

CONTRIBUIÇÕES DA HIBRIDIZAÇÃO DE UMA METAHEURÍSTICA ENXAME DE PARTÍCULAS COM UM MÉTODO DE BUSCA DIRETA

Joviana Sartori de Souza

Universidade Federal Fluminense- Departamento de Educação Matemática
28470 000, Santo Antônio de Pádua, RJ
joviana.sartori@gmail.com

Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira

Universidade Estadual do Rio de Janeiro- Instituto Politécnico do Rio de Janeiro
28630-050, Nova Friburgo, RJ
nelio@iprj.uerj.br

RESUMO

O cálculo do equilíbrio de fases de uma mistura é um problema muito presente em processos químicos, e para resolvê-lo precisa-se conhecer a priori o número de fases presentes na mistura, para isso a solução de um outro problema se faz necessária que é o teste de estabilidade, que pode ser abordado como um problema de otimização. No presente trabalho o objetivo é, através da solução do problema do teste de estabilidade, verificar as contribuições da associação de um método de busca direta, o método do conjunto gerador (MCG), à uma metaheurística de enxame de partículas (PSO), e como se pretende obter todos os pontos estacionários da função objetivo, utiliza-se a técnica de polarização. São comparados os resultados numéricos obtidos para quatro misturas com os algoritmos MCG-PSO-Polarização e PSO-Polarização, sendo verificada assim a real contribuição da busca local efetuada pelo método do conjunto gerador associada à busca global do PSO.

PALAVRAS CHAVE. Teste de estabilidade, Busca direta, Enxame de partículas.

Área principal (Programação Matemática, Metaheurística)

ABSTRACT

The calculation of equilibrium phases of a mixture is a problem very present in chemical processes, and to solve it necessary to know firstly the number of phases present in the mixture, so that the solution of another problem that is necessary is the stability test, which can be approached as an optimization problem. In this work the goal is, by solving the problem of the stability test, analyze contributions of the association of a direct search method, the method of generator set (MCG), a metaheuristic for the particle swarm (PSO), and as is desired all stationary points of the objective function, using the technique of polarization. Are compared the numerical results obtained for four mixtures with algorithms MCG-PSO-Polarization and PSO-Polarization, being checked so the real contribution of the local search performed by the method of generator set associated with the global search of PSO.

KEYWORDS. Stability test, direct search, particle swarm.

Main area (Mathematical Programming, Metaheuristics)

1. Introdução

O cálculo do equilíbrio de fases é um problema de grande importância em processos da engenharia, mas para resolvê-lo é aconselhável que se estude a priori a estabilidade termodinâmica do sistema, a qual consiste em determinar se uma dada mistura se apresenta em uma ou mais fases. Tal problema pode ser abordado como um problema de otimização, conhecido como a minimização da função distância do plano tangente à energia livre de Gibbs molar, onde modelos termodinâmicos, de natureza não convexa e não linear, são utilizados para descrevê-lo. Como tem sido ressaltado na literatura, para proporcionar uma completa previsão do equilíbrio de fases, faz-se necessário não apenas a determinação do minimizador global da função objetivo do teste de estabilidade, mas também a obtenção de todos os seus pontos estacionários. Souza (2010) aborda uma metodologia que emprega o algoritmo híbrido de otimização global recentemente proposto por Vaz e Vicente (2007), que conjuga o método do conjunto gerador desenvolvido por Kolda et al. (2003) com a metaheurística do enxame de partículas de Kennedy e Eberhart (1995). Esse método híbrido é utilizado juntamente com a técnica de polarização introduzida por Henderson et al. (2010), a qual ajuda a determinar mais de um minimizador de uma função objetivo através da resolução de diferentes subproblemas auxiliares de minimização. Metodologias utilizadas para a resolução desse problema termodinâmico também podem ser encontradas em Rangaiah (2001), Balogh et al. (2003), Srinivas and Rangaiah (2007).

Neste trabalho é feita uma comparação entre o algoritmo híbrido que conjuga o método do conjunto gerador, a metaheurística do enxame de partículas e a técnica de polarização com um algoritmo simplificado, que usa apenas a metaheurística do enxame de partículas juntamente com a técnica de polarização.

2. O problema

O problema do teste de estabilidade pode ser resolvido através do seguinte problema de otimização:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dados } z = (z_1, \dots, z_r)^T \in \Omega, T_0 \text{ e } P_0 \\ \text{Encontrar todos os } x = (x_1, \dots, x_r)^T \in \mathcal{R}^r \text{ que minimizam} \\ f(x) = \sum_{j=1}^{r-1} [\mu_j(x) - \mu_j(z)] - (\mu_r(x) - \mu_r(z))]^2 + [\sum_{i=1}^r x_i - 1]^2 \\ \text{Sujeito às restrições:} \\ 0 < x_i < 1, \forall i = 1, \dots, r. \end{array} \right. \quad (\text{P1})$$

Onde x_i é a fração molar do componente i presente na mistura, z_i é a composição global do componente i na mistura, μ_j é o potencial químico do componente j , μ_r é o potencial químico do componente r e o conjunto $\Omega = \{(z_1, \dots, z_r)^T \in \mathcal{R}^r; 0 < z_i < 1, \forall i = 1, \dots, r \text{ e } \sum_{i=1}^r z_i = 1\}$. Ressalta-se que como T_0 e P_0 são constantes, omite-se no problema (P1) o fato de os potenciais químicos serem calculados em termos de T_0 e P_0 .

É possível eliminar as restrições existentes no problema acima, transformando (P1) em um problema de minimização sem restrições. Para isso, considera-se a seguinte mudança de variáveis $y_i \mapsto x_i$, dada por

$$x_i = \frac{1}{e^{y_i} + 1}, \text{ para todo } i = 1, \dots, r. \quad (1)$$

Com essa troca de variáveis nota-se que x_i se mantém no intervalo $(0,1)$ para qualquer que seja o valor de $y_i \in (-\infty, +\infty)$. Além disso, $x_i \rightarrow 0$, quando $y_i \rightarrow +\infty$, e $x_i \rightarrow 1$, quando $y_i \rightarrow -\infty$

Com a mudança de variáveis definida na Eq. (1) o problema (P1) toma a forma pretendida, sem restrições:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dados } z = (z_1, \dots, z_r)^T \in \Omega, T_0 \text{ e } P_0 \\ \text{Encontrar todos os } y = (y_1, \dots, y_r)^T \in \mathcal{R}^r \text{ que minimizam} \\ f(y) = \sum_{j=1}^{r-1} [\mu_j(y) - \mu_j(z)]^2 + \left[\sum_{i=1}^r \left(\frac{1}{e^{y_i+1}} \right) - 1 \right]^2 \end{array} \right. \quad (\text{P2})$$

3- Os métodos de otimização

Uma vez que o problema de interesse exige a determinação de todos os minimizadores da função objetivo, e como essa tarefa será realizada via a técnica de polarização, então o método a ser escolhido tem de lidar com funções com descontinuidades, além de ser suficientemente robusto de modo a obter minimizadores globais de $f(y)$.

Assim, de imediato, as descontinuidades introduzidas pela técnica de polarização descartam métodos que exigem diferenciabilidade. Para contornar esse problema, será utilizado o método do conjunto gerador de busca (um tipo de algoritmo de busca padrão), um método de busca direta desenvolvido por Virginia Torczon e colaboradores, veja o excelente trabalho de revisão em Kolda et al. (2003). Aqui, o método do conjunto gerador de busca é denominado simplesmente de método do conjunto gerador, sendo abreviado por MCG. Apesar do MCG não ter sido desenvolvido para a determinação de minimizadores globais, em muitos casos ele tem mostrado a capacidade de obter extremos globais, em vez de simplesmente locais. Este fato estimulou Vaz e Vicente (2007) a “globalizarem” o método do conjunto gerador. Com essa finalidade, esses autores hibridizaram o referido método introduzindo direções de busca geradas por uma metaheurística recentemente introduzida na literatura de otimização global, o algoritmo de enxame de partículas conhecido como PSO (Particle Swarm Optimization). Os textos originais que introduziram o PSO são aqueles de Eberhart e Kennedy (1995) e Kennedy e Eberhart (1995). Assim, para equipar o MCG com a capacidade de obter todas as soluções do teste de estabilidade, considera-se a versão hibridizada de Vaz e Vicente (2007), a qual será denominada simplesmente de MCG-PSO associada à técnica de polarização.

3.1- A técnica de polarização

Na presente seção, considera-se uma estratégia que permite auxiliar a determinação de mais de um ponto estacionário da função distância, ou seja, uma ferramenta que ajuda a localizar mais de um minimizador global da função não negativa do problema (P2). Aqui, seguindo-se Henderson et al (2010), um ponto $y^* \in \mathcal{R}^r$ será denominado um pólo repulsivo (ou simplesmente um pólo) da função objetivo do problema (P2), se f é descontínua em y^* e $f(y) \rightarrow +\infty$, quando $y \rightarrow y^*$. Em geral, uma função f será chamada multipolarizada, se ela possui dois ou mais pólos.

A abordagem considerada parte do seguinte princípio: suponha que o primeiro minimizador global de (P2), denotado por $y^{(1)}$, já foi determinado pelo método de otimização global disponível.

Em seguida, para determinar um segundo minimizador global $y^{(2)}$, emprega-se o mesmo algoritmo de otimização na resolução do subproblema:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } f_1(y) = \frac{f(y) + \alpha}{\arctg \|y - y^{(1)}\|} \\ y \in \mathfrak{R}^r \end{cases} \quad (\text{P3})$$

onde $\alpha \geq 0$.

De uma maneira análoga, tendo-se obtido $y^{(2)}$, se o problema (P2) apresenta um outro minimizador global $y^{(3)}$, então se procura $y^{(3)}$ através da resolução do seguinte problema de otimização global:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } f_2(y) = \frac{f_1(y)}{\arctg \|y - y^{(2)}\|} \\ y \in \mathfrak{R}^r \end{cases} \quad (\text{P4})$$

Mais geralmente, tendo-se resolvido o problema (P4) e supondo-se que $n > 1$ soluções já foram determinadas, procura-se a $(n + 1)$ -ésima solução resolvendo o problema de minimização global:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } f_n(y) = \frac{f_{n-1}(y)}{\arctg \|y - y^{(n)}\|} \\ y \in \mathfrak{R}^r \end{cases} \quad (\text{P5})$$

A função obtida na n -ésima etapa deste processo (denominado de polarização) é a função multipolarizada, cujos pólos são as soluções anteriores $y^{(1)}, \dots, y^{(n)}$.

Assim, após n etapas, a função multipolarizada tem a forma:

$$f_n(y) = \frac{f(y) + \alpha}{\arctg \|y - y^{(1)}\| \times \dots \times \arctg \|y - y^{(n)}\|}$$

3.2- O Algoritmo por Enxame de Partículas

O algoritmo por enxame de partículas (PSO) se vale de uma população, o enxame de s partículas, onde s é o tamanho da população. A cada partícula associa-se um deslocamento, o qual, em um contexto puramente heurístico, simboliza o movimento da partícula. Seja t um instante de tempo, que no contexto do algoritmo de otimização representa uma iteração. Assim, a nova posição da i -ésima partícula no instante $t + 1$ é representada por $x^i(t + 1)$. Tal posição é calculada adicionando-se à antiga posição $x^i(t)$, ocupada no instante t , o vetor deslocamento $v^i(t + 1)$:

$$x^i(t + 1) = x^i(t) + v^i(t + 1) \quad (2)$$

Seguindo a versão do PSO usada por Vaz e Vicente (2007), para cada partícula i , os componentes do vetor $v^i = (v_1^i, \dots, v_n^i)^T \in \mathfrak{R}^n$ são atualizados pela equação escalar

$$v_j^i(t + 1) = \iota(t)v_j^i(t) + \mu(t)\omega_{1j}(t)(y_j^i(t) - x_j^i(t)) + \nu\omega_{2j}(t)(\hat{y}_j(t) - x_j^i(t)), \quad j = 1, \dots, n \quad (3)$$

Na Eq. (3), $\iota(t)$ é uma fator de peso chamado de fator de inércia, os parâmetros μ e ν são números reais positivos chamados, no contexto heurístico do PSO, de parâmetro cognitivo e parâmetro social, respectivamente. Para todo $j = 1, \dots, n$, os números $\omega_{1j}(t)$ e $\omega_{2j}(t)$ são números aleatórios gerados de maneira uniforme no intervalo $(0, 1)$. O valor $y_j^i(t)$ é o componente j do vetor posição $y^i(t)$ ocupado pela partícula com o i -ésimo melhor valor da função objetivo calculado antes. Isto significa que, no instante t , dentre todas as s partículas a

que ocupa a posição $y^i(t)$ possui o i -ésimo menor valor da função objetivo. Finalmente, $\hat{y}_j(t)$ é o componente j do vetor posição $\hat{y}(t)$ ocupado pela partícula que possui o menor valor da função objetivo, dentre as s partículas.

A atualização mostrada na Eq. (3) utiliza uma combinação linear estocástica de duas direções, a melhor i -ésima posição e a melhor posição entre todas. Desse modo, o PSO é um algoritmo estocástico de otimização.

A posição $\hat{y}(t)$ pode ser descrita como

$$\hat{y}(t) \in \underset{z \in \{y^1(t), \dots, y^s(t)\}}{\operatorname{argmin}} f(z). \quad (4)$$

O critério de parada do PSO cumpre a determinação da norma do vetor $v^i(t+1)$ ser menor do que uma dada tolerância v_{tol} , para todo $i = 1, \dots, s$.

3.3- O método do conjunto gerador

O algoritmo apresentado nesta seção é um caso particular das formas mais gerais estudadas por Kolda et al. (2003). Desse modo, aqui segue-se a forma simplificada do MCG adotado por Vaz e Vicente (2007), a qual tem mostrado na prática possuir a capacidade de conjugar simplicidade com eficiência.

Considere D_{\oplus} como sendo o conjunto das $2n$ direções coordenadas de \mathfrak{R}^n , definidas pelos vetores coordenados unitários positivos e negativos:

$$D_{\oplus} = \{e_1, e_2, \dots, e_n, -e_1, -e_2, \dots, -e_n\}. \quad (5)$$

Seja $D \in \mathfrak{R}^{n \times 2n}$ a matriz cujas colunas são os vetores que constituem o conjunto mostrado na Eq. (5).

Seguindo-se a descrição dada por Audet e Dennis (2003), em cada iteração t , o MCG considera dois conjuntos de pontos: a grade M_t e o conjunto P_t denominado de rol. A grade é dada por

$$M_t = \{y(t) + \alpha(t)Dz; z \in Z_+^{2n}\}, \quad (6)$$

onde o parâmetro $\alpha(t) > 0$ representa o tamanho do passo e Z_+ é o conjunto dos números inteiros não negativos. O rol é o conjunto de pontos obtidos deslocando-se de um passo $\alpha(t)$, a partir de $y(t)$, nas direções coordenadas definidas em D_{\oplus} , isto é,

$$P_t = \{y(t) + \alpha(t)d, d \in D_{\oplus}\}. \quad (7)$$

Nota-se que P_t é um subconjunto de M_t .

Cada etapa de busca do MCG realiza um número finito de avaliações de f nos pontos da grade M_t . As avaliações de f nos pontos do rol P_t são consideradas somente se a etapa de busca inicial falhar, ou seja, se após um número finito de avaliações de f não se encontrar um ponto y em M_t de modo que $f(y) < f(y(t))$. Se a etapa de busca nos pontos do rol também falha, ao se procurar $y \in P_t$ com $f(y) < f(y(t))$, então o valor $\alpha(t)$ deve ser reduzido. Portanto, uma outra etapa fundamental do MCG é a descrição de como $\alpha(t)$ é modificado. Uma vez que em caso de sucesso pode-se pretender aumentar o valor do passo, deve-se levar em consideração não só o decréscimo como também o crescimento de $\alpha(t)$. Tais expansões e contrações usam os fatores $\phi(t)$ e $\theta(t)$, respectivamente, os quais obedecem às seguintes regras:

$$\phi(t) = \bar{\tau}^{\ell_t}, \text{ para algum } \ell_t \in \{0, \dots, \ell_{\max}\}, \text{ se a iteração } t \text{ é bem sucedida,}$$

$$\theta(t) = \bar{\tau}^{m_t}, \text{ para algum } m_t \in \{m_{\max}, \dots, -1\}, \text{ se a iteração } t \text{ não é bem sucedida,}$$

onde $\bar{\tau} > 1$ é um número racional, ℓ_{\max} é um número inteiro positivo e m_{\max} é um número inteiro negativo. Esses números são previamente escolhidos e não se alteram com t . Uma maneira simples é considerar $\theta(t) = 1/2$, para toda iteração sem sucesso, e $\phi(t) = 1$ ou $\phi(t) = 2$ para as iterações bem sucedidas. Neste trabalho, considera-se $\theta(t) = 1/2$ e $\phi(t) = 2$.

3.4- O algoritmo híbrido MCG-PSO

A necessidade de hibridizar o MCG reside no fato das suas propriedades teóricas indicarem que esse algoritmo é um método de busca local. No entanto, alguns experimentos numéricos têm mostrado que o MCG é capaz de encontrar minimizadores globais para uma classe de problemas de interesse prático, veja Meza e Martinez (1994). Esses resultados motivaram a hibridização proposta por Vaz e Vicente (2007) que procura globalizar o MCG para qualquer aplicação.

O método MCG-PSO é um algoritmo híbrido estocástico e populacional que incorpora o PSO na etapa de busca inicial do MCG. Assim, essencialmente, as partículas do PSO fazem o papel dos pontos da grade do MCG e uma iteração do PSO substitui uma busca finita em M_t . Com isso, a busca local do MCG é substituída pela busca global do PSO, o que conduz a iteração para vizinhanças de minimizadores globais. Nesse novo contexto, a busca no rol continua sendo uma busca local que é realizada somente se uma iteração do PSO não diminui o valor de f em $\hat{y}(t)$, o melhor ponto corrente. Assim, se a busca no rol é bem sucedida, então é sinal que o rol possui um ponto $\hat{y}(t+1) = \hat{y}(t) + \alpha(t)d$ capaz de causar um decréscimo de f com relação ao ponto $\hat{y}(t)$. Caso contrário o tamanho do passo $\alpha(t)$ é decrescido. O critério de parada do MCG-PSO procura conjugar o critério do MCG com aquele do PSO.

Algoritmo MCG-PSO.

Dados. Um número inteiro positivo s indicando o tamanho da população, um número racional $\bar{\tau} > 0$ e duas tolerâncias α_{tol} e v_{tol} para o critério de parada conjugado.

Passo 1. Gere aleatoriamente tanto as posições iniciais das partículas do enxame, $x^1(0), \dots, x^s(0)$, como também os vetores descrevendo as velocidades iniciais, $v^1(0), \dots, v^s(0)$.

Passo 2. Faça $t = 0$, $y^i(t) = x^i(0)$, $\forall i = 1, \dots, s$; e $\hat{y}(t) \in \underset{z \in \{y^1(t), \dots, y^s(t)\}}{\operatorname{argmin}} f(z)$.

Passo 3. Faça $FLAG = \text{insucesso}$.

Passo 4. (Uma iteração do PSO)

Faça $\hat{y}(t+1) = \hat{y}(t)$.

Para $i = 1, \dots, s$ faça:

- Se $f(x^i(t)) < f(y^i(t))$ então
 - (a) faça $y^i(t+1) = x^i(t)$.
 - (b) Se $f(y^i(t+1)) < f(\hat{y}(t+1))$, então
 - * faça $\hat{y}(t+1) = y^i(t+1)$,
 - * faça $\alpha(t+1) = \phi(t)\alpha(t)$,
 - * faça $FLAG = \text{sucesso}$.
- Se $f(x^i(t)) \geq f(y^i(t))$ então
 - (c) faça $y^i(t+1) = y^i(t)$.

Passo 5. Se $FLAG = \text{sucesso}$ vá para o Passo 7. Senão vá para o Passo 6.

Passo 6. (Busca no Rol para diminuir o valor de f na melhor partícula do PSO)

- Se existe $d \in D_{\oplus}$ tal que $f(\hat{y}(t) + \alpha(t)d) < f(\hat{y}(t))$ então
 - (a) faça $\hat{y}(t+1) = \hat{y}(t) + \alpha(t)d$,
 - (b) faça $\alpha(t+1) = \phi(t)\alpha(t)$.
- Caso contrário, se $f(\hat{y}(t) + \alpha(t)d) \geq f(\hat{y}(t))$ para todo $d \in D_{\oplus}$ então
 - (c) faça $\hat{y}(t+1) = \hat{y}(t)$,
 - (d) faça $\alpha(t+1) = \theta(t)\alpha(t)$.

Passo 7. Calcule $v^i(t+1)$ e $x^i(t+1)$, $\forall i = 1, \dots, s$; usando as fórmulas (2) e (3).

Passo 8. Se $\alpha(t) < \alpha_{tol}$ e $\|v^i(t+1)\| < v_{tol}$, $\forall i = 1, \dots, s$; então pare. Caso contrário, faça $t = t+1$ e volte para o Passo 3.

4- Resultados numéricos

Para se analisar a efetiva contribuição do método de busca local usado na hibridização MCG-PSO-Polarização, na presente seção a metodologia proposta é comparada com o algoritmo PSO, sem a ajuda da busca local efetuada pelo método do Conjunto Gerador. Mais precisamente, são comparados os resultados numéricos obtidos com os algoritmos MCG-PSO-Polarização e PSO-Polarização, onde o último indica a utilização do método PSO juntamente com a técnica de polarização. Enfatizamos que, em cada caso estudado, os parâmetros comuns e os pontos de inicialização são os mesmos para ambos os métodos.

Para tal finalidade, serão mostrados os tempos de máquina (em segundos), os números de iterações (niter) e os números de avaliações (naval) da função objetivo, os quais são exigidos por cada metodologia para a determinação de um ponto estacionário.

A Tabela 4.1 compara os resultados obtidos para a mistura etanol/ciclohexano. Nota-se que o método MCG-PSO-Polarização é o mais eficiente, para todas as composições de alimentação testadas.

Tabela 4.1: Comparações para a mistura etanol/ciclohexano.

Composição global	Pontos estacionários	PSO-Polarização			MCG-PSO-Polarização		
		Tempo(seg.)	Niter	Naval	Tempo(seg.)	Niter	Naval
(0,0500, 0,9500)	(0.5979, 0.4021)	7.8000	1262	10104	2.3860	990	2942
	(0.0942, 0.9058)	3.3390	513	4112	1.1550	518	1364
(0,1000, 0,9000)	(0.5878, 0.4122)	6.0370	967	7744	2.0130	774	2438
	(0.0475, 0.9525)	2.7690	430	3448	1.8090	520	1924
(0,1500, 0,8500)	(0.4880, 0.5120)	3.1130	469	3760	1.6680	734	1766
	(0.0352, 0.9648)	2.6580	407	3264	0.8650	226	895
(0,2000, 0,8000)	(0.4000, 0.6000)	2.3260	353	2832	1.5420	543	1877
	(0.0304, 0.9696)	2.6000	383	3072	0.7120	176	720
(0,2500, 0,7500)	(0.3314, 0.6686)	3.1300	454	3640	1.7870	983	1733
	(0.0285, 0.9715)	3.5870	495	3968	0.7590	166	685
(0,3500, 0,6500)	(0.2351, 0.7649)	2.5250	348	2792	1.6900	581	2087
	(0.0288, 0.9712)	3.3970	486	3896	0.6350	168	692
(0,4000, 0,6000)	(0.2000, 0.8000)	2.4500	383	3072	1.2010	546	1344
	(0.0304, 0.9696)	6.2560	893	7152	1.0300	178	727
(0,4500, 0,5500)	(0.1702, 0.8298)	2.8390	412	3304	1.7010	540	1770
	(0.0327, 0.9673)	3.4010	451	3616	0.9210	196	790

(0,5000, 0,5000)	(0,1439, 0,8561)	2,8700	407	3264	1,6230	586	1948
	(0,0361, 0,9639)	2,5590	372	2984	0,8110	238	937
(0,6000, 0,4000)	(0,0929, 0,9071)	2,8860	456	3656	0,2810	67	313
	(0,0506, 0,9494)	3,0420	447	3584	1,1550	533	1392
(0,6500, 0,3500)	(0,0678, 0,9323)	3,2760	477	3824	1,8250	697	2150
(0,7500, 0,2500)	(0,0675, 0,9325)	3,9470	577	4624	1,5600	694	1651

A Tabela 4.2 apresenta os resultados para a mistura ácido cítrico/2-butanol, mostrando que o método MCG-PSO-Polarização foi, de maneira geral, mais eficiente.

Tabela 4.2: Comparações para a mistura ácido cítrico/2-butanol.

Composição global	Pontos estacionários	PSO-Polarização			MCG-PSO-Polarização		
		Tempo(seg.)	Niter	Naval	Tempo(seg.)	Niter	Naval
(0,0500, 0,9500)	(0,7096, 0,2904)	2,9440	425	3408	0,3300	101	446
	(0,0070, 0,9930)	3,6520	536	4296	0,4300	77	370
(0,1000, 0,9000)	(0,5705, 0,4295)	3,5000	505	4048	1,2540	602	1508
	(0,0027, 0,9973)	5,2450	794	6360	0,5470	79	376
(0,1500, 0,8500)	(0,4558, 0,5442)	2,6830	399	3200	1,3110	517	1310
	(0,0016, 0,9984)	1,3880	75	1368	0,4060	70	348
(0,2000, 0,8000)	(0,3695, 0,6305)	2,6050	416	3336	1,3570	579	1362
	(0,0012, 0,9988)	2,9330	176	3186	0,4680	73	352
(0,2500, 0,7500)	(0,3044, 0,6956)	3,3690	432	3464	3,2300	664	3556
	(0,0011, 0,9989)	2,0750	123	2232	0,5150	78	376
(0,3000, 0,7000)	(0,0011, 0,9989)	9,2150	570	10278	0,3300	86	410
	(0,2539, 0,7461)	0,0460	1	36	1,4350	524	1941
(0,3500, 0,6500)	(0,2136, 0,7864)	3,6820	511	4096	0,6240	341	588
	(0,0011, 0,9989)	1,7000	96	1746	0,4050	70	348
(0,4000, 0,6000)	(0,1806, 0,8194)	3,2140	498	3992	1,9340	622	2039
	(0,0013, 0,9987)	2,0910	123	2232	0,3430	64	326
(0,4500, 0,5500)	(0,1529, 0,8471)	3,6970	477	3824	1,8100	520	1862
	(0,0015, 0,9985)	1,5450	88	1602	0,5610	68	341
(0,5000, 0,5000)	(0,1291, 0,8709)	3,2760	467	3744	1,9100	746	2499
	(0,0019, 0,9981)	1,9500	117	2124	0,3590	73	359
(0,6000, 0,4000)	(0,0890, 0,9110)	2,6830	397	3184	2,5110	774	3115
	(0,0031, 0,9969)	4,4000	268	4842	0,5300	68	340
(0,6500, 0,3500)	(0,0711, 0,9289)	3,3390	480	3848	3,4640	1010	4388
	(0,0043, 0,9957)	3,9460	255	4608	0,5000	71	349
(0,7500, 0,2500)	(0,0334, 0,9666)	2,8550	441	3536	0,4210	109	498
	(0,0117, 0,9883)	3,3540	530	4248	0,4370	146	642

A Tabela 4.3 mostra que no estudo de estabilidade da mistura ternária acetoneitrilo/benzeno/n-heptano o método MCG-PSO-Polarização é o mais eficiente, mantendo-se suficientemente robusto de modo a determinar mais do que um ponto estacionário.

Tabela 4.3: Comparações para a mistura acetoneitrilo/benzeno/n-heptano.

Composição global	Pontos estacionários	PSO-Polarização			MCG-PSO-Polarização		
		Tempo(seg.)	Niter	Naval	Tempo(seg.)	Niter	Naval
(0,40, 0,05, 0,55)	(0,2215,0,0481,0,7304)	16,3490	223	5376	5,0700	253	1692
	(0,9114,0,0236,0,0650)	21,8870	297	7152	12,5270	282	5144
(0,45, 0,05, 0,50)	(0,1919,0,0473,0,7608)	15,8340	228	5496	11,4970	275	4398
	(0,9049,0,0248,0,0704)	18,5020	239	5760	9,1890	294	3173
(0,60, 0,05, 0,35)	(0,1320,0,0467,0,8213)	15,0080	191	4608	10,3900	477	3269
	(0,8658,0,0319,0,1024)	37,1280	274	6600	7,3640	315	2505
(0,70, 0,05, 0,25)	(0,1118,0,0493,0,8390)	14,4300	203	4896	14,5080	293	5507
	(0,8114,0,0412,0,1474)	24,3210	337	8112	13,6190	307	5148
(0,50, 0,10, 0,40)	(0,1720,0,0953,0,7327)	12,2460	172	4152	13,1510	264	4938
	(0,8526,0,0589,0,0885)	21,4960	283	6816	10,3110	265	3757
(0,55, 0,10, 0,35)	(0,1536,0,0956,0,7508)	20,5140	301	7248	8,2060	579	2099
	(0,8341,0,0646,0,1014)	21,9810	264	6360	15,9270	306	6337
(0,65, 0,10, 0,25)	(0,1309,0,1006,0,7685)	18,5010	245	5904	10,4360	213	4451
	(0,7736,0,0823,0,1442)	18,8450	246	5928	19,7190	371	7759
(0,45, 0,15, 0,40)	(0,2023,0,1460,0,6518)	18,3770	245	5904	10,2960	252	3736
	(0,8171,0,0919,0,0910)	21,6680	288	6936	10,2960	254	3795
(0,50, 0,15, 0,35)	(0,1805,0,1465,0,6730)	29,2500	200	4824	21,9960	345	7498
	(0,7976,0,0995,0,1029)	48,2660	261	6288	9,9990	532	2662
(0,60, 0,15, 0,25)	(0,1548,0,1538,0,6914)	16,8250	222	5352	6,3090	215	2329
	(0,7311,0,1246,0,1443)	33,1330	466	11208	10,6510	359	4368
(0,45, 0,20, 0,35)	(0,2154,0,1989,0,5857)	17,8850	217	5232	14,6130	292	6291
	(0,7528,0,1387,0,1085)	22,7200	276	6648	13,1620	355	5725
(0,55, 0,20, 0,25)	(0,1863,0,2085,0,6051)	17,7090	227	5472	8,0650	210	3563
	(0,6805,0,1700,0,1495)	21,9840	271	6528	19,3860	238	5736

A Tabela 4.4 ilustra as comparações obtidas com o estudo da mistura ternária água/ácido cítrico/2-butanol. Mais uma vez destaca-se a robustez e a eficiência do método MCG-PSO-Polarização. Nota-se que em mais de uma composição de alimentação considerada nessa tabela o método PSO-Polarização necessitou de um número muito grande de avaliações para minimizar a função objetivo polarizada. Assim, novamente a técnica de polarização trabalhou melhor quando acoplada ao método híbrido com busca local.

Tabela 4.4: Comparações para a mistura água/ácido cítrico/2-butanol.

Composição global	Pontos estacionários	PSO-Polarização			MCG-PSO-Polarização		
		Tempo(seg.)	Niter	Naval	Tempo(seg.)	Niter	Naval
(0,10, 0,05, 0,85)	(0,0846,0,4743,0,4411)	15,5370	222	5352	22,9160	308	4885
	(0,0698,0,0108,0,9195)	16,5520	212	5112	9,5630	275	3289
(0,20, 0,05, 0,75)	(0,2530,0,1748,0,5722)	16,6290	233	5616	8,6110	226	3409
	(0,1752,0,0276,0,7972)	26,7540	186	4488	9,5480	165	2001
(0,05, 0,10, 0,85)	(0,0298,0,4964,0,4738)	19,6100	208	5016	2,200	127	1682

	(0.0219.0.0034.0.9747)	88.7800	327	65600	2.1380	217	820
(0,15, 0,10, 0,75)	(0.1544.0.2908.0.5548)	14.7730	109	2640	9.7810	185	2085
	(0.0835.0.0071.0.9094)	944.2850	3777	755600	2.4960	229	839
(0,20, 0,10, 0,70)	(0.2177.0.1838.0.5985)	8.4400	112	2712	10.1080	264	4438
	(0.1257.0.0119.0.8624)	9.2820	144	3480	5.5380	306	2049
(0,05, 0,15, 0,80)	(0.0363.0.3989.0.5649)	13.5410	189	4560	8.1900	227	2903
	(0.0190.0.0022.0.9789)	35.1940	536	24702	5.8180	1173	2159
(0,10, 0,15, 0,75)	(0.0895.0.3230.0.5875)	18.7510	202	4872	6.2240	132	2372
	(0.0432.0.0032.0.9536)	32.6040	535	24656	1.7000	162	710
(0,15, 0,15, 0,70)	(0.1506.0.2353.0.6141)	6.4500	211	5088	2.7140	117	2325
	(0.0733.0.0051.0.9216)	133.6150	451	90400	1.6380	150	685
(0,05, 0,20, 0,75)	(0.0429.0.3218.0.6353)	5.8010	186	4488	3.1410	179	2454
	(0.0184.0.0018.0.9798)	133.6410	502	100600	1.4820	137	662
(0,10, 0,20, 0,70)	(0.0965.0.2568.0.6467)	4.8210	155	3744	3.3390	110	2611
	(0.0418.0.0028.0.9554)	139.1370	492	98600	2.7770	171	731
(0,20, 0,20, 0,60)	(0.1878.0.1126.0.6996)	6.5950	211	5088	2.3320	141	1822
	(0.1095.0.0093.0.8812)	934.2770	3707	715500	11.6840	1067	7309
(0,10, 0,30, 0,60)	(0.1080.0.1568.0.7352)	6.0460	188	4536	3.9940	151	3124
	(0.0471.0.0033.0.9495)	90.4800	310	62200	2.3400	227	841

5- Conclusões

Os resultados indicam que, com relação ao algoritmo PSO-Polarização, o método híbrido MCG-PSO-Polarização encontra os pontos estacionários da função distância com um tempo bem mais reduzido. Este fato decorre do menor número de avaliações da função objetivo, principalmente nas etapas de polarização. Em tais etapas a busca refinada proveniente da exploração local do método do conjunto gerador acelera a convergência do processo iterativo, melhorando consideravelmente o desempenho da busca global realizada pelo PSO, mesmo em situações aparentemente difíceis.

Referências

- Audet, C., Dennis, J. E.** Analysis of generalized pattern searches. *SIAM J. Optimization*, v. 13, n. 3, p. 889-903, 2003.
- Balogh, J., Csendes, T., Stateva, R. P.** Application of a stochastic method to the solution of the phase stability problem: cubic equations of state, *Fluid Phase Equilibria*, 212 (1-2), 257-267, 2003.
- Eberhart, R., Kennedy, J.** New optimization using particle swarm theory. In: *IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON MICRO MACHINE AND HUMAN SCIENCE*, 6., 1995, Nagoya. Proceedings... . Piscataway, N J: IEEE, 1995. p. 39-43.
- Henderson, N., Sacco, W. F., Platt, G. M.** Finding more than one root of nonlinear equations via a polarization technique: an application to double retrograde vaporization. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 88, n.5-6, p. 551-561, 2010.

Kennedy, J., Eberhart, R. Particle swarm optimization. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON NEURAL NETWORKS, 1995, Perth. Proceedings... Piscataway, NJ: IEEE Service Center, 1995. p. 1942-1948.

Kolda, T. G., Lewis, R. M., Torczon, V. Optimization by direct search: new perspective on some classical and modern methods. *SIAM Review*, v. 45, n. 3, p. 385-482, 2003.

Meza, J. C., Martinez, M. L. On the use of direct search methods for the molecular conformation problem. *J. Comput. Chem.*, v. 15, n. 6, p. 627-632, 1994.

Rangaiah, G. P. Evaluation of genetic algorithms and simulated annealing for phase equilibrium and stability problems, *Fluid Phase Equilibria* 187-188, 83-109, 2001.

Souza, J.S. “Análise global da estabilidade termodinâmica de misturas: um estudo com o método do conjunto gerador”, Tese de Doutorado, IPRJ-Uerj, 2010.

Srinivas, M., Rangaiah, G. P. A study of differential evolution and tabu search for benchmark, phase equilibrium and phase stability problems. *Computers & Chemical Engineering* 31 (7), 760-772, 2007.

Vaz, A. I., Vicente, L. N. A particle swarm pattern search method for bound constrained global optimization. *Journal of Global Optimization*, v. 39, n. 2, p. 197-219, 2007.