

ANÁLISE INVERSA VIA MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO E ALGORITMOS GENÉTICOS EM SISTEMAS DE PROTEÇÃO CATÓDICA

Sérgio Leal da Costa Júnior

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil.

Orientador(es): José Antônio Fontes Santiago

Rio de Janeiro Setembro de 2008

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

ANÁLISE INVERSA VIA MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO E ALGORITMO GENÉTICO EM SISTEMAS DE PROTEÇÃO CATÓDICA

Sérgio Leal da Costa Júnior

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:

Prof. José Antônio Fontes Santiago, D.Sc.

Prof. José Cláudio de Faria Telles, Ph.D.

Prof. Luiz Alkimin de Lacerda, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL SETEMBRO DE 2008 Costa Júnior, Sérgio Leal da

Análise Inversa Via Método dos Elementos de Contorno e Algoritmo Genético em Sistemas de Proteção Catódica/ Sérgio Leal da Costa Júnior. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2008.

IX, 135 p.; 29,7 cm.

Orientador: José Antônio Fontes Santiago

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Civil, 2008.

Referências Bibliográficas: p. 133-135.

 Análise Inversa. 2. Método dos Elementos de Contorno. 3. Algoritmos Genéticos. 4. Proteção Catódica.
 I. Santiago, Jose Antônio Fontes. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, programa de Engenharia Civil. III.Título

Esta dissertação é dedicada aos meus pais que me mostraram a importância do estudo para a realização dos meus sonhos.

AGRADECIMENTOS

Ao *Prof. José Antônio Fontes Santiago* pela amizade, incentivo e dedicação incondicionais que não me deixou esmorecer fazendo sempre com que a luz no fim do túnel não se apagasse. Ao *Prof. José Cláudio de Faria Telles* pela amizade e presteza em esclarecer dúvidas e questionamentos ao longo do presente estudo. Ao *Prof. Luiz Alkimin de Lacerda*, por ter aceito o convite para integrar a banca examinadora.

À *SUPORTE CONSULTORIA E PROJETOS LTDA.*, ao *BUREAU VERITAS / TECNITAS* e aos amigos com que trabalhei e trabalho, que me deram condições de desenvolver meu Mestrado sempre me incentivando e nunca me deixando desistir.

Aos meus pais *Sérgio* e *Beth* que me ensinaram a dar valor ao estudo como forma de alcançar os meus objetivos na vida, como alcançaram os deles. Pela incessante luta comigo e com meus irmãos para que nos tornássemos pessoas do bem, homens de caráter reto e dar valor para as nossas conquistas por menores que fossem.

Ao meu primo e padrinho *Jorge Roberto Abrahão Hijjar* que sempre me incentivou e me guiou ao longo da minha jornada profissional, com a amizade e carinho incondicionais.

À minha irmã e também engenheira, *Isabella*, companheira incansável nas jornadas ao Fundão desde a graduação e meu irmão e futuro advogado *Guilherme* que de uma forma ou de outra, sempre me estimularam a chegar ao fim deste presente estudo.

À COPPE, especialmente à Área de Estruturas, e todos os professores e funcionários, que também contribuiram para a realização deste trabalho.

Finalmente, agradeço a *Deus* por mais esta oportunidade e por sempre iluminar meus caminhos.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.).

ANÁLISE INVERSA VIA MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO E ALGORITMO GENÉTICO EM SISTEMAS DE PROTEÇÃO CATÓDICA

Sérgio Leal da Costa Júnior

Setembro/2008

Orientador: José Antônio Fontes Santiago

Programa: Engenharia Civil

Uma vez que o aumento da utilização do aço na sociedade moderna é um fato concreto, a preocupação com sistemas eficientes de proteção catódica aumenta constantemente.

Nesta dissertação abordamos uma metodologia baseada em Algoritmos Genéticos e no Método dos Elementos de Contorno para a estimativa de curvas de polarização por meio de Análise Inversa, para condições lineares e não lineares.

Partimos de valores de potenciais calculados via análise direta, como se medidos fossem, na superfície das estruturas dos exemplos estudados como parâmetros de maximização da função objetiva.

Na aplicação numérica discutimos a influência de diversos fatores que estão presentes na análise inversa desde a malha de elementos de contorno até os operadores genéticos.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.).

INVERSE ANALYSIS BY BOUNDARY ELEMENT METHOD AND GENETIC ALGORITH FOR CATHODIC PROTECTION SYSTEMS

Sérgio Leal da Costa Júnior

September/2008

Advisor: José Antônio Fontes Santiago

Department: Civil Engineering

As the usage of steel keeps growing in the modern society, the concern with efficient cathodic protection systems also rises.

In this dissertation, a methodology based upon Genetic Algorithms (GA) and Boundary Element Method (BEM) is approached in order to estimate polarization curves by means of Inverse Analysis, for linear and non linear boundary conditions.

In order to maximize the objective function we use previously calculated values for potential at the metal surface as parameters by means of a direct analysis.

In the numerical applications we discuss the influence of many factors present at the inverse analysis, from the used element meshing to the genetic algorithm operators.

Índice

Capítulo 1 - Introdução 1.1 - Motivação da Dissertação	
1.2 - Contextualização da Dissertação	2
1.3 - Princípios Básicos da Proteção Catódica	5
1.4 - Resumo dos Capítulos da Dissertação	9
Capítulo 2 -Formulação Clássica do Método dos Elementos de Contor2.1 -Introdução	no 11 11
2.2 - Método de Elementos de Contorno	12
2.2.1 - Identidades de Green	12
2.2.2 - Equação Integral Aplicada ao Domínio	
2.2.3 - Equação Aplicada aos Elementos do Contorno	15
Capítulo 3 -Análise Inversa.3.1 -Introdução.	17 17
3.2 - Métodos de Resolução para Problemas Inversos	
3.2.1 - Inversão Direta	
3.2.2 - Método dos Mínimos Quadrados	19
3.2.3 - Algoritmos Genéticos	20
e e	
Capítulo 4 - Implementação Numérica 4.1 - Introdução	
Capítulo 4 - Implementação Numérica 4.1 - Introdução 4.2 - Implementação Numérica para o Problema Proposto	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica. 4.1 - Introdução 4.2 - Implementação Numérica para o Problema Proposto	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica. 4.1 - Introdução. 4.2 - Implementação Numérica para o Problema Proposto	
 Capítulo 4 - Implementação Numérica	

6.3 -	Proposta de Trabalhos Futuros	131
REFERÍ	ÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	133

Capítulo 1 - Introdução

1.1 - Motivação da Dissertação

Atualmente devido ao desenvolvimento da sociedade, encontramos o aço como o material mais empregado nas plantas industriais. Isto implica num elevado custo com sistemas de proteção, inspeção e manutenção que buscam amenizar os efeitos do fenômeno de corrosão.

Estima-se que este custo corresponda a 3% do Produto Interno Bruto de países como Estados Unidos e Reino Unido [1].

O sistema de proteção normalmente empregado é o revestimento de zinco. Uma vez que o zinco é um material mais eletronegativo que o aço, ele sofre corrosão, funcionando como camada de proteção, evitando assim a estrutura ou o elemento estrutural revestido sofrer corrosão.

Entretanto, com a crescente complexidade das estruturas metálicas, ambientes cada vez mais hostis nos quais estão inseridas e a necessidade de se estender a vida útil dessas facilidades, outros sistemas de proteção foram desenvolvidos, dentre os quais se destacam a corrente impressa e a inserção de anodos de sacrifício.

O dimensionamento de tais sistemas geralmente se dá de forma empírica. Aplicações de determinadas normas e regras [2,3] são corriqueiramente empregadas na indústria naval e de petróleo offshore, onde pouquíssimas equações analíticas são empregadas como a Lei de Ohm ou a equação da perda de massa do anodo em função do tempo. Porém, muitas vezes como se baseiam em dados pouco confiáveis, em estimativas grosseiras e na experiência do projetista, estes sistemas apresentam elevados fatores de segurança e conseqüentemente elevados custos onde, por exemplo, os anodos muitas vezes, são distribuídos de acordo com a simetria da estrutura que protegem e não necessariamente de maneira otimizada.

Informações imprescindíveis para o dimensionamento de sistemas de proteção catódica, as curvas de polarização, quase nunca são conhecidas num determinado instante.

O conhecimento da relação da densidade de corrente e o potencial eletroquímico ao longo da área a ser protegida, é essencial para o dimensionamento de um sistema de proteção eficiente.

Esta relação não linear entre potencial e densidade de corrente é função dentre outros fatores, do tempo, da temperatura, da pressão e da velocidade de escoamento do fluido (eletrólito) no entorno da superfície catódica [1].

Estas curvas apresentam muitas vezes, formas exponenciais, com diversos parâmetros muito difíceis de determinar, podendo ser estáticas ou dinâmicas.

O objetivo que motivou o estudo apresentado nesta dissertação é partindo de dados medidos de potencial eletrostático na superfície catódica, determinar por meio de análise inversa, as curvas de polarização, empregando um Algoritmo Genético como apresentado em [4] acoplado ao Método dos Elementos de Contorno.

1.2 - Contextualização da Dissertação

Análises numéricas envolvendo Elementos de Contorno para verificação direta de sistemas de proteção catódica foram empregadas com mais freqüência a partir do final da década de 80.

Testes de laboratório e o emprego de modelos reduzidos mostraram-se custosos uma vez que a escala dos modelos podia ser reduzida, o mesmo, porém, já não podia ser aplicado às curvas de polarização [1].

O Método dos Elementos de Contorno mostrou-se dentre outros, o mais adequado para a resolução de sistemas de proteção catódica. Modelos em Elementos de Contorno são discretizados apenas no seu entorno. O eletrólito como a água do mar, por exemplo, é considerado com dimensão infinita se comparado ao domínio da superfície em questão.

Aqui no Brasil, em 1983, Telles, Mansur e Wrobel [6] implementaram no CENPES / PETROBRÁS o sistema PROCAT (Proteção Catódica para estruturas offshore e tubulações enterradas), para problemas bidimensionais, axissimétricos e

tridimensionais, sendo considerado como condições de contorno não-lineares as curvas de polarização fornecidas por interpolações lineares para trechos, definidos experimentalmente e fixas no tempo para a análise.

Novas implementações foram introduzidas no programa PROCAT. Com o seu aperfeiçoamento diversos trabalhos foram publicados [7-12], e estudos e aplicações acontecem até os dias de hoje.

Telles e Santiago [13] simularam sistemas de proteção catódica com curvas de polarização não lineares dinâmicas.

As primeiras aplicações de Algoritmos Genéticos junto com Elementos de contorno, com o objetivo de se resolver análises inversas deu-se na década de 90.

Em El Harouni, Ouazar, Walters e Cheng [14] a utilização dos Algoritmos Genéticos como ferramenta de otimização, num problema resolvido por Elementos de Contorno, foi proposta com a finalidade de se otimizar a vazão de bombeamento de um aqüífero submetido a algumas condições iniciais pré-estabelecidas. Num segundo momento foi proposta a integração do Método dos Elementos de Contorno com Dupla-Reciprocidade com um Algoritmo Genético para a obtenção com sucesso, por meio de análise inversa, parâmetros hidráulicos do mesmo aqüífero.

Kogushi e Watabe [15] propuseram com sucesso uma metodologia para análise inversa que une Algoritmos Genéticos e Elementos de Contorno para a identificação de defeitos circulares e elípticos em placas retangulares, sujeitas a diversos carregamentos sempre paralelos ao plano da placa.

Aoki e Amaya [16] elaboraram um estudo com o objetivo de otimizar sistemas de proteção catódica. Para tal era necessário encontrar uma distribuição anódica ótima e o potencial eletroquímico mínimo para satisfazer tal arranjo de anodos de sacrifício. Para encontrar resultados satisfatórios, operaram com os Elementos de Contorno, de modo que apenas os vetores independente (incógnitas) e prescrito (condições de contorno) fossem atualizados a cada iteração. Para reduzir o tempo de processamento utilizaram um Algoritmo Genético simples para encontrar os melhores pontos de partida possíveis

para iniciar a busca pela minimização da função objetiva pelo Método dos Gradientes Conjugados, convergindo assim mais rapidamente para a solução procurada.

Mera, Elliot e Ingham [17] propuseram um algoritmo Genético combinado ao Método dos Elementos de Contorno com o objetivo de se identificar a posição e geometria de parte de um domínio desconhecido, usando como dados observados para a função objetiva a parte conhecida do domínio. A motivação de tal estudo deveu-se a uma maneira não destrutiva de se quantificar a perda de material na superfície estudada devido à corrosão, partido desta vez de valores medidos de potenciais eletroquímicos e densidade de corrente.

Mera, Elliot e Ingham [18] propuseram a solução numérica para uma análise inversa com o intuito de identificar formas geométricas, agora como problemas de otimização. Partindo de diversas funções de forma não lineares, seus respectivos parâmetros foram encontrados após a minimização da função objetiva via Algoritmos Genéticos e comparados a valores conhecidos no restante do domínio. Esses valores a cada tentativa do algoritmo genético eram calculados pelo Método dos Elementos de Contorno.

Em Mitiadou e Wrobel [19] um Algoritmo Genético que se utiliza do Método dos Elementos de Contorno para cálculo de potenciais eletrostáticos e densidade de corrente foi proposto com o intuito de se determinar parâmetros de curvas de polarização não lineares. A minimização da função objetiva depende que tais valores calculados para as diversas tentativas fornecidas pelo Algoritmo Genético sejam os mais próximos possíveis dos valores observados ao longo do contorno da superfície estudada. Ressaltase aqui que os valores supostamente observados foram obtidos via análise direta com parâmetros adotados para as curvas de polarização não lineares que agora tentam ser encontrados via análise inversa.

Em Wrobel e Mitiadou [1] o estudo apresentado em [19] é extrapolado. Utilizando a mesma metodologia, acrescentando apenas funções de penalidade, sistemas de proteção catódica foram otimizados para problemas de potencial 2-D. Também foi elaborado o estudo para encontrar possíveis pontos sem proteção ou defeituosos do ponto de vista da proteção catódica para problemas axissimétricos e 3-D, no caso aplicado a casco de navios.

Recentemente Lacerda e Silva [20] desenvolveram um estudo para a identificação de curvas de polarização não lineares para estruturas esbeltas enterradas como torres de linhas de transmissão de eletricidade. O Método dos Elementos de Contorno é utilizado para modelar o sistema de proteção catódica, enquanto que o Algoritmo Genético lida com a não linearidade das curvas de polarização ao executar a análise inversa.

1.3 - Princípios Básicos da Proteção Catódica

Para entender o que é Proteção Catódica devemos primeiramente entender o mecanismo de corrosão. Para corrosão ocorrer são necessárias três condições [21]:

- Duas ligas metálicas diferentes;
- A presença de um eletrólito (água com algum tipo de sal ou sais dissolvidos);
- Uma maneira de condução entre os 2 metais.

Se as condições acima são satisfeitas, uma série de reações eletroquímicas ocorre [13].

Reação Anódica:

Reação de oxidação na parte anódica, onde há a tendência de aumentar a quantidade de elétrons livres na superfície metálica, aumentar a quantidade de íons do material na região do eletrólito que o envolve e a diminuição de sua massa. Esta reação pode ser descrita como:

$$\mathbf{M} \longrightarrow \mathbf{M}^{\mathbf{n}^+} + \mathbf{n}\mathbf{e}^- \tag{1.1}$$

Reação Catódica:

Reação de redução na parte catódica, onde há tendência de diminuição do número de elétrons livres na superfície metálica, diminuição de íons do metal no eletrólito que o

envolve e aumento de sua massa. Nesta região podem ocorrer as seguintes reações eletroquímicas:

Meio neutro ou básico não aerado:

$$2H_2O + 2e \longrightarrow H_2 + 2OH^-$$
(1.2)

Meio neutro ou básico aerado (Redução do Oxigênio):

$$O_2 + 2H_2O + 4e \longrightarrow 4OH^-$$
(1.3)

Meio ácido não aerado (Evolução do Hidrogênio):

$$2H^+ + 2e \rightarrow H_2$$
 (1.4)

Meio ácido aerado (redução de Oxigênio):

$$O_2 + 4H^+ + 4e \longrightarrow 2H_2O \tag{1.5}$$

Redução do íon metálico:

$$M^{m+} + ne \longrightarrow M^{(m-n)+}$$
(1.6)

Deposição do metal:

$$\mathbf{M}^{\mathbf{n}^{+}} + \mathbf{n}\mathbf{e} \longrightarrow \mathbf{M} \tag{1.7}$$

Proteção catódica pode ser resumida como a aplicação de corrente elétrica (elétrons) de modo que regiões metálicas naturalmente anódicas, tornem-se catódicas.

Sistemas de proteção catódica podem ser dimensionados e executados de duas maneiras: por anodos de sacrifício ou por corrente impressa. A primeira se dá por aplicação de anodos galvânicos, mais eletronegativos que a liga metálica a ser protegida, que ao longo de sua vida perdem massa (elétrons) em prol da estrutura catódica.

No caso de anodos de alumínio, por exemplo, a seguinte reação anódica ocorre:

$$4A1 \longrightarrow 4A1^{+++} + 12e^{-} \tag{1.8}$$

Já na superfície de aço a seguinte reação catódica acontece:

$$3O_2 + 12e^2 + 6H_2O \longrightarrow 12OH^2$$
 (1.9)

Enquanto os elétrons liberados pelos anodos de sacrifício estiverem chegando na parte catódica mais rápido que o oxigênio, o sistema de proteção catódica evita a corrosão do aço. Isto pode ser exemplificado na figura (1.1) [21].



Figura 1.1 – Sistema de Proteção Catódica – Anodo de Sacrifício (Alumínio)

A corrente elétrica descarregada pelos anodos de sacrifício obedece a Lei de Ohm:

$$I = E/R \tag{1.10}$$

Onde:

I = Corrente (*Amperes*);

E = Diferença de Potencial entre o Anodo e o Catodo (*Volts*);

R = Resistência do circuito (*Ohms*).

Inicialmente a corrente será elevada uma vez que a diferença de potencial entre o Anodo e o Catodo também será elevada. Entretanto a medida que a corrente é induzida no catodo, ocorre a polarização deste, fazendo com que a corrente seja diminuída gradualmente.

A resistência total do circuito engloba tanto a água do mar (eletrólito) quanto à de qualquer condutor metálico entre o anodo e o catodo. Porém o valor dominante vem da resistência do anodo na água do mar. Para a maioria das aplicações, a resistência do material metálico é tão pequena em relação a da água do mar que pode ser ignorada.

Em geral anodos mais esbeltos e longos têm menor resistência que os curtos e largos, porém possuem maior vida útil. O comprimento do anodo será responsável pela quantidade de corrente que ele pode gerar, e consequentemente a área da superfície catódica que poderá proteger. O peso do anodo determinará por quanto tempo este poderá gerar corrente nesta intensidade.

Já no método de corrente impressa, utiliza-se anodos que não se dissolvem facilmente em íons metálicos, entretanto, induzem uma reação eletroquímica alternativa, a oxidação de íons de cloro.

$$2\mathrm{Cl}^{-} \longrightarrow \mathrm{Cl}_{2} + 2\mathrm{e}^{-} \tag{1.11}$$

A corrente é fornecida por um dispositivo de corrente contínua, como ilustrado na figura (1.2) [21].



Figura 1.2 - Sistema de Proteção Catódica - Corrente Impressa

Como valor padrão para um sistema de proteção catódica eficiente adota-se o valor de potencial -0.800 volts na superfície catódica quando comparado ao anodo de referência Ag/AgCl. Entretanto como este valor é limiar e raramente conseguimos alcançá-lo projetistas adotam entre -0.950 volts e -1.000 volts.

1.4 - Resumo dos Capítulos da Dissertação

O presente estudo contempla 6 capítulos. No capítulo 2 é apresentada a dedução da Equação Integral do Contorno, base do Método dos Elementos de Contorno desde o Teorema de Green até a equação que calcula os potenciais eletroquímicos no domínio, passando pelo cálculo das soluções fundamentais.

No capítulo 3 alguns métodos de análise inversa como o Analítico e os Mínimos Quadrados são brevemente discutidos, dando ênfase quase que total aos Algoritmos Genéticos, não só descrevendo o método, mas também discutindo as bases teóricas que o fundamentam. No capítulo 4 são descritos as implementações numéricas do Método dos Elementos de Contorno e dos Algoritmos Genéticos e como estes são implementados juntos, com breve descrição de algumas das sub-rotinas que formam o algoritmo, fruto da teoria aplicada. Descrevemos também de maneira sucinta o Método de Newton-Raphson para a resolução de sistemas de equações não lineares.

No capítulo 5 fazemos as aplicações numéricas propriamente ditas, para análises inversas com o intuito de encontrarmos as curvas de polarização que condicionam os problemas descritos. Variamos diversos operadores genéticos e parâmetros para avaliar a influência de cada um na precisão das respostas e na convergência do Algoritmo com discussão dos resultados obtidos.

No capítulo 6, no decorrer da conclusão fazemos as considerações finais e propostas para desenvolvimentos futuros.

Capítulo 2 - Formulação Clássica do Método dos Elementos de Contorno

2.1 - Introdução

O Método de Elementos de Contorno encontra-se hoje amplamente difundido e empregado na solução de problemas de mecânica em meio continuo. Este vem apresentando ao longo dos anos excelentes resultados comprovados por inúmeros trabalhos principalmente no que diz respeito a problemas com domínios infinitos.

Suas aplicações mais comuns se dão em problemas como distribuição de temperatura, escoamento de fluidos em meios porosos, eletrostática e outros que podem ser descritos matematicamente como problemas de potencial. Problemas estes governados por equações de Laplace e Poisson.

O método consiste basicamente na transformação das equações diferenciais parciais, que descrevem o comportamento do fenômeno em questão dentro de um domínio conhecido e no seu entorno, em equações integrais aplicadas no contorno, resolvidas numericamente. Como as incógnitas estão apenas no contorno, isso acarreta na diminuição de uma unidade na dimensão do problema e considerável economia de dados de entrada, bem como tempo de processamento computacional. Apesar das equações matriciais não apresentarem esparsidade e nem simetria, suas dimensões, geralmente, são menores do que os métodos com o domínio discretizado. Uma vez resolvido o contorno, qualquer informação presente no interior do domínio pode ser também calculada.

2.2 - Método de Elementos de Contorno

2.2.1 - Identidades de Green

Para a dedução da equação integral utilizada no Método dos Elementos de Contorno podemos iniciar pelo Teorema da Divergência [equação (2.1)] que aplicado a um campo vetorial $\mathbf{F} = g\nabla u$ obtemos,

$$\int_{\Omega} \nabla (g \nabla u) d\Omega = \int_{\Gamma} g \nabla u.n d\Gamma$$
(2.1)

Onde g e u são funções escalares, **n** o vetor normal, orientado para fora do domínio Ω , envolvido pelo contorno Γ , conforme figura (2.1).



Figura 2.1 – Domínio (Ω), contorno (Γ) e vetor normal

Procedendo as operações necessárias na equação (2.1) e tendo em vista que $\nabla u.\mathbf{n} = \frac{\partial u}{\partial n}$ (derivada direcional) obtemos a primeira Identidade de Green:

$$\int_{\Omega} (\nabla g \cdot \nabla u + g \nabla^2 u) d\Omega = \int_{\Gamma} g \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma$$
(2.2)

Por outro lado considerando $\mathbf{F} = \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{g}$ temos:

$$\int_{\Omega} (\nabla g \cdot \nabla u + u \nabla^2 g) d\Omega = \int_{\Gamma} u \frac{\partial g}{\partial n} d\Gamma$$
(2.3)

Subtraindo (2.3) de (2.2) obtemos a Segunda Identidade de Green, onde relacionando variáveis no domínio e no contorno:

$$\int_{\Omega} (g\nabla^2 u - u\nabla^2 g) d\Omega = \int_{\Gamma} \left(g \cdot \frac{\partial u}{\partial n} - u \cdot \frac{\partial g}{\partial n} \right) d\Gamma$$
(2.4)

2.2.2 - Equação Integral Aplicada ao Domínio

Partindo da Segunda Identidade de Green, considerando que u satisfaz a Equação de Laplace ($\nabla^2 u = 0$) e somando e subtraindo u(ξ), definida pela seguinte propriedade da "função" Delta de Dirac [22]

$$\int_{\Omega} u(\mathbf{X}) \Delta(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{X}) d\Omega = u(\boldsymbol{\xi})$$
(2.5)

temos:

$$\int_{\Omega} g \nabla^2 u d\Omega - \int_{\Omega} u \nabla^2 g d\Omega + \int_{\Omega} u \Delta(\xi, \mathbf{X}) d\Omega - \int_{\Omega} u \Delta(\xi, \mathbf{X}) d\Omega = \int_{\Gamma} \left(g \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial g}{\partial n} \right) d\Gamma$$
(2.6)

Sendo $\Delta(\xi, \mathbf{X})$ Delta de Dirac; $\xi \in \mathbf{X}$ pontos fonte e campo respectivamente e u(\mathbf{X}) o campo de potenciais.



Figura 2.2 – Formulação Clássica para Problemas de Potencial

A primeira integral a esquerda da equação (2.6) é igual a 0, uma vez que u satisfaz a Equação de Laplace. A segunda integral é somada à quarta integral de maneira que obtemos, $\int_{\Omega} u [\nabla^2 g + \Delta(\xi, X)] d\Omega$.

Como esta integral introduz incógnitas no domínio e o ideal é trabalharmos apenas com incógnitas no contorno, por definição do Método de Elementos de Contorno, esta deverá ser nula, de modo que:

$$\nabla^2 g + \Delta(\xi, X) = 0 \tag{2.7}$$

uma vez que u é uma função potencial diferente de zero. A função g é a solução desta equação diferencial, denominada de solução fundamental. A terceira integral é igual a $u(\xi)$ devido à expressão (2.5).

Substituindo u(ξ), e eliminando os termos nulos de acordo com as considerações feitas acima, a equação (2.6) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$u(\xi) = \int_{\Gamma} \left(g \frac{\partial u}{\partial n} \right) d\Gamma - \int_{\Gamma} \left(u \frac{\partial g}{\partial n} \right) d\Gamma$$
(2.8)

As soluções fundamentais são apresentadas a seguir:

$$g = u^*(\xi, X) = \frac{1}{2\pi} \ln\left(\frac{1}{r}\right)$$
 (2.9a)

$$q^* = \frac{\partial u}{\partial r}^* \left(\xi, X\right) = \frac{1}{2\pi r} \left(\frac{r_1}{r} n_1 + \frac{r_2}{r} n_2\right)$$
(2.9b)

onde r é a distância entre os pontos fonte e campo.

2.2.3 - Equação Aplicada aos Elementos do Contorno

Para a obtenção da equação integral aplicada aos pontos no contorno $(\xi \in \Gamma)$, relacionando apenas variáveis do contorno, excluímos do domínio Ω , um setor circular centrado no ponto fonte ξ e de raio ε , onde Γ é o contorno total, Γ_{ε}^{*} o contorno retirado e Γ_{ε} o contorno do setor circular.



Figura 2.3 – Aplicação a pontos do contorno

Para este problema podemos escrever a Segunda Identidade de Green como:

$$\int_{\Omega-\Omega_{\varepsilon}} (u^* \nabla^2 u - u \nabla^2 u^*) d\Omega = \int_{\Gamma-\Gamma_{\varepsilon}^*} (u^* \cdot q - q^* \cdot u) d\Gamma + \int_{\Gamma_{\varepsilon}} u^* \cdot q d\Gamma - \int_{\Gamma_{\varepsilon}} q^* \cdot u d\Gamma$$
(2.10)

As integrais do lado direito da equação (2.10) resolvidas de maneira adequada resultam em [22]:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma_{\varepsilon}} u^*(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}) q(\mathbf{x}) d\Gamma = 0$$
(2.11a)

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma_{\varepsilon}} q^*(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}) u(\mathbf{x}) d\Gamma = u(\boldsymbol{\xi}) C(\boldsymbol{\xi})$$
(2.11b)

Sendo C(ξ) um coeficiente que depende da geometria onde está aplicado o ponto fonte, igual a $\frac{1}{2}$ para contornos suaves e expresso, na sua forma geral, como:

$$C(\boldsymbol{\xi}) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma_{\varepsilon}} q^*(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}) d\Gamma$$
(2.12)

Introduzimos os valores para as integrais apresentadas na expressão (2.11), na expressão (2.10), ficamos com:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Omega - \Omega_{\varepsilon}} \left(u^* \nabla^2 u - u \nabla^2 u^* \right) d\Omega = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma - T_{\varepsilon}^*} \left[u^* (\xi, X) q(X) - q^* (\xi, X) u(X) \right] d\Gamma - C(\xi) u(\xi)$$
(2.13)

onde,

$$q(X) = \frac{\partial u(X)}{\partial n}$$

e

$$q^*(\xi, X) = \frac{\partial u^*(\xi, X)}{\partial n}$$

A integral à esquerda é nula uma vez que $\nabla^2 u^* = 0$, pois $\Delta(\xi, X) = 0$ para ξ fora domínio e $\nabla^2 u = 0$, pois devemos satisfazer a equação de Laplace. Por conseguinte, a equação (2.13) pode ser escrita como:

$$C(\boldsymbol{\xi})u(\boldsymbol{\xi}) = \int_{\Gamma} u^*(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{X})q(\mathbf{X})d\Gamma - \int_{\Gamma} q^*(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{X})u(\mathbf{X})d\Gamma$$
(2.14)

onde as integrais do contorno devem ser analisadas como impróprias.

Capítulo 3 - Análise Inversa

3.1 - Introdução

Análise Inversa hoje encontra uma grande demanda por aplicações. Isso ocorre devido à necessidade de se estimar ou calcular parâmetros físicos diversos a partir de medições realizadas no domínio de determinado problema.

Em problemas de análise direta, a equação que rege o problema, as condições iniciais, as condições de contorno, a geometria do sistema e a propriedade dos materiais são conhecidas explicitamente. O objetivo da análise direta então, é encontrar as respostas para as variáveis do domínio e contorno. Já para análise inversa, dados e parâmetros normalmente disponíveis não são conhecidos. Isto acarreta a necessidade de encontrarmos tais dados a partir de valores medidos [1].

Os problemas inversos podem ser classificados como [1]:

- Problemas Inversos de Contorno
- Estimativa de Parâmetros
- Problemas Inversos de Condição Inicial
- Problemas Inversos de Geometria

Problemas inversos de contorno podem ser vistos como estimativas de valores desconhecidos em partes do contorno inacessíveis, por meio de medições em diversos pontos do contorno exposto, e do domínio que envolvem o fenômeno estudado.

Problemas de estimativa de parâmetros decorrem da necessidade de se encontrar parâmetros que descrevem as propriedades físicas de determinado fenômeno estudado a partir de medições realizadas no entorno deste fenômeno bem como no interior do domínio determinado para o problema.

Problemas inversos de condição inicial se baseiam na estimativa dos valores iniciais para determinado problema partindo de medições realizadas em tempo a posteriori.

Problemas inversos de geometria surgem da necessidade de se estimar a geometria de determinado corpo físico, quando estes dados não são disponibilizados, a partir de medições em outras partes do corpo.

Classificamos o presente estudo como Análise Inversa para Estimativa de Parâmetros, uma vez que estes irão determinar as condições de contorno.

3.2 - Métodos de Resolução para Problemas Inversos

Neste item indicamos alguns métodos como Inversão Direta, Mínimos Quadrados e Algoritmos Genéticos, para a resolução de diversos problemas inversos com suas formulações matemáticas resumidas. Cabe aqui ressaltar que ênfase maior é dada aos Algoritmos Genéticos por seu emprego ser motivação desta dissertação.

3.2.1 - Inversão Direta

O método de Inversão Direta pode ser classificado como um método explícito. Sua utilização apresenta restrições e geralmente é aplicado a problemas inversos sem complexidade. Por isso seu emprego se dá apenas no campo de soluções analíticas e em problemas discretos quando estes apresentam sistemas inversos bem-postos [23].

Demonstramos esta metodologia como um sistema de equações algébricas simples, em notação matricial que representa um problema qualquer:

$$\mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{f} \tag{3.1}$$

onde A é a matriz do sistema direto, f o vetor independente e y o vetor de incógnitas. Se a matriz for quadrada e não-singular, sua inversa existe. Resolvemos o problema então pré-multiplicando os dois lados do sistema de equações por A⁻¹. Isto resulta em:

$$\mathbf{A}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{f}$$
(3.2)

ou

onde $K = A^{-1}$ é o sistema de equações para problemas inversos, u = f, o vetor de dados ou parâmetros observados e x = y, o vetor de parâmetros a serem determinados.

3.2.2 - Método dos Mínimos Quadrados

Nem sempre a matriz K citada no item anterior é uma matriz quadrada. Quase sempre esta matriz é quase-singular ou singular. Nestes casos o método dos mínimos quadrados é amplamente aplicado.

O método dos mínimos quadrados é em suma, um procedimento matemático que busca a melhor curva que pode se ajustar a um conjunto de pontos de uma dada amostra de maneira a minimizar os quadrados das distâncias entre esta curva e estes pontos. Para o sistema apresentado a seguir em (3.4) com m \geq n, a solução em mínimos quadrados û é apresentada em (3.5).

Seja o seguinte sistema de equações, com $m \ge n$:

$$K u = x, \operatorname{com} K_{m x n}$$
(3.4)

A solução û em mínimos quadrados é obtida como:

$$\hat{u} \implies \min \|Ku-x\|^2$$
 (3.5)

Matricialmente podemos escrever o processo de resolução representado pela equação (3.5) como:

$$\mathbf{K}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}\,\mathbf{u} = \mathbf{K}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{x} \implies \mathbf{K}^{*}\,\mathbf{u}^{*} = \mathbf{x}^{*} \tag{3.6}$$

Com as matrizes e vetores com as seguintes ordens: $\mathbf{K}_{n \times m}^{T} \mathbf{K}_{m \times n}^{T} \mathbf{u}_{n \times 1}^{T}, \mathbf{K}_{n \times n}^{*}, \mathbf{u}_{n \times 1}^{*}, \mathbf{u}_{n \times 1}^{*}$ e $\mathbf{x}_{n \times 1}^{*}$

3.2.3 - Algoritmos Genéticos

Algoritmos Genéticos são algoritmos evolutivos empregado em otimizações baseados nos princípios análogos à seleção natural e genética [24].

Algoritmos Genéticos (GAs) são um ramo dos algoritmos evolucionários e como tal podem ser definidos como uma técnica de busca baseada numa metáfora do processo biológico de evolução natural.[25]

São técnicas heurísticas de otimização global [25]. A otimização global proposta pelos GAs se confronta aos métodos como Gradiente Conjugado, que por seguirem a derivada de uma função de forma a encontrar o máximo de outra, muitas vezes convergem para máximos ou mínimos locais.

Os GAs como um programa evolutivo é antes de tudo um algoritmo probabilístico que mantém uma população de indivíduos ao longo de todo o processo[4].

Cada indivíduo da população representa uma solução em potencial para o problema em questão, seja este de otimização, maximização ou minimização, desde que possa ser representado ou modelado por uma função. A esta função damos o nome de função objetiva.

Os elementos da população são então avaliados em termos da função objetiva a cada iteração, sendo que os indivíduos melhores avaliados possuem uma chance maior de fazer parte da população na iteração seguinte. Alguns elementos dessa nova população sofrem transformações inspiradas na genética como mutação e "crossover" para então formar novas soluções em potencial, evitando que a solução do algoritmo convirja para máximos ou mínimos locais. Este talvez seja o diferencial dos GAs se comparado a outros processos evolutivos.

Os Algoritmos Genéticos têm sido usados com sucesso em vários problemas de otimização, incluindo a maioria das formulações para análises inversas [1].

As vantagens dos GAs comparados a formulações clássicas para análises inversas podem ser resumidas a seguir:

- A otimização ocorre baseada no valor da função objetiva para cada uma das possíveis soluções.
- A continuidade da derivada da função objetiva não é condição para convergência.
- A avaliação das soluções é feita diretamente na função objetiva.
- A aleatoriedade em todas as etapas do algoritmo faz com que as chances de se chegar a um máximo ou mínimo global sejam bastante razoáveis [1].

3.2.3.1 Execução do Algoritmo Genético

A representação de cada indivíduo da população se dá na base 2, dependendo do domínio das soluções e da precisão desejada. Desta maneira os números na base 10 são representados por números binários que daqui por diante serão tratados como "cromossomos".

Cada variável na otimização tem um domínio e uma precisão requerida. Desta forma o número de bits de cada solução é dado por:

$$2^{N-1} \le (b-a) \times 10^{\gamma} \le 2^{N}$$
(3.7)

Onde b e a são os limites superior e inferior do domínio, respectivamente, γ é o número de casas decimais requeridas como precisão e N o número de bits.

Assim sendo podemos facilmente transformar o número da base 2 para o número na base 10:

$$X = a + X' - \frac{b - a}{2^{N} - 1}$$
(3.8)

Onde X' é a representação decimal de um número na base 2, e X o valor correspondente na base 10. Por exemplo, X' = decimal $(1111)_2 = 1 \times 2^0 + 1 \times 2^1 + 1 \times 2^2 + 1 \times 2^3 = 15$.

Para inicializar a primeira população, definimos primeiramente o tamanho desta, o número de variáveis, a precisão e os domínios de cada uma das variáveis.

Seja o domínio de cada variável representado por $D_i = [a_i, b_i] \subseteq R$.

Assumindo que desejamos para cada variável uma precisão de γ casas decimais, devemos dividir os respectivos domínios em $(b_i - a_i).10^{\gamma}$ partes iguais. Assim sendo devemos encontrar o menor inteiro N que atenda a $(b_i - a_i).10^{\gamma} \le 2^N - 1$.

Desta maneira cada variável estará devidamente representada na base 2, seguindo a notação binária, atendendo a precisão requerida.

Cada "cromossomo" (solução potencial) é representado na configuração binária de tamanho $m = \sum_{i=1}^{k} m_i$, onde m_i é o número de bits reservado ao domínio da variável i.

Portanto cada cromossomo contém valores para todas as variáveis do problema, o que faz dele uma possível solução.

A geração da primeira população se dá de maneira aleatória respeitando as definições descritas anteriormente.

Uma vez definida a primeira população, constituída de indivíduos ou o primeiro conjunto de possíveis soluções, podemos inicializar o algoritmo, que resumidamente realizará as seguintes etapas:

- Cálculo do valor da função objetiva para cada cromossomo da população Val(i)
 (i = 1, ..., n), onde n é o tamanho de população (nº de indivíduos)
- Somatório de todos os valores obtidos em cada solução para avaliação total da população

$$SumVal = \sum_{i=1}^{n} Val(i)$$
(3.9)

• Cálculo do peso de cada solução (cromossomo) perante o total da população

$$p_i = \frac{Val(i)}{SumVal} \tag{3.10}$$

 Cálculo da probabilidade acumulada de cada solução, ou seja quanto maior o peso de cada solução, maior a chance de ser selecionada para a população seguinte (ver figura 3.1)

$$q_{i} = \sum_{j=1}^{i} p_{j}$$
(3.11)

Em seguida rodamos o que chamamos de roleta de probabilidades. Esta consiste na geração aleatória de n números aleatórios entre 0 e 1. O cromossomo que tiver a probabilidade acumulada imediatamente maior que o número aleatório gerado é escolhido para fazer parte da próxima população.



Figura 3.1 – Roleta de Probabilidades para uma população de 7 cromossomos

Uma vez formada a nova população, utilizamos os operadores genéticos. Estes são bastante eficazes no sentido de diversificar os cromossomos reproduzidos. Estes talvez seja o grande diferencial dos Algoritmos Genéticos, pois permitem mesmo que uma solução muito forte e que repetidas vezes esteja presente de uma iteração para outra, seja alterada em diferentes partes dos cromossomos, o que pode evitar uma convergência prematura para máximos e mínimos locais.

Para cada operador genético devemos definir antes de mais nada a probabilidade de ocorrência de cada um.

Chamemos de P_c e P_m as probabilidades de ocorrência de "crossover" ou recombinação e de mutação, respectivamente.

O "crossover" ou recombinação é um fenômeno onde parte do material genético de um cromossomo é trocado com outro, sempre 2 a 2. Fazendo esta analogia, no algoritmo genético também combinamos 2 a 2 algumas soluções escolhidas aleatoriamente, trocando entre elas uma ou mais partes da solução.

No crossover devemos girar a roleta de probabilidades tantas vezes quanto for o número de cromossomos de uma população. Sempre que o número aleatório gerado for menor que p_c (probabilidade de haver crossover) o respectivo cromossomo é selecionado para ser recombinado. Caso o número de cromossomos selecionados for par, os combinamos 2 a 2. Se forem ímpares descartamos o último e procedemos como descrito anteriormente.

Para selecionar o ponto de "corte", ou o lugar a partir do qual os cromossomos serão recombinados, devemos gerar aleatoriamente números de 1 a N-1 (N = número de bits), uma vez que existem N-1 pontos de "corte".

Como exemplo ilustrativo para o crossover, escrevemos 1 par de cromossomos antes e depois da recombinação:

$$V_1 = (1000|1111) \rightarrow V_1' = (10000110)$$

 $V_2 = (0111|0110) \rightarrow V_2' = (01111111)$
(3.12)

O fenômeno genético de mutação, é representado analogamente no algoritmo genético como a simples troca de 0 por 1 ou vice-versa.

Para ocorrência de tal fenômeno devemos gerar N x n de cromossomos da população números aleatórios. Ou seja, devemos gerar números aleatórios para cada bit da população. Comparamos então cada número aleatório gerado entre 0 e 1 com a p_m (probabilidade de ocorrência de mutação). Os números aleatórios menores que p_m têm seus respectivos bits mudados de 0 para 1 e vice-versa.

A título de ilustração podemos dizer que na população abaixo, composta por 2 cromossomos, com 6 bits cada, houve mutação no segundo e no décimo primeiro bit, o que corresponde ao 2° bit do 1° cromossomo e ao 5° bit do 2° cromossomo.

$$V_1 = (100011) \rightarrow V_1' = (110011)$$

 $V_2 = (011110) \rightarrow V_2' = (011100)$
(3.13)

Após efetuar-mos estas duas operações, concluímos a primeira iteração do algoritmo, que deverá continuar com a avaliação desta população recém-formada e assim por diante, até o número máximo de iterações pré-definido ou que a função objetiva tenha atingido um valor satisfatório.

3.2.3.2 Bases Teóricas da Convergência dos Algoritmos Genéticos

As bases teóricas dos Algoritmos Genéticos residem na representação binária para soluções e o conceito de esquemas [4].

Esquemas são representações numéricas binárias (base 2) em que algumas de suas posições podem ser representadas por "*". Por exemplo, podemos considerar o seguinte esquema abaixo:

Este esquema representa 2 cromossomos:

$$(1110101)$$
 e (0110101) (3.15)

Assim sendo, cada esquema corresponde a 2^r cromossomos, onde r é o número de "*" presentes no esquema. Por sua vez cada cromossomo pode ser representado por 2^m esquemas onde m é o número de bits do cromossomo.

Existem duas importantes propriedades dos esquemas: ordem e comprimento de definição.

Ordem é o número de bits definidos num determinado esquema S. Ou seja, é o número de bits (m) menos o número de bits indefinidos (*). A Ordem de um esquema é representado por o(S). Esta propriedade é relevante quando do cálculo das probabilidades de mutação [4].

$$S_{1} = (**1*0*1010011) \longrightarrow o(S_{1}) = 13 - 4 = 9$$

$$S_{2} = (11001***011**) \longrightarrow o(S_{2}) = 13 - 5 = 8$$

$$S_{3} = (*0**0*1010011) \longrightarrow o(S_{3}) = 13 - 4 = 9$$
(3.16)

Comprimento de definição é a propriedade que representa a diferença entre a posição do último bit definido e a posição do primeiro bit definido dentro de um esquema S. Sua representação se dá por $\delta(S)$. Assim sendo:
$$\delta(S_1) = 13 - 3 = 10$$

$$\delta(S_2) = 11 - 1 = 10$$

$$\delta(S_3) = 13 - 2 = 11$$

(3.17)

O comprimento de definição é uma propriedade relevante no que tange à operação de crossover.

Para facilitar as demonstrações vamos às seguintes simbologias:

 ξ (S,t) \rightarrow número de cromossomos num instante t, que possuem o esquema S; eval (S,t) \rightarrow avaliação média dos cromossomos que possuem o esquema S:

$$eval(S,t) = \sum_{j=1}^{\zeta(S,t)} eval(v_{ij}) / \zeta(S,t)$$
(3.18)

 ξ (S,t+1) \longrightarrow número de cromossos que possuem o esquema S na geração t+1:

$$\zeta(S,t+1) = \zeta(S,t+1) \times tamanhodapopula \zeta \tilde{a} o \times eval(S,t) / F(t)$$
(3.19)

O aumento do número de cromossomos que contém determinado esquema, depende da razão $eval(S,t)/F(\overline{t})$ ser positiva. Assim sendo o número de vezes que um esquema aparece em qualquer instante é dado por:

$$\xi(S,t) = \xi(S,0) \times (1+\varepsilon)^{t}$$

$$\varepsilon = [eval(S,t) - F(\overline{t})] / F(\overline{t})$$
(3.20)

Observa-se que o aumento do número de vezes que um esquema aparece numa população é em progressão geométrica [4].

Este crescimento exponencial poderia acarretar em convergência prematura. Isto é impedido pelos operadores "genéticos", que têm participação fundamental na diversificação das soluções re-combinando os cromossomos após a etapa de solução. O tamanho de definição é uma propriedade que determina a chance de um determinado esquema sobreviver ao crossover. A probabilidade de sobrevivência de qualquer esquema S é dado por:

$$p_s(S) = 1 - \frac{\delta(S)}{m - 1} \tag{3.21}$$

Entretanto, devemos multiplicar a probabilidade de sobrevivência pela probabilidade de crossover. Assim teremos:

$$p_s(S) = 1 - p_c \times \frac{\delta(S)}{m - 1} \tag{3.22}$$

Assim, quando aplicamos a re-combinação (crossover) à seleção, a expectativa do número de vezes que um esquema irá se repetir na iteração t+1 torna-se:

$$\xi(S,t+1) \ge \xi(S,t) \times [eval(S,t)/\overline{F(t)}] \times [1 - p_c \times \frac{\delta(S)}{m-1}]$$
(3.23)

Para a mutação, a probabilidade de cada bit sobreviver é dado por $1-p_m$. Assim sendo a probabilidade de um esquema S sobreviver a mutação é dado por:

$$p_s(S) = (1 - p_m)^{o(S)}$$
(3.24)

Mas $p_m \ll 1$, então :

$$p_s(S) = 1 - o(S) \times p_m \tag{3.25}$$

Ao combinarmos finalmente seleção, mutação e re-combinação temos a expectativa do número de cromossomos que conterão determinado esquema S é dado por:

$$\xi(S,t+1) \ge \xi(S,t) \times [eval(S,t)/\overline{F(t)}] \times [1 - p_c \times \frac{\delta(S)}{m-1} \times o(S) \times p_m]$$
(3.26)

Podemos exemplificar numericamene com o esquema S3. Considerando:

$$\xi(S,t) = 2$$

$$[eval(S,t)/\overline{F(t)}] = 2.34$$

$$p_c = 75\%$$

$$p_m = 2.5\%$$

Obtemos para o esquema S_3 a seguinte estimativa para número de repetições na população t+1:

 $\xi(S_3, t+1) = 2 \ge 2.34 \ge [1 - (0.75 \ge 11/12 \ge 9 \ge 0.025)] = 3.96.$

Assim esperamos encontrar na população t+1, para os valores considerados para as variáveis, aproximadamente 4 vezes o esquema S_3 .

Essas equações descritas acima partem sempre da premissa que a função de avaliação retorne sempre valores positivos [4].

Capítulo 4 - Implementação Numérica

4.1 - Introdução

No presente capítulo descrevemos todos os passos necessários para a implementação numérica de um Algoritmo Genético em conjunto com o Método dos Elementos de Contorno, com o objetivo de determinarmos os parâmetros para condições de contorno, usando funções lineares ou curvas de polarização (relações não lineares), primordiais para o dimensionamento de um sistema de proteção catódica eficiente.

Para tal dimensionamento, faz-se necessário o conhecimento prévio da densidade de corrente e potencial eletroquímico na superfície da estrutura a ser protegida. Para a determinação de tais valores, devemos resolver um sistema de Equações de Laplace, com condições de contorno que dependem também da relação não-linear entre as duas variáveis em questão.

A determinação de tais curvas não-lineares envolve uma série de fenômenos físicos, dentre os quais podemos citar salinidade, condutividade elétrica do meio, temperatura, velocidade de escoamento do eletrólito especialmente para estruturas "off-shore", onde sistemas de proteção catódica são essenciais para sua vida útil, devido ao ambiente hostil a que estão submetidas [1].

Santiago e Telles [26,27] desenvolveram a metodologia para lidar com o fenômeno de distribuição de densidade de corrente e potencial, governado pela equação de Laplace e/ou Poisson, sujeitos a condições de contorno não-lineares, variáveis com o tempo e potenciais de formação, chamadas de curvas de polarização dinâmica.

No presente trabalho consideramos condições de contorno constantes, relações lineares e não lineares, entre o potencial eletro-químico e a densidade de corrente, sendo estas últimas (curvas de polarização obtidas em [13,28]) para o tempo constante. Primeiramente descrevemos a Implementação Numérica para o Método dos Elementos de Contorno com condições de contorno não-lineares, que utiliza o Método de Newton-Raphson para a resolução dos sistemas de equações de Laplace não lineares.

Em seguida, um Algoritmo Genético, que utiliza o Método dos Elementos de Contorno para avaliar a qualidade e a precisão dos parâmetros obtidos como solução para as curvas de polarização.

4.2 - Implementação Numérica para o Problema Proposto

Diante da escassez de dados e da complexidade em elaborar ensaios com o intuito de medir a distribuição de potenciais e densidade de corrente numa estrutura qualquer, adotamos metodologia semelhante à de Aoki e Urai [29].

Para a obtenção dos dados "medidos" desenvolvemos uma análise direta. A solução de tal análise passará a valer como dados observados ou medidos e servirá de base para a análise inversa, devendo esta convergir para tais valores.

Assim sendo elaboramos um programa computacional baseado no Método dos Elementos de Contorno para solução de problemas de potencial.

4.2.1 - Implementação Numérica para o Método dos Elementos de Contorno

Aplicamos o Método dos Resíduos Ponderados à equação integral para pontos no contorno [Equação (2.14)]:

$$\int_{\Gamma} c(\xi) u(\xi) w d\Gamma = \int_{\Gamma} \left\{ \int_{\Gamma} \left[u^*(\xi, \mathbf{X}) q(\mathbf{X}) - u(\mathbf{X}) q^*(\xi, \mathbf{X}) \right] w d\Gamma$$
(4.1)

Usamos o Método de Colocação, portanto a função de ponderação $w = \sum_{i=1}^{n} \beta_i \Delta(\xi^i, \xi)$, onde $\Delta(\xi^i, \xi)$ é a "função" Delta de Dirac aplicado a pontos selecionados. A equação (4.1) pode ser escrita como:

$$\int_{\Gamma} c(\xi) u(\xi) \Delta(\xi^{i}, \xi) d\Gamma = \int_{\Gamma} \left\{ \int_{\Gamma} \left[u^{*}(\xi, \mathbf{X}) q(\mathbf{X}) - u(\mathbf{X}) q^{*}(\xi, \mathbf{X}) \right] d\Gamma \right\} \Delta(\xi^{i}, \xi) d\Gamma$$
(4.2)

onde $u(\mathbf{X})$ e $q(\mathbf{X})$ são soluções aproximadas e ξ^i são os pontos de colocação aplicados nos nós funcionais do problema. Assim o i varia de 1 até o número total de pontos nodais funcionais, denotados por NN.

Aplicamos a propriedade da "função" Delta de Dirac apresentada na equação (2.5), na equação (4.2) e obtemos:

$$c(\boldsymbol{\xi}^{i})u(\boldsymbol{\xi}^{i}) = \int_{\Gamma} u^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X})q(\mathbf{X})d\Gamma(\mathbf{X}) - \int_{\Gamma} q^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X})u(\mathbf{X})d\Gamma(\mathbf{X})$$
(4.3)

Resolvamos agora a equação (4.3) sujeita às seguintes condições de contorno:

$$u(\mathbf{X}) = \bar{u}(\mathbf{X}) \operatorname{em} \Gamma_1$$

$$q(\mathbf{X}) = \bar{q}(\mathbf{X}) \operatorname{em} \Gamma_2$$
(4.4)

Posto isso, as seguintes considerações devem ser feitas:

a) O contorno Γ é discretizado em uma série de elementos (NE), sobre os quais u(X) e q(X) são interpolados em função dos pontos nodais funcionais e as coordenadas cartesianas retangulares são interpoladas em função dos pontos nodais geométricos;

b) A equação (4.3) é escrita de forma discretizada, aplicada para cada ponto nodal funcional ξ^i do contorno Γ e as integrais são calculadas sobre cada elemento do

contorno Γ_j . Obtemos desta forma um sistema de NN equações algébricas que envolvem NN valores nodais de potencial e NN valores nodais de densidade de corrente;

c) As condições de contorno (4.4) são impostas, conseqüentemente NN valores nodais são prescritos. Estes podem ser potencial ou densidade de corrente: constantes, lineares e não-lineares;

d) O sistema de equações pode então ser resolvido para NN valores nodais incógnitos;

e) Os valores de potenciais e fluxos podem ser obtidos em qualquer ponto do domínio, aplicando a equação integral (2.8), de forma discretizada.



Figura 4.1 - Domínio governado pela Equação de Laplace

4.2.1.1 Funções de Interpolação e de Forma

Coordenadas Cartesianas Retangulares

As coordenadas cartesianas $x^{(j)}$ dos pontos do contorno situados ao longo do elemento Γ_j são expressas em termos das coordenadas dos nós geométricos $x^{(jm)}$, relacionados pela função de forma $\psi^{(m)}$.

$$\mathbf{x}^{(j)} = \mathbf{\psi} \, \mathbf{x}^{(jm)} \tag{4.5}$$

Podemos descrever as funções lineares ψ , usuais para problemas 2-D como:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{1}^{(j)} &= \psi^{(1)} \mathbf{x}_{1}^{(j1)} + \psi^{(2)} \mathbf{x}_{1}^{(j2)} \\ \mathbf{x}_{2}^{(j)} &= \psi^{(1)} \mathbf{x}_{2}^{(j1)} + \psi^{(2)} \mathbf{x}_{2}^{(j2)} \end{aligned}$$
(4.6)

onde,

$$\psi^{(1)} = \frac{1}{2} (1 - \eta)$$

$$\eta \in [-1, 1]$$

$$\psi^{(2)} = \frac{1}{2} (1 + \eta)$$

(4.7)

Por conseguinte podemos escrever a equação (4.5) como:

$$\begin{cases} x_1^{j} \\ x_2^{j} \end{cases} = \begin{bmatrix} \psi^1 & 0 & \psi^2 & 0 \\ 0 & \psi^1 & 0 & \psi^2 \end{bmatrix} \begin{cases} x_1^{j1} \\ x_2^{j1} \\ x_1^{j2} \\ x_2^{j2} \end{cases}$$
(4.8)

ou:

$$x_{k}^{(j)} = \sum_{m=1}^{M} \psi^{(m)} x_{k}^{(jm)}$$
(4.9)

onde,

M – número de pontos nodais geométricos pertencentes ao contorno Γ_i .

Potenciais e Derivadas Normais

Os potenciais e fluxos são também aproximados sobre cada elemento por meio de funções de interpolação ϕ :

$$u^{(j)} = \boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{u}^{(jn)}$$

$$q^{(j)} = \boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{q}^{(jn)}$$
(4.10)

ou,

$$u^{(j)} = \sum_{n=1}^{N} \phi^{(n)} u^{(jn)}$$

$$q^{(j)} = \sum_{n=1}^{N} \phi^{(n)} q^{(jn)}$$
(4.11)

onde,

 $u^{(j)}$ – potencial num ponto pertencente ao contorno Γ_j ;

 $q^{(j)}$ – derivada normal num ponto pertencente ao contorno Γ_j ;

 $u^{(jn)}$ – potencial num ponto nodal funcional (n) pertencente ao contorno Γ_j ;

 $q^{(jn)}$ – derivada normal num ponto nodal funcional (n) pertencente ao contorno Γ_j ;

 $\phi^{(n)}$ – função de interpolação;

N – número de pontos nodais funcionais pertencentes ao contorno Γ_i .

Caso queiramos tranformar a derivada normal em densidade de corrente, basta multiplicarmos esta pela constante de condutividade k. Para todo este estudo k terá valor unitário (k = 1).

Exemplos de funções de interpolação podem ser descritos a seguir:

a) Constante (usada neste estudo):

$$\begin{split} u^{(j)} &= \varphi^{(1)} u^{(j1)} \\ \varphi^{(1)} &= 1 \\ \eta \in [-1,+1] \\ q^{(j)} &= \varphi^{(1)} q^{(j1)} \end{split} \tag{4.12a}$$

b) Linear:

$$u^{(j)} = \phi^{(1)}u^{(j1)} + \phi^{(2)}u^{(j2)}$$
$$q^{(j)} = \phi^{(1)}q^{(j1)} + \phi^{(2)}q^{(j2)}$$

onde,

$$\phi^{(1)} = \frac{1}{2}(1-\eta)$$

$$\eta \in [-1,+1] \qquad (4.12b)$$

$$\phi^{(2)} = \frac{1}{2}(1+\eta)$$

$$\{u^{(j)}\} = \left[\phi^{(1)} \quad \phi^{(2)}\right] \begin{cases} u^{(j1)} \\ u^{(j2)} \end{cases}$$

$$\left\{q^{(j)}\right\} = \left[\phi^{(1)} \quad \phi^{(2)}\right] \left\{q^{(j1)} \\ q^{(j2)}\right\}$$

c) Quadrático:

$$u^{(j)} = \phi^{(1)}u^{(j1)} + \phi^{(2)}u^{(j2)} + \phi^{(3)}u^{(j3)}$$

$$q^{(j)} = \phi^{(1)}q^{(j1)} + \phi^{(2)}q^{(j2)} + \phi^{(3)}q^{(j3)}$$

onde,

$$\phi^{(1)} = \frac{1}{2} \eta (1 - \eta)$$

$$\phi^{(2)} = (1 - \eta) (1 + \eta) \qquad \eta \in [-1, +1] \qquad (4.12c)$$

$$\phi^{(3)} = \frac{1}{2}\eta(1+\eta)$$

$$\{ u^{(j)} \} = \begin{bmatrix} \phi^{(1)} & \phi^{(2)} & \phi^{(3)} \end{bmatrix} \begin{cases} u^{(j1)} \\ u^{(j2)} \\ u^{(j3)} \end{cases}$$

$$\left\{ q^{(j)} \right\} = \begin{bmatrix} \phi^{(1)} & \phi^{(2)} & \phi^{(3)} \end{bmatrix} \begin{cases} q^{(j1)} \\ q^{(j2)} \\ q^{(j3)} \end{cases}$$

Uma vez que as funções de interpolação são escritas em termos da coordenada adimensional η , devemos escrever $d\Gamma$ em relação a este sistema de coordenadas intrínsecas:

$$d\Gamma = |J|d\eta \tag{4.13}$$

onde o jacobiano da transformação |J| é dado por:

$$\left|J\right| = \sqrt{\left(\frac{dx_1}{d\eta}\right)^2 + \left(\frac{dx_2}{d\eta}\right)^2} \tag{4.14}$$

4.2.1.2 Forma Discretizada da Equação Integral no Contorno

Se o contorno Γ for discretizado em NE elementos a equação (4.3) pode ser escrita como:

$$c(\boldsymbol{\xi}^{i})\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\xi}^{i}) = \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_{j}} \boldsymbol{u}^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X}) q(\mathbf{X}) d\Gamma(\mathbf{X}) - \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_{j}} q^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X}) \boldsymbol{u}(\mathbf{X}) d\Gamma(\mathbf{X}); i = 1, NN$$
(4.15)

Substituindo a equação (4.11) em (4.15) temos:

$$c(\boldsymbol{\xi}^{i})u(\boldsymbol{\xi}^{i}) = \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_{j}} u^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X}) \sum_{n=1}^{N} \varphi^{(n)} q^{(jn)} d\Gamma(\mathbf{X}) - \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_{j}} q^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X}) \sum_{n=1}^{N} \varphi^{(n)} u^{(jn)} d\Gamma(\mathbf{X})$$
(4.16)

Colocando as constantes fora das integrais obtemos para (4.16):

$$c(\boldsymbol{\xi}^{i})\boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\xi}^{i}) = \sum_{j=1}^{NE} \sum_{n=1}^{N} q^{(jn)} \int_{\Gamma_{j}} \boldsymbol{\mu}^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X}) \varphi^{(n)} d\Gamma(\mathbf{X}) - \sum_{j=1}^{NE} \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{\mu}^{(jn)} \int_{\Gamma_{j}} q^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X}) \varphi^{(n)} d\Gamma(\mathbf{X})$$
(4.17)

sendo:

$$g_n^{(ij)} = \int_{\Gamma_j} u^* \left(\boldsymbol{\xi}^i, \mathbf{X} \right) \phi^{(n)} d\Gamma(\mathbf{X})$$
(4.18)

$$\hat{h}_{n}^{(ij)} = \int_{\Gamma_{j}} q^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X}) \phi^{(n)} d\Gamma(\mathbf{X})$$
(4.19)

Os coeficientes $g_n^{(ij)}$ e $\hat{h}_n^{(ij)}$ são chamados de coeficientes de influência, quando o ponto fonte ξ está aplicado no ponto nodal funcional *i* e estamos integrando o elemento Γ_j . Como a este elemento podem pertencer N pontos nodais, dependendo do seu tipo (constante, linear, quadrático, etc), os coeficientes mencionados serão referenciados pelo número do ponto nodal funcional *n*.

Para o caso do presente trabalho, onde os elementos têm suas variáveis interpoladas linearmente, temos as seguintes integrais para n = 1:

$$g_1^{(ij)} = \int_{\Gamma_i} u^* \left(\boldsymbol{\xi}^i, \mathbf{X} \right) \phi^{(1)} d\Gamma(\mathbf{X})$$
(4.20a)

$$\hat{h}_{1}^{(ij)} = \int_{\Gamma_{j}} q^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X}) \phi^{(1)} d\Gamma(\mathbf{X})$$
(4.20b)

Os coeficientes $g_n^{(ij)}$ e $\overset{(ij)}{h_n}$ podem ser escritos em termos da coordenada adimensional η , que varia de -1 até 1, como:

$$g_n^{(ij)} = \int_{-1}^{1} u^* \left(\boldsymbol{\xi}^i, \mathbf{X} \right) \phi^{(n)} \left| J \right| d\eta, \quad \mathbf{X} \in \Gamma_j$$
(4.21)

$$\hat{h}_{n}^{(ij)} = \int_{-1}^{1} q^{*}(\boldsymbol{\xi}^{i}, \mathbf{X}) \phi^{(n)} |J| d\eta, \qquad \mathbf{X} \in \Gamma_{j}$$

$$(4.22)$$

Substituindo na equação (4.17) as integrais do contorno pelas suas respectivas denominações, esta pode ser escrita como:

$$c^{(i)}u^{(i)} + \sum_{j=1}^{NE} \sum_{n=1}^{N} \hat{h}_n^{(ij)} u^{(jn)} = \sum_{j=1}^{NE} \sum_{n=1}^{N} g_n^{(ij)} q^{(jn)}$$
(4.23)

Aplicando a equação (4.23) a todos os pontos nodais funcionais (i = 1, NN) no contorno, obtemos o seguinte sistema de equações:

$$\left(\mathbf{C} + \mathbf{\hat{H}}\right)\mathbf{u} = \mathbf{G}\mathbf{q} \tag{4.24}$$

onde C é uma matriz diagonal, contendo os coeficientes $c(\boldsymbol{\xi})$, que depende da geometria onde está aplicado o ponto fonte $\boldsymbol{\xi}$, $\mathbf{\hat{H}} \in \mathbf{G}$ são matrizes globais dos coeficientes de influência, $\mathbf{u} \in \mathbf{q}$ são vetores contendo os valores incógnitos e prescritos, dos potenciais e derivadas normais, respectivamente.

Somando as matrizes $\mathbf{\hat{H}} \mathbf{e} \mathbf{C}$ na expressão (4.24), temos:

$$\mathbf{H} \mathbf{u} = \mathbf{G} \mathbf{q} \tag{4.25}$$

a) Para condições de contorno constantes:

Pela simples troca de incógnitas e valores prescritos, formamos a matriz \tilde{A} , o vetor de incógnitas y e o vetor de valores prescritos f, formando o seguinte sistema de equações:

$$\mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{f} \tag{4.26}$$

Que resolvidos obtemos as incógnitas (potenciais e derivadas normais).

Isto fica mais evidente no exemplo abaixo:



Figura 4.2 - Exemplo para Condições de Contorno Constantes

Começando a integração a partir do 1° elemento e percorrendo o contorno com o domínio sempre à esquerda segundo o Teorema de Green, obtemos para a equação (4.23) as seguintes equações:

Considerando o ponto fonte no 1° elemento, temos para a 1ª equação:

$$\left(\frac{1}{2} + \hat{h}_{11}\right)u_1 + \hat{h}_{12}u_2 + \hat{h}_{13}u_3 + \hat{h}_{14}u_4 = g_{11}q_1 + g_{12}q_2 + g_{13}q_3 + g_{14}q_4$$
(4.27a)

ou,

$$\frac{1}{2}u(\xi^{1}) + \dot{h_{11}}u_{1} + \dot{h_{12}}u_{2} + \dot{h_{13}}u_{3} + \dot{h_{14}}u_{4} = g_{11}q_{1} + g_{12}q_{2} + g_{13}q_{3} + g_{14}q_{4}$$
(4.27b)

Considerando o ponto fonte agora no ponto nodal funcional do 2° elemento, temos para a 2^{a} equação do sistema:

$$\hat{h}_{21}u_1 + \left(\frac{1}{2} + \hat{h}_{22}\right)u_2 + \hat{h}_{23}u_3 + \hat{h}_{24}u_4 = g_{21}q_1 + g_{22}q_2 + g_{23}q_3 + g_{24}q_4$$
(4.28a)

ou,

$$\hat{h}_{21}u_1 + \frac{1}{2}u(\xi^2) + \hat{h}_{22}u_2 + \hat{h}_{23}u_3 + \hat{h}_{24}u_4 = g_{21}q_1 + g_{22}q_2 + g_{23}q_3 + g_{24}q_4$$
(4.28b)

Considerando o ponto fonte aplicado nos pontos nodais funcionais do 3º e 4º elementos e tendo em vista que:

$$h_{ij} = \hat{h}_{ij}$$
, para $i \neq j$ e
 $h_{ij} = \hat{h}_{ij} + 1/2$, para $i = j$

$$(4.29)$$

Chegamos na seguinte forma matricial:

$$\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} & h_{34} \\ h_{41} & h_{42} & h_{43} & h_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \bar{u}_2 \\ u_3 \\ \bar{u}_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} & g_{14} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} & g_{24} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & g_{34} \\ g_{41} & g_{42} & g_{43} & g_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{q}_1 \\ q_2 \\ \bar{q}_3 \\ q_4 \end{bmatrix}$$
(4.30)

Reordenando temos:

$$\begin{bmatrix} h_{11} & -g_{12} & h_{13} & -g_{14} \\ h_{21} & -g_{22} & h_{23} & -g_{24} \\ h_{31} & -g_{32} & h_{33} & -g_{34} \\ h_{41} & -g_{42} & h_{43} & -g_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ q_2 \\ u_3 \\ q_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & -h_{12} & g_{13} & -h_{14} \\ g_{21} & -h_{22} & g_{23} & -h_{24} \\ g_{31} & -h_{32} & g_{33} & -h_{34} \\ g_{41} & -h_{42} & g_{43} & -h_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{q}_1 \\ \bar{u}_2 \\ \bar{q}_3 \\ \bar{u}_4 \end{bmatrix}$$
(4.31)

b) Para condições de contorno com relação linear:

Considerando todos os elementos com relação linear obtemos o mesmo sistema de equações lineares como o anterior, ou seja, a equação (4.26), sendo:

$$Hu = Gq$$

$$q = Mu + b$$

$$Hu = G (Mu + b)$$

$$Hu - GMu = Gb$$

$$A = H - GM$$

$$f = Gb$$

$$(4.32)$$

onde **M** é uma matriz diagonal e **b** um vetor contendo o intercepto da relação linear entre $q_i e u_i (q_i = m_i u_i + b_i)$, conforme figura (4.3).



Figura 4.3 – Relação linear $q_i = m_i u_i + b_i$

Vamos analisar o seguinte exemplo: x_2

$$q_{4} = \bar{q_{4}}$$

$$q_{4} = \bar{q_{4}}$$

$$q_{4} = \bar{q_{4}}$$

$$q_{4} = \bar{q_{4}}$$

$$(4) \quad \nabla^{2} \phi = 0$$

$$(2) \quad u_{3} = \bar{u_{3}}$$

$$(3) \quad u_{1} = \bar{u_{1}}$$

$$(2) \quad x_{1}$$

Figura 4.4 – Exemplo para Condições de Contorno Lineares

Procedendo como anteriormente obtemos para a equação (4.23) as seguintes equações:

Para o ponto fonte aplicado no ponto funcional do 1° elemento ($m_2 = a, b_2 = b$):

$$\left(\frac{1}{2} + \dot{h_{11}}\right)u_1 + h_{12}u_2 + h_{13}u_3 + h_{14}u_4 = g_{11}q_1 + g_{12}(au_2 + b) + g_{13}q_3 + g_{14}q_4 \quad (4.33a)$$

ou,

$$h_{11}u_1 + \left(h_{12} - g_{12}a\right)u_2 + h_{13}u_3 + h_{14}u_4 = g_{11}q_1 + g_{12}b + g_{13}q_3 + g_{14}q_4$$
(4.33b)

Assim sendo obtemos para a 2ª equação do sistema:

$$h_{21}u_1 + (\frac{1}{2} + \dot{h}_{22})u_2 + h_{23}u_3 + h_{24}u_4 = g_{21}q_1 + g_{22}(au_2 + b) + g_{23}q_3 + g_{24}q_4 \quad (4.34a)$$

ou,

$$h_{21}u_1 + \left(h_{22} - g_{22}a\right)u_2 + h_{23}u_3 + h_{24}u_4 = g_{21}q_1 + g_{22}b + g_{23}q_3 + g_{24}q_4$$
(4.34b)

Integrando os elementos restantes, podemos colocar na seguinte forma matricial:

$$\begin{bmatrix} h_{11} & \left(h_{12} - g_{12} a\right) & h_{13} & h_{14} \\ h_{21} & \left(h_{22} - g_{22} a\right) & h_{23} & h_{24} \\ h_{31} & \left(h_{32} - g_{32} a\right) & h_{33} & h_{34} \\ h_{41} & \left(h_{42} - g_{42} a\right) & h_{43} & h_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ u_2 \\ \bar{u}_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} & g_{14} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} & g_{24} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & g_{34} \\ g_{41} & g_{42} & g_{43} & g_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ b \\ q_3 \\ \bar{q}_4 \end{bmatrix}$$
(4.35)

Reordenando temos:

$$\begin{bmatrix} -g_{11} & (h_{12} - g_{12} a) & -g_{13} & h_{14} \\ -g_{21} & (h_{22} - g_{22} a) & -g_{23} & h_{24} \\ -g_{31} & (h_{32} - g_{32} a) & -g_{33} & h_{34} \\ -g_{41} & (h_{42} - g_{42} a) & -g_{43} & h_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ u_2 \\ q_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -h_{11} & g_{12} & -h_{13} & g_{14} \\ -h_{21} & g_{22} & -h_{23} & g_{24} \\ -h_{31} & g_{32} & -h_{33} & g_{34} \\ -h_{41} & g_{42} & -h_{43} & g_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ b \\ \bar{u}_3 \\ \bar{q}_4 \end{bmatrix} (4.36)$$

E finalmente a equação (4.26) se repete.

c) Condições de contorno com relação não linear para todos os nós funcionais:

$$q_i = f_i(u_i) \text{ ou } q = f(u)$$
 (4.37)

Onde f_i() é uma função não linear fornecida.

No Método dos Elementos de Contorno, por diversas vezes nos deparamos com condições de contorno não lineares. Esta situação é corriqueira principalmente quando lidamos com problemas de distribuição de potencial e de fluxo, sejam eles de calor, elétrico, etc... Isto introduz considerável complexidade para a resolução numérica de tais sistemas de equações.

Para a resolução destes sistemas de equações empregamos o Método de Newton-Raphson. A equação de recorrência desse método é obtida procedendo-se de maneira análoga à empregada a equação de recorrência do Método de Newton-Raphson para uma equação.

Assim sendo desenvolvemos a função f(x) em série de Taylor em torno da solução x^{k} , ou seja:

$$f_i(\mathbf{x}) = f_i(\mathbf{x}^k) + \frac{\partial f_i(\mathbf{x}^k)}{\partial x_j} (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_j^k)$$
(4.38a)

onde $\mathbf{x} \in \mathbf{x}^k$ são os vetores solução; $x_j \in x_j^k$ são seus coeficientes e o superíndice k indica a k-ésima iteração.

Aplicando a função (4.38a) para o ponto \mathbf{x}^{k+1} temos,

$$f_i(\mathbf{x}^{k+1}) = f_i(\mathbf{x}^k) + \frac{\partial f_i(\mathbf{x}^k)}{\partial x_j} (\mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^k)$$
(4.38b)

ou na forma matricial:

$$f(\mathbf{x}^{k+1}) = f(\mathbf{x}^{k}) + \mathbf{F}(\mathbf{x}^{k})(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^{k})$$
(4.38c)

sendo **F** uma matriz com coeficientes $f_{ij} = \frac{\partial f_i(\mathbf{x}^k)}{\partial x_j}$.

A equação (4.25) pode ser escrita na seguinte forma recursiva:

$$\mathbf{H}\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{G}\mathbf{f}\left(\mathbf{x}^{k+1}\right) = \mathbf{0}; \quad \mathbf{x} = \mathbf{u}$$
(4.39)

Substituindo a equação (4.38c) na equação (4.39) temos.

$$\mathbf{H}\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{G}\left[\mathbf{f}\left(\mathbf{x}^{k}\right) + \mathbf{F}^{k}\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{F}^{k}\mathbf{x}^{k}\right] = 0$$
(4.40)

onde $F^k = F(\mathbf{x}^k)$.

Agrupando os termos, a equação (4.40) fica:

$$\left[\mathbf{H} - \mathbf{G}\mathbf{F}^{k}\right]\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{G}\mathbf{f}\left(\mathbf{x}^{k}\right) - \mathbf{G}\mathbf{F}^{k}\mathbf{x}^{k}$$

$$(4.41)$$

ou,

$$\mathbf{A}^k \cdot \Delta \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{f}^k \tag{4.42a}$$

onde

$$\mathbf{A}^{k} = \mathbf{H} - \mathbf{G}\mathbf{F}^{k} \quad \mathbf{e}$$
(4.42b)
$$\mathbf{f}_{1}^{k} = \mathbf{G}\mathbf{f}(\mathbf{x}^{k}) - \mathbf{G}\mathbf{F}^{k}\mathbf{x}^{k}$$

Expandindo a equação (4.41) e considerando $\Delta \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^{k}$, podemos escrevê-la da seguinte forma:

$$\mathbf{A}^k \Delta \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{f}_2^k \tag{4.43a}$$

sendo,

$$\mathbf{f}_2^k = \mathbf{G}\mathbf{f}(\mathbf{x}^k) - \mathbf{H}\mathbf{x}^k \tag{4.43b}$$

Vejamos agora o seguinte exemplo:

$$q_{4} = cu_{4}^{2} + du_{4}^{3}$$

$$Q_{4} = cu_{4}^{3} + du_{4}^{3} + du_{4}^{3}$$

$$Q_{4} = cu_{4}^{3} + du_{4}^{3} +$$

Figura 4.4 – Exemplo para Condições de Contorno Não Lineares Utilizando o mesmo procedimento anterior, obtemos para a equação (4.23) as seguintes equações:

$$h_{11}\bar{u}_{1} + h_{12}u_{2} + h_{13}u_{3} + h_{14}u_{4} = g_{11}q_{1} + g_{12}(au_{2} + b) + g_{13}\bar{q}_{3} + g_{14}(cu_{4}^{2} + du_{4}^{3})$$

$$h_{21}\bar{u}_{1} + h_{22}u_{2} + h_{23}u_{3} + h_{24}u_{4} = g_{21}q_{1} + g_{22}(au_{2} + b) + g_{23}\bar{q}_{3} + g_{24}(cu_{4}^{2} + du_{4}^{3})$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

Ao voltarmos à equação (4.36), podemos descrever $f(\mathbf{x}^k)$ como:

$$f_{1}(q_{1},u_{2},u_{3},u_{4}) = -h_{11}\bar{u}_{1} - h_{12}u_{2} - h_{13}u_{3} - h_{14}u_{4} + g_{11}q_{1} + g_{12}(au_{2}+b) + g_{13}\bar{q}_{3} + g_{14}(cu_{4}^{2}+du_{4}^{3})$$

$$f_{2}(q_{1},u_{2},u_{3},u_{4}) = -h_{21}\bar{u}_{1} - h_{22}u_{2} - h_{23}u_{3} - h_{24}u_{4} + g_{21}q_{1} + g_{22}(au_{2}+b) + g_{23}\bar{q}_{3} + g_{24}(cu_{4}^{2}+du_{4}^{3})$$

$$\cdot$$

$$\cdot$$

$$\cdot$$

$$\cdot$$

$$\cdot$$

$$\cdot$$

$$\cdot$$

$$\cdot$$

Na forma matricial e recursiva, $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ da equação (4.45), considerando o vetor solução $\mathbf{x}^{T} = (q_1, u_2, u_3, u_4)$, pode ser escrita como:

$$\mathbf{f}(x) = -\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} & h_{34} \\ h_{41} & h_{42} & h_{43} & h_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ u_2^k \\ u_3^k \\ u_4^k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} & g_{14} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} & g_{24} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & g_{34} \\ g_{41} & g_{42} & g_{43} & g_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1^k \\ q_2^k \\ \bar{q}_3 \\ q_4^k \end{bmatrix} (4.46)$$

Onde,

$$q_{2}^{k} = q_{2}(u_{2}^{k}) = au_{2}^{k} + b$$

$$q_{4}^{k} = q_{4}(u_{4}^{k}) = cu_{4}^{2} + du_{4}^{3}$$
(4.47)

 \mathbf{A}^k por sua vez, para o exemplo citado acima em sua forma matricial é apresentado abaixo:

$$\mathbf{A}^{k} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} & h_{34} \\ h_{41} & h_{42} & h_{43} & h_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} & g_{14} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} & g_{24} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & g_{34} \\ g_{41} & g_{42} & g_{43} & g_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial q_2(u_2^{k})}{\partial u_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial q_2(u_2^{k})}{\partial u_2} \end{bmatrix}$$
(4.48)

Reparar que o valor 0 aparece no vetor que multiplica a matriz **H** devido à prescrição do valor de potencial para o 1º elemento. O mesmo valor aparece no vetor de derivadas que multiplica a matriz **G**, pois o valor de fluxo para o 3º elemento é constante.

Por conseguinte, na forma geral, temos que resolver o sistema de equações:

$$\mathbf{A}^{\mathbf{k}} \Delta \mathbf{x}^{\mathbf{k}+1} = \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \tag{4.49}$$

Sendo:

$$\Delta \mathbf{x}^{k+1} = \begin{bmatrix} \Delta q_1^{k+1} \\ \Delta u_2^{k+1} \\ \Delta u_3^{k+1} \\ \Delta u_4^{k+1} \end{bmatrix}$$
(4.50)

O vetor solução é então calculado para (k+1)-ésima iteração como:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \Delta \mathbf{x}^{k+1} \tag{4.51}$$

O vetor \mathbf{x}^{k+1} corresponde às respostas do problema quando o passo k+1 atende ao critério de convergência do método interativo.

Para a implementação numérica podemos simplificar o Método de Newton-Raphson no algoritmo descrito a seguir:

$$k = 0$$

$$x^{0} = 0$$
Calcular $\mathbf{f}^{k} = \mathbf{f}(\mathbf{u}^{k}, \mathbf{q}^{k})$
Calcular $\mathbf{A}^{k} = \mathbf{A}(\mathbf{u}^{k}, \mathbf{q}^{k})$
Resolver o sistema $\mathbf{A}^{k} \Delta \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{f}^{k}$
Calcular $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^{k} + \Delta \mathbf{x}^{k+1}$
Calcular o erro relativo $\mathbf{e}_{r}^{k+1} = \frac{|\Delta \mathbf{x}^{k+1}|}{|\mathbf{x}^{k+1}|}$
Se $\mathbf{e}_{r}^{k+1} < \text{tolerância} \longrightarrow \mathbf{x}^{k} = \mathbf{x}^{k+1} \longrightarrow \text{FIM}$
obter $\mathbf{u}^{k} \in \mathbf{q}^{k}$ a partir de \mathbf{x}^{k}

$$k = k+1$$

Assim podemos calcular valores de potencial e fluxo para quaisquer condições de contorno, sejam elas constantes, lineares ou não lineares.

No item a seguir implementamos o Método dos Elementos de Contorno como parte de um Algoritmo Genético.

O Método dos Elementos de Contorno é empregado para testar ou verificar se possíveis soluções encontradas pelo Algoritmo Genético, são de fato as respostas para o problema em questão.

4.2.2 - Implementação Numérica para o Método dos Algoritmos Genéticos

Com o intuito de demonstrar como foi implementado numericamente o Algoritmo Genético acoplado ao Método dos Elementos de Contorno para a resolução de uma análise inversa de detecção de parâmetros para uma curva não-linear, faz-se necessário a apresentação das principais sub-rotinas criadas para o programa principal, cujo desenvolvimento foi alvo do estudo agora dissertado.

• <u>Sub-rotina "Gerapopulação"</u>:

Após a leitura dos parâmetros básicos para um problema de potencial a ser resolvido pelo Método dos Elementos de Contorno, onde os dados de geometria são indispensáveis, montamos as já discutidas matrizes **H** e **G**.

Utilizamos o Método dos Elementos de Contorno como método de cálculo para a análise inversa para a determinação de parâmetros. As matrizes **H** e **G** por representarem apenas a geometria do contorno, permanecem constantes ao longo do processo iterativo.

As condições de contorno entretanto, caso sejam lineares e não lineares variam de "cromossomo" para "cromossomo" (possíveis soluções como já abordado no Capítulo 3), e devem ser atualizadas constantemente, a cada rodada do MEC.

A sub-rotina "Gerapopulação" é responsável pela geração randômica dos cromossomos da 1ª geração que irá inicializar a análise. O número de cromossomos ou indivíduos por geração (Np) deve ser determinado pelo usuário.

Para a 1^a geração, usamos a função de geração de números aleatórios entre 0 e 1 "random seed" intrínseca ao compilador Fortran 90. A quantidade de números aleatórios gerados depende do número de bits por cromossomo (Nbc). Nbc é calculado em função do número de parâmetros incógnitos (variáveis), domínio de cada parâmetro e da precisão requerida na análise. Caso o número aleatório gerado seja < 0.5, damos a ele o valor binário 0. Caso contrário o número na posição deste bit recebe o valor 1.

Assim a sub-rotina "Gerapopulação" forma a 1^a geração de Np cromossomos compostos por Nbc bits.

Na 1^a geração o programa calcula por meio dos parâmetros presentes em cada cromossomo, Np respostas para a geometria do problema proposto. Em seguida essas respostas em forma de potencial são comparadas aos valores "observados", que na verdade são valores obtidos de uma análise direta com os parâmetros que agora queremos encontrar.

Neste instante aplicamos a função objetiva Z_k (u). Para este estudo a função escolhida foi:

$$Z_{k} = \frac{100}{\sum_{i=1}^{L} \left| \frac{u_{i}^{k} - \bar{u_{i}}}{\bar{u_{i}}} \right|}; \quad k = 1, 2, \dots \text{ Np } e \quad 0 \le Z_{k} \le 100 \quad (4.52)$$

Onde u_i^k é o valor calculado pelo MEC para potencial, $\bar{u_i}$ o valor retirado da análise direta ("observado") realizada a priori e L é o número de pontos observados. A função foi definida de tal forma que abreviasse a convergência do algoritmo, por valorizar as melhores respostas significativamente. A potência de *e* foi limitado a 625, para não haver desnecessários custos computacionais com respostas muito ruins.

Cada cromossomo então possui um valor para a função objetiva. Quanto melhor a resposta, maior o valor da função objetiva (máximo valor = 100).

Tendo sido avaliada a 1ª população de cromossomos, podemos passar para a sub-rotina seguinte, "Reprodução".

• <u>Sub-rotina "Reprodução"</u>:

Após passar pela avaliação da função objetiva, cada cromossomo possui uma probabilidade acumulada. Este passo é essencial para a sub-rotina "Reprodução".

$$Pacum = \frac{Eval(i)}{\sum_{i=1}^{N_p} Eval(i)}$$
(4.53)

Esta sub-rotina é responsável por selecionar os indivíduos que irão compor a próxima geração. É nesta etapa que usamos a "roleta de probabilidades", descrita no Capítulo 3 desta dissertação.

A "roleta de probabilidades" nada mais é que a simples geração de Np números aleatórios entre 0 e 1.

Os indivíduos são organizados por ordem de geração. Será selecionado aquele que tiver a probabilidade acumulada imediatamente inferior ao número entre 0 e 1 gerado pela função randômica intrínseca "random seed". Normalmente os cromossomos cm melhor avaliação da função objetiva apresentam maior probabilidade acumulada e por sua vez maior probabilidade de serem selecionados para a próxima geração. Entretanto como o processo é aleatório, indivíduos menos aptos (com valores relativamente baixos para a função objetiva) também podem ser selecionados, sendo este um dos fatores que evita a convergência prematura do algoritmo para máximos locais.

Outras sub-rotinas que simulam operadores "genéticos" são empregados para este fim e são utilizadas imediatamente após a nova população estar formada.

As subrotinas "Crossover" e "Mutação" são descritas a seguir.

• <u>Sub-rotina "Crossover":</u>

O "fenômeno genético" que ocorre nesta sub-rotina, já foi explicado anteriormente no Capítulo 3.

52

Numericamente, trata-se da geração de Np números aleatórios. Todos os *ncrco* (número de cromossomos selecionados para o crossover) cromossomos desta população cujo respectivo número aleatório gerado entre 0 e 1 é menor que *Pc* (probabilidade de "crossover") são selecionados.

Os pares de cromossomos são então ordenados por ordem de seleção (crescente de *Np*). Caso *ncrco* seja ímpar, o último cromossomo será descartado.

Uma vez formados os pares e considerando que haverá apenas um "crossover" por par, nos deparamos com a seguinte questão: a partir de que posição ocorrerá o "crossover"? Esta questão é resolvida partindo do princípio que temos *Nbc-1* posições para selecionar. Fazemos novamente uma geração aleatória de números truncados agora entre 1 e *Nbc-1*. A posição selecionada é aquela que corresponde ao número aleatório gerado.

Esta sub-rotina uma vez empregada acarreta mudanças radicais nos cromossomos desta população, e por conseqüência nos valores encontrados como parâmetros para as curvas de polarização não-lineares, fazendo com que muitas vezes, partes de soluções a priori muito ruins, sejam aproveitadas, criando assim novos cromossomos mais aptos que os anteriores. Outro fato benéfico gerado por esta sub-rotina é que, pela miscigenação dos cromossomos, um cromossomo muito melhor que os outros, não é repetido diversas vezes numa população seguinte. Isto evita a convergência prematura do algoritmo.

• Sub-rotina Mutação:

Outro operador "genético" já discutido também no Capítulo 3, é a Mutação.

Numericamente trata-se novamente da geração aleatória de $Nbc \ x \ Np$ números aleatórios entre 0 e 1. Valor este correspondente ao número de bits de uma população inteira. Os bits correspondentes aos números aleatórios gerados menores que Pm (probabilidade de haver mutação) deverão simplesmente passar a 0 se forem 1 ou vice-versa.

Após esta sub-rotina, a nova população ou geração, já alterada "geneticamente", tem seus valores correspondentes aos parâmetros das curvas não-lineares atualizados.

Aplicamos então as sub-rotinas inerentes aos cálculos do Método dos Elementos de Contorno como descritos na sub-rotina "*Gerapopulação*".

Os valores de potencial obtidos para o contorno e para o domínio da região estudada são comparados com os valores "observados" a priori, oriundos da análise direta, que teve os parâmetros da curva de polarização aplicados e que agora buscamos como forma de validar o algoritmo desta dissertação.

As respostas (cromossomos) recebem então nova avaliação e o processo re-começa até a N-ésima (*Nger*) geração, critério este usado como parada.

Uma vez que o processo é heurístico, a melhor solução pode estar em qualquer uma das gerações, e não necessariamente nas últimas.

A estrutura do algoritmo genético implementado, é representado de forma resumida e esquemática a seguir.

Algoritmo Genético

(*Np* = Tamanho da População por Geração)

(*Nger* = Número de Gerações)

(*Nv* = Número de variáveis incógnitas)

(Prec = Precisão Requerida)

(Nbc = Número de bits por cromossomo)

Início

Sub-rotina "Gerapopulação"

(Cria os primeiros Np cromossomos aleatoriamente - Função "Random Seed")

(Avalia a qualidade de cada cromossomo - Função Objetiva)

(Seleciona os "pais" proporcionalmente ao valor avaliado – Roleta de Probabilidades)

– End Do

Sub-rotina "Reprodução"

— Do j = 1, *Np*

(Seleciona os "pais" proporcionalmente ao valor avaliado – Roleta de Probabilidades)

End Do

- Do j = 1, *Np*

Sub-rotina "Crossover"

(Aplica a probabilidade de crossover -Pc – nos cromossomos reproduzidos)

— End Do

— Do j = 1, *Np*

Sub-rotina "Mutação"

(Aplica a probabilidade de mutação - Pm - aos bits dos cromossomos reproduzidos)

End Do

(Avalia a qualidade de cada cromossomo - Função Objetiva)

(Retorna o maior valor)

End Do

Stop / End

Podemos resumir o algoritmo completo, incluído o Método dos Elementos de Contorno como meio de avaliar a qualidade das respostas encontradas pelo Algoritmo Genético da seguinte forma:



Figura 4.5 – Fluxograma do Algoritmo Implementado

Capítulo 5 - Aplicação Numérica

5.1 - Introdução

Fazemos a aplicação da metodologia apresentada nos capítulos anteriores com exemplos bidimensionais, simulando tanques retangulares, ora contendo um eletrólito fictício (domínio finito), ora envolvido por ele (domínio infinito).

Por se tratar de exemplos meramente acadêmicos, como dito anteriormente no capítulo 4, este eletrólito apresenta a condutividade elétrica $k = 1 \Omega^{-1}$.cm⁻¹.

Executamos as aplicações para condições lineares, do tipo $i(\phi) = \alpha \phi + \beta$, onde $\alpha \in \beta$ são escolhidos aleatoriamente, de modo que os valores de potenciais eletroquímicos e densidades de corrente não estivessem muito longe da realidade.

Para todos os exemplos com condições de contorno lineares, adotamos como valores observados, os potenciais eletroquímicos oriundos de análises diretas, cujos parâmetros estão descritos a seguir:

Para a parte catódica adotamos:

- $\alpha = -3.000 \ 1/\Omega \ cm^2$
- $\beta = -2.500 \text{ A/cm}^2$

Para a parte anódica adotamos:

- $\alpha = 1.500 \ 1/\Omega \ cm^2$
- $\beta = 0.800 \text{ A/cm}^2$

Para as aplicações não lineares, foi escolhida a função exponencial presente em [13,28]. Para o tempo constante temos:

$$i(\phi) = 0.0605 + 10^{-4} \times \left(10^{\left(-\frac{A+\phi}{B} \right)} - 10^{\left(\frac{C+\phi}{D} \right)} \right)$$
(5.1)

Para todos os exemplos com condições de contorno não lineares, adotamos como valores observados, os potenciais eletroquímicos oriundos de análises diretas, cujos parâmetros adotados para a curva de polarização (5.1), estão descritos a seguir:

- A = 0.417
- B = 0.217
- C = 1.021
- D = 0.121

Adotando tais valores, a curva de polarização é mostrada na figura (5.1) a seguir:



Figura 5.1 – Curva de Polarização

Assim sendo quando da execução das análises inversas, temos o objetivo de encontrar parâmetros A, B, C e D que descrevam esta curva o mais próximo possível, e que a distribuição de potenciais seja a mesma da análise direta.

Para cada exemplo variamos alguns parâmetros necessários para a análise como a Probabilidade de Crossover (Pc), a Probabilidade de Mutação (Pm), o Número de Pontos Observados e o Domínio de cada parâmetro da curva de polarização.

Os valores aplicados para Pc e Pm foram escolhidos após inúmeras tentativas, necessárias para se adquirir sensibilidade nas execuções das análises.

O número de pontos observados foi variado com o intuito de analisar a sua influência na precisão da convergência do algoritmo.

Já o domínio foi contraído e expandido de modo a diminuir e aumentar o espaço de busca do algoritmo genético para cada parâmetro.

Os exemplos são descritos e ilustrados a seguir.

5.2 - Tanque Retangular com Condições de Contorno Lineares

Neste exemplo fazemos a aplicação numérica com o intuito de obtermos as curvas de polarização lineares aplicadas ao problema. Uma para a parte anódica e outra para a parte catódica.

O modelo foi propositalmente elaborado com número reduzido de elementos. Assim podemos estudar a influência do número de gerações, do número de cromossomos por população e ainda, da expansão do domínio aumentando o espaço de busca do algoritmo, uma vez que o custo computacional é proporcionalmente reduzido.

Como condições de contorno, consideramos além das condições lineares, a condição de isolamento eletro-químico (i = 0 A). Assim forçamos a densidade de corrente fluir da parte anódica para a parte catódica.

O exemplo citado encontra-se descrito a seguir.



Figura 5.2 – Tanque Retangular com condições de contorno lineares

1ª Análise:

- Número de Elementos: 12
- Número de Pontos Observados no Contorno: 3
- Número de Pontos Observados no Domínio: 10
- Número de Cromossomos por Geração: 50
- Número de Gerações: 1000
- Probabilidade de Crossover (Pc): 80%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 1.5%
- Precisão: 10⁻³

Para a parte catódica:

- Domínio parâmetro α: [-4.000; -2.500]
- Domínio parâmetro β: [-3.000; -2.000]

Para a parte anódica:

- Domínio parâmetro α: [1.000; 2.000]
- Domínio parâmetro β: [0.500; 1.000]



Figura 5.3 – Convergência do Algoritmo Genético para a 1ª análise



Figura 5.4 – Convergência para o parâmetro β da parte catódica na 1^a análise



Figura 5.5 – Convergência para o parâmetro α da parte catódica na 1^a análise



Figura 5.6 – Convergência para o parâmetro β da parte anódica na 1^a análise


Figura 5.7 – Convergência para o parâmetro α da parte anódica na 1^a análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (99.77) na geração 514. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

Para a parte catódica:

- $\alpha = -2.856$
- $\beta = -2.583$

Para a parte anódica:

- $\alpha = 1.544$
- $\beta = 0.812$



Figura 5.8 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.9 – Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada (GA)

2^a Análise:

- Número de Elementos: 12
- Número de Pontos Observados no Contorno: 3
- Número de Pontos Observados no Domínio: 2
- Número de Cromossomos por Geração: 50
- Número de Gerações: 1000
- Probabilidade de Crossover (*Pc*): 80%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 1.5%
- Precisão: 10⁻³

Para a parte catódica:

- Domínio parâmetro α: [-5.000; -1.000]
- Domínio parâmetro β: [-6.000; -0.500]

Para a parte anódica:

- Domínio parâmetro α: [0.500; 6.000]
- Domínio parâmetro β: [0.500; 5.000]

Obtivemos então, os seguintes resultados:



Figura 5.10 – Convergência do Algoritmo Genético para a 2ª análise



Figura 5.11 – Convergência para o parâmetro β da parte catódica na 2^a análise



Figura 5.12 – Convergência para o parâmetro α da parte catódica na 2^a análise



Figura 5.13 – Convergência para o parâmetro β da parte anódica na 2^a análise



Figura 5.14 – Convergência para o parâmetro α da parte anódica na 2^a análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (74.80) na geração 474. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

Para a parte catódica:

- $\alpha = -3.036$
- $\beta = -2.788$

Para a parte anódica:

- $\alpha = 5.286$
- $\beta = 2.645$



Figura 5.15 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.16 – Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada (GA)

Para a 3^a análise com este exemplo, aumentamos Pc e Pm.

3ª Análise:

- Número de Elementos: 12
- Número de Pontos Observados no Contorno: 3
- Número de Pontos Observados no Domínio: 2
- Número de Cromossomos por Geração: 50
- Número de Gerações: 1000
- Probabilidade de Crossover (*Pc*): 90%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 2.5%
- Precisão: 10⁻³

Para a parte catódica:

- Domínio parâmetro α: [-5.000; -1.000]
- Domínio parâmetro β: [-6.000; -0.500]

Para a parte anódica:

- Domínio parâmetro α: [0.500; 6.000]
- Domínio parâmetro β: [0.500; 5.000]

Obtivemos então, os seguintes resultados:



Figura 5.17 – Convergência do Algoritmo Genético para a 3ª análise



Figura 5.18 – Convergência para o parâmetro β da parte catódica na 3^a análise



Figura 5.19 – Convergência para o parâmetro α da parte catódica na 3^a análise



Figura 5.20 – Convergência para o parâmetro β da parte anódica na 3^a análise



Figura 5.21 – Convergência para o parâmetro α da parte anódica na 3^a análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (79.19) na geração 600. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

Para a parte catódica:

- $\alpha = -5.932$
- $\beta = -3.778$

Para a parte anódica:

- $\alpha = 3.524$
- $\beta = 1.669$



Figura 5.22 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.23 – Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada

(GA)

Tanque Retangular Linear				
DADOS	ANALISE 1	ANALISE 2	ANALISE 3	
Nº Elementos	12	12	12	
Nº Pts.Obs.Contorno	3	3	3	
Nº Pts.Obs.Domínio	10	2	2	
N° Cromossomos/Geração	50	50	50	
Nº Gerações	1000	1000	1000	
P. Crossover (%)	80	80	90	
Prob. Mutação (%)	1.5	1.5	2.5	
Domínio Par. Catódico α	[-4.000; -2.500]	[-5.000; -1.000]	[-5.000; -1.000]	
Domínio Par. Catódico β	[-3.000; -2.000]	[-6.000; -0.500]	[-6.000; -0.500]	
Domínio Par. Anódico α	[1.000; 2.000]	[0.500; 6.000]	[0.500; 6.000]	
Domínio Par. Anódico β	[0.500; 1.000]	[0.500; 5.000]	[0.500; 5.000]	
Precisão	10e-3	10e-3	10e-3	
RESPOSTAS				
Geração Melhor Resposta	514	474	600	
Melhor Resposta	99.77	74.80	79.19	
Parâmetro Catódico α	-2.856	-3.036	-5.932	
Parâmetro Catódico β	-2.583	-2.788	-3.778	
Parâmetro Anódico α	1.544	5.286	3.524	
Parâmetro Anódico β	0.812	2.645	1.669	
Domínio Par. Catódico αDomínio Par. Catódico βDomínio Par. Anódico αDomínio Par. Anódico βPrecisãoRESPOSTASGeração Melhor RespostaMelhor RespostaParâmetro Catódico αParâmetro Catódico βParâmetro Anódico αParâmetro Anódico β	[-4.000, -2.300] [-3.000; -2.000] [1.000; 2.000] [0.500; 1.000] 10e-3 514 99.77 -2.856 -2.583 1.544 0.812	[-5.000, -1.000] [-6.000; -0.500] [0.500; 6.000] [0.500; 5.000] 10e-3 474 74.80 -3.036 -2.788 5.286 2.645	[-5.000, -1.0 [-6.000; -0.5 [0.500; 6.00 [0.500; 5.00 10e-3 600 79.19 -5.932 -3.778 3.524 1.669	

Tabela 5.1 – Resumo das Análises para o 1º Exemplo Linear

Neste primeiro exemplo pudemos verificar que:

- Com o domínio mais contraído, melhores respostas são alcançadas para os parâmetros em questão;
- A variação de *Pc* e *Pm* causou convergência para valores maiores da função objetiva na 3ª análise em relação à 2ª;

• O número de gerações pouco influiu no alcance das melhores respostas, uma vez que estas, a partir das 100 primeiras gerações, oscilaram muito pouco;

• Em nenhuma das análises para este primeiro exemplo encontramos valores exatos para os parâmetros $\alpha \in \beta$, tanto para a parte anódica quanto para a catódica. Entretanto encontramos condições de contorno lineares bastante próximas às condições originais na 1^a análise, mesmo com poucos elementos modelados, as distribuições de potencial e densidade de corrente mostraram-se bem próximas das originais;

• O mesmo não podemos dizer da 2^a e 3^a análises, uma vez que muito provavelmente pela pobreza no refinamento da malha de elementos de contorno, e

expansão do domínio, obtivemos resultados ruins para as distribuições de potencial e densidade.

É importante ressaltar que maior ênfase foi dada aos exemplos seguintes, para condições de contorno não lineares, que apesar de meramente acadêmicos, aproximam-se bastante de problemas reais.

O exemplo para condições lineares foi utilizado para ganharmos sensibilidade na aplicação da metodologia e assim melhor desenvolver estudos mais complexos como os discutidos em seguida.

5.3 - Tanque Retangular com Condições de Contorno Não Lineares e Domínio Finito

Neste exemplo fazemos a aplicação numérica com o intuito de obtermos as curvas de polarização não lineares que contornam o problema descrito na figura 5.4a.

Analisamos este exemplo três vezes. Cada uma das análises encontra-se descrita com os respectivos parâmetros utilizados.

1ª Análise:



Figura 5.24 - Tanque Retangular Não Linear

- Número de Elementos: 130
- Número de Pontos Observados no Contorno: 35
- Número de Pontos Observados no Domínio: 20
- Número de Cromossomos por Geração: 34
- Número de Gerações: 100
- Probabilidade de Crossover (*Pc*): 75%

- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 1%
- Domínio parâmetro A: [0.150; 0.650]
- Domínio parâmetro B: [0.050; 0.650]
- Domínio parâmetro C: [0.450; 1.500]
- Domínio parâmetro D: [0.050; 0.650]
- Precisão: 10⁻⁴

Obtivemos os seguintes resultados:



Figura 5.25 – Convergência do Algoritmo Genético para a 1ª análise



Figura 5.26 – Convergência para o parâmetro A na 1ª análise



Figura 5.27 – Convergência para o parâmetro B na 1ª análise



Figura 5.28 – Convergência para o parâmetro C na 1ª análise



Figura 5.29 – Convergência para o parâmetro D na 1ª análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (95.65) na geração 69. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

- A = 0.341
- B = 0.210
- C = 1.089
- D = 0.145



Figura 5.30 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.31 – Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada (GA)

2ª Análise:



Figura 5.32 – Tanque Retangular Não Linear

- Número de Elementos: 130
- Número de Pontos Observados no Contorno: 35
- Número de Pontos Observados no Domínio: 2
- Número de Cromossomos por Geração: 60
- Número de Gerações: 100
- Probabilidade de Crossover (*Pc*): 90%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 2.5%
- Domínio parâmetro A: [0.200; 0.650]
- Domínio parâmetro B: [0.050; 0.550]
- Domínio parâmetro C: [0.650; 1.250]
- Domínio parâmetro D: [0.050; 0.350]
- Precisão: 10⁻⁴

Obtivemos os seguintes resultados:



Figura 5.33 – Convergência do Algoritmo Genético para a 2ª análise



Figura 5.34 – Convergência para o parâmetro A na 2ª análise



Figura 5.35 – Convergência para o parâmetro B na 2ª análise



Figura 5.36 – Convergência para o parâmetro C na 2ª análise



Figura 5.37 – Convergência para o parâmetro D na 2ª análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (99.60) na geração 20. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

- A = 0.397
- B = 0.524
- C = 0.979
- D = 0.105



Figura 5.38 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.39 - Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada

(GA)

Com o intuito de observar e tentar melhor compreender o comportamento da análise inversa e do algoritmo empregado para resolvê-la, realizamos uma 3ª análise, onde reduzimos drasticamente o número de pontos com potenciais observados e as posições observadas, e ainda para dificultar a convergência do algoritmo genético, expandimos os domínios das variáveis.



3^a Análise:

Figura 5.40 – Tanque Retangular Não Linear

- Número de Elementos: 130
- Número de Pontos Observados no Contorno: 5
- Número de Pontos Observados no Domínio: 2
- Número de Cromossomos por Geração: 34
- Número de Gerações: 100
- Probabilidade de Crossover (*Pc*): 90%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 2.5%
- Domínio parâmetro A: [0.050; 2.000]
- Domínio parâmetro B: [0.050; 2.000]

- Domínio parâmetro C: [0.050; 2.000]
- Domínio parâmetro D: [0.050; 2.000]
- Precisão: 10⁻⁴

Obtivemos os seguintes resultados:



Figura 5.41 – Convergência do Algoritmo Genético para a 3ª análise



Figura 5.42 – Convergência para o parâmetro A na 3ª análise



Figura 5.43 – Convergência para o parâmetro B na 3ª análise



Figura 5.44 – Convergência para o parâmetro C na 3ª análise



Figura 5.45 – Convergência para o parâmetro D na 3ª análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (99.96) na geração 68. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

- A = 1.102
- B = 0.501
- C = 1.547
- D = 0.340



Figura 5.46 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.47 – Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada (GA)

Tanque Retangular Não Linear				
DADOS	ANALISE 1	ANALISE 2	ANALISE 3	
Nº Elementos	130	130	130	
Nº Pts.Obs.Contorno	35	35	5	
Nº Pts.Obs.Domínio	20	2	2	
N° Cromossomos/Geração	34	60	34	
Nº Gerações	100	100	100	
P. Crossover (%)	75	90	90	
Prob. Mutação (%)	1	2.5	2.5	
Domínio Par. A	[0.150; 0.650]	[0.200; 0.650]	[0.050; 2.000]	
Domínio Par. B	[0.050; 0.650]	[0.050; 0.550]	[0.050; 2.000]	
Domínio Par. C	[0.450; 1.500]	[0.650; 1.250]	[0.050; 2.000]	
Domínio Par. D	[0.050; 0.650]	[0.050; 0.350]	[0.050; 2.000]	
Precisão	10e-4	10e-4	10e-4	
RESPOSTAS				
Geração Melhor Resposta	69	20	68	
Melhor Resposta	95.65	99.60	99.96	
Parâmetro A	0.341	0.397	1.102	
Parâmetro B	0.210	0.524	0.501	
Parâmetro C	1.089	0.979	1.547	
Parâmetro D	0.145	0.105	0.340	

Tabela 5.2 - Resumo das Análises para o 1º Exemplo Não Linear

Neste exemplo pudemos verificar que:

• Os pontos internos não influem na resposta, uma vez que são calculados a partir dos pontos do contorno;

• A variação de *Pc* e *Pm* causou convergência para valores maiores da função objetiva e de maneira mais constante. Um valor muito alto para *Pm*, pode fazer com que o algoritmo perca sua característica de tendência à melhorar na avaliação das respostas, uma vez que funcionaria como um algoritmo de tentativa e erro;

• O número de pontos observados influenciou no valor para a função objetiva. Quanto maior o número de pontos observados, maior a chance de se encontrar potenciais exatos para aqueles elementos. Dependendo da diferença dos números de pontos de observados não necessariamente significa obtermos melhor resposta como podemos observar na figuras (5.46) e (5.47);

• Em nenhuma das análises para este exemplo encontramos valores exatos para os parâmetros A, B, C e D. Entretanto encontramos curvas bastante próximas a curva de polarização original, que fez com que as distribuições de potenciais e de densidade de corrente nos elementos do contorno ficassem muito próximas das

distribuições encontradas originalmente na análise direta como observado nas figuras (5.30), (5.31) (5.38) e (5.39);

• A expansão do domínio fez com que aumentássemos o espaço de busca do algoritmo, que retornou valores de parâmetros não muito bons, apesar das distribuições de potenciais e densidade de corrente possuírem as mesmas tendências da original;

• Para este problema os parâmetros C e D parecem ter convergido de maneira mais estável que os parâmetros A e B, significando que para este problema específico os parâmetros C e D sejam mais relevantes.

5.4 - Tanque Retangular com Condições de Contorno Não Lineares e Cavidade Interna

Mais uma vez analisamos este exemplo três vezes. Cada uma das análises encontra-se descrita com os respectivos parâmetros utilizados.

1ª Análise:



Figura 5.48 – Tanque Retangular Não Linear com Cavidade

- Número de Elementos: 96
- Número de Pontos Observados no Contorno: 20
- Número de Pontos Observados no Domínio: 4
- Número de Cromossomos por Geração: 60
- Número de Gerações: 100
- Probabilidade de Crossover (Pc): 90%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 2.5%
- Domínio parâmetro A: [0.200; 0.650]
- Domínio parâmetro B: [0.050; 0.550]

- Domínio parâmetro C: [0.650; 1.250]
- Domínio parâmetro D: [0.050; 0.350]
- Precisão: 10⁻⁴

Obtivemos os seguintes resultados:



Figura 5.49 – Convergência do Algoritmo Genético para a 1ª análise



Figura 5.50 – Convergência para o parâmetro A na 1ª análise



Figura 5.51 – Convergência para o parâmetro B na 1ª análise



Figura 5.52 – Convergência para o parâmetro C na 1ª análise



Figura 5.53 – Convergência para o parâmetro D na 1ª análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (98.05) na geração 47. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

- A = 0.641
- B = 0.539
- C = 0.949
- D = 0.093


Figura 5.54 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.55 – Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada (GA)

2ª Análise:



Figura 5.56 – Tanque Retangular Não Linear

- Número de Elementos: 96
- Número de Pontos Observados no Contorno: 10
- Número de Pontos Observados no Domínio: 2
- Número de Cromossomos por Geração: 34
- Número de Gerações: 100
- Probabilidade de Crossover (*Pc*): 75%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 2.5%
- Domínio parâmetro A: [0.200; 0.650]
- Domínio parâmetro B: [0.050; 0.550]
- Domínio parâmetro C: [0.650; 1.250]
- Domínio parâmetro D: [0.050; 0.350]
- Precisão: 10⁻⁴



Figura 5.57 – Convergência do Algoritmo Genético para a 2ª análise



Figura 5.58 – Convergência para o parâmetro A na 2ª análise



Figura 5.59 – Convergência para o parâmetro B na 2ª análise



Figura 5.60 – Convergência para o parâmetro C na 2ª análise



Figura 5.61 – Convergência para o parâmetro D na 2ª análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (99.56) na geração 45. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

- A = 0.349
- B = 0.205
- C = 1.110
- D = 0.153

Fazemos então a comparação para as distribuições de potenciais e de densidades de corrente ao longo do contorno, calculadas com os parâmetros originais e com os parâmetros obtidos pela análise inversa.



Figura 5.62 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.63 - Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada

(GA)

Efetuamos uma 3^a análise, onde reduzimos drasticamente o número de pontos com potenciais observados, e ainda para dificultar a convergência do algoritmo genético, expandimos os domínios das variáveis.

3ª Análise:



Figura 5.64 – Tanque Retangular Não Linear

- Número de Elementos: 96
- Número de Pontos Observados no Contorno: 5
- Número de Pontos Observados no Domínio: 2
- Número de Cromossomos por Geração: 34
- Número de Gerações: 100
- Probabilidade de Crossover (*Pc*): 75%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 2.5%
- Domínio parâmetro A: [0.050; 2.000]
- Domínio parâmetro B: [0.050; 2.000]
- Domínio parâmetro C: [0.050; 2.000]
- Domínio parâmetro D: [0.050; 2.000]

• Precisão: 10⁻⁴



Figura 5.65 – Convergência do Algoritmo Genético para a 3ª análise



Figura 5.66 – Convergência para o parâmetro A na 3ª análise



Figura 5.67 – Convergência para o parâmetro B na 3ª análise



Figura 5.68 – Convergência para o parâmetro C na 3ª análise



Figura 5.69 – Convergência para o parâmetro D na 3ª análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (95.55) na geração 72. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

- A = 0.273
- B = 0.292
- C = 1.523
- D = 0.325

Fazemos então a comparação para as distribuições de potenciais e de densidades de corrente ao longo do contorno, calculadas com os parâmetros originais e com os parâmetros obtidos pela análise inversa onde aumentando a escala e considerando apenas os elementos do contorno externo podemos observar uma pequena discrepância nos resultados diretos e inversos.



Figura 5.70 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.71 – Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada (GA)

Tanque Retangular com Cavidade			
DADOS	ANALISE 1	ANALISE 2	ANALISE 3
Nº Elementos	96	96	96
Nº Pts.Obs.Contorno	20	10	5
Nº Pts.Obs.Domínio	4	2	2
N° Cromossomos/Geração	60	34	34
Nº Gerações	100	100	100
P. Crossover (%)	90	75	75
Prob. Mutação (%)	2.5	2.5	2.5
Domínio Par. A	[0.200; 0.650]	[0.200; 0.650]	[0.050; 2.000]
Domínio Par. B	[0.050; 0.550]	[0.050; 0.550]	[0.050; 2.000]
Domínio Par. C	[0.650; 1.250]	[0.650; 1.250]	[0.050; 2.000]
Domínio Par. D	[0.050; 0.350]	[0.050; 0.350]	[0.050; 2.000]
Precisão	10e-4	10e-4	10e-4
RESPOSTAS			
Geração Melhor Resposta	47	45	72
Melhor Resposta	98.05	99.56	95.55
Parâmetro A	0.641	0.349	0.273
Parâmetro B	0.539	0.205	0.292
Parâmetro C	0.949	1.110	1.523
Parâmetro D	0.093	0.153	0.325

Tabela 5.3 - Resumo das Análises para o 2º Exemplo Não linear

Neste exemplo pudemos verificar que:

• Assim como no segundo exemplo, os pontos internos não influem na resposta uma vez que são calculados a partir dos pontos do contorno;

• A variação de Pc e Pm não causou nenhuma discrepância significativa nos resultados, embora tenhamos chegado a valores maiores para a função objetiva com menor Pm;

• Isto pode ter ocorrido em função do número de pontos observados. Quanto menor o número de pontos observados, maior a chance de se encontrar valores maiores para a função objetiva. Isto não necessariamente significa que obtivemos uma melhor resposta como podemos observar na figuras (5.70) e (5.71), onde pudemos notar discrepância nas respostas;

• A expansão do domínio fez com que aumentássemos o espaço de busca do algoritmo, que retornou valores de parâmetros não muito bons, apesar das distribuições de potenciais e densidade de corrente possuírem curvas seguindo as mesmas tendências da original.

5.5 - Tanque Retangular com Condições de Contorno Não Lineares e Domínio Infinito

Outro exemplo, agora com domínio infinito onde a parte anódica encontra-se afastada pelo elerólito (domínio infinito) da parte catódica.

1ª Análise:



Figura 5.72 – Tanque Retangular Não Linear para Domínio Infinito

- Número de Elementos: 144
- Número de Pontos Observados no Contorno: 20
- Número de Pontos Observados no Domínio: 4
- Número de Cromossomos por Geração: 34
- Número de Gerações: 100
- Probabilidade de Crossover (Pc): 90%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 2.5%

- Domínio parâmetro A: [0.200; 0.650]
- Domínio parâmetro B: [0.050; 0.550]
- Domínio parâmetro C: [0.650; 1.250]
- Domínio parâmetro D: [0.050; 0.350]
- Precisão: 10⁻⁴



Figura 5.73 – Convergência do Algoritmo Genético para a 1ª análise



Figura 5.74 – Convergência para o parâmetro A na 1ª análise



Figura 5.75 – Convergência para o parâmetro B na 1ª análise



Figura 5.76 – Convergência para o parâmetro C na 1ª análise



Figura 5.77 – Convergência para o parâmetro D na 1ª análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (98.93) na geração 97. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

- A = 0.417
- B = 0.216
- C = 1.182
- D = 0.244

Fazemos então a comparação para as distribuições de potenciais e de densidades de corrente ao longo do contorno, calculadas com os parâmetros originais e com os parâmetros obtidos pela análise inversa.



Figura 5.78 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.79 – Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada (GA)

2^a Análise:



Figura 5.80 - Tanque Retangular Não Linear

- Número de Elementos: 144
- Número de Pontos Observados no Contorno: 10
- Número de Pontos Observados no Domínio: 4
- Número de Cromossomos por Geração: 34
- Número de Gerações: 100
- Probabilidade de Crossover (*Pc*): 90%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 2.5%
- Domínio parâmetro A: [0.050; 2.000]
- Domínio parâmetro B: [0.050; 2.000]
- Domínio parâmetro C: [0.050; 2.000]
- Domínio parâmetro D: [0.050; 2.000]
- Precisão: 10⁻⁴



Figura 5.81 – Convergência do Algoritmo Genético para a 2ª análise



Figura 5.82 – Convergência para o parâmetro A na 2ª análise



Figura 5.83 – Convergência para o parâmetro B na 2ª análise



Figura 5.84 – Convergência para o parâmetro C na 2ª análise



Figura 5.85 – Convergência para o parâmetro D na 2ª análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (98.22) na geração 88. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

- A = 0.329
- B = 0.244
- C = 1.547
- D = 0.366

Fazemos então a comparação para as distribuições de potenciais e de densidades de corrente ao longo do contorno, calculadas com os parâmetros originais e com os parâmetros obtidos pela análise inversa.



Figura 5.86 - Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.87 – Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada (GA)

Efetuamos uma 3^a análise, onde reduzimos drasticamente o número de pontos com potenciais observados, e ainda para dificultar a convergência do algoritmo genético, e mantemos expandido os domínios das variáveis.



<u>3^a Análise</u>:

Figura 5.88 - Tanque Retangular Não Linear

- Número de Elementos: 144
- Número de Pontos Observados no Contorno: 5
- Número de Pontos Observados no Domínio: 2
- Número de Cromossomos por Geração: 34
- Número de Gerações: 100
- Probabilidade de Crossover (Pc): 75%
- Probabilidade de Mutação (*Pm*): 2.5%
- Domínio parâmetro A: [0.050; 2.000]
- Domínio parâmetro B: [0.050; 2.000]
- Domínio parâmetro C: [0.050; 2.000]

- Domínio parâmetro D: [0.050; 2.000]
- Precisão: 10⁻⁴



Figura 5.89 – Convergência do Algoritmo Genético para a 3ª análise



Figura 5.90 – Convergência para o parâmetro A na 3ª análise



Figura 5.91 – Convergência para o parâmetro B na 3ª análise



Figura 5.92 – Convergência para o parâmetro C na 3ª análise



Figura 5.93 – Convergência para o parâmetro D na 3ª análise

Encontramos o maior valor para a função objetiva (96.34) na geração 68. Nesta geração os parâmetros encontrados foram:

- A = 0.173
- B = 0.295
- C = 1.844
- D = 0.448

Fazemos então a comparação para as distribuições de potenciais e de densidades de corrente ao longo do contorno, calculadas com os parâmetros originais e com os parâmetros obtidos pela análise inversa.



Figura 5.94 – Distribuição de Potenciais Originais (MEC) e Calculados (GA)



Figura 5.95 – Distribuição de Densidade de Corrente Original (MEC) e Calculada (GA)

Tanque Retangular com Condições de Contorno Não Lineares e Domínio Infinito				
ANALISE 1	ANALISE 2	ANALISE 3		
144	144	144		
20	10	5		
4	4	2		
34	34	34		
100	100	100		
90	90	75		
2.5	2.5	2.5		
[0.200; 0.650]	[0.050; 2.000]	[0.050; 2.000]		
[0.050; 0.550]	[0.050; 2.000]	[0.050; 2.000]		
[0.650; 1.250]	[0.050; 2.000]	[0.050; 2.000]		
[0.050; 0.350]	[0.050; 2.000]	[0.050; 2.000]		
10e-4	10e-4	10e-4		
97	88	68		
98.93	98.22	96.34		
0.417	0.329	0.173		
0.216	0.244	0.295		
1.182	1.547	1.844		
0.244	0.366	0.448		
	ANALISE 1 144 20 4 34 100 90 2.5 [0.200; 0.650] [0.50; 0.550] [0.650; 1.250] [0.050; 0.350] 10e-4 97 98.93 0.417 0.216 1.182 0.244	ANALISE 1 ANALISE 2 144 144 20 10 4 4 34 34 100 100 90 90 2.5 2.5 [0.200; 0.650] [0.050; 2.000] [0.650; 1.250] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.051] [0.050; 2.000] [0.052] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000] [0.050; 0.350] [0.050; 2.000]		

Tabela 5.4 – Resumo das Análises para o 3º Exemplo Não Linear

Neste exemplo pudemos verificar que:

• Assim como nos exemplos anteriores, os pontos medidos no eletrólito não influem na resposta uma vez que são calculados a partir dos pontos do contorno;

• A diminuição de *Pc* de 90% para 75% causou leve piora na convergência dos parâmetros A e B, e não influiu significativamente na convergência dos parâmetros C e D;

• A expansão do domínio entretanto, fez com que o algoritmo obtivesse para a função objetiva inicialmente, valores muito ruins. Somado a isso a diminuição de Pc na 3ª análise fez com que o algoritmo demorasse um pouco mais para convergir para valores maiores como na 2ª análise;

Isto pode ter ocorrido também, em função do número de pontos observados.
Quanto menor o número de pontos observados, maior a chance de se encontrar valores maiores para a função objetiva. Isto não necessariamente significa que obtivemos uma melhor resposta como podemos observar na figuras (5.94) e (5.95).
Mesmo assim para este problema, a convergência do algoritmo foi satisfatória, mesmo para um número reduzido de pontos observados;

• Para a 1^a análise deste exemplo encontramos valores exatos para os parâmetros A e B. Estes parecem ser os parâmetros que mais influem para este problema uma vez que obtivemos distribuições satisfatórias de potencial e densidade de corrente mesmo com valores muito precisos para os parâmetros C e D.

Capítulo 6 - Conclusão e Propostas para Desenvolvimentos Futuros

Apresentamos ao longo desta dissertação uma proposta para aplicações numéricas em análise inversa para sistemas de proteção catódica. Com o objetivo de obtenção de condições de contorno (curvas de polarização) lineares e não lineares fizemos uso desta ferramenta em 4 exemplos diferentes, um com condições lineares e outros três mais complexos com condições não lineares.

Neste capítulo apresentamos um resumo da dissertação, as conclusões oriundas das discussões dos resultados das aplicações numéricas e propostas para desenvolvimentos futuros.

6.1 - Resumo da Dissertação

No capítulo 1 fizemos uma breve introdução aos objetivos a serem alcançados neste estudo além de apresentar de maneira sucinta a descrição dos capítulos. Neste fizemos uma revisão bibliográfica com alguns artigos e teses que nos baseamos para a elaboração deste estudo com o objetivo de contextualizar a dissertação. Descrevemos ainda de maneira resumida os princípios básicos da proteção catódica e ainda os sistemas de proteção mais utilizados na prática para evitar corrosão.

No capítulo 2 apresentamos a formulação clássica para o Método dos Elementos de Contorno com a equação integral que o método se fundamenta.

No capítulo 3, a principal contribuição deste capítulo foi a descrição dos Algoritmos Genéticos com suas bases teóricas como uma estratégia evolutiva para se executar análises inversas.

No capítulo 4 apresentamos a implementação numérica do Método dos Elementos de Contorno e a do Algoritmo Genético e como os 2 métodos se integram com o objetivo de executar análises inversas. No capítulo 5 apresentamos exemplos acadêmicos de aplicações numéricas, lineares e não lineares, onde maior ênfase foi dada às não lineares por se tratarem de exemplos mais condizentes com problemas reais onde as condições não lineares são exponenciais.

6.2 - Conclusões

Após as aplicações numéricas pudemos perceber que o Método dos Elementos de Contorno, juntamente com os Algoritmos Genéticos, são ferramentas muito úteis para estimarmos parâmetros e condições de contorno por meio de análise inversa.

Os Algoritmos Genéticos por sua vez, por se tratar de uma estratégia evolutiva apresentaram sempre bom comportamento no sentido de se estimar parâmetros para as condições de contorno lineares e não lineares. Embora não obtivemos valores exatos para tais parâmetros, sempre obtivemos curvas muito próximas às originais, de maneira que a distribuição de potenciais e conseqüentemente de densidade de corrente encontrada pela análise inversa, ao longo dos elementos dos problemas estudados, fossem praticamente as mesmas da análise direta.

Pudemos observar, entretanto, que alguns fatores influenciam os resultados obtidos pela análise inversa. A discretização do contorno das superfícies estudadas pode ser levada em consideração quando da precisão das respostas obtidas, uma vez que para problemas mais simples (condições de contorno lineares) porém com uma malha mais pobre, os resultados para a distribuição de potenciais e densidade de corrente foram piores do que para os problemas mais complexos (não lineares) entretanto com a malha mais.rica .

Outro fator que pudemos notar foi o domínio de busca adotado para os parâmetros a serem estimados. Como esperado, percebemos que quanto maior o domínio ou o espaço para busca mais demorada a convergência do algoritmo e pior os valores para os parâmetros das condições de contorno. Entretanto isto parece influenciar pouco a distribuição de valores de potencial e densidade de corrente como podemos observar no capítulo 5. O número de pontos observados ou medidos no contorno também influenciam na resposta do algoritmo. Com menos valores de potencial nos nós funcionais do contorno para comparação com a solução direta, obtivemos valores altos

para a função objetiva, o que nesse caso não significa que tivemos melhores parâmetros para as condições de contorno.

Devemos citar também os operadores genéticos. A probabilidade de mutação (Pm) se muito elevada faz com que o algoritmo genético perca sua característica evolutiva e torna-se um algoritmo de busca aleatória. Por outro lado se a probabilidade de crossover (Pc) é muito baixa, o algoritmo pode convergir rapidamente para soluções ruins, uma vez que perdemos variedade "genética". O número de gerações não influenciou tanto na obtenção dos valores mais altos para a função objetiva como outros parâmetros previamente discutidos, pois uma vez que um valor elevado era atingido prematuramente, este oscilava muito pouco nas demais gerações. O número de cromossomos por população pareceu também não influenciar na convergência do algoritmo e na obtenção das melhores soluções para os parâmetros das condições de contorno apesar de aumentarem a varedade "genética" da população.

Cabe ressaltar aqui que a escolha dos melhores valores para os operadores genéticos depende muito da sensibilidade adquirida para cada problema estudado. Dependendo do problema determinados parâmetros das condições de contorno podem influenciar mais ou menos na distribuição de potencial e densidade de corrente obtida.

6.3 - Proposta de Trabalhos Futuros

Partindo do estudo apresentado nesta dissertação outros trabalhos poderiam ser desenvolvidos.

A otimização de sistemas de proteção catódica seria de grande valia. Apesar de existir normas específicas [2,3] para dimensionamento de tais sistemas, sua implementação depende da experiência de quem o projeta. A distribuição de anodos de sacrifício, quando este sistema é escolhido, é feito de forma aleatória, buscando respeitar muitas vezes a simetria e o espaço físico para introduzi-los. Isto não garante, entretanto, a proteção efetiva da estrutura.

Interface gráfica também seria de grande valia, pois permitiria aplicações às estruturas reais, uma vez que constantemente há discussões, principalmente na indústria de petróleo "offshore" sobre ampliação da vida útil das estruturas marítimas e proteção catódica é um aspecto essencial para que isto ocorra.

Outros estudos adicionais poderiam ser elaborados para restringir os domínios do espaço de busca dos parâmetros das curvas de polarização, e assim desenvolver análises mais rápidas economizando tempo de processamento computacional.

Poderiam ser ainda implementadas metodologias para otimizar a função objetiva, de maneira que descartássemos respostas muito ruins e aproveitássemos necessariamente as melhores e assim promover convergência de maneira mais rápida e precisa, conhecida como elitismo..

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] MILTIADOU, P, *Inverse Analysis Formulations for Cathodic Protection Systems*, Ph.D. thesis, Brunel University, Uxbridge, England, 2002.
- [2] DNV Recommended Practice F103, Cathodic Protection of Submarine Pipelines by Galvanic Anodes, Det Norsk Veritas, Hovik, Norway, 2003.
- [3] ISO 15589-2, Petroleum and natural gas industries Cathodic Protection of pipelines transportation systems – Part 2: Offshore Pipelines, International Standards, Geneva, Switzerland, 2004.
- [4] MICHALEWICZ, Z., Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs, 3 ed Berlin, Germany, Springer-Verlag, 1996.
- [5] SPERANDIO, D.; MENDES, J. T.; SILVA, L. H. M., CÁLCULO NUMÉRICO: Características Matemáticas e Computacionais dos Métodos Numéricos, 1 ed São Paulo, Brasil, Prentice Hall, 2003.
- [6] TELLES, J. C. F.; MANSUR, W. J.; WROBEL, L. C., Manual de Teoria do Programa PROCAT, CENPES/PETROBRÁS ET-15206, Rio de Janeiro, Brasil, 1984.
- [7] WROBEL, L. C.; MANSUR, W. J.; TELLES, J. C. F. e AZEVEDO, J. P. S., "Aplicação dos Elementos de Contorno à Proteção Catódica de Tubulações e Estruturas Offshore". 5^a Conferência Latino Americana de Métodos Computacionais em Engenharia, Salvador, Bahia, Brasil, 1984.
- [8] TELLES, J. C. F., WROBEL, L. C.; MANSUR, W. J.; and AZEVEDO, J. P. S., Boundary Elements for Cathodic Protection Problems, Boundary Element VII, 1ed Berlin, Germany, Springer-Verlag, 1985.
- [9] WROBEL, L. C., TELLES, J. C. F.; MANSUR, W. J.; and AZEVEDO, J. P. S., A Boundary Element System for Cathodic Protection Design, Offshore Engineering, Vol. 5 London, England, Pentech Press, 1985.
- [10] MANSUR, W. J.; WROBEL, L. C., TELLES, J. C. F.; AZEVEDO, J. P. S. and SANTIAGO, J. A. F., *The PROCAT System for Cathodic Protection Design*, Boundary Element Techniques, CML Publications, Southampton, England, 1987.
- [11] TELLES, J. C. F.; MANSUR, W. J.; WROBEL, L. C.; MARINHO, M. G., and SANTIAGO, J. A. F., Computer Aided Design of Cathodic Protection

Problems Using the PROCAT System, Offshore Engineering, Vol. 6 London, England, Pentech Press, 1987.

- [12] TELLES, J. C. F.; MANSUR, W. J.; WROBEL, L. C. and MARINHO, M. G., "Numerical Simulation of a Cathodically Protected Semisubmersible Platform Using the PROCAT System", *Corrosion 90* v.46, n.6, pp 513-518, National Association of Corrosion Engineers, Houston, Texas, USA, 1990.
- [13] SANTIAGO, J. A. F., Simulação Estática e Dinâmica de Sistemas de Proteção Catódica com o Método dos Elementos de Contorno. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1991.
- [14] HARROUNI, K. EL; OUAZAR, D.; WALTERS, G. A. and CHENG, A. H.-D. "Groundwater optimization and parameter estimation by genetic algorithm and dual reciprocity boundary element method", *Engineering Analysis with Boundary Elements* v.18, pp.287-296, 1996.
- [15] KOGUCHI, W. and WATABE H. "Improving defects search in structure by boundary element and genetic algorithm scan method", *Engineering Analysis with Boundary Elements* v.19, pp.105-116, 1997.
- [16] AOKI S. and AMAYA K. "Optimization of cathodic protection system by BEM", *Engineering Analysis with Boundary Elements* v.19, pp.147-156, 1997.
- [17] MERA, N. S.; ELLIOT, L. and INGHAM, D. B. "Genetic algorithms for shape identification problems using the boundary element method". In: *Fourth UK Conference on Boundary Integral Methods*, pp. 11-20, University of Salford, Salford, UK, Sept. 2003.
- [18] MERA, N. S.; ELLIOT, L. and INGHAM, D. B. "Numerical solution of a boundary detection problem using genetic algorithms", *Engineering Analysis* with Boundary Elements v.28, pp.405-411, 2004.
- [19] WROBEL, L. C. and MILTIADOU, P. "Genetic algorithms for inverse cathodic protection problems", *Engineering Analysis with Boundary Elements* v.28, pp.267-277, 2004.
- [20] LACERDA, L. A. and SILVA, J. M. "A Dual BEM Genetic Algorithm Scheme for the Identification of Polarization Curves of Buried Slender Structures", *CMES* v.14, n.3 pp.153-160, 2006.
- [21] BAXTER, D and BRITTON, J., Offshore Cathodic Protection 101: What is is and how does it work?, Deepwater Corrosion Services Inc., Houston, Texas, USA, 2006.
- [22] BREBBIA, C. A.; TELLES, J. C. F.; WROBEL, L. C.: Boundary Element Techniques. Theory and Applications in Engineering, 1st ed, Berlim, Springer-Verlag, 1984.
- [23] FERREIRA, M. D. C., Análise Inversa em Sólidos Bidimensionais Utilizando o Método dos Elementos de Contorno. Dissertação de M.Sc., Escola de Engenharia de São Carlos/Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, Brasil, 2007.
- [24] GOLDBERG, D. E., Genetic algorithms in search, optimization and machine learning, 23rd ed Canada, Addison-Wesley, 2002.
- [25] LINDEN, R., *ALGORITMOS GENÉTICOS: Uma importante ferramenta da Inteligência Computacional*, Rio de Janeiro, Brasil, Brasport, 2006.
- [26] SANTIAGO, J. A. F. and TELLES, J. C. F. "On Boundary Elements for Simulation of Cathodic Protection Systems with Dynamic Polarization Curves", *International Journal for Numerical Methods in Engineering* v.40, pp. 2611-2627, 1997.
- [27] SANTIAGO, J. A. F. and TELLES, J. C. F. "A solution technique for cathodic protection with dynamic boundary conditions by the boundary element method", *Advances in Engineering Software* v.30, pp.663-671, 1999.
- [28] NISANCIOUGLU, K. "Predicting the Time dependence of Polarization on Cathodically Protected Steel in Seawater", *Corrosion* 87 v.43, n.2, pp. 100, National Association of Corrosion Engineers, Houston, Texas, USA, 1987.
- [29] AOKI, S. and URAI, Y., "Inverse analysis for estimating galvanic rate". In: *IUTAM Symposion on Inverse Problems in Engineering Mechanics*, Tokyo, Japan, 1992.

Livros Grátis

(<u>http://www.livrosgratis.com.br</u>)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração Baixar livros de Agronomia Baixar livros de Arquitetura Baixar livros de Artes Baixar livros de Astronomia Baixar livros de Biologia Geral Baixar livros de Ciência da Computação Baixar livros de Ciência da Informação Baixar livros de Ciência Política Baixar livros de Ciências da Saúde Baixar livros de Comunicação Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE Baixar livros de Defesa civil Baixar livros de Direito Baixar livros de Direitos humanos Baixar livros de Economia Baixar livros de Economia Doméstica Baixar livros de Educação Baixar livros de Educação - Trânsito Baixar livros de Educação Física Baixar livros de Engenharia Aeroespacial Baixar livros de Farmácia Baixar livros de Filosofia Baixar livros de Física Baixar livros de Geociências Baixar livros de Geografia Baixar livros de História Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura Baixar livros de Literatura de Cordel Baixar livros de Literatura Infantil Baixar livros de Matemática Baixar livros de Medicina Baixar livros de Medicina Veterinária Baixar livros de Meio Ambiente Baixar livros de Meteorologia Baixar Monografias e TCC Baixar livros Multidisciplinar Baixar livros de Música Baixar livros de Psicologia Baixar livros de Química Baixar livros de Saúde Coletiva Baixar livros de Servico Social Baixar livros de Sociologia Baixar livros de Teologia Baixar livros de Trabalho Baixar livros de Turismo