

## Problema inverso aplicado a equação de Antoine para acetona e etanol

### *Inverse problem applied to Antoine equation for acetone and ethanol*

Ademilton Luiz Rodrigues de Souza<sup>1</sup>, Daniel Gomes Ribeiro<sup>2</sup>, Leonardo de Sousa Grigorio<sup>3</sup>, Igor Meirelles Martins<sup>4</sup>, Vitor Salles Bittencourt Muniz<sup>5</sup>

#### RESUMO

Os Algoritmos Evolucionários (AEs) são métodos de otimização não determinísticos amplamente utilizados na literatura, e encontram grande relevância e larga utilização em problemas envolvendo funções não lineares, não diferenciáveis ou multimodais. A Evolução Diferencial (ED) é um algoritmo que possui elementos dos AEs, como o operador de mutação, cruzamento e seleção, mas difere na geração de novos indivíduos. Neste trabalho, utilizou-se o algoritmo da ED na resolução do problema inverso da determinação dos coeficientes da equação de Antoine para a acetona e o etanol. Para tal, foram usados dados de temperatura e pressão disponíveis no Dortmund Data Bank (DDB) e foram realizadas 30 simulações para cada parâmetro da taxa de perturbação (F) e da probabilidade de cruzamento (CR). As previsões de pressão calculadas utilizando-se os parâmetros obtidos pelo processo estocástico apresentaram maior concordância com os dados experimentais quando comparadas com as previsões obtidas através dos parâmetros consultados na literatura.

**Palavras-chave:** Evolução Diferencial. Equação de Antoine. Pressão de vapor. Otimização.

#### ABSTRACT

Evolutionary Algorithms (AEs) are non-deterministic optimization methods widely used in the literature and find great relevance and wide use in problems involving non-linear, non-differentiable or multimodal functions. Differential Evolution (DE) is an algorithm that has elements of the AEs, such as the mutation, crossing and selection operator, but differs in the generation of new individuals. In this work, the DE algorithm was used to solve the inverse problem of determining the coefficients of the Antoine equation for acetone and ethanol. To this end, temperature and pressure data available in the Dortmund Data Bank (DDB) were used and 30 simulations were performed for each parameter of disturbance rate (F) and crossover probability (CR). The pressure predictions calculated using the parameters obtained by the stochastic process showed greater agreement with the experimental data when compared with the predictions obtained through the parameters consulted in the literature.

**Keywords:** Differential Evolution. Antoine's Equation. Steam pressure. Optimization.

<sup>1</sup> DSc. – Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca, CEFET/RJ. <https://orcid.org/0000-0003-1019-3806>

E-mail: [ademilton.souza@cefet-rj.br](mailto:ademilton.souza@cefet-rj.br)

<sup>2</sup> DSc. – Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca, CEFET/RJ. <https://orcid.org/0000-0003-0106-4041>

<sup>3</sup> DSc. – Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca, CEFET/RJ. <https://orcid.org/0000-0002-6150-3491>

<sup>4</sup> Graduando – Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca, CEFET/RJ. <https://orcid.org/0000-0002-5891-4556>

<sup>5</sup> Graduando – Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca, CEFET/RJ. <https://orcid.org/0000-0001-7822-300X>

## 1. INTRODUÇÃO

A otimização se caracteriza como uma busca por parâmetros que sejam capazes de maximizar ou minimizar os valores de uma função. A maioria dos métodos de otimização determinísticos consistem em encontrar soluções ótimas através de uma série de convergência, em que cada ponto é avaliado na função objetivo. Dependendo das restrições do problema, a solução encontrada é utilizada para determinar outras soluções até que um determinado critério de parada seja atingido. As técnicas determinísticas apresentam algumas dificuldades para encontrar a solução ótima quando o problema é complexo, não diferenciável ou apresenta diversos mínimos e máximos locais no espaço de busca. Uma maneira de contornar esses problemas é utilizando-se métodos estocásticos ou naturais de otimização, nos quais os algoritmos evolucionários (AEs) fazem parte (KARABOĞA e ÖKDEM, 2004).

Os AEs são algoritmos inspirados na evolução biológica e buscam as melhores soluções através de mutações e cruzamentos entre os indivíduos, em geral entes numéricos, de uma população. Diferentes dos métodos determinísticos que convergem mais rapidamente para uma solução ótima, os AEs necessitam de mais avaliações na função objetivo, demandando mais tempo computacional para realizar a otimização (OLIVEIRA, 2006).

Numa direção diferente dos algoritmos estocásticos de otimização, modelos termodinâmicos são representações matemáticas associadas a fenômenos envolvendo calor e outras formas de energia. Alguns modelos termodinâmicos, como a equação de Antoine, descrevem o comportamento de sistemas em que a pressão exercida pela fase vapor de uma substância está em equilíbrio termodinâmico com o líquido gerador. Devido à sua propriedade física e a sua relação com outras propriedades termodinâmicas, a pressão de vapor é uma grandeza importante presente em diversas funções, como a equação de Henglein, Antoine e Clausius-Clapeyron, que tentaram relacioná-la com a temperatura. Porém, nenhuma dessas expressões obtidas descrevem perfeitamente essa relação como a equação de Antoine, que geralmente é a mais recomendada para tal uso. Isso pode ser justificado por se tratar de uma função semi-empírica, relativamente simples e que possui três constantes que dependem apenas da temperatura e da substância (THOMSON, 1946).

No presente trabalho, os principais objetivos consistem em investigar os parâmetros presentes na equação de Antoine e aplicar o algoritmo da evolução diferencial no problema

inverso de determinação destes coeficientes para as substâncias acetona e etanol. Inicialmente o problema inverso é formulado considerando o procedimento da máxima verossimilhança resultando num problema de otimização onde a função objetivo deve ser minimizada. Os dados experimentais e as constantes de Antoine, usadas na comparação com as soluções encontradas, utilizados neste trabalho, foram retirados do DORTMUND DATA BANK (2021).

## 2. METODOLOGIA

A pressão de vapor de uma substância pode ser definida pela pressão exercida pelo vapor quando está em equilíbrio termodinâmico, com o líquido que lhe deu origem, ou seja, quando a fase gasosa está saturada por esse componente. Existem na literatura diversas equações com grande aplicação que relacionam as pressões de vapor ( $P$ ) e a temperatura ( $T$ ). Dentre elas, destaca-se a equação de Antoine que é uma função semi-empírica, e que foi apresentada inicialmente em 1888 pelo engenheiro francês Louis Charles Antoine:

$$P = 10^A - \frac{B}{C+T} \quad (1)$$

onde  $A$ ,  $B$  e  $C$  são constantes ajustáveis que dependem da substância e da temperatura ( $T$ ), em que a pressão é expressa em mmHg e a temperatura é dada em Kelvin.

O problema inverso da equação de Antoine consiste em encontrar os coeficientes  $A$ ,  $B$ , e  $C$  que melhor se ajustam a um conjunto de dados experimentais. A estimação de parâmetros pelo procedimento da máxima verossimilhança resulta num problema de otimização onde a função objetivo, que quantifica os desvios entre as previsões de um modelo e suas observações experimentais, deve ser minimizada. Considerando que os erros experimentais são cumulativos, não correlacionados, e podem ser modelados pela distribuição normal, com média zero e desvio padrão constante, então a função objetivo a ser minimizada para obtenção de estimativas de máxima verossimilhança pode ser representada pelo somatório dos resíduos quadrados entre as respostas do modelo e as observações experimentais (SCHWAAB e PINTO, 2007):

$$MIN = \sum_{i=1}^n (P_{exp,i} - P_{cal,i})^2 \quad (2)$$

onde  $n$  é o número total de medidas experimentais,  $P_{cal}$  é o vetor que contém os valores calculados de pressão através da solução da Equação (1) para as mesmas temperaturas das observações experimentais,  $P_{exp}$ .

## 2.1 Evolução Diferencial (ED)

Dos diversos AEs existentes, o algoritmo da Evolução Diferencial (ED) tem se tornado popular nos últimos anos devido a sua boa convergência em funções complexas e a sua fácil implementação (BREST ET AL., 2006).

A ED é um método estocástico de otimização proposto em 1995 por Storn e Price, em que o algoritmo consiste de uma busca paralela, direta e consegue lidar com problemas em que a função é não diferenciável, complexa ou multimodal (STORN e PRICE, 1997). A ED foi feita com o intuito de possuir poucos argumentos e contém características dos AEs mas se difere na geração de novos indivíduos.

Antes de ser inicializado o processo de otimização, é necessário passar algumas variáveis para o algoritmo, como o número de gerações ( $G$ ), a probabilidade de cruzamento ( $CR$ ), o tamanho da população ( $p$ ), a taxa de perturbação ( $F$ ) e o intervalo de busca de cada parâmetro. Depois de serem especificados os argumentos, o algoritmo gera  $p$  indivíduos aleatórios, que podem ser interpretados como  $\vec{x}_{i,G}$ , em que  $i=1,2,3,\dots,p$  e  $G$  é a geração atual. Posteriormente, através da mutação e do cruzamento, são criados  $p$  vetores de validação que são avaliados na função objetivo.

No algoritmo clássico da ED, a mutação é realizada pela soma da diferença ponderada entre dois vetores a um terceiro, como mostrado na equação seguinte:

$$\vec{v}_{i,G} = \vec{x}_{r_1,G} + F * (\vec{x}_{r_2,G} - \vec{x}_{r_3,G}) \quad (3)$$

onde  $\vec{v}_{i,G}$  é o vetor criado durante a mutação;  $\vec{x}_{r_1,G}$ ,  $\vec{x}_{r_2,G}$  e  $\vec{x}_{r_3,G}$  são indivíduos escolhidos aleatoriamente, e  $F \in [0,2]$ . Os índices  $r_1$ ,  $r_2$ ,  $r_3$  são números inteiros, aleatórios em  $[1,\dots,p]$  de tal modo que se tenha  $r_1 \neq r_2 \neq r_3 \neq i$ .

Para aumentar a variedade dos indivíduos, o operador de cruzamento é inserido no algoritmo da ED. Nesta etapa, são produzidos novos vetores candidatos a solução em que as suas coordenadas são herdadas dos vetores  $\vec{v}_{i,G}$  e  $\vec{x}_{r_1,G}$ . Para tal, é gerado um número aleatório ( $Y$ ) para cada dimensão do problema. Se este número for menor ou igual a  $CR$ , a componente ( $j$ ) do vetor  $\vec{u}_{j,i,G}$  recebe o valor da coordenada  $j$  do vetor criado na mutação. Caso contrário, ele herda do indivíduo atual. Assim, o modelo matemático do operador de cruzamento é dado pela Equação (2).

$$\vec{u}_{j,i,G} = \begin{cases} \vec{v}_{j,i,G} & \text{se } Y \leq CR \text{ ou } j = rn_i \\ \vec{x}_{j,i,G} & \text{se } Y > CR \text{ e } j \neq rn_i \end{cases} \quad (4)$$

Na Equação (4) acima, temos que  $Y \in [0,1]$ ,  $rn_i$  é um índice escolhido aleatoriamente em  $[1, D]$  para cada vetor,  $j = 1,2,3,\dots,D$  e  $D$  é o total de dimensões do problema. A igualdade  $j = rn_i$  certifica que o indivíduo  $\vec{u}_{j,i,G}$  receberá pelo menos um parâmetro do vetor criado na mutação.

Após o cruzamento e a mutação, os vetores  $\vec{u}_{j,i,G}$  e  $\vec{x}_{r1,G}$  são avaliados na função objetivo e, no caso de um problema de minimização, o indivíduo que passará para a próxima geração é determinado segundo a Equação (5).

$$\vec{x}_{i,G+1} = \begin{cases} \vec{u}_{i,G} & \text{se } f(\vec{u}_{i,G}) \leq f(\vec{x}_{i,G}) \\ \vec{x}_{i,G} & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (5)$$

A Equação (5) garante que apenas os melhores indivíduos serão utilizados nas futuras gerações. Em seguida, o algoritmo avança uma geração e repete os operadores de mutação, cruzamento e seleção até que o critério de parada seja satisfeito.

As definições dos operadores mencionados anteriormente fazem parte da versão conhecida como DE/rand/1/bin do algoritmo da evolução diferencial. Cada versão do algoritmo pode ser escrita no formato DE/x/y/z, sendo que  $x$  especifica a estratégia utilizada na mutação,  $b$  a quantidade da diferença ponderada empregada e  $z$  indica qual o tipo de cruzamento (STORN e PRICE, 1997). Neste estudo foi utilizada a versão DE/rand/1/bin considerando como critério de parada o número máximo de gerações. O seu passo a passo é apresentado a seguir:

- Passo 1. Entrada das variáveis  $G$ ,  $CR$ ,  $F$ ,  $p$ , e do espaço de busca dos parâmetros do problema;
- Passo 2. Gerar a população inicial;
- Passo 3. Repetir os passos 4 ao 9 até  $g$  gerações;
- Passo 4. Repetir os passos 5 ao 9 até o tamanho total da população;
- Passo 5. Escolher aleatoriamente os vetores  $\vec{x}_{r1,G}$ ,  $\vec{x}_{r2,G}$  e  $\vec{x}_{r3,G}$  e  $rn_i$ ;
- Passo 6. Repetir os passos 7 e 8 até  $D$  dimensões;
- Passo 7. Gerar aleatoriamente o valor  $Y$ ;
- Passo 8. Aplicar a Equação (4) para encontrar os componentes do vetor  $\vec{u}_{j,i,G}$ ;
- Passo 9. Avaliar os vetores  $\vec{u}_{j,i,G}$  e  $\vec{x}_{j,i,G}$  na função objetivo;
- Passo 10. Retornar o melhor indivíduo ou a população.
- Passo 11. Fim do programa.

## 2.2 Dados Experimentais

Neste trabalho, foram utilizados 79 valores de pressão e temperatura para a acetona, em que  $P \in [0,094;136,626]$  kPa e  $T \in [-63,6;65,8]$  °C. Para o etanol foram utilizados 98 valores, onde  $P \in [1,5932;102,22]$  kPa e  $T \in [0,78;55]$  °C (DORTMUND DATA BANK, 2021; FELSING e DURBAN, 1926; KRETSCHMER e WIEBE, 1949; MISHCHENKO e SUBBOTINA, 1967; SCATCHARD e RAYMOND, 1938; SCATCHARD e SATKIEWICZ, 1964; CHUN e DAVISON, 1972; DAVIS e BURROWS, 1936)

Com o intuito de avaliar a qualidade dos resultados que seriam obtidos pelo algoritmo da ED, dividiu-se os dados experimentais de cada substância, aleatoriamente, em dois conjuntos: um de regressão e outro de validação. O primeiro foi utilizado na análise do problema inverso para encontrar as constantes de Antoine da acetona e do etanol. No segundo conjunto de dados, comparou-se as medidas de pressão experimentais com as calculadas pela equação de Antoine, usando os coeficientes disponíveis no Dortmund Data Bank (DDB) e os encontrados pelo algoritmo. No caso do etanol, os conjuntos tiveram o mesmo tamanho, ou seja, 49 dados para cada. Para a acetona, o grupo de regressão teve 39 valores e o de validação 40.

## 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

As variáveis de entrada implementadas no algoritmo DE/rand/1/bin foram  $G = 500$ ,  $P=50$ ,  $CR$  e  $F$  não constantes. Para o intervalo do espaço de busca foram utilizados como referência os coeficientes de Antoine disponíveis no DDB com:  $A \in [1,50]$ ,  $B \in [50,5000]$  e  $C \in [50,5000]$ . Essas configurações foram usadas em ambas as substâncias.

Nas Tabelas 1 e 2 são apresentadas, respectivamente, as soluções encontradas pelo algoritmo para as constantes de Antoine para a acetona e o etanol.

Cada valor mostrado é o melhor resultado obtido em 30 simulações realizadas para cada par ordenado de  $CR$  e  $F$ . Na última coluna, encontram-se os valores mínimos obtidos quando os coeficientes e os dados de validação são aplicados na Equação (2).

Na Tabela 3, apresentam-se as constantes de Antoine descritas pela literatura, as melhores soluções encontradas para cada substância pelo algoritmo DE/rand/1/bin e os valores mínimos obtidos quando os coeficientes e os dados de validação são aplicados na Equação (2).

**Tabela 1.** Soluções encontradas para a acetona.

F	CR	A	B	C	MIN (x10 <sup>6</sup> )
0,2	0,10	8,82899	1000,82104	205,20807	20,52924
	0,35	9,61769	1438,37756	255,28066	17,17497
	0,60	9,40583	1312,82397	241,77819	17,42085
	0,85	10,00287	1674,08714	278,42925	18,16890
0,4	0,10	13,14889	4341,91608	476,63867	36,56062
	0,35	9,22568	1213,45965	230,95684	17,43290
	0,60	9,24841	1225,69717	232,30459	17,48685
	0,85	9,05927	1125,57371	221,06956	17,80403
0,6	0,10	10,49590	1979,06475	304,37219	54,80061
	0,35	9,38703	1303,18086	240,84215	17,05882
	0,60	9,24841	1225,69717	232,30459	17,48685
	0,85	9,24841	1225,69714	232,30459	17,48708
0,8	0,10	7,68623	524,922455	138,87307	33,99311
	0,35	8,68450	939,115184	198,63005	19,22642
	0,60	9,24844	1225,71121	232,30616	17,49681
	0,85	9,24841	1225,69719	232,30459	17,48669

**Tabela 2.** Soluções encontradas para o Etanol.

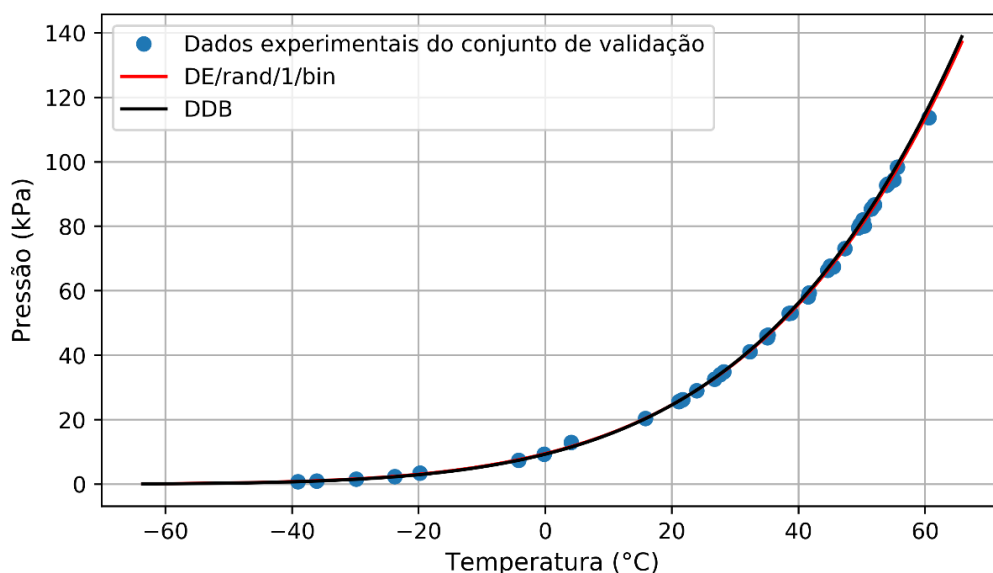
F	CR	A	B	C	MIN (x10 <sup>6</sup> )
0,2	0,10	10,08830	1493,76534	215,90615	9,48538
	0,35	10,37731	1659,39154	230,92248	9,40261
	0,60	11,33628	2252,65445	277,95109	11,40625
	0,85	9,93661	1418,63583	209,62611	9,82558
0,4	0,10	11,40137	2276,68856	278,09232	12,74605
	0,35	10,38571	1664,34083	231,36193	9,40124
	0,60	10,37480	1658,05688	230,81783	9,40081
	0,85	10,37480	1658,05689	230,81783	9,40082
0,6	0,10	9,51537	1182,31849	183,98241	25,62874
	0,35	10,05180	1478,29880	214,92753	9,42889
	0,60	10,44379	1698,41154	234,32598	9,45906
	0,85	10,37480	1658,05688	230,81783	9,40081
0,8	0,10	12,09972	2739,86780	308,31331	22,32687
	0,35	10,00255	1451,55299	212,44646	9,58775
	0,60	10,33222	1225,71121	232,30616	9,36656
	0,85	10,37480	1225,69719	232,30459	9,40083

**Tabela 3.** Comparação entre os Coeficientes obtidos e os retirados do DDB.

Substância	A	B	C	MIN (x10 <sup>6</sup> )	Referência
Acetona	9,25760	1219,97	230,653	39,68890	DDB
	9,38703	1303,18	240,842	17,05882	DE/rand/1/bin
Etanol	10,32907	1642,89	230,300	20,07051	DDB
	10,33222	1225,71	232,306	9,36656	DE/rand/1/bin

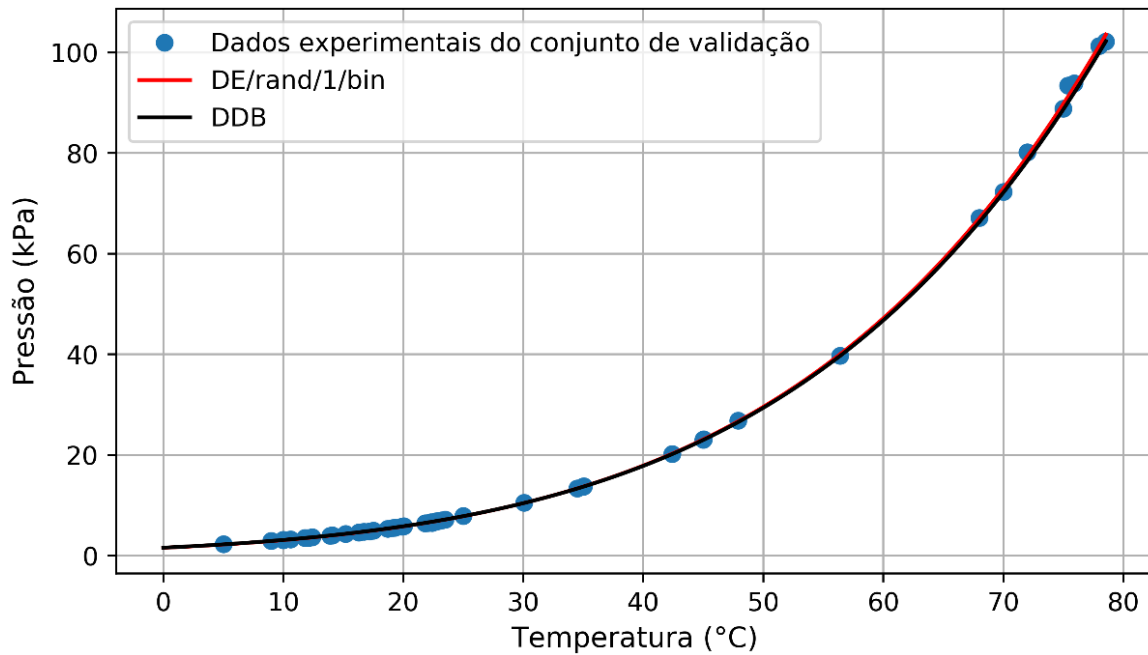
Comparando os resultados contidos nas Tabelas 1, 2 e 3 é possível observar que a maioria das soluções encontradas apresentaram valores mínimos menores se comparados com os mínimos apresentados pelo DDB, ou seja, o problema inverso pelo algoritmo de evolução diferencial deixa claro, que de fato, as estimativas dos parâmetros A, B e C se ajustaram melhor ao conjunto de dados de validação. Observa-se ainda que os resultados tabelados foram pouco influenciados pelos valores apresentados pelas taxas de perturbação (*F*) e probabilidades de cruzamento (*CR*), com exceção daqueles obtidos com *CR* = 0,10 que pode ser devido à natureza aleatória dos métodos estocásticos e às flutuações nos dados experimentais.

Nas Figuras 1 e 2 são mostradas as curvas das pressões calculadas pela equação de Antoine com os parâmetros da Tabela 3 e as pressões experimentais do conjunto de validação para cada substância.



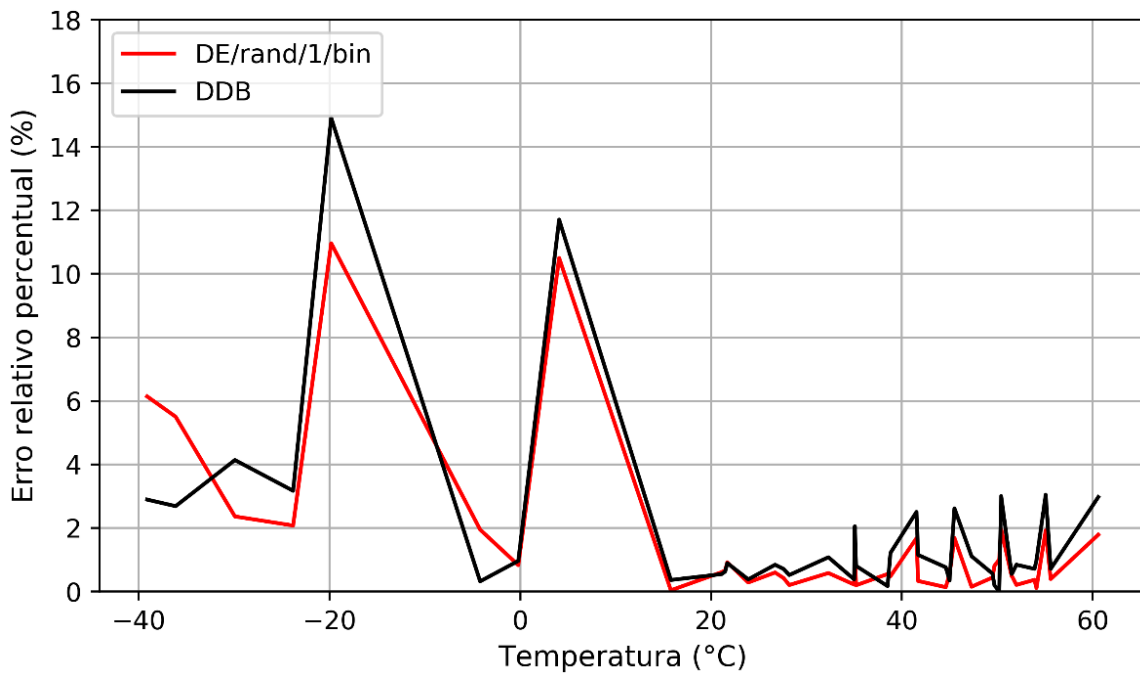
**Figura 1.** Pressões experimentais e calculadas para o conjunto de validação da acetona.



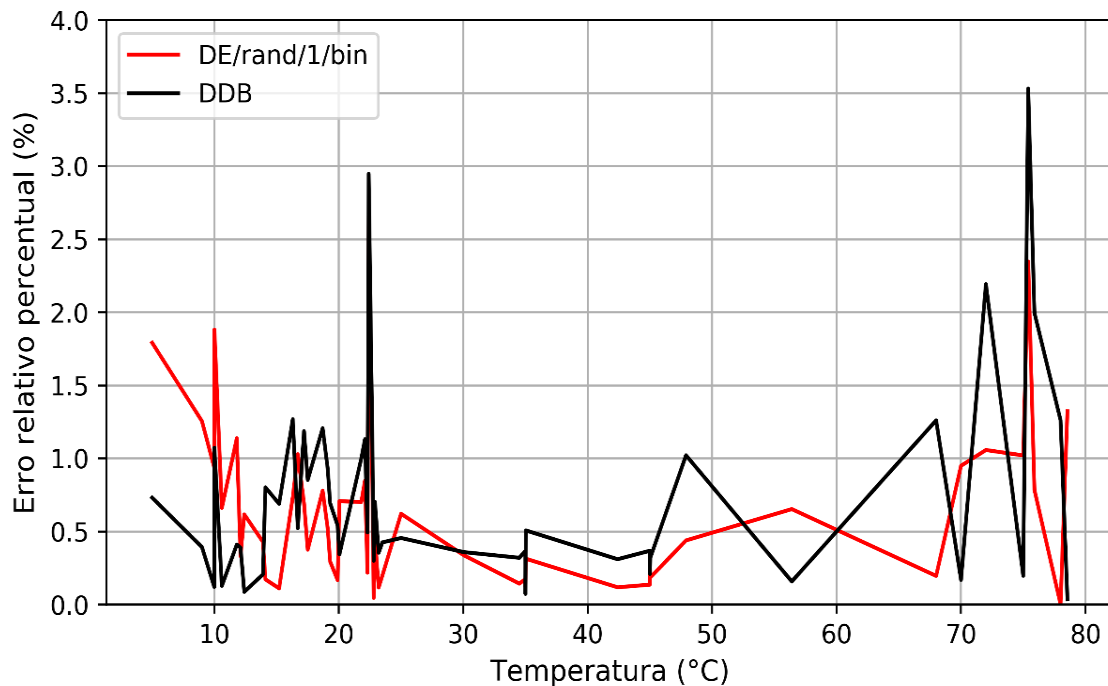


**Figura 2.** Pressões experimentais e calculadas para o conjunto de validação do etanol.

Em sequência, nas Figuras 3 e 4 são apresentados os erros relativos percentuais entre as pressões experimentais do conjunto de validação e as calculadas pela equação de Antoine com os coeficientes da Tabela 3.



**Figura 3.** Erro relativo percentual entre as pressões experimentais e as calculadas pela equação de Antoine para o conjunto de validação da acetona.



**Figura 4.** Erro relativo percentual entre as pressões experimentais e as calculadas pela equação de Antoine para o conjunto de validação do etanol.

Das Figuras 1 e 2, nota-se que tanto os parâmetros do DDB quanto os encontrados pelo algoritmo apresentaram uma boa interpolação no conjunto de dados experimentais. Entretanto, nas Figuras 3 e 4, verifica-se que os coeficientes do DDB resultaram em um erro relativo percentual maior na maioria dos dados.

## 5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi apresentada a versão DE/rand/1/bin do algoritmo da ED aplicada ao problema inverso da equação de Antoine para a acetona e o etanol. Como a ED é um método estocástico, os resultados apresentam certa aleatoriedade e dependem fortemente dos parâmetros do método de otimização e, mesmo colocando os parâmetros mais promissores segundo os testes realizados, pode acontecer do algoritmo não conseguir convergir para uma solução ótima. Devido a isso, foram realizadas diversas simulações para diminuir os efeitos da aleatoriedade do algoritmo. Desse modo, constatou-se que as variáveis  $F$  e  $CR$  pouco influenciam os resultados quando são feitas inúmeras simulações. Por fim, as soluções encontradas ajustaram-se melhor no conjunto de dados experimentais de validação se comparados com os resultados obtidos pelos coeficientes disponíveis no DDB.

Para trabalhos futuros especula-se fazer a análise de novas substâncias e o emprego de outras técnicas estocásticas no problema de otimização, como o algoritmo de colisão de partículas ou até mesmo uma abordagem Bayesiana, onde as informações a priori disponíveis sobre os parâmetros podem ser incorporadas naturalmente na formulação do problema inverso.

## REFERÊNCIAS

BREST, J., GREINER, S., BOSKOVIC, B., MERNIK, M. e ZUMER, V. Self-adapting control parameters in differential evolution: A comparative study on numerical benchmark problems, **IEEE transactions on evolutionary computation**, 10(6), 646-657, 2006.

CHUN, K. W., e DAVISON, R. R. Thermodynamic properties of binary mixtures of triethylamine with methyl and ethyl alcohol. **Journal of Chemical and Engineering Data**, 17(3), 307-310, 1972.

DAVIS, G. L., e BURROWS, G. H. Equilibrium and Free Energy Relationships in the System Acetone—Diacetone Alcohol. **Journal of the American Chemical Society**, 58(2), 311-312, 1936.

DORTMUND DATA BANK. Disponível em: <http://www.ddbst.com/>. Acesso em 30/07/2021.

FELSING, W. A., e DURBAN, S. A. The vapor pressures, densities, and some derived quantities for acetone. **Journal of the American Chemical Society**, 48(11), 2885-2893, 1926.

KARABOĞA, D. e ÖKDEM, S. A simple and global optimization algorithm for engineering problems: differential evolution algorithm. **Turkish Journal of Electrical Engineering & Computer Sciences**, 12(1), 53-60, 2004).

KRETSCHMER, C. B., e WIEBE, R. Liquid-Vapor Equilibrium of Ethanol--Toluene Solutions. **Journal of the American Chemical Society**, 71(5), 1793-1797, 1949.

MISHCHENKO, K. P.; SUBBOTINA, V. V. Dampfdruck von Ethanol bei Temperaturen von 4 bis 46 C. **Zhurnal Prikl. Khimii**, v. 40, p. 1156-1159, 1967.

OLIVEIRA, G. T. D. S. **Estudo e aplicações da evolução diferencial**, Tese de mestrado, UFU, Uberlândia, 2006.

SCATCHARD, G., e RAYMOND, C. L. Vapor—liquid equilibrium. II. Chloroform—ethanol mixtures at 35, 45 and 55°. **Journal of the American Chemical Society**, 60(6), 1278-1287, 1938.

SCATCHARD, G., e SATKIEWICZ, F. G. Vapor-liquid equilibrium. XII. The system ethanol-cyclohexane from 5 to 65. **Journal of the American Chemical Society**, 86(2), 130-133, 1964.

SCHWAAB, M., e PINTO, J. C. Optimum reference temperature for reparameterization of the Arrhenius equation. Part 1: Problems involving one kinetic constant. **Chemical**

**Engineering Science**, 62(10), 2750-2764, 2007.

STORN, R. Differential evolution-a simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces. **Technical report, International Computer Science Institute**, v. 11, 1995.

STORN, R., e PRICE, K. Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces, **Journal of global optimization**, 11(4), 341-359, 1997.

THOMSON, G. W. The Antoine equation for vapor-pressure data. **Chemical reviews**, 38(1), 1-39, 1946.