

APLICAÇÃO DE ALGORITMOS GENÉTICOS PARA AJUSTE DE MODELOS REGRESSORES NÃO LINEARES COM GRANDE NÚMERO DE PARÂMETROS¹

Kamila Lacerda de Almeida², Mariana Tito Teixeira³, Roney Alves da Rocha⁴

Resumo: Neste artigo, foi avaliada aplicação de algoritmos genéticos (AG) para fazer o ajuste de um modelo regressor não linear multiparamétrico a dados de viscosidade dinâmica de soluções similares a sucos. Para avaliar a eficiência da metodologia, foi utilizado um modelo regressor com 17 parâmetros independentes e dados de viscosidade obtidos da literatura. A correlação entre a viscosidade estimada pelo modelo e a viscosidade obtida experimentalmente foi de 99,21%. A utilização de AG mostrou-se como uma ferramenta valiosa para o ajuste de parâmetros de modelos regressores não lineares, com rápida convergência, pouca ou nenhuma dependência dos valores iniciais para a primeira iteração e facilidade de implementação computacional.

Palavras-chave: Juices, algoritmos genéticos, Ansys Multiphysics, Flotran, Método numérico, viscosidade.

Introdução

Equações não lineares nos estimadores dos parâmetros em geral não apresentam fórmulas explícitas e as estimativas de seus parâmetros são obtidas por métodos numéricos iterativos, como Gauss-Newton e Marquardt, que podem, ou não, convergir para a solução desejada dependendo dos valores iniciais fornecidos para as primeiras iterações. Uma alternativa aos procedimentos numéricos é utilizar alguma heurística capaz de operar em tempo polinomial e fornecer soluções de alta qualidade para o problema.

¹Parte do trabalho desenvolvido na disciplina ENG 105 – Operações Unitárias

²Graduanda em Engenharia Química – FACISA/UNIVIÇOSA. E-mail: kamila.sere@hotmail.com.

³Graduanda em Engenharia Química – FACISA/UNIVIÇOSA. E-mail: marianatitoteixeira@hotmail.com.

⁴Professor do curso de Engenharia Química – FACISA/UNIVIÇOSA. E-mail: ronoyalimentos@yahoo.com.br.

Nesse contexto, os Algoritmos Genéticos (AG) assumem um papel de destaque. AG é uma heurística cujos princípios de funcionamento seguem uma analogia ao processo evolutivo biológico: uma população inicial (F_1) de possíveis valores (indivíduos ou cromossomos) para os parâmetros do modelo é gerada aleatoriamente ou por meio de alguma heurística gulosa. Da população inicial são selecionados, com uma probabilidade p_1 , os indivíduos mais aptos, que se cruzarão (*crossover*) com uma probabilidade p_2 , e formarão uma nova geração de indivíduos (F_2). Durante o cruzamento, os cromossomos dos pais poderão sofrer mutação com probabilidade p_3 , um procedimento necessário para garantir variabilidade genética à população. O algoritmo desencadeia uma sequência de sucessivas gerações, caracterizando um processo evolutivo. Uma prática que auxilia na convergência do algoritmo é a de preservar o cromossomo do melhor indivíduo ao longo de algumas gerações, o que é denominado elitismo.

Uma ampla revisão sobre os algoritmos genéticos e suas aplicações pode ser encontrada em Micha-Lewicz (1995), Haupt e Haupt (2004) e Sivanandam e Deepa (2008). Os dados utilizados neste trabalho foram obtidos de Moura et al. (2005), pois, segundo esses autores, apesar de seus esforços, não foi possível realizar um bom ajuste do seu modelo regressor aos dados experimentais, sendo esta a principal justificativa para escolha do trabalho desses como fonte de dados para avaliar a aplicação de algoritmos genéticos.

A utilização de AG no presente trabalho tem como objetivo avaliar o potencial dessa importante ferramenta para o ajuste de modelos multiparamétricos não lineares, visto que essa é uma constante necessidade dos profissionais de engenharia e outros profissionais que atuam em diferentes áreas de pesquisa.

Material e Métodos

O modelo não linear utilizado neste trabalho é o que está descrito pela Equação 1.

$$\eta(T, W, C, L) = (\beta_0 + \beta_1 T + \beta_2 T^{\beta_3}) \times (\beta_4 + \beta_5 W + \beta_6 W^{\beta_7}) \times (\beta_8 + \beta_9 C + \beta_{10} C^{\beta_{11}}) \times (\beta_{12} + \beta_{13} L + \beta_{14} L^{\beta_{15}}) + \beta_{16}$$

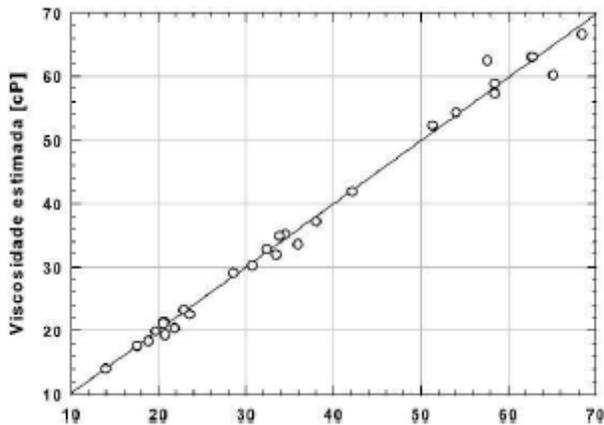
Na Equação 1, T é a temperatura em °C, W é o percentual de água, C é o percentual de carboidratos e L é o percentual de lipídios. i são parâmetros do modelo.

Os dados experimentais foram obtidos de Moura et al. (2005). A resolução via AG foi feita utilizando-se o módulo *Solver*, presente no Microsoft Excel, versão 2010, selecionando-se o método de solução "Evolutionary". O *Solver* realiza sucessivas alterações nos valores dos parâmetros de modo a minimizar a soma de desvios quadráticos do modelo. As configurações do AG foram: critério de convergência (*default*): 0,00001, taxa de mutação (*default*): 0,075, tamanho da população: 150 indivíduos, propagação aleatória (*default*): 3%, tempo máximo sem aperfeiçoamento: 300 segundos.

Resultados e Discussão

Moura et al. (2005) não tiveram sucesso ao tentar ajustar um modelo polinomial de segunda ordem aos dados experimentais; inclusive sugerem a busca por outras modelagens matemáticas. O coeficiente de determinação (r^2) obtido por eles não foi superior a 0,76, enquanto que o r^2 obtido por algoritmos genéticos para o modelo não linear foi de 0,9921. O gráfico na Figura 1 permite avaliar a capacidade preditiva do modelo descrito pela Equação 1. A linearidade apresentada nesse gráfico sugere que o modelo ajustado é confiável e que pode ser utilizado em simulações numéricas de transferência de calor em alimentos líquidos similares a sucos, observando-se os limites de composição centesimal e temperaturas utilizados no experimento. Embora não seja recomendado, certamente algum grau de extrapolação é permitido, devido à evidente linearidade apresentada no gráfico da Figura 1, cabendo, sobretudo, em sua utilização, o bom senso e o conhecimento do analista.

Figura 1: Gráfico da viscosidade experimental vs. viscosidade estimada pelo modelo descrito pela Equação 1. $R^2 = 0,9921$.



Conclusões

Os modelos multiparamétricos não lineares são importantes ferramentas na análise de muitos problemas de engenharia. O ajuste desses modelos aos dados experimentais pode, contudo, ser uma tarefa árdua, caso não seja utilizada uma técnica apropriada e de fácil implementação. Neste trabalho fez-se o ajuste de dados experimentais a um modelo multiparamétrico não linear utilizando algoritmos genéticos implementados no módulo *Solver* do Microsoft Excel. Este permitiu a realização de um excelente ajuste, em um intervalo de tempo relativamente pequeno (5 minutos) e sem nenhuma necessidade de programação, com rápida convergência, pouca ou nenhuma dependência dos valores iniciais para a primeira iteração, sendo, portanto, um método recomendado para o ajuste de modelos não lineares.

Referências Bibliográficas

HAUPT, R. L. and HAUPT, S. E. *Practical Genetic Algorithms*. Wiley Interscience, Second Edition, 2004.

MICHALEWICZ, Z.; *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs*. Third, Revised and Extended Edition. Springer, Berlin, 387p., 1995.

SIVANANDAM, S.N.; DEEPA, S.N.; Introduction to Genetic Algorithms. **Springer-Verlag**, Berlin, 442p., 1995.

FRANÇA, V.C.L. e LEAL, A.M.C.B. Propriedades termofísicas de soluções-modelo similares a suco - Parte II. **Ciênc. Tecnol. Aliment.**, Campinas, v. 25, n. 3, p. 454-459, jul.-set. 2005.

