



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
ENG07053 - TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM  
ENGENHARIA QUÍMICA



# **Avaliação de algoritmos para determinação de regiões de confiança de parâmetros**

*Autor: Nicolás Artifon Dorneles*

*Orientador: Marcio Schwaab*

Porto Alegre, julho de 2018

# Avaliação de algoritmos para determinação de regiões de confiança de parâmetros

Nícolas Artifon Dorneles

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado  
como requisito parcial para a obtenção de título de  
Engenheiro Químico da Escola de Engenharia da  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Orientador: Prof. Dr. Marcio Schwaab

Porto Alegre, julho de 2018

## Sumário

Sumário	iii
Agradecimentos	iii
Resumo	vi
Lista de Figuras	vii
Lista de Tabelas	viii
Lista de Símbolos	ix
Lista de Abreviaturas e Siglas	xi
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	2
2.1 Estimação de parâmetros	2
2.2 Função objetivo	2
2.3 Minimização	3
2.4 Região de confiança	6
3 Materiais e Métodos	11
3.1 Enxame de Partículas ( <i>Particle Swarm</i> )	12
3.2 Lobry – Flandrois	14
3.3 UCPR	14
4 Resultados	15
4.1 Modelo linear	15
4.2 Modelo não-linear	23
5 Conclusões e Trabalhos futuros	32
Referências	34

## **Agradecimentos**

*Aos meus pais pelo amor incondicional e pelo incentivo incansável aos estudos.*

*A minha namorada, Ana Carolina, pelos momentos de apoio e finais de semana sacrificados aos estudos.*

*Ao DPQG da FEPAM, em especial ao Geol. Rafael Midugno e à Eng. Química Ana Lúcia Mastrascusa pela Bolsa de Iniciação Científica e pelos dois anos de ensinamentos e orientações.*

*Ao meu orientador, Prof. Márcio Schwaab, pelos ensinamentos e por me guiar nesse trabalho, possibilitando a conclusão dessa etapa.*

*“O primeiro pecado da humanidade foi a fé; a primeira virtude foi a dúvida.”*

*Carl Sagan*

## Resumo

Neste trabalho, foi comparada a capacidade de diferentes algoritmos heurísticos em determinar a região de confiança. Para isso, foram implementados três algoritmos heurísticos, o Enxame de Partículas (PSO), o método de Lobry-Flandrois e o método de Kleper-Hendrix, UCPR, e se testou a qualidade da região de confiança gerada para dois diferentes modelos, um linear, cuja região de confiança tem formato conhecido e outro não-linear, cujo formato da região é mais complexo. Para o PSO, também foi possível avaliar a influência de diferentes valores finais do parâmetro peso de inércia inicial ( $W_o$ ) e final ( $W_f$ ) na qualidade da região obtida. Teve-se, para o modelo linear, que PSO com  $W_o$  mais elevado e  $W_f$  mais elevado gera melhor distribuição dos pontos ao longo da região de confiança. Também há melhora na definição da região quando o número de partículas/pontos inicial é aumentado nos três modelos. Contudo, verificou-se que o aumento no número de pontos do UCPR resulta no aumento significativo do tempo de convergência do problema. A interpretação dos resultados para o modelo não-linear foi similar à do modelo linear, exceto o modelo de Lobry-Flandrois, que não conseguiu delimitar a região de confiança daquele modelo.

**Palavras – chave:** Enxame de Partículas, Lobry-Flandrois, região de confiança, UCPR.

## Lista de Figuras

Figura 2-1. Esquema do funcionamento da metodologia do Enxame de Partículas. ....	5
Figura 2-2. Representação esquemática da translação e ajuste da esfera gerada com pontos aleatórios a escala de valores dos parâmetros. ....	8
Figura 2-3. Representação da metodologia de convergência do algoritmo Lobry-Flandrois.	9
Figura 2-4. Esquema do funcionamento da metodologia UCPR.....	10
Figura 4-1. Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de $W_o = 0,75$ e $W_f = 0,75$ .. ....	16
Figura 4-2. Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de $W_o = 0,75$ e $W_f = 0,95$ .. ....	17
Figura 4-3. Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de $W_o = 0,95$ e $W_f = 0,75$ . ....	18
Figura 4-4. Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de $W_o = 0,95$ e $W_f = 0,95$ .. ....	19
Figura 4-6. Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo de Lobry-Flandrois para sistemas com 1.000, 5.000 e 10.000 pontos respectivamente. ....	21
Figura 4-7. Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo de UCPR para sistemas com 100, 350 e 500 pontos respectivamente. ....	22
Figura 4-8. Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de $W_o = 0,75$ e $W_f = 0,75$ .. ....	24
Figura 4-9. Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de $W_o = 0,75$ e $W_f = 0,95$ .. ....	25
Figura 4-10. Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de $W_o = 0,95$ e $W_f = 0,75$ . ....	26
Figura 4-11. Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de $W_o = 0,95$ e $W_f = 0,95$ . ....	27
Figura 4-12. Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo de Lobry-Flandrois para sistemas com 1.000, 5.000 e 10.000 pontos respectivamente. ....	29
Figura 4-13. Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo de UCPR para sistemas com 100, 350 e 500 pontos respectivamente. ....	30

## Lista de Tabelas

Tabela 3-1. Valores das variáveis independente e dependente para utilizadas para estimação pelo modelo linear. ....	11
Tabela 3-2. Valores das variáveis independente e dependente para utilizadas para estimação pelo modelo não linear. ....	12
Tabela 4-1. Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo PSO para o modelo linear .....	20
Tabela 4-2. Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo Lobry-Flandrois para o modelo linear.....	21
Tabela 4-3. Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo UCPR para o modelo linear. ....	23
Tabela 4-4. Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo PSO para o modelo não-linear .....	28
Tabela 4-5. Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo Lobry-Flandrois para o modelo não-linear. ....	29
Tabela 4-6. Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo UCPR para o modelo não-linear. ....	30



## Lista de Símbolos

$H_{\hat{\theta}}$  - Matriz Hessiana dos parâmetros.

$V_{\hat{\theta}}$  - Matriz de covariância dos parâmetros.

$\hat{\theta}$  - Vetor dos parâmetros estimados.

$\nabla S$  - Vetor gradiente da função objetivo.

$c_1$  - Parâmetro cognitivo.

$c_2$  - Parâmetro social.

$C_{A0}$  - Concentração do reagente A no tempo inicial.

$C_B$  - Concentração do produto B em um tempo  $t$ .

$d$  - Direção da busca do enxame.

$i$  - Partícula.

$k$  - Índice de iteração.

$N_{int}$  - Número máximo de iterações.

$NP$  - Número de parâmetros

$N_{par}$  - Número de partículas/pontos do modelo.

$P$  - Vetor com  $N_{par}$  aleatórios.

$P_1$  e  $P_2$  - Parâmetros dos modelos.

$p_{global}$  - Melhor ponto encontrado pelo enxame.

$p_i$  - Melhor ponto encontrado pela partícula.

$P_{try}$  - Ponto aleatório.

$R$  - Distância mínima média entre os pontos de  $P$ .

$r_1$  e  $r_2$  - Números aleatórios.

$R_{try}$  - Distância entre  $P_{try}$  e o menor valor de  $P$ .

$S(\theta)$  - Função objetivo avaliada com o vetor de parâmetros do modelo.

$v$  - Velocidade da partícula.

$W$  - Peso de inércia.

$W_f$  - Peso de inércia no final das iterações.

$W_o$  – Peso de inércia no início das iterações.

$x$  – Posição da partícula no espaço de busca.

$x^e$  - Vetor com valores da variável independente experimentais.

$x^m$  – Vetor com valores da variável independente otimizadas.

$y^e$  - Vetor com valores da variável dependente experimentais.

$y^m$  - Vetor com valores da variável dependente otimizadas.

$\Theta$  – Vetor dos parâmetros.

$N$  – Número de variáveis dependentes.

$NE$  – Número de experimentos.

$Ny$  – Número de variáveis dependentes em cada experimento

$F(NP, N - NP, \alpha)$  – Distribuição  $F$  de Fisher com  $NP$  e  $N - NP$  graus de liberdade e nível de confiança  $\alpha$ .

$\alpha$ - Nível de confiança.

$\otimes$  - Multiplicação de elemento por elemento dos vetores.

## **Lista de Abreviaturas e Siglas**

PSO - Particle Swarm Optimization

UCPR – Uniform Covering by Probabilistic Rejection



## 1 Introdução

Em problemas de estimação de parâmetros, procura-se o melhor valor para determinado conjunto de parâmetros através de sucessivas iterações que modificam o valor desse conjunto até que o melhor ajuste possível das predições de um modelo aos dados experimentais seja alcançado. Para a medida da qualidade do ajuste são usadas funções objetivo, as quais medem a “distância” entre o modelo e a realidade. Uma função objetivo comumente utilizada e bastante robusta é a função dos mínimos quadrados que compara a soma do quadrado das diferenças entre os valores experimentais e os valores preditos pelo modelo. Aliado a função objetivo, está o algoritmo de minimização, que é empregado para reduzir os valores da função objetivo até o valor ótimo.

Entretanto, somente a determinação dos valores ótimos dos parâmetros do modelo não é suficiente, já que dados experimentais estão sujeitos a erros devido às imprecisões de medidas e fatores não controlados. Assim, a determinação das incertezas paramétricas é de fundamental importância para permitir a avaliação da qualidade das estimativas obtidas para cada parâmetro. A avaliação das incertezas é geralmente feita através da análise do intervalo de confiança de cada parâmetro, mas, devido à correlação paramétrica, geralmente presente devido à não-linearidade dos modelos, a análise deve ser feita através de regiões de confiança. A determinação de regiões de confiança de modelos lineares é simples e consistem em regiões delimitadas por elipses (ou elipsoides). Por outro lado, em modelos não-lineares esta determinação não é simples e geralmente envolve o uso de métodos computacionais intensivos, isto é, com um alto custo computacional.

Neste trabalho, foram avaliados três métodos computacionais intensivos de determinação de regiões de confiança: o Enxame de Partícula (PSO), o método de Lobry-Flandrois e o *Uniform Covering by Probabilistic Rejection* (UCPR). Foi considerado um modelo linear simples, para verificar a capacidade dos métodos em fornecer a região de confiança elíptica e um modelo não-linear simples, mas que apresenta uma região de confiança com formato complexo. Por fim, as regiões de confianças obtidas foram comparadas considerando o quanto o método foi capaz de descrever da região e o tempo necessário para gerar a convergência do problema.

O trabalho foi estruturado em quatro capítulos: revisão bibliográfica, com introdução de conceitos importantes para o entendimento pleno do trabalho; metodologia, na qual se aborda como o problema foi estruturado; discussão e resultados, onde comparou-se as regiões de confiança geradas; e a conclusão.

## 2 Revisão Bibliográfica

Nesse capítulo serão introduzidos conceitos essenciais para o desenvolvimento desse trabalho.

### 2.1 Estimação de parâmetros

Problemas de estimação de parâmetros consistem na medição dos valores de resposta de um determinado fenômeno físico, visando determinar os valores desconhecidos do modelo que serão utilizados para explicar o comportamento do sistema em análise (BITTENCOURT, 2013).

A busca pelos parâmetros de um modelo é realizada através de diversas medições experimentais do comportamento de determinados sistemas e, assim o processo pode estar susceptível a erros; portanto, conceitos de estatística passam a ser utilizados para que se possa estimar os parâmetros de um modelo adequadamente (PRETTO, 2017).

Para que a solução dos problemas de estimação de parâmetros concorde com os resultados obtidos experimentalmente, é necessário que as medições sejam realizadas com o menor erro possível, e que a escolha de um modelo ou a adequação de um já existente seja apropriada (BECK; WOODBURY, 1998).

Essencialmente, a estimação de parâmetros se baseia no uso equações e rotinas matemáticas, chamadas de estimadores, que ajustam os valores dos parâmetros até que a condição imposta ao modelo seja satisfeita. Geralmente, é utilizada a minimização de uma função objetivo (PRETTO, 2017; SCHWAAB, 2005).

### 2.2 Função objetivo

A função objetivo é uma função específica aplicada às variáveis de decisão do problema. Seu principal critério de escolha é a capacidade de otimizar o problema em questão, no qual se deseja obter o ponto ótimo, seja maximizando ou minimizando a função (FOGLIATTO, 2011). Também pode-se conceituar a função objetivo como distância entre os dados obtidos experimentalmente e os dados preditos pelo modelo e, assim, quanto menor a distância, melhor será o ajuste (SCHWAAB, 2005).

A função objetivo mais usual é a função dos mínimos quadrados, Equação (1), devido à sua robustez e simplicidade. O cálculo da função consiste na soma dos quadrados das diferenças (resíduos) entre os valores experimentais e os preditos, buscando-se valores de parâmetros que minimizem a função (MEISTER, 2006; TORRES, 2017). Para que o uso da

função dos mínimos quadrados seja adequado, é necessário considerar uma séria de hipóteses, como a distribuição normal dos erros experimentais, medidas independentes e com erros iguais em todas as condições medidas. A função do mínimos quadrados também não é adequada para problemas que envolvam duas ou mais variáveis de saída distintas, pois haverá discrepâncias entre as unidades (SCHWAAB, 2005).

$$S(\theta) = \sum_{i=1}^n (y_i^e - y_i^m(x_i^m, \theta))^2 \quad (1)$$

Onde  $S(\theta)$  é a função objetivo,  $y_i^e$  é o valor da variável dependente medida experimentalmente,  $y_i^m$  é o valor da variável dependente obtida pelo modelo,  $x_i^m$  é o valor da variável independente e  $\theta$  representa o parâmetro.

Existem alternativas de função objetivo como a função dos mínimos quadrados ponderados, que atribui pesos aos valores de saída conforme a qualidade (precisão) destes (VAZ; BECK, 2005). O valor atribuído ao peso pode ser estipulado por correlações empíricas ou pela análise do erro relativo (ALMEIDA; CASTEL-BRANCO; FALCÃO, 2002). O método admite que os erros entre as variáveis dependentes possam ser variáveis, assim, possui maior versatilidade do que a método dos mínimos quadrados ordinários.

## 2.3 Minimização

Em problemas de estimação de parâmetros, após determinar com qual função objetivo se trabalhará, escolhe-se o método pelo qual a função será minimizada (SILVA, 2010), podendo ser métodos analíticos e os heurísticos, que são o objeto de estudo desse trabalho. Para que a função atinja o seu ponto de mínimo, é necessário que se façam inúmeras iterações nos parâmetros a fim de encontrar seus valores ótimos (SCHWAAB, 2005).

Existem inúmeros métodos de otimização que podem ser utilizados para minimizar uma função objetivo. Nesse trabalho, serão utilizados o método de Gauss-Newton e o método de otimização pelo Enxame de Partículas (PSO - *Particle Swarm Optimization*).

### 2.3.1 Gauss-Newton

O método Gauss-Newton é uma adaptação do método de Newton que, por sua vez, é um método de otimização analítico. Os métodos analíticos empregam o uso de técnicas do cálculo diferencial para determinar o valor do ponto ótimo, sendo que se procura os pontos onde gradiente da função é nulo (HIMMELBLAU, 1972).

O uso dos métodos analíticos é ideal em situações nas quais a função objetivo não considera os desvios nas variáveis independentes e quando o modelo estimado é linear. Em problemas não lineares ou com vasta coleção de dados, os métodos analíticos não são a melhor opção (HIMMELBLAU, 1972; SCHWAAB, 2005).

O método de Newton consiste no emprego do vetor gradiente da função objetivo e da matriz Hessiana da função objetivo para a minimizar o problema. O princípio do método é obter a direção e o tamanho do passo através do vetor gradiente e, assim, iniciar as iterações até que o ponto ótimo seja encontrado.

A busca pelo ponto de mínimo é rápida, pois a convergência do método é quadrática (SCHWAAB, 2005). Contudo, o método de Newton é ótimo para valores iniciais próximos ao ponto de otimização, podendo apresentar baixo desempenho ou não convergir se a estimativa inicial não for boa (MONTEIRO, 2013).

Outra dificuldade no emprego do método de Newton é a inversão da matriz Hessiana que pode necessitar de alto gasto computacional e determinar sua inversa pode ser complicado ou impossível em problemas com baixa significância entre parâmetros (SCHWAAB, 2005). Também, faz-se necessário que a matriz Hessiana seja definida positiva, caso contrário não haverá minimização da função objetivo (MONTEIRO, 2013).

Uma alternativa viável ao método de Newton é o método de Gauss-Newton, que propõe uma aproximação para o cálculo da matriz Hessiana. A vantagem do método é que há situações em que o termo da derivada segunda do modelo em relação aos parâmetros pode ser omitido, possibilitando a minimização da função objetivo apenas com as derivadas de primeira ordem em relação ao modelo (AGUIAR, 2012).

Também, como alternativa, tem-se o uso dos métodos heurísticos, que minimizam a função objetivo através da manipulação matemática das variáveis do processo. A seguir, apresentam-se o método heurístico do Enxame de Partículas, utilizado nesse trabalho.

### 2.3.2 *Enxame de Partículas*

O método do Enxame de Partículas vem sendo utilizado em diversos problemas devido ao seu alto rendimento e flexibilidade em resolver problemas não lineares e não diferenciáveis (SHI; EBERHART, 1998). O conceito da técnica se baseia em replicar o comportamento gregário de animais, onde cada partícula é direcionada a um sentido baseado em sua experiência e na troca de informações com o enxame (CHEN, 2009).



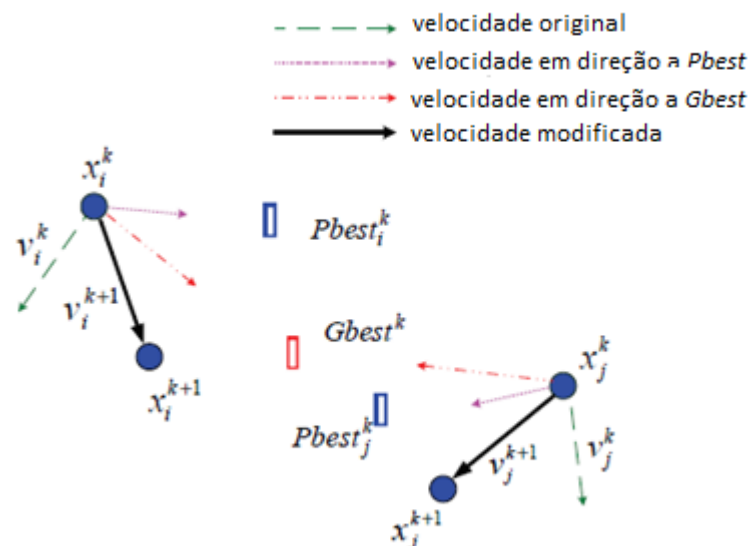
relativa à inércia partícula; uma relativa à atração da partícula com o melhor ponto já encontrado; e o último relativo à atração com o melhor ponto de todo o grupo (SCHWAAB, 2005). As equações que definem a abordagem de busca do PSO são descritas nas Equações (2) e (3) abaixo.

$$v_{i,d}^{k+1} = v_{i,d}^k + c_1 r_1 (p_{i,d}^k - x_{i,d}^k) + c_2 r_2 (p_{global,d}^k - x_{i,d}^k) \quad (2)$$

$$x_{i,d}^{k+1} = x_{i,d}^k + v_{i,d}^{k+1} \quad (3)$$

Os índices  $k$ ,  $i$  e  $d$  detalhados na equação descrevem, respectivamente, a iteração, a partícula e a direção de busca;  $v$  é a velocidade e  $x$  a posição no espaço de busca;  $c_1$  e  $c_2$  são definidas como constantes positivas denominadas parâmetro cognitivo e social, respectivamente;  $r_1$  e  $r_2$  são dois números aleatórios com distribuição uniforme entre  $[0, 1]$ ;  $p_i$  é o melhor ponto encontrado pela partícula  $i$  e  $p_{global}$  é o melhor valor encontrado pelo enxame.

Cada partícula do enxame é tratada como um ponto no espaço de  $n$  dimensões, ocupando uma posição  $x$ ,  $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})$ . A melhor posição encontrada pela partícula é armazenada em  $p$ ,  $p_i = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{in})$  e a melhor posição do enxame é armazenada em  $p_{global}$ . (SHI; EBERHART, 1998). A Figura (2-1) reproduz esquematicamente o comportamento das partículas do enxame.



**Figura 2-1.** Esquema do funcionamento da metodologia do Enxame de Partículas. (CHEN, 2009)

Caso o primeiro termo da Equação (2) fosse removido, tem-se as partículas do enxame se movendo para a mesma direção, ou seja, a área de busca é restringida através das iterações,

podendo convergir para mínimos locais. Assim, essa solução é influenciada pela população inicial do enxame. Inserindo-se o primeiro termo da Equação (3) a tendência é que as partículas explorem o espaço de busca, tendo maior facilidade em encontrar o mínimo global. Dessa forma, SHI; EBERHART (1998) propõe que haja um balanceamento entre a capacidade de busca local e a de busca global introduzindo o peso de inércia à Equação (2).

Existem várias adaptações do PSO, como a proposta por SHI e EBERHART (1998), na qual será considerado o termo de peso de inércia ( $W$ ), Equação (4), responsável por modificar o termo da velocidade prévia da partícula.

$$v_{i,d}^{k+1} = Wv_{i,d}^k + c_1r_1 \otimes (p_{i,d}^k - x_{i,d}^k) + c_2r_2 \otimes (p_{global,d}^k - x_{i,d}^k) \quad (4)$$

## 2.4 Região de confiança

A região de confiança é uma região do espaço de parâmetros que delimita todos os conjuntos de valores de parâmetros e, quando substituídos no modelo, ainda garantem a qualidade do ajuste aos dados experimentais, permitindo-se supor que o modelo utilizado é uma boa representação da função objetivo (HAAS, 2008).

O método mais comum e usual para determinar a região de confiança dos parâmetros é pela aproximação quadrática da função objetivo em torno do ponto de mínimo, resultando em uma região elíptica descrita na Equação (5):

$$S(\theta) = S(\hat{\theta}) + (\theta - \hat{\theta}) \nabla S_{\hat{\theta}} + \frac{1}{2} (\theta - \hat{\theta})^T H_{\hat{\theta}} (\theta - \hat{\theta}) \quad (5)$$

onde  $\theta$  é o vetor dos parâmetros e  $\hat{\theta}$  é o vetor dos parâmetros estimados;  $S$  é a função objetivo avaliada para os valores de  $\theta$  e  $\hat{\theta}$ ; e  $H_{\hat{\theta}}$  é a matriz Hessiana dos valores dos parâmetros estimados.

No ponto de mínimo, o gradiente é nulo, logo, descarta-se o termo da equação. Considerando a aproximação feita por Gauss para o cálculo da matriz Hessiana, temos a Equação (6) a seguir:

$$S(\theta) - S(\hat{\theta}) = (\theta - \hat{\theta})^T V_{\hat{\theta}}^{-1} (\theta - \hat{\theta}) \quad (6)$$

onde  $V_{\hat{\theta}}$  é a matriz de covariância dos parâmetros.

Seguindo a metodologia proposta por SCHWAAB (2005), o lado direito da Equação e a função objetivo, quando ponderados pelos seus respectivos graus de liberdade, seguem a distribuição  $F$  de Fisher como descrito pela Equação (7).

$$\frac{(\theta - \hat{\theta})^T V_{\hat{\theta}}^{-1} (\theta - \hat{\theta}) / NP}{s(\hat{\theta}) / (N - NP)} \leq F(NP, N - NP, \alpha) \quad (7)$$

Onde  $F$  é a distribuição  $F$  de Fisher com  $NP$  e  $N - NP$  graus de liberdade,  $NP$  é o número de parâmetros,  $N$  é igual a  $NE$ , número de experimentos, multiplicado por  $N_y$ , número de variáveis dependentes de cada experimento, e  $\alpha$  é o nível de confiança.

Assim, a região de confiança dos parâmetros pode ser descrita pela Equação (8) a seguir:

$$(\theta - \hat{\theta})^T V_{\hat{\theta}}^{-1} (\theta - \hat{\theta}) \leq S(\hat{\theta}) \frac{NP}{(N - NP)} F(NP, N - NP, \alpha) \quad (8)$$

O uso do método quadrático para estimar a região de confiança de parâmetros que seguem um modelo linear ou que possuem baixos níveis de confiança é altamente recomendado, pois a aproximação quadrática é exata e o ponto de mínimo é o centro da região (BIEGLER, 2003; SCHWAAB, 2005).

Para os modelos não lineares, a qualidade da aproximação da região de confiança não é exata e, assim, dependerá da qualidade da aproximação linear do modelo. Assim, os resultados podem levar a previsões erradas sobre os parâmetros e sobre a região de confiança (SCHWAAB, 2005). Contudo, a determinação de regiões de confiança de modelos não lineares pode demandar muito gasto computacional, assim, pode-se utilizar a aproximação linear para estimar o comportamento dos parâmetros frente a região de confiança elíptica (BIEGLER, 2003).

#### 2.4.1 *Enxame de partículas*

A vantagem do uso do Enxame de Partículas para definir a região de confiança é que cada iteração do algoritmo resulta em um conjunto de pontos que pode vir a ser utilizado para delimitar o contorno da região de confiança (KODURU; WELCH; DAS, 2007). Nesse trabalho, será considerada a adaptação proposta por SHI e EBERHART (1998), que apresenta o termo de peso de inércia ( $W$ ), modificando o termo da velocidade prévia da partícula.

A eficiência do Enxame de Partículas dependerá da escolha dos valores de peso de inércia escolhidos. Para valores pequenos de peso de inércia, o termo primeiro termo da equação

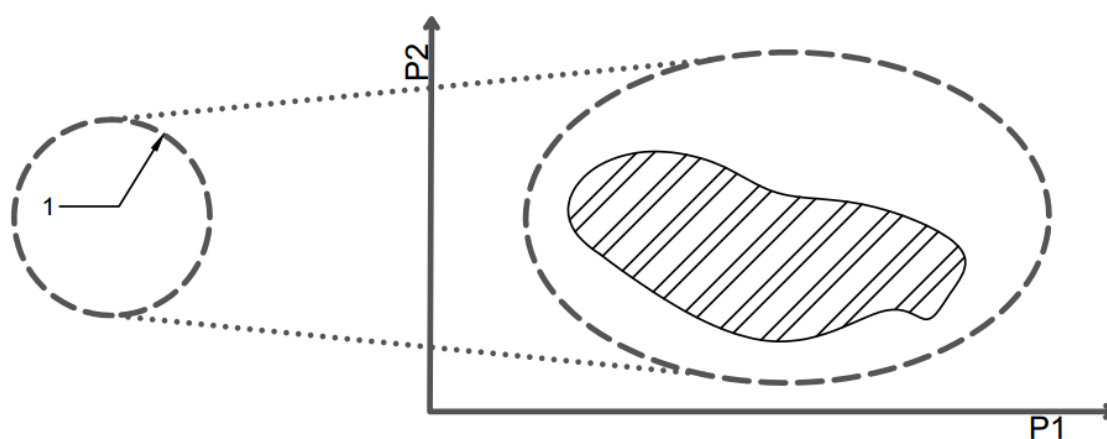
terá valor pequeno, restringindo a área de busca do ponto de mínimo. Caso o termo de inércia tenha valores elevados, a busca do enxame será realizada em locais afastados do ponto de mínimo, dificultando a convergência do problema. Assim, a melhor alternativa para que a região de confiança seja bem definida é ajustar o valor do peso inércia (KESSENTINI; BARCHIESI, 2015).

#### 2.4.2 Lobry – Flandrois

Uma alternativa aos métodos para determinar a região de confiança dos parâmetros é a abordagem sugerida por LOBRY; ROSSO; FLANDROIS (1991). O método consiste em adequar a superfície de uma esfera aos limites da região de confiança através de sucessivas interpolações lineares. Pode-se dividir o método em três etapas: amostragem aleatória; translação e ajuste; convergência ao ponto limite.

O objetivo da etapa de amostragem aleatória é obter uma distribuição homogênea de pontos em uma superfície esférica. Para isso, gera-se um vetor com pontos aleatórios normalmente distribuídos no intervalo  $[-1,1]$  e, em seguida, o normaliza para que a esfera tenha raio unitário (LOBRY; ROSSO; FLANDROIS, 1991).

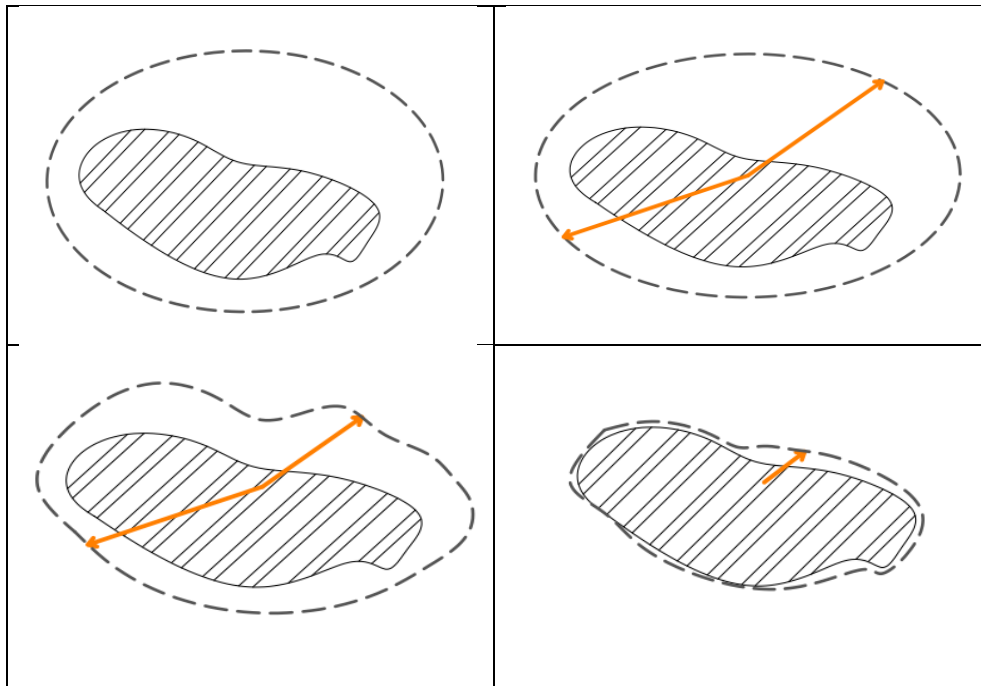
Após a esfera unitária ter sido gerada, translada-se o seu centro para as coordenadas do ponto de mínimo da função objetivo, o qual é determinado através de um método de minimização. O ajuste da esfera à região de confiança consiste em adequar o tamanho do raio à escala de valores dos parâmetros, conforme se demonstra na Figura (2-2) (LOBRY; ROSSO; FLANDROIS, 1991).



**Figura 2-2.** Representação esquemática da translação e ajuste da esfera gerada com pontos aleatórios a escala de valores dos parâmetros.

Por fim, para determinar as coordenadas do ponto da superfície que engloba a região de confiança usa-se um método iterativo baseado na interpolação de uma reta formada pelo

ponto ótimo e um ponto na superfície da região de confiança e o ponto gerado na superfície da esfera. A cada iteração do algoritmo, diminui-se o tamanho da reta que liga os três pontos, até que o ponto na superfície da esfera convirja a superfície da região de confiança, conforme demonstrado na Figura (2-3) (LOBRY; ROSSO; FLANDROIS, 1991).



**Figura 2-3.** Representação da metodologia de convergência do algoritmo Lobry-Flandrois.

#### 2.4.3 *Uniform Covering by Probabilistic Rejection*

O último algoritmo heurístico a ser testado nesse trabalho, é a rotina proposta por KLEPPER; HENDRIX, (1994). O método se baseia em determinar quais pontos se encontram dentro da região através de sucessivas interações com pontos gerados aleatoriamente.

Inicialmente, gera-se um conjunto de pontos,  $P$  de tamanho  $NP$  que define uma sub-região  $S$ . Para cada ponto gerado, calcula-se o valor máximo da função objetivo dos pontos do conjunto  $P$  e esse valor é atribuído ao pior ponto gerado (OSIDELE, 2001).

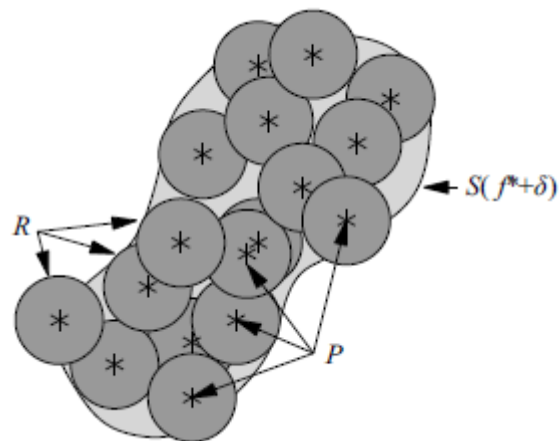
Após, calcula-se a distância euclidiana mínima, descrita na Equação (9), entre cada ponto do conjunto  $P$  e os demais. Assim, tendo-se  $NP$  valores de distâncias mínimas, determina-se o valor médio desses valores,  $R$ .

$$R = \frac{\sum_{j=1}^{NP} \min \left\{ \sqrt{\sum_{k=1}^{NP} (P_{1,1:NPar} - P_{k,1:NPar})^2} \right\}}{NP} \quad (9)$$

A etapa seguinte é a geração de um ponto distribuído aleatoriamente no intervalo,  $P_{try}$ , onde se calcula a distância entre  $P_{try}$  e o ponto mais perto de  $P$ ,  $R_{try}$ , descrita na Equação (10), caso essa distância seja maior do que a distância  $R$  multiplicada por uma constante  $c$ , o ponto gerado não é adequado, visto que está fora da região de confiança, então um novo  $P_{try}$  é gerado até que  $R_{try}$  seja menor do que  $R$ .

$$R_{try} = \min \left\{ \sqrt{\sum_{k=1}^{NP} (P_{try\ 1:NPar} - P_{k,1:NPar})^2} \right\} \quad (10)$$

Após, é calculada a função objetivo de  $P_{try}$ , que deve ser menor do que o valor máximo da função para o conjunto  $P$ , assim, se a função objetivo de  $P_{try}$  for maior do que a do pior ponto gerado, gera-se um novo  $P_{try}$ , caso seja menor,  $P_{try}$  substitui o pior ponto do conjunto  $P$  e repete-se o processo até que o valor máximo da função objetivo seja menor do que o valor limite definido (KLEPPER; HENDRIX, 2000). A Figura (2-4) representa esquematicamente o funcionamento do algoritmo UCPR.



**Figura 2-4.** Esquema do funcionamento da metodologia UCPR. (KLEPPER; HENDRIX, 2000)

### 3 Materiais e Métodos

Nesse trabalho, testou-se a capacidade dos três métodos diferentes para determinar a região de confiança de dois problemas de estimação de parâmetros. O objetivo do problema foi que o método seja capaz de descrever a região de confiança com a melhor precisão e menor gasto computacional possível.

As funções escolhidas para a estimação dos parâmetros e para definir a região de confiança são modelos cujas regiões são distintas, um modelo linear que possui uma região bem definida, e outro não linear. Assim, será possível comparar a eficiência das metodologias empregadas em situações opostas. O modelo linear escolhido consiste em uma equação de reta definida pela Equação (11):

$$y = P_1x + P_2 \quad (11)$$

onde  $x$  e  $y$  são, respectivamente, as variáveis independente e dependente do problema;  $P_1$  e  $P_2$  correspondem aos parâmetros da equação.

Os valores de  $x$  e  $y$  utilizados para estimação dos parâmetros estão definidos na Tabela (3-1).

**Tabela 3-1.** Valores das variáveis independente e dependente para utilizadas para estimação pelo modelo linear.

x	y
1,0	9,92
2,0	16,89
3,0	17,12
4,0	26,03
5,0	30,71
6,0	33,28
7,0	39,83
8,0	42,44
9,0	50,44
10,0	53,63

O modelo não linear escolhido define a equação de cinética de 1ª ordem da reação estequiométrica entre A e B, Equação (12), que pode ser rescrita na Equação (13) conforme a nomenclatura já utilizada.

$$C_B = C_{Ao}(1 - \exp(-kt)) \quad (12)$$

$$y = P_1(1 - \exp(-P_2x)) \quad (13)$$

onde  $x$  e  $y$  são, respectivamente, as variáveis independente e dependente do problema;  $P_1$  e  $P_2$  correspondem aos parâmetros da equação.

Os dados utilizados na estimação de parâmetros e na definição da região de confiança foram retirados da literatura (BATES; WATTS, 1988) e são apresentados na Tabela (3-2).

**Tabela 3-2.** Valores das variáveis independente e dependente para utilizadas para estimação pelo modelo não linear.

<b>x</b>	<b>y</b>
1,0	8,3
2,0	10,3
3,0	19,0
4,0	16,0
5,0	15,6
7,0	19,8

A função objetivo escolhida para minimizar os problemas foi a função dos mínimos quadrados, visto que é simples de ser implementada e bastante robusta, ou seja, garante resultados aceitáveis para uma gama de modelos. Para minimizar o valor da função objetivo, foi utilizado os métodos do PSO aliado ao Gauss-Newton. As estimações dos parâmetros, bem como a definição da região de confiança pelos algoritmos foram escritas em *Fortran* e realizada pela rotina *Estima*, desenvolvida por NORONHA *et al.*, (1993).

Todas as simulações foram realizadas em um *notebook Dell Inspiron* com processador *Intel® Core™ i3* e memória RAM de 4GB.

Esse capítulo está estruturado nas metodologias empregadas para cada modelo utilizado na determinação da região de confiança.

### 3.1 Enxame de Partículas

Por ser um método que apresenta ótimos resultados, existem várias sugestões de adaptações para esse modelo. Nesse trabalho foi utilizada a adaptação proposta por SHI e



EBERHART (1998) , considerado o termo de peso de inércia, responsável por modificar o termo da velocidade prévia da partícula.

Existem várias abordagens para o determinar o valor do peso de inércia, desde estimar um único valor a utilizar relações matemáticas. O único requisito necessário é que o valor do peso de inércia de ser um número menor que 1 para que o problema possa convergir (TRELEA, 2003). Nesse trabalho, foi utilizado o cálculo realizado por SCHWAAB (2005) descrito na Equação (14):

$$W = W_o + (W_f - W_o) \frac{k-1}{N_{int}-1} \quad (14)$$

onde  $W$  é o peso de inércia para  $k$ -ésima iteração,  $W_o$  e  $W_f$  são os valores iniciais do peso de inércia, respectivamente,  $k$  representa em qual iteração o algoritmo se encontra e  $N_{int}$  o número máximo de iterações pré-estabelecidas.

Valores baixos de peso de inércia garantem a rápida convergência do problema para o ponto de mínimo, enquanto altos valores de peso de inércia contribuem para a exploração da região de confiança. Assim, a ideia da Equação (14) é alterar o valor de  $W$  linearmente de uma estimativa inicial até um valor final, garantindo uma boa definição da região de confiança.

A rotina de trabalho foi realizada variando o número de partículas do enxame ( $N_{par}$ ), o número de iterações do enxame ( $N_{int}$ ) e o número de minimizações do enxame ( $N_{min}$ ), o qual corresponde a quantas vezes o algoritmo converge ao ponto ótimo. Para que as diferentes variações do modelo pudessem ser comparadas, manteve-se a relação  $N_{par} \times N_{int}$  constante, definida como 2.000. A minimização da função objetivo foi realizado a partir do algoritmo do PSO, aliado ao método Gauss-Newton, sendo que está última etapa é usada para garantir que o problema convirja ao ponto ótimo.

As alterações realizadas feitas para um conjunto de quatro diferentes pesos de inércia inicial e final, [0,75 – 0,75], [0,75 – 0,95], [0,95 – 0,75] e [0,95 – 0,95]. A proposta dessas modificações é avaliar o a influência dos valores de peso de inércia na estimação de parâmetros e na determinação da região de confiança. Como demonstrado por TRELEA (2003), o peso de inércia com valor de 0,75 proporciona convergência rápida ao ponto de mínimo; dessa forma procurou-se aumentar o valor do peso.

O Enxame de Partículas foi avaliado variando um conjunto de parâmetros do modelo:  $N_{par}$ ,  $N_{int}$ ,  $N_{min}$ ,  $W_o$  e  $W_f$ . O problema avaliado consiste em quatro conjuntos constituídos por diferentes valores de  $W_o$  e  $W_f$ , [0,75 – 0,75], [0,75 – 0,95], [0,95 – 0,75] e [0,95 – 0,95],

respectivamente. Para cada conjunto de  $W_o$  e  $W_f$ , foram realizadas nove simulações para os valores de  $N_{par}$  igual a [10, 25, 50],  $N_{int}$  igual a [200, 80, 40] e  $N_{min}$  igual a [1, 5, 10].

Para que o problema não ficasse muito amplo, os valores das constantes cognitiva e social,  $c_1$  e  $c_2$ , não foram alterados. Utilizou-se a abordagem habitual de atribuir o mesmo valor para as constantes, sendo que este valor foi definido igual a 1,5, respeitando o intervalo recomendado, [0, 4] (ÖZSOY; ÖRKÇÜ, 2016).

### 3.2 Lobry – Flandrois

Para o estudo do método proposto por LOBRY; ROSSO; FLANDROIS, (1991), implementou-se o algoritmo em Fortran e, especificando os limites do intervalo de confiança e sabendo-se a localização do ponto ótimo através do uso conjunto dos métodos PSO e Gauss-Newton, foi definido o problema para determinar a região de confiança dos parâmetros. Foram utilizados diferentes valores de pontos no conjunto inicial, sendo testados sistemas com 1.000, 5.000 e 10.000 pontos. Após os resultados foram comparados entre si e com os dos demais modelos utilizados.

### 3.3 UCPR

O algoritmo UCPR foi implementado em uma rotina Fortran utilizando como modelo o algoritmo disponível no trabalho de KLEPPER; HENDRIX, (1994). Assim, como nos demais modelos avaliados neste trabalho, o método foi utilizado para avaliar a predição da região de confiança a partir do ponto ótimo, que também foi determinado pelo uso conjunto dos métodos PSO e Gauss-Newton, para o modelo linear e o modelo não linear.

As rotinas de cálculo foram realizadas modificando o número de pontos avaliados e mantendo o valor do coeficiente de segurança constante. Os valores de pontos utilizados para cada modelo foram 100, 300 e 500 e o coeficiente de segurança foi definido como 1.

## 4 Resultados

Esse capítulo está estruturado no resultado das diferentes simulações realizadas para os modelos estudados e na discussão dos resultados obtidos. Os resultados serão comparados entre si, para determinar qual é a melhor configuração do modelo e, finalmente, comparam-se os três modelos utilizados, afim de determinar qual obteve melhor resultado.

### 4.1 Modelo linear

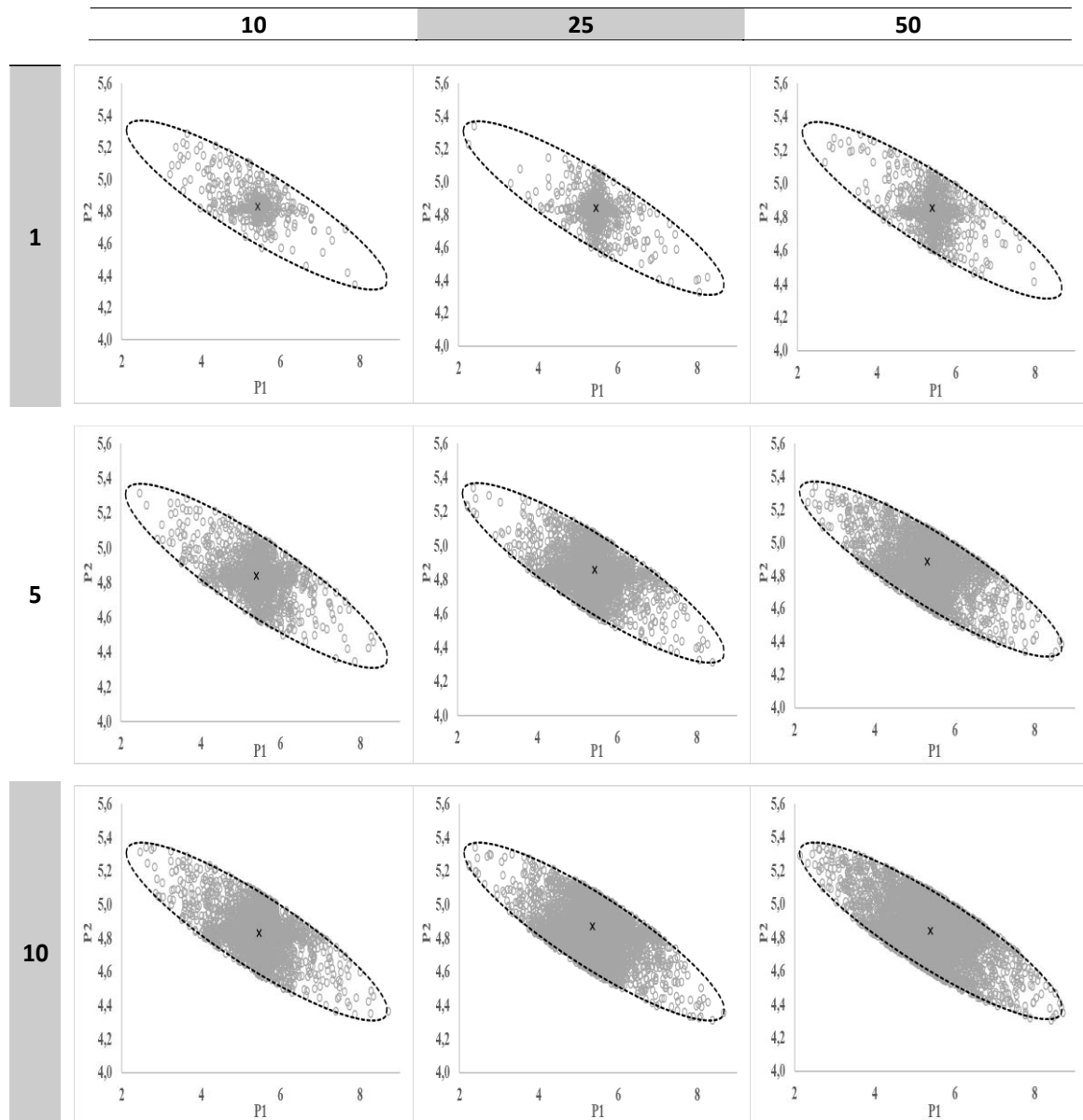
O valor do ponto de mínimo foi determinado através das abordagens conjuntas dos modelos PSO e Gauss-Newton e se situa nas coordenadas P1 igual a 5,4 e P2 igual a 4,84 e com valor da função objetivo no ponto ótimo igual a 20,8. Também foi gerada a região de confiança através da aproximação quadrática da função objetivo conforme a Equação (8), Onde  $NP$  é igual a 2,  $N-NP$  é igual a 8 e  $\alpha$  igual a 0,95.

#### 4.1.1 Enxame de Partículas

Os resultados apresentados nas Figuras (4-1), (4-2), (4-3) e (4-4) estão estruturados da seguinte maneira: a primeira coluna foi elaborada com os resultados do conjunto  $[Npar, Nint]$  igual a  $[10, 200]$ , a segunda coluna para os valores  $[25, 80]$  e a terceira coluna para os valores  $[50, 40]$ . A primeira linha é resultado de  $Nmin$  igual a 1, a segunda,  $Nmin$  igual a 5 e a terceira,  $Nmin$  igual a 10.

##### 4.1.1.1 1º Modelo – $[Wo, Wf] = [0,75, 0,75]$

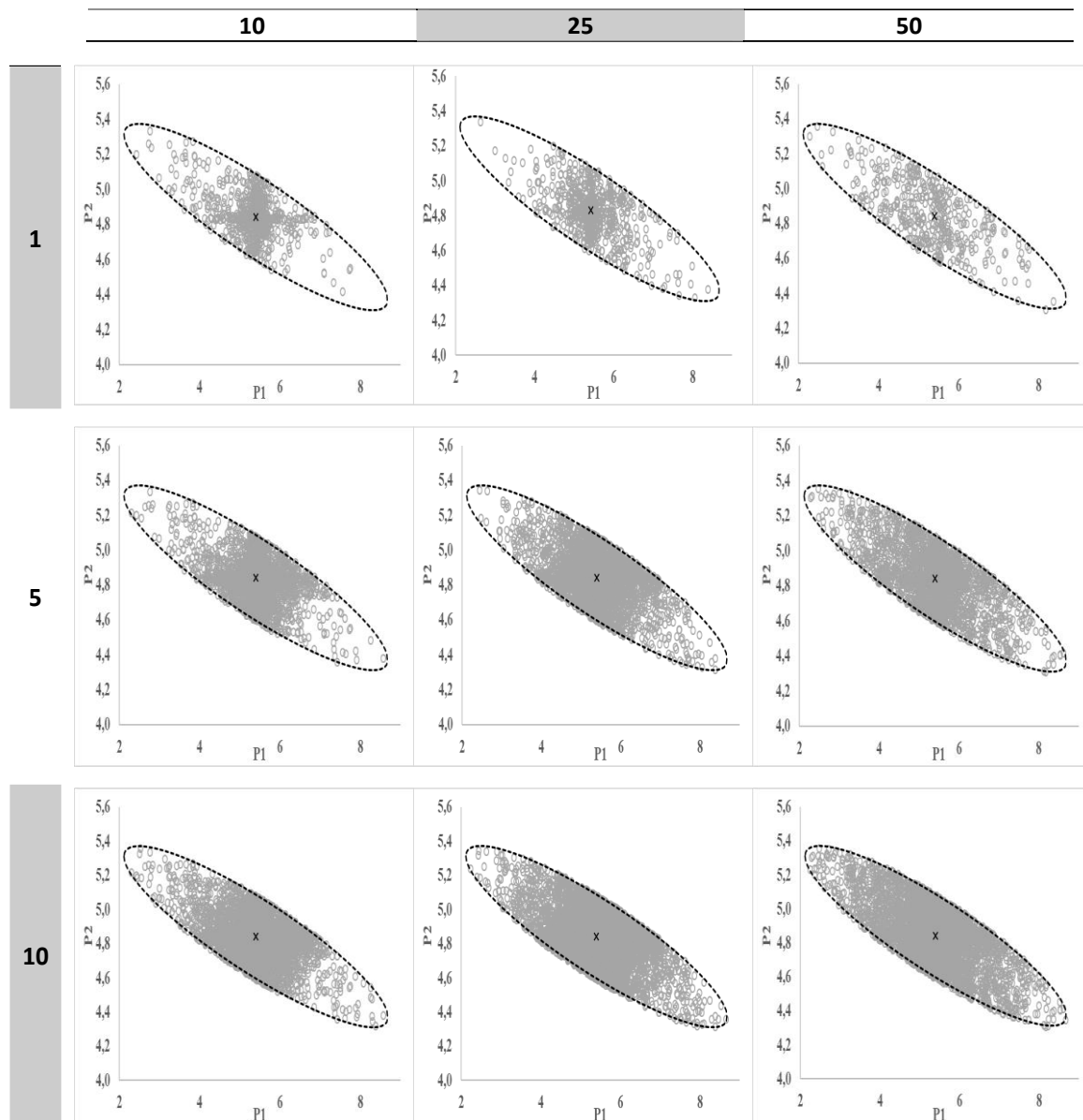
O aumento no número de partículas do enxame resulta no espalhamento das partículas ao longo da região de confiança, como se pode observar comparando nos gráficos da primeira linha da Figura (4.1). Isso se dá, pois há mais partículas no sistema inicial, assim há maior probabilidade de elas definirem mais pontos da região de confiança. Quando o número de minimizações do problema aumenta, observa-se a tendência dos pontos se espalharem pela região de confiança, visto que, haverá mais avaliações para preencher a região de confiança.



**Figura 4-1.** Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de  $W_o = 0,75$  e  $W_f = 0,75$ . Na horizontal  $Npar$  assume, respectivamente, os valores 10, 25 e 50 e na vertical  $Nmin$  assume os valores 1, 5 e 10.

4.1.1.2 2º Modelo –  $[Wo, Wf] = [0,75, 0,95]$ 

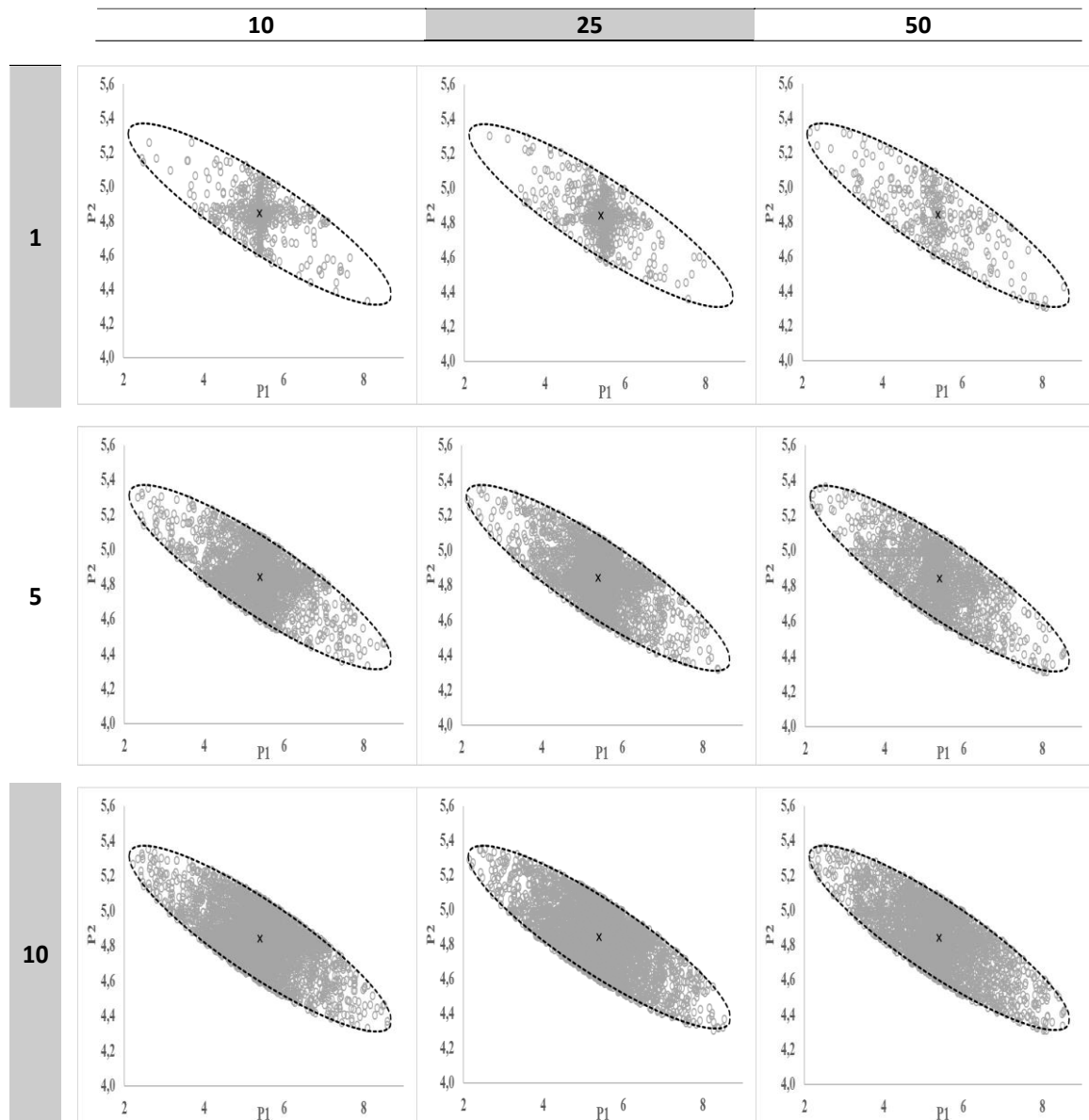
Quando comparado aos resultados da figura anterior com a Figura (4-2), percebe-se melhora na dispersão dos pontos devido ao aumento do valor de  $Wf$ . O sistema com  $Nmin$  igual a 5 já permite ótimo contorno da região de confiança. Nota-se, pela concentração de pontos perto dos mínimos nos gráficos da primeira linha da Figura (4-2) que o problema converge rapidamente ao ponto ótimo.



**Figura 4-2.** Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de  $Wo = 0,75$  e  $Wf = 0,95$ . Na horizontal  $Npar$  assume, respectivamente, os valores 10, 25 e 50 e na vertical  $Nmin$  assume os valores 1, 5 e 10.

#### 4.1.1.3 3º Modelo – $[Wo, Wf] = [0,95, 0,75]$

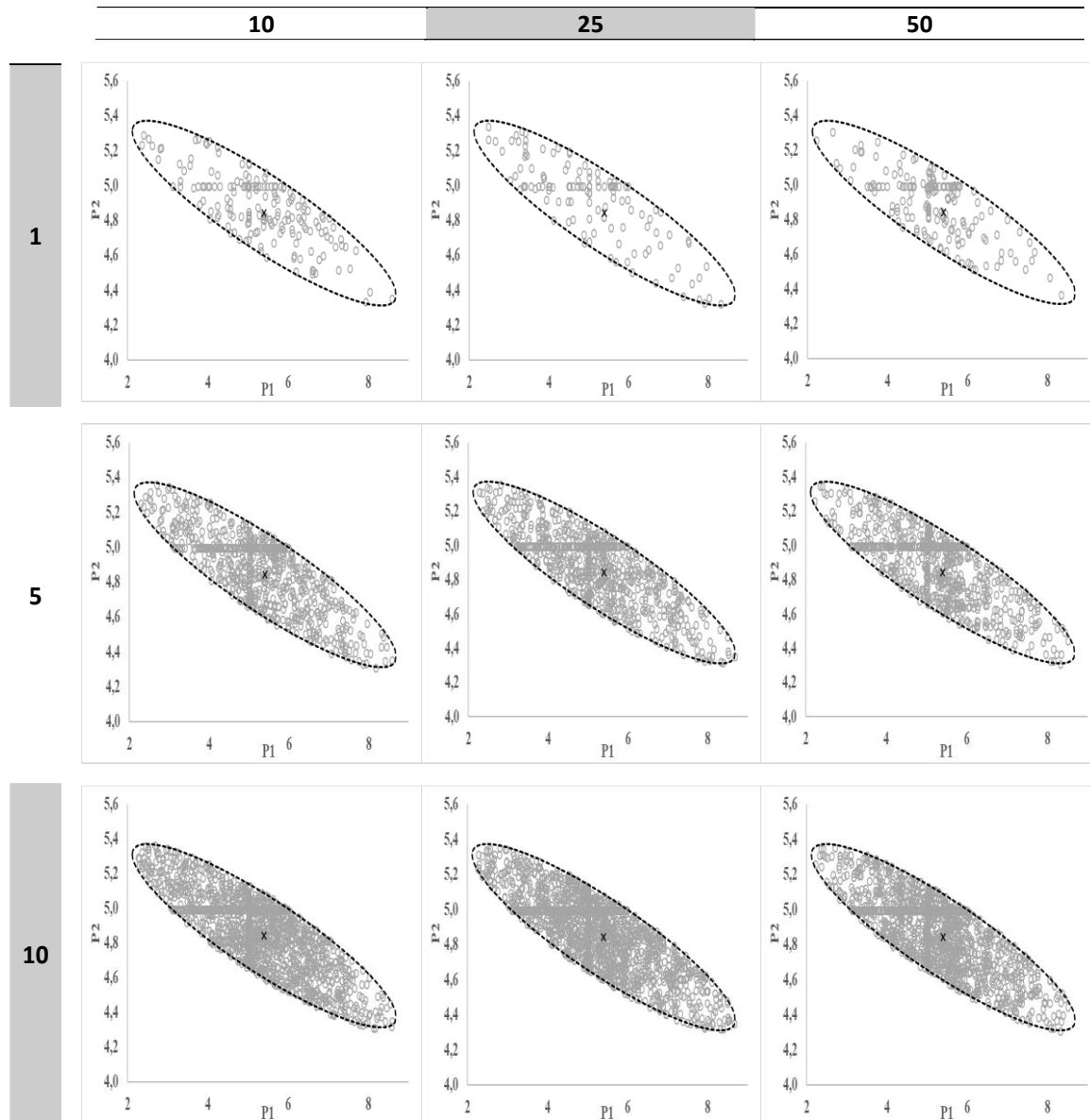
Nos resultados da Figura (4-3), percebe-se boa distribuição dos pontos ao longo da região de confiança para as situações com menos pontos totais. O resultado do gráfico do terceiro gráfico da primeira linha, com maiores números de partículas para 1 minimização, consegue representar quase que totalmente a região de confiança. Para os sistemas com maiores números de corridas, há boa dispersão dos pontos, seguida da concentração das partículas ao redor do ponto de mínimo.



**Figura 4-3.** Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de  $Wo = 0,95$  e  $Wf = 0,75$ . Na horizontal  $N_{par}$  assume, respectivamente, os valores 10, 25 e 50 e na vertical  $N_{min}$  assume os valores 1, 5 e 10.

#### 4.1.1.4 4º Modelo – $[W_o, W_f] = [0,95, 0,95]$

Os resultados dos gráficos da primeira linha da Figura (4-4) estão bem distribuídos ao longo da região de convergências, contudo, diferentemente dos resultados anteriores, não se concentram ao redor do ponto de mínimo. Os problemas com maior número de minimizações se distribuem melhor próximos ao ponto ótimo.



**Figura 4-4.** Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de  $W_o = 0,95$  e  $W_f = 0,95$ . Na horizontal  $N_{par}$  assume, respectivamente, os valores 10, 25 e 50 e na vertical  $N_{min}$  assume os valores 1, 5 e 10.

Comparando-se as quatro variações dos valores de peso de inércia, tem-se que a região de confiança foi melhor definida quando os valores dos pesos iniciais e finais são variados, como foi abordado no 2º e no 3º modelo. Como mencionado anteriormente, valores menores de peso de inércia fazem com que o problema convirja mais rapidamente ao mínimo, enquanto

que valores mais elevados fazem que haja maior dispersão dos pontos ao longo da região de confiança. Assim, tem-se que a abordagem mais apropriada consiste em misturar as duas metodologias e, embora não haja diferença significativa, iniciar com um valor alto de peso de inércia e o reduzir gera maior dispersão ao longo da região. A Tabela (4.1) apresenta o tempo necessário para o algoritmo definir a região de confiança; como se pode observar, em todas as abordagens o PSO convergiu rapidamente.

**Tabela 4-1.** Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo PSO para o modelo linear com as abordagens ( $W_o - W_f$ ) iguais a: a) 0,75 - 0,75; b) 0,75 - 0,95; c) 0,95 - 0,75; d) 0,95 - 0,95.

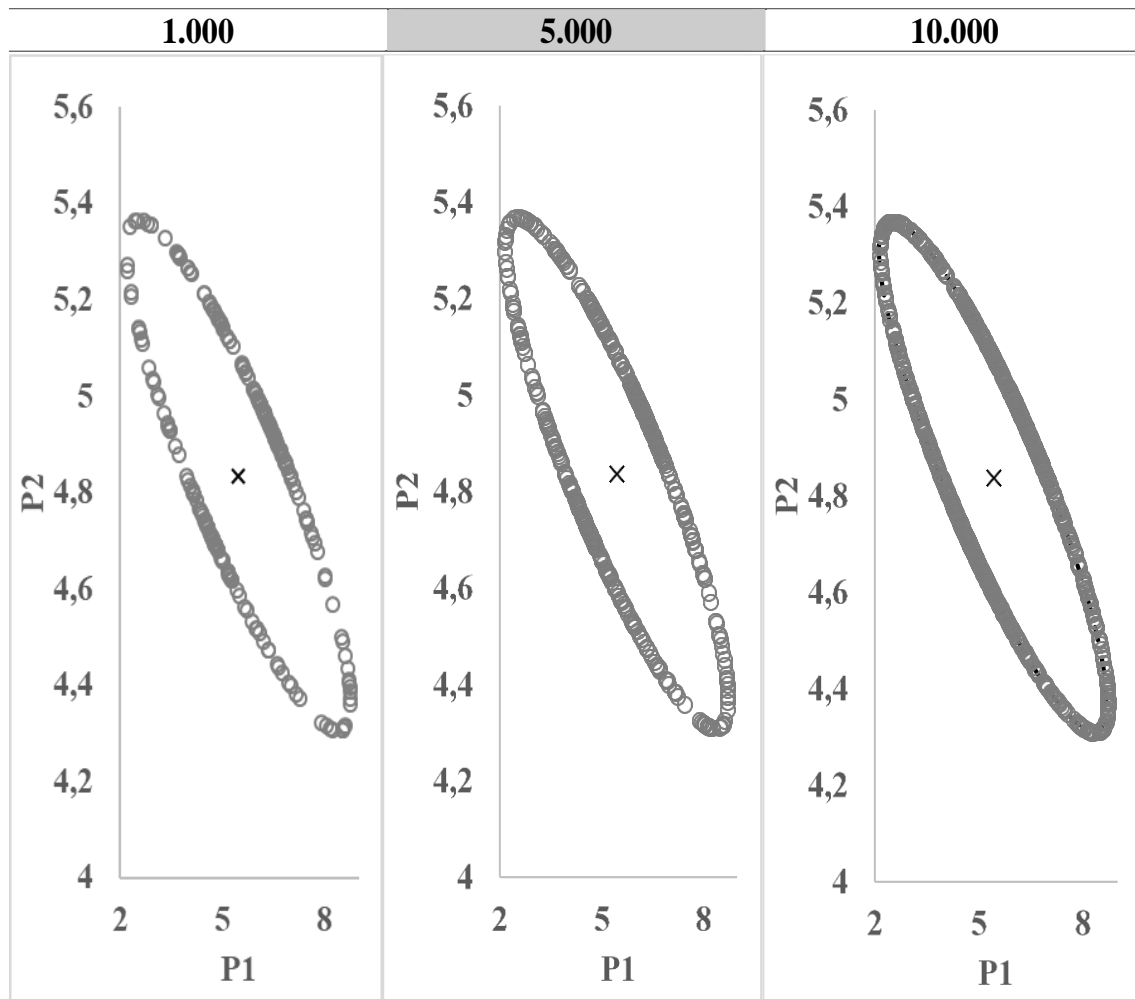
a)		Partículas			b)		Partículas		
		10	25	50			10	25	50
Minimizacões	1	1,3	0,9	1,3	Minimizacões	1	1,1	1,0	1,2
	5	0,8	1,4	1,4		5	1,5	1,4	1,4
	10	1,4	1,8	1,6		10	1,4	1,8	1,8
c)		Partículas			d)		Partículas		
		10	25	50			10	25	50
Minimizacões	1	1,2	1,2	1,2	Minimizacões	1	1,1	1,0	1,2
	5	1,5	1,3	1,4		5	0,9	1,2	1,3
	10	1,4	1,6	1,8		10	1,4	1,4	1,4

#### 4.1.2 Lobry – Flandrois

A determinação da região de confiança utilizando o método proposto por LOBRY; ROSSO; FLANDROIS, (1991), foi estabelecida através da variação do número de pontos definidos no início do problema; foram realizados testes para sistemas com 1.000, 5.000 e 10.000 pontos. A partir do ponto ótimo [5,4; 4,84] encontrado pelas minimizações efetuadas pelo PSO e pelo método Gauss-Newton, pode-se iniciar a rotina do algoritmo.

Pode observar na Figura (4-5) abaixo que o resultado do problema com 1.000 pontos define muito bem o contorno da região de confiança, percebendo-se claramente o contorno elíptico da região de confiança. Quando o número de pontos utilizados é aumentado, há melhora na estimação do contorno da região, estando quase que a totalidade preenchida quando se utiliza o sistema com 5.000 pontos. O sistema com 10.000 pontos define totalmente os limites da região de confiança.





**Figura 4-5.** Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo de Lobry-Flandrois para sistemas com 1.000, 5.000 e 10.000 pontos respectivamente.

A análise do tempo de convergência do algoritmo, Tabela (4-2), aponta que, embora haja um aumento de tempo quando o número de pontos é aumentado, esse aumento não foi significativo.

**Tabela 4-2.** Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo Lobry-Flandrois para o modelo linear.

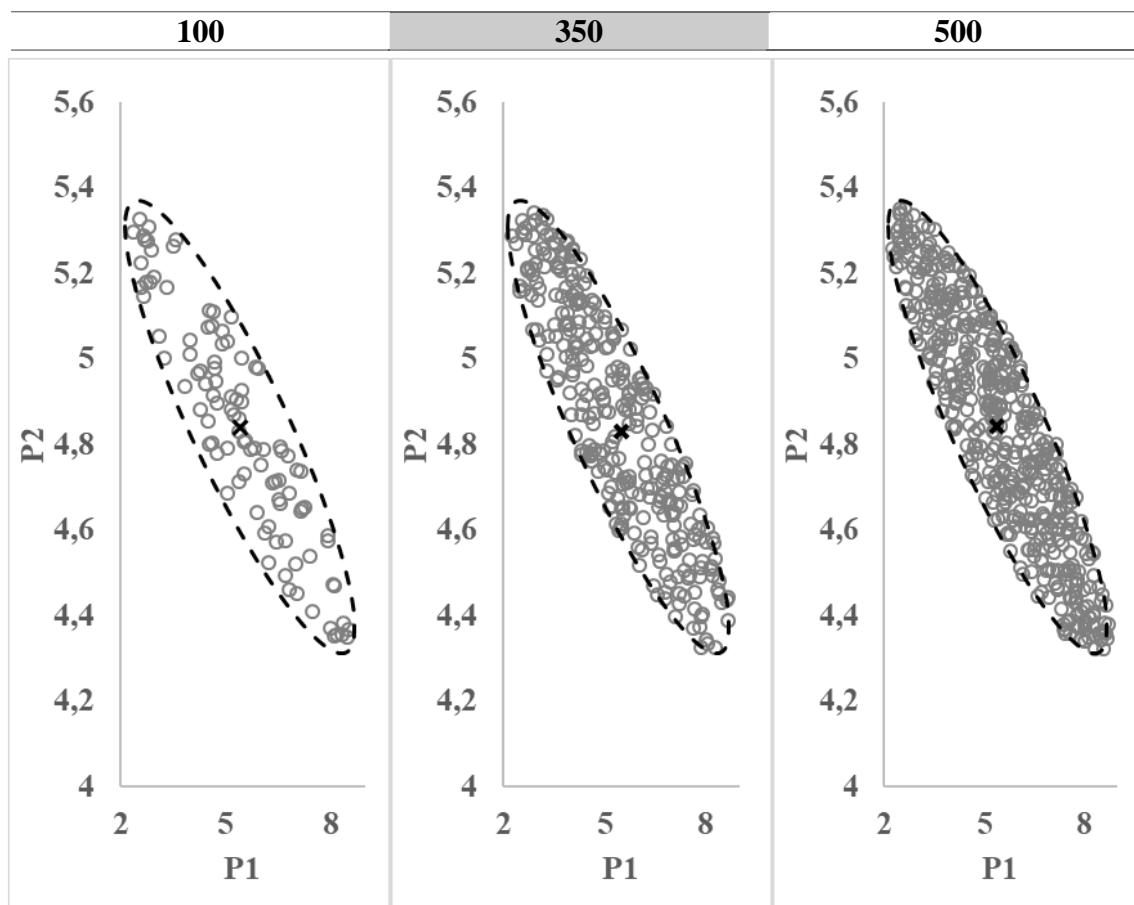
Pontos	1.000	5.000	10.000
Tempo	1,0	1,0	1,4

#### 4.1.3 UCPR

O algoritmo UCPR, proposto por KLEPPER; HENDRIX, (1994) foi simulado para diferentes valores de pontos iniciais do problema. Foram utilizados 100, 350 e 500 pontos nas

estimações. Utilizando em conjunto os métodos de minimização do PSO e Gauss-Newton, determinou-se o ponto ótimo, [5,4; 4,84].

O primeiro gráfico da Figura (4-6) abaixo, demonstra os resultados para o problema com 100 pontos, o qual permite uma boa delimitação da região de confiança, estando bem distribuída quando comparada com o limite obtido pelo método da aproximação quadrática. O sistema com 350 pontos define otimamente a região de confiança, contudo há o revés de que o problema gasta mais tempo para convergir, diferentemente dos demais situações observadas anteriormente. O problema com 500 pontos preenche completamente a região de confiança, porém o tempo de convergência é muito significativo.



**Figura 4-6.** Regiões de confiança do modelo linear utilizando o algoritmo de UCPR para sistemas com 100, 350 e 500 pontos respectivamente.

O tempo de convergência do algoritmo, Tabela (4-3), aumenta significativamente conforme o número de pontos do sistema aumenta.

**Tabela 4-3.** Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo UCPR para o modelo linear.

<b>Pontos</b>	<b>100</b>	<b>350</b>	<b>500</b>
<b>Tempo</b>	2,4	163,6	685,6

Os três métodos utilizados para determinar a região de confiança do modelo linear geram ótimos resultados quando se utilizam vários pontos iniciais. O método do Enxame de Partículas é o mais versátil, visto que se pode priorizar o que se deseja obter, o ponto de mínimo ou a região através do ajuste dos valores do parâmetro de inércia. O método de Lobry-Flandrois foi que obteve melhores resultados para o modelo linear, já que foi capaz de predizer o contorno da região de confiança com poucos pontos, sem gasto demasiado de tempo, como foi observado para modelo UCPR com número elevado e pontos.

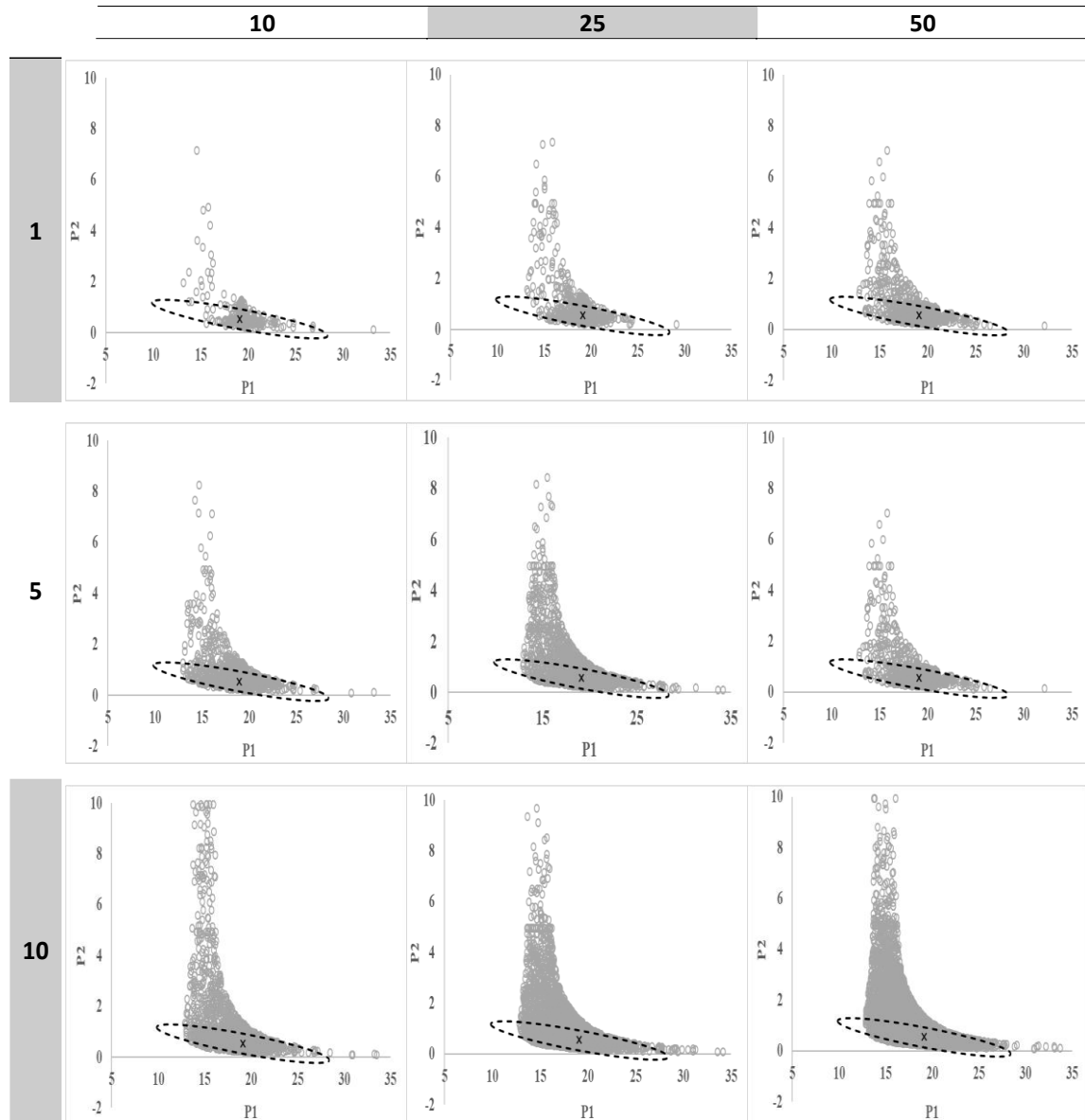
## 4.2 Modelo não-linear

Assim, como para o modelo linear, o ponto ótimo foi determinado através dos métodos de minimização conjuntos do PSO e de Gauss-Newton, o qual foi se encontra nas coordenadas [19,14; 0,53] e a função objetivo no ponto ótimo é igual a 26,00. Também foi gerada a aproximação quadrática da região de confiança (exceto na avaliação do modelo Lobry-Flandrois) para compara-la com as regiões obtidas com os algoritmos heurísticos conforme a Equação (8), Onde  $NP$  é igual a 2,  $N-NP$  é igual a 4 e  $\alpha$  igual a 0,95.

### 4.2.1 Enxame de Partículas

#### 4.2.1.1 1º Modelo – [Wo, Wf] = [0,75, 0,75]

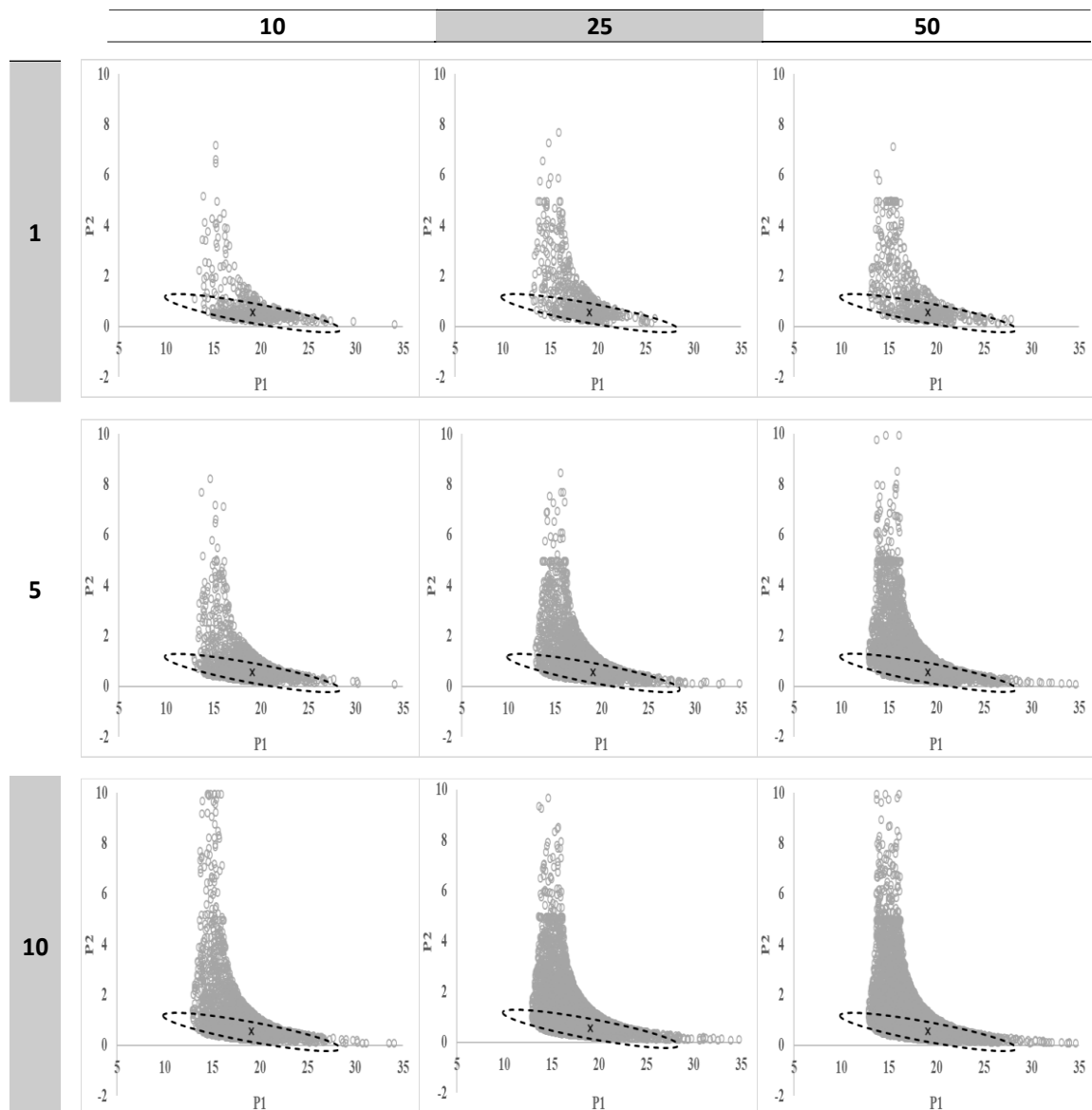
O resultado do primeiro gráfico da Figura (4-7), para dez partículas e uma minimização, não consegue descrever bem a região de confiança, sendo que as partículas se concentram próximas ao ponto de mínimo. O aumento, tanto no número de pontos como no número de minimizações, permite que haja melhor definição da região de confiança, já que haverá maior números de pontos distribuídos ao longo da região.



**Figura 4-7.** Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de  $Wo = 0,75$  e  $Wf = 0,75$ . Na horizontal  $Npar$  assume, respectivamente, os valores 10, 25 e 50 e na vertical  $Nmin$  assume os valores 1, 5 e 10.

#### 4.2.1.2 2º Modelo – $[Wo, Wf] = [0,75, 0,95]$

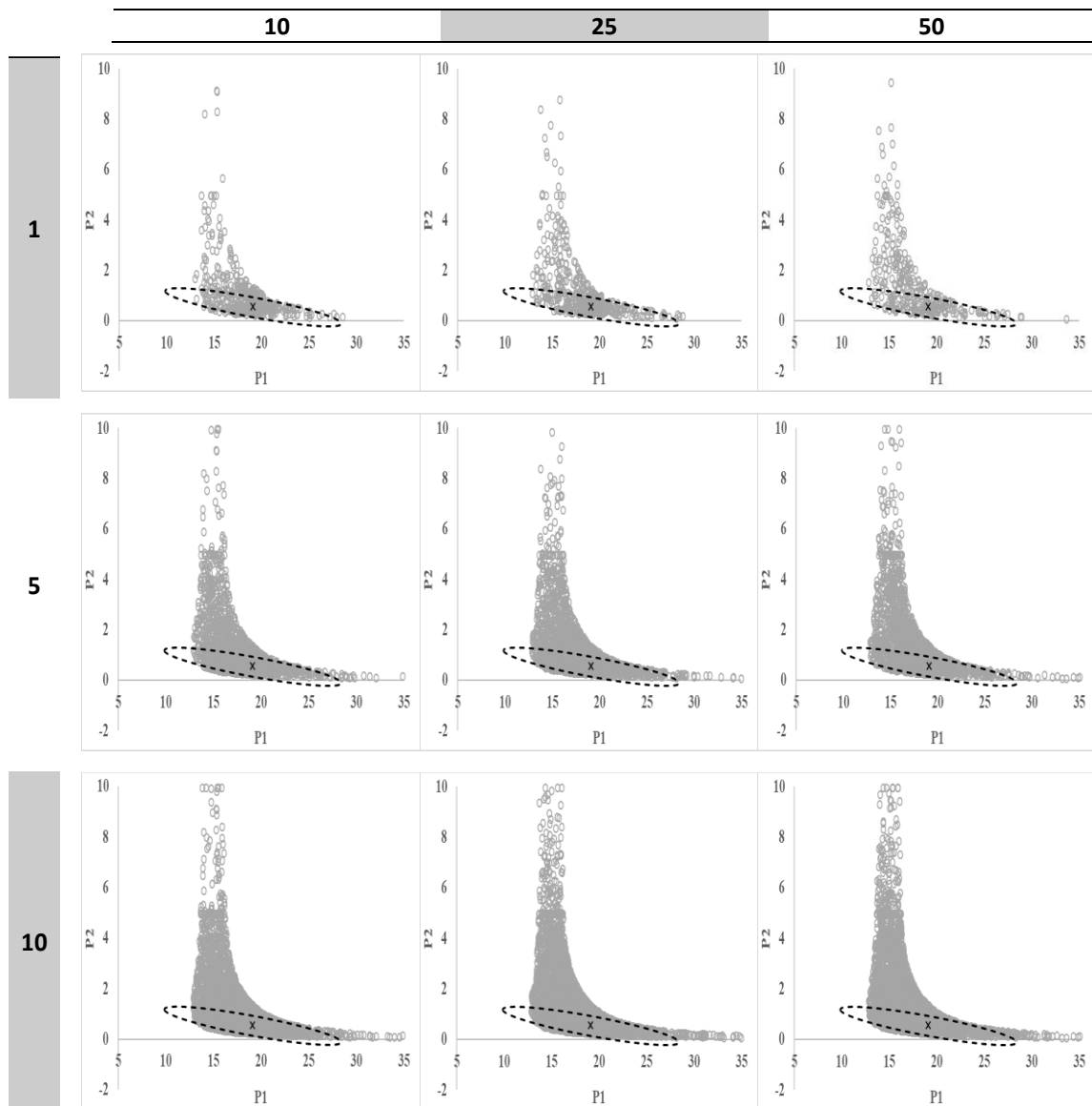
Comparando com os resultados da figura anterior, assim como observado pelos resultados do modelo linear, nos gráficos da Figura (4-8), tem-se melhor dispersão dos pontos com o aumento do parâmetro  $Wf$ . O primeiro gráfico da primeira linha da Figura (4-8) já permite uma ideia do contorno da região de confiança. Assim como nos resultados da figura anterior e nos apresentados para o modelo linear, aumentando-se o número de partículas do enxame, bem como o número de minimizações do modelo, tem-se melhor definição da região de confiança.



**Figura 4-8.** Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de  $Wo = 0,75$  e  $Wf = 0,95$ . Na horizontal  $Npar$  assume, respectivamente, os valores 10, 25 e 50 e na vertical  $Nmin$  assume os valores 1, 5 e 10.

#### 4.2.1.3 3º Modelo – $[Wo, Wf] = [0,95, 0,75]$

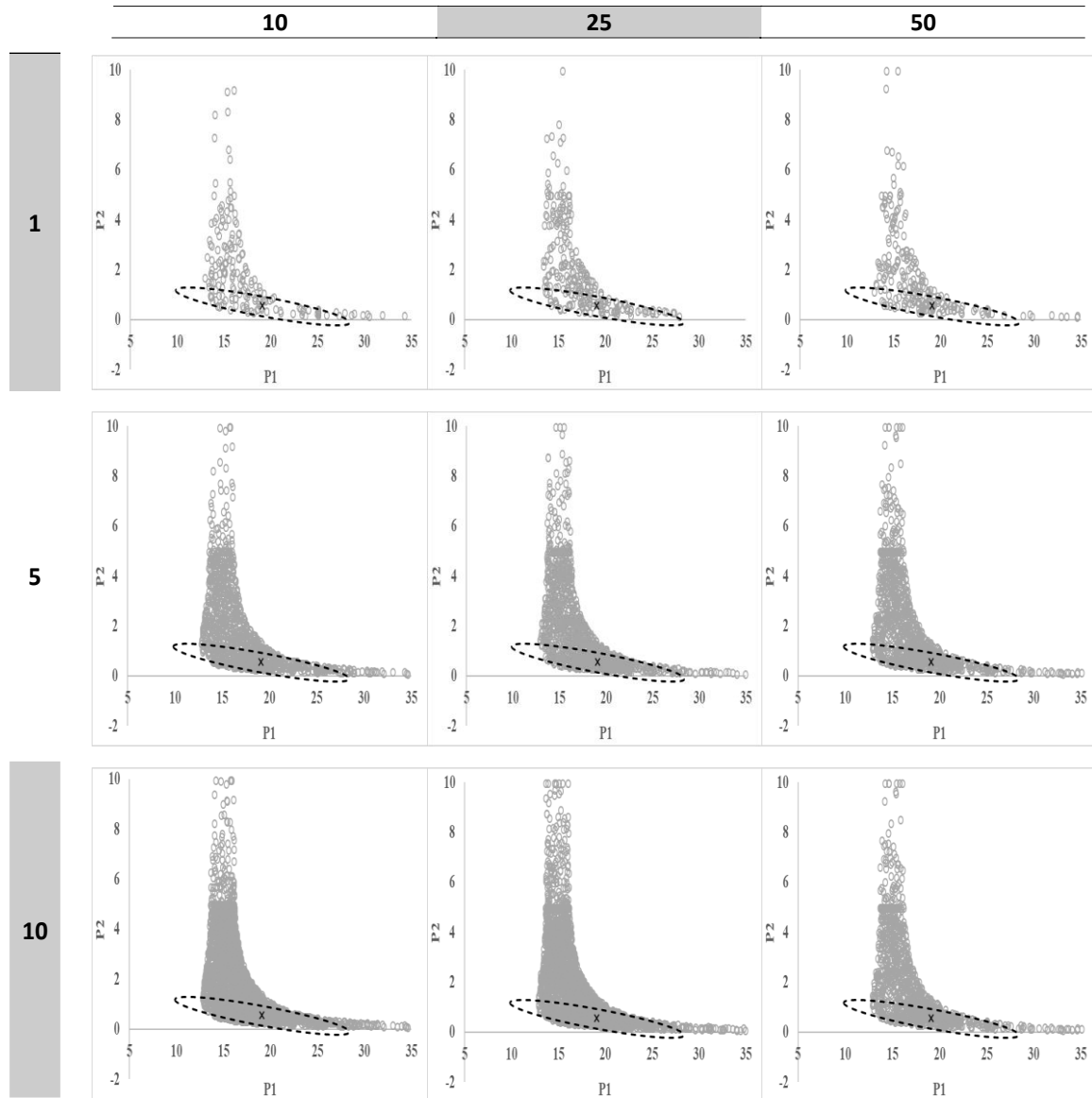
Pode-se observar na Figura (4-9) que nos casos com uma minimização houve aumento na dispersão dos pontos, visto que a região de confiança está melhor definida. O aumento do número do número de partículas e do número de minimizações melhora a definição da região, como pode ser observado nos demais resultados.



**Figura 4-9.** Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de  $Wo = 0,95$  e  $Wf = 0,75$ . Na horizontal  $N_{par}$  assume, respectivamente, os valores 10, 25 e 50 e na vertical  $N_{min}$  assume os valores 1, 5 e 10.

#### 4.2.1.4 4º Modelo – $[W_o, W_f] = [0,95, 0,95]$

Observando a Figura (4-10), infere-se que há melhor distribuição dos pontos, para os casos com uma minimização, a região de confiança está melhor definida para o sistema com menor número de partículas do que as obtidas nas Figuras (4-7), (4-8) e (4-9).



**Figura 4-10.** Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo do Enxame de Partículas para valores de  $W_o = 0,95$  e  $W_f = 0,95$ . Na horizontal  $N_{par}$  assume, respectivamente, os valores 10, 25 e 50 e na vertical  $N_{min}$  assume os valores 1, 5 e 10.

Assim como foi observado para modelo linear, tem-se melhor definição da região de confiança quando os valores dos pesos iniciais e finais são variados. Os resultados do modelo 1 mostram que são necessárias várias partículas e mais de uma minimização para definir a região de confiança, enquanto, no modelo 4, não houve convergência das partículas para mínimo da função com apenas uma minimização. Portanto, tem-se que os parâmetros ajustados

para os modelos 2 e 3 são as melhores opções. Também é possível observar a diferença entre a região de confiança obtida pela aproximação quadrática com a gerada pelo PSO, demonstrando que a aproximação quadrática não é a melhor abordagem quando um modelo é não-linear.

A análise dos tempos de convergência, Tabela (4-4), indica que o tempo necessário para o algoritmo concluir a região de confiança é pequeno, da mesma forma que foi observado para o modelo linear

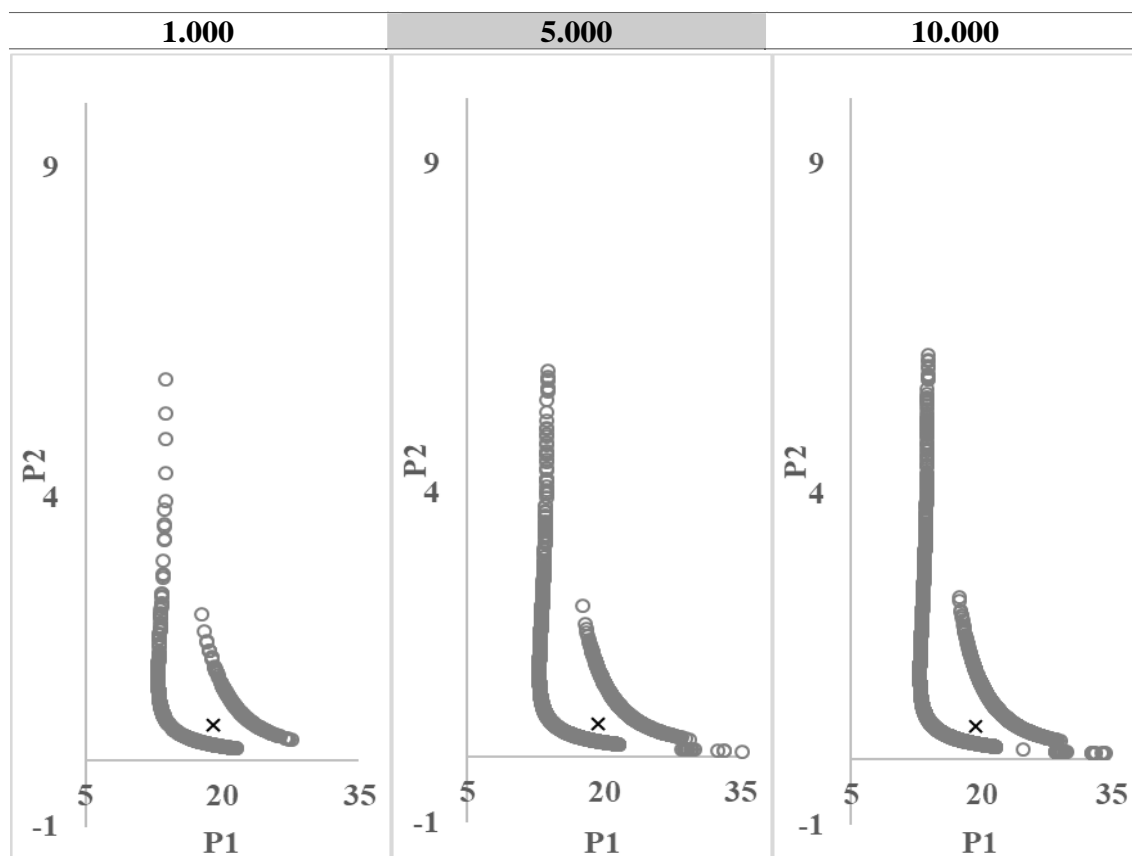
**Tabela 4-4.** Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo PSO para o modelo não-linear com as abordagens ( $W_o - W_f$ ) iguais a: a) 0,75 - 0,75; b) 0,75 - 0,95; c) 0,95 - 0,75; d) 0,95 - 0,95.

a)		Partículas			b)		Partículas		
		10	25	50			10	25	50
Minimizacões	1	0,5	1,0	0,9	Minimizacões	1	0,9	1,1	1,7
	5	0,9	1,3	1,0		5	0,8	1,3	2,2
	10	2,0	2,0	1,2		10	1,4	0,9	1,3
c)		Partículas			d)		Partículas		
		10	25	50			10	25	50
Minimizacões	1	0,7	1,0	1,5	Minimizacões	1	1,3	1,4	1,4
	5	1,3	1,2	1,4		5	1,1	1,6	2,1
	10	0,8	1,0	1,4		10	1,3	1,3	1,4

#### 4.2.2 Lobry – Flandrois

O método de Lobry aplicado ao modelo não-linear apresentou dificuldades em determinar a região de confiança, diferentemente dos resultados apresentados para o modelo linear. Pode-se observar na Figura (4-11) que o algoritmo só consegue descrever a parte da região que está próxima ao ponto de mínimo do modelo. O método não conseguiu descrever a porção superior da região de confiança; mesmo com o aumento do número de pontos utilizados, só conseguiu-se melhorar os pontos próximos ao mínimo.





**Figura 4-11.** Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo de Lobry-Flandrois para sistemas com 1.000, 5.000 e 10.000 pontos respectivamente.

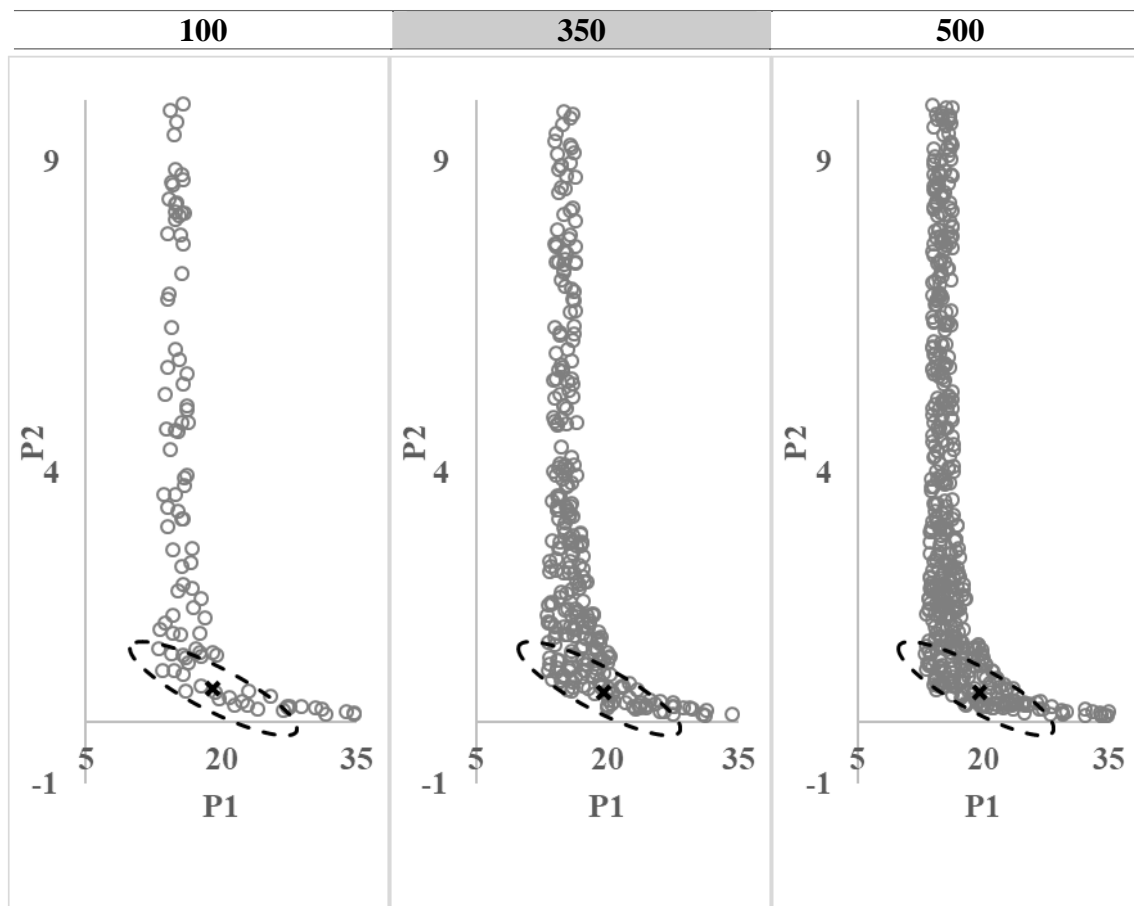
A Tabela (4-5) demonstra que o tempo para concluir as avaliações não foi significativo, embora o aumento no número de pontos resulte no aumento do tempo, o algoritmo, para a situação avaliada, continua rápido.

**Tabela 4-5.** Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo Lobry-Flandrois para o modelo não-linear.

Pontos	1.000	5.000	10.000
Tempo	1,0	1,8	2,2

#### 4.2.3 UCPR

Observando a Figura (4-12), pode-se ter uma boa ideia do contorno da região de confiança quando se tem o sistema com 100 pontos, que consegue definir os extremos da região, bem como a área em que há curvatura. Aumentando-se o número de pontos iniciais do sistema, tem-se melhora do contorno da região, contudo o aumento do número de pontos resulta no aumento do tempo utilizado para definir a região. Quando comparado com o modelo linear, percebe-se que o tempo gasto é significativamente menor.



**Figura 4-12.** Regiões de confiança do modelo não-linear utilizando o algoritmo de UCPR para sistemas com 100, 350 e 500 pontos respectivamente.

O tempo para convergir, assim como foi observado para o modelo linear, aumenta significativamente com o aumento do número de pontos do sistema, conforme demonstra a Tabela (4-6).

**Tabela 4-6.** Tempo, em segundos, de convergência de cada avaliação das regiões de confiança com o algoritmo UCPR para o modelo não-linear.

Pontos	100	350	500
Tempo	2,1	83,7	317,3

O modelo proposto por Lobry não conseguiu delimitar toda a região de confiança, diferentemente do seu desempenho para no modelo linear. O modelo do Enxame de Partículas e o UCPR tiveram sucesso em definir a região de confiança, sendo que ao aumentar o número de partículas/pontos do conjunto inicial, houve melhora na definição da região. Como mencionado anteriormente, o algoritmo UCPR necessita de um tempo considerável para convergir completamente, enquanto o Enxame de Partículas converge mais rapidamente; além

disso, o Enxame de Partículas é mais versátil, visto que se pode modificar o caráter de busca do algoritmo através dos valores dos pesos de inércia.

## 5 Conclusões e Trabalhos futuros

Nesse trabalho, foi avaliada a capacidade de três algoritmos em predizer a região de confiança de dois modelos, um linear e outro não-linear. Os três algoritmos avaliados foram o Enxame de Partículas, o método de Lobry-Flandrois e o UCPR, os quais são métodos heurísticos e computacionalmente intensivos. Foi observado o efeito que o número de pontos provocava na definição da região, e, para o Enxame de Partículas, também foi verificado o efeito que a mudança dos valores de peso de inércia ocasionava na região.

As avaliações do Enxame de Partícula, tanto para o modelo linear como para o modelo não-linear, indicaram que, para valores menores de peso de inércia, o problema tende a convergir rapidamente para o ponto de mínimo, enquanto que, para valores mais elevados de peso de inércia, o problema possui maior característica exploratória, ou seja, há maior dispersão dos pontos, definindo melhor a região de confiança. O aumento do número do número de partículas, bem como do número de minimizações, gera regiões de confiança com melhor definição, pois existirão mais partículas distribuídas ao longo da região. Portanto, observando os resultados, a melhor abordagem para o problema é iniciar com um peso de inércia elevado e diminuí-lo com o avanço da simulação.

O algoritmo de Lobry-Flandrois gerou ótimos resultados para o modelo linear, sendo capaz de predizer o contorno da região de confiança com o menor número de pontos utilizados. Quando o número de pontos é aumento, observa-se a melhora no contorno da região, já que há mais pontos distribuídos ao longo dela. O teste do mesmo algoritmo para o modelo não-linear não gerou resultados adequados, pois só se foi capaz de definir a região próxima ao ponto de mínimo do modelo. Devido à natureza da região de confiança do modelo não-linear, definir a região em pontos afastados do mínimo é difícil, pois o ângulo entre os pontos da região é pequeno, resultando em problemas no cálculo das iterações.

O algoritmo UCPR conseguiu gerar a região de confiança para os dois modelos com um número baixo de pontos, 300. Contudo, o tempo da estimação se mostrou bastante significativo quando comparado com os outros dois algoritmos testados no trabalho. Assim, tem-se que, para o modelo linear, o algoritmo de Lobry-Flandrois foi o que melhor definiu a região de confiança, enquanto, para o modelo não-linear, o melhor algoritmo foi o Enxame de Partículas.

Assim, após as conclusões obtidas com os resultados deste trabalho, sugere-se que sejam testados modelos com maior número de parâmetros, assim como testar outras variações

dos modelos, como o Enxame de Partícula e o UCPR, que possuem várias adaptações na literatura.

## Referências

- AGUIAR, A. A. **Análise de Convergência Local do Método de Gauss-Newton sob condição Lipschitz**. 2012. Universidade Federal de Goiás, Goiânia, 2012.
- ALMEIDA, A. M.; CASTEL-BRANCO, M. M.; FALCÃO, A. C. Linear regression for calibration lines revisited: Weighting schemes for bioanalytical methods. **Journal of Chromatography B: Analytical Technologies in the Biomedical and Life Sciences**, [s. l.], v. 774, n. 2, p. 215–222, 2002.
- BATES, D. M.; WATTS, D. G. **Nonlinear Regression Analysis and Its Applications**. [s.l: s.n.]. v. 85
- BECK, J. V.; WOODBURY, K. Introductory Article-Inverse Problems and Parameter Estimation: Integration of Measurements and Analysis. **Science Technology**, [s. l.], v. 9, p. 839–847, 1998.
- BIEGLER, L. T. **Optimization Algorithms for Parameter Estimation and Data Reconciliation**, 2003. Disponível em: <[http://dynopt.cheme.cmu.edu/content/06606/Parest\\_notes.pdf](http://dynopt.cheme.cmu.edu/content/06606/Parest_notes.pdf)>
- BITTENCOURT, G. F. **Estimação de parâmetros do modelo sólido padrão para o material EPH**. 2013. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2013.
- CHEN, P.-H. **Particle swarm optimization for power dispatch with pumped hydro**. Taiwan. Disponível em: <[http://www.intechopen.com/books/particle\\_swarm\\_optimization#book](http://www.intechopen.com/books/particle_swarm_optimization#book)>.
- FOGLIATTO, F. **Pesquisa Operacional**, 2011. Disponível em: <[http://www.producao.ufrgs.br/arquivos/disciplinas/382\\_po\\_apostila\\_completa\\_mais\\_livro.pdf](http://www.producao.ufrgs.br/arquivos/disciplinas/382_po_apostila_completa_mais_livro.pdf)>
- HAAS, P. **Estimadores de Estados Robustos Baseados em Implementações Ortogonais de Região de Confiança**. 2008. Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2008.
- HIMMELBLAU, D. M. **Applied Nonlinear Programming**. 1972. McGraw-Hill, New York, 1972.
- KESSENTINI, S.; BARCHIESI, D. Particle Swarm Optimization with Adaptive Inertia Weight. **International Journal of Machine Learning and Computing**, [s. l.], v. 5, n. 5, p. 368–373, 2015. Disponível em: <<http://www.ijmlc.org/index.php?m=content&c=index&a=show&catid=59&id=603>>
- KLEPPER, O.; HENDRIX, E. M. T. A COMPARISON OF ALGORITHMS FOR GLOBAL CHARACTERIZATION OF CONFIDENCE REGIONS FOR NONLINEAR MODELS S. **Environmental Toxicology and Chemistry**, [s. l.], v. 13, n. 12, p. 1887–1899, 1994.
- KLEPPER, O.; HENDRIX, E. M. T. On Uniform Covering , Adaptive Random Search and Raspberries. **Journal of Global Optimization**, [s. l.], v. 18, n. 1990, p. 143–163, 2000.
- KODURU, P.; WELCH, S. M.; DAS, S. A particle swarm optimization approach for estimating parameter confidence regions. **Proceedings of the 9th annual conference on Genetic and evolutionary computation - GECCO '07**, [s. l.], p. 70, 2007. Disponível em:

<<http://portal.acm.org/citation.cfm?doid=1276958.1276969>>

LOBRY, J.; ROSSO, L.; FLANDROIS, J. A fortran subroutine for the determination of parameter confidence limits in non-linear models. **Binary**, [s. l.], v. 3, p. 86–93, 1991.

MEISTER, D. **Aplicação Do Método Dos Mínimos Quadrados Na Estimação De Parâmetros Do Modelo De Um Transformador**. 2006. Universidade de Brasília, Brasília, 2006.

MONTEIRO, A. J. T. **Otimização não linear de mínimos quadrados**. 2013. Universidade de Aveiro, Aveiro, 2013.

NORONHA, F. B. et al. **Um Pacote Computacional para Estimação de Parâmetros e Projeto de Experimentos**, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 1993.

OSIDELE, O. O. **Reachable Futures, Structural Change, and the Practical Credibility of Environmental Simulation Models**. 2001. University of Georgia, Athens, United States of America, 2001.

ÖZSOY, V. S.; ÖRKÇÜ, H. H. Estimating the parameters of nonlinear regression models through particle swarm optimization. **Gazi University Journal of Science**, [s. l.], v. 29, n. 1, p. 187–199, 2016.

PRETTO, T. R. **Estimação dos parâmetros cinéticos da reação de desidrogenação catalítica de cicloexano**. 2017. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2017.

SCHWAAB, M. **Avaliação de algoritmos heurísticos de otimização em problemas de estimação de parâmetros**. Dissertação de Mestrado, 2005. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2005.

SHI, Y.; EBERHART, R. A modified particle swarm optimizer. **1998 IEEE International Conference on Evolutionary Computation Proceedings**, [s. l.], p. 69–73, 1998. Disponível em: <<http://ieeexplore.ieee.org/document/699146/>>

SILVA, C. K. F. **Estimação de Parâmetros de Secagem de Alimentos- Formulação de Luikov e uso da Transformada Integral Generalizada**. 2010. Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2010.

TORRES, A. J. R. **Estudo comparativo de métodos numéricos para solução das equações da elasticidade em problemas de otimização topológica**. 2017. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2017.

TRELEA, I. C. The particle swarm optimization algorithm: Convergence analysis and parameter selection. **Information Processing Letters**, [s. l.], v. 85, n. 6, p. 317–325, 2003.

VAZ, R. G.; BECK, V. C. INTRODUÇÃO AO MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS PONDERADOS. In: 21º CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA 2005, Pelotas. **Anais...** Pelotas