

VALIDAÇÃO DO MÉTODO ESTOCÁSTICO R2W NA OBTENÇÃO DE ÓTIMOS GLOBAIS DE FUNÇÕES NÃO-LINEARES

Melicia A. C. Ribeiro, Leôncio D. T. Câmara e Antônio J. Silva Neto

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico, Nova Friburgo - RJ, 28630-050, Brasil

Palavras-chave: Otimização, Métodos Estocásticos, Luus-Jaakola, R2W.

Resumo. A otimização é uma técnica conhecida há mais de um século, sendo utilizada em várias áreas como física, matemática e engenharia, dentre outras. Tal técnica possibilita melhorar o que já existe, e também projetar o novo com mais eficácia e menor custo. Os problemas de otimização visam maximizar ou minimizar uma função matemática, sujeita ou não a um conjunto de restrições, cuja solução pode ser obtida através de métodos determinísticos, estocásticos ou híbridos. A aplicação dos métodos estocásticos vem aumentando nos últimos anos, demonstrando o seu potencial no estudo e análise dos vários sistemas em aplicações de engenharia. Neste trabalho foram adotados os métodos estocásticos LJ e R2W na obtenção dos ótimos de equações não-lineares. Para isso, os referidos métodos foram implementados na Linguagem de Programação C, cujo objetivo é realizar um comparativo dos resultados atingidos pelo novo método de otimização R2W com os resultados obtidos pelo clássico algoritmo LJ criado há aproximadamente 40 anos.

E-mail addresses: macribeiro@iprj.uerj.br, dcamara@iprj.uerj.br, ajsneto@iprj.uerj.br

1 INTRODUÇÃO

No dia a dia, muitas pessoas se deparam com situações que envolvem tomadas de decisões nos mais diversos campos [10], tomar a decisão que gere a solução ideal nem sempre é fácil. Matematicamente, solucionar problemas desse tipo é resolver um problema de otimização [7].

As técnicas de otimização são conhecidas por mais de um século e são utilizadas na resolução de problemas de engenharia [5, 11, 4], física [10], administração, logística, transporte, economia [2], biologia, dentre outras ciências. Tais técnicas possibilitam melhorar o que já existe, e também projetar o novo com mais eficácia e menor custo [10].

O avanço tecnológico ocorrido nos últimos anos tem alavancado o crescimento das técnicas de otimização. Um algoritmo de otimização tem por meta otimizar uma função objetivo que pode possuir múltiplas variáveis e que satisfaça todas as restrições estabelecidas [10, 11], sendo a solução de tais funções obtidas através de métodos determinísticos (baseado no gradiente) e estocásticos (busca aleatória) [10]. Também há a possibilidade de realizar hibridização entre os métodos estocásticos com métodos determinísticos [11], na qual o primeiro realiza um pequeno número de iterações de modo a encontrar uma estimativa inicial para ser explorada pelo segundo método [7].

Há na literatura diversos de métodos de otimização [10, 11, 3, 2, 5], mas, ainda há centenas de problemas sem solução, sendo que nem sempre um método consegue alcançar o resultado de um problema desejado [11, 2]. Além disso, sempre que se propõe um novo método de otimização é de praxe realizar testes através de funções matemáticas clássicas para verificar a robustez do novo método de otimização [7].

O método de otimização R2W foi proposto por Câmara e Silva Neto [3] em 2008, na solução de problemas inversos em transferência de massa, envolvendo a adsorção de biomoléculas. Durante as pesquisas realizadas sobre o referido método, verificou-se que os testes que visa analisar a eficácia de um método de otimização não haviam sido realizados até então. Por esse motivo, foram selecionadas seis funções matemáticas clássicas [6], com características distintas, cujo objetivo foi a obtenção dos mínimos globais das mesmas através dos já citados métodos estocásticos. Além disso, como a solução analítica de tais funções é conhecida, disponibilizada na pesquisa realizada por Molga e Smutnicki [6], foi possível realizar um comparativo entre as soluções numérica e analítica, cujo objetivo foi verificar qual dentre os métodos de otimização estudado atingirá valores mais próximos da solução analítica.

2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

2.1 Caracterização do Problema

Existem várias classes de funções de teste [6], sendo que todas as funções analisadas nesse trabalho são contínuas e com características diversificadas, tais como: unimodal, convexo, multidimensional; multimodal, bidimensional e com um pequeno número de extremos locais e multimodal, bidimensional e com grande número de extremos locais.

Segue abaixo as seis funções de otimização analisadas nesse estudo,

$$f_1(x_1, x_2) = x_1^4 + x_2^4 - 3 \quad (1)$$

$$f_2(x_1, x_2) = 20 + (x_1^2 - 10 \cos(2\pi x_1)) + (x_2^2 - 10 \cos(2\pi x_2)) \quad (2)$$

$$f_3(x_1, x_2) = (4 - 2, 1x_1^2 + \frac{x_1^4}{3})x_1^2 + x_1x_2 + (4x_2^2 - 4)x_2^2 \quad (3)$$

$$f_4(x_1, x_2) = -x_1 \sin(\sqrt{|x_1|}) - x_2 \sin(\sqrt{|x_2|}) \quad (4)$$

$$f_5(x_1, x_2) = \frac{x_1^2}{4000} + \frac{x_2^2}{4000} - (\cos(\frac{x_1}{\sqrt{1}}))(\cos(\frac{x_2}{\sqrt{2}})) + 1 \quad (5)$$

$$f_6(x_1, x_2) = (x_2 - \frac{5,1}{4\pi^2}x_1^2 + \frac{5}{\pi}x_1 - 6)^2 + 10(1 - \frac{1}{8\pi}) \cos(x_1) + 10 \quad (6)$$

A Tabela 1 apresenta os domínios adotados nas simulações computacionais na obtenção das variáveis desejadas.

Tabela 1: Intervalos de busca adotados nas simulações computacionais realizadas

Funções	x_1	x_2
1	$-3, 0 \leq x_1 \leq 3, 0$	$-3, 0 \leq x_2 \leq 3, 0$
2	$-4, 0 \leq x_1 \leq 4, 0$	$-4, 0 \leq x_2 \leq 4, 0$
3	$-3, 0 \leq x_1 \leq 3, 0$	$-2, 0 \leq x_2 \leq 2, 0$
4	$-500, 0 \leq x_1 \leq 500, 0$	$-500, 0 \leq x_2 \leq 500, 0$
5	$-600, 0 \leq x_1 \leq 600, 0$	$-600, 0 \leq x_2 \leq 600, 0$
6	$-5, 0 \leq x_1 \leq 10, 0$	$0, 0 \leq x_2 \leq 15, 0$

3 ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO

Os métodos de otimização buscam determinar o valor máximo ou mínimo de uma função matemática, sujeita ou não a um conjunto de restrições de igualdade, desigualdade e laterais [10]. A seguir é apresentada uma pequena descrição dos métodos aleatórios ou estocásticos utilizados no presente trabalho.

3.1 Método Luus-Jaakola

O método estocástico Luus-Jaakola (LJ) foi proposto, em 1973, por Rein Luus e T.H.I. Jaakola, cujo objetivo era criar uma técnica que permitisse a qualquer pessoa interessada na otimização de sistemas a sua utilização. Além da facilidade de implementação, outra preocupação era desenvolver um procedimento que pudesse ser aplicado a qualquer região de interesse e para quaisquer tipos de funções. É um método de pesquisa aleatória muitas vezes utilizado na resolução de problemas de programação não-lineares [5], tais como problemas de engenharia química [4, 1, 9].

A ideia central desse método é considerar uma região ampla que englobe os possíveis valores das variáveis, valores factíveis, e geram-se soluções aleatórias enquanto a região de busca é reduzida ao longo das iterações [4]. O processo é repetido n_{out} vezes a fim de determinar um intervalo suficientemente pequeno o qual contenha a solução ótima [7].

Pode-se visualizar na Fig. 1 o pseudocódigo do método LJ modificado e que hoje é comumente utilizado.

Luus-Jaakola

Inicializar o espaço de busca inicial $r^{(0)}$, número de loops externos n_{out} , número de loops internos n_{int} e coeficiente de contração ε .

Gere randomicamente a estimativa inicial X^* .

for $i = 1$ até n_{out}

for $j = 1$ até n_{int}

$X^{(j)} = X^* + R^{(j)}r^{(i-1)}$, onde $R^{(j)}$ é matriz diagonal de números aleatórios $[-0, 5; 0, 5]$.

if ($Fitness(X^{(j)}) < Fitness(X^*)$), **then**

$X^* = X^{(j)}$

end if

end for

$r^{(i)} = (1 - \varepsilon)r^{(i-1)}$

end for

Figura 1: Pseudocódigo do algoritmo Luus-Jaakola modificado. Fonte: Ribeiro, 2012 [7]

3.2 Método R2W

O método *Random Restricted Window* (R2W) foi proposto por Câmara e Silva Neto em 2008 para a solução de problemas inversos em transferência de massa formulados implicitamente [3].

O R2W é um método básico que analisa a melhor solução ($\vec{\zeta}^*$) de uma função não-linear a partir de estimativas de parâmetros aleatórios pertencentes a um domínio pré-estabelecido $[\zeta_L, \zeta_H]$, podendo utilizar mais de uma fase de pesquisa (ψ) para refinar a solução desejada [8]. As estimativas dos parâmetros aleatórios são geradas de acordo com o número de sementes pré-estabelecidas (S).

Na Fig. 2 é possível visualizar o pseudocódigo do método de otimização R2W.

R2W

Inicializar o domínio de pesquisa $[\vec{\zeta}_L^{(0)}, \vec{\zeta}_H^{(0)}]$, o número de fases ψ , o número de sementes S e o fator de escala de busca δ .

for $i = 1$ até ψ

$\vec{R}^{(i-1)} = \vec{\zeta}_H^{(i-1)} - \vec{\zeta}_L^{(i-1)}$;

for $j = 1$ até S

$\vec{\zeta}^{(j)} = \vec{\zeta}_L^{(i-1)} + \vec{r} \vec{R}^{(i-1)}$, onde $\vec{\zeta}_L^{(i-1)}$ é o limite inferior da região de busca $\vec{R}^{(i-1)}$ e \vec{r} o vetor de aleatórios entre $[0, 0; 1, 0]$.

end for

$\vec{\zeta}_L^{(i)} = \vec{\zeta}^* - \delta | \vec{\zeta}^* |$, onde $\vec{\zeta}_L^{(i)}$ e $\vec{\zeta}_H^{(i)}$ são os limites do novo intervalo de busca e

$\vec{\zeta}_H^{(i)} = \vec{\zeta}^* + \delta | \vec{\zeta}^* |$, $\vec{\zeta}^*$ é a melhor solução encontrada anteriormente.

end for

Figura 2: Pseudocódigo do algoritmo R2W. Fonte: Ribeiro, 2012 [7]

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

As rotinas para cálculo dos ótimos das funções matemáticas analisadas, Eqs. (1) a (6), foram implementadas na linguagem de programação C, sendo as simulações computacionais rodadas

numa máquina de processador Intel Core 2 Duo CPU @2.53 GHz com 4 GB de memória. Além disso, todas as figuras foram implementadas no software Matlab R2009a e rodadas na mesma máquina indicada anteriormente.

Objetivando uma análise qualitativa, foram utilizados diferentes conjuntos de parâmetros respeitando as características de cada método. Após a variação dos mesmos, optou-se pelo conjunto que apresentou resultados com uma melhor acurácia. Além disso, foram realizadas 50 corridas por cada método numérico e foi adotado como critério de parada o valor a alcançar de 10^{-5} entre a solução analítica e o melhor valor alcançado na simulação computacional ou 15000 chamadas da função objetivo, que é o total de iterações possível de ser realizada em cada simulação numérica por cada método estocástico. Para que fosse fornecida a mesma estimativa inicial para ambos algoritmos, a mesma semente 20 foi passada, sendo que a cada nova simulação foi adicionada uma unidade à semente da simulação anterior, tudo isso com o intuito de encontrar o ótimo global das funções descritas na seção 2.1.

A zona azul escuro das Figs. 1 até 6 representa os menores valores da função objetivo indicadas pelas Eqs. (1) a (6), ou seja, os pontos mais próximos ao mínimo global, enquanto que a região vermelha representa os valores mais altos da função objetivo, conseqüentemente, é nessa região que se encontram os valores mais distantes do mínimo global.

Nas Tabelas 2 a 7 há um resumo (R) dos valores encontrados nas simulações computacionais, em que M , P , μ , Med , σ e σ^2 , representam, respectivamente, melhor, pior, média aritmética, mediana, desvio padrão e variância dos resultados obtidos.

A Fig. 3 demonstra o comportamento da função 1 obtida através da Eq. (1). Trata-se de uma função simples, convexa e unimodal, cujo mínimo global $f_1(x_1, x_2) = -3,0$ é obtido no ponto $(x_1, x_2) = 0, 0$. Na Tabela 2, verifica-se que ambos os métodos atingiram o mínimo global sem utilizarem o total de número de avaliações da função objetivo (NAF).

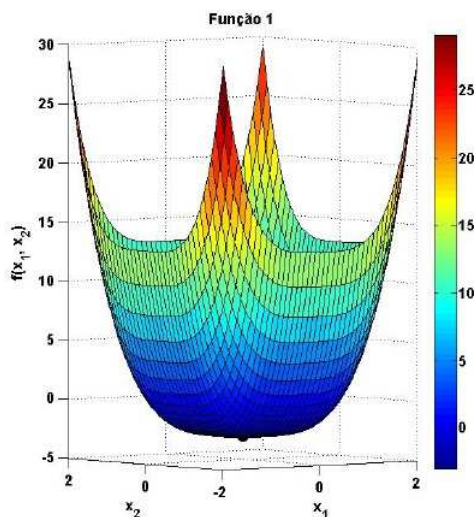


Figura 3: Gráfico demonstrativo do comportamento da Função 1

A função 2 é obtida através da Eq. (2), seu comportamento pode ser visto na Fig. 4. A função 2 é altamente multimodal, entretanto, seus mínimos locais são regularmente distribuídos e o mínimo global $f_2(x_1, x_2) = 0, 0$ está localizado em $(x_1, x_2) = (0, 0; 0, 0)$.

A Tabela 3 indica que ambos métodos analisados obtiveram como a melhor solução o mínimo global. Entre todas as simulações realizadas com a função 2, aquela que obteve o pior resultado encontrou um dos possíveis mínimos locais. Além disso, o algoritmo LJ alcançou em

Tabela 2: Resultados obtidos nas simulações computacionais com a Função 1 através dos métodos R2W e LJ

R2W					LJ			
R	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF
M	1,12E-02	-1,90E-02	-3,00E+00	3000	2,05E-02	2,01E-03	-3,00E+00	348
P	-2,13E-02	-5,48E-02	-3,00E+00	3000	5,13E-02	4,04E-02	-3,00E+00	747
μ	-1,54E-03	-1,96E-03	-3,00E+00	3180	6,80E-03	4,31E-03	-3,00E+00	791
Med	-6,60E-03	-6,16E-03	-3,00E+00	3000	8,59E-03	4,78E-03	-3,00E+00	803
σ	6,16E-04	5,81E-04	5,59E-12	-	7,47E-04	1,13E-03	8,22E-12	-
σ^2	2,48E-02	2,41E-02	2,37E-06	-	2,73E-02	3,36E-02	2,87E-06	-

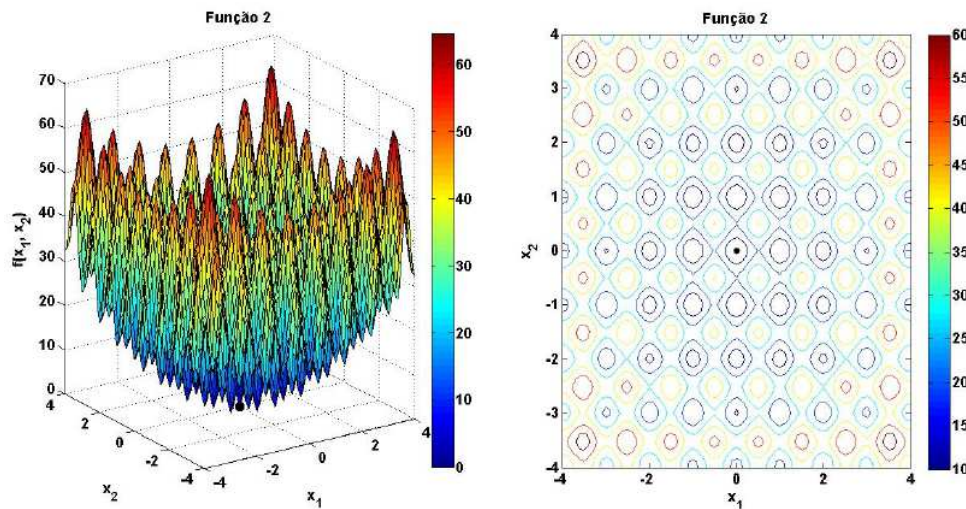


Figura 4: Gráficos demonstrativo do comportamento da Função 2 e suas respectivas curvas de níveis

86% das simulações computacionais o mínimo global, já o R2W encontrou o mínimo global em 66% dos testes realizados.

Tabela 3: Resultados obtidos nas simulações computacionais com a Função 2 através dos métodos R2W e LJ

R2W					LJ			
R	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF
M	4,40E-05	-1,40E-05	0,00E+00	15000	2,00E-05	7,00E-06	0,00E+00	4760
P	1,31E-03	-9,95E-01	9,95E-01	15000	-9,95E-01	0,00E+00	9,95E-01	15000
μ	1,99E-02	-7,06E-05	3,38E-01	14700	-3,98E-02	-1,99E-02	1,39E-01	6044
Med	3,75E-05	-3,80E-05	4,00E-06	15000	-3,40E-05	0,00E+00	6,00E-06	4718
σ	1,81E-01	1,62E-01	2,27E-01	-	7,92E-02	6,02E-02	1,22E-01	-
σ^2	4,26E-01	4,02E-01	4,76E-01	-	2,81E-01	2,45E-01	3,49E-01	-

A função 3 é obtida através da Eq. (3), seu comportamento pode ser visto na Fig. 5. Dentro da região de busca analisada, vide Tabela 1, há seis pontos de mínimos locais, sendo que dois desses pontos, $(x_1, x_2) = (-0,0898; 0,7126)$ e $(x_1, x_2) = (0,0898; -0,7126)$, levam ao mínimo global $f_3(x_1, x_2) = -1,0316$.

A Tabela 4 mostra os resultados atingidos pela função 3, sendo que os valores demonstrados no caso 1 estão relacionados ao extremo $(-0,0898; 0,7126)$. Nas simulações realizadas, o ponto mínimo indicado no caso 1 foi alcançado em 52% e 54% das corridas pelos algoritmos R2W e LJ, respectivamente. Já o outro extremo que leva ao ótimo global e é indicado no caso 2

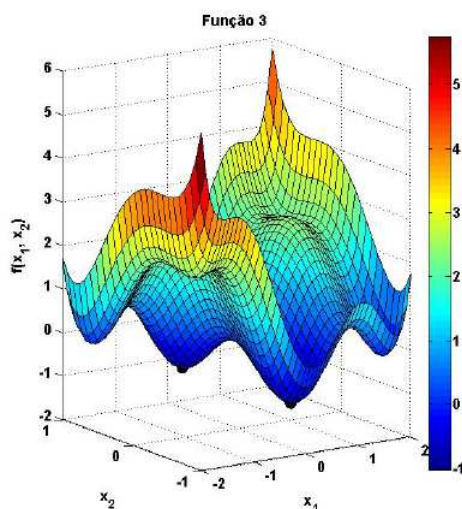


Figura 5: Gráfico demonstrativo do comportamento da Função 3

trata-se do ponto mínimo $(0, 0898; -0, 7126)$, sendo esse extremo alcançado apenas em 48% e 46% das simulações numéricas através dos métodos R2W e LJ. Ao analisar a variância e o desvio padrão, percebe-se que não houve variações bruscas nos resultados obtidos nas simulações numéricas realizadas.

Tabela 4: Resultados obtidos nas simulações computacionais com a Função 3 através dos métodos R2W e LJ, onde o ótimo global $f_3(x_1; x_2) = -1, 0316$ está localizado nos pontos descritos nos casos 1 e 2

R	R2W				LJ			
	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF
Caso 1: $f(-0, 0898; 0, 7126) = -1, 0316$								
M	-8,95E-02	7,11E-01	-1,03E+00	12000	-8,98E-02	7,13E-01	-1,03E+00	15000
P	-8,54E-02	7,15E-01	-1,03E+00	15000	-8,70E-02	7,13E-01	-1,03E+00	2728
μ	-9,03E-02	7,13E-01	-1,03E+00	12000	-8,94E-02	7,13E-01	-1,03E+00	7778
Med	-8,97E-02	7,14E-01	-1,03E+00	12000	-8,98E-02	7,13E-01	-1,03E+00	3197
σ	7,93E-06	3,36E-06	2,55E-09	-	2,41E-06	8,37E-07	2,10E-10	-
σ^2	2,82E-03	1,83E-03	5,05E-05	-	1,55E-03	9,15E-04	1,45E-05	-
Caso 2: $f(0, 0898; -0, 7126) = -1, 0316$								
M	8,91E-02	-7,11E-01	-1,03E+00	12000	8,98E-02	-7,13E-01	-1,03E+00	15000
P	9,82E-02	-7,14E-01	-1,03E+00	15000	9,25E-02	-7,12E-01	-1,03E+00	2598
μ	9,07E-02	-7,13E-01	-1,03E+00	12625	9,02E-02	-7,13E-01	-1,03E+00	5950
Med	9,05E-02	-7,13E-01	-1,03E+00	15000	8,98E-02	-7,13E-01	-1,03E+00	2993
σ	7,42E-06	3,43E-06	3,43E-09	-	1,65E-06	1,83E-06	1,94E-10	-
σ^2	2,72E-03	1,85E-03	5,86E-05	-	1,29E-03	1,35E-03	1,39E-05	-

O perfil da função 4 alcançado pela Eq. (4) é apresentado na Fig. 6. Esta função é complexa, com muitos mínimos locais geometricamente distantes. Devido a esse fato, os algoritmos de busca são potencialmente propensos a convergência à direção errada, acarretando seguir em direção a um dos extremos locais.

Verifica-se na Tabela 5 que o algoritmo LJ convergiu para a direção errada na grande maioria das corridas realizadas, isto corresponde a 98% das simulações computacionais. Em contra partida, o algoritmo R2W atingiu o mínimo global $f_4(420, 9687; 420, 9687) = -837, 9658$ em

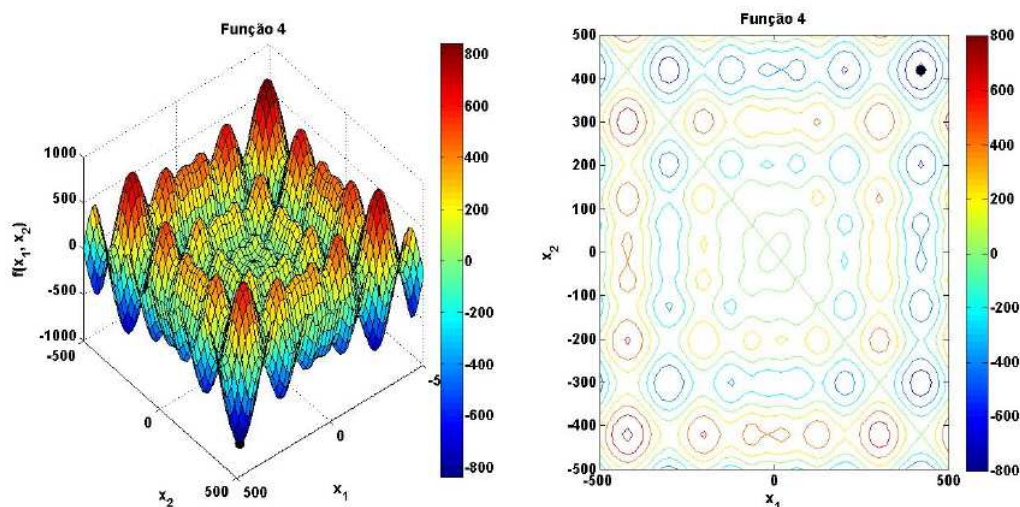


Figura 6: Gráficos demonstrativo do comportamento da Função 4 e suas respectivas curvas de níveis

todas as simulações feitas. Apesar de o limite de iterações ser atingido por ambos métodos numéricos, o LJ convergiu apenas em uma simulação para o ótimo global, já o método R2W convergiu para o ótimo em todas as simulações computacionais, sendo que em 50% das corridas os valores alcançados eram acurados.

Tabela 5: Resultados obtidos nas simulações computacionais com a Função 4 através dos métodos R2W e LJ

R	R2W				LJ			
	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF
M	4,21E+02	4,21E+02	-8,38E+02	15000	4,21E+02	4,21E+02	-8,38E+02	15000
P	4,16E+02	4,27E+02	-8,30E+02	15000	-3,03E+02	-3,03E+02	-6,01E+02	15000
μ	4,21E+02	4,21E+02	-8,36E+02	15000	-2,74E+02	4,48E+01	-6,63E+02	15000
Med	4,21E+02	4,21E+02	-8,37E+02	15000	-3,03E+02	-3,03E+02	-6,60E+02	15000
σ	7,74E+00	7,94E+00	4,23E+00	-	2,05E+04	1,33E+05	4,15E+03	-
σ^2	2,78E+00	2,82E+00	2,06E+00	-	1,43E+02	3,65E+02	6,44E+01	-

A característica da função 5, dada pela Eq. (5), é demonstrada na Fig. 7. Essa função é semelhante à função 2, e apresenta muitos mínimos locais regularmente distribuídos.

A Tabela 6 indica que ambos métodos analisados obtiveram como a melhor solução o mínimo global. Entre todas as simulações realizadas com a função 2, aquela que obteve o pior resultado encontrou um dos possíveis mínimos locais. Além disso, o algoritmo LJ alcançou em 86% das simulações computacionais o mínimo global, já o R2W encontrou o mínimo global em 66% dos testes realizados.

A função 6 é definida pela Eq. (6). O perfil dessa função está demonstrado na Fig. 8, onde estão evidenciados os três pontos mínimos $(x_1, x_2) = (-\pi; 12, 275)$, $(\pi; 2, 275)$ e $(9, 42478; 2, 275)$ que levam ao ótimo global $f_6(x_1, x_2) = 0, 397887$.

Na Tabela 6 é possível visualizar os resultados alcançados pela função 6. O ponto mínimo $(-\pi; 12, 275)$ indicado como caso 1 foi o mais alcançado pelo método LJ, mais precisamente em 54% das corridas realizadas, já no método R2W o referido ponto foi alcançado em 42% das simulações. Para o ponto mínimo indicado no caso 2, o algoritmo R2W convergiu em 44% das simulações realizadas, sendo que o LJ convergiu para esse mínimo apenas em 22% das corridas realizadas. No terceiro ponto mínimo $(9, 42478; 2, 275)$, que está indicado no caso 3, foi o

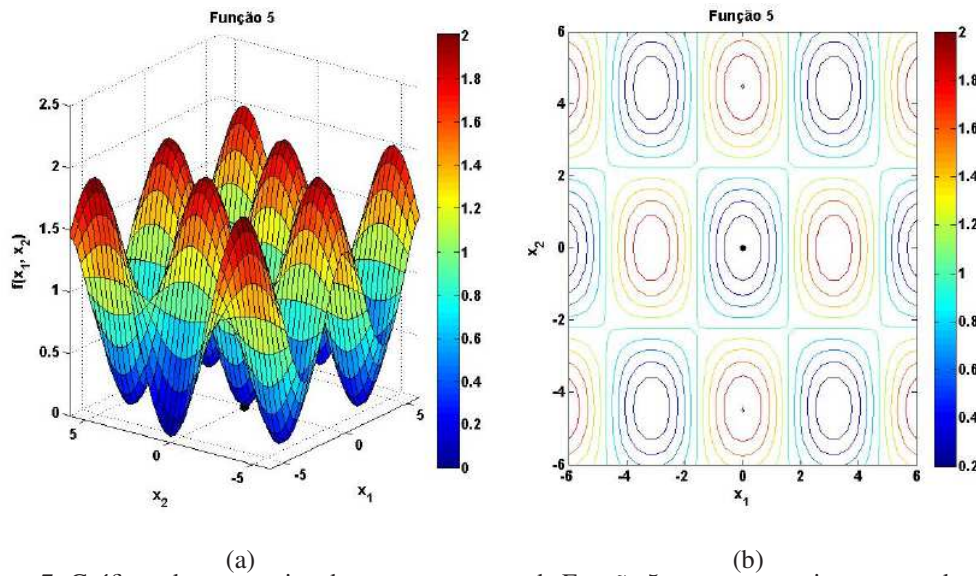


Figura 7: Gráficos demonstrativo do comportamento da Função 5 e suas respectivas curvas de níveis

Tabela 6: Resultados obtidos nas simulações computacionais com a Função 5 através dos métodos R2W e LJ

R	R2W				LJ			
	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF
M	-1,33E-03	-4,85E-04	1,00E-06	12000	-1,69E-03	4,40E-04	1,00E-06	5828
P	6,73E-03	-8,88E+00	1,97E-02	15000	-1,26E+01	0,00E+00	3,95E-02	15000
μ	5,62E-01	-9,75E-01	9,20E-03	14940	-1,19E+00	-8,87E-02	8,43E-03	12262
Med	3,08E+00	-1,28E-02	8,65E-03	15000	-2,20E-03	0,00E+00	7,40E-03	15000
σ	1,35E+01	1,86E+01	1,16E-05	-	1,65E+01	1,65E+01	8,64E-05	-
σ^2	3,68E+00	4,32E+00	3,40E-03	-	4,06E+00	4,06E+00	9,29E-03	-

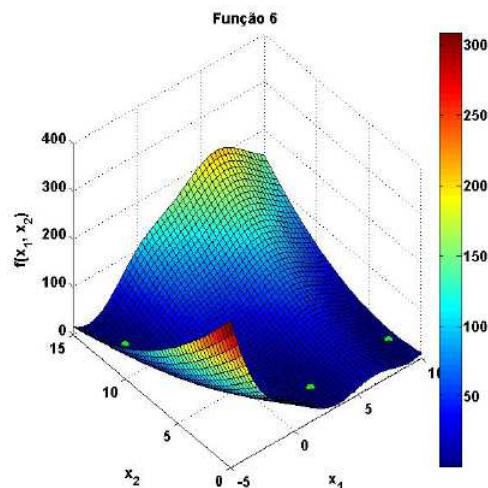


Figura 8: Gráfico demonstrativo do comportamento da Função 6

menos atingido pelo R2W, ou seja, em apenas 14% dos testes realizados houve a convergência para o mínimo em questão, mas o LJ convergiu para esse mínimo em 24% das simulações numéricas. O algoritmo LJ atingiu resultados mais acurados e com menos chamadas da função objetivo quando compara-se os valores encontrados pelo R2W.

Tabela 7: Resultados obtidos nas simulações computacionais com a Função 6 através dos métodos R2W e LJ

R2W					LJ			
R	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF	x_1	x_2	$f(x_1; x_2)$	NAF
Caso 1: $f(-\pi; 12, 275) = 0,397887$								
M	-3,13E+00	1,23E+01	3,98E-01	15000	-3,14E+00	1,23E+01	3,98E-01	2684
P	-3,12E+00	1,24E+01	4,39E-01	15000	-3,14E+00	1,23E+01	3,98E-01	3925
μ	-3,13E+00	1,23E+01	4,07E-01	15000	-3,14E+00	1,23E+01	3,98E-01	3275
Med	-3,13E+00	1,23E+01	4,04E-01	15000	-3,14E+00	1,23E+01	3,98E-01	3369
σ	7,96E-04	1,24E-02	1,18E-04	-	4,23E-07	4,21E-06	5,34E-12	-
σ^2	2,82E-02	1,11E-01	1,09E-02	-	6,50E-04	2,05E-03	2,31E-06	-
Caso 2: $f(\pi; 2, 275) = 0,397887$								
M	3,15E+00	2,27E+00	3,98E-01	15000	3,14E+00	2,28E+00	3,98E-01	3252
P	3,13E+00	2,37E+00	4,05E-01	15000	3,14E+00	2,27E+00	3,98E-01	4177
μ	3,14E+00	2,29E+00	4,00E-01	15000	3,14E+00	2,27E+00	3,98E-01	3636
Med	3,15E+00	2,29E+00	4,00E-01	15000	3,14E+00	2,27E+00	3,98E-01	3777
σ	1,83E-04	1,40E-03	4,14E-06	-	8,18E-07	1,96E-06	5,29E-12	-
σ^2	1,35E-02	3,75E-02	2,04E-03	-	9,04E-04	1,40E-03	2,30E-06	-
Caso 3: $f(9,42478; 2, 275) = 0,397887$								
M	9,42E+00	2,47E+00	3,98E-01	15000	9,42E+00	2,47E+00	3,98E-01	3522
P	9,41E+00	2,36E+00	4,09E-01	15000	9,43E+00	2,48E+00	3,98E-01	3828
μ	9,41E+00	2,43E+00	4,02E-01	15000	9,42E+00	2,47E+00	3,98E-01	3736
Med	9,42E+00	2,43E+00	4,01E-01	15000	9,42E+00	2,47E+00	3,98E-01	3746
σ	2,19E-04	1,73E-03	1,64E-05	-	4,95E-07	4,82E-06	5,73E-12	-
σ^2	1,48E-02	4,16E-02	4,05E-03	-	7,04E-04	2,20E-03	2,39E-06	-

A Fig. 9 mostra o desvio padrão alcançado nas simulações computacionais. As funções 3 e 6 apresentam mais de um ponto mínimo que levam ao ótimo global, portanto, o desvio padrão demonstrado em $F3_a$ e $F3_b$ foram encontrados através da função 3 e, correspondem, respectivamente, aos pontos mínimos $(-0,0898; 0,7126)$ e $(0,0898; -0,7126)$. Já os pontos mínimos $(-\pi; 12, 275)$, $(\pi; 2, 275)$ e $(9,42478; 2, 275)$ são alcançados pela função 6, tendo o desvio padrão mostrado em $F6_a$, $F6_b$ e $F6_c$.

Não houve muita dispersão dos resultados encontrados pelos métodos numéricos estudados, exceto pelos resultados oriundos das funções 2 e 4. Para a função 2, o método R2W apresentou um desvio padrão de 36% maior do que aquele alcançado pelo método LJ. Entretanto, o LJ apresentou um desvio padrão 32 vezes maior que o alcançado pelo R2W nas simulações computacionais com a função 4.

5 CONCLUSÃO

Analisando os resultados obtidos pelas funções objetivo, conclui-se que tanto o método R2W quanto o método LJ apresentaram bons resultados quando comparados com a solução analítica.

Para o conjunto de parâmetros adotados, o algoritmo R2W mostrou potencial na estimação dos ótimos globais das funções não-lineares analisadas, sendo esses resultados equivalentes a abordagem inversa LJ.

Na maioria das simulações, o método LJ convergiu para o ótimo global fazendo uso de menos avaliação da função objetivo, isso é possível de concluir quando compara-se o número de avaliações da função objetivo feita pelo algoritmo R2W, mas isso não implica em uma grande diferença no tempo de execução do programa. Isso ocorreu devido à característica de cada

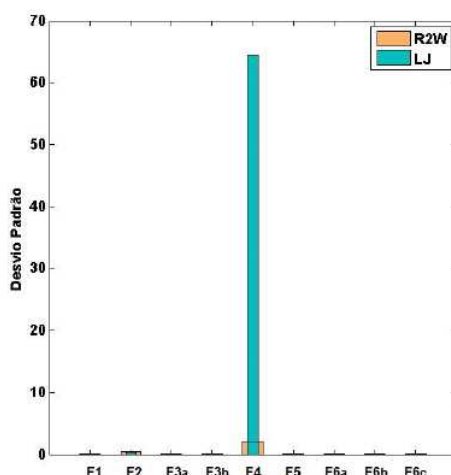


Figura 9: Gráfico demonstrativo do comportamento do desvio padrão atingido nas simulações numéricas

método numérico envolvido nas simulações computacionais e suas respectivas configurações. Enquanto o método LJ realiza o comparativo de suas soluções de duas em duas e seleciona a melhor, o método R2W gera todas as suas estimativas (nesse caso $S = 3000$) primeiro para depois selecionar a melhor dentre elas.

O método R2W alcançou resultados mais acurados através das funções 4 e 5, sendo que a amplitude do domínio de busca para essas funções é muito superior quando compara-se com as demais funções investigadas.

Para trabalhos futuros, uma análise mais detalhada sobre o comportamento do algoritmo R2W em domínios com grande amplitude será realizado, bem como a aplicação do referido método em problemas de cromatografia por adsorção em batelada.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro concedido pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

REFERÊNCIAS

- [1] A. L. J. Bihain, L. D. T. Câmara e A. J. Silva Neto. Avaliação da rotina inversa R2W na estimação de parâmetros de transferência de massa no processo de adsorção de glicose e frutose. *TEMA - Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, 13-3:277-289, 2012.
- [2] M. A. L. Brandão e S. F. P. Saramago. *Métodos estocásticos de otimização: algoritmos genéticos e evolução diferencial*. Notas em Matemática Aplicada: SBMAC, 55, São Carlos, SP, 2011.
- [3] L. D. T. Câmara e A. J. Silva Neto. Inverse stochastic characterization of adsorption systems by a Random Restricted Window (R2W) method. Em *International Conference on Engineering Optimization - Eng Opt2008*. Rio de Janeiro, Brazil, 2008.
- [4] , F. S. Lobato e V. Steffen Jr. Algoritmo de Luus-Jaakola aplicado a um problema in-

- verso de fermentação batelada alimentada. *TEMA - Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, 9-3:417-426, 2008.
- [5] R. Luus e T. H. I. Jaakola. Optimization by direct search and systematic reduction of the size of search region. *AIChE Journal*, 19-4:760-766, 1973.
- [6] M. Molga e C. Smutnicki. *Test functions for optimization needs*. Disponível em <http://dl.dadvarmarzieh.com/File/Booklet/13940824131547698.pdf>. Acesso em 01 de abril de 2016, 2005.
- [7] M. A. C. Ribeiro. *Modelagem e avaliação comparativa dos métodos Luus-Jaakola e R2W aplicados na estimativa de parâmetros cinéticos de adsorção*. MSc. Dissertação, Instituto Politécnico, UERJ, Nova Friburgo, RJ, 2012.
- [8] M. A. C. Ribeiro, L. D. T. Câmara e A. J. Silva Neto. Método estocástico R2W na obtenção de ótimos globais de equações não-lineares. Em *XXXIV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - CNMAC2012*. Águas de Lindóia, SP, 555-556, 2012.
- [9] M. A. C. Ribeiro, L. D. T. Câmara e A. J. Silva Neto. Comparação das rotinas inversas LJ e R2W na estimação de parâmetros cinéticos em batelada. Em *XVI Encontro de Modelagem Computacional / IV Encontro de Ciências e tecnologia de Materiais / III Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional - EMC2013 / ECTM2013 / ERMAC2013*. Ilhéus, BA, 2013.
- [10] S. F. P. Saramago. *Métodos de otimização randômica: algoritmos genéticos e simulated annealing*. Notas em Matemática Aplicada: SBMAC, 6, São Carlos, SP, 2003.
- [11] A. J. Silva Neto e J. C. Becceneri. *Técnicas de inteligência computacional inspiradas na natureza - aplicação em problemas inversos em transferência radiativa*. Notas em Matemática Aplicada: SBMAC, 41, São Carlos, SP, 2009.