

Determinando Pontos Estacionários de um Problema Termodinâmico Através de um Método Híbrido

Shayane da Silva Carvalho¹

Instituto do Noroeste Fluminense de Educação Superior, UFF, RJ

Joviana Sartori de Souza²

Departamento de Tecnologia de Alimentos, UFF, RJ

Este resumo tem como principal objetivo abordar o estudo da determinação de pontos estacionários de um problema termodinâmico através da aplicação de um método híbrido de otimização. Trata-se da minimização da função distância do plano tangente à energia livre de Gibbs molar, um problema que se enquadra em um tema de grande importância em processos da Engenharia Química: o cálculo do equilíbrio químico de fases de uma mistura. Para a resolução do problema foi utilizado o método híbrido Enxame de Partículas/Hooke Jeeves (PSO/HJ), um algoritmo que acopla o método de busca direta Hooke Jeeves (HJ) [3] às iterações internas da metaheurística populacional Enxame de Partículas (PSO) [1]. Para auxiliar o método PSO/HJ na busca pelos minimizadores da função objetivo, foi necessário utilizar a técnica da polarização [2] e também, em alguns casos, a técnica de repulsão [4]. A técnica da polarização é uma ferramenta que permite que sejam encontrados todos os pontos estacionários, que são os minimizadores globais da função distância. Em resumo, a estratégia consiste em resolver uma sequência de problemas de otimização não linear, de forma que cada ponto encontrado seja retirado do espaço de busca, permitindo assim, que uma nova solução seja obtida. O processo deve ser feito diversas vezes até que todos os mínimos sejam encontrados. A técnica de repulsão é uma ferramenta que deve ser utilizada em conjunto com a polarização. Esta estratégia é inserida após as equações de atualização de posições e velocidades do método PSO, e garante que uma partícula movendo-se em direção a um dos pontos já encontrados, seja repelida para longe dele. O método PSO/HJ foi testado para 14 misturas termodinâmicas, sendo dez misturas binárias, duas ternárias, uma quartenária e uma mistura quindenária. Cada mistura pôde exibir dois ou mais pontos estacionários, e são estes que permitem a estabilidade de cada sistema. Como exemplo, pode ser observado na Tabela 1, resultados para a mistura quindenária. As alimentações são os percentuais de cada componente adicionado à mistura e o objetivo é verificar o tempo computacional gasto pelo método PSO/HJ na busca pelos pontos de estabilidade desse sistema. Para validação dos resultados foi feita uma comparação com os pontos estacionários determinados por [5]. Com os resultados obtidos pode ser verificado que o método PSO/HJ apresenta bom desempenho na resolução do problema, encontrando todos os pontos estacionários das misturas testadas. De forma geral, o método permite encontrar as soluções com bons tempos computacionais, mostrando-se uma estratégia eficaz para a otimização do problema. Cabe ser destacado que nas misturas de três, quatro e cinco componentes, os minimizadores foram obtidos com menor tempo, e isto indica que o método PSO/HJ tem um melhor funcionamento nas misturas de maior dimensão.

¹shay-carvalho@hotmail.com

²joviana.sartori@gmail.com

Tabela 1: Mistura n-propanol (1) / n-butanol (2)/ benzeno (3)/ etanol (4) / água (5).

Alimentação	Pontos Estacionários	PSO/HJ	
		T(s)	It.
(0.148 0.052 0.500 0.100 0.200)	(0.1480 0.0520 0.5000 0.1000 0.2000)	3.3462	222
	(0.0644 0.0203 0.9280 0.0480 0.0380)	4.6554	304
	(0.0258 0.0006 0.0018 0.0376 1.0000)	3.5880	228
(0.148 0.052 0.540 0.080 0.180)	(0.1480 0.0520 0.5372 0.0800 0.1800)	4.1330	149
	(0.0690 0.0226 0.8221 0.0430 0.0432)	2.8947	107
	(0.0249 0.0005 0.0015 0.0295 1.0000)	8.1287	518
(0.148 0.052 0.560 0.080 0.160)	(0.1480 0.0520 0.5600 0.0800 0.1600)	2.2425	147
	(0.0823 0.0277 0.7874 0.0495 0.0527)	2.4893	161
	(0.0249 0.0006 0.0016 0.0314 0.9416)	2.7122	172
(0.148 0.052 0.500 0.120 0.180)	(0.1466 0.0515 0.5088 0.1185 0.1747)	2.2572	143
	(0.1321 0.0369 0.1368 0.1460 0.5351)	3.9386	227
	(0.1291 0.0450 0.6010 0.1020 0.1247)	4.6400	234
	(0.1125 0.0267 0.1008 0.1449 0.6041)	5.1110	322
	(0.0276 0.0008 0.0028 0.0502 1.0000)	6.4556	400
(0.148 0.052 0.520 0.100 0.180)	(0.1480 0.0520 0.5201 0.1000 0.1799)	2.9210	186
	(0.1651 0.0553 0.3110 0.1252 0.3434)	1.0506	65
	(0.1631 0.0536 0.2776 0.1279 0.3777)	1.9442	129
	(0.0740 0.0245 0.8265 0.0554 0.0473)	5.0504	332
	(0.0277 0.0007 0.0021 0.0408 1.0000)	15.9794	1000

Referências

- [1] Kennedy, J. e Eberhart, R. Particle swarm optimization, *Proceedings of ICNN'95-International Conference on Neural Networks*, volume 4, 1942–1948, 1995.
- [2] Henderson, N., Sacco, W. F. e 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*, 551–561, 2010.
- [3] Hooke, R. e Jeeves, T. A. Direct Search Solution of Numerical and Statistical Problems, *Journal of the Association for Computing Machinery*, 212-229, 1961.
- [4] Parsopoulos, K. E. e Vrahatis, M. N. On the computation of all global minimizers through particle swarm optimization, *IEEE Transactions on evolutionary computation*, 211–224, 2004.
- [5] Souza, J. S. Análise global da estabilidade termodinâmica de misturas: um estudo com o método do conjunto gerador, Tese de Doutorado, IPRJ-UERJ, Nova Friburgo, 2010.