenação de um Álcool Benzílico a Álcool Cíclico. Por ter um caráter multifásico, sua modelagem matemática é complexa e a dimensão do modelo é de ordem elevada. Por causa da grande complexidade do problema algumas das considerações das equações do modelo do reator estabelecido por Santana e Maciel Filho (1996) foram desprezadas. A partir deste modelo de reator estudado, outros trabalhos foram realizados, tais como: Dechechi e Maciel Filho

(1998), Villalba e Maciel Filho (2002), Freitas Jr. e Maciel Filho (2003), Mariano et al. (2003) e Melo e Maciel Filho (2005).

Uma unidade de produção do Álcool Cíclico, através da hidrogenação do Álcool Benzílico, é formada por uma série de módulos de reatores tubulares com refrigeração (fluido refrigerante), imerso em uma caldeira. O reator de Álcool Cíclico é constituído por oito módulos tubulares resfriados com água, sendo cada um deles formados por quatro tubos concêntricos, onde a mistura de reagentes é adicionada na parte tubular e sai no ânulo mais externo e alimenta a região tubular do módulo subsequente. Já o refrigerante entra na parte do ânulo mais interno e sai no ânulo intermediário indo para caldeira, de modo que a temperatura de reação ao longo do reator seja controlada. Os reagentes percorrem o sistema em série.

Cada módulo possui uma alimentação independente de refrigerante nas mesmas condições. Os dois últimos módulos só possuem dois tubos concêntricos sem a presença de fluido refrigerante, onde reagentes ainda não reagidos e produtos formados entram pelo duto interno e saem pelo ânulo externo respectivamente. Alguns medidores estão situados em dois pontos distintos em cada módulo tubular, sendo que estes podem sofrer problemas de incrustação acarretando erros nas medidas podendo ser de grande significância.

A Figura 3.1 ilustra o sistema estudado, considerando apenas um módulo tubular. No Apêndice III, as Figuras A.III.1 (b e c) e A.III.1 (d) exemplificam as vistas frontais e de topo e o conjunto dos oito módulos interligados respectivamente, fazendo parte do conjunto-reator de produção de Álcool Cíclico.

A alimentação dos reagentes é composta basicamente de Álcool Benzílico e Álcool Cíclico, além de Hidrogênio. Adicionalmente, o reator é alimentado por uma corrente de água. A água alimentada serve para deslocar o equilíbrio das reações indesejadas e também para melhorar a troca térmica no reator.

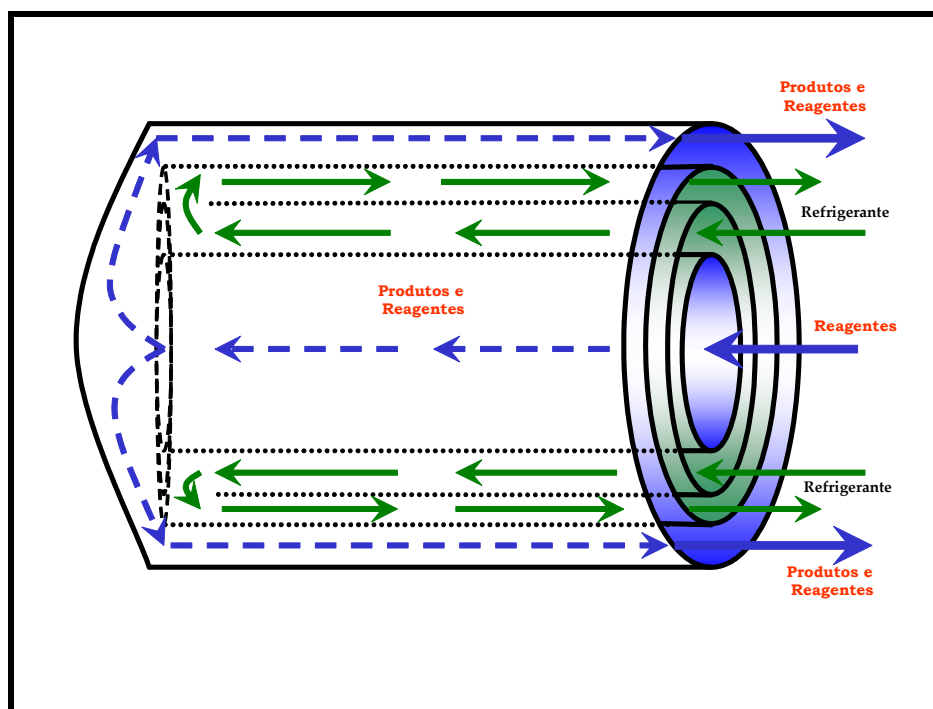


Figura 3.1 – Esquema do Reator de produção de Álcool Cíclico (o topo do reator é considerado onde reagentes, produtos e fluido refrigerante entram e saem do módulo).

Ainda em relação ao fluido refrigerante, ocorre injeção paralela deste, isto é, a corrente de alimentação de fluido refrigerante que advém do fluido na caldeira e eventualmente de uma alimentação nova de condensado (make-up) é dividida entre os seis módulos tubulares.

Com relação à caldeira, há o controle do nível e da temperatura de operação. Estas variáveis são controladas pela injeção de corrente de make-up e pelo controle adequado da taxa de purga. Percebe-se que a operação da planta é complexa e adicionalmente, tem-se a questão de operação segura, devido à presença de reagentes e produtos que podem ser danosos ao meio ambiente e a saúde humana.

A reação de hidrogenação do Álcool Benzílico possui caráter exotérmico, e é dependente da temperatura de operação do reator e do catalisador utilizado, pois pode formar diversos produtos, tais como, cetonas, álcoois alicíclicos, hidrocarbonetos aromáticos e alicíclicos.

III.1.1 MODELAGEM MATEMÁTICA DO REATOR DE ÁLCOOL CÍCLICO

O equipamento principal na unidade estudada é o alvo desta otimização (reator de hidrogenação do Álcool Benzílico a Álcool Cíclico). Como já foi mencionado, um reator multifásico, complexo de grande dimensão, onde as equações referentes ao modelo do reator de Álcool Cíclico seguem os estudos de Santana e Maciel Filho (1996). O modelo proposto se baseia na formulação dos balanços de massa, energia e quantidade de movimento para a mistura reagente e o fluido térmico refrigerante, considerando-se cada uma das seções dos tubos (regiões anulares e tubulares de cada tubo).

As equações matemáticas resultantes do modelo conduzem a um sistema de equações diferenciais do tipo valor inicial resolvido por integração numérica (Runge-Kutta-Gill). As soluções matemáticas das equações do modelo fornecem como resultados os perfis de conversão e da fração molar das espécies na fase líquida e os perfis de temperatura e pressão para os reagentes e o fluido térmico. São três reações que ocorrem no reator:

- Reação de hidrogenação do Álcool Benzílico (AB) a Álcool Cíclico (AC) (desejada);
- Reação de desidrogenação do Álcool Cíclico (AC) com formação de Água e Cicloalceno;
- Hidrogenação do cicloalceno com conseqüente formação de Cicloalcano (C) (produto indesejado).

Neste trabalho foi adotada uma simplificação em que todo cicloalceno formado a partir da desidrogenação do Álcool Cíclico é instantaneamente convertido em Cicloalcano (por hidrogenação), de modo que a taxa de formação deste é idêntica à taxa de formação de Cicloalceno. As reações pertinentes ao processo de formação do Álcool Cíclico são apresentadas na Figura 3.2.

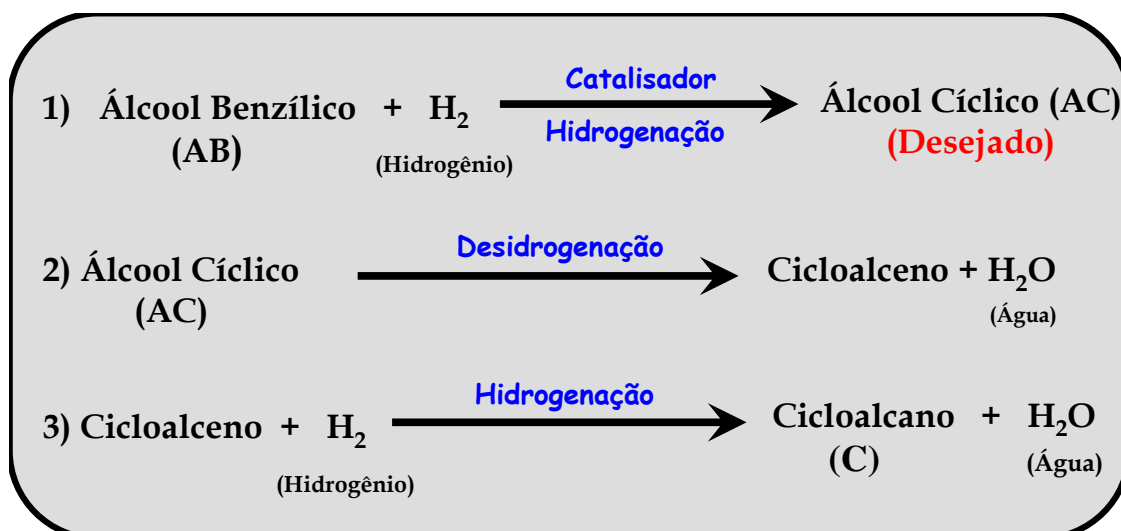


Figura 3.2 - Estequiometria das reações: 1) hidrogenação do Álcool Benzílico, 2) desidratação do Álcool Cíclico e 3) hidrogenação do Cicloalceno.

As seguintes hipóteses básicas são adotadas para o desenvolvimento das equações que descrevem o modelo matemático proposto para o reator de Álcool Cíclico:

- Estado estacionário;
- Escoamento empistonado (“plug-flow”) para a mistura reagente e para o fluido térmico;
- Suspensão (líquido + sólido) homogênea, considerada como um pseudo-fluido;
- Dispersão axial e radial desprezível;
- Modelo com cinética global (isto é, não se faz distinção entre os diversos passos envolvidos na reação como, transferência de massa entre as fases, e adsorção das espécies à superfície do catalisador). A taxa de reação é em função das composições dos reagentes na fase líquida;
- Ocorre mudança de fase no sistema (meio reacional e fluido refrigerante);
- Estado pseudo-estacionário para a fase sólida.

A formulação do modelo consiste em escrever as equações que descrevem os balanços de massa e energia para as fases fluida e sólida, respectivamente, e em determinar as equações cinéticas das reações.

As propriedades físicas (densidade, viscosidade, capacidade calorífica e outras) dos componentes envolvidos no processo e que são utilizadas para a modelagem do mesmo em estado estacionário foram preditas a partir de correlações existentes na literatura. Os dados disponíveis das espécies puras tomando como referência para o cálculo das propriedades de misturas, enquanto que os parâmetros de transferência de massa e calor foram estimados por correlações da literatura. Maiores detalhes a respeito, no que concerne aos mecanismos de transferência de calor são encontrados em Hasan et al. (2005).

Os estudos de Santana e Maciel Filho (1996) basearam-se nos modelos desenvolvidos por Froment e Bischoff (1990) com o objetivo de elaborar as equações do balanço de massa e energia no reator e os balanços foram descritos em termos da variável convertida (X), para as espécies de interesse, neste caso: 1 ou AB (Álcool Benzílico) e 2 ou AC (Álcool Cíclico). Os termos R_{e1} e R_{e2} referem-se às taxas efetivas da reação que são dependentes das taxas de hidrogenação do Álcool Benzílico e do Álcool Cíclico (R_1 e R_2) ou (R_{AB} e R_{AC}) respectivamente.

Os parâmetros operacionais do reator, coeficientes dos balanços de massa e energia e as propriedades físicas são considerados constantes. Alguns destes parâmetros foram estimados por correlações apresentadas em Santana (1995). As equações do modelo formam um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) que resultam em um problema de valor inicial de modo que as equações diferenciais foram integradas pelo método de Runge-Kutta-Gill.

O modelo estabelecido por Santana e Maciel Filho (1996) é representativo para o processo de produção de Álcool Cíclico deste estudo, onde são consideradas, uma reação

principal que é a hidrogenação do Álcool Benzílico a Álcool Cíclico na presença do catalisador de Níquel (Ni/Rhane), e uma reação secundária que é a desidratação deste álcool de interesse com formação do Cicloalceno e Água. O Cicloalceno é imediatamente hidrogenado formando Cicloalcano, produto indesejado no processo de produção de Álcool Cíclico.

A cinética e as taxas de reação foram baseadas nos trabalhos de Coussemant e Jungers (1950) e Santana e Maciel Filho (1996) e as constantes cinéticas relacionadas às taxas são mostradas, onde as espécies de interesse são representadas por: 1-Álcool Benzílico, 2-Álcool Cíclico, 3-Água, 4-Cicloalcano, 5-Hidrogênio e 6-Metano. A Tabela 3.1 apresenta os valores das constantes cinéticas para as correlações mencionadas.

Os valores industriais de certa forma já se encontravam otimizados pela prática industrial e assim foram considerados neste estudo.

Tabela 3.1 – Representação dos parâmetros cinéticos da cinética de Coussemant e Jungles (1950) e Santana e Maciel Filho (1996), utilizada na simulação de otimização.

Parâmetros	Parâmetros cinéticos Apresentados por Coussemant e Jungers (1950)
E ₁ (Uma energia de ativação da reação 1)	-4218,62
E ₂ (Uma energia de ativação da reação 1)	-2818,62
E ₃ (Uma energia de ativação da reação 2)	-2800,78
A ₁ (Um fator pré-exponencial da reação 1)	82,47
A ₂ (Um fator pré-exponencial da reação 1)	6,93
A ₃ (Um fator pré-exponencial da reação 2)	82,47
F ₁ (Efetividade da reação 1)	1,0
F ₂ (Efetividade da reação 2)	1,0
F _e (Fator p/ a taxa de vaporização da fase líquida)	0,8

III.1.1.1 BALANÇO DE MASSA

Baseado na cinética de Coussemant e Jungers (1950) e adaptando ao caso de estudo de Santana e Maciel Filho (1996), as equações de balanço de massa para todos os módulos tubulares (oito módulos) são descritas em função da variável de conversão da reação (X) para os componentes, Álcool Benzílico (AB) e Álcool Cíclico (AC).

- Região Tubular (j=1, 2, ..., 8):

$$\frac{dX_{AB,j}}{dz} = \frac{\pi D_{li}^2}{4} \frac{1}{F_{AB_0}} R_{eAB,j} \quad (3.1)$$

$$\frac{dX_{AC,j}}{dz} = \frac{\pi D_{li}^2}{4} \frac{1}{F_{AC_0}} R_{eAC,j} \quad (3.2)$$

- Região Anular (j=1, 2, ..., 6):

$$\frac{dX_{AB,j}}{dz} = \frac{\pi(D_{4i}^2 - D_{3e}^2)}{4} \frac{1}{F_{AB_0}} R_{eAB,j} \quad (3.3)$$

$$\frac{dX_{AC,j}}{dz} = \frac{\pi(D_{4i}^2 - D_{3e}^2)}{4} \frac{1}{F_{AC_0}} R_{eAC,j} \quad (3.4)$$

- Região Anular (j=7, 8):

$$\frac{dX_{AB,j}}{dz} = \frac{\pi(D_{4i}^2 - D_{1e}^2)}{4} \frac{1}{F_{AB_0}} R_{eAB,j} \quad (3.5)$$

$$\frac{dX_{AC,j}}{dz} = \frac{\pi(D_{4i}^2 - D_{1e}^2)}{4} \frac{1}{F_{AC_0}} R_{eAC,j} \quad (3.6)$$

Os diâmetros D_1, D_2, D_3 e D_4 são os diâmetros dos tubos concêntricos de cada módulo reacional conforme representado na Figura A.III.1 (b e c), no Apêndice III. Os índices i e e são referentes às situações interna e externa dos dutos relacionados. Nos dois últimos módulos, quando ocorrem apenas dois tubos, estes possuem diâmetros iguais a D_1 e D_4 respectivamente conforme os diâmetros dos seis módulos anteriores, mas observando que a região anular nestes é maior.

A taxa de reação referente ao consumo de Álcool Benzílico e formação de Álcool Cíclico foi determinada por:

$$R_{eAB,j} = c_{cat,j} \cdot F_{at,AB,j} \cdot k_{1,j} \cdot P_j^{a_j} \cdot \frac{X_{AB,j}}{0,2 + 0,8 \cdot X_{AB,j} + \frac{1,4}{K_j - 1} \cdot (X_{AB,j} - (X_{AB,j})^{K_j})} \quad (3.7)$$

A taxa de conversão do Álcool Cíclico a Cicloalcano é:

$$R_{eAC,j} = c_{cat,j} \cdot F_{at,AC,j} \cdot k_{3,j} \cdot \frac{\sqrt{X_{AC,j}}}{\sqrt{X_{AC,j}} + b_j \cdot X_{H_2O,j}} \quad (3.8)$$

As constantes cinéticas $k_{1,j}$, $k_{2,j}$ e $k_{3,j}$ são funções da temperatura e podem ser representadas na forma clássica do tipo Arrhenius:

$$k_{1,j} = A_1 \cdot \exp\left(\frac{E_1'}{T_j}\right) \quad (3.9)$$

$$k_{2,j} = A_2 \cdot \exp\left(\frac{E_2'}{T_j}\right) \quad (3.10)$$

$$k_{3,j} = A_3 \cdot \exp\left(\frac{E_3'}{T_j}\right) \quad (3.11)$$

$$K_j = 1,6 \cdot \frac{k_2}{k_1} \quad (3.12)$$

$$b_j = q + m \cdot T \quad (3.13)$$

onde X_{AC} é a fração molar de Álcool Cíclico e X_{H_2O} (representa a fração molar de água na fase líquida. Os parâmetros $k_{3,j}$ e b_j são funções da temperatura. A taxa de reação efetiva de um processo catalítico está diretamente associada com a concentração catalítica (nível de atividade). Em tais casos, η_c é um fator que se destina a quantificar a efetividade do catalisador e é expresso pelas Equações 3.14 e 3.15 respectivamente:

$$r_i = C_{cat} R_i \quad (3.14)$$

$$R_{ei} = \eta_c r_i \quad (3.15)$$

III.1.1.2 BALANÇO DE ENERGIA PARA O FLUIDO REAGENTE

Para o conjunto de equações que representam o balanço energético considera-se a mistura líquido-sólido como um único fluido pseudo-homogêneo, sem considerar gradientes radiais de temperatura, a qual varia na forma de um perfil axial (escoamento empistonado), devido à evolução da reação (liberação de calor) e à troca de calor com a caldeira e, para os seis primeiros módulos, o fluido térmico. Nos módulos tubulares, a equação de balanço de energia para os reagentes fica da seguinte forma:

- Região Tubular (j=1, 2, ..., 6):

$$\frac{dT_j}{dz} = \frac{1}{F_{L,j} \cdot cp_{L,j} + F_{G,j} \cdot cp_{G,j}} \left[U_1 \pi D_{1i,j} (T_{R,j} - T_j) + (-\Delta H_1) \frac{\pi \cdot D_{1i,j}^2}{4} R_{eAB,j} + (-\Delta H_2) \frac{\pi \cdot D_{1i,j}^2}{4} R_{eAC,j} \right] \quad (3.16)$$

- Região Anular (j=1, 2, ..., 6):

$$\frac{dT_j}{dz} = \frac{1}{F_{L,j} \cdot cp_{L,j} + F_{G,j} \cdot cp_{G,j}} \left[\begin{aligned} &U_2 \pi D_{3e} (T_{R,j} - T_j) + U_3 \pi D_{4i} (T_S - T_j) \\ &+ (-\Delta H_1) \frac{\pi (D_{4i}^2 - D_{3e}^2)}{4} R_{eAB} \\ &+ (-\Delta H_2) \frac{\pi (D_{4i}^2 - D_{3e}^2)}{4} R_{eAC} \end{aligned} \right] \quad (3.17)$$

III.1.1.3 BALANÇO DE ENERGIA PARA O FLUIDO REFRIGERANTE

Nos módulos há passagem de fluido refrigerante pelos ânnulos internos. A equação de balanço energético para esse fluido é definida da seguinte forma:

- Região Anular I:

$$\frac{dT_{R,j}}{dz} = - \frac{U_1 \cdot \pi \cdot D_{1i}}{Q_{r,j} \cdot cp_R} (T_{R,j} - T_j) \quad (3.18)$$

- Região Anular II:

$$\frac{dT_{R,j}}{dz} = - \frac{U_2 \cdot \pi \cdot D_{3e}}{Q_{r,j} \cdot cp_R} (T_{R,j} - T_j) \quad (3.19)$$

Podem ocorrer situações onde o fluido térmico sofre vaporização dentro da jaqueta. Nesta situação as equações de balanço de energia apresentadas para o fluido refrigerante perdem o significado físico, pois não há mais variação de temperatura do sistema de refrigeração. Quando este fato ocorre considera-se:

$$\frac{dT_R}{dz} = 0 \quad (3.20)$$

Esta mudança é importante, pois, quando o processo de vaporização é iniciado, as correlações são mudadas para o cálculo dos coeficientes de transferência de calor. Se ocorrer vaporização total, e se a vazão de refrigerante é suficientemente pequena, os procedimentos de cálculo dos coeficientes de transferência de calor são modificados.

Por este fato, o fluxo de fluido refrigerante pode ocorrer em três situações distintas: fluxo monofásico como condensado; fluxo bifásico como condensado e vapor; e fluxo monofásico como vapor.

III.1.1.4 CÁLCULO FLASH

No reator pode ocorrer vaporização da fase líquida reacional e o critério de Hanika (Ramachandran e Chaudhari (1983) e Mariano et al. (2003)) pode ser considerado para estabelecimento do início da vaporização.

$Han1 < Han2$ (ocorre mudança de fase)

$$Han1 = \frac{\rho_{L,j} \cdot u_{L,j} \cdot MM_{G,j}}{\rho_{G,j} \cdot u_{G,j} \cdot MM_{L,j}} \quad (3.21)$$

$$Han2 = \frac{P_j^{vap}}{P_j - P_j^{vap}} \quad (3.22)$$

A cada passo no processo de integração calcula-se uma das razões da desigualdade acima usando as duas outras fórmulas. Se em determinado instante o critério for satisfeito,

então deve-se prever quantitativamente o fenômeno de vaporização do líquido, para que foi implementada a seguinte metodologia:

- Definindo-se um fator de desvio relativo:

$$F_d = \frac{Han\ 2 - Han\ 1}{Han\ 1} \quad (3.23)$$

- Definindo-se um fator multiplicativo:

$$F_{me} = F_{-e} \cdot F_d \quad (3.24)$$

onde F_{-e} é um dado de entrada do usuário, podendo ser um parâmetro de ajuste do modelo. Um valor nulo de F_{-e} é correspondente a dizer, que é desprezível o efeito de vaporização do líquido reagente. O equilíbrio termodinâmico líquido-vapor (flash ideal) é calculado obtendo-se para determinadas condições de composição, temperatura e pressão, a quantidade de líquido que evapora. Essa quantidade é multiplicada por F_{me} , obtendo as vazões mássicas das fases líquidas ($F_{L,j}$) e gasosa ($F_{G,j}$).

$$F_G = F_{me} \cdot F_{G,ideal} \quad (3.25)$$

Mariano et al. (2003) descreveram o processo de cálculo de flash multicomponente com mais detalhes considerando algumas diversidades desta metodologia e o acoplamento a reatores trifásicos.

III.1.1.5 DESCRIÇÃO DO CÁLCULO DA TEMPERATURA DE ENTRADA DO REFRIGERANTE

A temperatura de entrada do fluido refrigerante não é um dado disponível diretamente, de modo que é preciso estimá-la para a resolução do modelo. Esta estimativa é realizada fazendo-se um balanço de energia global simplificado para todo o reator, considerando-se que o refrigerante que segue para as jaquetas é o resultante das correntes de fluxo adicional e de condensado da caldeira (supondo-se que a vazão de fluxo adicional é igual à vazão de vapor gerado). As seguintes medidas são disponíveis: temperaturas da água adicional e do condensado (temperatura de saturação da caldeira) e vazão de vapor gerado. Pode-se, portanto escrever o seguinte balanço energético simplificado:

$$Q_{\text{vapor}} T_{\text{make-up}} + (QT)_{\text{condensado}} = Q_{\text{jaqueta}} T_{R0} \quad (3.26)$$

Desta expressão obtém-se uma estimativa para a temperatura de alimentação do refrigerante, T_{R0} . O valor de Q_{jaqueta} é o somatório das vazões de refrigerante alimentadas para cada um dos tubos separadamente (valores conhecidos). Por ser um balanço simplificado, não se considera o efeito da variação de calor específico das diversas correntes com a temperatura. Isto, no entanto, não compromete em nada o valor da estimativa para T_{R0} . Foi realizado um teste para verificação deste efeito para uma situação de vazões típicas, onde um valor de $T_{R0} = 108,28$ °C foi obtido, considerando-se as capacidades caloríficas idênticas para todas as correntes, e $T_{R0} = 108,48$ °C, fazendo-se a correção das capacidades caloríficas com a temperatura. Desta forma, a temperatura de alimentação do refrigerante, T_{R0} , calculada através da equação exposta anteriormente é bastante satisfatória.

III.1.1.6 DESCRIÇÃO DO CÁLCULO DA PRESSÃO DE ENTRADA DO REFRIGERANTE

Para o cômputo da queda de pressão do refrigerante se faz necessário conhecer o valor da pressão do refrigerante à entrada da jaqueta. Mas este valor não se encontra disponível como dado operacional. Como a jaqueta descarrega na caldeira, cuja pressão é conhecida (devendo ser igual à pressão do refrigerante à saída da jaqueta), então um valor de pressão para o refrigerante na entrada da jaqueta é identificado de forma que possa fornecer como resultado final o valor correspondente à pressão de saturação da caldeira. Isto pode ser feito de forma automática arbitrando um valor inicial para a pressão do refrigerante à entrada da jaqueta.

Com este valor arbitrado o programa é executado numa forma de “loop” até que, feita a integração das equações do modelo para cada tubo que possui refrigerante, resulte em uma pressão de saída para o refrigerante, idêntica à de saturação da caldeira.

III.1.1.7 QUEDA DE PRESSÃO

Neste trabalho considera-se a queda de pressão e seus princípios, baseado nos estudos de Stephan (1992) e Santana e Maciel Filho (1996). O fato ocorre na corrente que passa através dos tubos, sendo composta por três componentes: friccional, aceleracional e gravitacional. A queda de pressão friccional é resultado da tensão de cisalhamento entre o fluido que está fluindo e as paredes dos tubos (ou dutos). A queda de pressão aceleracional resulta das mudanças de momentum da(s) fase(s) que flui(em). A queda de pressão gravitacional resulta da força gravitacional exercida pelo fluido (associada às mudanças de cota durante o fluxo), desaparecendo em fluxos horizontais. As quedas de pressão gravitacional e aceleracional são geralmente desprezíveis em comparação com a queda de pressão por fricção. As equações representativas das quedas de pressões são descritas na seqüência.

1) Queda de Pressão por Fricção:

$$-\left(\frac{dp}{dz}\right)_f = \tau_w \frac{C}{A} \quad (3.27)$$

2) Queda de Pressão Aceleracional:

$$-\left(\frac{dp}{dz}\right)_a = W^2 \frac{d}{dz} \left(\frac{X^2}{\varepsilon \rho_V} + \frac{(1-X)^2}{(1-\varepsilon)\rho_L} \right) \quad (3.28)$$

3) Queda de Pressão Gravitacional:

$$-\left(\frac{dp}{dz}\right)_g = [\varepsilon \rho_V + (1-\varepsilon)\rho_L] g \sin \gamma \quad (3.29)$$

onde, p : pressão; τ_w : tensão de cisalhamento; C : circunferência de escoamento; A : área de escoamento; z : coordenada axial; W : vazão mássica; X : qualidade do fluxo (massa de vapor/massa de líquido); g : aceleração da gravidade; ρ : massa específica; γ : ângulo de inclinação com a vertical; ε : fração da fase vapor; e os subscritos V e L indicam vapor e líquido respectivamente.

A queda de pressão friccional constitui a maior parcela da queda de pressão total e seu cálculo é baseado em extensos procedimentos empíricos e no caso de fluxos bifásicos envolve além da transferência de momentum entre fluido e parede, a transferência de momentum entre as fases individuais. Os dois procedimentos não podem ser processados separadamente, podendo ser estimados para o caso de fluxos simples. Normalmente os procedimentos de determinação da queda de pressão friccional partem de modelos simples. Geralmente assume-se fluxo homogêneo (com distribuição homogênea de fase) ou fluxo heterogêneo (distribuição heterogênea das duas fases). Outros métodos que podem ser aplicados são àqueles baseados em modelos de fluxo definido, quando aplicáveis a tipos específicos de modelos de fluxo.

A metodologia mais comum e de maior utilização para avaliação da queda de pressão friccional em um fluxo bifásico é a conhecida como o Procedimento de Lockhart-Martinelli (que é utilizado neste trabalho), onde a queda de pressão friccional é reduzida à queda de pressão do fluxo monofásico, sendo definidas como:

$$-\left(\frac{dp}{dz}\right)_f = \Phi_L^2 \left(\frac{dp}{dz}\right)_L \quad (3.30)$$

$$-\left(\frac{dp}{dz}\right)_f = \Phi_G^2 \left(\frac{dp}{dz}\right)_G \quad (3.31)$$

onde $\left(\frac{dp}{dz}\right)_L$ e $\left(\frac{dp}{dz}\right)_G$ representam a queda de pressão do líquido e do gás, supondo cada uma das fases fluindo isoladamente através do duto. Os fatores Φ_L^2 e Φ_G^2 são definidos pelas próprias equações acima. Se estes fatores forem conhecidos, então apenas a queda de pressão das fases individuais precisa ser determinada para que se possa calcular a queda de pressão do fluxo bifásico. Basta o cômputo da queda de pressão de uma única fase, para se obter a queda de pressão do fluxo bifásico.

A queda de pressão em fluxo monofásico (de uma fase simples) é determinada por equações conhecidas. A equação referente a queda de pressão friccional do líquido é determinada pela seguinte expressão:

$$\left(\frac{dp}{dz}\right)_L = -\frac{f}{2} \cdot \frac{\rho_L v_L^2}{D} \quad (3.32)$$

onde f é o fator de fricção de Moody (ou Darcy) e v a velocidade superficial. Como observação, existe também a definição do fator de fricção de Fanning f_f , o qual é relacionado com o fator de Moody pela seguinte relação:

$$f_f = \frac{f}{4} \quad (3.33)$$

O fator de fricção de Moody pode ser calculado a partir da equação de Coolebrook-White (forma implícita em função do número de Reynolds, Re , e da rugosidade relativa da superfície, e), sendo fornecida pela seguinte relação:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \ln \left(\frac{2,51}{Re \sqrt{f}} + \frac{e}{3,7} \right) \quad (3.34)$$

Para este trabalho a correlação de Chen (1983) é utilizada para o cômputo da perda de carga monofásica na modelização do reator, que é descrita a seguir:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log \left(\frac{e/D}{3,7065} - \frac{5,0452}{Re} \log A_4 \right) \quad (3.35)$$

onde e é a rugosidade absoluta e,

$$A_4 = \frac{\left(\frac{e}{D} \right)^{1,1098}}{2,8257} + \left(\frac{7,149}{Re} \right)^{0,8981} \quad (3.36)$$

e havendo fluxo laminar, utiliza-se a relação:

$$f = \frac{64}{Re} \quad (3.37)$$

A determinação de Φ_L e Φ_G que são relacionados com o parâmetro de Lockhart-Martinelli, X_{LM} . Supondo fluxo turbulento em ambas as fases, este parâmetro pode ser representado como:

$$X_{tt} = \left(\frac{1-X}{X} \right)^{0,9} \left(\frac{\mu_L}{\mu_V} \right)^{0,1} \left(\frac{\rho_V}{\rho_L} \right)^{0,5} \quad (3.38)$$

Existem diagramas que fornecem os valores de Φ_L e Φ_G em função do valor de X_{LM} , que são reproduzidos pelas seguintes relações:

$$\Phi_L^2 = 1 + \frac{C}{X_{LM}} + \frac{1}{X_{LM}^2} \quad (3.39)$$

$$\Phi_G^2 = 1 + CX_{LM} + X_{LM}^2 \quad (3.40)$$

Para o caso de fluxo turbulento ($X_{LM} = X_{tt}$) o valor de C referenciado na literatura para esta situação possui um valor de 20. Para a situação do reator este parâmetro pode ser variado.

O procedimento de Lockhart-Martinelli é simples de utilização (aplicação geral) e independentemente da aplicação ele fornece resultados para a queda de pressão dentro de uma faixa de incerteza de cerca de 50%. Deve-se esperar maiores desvios para o caso de tubos com diâmetros internos maiores que 0,1 m, e também para regiões de alta pressão (o Procedimento de Lockhart-Mmartinelli foi desenvolvido para situações de baixas pressões). Estas duas situações de desvios ocorrem no reator, de modo que o parâmetro C pode ser variado para simulações.

Stephan (1992) cita outros métodos para estimativa da queda de pressão friccional em fluxo bifásico. Cada método é baseado em situações específicas, não tendo, portanto

uma aplicação geral como no caso de Lockhart-Mmartinelli. Os procedimentos são: de Lockhart-Nnelson, de Baroczy-Chrisholm, de Theissing, de Chawla e de Lombardi-Pedrocchi.

III.1.1.8 TRANSFERÊNCIA DE CALOR

A predição do coeficiente global de transferência de calor que aparece nas equações do modelo exige uma grande atenção, pelo fato de que a mistura reacional flui de forma bifásica (fases líquida e gasosa) e, além disso, ocorre transferência de calor, possivelmente, com ebulição do lado do fluido refrigerante. Todos estes fenômenos devem ser levados em conta para a predição correta do coeficiente de transferência de calor.

Nesta parte do trabalho apresenta-se uma descrição dos procedimentos adotados para predição dos parâmetros de troca térmica para a simulação do modelo matemático do reator trifásico. Além da indicação das correlações utilizadas, far-se-á, também, uma descrição teórica sucinta dos fenômenos envolvidos (baseados em Vasco de Toledo (1999; 2001)).

Transferência de Calor em Escoamento Monofásico

A transferência de calor em escoamento monofásico é passível de um tratamento preditivo de razoável precisão, havendo um número grande de correlações que predizem o coeficiente convectivo de um fluido simples em escoamento. Incropera e De Witt (1990) apresentam uma descrição das principais correlações disponíveis para o cálculo dos coeficientes convectivos em fluxo laminar a turbulento (Vasco de Toledo (1999; 2001)).

A correlação mais geral (englobando uma faixa maior de números de Reynolds) é aquela proposta por Gnielinski (1976), dada pela seguinte expressão:

$$Nu = \frac{\left(\frac{f}{8}\right)(R_e - 1000)P_r}{1 + 12,7\left(\frac{f}{8}\right)^{1/2}\left(P_r^{2/3} - 1\right)} \quad (3.41)$$

Esta correlação é válida para $0.5 < P_r < 2000$ e $2300 < R_e < 5 \times 10^6$.

Havendo escoamento laminar, utiliza-se a bem conhecida relação:

$$N_u = 4,36 \quad (3.42)$$

Os números adimensionais de Reynolds, Nusselt e Prandtl que caracterizam o escoamento são descritos como segue:

$$N_u = \frac{h D}{\lambda} \quad (3.43)$$

$$R_e = \frac{D v \rho}{\mu} \quad (3.44)$$

$$P_r = \frac{C_p \mu}{\lambda} \quad (3.45)$$

Com a seguinte nomenclatura:

h : coeficiente de transferência de calor ($\text{kJ/m}^2\text{sK}$);

D : diâmetro característico (m);

λ : condutividade térmica (kJ/msK);

C_p : capacidade calorífica (kJ/kg C);

μ : viscosidade dinâmica (kg/ms);

v : velocidade superficial (m/s);

ρ : massa específica (kg/m³).

Para seções não-circulares define-se um diâmetro equivalente, como sendo:

$$D_{eq} = \frac{4S}{P} \quad (3.46)$$

Na expressão acima, S representa a área da seção de escoamento e P o perímetro molhado.

A velocidade superficial média é calculada pela relação:

$$v = \frac{W}{\rho S} \quad (3.47)$$

sendo que W representa a vazão mássica (kg/h), ρ a massa específica (kg/m³) e S a área da seção de escoamento (m²).

Na correlação de Gnielinski (1976), f representa o fator de fricção de Moody. Ele é correlacionado na literatura de acordo com o tipo de escoamento (número de Reynolds) e o grau de rugosidade da superfície de escoamento.

Transferência de Calor em Ebulição (Escoamento Bifásico)

O estudo da transferência de calor em ebulição é um tópico da engenharia considerado bastante difícil, não havendo, ainda, disponibilidade de correlações para predição segura dos coeficientes de transferência de calor, tal como se tem para o caso de

fluxo monofásico sem mudança de fase. A exposição que segue é baseada em Incropera e De Witt (1990).

Modos de Ebulição

Quando ocorre evaporação em uma interface sólido-líquido este fenômeno é denominado de ebulição, e tal processo ocorre quando a temperatura, T_s , da superfície (parede) sólida excede a temperatura de saturação, T_{sat} , correspondente à pressão em que o líquido se encontra. Esta diferença de temperatura ($\Delta T_e = T_s - T_{sat}$) é denominada de “Excesso de Temperatura”.

O processo de ebulição é caracterizado pela formação de bolhas de vapor que crescem e desprendem-se da superfície. O crescimento e a dinâmica das bolhas de vapor dependem de forma bastante complicada do excesso de temperatura, da natureza da superfície e das propriedades termofísicas do fluido (tais como tensão superficial, entalpia de vaporização, densidade, etc). A dinâmica de formação das bolhas de vapor afeta o movimento do fluido nas proximidades da superfície, e por isso influenciam fortemente o coeficiente de transferência de calor.

A ebulição pode ocorrer sob as mais variadas condições. Os dois modos principais são: a ebulição em lago e a ebulição com convecção forçada. Na ebulição em lago o líquido está em repouso e seu movimento junto à superfície ocorre devido à convecção livre e à mistura induzida pelo crescimento e desprendimento das bolhas. Na ebulição com convecção forçada o movimento do fluido é induzido por meios externos, além da convecção livre e da mistura induzida pelas bolhas.

De acordo com o valor de (ΔT_e) vários mecanismos de ebulição podem ocorrer. São possíveis os seguintes regimes (Fig. 10.4, Incropera e De Witt (1990)):

- 1) Convecção Livre (ocorre quando $\Delta T_e < 5^\circ\text{C}$);
- 2) Ebulição Nucleada (ocorre no intervalo $5^\circ\text{C} < \Delta T_e < 30^\circ\text{C}$);
- 3) Ebulição de Transição (ocorre no intervalo $30^\circ\text{C} < \Delta T_e < 120^\circ\text{C}$);
- 4) Ebulição de Filme (ocorre quando $\Delta T_e > 120^\circ\text{C}$).

Para valores de ΔT_e suficientemente elevados ocorre, também, transmissão de calor por radiação.

Deve-se ressaltar que os valores limítrofes de ΔT_e foram estabelecidos a partir do clássico experimento de Nukiyama para a ebulição da água à pressão atmosférica (obviamente tais limites podem variar de acordo com as condições particulares de um dado sistema). No entanto, estes valores fornecem um indício importante sobre o regime de ebulição que se deve esperar em função do valor de ΔT_e .

Predição de Coeficientes Convectivos

A estimativa de coeficientes de transferência de calor em ebulição geralmente está associada a dois tipos de ebulição: a ebulição em lago (nucleada) e a ebulição convectiva que são descritas na seqüência.

a) Ebulição Nucleada

Na região de ebulição nucleada o coeficiente de transferência de calor depende da natureza e da condição da superfície de transferência de calor, não sendo possível apresentar uma correlação universal que dê previsões exatas para todos os sistemas.

Não havendo dados experimentais disponíveis, é comum utilizar-se a correlação de Foster a Zuber (proposta em 1955) para a predição de coeficientes de ebulição nucleada. Esta correlação é descrita pela seguinte expressão:

$$h_{nb} = 0,00122 \left[\frac{\lambda_l^{0,79} C_{pl}^{0,45} \rho_l^{0,49}}{\sigma_l^{0,5} \mu_l^{0,29} H_v^{0,24} \rho_v^{0,24}} \right] (T_w - T_s)^{0,24} (P_w - P_s)^{0,8} \quad (3.48)$$

A nomenclatura para as variáveis que aparecem nesta equação é a seguinte: h_{nb} , coeficiente de ebulição nucleada; λ_l , condutividade térmica do líquido; C_{pl} , capacidade calorífica do líquido; μ_l , viscosidade do líquido; ρ_l , densidade do líquido; H_v , calor latente de vaporização do líquido; ρ_v , densidade do vapor; T_w , temperatura da parede; T_s , temperatura de saturação do líquido em ebulição; P_w , pressão de saturação correspondente à temperatura da superfície (T_w); P_s , pressão de saturação do sistema; e σ , tensão superficial.

b) Ebulição Convectiva

Para a descrição da transferência de calor em ebulição convectiva a metodologia comumente utilizada é aquela proposta por Chen (1983), descrita por Stephan (1992).

Chen sugere um procedimento similar àquele utilizado para o cálculo da transferência de calor na região de ebulição saturada. Suas equações são, portanto, válidas para a região de ebulição saturada e de ebulição convectiva.

A metodologia de Chen assume que o coeficiente de transferência de calor é composto de dois componentes que são independentes: um para a formação de bolhas (h_b) e outro para a convecção (h_k). De modo que o coeficiente bifásico é dado por:

$$h_{2ph} = h_b + h_k \quad (3.49)$$

O componente h_b é calculado supondo ebulição nucleada em convecção livre (h_{nb}). No entanto, devido ao fluxo forçado, a formação de bolhas é parcialmente suprimida. Para levar em conta esta influência, Chen introduziu um fator de correção $S \leq 1$ (fator de supressão), pelo qual o coeficiente de ebulição nucleada deve ser multiplicado:

$$h_b = S h_{nb} \quad (3.50)$$

O componente convectivo h_k do coeficiente de transferência de calor bifásica está relacionado à transferência de calor para uma fase líquida simples. Devido às bolhas de vapor presentes, o coeficiente de transferência de calor h do líquido (considerado como fluído em fase simples) é aumentado por um fator $F \geq 1$:

$$h_k = F h \quad (3.51)$$

Chen mostrou que o fator F está relacionado com o parâmetro de Lockhart-Martinelli, definido como:

$$X_{tt} = \left(\frac{\rho_v}{\rho_l} \right)^{0,5} \left(\frac{\mu_l}{\mu_v} \right)^{0,1} \left(\frac{1-X}{X} \right)^{0,9} \quad (3.52)$$

Com X representando a qualidade do fluxo bifásico (relação entre a massa de vapor (ou gás) e a massa de líquido).

O valor de F é dado pelas duas equações seguintes:

a) Se $1/X_{tt} \leq 0,1$: $F=1$

b) Se $1/X_{tt} > 0,1$: $F = A \left(\frac{1}{X_{tt}} + 0,213 \right)^n$

A literatura apresenta a correlação acima com valores fixos para as constantes ($A = 2,35$ e $n = 0,736$).

O fator S depende do fluxo mássico do líquido e pode ser expresso pelo seu número de Reynolds, conforme segue:

$$S = \frac{I}{1 + 2,53 \times 10^{-6} R_{e_{2ph}}^{1,17}} \quad (3.53)$$

O número de Reynolds bifásico, $R_{e_{2ph}}$, é calculado pela expressão:

$$R_{e_{2ph}} = F R_{el} \quad (3.54)$$

onde R_{el} , é o número de Reynolds, considerando-se a fase líquida como fluindo separadamente, e é computado por:

$$R_{el} = \frac{W(1-X)\rho_l D}{\mu_l} \quad (3.55)$$

Assim, o coeficiente de transferência de calor bifásico fica sendo dado, finalmente, por:

$$h_{2ph} = S h_{nb} + F h \quad (3.56)$$

O coeficiente para a ebulição nucleada (h_{nb}) é geralmente calculado através da equação de Foster-Zuber (acima relatada).

No caso da contribuição convectiva à transferência de calor (h) para o líquido fluindo como uma única fase, esta é comumente calculada a partir da equação de McAdams para um fluxo simples forçado.

No entanto, conforme citado por Stephan (1992), pode-se optar por uma outra correlação que se considere melhor para representar a transferência de calor monofásica. Na modelagem do reator utilizou-se a correlação de Ginielinski (1976).

A metodologia de Chen tem sido testada em experimentos para ebulição convectiva em canais verticais e até agora tem sido muito usada para cálculos de coeficientes de transferência de calor. Para a ebulição em ânulos deve-se utilizar a definição de diâmetro equivalente.

Transferência de Calor para o Fluido Refrigerante (Água)

No caso da água em ebulição não existe uma correlação prática que forneça diretamente o coeficiente de transferência de calor.

Na modelagem do reator trifásico utilizou-se a abordagem descrita por Foust et al. (1982), supondo um fluxo máximo de calor, em combinação com a correlação de Foster-Zuber para a ebulição nucleada.

Como o método do h_{max} é tido como mais confiável, não se justifica o uso de uma correlação para ebulição nucleada que prediga um valor de h superior ao máximo. Assim, na predição do coeficiente convectivo quando da água em ebulição utiliza-se a seguinte sistemática: caso o ΔT_e (diferença de temperatura entre a mistura reacional e a temperatura de saturação do fluido refrigerante) seja maior que aquele previsto para o fluxo máximo,

utiliza-se o valor predito pelo procedimento do fluxo máximo. Se ΔT_e é menor que o valor predito para o fluxo máximo, então, utiliza-se a correlação de Foster-Zuber.

O coeficiente de transferência de calor para um líquido em ebulição na condição de fluxo máximo pode ser calculado pela expressão:

$$h_{max} = \frac{\left(\frac{q}{A} \right)_{max}}{(T - T_s)_{max}} \quad (3.57)$$

As grandezas do numerador, a do denominador da relação acima são comumente grafadas como função da pressão reduzida em que se dá a ebulição (correspondente à temperatura de operação, T_s). Conhecendo-se os valores das variáveis no numerador e no denominador da equação acima, então, calcula-se h_{max} .

A partir dos gráficos fornecidos por Foust et al. (1982) foram ajustadas as seguintes correlações:

$$\frac{\left(\frac{q}{A} \right)_{max}}{P_c} = 111,6 + 4112,86 P_r - 30714,3 P_r^2 \quad (3.58)$$

$$(T - T_s)_{max} = 20,8206 P_r^{-0,320528} \quad (3.59)$$

Nas duas Equações 3.58 e 3.59, P_r , é a pressão reduzida de operação da jaqueta. O valor de $\frac{q}{A}$ na equação é dado em Btu/h.ft² psia. Esta correlação foi obtida a partir do gráfico apresentado por Foust et al. (1982) para as regiões de baixas pressões reduzidas ($P_r = 0,01- 0,05$). A pressão crítica da água é $P_r = 225,4 \text{ kg/cm}^2 = 3206 \text{ psia}$. O valor de h_{max} , assim calculado, tem a unidade de Btu/h ft² °F, o qual deve ser multiplicado por 4,88, de modo a convertê-lo para kcal/h m² °C.

III.1.1.9 COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR

Uma vez calculados os coeficientes convectivos internos e externos, o coeficiente global de transferência de calor pode ser computado pela relação:

$$\frac{1}{U A} = \frac{1}{h_i A_i} + R_w + \frac{1}{h_e A_e} \quad (3.60)$$

onde: U é o coeficiente global de troca térmica, A_i é a área relativa ao lado do meio reacional, A_e é a área relativa ao lado do refrigerante, A representa a superfície de referência (podendo-se escolher A_i ou A_e), h_i e h_e são os coeficientes convectivos individuais. O valor de U é calculado por unidade de comprimento de tubo, pois $A = \pi DL$, e em geral faz-se $L=1$.

Na expressão acima, R_w representa a resistência à transferência de valor através do tubo por condução, sendo calculada através da seguinte expressão:

$$R_w = \frac{D_e - D_i}{2 \pi L D_m \lambda_w} \quad (3.61)$$

onde: D_m e λ_w representam o diâmetro médio logarítmico e a condutividade térmica do tubo.

No cálculo do coeficiente global de transferência de calor deve-se especificar qual a superfície de referência, A , podendo ser a superfície interna ou externa. No trabalho de modelagem do reator trifásico, considerou-se $A = A_i$, o que corresponde a calcular um coeficiente global de troca térmica relacionado ao lado do meio reacional.

O diâmetro médio logarítmico é definido por:

$$D_m = \frac{D_e - D_i}{\ln \frac{D_e}{D_i}} \quad (3.62)$$

III.2 CÁLCULO DAS PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS

O elo de ligação entre um modelo matemático e o processo físico é o conjunto de parâmetros associados à representação matemática do modelo, juntamente com as propriedades físicas do sistema. De certa forma existe a necessidade de se ter um bom conhecimento numérico de seus valores para a obtenção de predições confiáveis.

Em certos procedimentos de validação do modelo há a necessidade de se otimizar algum ou mais parâmetros, sendo que um número excessivo destes pode causar problemas quanto à sua interpretação física. Isso requer que algumas propriedades e parâmetros sejam estimados, o que implica necessariamente na utilização de correlações.

Na modelagem e simulação de processos da indústria química o conhecimento das propriedades físicas dos componentes envolvidos tem uma grande importância, de modo que correlações para a predição destas propriedades com um grau de precisão satisfatório são necessárias.

No caso de reatores trifásicos este ponto merece uma importância particular, uma vez que, estão envolvidas três fases, e deve-se predizer satisfatoriamente as propriedades dos componentes na fase líquida e na gasosa.

Na modelagem de reatores trifásicos, a predição das propriedades físicas das substâncias envolvidas é imprescindível, pois delas depende diretamente o cálculo dos

parâmetros de transferência de massa e calor. Para alguns modos de operação dos reatores trifásicos os processos de transferência de massa influenciam diretamente na performance global do reator.

A seguir é feita uma exposição das correlações que foram utilizadas para o cálculo das propriedades físicas e coeficientes de transferência de massa e calor necessários aos propósitos da modelagem desenvolvida neste trabalho.

Os modelos desenvolvidos têm a opção de utilização das propriedades e coeficientes de transferência de massa e calor (calculados pelas correlações ou fornecidos pelo usuário) ou variantes (calculados pelas correlações a todo instante).

Destes parâmetros, o único que foi mantido constante, utilizando o valor sugerido por Santana (1999) foi o coeficiente de transferência de calor líquido-sólido. As correlações apresentadas a seguir não forneceram resultados satisfatórios.

Outro detalhe, é que nem todas as variáveis tiveram sua nomenclatura descrita, isto se deve ao grande número de variáveis e parâmetros apresentados a seguir. Para mais detalhes sobre as correlações apresentadas e nomenclaturas consultar a relação recomendada em Santana et al. (2001).

III.2.1 PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS

Para o cálculo das propriedades físicas dos componentes puros (Hidrogênio, Álcool Benzílico, Álcool Cíclico, Ciclohexano, Água e Fluido Refrigerante) foram utilizados os dados fornecidos pela literatura, seguindo-se das regras de mistura usadas para o cálculo de propriedades de mistura e de correlações para o cálculo de propriedades de suspensões. As propriedades avaliadas tanto para a fase gasosa como líquida foram:

- capacidade calorífica, C_p ;
- calor de formação, ΔH_f^o ;
- calor latente, H_λ ;
- condutividade térmica, λ ;
- densidade, ρ ;
- entalpia, H ;
- peso molecular, PM ;
- pressão de vapor, P_{sat} ;
- tensão superficial, σ ;
- viscosidade, μ .

De posse dos valores das propriedades físicas dos componentes puros fez-se uso de regras de mistura para avaliar as propriedades da fase gasosa, líquida e da suspensão (líquida+sólida). A seguir são apresentadas as equações para cada fase.

Fase Gasosa

a) Peso Molecular da Mistura

O peso molecular da mistura é dado por:

$$PM_g = \sum_{i=1}^n y_i PM_i \quad (3.63)$$

onde:

PM_g = peso molecular da fase gasosa, kg/kmol;

PM_i = peso molecular da substância i, kg/kmol;

y_i = fração molar da substância i.

b) Viscosidade da Mistura

Para o cálculo da viscosidade de mistura utilizou-se o método interpolativo de Wilke:

$$\mu_g = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \mu_i}{\sum_{j=1}^n y_j \phi_{ij}} \quad (3.64)$$

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} (PM_j PM_i)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{PM_i}{PM_j} \right) \right]^{1/2}} \quad (3.65)$$

$$\phi_{ji} = \phi_{ij} \left(\frac{\mu_j}{\mu_i} \right) \left(\frac{PM_i}{PM_j} \right) \quad (3.66)$$

$$\mu_i = f(T) \quad (3.67)$$

onde:

μ_g = viscosidade dinâmica da fase gasosa, kg/(m.h);

μ_i = viscosidade dinâmica da substância i, kg/(m.h);

PM_i = peso molecular da substância i, kg/kmol;

y_i = fração molar da substância i.

c) Condutividade Térmica da Mistura

Para o cálculo da condutividade térmica de mistura utilizou-se do método interpolativo de Wassiljewa, parecido na forma com o método de Wilke:

$$\lambda_g = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^n y_j A_{ij}} \quad (3.68)$$

$$A_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} (PM_j PM_i)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{PM_i}{PM_j} \right) \right]^{1/2}} \quad (3.69)$$

$$A_{ji} = A_{ij} \left(\frac{\mu_j}{\mu_i} \right) \left(\frac{PM_i}{PM_j} \right) \quad (3.70)$$

$$\lambda_i = f(T) \quad (3.71)$$

onde:

λ_g = viscosidade dinâmica da fase gasosa, kg/(m.h);

λ_i = viscosidade dinâmica da substância i, kg/(m.h);

PM_i = peso molecular da substância i, kg/kmol;

y_i = fração molar da substância i.

d) Calor Específico da Mistura

O calor específico molar da mistura é dado por:

$$Cp_g = \sum_{i=1}^n y_i Cp_i \quad (3.72)$$

$$Cp_i = f(T) \quad (3.73)$$

onde:

Cp_g = calor específico molar da fase gasosa, kcal/(kmol.K);

Cp_i = calor específico molar da substância i, kcal/(kmol.K);

y_i = fração molar da substância i.

e) Densidade da Mistura

Utilizando a hipótese de gás ideal:

$$PV_g = n_{total} RT = \frac{m_{total}}{PM_g} RT \quad (3.74)$$

Portanto:

$$\rho_g = \frac{m_{total}}{V_g} = \frac{P_{média} PM_g}{RT} \quad (3.75)$$

onde:

ρ_g = massa específica da fase gasosa, kg/m³;

m_{total} = massa total do gás, kg;

n_{total} = número total de moles do gás, kmol;

PM_g = peso molecular da fase gasosa, kg/kmol;

P = pressão total da fase gasosa, atm;

R = constante universal dos gases, (atm.m³)/(kmol.K);

T = temperatura da fase gasosa, K;

V_g = volume de gás, m³.

Fase Líquida

Para a predição das propriedades físicas da mistura líquida foram utilizadas médias ponderadas.

a) Peso Molecular da Mistura

O peso molecular da mistura é dado por:

$$PM_l = \sum_{i=1}^n x_i PM_i \quad (3.76)$$

onde:

PM_l = peso molecular da fase líquida, kg/kmol;

PM_i = peso molecular da substância i, kg/kmol;

x_i = fração molar da substância i.

b) Viscosidade da Mistura

Para o cálculo da viscosidade de mistura utilizou-se a seguinte equação:

$$\mu_l = \left(\sum_{i=1}^n x_i \mu_i^{1/3} \right)^3 \quad (3.77)$$

$$\mu_i = f(T) \quad (3.78)$$

onde:

μ_l = viscosidade dinâmica da fase líquida, kg/(m.h);

μ_i = viscosidade dinâmica da substância i, kg/(m.h);

PM_i = peso molecular da substância i, kg/kmol;

x_i = fração molar da substância i.

c) Condutividade Térmica da Mistura

Para o cálculo da condutividade térmica de mistura utilizou-se:

$$\lambda_l = \sum_{i=1}^n w_i \lambda_i \quad (3.79)$$

$$\lambda_i = f(T) \quad (3.80)$$

onde:

λ_g = viscosidade dinâmica da fase líquida, kg/(m.h);

λ_i = viscosidade dinâmica da substância i, kg/(m.h);

PM_i = peso molecular da substância i, kg/kmol;

w_i = fração mássica da substância i.

d) Calor Específico da Mistura

O calor específico molar da mistura é dado por:

$$Cp_g = \sum_{i=1}^n x_i Cp_i \quad (3.81)$$

$$Cp_i = f(T) \quad (3.82)$$

onde:

Cp_g = calor específico molar da fase líquida, kcal/(kmol.K);

Cp_i = calor específico molar da substância i, kcal/(kmol.K);

x_i = fração molar da substância i.

e) Densidade da Mistura

Utilizou-se a seguinte expressão:

$$\frac{1}{\rho_l} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\rho_i} \quad (3.83)$$

onde:

ρ_l = massa específica da fase líquida, kg/m³;

ρ_i = massa específica dos componentes da mistura líquida, kg/m³;

f) Difusividade Molecular

$$D_{Am \mu m} = (D_{A1 \mu l})^{x_1} (D_{A2 \mu l})^{x_2} \quad (3.84)$$

Propriedades de Suspensões

Devido à presença do catalisador (Ni-Rhaney) a mistura reacional forma uma suspensão, sendo necessário, portanto, a predição das propriedades físicas desta, a partir das propriedades da mistura líquida e da fração de sólidos presente na suspensão. Utilizam-se as seguintes correlações:

a) Densidade

$$\rho_{ss} = \phi_v \rho_s + (1 - \phi_v) \rho_l \quad (3.85)$$

b) Viscosidade

$$\mu_{ss} = \mu_l \left(\frac{1 + 0,5 \phi_v}{(1 - \phi_v)^4} \right) \quad (3.86)$$

c) Capacidade Calorífica

$$C_{pss} = \phi_m C_{ps} + (1 - \phi_m) C_{pl} \quad (3.87)$$

d) Condutividade Térmica

$$\lambda_{ss} = \lambda_l \frac{2\lambda_l + \lambda_s - 2\phi_v(\lambda_l - \lambda_s)}{2\lambda_l + \lambda_s + \phi_v(\lambda_l - \lambda_s)} \quad (3.88)$$

Nas equações acima, ϕ_m e ϕ_v , representam respectivamente, a fração mássica e volumétrica de sólidos na suspensão, as quais podem ser computadas pelas seguintes relações:

$$\phi_m = \frac{m_s}{m_l + m_s} \quad (3.89)$$

$$\phi_v = \frac{\rho_l \phi_m}{\rho_s - \phi_m(\rho_s - \rho_l)} \quad (3.90)$$

Carga ou Concentração de Catalisador

Um parâmetro de grande importância para a resolução do modelo matemático é a concentração de catalisador na suspensão, uma vez que a taxa de reação é expressa em função da massa de catalisador. A concentração de catalisador (kg-cat/m³-suspensão) é calculada pela seguinte relação direta:

$$w = C_{cat} = \phi_m \rho_{ss} \quad (3.91)$$

Pressões de Saturação

São utilizadas as leis de pressões de saturação (na forma de Antoine) os dados encontram-se em Santana (1995).

Entalpia de Reação

A entalpia de reação padrão é dada por:

$$\Delta H_R^{298,15 K} = \sum_{i=1}^n \nu_i \Delta H_{\text{formação } i} \quad (3.92)$$

A correção de ΔH_R com a temperatura é feita através dos calores específicos molares, de acordo com:

$$\Delta H_R = \Delta H_R^{298,15 K} + \sum_{i=1}^5 \nu_i \int_{298,15 K}^T C_{p_i} dT \quad (3.93)$$

$$C_{p_i} = f(T) \quad (3.94)$$

onde:

ΔH_R = entalpia de reação, kcal/kmol;

$\Delta H_R^{298,15 K}$ = entalpia de reação padrão, kcal/kmol;

$\Delta H_{\text{formação } i}$ = entalpia de formação da espécie i pura, kcal/kmol;

ν_i = coeficiente estequiométrico da substância i;

C_{p_i} = calor específico molar da substância i, kcal/(kmol.K).

Capítulo IV

Procedimentos para Otimização

IV.1 PROCEDIMENTOS PARA OTIMIZAÇÃO

IV.1.1 INTRODUÇÃO

O modelo do reator de hidrogenação de Álcool Benzílico a Álcool Cíclico proposto por Santana e Maciel Filho (1996) consideraram as seguintes simplificações como já citado no Capítulo III, ressaltando-se:

- Fluxo empistonado (“plug-flow”);
- Modelo pseudo-homogêneo (2 fases, suspensão e vapor);
- Modelo de cinética global, ou seja, não faz distinção entre os diversos passos envolvidos na reação, tais como, transferência de massa entre as fases e adsorção das espécies à superfície do catalisador (embora exista a possibilidade de consideração deste tópico, sendo utilizado, mas sem grandes influências nos resultados do modelo);
- Equilíbrio líquido-vapor ideal;
- Mudança de fase.

Quantidades do catalisador que deixam o reator na corrente de produto são recicladas se juntando com uma nova carga de catalisador regenerado, alimentando o reator novamente.

O modelo é considerado em estado estacionário (steady-state) sendo analisados três níveis de produção (Níveis 1, 2 e 3 respectivamente), onde cada nível produtivo possui suas particularidades operacionais e de produção.

O código de otimização, com os Algoritmos Genéticos, utilizado foi obtido e adaptado junto ao modelo de Santana e Maciel Filho (1996), criando assim uma modelagem híbrida para otimização deste sistema. O código genético está em Fortran e pertence ao pesquisador e Diretor de Engenharia David L. Carroll da empresa CU Aerospace L. L. C..

Foram diversos trabalhos publicados por Carroll (1996a) com esta codificação genética, onde a primeira aplicação foi estudada com objetivo de desenvolver o processo de otimização para verificação do desempenho em um sistema de laser (químico, sólido e gasoso) com o título **“Genetic Algorithms and Optimizing Chemical Oxygen-Iodine Lasers”**, onde foi estudada a influência dos diversos parâmetros genéticos referentes a esta codificação, tais como: o efeito do elitismo, forma de cruzamento de um ponto e uniforme, mutação de arraste, tamanho populacional, buscas em nichos, números de descendentes resultantes dos processos evolutivos (1 ou 2 descendentes – indivíduos ou conjunto de soluções), além de ser testado uma particularidade deste código denominado de Micro-AGs (pertencente ao código como um procedimento mais reduzido da aplicação do mesmo). Neste trabalho observou-se, um melhor desempenho global utilizando a forma reduzida com cruzamento uniforme e tamanho populacional de 5, encontrando o máximo global de um conjunto de funções de 3ª ordem adotada para o sistema em questão.

Outra aplicação desta codificação ocorreu no trabalho desenvolvido por Carroll (1996b), com o título **“Chemical Laser Modeling with Genetic Algorithms”**, onde

estudou a otimização com os Algoritmos Genéticos para determinação de um conjunto de parâmetros que melhor se adaptava às predições do modelo de laser químico Blaze II com os dados experimentais. O trabalho visou a modelagens de laser, fluxos de reação química e lasers químicos. A técnica teve bom desempenho para o problema de modelagem de laser também com um tempo bem eficiente. A existência deste sistema (Blaze II) teve como linha básica um ajuste com dados experimentais de laser de oxigênio-iodo químicos considerados, onde obteve-se resultados excelentes.

Diversos cálculos em conjunto para avaliação da busca e melhora do dispositivo deste sistema indicou altas taxas de fluxos de iodo necessárias para manter uma fração significativa do desempenho nominal. A técnica dos Algoritmos Genéticos pôde ser implementada para otimizar o desempenho de sistemas de laser químico em função de algumas taxas de fluxo, tamanhos de injetores e outros fatores deste sistema. A metodologia de otimização pode ser usada como um método para guiar experimentos para melhoria do desempenho de lasers químicos.

Yang et al. (1998a) utilizou este código genético em suas pesquisas, no **trabalho "A new genetic algorithm technique in optimization of permanent 125-I prostate implants"**, onde o objetivo foi desenvolver um algoritmo de otimização robusto para aplicação de bombardeio radioativo em tratamento de próstata através de um planejamento de tratamento otimizado em tempo real de uma transperineal (^{125}I), onde vários algoritmos de otimização aplicáveis possuem lentidão em suas aplicações.

Foram testados três diferentes códigos de Algoritmos Genéticos (sGA, sureGA e securGA), onde este último código (securGA) é uma melhoria do código básico de David Carroll em relação a rapidez de execução. Os códigos foram avaliados em termos do número de avaliações das funções e o ajuste correspondente.

A distribuição da dose otimizada foi atingida pelo melhor núcleo (inicial) de distribuição através da minimização de uma função de custo, considerando algumas

restrições em doses periféricas do volume do alvo planejado, a uniformidade da dose sem o volume do alvo e a dose para a estrutura crítica. Ajustes entre a dose periférica, a uniformidade da dose e a dose da estrutura crítica podem ser atingidas pela variação dos fatores de pesagem na função de custo. Todo planejamento foi evoluído em termos da razão não uniforme da dose, o número de conformações e o histogramas do volume da dose. Entre os três códigos genéticos, o securGA forneceu um melhor desempenho. Dentro de 2500 avaliações de função o resultado ótimo foi atingido.

Os resultados mostraram que os melhores conjuntos de parâmetros foram encontrados e aplicáveis em todos os tamanhos de volume de próstata. O código securGA apresenta uma eficiente e rápida otimização na distribuição da dose que é adequada para otimização de planejamento de tratamento em tempo real para o tratamento.

Diversos trabalhos do Carroll em conjunto com seus colaboradores e orientados, podem ser encontrados no seu site: <http://cuaerospace.com/carroll/ga.html>, podendo-se verificar seus trabalhos e aplicações em áreas da ciência da física aplicadas em saúde e outras, e a aplicação da técnica dos AGs no processo de otimização de sistemas, com o código proposto.

A escolha desse código justifica-se por ser um programa em Fortran disponível de uso público, de fácil entendimento e adaptação a diversos casos de estudo, como deste trabalho. Este código inclui os principais operadores genéticos mais utilizados em diversos códigos de Algoritmos Genéticos aplicados nas mais variadas áreas da ciência e encontrados em inúmeros trabalhos publicados.

Há na literatura inúmeros códigos tanto de uso público, como de uso comercial envolvendo os AGs e que estão disponíveis. Na Tabela 4.1 é apresentado alguns destes códigos encontrados em várias linguagens computacionais e adaptáveis a diversos casos de estudo.

Tabela 4.1 – Lista de alguns softwares sobre algoritmos genéticos encontrados na literatura e adaptáveis em diversos casos de estudo incluindo problemas de engenharia.

Software	Ling./Sist. Operacional	Contato/Obtenção
amGA	Unix	ftp://gal4.ge.uiuc.edu/pub/src/messyGA/C/
DGenesis	C/Unix	Erick Cantu-Paz <ecantu@lampport.rhon.itam.mx> ftp://ftp.aic.nrl.navy.mil/pub/galist/src/ga/dgenesis-1.0.tar.Z
GAC, GAL	C/Unix	Willian Spears <spears@aic.nrl.navy.mil>
GAGA	C/Unix	Jon Crowcroft <jon@cs.ucl.ac.uk>
GAGS	C++/DOS/Unix	J.J. Merelo <jmerelo@kal-el.ugr.es>
GALib	C++/DOS/WIN	Matthew <mbwall@mit.edu>
GALOPPS	C/DOS/Unix	Erik Goodman <goodman@egr.msu.edu>
GAMusic	V.Basic/Win	Jason H. Moore <jhm@superh.hg.med.umich.edu>
GANNET	C/Unix	Darrell Duane <dduane@fame.gmu.edu>
GARP	C/Unix Linux	http://kaos.erin.gov.au/general/biodiv_model/ERIN/GARP/home.html
GAucsd	C/Unix	Nici Schraudolph <Gaucsd-request@cs.ucsd.edu>
GECO	Lisp/Unix/MacOS	George Williams, Jr. <george@hsaic.hv.boeing.com>
Generator	Ms Excell/DOS	
Genesis	C/DOS/Unix	John Grefenstette <gref@aic.nrl.navy.mil>
GENESYs	C/Unix	Thomas Baeck <baeck@ls11.informatik.uni-dortmund.de>
GenET	C/Unix	Cezary Z. Janikow <janikow@radom.umsl.edu>
Genitor	C/Unix	Darrell Whitley <whitley@cs.colostate.edu>
GENOCOP	C/Unix	Zbigniew Michalewicz <zbyszek@uncc.edu>
LibGA	C/UNIX/DOS	corcoran@wiltel.com / ftp://ftp.aic.nrl.navy.mil/pub/galist/src/ga/libga100.tar.Z
Matlab-GA	MATLAB	ftp://ftp.mathworks.com/pub/contrib/optim/genetic
PGApack	Multiplataforma	ftp://info.mcs.anl.gov/pub/pgapack/pgapack.tar.Z
PARAGenesis	C	Michael van Lent vanlent@eecs.umich.edu / ftp://ftp.aic.nrl.navy.mil/pub/galist/src/ga/paragenesis.tar.Z
Evolver	Visual Basic	Axcelis / 72723.3614@compuserve.com
GAME	C++	Jose Luiz Ribeiro Filho / zeluiz@cs.ucl.ac.uk
MicroGA	C++	Steve Wilson / emergent@aol.com

IV.1.2 CONSIDERAÇÕES PARA OTIMIZAÇÃO DO REATOR DE ÁLCOOL CÍCLICO

O processo de otimização visou não só considerar a maximização da produtividade de Álcool Cíclico (AC), considerando algumas limitações reacionais devido à reagente e subprodutos, bem como observar algumas influências relacionadas pelas variações dos parâmetros do Algoritmo Genético na produtividade do processo reacional.

Para realização da otimização do reator de AC, considerou-se como grande importância fixar algumas situações, como:

- Melhor produtividade do processo reacional (maior produção de AC);
- Limitação do reagente principal (Álcool Benzílico) na corrente de produto (não reagido);
- Limitação de um dos subprodutos da reação (C), onde este pode determinar maior ou menor produção do produto de interesse;
- Conversão otimizada;
- Comprimento axial total dos oito módulos é de 130 metros.

A partir dessas primeiras premissas para realização da otimização no reator de AC, outras referentes ao código dos Algoritmos Genéticos também foram analisadas e consideradas, as quais ressalta-se:

- Variações do tamanho populacional;
- Variações das taxas de recombinação ou cruzamento;
- Utilização de dois tipos de parâmetros de recombinação (cruzamento ou crossover);
- Variações das taxas de mutação (tanto para mutação uniforme como para a de arraste).

Após realizar essas considerações a otimização foi realizada, e os resultados, são apresentados no próximo capítulo (Capítulo V).

IV.1.3 PROCEDIMENTO PARA O CÁLCULO DOS PERFIS DO MODELO DO REATOR

Foi utilizado um programa em Fortran 77, utilizando as equações do modelo estabelecido por Santana e Maciel Filho (1996), possibilitando simular o comportamento do reator de Álcool Cíclico. Para facilitação da entrada de dados no programa (parâmetros

físicos, cinéticos, vazões de operação, etc.) utilizou-se os recursos de programação em ambiente Windows do Microsoft Fortran PowerStation 4.0. Desta maneira, facilitando a entrada de dados necessárias à simulação e obtendo-se os perfis de composição, pressão, temperatura ao longo de todo o reator que são gerados pela simulação. Essa situação favorece a versatilidade do programa, possibilitando uma melhor ligação das relações entre as diversas variáveis operacionais.

IV.1.4 PROCEDIMENTO PARA A OTIMIZAÇÃO DO MODELO DO REATOR

Nessa etapa há uma adaptação do modelo do reator junto ao modelo de otimização dos Algoritmos Genéticos (código de David L. Carroll (2004)).

Esse código se inicia através de uma população de indivíduos obtida de forma aleatória representando os diferentes parâmetros que são considerados na otimização. A codificação dos indivíduos é da forma binária, a seleção considera o tipo denominado por torneio, com mutação uniforme, mutação de arraste e duas opções de recombinação ou cruzamento (uniforme ou de um ponto). O código também considera buscas em nichos (niching) e opção para o número de descendentes de um ou dois descendentes (neste trabalho optou-se por dois descendentes), pois caso utilizasse a opção de um indivíduo descendente, haveria aumento de tempo computacional e menos diversidade na população remanescente.

Uma apresentação de forma sucinta do código dos Algoritmos Genéticos é apresentada a seguir. O programa principal possui a sub-rotina input (ga.inp) contendo informações dos dados de entrada dos parâmetros inerentes ao funcionamento dos Algoritmos Genéticos. Uma outra sub-rotina inicializa (initial) a população de indivíduos e a leitura de um arquivo que contém o tamanho da população a ser inicializada juntamente com o tamanho máximo dos cromossomos, onde o número de cromossomos (tamanho da população) são analisados a cada geração, sendo submetidos ao processo de seleção e aos operadores genéticos (recombinação e mutação) até sua finalização.

Os valores das variáveis são passados para o modelo, onde este é resolvido retornando para suas saídas. A função de adequação ou avaliação é definida, sendo o ajuste da função objetivo (neste caso a própria função objetivo ou essa mais as restrições) considerando o conjunto de variáveis que é analisado. Os valores de adequação são obtidos e comparados e decide-se, se a solução está em conformidade ou não. A partir dessa etapa ocorrem os processos seletivos e os operadores genéticos entram em ação, ocorrendo na sequência a avaliação da população de indivíduos que foi transformada pela seleção e operadores genéticos atribuindo um valor de adequação da função objetivo, onde os melhores indivíduos são escolhidos, ou seja, àqueles que fornecem melhores ajustes ou adequação da função objetivo escrevendo as informações no arquivo de saída.

Na etapa de seleção o código trabalha com o elitismo. O operador genético de recombinação possui duas opções: uma delas é o operador uniforme e a outra, o de um ponto (ambos já definidos anteriormente). Para o operador de mutação apenas o caso de mutação uniforme (ou de troca de bits) é considerado (bastante difundido na literatura). No mesmo segmento desse operador uma outra modalidade de mutação, a mutação de arraste, é inserida no código como alternativa e possibilidade de analisar as proximidades das melhores respostas verificando a viabilidade de existência de outros valores com melhores desempenhos (melhor desempenho da função objetivo). O código considera a busca em nichos de regiões, ou seja, em outras direções utilizando outros indivíduos comparando-os com àqueles encontrados anteriormente.

O arquivo de saída possui todas as informações sobre as gerações de cada população, a solução dada para cada cromossomo, o valor de ajuste da função objetivo para cada solução referente a cada indivíduo, além do melhor valor de ajuste da função objetivo encontrado na população, os valores ótimos correspondentes ao melhor ajuste e o número de mutações e cruzamentos efetuados. O critério de término ou finalização é ajustado conforme o interesse, e pode ser definido como o número máximo de gerações, um tempo de execução pré-estabelecido, ou valores atingidos pela função de adequação ou ajuste que se encontrem em uma determinada faixa pré-fixada. De acordo com a Figura 4.1 pode-se observar o fluxograma que representativo do funcionamento desse código.

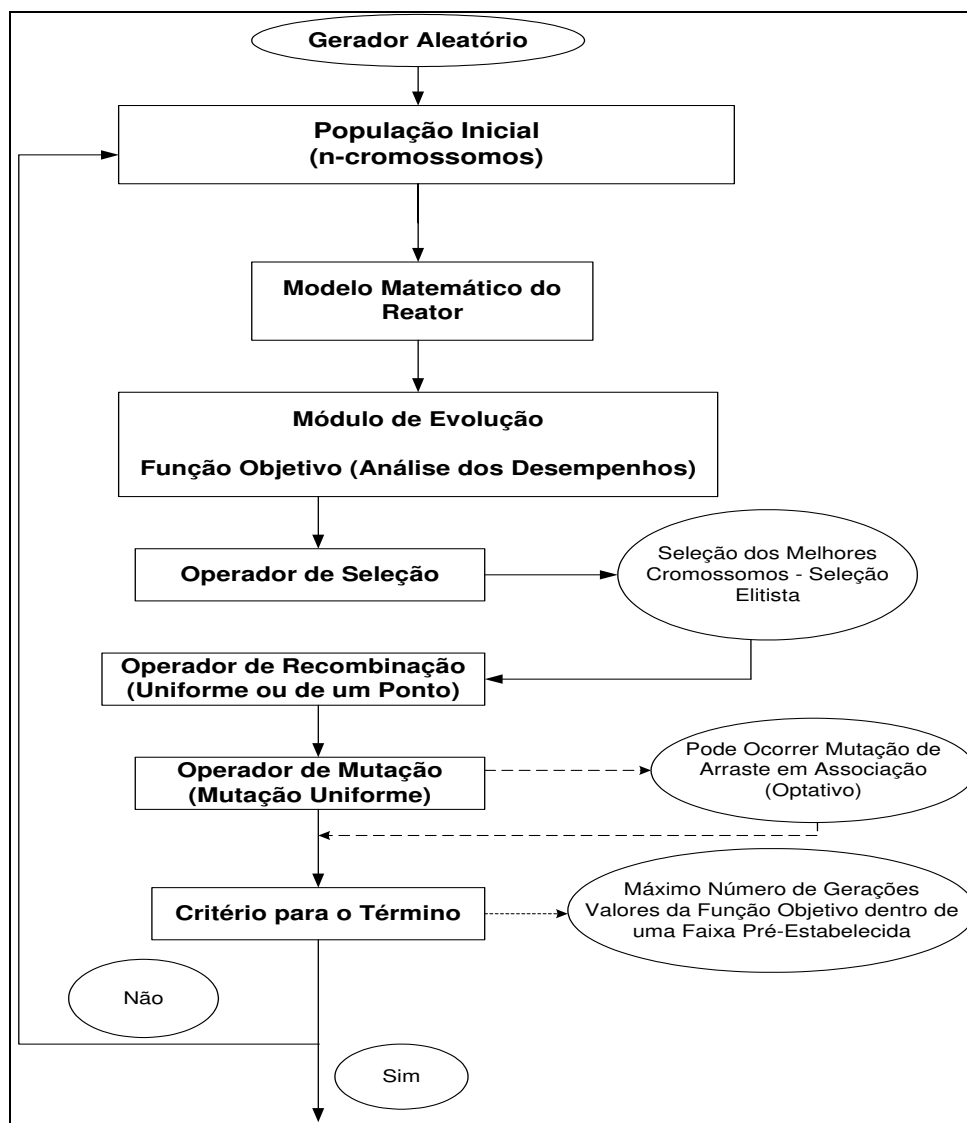


Figura 4.1 - Fluxograma que representa o código genético utilizado na otimização junto ao modelo reacional de produção de Álcool Cíclico.

Nesse trabalho foram realizadas combinações dos dois tipos de operadores de recombinação e mutação associada ou não com a especialidade de arraste. O código genético completo é apresentado com detalhes no site do autor, Carroll (2004). No Apêndice IV são apresentadas algumas definições das variáveis do código genético de David L. Carroll, onde se verificam as sub-rotinas do código, as variáveis de entrada de dados e as variáveis do código genético.

As modificações realizadas no código genético estão relacionadas ao número de variáveis que foi utilizado na otimização deste trabalho, as precisões destas e a função objetivo que foi implementada na resolução do problema ocorreu de forma simples ligando-a com o modelo do reator de produção de AC realizando adaptações. As restrições também foram inseridas juntamente com a função objetivo e conseqüente ligação ao modelo do reator.

IV.1.5 DETERMINAÇÃO E CODIFICAÇÃO DOS PARÂMETROS

Em conformidade com o trabalho realizado por Deb (1998), um Algoritmo Genético binário as variáveis são codificadas em uma série binária de tamanho fixo. Para um determinado problema com N variáveis, a representação se apresenta da seguinte forma:

$$\underbrace{11010}_{x_1} \underbrace{1001001}_{x_2} \underbrace{010}_{x_3} \dots \underbrace{0010}_{x_n}$$

Cada variável é codificada como uma sub-série binária de tamanho fixo ℓ_i , de modo que o número total de possibilidades permitidas ou o número de valores possíveis para cada variável seja 2^{ℓ_i} . Esse tamanho da sub-série ℓ_i é definido por Deb (1998) pela seguinte relação:

$$\ell_i = \log_2 \left(\frac{x_i^{máx} - x_i^{mín}}{\varepsilon_i} \right) \quad (4.1)$$

onde ε_i é a precisão requerida para a variável i (referente ao número de casas decimais), $x_i^{máx}$ e $x_i^{mín}$ são os valores limites superior e inferior da variável respectivamente. Desta

forma o tamanho total da série ou cromossomo representativo de um conjunto de soluções das variáveis que são otimizadas é definido pelo somatório de cada ℓ_i :

$$\ell_{total} = \sum_{i=1}^N \ell_i \quad (4.2)$$

As determinações dos tamanhos das sub-séries são definidas na sequência.

IV.1.6 SISTEMAS DE PRODUÇÃO A OTIMIZAR

Neste trabalho consideraram-se casos industriais de operação (Níveis 1, 2 e 3), onde cada um possui suas peculiaridades, com parâmetros operacionais diferentes para cada situação. Foram selecionadas oito variáveis operacionais para serem otimizadas conforme a Tabela 4.2 abaixo:

Tabela 4.2 - Definição dos parâmetros a otimizar.

Parâmetros	Definição
Q_{r1}	Vazão mássica de fluido refrigerante relacionada ao primeiro módulo do reator (kg/h)
Q_{r2}	Vazão mássica de fluido refrigerante relacionada ao segundo módulo do reator (kg/h)
Q_{r3}	Vazão mássica de fluido refrigerante relacionada ao terceiro módulo do reator (kg/h)
Q_{r4}	Vazão mássica de fluido refrigerante relacionada ao quarto módulo do reator (kg/h)
Q_{r5}	Vazão mássica de fluido refrigerante relacionada ao quinto módulo do reator (kg/h)
Q_{r6}	Vazão mássica de fluido refrigerante relacionada ao sexto módulo do reator (kg/h)
T_0	Temperatura inicial da mistura de reagentes e produtos na entrada do reator (°C)
Q_{cat}	Vazão mássica de catalisador (kg/h)

A partir da definição das variáveis a serem otimizadas, são definidos os limites, superior e inferior das mesmas encontrados na Tabela 4.3 abaixo:

Tabela 4.3 - Parâmetros e seus limites, inferior e superior utilizados na otimização.

Parâmetros	Limite Inferior da variável	Limite Superior da variável
Q_{r1}	100	10000
Q_{r2}	100	10000
Q_{r3}	100	10000
Q_{r4}	100	10000
Q_{r5}	100	10000
Q_{r6}	100	10000
T_0	y^*	210
Q_{cat}	0	x^*

O valor de y^* é relacionado ao valor do limite inferior da temperatura inicial da mistura de reagentes e produtos na entrada do reator, sendo 150 °C para o Nível 1 de produção e 170 °C para os dois outros níveis de produção (Níveis 2 e 3 respectivamente). Nos níveis 2 e 3, valores menores do que 170 °C fornecem descontinuidades para resolução do modelo do reator, não sendo adequados sua utilização na otimização.

O valor de x^* referente à vazão de catalisador (Q_{cat}) máxima (limite superior) que também depende do nível operacional de produção que é analisado. Para o Nível 1 o valor máximo é de 300,00 kg/h, para o Nível 2 esse valor é 400,00 kg/h e por último o Nível 3 assume o valor de 500,00 kg/h. Valores acima dos limites superiores de cada nível também fornecem descontinuidades na resolução do modelo, não sendo utilizados.

As Tabelas 4.4, 4.5 e 4.6 respectivamente, são descritos todos os dados operacionais referentes aos níveis de produção utilizados no processo real, inclusive os oito parâmetros selecionados a serem otimizados. O perfil de temperatura real que estão indicados ao final das tabelas são as temperaturas medidas no processo reacional de cada módulo na entrada (base) e saída (saída) respectivamente dos mesmos.

Tabela 4.4 - Dados operacionais do Nível 1 de produção.

Nível 1	
Conversões Iniciais	$X_{A0} = 0$ e $X_{B0} = 0$
Temperatura de entrada dos reagentes (°C)	$T_0 = 158$
Temperatura da caldeira (°C)	$T_s = 168$
Pressão de entrada dos reagentes (kgf/cm²)	$P_0 = 28,1$
Vazão de vapor (kg/h)	4500
Temperatura da água de reposição (°C)	67
Vazões dos componentes (kg/h)	
$Q_{\text{Álcool Benzílico}} = 3977$	$Q_{\text{Álcool Cíclico}} = 734$
$Q_{\text{água}} = 142$	$Q_{\text{Cicloalcano}} = 9$
$Q_{\text{catalisador}} = 217$	$Q_{\text{hidrogênio}} = 278$
$Q_{\text{metano}} = 29$	
Vazões de fluido refrigerante (kg/h)	
$Q_{r1} = Q_{\text{tubo1}} = 2520$	$Q_{r2} = Q_{\text{tubo2}} = 2590$
$Q_{r3} = Q_{\text{tubo3}} = 2760$	$Q_{r4} = Q_{\text{tubo4}} = 360$
$Q_{r5} = Q_{\text{tubo5}} = 520$	$Q_{r6} = Q_{\text{tubo6}} = 290$
Perfil de temperatura real (°C)	
$T1_{\text{base}} = 155$	$T1_{\text{saída}} = 183$
$T2_{\text{base}} = 207$	$T2_{\text{saída}} = 208$
$T3_{\text{base}} = 228$	$T3_{\text{saída}} = 214$
$T4_{\text{base}} = 213$	$T4_{\text{saída}} = 192$
$T5_{\text{base}} = 183$	$T5_{\text{saída}} = 172$
$T6_{\text{base}} = 170$	$T6_{\text{saída}} = 169$
$T7_{\text{base}} = 169$	$T7_{\text{saída}} = 169$
$T8_{\text{base}} = 168$	$T8_{\text{saída}} = 159$

Tabela 4.5 - Dados operacionais do Nível 2 de produção.

Nível 2	
Conversões Iniciais	$X_{A0} = 0$ e $X_{B0} = 0$
Temperatura de entrada dos reagentes (°C)	$T_0 = 173$
Temperatura da caldeira (°C)	$T_s = 172$
Pressão de entrada dos reagentes (kgf/cm²)	$P_0 = 28,2$
Vazão de vapor (kg/h)	4500
Temperatura da água de reposição (°C)	84
Vazão dos componentes (kg/h)	
$Q_{\text{Álcool Benzílico}} = 5739$	$Q_{\text{Álcool Cíclico}} = 1470$
$Q_{\text{água}} = 169$	$Q_{\text{Cicloalcano}} = 11$
$Q_{\text{catalisador}} = 376$	$Q_{\text{hidrogênio}} = 455$
$Q_{\text{metano}} = 61$	
Vazões de fluido refrigerante (kg/h)	
$Q_{r1} = Q_{\text{tubo1}} = 360$	$Q_{r2} = Q_{\text{tubo2}} = 380$
$Q_{r3} = Q_{\text{tubo3}} = 2740$	$Q_{r4} = Q_{\text{tubo4}} = 660$
$Q_{r5} = Q_{\text{tubo5}} = 1190$	$Q_{r6} = Q_{\text{tubo6}} = 1400$
Perfil de temperatura real (°C)	
$T1_{\text{base}} = 199$	$T1_{\text{saída}} = 199$
$T2_{\text{base}} = 222$	$T2_{\text{saída}} = 221$
$T3_{\text{base}} = 232$	$T3_{\text{saída}} = 229$
$T4_{\text{base}} = 226$	$T4_{\text{saída}} = 225$
$T5_{\text{base}} = 217$	$T5_{\text{saída}} = 185$
$T6_{\text{base}} = 180$	$T6_{\text{saída}} = 175$
$T7_{\text{base}} = 175$	$T7_{\text{saída}} = 175$
$T8_{\text{base}} = 175$	$T8_{\text{saída}} = 167$

Tabela 4.6 - Dados operacionais do Nível 3 de produção.

Nível 3	
Conversões Iniciais	$X_{A0} = 0$ e $X_{B0} = 0$
Temperatura de entrada dos reagentes (°C)	$T_0 = 173$
Temperatura da caldeira (°C)	$T_s = 172$
Pressão de entrada dos reagentes (kgf/cm ²)	$P_0 = 27,1$
Vazão de vapor (kg/h)	4500
Temperatura da água de reposição (°C)	72
Vazões dos componentes (kg/h)	
$Q_{\text{Alcool Benzílico}} = 5774$	$Q_{\text{Alcool Cíclico}} = 1280$
$Q_{\text{água}} = 124$	$Q_{\text{Cicloalcano}} = 15$
$Q_{\text{catalisador}} = 414$	$Q_{\text{hidrogênio}} = 441$
$Q_{\text{metano}} = 52$	
Vazões de fluido refrigerante (kg/h)	
$Q_{r1} = Q_{\text{tubo1}} = 390$	$Q_{r2} = Q_{\text{tubo2}} = 0$
$Q_{r3} = Q_{\text{tubo3}} = 850$	$Q_{r4} = Q_{\text{tubo4}} = 3490$
$Q_{r5} = Q_{\text{tubo5}} = 1190$	$Q_{r6} = Q_{\text{tubo6}} = 500$
Perfil de temperatura real (°C)	
$T_{1\text{base}} = 196$	$T_{1\text{saída}} = 195$
$T_{2\text{base}} = 222$	$T_{2\text{saída}} = 224$
$T_{3\text{base}} = 238$	$T_{3\text{saída}} = 234$
$T_{4\text{base}} = 234$	$T_{4\text{saída}} = 216$
$T_{5\text{base}} = 201$	$T_{5\text{saída}} = 180$
$T_{6\text{base}} = 175$	$T_{6\text{saída}} = 173$

Em síntese, na Tabela 4.7, encontram-se as variáveis a serem otimizadas de todos os níveis de produção com os respectivos valores utilizados nas condições operacionais reais de produção. As unidades dos parâmetros Q_{ri} , s e Q_{cat} estão em kg/h, e T_0 em °C.

Tabela 4.7 - Valores dos parâmetros dos Níveis 1, 2 e 3 da produção real a serem otimizados.

Parâmetros	Nível 1	Nível 2	Nível 3
Q_{r1}	2520	360	390
Q_{r2}	2590	380	0
Q_{r3}	2760	2740	850
Q_{r4}	360	660	3490
Q_{r5}	520	1190	1190
Q_{r6}	290	1400	500
T_0	158	173	173
Q_{cat}	217	376	414

IV.1.7 DEFINIÇÃO DO TAMANHO DAS SUB-SÉRIES E TOTAL DO CROMOSSOMO

Aplicando as Equações 4.1 e 4.2 define-se o tamanho de cada sub-série referente a cada variável e do tamanho total do cromossomo ou indivíduo (soma dos tamanhos de cada variável) que são adotados para o processo de otimização considerado neste trabalho. Primeiramente utilizando a Equação 4.1, pode-se definir da seguinte forma:

► Variáveis $Q_{ri's}$:

Para os Níveis 1, 2 e 3:

$$x_i^{min} = 100 ,$$

$$x_i^{max} = 10000 ,$$

precisão $(\varepsilon_i) = 1$, nenhuma casa decimal,

$$\ell_i = \log_2 \left(\frac{10000 - 100}{1} \right) = 13,27 ,$$

O valor de ℓ_i não pode ser fracionário como apresentado no cálculo anterior, pela regra definida por Deb (1998) o valor que melhor se apresenta é o número inteiro mais próximo superior ao valor fracionário, portanto $\ell_i = 14$, pois se for 13 não tem a abrangência correta no espaço de busca, ficando alguns valores fora de alcance e portanto, não sendo analisados e com um valor um pouco maior garante a busca em toda faixa especificada. Portanto as variáveis $Q_{ri's}$ possuem comprimentos iguais a $\ell_i = 14$.

A cobertura no espaço de busca possui $2^{14} = 16384$ possibilidades para cada variável nesse espaço determinado por seus limites inferior e superior respectivamente.

► Variável T_0 :

Para o Nível 1:

$$x_i^{mín} = 150,$$

$$x_i^{máx} = 210,$$

precisão $(\varepsilon_i) = 1$, nenhuma casa decimal,

$$\ell_i = \log_2 \left(\frac{210 - 150}{1} \right) = 5,91,$$

Para os Níveis 2 e 3:

$$x_i^{mín} = 170,$$

$$x_i^{máx} = 210,$$

precisão $(\varepsilon_i) = 1$, nenhuma casa decimal,

$$\ell_i = \log_2 \left(\frac{210 - 170}{1} \right) = 5,32,$$

Pelo mesmo princípio relatado acima o valor que melhor representa o comprimento desta sub-série é $\ell_i = 6$.

A cobertura no espaço de busca nesse caso fica sendo $2^6 = 64$ possibilidades para essa variável determinado pelos seus limites inferior e superior respectivamente.

► Variável Q_{cat} :

Para o Nível 1:

$$x_i^{min} = 0 ,$$

$$x_i^{max} = 300 ,$$

precisão $(\varepsilon_i) = 1$, nenhuma casa decimal,

$$\ell_i = \log_2 \left(\frac{300 - 0}{1} \right) = 8,22 ,$$

Para o Nível 2:

$$x_i^{min} = 0 ,$$

$$x_i^{max} = 400 ,$$

precisão $(\varepsilon_i) = 1$, nenhuma casa decimal,

$$\ell_i = \log_2 \left(\frac{400 - 0}{1} \right) = 8,64 ,$$

Para o Nível 3:

$$x_i^{min} = 0 ,$$

$$x_i^{max} = 500 ,$$

precisão $(\varepsilon_i) = 1$, nenhuma casa decimal,

$$\ell_i = \log_2 \left(\frac{500 - 0}{1} \right) = 8,97,$$

Em todas as situações o comprimento dessas sub-séries assumem o valor $\ell_i = 9$ pelo mesmo motivo considerado nas aproximações relatadas anteriormente. Nesse caso a abrangência no espaço de busca possui o valor de $2^9 = 512$ possibilidades determinadas pelos seus limites inferior e superior respectivamente.

O comprimento total do cromossomo fica sendo a soma dos comprimentos de todas as variáveis, descritas a seguir:

Variável $Q_{ri's}$: por terem seis destas com o mesmo tamanho, $6 \times 14 = 84$;

Variável T_0 : apenas uma desta com esse tamanho, $1 \times 6 = 6$;

Variável Q_{cat} : apenas uma desta com esse tamanho, $1 \times 9 = 9$;

Pela equação 4.2 o tamanho total do cromossomo fica:

$$\ell_{total} = \sum_{i=1}^N \ell_i = (6 \times 14 + 1 \times 6 + 1 \times 9) = 99,$$

que é adotado para ser utilizado no código dos Algoritmos Genéticos.

IV.1.8 CRITÉRIOS ADOTADOS PARA OTIMIZAÇÃO

Para efetivação da otimização, várias considerações foram realizadas na tentativa de se obter o melhor conjunto de parâmetros pertinentes ao Algoritmo Genético. Na primeira seção da otimização, considerando apenas o Nível 1 de produção, definido anteriormente, foi analisada a influência do tamanho da população inicial adotada para início da execução do algoritmo, na sequência foram escolhidos os casos de melhor desempenho referentes às duas populações adotadas que foram reproduzidas para o restante das análises deste trabalho.

Na continuação do processo, para os dois melhores casos, analisa-se a sensibilidade das taxas de probabilidade do parâmetro de recombinação (cruzamento) uniforme, bem como para a recombinação em um ponto.

O efeito do parâmetro de mutação (mutação uniforme e de arraste) também é verificado, juntamente com a sensibilidade das taxas de probabilidade de ambos tipos de mutação. Os melhores casos são selecionados e atribuídos ao processo reacional, sendo assim considerados como resultados da otimização.

Os outros níveis de produção são analisados com base nos resultados de melhor desempenho observados para o Nível 1, já que apenas as condições operacionais são alteradas, e o modelo permanece constante não havendo alterações significativas no processo e nem na metodologia do código de otimização.

A função objetivo considerada não levou em conta funções de penalidade para as restrições, mas essas se encontram de forma intrínseca no código computacional (código genético), ou seja, as restrições das variáveis otimizadas são definidas pelo código genético (através de seus limites). As restrições relacionadas ao Álcool Cíclico e Benzílico, além do Cicloalcano, são introduzidas na sub-rotina (do código genético) de cálculo da função

objetivo (func). Em análises futuras as funções de penalidade podem ser consideradas para execução da otimização. As definições dos casos de estudos estão descritas a seguir:

A escolha dos limites das variáveis a otimizar foram baseadas conforme utilizado no trabalho de Villalba (2002). Para o Álcool Cíclico, Álcool Benzílico e Cicloalcano, os valores limites utilizados como restrições, para cada um desses componentes é relacionado ao valor operacional obtido pelo seu respectivo nível de produção sem estar otimizado. No caso do Álcool Cíclico o valor considerado em cada nível de produção é o mínimo e para o Álcool Benzílico e Cicloalcano, os valores de cada um deles é o máximo em todos os níveis operacionais.

Caso 1: Otimização do Nível 1 de produção

Maximizar: a produtividade de Álcool Cíclico (Q_{AC}), (maximizar Q_{AC})

Sujeito a:

$$100 \leq Q_{r,j} \leq 10000, \quad j = 1, 2, \dots, 6,$$

$$150 \leq T_0 \leq 210,$$

$$0 \leq Q_{cat} \leq 300,$$

$$Q_{AC} - 4670,0 \geq 0,$$

$$0,066 - Q_{AB} \geq 0,$$

$$231,0 - Q_C \geq 0.$$

- Função objetivo: $f_{\text{objetivo}} = f_{\text{adequação}} = Q_{AC}$ (produtividade de AC);

- Sem função de penalidades;
- Valores reais da produtividade e reagente não reagido do processo Nível 1: $Q_{AC} = 4670,00$ kg/h, $Q_{AB} = 0,066$ kg/h, $Q_C = 231,00$ kg/h;
- Adotou-se número máximo de gerações de 500;
- Análise da influência do tamanho da população inicial no desempenho dos Algoritmos Genéticos;
- Análise do tipo de operador de recombinação, bem como as respectivas taxas de probabilidade no desempenho do processo;
- Análise da influência das taxas de probabilidade de mutação, tanto para mutação comum, como para mutação de arraste;
- Após análise das variantes dos parâmetros genéticos, considera-se os parâmetros do(s) melhor(es) caso(s) (no máximo dois casos) para servirem de base para análise dos outros níveis de produção, já que não há mudanças no modelo do processo reacional e nem na forma do código dos Algoritmos Genéticos, portanto pode servir de parâmetro para os outros casos.

Caso 2: Otimização do Nível 2 de produção

Maximizar: a produtividade de Álcool Cíclico (Q_{AC}), (maximizar Q_{AC})

Sujeito a:

$$100 \leq Q_{r,j} \leq 10000, \quad j = 1, 2, \dots, 6,$$

$$170 \leq T_0 \leq 210,$$

$$0 \leq Q_{cat} \leq 400,$$

$$Q_{AC} - 7125,4 \geq 0,$$

$$0,36 - Q_{AB} \geq 0 ,$$

$$359,6 - Q_C \geq 0 .$$

- Função objetivo: $f_{\text{objetivo}} = f_{\text{adequação}} = Q_{AC}$;
- Sem função de penalidades;
- Valores reais da produtividade e reagente não reagido do processo Nível 1: $Q_{AC} = 7125,40$ kg/h, $Q_{AB} = 0,36$ kg/h, $Q_C = 359,60$ kg/h;
- Adotou-se número máximo de gerações de 500;
- A partir das considerações e análises feitas para o caso 1 (Nível 1 de produção) relativas aos parâmetros analisados, considera-se os mesmos para esse caso de estudo.

Caso 3: Otimização do Nível 3 de produção

Maximizar: a produtividade de Álcool Cíclico (Q_{AC}), (maximizar Q_{AC})

Sujeito a:

$$100 \leq Q_{r,j} \leq 10000 , \quad j = 1, 2, \dots, 6,$$

$$170 \leq T_0 \leq 210 ,$$

$$0 \leq Q_{cat} \leq 500 ,$$

$$Q_{AC} - 6855,4 \geq 0 ,$$

$$0,076 - Q_{AB} \geq 0 ,$$

$$476,2 - Q_C \geq 0 .$$

- Função objetivo: $f_{\text{objetivo}} = f_{\text{adequação}} = Q_{AC}$;
- Sem função de penalidades;
- Valores reais da produtividade e reagente não reagido do processo Nível 1: $Q_{AC} = 6.855,40 \text{ kg/h}$, $Q_{AB} = 0,076 \text{ kg/h}$, $Q_C = 476,20 \text{ kg/h}$;
- Adotou-se número máximo de gerações de 500;
- A partir das considerações e análises feitas para o caso 1 (Nível 1 de produção) relativas aos parâmetros analisados, considera-se os mesmos para esse caso de estudo.

IV.2 ANÁLISE E INFLUÊNCIA DOS PARÂMETROS DO CÓDIGO GENÉTICO

Todas as simulações das otimizações foram realizadas para os três casos de produção (modos ou níveis de produção) procurando verificar a influência desses parâmetros no desempenho da otimização, ou seja, verificando se há aumento na taxa de Álcool Cíclico mantendo-se ou diminuindo-se os limites de taxas dos reagentes não consumidos (Álcool Benzílico), produto principal (Álcool Cíclico) sub-produtos (Álcool Benzílico não consumido, Cicloalcano e Água). O Álcool Benzílico, por ser o reagente principal e altamente tóxico deve ser limitado pelas condições de operação de cada nível produtivo, caso haja redução das quantidades deste reagente procura-se compensar com vantagens para a produção, desde que haja aumento da quantidade de Álcool Cíclico. O Cicloalcano é um sub-produto secundário não desejado, já que o aumento de sua quantidade (taxas mássicas) evidencia uma decomposição do Álcool Cíclico e isso afetaria e muito o rendimento do processo de produção do produto desejado.

As análises procuraram definir o comportamento da otimização e influência na produtividade de Álcool Cíclico, nas taxas do reagente principal (Álcool Benzílico) e do sub-produto Cicloalcano em cada caso estudado. As respostas (soluções) mostram esse comportamento, a cada variação dos parâmetros genéticos considerados, onde são apresentadas tabelas com a evolução das taxas dos componentes citados (Álcool Cíclico,

Álcool Benzílico e Cicloalcano) e os perfis destes com as variações, além de apresentar a comparação entre os casos otimizados e não otimizados.

IV.2.1 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DO TAMANHO POPULACIONAL, DA FORMA DE CRUZAMENTO E DAS TAXAS DE CRUZAMENTO

Esta análise considerou as recomendações básicas de Carroll (2004) em seu site, para utilização do código genético considerando a situação com busca em nichos, cruzamento uniforme e de um ponto (com taxas variáveis), mutação uniforme e de arraste (ambas com valores fixos) e número de geração igual a 500 (valor fixo utilizado para todas as simulações). A análise foi direcionada para verificar a influência do aumento do tamanho populacional na produtividade do produto de interesse (Álcool Cíclico). Os valores fixados para as taxas de mutação uniforme e de arraste foram de 0,01 e 0,02 respectivamente. Utilizou-se as formas de cruzamento uniforme e de um ponto, com suas respectivas taxas estando entre 0,4 e 0,8 (para ambas as formas de cruzamento).

IV.2.2 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DAS TAXAS DE MUTAÇÃO UNIFORME E DE ARRASTE E DA BUSCA EM NICHOS

Neste tópico as análises para todos os níveis de produção consideraram as variações das taxas de mutação uniforme e de arraste respectivamente e finalizando com a situação sem a utilização de mutação de arraste e a utilização ou não da busca em nichos. A primeira parte considera as taxas de mutação uniforme variáveis (entre 0,001 e 0,1) mantendo-se constante a mutação de arraste em 0,02 e na segunda situação a mutação de arraste é variável (entre 0,001 e 0,1) e a mutação uniforme fica com o valor fixo de 0,01 considerando a operação em busca em nichos. Nesta análise foram considerados apenas os casos com tamanho populacional inicial de 20 e 40 respectivamente ($npz = 20$ e 40), cruzamento uniforme e de um ponto e taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambas as situações.

IV.2.3 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DAS TAXAS DE MUTAÇÃO DE ARRASTE MANTENDO A MUTAÇÃO UNIFORME FIXA E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS

Na seqüência, as análises consideraram a sensibilidade na produção de Álcool Cíclico devido às variabilidades das taxas de mutação de arraste entre 0,001 e 0,1 e considerando a mutação uniforme fixa em 0,01 e desprezando a utilização do operador de busca em nichos. Essas análises fizeram uso do tamanho da população inicial de 20 ($npz = 20$), cruzamento uniforme e de um ponto com suas respectivas taxas de 0,6 e 0,8 para ambos os casos de cruzamento.

IV.2.4 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME MANTENDO A MUTAÇÃO DE ARRASTE FIXA E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS

As simulações realizadas ocorrem da mesma forma do item IV.2.3 apenas havendo a inversão, onde as taxas que variam são referentes às da mutação uniforme (entre 0,001 e 0,1) mantendo-se a mutação de arraste com valor de 0,02 sem a utilização da operação de busca em nichos e com a utilização do tamanho da população inicial de 20. Utilizou-se o cruzamento uniforme e de um ponto com taxas para as taxas de 0,6 e 0,8 para os dois casos.

IV.2.5 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO MUTAÇÃO DE ARRASTE E COM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS

Neste caso as análises são realizadas variando as taxas de mutação uniforme (entre 0,001 e 0,1), tamanho da população inicial de 20 ($npz = 20$), sem a utilização do operador de mutação de arraste (taxa nula), mas considerando o operador de busca em nichos. As

formas de cruzamento foram as mesmas (uniforme e de um ponto) com as taxas de 0,6 e 0,8 para ambos os casos.

IV.2.6 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO MUTAÇÃO DE ARRASTE E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS

Esta análise é praticamente a mesma do item anterior apenas não considerando a operação de busca em nichos. Os outros parâmetros são os mesmos utilizados.

IV.2.7 ANÁLISE DOS PERFIS DOS MELHORES CASOS OTIMIZADOS EM COMPARAÇÃO COM A SITUAÇÃO NÃO OTIMIZADA

Este tópico foi o último a ser considerado para todos os níveis de produção, onde é feita uma comparação entre os melhores casos obtidos pela otimização, um deles utilizando a forma de cruzamento uniforme e o outro o cruzamento de um ponto e comparando estes resultados com a situação não otimizada de cada nível de produção com o objetivo de verificar o comportamento de temperatura no reator, conversão de Álcool Benzílico e Álcool Cíclico, fração molar do produto de interesse (Álcool Cíclico), do reagente principal (Álcool Benzílico) e dos sub-produtos (Cicloalcano e Água) ao longo da distância axial do reator, ou seja, desde o momento da entrada do até a saída do reator.

Capítulo V

Resultados da Otimização

V.1 RESULTADOS DA OTIMIZAÇÃO

Os casos industriais de produção, Níveis 1, 2 e 3 foram considerados para otimização dos parâmetros operacionais do reator, sendo analisadas todas as variações de parâmetros inerentes ao código genético e suas implicações no aumento de produção de Álcool Cíclico (AC) (produto de interesse), controle e minimização das taxas de Álcool Benzfílico (AB) (reagente principal) e Cicloalcano (C) (subproduto indesejado) respectivamente.

As análises realizadas levaram em consideração os parâmetros dos Algoritmos Genéticos, tais como: o tamanho da população e o tipo de cruzamento (cruzamento uniforme (Un) e em um ponto (UP) e suas respectivas variações de taxas).

Além desses, estudou-se também os operadores de mutação (mutação uniforme, comum ou de troca de bits e de arraste) analisando os efeitos das flutuações de suas taxas (sempre variando uma das taxas e mantendo a outra fixa, bem como a influência da não utilização da mutação de arraste).

E por fim a análise da influência do operador de busca em nichos (utilizando ou não esta operação) com flutuações de ambas as taxas de mutação (uniforme e de arraste). Todas estas análises procuraram verificar seus efeitos ao aumento da produtividade, desenvolvida para todos os níveis operacionais de produção.

A partir destas análises e prognósticos verificou-se o comportamento do modelo junto aos parâmetros otimizados procurando analisar desvios consideráveis ou impossibilidades de operação do reator de produção de Álcool Cíclico.

O estudo do tamanho populacional considerou tamanhos de população de 20, 30, 40 e 50 respectivamente. Além disso, foram analisadas as formas de cruzamento uniforme e em um ponto, e suas respectivas variações de taxas entre 0,4 e 0,8.

Para os operadores de mutação analisados (mutação uniforme e de arraste) fez-se a análise de sensibilidade de suas taxas entre os valores de 0,001 a 0,1 (neste tópico foi analisada também a utilização ou não da mutação de arraste no processo de otimização). E por fim o estudo levou em consideração a variabilidade das taxas de mutação (entre 0,001 e 0,1) considerando a utilização ou não do operador de busca em nichos.

As simulações que analisam as variabilidades das taxas de mutação (uniforme e/ou de arraste) utilizando busca em nichos foram realizadas utilizando populações com tamanhos de 20 e 40 respectivamente e quando a análise foi relacionada aos casos sem a busca em nichos e sem mutação de arraste foi utilizado o tamanho da população igual a 20, que possui excelente representatividade.

O número de gerações foi fixado em 500 já que para gerações superiores não foram observadas melhorias na produtividade (valores não apresentados), além da elevação do tempo de execução do código.

V.1.1 ANÁLISE DO NÍVEL 1 DE PRODUÇÃO DE ÁLCOOL CÍCLICO

Neste nível operacional, como em todos os outros a serem analisados posteriormente, as simulações tiveram como objetivo otimizar os parâmetros operacionais do reator de produção de Álcool Cíclico visando o aumento da produtividade de AC e procurando reduzir as taxas de reagente principal (AB) e subproduto (C) utilizando as recomendações básicas na aplicação do código genético. Em conjunto foram realizadas as análises de sensibilidade dos parâmetros genéticos (mais complexa e abrangente) tentando-se verificar a influência destes parâmetros na produtividade de Álcool Cíclico neste nível operacional.

A produção de AC deste nível operacional sem otimização foi de 4.670,00 kg/h (ao final do processo reacional), para o reagente (AB) foi de 0,066 kg/h e o subproduto C teve uma taxa de 232,00 kg/h.

V.1.2 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DO TAMANHO POPULACIONAL, DA FORMA DE CRUZAMENTO E DAS TAXAS DE CRUZAMENTO NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 1 DE PRODUÇÃO

Esta análise considerou a situação com busca em nichos, cruzamento uniforme e em um ponto (com taxas variáveis), mutação uniforme e de arraste (ambas com valores fixos) e número de geração igual a 500 (valor fixo utilizado para todas as simulações).

A análise foi direcionada para verificar a influência do aumento do tamanho populacional na produtividade do produto de interesse (Álcool Cíclico) evitando o aumento das taxas de reagente AB e de subproduto C. Os valores fixados para as taxas de mutação uniforme e de arraste foram de 0,01 e 0,02 respectivamente (valores diferentes daqueles recomendados pelo código genético de Carroll (2004)).

Para este caso (Nível 1 de produção) os resultados são mostrados nas Tabelas 5.1 até 5.10, onde foi analisada a influência do tamanho populacional com a forma de cruzamento uniforme (utilizando tamanhos populacionais de 20, 30, 40 e 50 respectivamente) e a influência da sensibilidade de suas respectivas taxas na produtividade de AC.

Verifica-se que as simulações (em ambas as formas de cruzamento) fornecem resultados (produtividades) próximos, com pequenas variações na taxa de produção do AC, mas que ao serem analisadas do ponto de vista diário ou mensal, a quantidade produzida a mais é muito significativa. Isto pode contribuir para eliminar ou não custos menores que ocorrem nas operações de produção e ou em alguns casos aumentar a lucratividade do processo reacional. As taxas de cruzamento utilizadas ficaram entre 0,4 e 0,8 (para ambas as formas de cruzamento), citadas anteriormente, e outros valores foram testados fora destes limites onde os resultados foram inferiores (não satisfatórios) não possuindo representatividade nas análises de otimização (resultados não apresentados).

Com relação à análise referente ao tamanho populacional observou-se que os melhores resultados foram obtidos nos casos utilizando os tamanhos populacionais de 20 e 40 respectivamente, onde apresentou boa representatividade (melhores produtividades), embora se tenha observado bons resultados com tamanho populacional de 30. O uso do tamanho populacional de 50 evidencia um menor desempenho da otimização (menor produtividade) como pode ser observado nas Tabelas 5.1 a 5.10 e nas Figuras 5.1 a 5.6 na sequência. As Tabelas 5.1 a 5.5 são referentes à análise considerando a forma de cruzamento uniforme. Os resultados obtidos são referentes à saída do reator, ou seja, ao final (na saída) do conjunto dos oito módulos reacionais, e é comparado com a produtividade de AC sem otimização.

O melhor resultado obtido para o caso com cruzamento uniforme foi de 4.740,24 kg/h, com tamanho populacional de 40, e taxa de cruzamento de 0,8. Nesta análise verificou-se uma proximidade entre os vários resultados das simulações.

A diferença entre o melhor e pior caso otimizado entre as taxas de AC foi de 10,79 kg/h, 258,96 kg ao dia e 7.768,80 kg ao mês, sendo um valor muito significativo, evidenciando que o estudo de sensibilidade de parâmetros genéticos pode melhorar o desempenho de uma otimização (a produtividade), podendo tornar o processo reacional mais rentável ou diminuindo consideravelmente os custos operacionais.

Tabela 5.1 – Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 1, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,4.

Nível 1	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,4	4736,14
30	0,4	4737,85
40	0,4	4738,61
50	0,4	4736,93
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	4670,00	

Tabela 5.2 – Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 1, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,5.

Nível 1	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,5	4738,60
30	0,5	4730,08
40	0,5	4737,68
50	0,5	4732,13
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	4670,00	

Tabela 5.3 – Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 1, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,6.

Nível 1	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,6	4734,99
30	0,6	4736,95
40	0,6	4739,38
50	0,6	4735,48
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	4670,00	

Tabela 5.4 – Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 1, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,7.

Nível 1	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,7	4739,47
30	0,7	4737,11
40	0,7	4732,55
50	0,7	4732,44
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	4670,00	

Tabela 5.5 – Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 1, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,8.

Nível 1	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,8	4739,97
30	0,8	4738,13
40	0,8	4740,24
50	0,8	4729,45
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	4670,00	

Na seqüência são apresentados os resultados provenientes das simulações utilizando a forma de cruzamento em um ponto apresentados nas Tabelas 5.6 até 5.10. Os resultados descrevem um desempenho melhor quando comparado com a forma de cruzamento uniforme.

Nesta situação o melhor resultado obtido foi de 4.744,91 kg/h, e ocorreu com tamanho populacional de 40 e taxa de cruzamento de 0,6, onde mais uma vez a proximidade de todos os resultados pôde ser verificada.

A diferença entre o melhor e o pior caso otimizado entre as taxas de AC foi de 8,11 kg/h, significando 194,64 kg ao dia e 5.839,20 kg ao mês de aumento de produtividade de AC, como no caso anterior é um resultado significativo na produção.

Tabela 5.6 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 1, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,4.

Nível 1	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,4	4741,99
30	0,4	4741,57
40	0,4	4743,03
50	0,4	4739,47
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	4670,00	

Tabela 5.7 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 1, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,5.

Nível 1	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,5	4742,04
30	0,5	4742,70
40	0,5	4743,59
50	0,5	4741,51
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	4670,00	

Tabela 5.8 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 1, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,6.

Nível 1	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,6	4742,42
30	0,6	4743,69
40	0,6	4744,91
50	0,6	4736,80
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	4670,00	

Tabela 5.9 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 1, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,7.

Nível 1	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,7	4739,31
30	0,7	4738,67
40	0,7	4740,39
50	0,7	4738,60
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	4670,00	

Tabela 5.10 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 1, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,8.

Nível 1	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,8	4740,71
30	0,8	4737,77
40	0,8	4741,15
50	0,8	4737,20
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	4670,00	

O tamanho populacional influenciou na produtividade de Álcool Cíclico, mas a melhor conclusão foi verificada quanto ao tipo de cruzamento utilizado que fornece o melhor resultado (cruzamento em um ponto). Também pôde se concluir que houve diminuição das taxas de catalisador empregadas no processo reacional (resultado não apresentado).

Entre os melhores resultados obtidos da produtividade de AC, um para cada caso de cruzamento (uniforme e em um ponto), a diferença entre suas taxas ficou em 4,67 kg/h, 112,08 kg ao dia e 3.362,40 kg ao mês a mais na produtividade quando utilizado a forma de cruzamento em um ponto.

Uma diferença importante entre os melhores casos otimizados (relacionados à forma de cruzamento) que devido ao alto valor agregado do produto pode determinar uma vantagem financeira extremamente significativa.

A seguir são apresentadas as Figuras 5.1 até 5.6, que descrevem a análise referenciada ao tamanho populacional e as taxas de cruzamento discutidas anteriormente. As Figuras 5.1 e 5.2 são referentes ao Álcool Cíclico (AC), as Figuras 5.3 e 5.4 da análise do Álcool Benzálico e as Figuras 5.5 e 5.6 ao Cicloalcano (C), para as formas de cruzamento uniforme e em um ponto respectivamente para cada uma das substâncias.

De acordo com os resultados apresentados nas Figuras 5.1 e 5.2 observa-se que os melhores desempenhos (produtividade de AC) foram obtidos utilizando a forma de cruzamento em um ponto para tamanhos populacionais de 20, 30 e 40 respectivamente.

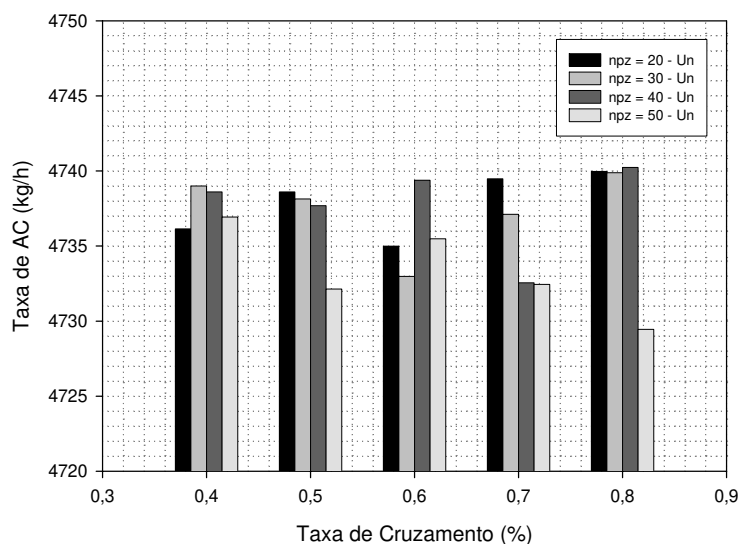


Figura 5.1 – Nível 1 - Análise da taxa de cruzamento e do tamanho da população na taxa de Álcool Cíclico (AC) – Cruzamento Uniforme (Un)

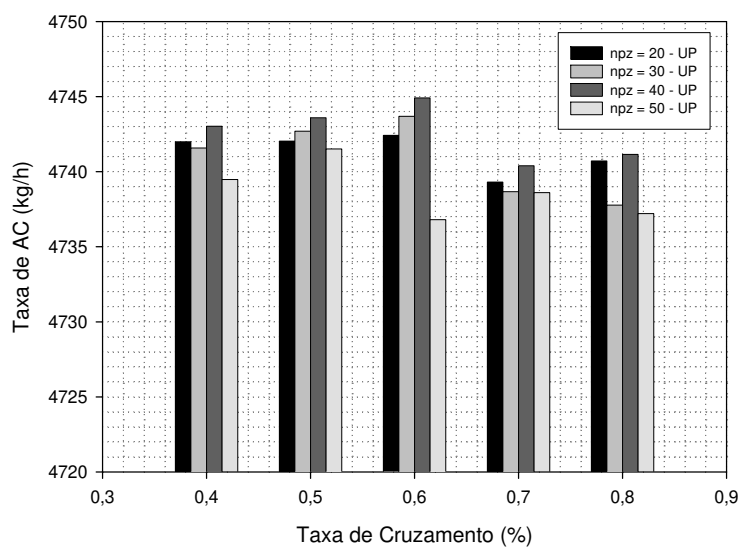


Figura 5.2 – Nível 1 - Análise da taxa de cruzamento e do tamanho da população na taxa de Álcool Cíclico (AC) - Cruzamento em Um Ponto (UP).

Com tamanhos populacionais de 50 o desempenho não foi satisfatório para ambas as formas de cruzamento, onde os resultados na sua grande maioria estão abaixo da média em relação às análises dos casos com outros tamanhos populacionais.

As Figuras 5.3 e 5.4 apresentam os resultados das taxas de AB das simulações considerando ambas as formas de cruzamento.

Observa-se que nas simulações utilizando cruzamento em um ponto (Figura 5.4) as taxas de AB apresentam maiores valores, significando um rendimento menor quando comparado ao caso com cruzamento uniforme (Figura 5.3).

Isso significa que a conversão ao AC não está sendo ideal ou adequada, embora maiores valores das taxas de AC são obtidos pelo caso com cruzamento em um ponto, mas poderia ser maior caso a conversão de AB fosse melhorada.

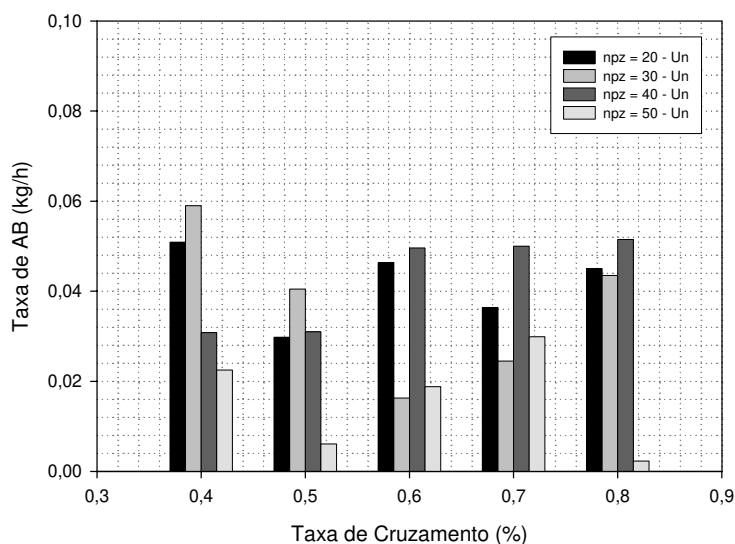


Figura 5.3 – Nível 1 - Análise da Taxa de Cruzamento e do Tamanho da População na Taxa de Álcool Benzílico (AB) - Cruzamento Uniforme (Un).

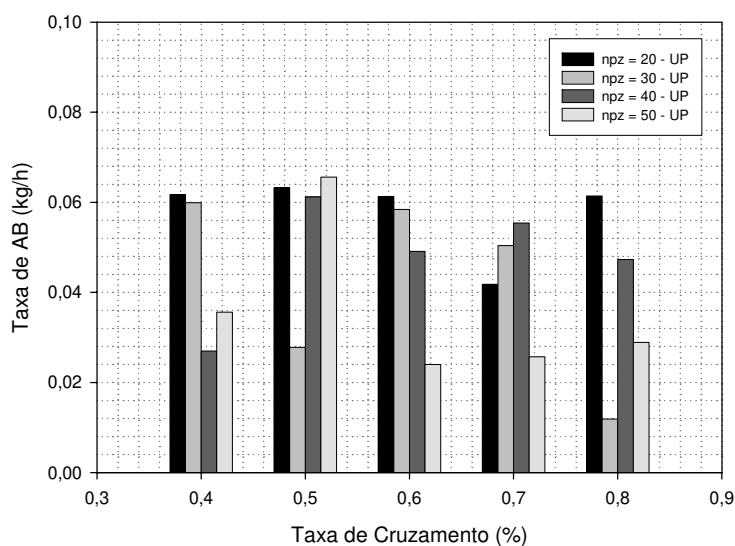


Figura 5.4 – Nível 1 - Análise da Taxa de Cruzamento e do Tamanho da População na Taxa de Álcool Benzílico (AB) - Cruzamento em Um Ponto (UP).

As Figuras 5.5 e 5.6 ilustram os resultados para as taxas de C desta análise. Observa-se que de uma forma geral maiores taxas de C são obtidas quando utilizada a forma de cruzamento uniforme, significando que o produto de interesse AC é decomposto em maior quantidade neste caso. Situação que ocorre em menor intensidade quando a forma de cruzamento em um ponto foi analisada nas simulações.

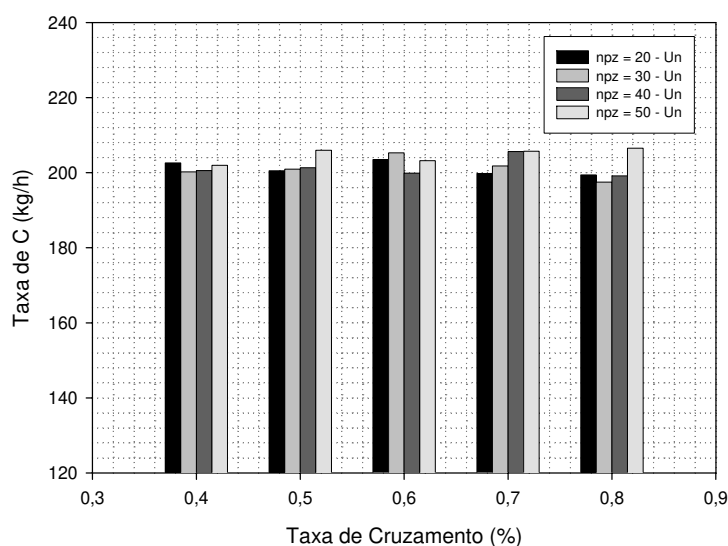


Figura 5.5 – Nível 1 - Análise da Taxa de Cruzamento e do Tamanho da População na Taxa de Cicloalcano (C) - Cruzamento Uniforme (Un).

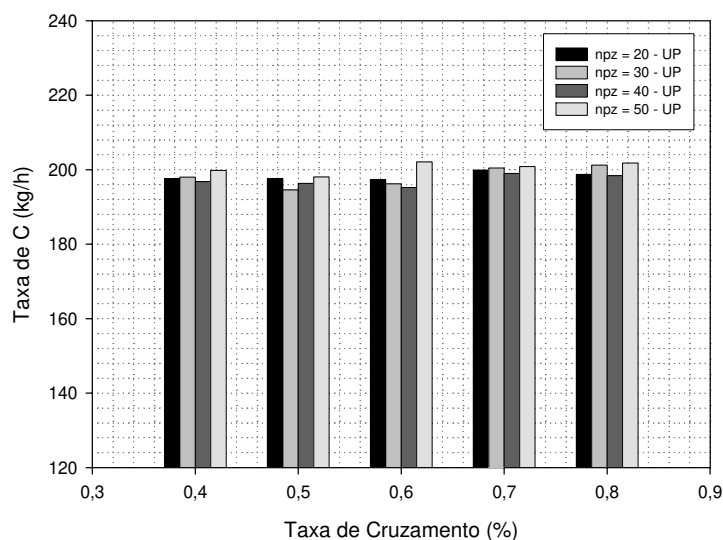


Figura 5.6 – Nível 1 - Análise da Taxa de Cruzamento e do Tamanho da População na Taxa de Cicloalcano (C) - Cruzamento em Um Ponto (UP).

Em síntese, o melhor desempenho neste caso estudado é devido à utilização do cruzamento em um ponto, que fornece maiores taxas de AC, sendo este menos decomposto ao subproduto C, mesmo com um consumo menor do reagente AB, onde outras estratégias operacionais podem ser revistas para uma melhor conversão de AB a AC e em evitar a decomposição de AC a C.

Para a sequência das análises realizadas para o Nível 1 de produção, selecionou-se os tamanhos populacionais de 20 e 40 respectivamente, aliados às taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8, já que as simulações (otimizações) utilizando estes tamanhos populacionais e taxas são bem representativos, onde foram observados os melhores resultados.

Portanto foram utilizados como valores padrões na sequência das simulações de todas as otimizações envolvendo todos os níveis operacionais considerados neste estudo.

V.1.3 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DAS TAXAS DE MUTAÇÃO UNIFORME E DE ARRASTE E DA BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 1 DE PRODUÇÃO

Neste tópico foram realizadas análises considerando as variações das taxas de mutação uniforme e de arraste respectivamente e finalizando com as análises levando-se em consideração a situação sem a utilização de mutação de arraste e a utilização ou não do operador de busca em nichos.

Os resultados evidenciam grandes melhorias no desempenho da otimização sendo observado um aumento considerável nas taxas de Álcool Cíclico e redução da quantidade de catalisador utilizado no processo reacional (resultado não apresentado), sendo assim um grande indicador de diminuição de custos. Além da melhora da produtividade, houve também redução de das taxas de AB e C respectivamente.

V.1.3.1 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME COM BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 1 DE PRODUÇÃO

Nesta etapa do estudo as análises indicaram um aumento das taxas de Álcool Cíclico, evidenciando uma grande sensibilidade no desempenho da simulação quando as taxas de mutação uniforme são variadas, com utilização do operador de busca em nichos.

As simulações foram realizadas considerando os tamanhos populacionais de 20 e 40 respectivamente, cruzamento uniforme e em um ponto, taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambas as formas de cruzamento e as variações das taxas de mutação uniforme na faixa de 0,001 a 0,1, mantendo-se a mutação de arraste com um valor fixo de 0,02 e utilizando a operação com busca em nichos.

As Tabelas 5.11 a 5.14 ilustram os resultados obtidos. As Tabelas 5.11 e 5.12 apresentam os resultados referentes à forma de cruzamento uniforme e por conseguinte, as Tabelas 5.13 e 5.14 os resultados para o cruzamento em um ponto.

Além das tabelas apresentadas, as Figuras 5.7 até 5.12 evidenciam os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) referentes a este nível de produção para ambas as formas de cruzamento.

O melhor resultado para a forma de cruzamento uniforme foi de 4.740,23 kg/h quando o tamanho da população foi de 40, taxa de cruzamento igual a 0,8 e a taxa de mutação uniforme com um valor de 0,01.

Para a situação que utiliza a forma de cruzamento em um ponto o melhor resultado foi de 4.744,91 kg/h quando o tamanho da população foi de 40, taxa de cruzamento igual a 0,6, e taxa de mutação uniforme de 0,01.

Na simulação envolvendo o caso com cruzamento uniforme a diferença entre o melhor e o pior caso otimizado entre as taxas de AC ficou em 17,38 kg/h, sendo uma diferença considerável em termos de aumento da produtividade, ou seja, isso pode representar um aumento de 417,12 kg por dia e 12.513,60 kg por mês na produtividade, um valor extremamente significativo que deve ser considerado.

As Tabelas 5.11 e 5.12 descrevem os resultados, e esses evidenciam a importância da escolha dos parâmetros genéticos adequados, pois em cada caso um dos parâmetros pode promover uma melhoria mais acentuada na produtividade do que outro.

Tabela 5.11 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme e com taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 a 0,100.

<i>npopsiz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	4732,56	0,0195	205,62
	0,005	4736,07	0,0491	202,64
	0,010	4734,99	0,0464	203,55
	0,050	4727,93	0,0022	208,20
	0,100	4725,21	0,0250	209,88
<i>npopsiz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	4730,28	0,0051	207,55
	0,005	4737,42	0,0296	201,53
	0,010	4739,38	0,0496	199,86
	0,050	4729,29	0,0020	208,36
	0,100	4722,85	0,0329	212,89

Tabela 5.12 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme e com taxa de cruzamento de 0,8. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 a 0,100.

<i>npopsiz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	4726,63	0,0047	210,61
	0,005	4737,72	0,0179	201,28
	0,010	4739,97	0,0450	199,36
	0,050	4737,11	0,0295	201,78
	0,100	4729,36	0,0484	208,04
<i>npopsiz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	4732,87	0,0244	205,33
	0,005	4732,36	0,0535	205,75
	0,010	4740,23	0,0515	199,14
	0,050	4736,61	0,0539	202,18
	0,100	4731,08	0,0522	206,76

Nas simulações utilizando a forma de cruzamento em um ponto (Tabelas 5.13 e 5.14) é verificado um aumento na produtividade de AC de 12,16 kg/h entre o melhor e o pior caso otimizado. Sendo assim, ocorre um aumento diário na produtividade de 291,84 kg e 8.755,20 kg ao mês, um valor importante a considerar. Mais uma vez confirma-se que o estudo dos parâmetros genéticos pode alterar significativamente o desempenho de uma otimização.

Tabela 5.13 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 a 0,100.

<i>npopsiz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	4737,30	0,0496	201,60
	0,005	4737,96	0,0270	201,07
	0,010	4742,38	0,0613	197,33
	0,050	4740,91	0,0372	198,59
	0,100	4734,22	0,0444	203,81
<i>npopsiz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	4738,76	0,0333	200,40
	0,005	4740,42	0,0328	199,00
	0,010	4744,91	0,0491	195,22
	0,050	4740,78	0,0563	198,67
	0,100	4732,75	0,0575	205,89

Tabela 5.14 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,8. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 a 0,100.

<i>npopsiz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	4737,63	0,0222	201,36
	0,005	4738,52	0,0603	200,57
	0,010	4740,71	0,0614	198,73
	0,050	4739,72	0,0432	199,58
	0,100	4735,01	0,0447	204,66
<i>npopsiz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	4732,82	0,0035	203,72
	0,005	4739,25	0,0372	200,04
	0,010	4741,15	0,0473	198,38
	0,050	4738,35	0,0398	201,00
	0,100	4734,02	0,0270	205,22

Comparando as simulações entre a forma de cruzamento uniforme e em um ponto, a diferença ocorrida entre estas ficou em 4,68 kg/h e essa diferença em termos diários chega em 112,32 kg e 3.369,60 kg por mês, onde esses valores representam um aumento na produtividade quando se utiliza a forma de cruzamento em um ponto em relação à outra forma de cruzamento.

A análise e escolha correta dos parâmetros e taxas é importante para melhorias do desempenho dos processos reacionais nos estudos de otimização.

A seguir são apresentados os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) em sequência, utilizando as duas formas de cruzamento analisadas (uniforme e em um ponto) para este caso estudado, através das Figuras 5.7 a 5.12.

Observa-se que a maior produtividade de AC ocorre com taxa de mutação uniforme em torno de 0,01, em todas as análises (tamanhos populacionais de 20 e 40 e taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8 respectivamente) após este valor há uma tendência de queda na produtividade na forma de cruzamento uniforme (Figura 5.7).

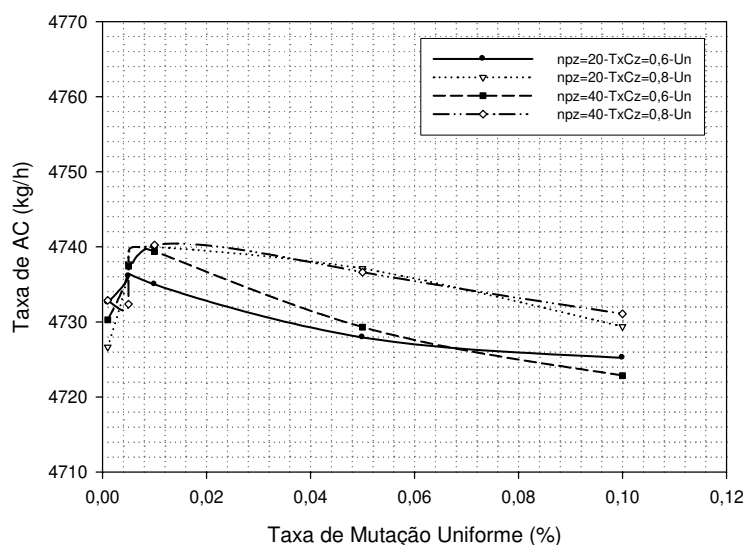


Figura 5.7 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento uniforme (Un).

Na Figura 5.8 utilizando o cruzamento em um ponto verificou-se o mesmo comportamento do caso anterior.

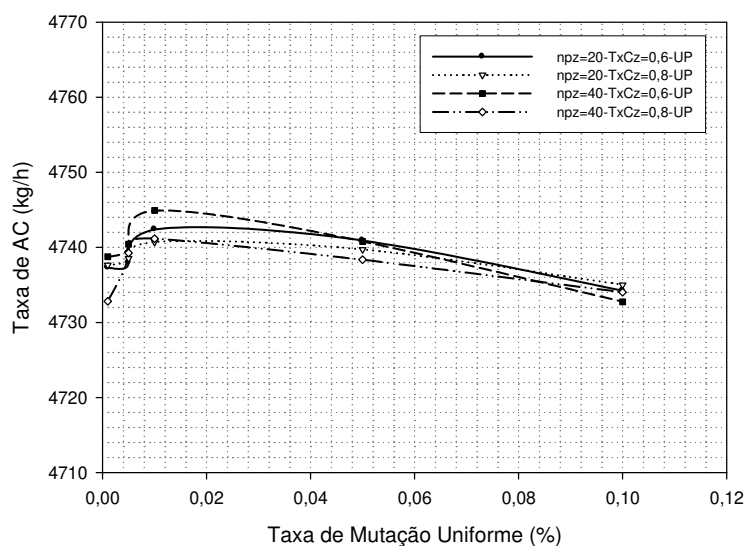


Figura 5.8 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento em um ponto (UP).

As Figuras 5.9 e 5.10 apresentam os perfis das taxas de AB (cruzamentos uniforme e em um ponto respectivamente).

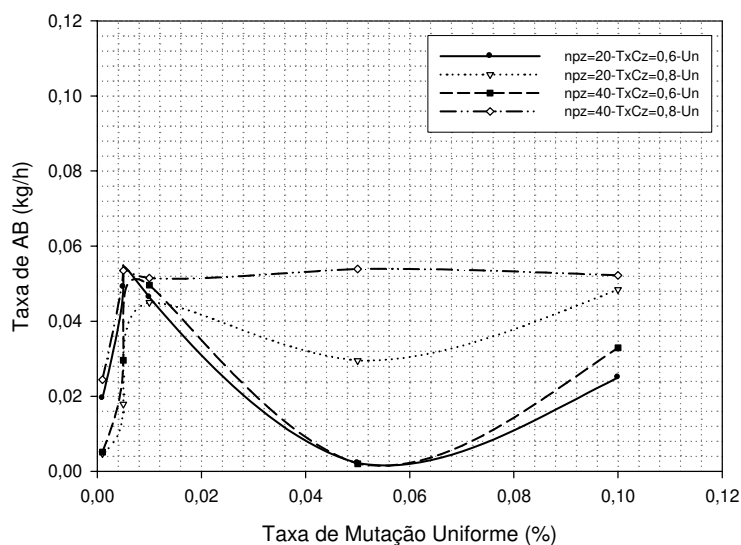


Figura 5.9 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento uniforme (Un).

Observa-se uma tendência de queda a partir da taxa de mutação uniforme de 0,01, com exceção do caso com tamanho populacional de 40, taxa de cruzamento 0,8

(cruzamento uniforme) onde os valores das taxas são praticamente constantes e no caso com cruzamento em um ponto quando é utilizado o tamanho populacional de 40, taxa de cruzamento de 0,6 há uma pequena elevação nos valores das taxas. A partir da taxa de mutação 0,05 a tendência é de aumento para maioria dos casos, com exceção do caso com cruzamento em um ponto utilizando tamanho populacional de 40, taxa de cruzamento de 0,8.

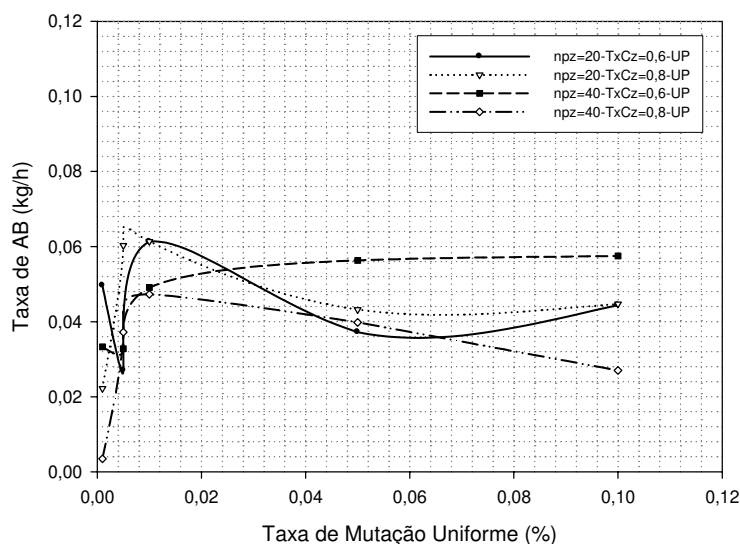


Figura 5.10 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento em um ponto (UP).

As Figuras 5.11 e 5.12 mostram os perfis das taxas de C nas simulações e confirmando as análises anteriores, as menores taxas são obtidas com taxas de mutação em torno de 0,01, onde nas proximidades deste valor são observados as maiores taxas de AC, concluindo-se que há menos decomposição de AC ao C (para ambas as formas de cruzamento).

Quando se utiliza valores superiores à taxa de 0,01 ocorre um aumento das taxas de C como pode ser verificado nas figuras subsequentes. Esta situação está em conformidade com a análise das taxas de AC nas Figuras 5.7 e 5.8, onde os valores de suas taxas diminuem quando as taxas de mutação são superiores a 0,01.

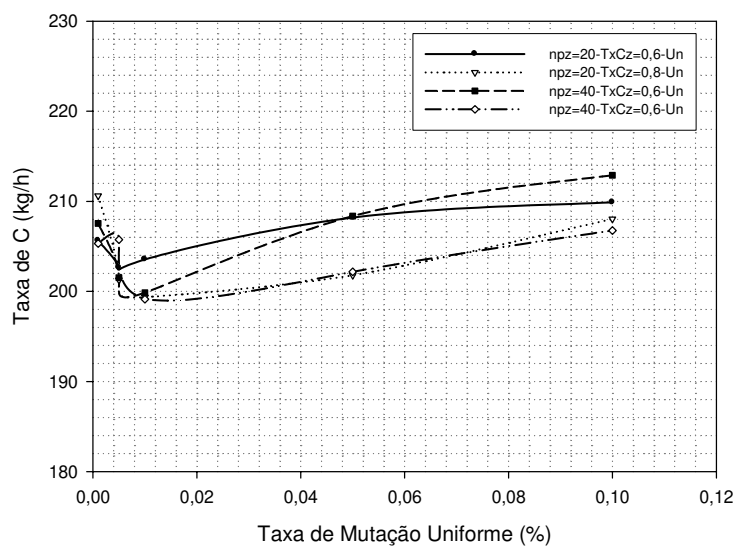


Figura 5.11 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento uniforme (Un).

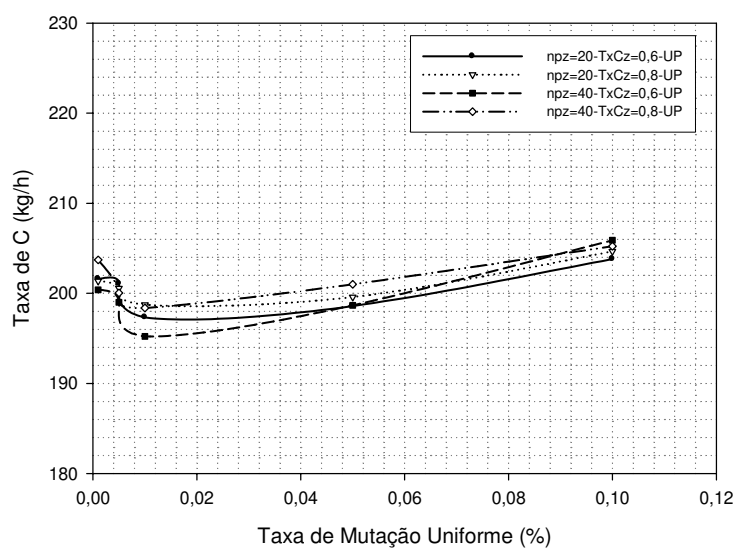


Figura 5.12 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento em um ponto (UP).

V.1.3.2 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE COM BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 1 DE PRODUÇÃO

Neste tópico analisou-se a influência da taxa de mutação de arraste na produtividade de Álcool Cíclico, mantendo-se fixa a taxa de mutação uniforme e considerando o operador de busca em nichos. Foi observado um comportamento semelhante ao obtido na análise de sensibilidade da taxa de mutação uniforme (tópico anterior), embora os resultados (produtividade de AC) tenham sido um pouco mais elevados, fazendo-se concluir que a produtividade de AC foi mais sensível a este operador genético.

Como no caso anterior, as simulações foram realizadas considerando os tamanhos populacionais de 20 e 40, cruzamento uniforme e em um ponto, taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambas as formas de cruzamento, com variações das taxas de mutação de arraste de 0,001 a 0,1, mantendo-se a mutação uniforme com um valor constante de 0,01 e por fim utilizando a operação com busca em nichos.

O melhor resultado para a forma de cruzamento uniforme foi de 4.745,63 kg/h quando o tamanho da população foi de 20, taxa de cruzamento igual a 0,8 e a taxas de mutação uniforme tendo um valor de 0,05. As Tabelas 5.15 e 5.16 respectivamente apresentam esses resultados.

Para a situação que utiliza a forma de cruzamento em um ponto o melhor resultado foi de 4.748,86 kg/h quando o tamanho da população foi de 20, taxa de cruzamento igual a 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,05. As Tabelas 5.17 e 5.18 apresentam os resultados obtidos. As Figuras 5.13 a 5.18 evidenciam os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) em sequência para ambas as formas de cruzamento.

No caso em que se utiliza o cruzamento uniforme (Tabelas 5.15 e 5.16) observa-se uma diferença na produtividade de AC entre o melhor e o pior caso otimizado de 18,38 kg/h, que diariamente pode fornecer 441,12 kg e mensalmente 13.233,60 kg a mais de AC, um valor importante a ser considerado para a produtividade de AC.

Tabela 5.15 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme e com taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 a 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	4736,70	0,0236	202,13
	0,005	4737,58	0,0514	201,37
	0,010	4739,65	0,0463	199,64
	0,050	4729,01	0,0248	208,45
	0,100	4727,25	0,0122	210,89
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	4737,28	0,0385	201,63
	0,005	4737,31	0,0342	201,61
	0,010	4737,30	0,0395	201,62
	0,050	4738,65	0,0405	200,48
	0,100	4732,26	0,0478	206,08

Tabela 5.16 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme e com taxa de cruzamento de 0,8. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 a 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	4731,50	0,0022	206,15
	0,005	4740,84	0,0565	198,63
	0,010	4739,97	0,0450	199,36
	0,050	4745,63	0,0487	194,61
	0,100	4738,66	0,0418	200,08
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	4742,07	0,0406	197,60
	0,005	4740,39	0,0597	199,00
	0,010	4740,23	0,0606	199,14
	0,050	4740,24	0,0391	199,14
	0,100	4735,64	0,0449	204,89

Na análise considerando o cruzamento em um ponto, apresentadas nas Tabelas 5.17 e 5.18 a diferença entre o melhor e o pior caso otimizado entre as taxas de AC ficou em 20,00 kg/h, que representaria um ganho diário de 480,00 kg e mensal de 14.400,00 kg. Confirmando mais uma vez a importância da escolha dos parâmetros e taxas genéticas nas otimizações.

Tabela 5.17 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 a 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	4736,93	0,0208	201,95
	0,005	4744,04	0,0558	195,94
	0,010	4739,77	0,0616	199,52
	0,050	4748,86	0,0419	195,22
	0,100	4728,86	0,0496	204,62
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	4743,80	0,0579	196,14
	0,005	4739,25	0,0415	199,98
	0,010	4741,73	0,0652	197,87
	0,050	4741,38	0,0447	198,18
	0,100	4733,29	0,0592	202,99

Tabela 5.18 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,8. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 a 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	4742,85	0,0653	196,93
	0,005	4739,57	0,0410	199,71
	0,010	4740,89	0,0370	198,60
	0,050	4741,54	0,0627	198,03
	0,100	4736,23	0,0412	202,97
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	4739,41	0,0440	199,84
	0,005	4739,07	0,0424	200,13
	0,010	4738,21	0,0241	200,86
	0,050	4738,11	0,0364	200,94
	0,100	4731,12	0,0504	205,25

Comparando os dois melhores resultados (cruzamento uniforme e em um ponto) a diferença entre as taxas de AC foi de 3,23 kg/h, 77,52 kg ao dia e 2.325,6 kg ao mês a mais, quando se utiliza a forma de cruzamento em um ponto.

Os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) referentes a esta última análise são apresentados pelas Figuras 5.13 e 5.14 (AC), Figuras 5.15 e 5.16 (AB) e Figuras 5.17 e 5.18 (C) respectivamente.

As análises utilizando cruzamento uniforme e em um ponto identificam bons resultados obtidos com taxas de mutação de arraste entre 0,01 e 0,05 (Figuras 5.13 e 5.14 respectivamente).

A exceção fica por conta do caso com cruzamento uniforme utilizando tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6, que tem os valores das taxas menores a partir da taxa de mutação 0,01 e permanecendo constante em valores superiores a 0,05.

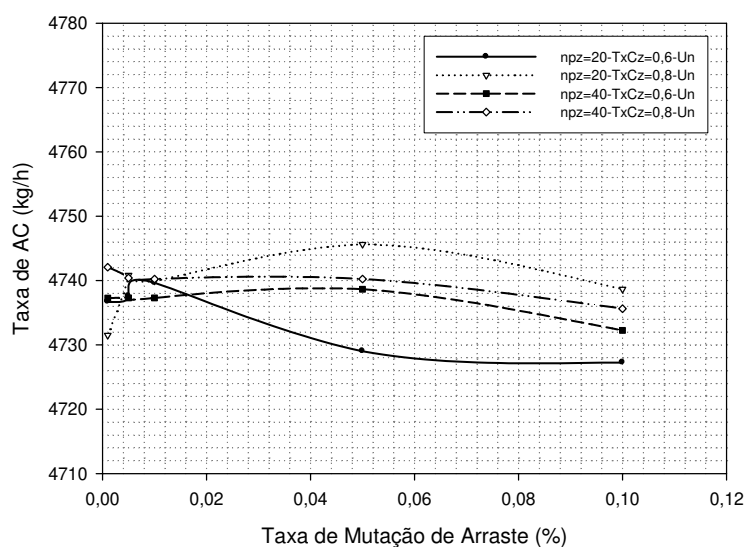


Figura 5.13 – Nível 1 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento uniforme (Un).

Na situação de cruzamento em um ponto (Figura 5.14) apenas o caso com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento 0,6 apresenta um aumento entre as taxas de mutação de 0,01 e 0,05, onde acima deste limite superior ocorre uma acentuada diminuição.

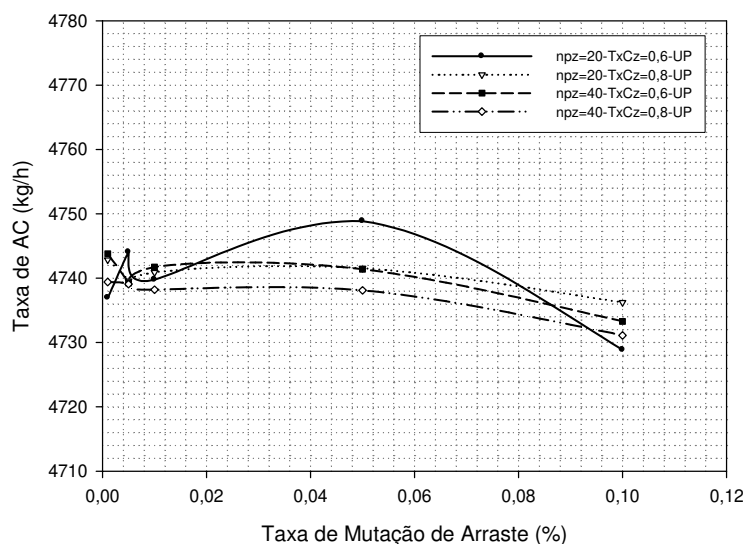


Figura 5.14 – Nível 1 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento em um ponto (UP).

Os perfis de AB (Figuras 5.15 e 5.16), reagente principal, confirmam um maior consumo deste dentro desta faixa de taxas de mutação (entre 0,01 e 0,05).

No cruzamento uniforme entre as taxas de mutação de 0,01 e 0,05 ocorre diminuição das taxas de AB (tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e tamanho populacional de 40 com taxa de cruzamento de 0,8).

Para o caso com cruzamento em um ponto há oscilações entre esses valores de taxas de mutação, onde os casos envolvendo tamanhos populacionais de 20 e 40 e taxas de cruzamento de 0,8 ocorre diminuição das taxas de AB até o valor de taxa 0,05, aumentando após este valor.

Para os outros dois casos (tamanhos populacionais de 20 e 40, taxa de cruzamento de 0,6) há uma diminuição das taxas entre este limite de taxas de mutação (entre 0,01 e 0,05).

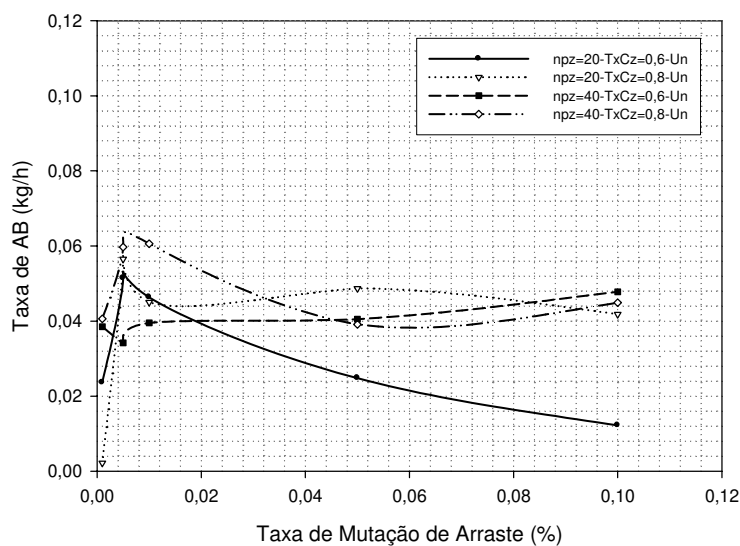


Figura 5.15 – Nível 1 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento uniforme (Un).

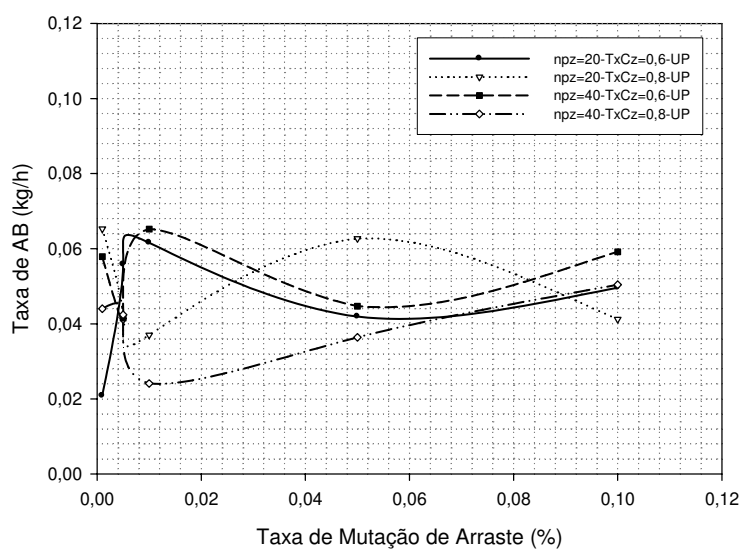


Figura 5.16 – Nível 1 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento em um ponto (UP)

As análises referentes ao subproduto C são apresentadas pelas Figuras 5.17 e 5.18. O subproduto C apresenta os melhores resultados (menores taxas) na mesma faixa de taxa de mutação (entre 0,01 e 0,05) para ambas as formas de cruzamento. A exceção observada ocorre quando é utilizada a situação de cruzamento uniforme com tamanho populacional de 20 e taxa de cruzamento de 0,6 onde há elevação das taxas de C (Figura 5.17).

Após a taxa de mutação 0,05 para este caso há uma tendência da taxa ficar com valor constante. Para os outros casos é observado um aumento das taxas de C a partir da taxa de mutação 0,05.

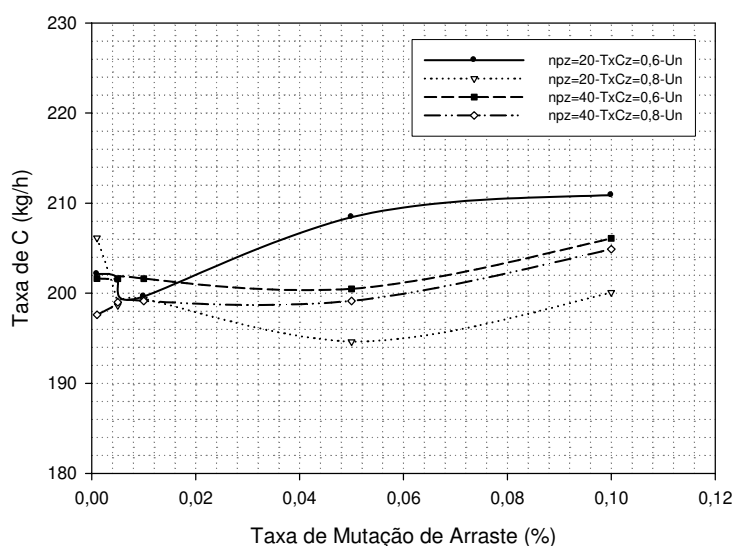


Figura 5.17 – Nível 1 - Influência da mutação de arraste na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento uniforme (Un).

No caso com cruzamento em um ponto as taxas de C sofrem pequenas oscilações em taxas de mutação entre 0,00 e 0,01.

Em quase todos os casos após a taxa de valor de 0,01 os valores permanecem constantes com exceção do caso de tamanho populacional de 20 e taxa de cruzamento de 0,6 que diminui até o valor de 0,05 aumentando após este valor indicando não ser adequado a utilização de taxas de mutação superiores a 0,05 (Figura 5.18).

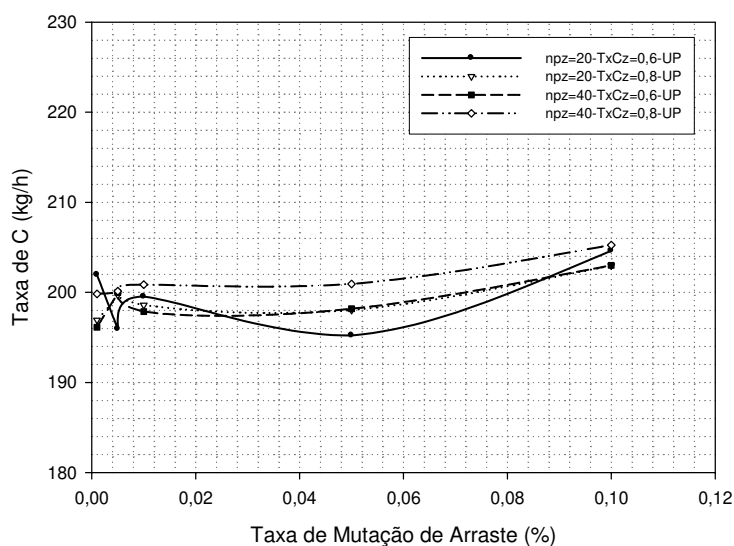


Figura 5.18 – Nível 1 - Influência da mutação de arraste na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento em um ponto (UP).

V.1.3.3 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE MANTENDO A MUTAÇÃO UNIFORME FIXA E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 1 DE PRODUÇÃO

Realizou-se, nesta etapa do trabalho a otimização utilizando a mutação de arraste e uniforme (valor fixo), mas diferenciando-se das análises anteriormente realizadas pela não utilização do operador de busca em nichos. Realizou-se uma verificação de sensibilidade na produtividade de AC variando a taxa de mutação de arraste entre 0,001 e 0,1, utilizando um tamanho populacional de 20, cruzamento uniforme (Un) e em um ponto (UP) com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos.

Os resultados mostram um aumento considerável na taxa de Álcool Cíclico, ou seja, pôde-se observar um aumento na produtividade evidenciando que a não aplicação do operador de busca em nichos conduz de maneira mais rápida e direta um melhor desempenho da otimização. As Tabelas 5.19 e 5.20 apresentam os resultados da simulação

e as Figuras 5.19 a 5.21 ilustram os perfis das taxas mássicas de AC, AB e C respectivamente. Entre os melhores resultados para o cruzamento uniforme, o maior valor da taxa de Álcool Cíclico obtida foi de 4.756,01 kg/h utilizando tamanho da população inicial de 20, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação de arraste de 0,05.

Utilizando a forma de cruzamento em um ponto o melhor valor encontrado foi de 4.758,65 kg/h com tamanho da população inicial de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação de arraste de 0,01.

A análise utilizando cruzamento uniforme (Tabela 5.19) apresenta uma diferença de produtividade de AC entre o melhor e o pior caso otimizado de 17,25 kg/h, que representaria 414,00 kg ao dia e 12.420,00 kg ao mês. Esta diferença é muito importante.

Tabela 5.19 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 a 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Uniforme	0,001	4746,55	0,0175	188,57
	0,005	4754,68	0,0366	187,02
	0,010	4754,96	0,0397	186,78
	0,020	4754,82	0,0358	186,72
	0,050	4755,39	0,0388	185,65
	0,100	4742,22	0,0422	189,81
npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Uniforme	0,001	4744,73	0,0657	195,35
	0,005	4754,94	0,0337	186,80
	0,010	4754,22	0,0348	187,40
	0,020	4754,96	0,0402	186,78
	0,050	4756,01	0,0357	184,82
	0,100	4738,76	0,0510	191,79

A otimização com a forma de cruzamento em um ponto (Tabela 5.20) obteve uma diferença entre o melhor e o pior caso otimizado de 12,21 kg/h, 293,04 kg ao dia e 8.791,20 kg ao mês em aumento da produtividade de AC.

Tabela 5.20 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 a 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	4750,34	0,0615	190,63
	0,005	4755,50	0,0398	186,33
	0,010	4758,65	0,0680	183,65
	0,020	4757,12	0,0684	184,70
	0,050	4756,31	0,0676	185,88
	0,100	4746,44	0,0691	191,11
npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	4754,52	0,0373	187,15
	0,005	4755,00	0,0384	186,74
	0,010	4755,09	0,0387	186,67
	0,020	4756,05	0,0392	185,62
	0,050	4755,22	0,0378	187,11
	0,100	4747,22	0,0459	190,02

Entre os melhores resultados obtidos (do cruzamento uniforme e em um ponto) a diferença entre suas taxas de AC foi de 2,64 kg/h, 63,36 kg ao dia e 1.900,80 kg ao mês. Essa diferença a mais ocorre quando utiliza-se o cruzamento em um ponto.

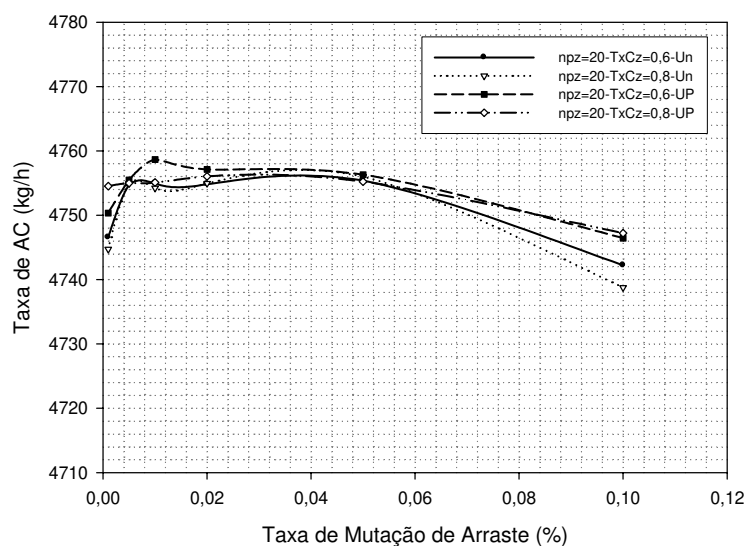


Figura 5.19 – Nível 1 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação uniforme fixa e sem nichos.

Esta análise evidencia que os melhores resultados da produtividade de AC ocorrem na faixa de taxa de mutação de arraste entre 0,01 e 0,05 em ambos os casos (cruzamento uniforme e em um ponto respectivamente) conforme pode ser observado na Figura 5.19.

As taxas de AB a partir do valor de taxa de mutação de arraste de 0,01 permanecem constantes para as duas formas de cruzamento (Figura 5.20). No caso com tamanho populacional de 20 e taxa de cruzamento 0,6 com cruzamento em um ponto há uma elevação quando a taxa de mutação de arraste vai a 0,01 e após esse permanece constante, onde nesta situação o valor da taxa de AB é superior aos demais, indicando menos conversão de AB a AC.

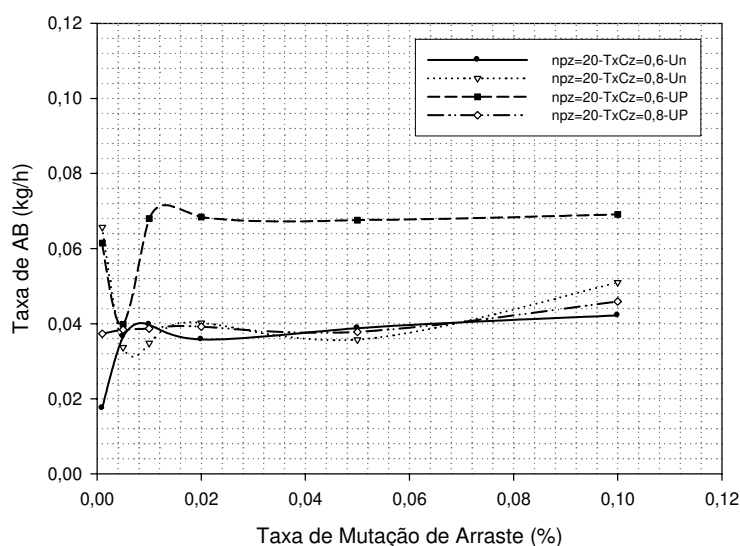


Figura 5.20 – Nível 1 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação uniforme fixa e sem nichos.

As taxas obtidas para o subproduto C possuem valores menores quando a taxa de mutação de arraste está próxima de 0,01 permanecendo constante a partir deste valor até 0,05 (Figura 5.21). Isso indica maior produtividade de AC.

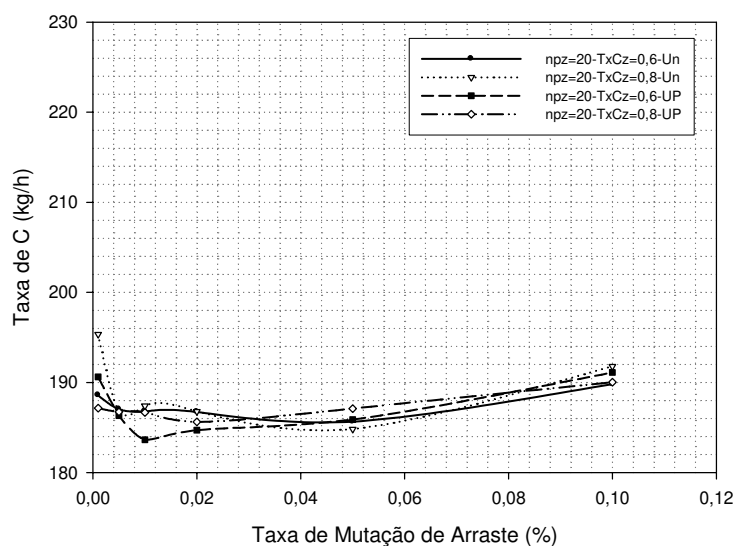


Figura 5.21 – Nível 1 - Influência da mutação de arraste na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação uniforme fixa e sem nichos.

V.1.3.4 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME MANTENDO A MUTAÇÃO DE ARRASTE FIXA E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 1 DE PRODUÇÃO

Esta análise considera a variação da mutação uniforme entre 0,001 e 0,1, fixando a taxa de mutação de arraste em 0,02 e não utilizando o operador de busca em nichos. Fez-se uma verificação de sensibilidade na produtividade de AC utilizando um tamanho da população de 20, cruzamento uniforme (Un) e em um ponto (UP) com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos.

De acordo com o caso anterior (sensibilidade em relação à variação da taxa de mutação de arraste) observou-se que os resultados indicaram um considerável aumento na taxa de Álcool Cíclico (produtividade de AC), evidenciando que a não aplicação do operador de busca em nichos conduz de maneira mais rápida e direta os resultados requeridos (ou sua proximidade).

A utilização da busca em nichos pode ser de grande utilidade quando o número de gerações é superior ao utilizado (resultados não apresentados).

As Tabelas 5.21 e 5.22 apresentam os resultados da simulação e as Figuras 5.22 a 5.24 ilustram os perfis de Álcool Cíclico (AC), de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) respectivamente. Esta análise proporcionou resultados bem expressivos, na produtividade de Álcool Cíclico em comparação com as outras análises relatadas até este tópico.

Para o cruzamento uniforme o maior valor da taxa de Álcool Cíclico foi de 4.760,27 kg/h utilizando tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação de uniforme de 0,001.

Para a forma de cruzamento em um ponto o melhor valor encontrado foi de 4.757,95 kg/h com tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação uniforme de 0,005.

Nas simulações envolvendo o cruzamento uniforme a diferença de produtividades de AC entre o melhor e o pior caso otimizado ficou em 21,39 kg/h, 513,36 kg ao dia ou 15.400,80 kg ao mês para a produtividade de AC, um valor alto, tornando claro que a escolha correta de parâmetros e taxas é significativa para a produtividade de AC.

Para a simulação com cruzamento em um ponto o aumento entre o melhor e o pior caso otimizado foi em torno de 17,84 kg/h, 428,16 kg ao dia e 12.844,80 kg ao mês. Como no caso do cruzamento uniforme, a importância da escolha correta dos parâmetros e suas respectivas taxas é muito importante para melhoria do desempenho. O estudo de sensibilidade dos parâmetros é relevante para melhoria do desempenho reacional do processo, elevando consideravelmente a produção.

Tabela 5.21 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 a 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	4760,27	0,0563	182,26
	0,005	4756,00	0,0399	185,67
	0,010	4754,56	0,0361	186,98
	0,050	4741,86	0,0539	197,77
	0,100	4738,88	0,0577	198,45
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	4754,16	0,0350	187,45
	0,005	4758,00	0,0500	184,22
	0,010	4755,42	0,0394	186,03
	0,050	4742,66	0,0619	197,09
	0,100	4739,89	0,0698	199,22

Tabela 5.22 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 a 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	4756,71	0,0444	185,30
	0,005	4755,20	0,0377	186,57
	0,010	4757,14	0,0469	184,94
	0,050	4744,26	0,0606	195,75
	0,100	4740,56	0,0677	197,22
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	4757,43	0,0429	184,65
	0,005	4757,95	0,0571	184,25
	0,010	4755,02	0,0399	186,73
	0,050	4742,71	0,0667	197,05
	0,100	4740,11	0,0697	199,39

A diferença entre as taxas de AC entre os melhores casos obtidos (cruzamento uniforme e em um ponto) foi de 2,32 kg/h, 55,68 kg ao dia e 1.670,40 kg ao mês a mais, quando se utiliza a forma de cruzamento uniforme. As Figuras 5.22 a 5.24 apresentam os perfis das simulações para os componentes AC, AB, e C respectivamente. O produto de interesse AC possui melhor e maior produtividade ao redor da taxa de mutação uniforme de

valor 0,01, onde a partir deste, tende a diminuir. Esta situação é observada em todos os casos simulados para os dois tipos de cruzamento (Figura 5.22).

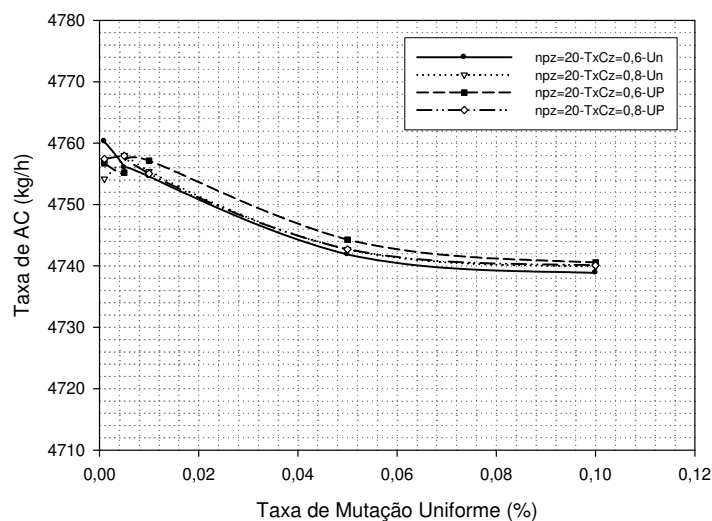


Figura 5.22 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação de arraste fixa e sem nichos.

O reagente principal AB e o subproduto C atingem as menores taxas também em torno desta taxa de mutação (0,01) confirmando assim maior consumo de AB e menor decomposição de C (Figuras 5.23 e 5.24 respectivamente) sugerindo maior produtividade de AC.

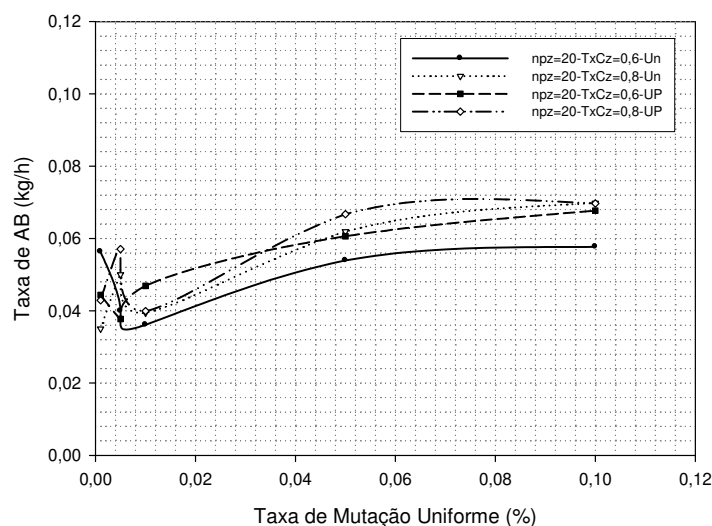


Figura 5.23 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação de arraste fixa e sem nichos.

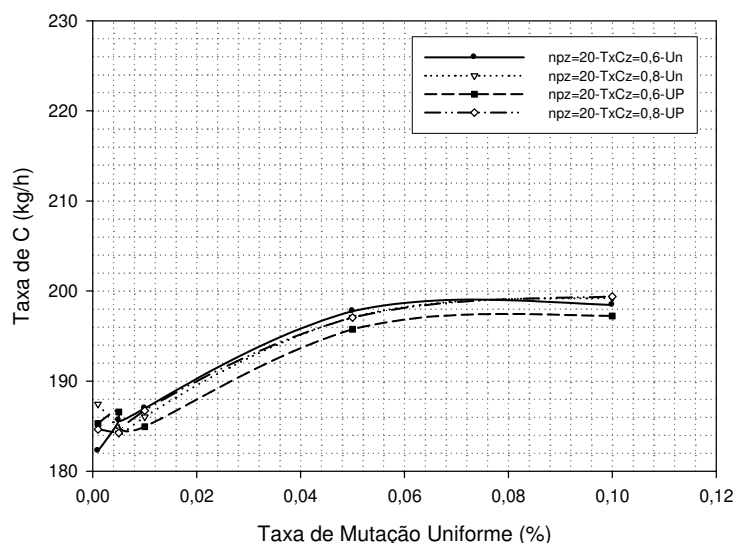


Figura 5.24 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação de arraste fixa e sem nichos.

Quando as taxas de mutação atingem valores superiores a 0,01, o desempenho reacional não é favorável, pois verifica-se um aumento das taxas de C em consequência da maior decomposição de AC.

Nestes dois últimos tópicos as análises sem considerar o operador de busca em nichos, apresentaram resultados semelhantes para o estudo de sensibilidade das taxas de mutação de arraste e de mutação uniforme.

O melhor resultado obtido ocorreu quando a taxa de Álcool Cíclico atingiu o valor de 4.760,27 kg/h especificamente quando foi realizada a variação das taxas de mutação uniforme com o valor de 0,001, tamanho da população de 20, cruzamento uniforme com taxa de 0,6, citados anteriormente.

V.1.3.5 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO MUTAÇÃO DE ARRASTE E COM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 1 DE PRODUÇÃO

A análise neste tópico é realizada procurando verificar a sensibilidade na produtividade de Álcool Cíclico quando se varia a taxa de mutação uniforme não considerando a mutação de arraste, mas fazendo-se uso da operação de busca em nichos. A faixa de variação da mutação uniforme ficou entre 0,001 e 0,1 como nas outras análises, utilizando um tamanho da população de 20, cruzamento uniforme (Un) e em um ponto (UP) com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos.

Os resultados indicam valores menores para a taxa de Álcool Cíclico em comparação com as outras análises feitas até então (embora tenha ocorrido aumento na produtividade em relação à operação sem otimização), evidenciando que esta classe da análise não é tão eficiente quanto as anteriores. As Tabelas 5.23 e 5.24 apresentam os resultados da simulação e as Figuras 5.25 a 5.27 ilustram os perfis de Álcool Cíclico (AC), de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C).

No cruzamento uniforme o maior valor da taxa de Álcool Cíclico foi de 4.741,74 kg/h utilizando tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação uniforme de 0,01. Para a forma de cruzamento em um ponto o melhor valor encontrado foi de 4.742,82 kg/h com tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,01. Para simulação considerando o cruzamento uniforme a diferença entre as produtividades de AC entre o melhor e o pior caso otimizado foi de 15,16 kg/h, 363,84 kg ao dia e 10.915,20 kg ao mês, valores expressivos em termos de produtividade que não podem ser desconsiderados quando se estuda a forma de cruzamento uniforme. A Tabela 5.23 apresenta os resultados do caso de cruzamento uniforme.

Tabela 5.23 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e com busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 a 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,00		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	4732,00	0,0291	206,07
	0,005	4736,32	0,0152	202,46
	0,010	4736,62	0,0483	202,18
	0,050	4734,00	0,0429	204,42
	0,100	4728,29	0,0401	207,41
npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,00		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	4738,20	0,0584	200,84
	0,005	4739,77	0,0534	199,53
	0,010	4741,74	0,0431	197,88
	0,050	4728,83	0,0429	203,79
	0,100	4726,58	0,0481	208,37

Utilizando cruzamento em um ponto a diferença de produtividades observada entre o melhor e o pior caso otimizado chegou a 10,50 kg/h, 252,00 kg ao dia e 7.560,00 kg ao mês (de AC). Na Tabela 5.24 é apresentado os resultados deste caso analisado.

Tabela 5.24 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e com busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 a 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,00		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	4735,46	0,0147	203,19
	0,005	4740,98	0,0356	198,53
	0,010	4742,82	0,0432	196,98
	0,050	4740,54	0,0521	198,88
	0,100	4733,69	0,0368	205,13
npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,00		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	4736,19	0,0149	202,57
	0,005	4740,95	0,0598	198,53
	0,010	4741,52	0,0404	198,07
	0,050	4741,45	0,0563	198,11
	0,100	4732,32	0,0467	205,88

Entre os melhores casos obtidos (cruzamento uniforme e em um ponto) a diferença entre os valores de suas taxas de AC foi de 1,08 kg/h, 25,92 kg ao dia e 777,60 kg ao mês a mais de AC quando a forma de cruzamento em um ponto é utilizada. Neste tópico com taxa de mutação uniforme de 0,01, as simulações evidenciaram maior produtividade de AC (Figura 5.25), onde a partir deste valor ocorre diminuição de suas taxas (AC).

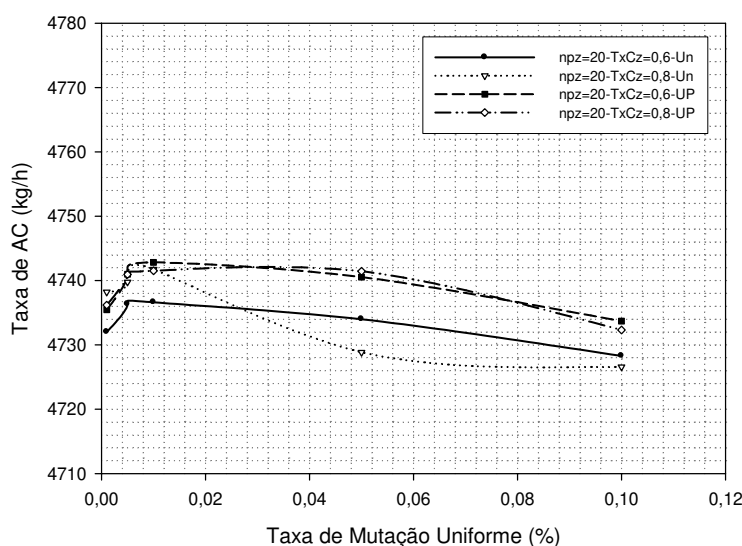


Figura 5.25 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e com busca em nichos.

O reagente AB em baixas taxas de mutação (menores que 0,01) apresenta um perfil de taxas oscilatório, onde a partir de 0,01 há uma tendência de estabilidade (Figura 5.26). Os perfis indicam que taxas de mutação menores que 0,01 podem ser adequados para um consumo deste promovendo assim maior produtividade de AC, que pode ser confirmado pelo perfil de taxas de C apresentado na Figura 5.27, onde é observada uma pequena tendência para o aumento dessas taxas (subproduto C) a partir do valor de taxa de mutação de 0,01.

Com taxas de mutação superiores a 0,05 observa-se diminuição das taxas de AB, ficando constante o caso de cruzamento uniforme que envolve o tamanho populacional de 20 e taxa de cruzamento 0,8.

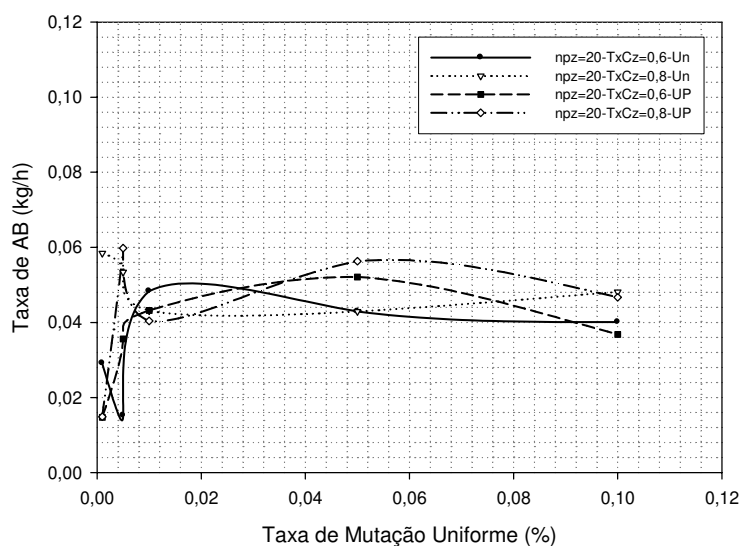


Figura 5.26 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e com busca em nichos.

A Figura 5.27 apresenta o perfil de taxas de C e os menores valores ocorrem ao redor da taxa de mutação de 0,01, aumentando a partir desta, sendo assim uma situação não desejada. Esta análise identifica o valor de taxa de mutação uniforme em torno de 0,01, como ideal para um bom desempenho reacional.

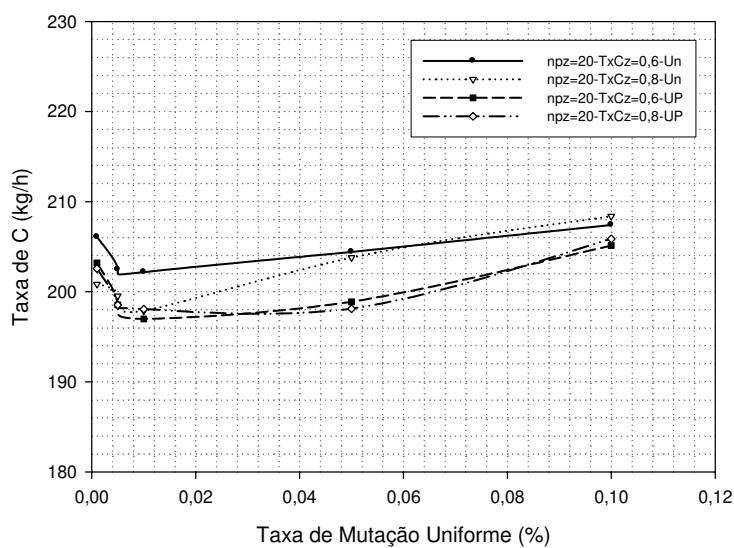


Figura 5.27 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e com busca em nichos.

V.1.3.6 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO MUTAÇÃO DE ARRASTE E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 1 DE PRODUÇÃO

Nesta última análise de sensibilidade na produtividade de Álcool Cíclico, não foram utilizadas a mutação de arraste e o operador de busca em nichos. A análise considerou como em muitas outras, a variação das taxas de mutação uniforme entre 0,001 e 0,1, utilizando também o mesmo tamanho populacional de 20, cruzamento uniforme (Un) e em um ponto (UP) com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos.

Os resultados indicam um bom desempenho em uma faixa intermediária para as taxas de Álcool Cíclico em comparação com as outras análises realizadas até então, evidenciando mais uma vez a eficiência da metodologia aplicada. As Tabelas 5.25 e 5.26 apresentam os resultados da simulação para as duas formas de cruzamento e as Figuras 5.28 a 5.30 ilustram os perfis de Álcool Cíclico (AC), de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) respectivamente.

O melhor resultado para a taxa de Álcool Cíclico, ocorreu quando foi utilizada a forma de cruzamento uniforme tendo um valor de 4.745,57 kg/h, com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,01. Para o caso com a forma de cruzamento em um ponto, o melhor valor obtido para a taxa de AC foi de 4.744,80 kg/h com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação uniforme de 0,01, onde mais uma vez faz-se notar a pequena diferença (mas importante na produtividade ao longo do tempo) entre os valores de taxas de AC otimizadas de ambas as formas de cruzamento como pode ser verificada na seqüência. Na simulação considerando o cruzamento uniforme a diferença de produtividades de AC entre o melhor e o pior caso otimizado foi de 7,02 kg/h, 168,48 kg ao dia e 5.054,40 kg ao mês, valores expressivos em termos de produtividade os quais não são desprezados.

Tabela 5.25 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 a 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	<i>0,001</i>	4738,55	0,0399	200,57
	<i>0,005</i>	4741,93	0,0623	197,70
	<i>0,010</i>	4745,57	0,0660	194,64
	<i>0,050</i>	4741,23	0,0579	198,31
	<i>0,100</i>	4739,69	0,0494	201,29
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	<i>0,001</i>	4741,89	0,0624	197,74
	<i>0,005</i>	4744,27	0,0631	195,74
	<i>0,010</i>	4744,92	0,0659	195,19
	<i>0,050</i>	4744,27	0,0602	195,74
	<i>0,100</i>	4740,24	0,0598	199,09

Quando a simulação foi realizada com a forma de cruzamento em um ponto, a diferença de produtividades de AC observada entre o melhor e o pior caso otimizado das foi de 8,35 kg/h, 200,40 kg ao dia e 6.012,00 kg ao mês (de AC). A Tabela 5.26 apresenta os resultados deste caso analisado (cruzamento em um ponto).

Tabela 5.26 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 1 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 a 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	<i>0,001</i>	4744,42	0,0651	195,61
	<i>0,005</i>	4743,32	0,0506	196,55
	<i>0,010</i>	4744,76	0,0659	195,32
	<i>0,050</i>	4743,59	0,0633	196,31
	<i>0,100</i>	4738,67	0,0526	201,53
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	<i>0,001</i>	4741,65	0,0623	197,94
	<i>0,005</i>	4744,72	0,0645	195,36
	<i>0,010</i>	4744,80	0,0660	195,29
	<i>0,050</i>	4743,71	0,0640	196,20
	<i>0,100</i>	4736,45	0,0592	200,21

Neste tópico considerando os melhores casos otimizados, onde cada um desses envolvendo uma forma de cruzamento (uniforme e em um ponto), a diferença entre suas taxas de AC foi de 0,77 kg/h, 18,48 kg ao dia e 554,40 kg ao mês a mais, quando se utiliza a forma de cruzamento uniforme. A Figura 5.28 apresenta o perfil das taxas de AC.

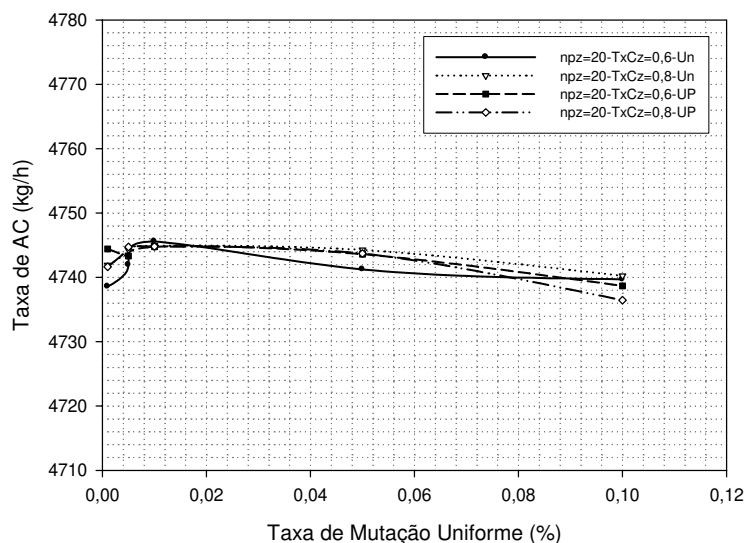


Figura 5.28 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e busca em nichos.

Os melhores valores são identificados na taxa de mutação uniforme com o valor de 0,01 e a partir deste há uma diminuição da produtividade. Esta análise identifica uma grande proximidade entre os diversos casos analisados.

As taxas de AB aumentam em valores de taxas de mutação inferiores a 0,01 (taxa de mutação uniforme), a exceção é o caso que envolve tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento 0,6 (cruzamento em um ponto) que oscila, e em valores superiores a 0,01 (taxa de mutação) ocorre diminuição dessas. Essa situação já estaria de acordo com os objetivos da simulação que procura melhorar o consumo de AB, convertendo a AC e procurando evitar a decomposição deste produto de interesse para formação de C. Os perfis são apresentados na Figura 5.29.

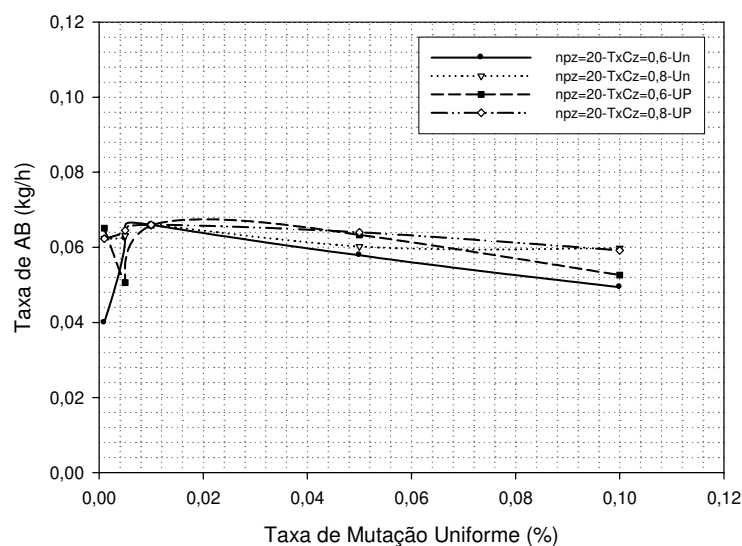


Figura 5.29 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e busca em nichos.

Os perfis do subproduto C (Figura 5.30) evidenciam a tendência discutida anteriormente, ou seja, as menores taxas de C ocorrem em taxas de mutação em torno de 0,01, portanto indicando menor decomposição do produto de interesse (AC).

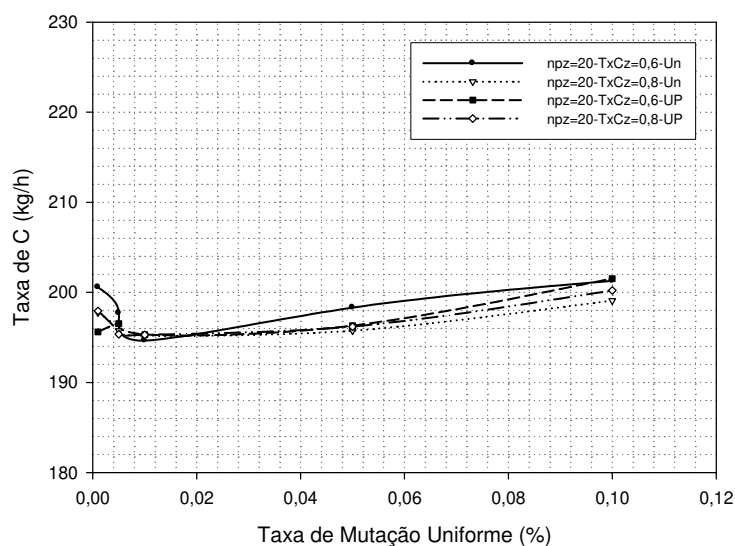


Figura 5.30 – Nível 1 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e busca em nichos.

Valores de taxa de mutação acima de 0,01 favorecem a formação de C e em consequência menor quantidade de AC (maior decomposição de AC a C), tornando assim o processo reacional com desempenho menor.

V.1.4 SÍNTESE DAS ANÁLISES DO NÍVEL 1 DE PRODUÇÃO

Foram selecionados os dois melhores casos simulados, um deles considerando a forma de cruzamento uniforme e o outro em um ponto respectivamente, que forneceram os melhores desempenhos na otimização (melhores produtividades de Álcool Cíclico) em todas as análises realizadas. A Tabela 5.27 apresenta os resultados da otimização para os dois melhores casos utilizando as duas formas de cruzamento.

Em síntese o melhor caso utilizando cruzamento uniforme foi o que considerou o tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,6, não utilizando a busca em nichos, tendo a taxa de mutação de arraste um valor constante de 0,02, a taxa de mutação uniforme variável com o valor de 0,001 e 500 gerações, resultados estes provenientes da análise do item V.1.3.4.

As taxas dos componentes principais obtidas pela otimização foram: 4.760,27 kg/h (Álcool Cíclico - AC), 0,056 kg/h (Álcool Benzílico - AB) e 182,26 kg/h (Cicloalcano - C). Este resultado foi o melhor obtido entre todas as simulações relativas ao Nível 1 de produção (incluindo aquelas com a utilização da forma de cruzamento em um ponto).

O melhor caso envolvendo a forma de cruzamento em um ponto considerou tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6, sem a utilização da busca em nichos, taxa de mutação uniforme constante com valor de 0,01, taxa de mutação de arraste variável no valor de 0,01 e número de gerações de 500, resultados provenientes do item V.1.3.3.

As taxas dos componentes principais obtidos pela otimização foram: 4.758,65 kg/h (Álcool Cíclico - AC), 0,065 kg/h (Álcool Benzílico - AB) e 183,65 kg/h (Cicloalcano - C).

Tabela 5.27 – Síntese dos resultados das simulações do Nível 1, apresentando os valores dos parâmetros operacionais otimizados para os dois melhores casos - cruzamentos uniforme e em um ponto.

Nível 1			
		<i>GA(20 - 0,6 - 0,001 - 0,02 - 500)</i>	<i>GA(20 - 0,6 - 0,01 - 0,01 - 500)</i>
<i>Parâmetros Operacionais</i>	<i>Não Otimizado</i>	<i>Uniforme Otimizado</i>	<i>Um Ponto Otimizado</i>
Q_{r1}	2520,00	100,60	130,82
Q_{r2}	2590,00	408,79	402,14
Q_{r3}	2760,00	486,14	483,12
Q_{r4}	360,00	407,58	365,88
Q_{r5}	520,00	100,00	104,23
Q_{r6}	290,00	3203,00	3199,98
T_0	158,00	210,00	210,00
Q_{cat}	217,00	129,16	131,51
Q_{AC}	4670,00	4760,27	4758,65
Q_{AB}	0,066	0,056	0,065
Q_C	232,00	182,26	183,65
Consumo de Q_{r1} 's (kg/h)	9040,00	4706,11	5027,68

Observou-se também, uma pequena redução da quantidade de Álcool Benzílico (AB) de 0,066 para 0,056 kg/h (redução de 0,01 kg/h, 0,24 kg ao dia ou 7,20 kg por mês) utilizando cruzamento uniforme e de 0,066 para 0,065 kg/h (0,001 kg/h, 0,024 kg ao dia, ou 0,72 kg por mês) para a situação quando utilizado o cruzamento em um ponto.

Com relação às correntes mássicas de Cicloalcano (C), utilizando cruzamento uniforme houve uma considerável redução de 232,00 para 182,26 kg/h (redução de 49,74 kg/h, 1.193,76 kg por dia e 35.812,80 kg ao mês) e de 232,00 para 183,65 kg/h (redução de 48,35 kg/h, 1.160,40 kg por dia e 34.812,00 kg ao mês) quando utilizado o cruzamento em um ponto. Observa-se através da Tabela 5.27 o aumento da quantidade de Álcool Cíclico obtida após a aplicação da metodologia de otimização utilizando os algoritmos genéticos. Para o caso que considera o cruzamento uniforme houve um aumento de 90,27 kg/h, 2.166,48 kg ao dia e 64.994,40 kg por mês (de 4.670,00 para 4.760,27 kg/h) e quando

aplicado o cruzamento em um ponto houve um aumento de 88,65 kg/h, 2.127,60 kg ao dia e 63.828,00 kg por mês (de 4.670,00 para 4.758,65 kg/h).

As taxas de catalisador utilizadas no processo reacional, diminuem em todas as simulações. No caso utilizando cruzamento uniforme a diminuição ocorreu de 217,00 kg/h para 129,16 kg/h (redução de 87,84 kg/h, 2.108,16 kg por dia e 63.244,80 kg ao mês) e para a forma de cruzamento em um ponto a redução foi de 217,00 kg/h para 131,51 kg/h (redução de 85,49 kg/h, 2.051,76 kg por dia e 61.552,80 kg ao mês).

Outra conclusão que se pode tirar das simulações de otimização foi uma redução considerável da utilização do fluido refrigerante no reator. Para a situação de cruzamento uniforme a redução ocorreu de 9.040,00 para 4.706,11 kg/h e quando utilizado a forma de cruzamento em um ponto a diminuição ocorreu de 9.040,00 para 5.027,68 kg/h. A Figura 5.31 evidencia o perfil de produtividade em função do número de gerações adotadas nas simulações da otimização com os casos de melhor desempenho citados anteriormente e na sequência os perfis das taxas dos componentes principais que estão envolvidos no processo reacional antes e após a otimização.

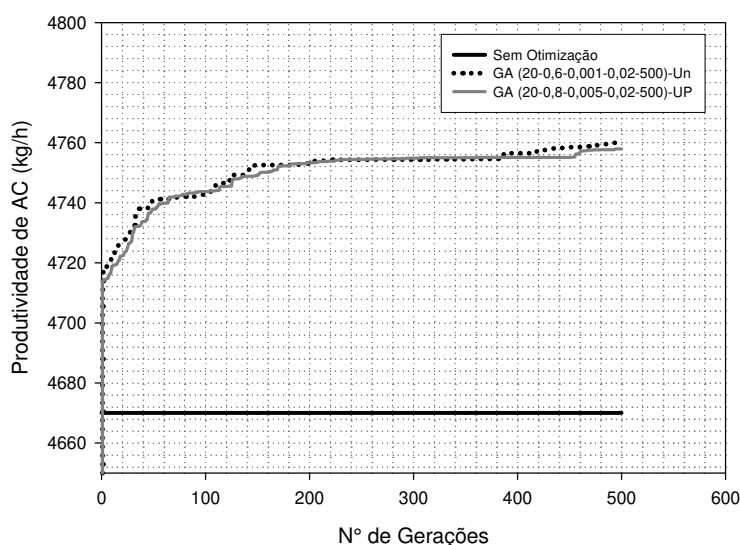


Figura 5.31 – Perfil da evolução da otimização do Nível 1 dos dois melhores resultados (cruzamento uniforme (Un) e em um ponto (UP)), com seus respectivos conjuntos de parâmetros genéticos.

As Figuras 5.32 a 5.38 mostram os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB), Cicloalcano (C) e de Água utilizando os parâmetros otimizados dos dois melhores casos observados para o Nível 1 de produção através do comprimento axial total medido no reator de produção (percurso total percorrido pelos reagentes e produtos desde a entrada até a saída dos módulos reacionais - reator).

As figuras relacionam a situação não otimizada pelo modelo, otimizada (cruzamento uniforme – Un), e otimizada (cruzamento em um ponto – UP). Para o perfil de temperatura ao longo do comprimento total axial do reator, foram utilizados dados experimentais coletados para comparação. Na Figura 5.32 são apresentados esses perfis comparando com as temperaturas coletadas experimentalmente e para a situação do modelo não otimizado. As medições das temperaturas são realizadas no início e saída de cada tubo de cada módulo do reator.

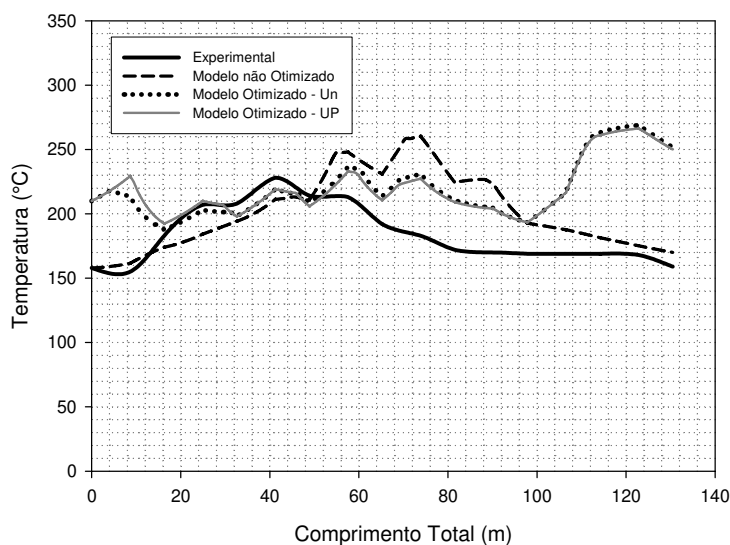


Figura 5.32 – Nível 1 - Perfis de temperatura ao longo do reator.

Tanto para o modelo não otimizado como para os casos otimizados são observados desvios em relação às temperaturas experimentais. A Figura 5.33 apresenta os perfis de conversão de AB comparando os casos otimizados com a situação não otimizada ao longo do comprimento axial do reator.

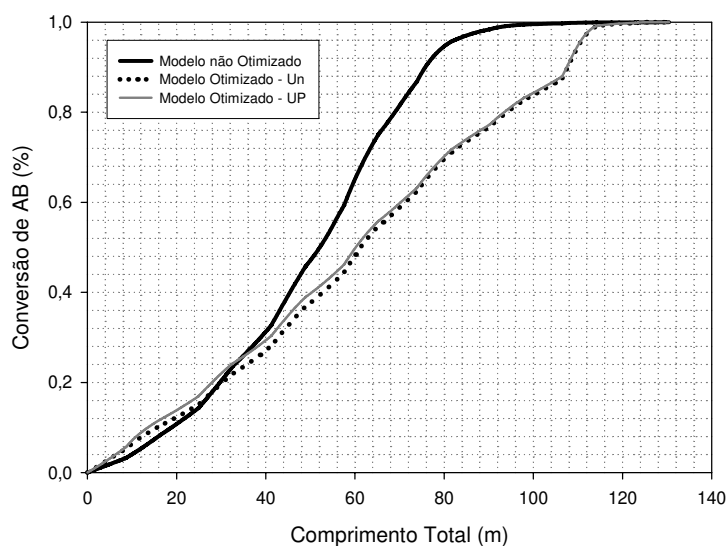


Figura 5.33 – Nível 1 - Perfis de conversão de Álcool Benzílico (AB) ao longo do reator.

A Figura 5.34 apresenta o perfil das taxas de fração molar de AB ao longo do comprimento axial do reator. Em ambas as situações otimizadas os menores valores ocorrem ao final do circuito de reação.

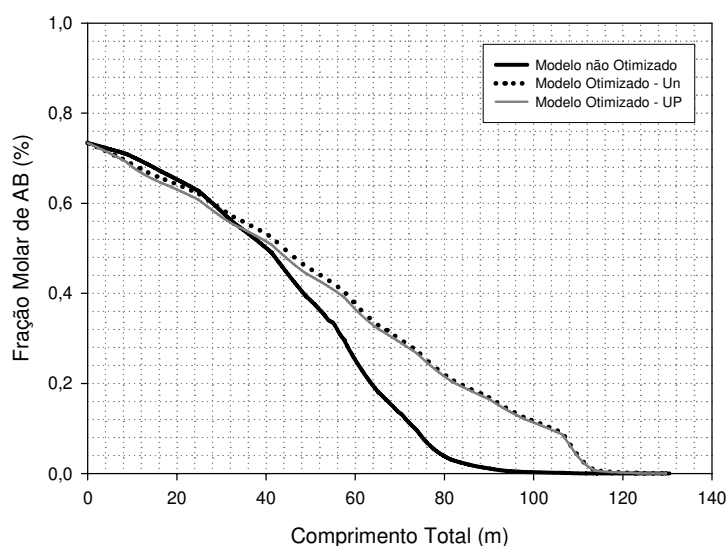


Figura 5.34 – Nível 1 - Perfis de fração molar de Álcool Benzílico (AB) ao longo do reator.

A Figura 5.35 exemplifica os perfis das taxas de conversão do AC (situação não desejada) para formação de C (subproduto), ao longo do comprimento axial do reator.

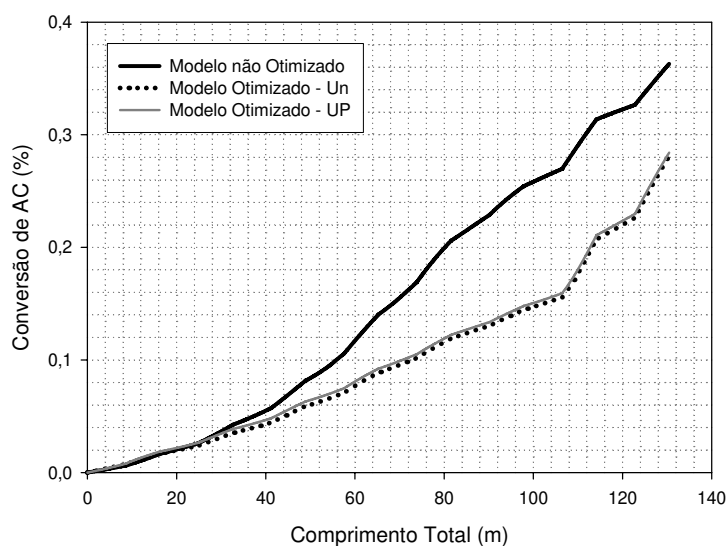


Figura 5.35 – Nível 1 - Perfis de conversão de Álcool Cíclico (AC) ao longo do reator.

A Figura 5.36 apresenta o perfil das frações molares de AC ao longo do reator. Os maiores valores são obtidos ao final do circuito de reação.

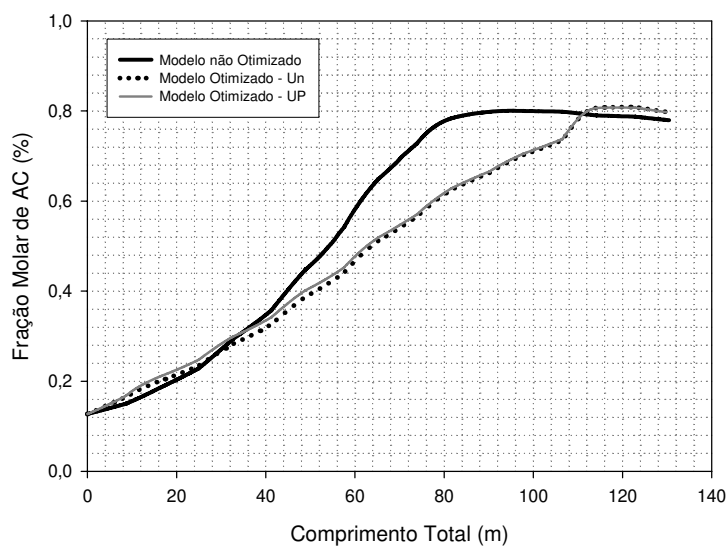


Figura 5.36 – Nível 1 - Perfis de fração molar do Álcool Cíclico (AC) ao longo do reator.

Na Figura 5.37 observa-se os perfis das frações molares de C (subproduto indesejado) ao longo do reator. Verifica-se um aumento destas conforme se aproxima ao final do circuito de reação (ao final do percurso do reator).

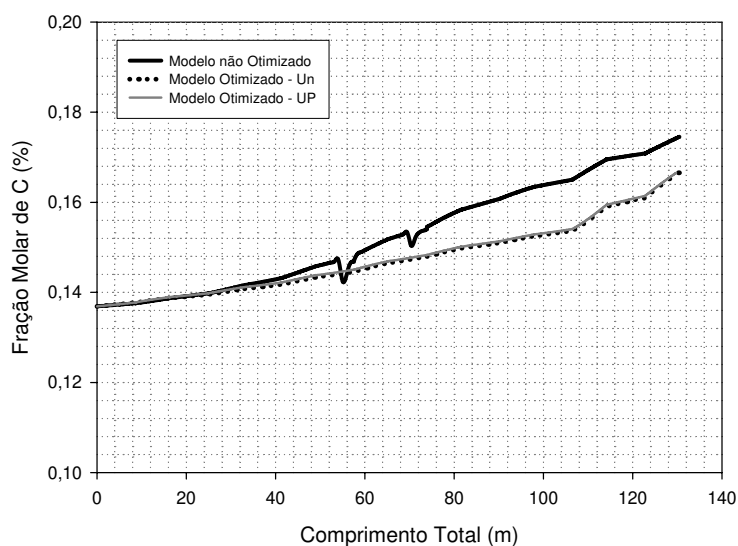


Figura 5.37 – Nível 1 - Perfis de fração molar de Cicloalcano (C) ao longo do reator.

Por último é verificado o perfil de fração molar de Água ao longo do comprimento axial do reator na Figura 5.38, onde há um aumento considerável na parte final do circuito reacional, indicando decomposição de AC.

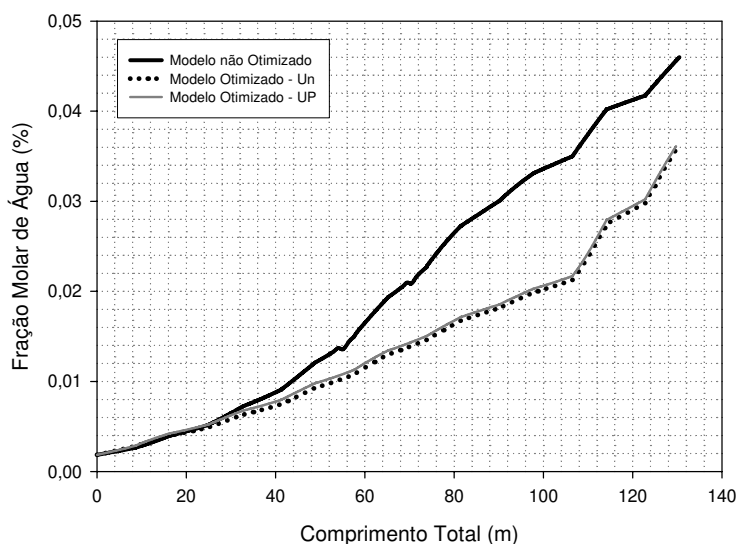


Figura 5.38 – Nível 1 - Perfis de fração molar de Água ao longo do reator.

Os perfis reacionais dos principais componentes do processo (AB, AC, C e Água) dos casos otimizados tanto para a situação onde é utilizada a forma de cruzamento uniforme

como no cruzamento em um ponto seguem de forma semelhante ao ocorrido com a situação não otimizada (modelo não otimizado) com pequenos desvios, mas que não influenciam no objetivo final. Onde este visa aumentar a produtividade de AC, procurando limitar e evitar uma conversão não adequada de AB, e decomposição do produto principal a C. A única situação onde esses desvios são observados com maior intensidade ocorre nos perfis de temperatura (Figura 5.32).

Em todas as simulações envolvendo os melhores casos (cruzamento uniforme e em um ponto) os resultados indicam aumento na produtividade de AC (produto de interesse) com diminuições das taxas de reagente principal AB e do subproduto C (indesejado).

A diferença entre as taxas de AC dos melhores resultados (4.760,27 kg/h – cruzamento uniforme e 4.758,65 kg/h – cruzamento em um ponto) de toda esta análise fornece um valor de 1,62 kg/h, 38,88 kg ao dia e 1.166,40 kg ao mês a mais quando é utilizada a forma de cruzamento uniforme. Uma diferença que pode elevar o faturamento, pois o produto AC possui um alto valor agregado.

V.2 ANÁLISE DO NÍVEL 2 DE PRODUÇÃO DE ÁLCOOL CÍCLICO

As simulações realizadas tiveram para este nível de produção o mesmo propósito em relação ao caso anterior (otimização dos parâmetros operacionais do reator). Foram consideradas as mesmas situações para análise e estudo, e foi constatada a melhoria do desempenho (aumento da produtividade de Álcool Cíclico) como no caso do Nível 1 de produção.

Os estudos iniciaram-se utilizando as recomendações básicas na aplicação do código genético e na seqüência, foram realizadas diversas análises procurando verificar a influência de variabilidades dos parâmetros genéticos do código na produtividade de Álcool Cíclico, como no caso do Nível 1 de produção.

Analisou-se o tamanho populacional, formas de cruzamento (uniforme (Un) e em um ponto (UP)) com suas respectivas variações de taxas, o efeito das flutuações das taxas de mutação uniforme (ou troca de bits) e de arraste, procurando variar uma das taxas mantendo-se a outra fixa (e vice-versa), bem como a influência da não utilização da mutação de arraste. Por fim a análise da influência do operador de busca em nichos (utilizando ou não este operador) com flutuações de ambas as taxas de mutação (uniforme e de arraste).

Após as análises e prognósticos verificou-se o comportamento do modelo junto aos parâmetros otimizados procurando analisar se há desvios consideráveis ou impossibilidades de operação do reator de produção de Álcool Cíclico.

As simulações que analisaram as flutuações das taxas de mutação (uniforme e/ou de arraste) utilizando o operador de busca em nichos em conjunto com as análises quando não se utilizavam este operador (busca em nichos), com ou sem mutação de arraste foram realizadas utilizando populações com tamanhos de 20 e 40 respectivamente. Por último a análise considerando busca em nichos, sem mutação de arraste utilizou o tamanho da população igual a 20 como foi realizado no caso do Nível 1.

A produção de AC deste nível operacional sem otimização foi de 7.125,40 kg/h (ao final do processo reacional), para o reagente (AB) foi de 0,3700 kg/h e o subproduto C teve uma taxa de 359,60 kg/h.

V.2.1 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DO TAMANHO POPULACIONAL, DA FORMA DE CRUZAMENTO E DAS TAXAS DE CRUZAMENTO NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 2 DE PRODUÇÃO

Este item considerou o operador de busca em nichos, cruzamento uniforme e em um ponto (com taxas variáveis), mutação uniforme e de arraste (ambas com valores fixos) e número de gerações igual a 500 (valor fixo utilizado para todas as simulações). A análise teve como objetivo a verificação da influência do aumento do tamanho populacional na produtividade de Álcool Cíclico procurando evitar o aumento das taxas e reagente AB e de subproduto C, tendo como valores fixos para as taxas de mutação uniforme e de arraste, 0,01 e 0,02 respectivamente.

Para esta análise específica os resultados são mostrados nas Tabelas 5.28 a 5.37 e o estudo visou observar a influência do tamanho populacional (tamanhos populacionais de 20, 30, 40 e 50 respectivamente) para ambos os casos de formas de cruzamento (uniforme e em um ponto) em conjunto com a sensibilidade das variações de suas respectivas taxas, na produtividade do AC.

Foi verificado que as simulações, neste caso de estudo, forneceram resultados (produtividades de AC) muito próximos (para ambas as formas de cruzamento), com pequenas variações na taxa de AC, mas essas podem ter um peso importante ao longo do processo produtivo diário ou mensal, como citado anteriormente. Os resultados apresentados na sequência podem confirmar esta situação. As análises do Nível 2 de produção seguiram conforme o caso anterior limitando-se às taxas de cruzamento entre 0,4 e 0,8 (para ambas as formas de cruzamento), outros valores foram testados fora destes limites e os resultados não foram satisfatórios (resultado não apresentado).

Em relação ao tamanho populacional, os melhores resultados foram obtidos com tamanhos de 20 e 40 respectivamente (as análises com tamanho de 30 também foram semelhantes), embora não tenham ocorrido grandes e significativas variações. Para o caso

com o tamanho populacional de 50 houve menor desempenho como no Nível 1 de produção (ocorrência dos menores valores de produtividade em quase todas as simulações com poucas exceções).

As Tabelas 5.28 a 5.32 apresentam os resultados das simulações para o caso de cruzamento uniforme onde o melhor resultado ocorreu com tamanho populacional de 30 e taxa de cruzamento 0,4, tendo a produtividade de AC um valor de 7.224,63 kg/h e a diferença entre o melhor e pior caso otimizado entre as taxas de AC foi de 3,59 kg/h, 86,16 kg ao dia e 2.584,80 kg ao mês, sendo um valor significativo, principalmente quando a produção é analisada diariamente ou mensalmente, onde o aumento da produtividade é importante para elevação da lucratividade e/ou diminuição de custos operacionais.

Tabela 5.28 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 2, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,4.

Nível 2	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,4	7224,08
30	0,4	7224,63
40	0,4	7224,19
50	0,4	7221,29
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	7125,40	

Tabela 5.29 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 2, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,5.

Nível 2	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,5	7224,02
30	0,5	7224,12
40	0,5	7224,26
50	0,5	7221,94
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	7125,40	

Tabela 5.30 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 2, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,6.

Nível 2	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,6	7223,27
30	0,6	7224,16
40	0,6	7223,82
50	0,6	7221,44
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	7125,40	

Tabela 5.31 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 2, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,7.

Nível 2	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,7	7224,30
30	0,7	7224,18
40	0,7	7223,91
50	0,7	7222,21
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	7125,40	

Tabela 5.32 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 2, considerando cruzamento uniforme e a taxa de cruzamento de 0,8.

Nível 2	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,8	7224,22
30	0,8	7224,16
40	0,8	7222,95
50	0,8	7221,04
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	7125,40	

Nas Tabelas 5.33 a 5.37 são apresentados os resultados provenientes das simulações utilizando a forma de cruzamento em um ponto utilizando os mesmos operadores genéticos e valores, que foram usados na otimização do caso com o cruzamento uniforme. Para este nível de produção o melhor resultado ocorreu com tamanho populacional de 30 e taxa de cruzamento 0,7, onde a diferença em todas as situações simuladas (produtividade) não varia muito.

Nesta análise o melhor resultado obtido foi de 7.225,11 kg/h, onde foi observada uma diferença entre o melhor e o pior caso otimizado entre as taxas de AC de 4,10 kg/h, significando 98,40 kg ao dia e 2.952,00 kg ao mês de aumento de produtividade de AC.

Tabela 5.33 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 2, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,4.

Nível 2	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,4	7224,17
30	0,4	7224,72
40	0,4	7223,81
50	0,4	7221,44
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	7125,40	

Tabela 5.34 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 2, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,5.

Nível 2	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,5	7223,80
30	0,5	7224,41
40	0,5	7224,57
50	0,5	7222,00
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	7125,40	

Tabela 5.35 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 2, considerando cruzamento em um ponto e a taxa de cruzamento de 0,6.

Nível 2	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,6	7224,72
30	0,6	7224,97
40	0,6	7224,80
50	0,6	7221,35
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	7125,40	

Tabela 5.36 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 2, considerando cruzamento em um ponto e a taxa de cruzamento de 0,7.

Nível 2	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,7	7223,70
30	0,7	7225,11
40	0,7	7224,79
50	0,7	7221,01
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	7125,40	

Tabela 5.37 - Influência do tamanho populacional na produtividade de AC do Nível 2, considerando cruzamento em um ponto e a taxa de cruzamento de 0,8.

Nível 2	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,8	7224,13
30	0,8	7224,67
40	0,8	7224,54
50	0,8	7221,32
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	7125,40	

Entre os melhores resultados obtidos um para cada caso de cruzamento (uniforme e em um ponto), as diferenças entre suas taxas de AC ficou em 0,48 kg/h, 11,52 kg ao dia e 345,60 kg ao mês, uma diferença razoável entre os melhores casos otimizados (relacionados à forma de cruzamento) que devido ao alto valor agregado do produto determina uma vantagem financeira.

O comportamento como já citado, foi muito semelhante em todas as variações analisadas, em relação ao primeiro modo de cruzamento (uniforme) e ao segundo (em um ponto), as variações foram pequenas, observando que o pior dos casos ocorreu quando o tamanho da população foi de 50. Também nesta análise observou-se uma diminuição na taxa de catalisador, como verificada no Nível 1 de produção, utilizada no processo reacional (resultado não apresentado).

As Figuras 5.39 até 5.44, que evidenciam esta análise podem ser verificadas, onde as disposições destas estão em sequência de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), apresentando as formas de cruzamento uniforme e em um ponto respectivamente para cada componente citado anteriormente. As Figuras 5.39 e 5.40 são referentes ao Álcool Cíclico (AC), as Figuras 5.41 e 5.42 ao Álcool Benzílico (AB) e as Figuras 5.43 e 5.44 ao Cicloalcano (C).

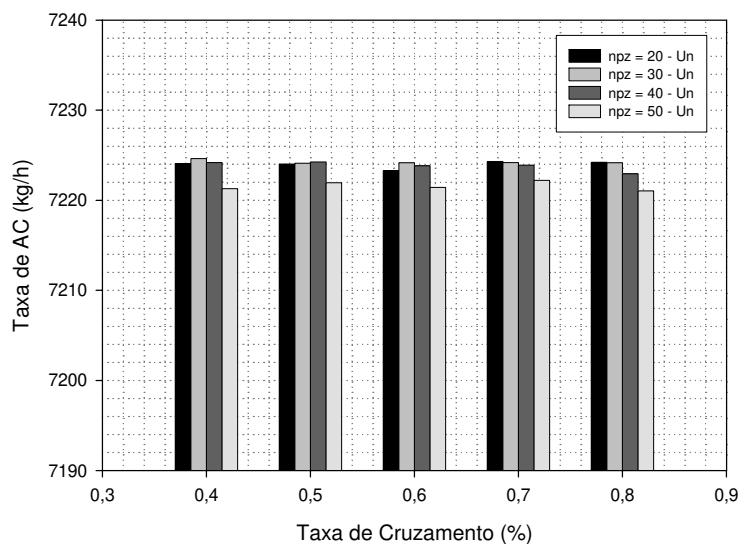


Figura 5.39 – Nível 2 - Análise das taxas de cruzamento e do tamanho da população na produtividade de Álcool Cíclico (AC) - Cruzamento Uniforme (Un).

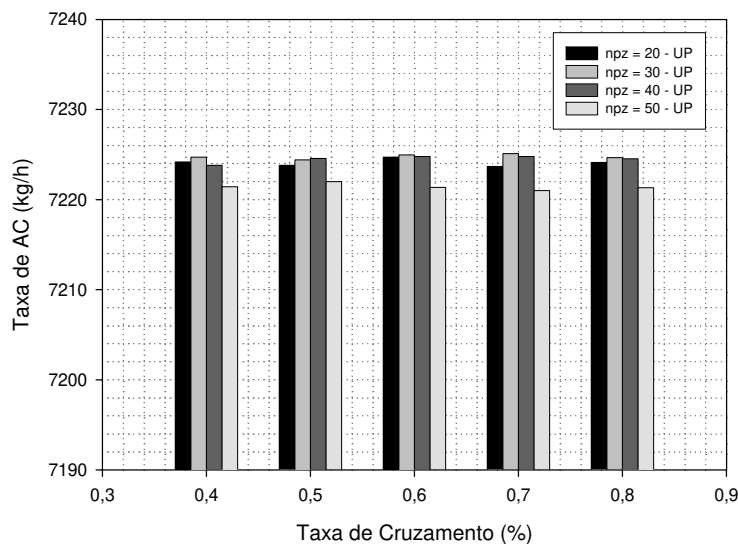


Figura 5.40 – Nível 2 - Análise da taxa de cruzamento e do tamanho da população na produtividade de Álcool Cíclico (AC) - Cruzamento em Um Ponto (UP).

Apesar da pequena diferença entre os dois casos analisados, estes possuem muita similaridade. O que se observa, é que em alguma simulação específica referente a algum tamanho populacional e/ou taxa de cruzamento, pode-se atingir um valor um pouco maior de AC do que em outra simulação. Esta situação é inerente ao algoritmo genético que possui algumas características de aleatoriedade.

Pelos resultados apresentados nas Figuras 5.39 e 5.40 verifica-se que os melhores desempenhos relacionados à produtividade de AC ocorrem em ambas as formas de cruzamento (uniforme e em um ponto) embora haja uma ligeira vantagem para a simulação com o cruzamento em um ponto (valores pouco superiores).

Mais uma vez, conforme observado nas simulações do Nível 1 de produção, o tamanho populacional de 50 não fornece bom desempenho quando comparado com os desempenhos das outras simulações que utilizam tamanhos populacionais de 20, 30 e 40 respectivamente. Na seqüência são apresentados os resultados da simulação referente ao reagente AB para as mesmas condições analisadas, conforme àquelas analisadas para o produto AC representadas pelas Figuras 5.41 e 5.42.

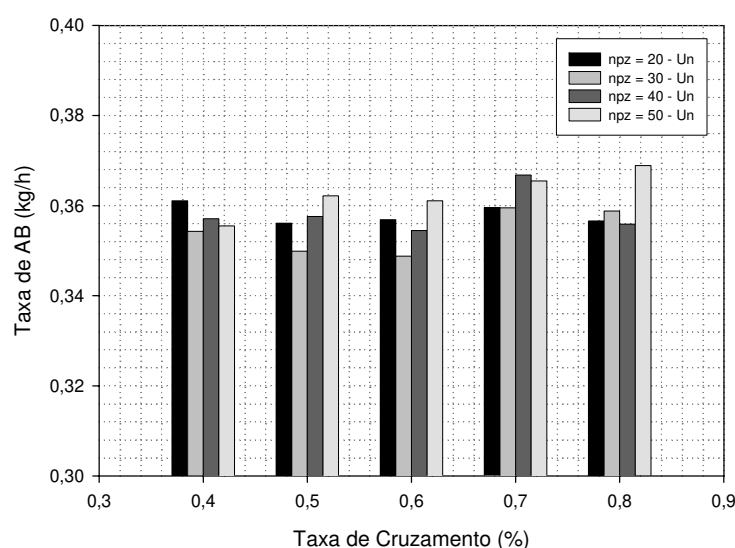


Figura 5.41 – Nível 2 - Análise da taxa de cruzamento e do tamanho da população na taxa de Álcool Benzílico (AB) - Cruzamento Uniforme (Un).

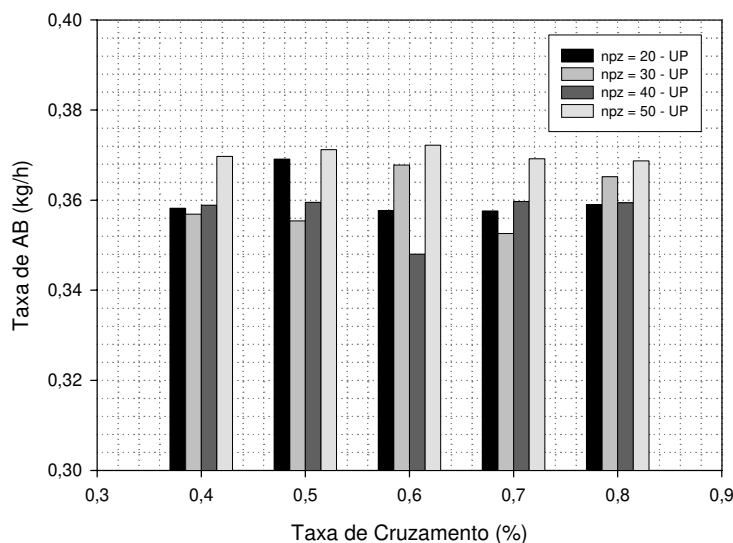


Figura 5.42 – Nível 2 - Análise da taxa de cruzamento e do tamanho da população na taxa de Álcool Benzílico (AB) - Cruzamento em Um Ponto (UP).

As taxas de AB são um pouco maiores no caso em que se utiliza a forma de cruzamento em um ponto como pode ser observado e comparado nas Figuras 5.41 e 5.42 (cruzamento uniforme e em um ponto respectivamente).

O fato de ter sido observado um desempenho levemente superior para o cruzamento em um ponto, verificou-se também que há semelhança em quantidades de reagente AB não convertido em ambos os casos (cruzamentos uniforme e em um ponto), essa situação pode ser melhorada para uma conversão maior de AB e assim elevar a produtividade em melhores valores. A exceção ocorre com alguns casos de tamanhos populacionais de 30 e 40 onde as taxas de AB apresentam valores menores quando comparado às outras situações.

As taxas do subproduto C são semelhantes nos dois casos simulados (cruzamento uniforme e em um ponto), que são representados pelas Figuras 5.43 e 5.44. Para o melhor resultado obtido em relação à produtividade de AC, a quantidade de C, inerente a esta

simulação, é a menor quando comparado com os outros casos, confirmando que o produto AC é menos decomposto, e assim formando menos C.

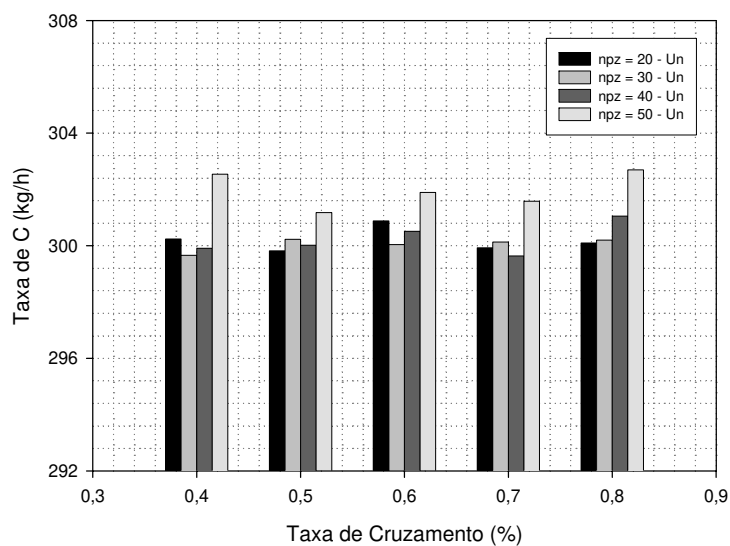


Figura 5.43 – Nível 2 - Análise da taxa de cruzamento e do tamanho da população na taxa de Cicloalcano (C) - Cruzamento Uniforme (Un).

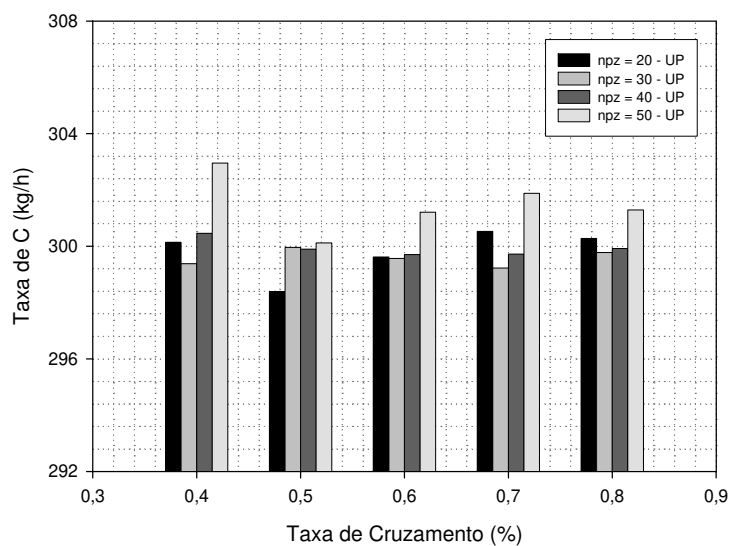


Figura 5.44 – Nível 2 - Análise da taxa de cruzamento e do tamanho da população na taxa de Cicloalcano (C) - Cruzamento em Um Ponto (UP).

Como conclusão a esta análise populacional e de formas de cruzamento com variabilidade das referidas taxas, o melhor caso simulado ocorreu quando utilizado o cruzamento em um ponto (tamanho populacional de 30, taxa de cruzamento de 0,7), já mencionado anteriormente.

É interessante ressaltar que nesta forma de cruzamento, em todos os casos simulados, excetuando-se aquele que fornece o melhor resultado, há uma quantidade considerável de reagente não convertido AB, isso pode ser um problema para o processo de produção, pois haverá necessidade de operações extras, como re-ciclo, separações, entre outras, elevando-se os custos. Desta forma deve-se atentar para melhoria da conversão de AB para AC e tentar evitar a decomposição deste ao subproduto C. Como as taxas de C são uniformes em todos os casos simulados com pouca variação destas, conclui-se que ocorre decomposição similar de AC em todos os casos.

Para a seqüência das análises realizadas no Nível 2 de produção, as recomendações realizadas na análise do Nível 1 de produção foram consideradas selecionando os tamanhos populacionais de 20 e 40 respectivamente, aliados às taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8, sendo valores bem representativos e utilizados como valores padrões na seqüência das simulações das otimizações.

V.2.2 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DAS TAXAS DE MUTAÇÃO UNIFORME E DE ARRASTE E DA BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 2 DE PRODUÇÃO

Nesta fase as análises foram realizadas considerando as variações das taxas de mutação uniforme e de arraste respectivamente utilizando o operador de busca em nichos e na seqüência o estudo é finalizado com as análises utilizando ou não o operador de busca em nichos, com ou sem a utilização de mutação de arraste.

Os resultados evidenciam melhoria no desempenho da otimização, mas quando esse desempenho foi comparado entre as diversas análises, observou-se variações discretas das taxas de Álcool Cíclico. De uma forma unânime em todas as análises foi verificada uma redução da quantidade de catalisador utilizado no processo reacional que indica diminuição dos custos.

V.2.2.1 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME COM BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 2 DE PRODUÇÃO

Esta parte do estudo procurou verificar o aumento das taxas de Álcool Cíclico, mas ocorreu pouca melhora no desempenho da simulação, ou seja, as taxas de Álcool Cíclico não foram muito sensíveis às variações das taxas de mutação uniforme.

As simulações foram realizadas considerando os tamanhos populacionais de 20 e 40 respectivamente, cruzamento uniforme e em um ponto, taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambas as formas de cruzamento e as variações das taxas de mutação uniforme de 0,001 a 0,1 e mantendo-se a mutação de arraste com um valor fixo de 0,02.

As Tabelas 5.38 e 5.39 (cruzamento uniforme) e as Tabelas 5.40 e 5.41 (cruzamento em um ponto) descrevem os resultados obtidos. Além das tabelas apresentadas, as Figuras 5.45 a 5.50 evidenciam os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) referentes ao Nível 2 de produção para ambas as formas de cruzamento.

No cruzamento uniforme o melhor resultado foi de 7.224,68 kg/h, utilizando tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,005 (Tabelas 5.38 e 5.39).

Para o cruzamento em um ponto o melhor valor obtido foi de 7.224,86 kg/h com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,05 (Tabelas 5.40 e 5.41).

A simulação do caso que considera cruzamento uniforme apresentou uma diferença entre o melhor e o pior caso otimizado em termos de produtividade de AC de 3,46 kg/h. Sendo uma diferença pequena em termos de aumento da produtividade, entretanto isso pode representar um aumento de 83,04 kg por dia e 2.491,20 kg ao mês na produtividade.

A escolha correta dos parâmetros e taxas dos mesmos é muito importante em um estudo de otimização.

Tabela 5.38 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme e com taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	<i>0,001</i>	<i>7224,04</i>	<i>0,3456</i>	<i>300,33</i>
	<i>0,005</i>	<i>7224,68</i>	<i>0,3435</i>	<i>299,72</i>
	<i>0,010</i>	<i>7223,26</i>	<i>0,3569</i>	<i>300,88</i>
	<i>0,050</i>	<i>7223,66</i>	<i>0,3517</i>	<i>300,62</i>
	<i>0,100</i>	<i>7221,57</i>	<i>0,3596</i>	<i>302,56</i>
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	<i>0,001</i>	<i>7224,49</i>	<i>0,3480</i>	<i>299,96</i>
	<i>0,005</i>	<i>7224,03</i>	<i>0,3383</i>	<i>300,35</i>
	<i>0,010</i>	<i>7223,82</i>	<i>0,3545</i>	<i>300,51</i>
	<i>0,050</i>	<i>7224,19</i>	<i>0,3595</i>	<i>300,07</i>
	<i>0,100</i>	<i>7221,88</i>	<i>0,3597</i>	<i>302,48</i>

Tabela 5.39 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme e com taxa de cruzamento de 0,8. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	7223,59	0,3472	300,69
	0,005	7223,97	0,3459	300,33
	0,010	7224,22	0,3566	300,10
	0,050	7223,62	0,3454	300,52
	0,100	7221,22	0,3579	302,49
npz = 40		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	7223,16	0,3401	301,09
	0,005	7224,53	0,3594	299,85
	0,010	7222,95	0,3559	301,05
	0,050	7224,39	0,3577	300,04
	0,100	7221,23	0,3600	302,19

Para as simulações utilizando a forma de cruzamento em um ponto (Tabelas 5.40 e 5.41) verifica-se um aumento na produtividade de AC de 3,77 kg/h entre o melhor e o pior caso otimizado. Sendo assim, ocorre um aumento diário na produtividade de 90,48 kg e 2.714,40 kg ao mês, um valor para não ser dispensado.

Tabela 5.40 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	7223,29	0,3575	300,92
	0,005	7223,88	0,3557	300,47
	0,010	7224,72	0,3577	299,62
	0,050	7224,86	0,3572	299,46
	0,100	7222,01	0,3481	301,02
npz = 40		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	7223,80	0,3494	300,56
	0,005	7223,87	0,3429	300,48
	0,010	7224,80	0,3480	299,70
	0,050	7224,25	0,3587	300,07
	0,100	7222,29	0,3583	301,78

Tabela 5.41 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,8. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	7223,82	0,3700	298,78
	0,005	7221,90	0,3600	301,92
	0,010	7224,13	0,3590	300,28
	0,050	7224,66	0,3553	299,77
	0,100	7221,27	0,3598	302,99
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	7224,21	0,3527	299,94
	0,005	7223,69	0,3577	300,59
	0,010	7224,54	0,3594	299,92
	0,050	7223,91	0,3586	300,30
	0,100	7221,09	0,3589	302,55

Realizando-se uma comparação entre as simulações envolvendo a forma de cruzamento uniforme e em um ponto (o melhor resultado de cada uma), a diferença ocorrida para as melhores taxas de AC ficou em 0,18 kg/h e essa diferença em termos diários chega em 4,32 kg e 129,60 kg por mês a mais na produtividade, quando a forma de cruzamento em um ponto é utilizada.

A seguir são apresentados os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) respectivamente para este tópico estudado, através das Figuras 5.45 a 5.50.

Os resultados dos perfis apresentados pelas Figuras 5.45 e 5.46 evidenciam bom desempenho quando utilizado taxas de mutação uniforme entre 0,01 e 0,05 para ambas as formas de cruzamento. A partir da taxa de mutação 0,05 há uma diminuição na produtividade de AC. Quando a simulação é realizada com valores menores que 0,01 há uma oscilação de valores de AC.

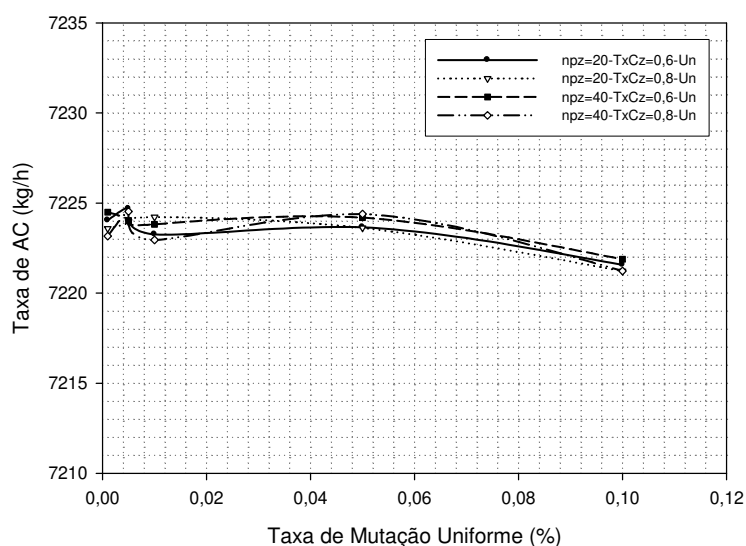


Figura 5.45 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento uniforme (Un).

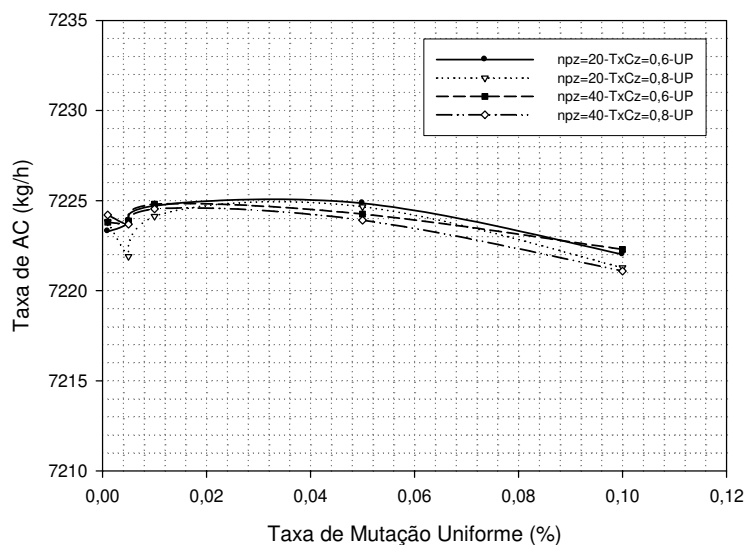


Figura 5.46 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento em um ponto (UP).

As taxas de AB utilizando cruzamento uniforme possuem valores baixos em taxas de mutação entre 0,00 e 0,02 (Figura 5.47) com tendência a diminuição para as simulações envolvendo tamanhos populacionais de 20 e taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8

respectivamente. Mas ao utilizar os tamanhos populacionais de 40, tanto para taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8 houve aumento da quantidade de AB, não sendo uma situação de interesse.

Para as simulações com cruzamento em um ponto (Figura 5.48) há oscilações quando foram utilizadas taxas de mutação com valores menores do que 0,01, a partir deste valor, as taxas de AB permanecem constantes até atingir a taxa de mutação com valor de 0,05 e a partir de então crescem suavemente, situação que não interessa.

A exceção desta tendência é o caso simulado com tamanho populacional de 20 e taxa de cruzamento 0,6, onde a partir da taxa de mutação 0,05 ocorre diminuição da taxa de AB.

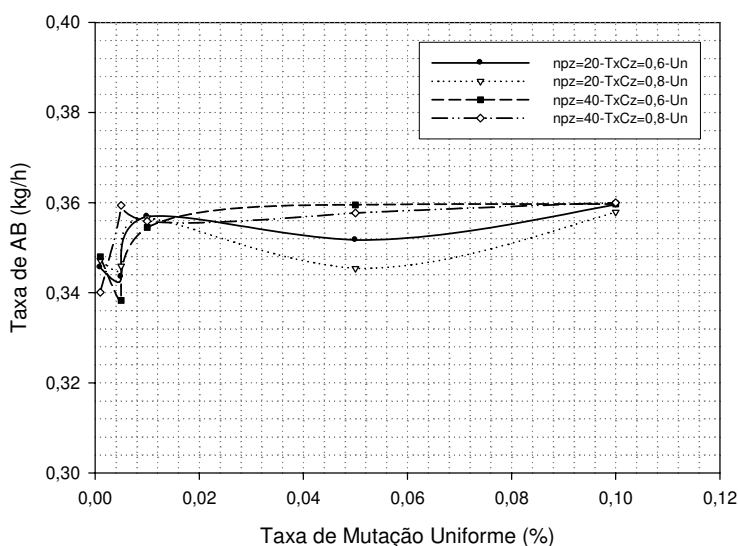


Figura 5.47 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento uniforme (Un).

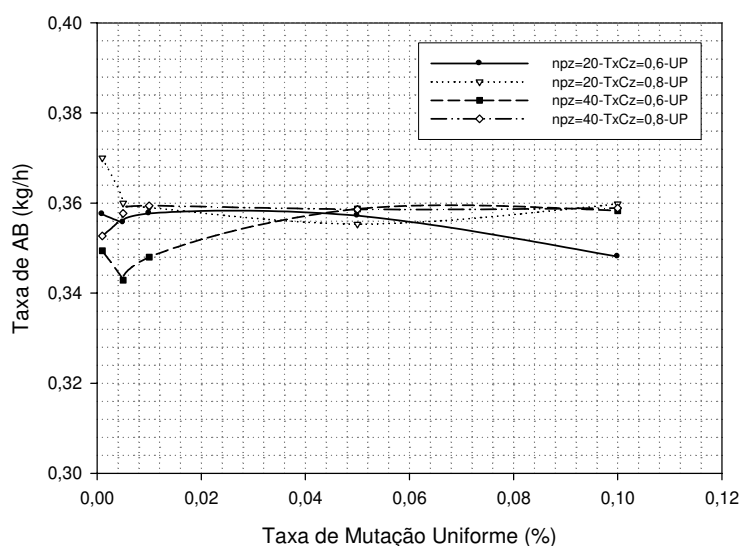


Figura 5.48 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento em um ponto (UP).

As taxas de C (Figura 5.49) (simulação com cruzamento uniforme) possuem valores constantes quando são utilizadas taxas de mutação entre 0,01 e 0,05 nas simulações. Para valores de taxa de mutação menores que 0,01 há uma pequena oscilação em todos os casos e utilizando valores dessas taxas acima de 0,05 há um aumento nas taxas de C.

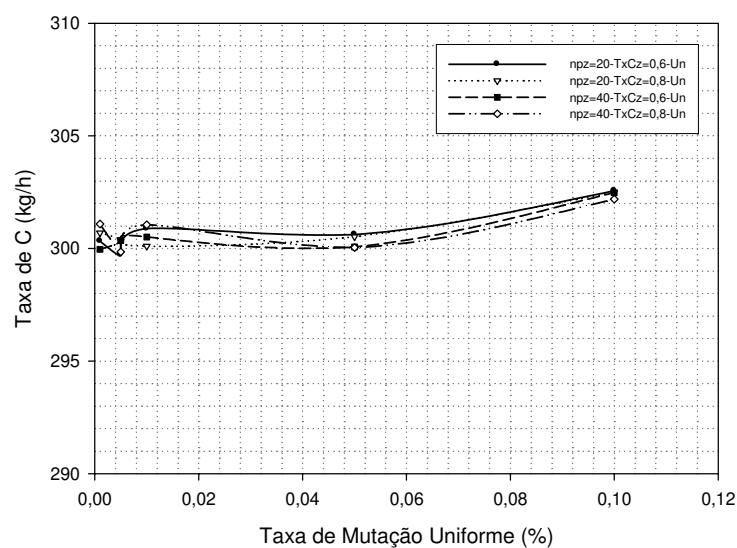


Figura 5.49 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento uniforme (Un).

O comportamento se repete para a simulação com cruzamento em um ponto (Figura 5.50).

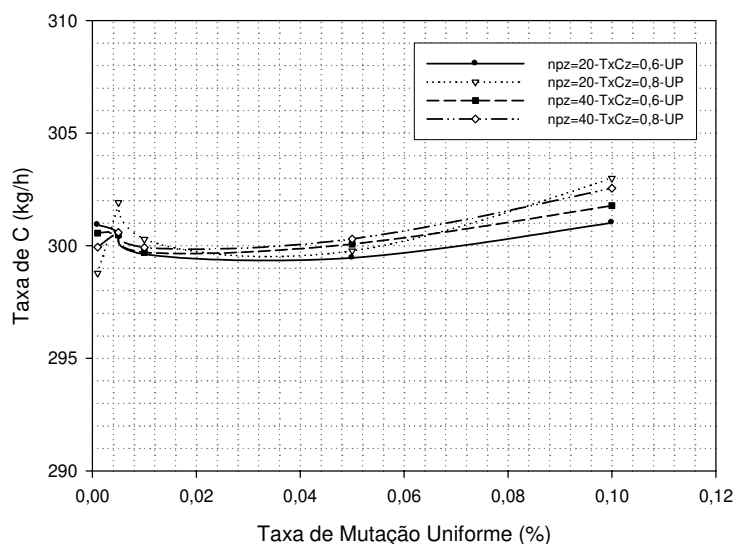


Figura 5.50 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento em um ponto (UP).

V.2.2.2 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE COM BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 2 DE PRODUÇÃO

Neste tópico a análise verificou a influência da taxa de mutação de arraste na produtividade de Álcool Cíclico considerando o operador de busca em nichos. Foi observado um comportamento semelhante ao obtido na análise de sensibilidade da taxa de mutação uniforme (tópico anterior), embora os resultados de produtividade de AC tenham tido valores um pouco mais elevados, fazendo-se concluir que esta é mais sensível a este operador genético.

Como no caso anterior as simulações foram realizadas considerando os tamanhos populacionais de 20 e 40, cruzamento uniforme e em um ponto, taxas de cruzamento de 0,6

e 0,8 para as ambas as formas de cruzamento, com variações das taxas de mutação de arraste de 0,001 a 0,1, mantendo-se a mutação uniforme com um valor constante de 0,01 e por fim utilizando a operação com busca em nichos.

As Tabelas 5.42 a 5.45 respectivamente apresentam os resultados obtidos. As Tabelas 5.42 e 5.43 estão relacionadas à forma de cruzamento uniforme, e por conseguinte as Tabelas 5.44 e 5.45 ao cruzamento em um ponto.

As Figuras 5.51 a 5.56 evidenciam os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) em seqüência para ambas as formas de cruzamento.

Quando utilizado a forma de cruzamento uniforme o melhor resultado foi de 7.225,08 kg/h, utilizando tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação de arraste de 0,05 e quando analisado com a forma de cruzamento em um ponto o melhor valor foi de 7.224,50 kg/h com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação de arraste de 0,001.

Nas simulações referentes ao caso que é utilizado cruzamento uniforme observa-se uma diferença na produtividade de AC entre o melhor e o pior caso otimizado de 3,32 kg/h, que diariamente pode fornecer 79,68 kg e mensalmente 2.390,40 kg a mais de AC.

Tabela 5.42 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme e com taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	7223,55	0,3540	300,26
	0,005	7224,51	0,3542	299,69
	0,010	7223,97	0,3575	300,40
	0,050	7225,08	0,3595	299,07
	0,100	7223,39	0,3610	301,71
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	7223,90	0,3590	300,14
	0,005	7223,04	0,3450	301,22
	0,010	7223,67	0,3494	300,69
	0,050	7224,65	0,3591	299,74
	0,100	7222,24	0,3631	301,88

Tabela 5.43 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme e com taxa de cruzamento de 0,8. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	7223,65	0,3439	300,69
	0,005	7223,87	0,3577	300,31
	0,010	7223,53	0,3504	300,69
	0,050	7223,39	0,3521	300,66
	0,100	7221,76	0,3610	302,08
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	7224,43	0,3697	297,60
	0,005	7224,01	0,3456	300,40
	0,010	7224,03	0,3507	300,20
	0,050	7224,40	0,3617	299,58
	0,100	7223,04	0,3596	301,29

Para a simulação com cruzamento em um ponto, apresentadas nas Tabelas 5.44 e 5.45 a diferença entre o melhor e o pior caso otimizado entre as taxas de AC fica em 3,01 kg/h, que representaria um ganho diário de 72,24 kg e mensal de 2.167,20 kg.

Tabela 5.44 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	7224,50	0,3560	299,96
	0,005	7224,42	0,3586	299,96
	0,010	7223,18	0,3390	301,10
	0,050	7224,53	0,3511	299,95
	0,100	7221,54	0,3668	302,13
npz = 40		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	7223,53	0,3503	300,76
	0,005	7224,21	0,3581	300,07
	0,010	7224,02	0,3485	300,38
	0,050	7223,26	0,3620	299,66
	0,100	7222,59	0,3601	302,11

Essas diferenças são muito importantes, pois quando aparentemente uma quantidade um pouco maior é obtida, esta pode ter um peso significativo na produção diária, mensal ou anual como pode ser observado.

Tabela 5.45 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,8. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	7224,01	0,3543	300,22
	0,005	7224,10	0,3573	300,13
	0,010	7223,92	0,3540	300,47
	0,050	7223,33	0,3440	300,87
	0,100	7222,07	0,3591	301,78
npz = 40		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	7224,15	0,3560	300,09
	0,005	7224,30	0,3700	297,99
	0,010	7223,86	0,3499	300,42
	0,050	7223,79	0,3574	300,50
	0,100	7221,49	0,3622	302,27

Os dois melhores casos utilizando as formas de cruzamento uniforme e em um ponto (o melhor resultado de cada uma), dentre todas as simulações realizadas neste tópico, obteve uma diferença entre as melhores taxas de AC em 0,58 kg/h e essa diferença em termos diários chega em 13,92 kg e 417,60 kg por mês a mais quando se utiliza a forma de cruzamento uniforme na otimização.

Na Figura 5.51 são apresentados os perfis deste caso da simulação (cruzamento uniforme) onde se observa um aumento da produtividade quando utilizado taxas de mutação de arraste entre 0,01 e 0,05.

Para valores das taxas de mutação acima de 0,05 ocorre diminuição nas taxas de AC.

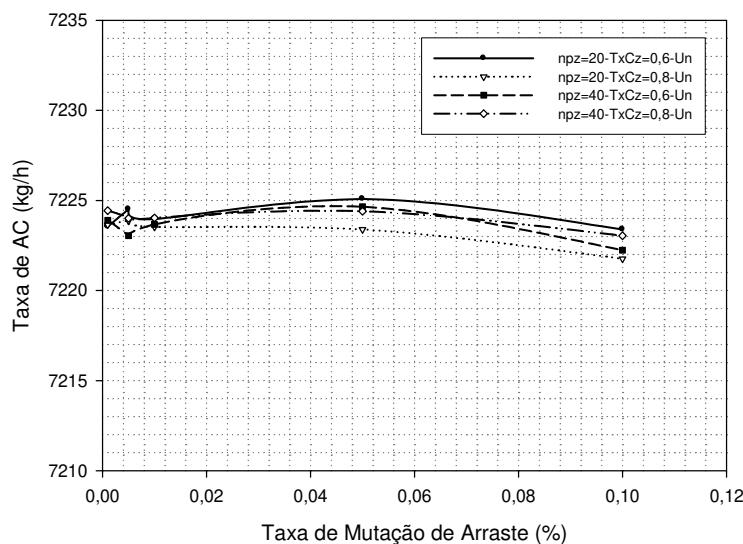


Figura 5.51 – Nível 2 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento uniforme (Un).

O perfil é bem semelhante quando simulado o caso com cruzamento em um ponto (Figura 5.52).

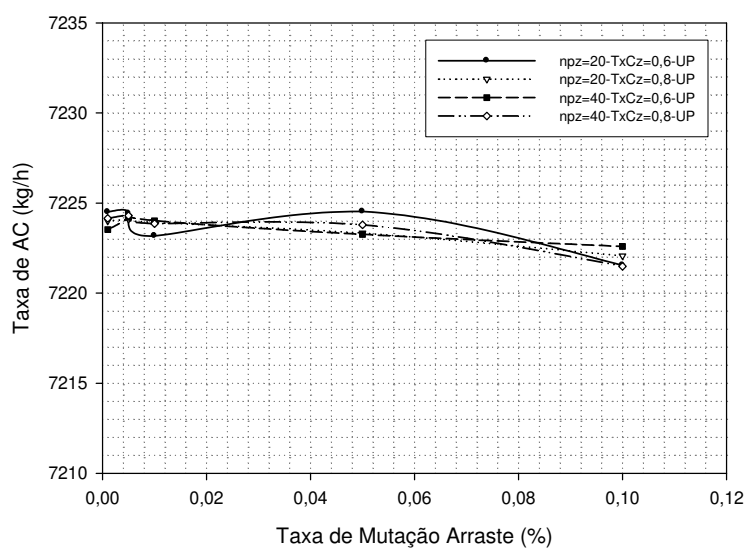


Figura 5.52 – Nível 2 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento em um ponto (UP).

As taxas de AB atingem os menores valores entre 0,00 e 0,02 conforme observado na Figura 5.53, para o caso com cruzamento uniforme.

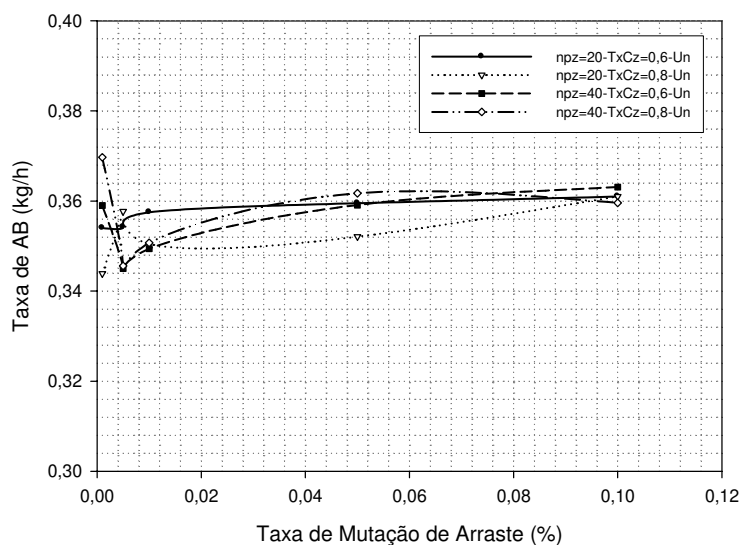


Figura 5.53 – Nível 2 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento uniforme (Un).

Nas simulações com cruzamento em um ponto (Figura 5.54) há muitas oscilações principalmente quando são utilizados taxas de mutação com valores baixos (até 0,01). Para valores superiores desta, a tendência observada é de aumento das taxas AB.

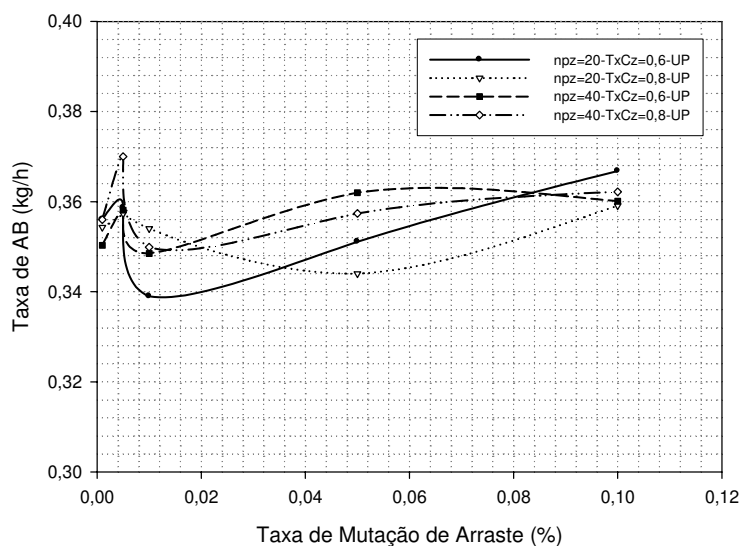


Figura 5.54 – Nível 2 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento em um ponto (UP).

As taxas de C (Figura 5.55), utilizando cruzamento uniforme, tem uma suave diminuição quando as taxas de mutação ficam entre 0,01 e 0,05, aumentando a partir da taxa de 0,05. Em taxas de mutação entre 0,00 e 0,01, ocorre oscilações das taxas de C.

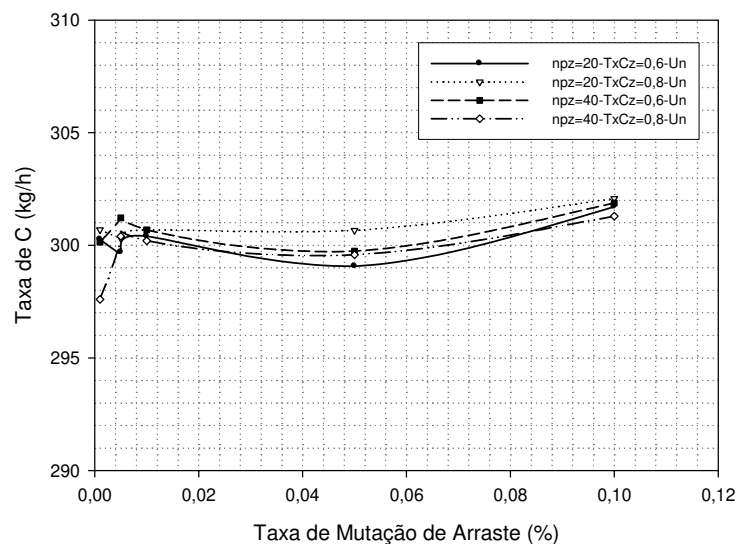


Figura 5.55 – Nível 2 - Influência da mutação de arraste na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento uniforme (Un).

A mesma situação é observada quando é utilizada a forma de cruzamento em um ponto (Figura 5.56).

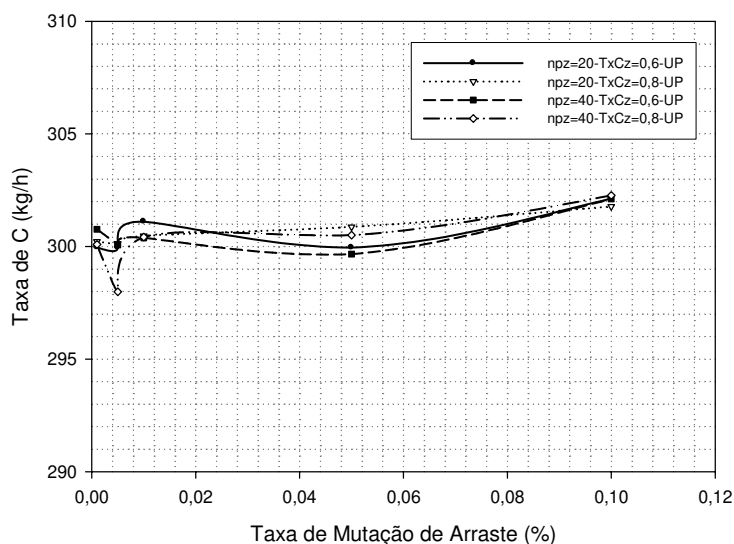


Figura 5.56 – Nível 2 - Influência da mutação de arraste na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento em um ponto (UP).

V.2.2.3 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE MANTENDO A MUTAÇÃO UNIFORME FIXA E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 2 DE PRODUÇÃO

A otimização foi realizada utilizando a mutação de arraste e uniforme (valor fixo), mas diferenciando-se das análises anteriormente realizadas pela não utilização do operador de busca em nichos. Fez-se uma verificação de sensibilidade na produtividade pela variação da taxa de mutação de arraste entre 0,001 à 0,1, utilizando o tamanho da população de 20, cruzamento uniforme (Un) e em um ponto (UP) com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos.

Os resultados evidenciam um pequeno aumento na taxa de Álcool Cíclico, ou seja, não houve melhora considerável, mostrando que a não aplicação da busca em nichos não influencia muito o aumento da taxa de Álcool Cíclico. As Tabelas 5.46 e 5.47 apresentam

os resultados da simulação e as Figuras 5.57 a 5.59 ilustram os perfis de Álcool Cíclico (AC), de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C).

Utilizando a forma de cruzamento uniforme, o melhor resultado foi de 7.225,41 kg/h, utilizando tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação de arraste de 0,05.

Na situação em que o cruzamento em um ponto foi utilizado, o melhor valor obtido foi de 7.225,76 kg/h com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação de arraste de 0,05.

A análise utilizando cruzamento uniforme apresenta uma diferença de produtividade de AC entre o melhor e o pior caso otimizado de 3,12 kg/h, que representaria 74,88 kg ao dia e 2.246,40 kg ao mês. A alteração ou modificação de parâmetros é muito significativa no processo de otimização. Na Figura 5.57 são apresentados os perfis de AC para as simulações deste caso de estudo.

Tabela 5.46 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Uniforme	0,001	7224,83	0,3562	299,54
	0,005	7225,35	0,3512	298,83
	0,010	7225,28	0,3531	299,10
	0,020	7224,97	0,3611	297,83
	0,050	7224,67	0,3587	299,83
	0,100	7222,29	0,3659	301,49
npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Uniforme	0,001	7224,82	0,3593	299,67
	0,005	7224,97	0,3539	299,56
	0,010	7225,09	0,3555	299,46
	0,020	7224,95	0,3571	299,57
	0,050	7225,41	0,356	299,09
	0,100	7223,32	0,3632	300,54

Tabela 5.47 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	<i>0,001</i>	7224,62	0,3585	299,85
	<i>0,005</i>	7224,85	0,3567	299,14
	<i>0,010</i>	7224,66	0,3591	299,76
	<i>0,020</i>	7225,03	0,3562	299,38
	<i>0,050</i>	7225,76	0,3567	298,81
	<i>0,100</i>	7223,44	0,3591	300,20
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	<i>0,001</i>	7224,16	0,3508	299,60
	<i>0,005</i>	7224,82	0,3581	299,70
	<i>0,010</i>	7224,53	0,3585	299,95
	<i>0,020</i>	7224,22	0,3586	300,20
	<i>0,050</i>	7224,45	0,3583	300,02
	<i>0,100</i>	7223,13	0,3549	301,31

A otimização com a forma de cruzamento em um ponto obteve uma diferença entre o melhor e o pior caso otimizado entre as taxas de AC em 2,63 kg/h, 63,12 kg ao dia e 1.893,60 kg ao mês em aumento da produtividade de AC.

Em todos os casos estudados os máximos obtidos com as taxas de AC ocorrem próximos à taxa de mutação de arraste de 0,01, com exceção do caso envolvendo o tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento 0,8 com cruzamento em um ponto.

Entre os melhores resultados obtidos de todas as simulações deste item envolvendo as duas formas de cruzamento (uniforme e em um ponto) a diferença entre suas taxas de AC foi de 0,35 kg/h, 8,40 kg ao dia e 252,00 kg ao mês. Essa diferença a mais ocorre quando a forma de cruzamento em um ponto é utilizada.

Na Figura 5.57, para os casos simulados com cruzamento uniforme e em um ponto, verifica-se um aumento na produtividade de AC para taxas de mutação de arraste entre 0,00 e 0,05.

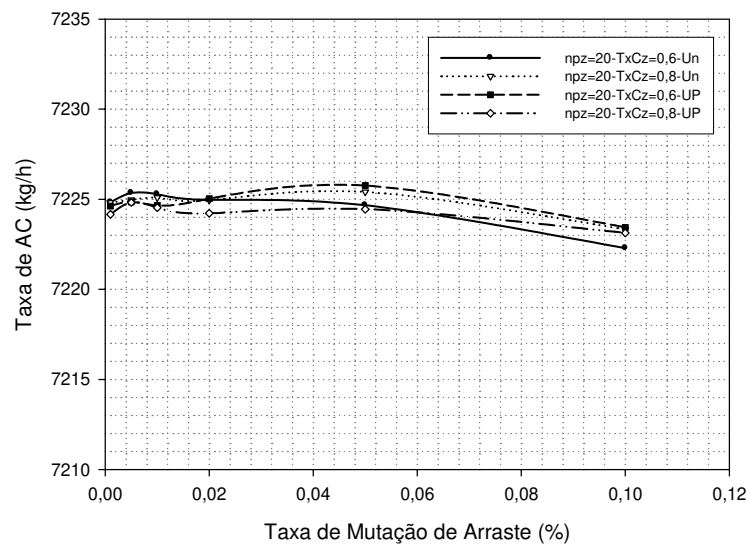


Figura 5.57 – Nível 2 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação uniforme fixa e sem nichos.

As taxas de AB possuem os menores valores quando simuladas com taxas de mutação de 0,01 (Figura 5.58).

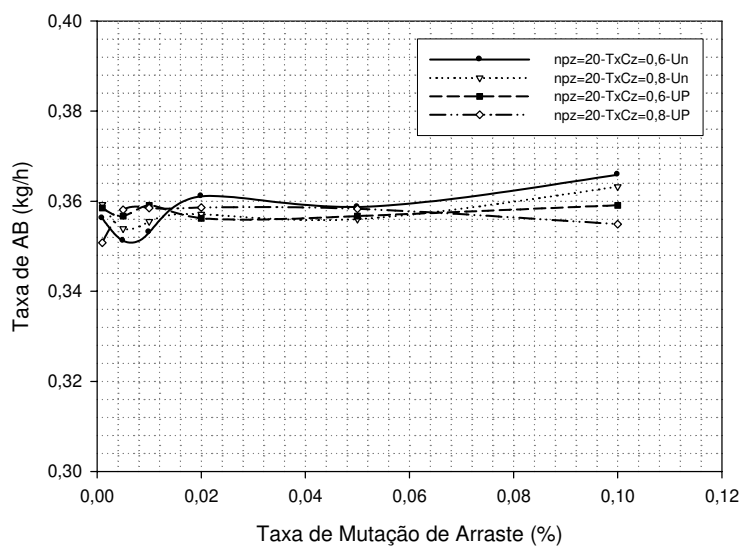


Figura 5.58 – Nível 2 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação uniforme fixa e sem nichos.

Em todos os casos os perfis são bem semelhantes. A partir da taxa de mutação com valor de 0,05 há uma diminuição das taxas de AC.

Para o subproduto C (Figura 5.59) observa-se que sua taxa praticamente permanece constante quando são utilizadas taxas de mutação com valores acima de 0,02, para todos os casos com exceção do caso de tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento 0,6 e cruzamento uniforme que apresenta um aumento considerável.

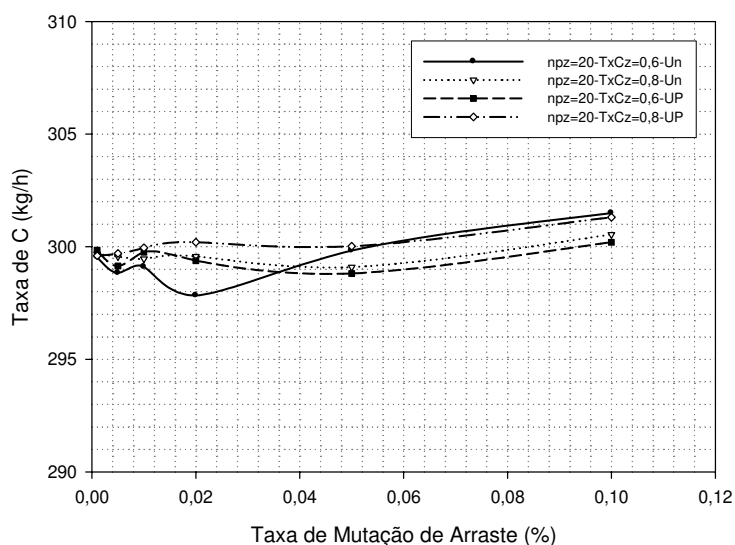


Figura 5.59 – Nível 2 - Influência da mutação de arraste na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação uniforme fixa e sem nichos.

V.2.2.4 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME MANTENDO A MUTAÇÃO DE ARRASTE FIXA E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 2 DE PRODUÇÃO

Esta análise considera a variação da mutação uniforme entre 0,001 e 0,1, fixando a taxa de mutação de arraste em 0,02 e não utilizando o operador de busca em nichos. Fez-se uma verificação de sensibilidade na produtividade de AC utilizando um tamanho da população de 20, cruzamento uniforme (Un) e em um ponto (UP) com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos.

Os resultados indicam que não houve aumento na taxa de Álcool Cíclico, observou-se que os resultados são bem próximos. Como no item anterior a não aplicação da busca em nichos não mostrou melhoria na taxa de Álcool Cíclico. Esta análise não proporcionou resultados expressivos, quando comparado com as outras análises até aqui descritas. As Tabelas 5.48 e 5.49 apresentam os resultados da simulação e as Figuras 5.60 a 5.62 ilustram os perfis de AC, AB e C respectivamente.

Utilizando o cruzamento uniforme, o melhor resultado foi de 7.225,04 kg/h considerando tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,005. Para o caso de cruzamento em um ponto, o melhor valor obtido foi de 7.225,03 kg/h com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,01.

Nas simulações envolvendo o cruzamento uniforme (Tabela 5.48) a diferença entre o melhor e o pior caso otimizado entre as taxas de AC ficou em 2,35 kg/h, 56,40 kg ao dia ou 1.692,00 kg ao mês a mais de produtividade de AC. Sendo relevante a análise de sensibilidade dos parâmetros genéticos e respectivas taxas.

Tabela 5.48 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	7224,92	0,3599	299,57
	0,005	7225,04	0,3572	299,53
	0,010	7224,97	0,3688	299,83
	0,050	7224,02	0,3496	300,17
	0,100	7223,16	0,3629	300,32
npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	7224,90	0,3564	299,65
	0,005	7224,89	0,3523	299,66
	0,010	7224,95	0,3571	299,57
	0,050	7224,24	0,3579	299,90
	0,100	7222,69	0,3633	301,01

Para a simulação com cruzamento em um ponto (Tabela 5.49) o aumento entre o melhor e o pior caso otimizado entre as produtividades de AC foi de 2,71 kg/h, 65,04 kg ao dia e 1.951,20 kg ao mês.

Tabela 5.49 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	7223,97	0,3656	299,94
	0,005	7224,88	0,3511	299,64
	0,010	7225,03	0,3562	299,38
	0,050	7223,89	0,3566	300,45
	0,100	7222,32	0,3669	301,25
npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	7223,91	0,3664	299,72
	0,005	7224,55	0,3580	299,93
	0,010	7224,22	0,3586	300,20
	0,050	7224,42	0,3577	299,97
	0,100	7222,39	0,3685	301,59

Entre as simulações envolvendo os dois melhores casos utilizando as formas de cruzamento uniforme e em um ponto (o melhor resultado de cada uma), a diferença ocorrida entre essas foi de 0,01kg/h e essa diferença em termos diários chega em 0,24 kg e 7,20 kg por mês a mais de AC quando se utiliza cruzamento uniforme.

Nesta análise observa-se que a melhor produtividade de AC ocorreu quando a simulação foi realizada com taxas de mutação entre 0,00 e 0,02 (Figura 5.60). Para valores superiores a 0,02 há diminuição de AC.

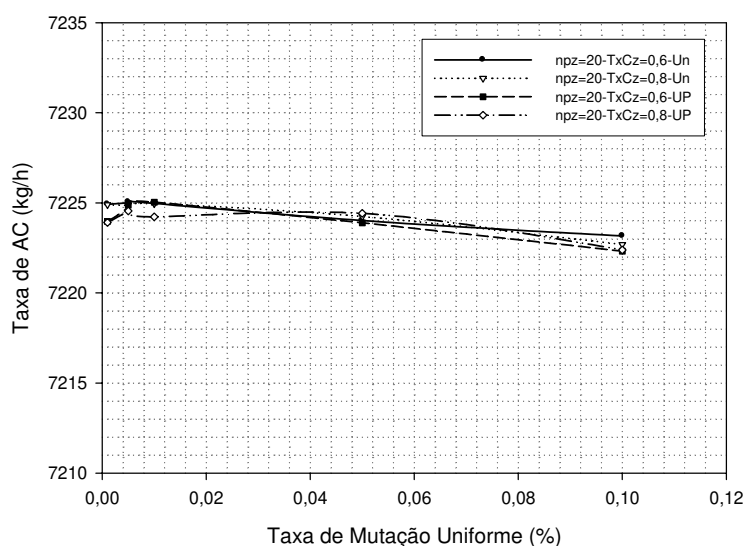


Figura 5.60 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação de arraste fixa e sem nichos.

Para o reagente AB, a taxa de mutação uniforme adequada estaria em torno de 0,01, ou valores inferiores (Figura 5.61) indicando maior consumo deste.

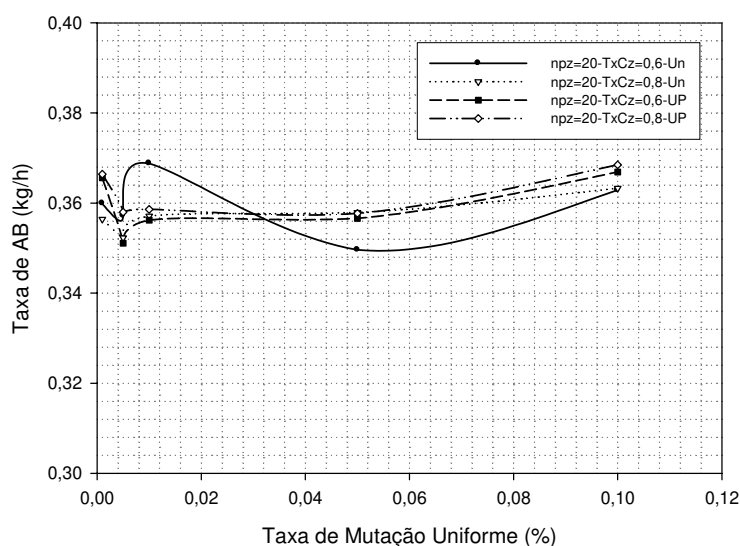


Figura 5.61 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação de arraste fixa e sem nichos.

O perfil das taxas para o subproduto C (Figura 5.62), apresenta valores constantes até que o valor da taxa de mutação atinja 0,05, onde a partir deste ocorre uma suave elevação das taxas de C.

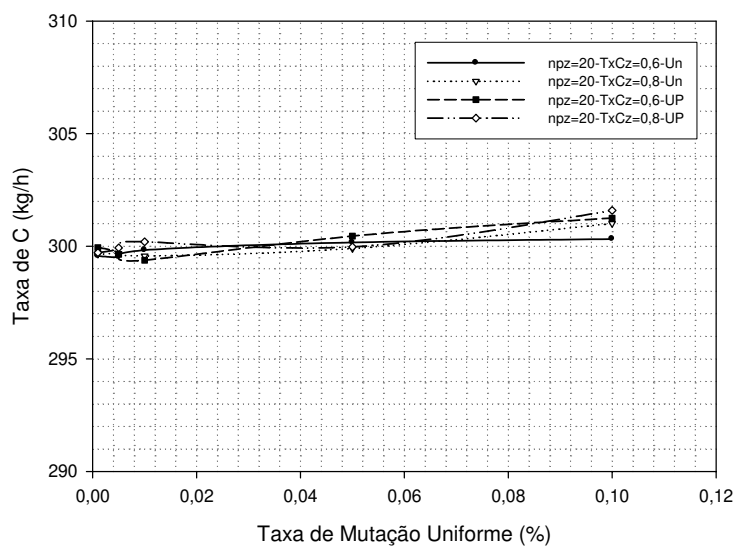


Figura 5.62 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação de arraste fixa e sem nichos.

O aumento das taxas de subproduto C conforme análise anterior indica que o produto de interesse AC está sendo decomposto. Esta é uma situação que não se deseja, pois afetará o rendimento do processo reacional, tornando o desempenho insatisfatório.

V.2.2.5 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO MUTAÇÃO DE ARRASTE E COM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 2 DE PRODUÇÃO

Neste tópico a análise foi realizada verificando a sensibilidade na produtividade de Álcool Cíclico quando se varia a taxa de mutação uniforme não considerando a mutação de arraste, mas fazendo-se uso da operação de busca em nichos.

A faixa de variação da mutação uniforme ficou entre 0,001 e 0,1 como nas outras análises, utilizando um tamanho da população de 20, cruzamento uniforme (Un) e em um ponto (UP) com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos.

Mais uma vez não foi observado melhorias no aumento da taxa de Álcool Cíclico, como nos casos anteriores (embora tenha ocorrido aumento na produtividade em relação à operação sem otimização).

As Tabelas 5.50 e 5.51 apresentam os resultados da simulação e as Figuras 5.63 a 5.65 ilustram os perfis de Álcool Cíclico (AC), de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C).

Para a forma de cruzamento uniforme o melhor resultado foi de 7.224,75 kg/h, utilizando tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação uniforme de 0,01.

Na situação onde foi utilizado o cruzamento em um ponto, o melhor valor obtido foi de 7.224,27 kg/h com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,05.

Para simulação considerando o cruzamento uniforme a diferença de produtividades de AC entre o melhor e o pior caso otimizado foi de 3,16 kg/h, 75,84 kg ao dia e 2.275,20 kg ao mês. A Tabela 5.50 apresenta os resultados do caso de cruzamento uniforme.

Tabela 5.50 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e com busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,00		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	7221,96	0,3646	300,70
	0,005	7222,55	0,3560	301,57
	0,010	7223,77	0,3404	300,93
	0,050	7223,26	0,3485	300,67
	0,100	7221,59	0,3695	302,21
npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,00		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	7221,80	0,3459	302,19
	0,005	7223,58	0,3589	300,72
	0,010	7224,75	0,3597	300,94
	0,050	7223,35	0,3506	300,67
	0,100	7221,98	0,3577	302,28

Com a utilização do cruzamento em um ponto os resultados são bem semelhantes às situações anteriores, onde se verifica que não ocorrem grandes diferenças entre o pior e o melhor caso simulado. Essa diferença observada entre as produtividades de AC entre o melhor e o pior caso otimizado foi de 3,01 kg/h, 72,24 kg ao dia e 2.167,20 kg ao mês (de AC). Na Tabela 5.51 é apresentado os resultados deste caso analisado.

Tabela 5.51 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e com busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	7223,58	0,3442	300,64
	0,005	7224,22	0,3423	300,22
	0,010	7223,19	0,3523	301,06
	0,050	7224,27	0,3573	300,67
	0,100	7222,13	0,3666	301,51
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	7222,56	0,3570	301,56
	0,005	7224,08	0,3544	300,26
	0,010	7223,58	0,3561	300,64
	0,050	7223,68	0,3578	300,49
	0,100	7221,26	0,3678	302,54

Nas simulações envolvendo os dois melhores casos obtidos (em termos de produtividade de AC), que utilizam as formas de cruzamento uniforme e em um ponto (o melhor resultado de cada uma), a diferença ocorrida entre estes ficou em 0,48 kg/h e essa diferença em termos diários chega em 11,52 kg e 345,60 kg por mês a mais, quando se utiliza a forma de cruzamento uniforme.

Este tópico evidencia que as melhores produtividades de AC ocorrem com taxas de mutação uniforme em torno de 0,01.

A Figura 5.63 apresenta estes perfis. Valores da taxa de mutação entre 0,01 e 0,05 fornecem produtividades praticamente constantes e após ocorre diminuição.

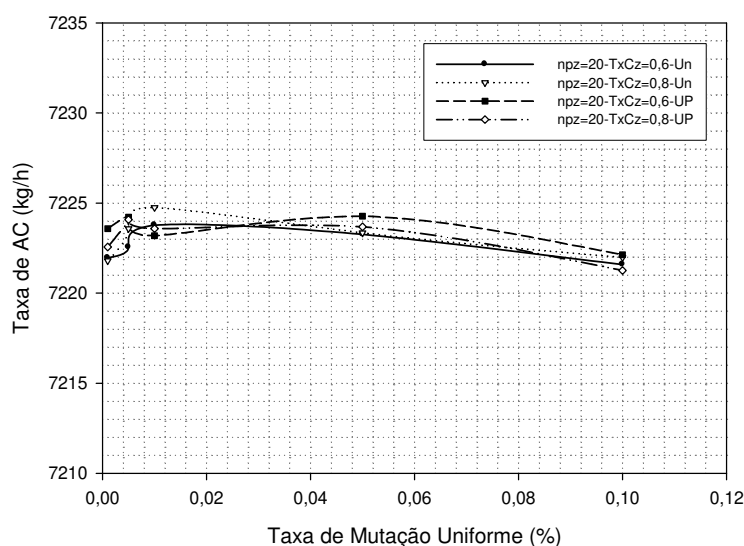


Figura 5.63 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e com busca em nichos.

A Figura 5.64 apresenta o perfil das taxas de AB e os menores valores são obtidos com taxas de mutação uniforme inferiores a 0,01.

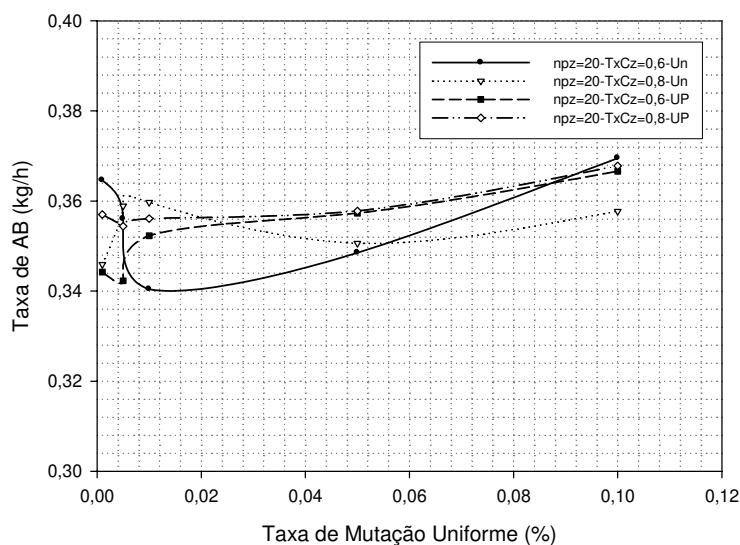


Figura 5.64 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e com busca em nichos.

Os perfis das taxas de subproduto C são apresentados na Figura 5.65. Com taxas de mutação em torno de 0,01 são obtidas as menores taxas de C, isso confirma que a taxa de mutação ideal para este caso estudado fica nas proximidades do valor de 0,01.

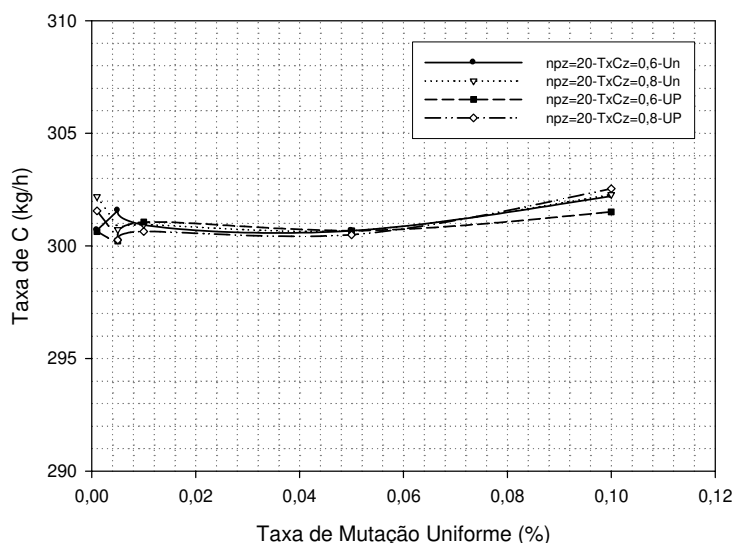


Figura 5.65 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e com busca em nichos.

V.2.2.6 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO MUTAÇÃO DE ARRASTE E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 2 DE PRODUÇÃO

Nesta última análise de sensibilidade na produtividade de Álcool Cíclico, não foram utilizadas a mutação de arraste e o operador de busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variaram entre 0,001 e 0,1, utilizando também o mesmo tamanho populacional de 20, cruzamento uniforme (Un) e em um ponto (UP) com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos. Mais uma vez não houve aumento da taxa de Álcool Cíclico, ou melhor, ocorreu uma constância dos valores quando comparado com as situações anteriores.

As Tabelas 5.52 e 5.53 apresentam os resultados da simulação e as Figuras 5.66 a 5.68 ilustram os perfis de Álcool Cíclico (AC), de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) respectivamente.

Os dois melhores resultados foram: para o cruzamento uniforme com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,01, a taxa de Álcool Cíclico foi de 7.225,21 kg/h.

Na análise com a forma de cruzamento em um ponto, com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,05 o valor da taxa de Álcool Cíclico obtida foi de 7.224,86 kg/h.

Na situação com o cruzamento uniforme o aumento da produtividade de AC entre o melhor e o pior caso otimizado foi de 3,58 kg/h, 85,92 kg ao dia e 2.577,60 kg ao mês, sendo importante a avaliação dos parâmetros genéticos para uma melhoria do desempenho reacional.

Tabela 5.52 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), valores em kg/h) para o Nível 2 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	7221,63	0,3700	300,18
	0,005	7224,52	0,3556	299,95
	0,010	7225,21	0,3555	299,27
	0,050	7224,67	0,3586	299,62
	0,100	7222,37	0,3689	301,22
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	7223,40	0,3542	300,86
	0,005	7224,88	0,3566	299,66
	0,010	7224,42	0,3584	300,01
	0,050	7224,21	0,3570	300,12
	0,100	7222,63	0,3655	301,29

Nas simulações envolvendo a forma de cruzamento em um ponto, essa diferença (entre o melhor e o pior caso otimizado) ficou em 3,27 kg/h, 78,48 kg ao dia ou 2.354,40 kg ao mês. Este estudo confirma a importância da escolha dos valores corretos para os parâmetros genéticos e respectivas taxas em uma otimização podendo assim promover melhorias consideráveis no desempenho do processo. A Tabela 5.80 apresenta as simulações deste caso estudado.

Tabela 5.53 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 2 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	7223,25	0,3499	300,10
	0,005	7224,60	0,3420	298,79
	0,010	7224,37	0,3448	299,21
	0,050	7224,86	0,3405	298,55
	0,100	7221,59	0,3544	302,09
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	7223,04	0,3509	300,50
	0,005	7223,74	0,3488	299,69
	0,010	7224,72	0,3416	298,91
	0,050	7224,23	0,3448	298,95
	0,100	7222,65	0,3621	301,96

Entre as simulações envolvendo os dois melhores casos utilizando as formas de cruzamento uniforme e em um ponto (o melhor resultado de cada uma), a diferença ocorrida para as melhores taxas de AC ficou em 0,35 kg/h e essa diferença em termos diários chega em 8,40 kg e 252,00 kg por mês a mais, quando foi utilizada a forma de cruzamento uniforme.

As produtividades de AC têm seus melhores valores ao redor da taxa de mutação uniforme de 0,01. Para taxas maiores a produtividade diminui conforme a Figura 5.66.

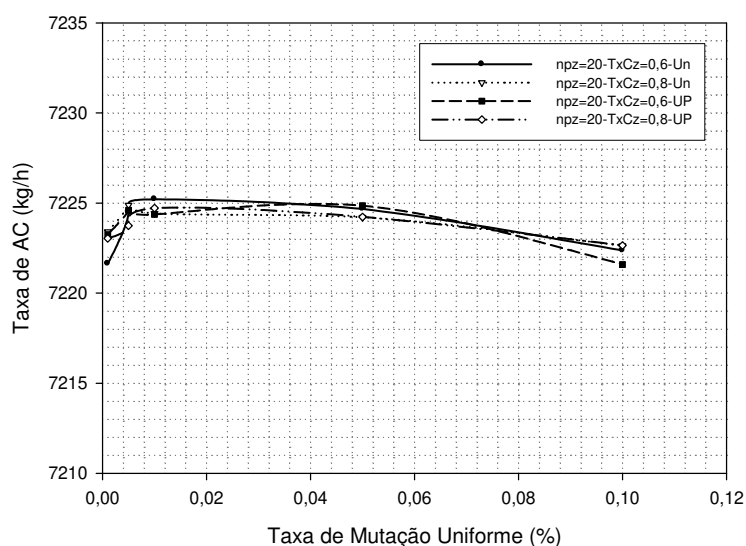


Figura 5.66 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e busca em nichos.

A confirmação de maior produtividade de AC acontece com a evidência das menores taxas de AB que aparecem em torno do valor de taxa de mutação de 0,01 (Figura 5.67).

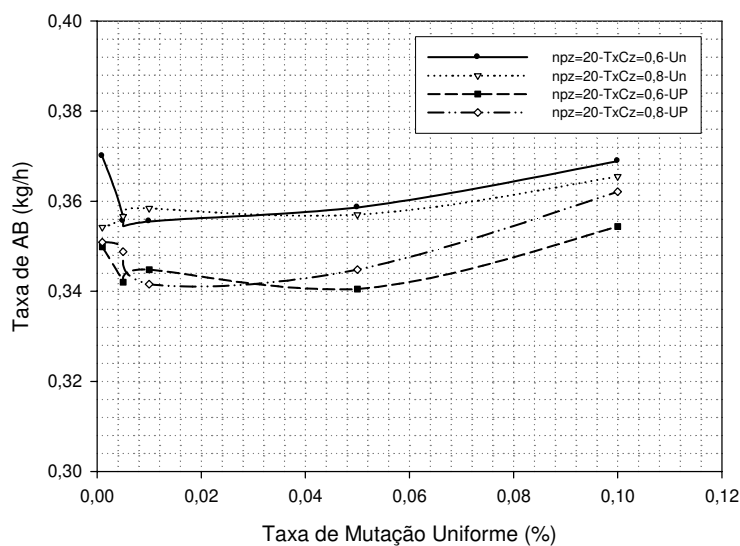


Figura 5.67 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e busca em nichos.

Para o subproduto C, a ocorrência das menores taxas, ocorrem em valores das taxas de mutação próximos a 0,01 (Figura 5.68), onde são observados as melhores produtividades de AC e menores taxas de AB.

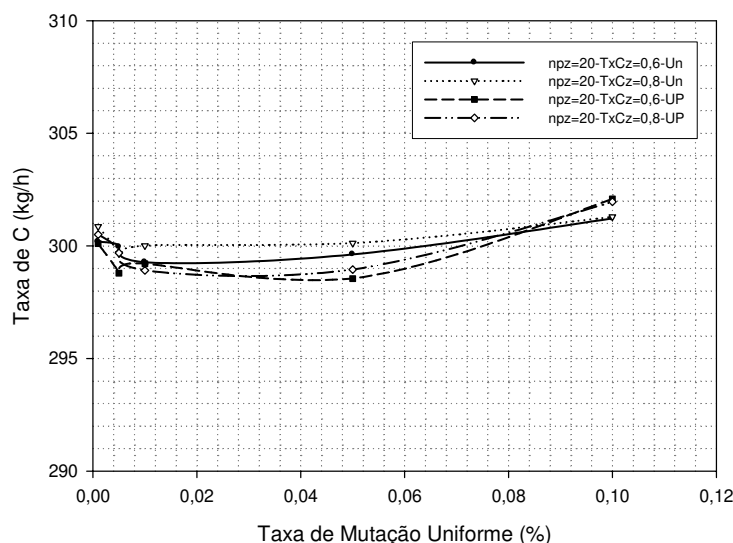


Figura 5.68 – Nível 2 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e busca em nichos.

V.2.3 SÍNTESE DAS ANÁLISES DO NÍVEL 2 DE PRODUÇÃO

Foram selecionados os dois melhores casos simulados, um deles considerando a forma de cruzamento uniforme e o outro, a em um ponto, que forneceram os melhores desempenhos na otimização (melhores produtividades de Álcool Cíclico). A Tabela 5.54 apresenta os resultados da otimização para os dois melhores casos.

Para o caso que se utilizou o cruzamento uniforme o conjunto de parâmetros genéticos que permitiu o melhor desempenho ocorreu quando foi considerado o tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,8, não utilizando a busca em nichos, tendo a taxa de mutação de arraste um valor de 0,05, a taxa de mutação uniforme com o valor fixo de 0,01 e 500 gerações, resultados estes provenientes da análise do item V.2.2.3. As taxas dos

componentes principais obtidas pela otimização foram: 7.225,41 kg/h (Álcool Cíclico - AC), 0,3560 kg/h (Álcool Benzílico - AB) e 299,09 kg/h (Cicloalcano - C).

Utilizando o cruzamento em um ponto o conjunto de parâmetros genéticos aplicados considerou o tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,6, não utilizando a operação com busca em nichos, a taxa de mutação de arraste teve o valor de 0,05, a taxa de mutação uniforme de 0,01 (valor fixo para todas as simulações) e usando 500 gerações, relativos à análise do item V.2.2.3.

As taxas dos componentes principais obtidas para esta otimização foram: 7.225,76 kg/h (Álcool Cíclico - AC), 0,3567 kg/h (Álcool Benzílico - AB) e 298,81 kg/h (Cicloalcano - C).

Outra observação foi a redução da taxa de catalisador utilizada no reator, quando utilizado cruzamento uniforme a redução ocorreu de 376,00 para 281,80 kg/h (uma redução de 94,20 kg/h, 2.260,80 kg ao dia ou 67.824,00 kg ao mês) e na situação utilizando o cruzamento em um ponto a redução foi de 376,00 para 281,80 kg/h (a mesma).

Por fim, observou-se um aumento elevado nas taxas de fluido refrigerante de 6.730,00 para 15.623,12 kg/h (cruzamento uniforme) e de 6.730,00 para 19.604,15 kg/h (cruzamento em um ponto).

Esse aumento indica uma elevação da temperatura reacional, ou seja, em outras palavras eleva-se o custo energético. Mesmo com a elevação de custos através do aumento de temperatura, este não terá tanto impacto na elevação do custo do processo reacional como um todo.

Esta situação é anulada por uma diminuição acentuada das taxas de catalisador (produto de custo muito alto) e pelo aumento da produtividade de AC que tem uma

elevação de 100,01 kg/h (diferença entre o melhor valor operacional otimizado pelo valor não otimizado) para o caso com cruzamento uniforme e de 100,36 kg/h para o caso com cruzamento em um ponto.

Isso representaria de forma aproximada para os dois casos em questão 2.400,00 kg por dia ou 72.000,00 kg ao mês a mais de AC na produção. Um aumento extremamente considerável.

A síntese dos resultados para ambas as formas de cruzamento (melhores casos para cada forma de cruzamento entre todas as simulações realizadas) estão representadas pela Tabela 5.54.

Tabela 5.54 – Síntese dos resultados das simulações do Nível 2, apresentando os valores dos parâmetros operacionais otimizados para os dois melhores casos (cruzamentos uniforme e em um ponto).

Nível 2			
		<i>GA(20 - 0,8 - 0,01 - 0,05 - 500)</i>	<i>GA(20 - 0,6 - 0,01 - 0,05 - 500)</i>
<i>Parâmetros Operacionais</i>	<i>Não Otimizado</i>	<i>Uniforme Otimizado</i>	<i>Um Ponto Otimizado</i>
Q_{r1}	360,00	9040,39	6453,45
Q_{r2}	380,00	792,51	9522,61
Q_{r3}	2740,00	3101,48	1434,86
Q_{r4}	660,00	115,11	178,56
Q_{r5}	1190,00	2080,24	1769,64
Q_{r6}	1400,00	493,39	245,03
T_0	173,00	170,00	170,00
Q_{cat}	376,00	281,80	281,80
Q_{AC}	7125,40	7225,41	7225,76
Q_{AB}	0,3700	0,3560	0,3567
Q_C	359,60	299,09	298,81
Consumo de Q_{r1}'s (kg/h)	6730,00	15623,12	19604,15

Outro fato analisado foi uma redução das taxas de Álcool Benzílico e Cicloalcano para ambas as formas de cruzamento.

No cruzamento uniforme o melhor caso otimizado forneceu uma redução de AB de 0,014 kg/h, 0,37 kg ao dia ou 10,08 kg por mês. Para o subproduto C a redução foi de 60,60 kg/h, 1.454,40 kg por dia, ou 43.632,00 kg ao mês. A redução de C é muito significativa e importante.

O cruzamento em um ponto promoveu a redução das taxas de AB em torno de 0,0133 kg/h, 0,3192 kg ao dia, ou 9,58 kg por mês. Para C a redução foi de 60,88 kg/h, 1.461,12 kg por dia, ou 43.833,60 kg ao mês. Mais uma vez verifica-se uma redução de C muito significativa.

A Figura 5.69 evidencia o perfil de produtividade em função do número de gerações adotadas nas simulações das otimizações com os casos de melhor desempenho citados anteriormente e na sequência os perfis das taxas dos componentes principais que estão envolvidos no processo reacional antes e após a otimização. O aumento da produtividade de Álcool Cíclico é evidenciado quando comparado com a situação não otimizada.

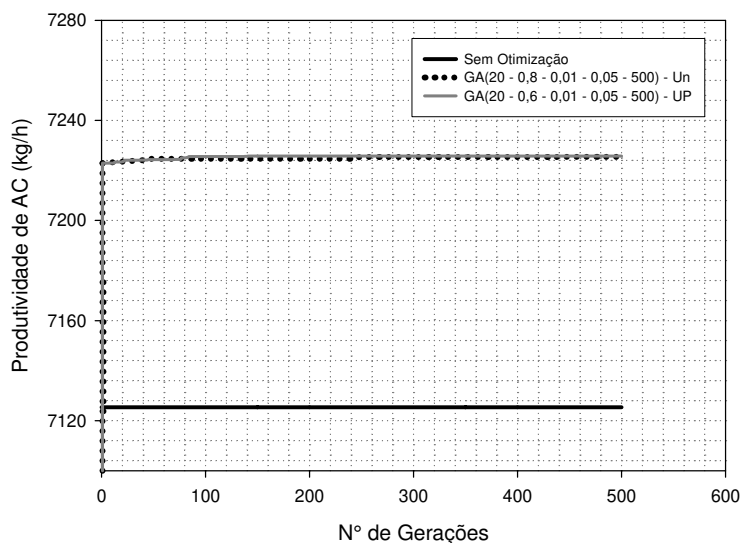


Figura 5.69 - Perfil da evolução da otimização do Nível 2 dos dois melhores resultados, utilizando as duas formas de cruzamento (uniforme (Un) e em um ponto (UP)).

As Figuras 5.70 a 5.76 ilustram os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB), Cicloalcano (C) e de Água utilizando os parâmetros otimizados dos dois melhores casos observados para o Nível 2 de produção ao longo do comprimento axial do reator (percurso total percorrido pelos reagentes e produtos desde a entrada até a saída do conjunto de módulos tubulares - reator).

Nas figuras são apresentadas as situações: não otimizada pelo modelo, otimizada (cruzamento uniforme – Un), e otimizada (cruzamento em um ponto – UP). Para o perfil de temperatura foram considerados os dados experimentais medidos ao longo do reator como forma de comparação.

Com relação à temperatura, os perfis possuem semelhança quando comparado com os dados experimentais e as simulações sem otimização. A Figura 5.70 apresenta os perfis de temperatura ao longo do comprimento axial do reator.

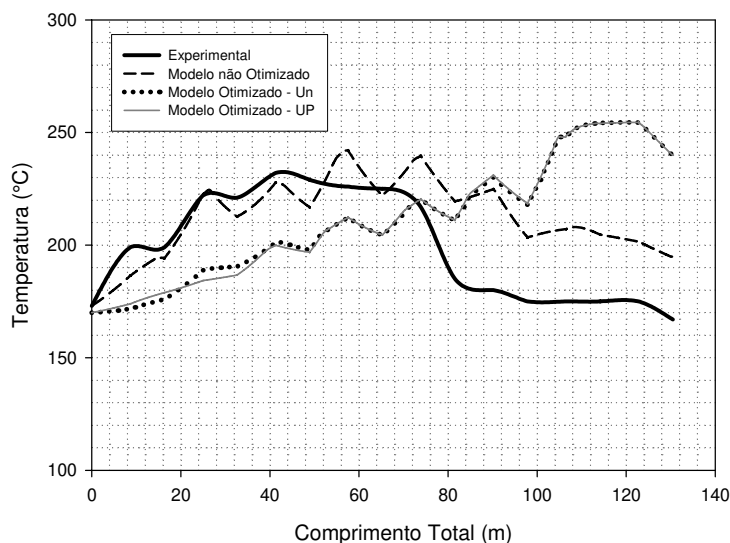


Figura 5.70 – Nível 2 - Perfis de temperatura ao longo do reator.

O perfil de conversão de AB ao longo do comprimento axial do reator pode ser observado na Figura 5.71.

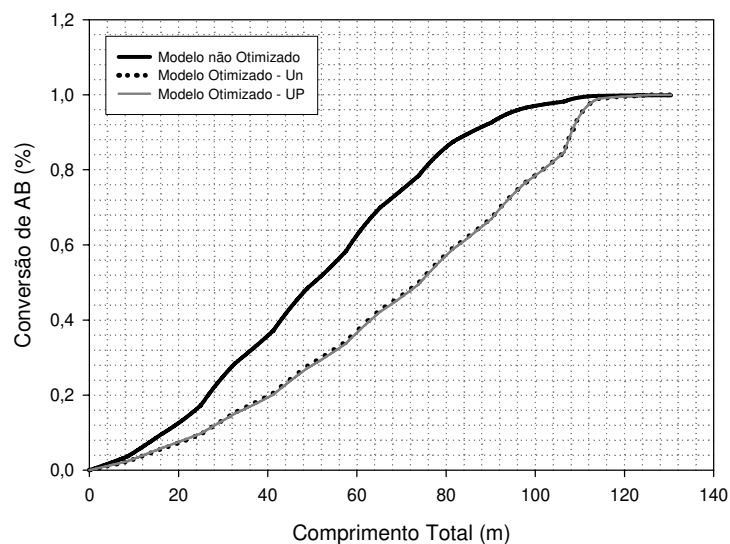


Figura 5.71 – Nível 2 - Perfis de conversão de Álcool Benzílico (AB) ao longo do reator.

Os perfis dos casos otimizados (melhor caso utilizando cruzamento uniforme e em um ponto respectivamente) praticamente se sobrepõem com mínimas diferenças, apresentando um desvio em relação ao caso não otimizado. Na sequência são apresentados outros resultados através dos perfis de frações molares e conversões.

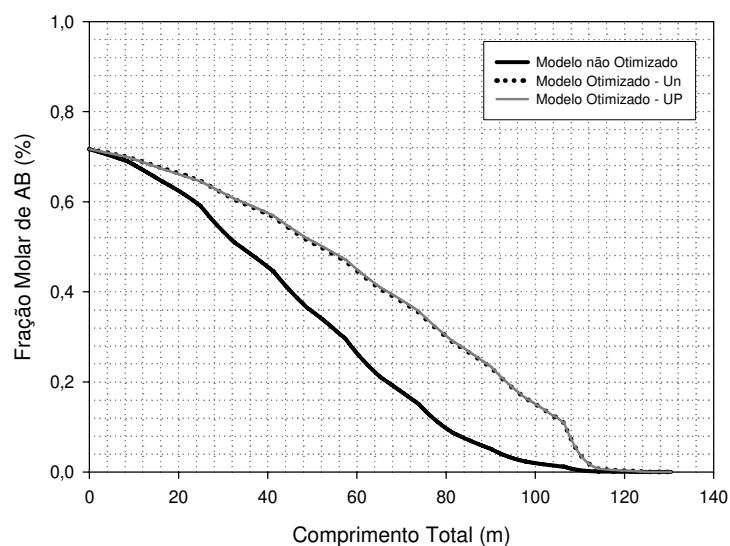


Figura 5.72 – Nível 2 - Perfis de fração molar de Álcool Benzílico (AB) ao longo do reator.

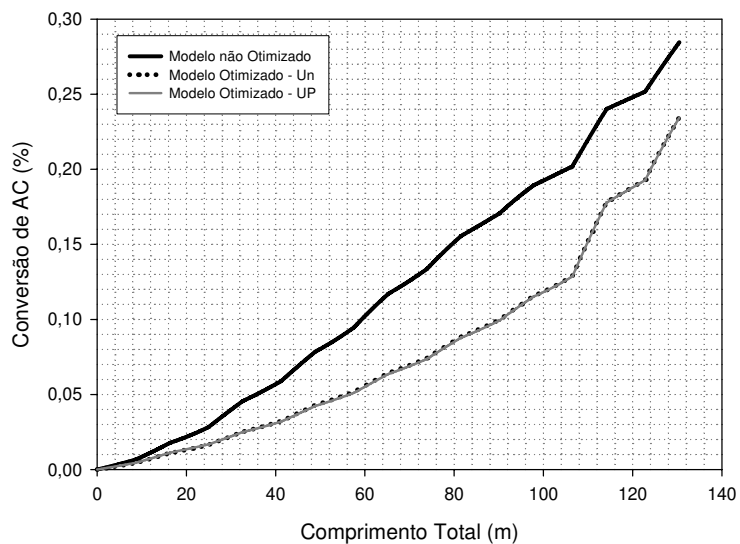


Figura 5.73 – Nível 2 - Perfis de conversão de Álcool Cíclico (AC) ao longo do reator.

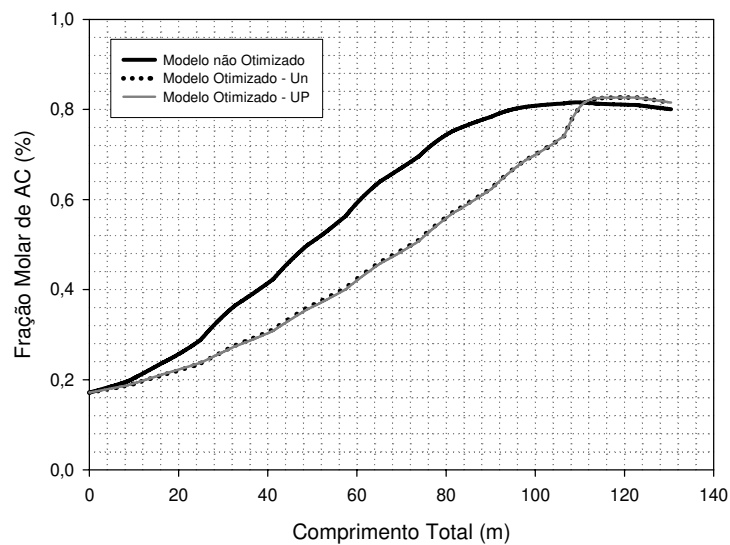


Figura 5.74 – Nível 2 - Perfis de fração molar de Álcool Cíclico (AC) ao longo do reator.

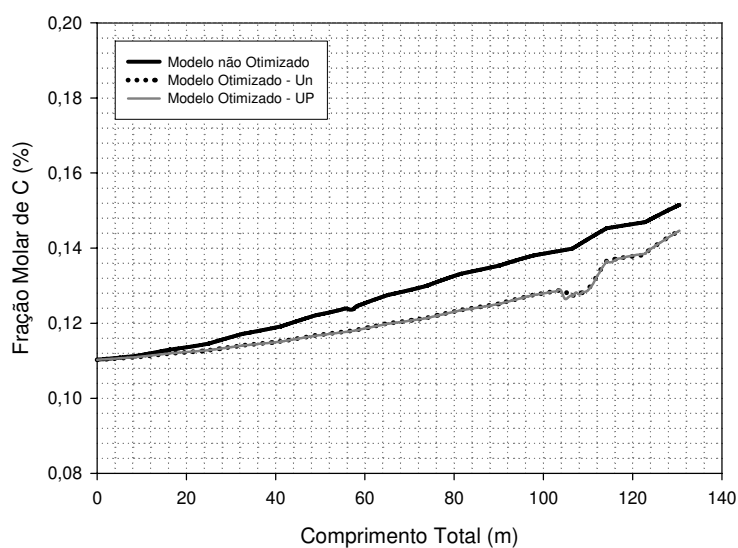


Figura 5.75 – Nível 2 - Perfis de fração molar de Cicloalcano (C) ao longo do reator.

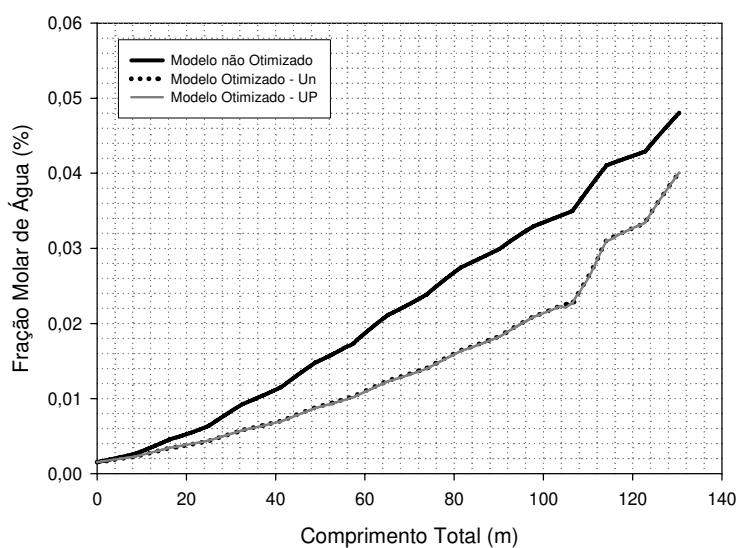


Figura 5.76 – Nível 2 - Perfis de fração molar de Água ao longo do reator.

Em todas as simulações envolvendo os melhores casos (considerando cruzamento uniforme e em um ponto) os resultados indicam maior produtividade de AC (produto de

interesse) com diminuições das taxas de reagente principal AB e do subproduto C (indesejado).

Os perfis reacionais seguem o modelo com um pequeno desvio, como os perfis do Nível 1, mas que não influencia no objetivo final, que visa aumentar a produtividade de AC, procurando limitar e evitar uma conversão não adequada de AB e decomposição do produto principal a C.

A diferença entre as taxas de AC dos melhores resultados (7.225,41 kg/h – cruzamento uniforme e 7.225,76 kg/h – cruzamento em um ponto) de toda esta análise fornece um valor de 0,35 kg/h, 8,40 kg ao dia e 252,00 kg ao mês a mais, quando se utiliza a forma de cruzamento em um ponto. Uma diferença pequena, mas que pode ser relevante para suprir pequenos custos operacionais.

V.3 ANÁLISE DO NÍVEL 3 DE PRODUÇÃO DE ÁLCOOL CÍCLICO

As simulações realizadas tiveram para este nível de produção o mesmo propósito em relação às simulações dos níveis anteriores. Foram consideradas as mesmas situações para análise e estudo, sendo constatado a melhoria do desempenho (aumento da produtividade de Álcool Cíclico) e reduções de reagente AB e subproduto C, além do catalisador.

Os estudos se iniciaram utilizando as recomendações básicas na aplicação do código genético e conseqüentemente outras análises mais complexas foram realizadas procurando verificar a influência de variabilidades dos parâmetros genéticos do código na produtividade de Álcool Cíclico (como nos casos anteriores). Foram analisados os tamanhos populacionais, formas de cruzamento (uniforme (Un) e em um ponto (UP)) com suas respectivas variações de taxas. Além dessas analisou-se também a utilização da mutação uniforme (ou troca de bits) e de arraste considerando o efeito de suas flutuações

bem como a influência da não utilização da mutação de arraste. O estudo é finalizado através da análise da influência da busca em nichos com flutuações de ambas as taxas de mutação uniforme e de arraste respectivamente (as mesmas análises que foram realizadas para os Níveis 1 e 2 produção).

Após as análises e prognósticos verificou-se o comportamento do modelo junto aos parâmetros otimizados procurando analisar se ocorrem desvios consideráveis ou impossibilidades de operação do reator de produção de Álcool Cíclico.

As simulações que analisaram as flutuações das taxas de mutação (uniforme e/ou de arraste) utilizando busca em nichos foram realizadas utilizando populações com tamanhos de 20 e 40 respectivamente e quando o estudo foi referenciado aos casos sem a busca em nichos e sem mutação de arraste utilizou-se o tamanho da população igual a 20 como realizadas nos Níveis 1 e 2 de produção respectivamente.

A produtividade de AC deste nível operacional sem otimização foi de 6.855,40 kg/h (ao final do processo reacional), para o reagente AB foi de 0,0760 kg/h e o subproduto C teve uma taxa de 476,20 kg/h.

V.3.1 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DO TAMANHO POPULACIONAL, DA FORMA DE CRUZAMENTO E DAS TAXAS DE CRUZAMENTO NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 3 DE PRODUÇÃO

Esta análise considerou o operador de busca em nichos, cruzamento uniforme e em um ponto (com taxas variáveis), mutação uniforme e de arraste (ambas com valores fixos) e número de gerações igual a 500 (valor fixo utilizado para todas as simulações). O estudo objetivou verificar a influência do aumento do tamanho populacional na produtividade do produto de interesse (Álcool Cíclico) tomando o cuidado para evitar o aumento das taxas do

reagente AB e de subproduto C. Os valores fixados para as taxas de mutação uniforme e de arraste foram de 0,01 e 0,02 respectivamente.

Os resultados desses estudos para este nível de produção são apresentados nas Tabelas 5.55 a 5.64, onde foi analisada a influência do tamanho populacional para a forma de cruzamento uniforme e em um ponto (tamanhos populacionais de 20, 30, 40 e 50 respectivamente) e a influência das sensibilidades de suas respectivas taxas de cruzamento na produtividade de AC.

Neste caso estudado pôde ser observada uma influência razoável do tamanho populacional e das taxas de cruzamento nas taxas de Álcool Cíclico, mas como já mencionado para os outros dois níveis de produção essas diferenças são importantes para elevação da produção diária ou mensal. Como nos casos anteriores as análises se limitaram às taxas de cruzamento entre 0,4 e 0,8 (para ambas as formas de cruzamento), outros valores foram testados fora destes limites e os resultados foram inferiores (não satisfatórios) não possuindo representatividade nas análises de otimização (resultados não apresentados).

Os melhores resultados foram obtidos com tamanhos de 20 e 40 respectivamente (observou-se que as análises com tamanho populacional de 30 também foram semelhantes e em alguns casos com melhor desempenho, mas essas ocorreram de forma isolada e não uniforme), embora não tenham ocorrido grandes e significativas variações. Utilizando o tamanho populacional de 50 o desempenho não foi satisfatório como em todos os casos analisados (ocorreram os menores valores de produtividade em quase todas as simulações com poucas exceções). Esta situação foi comum em todos os níveis de produção.

As Tabelas 5.55 a 5.59 apresentam os resultados das simulações para o caso de cruzamento uniforme, onde o melhor resultado ocorreu fazendo-se uso do tamanho populacional de 30 e taxa de cruzamento de 0,5, e a produtividade de AC encontrada foi de 6.985,15 kg/h e a diferença entre o melhor e pior caso otimizado entre as taxas de AC foi de 8,59 kg/h, 206,16 kg ao dia e 6.184,80 kg ao mês, um valor acrescido a não ser dispensado.

Tabela 5.55 - Influência do tamanho populacional na produtividade do Nível 3, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,4.

Nível 3	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,4	6983,77
30	0,4	6984,53
40	0,4	6984,56
50	0,4	6978,22
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	6855,40	

Tabela 5.56 - Influência do tamanho populacional na produtividade do Nível 3, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,5.

Nível 3	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,5	6982,89
30	0,5	6985,15
40	0,5	6984,86
50	0,5	6977,21
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	6855,40	

Tabela 5.57 - Influência do tamanho populacional na produtividade do Nível 3, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,6.

Nível 3	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,6	6983,82
30	0,6	6979,81
40	0,6	6984,79
50	0,6	6979,32
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	6855,40	

Tabela 5.58 - Influência do tamanho populacional na produtividade do Nível 3, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,7.

Nível 3	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,7	6976,56
30	0,7	6985,11
40	0,7	6982,08
50	0,7	6980,57
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	6855,40	

Tabela 5.59 - Influência do tamanho populacional na produtividade do Nível 3, considerando cruzamento uniforme e taxa de cruzamento de 0,8.

Nível 3	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento Uniforme</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,8	6979,94
30	0,8	6984,88
40	0,8	6983,92
50	0,8	6981,78
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	6855,40	

Nas Tabelas 5.60 a 5.64 são apresentados os resultados provenientes das simulações utilizando a forma de cruzamento em um ponto utilizando os mesmos operadores genéticos e valores, que foram utilizados na otimização do caso com o cruzamento uniforme.

O melhor resultado obtido foi de 6.985,41 kg/h, com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento 0,5, onde foi observada uma diferença entre o melhor e o pior caso otimizado de 10,18 kg/h, significando 244,32 kg ao dia e 7.329,60 kg ao mês de aumento de produtividade de AC, sendo um resultado muito expressivo na produção.

Tabela 5.60 - Influência do tamanho populacional na produtividade do Nível 3, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,4.

Nível 3	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Nichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,4	6976,78
30	0,4	6980,34
40	0,4	6977,15
50	0,4	6980,05
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização	6855,40	

Tabela 5.61 - Influência do tamanho populacional na produtividade do Nível 3, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,5.

Nível 3	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,5	6985,41
30	0,5	6975,23
40	0,5	6983,84
50	0,5	6980,01
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização		6855,40

Tabela 5.62 - Influência do tamanho populacional na produtividade do Nível 3, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,6.

Nível 3	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,6	6984,53
30	0,6	6984,85
40	0,6	6983,58
50	0,6	6979,47
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização		6855,40

Tabela 5.63 - Influência do tamanho populacional na produtividade do Nível 3, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,7.

Nível 3	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,7	6982,96
30	0,7	6985,08
40	0,7	6984,76
50	0,7	6980,12
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização		6855,40

Tabela 5.64 - Influência do tamanho populacional na produtividade do Nível 3, considerando cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento de 0,8.

Nível 3	Tamanho Populacional de 20, 30, 40 e 50	
<i>Com Busca em Niichos</i>	<i>Com Elitismo</i>	<i>Cruzamento em Um Ponto</i>
<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>	<i>Taxa de Mutação de Arrate = 0,02</i>	<i>Número de Gerações = 500</i>
Tamanho da População	Taxa de Cruzamento	Produtividade de AC (kg/h)
20	0,8	6985,24
30	0,8	6978,14
40	0,8	6983,90
50	0,8	6977,29
Produtividade de AC (kg/h) s/ Otimização		6855,40

Comparando os melhores resultados obtidos um para cada caso de cruzamento (uniforme e em um ponto), a diferença entre suas taxas de AC ficou em 0,26 kg/h, 6,24 kg ao dia e 187,20 kg ao mês, uma diferença razoável entre os melhores casos otimizados (relacionados à forma de cruzamento) que devido ao alto valor agregado do produto determina uma vantagem financeira.

Os piores resultados otimizados, verificados anteriormente, ocorreram quando utilizado o tamanho da população de 50 (mesmo inferior às outras situações este caso promoveu aumento da produtividade de AC). Esta conclusão é obtida pela observação das produtividades de AC em todas as simulações onde foram encontrados valores inferiores às demais envolvendo outros tamanhos populacionais. Esta situação também ocorreu nos outros dois níveis de produção estudados (Níveis 1 e 2).

Em relação à utilização de catalisador, observou-se que houve acentuada redução de suas taxas (resultados não apresentados), indicativo de diminuição de custos operacionais. Situação comum nos três níveis operacionais.

As Figuras 5.77 a 5.82, que evidenciam esta análise referente ao tamanho populacional e as taxas de cruzamento, podem ser verificadas na sequência para ambas as formas de cruzamento. As figuras estão dispostas em sequência de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), apresentando as formas de cruzamento uniforme e em um ponto para cada componente, da mesma forma dos níveis de produção anteriores.

As Figuras 5.77 e 5.78 são referentes aos perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), as Figuras 5.79 e 5.80 aos perfis das taxas de Álcool Benzílico e as Figuras 5.81 e 5.82 aos perfis das taxas de Cicloalcano (C).

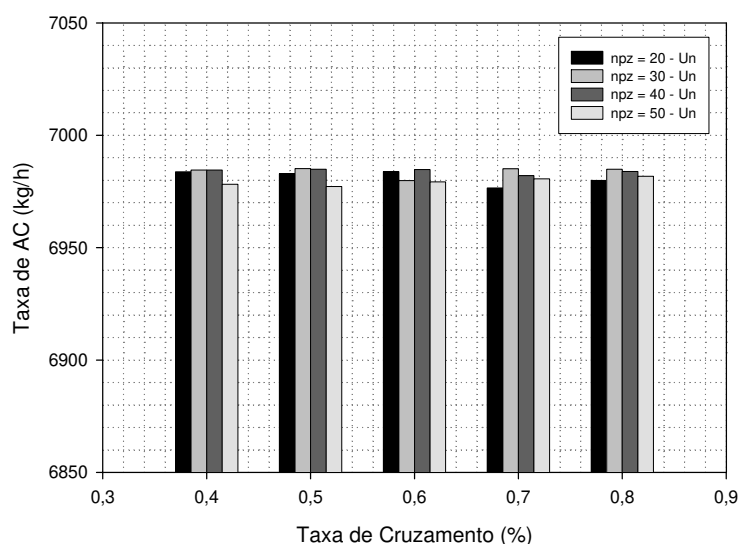


Figura 5.77 – Nível 3 - Análise das taxas de cruzamento e do tamanho da população na produtividade de Álcool Cíclico (AC) - Cruzamento Uniforme (Un).

Nesta primeira análise (considerando cruzamento uniforme) um bom desempenho nas simulações foi obtido para o caso de tamanho populacional 30 excetuando-se o caso com taxa de cruzamento 0,6 que pode ser confirmado pela Figura 5.77.

Bons resultados também são obtidos com tamanho populacional de 40, embora estes sejam um pouco inferiores.

A Figura 5.78 representa as simulações utilizando o cruzamento em um ponto, onde os melhores resultados foram obtidos para o caso que utiliza tamanho populacional de 20, com apenas um dos casos tendo um desempenho inferior (caso com tamanho populacional de 20 e taxa de cruzamento de 0,4).

Em outras simulações de tamanhos populacionais diferentes alguns bons resultados são observados, mas são inferiores à situação com tamanho populacional de 20 que foi àquela de melhor desempenho.

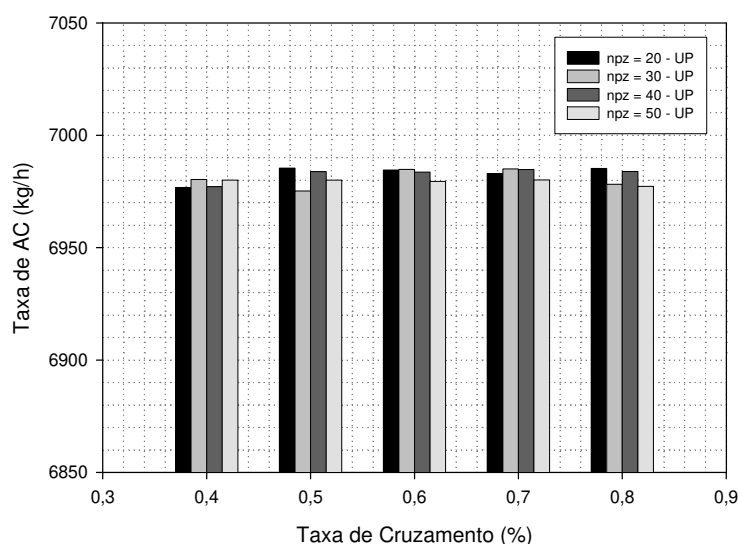


Figura 5.78 – Nível 3 - Análise da taxa de cruzamento e do tamanho da população na produtividade de Álcool Cíclico (AC) - Cruzamento em Um Ponto (UP).

A Figura 5.79 apresenta os resultados das taxas de AB das simulações considerando cruzamento uniforme. Maiores taxas (mais uniformes nas várias simulações) ocorrem com tamanhos populacionais de 30 e 40 respectivamente, com poucas exceções, significando menos conversão ao AC.

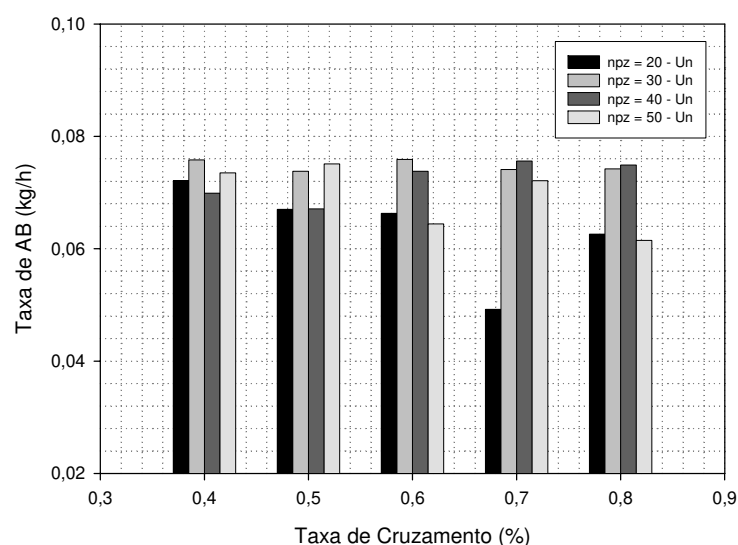


Figura 5.79 – Nível 3 - Análise das taxas de cruzamento e do tamanho da população na taxa de Álcool Benzílico (AB) - Cruzamento Uniforme (Un).

A figura na sequência (Figura 5.80) apresenta as simulações considerando o cruzamento em um ponto.

Pelas taxas de AB obtidas ao final do processo reacional (cruzamento uniforme), verifica-se que este reagente é mais consumido e convertido ao AC quando utilizado tamanho populacional de 20, pois suas taxas são menores, indicando a possibilidade de maior produtividade de AC como observado na Figuras 5.79. Quando utilizado o cruzamento em um ponto as menores taxas de AB ocorrem quando é utilizado tamanho populacional de 30 (Figura 5.80).

Observou-se também no caso simulado com tamanho populacional de 50 que há de forma uniforme valores de taxas de AB altos, como também se verifica para o caso de tamanho populacional de 20 e 40 respectivamente, embora nestes últimos foram detectadas oscilações.

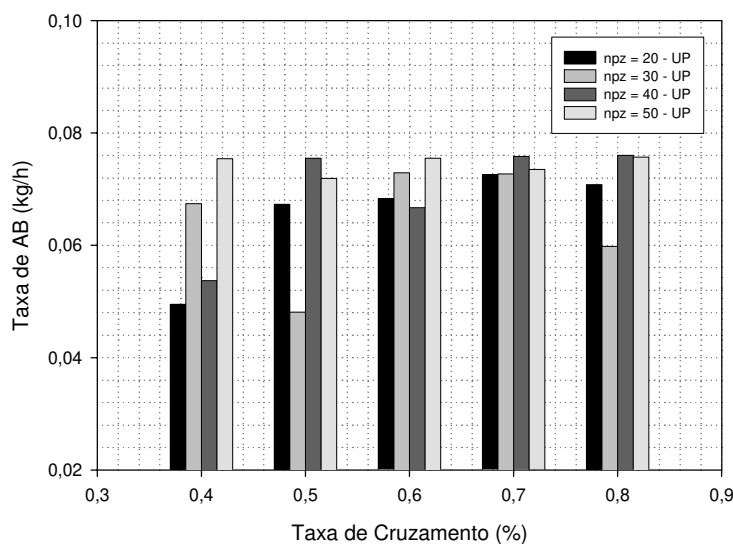


Figura 5.80 – Nível 3 - Análise das taxas de cruzamento e do tamanho da população na taxa de Álcool Benzílico (AB) - Cruzamento em Um Ponto (UP).

A confirmação final de que o melhor caso é relacionado à simulação com cruzamento em um ponto e utilizando tamanho populacional de 30 é evidenciada nas

próximas figuras que apresentam a evolução das taxas de C (subproduto indesejado). Na Figura 5.81 são apresentados os resultados do caso com cruzamento uniforme.

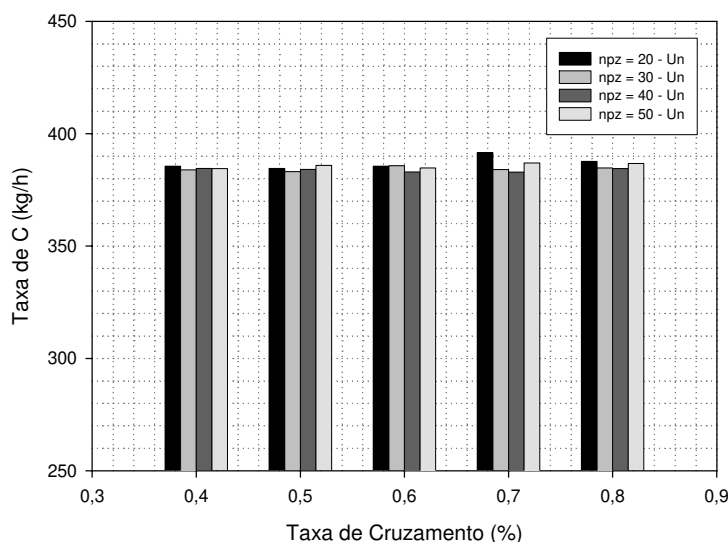


Figura 5.81 – Nível 3 - Análise das taxas de cruzamento e do tamanho da população na taxa de Cicloalcano (C) - Cruzamento Uniforme (Un).

Nesta situação (análise com cruzamento uniforme) observa-se uma uniformidade nas taxas de C em praticamente todas as simulações envolvendo todos os casos, com algumas situações diferenciadas ocorrendo isoladamente tendo taxas mais elevadas (tamanho populacional de 20 e taxa de cruzamento 0,7 e tamanho populacional de 30 com taxa de cruzamento 0,6).

A análise com a forma de cruzamento em um ponto representada pela Figura 5.82, identifica taxas de C um pouco mais elevadas de uma forma geral, principalmente para o caso onde forneceu melhor produtividade de AC, ou seja, ocorre decomposição de AC para formação de subproduto e isto poderia ser modificado, podendo assim melhorar o desempenho da reação.

O que se pode concluir das análises deste tópico é que embora as taxas de C não sejam altas (indicando pouca decomposição de AC), há altas taxas de AB significando que

o processo reacional poderia ser melhorado obtendo-se uma conversão maior deste reagente.

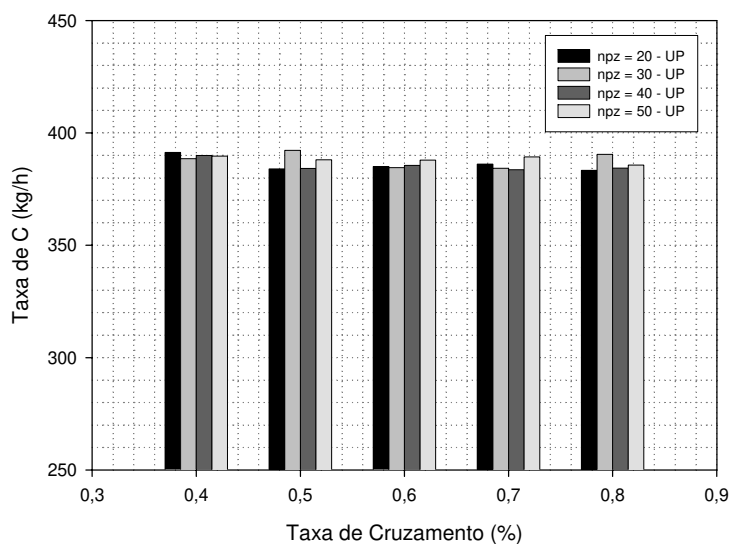


Figura 5.82 – Nível 3 - Análise da taxa de cruzamento e do tamanho da população na taxa de Cicloalcano (C) - Cruzamento em Um Ponto (UP).

Como nos outros níveis de produção a sequência das análises considerou, os tamanhos populacionais de 20 e 40 respectivamente, com taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8, os quais apresentam boa representatividade nas otimizações.

V.3.2 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DAS TAXAS DE MUTAÇÃO UNIFORME E DE ARRASTE E DA BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 3 DE PRODUÇÃO

Neste tópico as análises realizadas consideraram as variações das taxas de mutação uniforme e de arraste respectivamente e finalizando com os estudos levando em consideração a utilização ou não do operador de busca em nichos e a situação particular sem a utilização de mutação de arraste.

Os resultados das otimizações mais uma vez evidenciam melhorias no desempenho da produtividade de AC, onde foi observado aumento nas taxas de Álcool Cíclico, redução nas taxas de AB e C, além de constatar uma redução da quantidade de catalisador utilizado no processo reacional sendo um indicador de diminuição dos custos como ocorrido nos outros dois níveis de produção analisados anteriormente.

V.3.2.1 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME COM BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 3 DE PRODUÇÃO

Esta análise verificou um aumento considerável das taxas de Álcool Cíclico quando as taxas de mutação uniforme são variadas e utilizando a operação com busca em nichos. As simulações foram realizadas considerando os tamanhos populacionais de 20 e 40, cruzamento uniforme e em um ponto, taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8, variações das taxas de mutação uniforme de 0,001 à 0,1 e mantendo-se a mutação de arraste com um valor fixo de 0,02.

As Tabelas 5.65 a 5.68 ilustram todos os resultados obtidos pelas simulações, onde as Tabelas 5.65 e 5.66 estão relacionadas à forma de cruzamento uniforme, e em consequência as Tabelas 5.67 e 5.68 ao cruzamento em um ponto. As Figuras 5.83 a 5.88 evidenciam os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) referentes a este nível de produção para ambas as formas de cruzamento.

O melhor resultado para a forma de cruzamento uniforme ocorreu com tamanho populacional de 40, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme 0,01, com produtividade de AC igual a 6.985,96 kg/h. Na simulação com cruzamento em um ponto, o melhor resultado foi de 6.988,05 kg/h ocorrendo na situação de tamanho populacional de 40, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação uniforme no valor de 0,01.

Para simulação envolvendo o caso com cruzamento uniforme a diferença entre o melhor e o pior caso otimizado em termos de produtividade de AC ficou em 14,99 kg/h, sendo uma diferença considerável em termos de aumento da produtividade, ou seja, isso representa um aumento de 359,76 kg por dia e 10.792,80 kg por mês na produtividade, um valor extremamente significativo (Tabelas 5.65 e 5.66).

Tabela 5.65 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme com taxa de cruzamento de 0,6 e busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	6983,63	0,0743	385,77
	0,005	6983,12	0,0658	386,19
	0,010	6985,36	0,0714	383,71
	0,050	6981,29	0,0665	387,51
	0,100	6979,22	0,0758	389,06
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	6985,41	0,0718	383,65
	0,005	6984,19	0,0736	385,18
	0,010	6985,96	0,0758	383,67
	0,050	6982,77	0,0686	384,86
	0,100	6976,56	0,0740	391,23

Tabela 5.66 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme e com taxa de cruzamento de 0,8 e busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	6970,97	0,0409	394,50
	0,005	6981,58	0,0643	387,31
	0,010	6979,69	0,0601	388,69
	0,050	6981,91	0,0664	387,16
	0,100	6979,39	0,0638	389,90
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	0,001	6982,01	0,0746	386,88
	0,005	6983,99	0,0688	384,90
	0,010	6984,74	0,0655	384,60
	0,050	6984,47	0,0661	384,78
	0,100	6980,22	0,0689	388,79

Para as simulações utilizando a forma de cruzamento em um ponto (Tabelas 5.67 e 5.68) verifica-se um aumento na produtividade de AC de 20,82 kg/h entre o melhor e o pior caso otimizado. Sendo assim, ocorre um aumento diário na produtividade de 499,68 kg e 14.990,40 kg ao mês, um valor ainda maior em comparação ao caso anterior.

Tabela 5.67 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto com taxa de cruzamento de 0,6 e busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6967,23	0,0474	394,70
	0,005	6983,83	0,0633	385,12
	0,010	6981,65	0,0771	386,42
	0,050	6986,78	0,0753	383,06
	0,100	6975,23	0,0720	391,89
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6967,79	0,0376	397,51
	0,005	6976,61	0,0504	391,10
	0,010	6980,21	0,0655	387,97
	0,050	6985,46	0,0705	384,10
	0,100	6976,32	0,0541	391,77

Tabela 5.68 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,8 e busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6973,21	0,0516	392,81
	0,005	6984,39	0,0759	385,18
	0,010	6982,41	0,0622	386,18
	0,050	6983,77	0,0652	385,67
	0,100	6977,29	0,0690	389,10
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,02</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6983,59	0,0745	383,99
	0,005	6983,83	0,0735	385,12
	0,010	6988,05	0,0759	381,90
	0,050	6984,63	0,0687	384,74
	0,100	6979,36	0,0756	387,11

Comparando as simulações entre a forma de cruzamento uniforme e em um ponto, a diferença ocorrida entre estas ficou em torno de 2,09 kg/h e essa diferença em termos diários chega em 50,16 kg e 1.504,80 kg por mês a mais na produtividade, quando utiliza-se a forma de cruzamento em um ponto.

A seguir são apresentados os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) em sequência para este tópico estudado, através das Figuras 5.83 a 5.88.

O perfil de AC na análise com cruzamento uniforme apresenta os melhores valores quando a taxa de mutação uniforme fica em torno de 0,01 (Figura 5.83), o mesmo ocorrendo para o caso de cruzamento em um ponto excetuando-se a situação que utiliza o tamanho populacional de 40 com sua respectiva taxa de cruzamento de 0,6 (Figura 5.84).

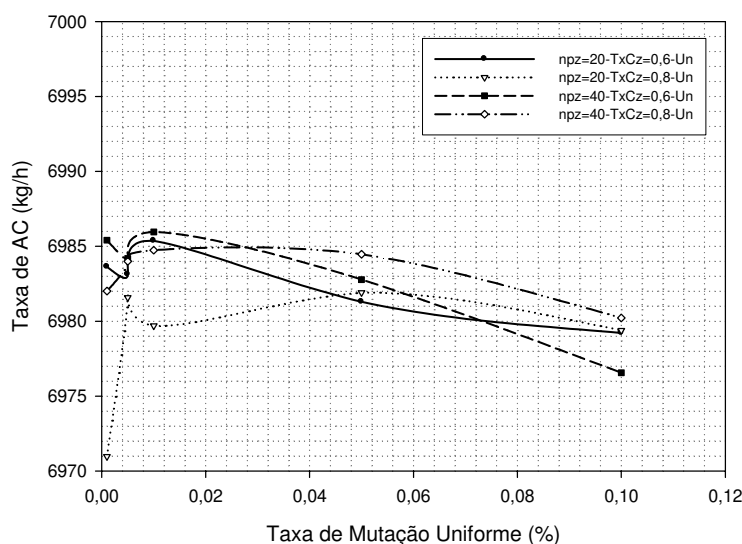


Figura 5.83 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento uniforme (Un).

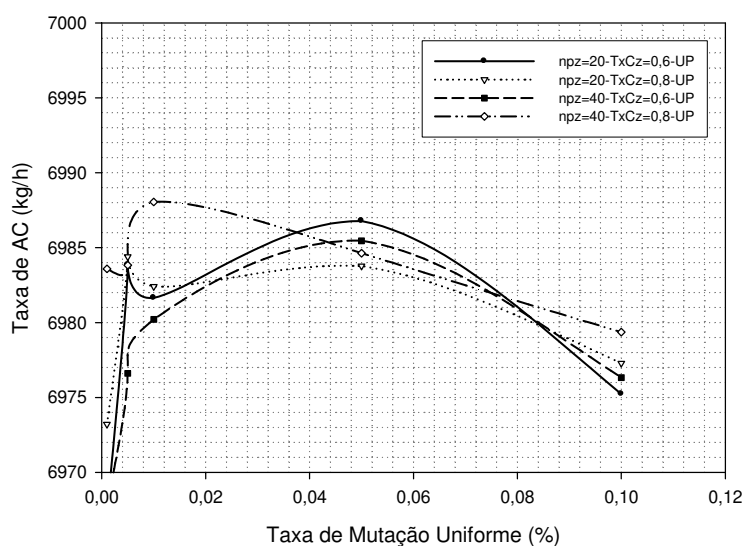


Figura 5.84 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento em um ponto (UP).

A Figura 5.85 apresenta os perfis das taxas de AB para o caso com cruzamento uniforme. Neste perfil de AB até o valor de taxa de mutação em torno de 0,01, ocorrem oscilações e a partir deste há uma tendência dos valores permanecerem constantes.

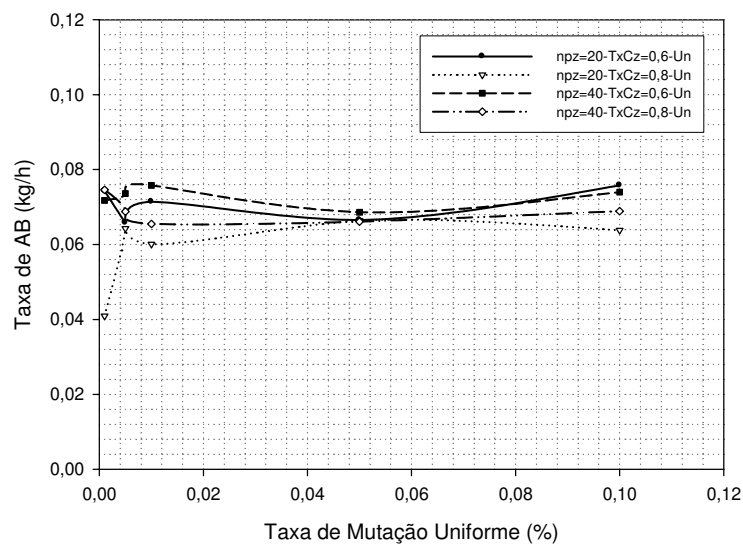


Figura 5.85 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento uniforme (Un).

Na Figura 5.86, onde é analisado o caso com cruzamento em um ponto, as taxas de AB possuem perfis muito semelhantes ao caso com cruzamento uniforme.

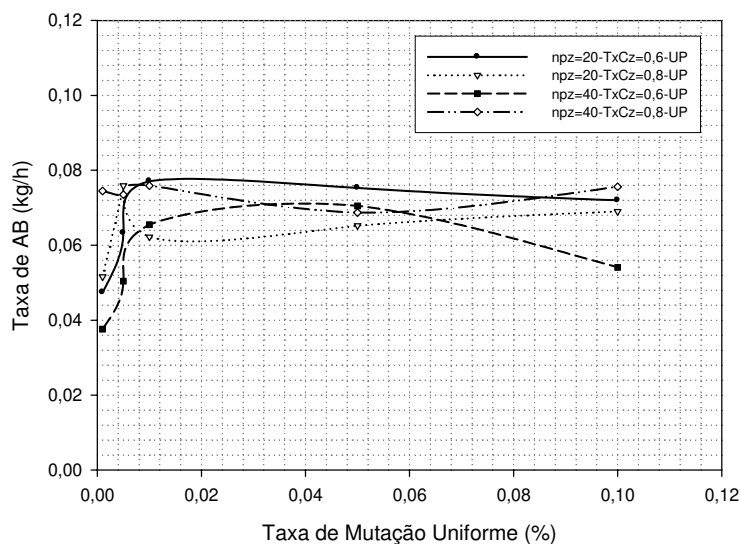


Figura 5.86 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento em um ponto (UP).

As análises de C são apresentadas pela Figuras 5.87 e 5.88 na sequência.

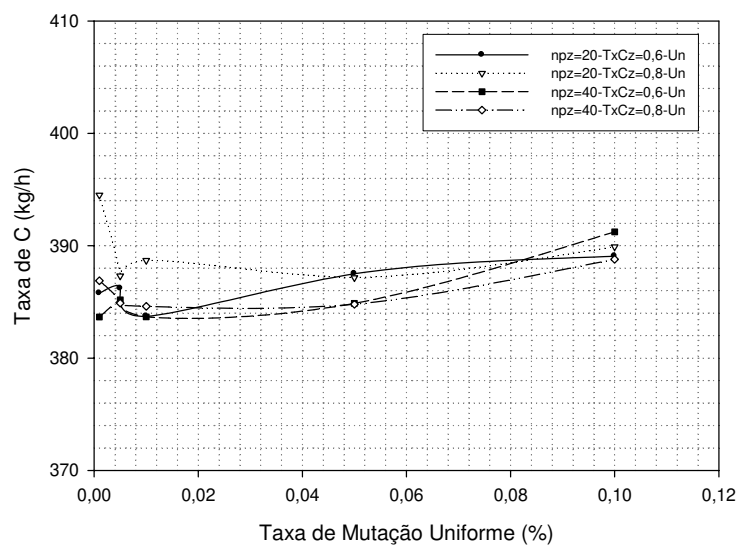


Figura 5.87 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento uniforme (Un).

Observa-se que para taxas de mutação até 0,01 as taxas de C atingem os menores valores, estando assim de acordo com uma maior produtividade de AC sem decomposição do mesmo para o subproduto. Essa ocorrência é semelhante para ambos os casos simulados (com cruzamento uniforme em um ponto).

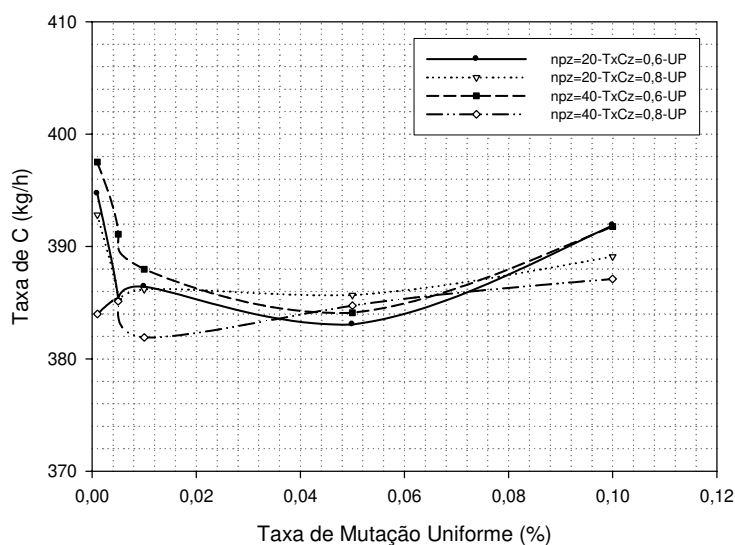


Figura 5.88 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento em um ponto (UP).

V.3.2.2 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE COM BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 3 DE PRODUÇÃO

Esta análise verificou a influência da taxa de mutação de arraste na produtividade de Álcool Cíclico considerando o operador de busca em nichos. Foi observado um comportamento semelhante ao obtido na análise de sensibilidade da taxa de mutação uniforme (tópico anterior), embora os resultados (produtividade de Álcool Cíclico) tenham tido valores um pouco mais elevados, fazendo-se concluir que a produtividade de AC é mais sensível a este operador genético.

Como no caso anterior as simulações foram realizadas considerando tamanhos populacionais de 20 e 40 respectivamente, cruzamento uniforme e em um ponto, taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8 para as ambas as formas de cruzamento, com variações das taxas de mutação de arraste de 0,001 a 0,1, mantendo-se a mutação uniforme com um valor fixo de 0,01 e por fim utilizando a operação com busca em nichos. As Tabelas sequenciais ilustram os resultados obtidos.

As Tabelas 5.69 e 5.70 estão relacionadas à forma de cruzamento uniforme, e por conseguinte as Tabelas 5.71 e 5.72 ao cruzamento em um ponto. As Figuras 5.89 a 5.94 evidenciam os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C), na sequência para as duas formas de cruzamento.

Os melhores resultados foram observados para a forma de cruzamento uniforme com tamanho da população de 40, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação de arraste em torno de 0,01, onde o valor encontrado foi de 6.986,26 kg/h e para o cruzamento em um ponto o valor encontrado foi de 6.987,89 kg/h utilizando tamanho populacional de 40, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação de arraste de 0,001.

Nas Tabelas 5.69 e 5.70 que representam as simulações referentes ao caso que utiliza cruzamento uniforme observa-se uma diferença na produtividade de AC entre o melhor e o pior caso otimizado de 8,39 kg/h, que diariamente pode fornecer 201,36 kg e mensalmente 6.040,80 kg a mais de AC, um valor importante a ser considerado para a produtividade de AC.

Tabela 5.69 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme com taxa de cruzamento de 0,6 e busca em nichos. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Uniforme	0,001	6981,17	0,0641	387,06
	0,005	6982,46	0,0653	386,74
	0,010	6984,44	0,0676	384,99
	0,050	6977,87	0,0542	389,85
	0,100	6978,56	0,0600	390,24
npz = 40		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Uniforme	0,001	6983,35	0,0701	385,87
	0,005	6984,43	0,0727	384,81
	0,010	6986,04	0,0738	382,96
	0,050	6984,64	0,0727	384,76
	0,100	6981,29	0,0741	387,08

Tabela 5.70 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento uniforme e com taxa de cruzamento de 0,8. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Uniforme	0,001	6982,54	0,0637	386,73
	0,005	6979,19	0,0655	391,38
	0,010	6986,10	0,0734	383,72
	0,050	6984,96	0,0757	384,71
	0,100	6980,29	0,0671	388,89
npz = 40		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Uniforme	0,001	6984,48	0,0745	384,47
	0,005	6983,58	0,0737	385,69
	0,010	6986,26	0,0699	383,37
	0,050	6982,18	0,0743	386,36
	0,100	6978,59	0,0711	389,88

Na análise considerando o cruzamento em um ponto, apresentadas nas Tabelas 5.71 e 5.72 a diferença entre o melhor e o pior caso otimizado fica em torno de 10,61 kg/h, que representaria um ganho diário de 254,64 kg e mensal de 7.639,20 kg. Essas diferenças são consideráveis, pois embora já se tenha obtido melhoria na produtividade, entre algumas situações onde aparentemente uma quantidade um pouco maior é obtida, esta significa melhoria no desempenho global.

Tabela 5.71 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6982,95	0,0712	386,39
	0,005	6983,61	0,0718	385,73
	0,010	6986,28	0,0751	382,09
	0,050	6986,25	0,0760	383,43
	0,100	6982,01	0,0689	388,04
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6980,18	0,0623	388,57
	0,005	6984,71	0,0663	384,83
	0,010	6982,62	0,0625	386,58
	0,050	6982,50	0,0631	386,70
	0,100	6977,28	0,0632	391,68

Tabela 5.72 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando os tamanhos de população 20 e 40, cruzamento em um ponto e com taxa de cruzamento de 0,8. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6984,37	0,0652	385,18
	0,005	6985,96	0,0762	382,42
	0,010	6985,83	0,0711	383,27
	0,050	6980,93	0,0624	386,27
	0,100	6978,79	0,0654	388,59
<i>npz = 40</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6987,89	0,0759	381,98
	0,005	6983,18	0,0632	386,22
	0,010	6986,18	0,0711	383,47
	0,050	6984,07	0,0678	384,17
	0,100	6982,22	0,0688	388,89

Os perfis das taxas de AC (Figuras 5.89 e 5.90), de AB (Figura 5.91 e 5.92) e C (Figuras 5.93 e 5.94) são apresentados na sequência. A produtividade de AC (Figura 5.89) simulada com cruzamento uniforme tem seus melhores valores quando utilizado taxas de mutação de arraste próximas a 0,01. A partir desta taxa de mutação ocorre uma diminuição em todos os casos otimizados, sendo assim causando diminuição na produtividade. Situação semelhante ocorre quando é utilizado cruzamento em um ponto (Figura 5.90).

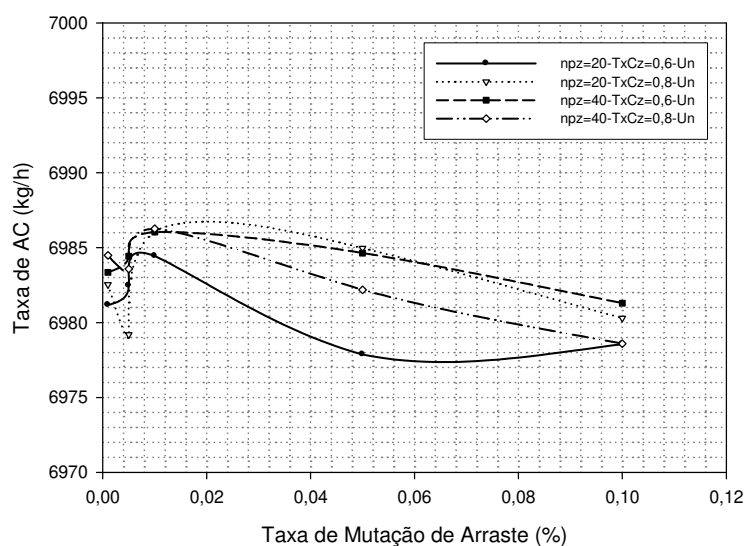


Figura 5.89 - Nível 3 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento uniforme (Un).

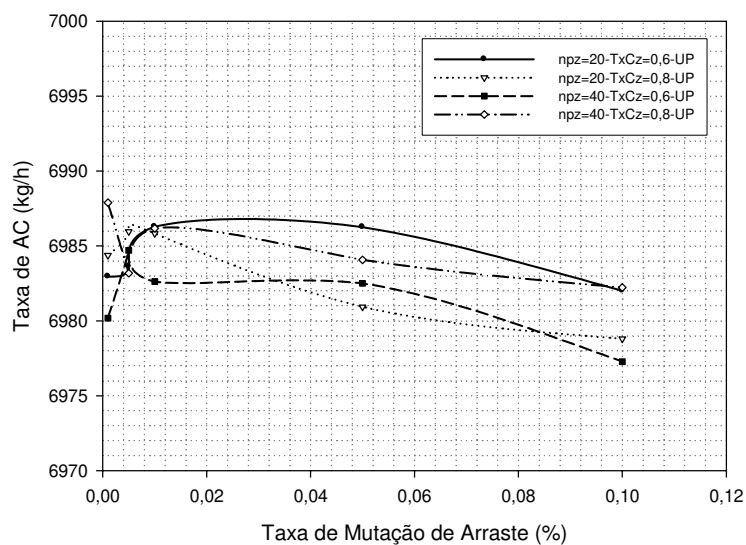


Figura 5.90 - Nível 3 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamento em um ponto (UP).

As Figuras 5.91 e 5.92 representam os perfis de AB.

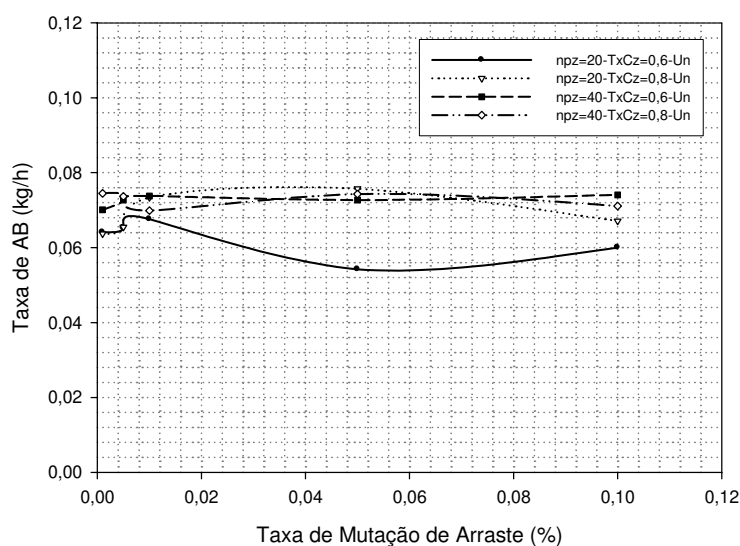


Figura 5.91 – Nível 3 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento uniforme (Un).

Nas taxas de mutação de arraste com valores até 0,01 ocorrem oscilações para ambos os casos (cruzamento uniforme e em um ponto). A partir deste valor (taxa de 0,01) há uma tendência da taxa de AB permanecer constante, com exceção do caso de tamanho populacional de 20 e taxa de cruzamento 0,6 com cruzamento uniforme (Figura 5.91).

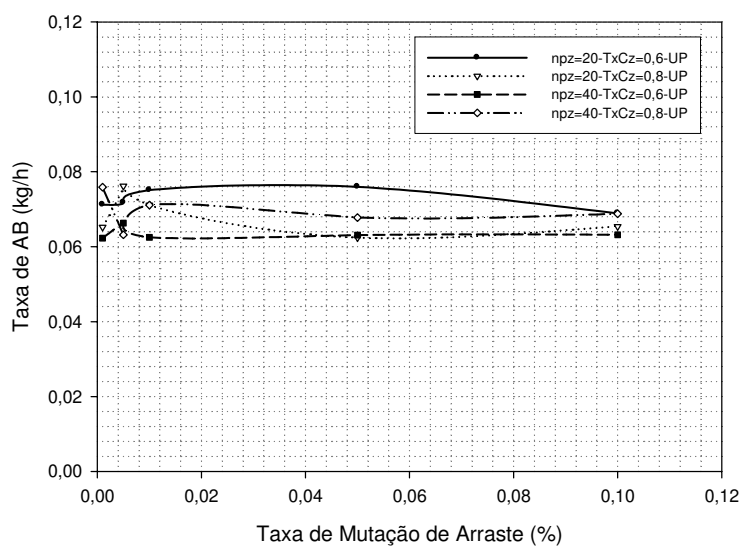


Figura 5.92 – Nível 3 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamento em um ponto (UP).

As Figuras 5.93 e 5.94 estão relacionadas ao subproduto C e estão na sequência.

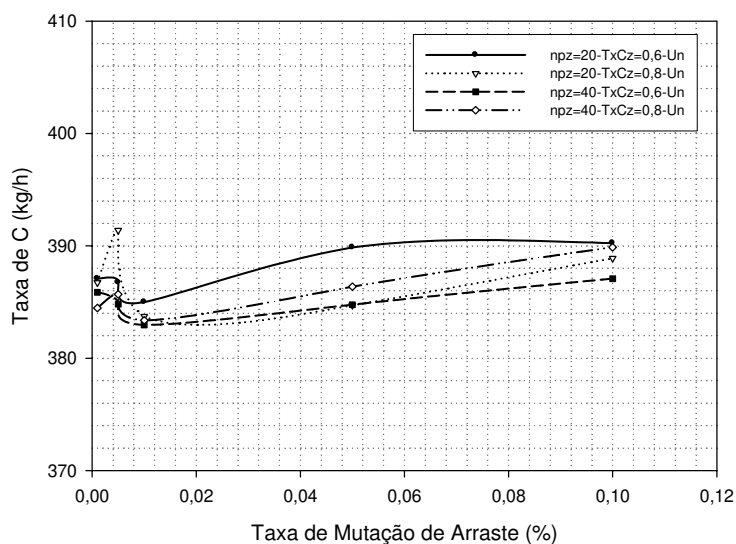


Figura 5.93 – Nível 3 - Influência da mutação de arraste na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento uniforme (Un).

Mais uma vez os menores valores das taxas de C são encontrados próximos à taxa de mutação de arraste de 0,01 para as duas formas de cruzamento utilizadas. Isso confirma as simulações anteriores, onde as maiores produtividades de AC acontecem próximos a esta taxa de mutação.

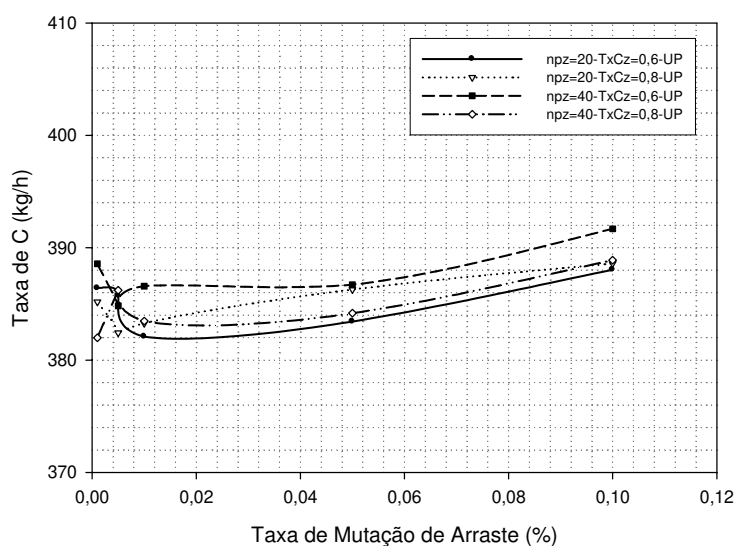


Figura 5.94 – Nível 3 - Influência da mutação de arraste na taxa de Cicloalcano (C), cruzamento em um ponto (UP).

O aumento das taxas de C a partir da taxa de mutação de 0,01 indica que o AC é decomposto e o rendimento do processo reacional é menor, situação não desejada.

V.3.2.3 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE MANTENDO A MUTAÇÃO UNIFORME FIXA E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 3 DE PRODUÇÃO

Como nas simulações em todos os níveis de produção, a análise neste tópico considerou a otimização utilizando a mutação de arraste e uniforme (valor fixo), mas diferenciando-se das análises anteriormente realizadas pela não utilização do operador de busca em nichos. Realizou-se uma verificação de sensibilidade na taxa de mutação de arraste variando esta entre 0,001 a 0,1, utilizando tamanho da população de 20, cruzamento uniforme e em um ponto com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos.

Os resultados descrevem um aumento considerável na taxa de Álcool Cíclico, evidenciando que a não aplicação da busca em nichos conduz de forma rápida e direta um melhor desempenho da otimização, embora a utilização deste operador possa promover maior eficiência, melhorando a produtividade de AC quando é assumido um número maior de gerações (fato não observado neste trabalho – resultados não apresentados).

As Tabelas 5.73 e 5.74 apresentam os resultados da simulação e as Figuras 5.95 a 5.97 ilustram os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C).

Entre os melhores resultados para o cruzamento uniforme, o maior valor da taxa de Álcool Cíclico obtida foi de 6.987,48 kg/h utilizando tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação de arraste de 0,01. Utilizando a forma de cruzamento

em um ponto o melhor valor encontrado foi de 6.982,76 kg/h com tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação de arraste de 0,005.

A análise utilizando cruzamento uniforme (Tabela 5.73) apresenta uma diferença de produtividade de AC entre o melhor e o pior caso otimizado de 11,93 kg/h, que representaria 286,32 kg ao dia e 8.589,60 kg ao mês. Devido a isso a alteração ou modificação de parâmetros e taxas é muito significativa no processo de otimização.

A otimização com a forma de cruzamento em um ponto (Tabela 5.74) obteve uma diferença na produtividade de AC entre o melhor e o pior caso otimizado de 7,58 kg/h, 181,92 kg ao dia e 5.457,60 kg ao mês em aumento da produtividade de AC. Observa-se a mesma ocorrência do caso com cruzamento uniforme.

Tabela 5.73 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	<i>0,001</i>	6983,09	0,0626	386,05
	<i>0,005</i>	6983,18	0,0632	385,97
	<i>0,010</i>	6987,48	0,0757	382,53
	<i>0,020</i>	6985,46	0,0699	384,14
	<i>0,050</i>	6978,79	0,0522	389,54
	<i>0,100</i>	6979,52	0,0501	390,11
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação Uniforme = 0,01</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação de Arraste</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Uniforme	<i>0,001</i>	6978,85	0,0506	389,71
	<i>0,005</i>	6976,19	0,0467	391,87
	<i>0,010</i>	6985,60	0,0717	384,02
	<i>0,020</i>	6983,93	0,0721	384,25
	<i>0,050</i>	6982,84	0,0749	385,45
	<i>0,100</i>	6975,55	0,0544	392,56

Tabela 5.74 – Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação de arraste variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	6979,84	0,0659	388,88
	0,005	6978,12	0,0528	388,80
	0,010	6982,41	0,0630	386,82
	0,020	6975,18	0,0468	392,94
	0,050	6980,86	0,0639	387,77
	0,100	6981,22	0,0649	387,91
npz = 20		Taxa de Mutação Uniforme = 0,01		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação de Arraste	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	6982,46	0,0710	386,77
	0,005	6982,76	0,0671	386,50
	0,010	6979,32	0,0629	391,39
	0,020	6981,97	0,0719	386,67
	0,050	6982,32	0,0732	386,88
	0,100	6976,59	0,0477	391,83

Na Figura 5.95 se encontram os perfis de AC para as simulações para ambas as formas de cruzamento. Em todos os casos estudados os máximos obtidos das taxas de AC ocorrem próximos à taxa de mutação de arraste de 0,01, com exceção do caso envolvendo o tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento 0,8 com cruzamento em um ponto.

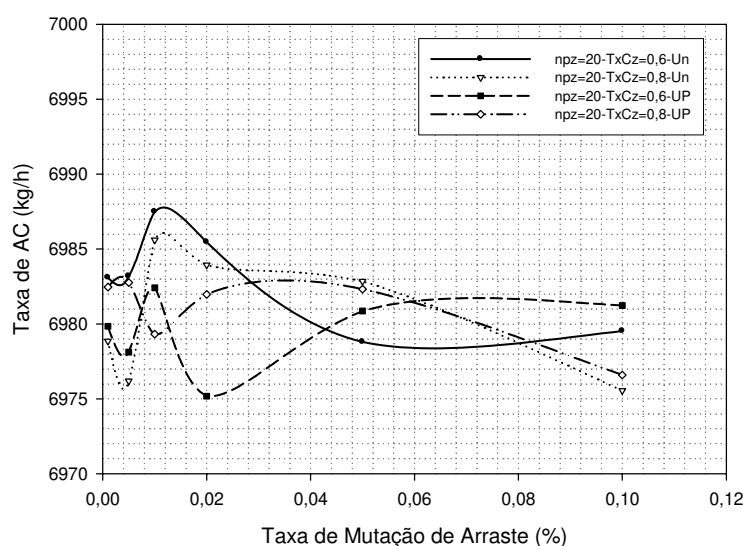


Figura 5.95 – Nível 3 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação uniforme fixa e sem nichos.

Os perfis de AB são apresentados pela Figura 5.96, onde é importante ressaltar que em valores de taxas de mutação menores que 0,01 os menores valores são encontrados, indicando maior conversão deste para AC.

Em valores entre 0,01 até 0,05 dois casos apresentam diminuição das taxas, cada um referente a uma forma de cruzamento com tamanhos populacionais de 20 e taxas de cruzamento de 0,6, para os casos com taxas de cruzamento de 0,8 (em ambas as formas de cruzamento), as taxas tendem a permanecerem constantes. Após a taxa de mutação de 0,05 houve inversão dos casos citados.

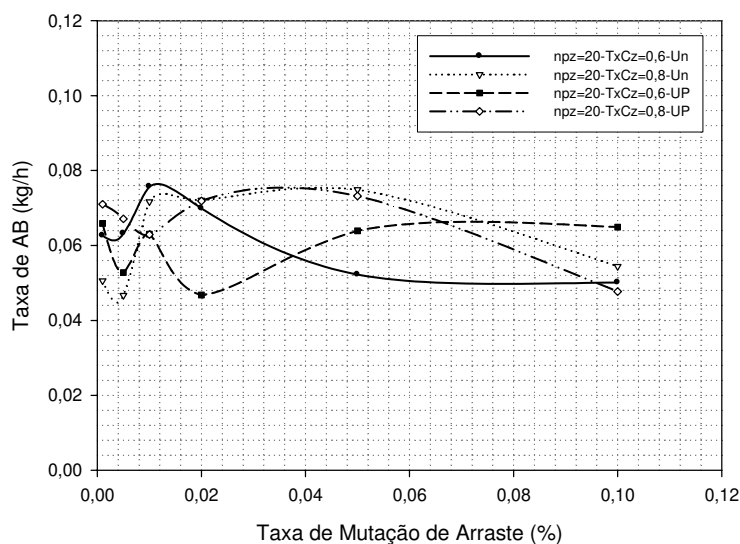


Figura 5.96 – Nível 3 - Influência da mutação de arraste na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação uniforme fixa e sem nichos.

A simulação envolvendo o subproduto C, representada pela Figura 5.97, evidencia que na maioria dos casos próximos a taxa de mutação a 0,01 há ocorrência das menores taxas de C e isso pode ser confirmado pela Figura 5.95, onde as taxas de AC são as maiores. Observa-se que com o aumento da taxa de mutação há uma elevação nas taxas de AC.

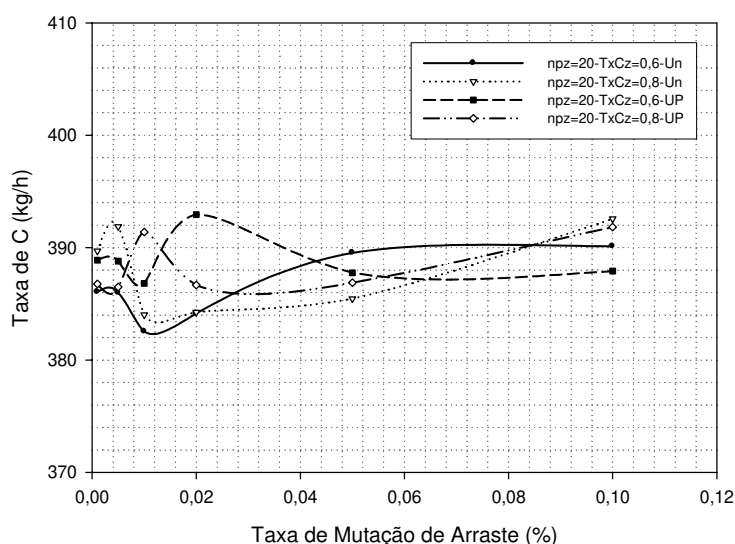


Figura 5.97 – Nível 3 - Influência da mutação de arraste na taxa de Cicloalcano (c), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação uniforme fixa e sem nichos.

V.3.2.4 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME MANTENDO A MUTAÇÃO DE ARRASTE FIXA E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 3 DE PRODUÇÃO

Nesta parte do estudo, como nas análises dos outros níveis operacionais, considerou-se a variação da mutação uniforme entre 0,001 e 0,1, fixando a taxa de mutação de arraste em 0,02 e não utilizando o operador de busca em nichos.

Verificou-se a sensibilidade na produtividade de AC utilizando um tamanho populacional de 20, cruzamento uniforme e em um ponto com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos.

Os resultados indicam que não houve aumento na taxa de Álcool Cíclico, observando que os resultados ficaram bem próximos. Como no item anterior a não aplicação da busca em nichos não mostrou melhoria na taxa de Álcool Cíclico.

As Tabelas 5.75 e 5.76 apresentam os resultados da simulação e as Figuras 5.98 a 5.100 ilustram os perfis de Álcool Cíclico (AC), de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) para ambas as formas de cruzamento. Esta análise não proporcionou resultados expressivos quando comparado com as outras análises até aqui descritas.

Para o cruzamento uniforme o maior valor da taxa de Álcool Cíclico foi de 6.985,46 kg/h utilizando tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,01.

Para a forma de cruzamento em um ponto o melhor valor encontrado foi de 6.984,97 kg/h com tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,05.

A Tabela 5.75 apresenta os resultados das simulações com o cruzamento uniforme e a Tabela 5.76 os resultados referentes ao caso utilizando cruzamento em um ponto.

Tabela 5.75 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	6979,68	0,0576	389,08
	0,005	6982,62	0,0659	386,50
	0,010	6985,46	0,0699	384,14
	0,050	6983,22	0,0688	384,97
	0,100	6980,25	0,0611	388,76
npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	6977,20	0,0487	391,18
	0,005	6983,58	0,0676	384,98
	0,010	6983,93	0,0721	384,25
	0,050	6979,27	0,0664	389,40
	0,100	6980,29	0,0598	388,56

Nas simulações envolvendo o cruzamento uniforme a diferença entre o melhor e o pior caso otimizado entre as taxas de AC ficou em 8,26 kg/h, 198,24 kg ao dia ou 5.947,20 kg ao mês a mais de AC. Sendo assim, relevante a análise de sensibilidade dos parâmetros genéticos e respectivas taxas, pois elevam consideravelmente a produção.

Para a simulação com cruzamento em um ponto o aumento da produtividade de AC entre o melhor e o pior caso otimizado foi de 23,93 kg/h, 574,32 kg ao dia e 17.229,60 kg ao mês.

Nesta análise houve maior sensibilidade dos parâmetros e taxas ao aumento da produtividade de AC. O estudo dos parâmetros é muito significativo para melhoria do desempenho reacional do processo.

Tabela 5.76 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente e sem busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	6963,49	0,0346	402,53
	0,005	6977,69	0,0547	390,84
	0,010	6975,18	0,0468	392,94
	0,050	6984,97	0,0708	384,27
	0,100	6979,45	0,0711	389,54
npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,02		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Um Ponto	0,001	6961,04	0,0337	403,89
	0,005	6978,68	0,0514	389,83
	0,010	6980,86	0,0727	388,18
	0,050	6984,74	0,0675	384,91
	0,100	6980,11	0,0698	389,04

A Figura 5.98 apresenta os perfis de AC correspondentes a este tópico analisado.

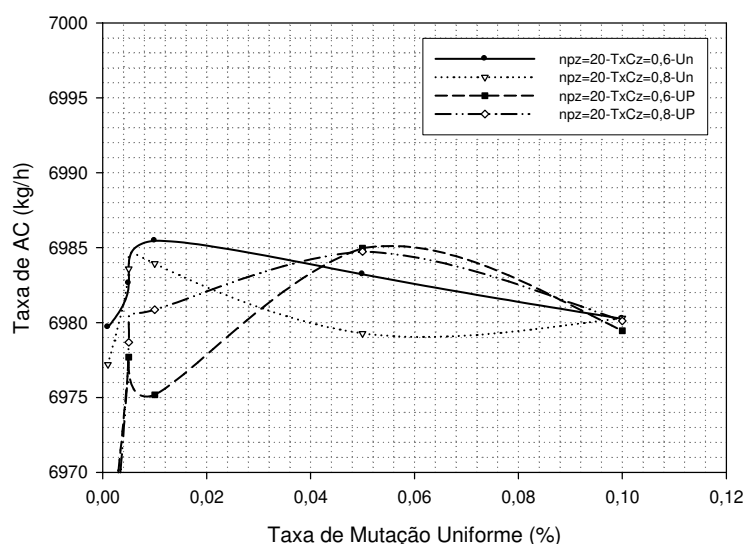


Figura 5.98 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico, cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação de arraste fixa e sem nichos.

Mais uma vez fica evidente que as maiores taxas de AC são obtidas quando a taxa de mutação uniforme está em torno de 0,01, com exceção dos casos de tamanhos populacionais de 20 e forma de cruzamento em um ponto para as taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8 respectivamente. Os perfis das taxas de AB estão apresentados na Figura 5.99, e pode-se constatar que as menores taxas ocorrem com taxas de mutação menores que 0,01.

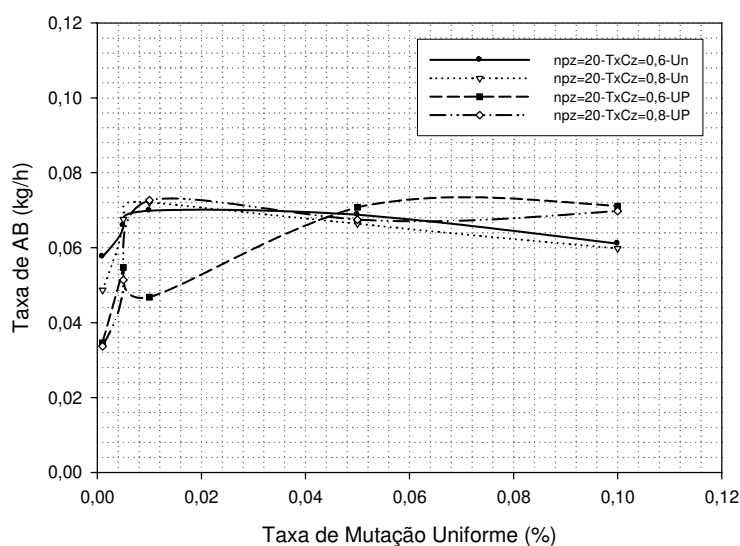


Figura 5.99 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação de arraste fixa e sem nichos.

A Figura 5.100 exemplifica os perfis das taxas de subproduto C e os menores valores (situação desejada), ocorrendo em torno do valor da taxa de mutação de 0,01, confirmando assim que nestas proximidades, menos quantidade de subproduto é produzido, e desta forma menos AC é decomposto.

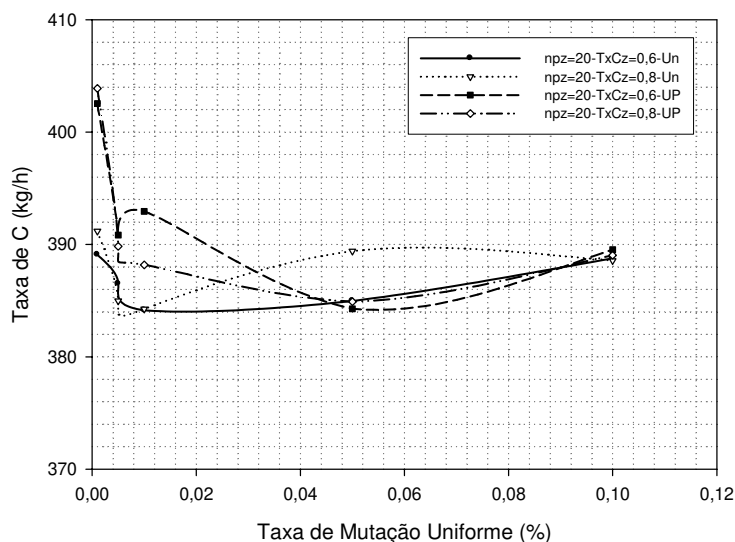


Figura 5.100 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, mutação de arraste fixa e sem nichos.

V.3.2.5 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO MUTAÇÃO DE ARRASTE E COM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 3 DE PRODUÇÃO

A análise foi realizada verificando a sensibilidade na produtividade de Álcool Cíclico quando se varia a taxa de mutação uniforme não considerando a mutação de arraste, mas fazendo-se uso da operação de busca em nichos. A faixa de variação da mutação uniforme ficou entre 0,001 e 0,1 como nas outras análises, utilizando um tamanho da população de 20, cruzamento uniforme e em um ponto com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos. Mais uma vez não foi observado melhorias no aumento da taxa de Álcool Cíclico, como nos casos anteriores (embora tenha ocorrido aumento na produtividade em relação à operação sem otimização).

As Tabelas 5.77 e 5.78 apresentam os resultados da simulação e as Figuras 5.101, 5.102 e 5.103 ilustram os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C).

No cruzamento uniforme o maior valor da taxa de Álcool Cíclico foi de 6.986,64 kg/h utilizando tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação uniforme de 0,005. Para a forma de cruzamento em um ponto o melhor valor encontrado foi de 6.986,36 kg/h com tamanho da população de 20, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação uniforme de 0,01.

Para simulação considerando o cruzamento uniforme a diferença entre as produtividades entre o melhor e o pior caso otimizado foi de 13,66 kg/h, 327,84 kg ao dia e 9.835,20 kg ao mês, valores expressivos em termos de produtividade que não podem ser desconsiderados. A escolha dos parâmetros e taxas é importante para determinação da melhor produtividade. A Tabela 5.77 apresenta os resultados do caso de cruzamento uniforme.

Tabela 5.77 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e com busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,00		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	6972,98	0,0503	390,58
	0,005	6984,48	0,0704	385,05
	0,010	6981,67	0,0759	387,01
	0,050	6978,00	0,0570	389,19
	0,100	6979,22	0,0512	388,56
npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,00		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	6978,45	0,0691	389,99
	0,005	6986,64	0,0719	383,22
	0,010	6982,24	0,0606	386,98
	0,050	6985,09	0,0774	383,34
	0,100	6980,34	0,0621	389,29

Utilizando cruzamento em um ponto a diferença observada entre as produtividades de AC entre o melhor e o pior caso otimizado chegou em 13,56 kg/h, 325,44 kg ao dia e 9.763,20 kg ao mês a mais de AC. Na Tabela 5.78 é apresentado os resultados deste caso analisado.

Tabela 5.78 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e com busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6981,61	0,0734	387,15
	0,005	6984,58	0,0667	384,90
	0,010	6983,34	0,0671	385,33
	0,050	6986,35	0,0730	383,28
	0,100	6980,74	0,0688	389,19
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6972,80	0,0493	394,45
	0,005	6980,91	0,0682	387,57
	0,010	6986,36	0,0726	383,43
	0,050	6982,73	0,0687	386,49
	0,100	6978,69	0,0611	390,49

Nas simulações envolvendo os dois melhores casos obtidos, em relação às produtividades de AC, que utilizaram as formas de cruzamento uniforme e em um ponto (o melhor resultado de cada uma), a diferença entre estes foi de 0,48 kg/h e essa diferença em termos diários chega em 11,52 kg e 345,60 kg por mês a mais, quando se utiliza a forma de cruzamento uniforme.

Os perfis de AC estão na Figura 5.101, na seqüência para os dois casos analisados.

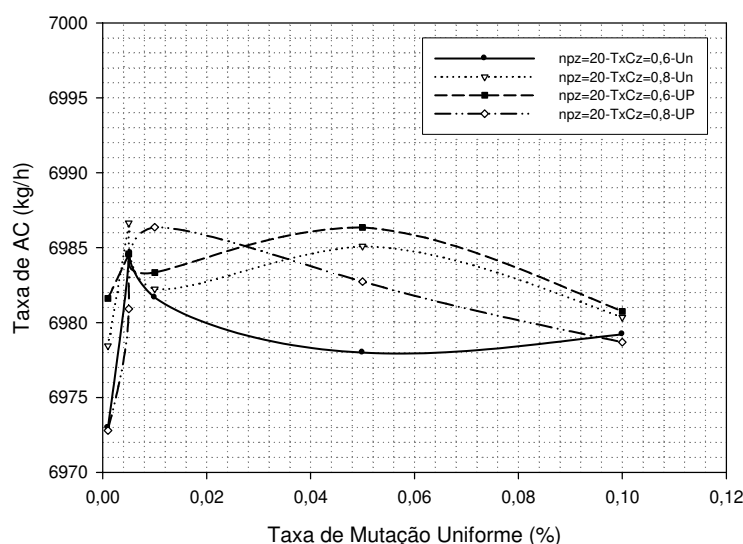


Figura 5.101 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e com busca em nichos.

As taxas de AC possuem os melhores valores próximos a taxas de mutação de 0,01, onde existe uma tendência de diminuição a partir deste valor de taxa de mutação.

Na Figura 5.102 são apresentados os perfis das taxas de AB. Observa-se nesta análise que para os casos com tamanhos populacionais de 20, cruzamentos uniforme e em um ponto e taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8 respectivamente as maiores taxas ocorrem quando a taxa de mutação está em torno de 0,01, e diminuem conforme o aumento dessas taxas de mutação.

Para os outros dois casos os menores valores das taxas de AB são atingidos na taxa de mutação de 0,01 e a partir desta aumentam voltando a diminuir após 0,05.

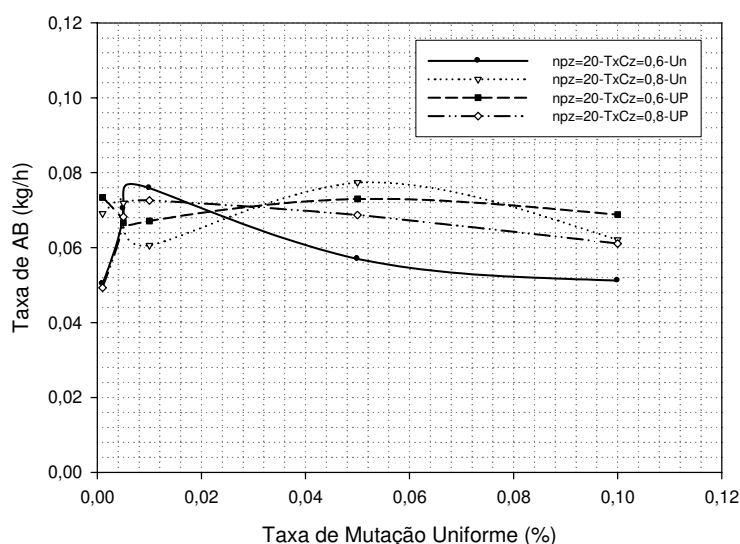


Figura 5.102 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e com busca em nichos.

As taxas de C, Figura 5.103, evidenciam a faixa das taxas de mutação em que os menores valores de subproduto são obtidos, ou seja, em taxas de mutação em torno de 0,01 com exceção do caso de tamanho populacional de 20, cruzamento em um ponto e taxa de cruzamento 0,6, onde o menor valor é atingido na taxa de 0,05.

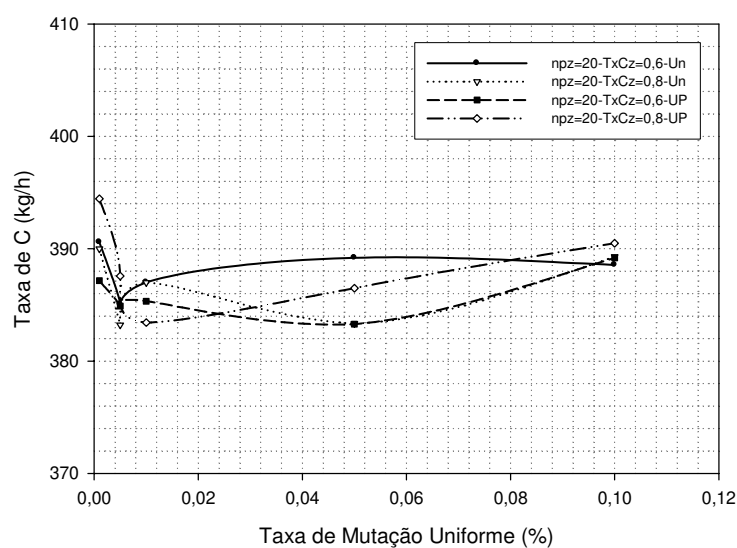


Figura 5.103 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e com busca em nichos.

V.3.2.6 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO MUTAÇÃO DE ARRASTE E SEM UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS NA PRODUTIVIDADE DE ÁLCOOL CÍCLICO DO NÍVEL 3 DE PRODUÇÃO

Nesta última análise de sensibilidade na produtividade de Álcool Cíclico, não foram utilizadas a mutação de arraste e o operador de busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variaram entre 0,001 e 0,1, utilizando também o mesmo tamanho populacional de 20, cruzamento uniforme e em um ponto com a taxa de cruzamento de 0,6 e 0,8 para ambos os casos. Mais uma vez não houve aumento da taxa de Álcool Cíclico, ou melhor, houve uma constância dos valores quando comparado com as situações anteriores.

As Tabelas 5.79 e 5.80 apresentam os resultados da simulação e as Figuras 5.104 a 5.106 ilustram os perfis de Álcool Cíclico (AC), de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C).

Observou-se que para o cruzamento uniforme com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,8 e taxa de mutação uniforme de 0,005, a taxa de Álcool Cíclico obtida foi de 6.986,62 kg/h.

A análise com a forma de cruzamento em um ponto, com tamanho populacional de 20, taxa de cruzamento de 0,6 e taxa de mutação uniforme de 0,05 o valor da taxa de Álcool Cíclico obtida foi de 6.986,35 kg/h, como melhores resultados.

Na situação com o cruzamento uniforme o aumento da produtividade de AC entre o melhor e o pior caso otimizado foi de 23,17 kg/h, 556,08 kg ao dia e 16.682,40 kg ao mês, um valor considerável para elevação da produtividade e melhoria do rendimento reacional. Os resultados referentes às simulações deste caso encontram-se na Tabela 5.79.

Tabela 5.79 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando npz = 20, cruzamento uniforme (Un) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,00		
TxCruzam. = 0,6	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	6983,40	0,0710	385,42
	0,005	6984,80	0,0714	384,78
	0,010	6975,49	0,0490	392,51
	0,050	6982,05	0,0664	387,07
	0,100	6980,12	0,0697	389,10
npz = 20		Taxa de Mutação de Arraste = 0,00		
TxCruzam. = 0,8	Taxa de Mutação Uniforme	AC	AB	C
Uniforme	0,001	6963,45	0,0290	401,83
	0,005	6986,62	0,0727	383,32
	0,010	6985,84	0,0714	383,05
	0,050	6975,39	0,0484	392,71
	0,100	6979,59	0,0728	390,48

Nas simulações envolvendo a forma de cruzamento em um ponto, a diferença entre produtividades de AC (entre o melhor e o pior caso otimizado) ficou em 13,89 kg/h, 333,36 kg ao dia ou 10.000,80 kg ao mês.

Este estudo confirma a importância da escolha dos valores de forma correta para os parâmetros genéticos e respectivas taxas de uma otimização, promovendo melhorias importantes no desempenho do processo. A Tabela 5.80 apresenta as simulações deste caso estudado.

Tabela 5.80 - Resultados das simulações (taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C)) para o Nível 3 de produção considerando npz = 20, cruzamento em um ponto (UP) e com taxas de 0,6 e 0,8 respectivamente, sem mutação de arraste e busca em nichos. As taxas de mutação uniforme variam de 0,001 à 0,100.

<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,6</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6981,61	0,0734	387,15
	0,005	6983,50	0,0726	383,70
	0,010	6979,26	0,0600	396,21
	0,050	6986,35	0,0730	383,28
	0,100	6981,26	0,0744	388,62
<i>npz = 20</i>		<i>Taxa de Mutação de Arraste = 0,00</i>		
<i>TxCruzam. = 0,8</i>	<i>Taxa de Mutação Uniforme</i>	<i>AC</i>	<i>AB</i>	<i>C</i>
Um Ponto	0,001	6973,23	0,0492	394,48
	0,005	6972,46	0,0458	395,20
	0,010	6985,78	0,0718	383,73
	0,050	6985,59	0,0714	383,53
	0,100	6979,16	0,0684	390,51

A Figura 5.104 traz os perfis de AC deste caso estudado, e verifica-se uma oscilação entre os valores de taxas 0,00 e 0,05. A partir do valor de taxa de mutação 0,05 na maioria dos casos ocorre uma diminuição na produtividade.

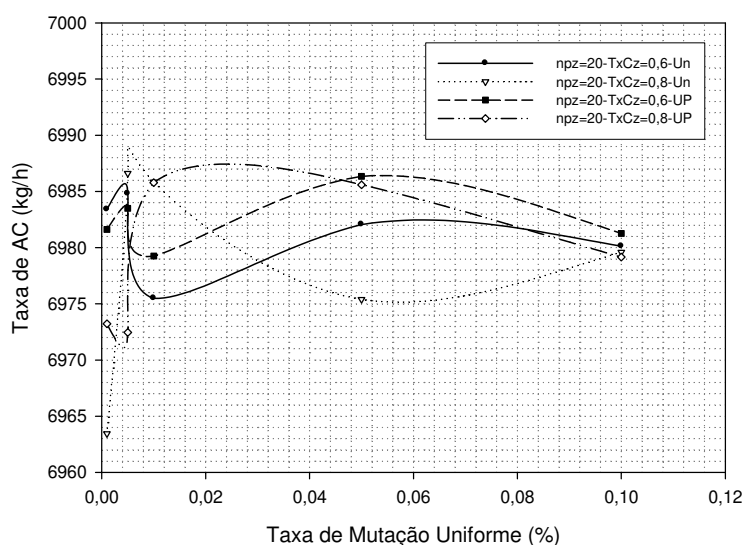


Figura 5.104 - Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Cíclico (AC), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e busca em nichos.

As taxas de AB são apresentadas pela Figura 5.105 e conforme a Figura 5.104 existe oscilações na maioria dos casos.

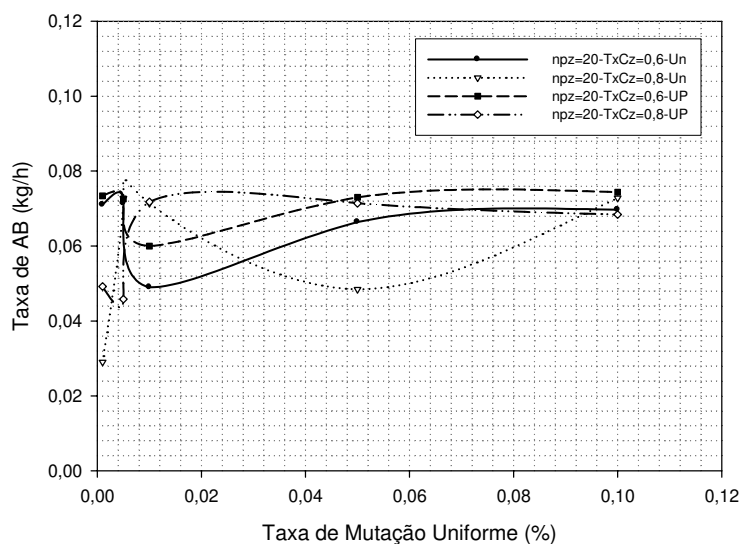


Figura 5.105 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Álcool Benzílico (AB), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e busca em nichos.

A produção do subproduto C também é oscilante e na maioria dos casos simulados aumentam a partir da taxa com valor de 0,05. Na Figura 5.106 podem ser observados os perfis das taxas de C.

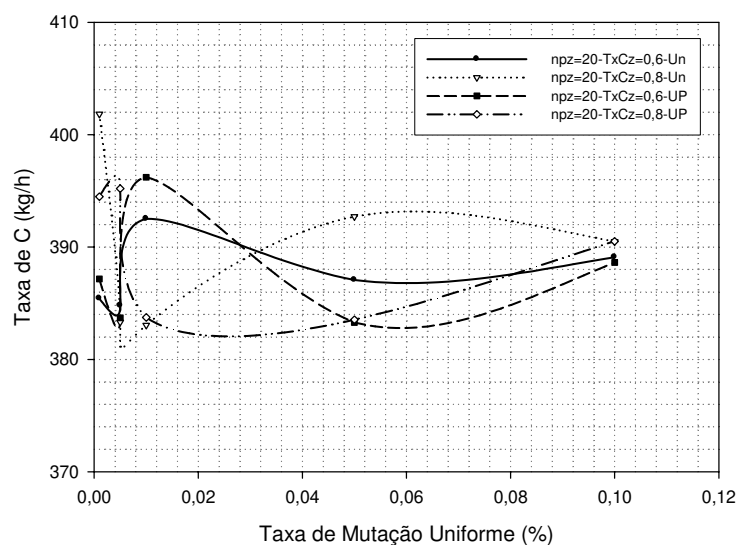


Figura 5.106 – Nível 3 - Influência da mutação uniforme na taxa de Cicloalcano (C), cruzamentos uniforme e em um ponto, sem mutação de arraste e busca em nichos.

V.3.3 SÍNTESE DAS ANÁLISES DO NÍVEL 3 DE PRODUÇÃO

Neste nível operacional de produção foram selecionados os dois melhores casos simulados, um deles considerando a forma de cruzamento uniforme e a outra, a em um ponto, que forneceram os melhores desempenhos na otimização (melhores produtividades de Álcool Cíclico). A Tabela 5.81 apresenta os resultados da otimização para os dois melhores casos para ambas as formas de cruzamento (uniforme e em um ponto respectivamente).

Para o caso que se utilizou o cruzamento uniforme o conjunto de parâmetros genéticos que permitiu o melhor desempenho ocorreu quando o tamanho da população foi de 20, taxa de cruzamento de 0,6, não utilizando o operador de busca em nichos, tendo a taxa de mutação de arraste um valor de 0,01, taxa de mutação uniforme com o valor de 0,01 (valor fixo) e utilizando 500 gerações, esse resultado é proveniente do item V.3.2.3. As taxas dos componentes principais obtidas pela otimização foram: 6.987,48 kg/h (Álcool Cíclico - AC), 0,0757 kg/h (Álcool Benzílico - AB) e 382,53 kg/h (Cicloalcano - C).

Para o caso que utiliza o cruzamento em um ponto o conjunto de parâmetros genéticos aplicados foi o que considerou o tamanho da populacional de 40, taxa de cruzamento de 0,8, utilizando a operação com busca em nichos, taxa de mutação de arraste com valor fixo de 0,02, taxa de mutação uniforme de 0,01 e utilizando 500 gerações (referentes ao item V.3.2.1).

As taxas dos componentes principais obtidas para esta otimização foram: 6.988,05 kg/h (Álcool Cíclico - AC), 0,0759 kg/h (Álcool Benzílico - AB) e 381,90 kg/h (Cicloalcano - C). Este resultado foi o melhor entre todos da análise do Nível 3 de produção (Tabela 5.81).

Tabela 5.81 – Síntese dos resultados das simulações do Nível 3, apresentando os valores dos parâmetros operacionais otimizados para os dois melhores casos (cruzamentos uniforme e em um ponto) – valores máximos.

Nível 3			
		<i>GA(20 - 0,6 - 0,01 - 0,01 - 500)</i>	<i>GA(40 - 0,8 - 0,01 - 0,02 - 500)</i>
<i>Parâmetros Operacionais</i>	<i>Não Otimizado</i>	<i>Uniforme Otimizado</i>	<i>Um Ponto Otimizado</i>
Q_{r1}	390,00	7930,32	1801,67
Q_{r2}	0,00	4213,37	9923,86
Q_{r3}	850,00	8013,71	4775,35
Q_{r4}	3490,00	7631,81	1889,89
Q_{r5}	1190,00	7123,00	9441,64
Q_{r6}	500,00	4541,49	304,85
T_0	173,00	171,27	170,00
Q_{cat}	414,00	285,91	284,74
Q_{AC}	6855,40	6987,48	6988,05
Q_{AB}	0,076	0,0757	0,0759
Q_C	476,20	382,53	381,90
Consumo de Q_{ri} 's (kg/h)	6420,00	39453,70	28137,26

A observação principal nestas simulações para otimização da produção, foi um aumento bem acentuado na produtividade de AC, ou seja, verificou-se que na simulação com cruzamento uniforme houve um aumento das taxas de AC de 132,08 kg/h, 3.169,92 kg ao dia e 95.097,60 kg ao mês comparado à situação não otimizada.

Na simulação com o cruzamento em um ponto o aumento de produtividade de AC foi de 132,65 kg/h, 3.183,60 kg ao dia e 95.508,00 kg ao mês comparado à situação não otimizada, onde mais uma vez se confirma um aumento expressivo na produtividade de Álcool Cíclico.

Em auxílio ao aumento expressivo da produtividade de AC, foi constatado que houve uma grande diminuição das taxas de catalisador em ambos os casos de melhor desempenho da otimização.

Para a forma de cruzamento uniforme a taxa de catalisador passou de 414,00 para 285,91 kg/h, uma redução de 128,09 kg/h, 3.074,16 kg ao dia e 92.224,80 kg por mês, o que nem precisa se discutir, já que a economia de catalisador é muito grande e pode aumentar de forma contundente a lucratividade do processo reacional, pois catalisadores possuem custos muito elevados.

Isso também é confirmado para o caso com o cruzamento em um ponto, onde a taxa passou de 414,00 para 284,74 kg/h, ou seja, uma redução em 129,26 kg/h, 3.102,24 kg por dia e mensalmente economizando 93.067,20 kg. Neste caso simulado a economia fica sendo maior, a decisão de qual dos casos a utilizar seria realizada conforme um balanço econômico do processo reacional como um todo, levando-se em conta todos os parâmetros de importância reacional.

Outra observação feita foi o aumento das taxas de fluido refrigerante que para o caso de cruzamento uniforme passou de 6.420,00 para 39.453,70 kg/h e no cruzamento em um ponto foi de 6.420,00 para 28.137,26 kg/h. Esse aumento grande na quantidade de refrigerante é devido ao aumento da temperatura reacional, isso significa um aumento energético no processo e como já citado deve entrar nos cálculos de avaliação econômica para que as decisões operacionais sejam as melhores possíveis. O impacto desse aumento não afeta o balanço financeiro do aumento da produtividade por causa da diminuição das taxas de catalisador.

Outro fato analisado foi uma redução das taxas de Álcool Benzílico (AB) e Cicloalcano (C) para ambas as formas de cruzamento. No cruzamento uniforme o melhor caso otimizado forneceu uma diminuição de AB de 0,0003 kg/h, 0,0072 kg ao dia ou 0,216 kg por mês (aproximadamente). Para o subproduto C a diminuição foi de 94,00 kg/h, 2.256,00 kg por dia, ou 67.680,00 kg ao mês. A redução de C é muito significativa.

O cruzamento em um ponto promoveu a redução das taxas de AB em torno de 0,0001 kg/h, 0,0024 kg ao dia, ou 0,072 kg por mês. Para C a redução foi de 94,00 kg/h,

2.256,00 kg por dia, ou 67.680,00 kg ao mês. Mais uma vez verifica-se uma redução de C sendo muito importante.

A Figura 5.107 descreve o perfil de produtividade em função do número de gerações adotadas (500 gerações) nas simulações utilizando os casos de melhor desempenho citados anteriormente e após são apresentados os perfis das taxas dos componentes principais que estão envolvidos no processo reacional antes e após a otimização. O aumento da produtividade pode ser observado quando comparado com a situação não otimizada.

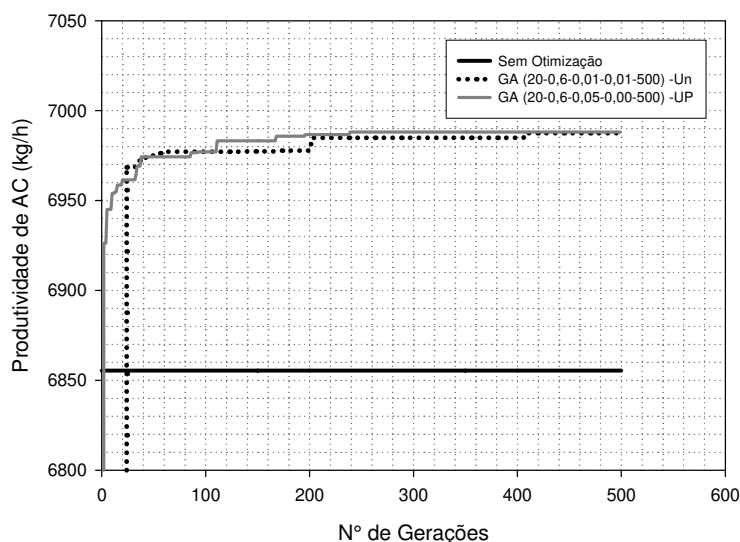


Figura 5.107 - Perfil da evolução da otimização do Nível 3 dos dois melhores resultados, utilizando as duas formas de cruzamento (uniforme (Un) e em um ponto (UP)), com seus respectivos conjuntos de parâmetros genéticos.

As Figuras 5.108 a 5.114 apresentam os perfis das taxas de Álcool Cíclico (AC), Álcool Benzílico (AB), Cicloalcano (C) e de Água utilizando os parâmetros otimizados dos dois melhores casos observados para este nível operacional. A análise é realizada ao longo do comprimento axial total medido no reator (percurso total percorrido pelos reagentes e produtos desde a entrada até a saída do reator – do primeiro ao último módulo).

As figuras retratam os casos: não otimizado pelo modelo, otimizado (melhor resultado com cruzamento uniforme – Un), e otimizado (melhor resultado com cruzamento em um ponto – UP).

A Figura 5.108 que descreve os perfis de temperatura, ao longo do comprimento axial do reator (em todos os módulos), utiliza o perfil coletado experimentalmente para comparação com as situações não otimizada, e otimizadas.

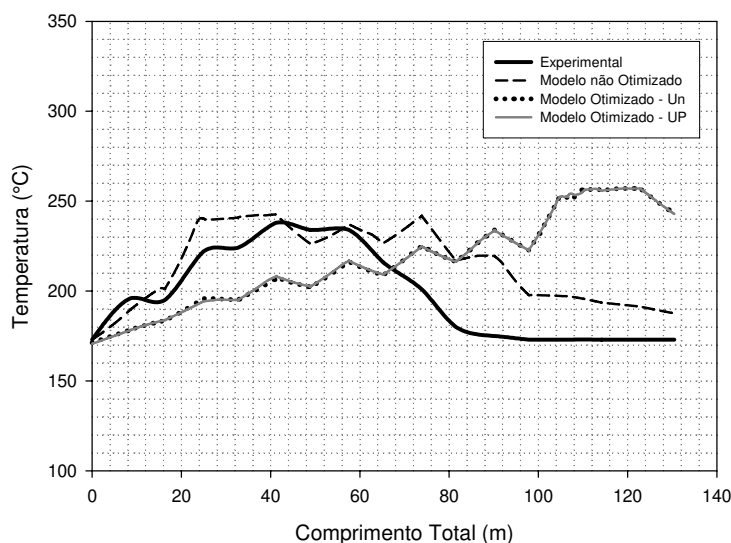


Figura 5.108 – Nível 3 - Perfis de temperatura ao longo do reator.

Os casos otimizados de acordo com o modelo proposto e o caso não otimizado seguem com proximidade os dados experimentais, apenas possuem temperaturas mais elevadas principalmente a partir da posição axial de 60,0 metros (casos otimizados) e 20,0 metros para o caso não otimizado embora este último possui um desvio um pouco menor em relação aos otimizados.

As Figuras 5.109 e 5.110 são referentes ao reagente AB apresentando os perfis de conversão e de frações molares ao longo do comprimento axial do reator.

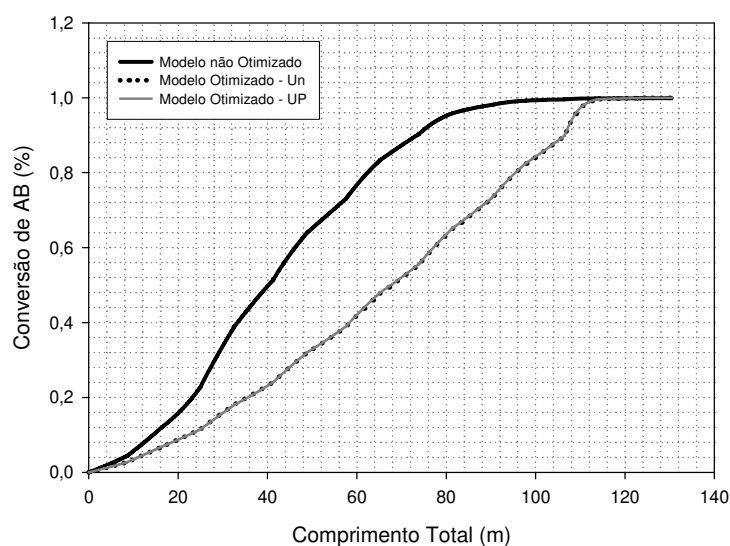


Figura 5.109 – Nível 3 - Perfis de conversão de Álcool Benzílico (AB) ao longo do reator.

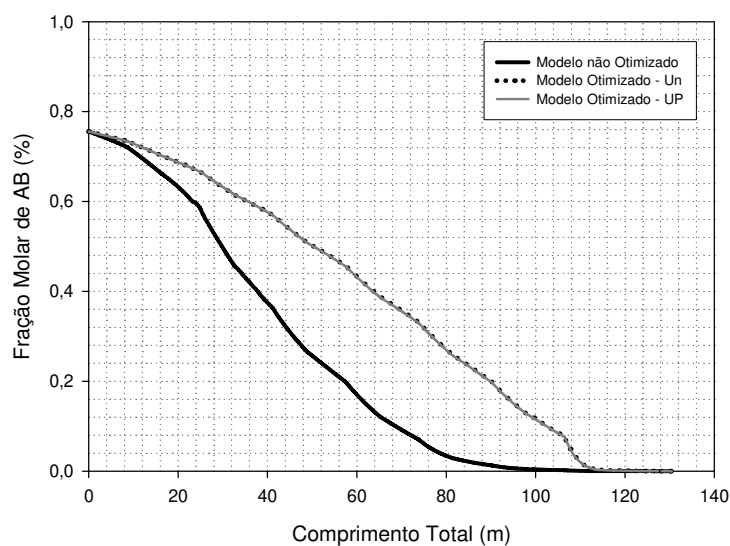


Figura 5.110 – Nível 3 - Perfis de fração molar de Álcool Benzílico (AB) ao longo do reator.

Os perfis de conversão e frações molares de AC ao longo do comprimento axial do reator de produção são representados pelas Figuras 5.111 e 5.112 respectivamente.

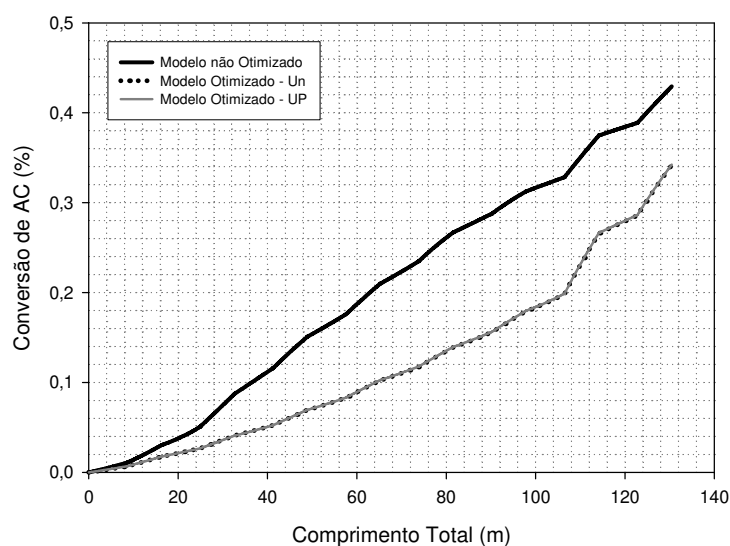


Figura 5.111 – Nível 3 - Perfis de conversão de Álcool Cíclico (AC) ao longo do reator.

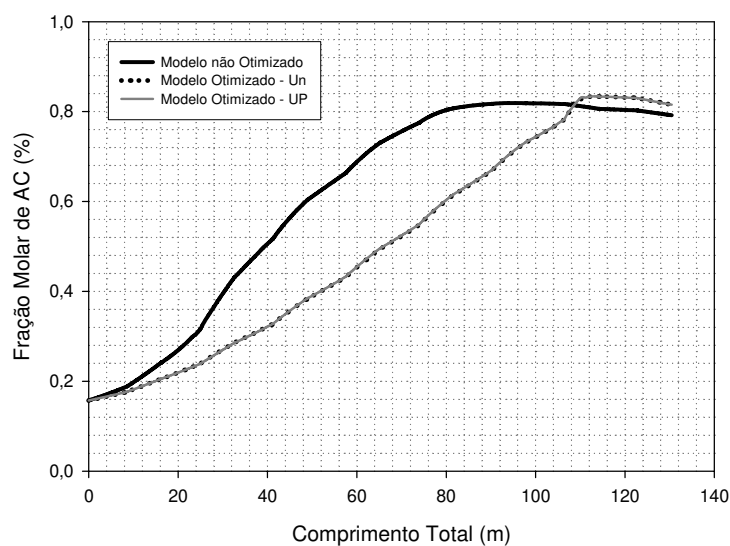


Figura 5.112 – Nível 3 - Perfis de fração molar de Álcool Cíclico (AC) ao longo do reator.

Por último são apresentados os perfis de frações molares do subproduto C e de Água ao longo do comprimento axial do reator de produção pelas Figuras 5.113 e 5.114 respectivamente.

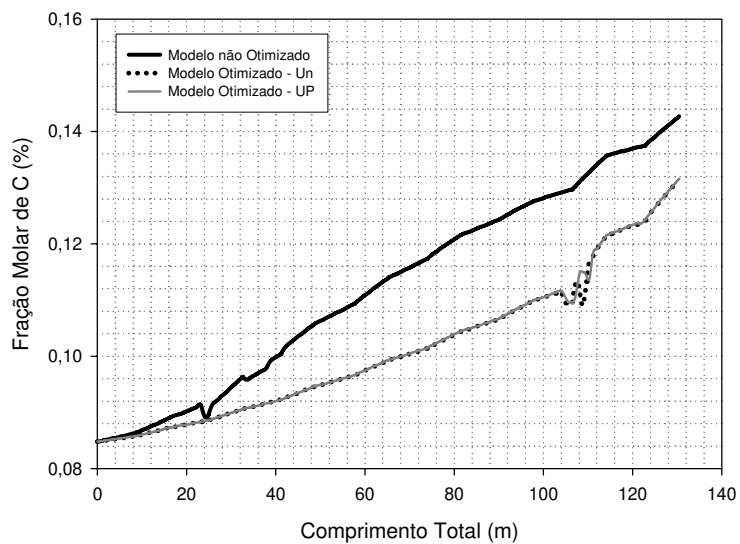


Figura 5.113 – Nível 3 - Perfis de fração molar de Cicloalcano (C) ao longo do reator.

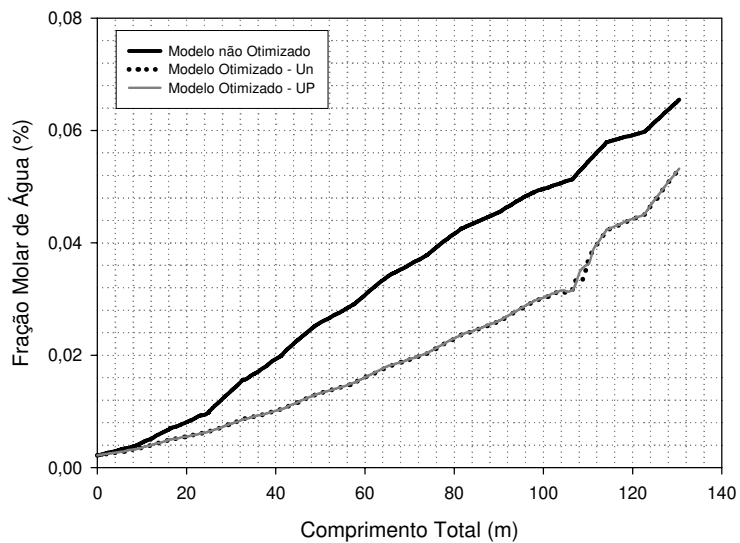


Figura 5.114 – Nível 3 - Perfis de fração molar de Água ao longo do reator.

V.4 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

A otimização do reator de Álcool Cíclico utilizando a técnica dos algoritmos genéticos foi muito proveitosa conforme os resultados apresentados. Em todas as formas de produção (Níveis de produção) os resultados foram extremamente favoráveis para o aumento da produtividade de Álcool Cíclico como pôde ser verificado, além da observação importante de grande diminuição da quantidade de catalisador (produto de elevado custo) e de subproduto C (produto indesejado).

Os diversos parâmetros genéticos e suas respectivas variações promoveram maior ou menor produtividade do produto de interesse dependendo do Nível de produção analisado. A diferença entre os valores otimizados pode ser grande e depende do tipo de operador genético utilizado e suas oscilações de valores.

Observou-se que nos Níveis de produção 1 e 3 o efeito dos parâmetros genéticos e respectivas oscilações determinaram alterações nas taxas de Álcool Cíclico entre o melhor e o pior caso otimizado na ordem de 20,00 kg/h (Nível 1) e 27,00 kg/h (Nível 3). Na situação do Nível 2 de produção a diferença ficou em torno de 4,00 kg/h que pode ser devida a faixa de busca das variáveis operacionais estar próxima do(s) ótimo(s) não havendo significativas alterações quando utilizado determinados parâmetros genéticos e/ou quando ocorrem as oscilações destes, mas nos outros dois casos (Níveis 1 e 3) a região de busca deve conter diversos e variados máximos, além de não ser um espaço de busca ideal, mas mesmo assim promove a maximização da produção.

Esta elevação das taxas de AC é importante quando se analisa a produtividade ao longo de um dia, mês ou ano e evidencia a importância dos parâmetros genéticos nas otimizações.

Outra observação muito importante foi a redução das taxas de catalisador utilizadas nos casos de produção. Na análise do Nível 1 houve uma redução de 87,84 kg/h e 85,49 kg/h para os melhores casos otimizados (cruzamento uniforme e em um ponto respectivamente). Para o Nível 2 a redução foi aproximadamente de 94,20 kg/h para os dois melhores casos igualmente e no Nível 3 a redução foi em torno de 128,09 kg/h (cruzamento uniforme) e 129,26 kg/h (cruzamento em um ponto), citados anteriormente. A redução foi considerável e a diminuição de custos pode ser muito acentuada.

Com relação a redução de reagentes (Álcool Benzílico - AB) e subprodutos (Cicloalcano), a otimização promoveu a redução de ambos. A redução de Álcool Benzílico em todos os casos foi pequena ficando na ordem de 10^{-2} kg/h (Níveis 1 e 2) e 10^{-4} kg/h (Nível 3) para todos os casos otimizados.

Para o Cicloalcano (C) (Nível 1) a redução foi em torno de 48,00 kg/h nos dois melhores casos otimizados, para o Nível 2 ficou em 60,00 kg/h aproximadamente para ambos os casos e no Nível 3 a redução foi próxima de 94,00 kg/h. Isso evidencia que os valores otimizados promovem o aumento da produtividade de Álcool Cíclico com diminuição de reagente (Álcool Benzílico - AB) e subproduto (Cicloalcano - C), melhorando o desempenho do reator dentro dos limites operacionais impostos.

Outro fato foi a utilização de fluido refrigerante onde no Nível 1 houve redução das taxas em 4.333,89 kg/h (cruzamento uniforme) e 4.012,32 kg/h (cruzamento em um ponto), mas para os Níveis 2 e 3 houve aumento dessas, ficando para o Nível 2 um valor acrescido de 8.893,12 kg/h (cruzamento uniforme) e 12.874,15 kg/h (cruzamento em um ponto) e por fim o Nível 3 ocorreu aumento das taxas de fluido refrigerante de 33.033,70 kg/h (cruzamento uniforme) e 21.717,26 kg/h (cruzamento em um ponto).

Este trabalho apresentou um inconveniente que foi o tempo de execução do código genético. As otimizações, em média, eram realizadas em aproximadamente uma hora, isso para cada simulação, conforme o tamanho da população inicial que era adotado. Por

exemplo, para tamanhos populacionais de 20 o tempo de execução foi de aproximadamente 45 minutos e de acordo com o aumento destes (tamanhos populacionais) como: de 30, 40 e 50, o tempo aumentava na ordem de 10, 15 e 20 minutos para cada situação respectivamente. Devido a esta situação a análise tornou-se mais lenta devido a grande quantidade de simulações requeridas para a análise proposta considerando os diversos parâmetros genéticos.

Em resumo a técnica dos algoritmos genéticos aplicada neste caso específico (estado estacionário), para todos os níveis de produção promoveu um grande aumento na produtividade (Álcool Cíclico), com fortes indícios de redução de custos, como redução das taxas de catalisador e diminuição de reagentes não reagidos e subprodutos. Isto significa que pode haver uma revisão nas atividades de operações unitárias na seção posterior ao reator (menos quantidades destes componentes na corrente de saída) fornecendo menos esforços para separação de produtos, subprodutos e reagentes.

Para uma conclusão mais efetiva da aplicação desta técnica faz-se necessário utilizar um modelo de maior complexidade do reator, considerando a situação em tempo real, e além desta pode-se estudar o caso do reator acoplado às outras subunidades do processo como um todo, tornando assim a representatividade do processo de otimização com valores mais realísticos às condições de produção desejadas ou almejadas. Portanto a aplicação desta metodologia foi bem sucedida e indica que pode ser aplicada em situações semelhantes a outros reatores e/ou processos químicos.

Capítulo VI

Conclusões e Recomendações para Trabalhos Futuros

VI.1 CONCLUSÕES

Os resultados deste trabalho indicam que a técnica dos Algoritmos Genéticos é muito eficiente, promissora, de fácil aplicação e grande adaptabilidade com alto potencial de ser utilizada em diversos outros problemas relacionados à Engenharia Química, não só na parte reacional (reatores), como em outros equipamentos pertinentes a processos químicos de forma individual ou em conjunto, podendo ainda ser utilizada em tempo real em uma unidade de processamento. Uma outra face da utilização dos algoritmos genéticos pode ser voltada para controle on-line de processos e sistemas integrados, sendo utilizado através da programação paralela, que poderia diminuir consideravelmente o tempo computacional. Em auxílio aos fatores econômicos pode também ser acoplada para estudos de avaliação econômica de projetos, ou através de uma forma de planejamento, controle e avaliação de diversos processos da indústria sempre considerando as flutuações dos diversos parâmetros econômicos ligados aos mercados atuais (economia nacional ou internacional), além das considerações de ordem ambiental.

Podem-se ressaltar algumas conclusões da aplicação desta técnica conforme discussão no capítulo anterior:

- Os resultados confirmaram que a técnica é adequada e pode ser adotada para otimização do reator de Álcool Cíclico. Para as melhores soluções otimizadas, no Nível 1 de produção o aumento da produtividade ficou na ordem de 90,00 kg/h, no Nível 2 de produção o aumento ficou em torno de 100,00 kg/h e para o Nível 3 tendo um aumento de 133,00 kg/h aproximadamente. Isto sendo analisado diariamente, semanalmente ou mensalmente indica um aumento na produtividade considerável;
- As variações dos parâmetros inerentes aos algoritmos genéticos influenciaram na produtividade do reator de Álcool Cíclico. No Nível 1 de produção houve uma diferença entre o pior e o melhor resultado otimizado de 38,00 kg/h tornando a análise de parâmetros importante na determinação de um melhor valor maximizado (otimizado). Para o Nível 2 de produção essa diferença foi de aproximadamente 4,00 kg/h e no Nível 3 de produção a diferença entre os extremos otimizados chegou ao valor de 27,00 kg/h. Essa situação evidencia a influência da escolha dos parâmetros genéticos e seus valores adotados para melhoria desempenho do reator;
- Houve concordância com a literatura no aspecto da utilização desses parâmetros genéticos. Mas mesmo assim existem ressalvas, porque para cada caso em específico, um determinado parâmetro pode promover ou não melhorias na produtividade. Neste trabalho pode-se verificar esta nuance quando foram analisadas as formas de cruzamento, uniforme e de um ponto respectivamente, onde na literatura designa o cruzamento uniforme como mais eficiente em diversos trabalhos já publicados, e em algumas simulações verificou-se que o cruzamento de um ponto forneceu melhores resultados. Apenas no Nível 1 de produção ocorreu conforme na literatura, ou seja utilizando o cruzamento uniforme obteve-se maior valor otimizado;
- Em relação aos outros parâmetros como busca em nichos, observa-se que em algumas situações a não utilização deste operador fornece bons resultados, mas isso

pode ser devido a um direcionamento na busca do ótimo em uma região mais afastada das melhores soluções pesquisadas. Além do mais, a busca em nichos pode “prender” as execuções por mais tempo em determinadas regiões no espaço de busca, havendo necessidade de um maior número de execuções ou gerações a serem adotadas no código genético para que a busca possa atingir outras regiões (mais promissoras) e assim ser direcionada a melhores resultados;

- A redução do reagente Álcool Benzílico (reagente principal) e do subproduto (Cicloalcano) ocorreu quando aplicada esta técnica de otimização. Para o Álcool Benzílico, em todos os casos, esta redução foi pequena ficando na ordem de 10^{-2} kg/h (Níveis 1 e 2) e 10^{-4} kg/h (Nível 3). Para o Cicloalcano, no Nível 1, a redução foi em torno de 48,00 kg/h nos dois melhores casos otimizados, para o Nível 2 ficou em 60,00 kg/h aproximadamente para ambos os casos, e no Nível 3 a redução foi aproximadamente de 94,00 kg/h, mostrando que os valores otimizados promovem o aumento da produtividade de Álcool Cíclico com diminuição de reagente (Álcool Benzílico) e subproduto (Cicloalcano), melhorando o desempenho do reator dentro dos limites operacionais impostos;
- Com relação a utilização de fluido refrigerante apenas no Nível 1 de produção houve diminuição na quantidade total de fluido refrigerante, nos outros dois casos há um aumento significativo, mas que não influencia no valor substancial causado pelo aumento da quantidade de Álcool Cíclico e com a diminuição de da taxa de catalisador. Esse balanço pode significar uma grande e favorável vantagem econômica na produção de Álcool Cíclico. Para o Nível 1 houve redução das taxas em 4.333,89 kg/h (cruzamento uniforme) e 3.556,77 kg/h (cruzamento de um ponto) mas para os Níveis 2 e 3 houve aumento das taxas, ficando para o Nível 2 um valor acrescido de 8.893,12 kg/h (cruzamento uniforme) e 12.874,15 kg/h (cruzamento de um ponto), e por fim o Nível 3 teve aumento das taxas de fluido refrigerante de 33.033,70 kg/h (cruzamento uniforme) e 21.717,26 kg/h (cruzamento de um ponto). O aumento da quantidade de refrigerante evidencia maiores trocas de calor ou seja maior quantidade de energia a ser retirada do processo reacional;

- Conforme discussão no capítulo anterior, para todos os casos observou-se a diminuição da quantidade de catalisador utilizada no reator de produção, na análise do Nível 1 a redução foi de 87,84 kg/h e 86,08 kg/h para os melhores casos otimizados (utilizando cruzamento uniforme e de um ponto respectivamente). Para o Nível 2 a redução foi de 94,20 kg/h aproximadamente para os dois melhores casos igualmente e no Nível 3 a redução ficou em 128,09 kg/h (cruzamento uniforme) e 129,26 kg/h (cruzamento de um ponto). A redução é considerável e a diminuição de custos pode ser muito acentuada indicando possibilidades de maior lucratividade;
- Comparações com outros trabalhos, principalmente em relação ao trabalho de Villalba (2002), embora tenha obtido bons resultados, indica que a técnica dos algoritmos genéticos é muito eficaz e fornece excelentes resultados para a otimização do reator de produção de Álcool Cíclico em steady-state. É evidente que o mesmo problema deve ser estudado para a situação de reação contínua, onde tenha condições de obtenção de conclusões mais definidas sobre a aplicação desta técnica. Mesmo assim pode-se concluir que é uma técnica promissora e útil para utilização em estudos de otimização de reatores catalíticos;
- Como já mencionado no capítulo anterior, o processo de otimização neste trabalho apresentou uma situação inconveniente que foi o tempo de execução do código genético, que em média realizava as otimizações em aproximadamente uma hora (para tamanhos populacionais de 20), isso para cada simulação realizada, ou seja conforme o tamanho da população inicial escolhido, o tempo de execução aumentava na ordem de 15, 20 e 30 minutos para cada situação de tamanhos populacionais de 30, 40 e 50 respectivamente. Com isso a análise como um todo ficou um pouco lenta devido a grande quantidade de simulações requeridas para a análise proposta considerando os diversos parâmetros genéticos;
- Em consequência deste alto tempo computacional (em torno de 1 hora), as análises se limitaram em poucos pontos simulados, mas mesmo assim houve um grande

número de simulações realizadas. Por exemplo, para a análise do tamanho populacional, em cada nível de produção foram realizadas 40 simulações totalizando 120 simulações no total. Para as outras análises referentes aos parâmetros genéticos, houve um limite da análise para tamanhos populacionais de 20 e 40, quando analisado as duas formas de mutação (de arraste e uniforme) utilizando taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8, para cruzamentos uniforme e de um ponto respectivamente, foram simulados 80 casos para cada nível de produção, ou seja mais 240 simulações. Na situação em que se limitou o tamanho populacional em 20 e analisando ambas as formas de cruzamento (uniforme e de um ponto) com taxas de cruzamento de 0,6 e 0,8, respectivamente, com adoção ou não de nichos e mutação de arraste, em cada nível produtivo foram simulados 108 casos, totalizando mais 324 simulações. No trabalho, houve mais ou menos em torno de 684 simulações;

- Por ser alto este número de simulações, tem-se a necessidade de diminuição do tempo computacional, e assim ampliar a faixa de análise para um número maior de pontos, utilizando os mesmos parâmetros e analisando também maiores tamanhos populacionais como de 50, 60, 70 chegando a 100, e em consequência fornecer maior representatividade e um melhor espaço de busca podendo nesse universo encontrar resultados melhores;
- Uma solução para esse inconveniente, seria a aplicação de técnicas paralelas de computação.

VI.2 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Embora a análise feita para os casos de estudo terem sido realizadas na condição de estado estacionário, os resultados mostraram um grande indicativo de melhoria no processo reacional onde outras etapas devem ser estudadas para se ter uma conclusão mais

precisa sobre a aplicação desta técnica. Algumas das etapas a serem estudadas são ressaltadas:

- Estudar a otimização utilizando outras funções objetivo que melhor possam representar o processo (análise de novas funções objetivos), incluindo mais restrições e a utilização de funções de penalidade;
- Analisar, e se possível ampliar as faixas de temperatura relacionadas ao desempenho reacional do reator aliado às condições reais de operação para os casos estudados;
- Verificar a possibilidade de realização da otimização dos parâmetros cinéticos do conjunto de reações do processo em questão, pois com a otimização destes o desempenho cinético poderia ser mais adequado ao processo reacional e assim promover uma melhor produtividade do produto de interesse. Além de uma melhor avaliação do estudo dos parâmetros cinéticos utilizando outra função objetivo ou outras (otimização multi-objetivo) considerando também as devidas restrições de penalidades, o processo de otimização como um todo poderia ser analisado de duas formas: otimizando os parâmetros cinéticos das reações e com estes já obtidos poderia ser realizada a otimização dos parâmetros operacionais como realizado neste trabalho ou otimizar todos os parâmetros em conjunto (parâmetros cinéticos e operacionais), para todos os níveis de produção;
- Estudar e verificar outras formas de codificação dos algoritmos genéticos, como a codificação real;
- Estudar e implantar outros operadores genéticos a serem aplicados na codificação genética e/ou novas combinações desses operadores com o objetivo de melhorar as soluções ótimas ampliando a pesquisa no espaço de busca;

- Realização da otimização considerando o reator operando de forma contínua (dinâmica). Otimização em tempo real;
- Aplicação de estratégias combinadas, como desenvolvimento de técnicas híbridas utilizando algoritmos genéticos e outra técnica de otimização clássica tradicional, também pode ser uma boa estratégia;
- Aplicação de outras técnicas evolucionárias, tais como: Estratégias Evolutivas, Programação Evolutiva e Programação Genética realizando comparações com a técnica dos Algoritmos Genéticos;
- Realização de estratégias de paralelismo ao aumentar a complexidade, quando estudar o processo da forma dinâmica em tempo real. Dentro deste contexto, fazer uso de aplicação de técnicas concorrentes, no sistema de maior complexidade, podendo não só considerar apenas o reator de produção de Álcool Cíclico, como o processo inteiro (unidade de produção), podendo assim melhorar o tempo de execução e a eficiência de otimização do processo;
- Em consequência da utilização de técnicas concorrentes, pode ser inserido junto ao modelo do processo (do reator ou unidade inteira) um estudo mais detalhado da otimização considerando não só o aspecto da eficiência técnica, produtiva e operacional, mas também sendo aliado às condições macro-econômicas, financeiras e ambientais de forma mais atuante e dinâmica conforme as situações reais;
- Desenvolvimento de modelos matemáticos mais detalhados e realísticos representativos do processo de reação (reator de produção), ou no caso de análise da unidade inteira;

Capítulo VII

Referências Bibliográficas

VII.1 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ACKLEY, D. H.. **“A connectionist machine for genetic hill climbing”**. Kluwer Academic, Boston, 1987.

ALPER, E., WICHTENDAHL, B. e DECKWER, W. D.. **“Gas absorption mechanism in catalytic slurry reactors”**. Chem. Eng. Sci., v. 35, p.217-222, 1980.

ALTINTEN, A., ERDOGAN, S., HAPOGLU, H. e ALPBAZ, M.. **“Control of a polymerization reactor by fuzzy control method with genetic algorithm”**. Computers and Chemical Engineering, Vol. 27, 1031-1040, 2003.

ANSARI, R. M. e TADÉ, M. O.. **“Constrained Nonlinear Multivariable Control of a Fluid Catalytic Cracking Process”**. Journal of Process Control, Vol. 10, 539 – 555, 2000.

BÄCK, T.. **“Evolutionary Algorithms in Theory and Practice”**, Oxford University Press, New York, 1996.

BÄCK, T., HOFFMEISTER, F., e SCHWEFEL, H. P.. **“A survey of evolution strategies”**. In Richard K Belew and Lashon B. Booker, editors, Proceedings of the Fourth International Conference on Genetic Algorithms, pages 2-9, 1991.

BÄCK, T., FOGEL, D. B. e Michalewicz, Z. (eds.). **“Evolutionary Computation 1: Basic Algorithms and Operators”**. Institute of Physics Publishing, 2000a.

BÄCK, T., FOGEL, D. B. e MICHALEWICZ, Z. (eds.). **“Evolutionary Computation 2: Advanced Algorithms and Operators”**. Institute of Physics Publishing, 2000b.

BAKER, J. E.. **“Adaptative Selection Methods for Genetic Algorithms”**. In J. J. Grefenstette, ed., Proceedings of the First International Conference on Genetic Algorithms and Their Applications, Erlbaum, 1985.

BALLAND, L., ESTEL, L., COSMAO, J. M. e MOUHAB, N.. **“A genetic Algorithm with Decimal Coding for the Estimation of Kinetic and Energetic Parameters”**. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, Vol. 50, pp. 121-135, 2000.

BANG, W., NIKOV, I., DELMAS, H. e BASCOUL, A.. **“Gas-Liquid Mass Transfer in a New Three-Phase Stirred Airlift Reactor”**. Journal of Chemical Technology & Biotechnology, Vol. 72, Issue 2, Pages 137-142, 1998.

BARÁN, B.. **“Estudo de Algoritmos Combinados Paralelos Assíncronos”**. Tese de Doutorado na COPPE / UFRJ, Rio de Janeiro, 1993.

BARÁN, B., KASZKUREWICS, E. e BHAYA, A.. **“Parallel Asynchronous Team Algorithms Convergence and Performance Analysis”**. IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems, Vol. 7, n.7, July 1996.

BARBOSA, H. J. C.. **“Algoritmos Genéticos para Otimização em Engenharia: Uma Introdução”**. Em: IV Seminário sobre Elementos Finitos e Métodos Numéricos em Engenharia, Juiz de Fora, 1996.

BARR, A. e FEIGENBAUN, E.A., editors. **“The Handbook of Artificial Intelligence”**. Vol I-II. William Kaufmann Inc., Los Altos, California, 1981.

BARTHOLOMEW-BIGGS, M. C. e HERNANDEZ, F. G.. **“Using the KKT matrix in an augmented lagrangian SQP method for space constrained optimization”**. J.O.T.A., Vol. 85 (1), 201 – 220, 1995.

BHASKAR, V., GUPTA, S. K. e RAY, A. K.. **“Multi-Objective Optimization of an Industrial Wiped-Film PolyEthylene Terephthalate Reactor”**. AIChE Journal, 46(5), pp. 1046-1058, 2000.

BAZARAA, M. S. e SHETTY, C. M.. **“Nonlinear Programming - Theory and Algorithms”**. John Wiley & Sons, New York, 1979.

BAZARAA, M. S.. **“Nonlinear Programming: Theory and Algorithms”**. 2nd Ed., J. Wiley, New York, 1993.

BEASLEY, D., BULL, D. R. e MARTIN, R. R.. **“A Sequential Niche Technique for Multimodal Function Optimization”**, Evolutionary Computation, 1(2), pp. 101-125, <http://citeseer.ist.psu.edu/beasley93sequential.html> , 1993.

BECKERS, M. L. M., DERKS, E. P. P. A., MELSEN, W. J. e BUYDENS, L. M. C.. **“Parallel Processing of Chemical Information in a Local Area Network-III. Using Genetic**

Algorithms for Conformational Analysis of Biomacromolecules". Computers Chemicals Engineering. Vol. 20, No. 4, pp. 449-457, 1996.

BELEW, R. e BOOKER, L. B. (Eds). **"Proceedings of the Fourth International Conference on Genetic Algorithms"**. San Mateo: Morgan Kaufmann, 1991.

BERNING, G., BRANDENBURG, M., GÜRSOY, K., KUSSE, J. S., MEHTA, V. e TÖLLE, F. J.. **"Integrating Collaborative Planning and Supply Chain Optimization for the Chemical Process Industry (I)-Methodology"**. Computers and Chemical Engineering, No. 28, pp. 913-927, 2004.

BIRK, J., LIEPELT, M., SCHITTKOWSKI, K., e VOGEL, F.. **"Computational of Optimal Feed Rates and Operations Intervals for Tubular Reactors"**. Journal of Process Control, No. 9, 325 – 336, 1999.

BLICKLE, T. e THIELE, L., **"A Comparison of Selection Schemes used in Genetic Algorithms"**. Report No. 11, Computer Engineering and Communication Networks Lab (TIK), Swiss Federal Institute of Technology (ETH), Zurich, 1995.

BORNHOLDT, S. e SNEPPEN, K.. **"Robustness as an Evolutionary Principle"**. Proceedings of the Royal Society of London, B 267, 2281-2286, 2000.

BRAGA, C. G.. **"O Uso de Algoritmos Genéticos para Aplicação em Problemas de Otimização de Sistemas Mecânicos"**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, MG, 1998.

BURNS, G. E BOTTINO, P.. **"The Science of Genetics"**. New York: Macmillan Publishing Company, 1989.

CALBERG, P. J. e FEORD, D. M.. **“Model Based Optimization and Control of a Reactor System with Heterogeneous Catalyst”**. Computers Chemical Engineering, Vol. 21, Suppl., S386 – S390; 1997.

CANTÚ-PAZ, E.. **“A Summary of Research on Parallel Genetic Algorithms”**. IlliGal Report No. 95007, July 1995.

CARROLL, D. L.. <http://cuaerospace.com/carroll/ga.html> , 2004.

CARROLL, D. L.. **“Genetic Algorithms and Optimizing Chemical Oxygen-Iodine Lasers”**. *Developments in Theoretical and Applied Mechanics, Vol. XVIII*, eds. H.B. Wilson, R.C. Batra, C.W. Bert, A.M.J. Davis, R.A. Schapery, D.S. Stewart, and F.F. Swinson, School of Engineering, The University of Alabama, pp.411-424, 1996a.

CARROLL, D. L.. **“Chemical Laser Modeling with Genetic Algorithms”**. AIAA J., Vol. 34, 2, pp. 338-346, 1996b.

CASTRO, R. E.. **“Otimização: Programação Matemática e Algoritmos Genéticos”**. Monografia para inscrição direta de D.Sc., Programa de Engenharia Civil, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, Fevereiro de 1999.

CASTRO, R. E.. **“Otimização de Estruturas com Multi-objetivos Via Algoritmos Genéticos de Pareto”**. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, 2001.

CAVICCHIO, D.. **“Adaptive search using Simulated Evolution”**. Unpublished doctoral dissertation, University of Michigan, Ann Arbor, 1970.

CAZANGI, R. R. e FIGUEIREDO, M. F.. **“Simultaneous Emergence of Conflicting Basic Behaviors and Their Coordination in an Evolutionary Autonomous Navigation System”**. In: 2002 World Congress on Computational Intelligence - Congress on Evolutionary Computing, Honolulu, Hawaii, EUA, 2002.

CHARNIACK, E. e McDERMOTT, D.. **“Introduction to Artificial Intelligence”**. Addison-Wesley Publishing Company, Reading, MA, 1985.

CHAUDHARI, R. V., GHOLAP, R. V. e BHATTACHARYA, A.. **“Gas absorption with exothermic bimolecular (1,1 order) reaction”**. AIChE Journal Volume 33, Issue 9, Pages 1507-1513, 1987

CHAUDHARI, R. V. e RAMACHANDRAN, P. A.. **“Three-phase Slurry Reactors”**. AIChE Journal, Vol. 26, 21, 177-201, 1980.

CHEN, N. H.. **“Process Reactor Design”**. Allyn and Bacon, Inc., 1983.

CHUNG, J. S. e HWANG, S. M.. **“Application of a Genetic Algorithm to the Optimal Design of the Die Shape in Extrusion”**. Journal of Materials Processing Technology. Vol. 72, pp. 69-77, 1996.

COUSSEMANT, F. e JUNGERS, J. C.. **“La Cinétique de L’Hydrogénation Catalytique des Phénols”**. Bull. Soc. Chim. Bel., Vol. 59, 295-326, 1950.

DADONE, P. e VANLANDINGHAM, H. F.. **“PLC implementation of a genetic algorithm for controller optimization”**. Proc. 3rd International Conf. Computacional Intelligence and Neuroscience (JCIS’98/CI&N’98), Vol. 2, 91-94 Raleigh, NC, October 1998.

DARWIN, C. **Origem das Espécies. Tradução do original “On The Origin of Species: by means of Natural Selection, or the preservation of favoured races in the struggle for life”**. feita por Eugênio Amado. Belo Horizonte: Villa Rica, 1994.

DARWIN, C.. **“O Beagle na América do Sul”**. São Paulo: Ed. Paz e Terra, 1996.

DAVIS, L.. **“Handbook of Genetic Algorithms”**. New York, Van Nostrand Reinhold, 1991.

DEB, K.. **“Genetic algorithms in search and optimization: The technique and applications”**. Proceedings of International Workshop on Soft Computing and Intelligent Systems, Calcutta, India: Machine Intelligence Unit, Indian Statistical Institute, pp. 58 – 87, 1998.

DECHECHI, E.D. e MACIEL FILHO, R.. **“Controle Avançado Preditivo Adaptativo DMC Multivariável Adaptativo”**. Tese Doutorado, FEQ, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Brasil, 1998.

DECKWER, W. D.. **“Bubble Column Reactors”**. John Wiley and Sons, New York, 1992.

DECKWER, W. D. e SCHUMPE, A.. **“Improved tools for bubble column reactors design and scape-up”**, Chem. Eng. Sci., Vol. 48, 5, 889-911, 1993.

DEDIEU, S., PIBOULEAU, L., AZZARO-PANTEL, C. e DOMENECH, S.. **“Design and Retrofit of Multiobjective Batch Plants via a Multicriteria Genetic Algorithm”**. Computers & Chemical Engineering, Vol. 27, No. 12, pp. 1723–1740, 2003.

DE JONG, K. A.. **“An Analysis of the Behavior of a Class of Genetic Adaptive Systems”**. Doctoral dissertation - University of Michigan, 1975.

DELMAS, H., BEM A. M. e STUBER, F.. **“Seletive hydrogenation of 1-5-9-ciclododecadieno in three-phase catalytic reactors”**. Catalytic Today, v. 24, p 95-101, 1995.

DORIGO, M.. **“Ant Colony Optimization”**. Iridia. Université Libre de Bruxelles, Belgium. <http://iridia.ulb.ac.be/~mdorigo/ACO/ACO.html>.

DOWNS, J. J. e VOGEL, E. F.. **“A Plant-Wide Industrial Process Control Problem”**, Computers Chem. Engineering, Vol. 17, 245–255, 1993.

DUVALL, P. M. e RIGSS, J. B.. **“On-Line Optimization of The Tennessee Eastman Challenge Problem”**. Journal of Process Control, Vol. 10, 19–33, 2000.

EAST, I. e MACFARLANE, D.. **“Implementation in Occam of Parallel Genetic Algorithms on Transputer Networks”**. J. Stender: Parallel Genetic Algorithms, IOS Press 1993.

EDGAR, T. F. e HIMMELBLAU, D. M.. **“Optimization of Chemical Process”**, McGraw-Hill, Singapoure, 1989.

ELDRED, M. S.. **“Optimization Strategies for Complex Engineering Applications”**. Sandia Report, Sandia National Laboratories, 1998.

ENGELL, S., WANG, K., LÖHL, T., e STOBBE, M.. **“A Genetic Algorithm for Online-Scheduling of a Multiproduct Polymer Batch Plant”**, Computers and Chemical Engineering, Vol., 24, 393 – 400, 2000.

ESHELMAN, L. J., CARUANA, R. A. e SCHAFFER, J. D.. **“Biases in the Crossover Landscape”**. In Schaffer, J. (ed.). Proceedings of the Third International Conference on Genetic Algorithms, Morgan Kaufmann Publishers, 10-19, 1989.

ESHELMAN, L. J. e SCHAFFER, J. D.. **“Foundations of Genetic Algorithms 2, chapter Real-Coded Genetic Algorithms and Interval-Schemata”**, pages 187-202. Morgan Kaufman, 1993.

FACCHINEI, F.. **“Robust Recursive Quadratic Programming Model with Global and Superlinear Convergence Properties”**, J.O.T.A., Vol. 92 (3), 546–579, 1997.

FLETCHER, R.. **“Semidefinite matrix constraints in optimization”**. SIAM J. Control and Opt., 23: 493-513, 1985.

FLETCHER, R.. **“Practical Mmethods of Optimization”**. 2nd ed., Chichester, Wiley, 1987.

FOGEL, L. J., OWENS, A. J. e WALSH, M. J.. **“Artificial Intelligence Through Simulated Evolution”**. Wiley, New York, 1966.

FOGEL, D. B. e ATMAR, J. W.. **“Comparing Genetic Operators with Gaussian Mutations in Simulated Evolutionary Processes Using Linear Systems”**. Biological Cybernetics, 63(2):111-114, 1990.

FOGEL, D. B.. **“An Introduction to Simulated Evolutionary Optimization”**. IEEE Transactions on Neural Networks, Special issue on EP, Vol. 5, No. 1, 1994.

FORBES, J. F., SINGH, A., VERMEER, P. J. e WOO, S. S. **“Mode-Based Real-Time Optimization of Automotive Gasoline Blending Operations”**. Journal of Process Control, Vol. 10, 43–58, 1999.

FOUST ET AL.. **“Princípios de Operações Unitárias”**. Rio de Janeiro: Ed. Guanabara Dois, 1982.

FRAGA, E. S. e MATIAS, T. R. S.. **“Sythesis and Optimization of a Nonideal Distillation System Using a Parallel Genetic Algorithm”**. Computers chemical engineering, Vol. 20, Suppl., 579-584, 1996.

FRASER, A. S.. **“Simulation of Genetic Systems by Automatic Digital Computers”**. Australian Journal of Biological Sciences, 10, 484-491, 1957.

FREITAS JR., B. B. e MACIEL FILHO, R.. **“Modelagem Determinística, Fuzzy e Análise de Operação de Reatores Multifásicos; Processo de Hidrogenação do Fenol”**. Tese de Doutorado, FEQ, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Brasil, 2003.

FRIESE, T., ULBIG, P. e SCHULZ, S.. **“Use of Evolutionary Algorithms for the Calculation of Group Contribution Parameters in Order to Predict Thermodynamic Properties Part 1: Genetic algorithms”**. Computers Chemical Engineering, Vol. 22 No. 11, pp. 1559-1572, 1998.

FROMENT, G. F. e BISCHOFF, K. B.. **“Chemical Reactor Analysis and Design”**. John Wiley and Sons, 2ed., 664pp, New York, 1990.

FUZZY LOGIC TUTORIAL. [www.cacs.usl.edu/~manaris/ai-education-repository/ fuzzy-tutorial.html](http://www.cacs.usl.edu/~manaris/ai-education-repository/fuzzy-tutorial.html).

GARRARD, A. e FRAGA, E. S.. **“Mass Exchange Network Synthesis Using Genetic Algorithms”**. Computers Chem. Engineering. Vol. 22, No. 12, pp. 1837-1850, 1998.

GIANETTO, A. e SILVESTON, P. L.. **“Multiphase Chemical Reactors: Theory, Design, Scale-up”**. Hemisphere Publishing Corporation, Washington, 1986.

GILL, P. E., MURRAY, W. e WRIGHT, M. H.. **“Practical Optimization. Academic Press”**. London, 1981.

GNIELINSKI, V.. **“New Equations for Heat and Mass Transfer in Turbulent Pipe and Channel, Flow”**. Int. Chem. Eng, Vol. 16, pp. 359-368, 1976.

GOLDBERG, D. E.. **“Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning”**. Massachusetts: Addison-Wesley Co, 1989.

GOLDBERG, D. E. e DEB, K.. **“A Comparison of Selection Schemes Used in Genetic Algorithms, Foundation of Genetic Algorithms”**. edited by G. J. E. Rawlins, pp. 69-93, 1991.

GOTO, S. e SMITH, J. M.. **“Performance of Slurry and Trickle-bed Reactors: Application to Sulfur Dioxide Removal”**. AIChE Journal, Vol. 21, 2, 286-293, 1978.

GOTO, S., WATABE, S. e MATSUBARA, M.. **“The Role of Mass Transfer in Trickle-bed Reactors”**, Can. J. Chem. Eng., Vol. 54, pp. 551-555, 1976.

GROSS, B. e ROOSEN, P.. **“Total Process Optimization in Chemical Engineering with Evolutionary Algorithms”**. Computers chemical Engineering, Vol. 22, Suppl., S229-5236, 1998.

GUPTA, R. R. e GUPTA, S. K.. **“Multiobjective Optimization of an Industrial Nylon-6 Semibatch Reactor Sytem Using Genetic Algorithm”**, Journal of Applied Polymer Science, Vol. 73, pp. 729–739, 1999.

HAFTKA, R. T. e KAMAT, M. P.. **“Elements of Structural Optimization”**. Martinus Nijhoff, The Hague, 1985.

HANAGANDI, V. e NIKOLAOU, M.. **“A Hybrid Approach to Global Optimization Using a Clustering Algorithm in a Genetic Search Framework”**, Computers Chemical Engineering, Vol. 22. No. 12, 1913-1925, 1998.

HARDING, T. J., RADCLIFFE, N. J. e KING, P. R.. **“Hydrocarbon Production Scheduling with Genetic Algorithms”**. SPE Journal, June 1998.

HAUPT, R. L. e HAUPT, S. E.. **“Pratical Genetic Algorithm”**, John Wiley G. Sons Inc; New York, pp.25-48, 1998.

HASAN, S. D. M., MELO, D. N. C. e MACIEL FILHO, R.. **”Simulation and Response Surface Analysis for the Optimization of a Three-Phase Catalytic Slurry Reactor”**. Chemical Engineering and Processing, Irlanda, Vol. 44, n°. 3, 335-343, 2005.

HEINZ, J. e SPELLUCI, P.. **“A Successful Implementation of the Pantoja-Mayne SQP Method”**, Optimization Methods and Software, Vol. 4 (1), 1–28, 1994.

HEYEN, G. e KALITVENTZEFF, B.. **“Methodology for Optimization of Operation to Reduce Site-Scale Energy Use in Production Plants”**, Applied Thermal Engineering, Vol. 17, Nos. 8-10, 1005-1014, 1997.

HICHRI, H., ARMAND, A. e ANDRIEU, J.. **“Kinetics and Slurry-Type Reactor Modelling During Catalytic Hydrogenation of o-Cresol on Ni/SiO₂”**, Chem. Eng. Process, Vol. 30, 133-140, 1994.

HINTERDING, R., MICHALEWICZ, Z. e EIBEN, A. E.. **“Adaptation in Evolutionary Computation: A Survey”**. <http://www.coe.uncc.edu/~zbyszek/papers.html>, 1982.

HOLLAND, J. H.. **“Adaptation in Natural and Artificial Systems”**. Ann Arbor: University of Michigan Press, 1975.

HOLLAND, J. H.. **“Adaptation in Natural and Artificial Systems”**. University of Michigan Press, 2nd, 1992.

HORN, J. e NAFPLIOTIS, N., **“Multiobjective Optimization Using the Niche Pareto Genetic Algorithm”**. IlliGAL Report 93005, Illinois Genetic Algorithms Laboratory, University of Illinois, Urbana, Champaign, July 1993.

HORNBY, G. S.. **“The Recombination Operator, its Correlation to the Fitness Landscape and Search Performance”**, Master Thesis, University of Alberta. 1996.

HOROWITZ, A. J.. **“Convergence Properties of Some Iterative Traffic Assignment Algorithms”**. Transportation Research Record, No. 1220, pp. 21-27, 1989.

HSU, S. H. e RUETHER, J. A.. **“Kinetics of the Liquid-Phase Oxidation of Ethanol by Oxygen over Pd-Alumina Catalyst”**, Ind. Eng. Chem. Proc.Des.Dev., Vol. 17(4), 524-527, 1978.

HUANG, K., ZHAN, X-L., CHEN, F-Q. e LÜ, D-W., **“Catalyst Design for Methane Oxidative Coupling by Using Artificial Neural Network and Hybrid Genetic Algorithm”**. Chemical Engineering Science, Vol. 58, 81-87, 2002.

IGNIZIO, J. P.. **“Goal Programming and Extensions”**. Lexington Books, London, Massachusetts, 1976.

IGNIZIO, J. P., **“Linear Programming for Decision Analysis”**. Averbach Publishers, Philadelphia, 1982.

IMMANUEL, C. D. e DOYLE III, F. J.. **“Open-loop Control of Particle Size Distribution in Semi-Batch Emulsion Copolymerization Using a Genetic Algorithm”**. Chemical Engineering Science, Vol. 57, 4415-4427, 2002.

INCROPERA, F. P. e DE WITT, D. P.. **“Fundamentals of Heat and Mass Transfer”**. John Wiley and Sons, 3ed., 919pp, New York, 1990.

KASAT, R. B. e SANTOSH, G. K.. **“Multi-Objective Optimization of an Industrial Fluidized-Bed Catalytic Cracking Unit (FCCU) Using Genetic Algorithm (GA) with the Jumping Genes Operator”**. Computers and Chemical Engineering, Vol. 27, No. 12, 2003.

KALE, S. S. e RAMACHANDRAN, P. A.. **“Butynediol Synthesis: A Kinetic Study, Ind”**, Eng. Chem. Prod. Dev., Vol. 20 (2), 309-315, 1981.

KEITH, E., EDGAR, T.F. e MANOUSIOUTHAKIS, V.I.. **“Kinetic Model Reduction Using Genetic Algorithms”**, Computers chemical Engineering, Vol. 22, Nº 1-2, 239-246, 1998.

KIAN, L. H. e SORESENSEN, E.. **“Simultaneous Optimal Design and Operation of Multipurpose Batch Distillation Columns”**. Chemical Engineering and Processing, Vol. 43, N. 3, 2003.

KIRKPATRICK, S., GELATT Jr., C. D. e VECCHI, M. P., **“Optimization by Simulating Annealing”**. In: *Science*, 220, No. 4598, pp. 671-680, 1983.

KIRSCH, U.. **“Optimum Structural Design - Concepts, Methods and Applications”**. McGraw-Hill, New-York, (441 pages), 1981.

KODRA, D. e LEVEC, J.. **“Liquid Phase Methanol Synthesis: Comparison Between Trickle-Bed and Bubble Column Slurry Reactors”**, Chem. Eng. Sci., Vol. 46, 9, 2339-2350, 1991.

KOZA, J. R.. In: www.genetic-programming.com/johnkoza.html , 1990.

KOZA, J. R.. **“Genetic Programming: on the Programming of Computers by Means of Natural Selection”**, MIT Press, 1992.

LADSON, L. S.. **“Generalized Reduced Gradient Software for Linearly and Nonlinearly Constrained Problems. In Design and Implementation of Optimization Software”**. H. Greenberg, ed., Sijthoff and Noordhoof, 1979.

LEHRER, S.. “Evaluation of IgE Antibody Reactivity of Food Allergic”. Subjects to Starlink Corn, Submitted to EPA, Oct., 24, 2000.

LEVEC, J. e SMITH, J. M. **“Oxidation of Acetic Acid Solution in a Trickle-Bed Reactor”**. ALChW Journal, v. 33, n. 1, p. 159-168, 1975.

LEWIN, D. R. **“Multivariable Feedforward Control Design Using Disturbance Cost Maps and a Genetic Algorithm”**. Computers Chem. Engineering. Vol. 20, No. 12, pp. 1477-1489, 1996.

LEWIN, D. R., WANG, H. e SHALEV, O.. **“A Generalized Method for HEN Synthesis Using Stochastic Optimization – I. General Framework and MER Optimal Synthesis”**, Computers Chemical. Engineering, Vol. 22, No. 10, 1503-1513, 1998.

LID, T. e STRAND, S.. **“Real Time Optimization of a Catalytic Cacker Unit”**, Computers Chem. Engineering, Vol. 21, Suppl., p. S887 – 892, 1997.

LIPSCHUTZ, S.. **“Probabilidade”**. 3ª edição. Coleção Schaum. Editora McGraw-Hill do Brasil Ltda., 1972.

LÖHL, T., SCHULZ, C. e ENGELL, S.. **“Sequencing of Batch Operations for a Highly Coupled Production Process: Genetic Algorithms Versus Mathematical Programming”**. Computers chemical Engineering, Vol. 22, Suppl., S579-S585, 1998.

LUENBERGER, D. G.. **“Convergence Rate of a Penalty Function Scheme”**. Journal of Optimization Theory and Applications, 7:1 (1971) 39-51, 1971.

LUENBERGER, D. G.. **“Linear and Nonlinear Programming”**. 2nd Ed., Addison-Wesley, 1984.

LUENBERGER, D. G.. **“Linear and Non Linear Programming”**. Addison-Wesley Publishing Company, 1989.

MAES, P.. **“Intelligent Software: Easing the Burdens that Computers Put on People”**. IEEE Expert, 11(6), pp. 62-63, 1996.

MANDELBROT, B.. **“The Fractal Geometry of Nature”**, W. H. Freeman, New York, 1983.

MARIANO, A. P., MACIEL FILHO, R., VASCO DE TOLEDO, E. C. e SILVA, J. M.F.. **“Influence of the Phenomenon of Change of Phase of the Reacting Medium and of the Refrigerant Fluid on Model Predictions of Three-Phase Catalytic Slurry Reactor”**. In: 4th European Congress of Chemical Engineering - ECCE-4, 2003, Granada, Vol. 1, p. 1-1, 2003.

MARRIOTT, J. e SØRENSEN, E.. **“The Optimal Design of Membrane Systems”**. Chemical Engineering Science, Vol. 58, No. 22, 2003.

MCCORDUCK, P.. **“Machines Who Think”**. Freeman, San Francisco, 1979.

McCARTHY, J. e HAYES, P. J.. **“Some Philosophical Problems from the Standpoint of Artificial Intelligence”**. In D. Michie and B. Meltzer, editors, *Machine Intelligence 4*, pages 463-502. Edinburgh University Press, Edinburgh, GB, 1969.

MELO, D. N. C. e MACIEL FILHO, R.. **“Estratégia de Otimização em Duas Camadas: Aplicação para Processos de Hidrogenação em Reatores Catalíticos Trifásicos”**. Tese de Doutorado, FEQ, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Brasil, 2005.

MICHALEWICZ, Z.. **“Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs”**. New York: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996.

MICHALEWICZ, Z. e SCHENAUER, M.. **“Evolutionary Algorithms for Constrained Parameter Optimization Problems”**, Evolutionary Computation, No. 4, Vol. 1, pp. 1-32, 1996.

MITCHELL, M., HOLLAND, J. H. e FORREST, S. **When Will a Genetic Algorithm Outperform Hill Climbing?** In J. D. Cowan, G. Tesauro, and J. Alspector, eds., *Advances in Neural Information Processing Systems 6*. Morgan Kauffmann, 1994.

MICHELL, M.. **“An Introduction to Genetic Algorithms (Complex Adaptive Systems)”**, 1996.

MITCHELL, M.. **An Introduction to Gene tic Algorithms**. MIT Press, 1999.

MITRA, K. e GOPINATH, R.. **“Multiobjctive Optimization of an Industrial Griding Operation Using Elitist Nondominated Sorting Genetic Algorithm”**. Chemical Engineering Science, Vol. 59, 385 –396, 2003.

MOCHIZUKY, S. e MATSUI, T.. **“Seletive Hydrogenation and Mass Transfer in a Fixed-Bed Ctalitic Reactor with Gas-Liquid Cocurrent Upflow”**. AIChE Journal, Vol. 22(5), 904-909, 1976.

MOROS, R., KALIES, H., REX, H. G. e SCHAFFARCZYK, St.. **“A Genetic Algorithm for Generating Initial Parameter Estimations for Kinetic Models of Catalytic Process”**. Computers Chemical Engineering, Vol. 20, No. 10, 1257-1270, 1996.

MURASE, A. E., ROBERTS, H. L. e CONVERSE, A. O.. **“Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev”**, 9, 503, 1970.

NATH, R. e ALZEIN, Z.. **“On-Line Dynamic Optimization of Olefins Plants”**. Computers Chemical Engineering, Vol 24, 533 – 538, 2000.

NEVES, F. A.. **“Programação com Multi-Objetivos Aplicada à Otimização do Projeto de Pontes Estaiadas”**. Tese de Doutorado na COPPE / UFRJ, Rio de Janeiro, 1997.

ÖZTÜRK, S. S. e SHAH, Y. T.. **“Comparison of Gas and Liquid Phase Methanol Synthesis Process”**, Chem. Eng. Journal, Vol. 37, 177-192, 1988.

PALAZZO, Luiz A. M.. **“Algoritmos para Computação Evolutiva”**. - Relatório Técnico - Pelotas: Grupo de Pesquisa em Inteligência Artificial - Universidade Católica de Pelotas, 1997.

PANTEL, C. A., HARO, L. B., BAUDET, P., DOMENECH, S. e PIBOULEAU, L.. **“A Two-Stage Methodology for Short-Term Batch Plant Scheduling: Genetic Algorithm”**. Computers Chem. Engineering. Vol. 22, No. 10, pp. 1461-1481, 1997.

PARK, T. Y. e FROMENT, G. F., **“A Hybrid Genetic Algorithm for the Estimation of Parameters in Detailed Kinetic Models”**. Computers and Chemical Engineering, 22, Suppl., p. S103, 1998.

PATAI, S. (ed). **“The Chemistry of the Hydroxyl Group: The Dehydration of Alcohols”**. Interscience Publishers, vol. 2, pp. 641-718, 1971.

PATAI, S. (ed). **“The Chemistry of the Hydroxyl Group: Oxidation and Reduction of Phenols”**. Interscience Publishers, Vol. 2, pp. 641-718, 1971.

PEKNY, J. F. e REKLAITIS, G. V.. **“Towards the Convergence of Theory an Practice: A Technology Guide for Scheduling/Planning Methodology”**. In: PEKNY, J. F. BLAU, G. E., CARANHAM, B. (Eds): Proc. Foundations of Computer Aided Process Operations (FOCAPO98), CACHE Publications Michigan, pp. 91-111, 1998.

PENADILLOS, E. M. M.. **“Auto-sintonia Robusta de Controladores PID Usando Algoritmos Genéticos”**. Dissertação de Mestrado, Programa de Engenharia Elétrica, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1997.

PERRY, R. e CHILTON, C. H. (ed.). **“Chemical Engineers' Handbook”**. McGraw-Hill, 5ed., New York, 1973.

PHAM, Q. T.. **“Dynamic Optimization of Chemical Engineering Precesses by an Evolutionary Method”**. Computers Chemical Engineering, Vol. 22, No. 7-8, pp. 1089-1097, 1998.

POLIFKE, W., GENG, W. e DÖBBELING, K.. **“Optimization of Rate Coefficients for Simplified Reaction Mechanisms with Genetic Algorithms”**. Combustion and Flame, Vol. 113, pp. 119 – 135, 1998.

PRAKOTPOL, D. e SRINOPHAKUN, T.. **“GAPinch: Genetic Algorithm Toolbox for Water Pinch Technology”**. Chemical Engineering and Processing, Vol. 43, No. 2, 2004.

PROJETO ISIS. <http://www.geocities.com/igoryepes/index.htm>.

PULLAN, W. J.. **“Genetic Operators for a Two-Dimensional Bonded Molecular Model”**. Computers Chem. Engineering. Vol. 22, No. 4, pp. 331-338, 1998.

RADCLIFFE, N.. **“Genetic Neural Networks on MIMD Computers”**. PhD thesis, University of Edinburgh, UK, 1990.

RAJESH, J. K., GUPTA, S. K., RANGAIAH, G. P. e RAY, A. K.. **“Multi-Objective Optimization of Industrial Hydrogen Plants”**. Chemical Engineering Science, 56, pp. 999-1010, 2001.

RAMACHADRAN, P. A. e CHAUDHARI, R. V.. **“Theoretical Analysis of Reaction of Two Gases in a Catalytic Slurry Reactor”**. Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., Vol. 18(4), 1979.

RAMACHANDRAN, P. A. e SMITH, J.M.. **“Mixing-Cell for Design of Trickle-Bed Reactors”**. Chem.Eng.Journal, Vol.17, 91-99, 1979.

RAMACHADRAN, P. A. e CHAUDHARI, R. V.. **“Three-Phase Catalytic Reactors”**. Gordon and Breach Science Publisher, New York, 1983.

RANGAIAH G.P.. **“Evaluation of Genetic Algorithms and Simulated Annealing for Phase Equilibrium and Stability Problems”**, Fluid Phase Equilibria, 187-188, pp. 83-109, 2001.

RECHENBERG, I.. **“Evolutiosstrategie: Optimierung Technischer Systeme Nach Prinzipien der Biologischen Evolution”**. Frommann-Holzboog, Stuttgart, 1973.

RICKER, N. L.. **“Optimal Steady-State Operation of the Tennessee Eastman Challenge Process”**. Computers Chem. Engineering, Vol 19, p. 949–959, 1995.

RODRIGUES, A. E., CALO, J. M. e SWEED, N. H.. **“Multiphase Chemical Reactors: Design Methods”**. Sitjthoff et Noordhoof International Publishers B. V., Netherlands, 1981.

RODRIGUEZ-TORAL, M. A., MORTON, W. e MITCHELL, D. R.. **“The Use of New SQP Methods for the Optimization of Utility Systems”**. Computers Chem. Engineering, Vol. 25, pp. 287–300, 2001.

SAHIN, Ö., SAYAN, P. e BULUTCU, A. N.. **“Application of Genetic Algorithm for Determination of Mass Transfer Coefficients”**. Journal of Crystal Growth, Vol. 216, pp. 475–482, 2000.

SANTANA, P. L.. **“Modelos Matemáticos para Reator de Lama Trifásico Aplicados à Hidrogenação do o-Cresol”**. Dissertação de Mestrado, FEQ, Universidade Estadual de Campinas, 1995.

SANTANA, P. L. e MACIEL FILHO, R.. **“Relatório interno da Faculdade de Engenharia Química”**. Universidade Estadual de Campinas, 1996.

SANTANA, P. L.. **“Modelagem Matemática para Reator Trifásico: Modelos Determinísticos, Neurais e Híbridos”**. Tese de Doutorado, FEQ, Universidade Estadual de Campinas, 1999.

SANTANA, P. L., VASCO DE TOLEDO, E. C., MELEIRO, L. A. C., SCHEFFER, R., FREITAS JR., N. B., MACIEL, M. R. W., e MACIEL FILHO, R.. **“A Hybrid Mathematical Model for a Three-Phase Industrial Hydrogenation Reactor”**. European symposium on computer aided process engineering Vol. 11, Kolding, Denmark, 279–284, 2001.

SANTOS, A. e DOURADO, A.. **“Global Optimization of Energy and Production in Process Industries: A Genetic Algorithm Application”**. Control Engineering Practice, Vol. 7, pp. 549–554, 1999.

SARIMVEIS, H., ALEXANDRIDIS, A., MAZARAKIS, S. e BAFAS, G.. **“A New Algorithm for Developing Dynamic Radial Basis Function Neural Network Models Based on Genetic Algorithms”**. Computers & Chemical Engineering, Vol. 28, No. 1-2, pp. 209-217, 2003.

SARKAR, D. e MODAK, J. M.. **“Optimization of Fed-Batch Bioreactors Using Genetic Algorithms: Two Control Variables”**. Computers and Chemical Engineering, No. 28, pp. 789-798, 2004.

SATTERFIELD, C. N.. **“Trickle-Bed Reactors”**, Chem. Eng. Journal, Vol. 21, 2, 209-228, 1975.

SCHNEIDER, A. M.. **“Algoritmo Adaptativo Genético para Acompanhamento da Trajetória de Alvos Móveis”**. Dissertação de Mestrado - Porto Alegre: Instituto de Informática - Universidade Federal do rio Grande do Sul, 1998.

SCHLEUTER, M. G.. **“Explicit Parallelism of Genetic Algorithms through Population Structures”**. Parallel Problem Solving from Nature (PPSN1), Proceedings, 1990.

SCHULTZ, C., ENGELL, S. e RUDOLF, R.. **“Scheduling of a Multiproduct Polymer Batch Plant”**. In J. F. Pekny, G. E. Blau, & B. Carnahan, Proceeding for foundations of computer-aided process operations (FOCAPO’98). Snowbird: CACHE Publications, 1998.

SCHWEFEL, H. P. e TAYLOR, L.. **“Evolution and Optimum Seeking”**, John Wiley & Sons Inc, United States of America, pp. 87-88, 1994.

SERRA, J. M., CHICA, A. e CORMA, A.. **“Development of a Low Temperature Light Paraffin Isomerization Catalysts with Improved Resistance to Water and Sulphur by Combinatorial Methods”**. Applied Catalysis A: general 239, 35-42, 2002.

SERRADA, A. P.. **“Una Introducción a la Computación Evolutiva”**. Disponível na Internet via World Wide Web: <http://www.geocities.com/igoryepes/>, 1996.

SHAH, Y. T.. **“Gas-Liquid-Solid Reactor Design”**. McGraw Hill International Editions, Singapore, 1979.

SILVA, E. E.. **“Otimização de Estruturas de Concreto Armado Utilizando Algoritmos Genéticos”**. Tese de Mestrado, Universidade de São Paulo (USP), 2001.

SILVA, T. T. e BARBOSA, H. J. C.. **“Inicialização da População em Algoritmos Genéticos com Codificação Real”**. V Seminário sobre Elementos Finitos e Métodos Numéricos em Engenharia da UFJF, Juiz de Fora, 1998.

SOARES, G. L.. **“Algoritmos Genéticos: Estudo, Novas Técnicas e Aplicações”**. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais, 1997.

SOARES, G. L. e VASCONCELOS, J. A.. **“Adaptação Dinâmica de Operadores em Algoritmos Genéticos”**. Segundo Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo, Ouro Preto, p. 155–158, novembro, 1996.

SPEARS, W. M.. **“The Role of Mutation and Recombination Evolutionary Algorithms”**, Ph.D. thesis, George Mason University, Fairfax, VA, 1998.

SPEARS, W. M. e DE JONG, K. A.. **“An Analysis of Multi-Point Crossover”**. In G. J. E. Rawlins (Eds.), *Foundations of Genetic Algorithms*, pp. 310-315. (Also AIC Report No. AIC - 90 -014), 1991.

SRINIVAS, M., e PATNAIK, L. M.. **“Adaptive Probabilities of Crossover and Mutation in Genetic Algorithms”**. IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics, Vol. 24, No.4, 1994.

STEPHAN, K.. **“Heat Transfer in Condensation and Boiling”**. Springer-Verlag, p. 325, New York, 1992.

STEPHAN, E. A. e CHASE, G.G.. **“Use of Genetic Algorithms as an Aid in Modeling Deep Bed Filtration”**, Computers and Chemical Engineering, Vol. 27, 281- 292, 2002.

STOER, J.. **“Principles of Sequential Quadratic Programming Methods for Solving Nonlinear Programs”**. In: *Computational Mathematical Programming*, K. Schittkowski, editor, 23/07 – 02/08, 1984, Bad Windsheim, Germany. NATO ASI Series. Springer-Verlag, p. 165–208, 1985.

SUBRAMANI, H. J., HIDAJAT, K. e RAY, A. K.. **“Optimization of Reative SMB and Varicol Systems”**, Computers and Chemical Engineering, No. 27, pp. 1883–1901, 2003.

SYLVESTER, N. D., LARIBI, S. e ROSENBERG, D. U.. **“The Effects of Mass Transport and Chemical Reaction on Pollutant Removal in a Three-Phase Slurry Absorber-Reactor”**. Can. J. Chem. Eng., Vol. 57, 280-287, 1979.

SYSWERDA, G.. **“Uniform Crossover in Genetic Algorithms”**. In J. D. Schaffer (Ed.), Proceedings of The Third International Conference on Genetic Algorithms, pp. 2-9, 1993.

TAE-YUN PARK e GILBERT F. FROMENT.. **“A Hybrid Genetic Algorithm for the Estimation of Parameters in Detailed Kinetic Models”**. Computers Chemical Engineering, Vol. 22, Suppl., pp. S103-S110, 1998.

TEIXEIRA, O, N.. **“Computação Evolucionária: dos Aspectos Filosóficos à Implementação dos Algoritmos Genéticos Aplicados na Solução do Problema do Caixeiro Viajante Simétrico”**. Trabalho de Conclusão de Curso submetido à Universidade Federal do Pará como parte dos requisitos para obtenção do grau de Bacharel em Ciência da Computação, 2004.

TORVIK, R. e SVENDSEN, H. F.. **“Modelling of Slurry Reactors. A Fundamental Approach”**. Chem. Eng. Sci., Vol. 45, 8, 2325-2332, 1990.

TURNER, J. R. e MILLS, P. L.. **“Comparison of Axial Dispersion and Mixing Cell Models for Design and Simulation of Fischer-Tropsch Slurry Bubble Column Reactors”**. Chem. Eng. Sci., Vol. 45, 8, 2317-2324, 1990.

TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M.. **“Uso de um Algoritmo SQP na Otimização de Processos Químicos Contínuos em Tempo Real”**. Tese de Doutorado – DEQ/EPUSP, São Paulo, 1997.

TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M. e ODLOAK, D.. **“One-Layer Real Time Optimization of LPG the Production in the FCC Unit: Procedure, Advantages and Disadvantages”**, Computers Chem. Engineering., Vol 22, Suppl., pp. S191–198, 1998a.

TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M. e ODLOAK, D.. **“On-Line Maximization of LPG in the FCC Unit”**. Int. J. Latin American Applied Res., Vol. 28, n. 1/2, pp. 107–114, 1998b.

UPRETI, S. R. e DEB, K.. **“Optimal Design an Ammonia Synthesis Reactor Using Genetic Algorithms”**. Computers chemical engineering, Vol. 21. No. 1, 87-92, 1997.

VANDERPLAATS, G.. **“Numerical Optimization Techniques for Engineering Design”**, McGraw- Hill, United States of America, 70-97, 1984.

VASCO DE TOLEDO, E. C.. **“Modelagem, Simulação e Controle de Reatores Catalíticos de Leito Fixo”**, Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Brasil, 1999.

VASCO DE TOLEDO, E. C. e MACIEL FILHO, R.. **“Modelagem, Simulação e Controle de um Reator de Lama Catalítico Trifásico”**. Projeto de Pós-Doutorado Integrado ao Projeto Temático de Pesquisa Intitulado: “Integração de Processos Químicos Contínuos em Tempo Real”, FAPESP - Processo Nº 1998/14384-3, 2001.

VASCONCELOS, J. A., SALDANHA, R. R., KRÄHENBÜHL, L., ET AL.. **“Algoritmos Genéticos Aplicados à Otimização em Eletromagnetismo”**, In: *SBmag - Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo*, pp. 1–6, Florianópolis, Brasil, 1995.

VASCONCELOS, J. A., SALDANHA, R. R., KRÄHENBÜHL, L., ET AL.. **“Genetic Algorithm Coupled with a Deterministic Method for Optimization in**

Electromagnetics”, *IEEE - Transactions on Magnetics*, v. 33, n. 2, pp. 1860–1963, Mar. 1997.

VIJANDE, J., PIÑEIRO, M. M., MOSTEIRO, L. E LEGIDO, J. L.. **“Estimation of Carbonate–Alcohol Interaction Parameters for Nitta–Chao Group Contribution Model: Application of a Genetic Algorithm”**. *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 212 No. 1-2, 2003.

VILLALBA, R. M. e MACIEL FILHO, R.. **“Modelagem do Problema de Planejamento da Produção da Rede da Utilidade e do Sistema de Pré-Aquecimento e Mistura da Unidade de Produção do Ciclohexanol”**. Tese de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Brasil, 2002.

VON ZUBEN, F. J.. **“Computação Evolutiva: Uma Abordagem Pragmática. (Tutorial utilizado na disciplina de Computação Evolutiva – IA707)”**. Departamento de Engenharia de Computação e Automação Industrial – DCA. Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação – FEEC. Universidade de Campinas – UNICAMP, 2002. Disponível em: <http://www.dca.fee.unicamp.br/~vonzuben/courses/ia707.html>. Acessado em: 12 ago 2002.

WEHRENS, R., PRETSCH, E. e BUYDENS, L. M. C.. **“The Quality of Optimisation by Genetic Algorithms”**. *Analytica Chimica Acta*, No. 388, pp. 265-271, 1999.

WEIXIANG ZHAO, DEZHAO CHEN e SANGX HU.. **“Optimizing Operating Conditions Based an ANN and Modified GAs”**, *Computers & Chemical Engineering*, Vol. 24, 61-65, 2000.

WHITLEY, D.. **“A Genetic Algorithm Tutorial”**. Technical Report CS-93-103. Department of Computer Science. Colorado State University, Nov, 1994.

WILLIS, M., HIDEN, H., HINCHLIFFE, M., McKAY, B. e BARTON, G. W.. **“Systems Modelling Using Genetic Programming”**. Computers Chem. Engineering, Vol. 21, p. S1161-S1166, 1997.

WINSTON, P. H.. **“Artificial Intelligence (2nd Edition)”**. Addison-Wesley Publishing Company, Reading, MA, 1984.

WOLF, D. e MOROS, R.. **“Estimating Rate Constants of Heterogeneous Catalytic Reactions Without Supposition of Rate Determining Surface Steps - An Application of a Genetic Algorithm”**. Chemical Engineering Science, Vol. 52 No. 7, 1189-1199, 1997.

WOZNY, G., LI, P.. **“Planning and Optimization of Dynamic Plant Operation”**. Applied Thermal Engineering, Vol. 20, 1393–1407, 2000.

WRIGHT, A. H.. **“Genetic Algorithms for Real Parameter Optimization”**. In G. J. E. Rawlins, editor, Foundations of Genetic Algorithms, pages 205-218. Morgan Kaufmann, 1991.

WRIGHT, S.. **“Convergence of SQP-Like Methods for Constrained Optimization”**. SIAM J. On Control and Optimization, Vol 27, No. 1, p. 13–26, 1989.

YAN, X. F., CHEN, D. Z. e HU, S. X.. **“Chaos-Genetic Algorithms for Optimizing the Operating Conditions Based on RBF-PLS Model”**. Computers & Chemical Engineering, Vol. 27, No. 10, pp. 1393 – 1404, 2003.

YANG, G, REINSTEN, L.E., PAI, S., XU, Z. e CARROLL, D.L.. **“A New Genetic Algorithm Technique in Optimization of Permanent 125-I Prostate Implants”**. Medical Physics, Vol. 25, No. 12, December, pp. 2308-2315, 1998a.

YANG, R. e DOUGLAS, I.. **“Simple Genetic Algorithm with Local Tuning: Efficient Global Optimizing Technique”**. Journal of Optimization Theory and Applications, Vol. 98, No. 2, pp. 449-465, August 1998.

YAO, R., YANG, B., CHENG, G., TAO, X. e MENG, F.. **“Kinetics Research for the Synthesis of Branch Ether Using Genetic-Simulated Annealing Algorithm with Multi-Pattern Evolution”**. Chemical Engineering Journal, 94 (2), pp. 113-120, 2003.

YEE, A. K.Y. RAY, A. K. e RANGAIAH, G.P.. **“Multiobjective Optimization of an Industrial Styrene Reactor”**. Computers and Chemical Engineering, Vol. 27, No. 1, 2003.

YU, H., FANG, H., YAO, P. e YUAN, Y.. **“A Combined Genetic Algorithm: Simulated Annealing Algorithm for Large Scale System Energy Integration”**. Computers and Chemical Engineering, 24, pp. 2023–2035, 2000.

ZHAO, W., CHEN, D. e HU, S.. **“Optimizing Operating Conditions Based on ANN and Modified GAs”**. Computers and Chemical Engineering, 24, pp. 61–65, 2000.

ZIYANG, Z. K. H. e RAY, A. J.. **“Determination of Adsorption and Kinetic Parameters for Methyl Tert-Butyl Ether Synthesis from Tert-Butyl Alcohol and Methanol”**. Journal of Catalysis, Vol. 200, pp. 209-221, 2001.

ZUO, K. e WU, W.T.. **“Semi-Realtime Optimization and Control of a Fed-Bach Fermentation System”**. Computers and Chemical Engineering, Vol. 24, pp. 1105 – 1109, 2000.

ZWICKY J. J. e GUT G.. **“Kinetics, Poisoning and Mass Transfer Effects in Liquid-Phase Hydrogenatio of Phenolic Compounds Over A Palladium Catalyst”**. Chemical Engineering Science, Vol. 33, pp. 1363-1369, 1978.

Apêndice I

Computação Natural

AI.1 COMPUTAÇÃO NATURAL

Nas últimas décadas surgiu uma nova ciência computacional inspirada na natureza denominada Computação Natural. Algumas de suas principais áreas são apresentadas abaixo na figura AI.1 junto com a descrição dos fenômenos ou processos naturais que as inspiraram e seus fundamentos básicos.

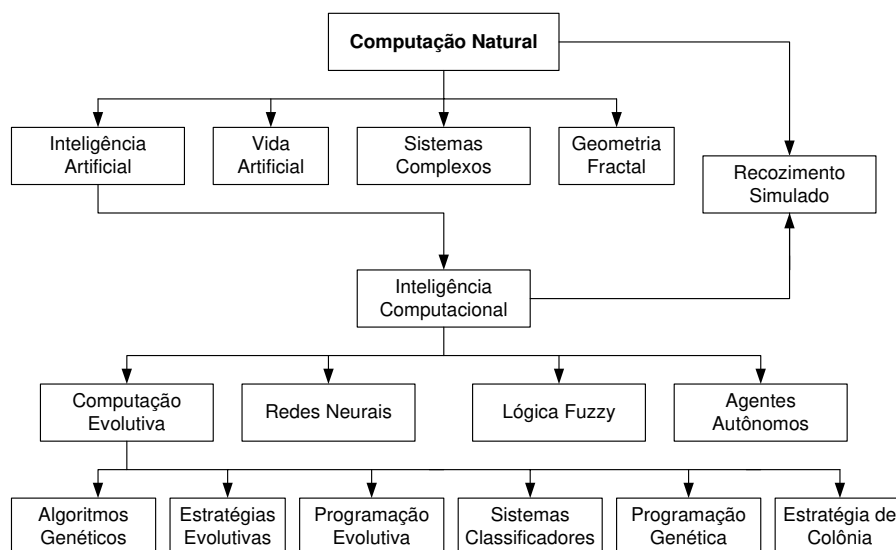


Figura AI.1 – Algumas sub-áreas da computação natural.

A Inteligência Computacional busca criar sistemas inteligentes que reproduzam aspectos do comportamento humano, tais como: percepção, raciocínio, adaptação e aprendizado. A técnica de Recozimento Simulado não apresenta exatamente as características da inteligência computacional, sendo normalmente tomada numa classificação intermediária.

AI.1.1 RECOZIMENTO SIMULADO

No coração do método de Recozimento Simulado (Kirkpatrick et al. (1983)) está a analogia com a termodinâmica, mais especificamente no modo como os líquidos se esfriam e cristalizam ou no processo de recozimento de metais. Em altas temperaturas as moléculas de um líquido movem-se livremente umas em relação às outras. Caso o líquido seja submetido a um resfriamento lento, esta mobilidade térmica é perdida. Os átomos alinham-se então de forma ordenada, formando um cristal puro, esse cristal é o estado de energia mínima do sistema. Por outro lado, caso o processo de resfriamento não seja lento e gradual, estados mais altos de energia são alcançados, não havendo a formação de cristal puro. Estes princípios foram inseridos dentro do contexto da computação numérica por Metropolis, sendo posteriormente aplicados em problemas de otimização combinatória, tal como o do caixeiro viajante.

AI.1.2 FRACTAIS

A geometria fractal surgiu em 1975, quando o matemático polonês Benoit Mandelbrot publicou seus trabalhos no livro “Os objetos fractais: forma, acaso e dimensão”, no qual divulga novos objetos geométricos - os fractais (Mandelbrot (1983)).

A palavra Fractal tem origem do latim Fractus que significa quebrado, fragmentado ou irregular. É uma figura que possui uma regularidade geométrica

fundamental e invariante para diferentes escalas, ou seja, cada fragmento é estatisticamente semelhante ao todo, descrevendo em geral, objetos de dimensões fracionárias.

Ao contrário da geometria euclidiana que estuda cubos, esferas e muitas outras figuras que não existem na natureza, a geometria fractal descreve objetos reais, tais como: nuvens, montanhas, superfícies cerebrais, fronteiras entre países, etc. Essas figuras possuem dimensão fracionária e preservam sua identidade para todas as escalas nas quais sejam observadas.

Algumas décadas antes do surgimento da geometria fractal, George Cantor (1845-1918) já havia criado um conjunto fractal através da fragmentação do segmento de reta compreendido pelo intervalo $[0,1]$. Trata-se de um procedimento onde, primeiramente, divide-se o segmento em três partes auto-similares, para depois se retirar a parte central. De cada intervalo restante retira-se a respectiva terça parte mediana, repetindo-se o processo indefinidamente. Defini-se assim o Conjunto de Cantor, que é um tradicional exemplo de fractal.

A geometria fractal descreve bem as irregularidades e os processos turbulentos da natureza, sendo largamente utilizada em inúmeras áreas: meteorologia, biologia, hidrografia, medicina, geografia, dentre outras. Como um exemplo de sua aplicação pode-se citar o seu emprego recente como ferramenta de compactação de dados da enciclopédia Encarta desenvolvida pela empresa americana Microsoft.

AI.1.3 SISTEMAS COMPLEXOS

A teoria da complexidade se relaciona muito de perto com a teoria dos sistemas. Ambas por sua vez estão relacionadas com a teoria do caos e com a cibernética. De uma maneira simples esse relacionamento pode ser resumido como se apresenta na Tabela AI.1.

Tabela AI.1 - Objetos de diferentes teorias.		
	Sistemas	Comportamento
Teoria dos Sistemas	simples	simples
Teoria da Complexidade	complexos	simples
Teoria do Caos	simples	complexo
Cibernética	complexos	complexo

A teoria dos sistemas e a teoria da complexidade se sobrepõem e são baseadas nos mesmos princípios. Qual seria então a necessidade de duas disciplinas distintas? A razão principal parece ser o fato de que ambas pertencem a duas diferentes tradições científicas, entretanto há certamente outros motivos. Nem todos os sistemas são tão simples. Em um sistema constituído por milhões de componentes seria quase impossível projetar uma estrutura circular descrevendo todos os possíveis laços de feedback. Somente é possível esquematizar o feedback de uma forma muito geral, como é mostrado na Figura AI.2.

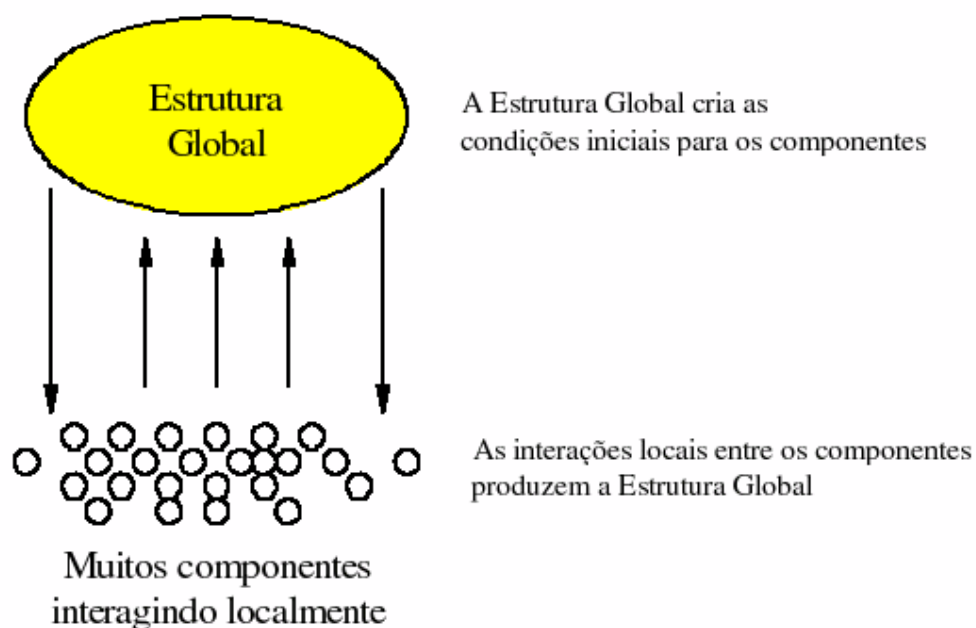


Figura AI.2 - Feedback em sistemas complexos.

Como o diagrama sugere, há um relacionamento circular entre a estrutura global do sistema e as interações locais entre os componentes. A estrutura global pode ser definida como a rede de todos os relacionamentos locais, que é produzida e mantida em um dado momento pelo total de interações que ocorrem neste momento. Cada um e todos os

componentes do sistema interagem com seus vizinhos imediatos, modificando assim a estrutura global. Uma vez que cada componente responde à estrutura global, então o comportamento de cada indivíduo é determinado pelo todo. Ao mesmo tempo a resposta independente de todos os componentes em um dado momento produz o todo do momento seguinte. Um exemplo de sistema complexo é uma sociedade. Uma sociedade consiste em muitos componentes independentes interagindo localmente. O estado corrente da sociedade é a estrutura global. Cada um e todos os indivíduos respondem ao estado corrente e, portanto criam o novo estado da sociedade no momento seguinte e assim por diante. Assim um sistema complexo pode ser definido como sendo constituído por muitos componentes independentes que interagem localmente produzindo um comportamento geral organizado, e bem definido, independente da estrutura interna dos componentes.

AI.1.4 VIDA ARTIFICIAL

Vida Artificial (Artificial Life ou simplesmente ALife) pode ser definida por : “vida feita pelo homem ao invés de pela natureza”. Na prática, a biologia é o estudo científico da vida na Terra baseada em Carbono, já que este é a única forma de vida disponível para estudo, este novo ramo da ciência, Vida Artificial também chamada ALife, tem por objetivo estudar a vida natural tentando reproduzi-la por meios artificiais. Ao contrário da biologia que individualiza os organismos para ver como estes funcionam, ALife tenta agrupar sistemas que se comportem como organismos vivos. Esta tentativa de recriar fenômenos biológicos por meios artificiais resulta não somente em uma melhor compreensão do fenômeno da vida como também na aplicação de princípios da biologia na tecnologia de hardware e software, robôs móveis, área médica, processos industriais e outros.

Vida artificial é o estudo de sistemas artificiais que exibem característica de comportamento de sistemas vivos naturais; ego-organização, adaptação, evolução, co-evolução, metabolismo, etc., é a indagação para explicar vida em quaisquer de suas possíveis manifestações, sem restrição para os exemplos particulares que evoluíram em

terra. Isto inclui experiências biológicas e químicas, simulações de computador, e estudos puramente teóricos. O homem e outros seres vivos provavelmente são a única combinação de átomos que conduz à vida. A natureza pode ser dita como sendo uma aplicação das regras da vida. No passado as duas eram inseparáveis, tal que não havia outro exemplo. Com vida artificial o fenômeno pode ser visto isolado da natureza, as regras e complexidades podem ser vistas como sendo emprestadas da natureza. Não há um monopólio.

Vida artificial é artificial apenas porque é feita pelo homem. Em Alife o ambiente é originalmente criado por humanos em um computador. As regras da vida são universais e se aplicam mesmo se fora da natureza. A espera por uma formação casual por combinação de átomos é substituída por um conjunto de regras para criaturas ou células. Se estas criaturas são capazes de se reproduzir e de sofrer alguma forma de mutação e são complexos o suficiente, as criaturas vão evoluir ou o padrão das células muda para novas formas. O resultado é que ou a população se extingue, ou uma solução para a sobrevivência no ambiente é encontrada. O ambiente pode ser um problema computacional como a contagem de pessoas em uma plataforma, ou a resolução de um problema matemático, ou pode ser uma área de memória compartilhada com outras criaturas similares.

Não há uma estipulação de que um ambiente deve espelhar a vida real. Alife poderia resolver muitos problemas que são geralmente muito complexos para se resolver manualmente. Alife é usada em química sintética para se modelar novos componentes e em engenharia para se desenvolver aviões. Alife pode ser usada para se digerir informação criar agentes de informação e automatizar eventos que mudam e não podem ser programados facilmente.

AI.1.5 INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL

A Inteligência Artificial surgiu nos anos 50 quando, nos Estados Unidos, John McCarthy reuniu vários pesquisadores para estudar e propor uma nova área do

conhecimento denominada Inteligência Artificial, a qual tem origem nos estudos da cibernética.

As correntes de pensamento que se cristalizaram em torno da IA já estavam em gestação desde os anos 30 (Barr e Feigenbaun (1981)). No entanto, oficialmente, a IA nasceu em 1956 com uma conferência de verão em Dartmouth College, NH, USA. Na proposta dessa conferência, escrita por John McCarthy (Dartmouth), Marvin Minsky (Harvard), Nathaniel Rochester (IBM) e Claude Shannon (Bell Laboratories) e submetida à fundação Rockefeller, consta a intenção dos autores de realizar “um estudo durante dois meses, por dez homens, sobre o tópico *inteligência artificial*”. Ao que tudo indica, esta parece ser a primeira menção oficial à expressão “Inteligência Artificial” (McCorduck, (1979)). Desde seus primórdios, a IA gerou polêmica a começar pelo seu próprio nome, considerado presunçoso por alguns, até a definição de seus objetivos e metodologias. O desconhecimento dos princípios que fundamentam a inteligência, por um lado, e dos limites práticos da capacidade de processamento dos computadores, por outro, levou periodicamente a promessas exageradas e às correspondentes decepções.

Dada a impossibilidade de uma definição formal precisa para IA, visto que para tanto seria necessário definir, primeiramente, a própria inteligência, foram propostas algumas definições operacionais: “uma máquina é inteligente se ela é capaz de solucionar uma classe de problemas que requerem inteligência para serem solucionados por seres humanos” (McCarthy e Hayes (1969)). “Inteligência Artificial é a parte da ciência da computação que compreende o projeto de sistemas computacionais que exibam características associadas, quando presentes no comportamento humano, à inteligência” ou ainda “Inteligência Artificial é o estudo das faculdades mentais através do uso de modelos computacionais” Charniack e McDermott, (1985). Outros se recusam a propor uma definição para o termo e preferem estabelecer os objetivos da IA: “tornar os computadores mais úteis e compreender os princípios que tornam a inteligência possível” (Winston (1984)).

A IA tem por objetivo tornar uma máquina capaz de executar tarefas que, devido a sua natureza cognitiva, até então os seres humanos eram os únicos capazes de executar. Tem como meta principal a construção de uma máquina inteligente e, conseqüentemente, pesquisar a natureza da inteligência. Isto é conseguido investigando como as pessoas pensam quando estão tentando tomar decisões e resolver problemas, dividindo esses processos de pensamentos em etapas básicas e implementando um programa que solucione o problema usando essas mesmas etapas. Dentro da IA existe um imenso leque de técnicas, cada qual com a sua aplicabilidade e utilidade, dentre as quais se destaca a Inteligência Computacional e seus derivados, conforme pode ser visto mais adiante.

AI.2 INTELIGÊNCIA COMPUTACIONAL

A inteligência artificial, tradicionalmente, trabalha com bases de dados e bases de regras, realizando inferências lógicas até convergir para uma conclusão. Este processo é caracterizado como comportamento inteligente, quando a tarefa executada é classificada como inteligente, se realizada por seres humanos.

Devido à dificuldade existente para que sistemas inteligentes tradicionais resolvam determinadas classes de problemas, como reconhecimento de padrões ou sistemas reativos, intensificaram-se as pesquisas no campo da IC. As técnicas mais conhecidas de IC são (Palazzo (1997)).

- Redes Neurais Artificiais;
- Lógica Fuzzy;
- Agentes Autônomos;
- Computação Evolutiva.

AI.2.1 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

As Redes Neurais (Mandelbrot (1983)) são inspiradas na estrutura do cérebro humano, com o objetivo de apresentar características similares a eles: aprendizado, associação, generalização e abstração. Elas são compostas por diversos elementos, os processadores (neurônios artificiais) altamente interconectados, que efetuam um número pequeno de operações simples e transmitem seus resultados aos processadores vizinhos.

Devido a sua estrutura, as Redes Neurais são bastante efetivas no aprendizado de padrões a partir de dados não-lineares, incompletos, com ruídos e até compostos de exemplos contraditórios. Algumas aplicações são: reconhecimento de padrões (imagem, texto, voz, etc.), previsão de séries temporais e modelagens de problemas específicos.

AI.2.2 LÓGICA FUZZY

A Lógica Fuzzy (Nebulosa ou Difusa) surgiu da necessidade do tratamento de problemas onde existe uma região cujas classificações tornam-se imprecisas (*Fuzzy Logic Tutorial*). A Lógica Nebulosa não trata as variáveis como tendo apenas um estado mas sim n estados; cada qual com um certo grau de associação, ou seja, uma casa não é grande e sim 0.8 grande, 0.2 média e 0.0 pequena. Isto gera a geração de conjuntos, para os quais os dados podem ser inseridos. Estas características lhe permitem um melhor tratamento de problemas, onde existam fronteiras imprecisas ou não bem definidas. A Lógica Nebulosa tem sido empregada em diversas áreas de modo isolado ou em associação com outras técnicas.

AI.2.3 AGENTES AUTÔNOMOS

A concepção, especificação e implementação dos Agentes Autônomos é matéria constituinte de uma disciplina derivada essencialmente da Inteligência Artificial cuja investigação científica teve grandes desenvolvimentos nos últimos anos. Os agentes são aplicados nas mais diversas áreas que variam desde a interação homem-máquina até complexos processos de controle industrial. Devido ao elevado número de aplicações e à relativa abertura do conceito, existem diversas definições sobre o conceito de *Agente* e não existe um consenso alargado entre os autores da área sobre esta matéria. No entanto, baseando-nos no trabalho de Pattie Maes (Maes (1996)), uma primeira e simples definição de *agente* é: “*Um sistema computacional que habita um dado ambiente, sente e age nesse ambiente, e ao fazê-lo realiza um conjunto de objetivos ou tarefas para o qual foi projetado*”.

O crescimento da investigação realizada no campo dos agentes está ligado ao fato de ser uma convicção geral dos investigadores que os agentes constituem um paradigma de *software* apropriado para desenvolver aplicações para ambientes abertos, heterogêneos e distribuídos, como, por exemplo, a Internet. Desta forma, o crescimento do número e dimensão de ambientes com estas características constitui uma forte motivação para a investigação em agentes. A adequação dos agentes a processos de resolução de problemas cuja perspectiva centralizada não demonstra ter capacidade de os resolver satisfatoriamente é outra razão para o crescimento da investigação realizada em agentes.

AI.2.4 COMPUTAÇÃO EVOLUTIVA

A Computação Evolutiva (também chamada de Evolucionária) surgiu no final dos anos 60, quando John Holland começou a estudar a possibilidade de incorporar os mecanismos naturais de seleção e sobrevivência para a resolução de problemas de Inteligência Artificial (IA), os quais já tinham encontrado solução na natureza, mas não

apresentavam uma abordagem satisfatória em sistemas computacionais. Como resultado de sua pesquisa, Holland lançou seu livro *Adaptation in Natural and Artificial Systems* (Holland (1975)) o qual é considerado o ponto de partida da CE.

O termo de Computação Evolutiva engloba um amplo leque de técnicas de resolução de problemas complexos de busca e aprendizagem que se baseiam na simulação dos processos descritos nas Teorias da Evolução, cujo objetivo fundamental não se trata de reproduzir os fenômenos que ocorrem na natureza, mas sim de tirar proveito das idéias por trás deles.

Devido ao alto esforço computacional exigido, a utilização prática de sistemas com técnicas de CE, só foi viabilizada a partir dos anos 80 com o surgimento de computadores de alto desempenho (para a época) e baixo custo, sendo a partir de então, amplamente utilizada para resolver com êxito certos problemas de engenharia e das ciências sociais que até então não encontravam forma prática de implementação em modelos computacionais. Deste período são os trabalhos de Goldberg (Goldberg (1989)) e de Davis (Davis (1991)), os quais propõem soluções para problemas da vida real.

Provavelmente, devido aos trabalhos, à divulgação destes autores e às novas possibilidades apresentadas, o crescimento da CE foi impressionante, tendo na atualidade inúmeras aplicações funcionando com êxito, como, por exemplo, na área industrial, onde atuam em controles de redes de distribuição de gás até o desenho de turbinas e o cálculo de estratégias de mercado entre outros.

A CE baseia-se fundamentalmente no uso dos Algoritmos Evolutivos (AEs), cujo propósito é conduzir uma busca estocástica, fazendo evoluir um conjunto de estruturas e selecionando de modo iterativo as mais adequadas. Um AE é considerado mais eficiente quanto melhor seja seu desempenho na solução de um determinado problema, independente de sua fidelidade aos conceitos biológicos. Na verdade, a maioria dos algoritmos que

seguem este enfoque são extremamente simples do ponto de vista biológico, mas mesmo assim, se apresentam como poderosas e eficientes ferramentas de busca.

Como já foi dito anteriormente, a Computação Evolutiva (CE) sustenta-se nos AEs, os quais têm como finalidade a “sobrevivência do mais apto”, que é conseguida por meio de “adaptação ao ambiente”, ou seja, maior chance de sobrevivência dos mais aptos e estes, conseqüentemente, maior possibilidade de gerar descendentes, transmitindo as suas características genéticas. Ao executar um AE, é criada uma população de indivíduos que nada mais são do que um conjunto de possíveis soluções para um determinado problema, sendo submetidos a determinadas transformações (cruzamento, mutação, outros), para cada ciclo completo de transformação e seleção denominado geração. O algoritmo básico da Computação Evolucionária é definido na Figura AI.3. Logo, para podermos gerar um AE, devemos ter:

- Uma população de indivíduos (conjunto de soluções candidatas);
- Um processo de seleção que avalie a aptidão de cada indivíduo da população;
- Um processo de transformação, o qual gerará novas soluções à partir das existentes.

Algoritmo Evolucionário Básico

Inicialização com uma população (denominada de população inicial);

Avaliação dos indivíduos na população

Repetição (chamado de evolução do processo)

Processo seletivo dos indivíduos da população

Processos de alteração desses indivíduos criando uma nova população

Avaliação dessa nova população

Critério de término até que um determinado objetivo seja encontrado

Final do processo evolucionário

Figura AI.3 - Algoritmo Evolucionário conceitual.

Tendo cumprido esses requisitos, pode-se realizar a implantação de um AE, cujo principal paradigma são os Algoritmos Genéticos, os quais são descritos de forma mais aprofundada no próximo item. Essas técnicas tem sido utilizadas com resultados bastante satisfatórios em diversas técnicas como (Mitchell (1996)).

Otimização: ampla variedade de tarefas de otimização, incluindo otimização numérica e problemas de otimização combinatória como o desenho de circuitos ou o problema do caixeiro viajante.

Programação automática: para fazer evoluir programas de computador para tarefas específicas e para projetar outras estruturas computacionais (como autômatos celulares).

Aprendizado artificial: para muitas aplicações de aprendizado artificial, incluindo tarefas de classificação e predição, como predição do tempo ou de estruturas protéicas.

Economia: para desenvolver estratégias de venda, e para o surgimento de mercados econômicos.

Ecologia: para modelar fenômenos ecológicos. · Genética das populações: para estudar questões em genética das populações como: "Sob quais condições um gene, por recombinação, será evolutivamente viável?".

Evolução e aprendizado: para estudar como o aprendizado individual e a evolução das espécies se afetam entre si.

Sistemas sociais: para estudar aspectos evolutivos de sistemas sociais, como a evolução do comportamento social em colônias de insetos e, de forma mais geral, a evolução da cooperação e comunicação em sistemas multi-agentes.

Controladores robóticos: para realizar controle de tarefas desenvolvidas por equipamentos robóticos, como planejamento de trajetórias para robôs móveis, desvio de obstáculos ou controle de manipuladores mecânicos.

Esta lista não apresenta uma relação exaustiva, mas dá uma noção geral do tipo de tarefas para as quais os AEs vem sendo usados.

A Computação Evolutiva divide-se então, em cinco paradigmas básicos:

- Algoritmos Genéticos;
- Estratégias Evolutivas;
- Programação Evolutiva;
- Sistemas Classificadores;
- Programação Genética;
- Estratégia de Colônia

AI.2.4.1 ALGORITMOS GENÉTICOS

São algoritmos que operam com populações de indivíduos representados por cromossomos os quais durante o processo de evolução são submetidos ao procedimento de seleção e reprodução, onde são aplicados os operadores de recombinação e mutação, que são inspirados nos mecanismos naturais da genética (Barbosa (1996); Goldberg (1989); Holland (1975) e Mitchell (1996)).

AI.2.4.2 ESTRATÉGIAS EVOLUTIVAS (EVOLUCIONÁRIAS OU DE EVOLUÇÃO)

Foram concebidas para tratarem problemas técnicos de otimização e quase que exclusivamente empregadas na engenharia civil como alternativa aos métodos convencionais. Operam com cromossomos na forma de vetores de números reais e originalmente na proporção (1+1), isto é, cada progenitor gera um herdeiro por geração, normalmente por mutações distribuídas. Caso este descendente seja melhor que seu progenitor ele lhe toma o lugar. Atualmente estas estratégias foram estendidas para as proporções (m+1) e (m+n), além de terem tido estratégias de recombinações introduzidas no seu processo evolutivo.

AI.2.4.3 PROGRAMAÇÃO EVOLUTIVA OU EVOLUCIONÁRIA

Originalmente concebida por Lawrence J. Fogel em 1960 como uma estratégia de otimização estocástica similar aos AGs. No entanto, enfatizam o relacionamento entre os progenitores e seus descendentes ao invés de tentar emular operadores genéticos específicos observados na natureza.

A PE também opera com populações, mas apenas diferentes níveis de mutação são efetuados sobre os progenitores na criação de novas soluções. O tamanho da população não necessita ser mantido constante, como também não é fixado um número fixo de descendentes por progenitor. Trabalham com representações mais flexíveis que as empregadas pelos AGs por não efetuarem recombinações.

AI.2.4.4 SISTEMAS CLASSIFICADORES

Os Sistemas Classificatórios foram criados como uma extensão dos AGs. Basicamente sua arquitetura permite que haja uma classificação das regras de forma a eliminar as regras mais fracas (aquelas que não se adaptaram a problemática), e fortalecer as regras mais fortes que continuam a competir entre si.

Posteriormente, ao descobrir as melhores regras, o sistema classificatório cria novas regras (através de mutação e/ou crossing-over) e coloca no lugar das regras que foram eliminadas. A partir daí é reiniciada uma nova recombinação entre as regras fortes e as regras novas, simulando o processo da evolução.

AI.2.4.5 PROGRAMAÇÃO GENÉTICA

Operam sobre representações de trechos de programas na forma de árvores, de modo que possam ser combinados para gerarem novos trechos de programas mais complexos. Usualmente é utilizada a linguagem Lisp pela facilidade requerida na representação (Koza, J. R.).

Os programas na população são compostos de elementos ou conjuntos fixos de símbolos, devidamente selecionados por serem apropriados ao domínio do problema a ser resolvido.

Normalmente apenas operações de recombinações são empregadas, através de uma seleção aleatória de sub-árvores e posteriores trocas nos indivíduos. Os indivíduos são selecionados conforme suas aptidões.

AI.2.4.6 ESTRATÉGIAS DE COLÔNIA

A Estratégia de Colônia (Swarm) é inspirada no comportamento de enxames, isto é, no comportamento coletivo de colônias de insetos, como por exemplo, colônia de formigas (Ant Colonization), ou em sociedades de outros animais (Dorigo, site: <http://iridia.ulb.ac.be/~mdorigo/ACO/ACO.html>).

Operam com a idéia da comunicação indireta explorada pelas sociedades de insetos, que formam algoritmos distribuídos de multi-agentes. Esta estratégia está sendo aplicada a vários problemas de otimização de cadeias de telecomunicações, distribuição de tarefas e principalmente em problemas de otimização combinatória.

AI.3 CONCLUSÃO

São variadas as metodologias ligadas à computação natural, cada qual com sua eficiência e aplicação em determinados tipos de problemas. As aplicações são eficientes e permitem a melhoria dos métodos conforme as necessidades, promovendo maior e melhor atuação na resolução de problemas. Atualmente existem inúmeros trabalhos utilizando redes neurais, lógica e fuzzy e a computação evolucionária nas mais diferentes áreas da ciência. Todas estas técnicas vieram e estão em constante aprimoramento tendo como objetivo a melhor performance para resolução dos problemas, principalmente no âmbito industrial, onde se requer qualidade e eficiência em seus processos e negócios.

Apêndice II

Otimização e Métodos

AII.1 INTRODUÇÃO À OTIMIZAÇÃO

O mercado mundial, nos tempos atuais, devido a grande competitividade, concorrência e necessidade de ampliações dos negócios e o oferecimento de serviços e produtos com grande qualidade e cada vez com menores custos, vem com o interesse crescente em uma reformulação dos processos e dos mecanismos de produção e serviços de uma maneira inteligente, rápida sem onerar os custos possibilitando as organizações aumentarem seus domínios e lucros oferecendo qualidade e desenvolvimento tecnológico.

A otimização é a forma de melhorar aquilo que já existe, realizar um projeto novo ou reformulá-lo com mais e maior eficiência diminuindo os custos. A intenção é determinar a melhor configuração ou ainda uma melhor forma de operação e/ou planejamento de um projeto qualquer sem ter que realizar testes das variadas configurações existentes. Os problemas de otimização se caracterizam pela maximização ou minimização de uma função numérica contendo diversas variáveis com as respectivas restrições e que seja representativa do sistema em questão. Essas funções e restrições são dependentes dos valores assumidos pelas variáveis de projeto ao longo do procedimento de otimização. A otimização é aplicada em diversas áreas como: projetos de sistemas e componentes, planejamento e análise de operações, otimização de estruturas, controle de sistemas

dinâmicos, determinação de parâmetros de reações químicas, dimensionamento de equipamentos, planejamento da produção, análises financeiras, entre muitos outros casos.

A grande vantagem é a diminuição do tempo que se dedica ao projeto, possibilitando uma análise mais ampla e simultânea de problemas de grande complexidade, que envolvem grande quantidade de variáveis e restrições de difícil interpretação, possibilitando a melhoria como um todo, soluções não comuns e redução de custos. As limitações ocorrem devido a um aumento do número das variáveis de projeto envolvidas no problema, observando-se maior dificuldade na resolução e montagem do problema a ser solucionado, causando dificuldades na criação de um algoritmo de resolução, podendo surgir funções descontínuas que apresentam convergência lenta, funções que apresentam muitos mínimos ou máximos locais, onde os valores globais são dificilmente obtidos.

As técnicas clássicas de otimização são conhecidas a mais de um século, sendo utilizadas na física e na geometria, servindo-se de ferramentas associadas às equações diferenciais ao cálculo variacional. Com o desenvolvimento dos recursos computacionais, nos últimos anos, houve um grande incentivo para o avanço das técnicas de otimização, embora possam apresentar algumas dificuldades numéricas e problemas de robustez que estão intimamente relacionados à falta de continuidade das funções que são otimizadas ou de suas restrições, funções não convexas, multimodalidade, necessidade de se trabalhar com valores discretos para as variáveis, existência de mínimos e máximos locais, etc. A esta “família tradicional” de técnicas de otimização, outros estudos e técnicas referentes aos métodos heurísticos, com busca randômica controlada por critérios probabilísticos vêm surgindo nos últimos anos como uma forte tendência e auxílio, principalmente pelo avanço dos recursos computacionais, pois o fato limitante desses métodos é a necessidade de um número elevado de avaliações da função objetivo (Schwefel e Taylor (1994)). Uma destas técnicas objeto deste trabalho são os Algoritmos Genéticos, classe da Computação Evolutiva (Goldberg (1989), Michalewicz (1996)) que são abordados nos próximos capítulos.

AII.2 PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA

Segundo Silva (2001) a Programação Matemática lida com os problemas de otimização em conjunto com a identificação de um algoritmo que seja mais adequado para resolução destes problemas. Desta forma é de vital importância entender e estudar muito bem os métodos com o objetivo de avaliar e entender todos os processamentos matemáticos que façam parte dos mesmos e aqueles que podem ser mais adequados a determinados tipos de problema. Vários trabalhos são encontrados na literatura tais como: Bazaraa e Shetty (1979); Haftka e Kamat (1985); Kirsch (1981); Luenberger (1984) e outros.

A programação matemática trata o problema de forma iterativa e determinística, isto é, através de gradientes, operações matriciais, entre muitas outras operações matemáticas. Por isso exigem muitas informações e condições do problema a ser resolvido: região viável ou possível bem definida, função objetivo sem complexidade e convexidade do problema.

A descoberta de uma determinada solução de um problema de otimização possui um significado lógico da descoberta de ponto(s) de máximo(s) ou mínimo(s) da função ou modelo que representa a situação ou o problema que é analisado.

A fragilidade da Programação Matemática é o não desenvolvimento de uma metodologia que possibilite a busca de soluções ótimas globais, podendo desta maneira haver convergência em qualquer solução ótima local que vai depender do ponto de partida adotado.

A representação de um problema clássico de otimização é da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& \text{Minimizar} && f(x) \\
& \text{Sujeito a} && h_i(x) \geq 0 \\
& && h_j(x) = 0 \\
& && x_i^L \leq x \leq x_i^U \quad i = 1, 2, \dots, n \\
& && x \in \theta
\end{aligned} \tag{AII.1}$$

onde $f(x)$ é a função objetivo, $h_i(x)$ e $h_j(x)$ são as restrições de desigualdade e igualdade respectivamente e x_i^L e x_j^U as restrições laterais. Se o ponto $x \in \theta$ obedece a determinadas condições de restrição, é denominado como ponto viável ou possível, e o conjunto Π de todos os pontos viáveis se identifica como região viável.

Admite-se que a função $f(x)$ seja contínua e possua derivadas parciais contínuas até segunda ordem e as funções $h_i(x)$ e $h_j(x)$ sejam contínuas e possuam derivadas parciais contínuas até primeira ordem.

Na área da otimização algumas definições são normalmente empregadas e devem estar no conhecimento para melhor entendimento dos problemas, sendo definidas como:

- Variáveis de Projeto: são as variáveis que se alteram durante o processo de otimização, desejando-se modificá-las no processo para o intuito desejado, podendo ser contínuas (reais), inteiras ou discretas (valores que estão compreendidos em um certo conjunto fixado);
- Restrições: são funções de igualdade ou desigualdade descrevendo situações indesejáveis ou limitantes do projeto onde as soluções (bons resultados) podem ser encontradas, sendo divididas em Restrições Laterais que efetuadas diretamente sobre as variáveis de projeto, limitam seus valores e as Restrições de Comportamento, as quais possuem condições desejáveis para os limites;

- Espaço de Busca e Região Viável: é o espaço ou região que compreende as soluções possíveis ou viáveis do problema a ser otimizado, sendo caracterizado e delimitado pelas funções de restrição;
- Função Objetivo (ou de Avaliação): é a função do problema (ou função que representa o problema ou condições, etc.) que se deseja otimizar, podendo ser de uma ou mais variáveis sendo classificadas como: otimização unidimensional e multidimensional respectivamente;
- Ponto Ótimo: caracteriza-se pelo vetor $x^* = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, formado pelas variáveis de projeto que maximizam ou minimizam a função objetivo, conforme a intenção do problema, satisfazendo as suas restrições ao qual é submetido;
- Valor Ótimo: é o valor da função objetivo $f(x^*)$ no ponto ótimo;
- Solução Ótima: é o par de solução formado pelo ponto ótimo e o valor ótimo $(x^*, f(x^*))$. A solução ótima pode ser Local (onde o valor ótimo está localizado na vizinhança), Global (quando o valor ótimo é global na região possível), Restringida (as restrições são atendidas) e Não restringida (não atende a nenhuma restrição). Quando analisadas muitas variáveis de projeto, o valor ótimo é determinado por um conjunto ótimo dessas variáveis otimizadas.

Os inúmeros métodos matemáticos que normalmente apresentam teoremas provando a sua convergência, embora não garantam que a solução encontrada seja o ponto ótimo global, que nesta situação dependerá do ponto de partida inicial considerado. Essa situação característica dos métodos clássicos é um dos pontos que determinam a fragilidade desses métodos que se intenta superar, embora este objetivo ainda não tenha sido alcançado.

As características da função objetivo e das restrições influenciam na forma dos problemas de otimização criando subdivisões da Programação Matemática em:

- Programação Linear: a função objetivo e as restrições são funções lineares das variáveis de projeto;
- Programação Não-Linear: a função objetivo ou pelo menos uma das restrições é uma função não-linear das variáveis de projeto.

Outras divisões foram surgindo ao longo dos anos tendo como objetivo uma maior especialização para resolução dos problemas, conforme:

- Programação Quadrática: considera neste caso a função objetivo como função quadrática sendo as restrições funções lineares das variáveis de projeto.

Uma outra extensão da Programação Quadrática é a Programação Multi-Objetivo, que ao invés de uma, possui várias funções objetivo a serem otimizadas.

Segundo Edgar e Himmelblau (1989), problemas de otimização consistem em encontrar conjuntos de valores que maximizem ou minimizem um determinado critério, além de obedecer a conjuntos de restrições. Por isso, os problemas de otimização possuem quatro categorias essenciais:

- 1) Pelo menos uma função objetivo (ou critério de otimização);
- 2) Restrições de igualdade (equações);
- 3) Restrições de desigualdade (inequações);
- 4) Restrições Mistas (equações e inequações).

Para um determinado problema de otimização as soluções factíveis são formadas por um conjunto de variáveis que possam satisfazer as categorias 2 e 3 ou 4. A Figura AII.1

ilustra a região formada por todas as soluções factíveis; a região factível, para um problema de otimização com duas variáveis.

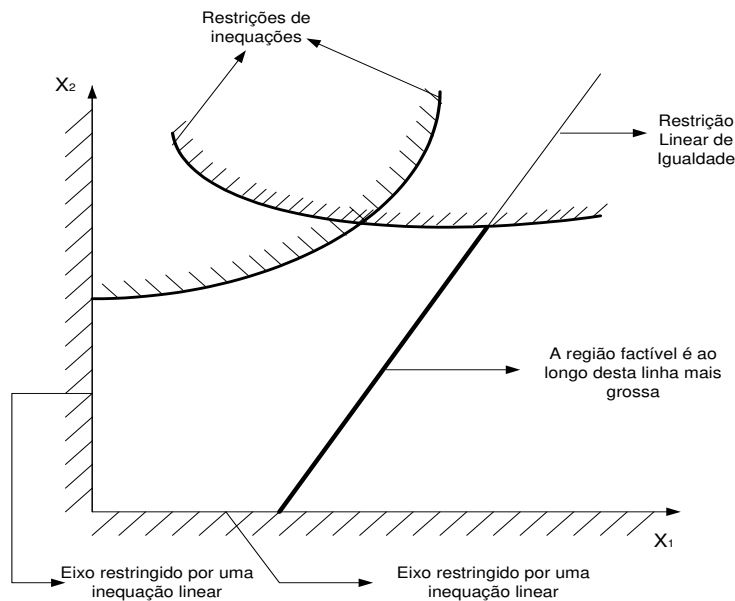


Figura AII.1 - Região factível para um problema de otimização envolvendo duas variáveis independentes (Adaptado de Edgar Himmelblau (1989)).

Em termos matemáticos, o problema de otimização tem a seguinte notação:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Minimizar} & f(x) \\
 \text{Sujeito a} & h(x) = 0 \\
 & g(x) \geq 0
 \end{array} \tag{AII.P1}$$

sendo que x é um vetor de n variáveis $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)^T$, $h(x)$ um vetor de equações de dimensão m_1 , e $g(x)$ um vetor de inequações de dimensão m_2 . O número total de restrições é $m = (m_1 + m_2)$. O problema denominado de (AII. P1) pode ser resolvido com grande facilidade convertido para um problema de maximização, e para tanto é necessário multiplicar $f(x)$ por (-1) .

As características de x , $f(x)$, $h(x)$, $g(x)$, dos problemas de otimização podem receber a seguinte classificação, conforme a Tabela AII.1.

Tabela AII.1 - Exemplificação para classificação dos problemas de otimização (baseada em Villalba (2002)).	
<i>Problema</i>	<i>Características</i>
Minimização sem restrições	Não há nenhum tipo de restrição, as variáveis são contínuas.
Programação Linear	A função objetivo e as restrições são funções lineares e as variáveis são contínuas.
Programação Inteira Linear	A função objetivo e as restrições são funções lineares e as variáveis são discretas.
Programação Inteira Mista Linear	A função objetivo e as restrições são funções são funções lineares e as variáveis são discretas e contínuas.
Programação Não-Linear	A função objetivo e/ou as restrições são funções não lineares e as variáveis são contínuas.
Programação Não-Linear Inteira	A função-objetivo e/ou as restrições são funções não lineares e as variáveis são discretas.
Programação Não-Linear Inteira Mista	A função objetivo e/ou as restrições são funções não lineares e as variáveis são contínuas e discretas.
Programação Quadrática	A função objetivo é uma função quadrática sendo que as restrições são representadas por funções lineares das variáveis de projeto.
Programação Multi-Objetivo	É uma outra extensão da Programação Quadrática que ao invés de uma, possui várias funções objetivo a serem otimizadas.

Existem inúmeros métodos para otimização, e várias são as formas de classificação realizadas pelos autores. A Figura AII.2 apresenta uma classificação geral de vários métodos existentes.

Neste capítulo são apresentadas informações gerais das classes de problemas mais comuns, com comentários ou ênfase em alguns métodos mais utilizados em problemas de Engenharia Química.

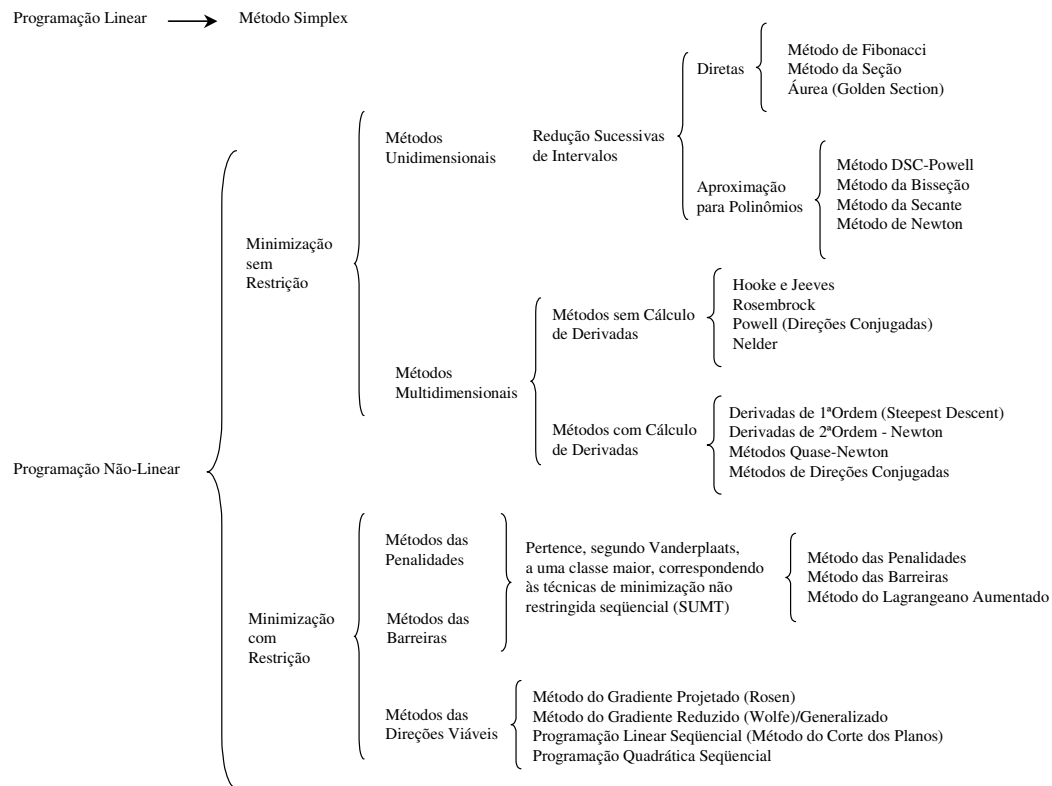


Figura AII.2 – Classificação geral das várias metodologias de otimização existentes (Baseado em Silva (2001) e Castro (2001)).

AII.2.1 PROGRAMAÇÃO LINEAR

As soluções são investigadas em problemas que possuem todas as suas relações, entre as variáveis, como sendo lineares, como as restrições e a função a ser otimizada (função objetivo). O problema pode ser definido da seguinte forma: dado um conjunto de k desigualdades (equações lineares) em p variáveis, tem-se como objetivo determinar os valores que não sejam negativos das variáveis que satisfazem as restrições e minimizam alguma função linear das variáveis. A representação matemática é apresentada na seqüência.

$$\begin{array}{ll}
\text{Minimizar} & f(x) \\
\text{Sujeito a} & A \cdot x = b \\
& \text{ou} \quad A \cdot x \geq b \\
& \text{ou} \quad A \cdot x \leq b \\
& x_j \geq 0 \quad j=1, \dots, q
\end{array} \tag{AII.2}$$

Os problemas de programação linear garantem que a solução ótima vai se encontrar no contorno da região de soluções viáveis. A metodologia mais conhecida neste tipo de problemas é chamada de Método Simplex, desenvolvida por George Dantzig, que ao longo dos anos foram feitas algumas modificações, as quais são denominadas de: (1) Método Simplex Generalizado e (2) Método Simplex Revisado. Na resolução do método o problema sofre transformações (padronização), introduzindo variáveis de folga nas restrições de desigualdade para obtenção apenas de restrições de igualdade, além de variáveis artificiais nas restrições de origem de igualdade. Quando as variáveis de projeto admitem valores negativos, faz-se uma transformação dessas pela soma dos valores altos, tendo como intuito trabalhar com todas as variáveis com valores positivos, que melhora a convergência computacional do método (Fletcher (1985), Horowitz (1989) e Luenberger (1989)).

AII.2.2 PROGRAMAÇÃO NÃO-LINEAR

Este tipo de programação considera a função objetivo ou algumas das restrições como funções não-lineares das variáveis de projeto. Há uma divisão em problemas restritos e não restritos e uni ou multidimensionais, onde a resolução pode ser feita por um grande variedade de métodos, onde alguns deles são encontrados na Figura AII.2. Desta maneira pode-se dividir os métodos de programação não-linear em duas classes distintas: a otimização sem restrições e com restrições que estão descritos com detalhes em Silva (2001) e são apresentados de uma forma sucinta neste capítulo.

AII.2.2.1 OTIMIZAÇÃO SEM RESTRIÇÕES

Esta classe de problemas de otimização possui uma estruturação comum de resolução, aplicando de forma iterativa, como exemplo a equação de recorrência $x^k = x^{k-1} + \alpha^k \cdot d^k$, onde x é a representação dos vetores das variáveis de projeto, α representa o tamanho do passo, d a direção de busca e k é o índice representativo da iteração atual. A diferença básica entre os diversos algoritmos de solução de problemas de otimização consiste em uma estratégia empregada para obter o valor de d^k , que corresponde as diversas direções de buscas. Dentre diversos métodos para solução de problemas de programação não-linear sem restrições, alguns destes precisam apenas de informações sobre o valor da função (ordem zero), e outros, além desse valor faz-se necessário utilizar a primeira derivada (ordem um), e ainda existem outros que utilizam a segunda derivada (ordem dois). Vários são os métodos empregáveis nesta classe de problemas, destacando-se os métodos: Gradiente, Newton e Quase-Newton (Fletcher (1985)). A representação geral fica da seguinte forma:

$$\text{Minimizar} \quad f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n \quad (\text{AII.3})$$

As condições necessárias e suficientes para se ter um mínimo local são:

- Condição necessária de primeira ordem é que $\nabla f(x^*) = 0$, sendo $\nabla f(x^*) = 0 \Rightarrow x^*$ um ponto estacionário;
- Condição necessária de segunda ordem:
$$\begin{cases} \nabla f(x^*) = 0 \\ d^T \cdot \nabla^2 f(x^*) \cdot d \geq 0 \end{cases} \quad \forall d \neq 0;$$
- Condição suficiente de segunda ordem:
$$\begin{cases} \nabla f(x^*) = 0 \\ d^T \cdot \nabla^2 f(x^*) \cdot d > 0 \end{cases} \quad \forall d \neq 0$$

Nesta classe de métodos de otimização ressalta-se as descrição das técnicas de Newton-Raphson, Quase-Newton (BFGS) e Quase-Newton (DFP) e que são encontrados em Silva (2001) e Fletcher (1985).

AII.2.2.2 OTIMIZAÇÃO COM RESTRIÇÕES

Esse tipo de otimização procura descrever o problema de forma a transformá-lo em um problema de otimização sem restrições, sendo assim possível resolvê-lo com métodos que foram apresentados anteriormente (problemas sem restrições). Esta classe de problemas é mais representativa em problemas de ordem de complexidade elevada e estão presentes na maioria dos casos a otimizar em processos industriais.

Considere o problema-caso de otimização com restrições, representado:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Minimizar} & f(x) \\
 \text{Sujeito a} & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \\
 & g_j(x) = 0 \quad j = 1, \dots, q \\
 & x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \\
 & \Gamma = \{x \in \Omega \mid g_i(x) = 0, \quad i = 1 \dots m \quad e \quad g_j(x) \leq 0, \quad j = 1 \dots q\}
 \end{array} \tag{AII.4}$$

onde Γ é denominada de região viável ou factível e com a função $f(x)$ contínua com derivadas parciais contínuas até a segunda ordem e as funções $g_i(x)$ e $g_j(x)$ contínuas e com derivadas parciais contínuas até a primeira ordem. Assim os métodos são subdivididos em:

- Métodos com Restrições de Igualdade;
- Métodos com Restrições de Desigualdade;
- Métodos com Restrições Mistas.

AII.2.2.2.1 OTIMIZAÇÃO COM RESTRIÇÕES DE IGUALDADE

Analisa-se o seguinte problema geral de otimização apresentado da forma:

$$\begin{aligned}
 &\text{Minimizar} && f(x) \\
 &\text{Sujeito a} && g_i(x) = 0, \quad i = 1 \dots m \\
 &&& x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \\
 &&& \Gamma = \{x \in \Omega \mid g_i(x) = 0, \quad i = 1 \dots m\}
 \end{aligned} \tag{AII.5}$$

Algumas definições importantes que posteriormente podem ser utilizadas nos métodos de otimização:

- $\delta \in \mathbb{R}^n$ é um incremento viável em um ponto $x \in \Gamma \Leftrightarrow x + \delta \in \Gamma$;
- Uma direção d é uma direção de decréscimo em $x \Leftrightarrow d^T \cdot \nabla f(x^*) < 0$ e se o ponto x^* é um ponto de mínimo local, não existe d tal que:
$$\begin{cases} d^T \cdot \nabla g_i(x^*) = 0 \\ d^T \cdot \nabla f(x^*) < 0 \end{cases} \quad i = 1 \dots m;$$
- Um ponto x^* que satisfaz as restrições $g_i(x) = 0$ para $i = 1 \dots m$, é um ponto regular se os vetores gradientes $\nabla g_1(x^*), \nabla g_2(x^*), \dots, \nabla g_m(x^*)$ forem LI;
- Sendo x^* um ponto regular e como o sistema:
$$\begin{cases} d^T \cdot \nabla g_i(x^*) = 0 \\ d^T \cdot \nabla f(x^*) < 0 \end{cases} \quad i = 1 \dots m, \text{ não possui solução, pode-se garantir que existem } \lambda_i^* \text{ com } i = 1, \dots, m, \text{ tais que,}$$
$$\nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \cdot \nabla g_i(x^*) = 0, \text{ onde os números } \lambda_i^* \text{ são denominados Multiplicadores de Lagrange;}$$
- A função Lagrangiana é definida por:

$$L(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i=1}^m \lambda_i \cdot g_i(x) \quad (\text{AII.6})$$

- A condição necessária de primeira ordem para que um ponto viável seja um mínimo local, é dada por $\nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \cdot \nabla g_i(x^*) = 0$, ou seja, o gradiente da função objetivo deve ser uma combinação linear dos gradientes das restrições;
- A condição necessária de primeira ordem para que o ponto (x^*, λ^*) seja um ponto estacionário da função Lagrangiana é dado por $\nabla L(x^*, \lambda^*) = 0$, com $\nabla = \begin{bmatrix} \nabla_x \\ \nabla_\lambda \end{bmatrix}$. Os próximos métodos a serem apresentados são: o Método Lagrangiano, o da Penalidade e o Lagrangiano Aumentado.

AII.2.2.2.1 MÉTODO DO LAGRANGIANO

Considere o seguinte problema geral de otimização com restrições de igualdade:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) \\ \text{Sujeito} & a \quad g_i(x) = 0 \quad i = 1 \dots m, \\ & x \in \mathfrak{R}^n \end{array} \quad (\text{AII.7})$$

com a função $f(x)$ contínua e com derivadas parciais contínuas até a segunda ordem e funções $g_i(x)$ contínuas e também com derivadas parciais contínuas até primeira ordem. A condição necessária de primeira ordem para que um determinado ponto (x^*, λ^*) seja um ponto estacionário da função Lagrangiana como pode ser verificado na seção anterior é:

$$\nabla L(x^*, \lambda^*) = 0, \text{ onde } L(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i=1}^m \lambda_i \cdot g_i(x) \quad (\text{AII.8})$$

Desta forma define-se as funções $f_1(x^*)$ e $f_2(x^*)$ na seqüência:

$$f_1(x^*) = \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \cdot \nabla g_i(x^*) = 0 \quad \text{e} \quad f_2(x^*) = \begin{bmatrix} g_1(x^*) \\ g_2(x^*) \\ \vdots \\ g_m(x^*) \end{bmatrix} = 0, \quad (\text{AII.9})$$

assim o sistema acima é representado por:

$$t(x, \lambda) = \begin{bmatrix} \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \cdot \nabla g_i(x^*) \\ \nabla g_1(x^*) \\ \vdots \\ \nabla g_m(x^*) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix} = 0 \quad (\text{AII.10})$$

O método de Newton é utilizado na resolução do sistema obtendo-se:

$$\begin{bmatrix} x \\ \lambda \end{bmatrix}^{k+1} = \begin{bmatrix} x \\ \lambda \end{bmatrix}^k - [\nabla t(x^k, \lambda^k)]^{-1} \cdot t(x^k, \lambda^k), \quad (\text{AII.11})$$

equivalendo a resolver $\nabla t(x^k, \lambda^k) \cdot d^k = -t(x^k, \lambda^k)$, onde d^k e $\nabla t(x^k, \lambda^k)$ são de forma respectiva:

$$d^k = \begin{bmatrix} x \\ \lambda \end{bmatrix}^{k+1} - \begin{bmatrix} x \\ \lambda \end{bmatrix}^k \quad \text{e} \quad \nabla t(x^k, \lambda^k) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial \lambda} \end{bmatrix}. \quad (\text{AII.12})$$

Reescrevendo de outra maneira,

$$\nabla t(x^k, \lambda^k) = \begin{bmatrix} \nabla^2 f(x^k) + \sum \lambda_i^k \cdot \nabla^2 g_i(x^k) & \nabla g(x^k) \\ [\nabla g(x^k)] & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{AII.13})$$

A resolução do sistema de equações (descritos anteriormente) se faz necessário a inversão da matriz $\nabla t(x^k, \lambda^k)$, desta forma simplifica-se os cálculos, adotando-se para as matrizes A e B as seguintes expressões:

$$A = \nabla^2 f(x^k) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^k \cdot \nabla^2 g_i(x^k) \quad e \quad B = \nabla g(x^k). \quad (\text{AII.14})$$

A inversão da matriz $\nabla t(x^k, \lambda^k)$ é o mesmo que determinar as matrizes C, D e E de forma que:

$$\begin{bmatrix} A & B \\ B^T & O \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C & D \\ D^T & E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & O \\ O & I \end{bmatrix}. \quad (\text{AII.15})$$

A partir de manipulações e operações as expressões obtidas são:

$$C = A^{-1} - A^{-1} \times B \times (B^T \times A^{-1} \times B)^{-1} \times B^T \times A^{-1}, \quad (\text{AII.16})$$

$$D = A^{-1} \cdot B \cdot (B^T \cdot A^{-1} \cdot B)^{-1} \quad e \quad E = -(B^T \cdot A^{-1} \cdot B)^{-1}. \quad (\text{AII.17})$$

Logo o problema se resume na resolução do seguinte sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix}^k = \begin{bmatrix} C & D \\ D^T & E \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}, \quad (\text{AII.18})$$

de onde são obtidas as expressões finais:

$$d_1^k = -A^{-1} \cdot f_1 - A^{-1} \cdot B \cdot d_2^k \quad e \quad d_2^k = (B^T \cdot A^{-1} \cdot B)^{-1} \cdot [B^T \cdot A^{-1} \cdot f_1 + f_2]. \quad (\text{AII.19})$$

O algoritmo para a metodologia Lagrangiana com restrições de igualdade é encontrado em detalhes em Silva (2001).

AII.2.2.2.1.2 MÉTODO DA PENALIDADE

A idéia central dessa metodologia é transformar o problema de otimização com restrições de igualdade em um problema sem restrições. Objetiva-se construir uma função de penalidade na qual há uma combinação da função objetivo $f(x)$ com as restrições $g_i(x)$ dando condições de haver a minimização de $f(x)$ ao mesmo tempo em que são satisfeitas as restrições $g_i(x)$, que são penalizadas.

A função de penalidade escrita de forma genérica é:

$$P(x, \xi) = f(x) + \frac{1}{2} \cdot \xi \cdot \sum_{i=1}^m g_i^2(x), \quad (\text{AII.20})$$

onde ξ é o parâmetro de penalidade. Os procedimentos de solução assumem uma seqüência de escalares tendendo ao infinito, resolvendo o problema atribuindo cada valor a $\xi^{(m)}$, gerando assim, uma seqüência de solução $x^{(m)}$.

Demonstra-se que, quando $\xi^{(m)} \rightarrow \infty$, então $x^{(m)} \rightarrow x^*$ que é um mínimo local do problema. Além disso, a convergência é global, ou seja, a convergência de um mínimo local independe do valor inicial adotado. Da mesma maneira que o método anterior a

utilização de uma função única que se deseja otimizar com as restrições gera um novo problema que é representado pela minimização da função $P(x, \xi^k)$ sem restrições, assim podendo ser utilizado vários métodos de minimização sem restrições, inclusive aqueles anteriormente apresentados.

O gradiente da Função de Penalidade $\nabla P(x, \xi^k)$ é dado pela seguinte equação:

$$\nabla P(x, \xi^k) = \nabla f(x) + \xi^k \cdot \sum_{i=1}^m g_i(x) \cdot \nabla g_i(x). \quad (\text{AII.21})$$

Em Silva (2000), esse método é apresentado com mais detalhes.

AII.2.2.2.1.3 MÉTODO DO LAGRANGIANO AUMENTADO (MLA)

Essa metodologia resolve uma série de problemas de minimização sem restrições utilizando a idéia básica do Lagrangiano acrescentando um termo na função Lagrangiana que penaliza as restrições, ou seja, uma metodologia equivalente ao Método da Penalidade. O Lagrangiano Aumentado do problema fica representado da forma:

$$A(x, \lambda, \xi) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \cdot g_i(x) + \sum_{i=1}^m \frac{1}{2} \cdot \xi \cdot g_i^2(x), \quad (\text{AII.22})$$

onde ξ é o parâmetro de penalidade e λ é o vetor que contém os multiplicadores de Lagrange. A idéia do método é de minimizar a função $A(x, \lambda, \xi)$, onde os valores de ξ e λ^k são escolhidos e fixados no início de cada processo de minimização sem restrições e posteriormente o funcional $A(x, \lambda, \xi)$ é minimizado em relação a x . A atualização dos Multiplicadores de Lagrange pode ser feita pela equação: $\lambda^{k+1} = \lambda^k + \xi \cdot g(x)$. A convergência nesse método ocorre quando o valor da penalidade ξ é finito, enquanto que

no Método da Penalidade este valor tinha que tender ao infinito acarretando problemas computacionais. Em Silva (2001) pode ser encontrada uma descrição detalhada dessa metodologia.

AII.2.2.2.2 OTIMIZAÇÃO COM RESTRIÇÕES DE DESIGUALDADE

Considerando o problema genérico de otimização com restrições de desigualdade:

$$\begin{aligned}
 & \text{Minimizar} \quad f(x) \\
 & \text{Sujeito a} \quad g_j(x) \leq 0, \quad j = 1 \dots q \\
 & \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \\
 & \quad \Gamma = \{x \in \Omega \mid g_j(x) \leq 0, \quad j = 1 \dots q\}
 \end{aligned} \tag{AII.23}$$

onde Γ é denominada de região viável e a função $f(x)$ sendo contínua e com derivadas parciais contínuas até segunda ordem e as funções $g_j(x)$ contínuas e com derivadas parciais contínuas até primeira ordem. A condição necessária de primeira ordem para que um ponto x^* seja um ponto de mínimo local do problema de minimização descrito acima é fornecida pelas equações:

$$\begin{aligned}
 & \nabla f(x^*) - \sum_{j=1}^q \lambda_j^* \cdot g_j(x^*) = 0 \\
 & g_j(x^*) \leq 0 \quad j = 1 \dots q \\
 & \lambda_j^* \geq 0 \\
 & \lambda_j^* \cdot g_j(x^*) = 0
 \end{aligned} \tag{AII.24}$$

Considerando $\Xi(x^*)$ o conjunto de restrições de desigualdade ativas na solução x^* , ou seja, $\Xi(x^*)$ é o conjunto dos índices j de forma que $g_j(x^*) = 0$. Então, as condições necessárias são:

$$\begin{aligned}
\nabla f(x^*) - \sum_{j=1}^q \lambda_j^* \cdot g_j(x^*) &= 0 \\
g_j(x^*) &= 0 & j \in \Xi(x^*) \\
g_j(x^*) &< 0 & j \notin \Xi(x^*) \\
\lambda_j^* &\geq 0 & j = 1 \dots q \\
\lambda_j^* &= 0 & j \in \Xi(x^*)
\end{aligned} \tag{AII.25}$$

A resolução desse problema ocorre através dos Métodos dos Conjuntos Ativos que tem como objetivo a definição em cada iteração de um conjunto de restrições, denominado de conjunto de trabalho, que é uma estimativa do conjunto $\Xi(x^*)$. O método determina um conjunto de trabalho atual, que é um subconjunto de restrições, efetuando um processo de minimização sob restrições de igualdade para este conjunto. Se este ponto não satisfizer as condições do problema, é realizada uma atualização do conjunto de trabalho calculando-se em seguida o novo ponto. Quando a solução for encontrada, o conjunto de trabalho passa a ser o conjunto ativo correto $\Xi(x^*)$. Existem vários métodos, mas nos próximos tópicos apenas dois estão disponíveis, nesta categoria, que são: o Método da Penalidade e o Método Lagrangiano Aumentado.

AII.2.2.2.1 MÉTODOS DA PENALIDADE

Quando são tratados os problemas com restrições de igualdade, para obtenção de um ponto que satisfaz às condições necessárias do problema de otimização com restrições de desigualdade, já apresentados, basta resolver um sistema não-linear de equações. Mas em problemas que incluem restrições de desigualdade, além da resolução do sistema não-linear de equações, se faz necessário que a solução deste sistema também possa satisfazer as restrições, sendo assim construída uma nova Função de Penalidade. A nova função é representada da seguinte forma:

$$P(x, \xi) = f(x) + \frac{1}{2} \cdot \xi \cdot \sum_{j=1}^q \langle g_j(x) \rangle^2, \quad (\text{AII.26})$$

onde ξ é chamado de parâmetro de penalização.

A resolução é de forma iterativa, onde a cada passo do processo a função $\langle g_j(x) \rangle$ avaliada em função do valor de x para esta determinada iteração e desta forma pode ser considerada ou não no processo, ou seja, há uma verificação da restrição se é ou não ativa (Silva (2001)).

AII.2.2.2.2 MÉTODO DO LAGRANGIANO AUMENTADO

Igualmente ao Método da Penalidade algumas alterações no funcional $A(x, \lambda, \xi)$ resultam na equação:

$$A(x, \lambda, \xi) = f(x) + \sum_{j=1}^q \lambda_j \cdot \langle g_j(x) \rangle + \sum_{j=1}^q \frac{1}{2} \cdot \xi \cdot \langle g_j(x) \rangle^2, \quad (\text{AII.27})$$

onde ξ é o parâmetro de penalidade e λ_j são os multiplicadores de Lagrange. Outra diferença ocorre na atualização dos multiplicadores de Lagrange que nesta versão do método são fornecidos pela equação: $\lambda^{k+1} = \langle \lambda^k + \xi \cdot g(x) \rangle$. No trabalho de Silva (2001), os detalhes dessa metodologia podem ser verificados.

AII.2.2.2.3 OTIMIZAÇÃO COM RESTRIÇÕES MISTAS

É um método que engloba vários tipos de restrições em conjunto, onde se caracteriza como um problema geral da Programação Matemática. Dentro desse contexto são apresentados os seguintes métodos: o de Penalidade e do Lagrangiano Aumentado.

AII.2.2.2.3.1 MÉTODO DA PENALIDADE

Considere o problema geral de otimização definido da seguinte forma:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Minimizar} & f(x) \\
 \text{Sujeito a} & g_i(x) = 0 \quad i = 1 \dots m, \\
 & g_j(x) \leq 0 \quad j = 1 \dots q, \\
 & x \in \mathfrak{R}^n
 \end{array} \tag{AII.28}$$

onde a função $f(x)$ é contínua e com derivadas parciais contínuas até segunda ordem e as funções $g_i(x)$ e $g_j(x)$ são contínuas e com derivadas parciais contínuas até primeira ordem.

A função de penalidade do problema geral é:

$$P(x, \xi) = f(x) + \frac{1}{2} \cdot \xi \cdot \sum_{i=1}^m g_i^2(x) + \frac{1}{2} \cdot \xi \cdot \sum_{j=1}^q \langle g_j(x) \rangle^2, \tag{AII.29}$$

com ξ sendo o parâmetro de penalidade. Observa-se que $P(x, \xi)$ é a mesma função dos problemas anteriores, só que para esta situação são considerados as restrições de igualdade e de desigualdade respectivamente. Depois da definição da função $P(x, \xi)$, o problema é

resolvido da forma iterativa como sendo uma minimização com restrições de igualdade, pois a cada iteração a função $\langle g_j(x) \rangle$ pode estar ativa ou não.

AII.2.2.2.3.2 MÉTODO DO LAGRANGIANO AUMENTADO

Considerando o seguinte problema geral de otimização:

$$\begin{aligned}
 & \text{Minimizar} && f(x) \\
 & \text{Sujeito a} && g_i(x) = 0 \quad i = 1 \dots m, \\
 & && g_j(x) \leq 0 \quad j = 1 \dots q, \\
 & && x \in \mathfrak{R}^n
 \end{aligned} \tag{AII.30}$$

onde a função $f(x)$ é contínua e com derivadas parciais contínuas até segunda ordem e as funções $g_i(x)$ e $g_j(x)$ são contínuas e com derivadas parciais contínuas até primeira ordem. A função Lagrangiano Aumentado fica:

$$A(x, \lambda, \xi) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \cdot g_i(x) + \sum_{i=1}^m \frac{1}{2} \cdot \xi \cdot g_i^2(x) + \sum_{j=1}^q \lambda_j \cdot \langle g_j(x) \rangle + \sum_{j=1}^q \frac{1}{2} \cdot \xi \cdot \langle g_j(x) \rangle^2 \tag{AII.31}$$

onde ξ sendo o parâmetro de penalidade e λ_j são os multiplicadores de Lagrange. A atualização dos multiplicadores de Lagrange é feita conforme as equações:

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \xi \cdot g_i(x) \rightarrow \text{Para restrições de igualdade}$$

$$\lambda^{k+1} = \langle \lambda^k + \xi \cdot g_j(x) \rangle \rightarrow \text{Para restrições de desigualdade}$$

Depois que a função $A(x, \lambda, \xi)$ é definida, resolve-se o problema de forma iterativa como sendo uma minimização com restrição de igualdade, pois a cada iteração a função $\langle g_j(x) \rangle$ pode estar ativa ou inativa.

AII.2.3 PROGRAMAÇÃO MULTI-OBJETIVOS

Em diversos problemas, intenta-se alcançar mais de um objetivo. Uma exemplificação seria o caso de uma reação química a qual deseja-se aumentar a produtividade do produto principal com diminuição de outros sub-produtos ou ainda diminuição da energia utilizada na reação química, entre outros fatores que podem ser analisados em conjunto. Desta forma, inúmeros outros problemas de outras áreas de engenharia ou ciência apresentam mais de um objetivo a serem encontrados simultaneamente, devido a isso surgiu a Programação Multi-Objetivos.

Em geral, qualquer modelo de programação clássica com apenas um objetivo e várias restrições pode ser modelado e resolvido empregando a técnica para Multi-Objetivos, mas apesar disso ainda existem muitas diferenças na formulação e dos conceitos entre as duas técnicas de otimização. Um dos métodos mais utilizados neste tipo de programação é o GOAL Programming, funcionando como um algoritmo de tomada de decisões. As diferenças entre as diversas formulações são muito grandes que em um problema de otimização que sequer apresente uma região viável, e com o tratamento clássico seria impossível sua resolução. Com o GOAL Programming, consegue-se obter, embora esta solução possa violar alguma ou algumas das restrições, e nesta situação assume-se como a melhor solução encontrada para as metas estabelecidas.

Outros métodos de resolução de problemas de Programação Não-Linear, assim como maiores detalhes dos métodos apresentados e como implementá-los podem ser encontrados em Gill et al. (1981), Fletcher (1987) e Bazaraa (1993).

AII.3 OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS E MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO MAIS APLICADOS

A área de otimização vem crescendo a cada dia, sendo observado um número crescente de estudos relativos a esta área, principalmente com trabalhos aplicados aos processos da indústria química. Destes, muitas pesquisas vêm sendo realizadas com otimização em tempo real (OTR), que podem ser aplicados, tanto para equipamentos isolados, como reatores (Caldberg e Feord (1997)), coluna de destilação (Wozny e Li (2000)); como para processos que englobam um conjunto de equipamentos ou uma unidade inteira (Ricker (1995); Lid e Strand (1997); Tvrzská de Gouvêa (1998a; 1998b); Duvall e Riggs (2000); Forbes et al. (1999); Rodriguez-Toral, et al. (2001)).

As estratégias de otimização em tempo real são divididas em duas, segundo Tvrzská de Gouvêa (1997):

- Otimização em duas camadas;
- Otimização em uma camada.

Na otimização em duas camadas, as resoluções dos aspectos econômicos são feitas isoladamente e a solução é enviada ao controlador, que atua no processo, garantindo a operação estável e segurança da planta. Em cada uma das camadas (de otimização e a de controle), necessita-se de utilizar um modelo representativo do processo, o qual é atualizado através da estimativa de certos parâmetros deste. Esta situação é bem comentada pelos pesquisadores, pela grande facilidade de implementação.

A respeito do segundo caso de otimização, o controlador incorpora o cálculo da função que representa o aspecto econômico. O modelo utilizado no processo é único e suas informações abrangem os dados econômicos e do próprio processo. Este modelo também é

atualizado em períodos de tempos definidos. A Figura AII.3 mostra um esquema das duas formas de estratégias de otimização.

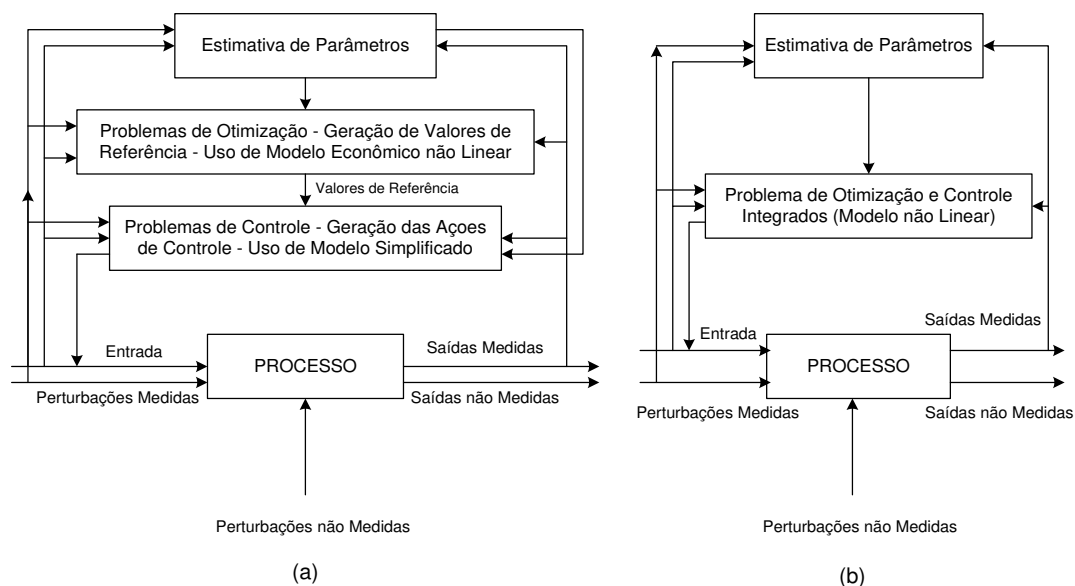


Figura AII.3 - Esquema de otimização: (a) em duas camadas, (b) em uma camada (Tvrzská de Gouvêa (1997)).

Calberg e Feord (1997) descreveram um reator de catálise heterogênea, no qual um modelo cinético foi desenvolvido e feita algumas adaptações para realização de controle e otimização em tempo real. A estratégia de duas camadas foi adotada e os dados do processo eram utilizados para sintonia dos parâmetros do modelo.

Lid e Strand (1997) estudaram a implementação de um otimizador em tempo real em duas camadas para uma planta de craqueamento catalítico residual da refinaria “Statoil Mongstad”. Os dados de testes da planta foram utilizados para o modelo empregado, junto com os dados da operação ordinária. Neste trabalho, o processo de otimização engloba aproximadamente 20 variáveis independentes e 40 equações relativas ao modelo do processo. O modelo adotado é continuamente comparado às medidas atuais e as perturbações são atualizadas no processo de acordo com as condições do estado estacionário. A otimização trata da maximização do lucro considerando restrições físicas do processo e limitações de fluxos internos. A função objetivo é simplificada, não considerando o custo do catalisador, consumo de energia e da produção, uso do

equipamento, custo de manutenção entre outros. As estimativas preliminares tinham uma previsão que o retorno ocorresse em dois meses.

Tvrzská de Gouvêa e Odloak (1998a; 1998b) desenvolveram estudos de um projeto de otimização em tempo real da Petrobrás para refinarias. As abordagens considerando otimização em uma e duas camadas foram verificadas com a tentativa de maximizar a produção de LPG de uma unidade de craqueamento catalítico. No caso da otimização em uma camada o processo de estudo foi assimilado mais rapidamente as alterações e mudanças nos objetivos econômicos. Entretanto quando houve fortes perturbações no sistema a resposta foi lenta, tornando a estratégia em uma camada não aplicável.

Birk et al. (1999) utilizaram um modelo de controle ótimo de vazões de alimentação de reatores tubulares levando-se em consideração o número de paradas para limpeza, e intervalos de operação entre as diversas paradas sucessivas, assumindo que as funções de custo e demanda são conhecidas por todo o horizonte de tempo que é considerado. No entanto, esta hipótese não é real, pois com o tempo as funções sempre sofrem modificações ou alterações. Assim o número de paradas devem ser recalculadas rapidamente sempre quando há alterações do modelo.

Forbes et al. (1999) estudaram e desenvolveram uma nova estratégia de otimização em tempo real das operações que envolvem a mistura de gasolina. As diferenças esta nova estratégia que foi baseada em horizonte de tempo e as outras existentes na literatura ou ainda àquelas aplicadas comercialmente são: a receita de mistura é otimizada em relação a mistura restante, sendo que a atualização do modelo consegue fazer uma previsão de valores futuros das propriedades das matérias-primas. Bons resultados foram obtidos quando há distúrbios ou perturbações de forma aleatória das propriedades das matérias-primas.

Ansari e Tade (2000) desenvolveram para um reator de reforma catalítico um controle multivariável não linear restringido, que também abrange uma estratégia de otimização. O modelo do processo estudado foi dinâmico baseado nas leis de conservação. Nesta situação, a otimização em tempo real foi realizada em uma camada, obtendo bons resultados.

Duvall e Riggs (2000) estudaram um reator industrial com reciclo que foi proposto por Downs e Vogel (1993), para determinação em tempo real das condições ótimas de operação em estado estacionário para os seis modos de operação da unidade, considerando ou não as perturbações. O trabalho teve como objetivo a determinação dos benefícios na aplicação da otimização em tempo real em estado estacionário da unidade quando comparado com a otimização off-line ou a otimização realizada por um operador experiente.

Nath e Alzein (2000) trabalharam com uma planta de etileno e descreveram uma estratégia de otimização em tempo real viável. A abordagem considerou a otimização em uma camada de um modelo utilizado pelo controlador multivariável. A vantagem observada é que não há necessidade de otimização em estado estacionário.

O problema de programação não linear (PNL) possui a seguinte forma geral:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar: } f(x), \text{ sendo } x \in R^n \\ &\text{Sujeito a: } h(x) = 0 \quad j = 1, 2, \dots, m_1 \\ &\quad \quad g(x) \geq 0 \quad j = 1, 2, \dots, m_2 \end{aligned} \tag{AII.P2}$$

A obtenção de uma solução para o problema (AII.P2) não é simples e em muitas vezes é suficiente que se encontre uma determinada solução x^* tal que (AII.P3) possa ser satisfeita. Neste caso, diz-se que x^* é uma solução local de (AII.P2) e a solução de fato de (AII.P2) é chamada de solução global.

$$\begin{aligned}
 f(x^*) &= \min f(x), \quad x \in R^n \cap B_\delta(x^*) \\
 \text{Sujeito a: } h_j(x) &= 0, \quad j = 1, 2, \dots, m_1 \\
 g_j(x) &\geq 0, \quad j = 1, 2, \dots, m_2
 \end{aligned}
 \tag{AII.P3}$$

sendo $B_\delta(x^*)$ a bola aberta de raio δ em torno de x^* , ou seja, é suficiente que, $f(x^*) \leq f(x)$ para todo x suficientemente próximo de x^* . A Figura AII.4 mostra os tipos de soluções ótimas abordados.

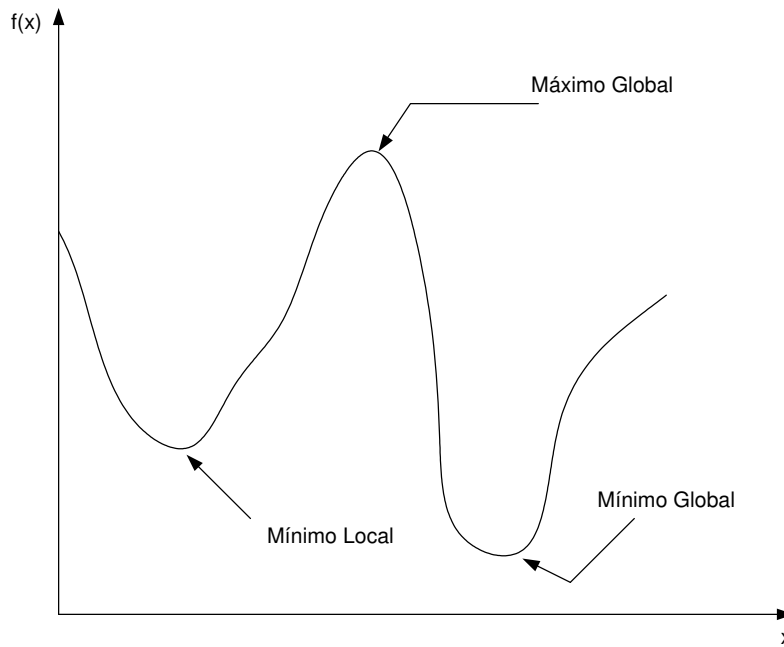


Figura AII.4 - Extremos de uma função em um determinado intervalo.

A caracterização de uma solução (AII.P2) pode ser melhor obtida se alguma hipóteses são feitas em relação as funções f , h_j e g_j . A utilização se dá quando estas funções sejam duplamente diferenciáveis em todos os pontos do domínio de definição. Nesta situação, a caracterização da solução ótima pode ser feita através da função lagrangiana.

A função Lagrangiana associada ao problema (AII.P2) é definida como:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^{m_1} \tilde{e}_i h_i(x) + \sum_{i=1}^{m_2} \tilde{\mu}_i g_i(x) \quad (\text{AII.32})$$

sendo $\tilde{e}_i$ e μ_i os multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade e das restrições de desigualdade, respectivamente.

Vários critérios foram estabelecidos por muitos pesquisadores para caracterização de uma solução de (AII.P2), os quais são denominados de critérios de otimalidade e o seu estabelecimento continua sendo um alvo de pesquisa ainda em exploração. Entre as condições de otimalidade, as mais utilizadas são as de Karush-Kuhn-Tucker (KKT), que podem ser definidas como:

- Condição necessária de KKT: seja x^* uma solução local ou global de (AII.P2), e f , h e g diferenciáveis em x^* e h e g tais que x^* seja ponto regular de h e g , ou seja, $h_j(x^*) = 0$ e $g_j(x^*) \leq 0$, e os componentes de h e g (correspondentes a $g_j(x^*) = 0$) são linearmente independentes em x^* . Então, AII.33 tem solução:

$$\begin{aligned} \nabla L_x(x^*, \lambda^*, \mu^*) &= 0 \\ h_j(x^*) &= 0 \\ g_j(x^*) &\leq 0 \\ \mu_j g_j(x^*) &= 0 \\ \mu_j &\geq 0 \end{aligned} \quad (\text{AII.33})$$

- Condições suficientes de KKT: seja x^* uma solução local ou global de (AII.P2) e f , h , e g duplamente diferenciáveis em x^* , e ainda $I_a = \{i : g_i(x^*) = 0; i = 1, \dots, p\}$, I_a é o conjunto ativo correspondente à solução ótima do problema. Supondo-se que alguma qualificação de restrições seja válida. Então x^* é solução de (AII.33) e $d^T \nabla^2 L_{xx}(x^*) d \geq 0$ para todo $d \in C$ e $C = \{d \in R^n, d \neq 0, \nabla g_i^T(x^*) \leq 0, i \in I_a, \nabla h^T d = 0\}$.

As condições KKT são muito utilizadas pelos pesquisadores, devido ao fato de se obter um ponto x^* que satisfaça o sistema (AII.32) é muito mais fácil que resolver (AII.P2). Além disso, os algoritmos numéricos são normalmente formulados através de procedimentos iterativos que visam encontrar uma solução do sistema (AII.32), denominada de solução estacionária.

AII.3.1 MÉTODO DA PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SUCESSIVA

Existem vários algoritmos para resolução de problemas de programação não linear, e mesmo assim, pode-se dizer que não há um método considerado definitivo. Este algoritmo denominado de Programação Quadrática Sucessiva (SQP) é considerado o mais eficiente para resolução de problemas da categoria (AII.P2), pelo menos considerando problemas de tamanho pequeno a médio (Facchinei (1997); Bartholomew-Biggs e Hernandez (1995); Heinz e Spelluci (1994)).

Os algoritmos de SQP correspondem a um método iterativo, como os outros em problemas de PNL, que gera uma seqüência de valores $\{x_k, \lambda_k, \mu_k\}$ que converge para a solução do problema (AII.P3), dada por (x^*, λ^*, μ^*) . A diferença entre os métodos dá-se na maneira de como a seqüência de valores é gerada.

O estabelecimento desta seqüência para algoritmos de SQP, é interpretada de várias formas. Dentre as quais, duas merecem atenção, que tem como objetivo obter a solução (x^*, λ^*, μ^*) , de (AII.P3) e deve-se satisfazer as condições de KKT. Por outro lado, estas condições nada mais são que um sistema de equações não lineares. Desta forma para se obter uma solução ótima de (AII.P3), nada mais objetivo que resolver um sistema de equações $F(x, \lambda, \mu) = 0$. Assim uma interpretação inicial surge em Stoer (1985), sabendo-se que, os métodos de SQP são essencialmente métodos de Newton ou Quase-Newton de resolução de $F(x, \lambda, \mu) = 0$, dado pelas condições estabelecidas por KKT.

Wright (1989) descreve os métodos SQP, como sendo aqueles em que para cada iteração do algoritmo efetua-se uma aproximação linear do conjunto composto por restrições do problema de PNL. Uma função quadrática sofre uma minimização sobre este conjunto simplificado, obtendo-se os novos valores da sequência $\{x_k, \lambda_k, \mu_k\}$. A minimização de uma função quadrática sujeita as restrições lineares têm uma correspondência a um problema de programação quadrática (PQ).

Em relação ao que foi exposto, entende-se que a classe de algoritmos SQP é caracterizada pela geração da sequência $\{x_k, \lambda_k, \mu_k\}$ como segue:

1. Resolvendo-se o seguinte problema da PQ para obtenção de d_k :

$$\begin{aligned} \text{Min } & \frac{1}{2} d_k^T H(x_k, \lambda_k, \mu_k) d_k + \nabla f^T(x_k) d_k \\ \text{s.a. } & \nabla h^T(x_k) d_k = -h(x_k) \\ & \nabla g^T(x_k) d_k \leq -g(x_k) \end{aligned} \quad (\text{AII.P4})$$

onde, H é uma aproximação do Hessiano (matrix contendo as derivadas segundas de uma função) do Lagrangeano de (AII.P2) ou (AII.P3) avaliado na iteração k e d_k é um vetor com a mesma dimensão de x . A aproximação linear das restrições na iteração k é obtida expandindo-se as mesmas em série de Taylor e truncando-se os termos de ordem superior.

2. $x_{k+1} = x_k + d_k$
3. λ_{k+1} e μ_{k+1} correspondem aos multiplicadores de Lagrange do problema da PQ.

Percebe-se que a essência do método SQP é simples. No entanto, sendo um método de Newton, a sequência $\{x_k, \lambda_k, \mu_k\}$ só irá convergir para a solução (x^*, λ^*, μ^*) quando os valores $\{x_k, \lambda_k, \mu_k\}$ estiverem suficientemente próximos da solução ótima.

Como não é conhecida a solução ótima inicialmente, é necessário que se efetue mudanças no algoritmo básico de forma que se tenha convergência global para uma solução KKT, independentemente do ponto de partida. Para garantia da propriedade de convergência global do método SQP, define-se então um problema de minimização em linha (Wright (1989)). Este é o ponto de partida para o método SQP, ou seja, é introduzido uma penalidade no passo 2 o qual passa a ser definido como:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \quad (\text{AII.34})$$

sendo, α_k um amortecimento obtido a partir da minimização unidirecional de uma função objetivo adequada, denominada função de mérito.

AII.3.2 RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE PROGRAMAÇÃO NÃO-LINEAR EM PROCESSOS QUÍMICOS

O método abordado anteriormente (SQP), é apenas um dos métodos para resolução de Problemas de Programação não Linear. Outros métodos de resolução deste tipo de problemas são encontrados na literatura e descritos na sequência.

AII.3.2.1 MÉTODO DA PROGRAMAÇÃO LINEAR SUCESSIVA

Para cada iteração do método, as equações descritas no problema AII.P2 são linearizadas:

$$\begin{aligned} \text{Min } & f(x_k) + \nabla f(x_k) d_k \\ \text{s.a. } & \nabla h^T(x_k) d_k \leq -h(x_k) \\ & \nabla g^T(x_k) d_k \leq -g(x_k) \end{aligned} \quad (\text{AII.P5})$$

Na sequência, técnicas de programação linear são utilizadas para resolver o problema AII.P4. É um método que se aplica a problemas quase lineares, mas possui uma desvantagem que é relacionada a sua convergência que é lenta para problemas muito não lineares, pois não há informações de segunda ordem sobre as restrições e a função objetivo.

AII.3.2.2 MÉTODOS DAS FUNÇÕES PENALIDADES

Neste caso um termo penalidade é acrescentado a função objetivo, sendo desta forma criado uma nova função objetivo. O termo penalidade aumenta monotonicamente a medida que as restrições são violadas. A idéia é transformar um problema de restrição multivariável em uma série de problemas no qual uma única função sem restrição é minimizada. Uma representação clássica para a função penalidade é a função perda quadrática:

$$P(x, \rho) = F(x) + \frac{1}{2} \rho \sum_{j=1}^{m_1} h_j^2(x) + \frac{1}{2} \rho \sum_{j=1}^{m_2} [\min \{0, g_j(x)\}]^2 \quad (\text{AII.P6})$$

É difícil determinar qual o valor utilizar para o fator penalidade ρ . Teoricamente, o mínimo irrestrito de $P(x, \rho)$ se aproxima da solução de AII.P2 quando o fator penalidade tender ao infinito. Devido a isso, o procedimento envolve minimizações irrestritas de P com valores cada vez maiores de ρ . Cada aumento no parâmetro de penalidade vai ocasionar um aumento do mal-condicionamento da matrix Hessiana do problema sem restrições.

AII.3.2.3 MÉTODOS DE GRADIENTE PROJETADO E GRADIENTE REDUZIDO

Métodos que são uma extensão da estratégia de conjunto ativo (“active set approach”) utilizada em programação linear. O princípio é a redução da função objetivo no

espaço das restrições não-lineares ativadas. O estímulo para os métodos de gradiente reduzido é que a dimensão do problema de otimização é reduzida pois é necessário se tornar viável em cada iteração. O método do Gradiente Reduzido Generalizado (GRG) está nessa categoria (GRG2, Ladson (1979)). O método possui uma seqüência:

1. Decisão de quais as restrições são ativas ou não e dividir as variáveis como dependentes ou independentes;
2. Determinação da direção de busca para as variáveis independentes;
3. Resolução do problema irrestrito no espaço das variáveis independentes, e;
4. Uso do Método de Newton para restaurar a factibilidade em relação as restrições não lineares originais.

Caso um limite seja encontrado, a variável é removida da base e substituída por uma das variáveis dependentes. O método de Newton é então repetido para o novo conjunto de variáveis dependentes. O passo de restauração é uma séria desvantagem para problemas grandes já que um grande conjunto de equações não-lineares precisa ser solucionado a cada iteração.

AII.3.2.4 MÉTODOS DOS LAGRANGIANOS AUMENTADOS

O método tem como objetivo encontrar um problema de minimização irrestrita que não produza os inconvenientes do mal-condicionamento associado com os métodos das funções penalidades. Este método aumentado tenta a estender as condições de otimalidade adicionando um termo penalidade ao Lagrangiano. Um dos mais utilizados é o termo penalidade quadrático:

$$L(x, \lambda, \rho) = F(x) - \lambda^T c(x) + \frac{\rho}{2} c(x)^T c(x) \quad (\text{AII.P7})$$

onde, $c(x)$ é o conjunto de funções formadas pelas restrições de igualdade e desigualdade e ρ um parâmetro de penalidade positiva. Pode-se demonstrar (Gill et al. (1981)) que x^* (solução local do problema (AII.P3)) é um mínimo irrestrito da função Lagrangiana aumentada se ρ exceder um valor finito (a função penalidade quadrática requeria um ρ próximo a infinito). A escolha inicial de ρ continua sendo problemática.

AII.4 CONCLUSÃO

Neste capítulo pode-se verificar e abordar uma variedade de métodos aplicáveis em diversos tipos de problemas de otimização para diversas áreas da ciência, cada um com suas vantagens e desvantagens características. Considerando sempre, o tipo de problema que é analisado (número de variáveis restrições lineares ou não, não existência de restrições, esforço computacional, entre outros). Ao longo dos anos muitas técnicas puderam ser aperfeiçoadas e melhoradas, bem como o desenvolvimento de outras que vieram com o avanço computacional que trouxe inúmeros benefícios na Programação Matemática.

O processo de produção do álcool cíclico a partir da hidrogenação do Álcool Benzílico é um caso de grande complexidade (composto por equações e inequações, além de restrições não-lineares não só do modelo em si mas das condições operacionais que estão relacionadas), com possibilidades de múltiplas soluções e a aplicação de técnicas de otimização podem trazer grandes benefícios na melhoria do processo reacional de produção e forte melhoria em diversos fatores econômicos. O principal equipamento do processo é o reator de Álcool Cíclico, um reator trifásico. Nas referências da literatura são encontrados vasto material sobre esse tipo de equipamento destacando-se o livro de Ramachandran e Chaudhari (1983), Gianetto e Silverston (1986). A Programação Matemática (problema de programação não-linear) pode ser amplamente aplicada a este problema como foi feito no trabalho de Villalba (2002), mas alguns inconvenientes foram observados principalmente quanto às soluções locais que foram obtidas e em algumas situações de não convergência.

Apêndice III

Produção de Álcool Cíclico - Reatores Trifásicos

AIII.1 INTRODUÇÃO

Os temas abordados neste capítulo são os seguintes:

- Processo de produção do Álcool Cíclico (AC) a partir da hidrogenação do Álcool Benzílico;
- Reatores Trifásicos.

Uma descrição do processo de produção de AC (unidade e sub-unidades) é apresentada, além de um resumo sobre reatores trifásicos e suas variedades, onde o reator de AC é uma categoria deste tipo de reatores.

AIII.2 PROCESSO DE PRODUÇÃO DO ÁLCOOL CÍCLICO A PARTIR DA HIDROGENAÇÃO DO ÁLCOOL BENZÍLICO

A unidade de produção do Álcool Cíclico é mostrada pela Figura AIII.1a, sendo formada por tanques de armazenamento (TQ2) e mistura (TQ3), por um tanque de separação de produtos da reação e do catalisador (TQ1), por um conjunto de trocadores de

calor (TC1 a TC8) e por um reator (RX), o qual é formado por oito módulos tubulares imersos em uma caldeira. Os tanques são controlados fazendo o controle da operação dos tanques (TQ3 e TQ1).

No primeiro, o nível, a proporção dos reagentes e a pressão de alimentação do catalisador são mantidos sobre controle, enquanto que no último a quantidade reciclada é controlada. A reação química para formação do Álcool Cíclico tem como os reagentes básicos, Álcool Benzílico e Hidrogênio. Adicionalmente, o reator é alimentado por uma corrente de Água e outra de reciclo do catalisador. A corrente de água alimentada tem como função deslocar o equilíbrio das reações indesejadas e melhorar a troca térmica no reator. O catalisador é separado do meio reacional (produtos de reação) no tanque TQ1, como pode ser observado na Figura AIII.1a, sendo então enviado para a etapa de regeneração, com uma porção retornando ao processo.

O catalisador regenerado é misturado com uma nova alimentação de catalisador. No tanque (TQ1) é medida a concentração de Álcool Benzílico residual. Caso esta esteja acima das especificações da operação, toda corrente oriunda do reator é reciclada, havendo interrupção de injeção de novos reagentes e o reator é empregado para consumir apenas todo Álcool Benzílico.

Caso não exista AB residual acima das especificações, a corrente líquida não é reciclada, sendo apenas uma pequena porção desta, que esteja impregnada no catalisador, retorna ao processo.

A reação de hidrogenação do Álcool Benzílico é exotérmica, sendo que, dependendo da temperatura de operação do reator e do catalisador utilizado, uma variedade de produtos podem ser formados como cetonas ou álcoois alicíclicos, hidrocarbonetos aromáticos e alicíclicos.

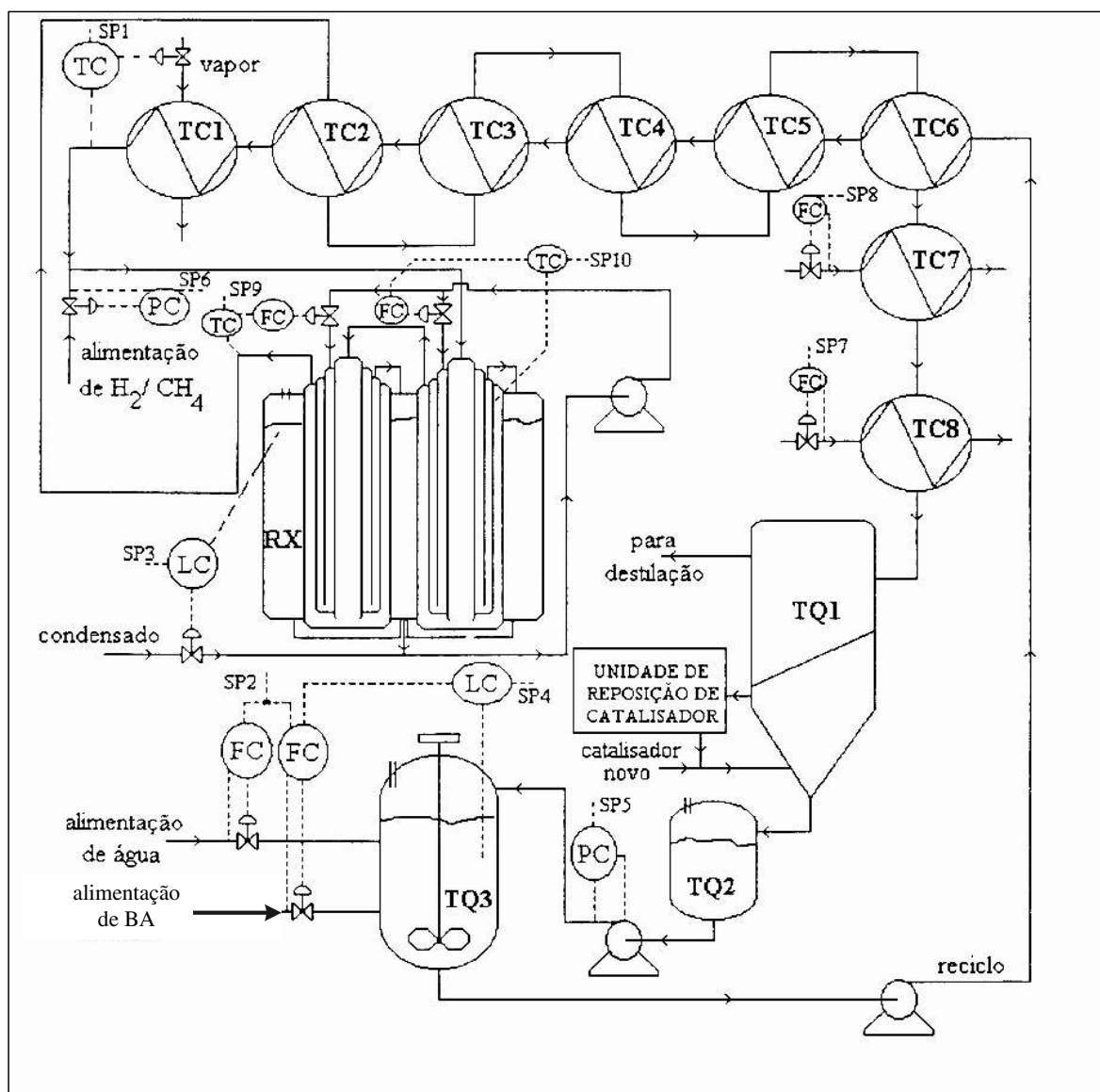


Figura AIII.1(a) - Processo inteiro de produção de Álcool Cíclico contendo o reator e as outras unidades de produção.

O fluxo de reagentes no reator ocorre de um módulo tubular a outro, sendo que os seis primeiros são análogos, um ao outro, sendo constituídos, cada um, de quatro tubos concêntricos, nestes os reagentes e produtos da reação circulam pelo tubo interno e pelo anulo externo, enquanto que o fluido refrigerante (condensado da caldeira e make-up) circula pelos dois ânnulos internos conforme pode ser observado na Figura AIII.1b. Ainda considerando o fluido refrigerante, ocorre injeção paralela deste, ou seja, a corrente de alimentação de fluido que advém do fluido na caldeira e eventualmente de uma nova alimentação de condensado (make-up) é dividida entre os seis primeiros módulos tubulares.

Os dois últimos módulos que são estruturalmente idênticos correspondem à porção do reator onde ocorre o final da reação. Estes são formados por apenas dois tubos concêntricos como mostrado pela Figura AIII.1c, por onde escoam os produtos da reação e reagentes. A circulação do fluxo material dentro do reator é mostrada pelo esquema da Figura AIII.1d. Em relação à caldeira, o nível e a temperatura de operação são controlados pela injeção de corrente de make-up e pelo controle adequado da taxa de purga.

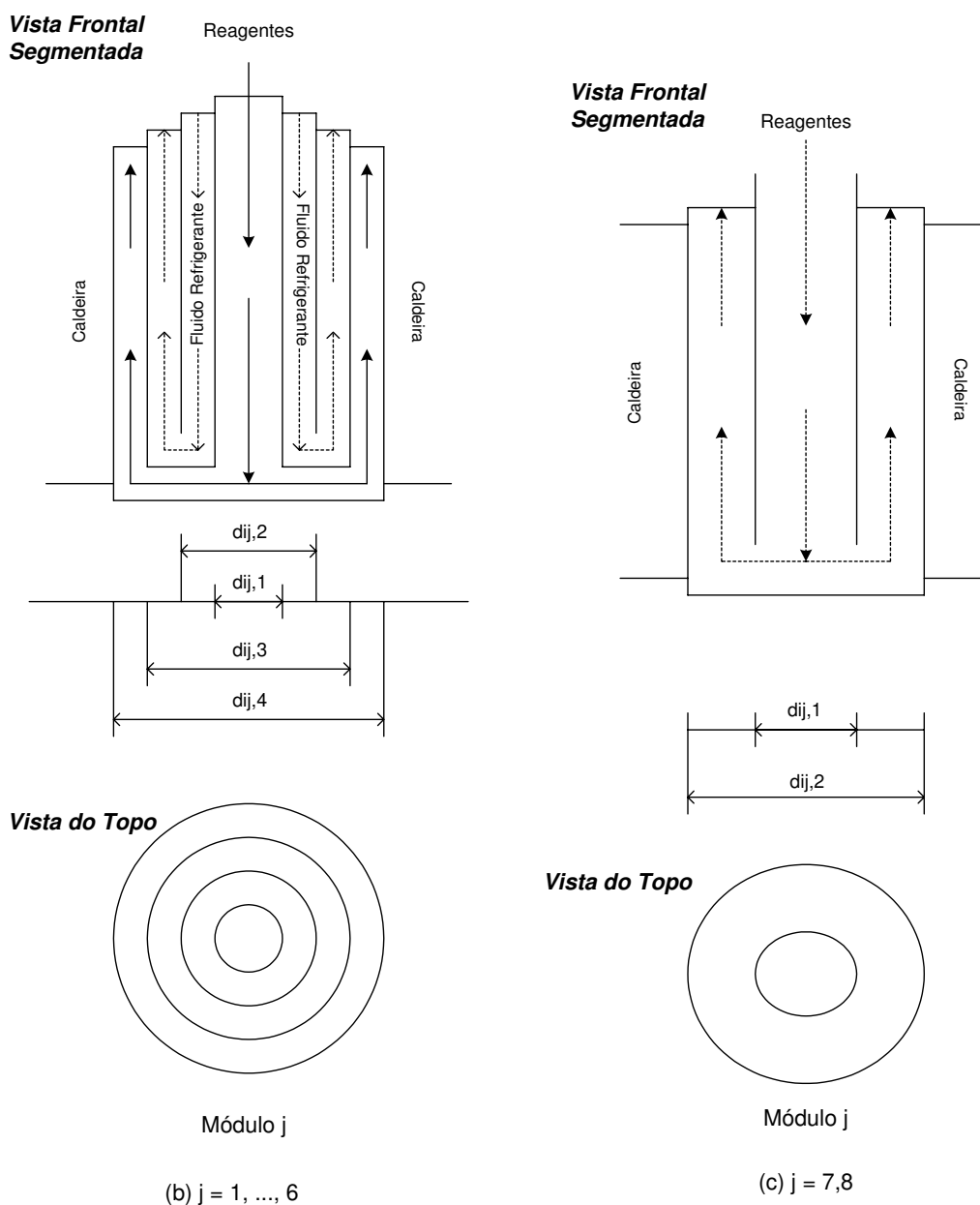


Figura AIII.1 (b e c) - Fluxo material nos módulos tubulares: (b) Os seis primeiros módulos; (c) Os dois últimos módulos.

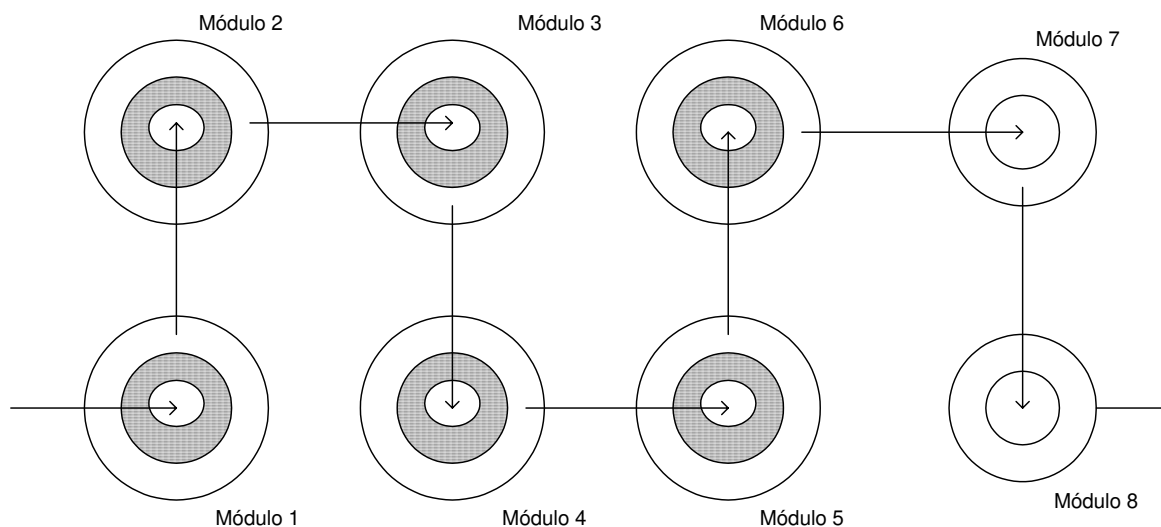


Figura AIII.1(d) - Fluxo material de reagentes e produtos no interior do reator (os módulos que fazem parte do reator).

AIII.3 REATORES TRIFÁSICOS

AIII.3.1 INTRODUÇÃO

Os reatores trifásicos são caracterizados, de acordo com a sua utilização nos processos da indústria química e da modelagem matemática dos processos trifásicos. O reator de Álcool Cíclico é parte fundamental do processo estudado, sendo um tipo específico de reator conhecido na literatura como reator trifásico.

Neste tipo de reatores a caracterização é feita pela presença de pelo menos três fases, que são: uma sólida, uma líquida e uma gasosa. Estas três fases distintas interagem de forma complexa, fazendo-se necessário controlar bem as condições reacionais, visando à obtenção de um desempenho ótimo do reator. As condições ótimas podem ser encontradas através da simulação por modelagem matemática. Deve-se ressaltar novamente, que um reator é um sistema no qual uma fase gasosa e uma líquida estão em contato com um catalisador na fase sólida, de modo que coexistem as três fases. Em muitas aplicações, a reação se dá entre o gás dissolvido e um reagente na fase líquida, na presença do catalisador

sólido. Em outros casos o líquido funciona como um meio inerte, e a reação ocorre na superfície do sólido, entre os gases dissolvidos (Ramachandran e Chaudhari (1983)).

Primeiramente é realizada uma abordagem de alguns aspectos relacionados com a utilização dos reatores trifásicos: os modelos normalmente encontrados nos processos químicos industriais, suas vantagens e desvantagens em relação aos modelos convencionais de reatores (tais como os reatores de leito fixo) e os fenômenos fundamentais que ocorrem em sistemas trifásicos.

AIII.3.2 OCORRÊNCIA DOS REATORES TRIFÁSICOS

Os reatores trifásicos são utilizados em vários processos relativos às indústrias petroquímica, bioquímica e afins havendo uma preferência atual em utilizá-los em comparação com os modelos convencionais (principalmente na indústria química).

O sucesso na modelagem de um reator trifásico está comprometido às considerações adequadas dos fenômenos de transferência de calor e massa, em conjunto com a cinética da reação química envolvida.

Gianetto e Silveston (1986) realizam uma retrospectiva da utilização de reatores multifásicos a partir das primeiras décadas do século XX. Algumas aplicações vêm de antes do início do desenvolvimento da ciência da Engenharia Química.

Santana (1995) ressaltou alguns processos multifásicos tradicionais importantes na indústria química: síntese do butadieno a partir do acetileno (processo reppe, comercializado na Alemanha, na década de 40); hidrogenação de óleos vegetais em reatores de lama (importante processo comercial da indústria de alimentos desde a década de 10);

hidrotratamento de óleos lubrificantes (década de 50); processo de hidrodessulfuração (década de 60).

Ramachandran e Chaudhari (1979) destacam algumas aplicações mais recentes dos reatores trifásicos onde dois gases reagem na presença de um catalisador disperso num meio líquido inerte. São aplicações tais como: remoção de gases poluentes (SO_2 , H_2S) por oxidação numa lama contendo carbono como catalisador; síntese de hidrocarbonetos a partir da reação de CO e H_2 (síntese de Fischer-Tropsch) em um reator de lama na presença de uma suspensão catalítica; hidrogenação de acetileno; oxidação de etileno a óxido de etileno.

Santana (1995) estudou a síntese de Fischer-Tropsch efetuada em reatores na forma de lama (slurry), e alguns trabalhos da literatura apontam algumas vantagens dessa forma de operação comparada ao processo convencional na fase vapor. Atualmente, os reatores catalíticos trifásicos estão sendo utilizados em alguns processos industriais, principalmente nas indústrias alimentícia e petroquímica. Ainda vale a pena lembrar, a aplicação deste tipo de reatores na forma de reator-absorvedor para remoção de poluentes, o que amplia muito sua importância, relacionando-os com a "indústria ambiental", nascida devido à constatação de que a natureza vem sendo fortemente agredida e da percepção da necessidade da implementação de procedimentos na indústria química que garantam o desenvolvimento sustentável. Observa-se, desta forma mais uma das aplicações dos os reatores trifásicos, que possuem um grande potencial nas aplicações de controle ambiental, área que demanda esforços dos profissionais envolvidos com a ciência da Engenharia Química.

Santana (1999) definiu os aspectos fundamentais para o desenvolvimento e aplicações relativos à modelagem e operação de reatores trifásicos de natureza interdisciplinar, necessitando de conhecimentos nas áreas da termodinâmica, catálise, cinética química e fenômeno de transporte, havendo bom domínio tanto da teoria e prática, as quais levam ao desenvolvimento e simplificação das condições ótimas de operação do

reator. Portanto, independentemente do tipo de reator, para realizar um projeto de um reator trifásico necessita-se de conhecer as seguintes questões:

- Transferência de massa e calor;
- Resistência à transferência de massa e calor;
- Difusão interna dos reagentes nas partículas de catalisador sólido;
- Fenômenos de dispersão e de mistura;
- Não-linearidades envolvidas na cinética da reação;
- Mistura das diversas fases em contato;
- “Holdup” das fases e áreas interfaciais;
- Molhabilidade parcial das partículas de catalisador em determinados sistemas;
- Características de escoamento dependentes do projeto e do modo de operação do reator;
- Regime fluidodinâmico;
- Queda de pressão ao longo do reator;
- Distribuição de tempo de residência das fases.

Além destes fatores, a mudança de fase (evaporação) foi verificada recentemente como influir e é de extrema importância no comportamento do reator, Santana (1999). A evaporação dos reagentes químicos e do fluido refrigerante leva a uma mudança brusca no valor do coeficiente de transferência global de calor do reator, promovendo mudanças significativas no comportamento dinâmico do mesmo. Em relação aos aspectos fenomenológicos, muitos avanços importantes ocorreram para compreensão destes, nos sistemas trifásicos, a partir da década de 70 (nos processos de hidrotreatamento empregados nas indústrias do petróleo). Todos os estudos apontam para o desenvolvimento de procedimentos mais racionais para o projeto e a análise dos reatores multifásicos.

Segundo Gianetto e Silveston (1986), o desenvolvimento das pesquisas acerca destes tipos de reatores, tem mostrado a dificuldade de traçar uma história da evolução destes tipos de reatores. Eles citam a afirmação feita por Shah (1979), de que um dos tópicos mais pesquisados na área dos reatores químicos atualmente, é relativo aos problemas que envolvem estes reatores multifásicos. Portanto, os diversos trabalhos e estudos envolvendo reatores trifásicos têm sido conduzidos por importantes grupos de pesquisa, tanto em universidades e importantes companhias industriais. Desde a década de 80, o número de trabalhos publicados é bastante significativo. Entretanto, estudos relacionados ao comportamento dinâmico não isotérmico destes reatores ainda são poucos encontrados na literatura.

AIII.3.3 TIPOS DE REATORES TRIFÁSICOS

Os principais tipos de reatores trifásicos são descritos por Ramachandran e Chaudhari (1983), Gianetto e Silveston (1986) e Santana (1995; 1999), indicando os principais aspectos relacionados com a operação de tais sistemas; e também indicam onde um dado tipo encontra melhor aplicação (adequação para determinadas reações industriais). A classificação destes reatores ocorre em duas categorias principais:

- Reatores onde o catalisador sólido está suspenso e em movimento;
- Reatores com leito fixo de catalisador sólido.

Uma descrição sucinta dos principais tipos de reatores trifásicos é apresentada a seguir. Detalhes podem ser encontrados em Gianetto e Silveston (1986).

AIII.3.3.1 REATORES COM SÓLIDOS EM MOVIMENTO

Reator de Lama Agitado: Na prática industrial, é o tipo encontrado com mais frequência. É utilizado em processos de hidrogenação, halogenação e oxidação, sendo também empregado largamente nos processos bioquímicos. Pode ser operado em batelada ou continuamente. Partículas sólidas de cerca de 0.1 mm de diâmetro com concentrações na ordem de gramas/litro são mantidas em suspensão na fase líquida por meio de agitação mecânica ou simplesmente pelo borbulhamento do gás. Este tipo de reator é caracterizado por uma baixa razão comprimento/diâmetro. Como pode ser visto na Figura AIII.2.

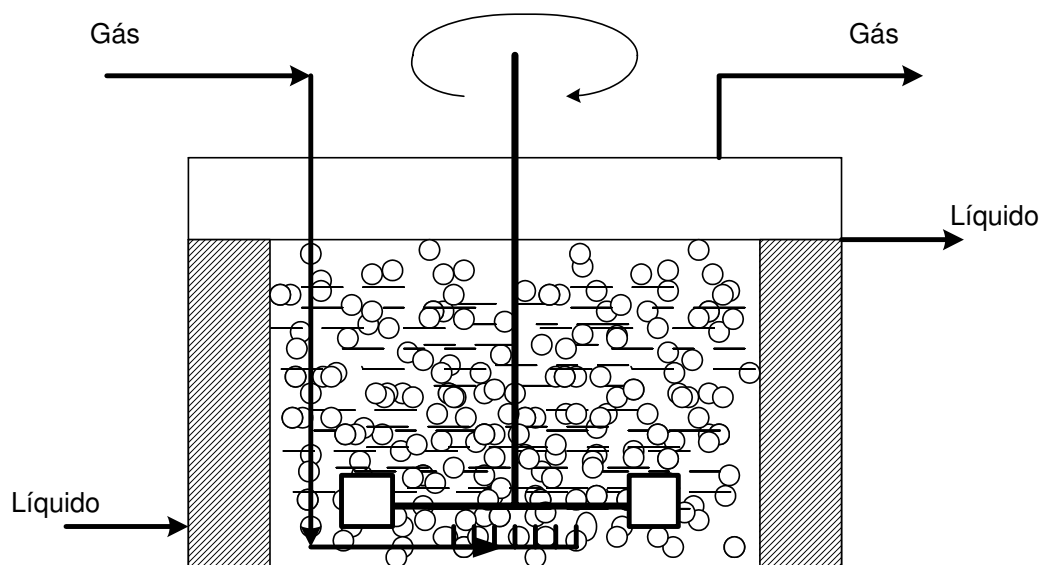


Figura AIII.2 - Representação de um reator de lama agitado (baseado em Villalba (2002)).

Reator Coluna de Bolhas e Lama: Neste tipo de reator as partículas do sólido são suspensas por turbulência induzida, causada pela elevação das bolhas do gás, o qual é alimentado no fundo do reator. A mistura neste tipo de reator é menos intensa, comparando-se com os reatores mecanicamente agitados, e a razão comprimento/ diâmetro é bem maior.

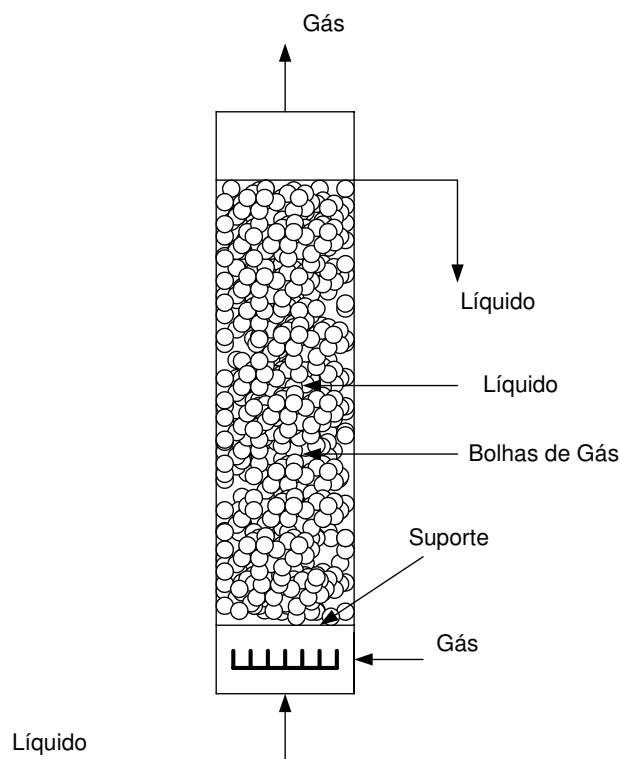


Figura AIII.3 - Representação o reator coluna de bolhas e lama (baseado em Villalba (2002)).

Reator Trifásico de Leito Fluidizado: Neste tipo de reator as partículas são suspensas devido ao movimento ascendente de ambas as fases. O tamanho das partículas é bem maior comparado ao do tipo coluna de bolhas, de modo a permitir uma velocidade razoável do líquido. A velocidade de ascensão do líquido deve ser menor que a velocidade de sedimentação (terminal) das partículas, a fim de evitar o arraste destas para fora do reator (no entanto, essa situação pode ser mantida, ocasionalmente, caso se deseje uma remoção parcial do catalisador quando este precisa ser regenerado frequentemente).

Estes reatores são caracterizados por uma maior razão comprimento/diâmetro comparando-se àquela encontrada nos reatores agitados mecanicamente. A Figura AIII.4 exemplifica esse tipo de reator.

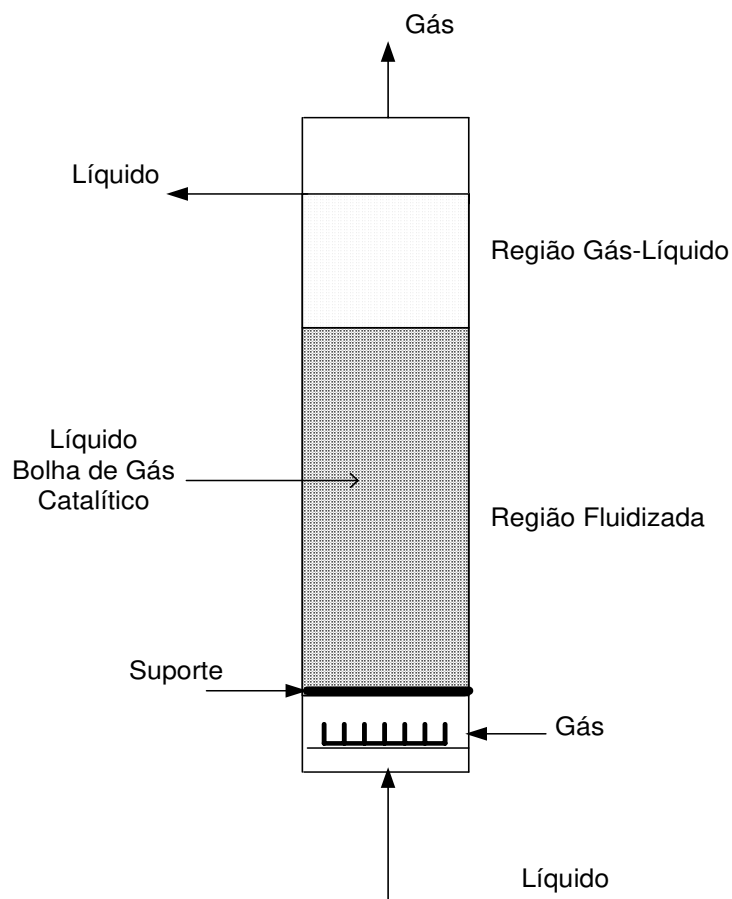


Figura AIII.4 - Representação e um reator trifásico de leito fluidizado (Villalba (2002)).

AIII.3.3.2 REATORES COM SÓLIDOS ESTACIONÁRIOS

Reator de Leito Fixo Submerso com Borbulhamento de Gás: Num reator deste tipo o gás move-se para cima na forma de bolhas discretas, através de um leito fixo de partículas cheio de líquido. O diâmetro das partículas sólidas varia em geral de 1 a 5 mm, sendo consideravelmente maior que os tamanhos encontrados nos reatores onde há movimentação do sólido. Estes reatores são sempre operados continuamente, e são empregados preferencialmente quando se deseja um bom molhamento do catalisador, garantindo-se alta eficiência da reação, seletividade e estabilidade térmica; possíveis de serem alcançados quando a difusão intrapartícula não é processo significativamente importante. Na Figura AIII.5 apresenta esse tipo de reator.

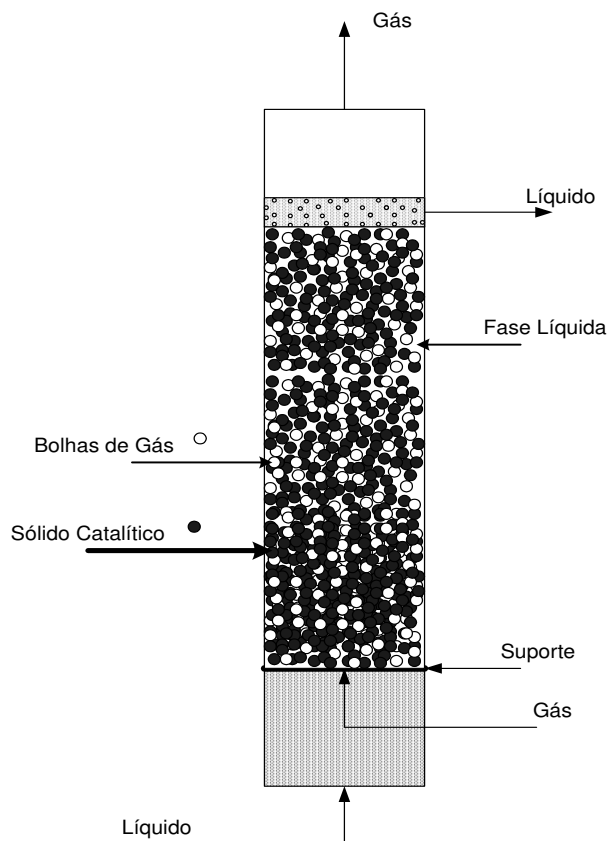


Figura AIII.5 - Representação de um reator de leito fixo submerso (Villalba (2002)).

Reator em Leito Gotejante (Trickle Bed Reactor): Neste tipo de reator as fases gasosa e líquida fluem descendentemente através de um leito estacionário de partículas de catalisador. A fase líquida flui na forma de filme. A velocidade superficial do gás é da ordem de 0.1 a 0.3 m/s; baixa o suficiente para o molhamento externo das partículas de catalisador. Há uma tendência recente para a adoção de velocidades mais altas das fases fluidas, o que proporciona melhor molhamento do sólido e mais altos coeficientes de transferência de massa entre o meio reagente e a partícula. A Figura AIII.6 descreve este tipo de reator.

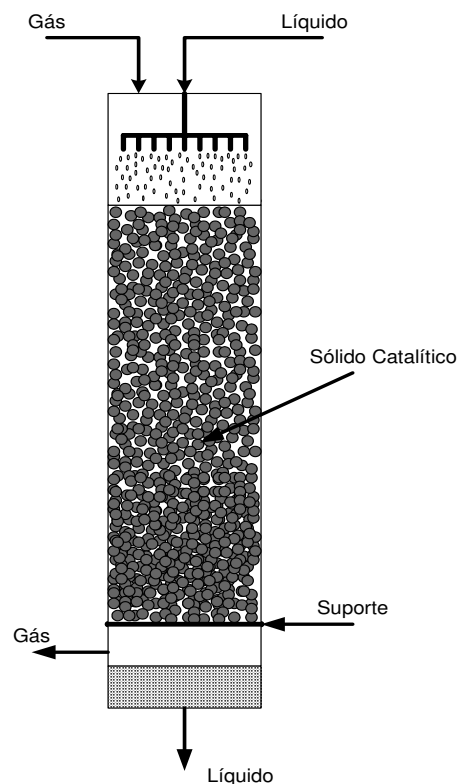


Figura AIII.6 - Representação de um reator de leito gotejante (baseado em Villalba (2002)).

AIII.3.4 COMPARAÇÃO ENTRE REATORES COM PARTÍCULAS ESTACIONÁRIAS E COM PARTÍCULAS EM MOVIMENTO

Ramachandran e Chaudhari (1983) fornecem uma comparação destas duas categorias principais de reatores trifásicos, abordando aspectos ligados à taxa global de reação, transferência de calor e massa, e manipulação do catalisador.

Devido à natureza altamente heterogênea de um sistema trifásico, um grande número de passos devem ser completados antes que as espécies reagentes possam ser convertidas em produtos. Os principais passos envolvidos são: transferência de massa do gás para o líquido, transferência de massa do líquido para a superfície do catalisador, e difusão dentro dos poros do catalisador acompanhado pela reação química. Invariavelmente, a taxa global de reação em reatores trifásicos é limitada por estes fatores.

As taxas dos processos de transferência de massa (especialmente quando a difusão intrapartícula é considerada) são comumente mais rápidas em reatores de lama que em reatores de leito fixo. Isto ocorre porque pequenas partículas podem ser usadas em reatores de lama, o que garante taxas de difusão líquido-sólido e de difusão intrapartícula mais altas, conduzindo a uma utilização mais efetiva do catalisador.

A carga de catalisador (quantidade por unidade de volume do reator) é, no entanto, menor em sistemas de lama. Como a taxa de reação é também proporcional à carga de catalisador, a taxa de reação por unidade de volume do reator é maior em reatores de leito estacionário.

Além da transferência de massa, a taxa de reação é também influenciada pela maneira como as fases gasosa e líquida são contatadas. São possíveis duas situações extremas: fluxo empistonado (plug-flow) e mistura perfeita (backmixing). Em fluxo empistonado a concentração de um reagente decresce monotonicamente da entrada para a saída do reator, enquanto num reator de mistura perfeita a concentração é a mesma através de todo o reator e igual à da saída. Nota-se que mistura perfeita geralmente diminui o desempenho do reator.

Em um reator de lama a fase líquida é geralmente bem misturada, ao passo que, em um reator com leito fixo, o comportamento do fluxo do líquido aproxima-se do modelo empistonado. Assim, se deseja uma alta conversão do reagente líquido, deve-se dar preferência à operação com leitos fixos ao invés dos reatores de lama.

Tabelas indicando vantagens e desvantagens destas duas classes de reatores trifásicos, bem como critérios que permitem a escolha de um dado tipo de operação para os reatores de leito fixo, podem ser encontrados na literatura (Gianetto e Silveston (1986)).

No que diz respeito à transferência de calor, nota-se que esta é mais eficiente em reatores de lama que em reatores com leito fixo, de modo que o controle de temperatura é mais fácil nos primeiros. Isto conduz a temperaturas uniformes nas partículas de catalisador, o que elimina a formação de pontos quentes ("hot spots"). O alto "holdup" de líquido em reatores de lama também facilita o melhor controle da temperatura, graças à alta capacidade calorífica da fase líquida (Ramchandran e Chaudhari (1983)).

A separação do catalisador apresenta dificuldades na operação contínua de reatores de lama, sobretudo devido aos problemas de filtração, ao passo que em reatores de leito fixo este problema não é encontrado. No entanto, a manipulação do catalisador é mais fácil em reatores de lama, comparando-se aos de leito fixo, devido ao estado suspenso das partículas. Para processos onde remoção freqüente e substituição do catalisador devem ser efetuadas os reatores com leito fixo são inadequados, pois a substituição do catalisador normalmente requer a interrupção e a desmontagem do reator (Ramachandran e Chaudhari (1983)).

AIII.3.5 VANTAGENS E DESVANTAGENS DOS REATORES TRIFÁSICOS

Em alguns processos de Engenharia Química torna-se impossível à operação em fase homogênea, o que ocorre devido à impossibilidade de elevar-se a temperatura num nível tal a manter todas as substâncias na fase gasosa ou elevar-se a pressão de modo a mantê-los na fase líquida, ou ainda quando se deseja facilitar a manipulação do catalisador. É exatamente nestes casos que surgem os sistemas trifásicos.

Nos processos da indústria química, em geral, temperaturas baixas são desejáveis, havendo mesmo uma forte tendência no desenvolvimento de processos cujas temperaturas e pressões sejam as mais baixas possíveis.

Dentro destas diretrizes pode-se incluir a utilização dos reatores trifásicos, aos quais são apontadas as seguintes vantagens:

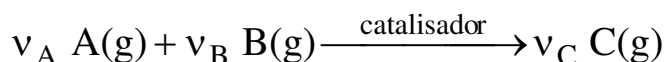
- Economia de energia (por operarem em mais baixas temperaturas);
- Prevenção de perda de reagentes e/ou produtos termosensíveis;
- Prevenção de perda de catalisador e/ou suporte (sobretudo no que diz respeito aos sistemas em que ocorrem reações enzimáticas);
- Melhor seletividade, devido à eliminação de reações laterais pela ação dissolvente do líquido e pela ocorrência de temperaturas mais baixas;
- Alta efetividade catalítica, pois é possível trabalhar com partículas de dimensões reduzidas;
- Melhor controle de temperatura (com a eliminação de pontos quentes), devido às maiores condutividade térmica e capacidade calorífica do líquido;
- Flexibilidade de projeto, permitindo maior liberdade na escolha das formas geométricas dos equipamentos e dos parâmetros de operação.

Como principais desvantagens dos reatores trifásicos são apontados o aumento da resistência à transferência de massa (devido sobre tudo à baixa difusividade em líquidos), o decréscimo da taxa de reação química (porque temperaturas menores são utilizadas) e também as baixas solubilidades em líquidos.

AIII.3.6 FENÔMENOS FUNDAMENTAIS EM REATORES TRIFÁSICOS

Um reator trifásico é um sistema altamente heterogêneo, uma vez que os reagentes são alimentados em diferentes fases. Portanto, um sistema deste tipo caracteriza-se por um certo número de passos envolvendo transferência de calor e massa, os quais podem afetar seriamente o comportamento e o desempenho do reator.

Nos reatores trifásicos comumente encontrados na prática a reação que ocorre pode ser representada pelo seguinte esquema:



As espécies reagentes A, estão presentes na fase gasosa, enquanto as espécies B, estão presentes na fase líquida, sendo que a reação tem lugar à superfície do catalisador sólido. Na equação, v_i representa o coeficiente estequiométrico de cada espécie.

Pode ocorrer, em alguns casos, que ambos os reagentes (A e B) estejam presentes na fase gasosa (o que é o caso, por exemplo, da síntese de metanol pelo processo Fischer-Tropsch e da oxidação de dióxido de enxofre em um meio aquoso com um catalisador de carbono ativado).

Os passos que ocorrem antes que as espécies presentes na fase gasosa possam ser convertidas em produtos sobre os sítios ativos do catalisador são as seguintes (Ramachandran e Chaudhari (1983)):

- Transporte de A da fase gasosa para a interface gás-líquido;
- Transporte de A da interface gás-líquido para o líquido;
- Transporte de A e B do líquido para a superfície do catalisador;
- Difusão interna dos reagentes nos poros do catalisador;
- Adsorção dos reagentes sobre os sítios ativos do catalisador;
- Reação das espécies adsorvidas com formação dos produtos;
- Desorção dos produtos formados e reagentes que não reagiram.

A Figura AIII.7 representa um esquema com os gradientes de concentração em um sistema trifásico. No caso de reações reversíveis e de produtos voláteis, devem ser considerados passos adicionais, tais como, desorção e transporte dos produtos no sentido contrário ao dos reagentes. Tudo isto pode tornar muito mais complexa a análise dos fenômenos que ocorrem em um reator trifásico.

A fim de se estudar o desempenho de um reator trifásico, faz-se necessária uma análise minuciosa destes processos, bem como, a solução de equações que predigam o efeito da transferência de massa sobre a taxa de reação (Ramachandran e Chaudhari (1983)).

Para que se possa fazer uma estimativa da taxa de reação é necessário o conhecimento da cinética intrínseca da reação, assim como, das taxas de transferência de massa dos reagentes envolvidas.

As solubilidades das espécies gasosas no líquido são parâmetros que têm também uma grande importância na análise de reatores trifásicos. Em geral considera-se a solubilidade do gás no líquido como sendo quantificada pela lei de Henry. Isto significa supor que existe equilíbrio termodinâmico na interface líquido-gás.

A lei de Henry é uma das formas preferidas para expressar a solubilidade de um gás em um líquido. Esta lei estabelece que a solubilidade do gás é proporcional a sua pressão parcial, representada da seguinte forma:

$$p_A = H A^* \quad (\text{AIII.1})$$

onde p_A é a pressão parcial do gás sobre o líquido (ou solução) em equilíbrio com a concentração A^* do soluto no líquido, e H é a constante da lei de Henry.

Embora as constantes da lei de Henry sejam meios adequados de se correlacionar os dados de solubilidade para diversos sistemas, deve-se ter em mente que a lei de Henry é uma lei válida para soluções ideais, aplicada apenas a uma faixa de soluções diluídas. A constante da lei de Henry, em geral, depende fortemente da temperatura, aumentando esta, corresponde a um decréscimo da solubilidade do gás.

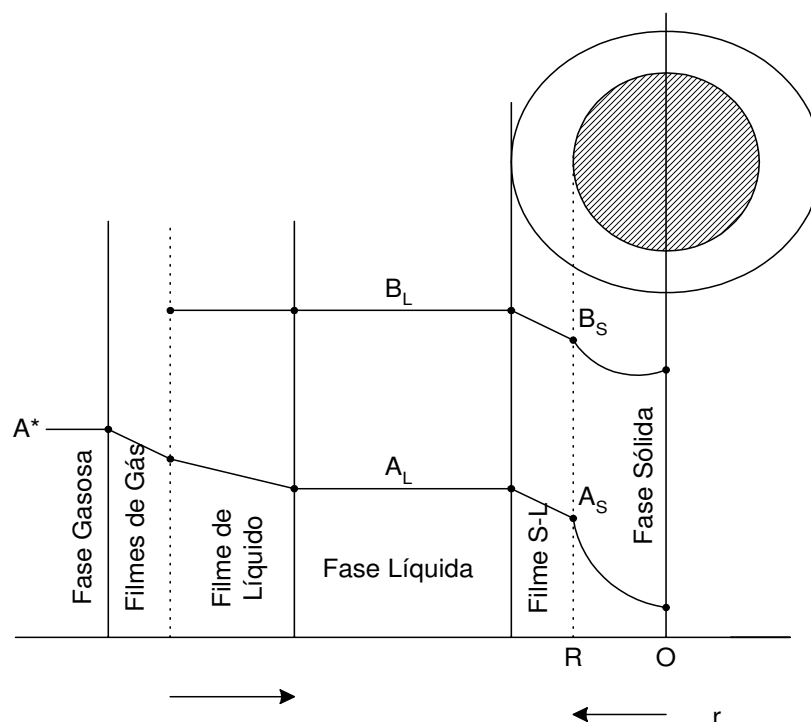


Figura AIII.7 - Representação dos gradientes de concentração em um sistema trifásico.

As taxas de transferência de massa dependem do tipo, geometria, e tamanho do reator, assim como do tamanho das partículas de catalisador e das condições de operação, dentre outras variáveis do sistema que influenciam os fenômenos de transporte.

Segundo Gianetto e Silveston (1986), é necessário muita habilidade para estimar as concentrações de reagentes e produtos, temperatura e distribuição de catalisador ativo dentro do reator a fim de que possam ser encontrados meios que garantam a otimização tanto da conversão como da seletividade.

O projeto de um reator trifásico requer, de um modo geral, independentemente do tipo de reator em questão, o conhecimento das seguintes condições (Gianetto e Silveston (1986)):

- Regimes de fluxo e hidrodinâmica;
- Queda de pressão ao longo do reator;
- Holdup das fases e áreas interfaciais;
- Resistências à transferência de massa e calor;
- Fenômenos de dispersão e de mistura;
- Distribuição de tempo de residência das fases e fenômenos de agregação.

Entende-se por fenômenos de agregação aqueles associados ao grau de micromistura entre as moléculas das espécies reagentes.

Os fenômenos envolvidos nos sistemas trifásicos são inúmeros e bastante complexos, de modo que a modelagem matemática com base em princípios e equações básicas da engenharia química constitui uma tarefa de difícil empreendimento.

AIII.3.7 MODELAGEM MATEMÁTICA DE REATORES TRIFÁSICOS

Grande parte dos trabalhos sobre reatores trifásicos, apresentados na literatura, está relacionada com estudos cinéticos de reações químicas que ocorrem em sistemas trifásicos, em que o principal interesse é o estabelecimento de uma equação para a taxa intrínseca de reação. Podem ser citados os seguintes trabalhos, por exemplo:

- Hidrogenação de compostos fenólicos catalisados por paládio (Zwicky e Gut, 1978);

- Cinética de hidrogenação do Thymol em $\text{Ni-Cr}_2\text{O}_3$ em Santana e Maciel (1999);
- Oxidação de soluções aquosas de ácido acético, catalisada por CuO-ZnO (Levec e Smith (1975));
- Síntese de butenadiol (Kale e Ramachandran (1981));
- Hidrogenação do o-cresol, catalisada por Ni-SiO_2 (Hichri et al. (1994)) em Santana e Maciel (1999);
- Hidrogenação de 1-5-9-ciclododecadieno (Delmas et al. (1995));
- Hidrogenação seletiva de fenilacetileno a estireno, catalisada por $\text{Pd-Al}_2\text{O}_3$ (Mochizuki e Matsui (1976));
- Oxidação de etanol na fase líquida, catalisada por $\text{Pd-Al}_2\text{O}_3$ (Hsu e Ruether (1978)).

Outros estudos sobre reatores trifásicos que aparecem com frequência na literatura estão ligados ao problema da transferência de massa, analisando seu efeito sobre o desempenho global do reator, visando ao estabelecimento de correlações que permitam uma predição segura dos coeficientes de transferência de massa gás-líquido e líquido-sólido, dentre os quais podem ser citados:

- Estudo do papel da transferência de massa em reações de hidrogenação em reatores de lama, Goto et al. (1976);
- Estudo dos efeitos da transferência de massa e da reação química na remoção de poluentes em reatores-absorvedores de lama trifásicos, Sylvester et al. (1979).

No que concerne à modelagem matemática de reatores trifásicos contínuos os modelos existentes são relativamente em pequeno número, quase sempre aplicados a tipos cinéticos de reações mais simples, que permitem, comumente, uma solução analítica. De modo geral são considerados modelos isotérmicos.

Os estudos sobre a modelagem matemática de reatores trifásicos concentram-se sobre tudo nos três tipos mais utilizados nos processos industriais, que são: reatores de lama (slurry reactors), reatores de leito gotejante (trickle bed reactors) e reatores de coluna de bolhas e lama (bubble column slurry reactors).

Shah (1979), Rodrigues et al. (1981), Ramachandran e Chaudhari (1983) e Gianetto e Silveston (1986) e Deckwer (1992) apresentam extensas abordagens, onde estão reunidos os principais resultados obtidos por diversos pesquisadores, sobre a modelagem matemática e o projeto de reatores catalíticos trifásicos.

Satterfield (1975) apresenta um importante artigo de revisão sobre reatores em leito gotejante. É feita uma comparação destes com os demais tipos de reatores trifásicos. Correlações para coeficientes de transferência de massa e cinéticos com base em experimentos sobre a oxidação de soluções aquosas de ácido fórmico.

Goto e Smith (1978) fazem um estudo comparativo do desempenho de reatores em leito gotejante e reatores de lama, utilizando um modelo cinético de primeira ordem para a oxidação de dióxido de enxofre. Consideram-se apenas os balanços de massa, de modo que uma solução analítica é obtida.

Chaudhari e Ramachandran (1980) apresentam uma compilação sucinta dos principais resultados existentes na literatura com relação aos reatores de lama (slurry reactors). É feita uma análise teórica geral da predição de taxas globais dos diversos tipos de cinéticas em reatores de lama, com a incorporação de todos os efeitos de transporte. Algumas das principais correlações que podem ser usadas para a predição dos coeficientes de transferência de massa gás-líquido e líquido-sólido são revistas; e por fim é feita uma comparação entre os reatores de lama e demais tipos de reatores trifásicos, apontando-se suas vantagens e desvantagens.

Alper et al. (1980) estudou o mecanismo de absorção de gás em reatores catalíticos; Chaudhari e Gholap et al. (1987) estudou o mecanismo de transferência de massa gás-líquido em reatores tipo autoclave e Bang et al. (1998) estudou a transferência de massa gás-líquido em um reator agitado do tipo airlift.

Deckwer e Schumpe (1993) apresentam os principais resultados existentes na literatura sobre os reatores coluna de bolhas e lama (bubble column slurry reactors). É feita uma comparação das principais correlações para o cálculo dos coeficientes de transferência de massa e de mistura (dispersão axial), com recomendações específicas para sua utilização. Os autores mostram um diagrama esquemático onde se relacionam os principais fenômenos que devem ser considerados na modelagem e no projeto de reatores coluna de bolhas e lama.

Com a utilização crescente de reatores trifásicos (processos conduzidos em temperaturas mais baixas) têm surgido trabalhos sobre a modelagem matemática de tais sistemas, onde a preocupação básica é o desenvolvimento de modelos com base em princípios fundamentais (balanços de massa, energia e momentum).

Uma aproximação que tem sido adotada em alguns casos que é a utilização de modelos de células de mistura, em que se visualiza o reator como consistindo de uma série de reatores idealizados, mais facilmente tratáveis, e com a possibilidade da incorporação de maiores complexidades fenomenológicas sem o aumento das dificuldades matemáticas para a solução do modelo.

Ramachandran e Smith (1979) apresentam pela primeira vez um modelo de células de mistura em série para um reator em leito gotejante, mostrando a utilidade desta nova aproximação com a aplicação à oxidação do ácido fórmico.

Torvik e Svendsen (1990) apresentam um modelo matemático para reatores do tipo tanque agitado e do tipo coluna de bolhas, baseado em princípios fundamentais, onde os parâmetros são de natureza fundamental, podendo sempre ser obtidos da literatura geral sobre fluido-dinâmica. Eles apontam, também, a importância da modelagem matemática como passo valioso, pois os modelos mais comuns para os reatores trifásicos usam predominantemente informações de cunho empírico, obtidos a partir de experimentos em escala piloto, o que torna, em princípio, o projeto bastante difícil, com complicações para a realização de ampliações de escala (scale-up).

Turner e Mills (1990) apresentam uma comparação entre um modelo de dispersão axial e um modelo de células de mistura, para o projeto e a simulação de um reator coluna de bolhas e lama, aplicados à reação Fischer-Tropsch.

Até pouco tempo atrás poucos modelos consideravam o comportamento não-isotérmico dos sistemas trifásicos. Em geral tratavam-se apenas das equações que expressam os balanços de massa e modelos em que aparece uma equação para o fluido refrigerante não eram encontrados na literatura.

Öztürk et al. (1988) e Kodra e Levec (1991) apresentam modelos para a síntese de metanol na fase líquida (reator em leito gotejante e reator coluna de bolhas e lama), onde o balanço de energia é levado em conta e o sistema é considerado adiabático, e Turner e Mills (1990) apresentam um modelo não-isotérmico para a reação de Fischer-Tropsch, onde se considera a transferência de calor para a parede dos tubos com uma temperatura de parede constante.

Com relação à modelagem matemática de reatores trifásicos contínuos, os modelos são relativamente simples em pequeno número, e são quase sempre aplicados a tipos cinéticos de reações mais simples que permitem, geralmente, uma solução analítica das equações do modelo. Além disso, de um modo geral, são considerados quase sempre modelos isotérmicos.

Ramachandran e Chaudhari (1983) apresentam um trabalho extenso sobre modelagem matemática e projeto de reatores catalíticos trifásicos, onde estão reunidos os principais resultados obtidos por diversos pesquisadores.

A grande maioria dos trabalhos publicados sobre modelagem de reatores trifásicos considera apenas o balanço de massa, não leva em conta o balanço de energia, considerando o sistema como isotérmico.

A utilização crescente de reatores trifásicos tem feito surgir alguns trabalhos sobre sua modelagem matemática de reatores trifásico levando em conta o balanço de massa e energia. Santana e Maciel (1999) apresentam um trabalho extenso sobre a modelagem matemática de reatores de lama trifásicos, onde se desenvolvem e analisam-se alguns modelos determinísticos para a descrição dos fenômenos mais importantes que ocorrem neste sistema. Nos modelos são consideradas as equações que descrevem os balanços de massa e energia levando em conta a presença do sistema de refrigeração. Os resultados são discutidos a partir de um estudo de caso que considera a reação de hidrogenação catalítica do o-cresol. Ultimamente modelos abordando tanto o balanço de energia para o fluido reagente e refrigerante, como o comportamento dinâmico dos reatores trifásicos são encontrados na literatura, embora a quantidade destes artigos seja ainda muito inferior aos reatores bifásicos.

Apêndice IV

Rotinas e Sub-Rotinas do Código Genético

AIV.1 ROTINAS E SUB-ROTINAS

Neste tópico são apresentadas as rotinas e sub-rotinas do código genético de David L. Carroll (2004) (<http://cuaerospace.com/carroll/ga.html>).

Sub-rotinas do Código Genético

code	Codifica o valor de ponto flutuante para série binária.
crosovr	Executa o crossover (ponto único ou uniforme).
decode	Decodifica a série binária para o valor em ponto flutuante.
evalout	Evolui o fitness de cada indivíduo e as informações de saídas das gerações para o arquivo “ga.out”.
func	A função que está sendo avaliada.
gamicro	Implementa a técnica micro-GA.
input	Entrada de informações do arquivo “ga.inp”.
initial	Inicialização do programa e entrada das informações do arquivo “ga.restart”.
mutate	Executa o operador de mutação (Comum e/ou Arraste).
newgen	Escreve a matriz de descendentes novamente dentro da matriz dos pais para uma nova geração; também verifica se o melhor indivíduo foi replicado (elitismo).
niche	Executa a oeração em nichos na população.
possibl	Verifica se a série binária decodificada fica dentro da faixa especificada entre o valor mínimo e máximo do parâmetro.
ran3	Gerador de números aleatórios.
restart	Escreve o arquivo “ga.restart”.
select	Uma sub-rotina de “selectn”.

selectn	Executa a seleção; seleção por torneio é a única opção nesta versão do código.
shuffle	Mistura (embaralha) a população aleatoriamente para a seleção.

Definições das Variáveis de Entrada de Dados

icreep	= 0 para não utilização da mutação de arraste; = 1 para utilização da mutação de arraste (recomendado).
idum	É o iniciador (semente) do número aleatório para execução do AG. Deve ser um inteiro negativo, idum = -1000.
ielite	= 0, para não utilização do elitismo (melhor indivíduo não é necessariamente replicado de uma geração para a próxima); = 1, para utilização do elitismo (melhor indivíduo é replicado para próxima geração – recomendado).
iend	= 0, para execução normal do AG (é o padrão). Número de membros da última população para ser considerada em um conjunto de indivíduos. Ajustando iend=0, é somente usado para propósitos de debugging e é comumente usado em conjunção com o iskip.
iniche	= 0, para não utilização de nichos; = 1, para utilização de nichos (nichos são recomendados).
irestrt	= 0, para uma nova execução do AG, ou para uma avaliação de uma função individual; = 1, para reiniciar a continuação da execução do AG.
iskip	= 0, para execução normal do AG (é o padrão). Número na população para considerar um indivíduo específico ou um conjunto de indivíduos. Ajustando iskip=0 só se usa para determinação de debugging.
itourny	Nenhuma extensão é usada. O AG é ajustado para seleção de torneio.
iunifrm	= 0, para crossover em ponto individual ou único ponto; = 1, para crossover uniforme (este é recomendado).
kountmx	O valor máximo de contagem antes de um novo arquivo restart (de reinício) é escrito. Escreve a quinta geração completa. Aumentando este valor reduz-se o tempo requerido I/O e reduz o consumo em seu padrão de estoque.
maxgen	O máximo número de gerações executadas pelo AG. Para uma avaliação de uma função individual simples, ajustar igual a 1.
microga	= 0, para operação normal do AG convencional; = 1, para a operação micro-GA (esta, automaticamente reajusta alguns dos outros sinais de entrada). Recomenda-se usar npopsiz = 5, quando microga=1.
nchild	= 1, para um descendente (filhos) por par de pais (usado pelo autor). = 2, para dois descendentes por par de pais (2 é mais comum em trabalhos de AG).
nichflg	Representa a matriz de sinais de entrada 1/0 para a ocorrência de niching em um particular parâmetro. Ajustar 0 para não ocorrência de niching, ou ajustar em 1 para niching operar em

	um parâmetro. A implementação de niching é controlada pelo sinal de entrada iniche.
nowrite	= 0, para escrever a mutação em detalhes e o ajuste de parâmetros; = 1, para não escrever a mutação em detalhes e o ajuste de parâmetros.
nparam	Número de parâmetros (grupos de bits) de cada indivíduo. Representação segura que o nparam sure that nparam une o número de valores das entradas das matrizes parmin, parmax e nposibl.
npopsiz	O tamanho da população de uma execução do AG. Para um cálculo simples, ajustar igual a 1.
nposibl	Equivale a uma matriz de número inteiro de possibilidades por parâmetro. Para uma ótima eficiência do código ajustar nposibl=2**n, i.e. 2, 4, 8, 16, 32, 64, etc.
parmax	Equivale a matriz de valores máximos permitidos dos parâmetros.
parmin	Equivale dos valores mínimos permitidos dos parâmetros.
pcreep	A probabilidade da mutação de arraste. Tipicamente esse valor é ajustado para (nchrome/nparam)/npopsiz.
pcross	A probabilidade de crossover. Para crossover em um ponto o valor recomendado é de 0.6 ou 0.7. Para crossover uniforme o valor sugerido é de 0.5.
pmutate	A probabilidade de mutação de salto (simples ou jump). Tipicamente é ajustado para 1/npopsiz.

Definições das Variáveis do Código

best	Equivale ao melhor fitness (ajuste) da geração.
child	Equivale a matriz do parâmetro em ponto flutuante dos descendentes.
cpu	Equivale ao tempo de cálculo da CPU.
cpu0,cpu1	Equivale aos tempos associados com o “etime” função de cronometragem.
creep	Equivale a +1 ou -1, indicando qual a direção o parâmetro se arrasta.
delta	= del/nparam
difffrac	Equivale a fração do número total de bits que são diferentes entre o melhor e o resto da população do micro-GA. A convergência da população converge arbitrariamente com um ajuste de difffrac<0.05.
evals	Equivale ao número de avaliações da função.
fbar	Equivale ao fitness médio da população.
fitness	Equivale a matriz dos fitness dos progenitores.
fitsum	Equivale a soma dos fitness dos progenitores.
genavg	Equivale a matriz dos valores de fitness médio para cada geração.
geni	Equivale a matriz geração
genmax	Equivale a matriz dos valores de fitness máximo para cada geração.
g0	Equivale aos valores limites inferiores da matriz dos parâmetros a ser otimizada. O número de parâmetros na matriz que deveria se igualar ao conjunto de dimensões nos parâmetros declarados acima.
g1	Equivale ao incremento pelo qual a matriz parâmetro é aumentada dos valores dos limites

	inferiores na matriz g0. O valor mínimo do parâmetro is g0 e o valor máximo do parâmetro igual a $g0 + g1 * (2^{ig2} - 1)$, isto é, g1 é o valor incremental entre o mínimo e máximo.
ig2	Equivale a matriz do número de bits por parâmetro, isto é, o número de valores possíveis por parâmetro. Por exemplo, $ig2 = 2$ é equivalente a 4 ($=2^{ig2}$) possibilidades, $ig2=4$ é equivalente a 16 ($=2^{ig2}$) possibilidades.
ig2sum	Equivale a soma dos números de possibilidades da matriz ig2.
ibest	Equivale a matriz binária de cromossomos do melhor indivíduo.
ichild	Equivale a matriz binária de cromossomos dos descendentes.
icount	Equivale ao contador do número de diferentes bits entre o melhor indivíduo e outros membros da população micro-GA.
icross	Equivale ao ponto de corte de crossover no crossover de um ponto.
indmax	Equivale ao máximo número de indivíduos permitidos, isto é, o tamanho máximo da população.
iparent	Equivale a matriz binária de cromossomos dos progenitores.
istart	Equivale a geração a ser iniciada a partir de um ponto.

Definições das Variáveis do Código

jbest	Equivale ao membro na população com o melhor fitness.
jelite	Equivale ao contador o qual rastreia o número de bits de um indivíduo que se une aqueles do melhor indivíduo.
jend	Equivale ao uso em conjunção com o iend para debugging
jstart	Equivale ao usado em conjunção com o iskip para debugging
kount	Equivale ao contador que controla como freqüentemente o arquivo restart é escrito.
kelite	Equivale ao ajuste kelite para a unidade quando jelite = nchrome, indica que o melhor progenitor foi replicado entre os descendentes.
mate1	Equivale ao número de membros da população escolhidos como mate1.
mate2	Equivale ao número de membros da população escolhidos como mate2.
nchrmax	Equivale ao número máximo de cromossomos (bits binários) por indivíduo.
nchrome	Equivale ao número de cromossomos (bits binários) de cada indivíduo.
ncreep	Equivale ao número de mutações de arraste que ocorreram durante a reprodução.
nmutate	Equivale ao número de mutações jump que ocorreram durante a reprodução.
npamax	Equivale ao número máximo de parâmetros que compõem os cromossomos.
paramav	Equivale a média de cada parâmetro na população.
paramsm	Equivale a soma de cada parâmetro na população.
parent	Equivale a matriz do parâmetro em ponto flutuante dos progenitores.
pardel	Equivale a matriz da diferença entre o parmax and parmin
rand	Equivale ao valor do número aleatório atual.
npossum	Equivale a soma do número de valores possíveis de todos os parâmetros.

tarray	Equivale a matriz do tempo usada com a função de cronometragem “etime”.
time0	Equivale ao tempo do relógio no início da execução.