

UM BREVE ESTUDO DOS PARÂMETROS DO MÉTODO ENXAME DE PARTÍCULAS

Shayane da Silva Carvalho

Universidade Federal Fluminense/INFES
Santo Antônio de Pádua, RJ
shay-carvalho@hotmail.com

Joviana Sartori de Souza

Universidade Federal Fluminense/INFES
Santo Antônio de Pádua, RJ
joviana.sartori@gmail.com

RESUMO

Este artigo tem como finalidade apresentar uma análise de uma metaheurística populacional, o Enxame de Partículas (PSO), aplicado na resolução de um problema termodinâmico. O problema do cálculo do equilíbrio de fases de uma mistura está presente em processos da Engenharia Química. Para ser resolvido é necessário que se conheça a priori o número de fases presentes na mistura, para isto deve-se solucionar o problema de otimização conhecido como teste de estabilidade. O objetivo central do trabalho é aplicar o método de busca global na minimização do problema objetivo. Será utilizada a técnica da polarização que permite encontrar todos os pontos estacionários da função, e também serão avaliadas estratégias de valoração dos parâmetros do PSO. Os resultados numéricos dos testes serão apresentados para três misturas binárias já abordadas na literatura, de forma a avaliar qual metodologia proposta será a mais robusta para eficiência computacional do método.

Palavra-chave: Otimização; Enxame de Partículas; Problema Termodinâmico; Teste de Estabilidade.

ABSTRACT

This article aims to present an analysis of a population metaheuristic, the Particle Swarm (PSO), applied to solve a thermodynamic problem. The problem of calculating the phase equilibrium of a mixture is present in Chemical Engineering processes. To be solved it is necessary to know a priori the number of phases present in the mixture, for this one must solve the optimization problem known as stability test. The main objective of this work is to apply the global search method to minimize the objective problem. It will be used the polarization technique that allows to find all the stationary points of the function, and will also be evaluated strategies of PSO parameter valuation. The numerical results of the tests will be presented for three binary mixtures already discussed in the literature, in order to evaluate which proposed methodology will be the most robust for the computational efficiency of the method.

Keywords: Optimization; Particle Swarm; Thermodynamic problem; Stability Test.

Como Citar:

CARVALHO, Shayane da Silva; SOUZA, Joviana Sartori de. Um breve estudo dos parâmetros do método Enxame de Partículas. *In: SIMPÓSIO DE PESQUISA OPERACIONAL E LOGÍSTICA DA MARINHA*, 19., 2019, Rio de Janeiro, RJ. **Anais** [...]. Rio de Janeiro: Centro de Análises de Sistemas Navais, 2019.

1. INTRODUÇÃO

O problema abordado neste artigo se enquadra em um tema de grande importância em processos da Engenharia Química: o cálculo do equilíbrio de fases. Este é um problema de otimização conhecido como a minimização da função distância do plano tangente à energia livre de Gibbs molar. Para ser resolvido é necessário que se faça uma análise prévia da estabilidade termodinâmica do sistema.

Como enfatizado por Michelsen (1982), Sun et al. (1995), Stadtherr et al. (1995) e por Lucia et al. (2005), para proporcionar uma completa predição 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.

Neste trabalho realiza-se uma análise no método estocástico Enxame de Partículas (PSO) aplicado ao processo de minimização do problema termodinâmico que é descrito por modelos de natureza não convexa e não linear.

O objetivo central deste artigo é comparar cinco estratégias de valoração dos parâmetros do método PSO e verificar a partir dos resultados obtidos, qual metodologia será a mais robusta na determinação dos pontos estacionários do problema proposto. Assim, pode-se analisar a influência dos valores de parâmetros no desempenho do método.

2. O PROBLEMA DO TESTE DE ESTABILIDADE

O presente estudo aborda apenas o teste de estabilidade de fases básico de uma mistura onde procura-se analisar se um sistema termodinâmico composto por diversos componentes químicos apresenta-se em uma fase simples ou mais fases. Trata-se da relação com a transferência de massa entre subsistemas de um sistema composto.

As condições de equilíbrio de um sistema em que são conhecidas as composições de cada um dos componentes químicos, a temperatura e a pressão, podem ser atingidas quando a função distância do plano tangente à energia livre de Gibbs é minimizada.

Considerando uma mistura que se encontra a temperatura T , pressão P e possui r componentes químicos representados pelos seus números de moles N_1, \dots, N_r . Com o intuito de se estudar a estabilidade desta mistura em relação ao processo de transferência de massa a T e P constantes, suponha inicialmente que tal mistura encontra-se numa fase simples a qual será chamada de fase inicial. Sabe-se que a energia livre de Gibbs do sistema nestas condições de fase simples é dada por

$$G_0 \equiv G(N_1, \dots, N_r) = \sum_{i=1}^r N_i \mu_i(0)$$

Sabe-se também que o potencial químico de cada componente químico na fase simples é uma função homogênea de grau zero e, portanto, pode ser escrito na forma

$$\mu_i = \mu_i(N_1, \dots, N_r) = \mu_i(z_1, \dots, z_r) \quad (0)$$

Na equação (2), $z_i = N_i / \sum_{i=1}^r N_i$ é a fração molar global do componente i ($i = 1, \dots, r$) na mistura multicomponente. Desta forma, por definição as frações molares satisfazem à restrição $\sum_{i=1}^r z_i = 1$.

A função objetivo a ser minimizada denominada função distância do plano tangente à energia livre de Gibbs molar pode ser definida como:

$$d(x_1, \dots, x_r) = \sum_{i=1}^r x_i [\mu_i(x_1, \dots, x_r) - \mu_i(z_1, \dots, z_r)] \quad (0)$$

para todo $(x_1, \dots, x_r)^T$ pertencente ao conjunto

$$\Omega = \left\{ (x_1, \dots, x_r)^T \in R^r; 0 < x_i < 1; \forall i = 1, \dots, r \text{ e } \sum_{i=1}^r x_i = 1 \right\} \quad (0)$$

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_i é o potencial químico do componente i .

O critério de estabilidade pode ser realizado através da função d : se $d(x_1, \dots, x_r) \geq 0$, para todo $(x_1, \dots, x_r)^T$ em Ω a mistura com componentes globais z_1, \dots, z_r é estável e permanecerá no estado homogêneo inicial, nas referidas temperatura e pressão. Caso contrário, a mistura é instável e deve se dividir em duas ou mais fases.

Uma possível maneira de implementar um teste de estabilidade baseado no critério do plano tangente de Gibbs consiste em resolver o problema de otimização global descrito a seguir.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dados } z = (z_1, \dots, z_r)^T \in \Omega, T_0 \text{ e } P_0 \text{ } z = (z_1, \dots, z_r)^T \in \Omega, T_0 \text{ e } P_0 \text{ } z = (z_1, \dots, z_r)^T \in \Omega, T_0 \text{ e } P_0, \\ \text{Encontrar } x = (x_1, \dots, x_r)^T \in R^r \text{ a fim de} \\ \text{Minimizar } d(T_0, P_0, x_1, \dots, x_r) = \sum_{i=1}^r x_i [\mu_i(T_0, P_0, x_1, \dots, x_r) - \mu_i(T_0, P_0, z_1, \dots, z_r)] \\ \text{Sujeito à seguinte restrição:} \\ x \in \Omega = \left\{ (x_1, \dots, x_r)^T \in R^r; 0 < x_i < 1, \forall i = 1, \dots, r \text{ e } \sum_{i=1}^r x_i = 1 \right\} \end{array} \right. \quad (P1)$$

Se $x^* \in \Omega$ é um minimizador global do problema (P1), têm-se que $d(T_0, P_0, x^*) \leq d(T_0, P_0, x)$, para todo $x \in \Omega$. Sabe-se que o ponto x é denominado ponto estacionário da função d se $\nabla d(x) = 0$. Dentre esses pontos estacionários encontram-se todos os minimizadores (locais) de d , os seus maximizadores (locais) e os possíveis pontos de sela dessa função.

Neste trabalho o principal interesse é encontrar todos os pontos estacionários da função distância e realizar uma análise sobre quais valores de parâmetros são os mais eficientes no desempenho do método Enxame de Partículas.

3. O MÉTODO ENXAME DE PARTÍCULAS

O método de otimização por Enxame de Partículas (Particle Swarm Optimization – PSO) é uma metaheurística populacional baseada no movimento e comportamento coletivo de um sistema social. Trata-se de um método de otimização estocástica desenvolvido por Eberhart e Kennedy (1995) fundamentado em uma população, o enxame de s partículas.

Seguindo a versão do PSO apresentada por Viot (2010), a posição de cada partícula é atualizada conforme as equações representadas por:

$$v_{i+1} = v_i + 2 \text{rnd}() (p_{best} - x_i) + 2 \text{rnd}() (g_{best} - x_i) \quad (0)$$

$$x_{i+1} = x_i + v_{i+1} \quad (0)$$

Sendo:

x_i = posição da partícula.

v_i = velocidade da partícula.

$\text{rnd}()$ = número gerado aleatoriamente no intervalo [0,1].

p_{best} = melhor posição ocupada pela partícula.

g_{best} = melhor posição ocupada pelo grupo.

i = iteração.

Uma modificação no algoritmo inicial foi proposta por Eberhart e Shi (1998), introduzindo o peso inercial w para controlar a velocidade entre as iterações das partículas e dois coeficientes de aceleração, parâmetro cognitivo c_1 e parâmetro social c_2 , que objetivam ajudar o método a encontrar a solução ótima de modo mais rápido. Estes dois parâmetros na versão anterior eram fixos no valor 2. Conforme a modificação, as fórmulas se apresentam como:

$$v_{i+1} = w v_i + c_1 \text{rnd}() (p_{best} - x_i) + c_2 \text{rnd}() (g_{best} - x_i) \quad (0)$$

$$x_{i+1} = x_i + v_{i+1} \quad (0)$$

Sendo:

w = peso inercial.

c_1 = coeficiente de aceleração cognitivo.

c_2 = coeficiente de aceleração social.

A seguir é apresentado o algoritmo do método PSO.

Algoritmo: Método Enxame de Partículas

1 Dados c_1, c_2, w, n, d .

2 Gerar aleatoriamente as posições das partículas do enxame x_0^1, \dots, x_0^s e os vetores que descrevem as velocidades iniciais v_0^1, \dots, v_0^s .

3 Considere

4 $p_{best} = x_0^i \forall i = 1, \dots, d$.

5 $g_{best} = \min \{ p_{best}^1, \dots, p_{best}^2 \}$

6 enquanto (critério de parada não for aceito) faça

7 para $i = 1, \dots, n$ faça

8 Atualizar a velocidade v_{i+1} das partículas com a Eq. (7).

9 Atualizar a posição x_{i+1} das partículas com a Eq. (8).

10 fim

11 Atualizar p_{best} e g_{best} .

12 fim

4. METODOLOGIA PROPOSTA

A metodologia proposta para resolver o problema do teste de estabilidade consiste na utilização do método estocástico Enxame de Partículas. O problema exige que todos os minimizadores da função objetivo sejam encontrados e para isto será utilizada a técnica de polarização. Serão realizados testes no método numérico para analisar quais composições de seus parâmetros são mais eficientes para seu desempenho.

4.1. A TÉCNICA DA POLARIZAÇÃO

A técnica da polarização é uma tática que auxilia na determinação de mais de um minimizador global da função distância, ou seja, permite encontrar mais de um ponto estacionário da função não negativa do problema.

Supondo que o primeiro minimizador global da função, denotado por $y^{(1)}$, foi determinado pelo método de otimização emprega-se o mesmo algoritmo de otimização para determinar o segundo minimizador global $y^{(2)}$ resolvendo o problema (P2).

$$\begin{cases} \text{Minimizar } f_1(y) = \frac{f(y) + \alpha}{\arctg \|y - y^{(1)}\|} \\ y \in R^r, \alpha \geq 0 \end{cases} \quad (P2)$$

Assim, de modo geral deve ser feito o mesmo processo de resolução dos subproblemas repetidas vezes para que todas as soluções sejam encontradas.

No processo de polarização procuram-se os pólos de maneira que supondo já encontradas $n > 1$ soluções, busca-se a $(n+1)$ -ésima solução resolvendo o problema (P3) a seguir.

$$\begin{cases} \text{Minimizar } f_n(y) = \frac{f_{n-1}(y)}{\arctg \|y - y^{(n)}\|} \\ y \in R^r \end{cases} \quad (P3)$$

4.2. ESTUDO DE PARÂMETROS DO MÉTODO ENXAME DE PARTÍCULAS

O objetivo foi realizar testes com estratégias de parâmetros aplicados ao problema de estabilidade para constatar os valores mais apropriados para o peso inercial (w), parâmetro cognitivo (c_1) e parâmetro social (c_2).

Em 1995, Kennedy e Eberhart propuseram o algoritmo clássico do método que fixava os parâmetros c_1 e c_2 para o valor 2, para que desta forma, o fator randômico tivesse a média igual a 1. O algoritmo básico foi aprimorado em 1998 por Eberhart e Shi que introduziram a constante de inércia w para atuar como o controlador da velocidade e as constantes de aceleração c_1 e c_2 .

Segundo Mendes (2004), utilizar o coeficiente de inércia igual a 0,5 é favorável para a convergência do algoritmo assim, a primeira estratégia de valoração de parâmetros vai utilizar esta ideia juntamente com os mesmos coeficientes de aceleração do algoritmo fixado em 2.

Para a segunda estratégia de parâmetros, é preservado o valor $w = 0,5$ e utilizada a ideia de Carlise e Dozier (2001), onde é assegurado que os parâmetros de aceleração são mais eficientes quando são utilizados valores aos quais $c_1 > c_2$ e $c_1 + c_2 \leq 4$.

Visando a melhoria no desempenho do método, Eberhart e Shi (2000) recomendaram que no intervalo $[0,4 \ 0,9]$ o valor de w estivesse em uma variação linear conforme a fórmula (9). A terceira valoração de parâmetros emprega a proposta da variação linear da inércia.

$$w = (w_{inicial} - w_{final}) \left[\frac{N-i}{i} \right] + w_{final} (0)$$

Sendo:

N - número total de iterações;

i - iteração atual;

$w_{inicial}$ - valor inicial do peso de inércia;

w_{final} - valor final do peso de inércia.

Chatterjee e Siarry (2006) aperfeiçoaram o conceito da variação linear da inércia para a variação não linear da inércia. Para a quarta estratégia de valoração de parâmetros utiliza-se a variação não linear da inércia, seguindo a fórmula (10), onde os valores $w_{inicial}$ e w_{final} são mantidos e ao longo das iterações w pode ser controlado através do expoente de não linearidade n . A exemplo de Matias (2008), foi utilizado o valor 1,2 para o expoente de não linearidade.

$$w = \left[\frac{(N-i)^n}{N^n} \right] (w_{inicial} - w_{final}) + w_{final} \quad (0)$$

Na quinta estratégia de valoração de parâmetros do presente estudo é utilizado o princípio do Coeficiente de Construção. Clerc (1999) propôs um limitador para a velocidade inercial chamado de Fator de Construção, este delimita c_1 e c_2 em função da velocidade.

$$\begin{cases} v_{i+1} = k [v_i + 2rnd() (p_{best} - x_i) + 2rnd() (g_{best} - x_i)] \\ x_{i+1} = x_i + v_{i+1} \end{cases} \quad (0)$$

$$k = \frac{2}{|2 - \varphi - \sqrt{(\varphi^2 - 4\varphi)}|} \quad (0)$$

Onde:

$k \in [0, 1]$;

$\varphi = c_1 + c_2$;

$\varphi > 4$;

N - número total de iterações;

i - iteração atual;

$w_{inicial}$ - valor inicial do peso de inércia;

w_{final} - valor final do peso de inércia.

Seguindo Viot (2010) utiliza-se o valor de $\varphi = 4,1$, $c_1 = c_2 = \frac{\varphi}{2} = 2,05$, e $k = 0,729$.

5. RESULTADOS NUMÉRICOS

Nesta seção apresentam-se os resultados obtidos para as misturas com a metodologia proposta. Os testes foram realizados na função do problema termodinâmico. Para comparação foi utilizado o mesmo gerador de números aleatórios, para todas as estratégias de parâmetros.

5.1. RESULTADOS DO ESTUDO DOS PARÂMETROS

O método PSO foi testado para três misturas binárias visando encontrar todos os pontos estacionários da função distância do teste de estabilidade. Os pontos estacionários foram obtidos através da técnica da polarização que é a estratégia que auxilia a encontrar todos os minimizadores globais da função objetivo. Os pontos mínimos globais das misturas foram comparados com os resultados encontrados por Oliveira (2016), utilizando o método estocástico Luus Jaakola, com o objetivo de validar os resultados obtidos pela metodologia proposta.

Os testes foram realizados em um Notebook Acer, munido de um processador Intel Core i3 com memória RAM de 4GB DDR4 e a implementação do método foi feita no

Software Matlab. O programa foi executado 50 vezes e o resultado final é a média aritmética dos valores encontrados.

Os parâmetros do método PSO aplicados na função do problema são apresentados na Tabela 1, sendo avaliados em todas as misturas propostas.

Foram testadas as seguintes misturas binárias: n-pentanol /dimetilbutano, n-pentanol / metilpentano e a mistura etanol /ciclohexano.

Tabela 1: Parâmetros utilizados nas misturas binárias.

Parâmetros PSO			
Dimensão	Número de Partículas	Número Máximo de Execuções	Tolerância
2	30	100	10^{-6}

Fonte: A autora.

Os valores dos coeficientes a serem utilizados em cada uma das estratégias de valorações de parâmetros objetivados são apresentados nas Tabelas 2 e 3.

Tabela 2: Valores dos coeficientes.

Conjunt o	W	c_1	c_2
1	0,5	2	2
2	0,5	2,5	1,5
3	Variação linear	2	2
4	Variação não-linear	2	2
5	0,5	2,05	2,05

Fonte: A autora.

Tabela 3: Dados da variação linear e não linear.

	Variação linear	Variação não linear
$w_{inicial}$	0,9	0,9
w_{final}	0,4	0,4

Fonte: A autora.

A Tabela 4 expõe os resultados obtidos para a primeira mistura testada. Foram utilizados os parâmetros da Tabela 1 e os coeficientes dos conjuntos de parâmetros apresentados nas tabelas 2 e 3.

Tabela 4: Resultados dos conjuntos de parâmetros na mistura: n-pentanol (1) / 2,2 - dimetilbutano (2) – PSO.

Fonte: A autora.

Observa-se que o método encontrou todos os mínimos globais da função. Analisando os dados da Tabela 4, nota-se que os conjuntos 3 e 4 foram os que melhor otimizaram as alimentações dadas a função objetivo, localizando os pontos estacionários com menores tempos e baixos números de iterações.

Os dados apresentados na Tabela 5 referem-se à mistura n-pentanol (1) / 2-metilpentano (2).

É possível analisar a partir dos dados da Tabela 5 que o conjunto 3 foi a estratégia que obteve os resultados no menor tempo e baixos números de iterações. O conjunto 4 também destacou-se em relação ao tempo e ao número de iterações.

Alimentação	Pontos Estacionários	Conjunto 1		Conjunto 2		Conjunto 3		Conjunto 4		Conjunto 5	
		Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.
(0.05 0.95)	(0.0500 0.9500)	0.2313	45	0.2367	54	0.3762	47	0.3502	62	0.2874	48
	(0.1326 0.8669)	0.3174	75	0.2584	59	0.2416	50	0.2913	47	0.3336	53
(0.10 0.90)	(0.1000 0.9000)	0.2781	71	0.2199	54	0.1857	45	0.1507	33	0.2814	66
	(0.0692 0.9308)	0.3099	66	0.1921	38	0.2721	51	0.2758	52	0.3025	68
	(0.1500 0.8500)	0.2440	52	0.2201	46	0.3016	65	0.2052	44	0.3160	70
(0.15 0.85)	(0.1500 0.8500)	0.2734	69	0.2421	60	0.2281	50	0.1907	45	0.3027	72
	(0.0692 0.9308)	0.3773	91	0.3132	68	0.2191	47	0.2341	38	0.2571	55
	(0.1000 0.9000)	0.3822	87	0.2919	62	0.2887	59	0.2628	57	0.2278	48
(0.20 0.80)	(0.2000 0.8000)	0.2301	60	0.2243	54	0.1881	28	0.1836	43	0.3499	90
	(0.0768 0.9245)	0.2157	47	0.2300	50	0.2098	42	0.2862	68	0.3113	73
	(0.0771 0.9242)	0.2490	51	0.3912	76	0.2081	40	0.2341	50	0.2427	55

ab
a

T
el
5:

Resultados dos conjuntos de parâmetros na mistura: n-pentanol (1) / 2-metilpentano (2) – PSO

Alimentação	Pontos Estacionários	Conjunto 1		Conjunto 2		Conjunto 3		Conjunto 4		Conjunto 5	
		Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.
(0.05 0.95)	(0.0500 0.9500)	0.3745	101	0.2895	74	0.2191	45	0.2522	47	0.2328	61
	(0.1397 0.8599)	0.2604	58	0.3220	77	0.2268	48	0.4218	51	0.2515	49
(0.10 0.90)	(0.1000 0.9000)	0.2614	64	0.2270	55	0.2787	64	0.2204	49	0.3095	46
	(0.1657 0.8343)	0.2322	53	0.4004	53	0.1856	43	0.1939	39	0.1135	23
	(0.0688 0.9312)	0.4038	74	0.2376	49	0.2524	54	0.1598	29	0.3097	70
(0.11 0.89)	(0.1100 0.8900)	0.2733	48	0.3212	71	0.1829	45	0.1814	45	0.1915	47
	(0.1582 0.8418)	0.5340	64	0.2251	51	0.1952	45	0.3357	57	0.2183	44
	(0.0654 0.9346)	0.3635	79	0.2163	44	0.2422	54	0.2106	43	0.1753	37
(0.12 0.88)	(0.1200 0.8800)	0.2613	66	0.1331	29	0.2038	49	0.1816	46	0.1921	49
	(0.1495 0.8505)	0.3308	78	0.2494	61	0.2170	50	0.2021	47	0.1893	43
	(0.0633 0.9367)	0.2180	46	0.3245	73	0.3238	59	0.2277	49	0.2702	61
(0.20 0.80)	(0.2000 0.8000)	0.1849	44	0.2231	57	0.1487	34	0.1688	41	0.1849	46
	(0.0808 0.9193)	0.4075	76	0.2667	63	0.2406	52	0.2684	57	0.2692	66
	(0.0731 0.9291)	0.1833	37	0.2479	55	0.1831	38	0.1854	39	0.1976	42
(0.25 0.75)	(0.2500 0.7500)	0.3012	77	0.3296	48	0.2402	44	0.2060	53	0.2442	36
	(0.0782 0.9242)	0.2567	54	0.3151	72	0.2754	50	0.1826	35	0.2263	50
	(0.0779 0.9248)	0.2405	51	0.2535	56	0.1975	43	0.1920	41	0.0044	41

Fonte: A autora.

A tabela 6 a seguir, apresenta os resultados encontrados para a mistura etanol (1)/ciclohexano (2).

Tabela 6: Resultados dos conjuntos de parâmetros na mistura: Etanol 1 / ciclohexano 2 – PSO

Alimentação	Pontos Estacionários	Conjunto 1		Conjunto 2		Conjunto 3		Conjunto 4		Conjunto 5	
		Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.	Tempo (s)	It.
(0.05 0.95)	(0.0500 0.9500)	0.4226	51	0.2492	56	0.1957	45	0.1972	32	0.3328	62
	(0.0942 0.9058)	0.3629	72	0.2730	54	0.2328	42	0.3017	49	0.4415	94
	(0.5979 0.4021)	0.3466	67	0.2671	51	0.2511	43	0.2331	42	0.3232	62
(0.10 0.90)	(0.1000 0.9000)	0.2336	45	0.2432	47	0.2475	54	0.2224	50	0.3314	67
	(0.0475 0.9529)	0.4228	67	0.2146	45	0.3550	64	0.2770	57	0.4082	83
	(0.5878 0.4122)	0.3506	68	0.2682	57	0.2122	41	0.2172	42	0.3508	62
(0.15 0.85)	(0.1500 0.8500)	0.3668	88	0.2201	53	0.4628	52	0.2150	49	0.2861	60
	(0.0352 0.9659)	0.5914	113	0.3574	77	0.3330	61	0.2877	53	0.2009	32
	(0.4880 0.5120)	0.2869	56	0.3035	58	0.2530	52	0.2150	41	0.2530	50
(0.20 0.80)	(0.2000 0.8000)	0.2936	62	0.3214	66	0.2166	51	0.2112	46	0.2680	65
	(0.4000 0.6000)	0.2670	53	0.2905	49	0.2026	45	0.2290	44	0.3166	70
	(0.0304 0.9696)	0.4265	87	0.3281	61	0.1624	30	0.2583	48	4.3359	1000
(0.25 0.75)	(0.2500 0.7500)	0.3307	81	0.3199	55	0.2443	38	0.2403	45	0.3960	62
	(0.3314 0.6686)	0.3097	72	0.2446	49	0.1859	41	0.2192	47	0.3194	72
	(0.0285 0.9715)	0.1990	36	0.2955	64	0.2707	56	0.3764	56	0.3226	59
(0.35 0.65)	(0.3500 0.6500)	0.3339	73	0.2592	55	0.1690	37	0.2215	55	0.3234	80
	(0.2351 0.7649)	0.2958	65	0.2782	53	0.2000	44	0.1343	25	0.2686	62
	(0.0287 0.9678)	0.2852	60	0.3816	76	0.1667	32	0.2782	54	0.3821	89
(0.40 0.60)	(0.4000 0.6000)	0.2114	52	0.2731	60	0.2153	44	0.2204	54	0.2435	61
	(0.2000 0.8000)	0.2702	62	0.2876	61	0.2293	47	0.2180	50	0.2985	71
	(0.0304 0.9697)	0.4301	97	0.3031	59	0.4420	89	0.2588	53	0.2405	50
(0.45 0.55)	(0.4500 0.5500)	0.3705	59	0.2676	59	0.2349	50	0.1804	44	0.4489	66
	(0.0327 0.9673)	0.3169	69	0.2917	57	0.2297	39	0.3394	74	0.3275	72
	(0.1702 0.8298)	0.2819	60	0.2601	48	0.2713	54	0.2578	50	0.3498	58
(0.60 0.40)	(0.6000 0.4000)	0.2550	57	0.2763	61	0.2095	35	0.2065	48	0.1851	45
	(0.0506 0.9495)	0.4841	100	0.2799	53	0.3059	58	0.3633	64	4.3762	1000
	(0.0929 0.9071)	0.2409	54	0.3017	58	0.4775	93	0.2790	52	0.3002	64
(0.65 0.35)	(0.6500 0.3500)	0.3281	45	0.3065	61	0.2196	46	0.1688	41	0.4372	63
	(0.0679 0.9321)	0.2488	49	0.2416	45	0.3262	63	0.3504	78	0.5707	107

Fonte: A autora.

Nos dados da Tabela 6, nota-se que ao realizar os testes para a terceira mistura abordada, pode-se afirmar que a estratégia do conjunto 4 foi a que apresentou as soluções que melhor convergiram a função apresentando baixo tempo e bons números de iterações. O conjunto 3 também conseguiu bons resultados. Cabe destacar que para esta mistura, o conjunto 5 foi o que encontrou a maior dificuldade na minimização, visto que teve maiores tempos nas mais altas iterações.

6. CONCLUSÕES

Analisando o estudo realizado neste trabalho é possível afirmar que o Método Enxame de Partículas foi eficiente e robusto na minimização do problema. O método apresentou um bom desempenho e encontrou todos os pontos estacionários da função distância. De acordo com os testes numéricos realizados, identificou-se que utilizando as técnicas da variação linear e também da variação não linear da inércia no método de otimização, para o problema abordado, garantiu boa eficiência temporal na busca pelos mínimos globais. Pode-se concluir que a metodologia proposta foi um bom instrumento para se verificar qual estratégia de parâmetros atuam melhor no método aplicado ao problema da análise de estabilidade de fases de uma mistura.

7. AGRADECIMENTOS

Agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ), pelo apoio financeiro a este projeto de pesquisa.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] CARLISLE, A., DOZIER, G., An Off-The-Shelf PSO. **Proceedings of the Particle Swarm**, Optimization Workshop, pp. 1–6, 2001.
- [2] CHATTERJEE, A., SIARRY, P. **Nonlinear Inertia Weight Variation for Dynamic Adaptation in Particle Swarm Optimization**, *Computers & Operational Research*, Volume 33, Issue 3, pp 859-871, 2006.
- [3] CLERC, M. **The swarm and the queen: towards a deterministic and adaptive particle swarm optimization**. Proc. 1999 ICEC, Washington, DC, p. 1951-1957, 1999.
- [4] EBERHART, R. C.; SHI, Y. **Particle Swarm Optimization: Developments, Applications and Resources**. In: IEEE Congr. Evol. Comput., vol. 1, 2001. p. 81–86.
- [5] 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.
- [6] LUCIA, A., DIMAGGIO, P. A., BELLOWS, M. L. e OCTAVIO, L. M. The phase behavior of n-alkane systems. **Computers & chemical engineering**, v. 29, n. 11-12, p. 2363-2379, 2005.
- [7] MATIAS, P.T. **Avaliação Comparativa de Algoritmos evolutivos com operadores adaptativos**. Rio de Janeiro, 2008. 56 p. Dissertação (Mestrado em Ciência em Engenharia Civil) – COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2008. Disponível em: < http://www.coc.ufrj.br/index.php?option=com_docman&task=doc_details&gid=1457 >. Acesso em: 04 agosto 2018.
- [8] MENDES, R. **Population Topologies and Their Influence in Particle Swarm Performance**. 2004. 189 p. Tese (Doutorado)- Departamento de Informática, Escola de Engenharia, Universidade do Minho, 1994. Disponível em: < <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.150.6463&rep=rep1&type=pdf> >. Acesso: 10 agosto 2018.
- [9] MICHELSEN, M. L. The Isothermal Flash Problem. Part I - Stability Analysis. Part II - Phase Split Calculation. **Fluid Phase Equilibria**, v. 9, p. 1-19, 21-40, 1982.
- [10] OLIVEIRA, M. B. **Aplicação do Método Luus Jaakola em um Problema Termodinâmico**. Santo Antônio de Pádua, 2016. 67 p. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Matemática) – Instituto do Noroeste Fluminense de Educação Superior, Universidade Federal Fluminense, Santo Antônio de Pádua, 2016.
- [11] SOUZA, J. S. **Análise global da estabilidade termodinâmica de misturas: um estudo com o método do conjunto gerador**. Nova Friburgo, 2010. 138 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - IPRJ, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo- RJ, 2010. Disponível em: <http://www.bdt.d.uerj.br/tde_busca/processaPesquisa.php?pesqExecutada=1&id=1869&PHPSESSID=lpbth6m3objo1o7085flupu2n0>. Acesso em: 18 abril 2019.

- [12] STADTHERR, M. A., SCHNEPPER, C. A., BRENNECKE, J. F. Robust Phase Stability and Analysis using Interval Methods. In: **AIChE Symposium Series**. New York, NY: American Institute of Chemical Engineers, v. 91, n. 304, p. 356- 359, 1995.
- [13] SUN, A. C., SEIDER, W. D. Homotopy-continuation method for stability analysis in the global minimization of the Gibbs free energy. **Fluid Phase Equilibria**, v. 103, n. 2, p. 213-249, 1995.
- [14] VIOT, J. **Otimização por Enxame de Partículas com congregação passiva seletiva**. Rio de Janeiro, 2010. 94 p. Tese (Doutorado em ciências em engenharia civil) – COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010. Disponível em: < http://www.dominiopublico.gov.br/pesquisa/DetalheObraForm.do?select_action=&co_obra=181377>. Acesso em: 08 agosto 2018.