

UM ALGORITMO PARA A OTIMIZAÇÃO DA
EXTRAÇÃO DA SACAROSE ATRAVÉS DE UM
DIFUSOR CONTÍNUO

ALBERTO ANGEL MAZZONI

Orientador: Prof. Dr. JOSÉ MARIO MARTÍNEZ PEREZ

Dissertação apresentada no Instituto
de Matemática, Estatística e Ciência
da Computação, como requisito par -
cial para obtenção do título de Mes-
tre em Matemática Aplicada.

JULHO/ 1982

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

A G R A D E C I M E N T O S

- Ao Mario Martínez, pela orientação e pelo apoio.
- Aos colegas e amigos da UNICAMP, pelas palavras de incentivo.
- Ao Professor Enrique Ortega da Faculdade de Engenharia de Alimentos e Agrícola, pelas claras explicações sobre os processos de difusão.
- Ao colega e amigo Renato Borges Guerra, graças a quem aprendi o pouco que eu sei de matemática.
- Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

I N D I C E

	Página
Capítulo I - Motivação: O Processo de Difusão para Extração de Sacarose	1
1.1 - Procedimentos de Extração de Sacarose.	1
1.2 - Conceitos sobre Difusão	1
1.3 - Descrição do Difusor e do Processo de Extração	2
1.4 - Previsão da Influência e Comportamento das Variáveis no Processo de Extração.	7
1.5 - Conceito de Eficiência	11
1.6 - Definição do Problema	11
Capítulo II - Formulação e Resolução do Problema	13
2.1 - Introdução	13
2.2 - Formulação do Problema	13
2.3 - Algoritmo Proposto	15
2.4 - Ajuste do Algoritmo aos Dados Disponíveis	16
2.5 - Resolução do Problema	17
2.5.1 - Esquema do Algoritmo	17
2.6 - Procedimento Computacional	19
2.6.1 - Comentários sobre as Principais Subrotinas	20
Capítulo III - Experiências Numéricas	22
3.1 - Introdução	22
3.2 - Função Teste	22

R E S U M O

O presente trabalho aborda o problema de otimizar a extração de sacarose que será destinada à produção de álcool hidratado. O processo de extração é realizado através de um protótipo de difusor contínuo que fora projetado pela Faculdade de Engenharia de Alimentos e Agrícola da UNICAMP.

No capítulo I, fazemos uma breve descrição do processo de extração por difusão, do protótipo de difusor contínuo e analisamos o comportamento das variáveis que intervêm no processo de extração definindo em forma global o problema.

No capítulo II, formulamos o problema e propomos um algoritmo para sua resolução expondo o procedimento computacional utilizado.

No capítulo III apresentamos as experiências numéricas que foram realizadas visando analisar o comportamento do algoritmo proposto.

CAPITULO I

MOTIVAÇÃO: O PROCESSO DE DIFUSÃO PARA EXTRAÇÃO DE SACAROSE

1.1 PROCEDIMENTOS DE EXTRAÇÃO DE SACAROSE

Os procedimentos usados para a extração de sacarose, podem ser classificados, de uma forma geral, em dois tipos:

a) Procedimento de extração por moendas (tradicional).

Era, há algum tempo atrás, o único processo de extração, e consiste, basicamente, na obtenção do caldo da cana de açúcar por prensagem em moendas com a ajuda do chamado moinho de cana.

b) Procedimento de extração sólido-líquido.

O processo de extração é realizado através de difusores ou extratores, cujas características e funcionamento serão detalhadas nos itens seguintes.

1.2 CONCEITOS SOBRE DIFUSÃO

"Difusão" ou "difusor" são termos oriundos da indústria da beterraba açucareira e empregados para descrever o sistema de extração de sacarose com água quente. Na indústria química, a operação se classifica como lixiviação (extração com solvente), sendo o termo difusão reservado apenas para descrever um dos mecanismos de migração do soluto.

A utilização deste sistema de extração tem motivado sua adoção por parte dos países industrializados, visto que tem sido comprovado um maior rendimento de extração [3], exigindo uma construção civil mais simples e um custo de manutenção menor.

1.3 DESCRIÇÃO DO DIFUSOR E DO PROCESSO DE EXTRAÇÃO

Neste item faremos uma breve descrição das características e funcionamento do protótipo de difusor contínuo, que foi projetado pela Faculdade de Engenharia de Alimentos e Agrícola da UNICAMP e para o qual temos desenvolvido o algoritmo de otimização que apresentaremos no capítulo seguinte.

Visto que o protótipo de difusor é de caráter experimental, serão expostas diferentes alternativas a serem testadas no processo, visando a obtenção de um maior rendimento na extração.

O corpo do difusor é um prisma retangular de 28cm. por 40cm. de base e 2,50 metros de comprimento sustentado por quatro suportes de 80cm. de altura. A figura 1, mostra uma vista superior e uma vista em perspectiva do mesmo.

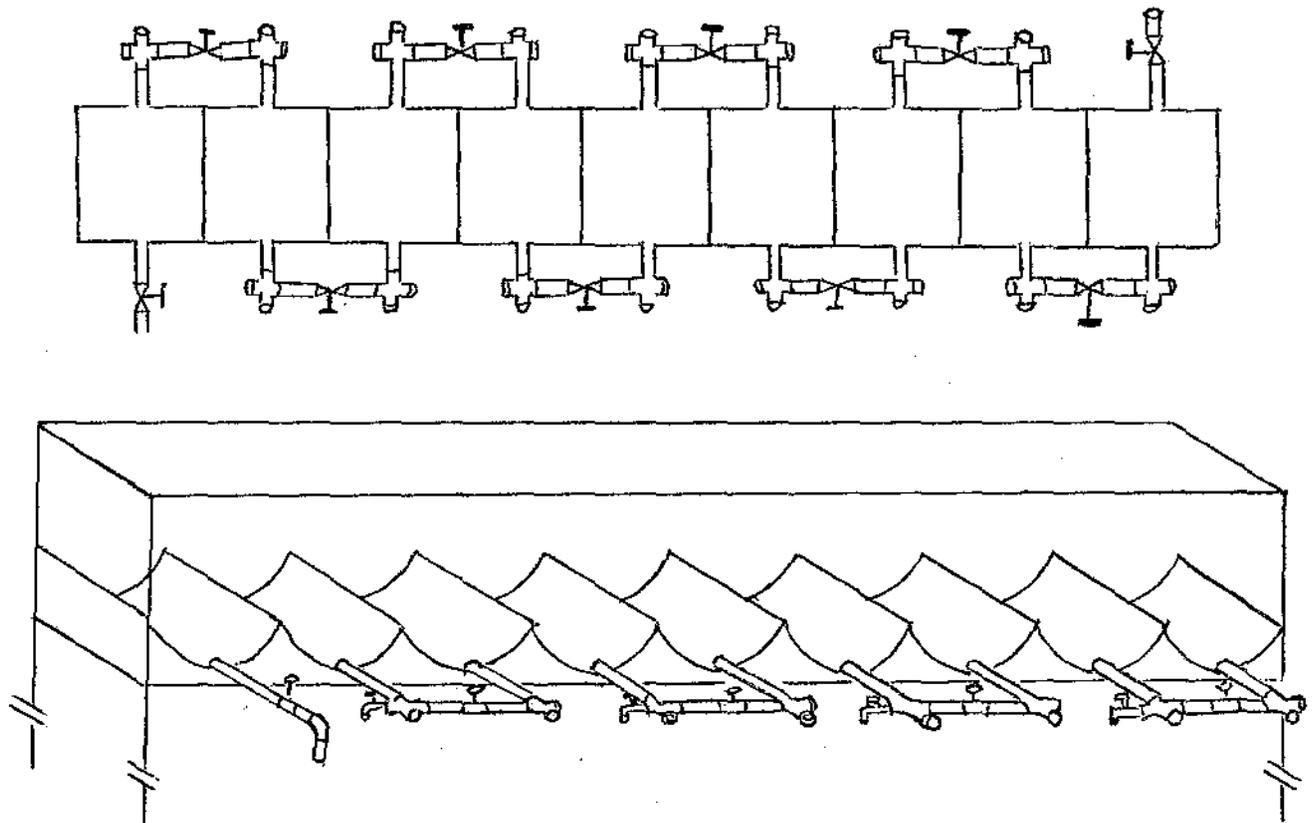


Figura 1

O difusor foi projetado com 4 conexões que são apresentadas na figura 2, destinadas a:

- Entrada de cana picada
- Saída de megaço
- Entrada de água
- Saída de caldo concentrado

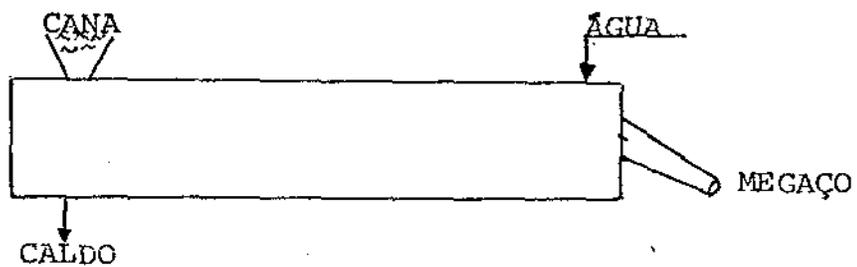
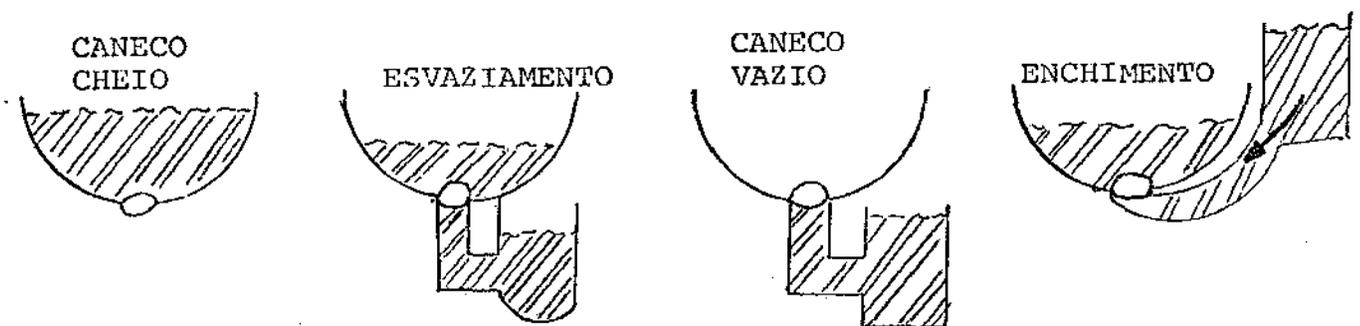


Figura 2

Basicamente, as quatro conexões citadas definem o processo de extração. Por uma conexão é injetada água quente e simultaneamente é introduzida a cana picada em contracorrente. No sentido do fluxo da água é obtido, como saída, caldo concentrado. No sentido do fluxo do sólido (cana picada) é extraído megaço.

O difusor possui no seu interior 9 metades de cilindros que chamamos canecos, como foi mostrado na figura 1. Existe uma pequena zona de justaposição entre os canecos, que foi projetada levando em consideração um melhor deslocamento do material sólido entre os mesmos.

Na parte inferior dos canecos existe, em cada lado, uma boca de saída de uma polegada de diâmetro. Este par de bocas permite a entrada/saída rápida de líquido contido no caneco. Essa movimentação de líquido se torna necessária para a pesquisa de pulsação do nível do líquido (Fig.3), operação esta muito importante para acelerar a extração.

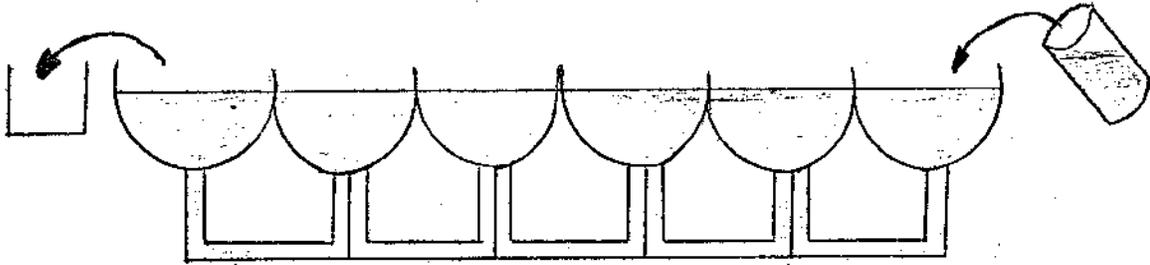


ESQUEMA DE PULSAÇÃO

FIGURA 3

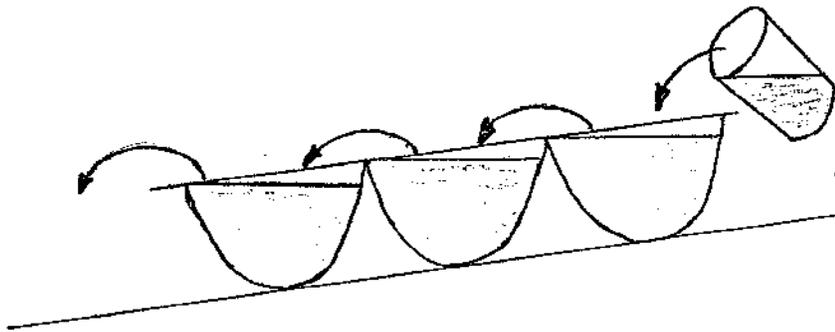
As bocas também servirão para experimentar os sistemas alternativos de movimentação de líquido, tais como:

- a) Escoamento por vasos comunicantes sem pulsação - (Fig. 4)
- b) Escoamento gravitatório em cascata. Neste caso, o difusor precisará ficar inclinado, aproximadamente 4° , para conseguir esta movimentação (Fig.5).



ESCOAMENTO POR VASOS COMUNICANTES

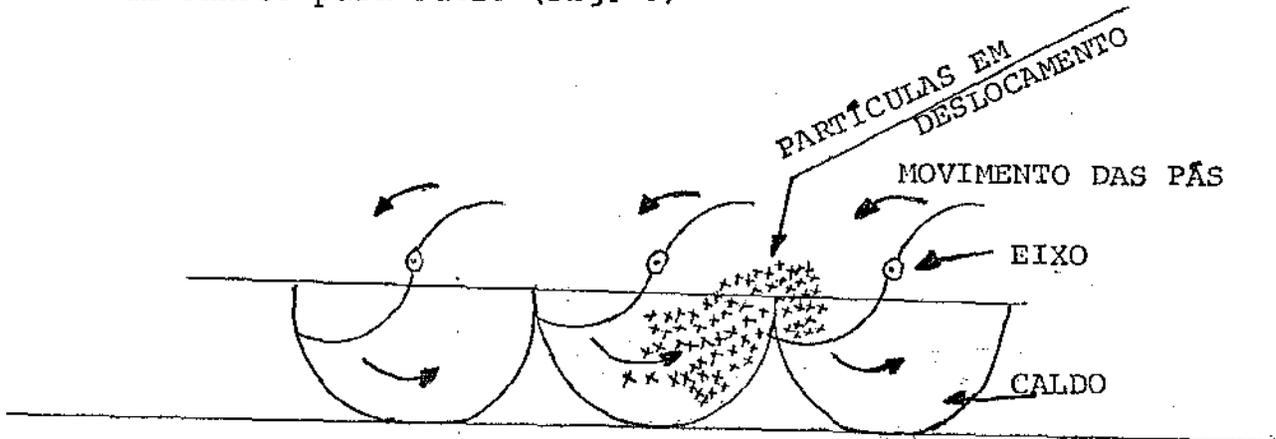
FIGURA 4 .



ESCOAMENTO GRAVITATÓRIO EM CASCATA

FIGURA 5

A movimentação do sólido será realizada através de pás, que lentamente carregarão as porções de cana picada de um caneco para outro (Fig. 6)



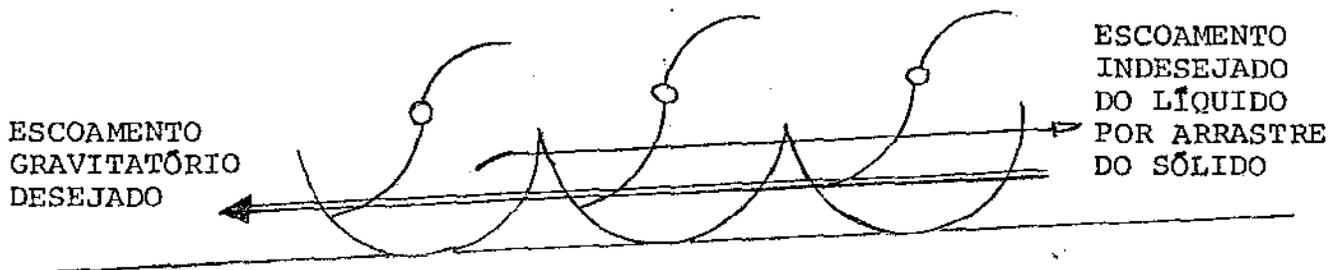
MOVIMENTAÇÃO DO SÓLIDO

FIGURA 6

Diferentes modelos de pás e acessórios terão que ser testados, pois além do efeito de transporte do sólido, existem outros efeitos colaterais relevantes, tais como:

- a) Compressão do leito da cana picada
- b) Escoamento do caldo contido no leito por arrastre do sólido.

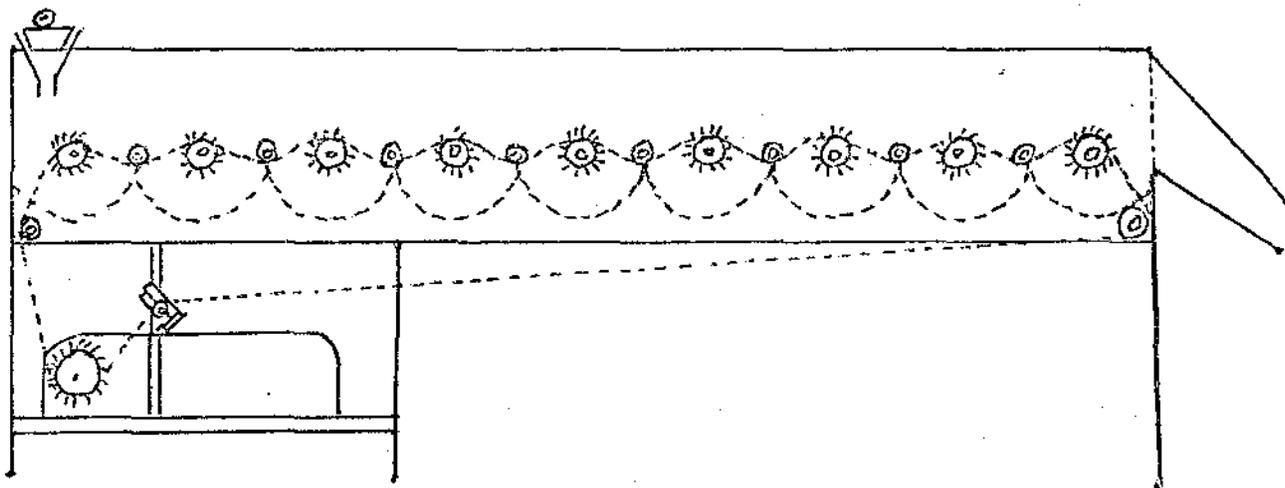
Ambos os efeitos colaterais coincidem, a fim de evitar arrastre de caldo em sentido inverso a seu escoamento - (Fig. 7).



EFEITOS COLATERAIS

FIGURA 7

As pás girarão com velocidade de uma ou duas rotações por minuto e serão movimentadas com um mecanismo que inclui catracas e correntes, um tensor de corrente e um tensor com redutor de velocidade (Fig. 8).



ESQUEMA DOS COMPONENTES MECÂNICOS

FIGURA 8

1.4 PREVISÃO DA INFLUÊNCIA E COMPORTAMENTO DAS VARIÁVEIS NO PROCESSO DE EXTRAÇÃO

Neste item, daremos uma idéia do comportamento das principais variáveis que intervêm no processo de extração de sacarose, assim como as prováveis mudanças a serem introduzidas dado o caráter experimental do difusor. As variáveis mais importantes são:

a) TEMPERATURA

Variará entre 25 a 90°C. A cana entrará com uma

temperatura de 20-30°C. e a água quente entrará com uma temperatura máxima de 90°C. As chapas inferiores do difusor serão aquecidas com óleo quente a 90°C.

É possível que exista um perfil de temperatura, ao longo do difusor, como é mostrado na Fig. 9.

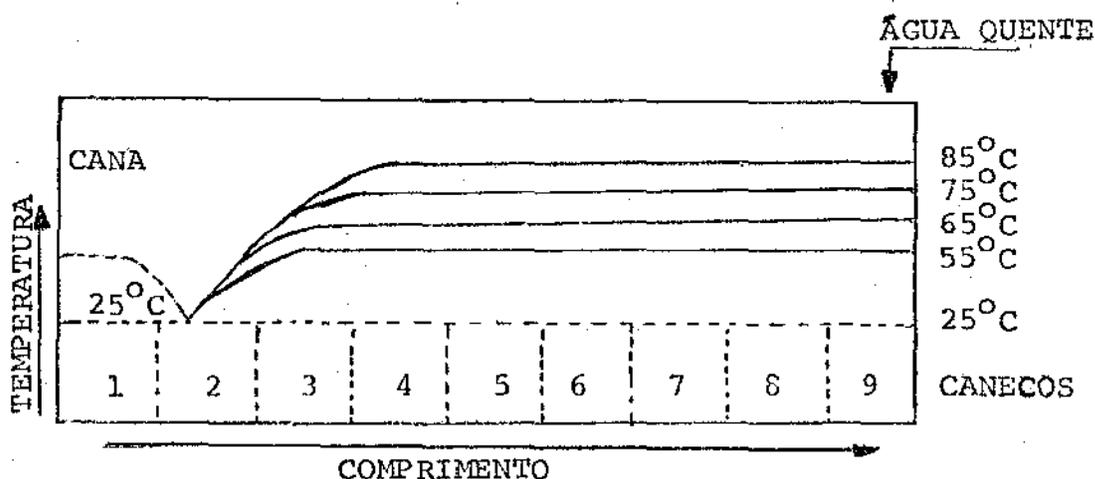


FIGURA 9

Serão feitas experiências, com diversas condições de aquecimento, para atingir quatro diferentes níveis de temperatura de extração: 55, 65, 75 e 85°C.

Existe, em geral, a tendência de aumentar o rendimento conforme se aumenta a temperatura. Isto ocorre sempre que o aquecimento for gradual, pois um choque térmico poderá acarretar a modificação da estrutura do material de forma a impedir a migração da sacarose.

b) PULSAÇÕES

Tem sido observado, que o processo de molhar e deixar escorrer a cana moída em forma repetida, conduz aos maiores índices de extração no menor tempo de contato.

O efeito da pulsação na extração ainda não foi explicado. É provável que tenha a ver com a compactação do megaço quando se deixa escorrer o líquido e/ou a possibilidade de escoamento gravitatório dentro dos canais das partículas de cana.

c) AGITAÇÃO MECÂNICA (movimentação do sólido)

O sólido é transladado de um caneco a outro por meio das pás que se movimentam em baixa rotação (1 ou 2 rpm). Será testado um sistema alternativo de movimentação rápida (10-40 rpm) para testar a resistência do material sólido.

d) EFEITO DA MODIFICAÇÃO DO PH PELA ADIÇÃO DE HIDRÓXIDO DE CÁLCIO

Para diminuir o efeito corrosivo do caldo sobre o aço carbono, material do qual é construído o difusor, usa-se uma solução de hidróxido de cálcio, para fazer com que o PH do caldo passe de 5.4 (PH natural da cana) a 6.2, valor mínimo recomendado para reduzir a corrosão.

A modificação do PH deverá ser feita em forma gradativa, para evitar efeitos secundários tais como reação de compostos químicos (formação de sais de cálcio insalubre), que poderiam afetar o proces - so de extração.

e) TEMPO

O processo é medido através do intervalo de tempo que decorre entre a entrada da massa de cana e a saída do megaço.

Depois de estabelecida a influência da temperatu - ra no processo, deverá ser estudada a influên - cia do tempo de contato em relação ao rendimento de extração. Por exemplo, será analisado como flui no processo um tempo de 5 até 40 minutos com intervalos de 5 minutos.

O tempo adequado definirá a capacidade de produ - ção do difusor.

f) REFLUXO

A cana que entra é colocada em contato com caldo quente, concentrado, para que absorva todo o lí - quido que essa massa, de partículas sólidas, é capaz de absorver. O efeito é produzir um enrique - cimento do teor de sacarose do produto final.

g) NÚMERO DE ETAPAS

Como foi definido no item 1.3, o difusor tem 9 etapas (canecos). No entanto, dada a forma de operação é possível adicionar módulos de 3,6 ou 9 estágios, em caso de se considerar necessário.

h) TAMANHO E FORMA DAS PARTÍCULAS DA CANA

Esta é uma variável externa ao processo de extração, porém, muito importante. Se trabalharmos com cana preparada sob diferentes processos, os quais produzem sólidos de diferentes dimensões, obteremos partículas de diferentes dimensões e teores de umidade.

1.5 CONCEITO DE EFICIÊNCIA

Definimos como eficiência o percentual de extração de sacarose no processo. Tal percentual mede-se através da relação sacarose extraída no caldo e sacarose total contida na cana inicial. Este indicador pode ser calculado pela seguinte fórmula:

$$E = \frac{100 \times \text{volume caldo} \times \rho_{\text{caldo}}}{\text{umidade}(\%) \times \text{tipo de cana usada}}$$

Sendo ρ_{caldo} = Densidade do caldo lida em tabelas

1.6 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

Trata-se de encontrar a combinação de variáveis inde

pendentes que permitem uma extração mais eficiente de sacarose pelo método de difusão.

CAPITULO II

FORMULAÇÃO E RESOLUÇÃO DO PROBLEMA

2.1 INTRODUÇÃO

O presente capítulo tem por objetivo a apresentação, formulação e resolução do problema definido globalmente, no capítulo anterior.

O algoritmo que apresentaremos é de caráter geral, e admite qualquer número de variáveis que intervêm no processo de extração de sacarose. Temos adotado este critério, visto que é possível sua utilização para qualquer tipo e dimensão de difusor contínuo.

2.2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

As variáveis independentes do problema, podem ser classificadas em contínuas e discretas; contínuas são: PH , temperatura e tempo; discretas são: pulsação, agitação mecânica, refluxo, número de etapas e tamanho das partículas de cana. Temos assim um conjunto de possíveis combinações (nem todas válidas para o processo) para as variáveis discretas. Para citar algumas como exemplo damos as seguintes:

- Agitação lenta com moido tipo fino de cana, sem refluxo , nem pulsação, com 9 etapas.
- Agitação rápida, com moido tipo fino de cana, sem refluxo, com pulsação, com 9 etapas.
- Agitação rápida, com moido tipo grosso de cana, com re -

fluxo, sem pulsação, com 9 etapas.
etc.

Para cada combinação de variáveis discretas, temos definido então um problema de otimização "contínuo". Porém a função objetivo (eficiência) não é dada em forma determinística pois está sujeita a erros aleatórios de medição ou por intervenção de variáveis não consideradas.

Consideremos agora numa combinação fixa de variáveis contínuas. Sejam X_1, \dots, X_k as variáveis discretas e Y o valor da eficiência para valores dados a X_1, \dots, X_k distribuídas da seguinte forma:

Obs.	X_1	X_2	X_3	X_k	Y
1	x_1^1	x_2^1	x_3^1	x_k^1	y^1
2	x_1^2	x_2^2	x_3^2	x_k^2	y^2
3	x_1^3	x_2^3	x_3^3	x_k^3	y^3
m	x_1^m	x_2^m	x_3^m	x_k^m	y^m

Onde:

m é o número de observações (experimentos)
 y^j é variável dependente para $j=1,2,\dots,m$

x_i^j é variável independente para $i=1,2,\dots,k$
 $j=1,2,\dots,m$

Sendo que:

x_i^j representa as variáveis discretas já definidas
 y^j representa a eficiência no processo de extração de sacarose para esse experimento.

Trata-se, como foi dito anteriormente de achar valores de x_1, \dots, x_k , que forneçam altas eficiências, no menor número de ensaios possíveis.

Observamos que o custo deste processo nas suas condições reais, depende unicamente do número de ensaios, sendo o trabalho computacional (em termos de memória e tempo de CPU) usado para determinar que ensaio deve ser realizado considerado desprezível.

2.3 ALGORITMO PROPOSTO

Propomos que a eficiência como função das variáveis independentes contínuas é adequadamente representada pelo "modelo quadrático" seguinte:

$$\text{-Eficiência} = Q(X) = \frac{1}{2} X^t G X + b X + C$$

Onde:

G é uma matriz simétrica

b é um vetor

C é uma constante

X é o vetor de variáveis independentes

Sendo que G, b e C , são determinados em cada passo do algoritmo (antes de cada ensaio) usando todos os ensaios precedentes, através do método dos quadrados mínimos lineares.

A escolha do modelo foi baseada nas considerações seguintes:

- a) As expressões quadráticas são as que melhor se adaptam a problemas de otimização.
- b) O alto grau de flexibilidade (o algoritmo admite que se possa trabalhar com um grande número de variáveis, as quais podem ser modificadas em forma isolada ou conjunta).

2.4 AJUSTE DO ALGORITMO AOS DADOS DISPONÍVEIS

Dado um conjunto de dados; X, Y, \in, R^n , onde Y é a variável dependente, temos que ajustar uma expressão quadrática aos dados, tal que, o erro seja mínimo.

Achar a melhor aproximação quadrática para esses dados, implica achar os coeficientes de G_{ij}, b_i e C , que minimizem a seguinte expressão:

$$\sum_{i=1}^n [Y^i - (\frac{1}{2} (X^i)^t G X^i + b X^i + C)]^2$$

Este problema pode ser resolvido pelo método dos quadrados mínimos lineares (1).

(1) Vide Apêndice I

2.5 RESOLUÇÃO DO PROBLEMA

As variáveis independentes tem cotas inferiores e superiores naturais, que o experimentador conhece, por exemplo a temperatura poderá variar entre 25 e 90°, o tempo entre 5 e 45 minutos, o PH entre 5.4 e 6.2. Assim, em cada passo do algoritmo, o experimentador será aconselhado a fazer o ensaio que resolva o seguinte problema:

Minimizar $Q(X)$

Sujeito a $L_i \leq X_i \leq U_i$

O resultado obtido, aconselha um novo experimento a ser feito até atingirmos valores desejados da eficiência.

2.5.1 ESQUEMA DO ALGORITMO

Inicialmente simulamos um número de experimentos, atribuindo valores gerados aleatoriamente para as variáveis independentes. A seguir calculamos a eficiência (variável dependente) para cada experimento simulado.

Feito isto, procedemos como segue:

1. Ajusta-se a função quadrática $Q(x)$ aos dados gerados, através de quadrados mínimos lineares.
2. Minimiza-se $Q(X)$, encontrando o ponto ótimo X^*
3. Simula-se um novo experimento, calculando a eficiência em X^* , encontrando o ponto (X^*, Y^*) .
4. Ajusta-se nova quadrática, incluindo neste ajuste

te ajuste o ponto (X^*, Y^*) .

5. Minimiza-se a nova quadrática encontrada no item 4.
6. Repete-se o processo, até atingirmos um valor razoável de eficiência.

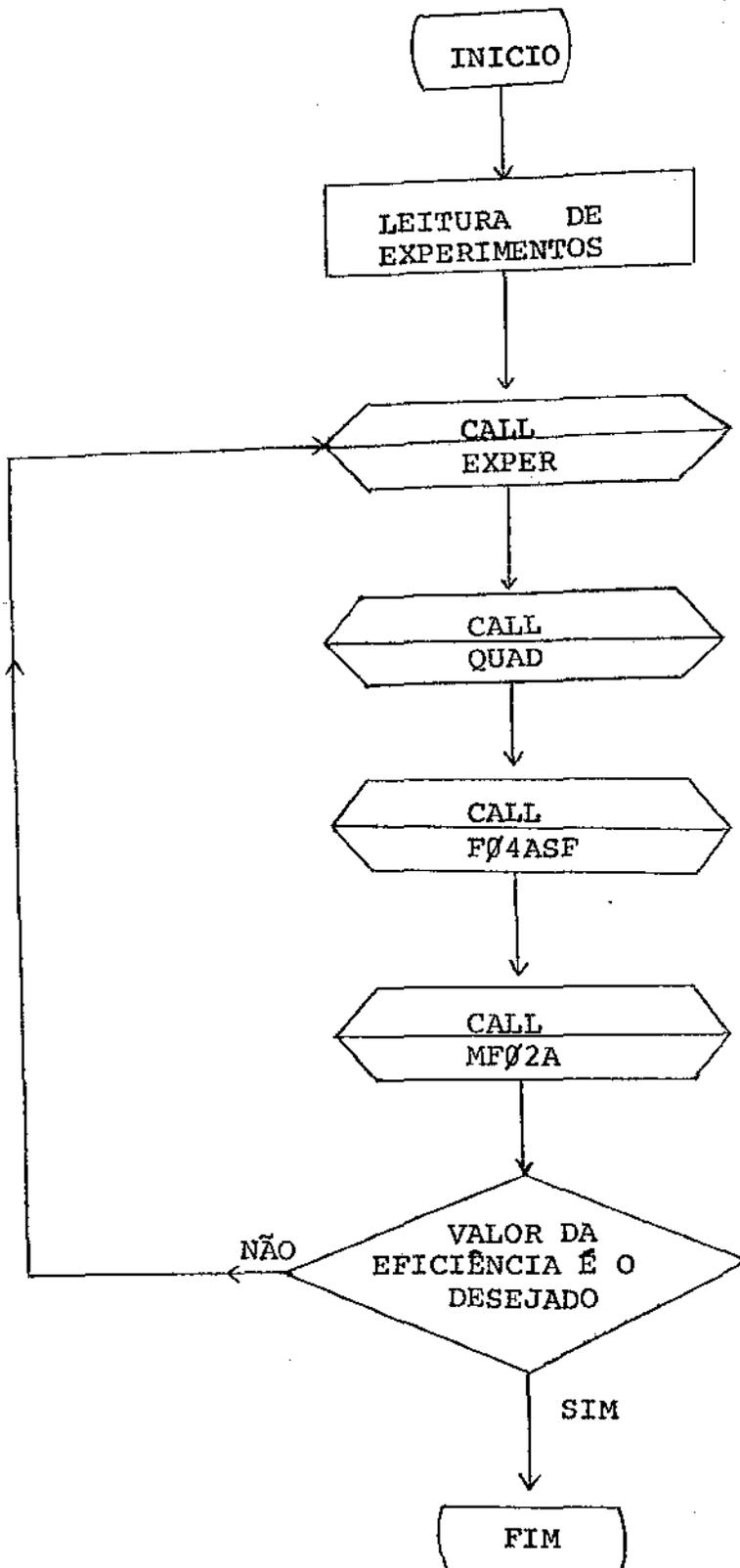
Para realizarmos o processo de otimização dos itens 2 e 6, usamos o método de Nelder-Mead (2).

A seguir, passaremos a descrever o processo computacional, com seu respectivo diagrama de blocos simplificado.

(2) Vide Apêndice II

2.6 PROCEDIMENTO COMPUTACIONAL

O procedimento computacional compreende um programa principal e quatro subrotinas principais, para o qual temos desenvolvido o seguinte diagrama de blocos



2.6.1 COMENTÁRIOS SOBRE AS PRINCIPAIS SUBROTINAS

Faremos agora alguns comentários sobre as subrotinas utilizadas:

a) SUBROTINA EXPER

É a subrotina que inicialmente calcula a eficiência Y para cada combinação de variáveis independentes X_i^j geradas aleatoriamente. Na saída do processo de otimização, efetuado pela subrotina MF02A a subrotina EXPER calcula a eficiência para cada ponto ótimo encontrado X^* . No processo real esta rotina é o próprio experimento, realizado no laboratório em condições naturais.

b) SUBROTINA QUAD

É aquela que monta as equações normais, no processo de ajuste da função quadrática $Q(X)$, aos dados disponíveis, através do método dos quadrados mínimos lineares.

c) SUBROTINA F04ASF

É aquela que resolve um sistema linear de equações do tipo $Ax=b$, onde A é uma matriz simétrica. Para a resolução do sistema a subrotina usa o método de decomposição de Cholesky, e foi implementada pela NAG LIBRARY.

d) SUBROTINA MF02A

É a que minimiza a função, foi implementada pelo

LABMA, e usa o método de Nelder-Mead para otimização de funções, que é descrito no apêndice II.

CAPÍTULO III

EXPERIÊNCIAS NUMÉRICAS

3.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo apresentaremos as experiências numéricas realizadas, sendo que as mesmas tiveram como objetivo analisar o comportamento do algoritmo proposto no capítulo anterior.

Tendo em consideração que no processo de extração de sacarose por difusão é oneroso fazer experimentos, consideramos conveniente fazer experiências numéricas com uma função teste usando o algoritmo proposto e o método de Nelder-Mead. Com o algoritmo de Nelder-Mead simulamos que o processo de otimização da função teste representa o número de experimentos que seriam necessários realizar até serem atingidos valores ótimos da eficiência e comparamos esses resultados com os obtidos nas experiências numéricas do algoritmo proposto.

3.2 FUNÇÃO TESTE

A função teste escolhida para as experiências numéricas foi a seguinte:

$$F(X) = (X-X^*)^t G(X-X^*) + C + P$$

Onde:

X^* é um suposto ponto ótimo

X é um ponto inicial

G é uma matriz simétrica

C é uma constante

P é o valor da perturbação.

3.3. ALGORITMO PROPOSTO - EXPERIÊNCIAS NUMÉRICAS

As experiências numéricas realizadas com o algoritmo proposto que foi apresentado no item 2.5.1 do capítulo anterior, são dadas na tabela I. As mesmas foram realizadas com duas variáveis e tendo suposto conhecido um ponto ótimo da eficiência $X^*(7, -6)$.

Visando analisar o comportamento do algoritmo com mudanças nas variáveis é que fizemos experiências sem perturbações e com perturbações de 10 até 100%.

Nº AVAL.	SEM PERTURBAÇÃO	PERTURBAÇÃO 10%	PERTURBAÇÃO 20%	PERTURBAÇÃO 30%	PERTURBAÇÃO 40%	PERTURBAÇÃO 50%	PERTURBAÇÃO 60%	PERTURBAÇÃO 70%	PERTURBAÇÃO 80%	PERTURBAÇÃO 90%	PERTURBAÇÃO 100%	
	VALOR MÍN DA FUNÇÃO											
VALORES GERADOS ALEATORIAMENTE	-	803.0619	783.6588	764.2557	744.8527	725.4496	706.0465	686.6434	667.2403	647.8373	628.4342	609.0311
	-	76.2406	76.8242	77.4084	77.9926	78.5769	79.1611	79.7453	80.3295	80.9137	81.4980	82.0822
	-	666.9703	718.1759	769.3816	820.5872	871.7921	922.9985	974.2041	1025.410	1076.615	1127.821	1179.027
	-	948.8491	931.6525	914.4559	897.2593	880.0627	862.8661	845.6695	828.4729	811.2763	794.0797	776.8831
	-	125.3906	132.9105	140.4304	147.9503	155.4702	162.9901	170.5100	178.0308	185.5499	193.0698	200.5897
	-	84.8973	83.8089	82.7204	81.6319	80.5435	79.4550	78.3665	77.2781	76.1896	75.1011	74.0127
1	0.890E-06	0.181	0.722	1.605	2.787	4.190	5.644	6.902	7.497	6.636	2.895	
2	0.890E-06	0.711E-01	0.241	0.464	0.711	0.973	1.252	1.570	1.975	2.530	3.309	
3	0.217E-05	0.811E-01	0.305	0.654	1.129	1.750	2.596	3.816	5.740	9.121	15.616	
4	0.217E-05	0.771E-01	0.272	0.548	0.893	1.302	1.810	2.486	3.511	5.253	8.465	
5	0.182E-05	0.755E-01	0.262	0.516	0.816	1.155	1.555	2.069	2.820	4.060	6.311	
6	0.125E-05	0.746E-01	0.249	0.476	0.724	0.983	1.259	1.584	2.021	2.694	3.807	
7	0.122E-06	0.767E-01	0.270	0.541	0.864	1.216	1.706	2.310	3.212	4.753	7.624	
8	0.122E-06	0.730E-01	0.244	0.457	0.686	0.911	1.138	1.383	1.696	2.139	2.805	
9	0.122E-06	0.824E-01	0.307	0.652	1.112	1.699	2.470	3.558	5.270	8.284	14.180	
10	0.122E-06	0.770E-01	0.264	0.519	0.817	1.151	1.543	2.041	2.727	4.006	6.267	
11	0.122E-06	0.786E-01	0.281	0.574	0.934	1.368	1.904	2.629	3.740	5.665	9.345	
12	0.298E-06	0.769E-01	0.271	0.541	0.866	1.239	1.687	2.278	3.166	4.677	7.518	
13	0.186E-05	0.870E-01	0.338	0.748	1.319	2.075	3.096	4.562	6.902	11.127	19.434	
14	0.436E-06	0.740E-01	0.242	0.451	0.669	0.877	1.076	1.284	1.536	1.887	2.366	
15	0.436E-06	0.783E-01	0.278	0.562	0.909	1.324	1.829	2.506	3.537	5.332	8.737	
16	0.436E-06	0.760E-01	0.260	0.504	0.784	1.090	1.434	1.865	2.491	3.523	5.402	
17	0.115E-05	0.722E-01	0.232*	0.423*	0.607*	0.763*	0.885	0.974	1.027	1.011	0.754	
18	0.297E-05	0.795E-01	0.284	0.577	0.941	1.378	1.920	2.649	3.773	5.731	9.501	
19	0.736E-06	0.775E-01	0.271	0.536	0.858	1.275	1.656	2.227	3.080	4.548	7.303	
20	0.736E-06	0.783E-01	0.280	0.566	0.915	1.335	1.840	2.525	3.573	5.381	8.840	

*VALORES MÍNIMOS

TABELA I

ANÁLISE DA TABELA I

Nesta tabela, observamos que o valor mínimo sem perturbação é atingido na sétima iteração com uma precisão de E-06 mantendo-se esse valor constante nas quatro seguintes iterações, sendo que já na primeira iteração é obtido um excelente resultado com a mesma precisão.

Perturbando de 10%, o valor mínimo é atingido na segunda iteração com uma precisão de E-01. Os valores obtidos nas iterações restantes oscilam em torno desse mínimo mantendo-se a precisão.

Analisando as restantes perturbações, observamos que os valores mínimos são obtidos na iteração 17, sendo que os mínimos vão aumentando em ordem de grandeza até perturbações de 80%, diminuindo nas duas últimas perturbações (90 e 100%).

Por outra parte observamos que a medida que o valor da perturbação é incrementado, aumenta a dispersão dos restantes valores com relação aos respectivos mínimos obtidos.

3.4 NELDER-MEAD - EXPERIÊNCIAS NUMÉRICAS

Com o algoritmo de Nelder-Mead supomos um ponto ótimo conhecido $X^*(7,-6)$ para uma determinada eficiência e simulamos que o processo de otimização representa um conjunto de ensaios a serem feitos até obter valores ótimos da eficiência.

De forma análoga as experiências realizadas no item anterior, a função foi testada sem perturbações e com perturbações que variaram de 10 até 100%.

Levando em consideração que para realizar o processo de otimização é necessário dar um ponto inicial e que a função é perturbada, fizemos experiências com diferentes pontos iniciais visando analisar os efeitos que as perturbações produziam no valor da função com relação aos mesmos.

A seguir apresentamos os resultados nas seguintes tabelas.

ANÁLISE DA TABELA II

O ponto inicial dado foi $(4,-4)$, porém bem próximo do ótimo suposto $(7,-6)$. Na função sem perturbação o mínimo é atingido em 72 iterações com uma precisão de E-08, mas obtém-se um bom valor com 20 iterações.

Analisando as diferentes perturbações observamos que os valores mínimos são atingidos com uma excelente precisão, sendo que esta varia conforme a perturbação. Com perturbações de 10 a 90% a precisão está entre E-04 e E-08 e com 100% a precisão é de E-01.

TABELA III

PONTO INICIAL (-4, 4)																					
SEN PERTURBAÇÃO		PERTURBAÇÃO 10%		PERTURBAÇÃO 20%		PERTURBAÇÃO 30%		PERTURBAÇÃO 40%		PERTURBAÇÃO 50%		PERTURBAÇÃO 60%		PERTURBAÇÃO 70%		PERTURBAÇÃO 80%		PERTURBAÇÃO 90%		PERTURBAÇÃO 100%	
Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO	Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO	Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO	Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO	Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO	Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO	Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO	Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO	Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO	Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO	Nº AVAL.	VALOR MIN. DA FUNÇÃO
1	620.7500	1	582.8617	1	544.9735	1	507.0852	1	469.1969	1	431.3087	1	393.4204	1	355.5322	1	317.6439	1	279.7556	1	241.8674
5	514.6875	5	493.7380	5	451.7885	5	425.0933	5	392.5202	5	359.9471	5	327.3741	5	294.8010	5	262.2279	5	229.6548	5	197.0817
10	125.1826	10	209.1680	10	187.4609	10	683.9509	10	659.5675	10	750.0815	10	771.2572	10	793.8329	10	815.7085	10	837.5842	10	859.4599
15	22.6999	15	425.5726	15	11.18850	15	523.3577	15	539.9332	15	536.8472	15	526.1481	15	515.4489	15	504.7497	15	494.0506	15	483.3514
20	28.0495	20	10.62546	20	10.07366	20	630.4045	20	680.9773	20	713.5309	20	735.1960	20	756.8611	20	778.5262	20	800.1913	20	821.8564
25	5.0340	25	5.324676	25	1.644979	25	440.1160	25	416.7087	25	381.0715	25	337.3644	25	293.6572	25	249.9501	25	206.2429	25	162.5358
30	5.0177	30	0.5978451	30	4.716846	30	718.0248	30	807.9283	30	872.3473	30	926.2661	30	981.5849	30	1036.204	30	1090.823	30	1145.441
35	2.3128	35	0.3478830	35	0.1273289	35	556.6343	35	578.6204	35	582.8064	35	579.1859	35	575.5655	35	571.945	35	568.3245	35	564.7040
40	0.671E-01	40	0.767926	40	0.2212394	40	408.7719	40	372.8996	40	322.0944	40	267.5539	40	212.1135	40	156.6731	40	101.2327	40	45.7922
45	0.895E-01	45	0.743E-02	45	0.532E-02	45	532.9991	45	546.3475	45	542.9005	45	531.4674	45	520.0343	45	508.601	45	497.1681	45	485.7350
50	0.421E-02	50	0.221E-01	50	0.323E-02	50	445.1533	50	423.7432	50	337.2021	50	344.6046	50	302.0070	50	259.409	50	216.8120	50	174.2144
55	0.602E-02	55	0.641E-03	55	0.756E-02	55	677.6474	55	748.0618	55	798.5842	55	838.2722	55	877.9602	55	917.648	55	957.3362	55	997.0242
60	0.116E-03	60	0.811E-03	60	0.348E-03	60	*490.4415	60	*361.3562	60	*308.1292	60	*249.7148	60	*191.3013	60	*137.887	60	*74.4743	60	*15.0608
65	0.186E-03	65	0.112E-04	65	0.312E-04	65	589.6781	65	625.3317	65	642.3497	65	651.3819	65	659.9140	65	668.446	65	676.978	65	685.510
70	0.372E-05	70	0.509E-04	70	0.108E-03	70	584.9694	70	618.7589	70	634.5096	70	641.3731	70	648.2365	70	655.100	70	661.963	70	668.826
75	0.401E-05	75	0.538E-06	75	0.205E-05	72	573.1939	72	602.3304	72	613.6769	72	616.3737	72	619.0505	72	621.767	72	624.4641	72	627.1585
80	0.114E-05	80	0.225E-06	80	0.265E-05																
85	0.426E-06	85	0.251E-07	85	0.639E-07																
85	0.125E-07	89	*0.208E-08	89	*0.170E-08																
87	*0.881E-09																				

ANÁLISE DA TABELA III

O ponto inicial dado foi $(-4,4)$, sendo que a função sem perturbação atinge o mínimo em 87 iterações com uma precisão de $E-09$, mas obtem-se um excelente resultado na iteração 40 com uma precisão de $E-01$.

Com perturbações de 10 e 20% o mínimo é atingido em 89 iterações com uma precisão de $E-08$. Perturbações de 30 a 100% produzem valores da função não representativos.

FONTO INICIAL (-4, -4)

SEN PERTURBAÇÃO		PERTURBAÇÃO 104		PERTURBAÇÃO 201		PERTURBAÇÃO 304		PERTURBAÇÃO 404		PERTURBAÇÃO 504		PERTURBAÇÃO 604		PERTURBAÇÃO 704		PERTURBAÇÃO 804		PERTURBAÇÃO 904		PERTURBAÇÃO 1004	
Nº AVAL. DA FUNÇÃO	VALOR MIL. DA FUNÇÃO																				
1	308.7500	1	289.9051	1	271.0601	1	252.2152	1	233.3702	1	214.5253	1	200.9315	1	176.8350	1	157.9904	1	139.1455	1	120.3005
5	254.8125	5	238.9868	5	223.0611	5	207.1853	5	191.3096	5	175.4339	5	161.4400	5	143.6824	5	127.8067	5	111.9310	5	96.0562
10	109.3945	10	164.1702	10	191.4403	10	250.0448	10	257.7890	10	305.0137	10	216.7413	10	365.1389	10	375.2001	10	385.2622	10	395.3243
15	208.9736	15	41.9752	15	165.1285	15	224.8012	15	220.4937	15	256.3189	15	260.5143	15	246.1022	15	247.1777	15	241.9386	15	236.6989
20	1.0986	20	135.4963	20	198.7109	20	254.0885	20	262.3022	20	333.2244	20	236.2391	20	353.8599	20	377.3354	20	387.8360	20	398.3366
25	3.5953	25	10.9514	25	147.3854	25	179.9701	25	164.7318	25	179.4168	25	126.3584	25	138.2603	25	121.6039	25	100.3398	25	79.0757
30	0.1465-01	30	4.1770	30	204.7148	30	290.9381	30	320.2361	30	412.6554	30	251.0337	30	464.3292	30	502.1775	30	528.6475	30	555.1176
35	0.7052-01	35	1.4909	35	169.0586	35	223.8245	35	228.7791	35	275.4117	35	162.7959	35	271.9900	35	276.4868	35	274.7306	35	272.9805
40	0.1402-01	40	4.1304	40	139.4796	40	164.7677	40	280.2660	40	352.5415	40	395.9735	40	100.1754	40	75.8972	40	49.0401	40	22.1831
45	0.3422-03	45	0.4852-01	45	163.8037	45	215.0888	45	305.7815	45	305.4340	45	117.9649	45	245.6334	45	246.4155	45	240.8762	45	235.3369
50	0.9282-03	50	0.8502-01	50	146.0036	50	179.3901	50	206.5207	50	182.9195	50	182.9195	50	142.6722	50	125.6307	50	105.0009	50	84.3711
55	0.2642-05	55	0.9942-03	55	192.8530	55	273.2307	55	210.5173	55	377.2262	55	145.5593	55	434.7209	55	444.4973	55	463.2216	55	462.8460
60	0.1002-04	60	0.2842-02	60	137.1273	60	151.3670	60	295.6295	60	143.0069	60	143.0069	60	143.0069	60	143.0069	60	143.0069	60	143.0069
65	0.7792-06	65	0.7392-04	65	175.1229	65	175.1229	65	175.1229	65	175.1229	65	175.1229	65	175.1229	65	175.1229	65	175.1229	65	175.1229
70	0.7892-07	70	0.1252-03	70	174.1754	70	174.1754	70	174.1754	70	174.1754	70	174.1754	70	174.1754	70	174.1754	70	174.1754	70	174.1754
72	0.2982-08	72	0.2582-05	72	184.0786	72	184.0786	72	184.0786	72	184.0786	72	184.0786	72	184.0786	72	184.0786	72	184.0786	72	184.0786
		80	0.3142-05	77	136.6585																
		85	0.6852-07																		
		95	0.4902-08																		

* VALORES MIÚDOS

TABELA IV

ANÁLISE DA TABELA IV

O ponto inicial dado foi $(-4,-4)$ e a função sem perturbar atinge o mínimo em 72 iterações com uma precisão de $E-08$.

Perturbando a função em 10% o mínimo é atingido em 95 iterações com uma precisão de $E-08$. Os valores obtidos com perturbações de 20 a 100% não são representativos.

PONTO INICIAL (4, 4)

PERTURBAÇÃO 108		PERTURBAÇÃO 208		PERTURBAÇÃO 308		PERTURBAÇÃO 408		PERTURBAÇÃO 508		PERTURBAÇÃO 608		PERTURBAÇÃO 708		PERTURBAÇÃO 808		PERTURBAÇÃO 908		PERTURBAÇÃO 1008			
NP AVAL DA FUNÇÃO	NP VALOR MIN. DA FUNÇÃO	NP AVAL DA FUNÇÃO	NP VALOR MIN. DA FUNÇÃO	NP AVAL DA FUNÇÃO	NP VALOR MIN. DA FUNÇÃO	NP AVAL DA FUNÇÃO	NP VALOR MIN. DA FUNÇÃO	NP AVAL DA FUNÇÃO	NP VALOR MIN. DA FUNÇÃO	NP AVAL DA FUNÇÃO	NP VALOR MIN. DA FUNÇÃO	NP AVAL DA FUNÇÃO	NP VALOR MIN. DA FUNÇÃO	NP AVAL DA FUNÇÃO	NP VALOR MIN. DA FUNÇÃO	NP AVAL DA FUNÇÃO	NP VALOR MIN. DA FUNÇÃO	NP AVAL DA FUNÇÃO	NP VALOR MIN. DA FUNÇÃO		
1	468.7509	1	440.1333	1	411.5285	1	392.9177	1	354.3070	1	325.6962	1	297.0355	1	268.4747	1	239.8640	1	211.2532	1	182.6425
5	378.1675	5	358.8447	5	335.0019	5	311.1591	5	305.4290	5	280.0832	5	254.7373	5	229.3915	5	204.0456	5	178.6997	5	153.3539
10	62.2216	10	81.7457	10	384.4797	10	316.6514	10	509.5399	10	524.8467	10	610.5860	10	627.8065	10	665.1370	10	682.4075	10	679.7080
15	7.4987	15	15.3840	15	47.8676	15	308.3497	15	425.1018	15	398.4318	15	402.4860	15	394.3015	15	356.1170	15	377.9325	15	369.7480
20	9.7751	20	2.5045	20	40.2033	20	308.6761	20	506.8504	20	530.7584	20	564.9739	20	581.6328	20	598.2717	20	614.9206	20	631.5696
25	1.6472	25	4.3856	25	4.6232	25	233.9757	25	318.7029	25	281.3615	25	258.8143	25	225.2837	25	191.7530	25	158.2224	25	124.6928
30	0.417E-01	30	4.4825	30	2.5380	30	392.4485	30	623.1394	30	649.7207	30	712.8577	30	754.8608	30	796.8639	30	838.8670	30	880.8701
35	0.480E-01	35	0.464E-01	35	1.8478	35	297.1550	35	445.9782	35	433.3100	35	446.0137	35	443.2257	35	440.4376	35	437.6486	35	434.8616
40	0.597E-01	40	0.349E-01	40	0.254E-01	40	218.3746	40	286.5547	40	239.6942	40	205.7850	40	163.1438	40	120.5037	40	77.8515	40	35.2203
45	0.570E-02	45	0.610E-02	45	0.480E-02	45	284.6219	45	419.9481	45	403.0073	45	408.7418	45	399.9488	45	391.1558	45	382.3628	45	373.5698
50	0.231E-03	50	0.215E-02	50	0.819E-03	50	237.6587	50	325.9284	50	287.5571	50	265.0928	50	232.3240	50	199.5551	50	166.7862	50	134.0174
55	0.133E-03	55	0.117E-03	55	0.181E-02	55	361.8421	55	575.1706	55	592.9171	55	644.7828	55	675.3101	55	705.8363	55	736.3640	55	766.8918
60	0.275E-04	60	0.280E-03	60	0.471E-04	60	*211.8034	60	277.9171	60	228.8149	60	*192.0948	60	*147.1599	60	*102.2209	60	*57.2899	60	*12.3549
65	0.762E-05	65	0.988E-05	65	0.353E-04	65	314.8451	65	480.9199	65	477.3649	65	501.0735	65	507.6368	65	514.2001	65	520.7634	65	527.3267
70	0.713E-06	70	0.297E-05	70	0.127E-04	70	312.3289	70	475.8718	70	471.1761	70	493.3770	70	498.6568	70	503.0365	70	509.2162	70	514.4959
75	0.111E-05	75	0.257E-05	75	0.399E-05	75	306.0399	75	582.2997	75	458.7077	75	474.1470	75	476.2215	75	478.2950	75	480.3705	75	482.4451
80	*0.490E-08	80	0.340E-07	80	0.523E-07	80	0.706E-07	80	*275.3544	80		80		80		80		80		80	
85		85	0.706E-07	85	0.123E-06	85															
90		90	*0.836E-09	90	*0.280E-08	90															

* VALORES MÍNIMOS

TABELA V

ANÁLISE DA TABELA V

O ponto inicial dado foi (4,4) e o valor mínimo sem perturbar a função foi atingido na iteração 80 com uma precisão de E-08.

Observamos que com perturbações de 10 e 20% o valor mínimo da função é obtido na iteração 88 com uma precisão de E-09 e E-08 respectivamente. Para perturbações de 30 a 100% os valores da função não são representativos.

Da análise realizada nas tabelas II, III, IV e V concluimos que sem perturbar a função, com quaisquer dos pontos iniciais usados, obtemos mínimos compatíveis sendo que o que varia é o número de iterações na medida em que o ponto inicial é dado mais longe do ótimo suposto.

Perturbando a função observamos que para um ponto inicial próximo da solução (tabela II) os valores obtidos são compatíveis enquanto que para valores iniciais longe da solução com perturbações acima de 20%, obtemos valores não significativos.

3.5 RESULTADOS COMPARATIVOS

Neste item vamos comparar os resultados obtidos com o algoritmo proposto (tabela I) e aqueles conseguidos com o algoritmo de Nelder-Mead (tabela II) já que não podemos considerar significativos pelos motivos apontados no item anterior as tabelas III, IV e V.

Considerando que cada avaliação da função teste com Nelder-Mead representa para nós um experimento e supondo que para realizar cada um destes no processo real é necessário um dia de tempo, analisando a tabela II sem perturbar a função observamos que para obter um valor compatível com o da tabela I precisaríamos de 30 dias, enquanto que na tabela I na primeira iteração (um dia) obtemos excelentes resultados.

Seguindo o mesmo raciocínio comparativo, com uma perturbação de 10% seriam necessários 25 dias, sendo que na segunda iteração da tabela (dois dias) atingimos o ótimo.

Com uma perturbação de 20% gastaríamos 25 dias, com 30% 10 dias, com 40% 15 dias, com 50% 15 dias e de 60 a 100% 5 dias, sendo que em todos esses casos o ótimo do algoritmo proposto é atingido em 17 iterações (dezessete dias).

APÊNDICE I

MÉTODOS DOS QUADRADOS MÍNIMOS LINEARES

1.1 PRINCÍPIO DOS QUADRADOS MÍNIMOS LINEARES

Consideremos que $f(x)$ seja uma função, e que $\{X_i\}$, para $i = 1, 2, \dots, n$ seja uma seqüência de pontos, nos quais temos valores observados de $f(x)$. Denotamos $f(x_i)$, valor exato em X_i , por f_i e o valor observado em X_i por \tilde{f}_i . Definimos o erro como:

$$E_i = f_i - \tilde{f}_i$$

Consideremos que $\vartheta_j(x)$, $j=1, 2, \dots, n$ seja uma seqüência definida de funções para cada x_i , ou seja:

$$\vartheta_a(x) = \sum_{r=1}^n a_r T_r(x)$$

Desta maneira, nosso objetivo é aproximar f_i através de uma combinação linear de $\{\vartheta(x)\}$ tal que:

$$f_i = \sum_{j=1}^m a_j^m(x_i) \quad \text{para } i=1, 2, \dots, n \quad (\text{I})$$

Sendo os coeficientes a_j^m incôgnitas a determinar, de forma que a seguinte expressão, seja reduzida ao mínimo.

$$E(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=0}^n (f(x_i) - \vartheta_a(x_i))^2 \quad (\text{II})$$

A condição necessária para E ter um mínimo é:

$$\frac{\partial E}{\partial a_r} = 0 \text{ para } r = 0, 1, \dots, n$$

Ou seja,

$$-2 \sum_{i=0}^n [f(x_i) - (a_0 T_0(x_i) + \dots + a_n T_n(x_i))] T_r(x_i) = 0$$

O que nos conduz a seguinte expressão:

$$a_0 \sum_{i=0}^n T_0(x_i) T_r(x_i) + \dots + a_n \sum_{i=0}^n T_n(x_i) T_r(x_i) = \sum_{i=0}^n f(x_i) T_r(x_i) \tag{III}$$

Para $0 \leq r \leq n$

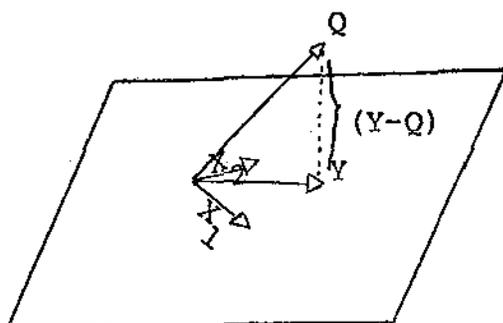
A expressão (III) constitui um sistema de $n+1$ equações com $n+1$ incógnitas, denominadas equações normais.

Pela resolução do sistema, determina-se o valor das incógnitas que satisfazem a equação (II), obtendo-se uma aproximação por quadrados mínimos lineares de $f(x)$ sobre $\{X_i\}$.

Assim definido o princípio dos quadrados mínimos lineares, no item seguinte daremos uma aplicação específica para o problema formulado no capítulo II.

1.2 APLICAÇÕES AO PROBLEMA

Dado um plano e dois vetores X_1, X_2 que pertencem ao plano, podemos obter um vetor resultante Y e aproximar a função Q definida no capítulo II a Y . Consideremos a seguinte figura:



Na figura I, temos que:

- X_1 e X_2 são vetores dados.
- Y é o vetor resultante de X_1, X_2
- $(Y - Q)$ é o vetor diferença, cuja norma (1) representa a menor distância de um ponto ao plano, onde $(Y-Q)$ satisfaz a condição de ortogonalidade a todo vetor do plano, isto é,

$$(Y-Q) \perp X_i, \text{ para } i = 1, 2, \dots, K$$

(1) Usamos norma Euclidiana

Podemos agora definir o erro mínimo para a função Q. De uma maneira geral, o erro mínimo pode ser expresso por:

$$(Y - Q) \equiv E_m^2 = |Y - Q|^2 \quad (IV)$$

Agora consideremos a função $Q \in R^n$ e $Y \in R^n$

Da expressão (IV) temos:

$$E_m^2 = |Y^1 - \frac{1}{2} (x^1)^t G x^1 + b x^1 + c|^2 + |Y^2 - \frac{1}{2} (x^2)^t G x^2 + b x^2 + c|^2 \\ + \dots + |Y^m - \frac{1}{2} (x^m)^t G x^m + b x^m + c|^2$$

Generalizando:

$$E_m^2 = \sum_{i=1}^m |Y^i - \frac{1}{2} (X^i)^t G X^i + b X^i + c|^2 \quad (V)$$

A seguir passaremos a deduzir as equações normais resultantes da aplicação do método dos quadrados mínimos lineares.

Temos definido,

$$(Y - Q) \perp X_i, \text{ para } i = 1, 2, \dots, k.$$

Por ortogonalidade,

$$\langle Y - Q, X_i \rangle = 0$$

Segue-se que:

$$\langle Q, X_i \rangle = \langle Y, X_i \rangle \quad (\text{VI})$$

A função Q pode ser expressa em forma matricial como:

$$Q(x) = A r \quad (\text{VII})$$

Onde A é a matriz de coeficientes e r é um vetor, cujas componentes são as componentes das incógnitas G , b e c .

Substituindo (VII) na equação (VI), temos:

$$\langle A r, X_i \rangle = \langle Y, X_i \rangle \quad (\text{VIII})$$

Onde X_i são os vetores colunas de A

Operando em (VIII) e por propriedade de produto interno, obtemos:

$$(X_i)^t A r = (X_i)^t Y$$

Ou seja,

$$A^t A r = A^t Y$$

Que representa um sistema de equações lineares, onde o número de equações é igual ao número de incógnitas.

Pela resolução do sistema de equações, obtemos como resultado um vetor, cujas componentes são as componentes da matriz A , vetor b e a constante c .

APÊNDICE II

MÉTODO DE NELDER-MEAD

2.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS

De maneira geral, os métodos numéricos para a determinação do valor ótimo de uma função não linear são iterativos, sendo necessário para iniciar o processo de busca, estimar um valor inicial para a solução. Desta forma é gerada uma sequência de aproximações sucessivas até atingir o ótimo.

Os diferentes procedimentos são caracterizados pelas estratégias para produzir esta série de aproximações. Os métodos diretos são aqueles em que a estratégia de busca é baseada na comparação dos valores que assume a função em cada ponto. Tais métodos não avaliam as derivadas da função. Entre estes métodos, encontra-se o método de Nelder - Mead, que passaremos a descrever no item seguinte.

2.2 DESCRIÇÃO DO MÉTODO

Neste método a figura geométrica denominada simplex tem uma importante relevância, como definiremos a seguir.

Definição: Um conjunto de $n+1$ pontos num espaço n -dimensional, forma um simplex. Quando os pontos são equidistantes, o simplex é denominado regular.

No caso em que $n = 2$, a figura correspondente é um triângulo. Para $n = 3$, um tetraedro, etc. A idéia prin-

principal do método, é que podemos facilmente formar um novo simplex a partir do original, e irmos trasladando o mesmo até conseguirmos que a figura "cerque" o mínimo.

Para descrever o processo, introduzimos a seguinte notação:

(1) X_h é o vértice correspondente para $f(X_h) = \max_i f(x_i)$

(2) X_s é o vértice correspondente para $f(X_s) = \max_i f(x_i)$,

$i \neq h$

(3) X_l é o vértice correspondente para $f(X_l) = \min_i f(x_i)$

onde $i=1,2,\dots,n+1$

(4) X_o é o centróide $\forall x_i, i \neq h$, sendo dado pela seguinte expressão:

$$X_o = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq h}}^{n+1} x_i$$

A seguir definiremos 3 operações básicas usadas neste método.

a) Reflexão, onde X_h é substituído por:

$$X_r = X_o + \alpha(X_o - X_h)$$

Onde o coeficiente de reflexão $\alpha > 0$ é a razão da distância de $[X_r X_o]$ para $[X_h X_o]$.

b) Expansão, onde X_r é expandido na direção de $(X_r - X_o)$,

tal que, um melhor valor da função é esperado. Usa-se a relação:

$$X_e = X_o + \gamma (X_r - X_o)$$

Onde o coeficiente de expansão $\gamma > 1$ é expresso pela razão da distância de $[X_r X_o]$ para $[X_h X_o]$.

c) Contração, é a operação através da qual o simplex é reduzido, usa-se a seguinte relação:

$$X_c = X_o + \beta (X_h - X_o)$$

Onde o coeficiente de contração β é a razão da distância de $[X_c X_o]$ para $[X_h X_o]$ e satisfaz $0 < \beta < 1$.

O método pode ser visualizado como um movimento definido através das operações descritas acima, que mostramos na Fig. 1, até o simplex "cercar" o ponto mínimo.

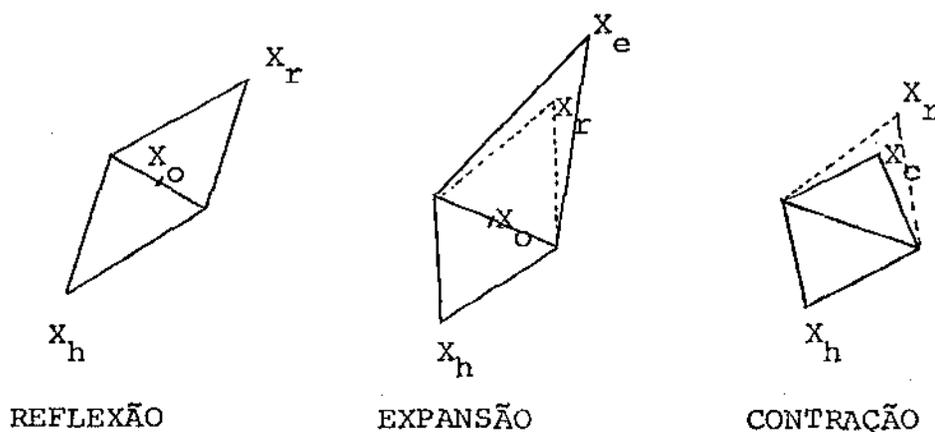


FIGURA 1

Podemos definir o processo como segue:

- 1) Um simplex original é formado, e a função é avaliada em cada vértice para determinar X_h , X_s e X_o .
- 2) Realiza-se a reflexão sobre X_h e avalia-se o ponto refletido X_r .
- 3) Se $f(X_s) \geq f(X_r) \geq f(X_l)$ substitue-se X_h por X_r e restaura-se o processo, com a formulação de um novo simplex.
- 4) Se $f(X_r) < f(X_l)$, é de se esperar que a direção $(X_r - X_o)$ possa dar um valor inferior da função, logo expandimos o novo simplex nessa direção. A expansão seria sucesso, se $f(X_l) > f(X_e)$. Neste caso, X_h é substituído por X_e . Em caso de falha, X_h é substituído por X_r . Em ambos os casos, o processo é restaurado através de um novo simplex.
- 5) Se no movimento de reflexão do item 2, a avaliação de X_r é tal que $f(X_h) > f(X_r) > f(X_s)$, substitue-se X_h por X_r e realiza-se o movimento de contração. Depois de efetuarmos a contração, compara-se $f(X_h)$ e $f(X_c)$. Se $f(X_h) > f(X_c)$ a contração é sucesso; X_h é substituído por X_c e reinicia-se o processo com um novo simplex. No caso de falha, $f(X_h) \leq f(X_c)$ e o último simplex é contraído em torno do ponto X_l , onde a função assume o menor valor, pela seguinte relação:

$$X_i = \frac{1}{2} (X_i + X_l)$$

Recomeçando-se o processo a partir do item 1.

O critério de parada do algoritmo sugerido por Nelder - Mead [7] é dado pela seguinte expressão:

$$\left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n+1} (f(X_i) - f(X_0))^2 \right\}^{\frac{1}{2}} < \epsilon$$

Onde ϵ é um valor prefixado suficientemente pequeno.

2.3 COMENTÁRIOS

O método de Nelder-Mead requer a continuidade de função, sendo de grande utilidade prática nos casos onde a função é não diferenciável ou as derivadas parciais da mesma são descontínuas, ou ainda quando o valor da função depende de alguma medida física, porém sujeita a erros aleatórios.

Os problemas citados, acarretam em geral dificuldades para os métodos que precisam avaliar a derivada da função.

A maior vantagem do método é a facilidade de programação. No referente a convergência, é em geral lenta e a rapidez da mesma depende da estimação dada para o ponto inicial.

Este método, juntamente com os demais métodos diretos, foram desenvolvidos através de processos heurísticos,

entretanto nenhuma prova sobre a convergência dos mesmos foi realizada até hoje. Porém experiências computacionais realizadas por muitos autores [4,6] asseguram que o Nelder-Mead é o melhor "método direto" disponível.

C O N C L U S Õ E S

Como já temos apontado no decorrer do presente trabalho, o oneroso no processo real de extração de sacarose por difusão é realizar experimentos com alterações nas variáveis até atingir um resultado razoável na extração. Considerando esse fator como muito importante é que temos proposto um algoritmo para resolver o problema, sem entrar em considerações no que respeita a eficiência computacional do mesmo, considerações estas que temos nos reservado para expor aqui.

As experiências numéricas realizadas mostraram um bom comportamento do algoritmo proposto, embora consideremos o mesmo lento, já que foi testado para duas variáveis e vinte iterações (cada iteração é considerada um experimento simulado) sendo que o tempo de CPU gasto foi de 3.5 minutos para cada rodada de programa nessas condições. Se o número de variáveis fosse incrementado, o tempo de CPU aumentaria consideravelmente.

O tempo computacional que é considerado grande e causado em boa parte pelo uso do método de Nelder-Mead no processo de otimização. Embora o algoritmo de Nelder-Mead seja considerado lento é extremamente eficiente em termos de convergência, razão pela qual optamos pelo uso do mesmo.

B I B L I O G R A F I A

- [1] Brodkie, K.W.: Unconstrained Minimization, em the State of the Art in Numerical Analysis, D. Jacobs (Ed.), Academic Press, New York, 1977.
- [2] Brüniche, Olsen H.: Diffusion of Beet and Cane, Sugar Technology, Review 1, 3-42, 1979.
- [3] Genie, G.V.: Evaluation of the Efficiency of Cane Diffusers by Transfer Units, S African Sugar J., 57, 601-607, 1973.
- [4] Kowalik, J. e Osborne M.R.: Methods for Unconstrained Optimization Problems, Richard Bellman (Ed.), American Elsevier Publishing Company Inc., New York, 1968.
- [5] Luenberger, D.G.: Introduction to Linear and Non Linear Programming, Adisson - Wesley, 1973.
- [6] Murray, W.: Numerical Methods for Unconstrained Optimization, London Academic, 1972.
- [7] Nelder, J.A. e Mead, R.: A Simplex Methods for Function Minimization, Computer J. 7, 303 - 310, 1965.
- [8] Ralston Antony: Introducción al Analisis Numérico, Editorial Limusa - Wiley S.E., Mexico, 1970.