

AVALIAÇÃO EMPÍRICA SISTEMÁTICA DE ALGORITMOS DE OTIMIZAÇÃO METAHEURÍSTICOS APLICADOS A PROBLEMAS DE ENGENHARIA QUÍMICA E DE PROCESSOS

M. A. Bannoud¹, G. Y. Ottaiano², T. D. Martins²

¹Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brasil (mohamad.bannoud@unifesp.br)

²Universidade Federal de São Paulo, Diadema, Brasil

Este trabalho compara oito algoritmos de otimização metaheurísticos em cinco problemas de engenharia química e de processos sob protocolo padronizado (100 rodadas e 10.000 avaliações por execução). A análise estatística (Friedman e Wilcoxon-Holm) mostrou que DE e EO apresentaram o melhor desempenho global, enquanto ABC destacou-se no biorreator fed-batch. Os resultados corroboram o teorema No Free Lunch e indicam que a estrutura do problema orienta a seleção do algoritmo.

Palavras-chave: Otimização metaheurística; Engenharia de processos; Comparação empírica; No Free Lunch; Benchmarking.

INTRODUÇÃO

A otimização de processos químicos é uma atividade fundamental na engenharia, abrangendo desde o dimensionamento de reatores e colunas de separação até o controle operacional de biorreatores e redes de distribuição de fluidos. Esses problemas são tipicamente não-lineares, multimodais, envolvem variáveis mistas (contínuas e inteiras) e apresentam restrições de igualdade e desigualdade que tornam ineficientes os métodos clássicos baseados em gradiente (Edgar et al., 2001; Biegler, 2010). Os algoritmos de otimização metaheurísticos (MOAs) emergem como alternativa robusta por não exigirem derivadas e possuírem mecanismos naturais de escape de ótimos locais (Bannoud et al., 2024).

Desde a consolidação do Algoritmo Genético (*Genetic algorithm*, GA) Holland (1975) e do Recozimento Simulado (*Simulated Annealing*, SA) Kirkpatrick et al. (1983), a literatura de MOAs cresceu exponencialmente. Algoritmos baseados em inteligência de enxame, como a Otimização por Enxame de Partículas (PSO, Kennedy e Eberhart, 1995), a Colônia Artificial de Abelhas (ABC, Karaboga, 2005), o Otimizador dos Lobos Cinzentos (GWO, Mirjalili et al., 2014) e o Algoritmo das Baleias (WOA, Mirjalili e Lewis, 2016), demonstraram desempenho competitivo em problemas de referência (benchmarks) matemáticos contínuos. Mais recentemente, o Otimizador de Equilíbrio (EO, Faramarzi et al., 2020) foi proposto a partir de uma analogia direta com o balanço de massa

em um reator de mistura perfeita (CSTR), tornando-o particularmente relevante para a engenharia química.

Apesar da abundância de MOAs disponíveis, a seleção do algoritmo mais adequado a um problema específico permanece uma questão aberta. O teorema *No Free Lunch* (NFL), de Wolpert e Macready (1997), demonstra rigorosamente que nenhum algoritmo de busca é universalmente superior ao considerar todos os problemas possíveis, tornando as comparações empíricas contextualizadas o único meio válido de orientar a prática. Estudos comparativos focados em problemas reais da engenharia química ainda são escassos na literatura nacional e, quando presentes, frequentemente carecem de protocolos estatísticos adequados para validação dos resultados (Rangaiah e Bonilla-Petriciolet, 2013).

Rangaiah (2010) e Rangaiah e Bonilla-Petriciolet (2013) organizaram arcabouços abrangentes de comparação de MOAs em engenharia química, com foco em algoritmos clássicos. Haddad et al. (2026) avaliaram algoritmos modernos de enxame em problemas células de combustíveis, porém não houve uma exploração em variedade de processos na área de engenharia química. O presente trabalho supre essa lacuna ao adotar o arcabouço metodológico de Demšar (2006) e García et al. (2009), consolidado na comunidade de inteligência computacional para comparação múltipla de algoritmos estocásticos.

Os objetivos específicos deste trabalho são: (i) formular e implementar cinco problemas de referência (*benchmarks*) de engenharia química e de processos

com formulação matemática explícita e validada; (ii) comparar oito MOAs de diferentes famílias sob protocolo experimental rigoroso (100 rodadas independentes e 10.000 avaliações da função objetivo); (iii) analisar estatisticamente os resultados via teste de Friedman e pós-teste de Wilcoxon com correção de Holm; e (iv) discutir os resultados à luz do teorema NFL, identificando padrões de adequação entre tipos de algoritmo e estrutura da paisagem de *fitness* de cada problema.

MATERIAL E MÉTODOS

Algoritmos Avaliados

Foram selecionados oito MOAs, conforme mostrado na Tabela 1, que são representativos de três famílias algorítmicas: dois evolucionários (EGA e DE), quatro baseados em inteligência de enxame (PSO, GWO, WOA e ABC) e dois inspirados em fenômenos físicos ou matemáticos (EO e SCA). A diversidade intrafamiliar foi intencional para permitir investigar se os mecanismos compartilhados dentro de cada família conferem vantagens estruturais em determinadas classes de problemas.

O *OriginalGA* da biblioteca *MEALPY* (Meta-heuristic Algorithms Library in Python) v3.0.3 (Van Thieu e Mirjalili, 2023) foi substituído pelo *EliteSingleGA* (EGA), variante com elitismo duplo que opera corretamente sobre espaço contínuo *FloatVar*. O operador de mutação do GA original realizava apenas troca de posições entre genes (swap), sem perturbação efetiva dos valores das variáveis em representação de ponto flutuante, resultando em convergência nula em testes preliminares. Todos os algoritmos foram implementados via *MEALPY* v3.0.3, eliminando o viés de implementação. Os parâmetros foram mantidos nos valores das publicações originais conforme mostrado na Tabela 1, sem ajuste fino, garantindo comparação justa (Eiben e Smit, 2011).

Problemas de Referência (Benchmarks)

Cinco problemas de otimização foram formulados para cobrir subáreas distintas da engenharia química, com variação intencional de: (i) dimensionalidade (3–10 variáveis de decisão), (ii) tipo de variável (contínua, inteira e discreta por arredondamento), (iii) natureza das restrições (igualdade implícita, desigualdade e limites de caixa) e (iv) morfologia da paisagem de *fitness* (unimodal, multimodal e dinâmica com integração de equações diferenciais ordinárias (EDOs)). São versões simplificadas, inspiradas nas formulações canônicas citadas. A Tabela 2 resume os problemas.

P1 — Rede de Reatores CSTR em Série ($A \rightarrow B \rightarrow C$). O problema minimiza o custo total de capital e operação de dois reatores de mistura perfeita contínua (CSTR) em série para a reação consecutiva $A \rightarrow B \rightarrow$

C, em que B é o produto desejado e C é o subproduto indesejado. A função objetivo é:

$$f(x) = 2,5 \cdot (V_1^{0,6} + V_2^{0,6}) + 0,01 \cdot (T_1 + T_2) \quad (1)$$

em que V_i [L] é o volume e T_i [K] é a temperatura do i -ésimo reator. As constantes cinéticas seguem a lei de Arrhenius:

$$k_j = A_j \cdot \exp(-E_{a,j} / T_i) \quad [j = 1, 2] \quad (2)$$

com $A_1 = 10^6$ L/(mol·s), $E_{a1}/R = 5.000$ K para a reação $A \rightarrow B$ (desejada); $A_2 = 10^5$ L/(mol·s), $E_{a2}/R = 7.000$ K para a reação $B \rightarrow C$ (indesejada). Essa parametrização garante que a seletividade para B diminua a temperaturas mais elevadas, tornando o problema não-trivial. Os balanços de massa para o i -ésimo CSTR são:

$$C_{A,i} = C_{A,i-1} / (1 + k_{1,i} \cdot V_i / q) \quad (3)$$

$$C_{B,i} = (C_{B,i-1} + k_{1,i} \cdot C_{A,i} \cdot V_i / q) / (1 + k_{2,i} \cdot V_i / q) \quad (4)$$

com $C_{A0} = 2,0$ mol/L e $q = 1,0$ L/s. A conversão de A e a seletividade para B são:

$$X_A = (C_{A0} - C_{A,2}) / C_{A0}; \quad S_B = C_{B,2} / (C_{A0} - C_{A,2}) \quad (5)$$

As restrições de projeto impõem $X_A \geq 0,80$ e $S_B \geq 0,50$. Espaço de busca: $V_i \in [0,5; 10]$ L e $T_i \in [310; 400]$ K. Inspirado em Flores-Tlacuahuac e Biegler (2007).

P2 — Síntese de Rede de Trocadores de Calor (HEN). O problema minimiza o custo total de área de troca e de utilidades externas em uma rede com duas correntes quentes (H_1 , H_2) e uma fria (C_1), com três combinações possíveis de troca:

$$f(x) = 500 \cdot (A_{12}^{0,6} + A_{23}^{0,6}) + 80 \cdot Q_{util,H1} + 60 \cdot Q_{util,H2} \quad (6)$$

em que A_{ij} [m²] é a área do trocador entre as correntes i e j , calculada pela diferença de temperatura média logarítmica (LMTD, *Logarithmic Mean Temperature Difference*) com coeficiente global $U = 0,5$ kW/(m²·K):

$$LMTD = (\Delta T_1 - \Delta T_2) / \ln(\Delta T_1 / \Delta T_2) \quad (7)$$

As variáveis de decisão são $x = [q_{12}, q_{13}, q_{23}$ (kW), $T_{H1,saída}$, $T_{H2,saída}$ (°C)]. As restrições de balanço energético são:

$$q_{12} + q_{13} \leq FCp_{H1} \cdot (T_{H1,ent} - T_{H1,saída}) \quad (8)$$

$$q_{23} \leq FCp_{H2} \cdot (T_{H2,ent} - T_{H2,saída}) \quad (9)$$

$$T_{C1,saída} = T_{C1,ent} + (q_{12} + q_{13} + q_{23}) / FCp_{C1} \geq 190 \text{ °C} \quad (10)$$

com $\Delta T_{min} = 10$ °C em todos os trocadores. Dados: $FCp_{H1} = 10$, $FCp_{H2} = 20$, $FCp_{C1} = 15$ kW/°C; $T_{H1,ent} = 250$, $T_{H2,ent} = 200$, $T_{C1,ent} = 50$ °C. Inspirado em Yee e Grossmann (1990).

P3 — Coluna de Destilação Binária (Modelo FUG). O problema minimiza a carga do refeedor Q_R [MJ/h] de coluna de destilação da mistura binária etanol-água:

$$f(x) = Q_R = (R+1) \cdot D \cdot \lambda_v / 1000 \quad (11)$$

em que R é a razão de refluxo, D [kmol/h] é a vazão molar de destilado — calculada pelo balanço global $D = F \cdot (z_F - x_B) / (x_D - x_B)$ — e $\lambda_v = 38.000$ kJ/kmol é o calor de vaporização médio. O modelo Fenske-Underwood-Gilliland (FUG) fornece as condições de projeto mínimas:

$$N_{\min} = \ln[(x_D / (1 - x_D)) \cdot ((1 - x_B) / x_B)] / \ln(\alpha) \quad (12)$$

$$R_{\min} = \max\{0,60; [(\alpha \cdot z_F - 1) / (\alpha - 1)] + 0,05\} \quad (13)$$

com $\alpha = 2,2$ (volatilidade relativa etanol-água), $x_D = 0,95$, $x_B = 0,02$, $z_F = 0,50$, $F = 100$ kmol/h. As restrições de projeto exigem:

$$R \geq 1,2 \cdot R_{\min}; N \geq 1,5 \cdot N_{\min}; N_f \leq 0,7 \cdot N \quad (14)$$

Espaço de busca: $R \in [0,70; 5,0]$, $N \in [5; 30]$ (inteiro), $N_f \in [2; 25]$ (inteiro). O limite inferior $R = 0,70$ foi fixado acima da restrição ativa $1,2 \cdot R_{\min} \approx 0,72$, evitando uma zona de penalidade nas bordas do espaço de busca que poderia induzir falsos positivos em algoritmos com passo grande. Inspirado em Rangaiah (2010).

Tabela 1. Algoritmos avaliados, famílias e parâmetros utilizados.

MOA	Família	Parâmetros (valores dos autores originais)
EGA	Evolucionário	$pc = 0,90$; $pm = 0,10$; seleção por torneio; cruzamento uniforme; elitismo duplo ($elite_best = 0,10$; $elite_worst = 0,30$)
PSO	Enxame	$c_1 = c_2 = 1,50$; $w = 0,70$ (inércia constante)
GWO	Enxame	a decresce linearmente de 2,0 a 0,0; hierarquia α - β - ω
DE	Evolucionário	$F = 0,80$ (fator de escala); $CR = 0,90$; $DE/rand/1/bin$ ($strategy = 0$)
WOA	Enxame	a: 2,0 $\rightarrow$ 0,0; espiral logarítmica $b = 1$; probabilidade de ataque = 0,50
ABC	Enxame	$n_limits = 25$ (número máximo de tentativas por fonte de alimento)
EO	Físico/Químico	$a_1 = 2$; $a_2 = 1$; $GP = 0,50$ (probabilidade de geração de equilíbrio)
SCA	Matemático	$a = 2$; oscilação guiada por funções seno e cosseno

Tabela 2. Problemas de referência de engenharia química e de processos.

ID	Problema	Referência	Área	Dim.	Objetivo / Ótimo esperado (f^*)
P1	CSTR em Série	Flores-Tlacuahuac e Biegler (2007)	Reatores Químicos	4	Min. custo de capital e operação; $f^* \approx 11,05$
P2	Rede de Trocadores (HEN)	Yee e Grossmann (1990)	Integração Energética	5	Min. custo de área + utilidades; $f^* \approx 5.157$
P3	Destilação Binária (FUG)	Rangaiah (2010)	Operações de Separação	3	Min. carga do refeedor Q_R [MJ/h]; $f^* \approx 3.338$
P4	Biorreator Fed-Batch	Roubos et al. (1999)	Bioprocessos	10	Máx. biomassa $X \cdot V$ [g]; $f^* \approx 26,55$
P5	Rede de Tubulações	Simpson et al. (1994)	Transporte de Fluidos	6	Min. custo anual [R\$/ano]; $f^* \approx 231.384$

P4 — Biorreator de Batelada Alimentada (Fed-Batch). O problema maximiza a produção total de biomassa $X \cdot V$ [g] ao final de 10 h de operação, otimizando o perfil discretizado de vazão de alimentação de substrato. O sistema é descrito pelas seguintes EDOs do modelo de Monod:

$$dX/dt = (\mu - F/V) \cdot X \quad (15)$$

$$dS/dt = -(\mu/Y_{xs}) \cdot X + (F/V) \cdot (S_f - S) - m_s \cdot X \quad (16)$$

$$dV/dt = F \quad (17)$$

$$\mu = \mu_{\max} \cdot S / (K_s + S) \quad (18)$$

com $\mu_{\max} = 0,40$ h⁻¹, $K_s = 0,10$ g/L, $Y_{xs} = 0,50$ g/g, $m_s = 0,03$ g/(g·h), $S_f = 20,0$ g/L. Condições iniciais: $X_0 = 0,5$ g/L, $S_0 = 10,0$ g/L, $V_0 = 1,0$ L. O perfil de

alimentação é discretizado em 10 intervalos de 1 h, com $F_i \in [0; 0,5]$ L/h para cada intervalo, resultando em 10 variáveis de decisão contínuas. As EDOs são integradas numericamente pelo método LSODA (*Livermore Solver for ODEs with Automatic switching*) via *SciPy* ($rtol=10^{-4}$, $atol=10^{-6}$). A função objetivo de minimização equivalente é:

$$f(x) = -(X_f \cdot V_f) + 10^3 \cdot [\max\{0, V_f - 10\}]^2 \quad (19)$$

em que o sinal negativo transforma a maximização de $X_f \cdot V_f$ em minimização, e o termo de penalidade limita o volume final a 10 L. Inspirado em Roubos et al. (1999).

P5 — Dimensionamento de Rede de Tubulações. O problema minimiza o custo anual total de instalação e bombeamento de uma rede com 6 ramos, com diâmetros arredondados para os valores comerciais disponíveis (100, 125, 150, 200, 250, 300, 350 ou 400 mm):

$$f(x) = \sum_j 150 \cdot (D_j/1000)^{1,2} \cdot L_j + P_b \cdot 8760 \cdot 400/1000 \quad (20)$$

em que D_j [mm] é o diâmetro do ramo j , L_j [m] é o comprimento e P_b [kW] é a potência de bombeamento $P_b = \gamma \cdot Q \cdot H_{tot} / \eta$, com $\gamma = 9.810$ N/m³ e $\eta = 0,75$. As perdas de carga são calculadas pela equação de Hazen-Williams em unidades SI (q em m³/s; D em metros):

$$h_{f,j} = 10,67 \cdot L_j \cdot [q / (C_{HW} \cdot D_{j,m}^{2,63})]^{1/0,54} \quad (21)$$

com $C_{HW} = 130$ e $D_{j,m} = D_j/1000$ (em metros). A restrição de pressão mínima em cada nó consumidor é:

$$h_{f,j} \leq 30 \text{ m } \forall j \quad (22)$$

Dados: $q = [60; 40; 35; 30; 20; 25]$ L/s; $L = [1000; 800; 1200; 900; 700; 600]$ m. Inspirado em Simpson et al. (1994).

Tratamento de Restrições

Todas as restrições de desigualdade dos cinco problemas são tratadas pelo método de penalização exterior estática (Coello, 2002). A função objetivo penalizada tem a forma geral:

$$f_{pen}(x) = f(x) + 10^3 \cdot \sum_k [\max\{0, g_k(x)\}]^2 \quad (23)$$

Protocolo experimental

O protocolo segue as diretrizes de Eiben e Smit (2011) e Bartz-Beielstein et al. (2020) para comparação empírica rigorosa de MOAs.

Cada execução teve um limite fixo de $N_{max} = 10.000$ avaliações da função objetivo, obtidas a partir de 200 épocas com população de 50 indivíduos (exceto EGA, cuja população é iniciada de forma idêntica). O mesmo orçamento é aplicado a todos os algoritmos e problemas, garantindo comparação justa em termos de custo de avaliação.

Rodadas independentes: 100 rodadas por combinação algoritmo $\times$ problema, com sementes pseudo-aleatórias determinísticas e documentadas ($seed = run \cdot 137 + prob \cdot 31 + alg \cdot 7 \bmod 2^{31}$), garantindo reprodutibilidade total. O número de 30 é o mínimo recomendado para aplicação dos testes de Wilcoxon e Friedman (García et al., 2009). Assim, o uso de 100 rodadas consiste em uma escolha adequada.

Curvas de convergência: as curvas são normalizadas para a fração de melhoria $f^*(t) \in [0,1]$, definida por:

$$f^*(t) = [f(0) - f(t)] / [f(0) - f(T)] \quad (24)$$

com $f^*(0) = 0$ e $f^*(T)$ tendendo a 1 quando o algoritmo converge para o melhor valor encontrado $f(T)$. Essa métrica permite comparação visual direta entre problemas com escalas de fitness muito distintas, com bandas de intervalo interquartil (IQR) mostrando a variabilidade entre as 100 rodadas.

Análise Estatística

A análise segue o arcabouço metodológico de Demšar (2006) e García et al. (2009) para comparação múltipla de algoritmos estocásticos. Como os dados não garantem normalidade, adota-se abordagem inteiramente não-paramétrica com dois estágios:

1. Teste de Friedman (Friedman, 1937): verifica se há diferença estatisticamente significativa entre os $k=8$ algoritmos em cada problema, utilizando as 100 rodadas como blocos. Hipótese nula H_0 : todos os algoritmos têm o mesmo desempenho mediano. Nível de significância $\alpha = 0,05$.

2. Pós-teste de Wilcoxon (Wilcoxon, 1945): em caso de rejeição de H_0 , aplicado a todos os $C(8,2) = 28$ pares de algoritmos em cada problema. A correção de Holm (1979) controla a taxa de erro por família (FWER, *Family-Wise Error Rate*), sendo menos conservadora que a correção de Bonferroni e mais poderosa para múltiplas comparações.

3. Por fim, foi calculado o ranqueamento global. Este foi calculado pelo rank médio de cada algoritmo sobre os 5 problemas. Utiliza-se o método de média de postos em caso de empate (*pandas.rank(method='average')*), que atribui a cada membro do empate a média dos postos que ocupariam. Esse indicador permite identificar algoritmos robustos de propósito geral sem ocultar comportamentos específicos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ranking Global

A Tabela 3 apresenta o ranking global e por problema. DE e EO obtiveram o melhor desempenho geral (rank médio 2,80), empatados em primeiro lugar. ABC ficou em terceiro (3,10), liderando isoladamente no biorreator (P4, rank 1). GWO mostrou-se o algoritmo

com comportamento médio mais consistente na sequência (3,60), posicionando-se entre os quatro primeiros em P1, P2 e P4. PSO e WOA apresentaram desempenho intermediário (5,50 e 5,60, respectivamente), com WOA penalizado pela última posição em P1 e P5. SCA (6,00) e EGA (6,60) ocuparam as últimas posições globais.

Tabela 3. Ranking global e por problema. Ranks fracionários indicam empate (média dos postos).

Pos.	Alg.	P1	P2	P3	P4	P5	Rank Médio
1°	DE	1,5	1,5	3,5	3,5	4,0	2,80
1°	EO	1,5	1,5	3,5	3,5	4,0	2,80
3°	ABC	3,0	4,0	3,5	1,0	4,0	3,10
4°	GWO	4,0	3,0	3,5	3,5	4,0	3,60
5°	PSO	6,0	7,0	3,5	7,0	4,0	5,50
6°	WOA	8,0	5,0	3,5	3,5	8,0	5,60
7°	SCA	5,0	6,0	7,0	8,0	4,0	6,00
8°	EGA	7,0	8,0	8,0	6,0	4,0	6,60

Análise Detalhada por Problema

P1 — CSTR e P2 — HEN: DE e EO empataram em primeiro lugar (rank 1,5) em ambos os problemas, convergindo ao ótimo global com alta consistência (desvio-padrão — $DP \approx 0$ em P1, $DP \approx 2,4$ em P2) em todas as 100 rodadas. A perturbação vetorial do DE, que cria soluções candidatas a partir de diferenças entre indivíduos da população, e a dinâmica de equilíbrio de massa do EO são mecanismos especialmente eficazes em paisagens de fitness com alta curvatura e interações não-lineares entre variáveis. WOA apresentou o pior desempenho em P1 (rank 8, mediana=12,28 $\pm$ 0,82), sugerindo que a estratégia de busca em espiral logarítmica é inadequada para o espaço de 4 dimensões do CSTR.

P3 — Destilação Binária: seis dos oito algoritmos convergiram para a mesma mediana (3.338,2 MJ/h, $DP \approx 0$), com ranks todos iguais a 3,5. Apenas SCA (rank 7, mediana=3.338,2 com $DP=0,038$) e EGA (rank 8, mediana=3.639,2, $DP=431,7$) não atingiram o ótimo global de forma consistente. A alta degeneração indica que o ótimo desta instância é facilmente alcançável com 10.000 avaliações: o espaço de 3 variáveis (sendo 2 inteiras) e a restrição ativa $R \geq 1,2 \cdot R_{\min}$ tornam o problema essencialmente unidimensional nas condições avaliadas.

P4 — Biorreator Fed-Batch: ABC liderou com rank 1 e mediana=26,545 g ($DP \approx 0$). DE, GWO, EO e WOA empataram em rank 3,5 com a mesma mediana, enquanto PSO (rank 7, mediana=26,526) e SCA (rank

8, mediana=26,523) não convergiram ao ótimo global. O mecanismo de abandono de fontes de alimento do ABC permite escapar dos platôs do espaço de controle dinâmico do biorreator, onde pequenas variações na vazão de alimentação produzem mudanças mínimas na biomassa final. EGA apresentou a maior variabilidade ($DP=0,002$) em P4.

P5 — Rede de Tubulações: sete dos oito algoritmos convergiram para a mesma mediana (R\$ 231.384/ano, $DP \approx 0$). WOA foi o único a não atingir o ótimo global consistentemente (mediana=R\$ 233.745, $DP=3,409$). O arredondamento dos diâmetros para valores comerciais reduz o número de soluções distintas efetivas para $8^6=262.144$ combinações, tornando o problema trivialmente resolvível para a maioria dos MOAs com o orçamento disponível. O problema é, portanto, de baixa discriminabilidade para este protocolo experimental e não é recomendado como benchmark isolado em estudos futuros.

Curvas de Convergência

A Figura 1 apresenta as curvas de convergência normalizada $f^*(t)$ com bandas de IQR. Em P1 e P2, observa-se clara separação entre algoritmos: DE, EO, GWO e ABC atingem $f^* \approx 1,0$ em menos de 2.000 avaliações, enquanto PSO e WOA apresentam convergência mais lenta, e EGA permanece abaixo de 0,90 mesmo após 10.000 avaliações. A banda de IQR estreita de DE e EO confirma alta reprodutibilidade entre as 100 rodadas.

Em P3 e P5, a maioria dos algoritmos atinge $f^*=1,0$ em poucas centenas de avaliações, confirmando a baixa discriminabilidade dessas instâncias. Em P4, ABC e GWO convergem rapidamente ($f^* \rightarrow 1,0$ em ~ 3.000 avaliações), enquanto SCA e PSO apresentam convergência incompleta ($f^* \approx 0,90-0,95$), e EGA exibe a maior incerteza (banda de IQR ampla), reflexo da alta dependência da solução inicial em um espaço de 10 dimensões.

Distribuição das 100 Rodadas

Os diagramas de caixas (boxplots) da Figura 2 (escala z-score por problema) revelam a consistência interna de cada algoritmo. Em P1 e P2, DE e EO apresentam caixas virtualmente degeneradas próximas ao melhor valor global (linha pontilhada), com medianas e médias coincidentes, indicando convergência determinística ao ótimo em todas as 100 rodadas. GWO e ABC também mostram caixas compactas em P1.

EGA e WOA exibem as maiores dispersões em P1 e P2, com caixas largas e médias afastadas do melhor valor global, evidenciando instabilidade no processo de busca. Em P4, PSO apresenta valores extremos (outliers) inferiores pronunciados, indicando tendência de ficar preso em ótimos locais do espaço de

controle do biorreator. Os valores extremos acima de 4σ em P2 para EGA e WOA sugerem que esses

algoritmos, em algumas rodadas, não escapam das regiões de alta penalidade do espaço de busca.

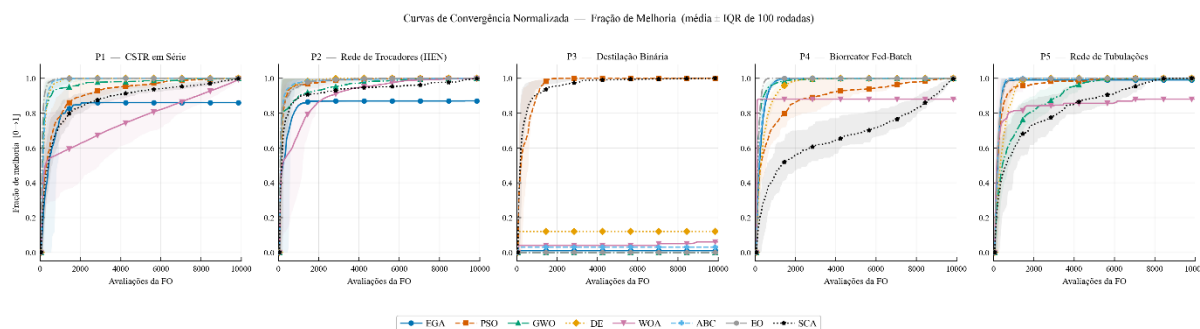


Figura 1. Curvas de convergência normalizada — fração de melhoria $f^*(t) \in [0,1]$ — para os 8 algoritmos nos 5 problemas (média de 100 rodadas; banda = IQR entre Q25 e Q75). $f^*=0$ indica valor inicial; $f^*=1$ indica o melhor valor atingido pelo algoritmo. Eixo horizontal: número de avaliações da função objetivo (máx. 10.000).

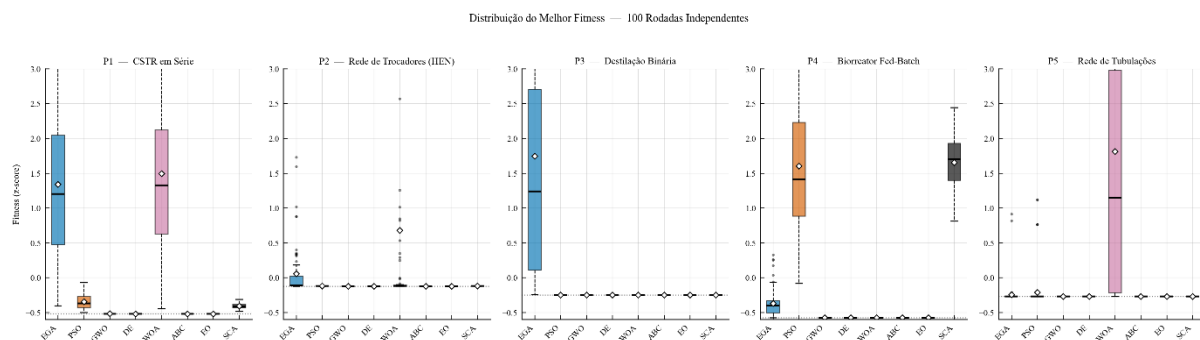


Figura 2. Diagramas de caixas (boxplots) do melhor fitness nas 100 rodadas independentes, normalizados por z-score dentro de cada problema (desvio-padrão amostral, $ddof=1$). ◇ = média aritmética; linha pontilhada = melhor valor global por problema. A normalização por z-score permite comparação visual direta entre problemas com escalas de fitness muito distintas.

Heatmap de Rankings: Adequação Algoritmo-Problema

A Figura 3 sintetiza os rankings por problema. DE e EO dominam em P1 e P2 (rank 1,5 em ambos), confirmando a eficácia de perturbação vetorial e dinâmica de equilíbrio em paisagens de fitness multimodais com interações entre variáveis contínuas. ABC lidera em P4 (rank 1), beneficiando-se do mecanismo de abandono de fontes que gera diversificação em platôs do biorreator. A consistência de GWO (entre os quatro primeiros em P1, P2 e P4) sugere que a hierarquia de liderança α - β - δ - ω equilibra exploração e exploração de forma robusta em espaços contínuos de dimensão moderada. A Figura 4 mostra um radar plot por algoritmo e tipo de problema.

O ranking global, mostrado na Figura 5 confirma DE e EO como os algoritmos mais robustos para os tipos de problemas avaliados, com ABC próximo em terceiro lugar. O perfil do heatmap evidencia que não há algoritmo dominante em todos os problemas, mesmo DE e EO, com rank 1,5 em P1 e P2, ficam em

rank 3,5 em P3, P4 e P5. Essa observação é diretamente consistente com o teorema NFL.

Testes Estatísticos

O teste de Friedman rejeitou a hipótese nula ($p<0,001$) para todos os cinco problemas, confirmando que há diferenças estatisticamente significativas entre pelo menos um par de algoritmos em cada caso. O pós-teste de Wilcoxon com correção de Holm identificou os seguintes pares com diferença significativa ($p<0,05$ após correção):

P1: DE e EO diferem significativamente de EGA, WOA, PSO e SCA ($p<0,001$). ABC difere significativamente de EGA e WOA.

P2: DE e EO diferem significativamente de EGA, PSO, WOA e SCA. GWO difere significativamente de WOA e SCA.

P3: EGA difere significativamente de todos os demais algoritmos, sendo o único que não converge ao ótimo global nesta instância.

P4: ABC difere significativamente de PSO e SCA. EGA difere significativamente de PSO.

P5: WOA difere significativamente de todos os demais (único que não converge ao ótimo global).

Em P3 e P5, a degeneração dos dados limita o poder discriminativo dos testes para os pares não citados. Essa limitação deve ser interpretada como insuficiência discriminativa da instância para este orçamento de avaliações, e não como evidência de igualdade geral entre os algoritmos.



Figura 3. Ranking dos algoritmos por problema benchmark.

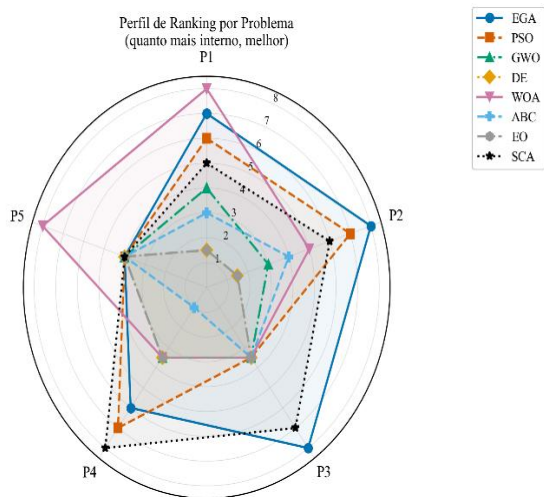


Figura 4. Perfil de desempenho dos algoritmos nos problemas benchmark.

Custo Computacional

O biorreator (P4) é o problema computacionalmente mais custoso: tempo médio de 5–10 s por rodada para todos os algoritmos, em razão da integração numérica de EDOs a cada avaliação da função objetivo. ABC apresenta o maior custo em P4 (~10 s), pois o mecanismo de abandono implica avaliações adicionais das fontes de alimento antes da reinicialização. P1, P2, P3 e P5 apresentam tempos

inferiores a 1 s por rodada. O tempo total do experimento (8 algoritmos $\times$ 5 problemas $\times$ 100 rodadas = 4.000 execuções) foi de aproximadamente 40 min em processador único.

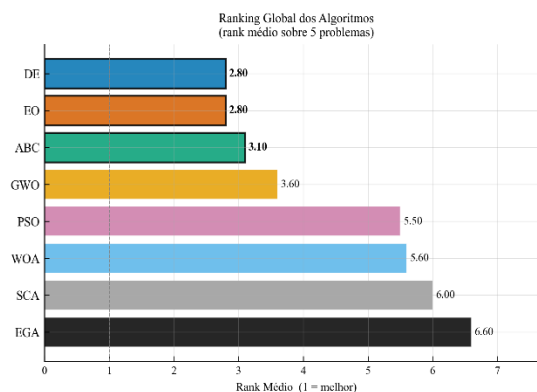


Figura 5. Desempenho global dos algoritmos metaheurísticos.

Implicações para a Seleção de MOAs em Engenharia Química

Os resultados corroboram empiricamente o teorema NFL de Wolpert e Macready (1997): não há algoritmo dominante em todos os problemas do conjunto avaliado. A análise combinada do heatmap de rankings e dos diagramas de caixas permite identificar quatro padrões de adequação:

- Paisagens multimodais com interações entre variáveis (P1, P2): a perturbação vetorial explora diferenças entre indivíduos da população, sendo eficaz em espaços com alta curvatura; a dinâmica de equilíbrio de estados do EO gera atratores que naturalmente convergem para regiões de baixo custo neste tipo de paisagem.
- Problemas de controle ótimo com platôs (P4): o abandono de fontes e a reinicialização aleatória de exploradoras permitem escapar de platôs extensos no espaço de perfis de alimentação, onde pequenas variações de vazão produzem mudanças mínimas na biomassa final.
- Problemas de baixa dimensionalidade com restrição ativa dominante (P3): o ótimo é determinado pela restrição ativa $R \geq 1,2 \cdot R_{min}$, tornando o problema essencialmente unidimensional nas condições avaliadas.

(iv) Problemas combinatórios discretos com espaço de busca reduzido (P5): o arredondamento para diâmetros comerciais reduz o espaço efetivo, tornando a distinção baseada apenas na velocidade de convergência.

Esses padrões sugerem que a seleção do MOA deveria ser orientada por uma análise prévia da morfologia da paisagem de fitness, grau de multimodalidade,

dimensionalidade efetiva, presença de platôs e tipo de restrições ativas, e não apenas por rankings globais genéricos ou pela popularidade do algoritmo na literatura.

CONCLUSÃO

Este trabalho apresentou um estudo empírico sistemático comparando oito algoritmos de otimização metaheurísticos em cinco problemas de referência de engenharia química e de processos, com protocolo estatístico rigoroso (100 rodadas, 10.000 avaliações, Friedman + Wilcoxon-Holm). Os principais resultados e contribuições são:

(i) DE e EO obtiveram os melhores desempenhos globais (rank médio 2,80), liderando nos problemas de maior não-linearidade (CSTR e HEN), com convergência ao ótimo global em todas as 100 rodadas e desvio-padrão essencialmente nulo. Esses algoritmos são recomendados como primeira escolha para problemas de engenharia de reatores e integração energética com características similares às avaliadas.

(ii) ABC foi o algoritmo mais eficaz para o biorreator fed-batch (rank 1), beneficiando-se do mecanismo de abandono de fontes de alimento para diversificação em platôs do espaço de controle dinâmico. Para problemas de controle ótimo de bioprocessos com integração de EDOs, ABC é a opção mais robusta entre os oito avaliados.

(iii) Os resultados corroboram empiricamente o teorema No Free Lunch: a morfologia da paisagem de fitness é o fator determinante na seleção do MOA, não a família algorítmica. Algoritmos de perturbação vetorial e equilíbrio de estados são vantajosos em espaços com alta curvatura; algoritmos de memória distribuída destacam-se em espaços com platôs extensos.

(iv) Os problemas de destilação (P3) e tubulações (P5), nas instâncias avaliadas, apresentaram baixo poder discriminativo com 10.000 avaliações. Recomenda-se, para trabalhos futuros, o uso de formulações de maior dimensionalidade, abordagens multiobjetivo ou restrições não-lineares mais complexas para aumentar o poder discriminativo do conjunto de problemas.

REFERÊNCIAS

AL BANNOUD, M.; MOREIRA DA SILVA, C. A.; MARTINS, T. D. Applications of metaheuristic optimization algorithms in model predictive control for chemical engineering processes: A systematic review. **Annual Reviews in Control**, 2024. DOI: 10.1016/j.arcontrol.2024.100973.

BARTZ-BEIELSTEIN, T. et al. **Benchmarking in optimization: best practice and open issues**. arXiv:2007.03488, 2020.

BIEGLER, L. T. **Nonlinear Programming: Concepts, Algorithms, and Applications to Chemical Processes**. Philadelphia: SIAM, 2010.

COELLO, C. A. C. Theoretical and numerical constraint-handling techniques used with evolutionary algorithms: a survey of the state of the art. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 191, n. 11-12, p. 1245-1287, 2002.

DEMŠAR, J. Statistical comparisons of classifiers over multiple data sets. **Journal of Machine Learning Research**, v. 7, p. 1-30, 2006.

EDGAR, T. F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L. S. **Optimization of Chemical Processes**. 2. ed. Nova York: McGraw-Hill, 2001.

EIBEN, A. E.; SMIT, S. K. Parameter tuning for configuring and analyzing evolutionary algorithms. **Swarm and Evolutionary Computation**, v. 1, n. 1, p. 19-31, 2011.

FARAMARZI, A. et al. Equilibrium optimizer: A novel optimization algorithm. **Knowledge-Based Systems**, v. 191, 105190, 2020.

FLORES-TLACUAHUAC, A.; BIEGLER, L. T. Simultaneous mixed-integer dynamic optimization for integrated design and control. **Computers & Chemical Engineering**, v. 31, n. 5-6, p. 588-600, 2007.

FRIEDMAN, M. The use of ranks to avoid the assumption of normality implicit in the analysis of variance. **Journal of the American Statistical Association**, v. 32, n. 200, p. 675-701, 1937.

GARCÍA, S. et al. A study on the use of non-parametric tests for analyzing the evolutionary algorithms' behaviour: a case study on the CEC 2005 special session on real parameter optimization. **Journal of Heuristics**, v. 15, p. 617-644, 2009.

HADDAD, M.; LEKOUAGHET, B.; BENGHANEM, M. Performance evaluation of recent metaheuristic optimizers for enhanced modeling and parameter identification of PEM fuel cells. **Journal of Power Sources**, v. 676, 2026.

HOLLAND, J. H. **Adaptation in Natural and Artificial Systems**. Ann Arbor: University of Michigan Press, 1975.

HOLM, S. A simple sequentially rejective multiple test procedure. **Scandinavian Journal of Statistics**, v. 6, n. 2, p. 65-70, 1979.

KARABOGA, D. **An idea based on honey bee swarm for numerical optimization**. Technical Report TR06, Erciyes University, Kayseri, Turquia, 2005.

-
- KENNEDY, J.; EBERHART, R. Particle swarm optimization. In: **INTERNATIONAL CONFERENCE ON NEURAL NETWORKS**, Perth, 1995. Anais [...]. Nova York: IEEE, 1995. p. 1942-1948.
- KIRKPATRICK, S.; GELATT JR., C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by simulated annealing. **Science**, v. 220, n. 4598, p. 671-680, 1983.
- MIRJALILI, S. SCA: A Sine Cosine Algorithm for solving optimization problems. **Knowledge-Based Systems**, v. 96, p. 120-133, 2016.
- MIRJALILI, S.; LEWIS, A. The Whale Optimization Algorithm. **Advances in Engineering Software**, v. 95, p. 51-67, 2016.
- MIRJALILI, S.; MIRJALILI, S. M.; LEWIS, A. Grey Wolf Optimizer. **Advances in Engineering Software**, v. 69, p. 46-61, 2014.
- RANGAIAH, G. P. (Ed.). **Stochastic Global Optimization: Techniques and Applications in Chemical Engineering**. Singapura: World Scientific, 2010.
- RANGAIAH, G. P.; BONILLA-PETRICIOLET, A. (Eds.). **Multi-Objective Optimization in Chemical Engineering: Developments and Applications**. Chichester: Wiley, 2013.
- ROUBOS, J. A. et al. Minimum time feeding policy for high cell density fed-batch cultures. In: **IFAC WORKSHOP ON DYNAMICS AND CONTROL OF CHEMICAL REACTORS**, 1999.
- SIMPSON, A. R.; DANDY, G. C.; MURPHY, L. J. Genetic algorithms compared to other techniques for pipe optimization. **Journal of Water Resources Planning and Management**, v. 120, n. 4, p. 423-443, 1994.
- STORN, R.; PRICE, K. Differential evolution — a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. **Journal of Global Optimization**, v. 11, p. 341-359, 1997.
- VAN THIEU, N.; MIRJALILI, S. MEALPY: An open-source library for latest meta-heuristic algorithms in Python. **Journal of Systems Architecture**, v. 139, 102871, 2023.
- WILCOXON, F. Individual comparisons by ranking methods. **Biometrics Bulletin**, v. 1, n. 6, p. 80-83, 1945.
- WOLPERT, D. H.; MACREADY, W. G. No free lunch theorems for optimization. **IEEE Transactions on Evolutionary Computation**, v. 1, n. 1, p. 67-82, 1997.
- YEE, T. F.; GROSSMANN, I. E. Simultaneous optimization models for heat integration — II. Heat exchanger network synthesis. **Computers & Chemical Engineering**, v. 14, n. 10, p. 1165-1184, 1990.