
Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Departamento de Matemática

**Otimização de colunas de destilação: uma
abordagem aplicada dos multiplicadores de
Lagrange**

Diego Piasson

Mestrado Profissional em Matemática - Campinas - SP

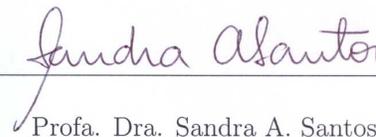
Orientador: Profa. Dra. Sandra Augusta Santos

Campinas
Fevereiro/2008

Otimização de colunas de destilação: uma abordagem aplicada dos multiplicadores de Lagrange

Este exemplar corresponde à redação da dissertação devidamente corrigida e defendida por Diego Piasson e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 28 de Fevereiro de 2008



Profa. Dra. Sandra A. Santos

Orientadora

Banca Examinadora

1. Prof. Dr Luiz Mariano (UERJ)
2. Profa. Dra. Véra Lucia da Rocha Lopes (IMECC - Unicamp)
3. Prof. Dr. Rogério Monteiro de Siqueira (USP)
4. Prof. Dr. José Mario Martínez (IMECC - Unicamp)
5. Prof. Dr. Sandra Augusta Santos (IMECC - Unicamp)

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Unicamp, como pré-requisito para obtenção do Título de MESTRE em Matemática.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP**

Bibliotecária: Crislene Queiroz Custódio – CRB8a 162/2005

Piasson, Diego

P573o Otimização de colunas de destilação : uma abordagem aplicada dos multiplicadores de Lagrange / Diego Piasson -- Campinas, [S.P. : s.n.], 2008.

Orientador : Sandra Augusta Santos

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Otimização matemática. 2. Multiplicadores de Lagrange. 3. Destilação - Modelos matemáticos. 4. Funções de várias variáveis reais. I. Santos, Sandra Augusta. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Título em inglês: Optimization of distillation columns : an applied approach of the Lagrange multipliers

Palavras-chave em inglês (Keywords): 1. Mathematical optimization. 2. Lagrange multipliers. 3. Distillation – Mathematical models. 4. Functions of several real variables.

Área de concentração: Otimização

Titulação: Mestre em Matemática

Banca examinadora: Profa. Dra. Sandra Augusta Santos (IMECC-UNICAMP)
Prof. Dr. Luiz Mariano Carvalho (UFRJ)
Profa. Dra. Véra Lúcia da Rocha Lopes (IMECC-UNICAMP)
Prof. Dr. José Mário Martínez Perez (IMECC-UNICAMP)
Prof. Dr. Rogério Monteiro de Siqueira (USP)

Data da defesa: 28/02/2008

Programa de Pós-Graduação: Mestrado Profissional em Matemática

Dissertação de Mestrado defendida em 28 de fevereiro de 2008 e aprovada

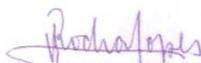
Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



Prof. (a). Dr (a). SANDRA AUGUSTA SANTOS



Prof. (a). Dr (a). LUIZ MARIANO PAES DE CARVALHO FILHO



Prof. (a). Dr (a). VERA LUCIA DA ROCHA LOPES

Agradecimentos

Após uma longa caminhada é difícil recordar de todos que me auxiliaram a cruzar a linha de chegada. Em muitas circunstâncias ao longo desta, uma simples palavra de incentivo foi tão valiosa quanto uma orientação para transpassar alguns obstáculos eminentes ao longo do caminho. Portanto e por tudo, devo agradecer:

- A Deus primeiramente, por abençoar minha vida e possibilitar que chegasse até aqui.
- Aos meus amigos e colegas: Flávio Teles Carvalho da Silva, por acreditar em nosso trabalho e promover os primeiros contatos com a usina Barralcool; Alessandro Mundim, pela sua colaboração na análise de dados; Gilberto Alexandre Soares Goulart, pelo conhecimento esclarecedor nos momentos de dúvidas; Anderson Kurunzi Domingos, pelo empenho em contribuir com seu conhecimento sobre a coluna de destilação da usina Barralcool; Suzan G. Benetti, pelos momentos de estudos e colaboração durante a execução desse trabalho e a todos os meus colegas do curso de Mestrado pelos momentos de estudo.
- À minha orientadora, a professora Dr. Sandra Augusta Santos, por ter acreditado em mim e pelos momentos de paciência em me direcionar durante essa caminhada.
- Em especial, à minha esposa Valdinéia por me incentivar e apoiar desde o início deste curso e, principalmente, por estar ao meu lado nos momentos mais difíceis.

Resumo

Este trabalho aborda a otimização de um processo de destilação de uma mistura binária em uma coluna de pratos, motivado pela destilação do metanol no processo de produção do biodiesel. Mais especificamente, considera a minimização de uma função custo energético envolvendo o calor do refeedor e a temperatura fornecida à carga de alimentação sujeita a restrições de equilíbrio e canalizações. Esse problema foi formulado baseado no artigo de Moré *A collection of Nonlinear Model Problems*. Para a solução foi utilizada a metodologia dos multiplicadores de Lagrange delineada no Teorema de Karush-Kuhn-Tucker para otimização de problemas com restrições mistas. Os *softwares* Maxima e MatLab foram utilizados para a investigação numérica da solução do problema. Uma explanação do funcionamento da coluna também é feita, bem como a apresentação dos principais resultados envolvendo otimização, desde problemas irrestritos até problemas com várias restrições mistas.

Palavras-chave: Otimização matemática; Multiplicadores de Lagrange; Destilação - Modelos matemáticos; Funções de várias variáveis reais.

Abstract

This work tackles the optimization of a distillation process of a binary mixture in a column with plates, which came from the methanol distillation in the production process of the biodiesel. More specifically, it considers the minimization of a cost objective function that encompass the heat rate supplied to the reboiler and the feed temperature, subject to equilibrium constraints and simple bounds. This problem was formulated based on Moré's article *A collection of Nonlinear Model Problems*. The Lagrange multiplier methodology was used for solve it, outlined in the Karush-Kuhn-Tucker Theorem for optimization problems with mixed constraints. The softwares Maxima and MatLab were employed for the numerical investigation of the problem solution. An explanation about the operation of the column is also included, together with the presentation of the main results encompassing optimization, from unconstrained to mixed constrained problems.

Keywords: Mathematical optimization; Lagrange multipliers; Distillation - Mathematical models; Function of several real variables.

Sumário

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
Sumário	vii
Introdução	1
1 Definições e alguns fatos básicos sobre otimização	3
1.1 Função escalar de várias variáveis	4
1.2 Máximos e mínimos	6
1.3 Condições de otimalidade	7
1.4 Otimização com restrições de igualdade	17
1.5 Multiplicadores de Lagrange	19
1.6 Otimização com restrições de desigualdade	47
1.7 Otimização com restrições mistas	55
1.8 Condições de segunda ordem	63
1.8.1 Condições de segunda ordem para problemas de otimização com restrições de igualdade	63
1.8.2 Condições de segunda ordem para problemas de otimização com restrições mistas	65
2 Preliminares do problema	71
2.1 A motivação	71
2.2 A usina Barralcool	72

2.3	O biodiesel	73
2.4	O metanol	74
2.5	O processo de destilação fracionada	75
2.6	A coluna ou torre de destilação	79
2.6.1	Principais componentes da coluna de destilação	80
2.6.2	O funcionamento	82
2.6.3	Restrições hidráulicas da coluna de destilação	85
2.7	Os trabalhos de Moré e Fletcher	86
3	Otimização da coluna de destilação	89
3.1	O Problema da coluna de destilação	90
3.2	Os resultados de Moré	97
4	Uma abordagem via multiplicadores de Lagrange	101
4.1	Solução do sistema não linear de Moré	102
4.2	A influência da coluna de destilação da usina Barralcool	104
4.2.1	O contato com a usina	104
4.2.2	As dificuldades e a parceria com a Súzan	105
4.2.3	A estratégia	106
4.3	A formulação do problema	107
4.3.1	As ferramentas computacionais	114
4.3.2	A implementação do problema no MatLab	116
4.4	A investigação numérica	117
4.4.1	Estimativas iniciais do sistema de equilíbrio de Moré	118
4.4.2	Estimativas iniciais do sistema de equilíbrio de Moré com escala- mento das equações	122
4.4.3	A influência do escalamento	125
4.4.4	Utilizando uma nova estimativa inicial para as variáveis	128
4.4.5	Inserindo restrições ao refluxo	131
4.4.6	A função custo por unidade	136
4.5	Síntese da análise numérica	142
	Considerações finais	145

Anexo	151
Referências Bibliográficas	161

Lista de Figuras

1.1	Caixa retangular com dimensões x_1 , x_2 e x_3	4
1.2	Superfície $x_3 = x_1^2 + x_2^2$, gráfico da função $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$	5
1.3	Gráfico da função $f(x, y) = x^2 + (1 - x)^3 y^2$ em $D_f = [-3, 4] \times [-3, 4]$. . .	12
1.4	O conjunto D_1 é convexo; o conjunto D_2 não é convexo.	13
1.5	Ilustração da definição de função convexa.	13
1.6	Curvas de nível das funções f e h	18
1.7	Bola aberta de raio $r > 0$ em torno de um ponto do conjunto admissível D . 18	
1.8	A função $g : A \rightarrow B$ é definida implicitamente pela equação $f(x_1, x_2) = z$. 20	
1.9	Vetor gradiente de f em \mathbf{q} é ortogonal ao conjunto de nível $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{q})$. 22	
1.10	Os vetores gradientes de f e h em \mathbf{q} são paralelos.	24
1.11	Gráfico da função V e da curva restrição D sobre o gráfico de V	27
1.12	Curvas de nível da função V (azul), a curva de H (vermelho) e o vetor gradiente de H em \mathbf{q}	28
1.13	Gráfico da função $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ e da curva $h(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^3 = 0$. 33	
1.14	Gráficos das equações $h_1(\mathbf{x}) = 1$, $h_2(\mathbf{x}) = 1$ e da curva de nível $D = F_{\mathbf{k}}$. 41	
1.15	Figura ilustrando os gradientes, $\nabla h_1(\mathbf{x}^*)$ (em vermelho) e $\nabla h_2(\mathbf{x}^*)$ (em azul), ortogonais aos conjuntos $h_1(\mathbf{x}) = 1$ e $h_2(\mathbf{x}) = 1$, respectivamente, em um ponto $\mathbf{x}^* \in D$	42
1.16	A função γ leva os valores do intervalo I da reta, na curva (em verde) em D	43
1.17	Os vetores $\nabla f(\mathbf{p}^*)$ (em verde), $\nabla h_1(\mathbf{p}^*)$ (em vermelho) e $\nabla h_2(\mathbf{p}^*)$ (em azul) são coplanares no plano dos vetores ortogonais ao vetor tangente (em vinho) à curva de nível D	44

1.18	Visualização dos valores da função f (em vermelho) para os quais o domínio é o conjunto D da restrição de f	47
1.19	O ponto \mathbf{p} está sobre a fronteira do conjunto admissível D e o vetor $\nabla f(\mathbf{p})$, aponta para a direção de crescimento de f	48
1.20	A intersecção do sólido $g(\mathbf{x}) \leq 1$ com o plano $h(\mathbf{x}) = 1$, define a região elíptica correspondente ao conjunto D que restringe f	56
1.21	A Figura mostra a curva C de intersecção das superfícies $h(\mathbf{x}) = 1$ e $g(\mathbf{x}) = 1$	60
1.22	A Figura mostra os três pontos encontrados sobre a região elíptica.	62
2.1	Usina Barralcool localizada no município de Barra do Bugres - MT (Foto extraída de [4]).	73
2.2	Foto do Presidente da República e do Governador do estado de Mato Grosso na inauguração da unidade de produção de biodiesel da usina Barralcool (Foto extraída de [1]).	73
2.3	Curvas de equilíbrio-termodinâmico da fase líquida e de vapor para uma mistura de duas fases.	77
2.4	O vapor V_1 é condensado e transforma-se no líquido L_2 com composição $x_a = 0.5$ e $x_b = 0.5$	78
2.5	O vapor V_2 é condensado e transforma-se no líquido L_3 com composição $x_a = 0.9$ e $x_b = 0.1$	78
2.6	O vapor V_3 é condensando num líquido cuja composição é rica na substância mais volátil.	79
2.7	A esquemática de uma típica coluna de destilação.	81
2.8	Coluna de destilação com cinco pratos.	82
2.9	Prato perfurado com <i>downcomer</i>	83
2.10	Esquema de uma coluna de destilação dotada com prato perfurado com <i>downcomer</i>	83
3.1	Coluna de destilação de n estágios com alimentação no k -ésimo estágio.	90
3.2	Esquema mostrando o fluxo de matéria pelo estágio i	91

4.1	Ao centro da foto, a coluna de destilação da usina Barralcool (foto tirada em 04/01/2008).	105
4.2	Gráfico das temperaturas para cada estágio i	119
4.3	Gráfico das composições molares do metanol em cada estágio i	120
4.4	Gráfico dos vapores para cada estágio i	120
4.5	Gráfico do vapor v_2 em função da temperatura t_f da carga de alimentação. 121	
4.6	O gráfico mostra as massas de vapor v_i do primeiro caso (com estrelas) e deste caso (com retângulos), para cada estágio i	123
4.7	Gráfico mostrando as temperaturas t_i do primeiro caso (com estrelas) e deste caso (com retângulos) para cada estágio i	124
4.8	Gráfico mostrando as composições molares do metanol, para cada estágio i , obtidas com a otimização da função f no primeiro caso (estrelas) e caso atual (retângulos).	124
4.9	Os gráficos mostram os resultados das temperaturas e dos vapores obtidos na otimização usando o ponto inicial de Moré (estrela) e o ponto arbitrário (retângulos).	130
4.10	Gráfico mostrando os valores das pressões em cada estágio i obtidos na otimização do problema, primeiramente usando o ponto inicial de Moré (em estrela) e posteriormente, com um ponto arbitrário (em retângulos). 131	
4.11	Gráfico mostrando a composição molar do metanol para cada estágio i de destilação.	131
4.12	Gráfico mostrando os vapores v_i encontrados na otimização do problema que inclui as inequações do refluxo (retângulos) e da otimização do problema na formulação inicial usando o ponto inicial de Moré (estrelas). . . . 133	
4.13	O gráfico mostra os resultados obtidos na otimização do problema para a composição molar do metanol em cada estágio i	133
4.14	O gráfico mostra os valores das temperaturas em cada estágio i da coluna obtidos da otimização usando ponto inicial de Moré e escalamento do problema (estrela) e da otimização usando ponto inicial arbitrário e condição para o refluxo.	134
4.15	Gráfico com os valores das pressões em cada estágio i da coluna.	135

4.16	Gráfico dos valores das temperaturas em cada estágio i da coluna para a otimização incluindo as inequações do refluxo (estrelas) e para a otimização da nova formulação do problema (retângulos).	137
4.17	Gráfico dos valores dos vapores em cada estágio i da coluna para a otimização incluindo as inequações do refluxo (estrelas) e para a otimização da nova formulação do problema (retângulos).	138
4.18	O gráfico mostra os valores das pressões em cada estágio i da coluna obtidos na otimização que inclui as inequações do refluxo (estrelas) e na otimização da nova formulação do problema (retângulos).	138
4.19	O gráfico mostra os valores das pressões em cada estágio i da coluna obtidos na otimização que inclui as inequações do refluxo (estrelas) e na otimização da nova formulação do problema com aumento dos limitantes das pressões (retângulos).	139
4.20	O gráfico mostra os valores da composição molar do metanol em cada estágio i da coluna obtidos na otimização que inclui as inequações do refluxo (estrelas) e na otimização da nova formulação do problema com aumento dos limitantes das pressões (retângulos).	140
4.21	Gráfico da pressão para cada estágio i da coluna obtidos na otimização da função g usando o ponto inicial de Moré (estrela) e o ponto arbitrário (retângulos).	143
4.22	Os gráficos mostram as temperaturas e os vapores para cada estágio i da coluna obtidos na otimização da função g usando o ponto inicial de Moré (estrela) e o ponto arbitrário (retângulos).	143
4.23	Gráfico da composição molar do metanol para cada estágio i da coluna obtidos na otimização da função g usando o ponto inicial de Moré (estrela) e o ponto arbitrário (retângulos).	143
4.24	Gráfico das temperaturas obtidas na otimização da função g usando um ponto inicial arbitrário.	147
4.25	Dados de saída da rotina <code>fmincon</code> mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Aqui foram fornecidos ao algoritmo, como estimativas iniciais, os valores encontrados na solução do sistema de equilíbrio de Moré.	152

4.26	Dados de saída da rotina <code>fmincon</code> mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Aqui, além das estimativas iniciais, também foram escaladas as restrições de acordo com Moré.	153
4.27	Dados de saída da rotina <code>fmincon</code> mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Para este resultado foi utilizado um escalamento diferente do sugerido por Moré, mas foram mantidas as mesmas estimativas iniciais propostas por ele.	154
4.28	Dados de saída da rotina <code>fmincon</code> mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Para este resultado foi utilizado o melhor ajuste dos escalares e vetor inicial de Moré.	155
4.29	Dados de saída da rotina <code>fmincon</code> mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Para este resultado foi utilizado o escalamento anterior mas com um vetor inicial arbitrário.	156
4.30	Dados de saída da rotina <code>fmincon</code> mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Esses dados foram obtidos com a otimização do problema com inclusão de duas inequações no conjunto admissível.	157
4.31	Dados de saída da rotina <code>fmincon</code> mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Esses dados foram obtidos com a otimização da função g restrita ao conjunto admissível inicial adicionado com as condições do refluxo.	158
4.32	Dados de saída da rotina <code>fmincon</code> mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Esses dados foram obtidos com a otimização da função g restrita ao conjunto admissível inicial adicionado com as condições do refluxo e aumento dos limitantes dos vapores.	159

Introdução

No nosso dia-a-dia, estamos a todo momento tentando otimizar alguma situação-problema, por exemplo, minimizar despesas domésticas, maximizar o tempo livre, minimizar trajeto, entre outros. A otimização faz parte do nosso cotidiano, mesmo que não percebamos. Por outro lado, nos setores de produção, por exemplo, ela além de percebida é também almejada. Daí nascem muitos dos problemas de otimização que acabam, em alguns casos, resultando em novas metodologias de resolução e/ou descobertas de que “velhos” resultados são importantes ferramentas.

Nosso trabalho, que não é tão pretensioso assim, consiste na otimização do processo de destilação de uma mistura binária em uma coluna composta por pratos. Mais especificamente, minimizar uma função custo energético, formulada por nós, restrita a várias condições de equilíbrio, em cuja solução se adota uma abordagem via multiplicadores de Lagrange. Além disso, apresentamos uma síntese dos principais resultados sobre otimização que sustentam teoricamente os resultados obtidos neste trabalho. Incluímos ainda uma apresentação sobre o processo de destilação de misturas, das partes e funcionamento de uma coluna de destilação composta por pratos, e das relações físico-químicas envolvidas.

Para a abordagem numérica do problema foi utilizado o *software* **MatLab**, pois uma solução analítica é praticamente impossível devido ao grande número de restrições do problema e à não linearidade dessas. Além disso, a utilização do *software* nos permitiu testar hipóteses e ajustar o problema quando necessário em um tempo reduzido, e com isso, ganhamos em qualidade de análise. Para a apresentação da parte teórica sobre otimização, nos baseamos nas seguintes bibliografias: [2], [3], [10], [11], [12], [17], [18], [19], [20], [21] e [30]. E quanto ao processo de destilação, nas baseamos nas referências [7], [14], [15], [16], [27], [28] e [29].

O desenvolvimento deste trabalho contou com a parceria da, também aluna do Mestrado Profissional em Matemática, Súzana G. B. de Pádua, que assim como nós, estava elaborando um trabalho de otimização em processos de destilação. No entanto, sua investigação consistiu em maximizar a porcentagem do metanol obtido no destilado, no topo da coluna, conforme podemos ver em [25].

Este trabalho está dividido em quatro capítulos. No primeiro, apresentamos os principais resultados em torno da teoria sobre otimização, desde problemas irrestritos para funções de uma variável a problemas com várias variáveis e com várias restrições mistas (envolvendo igualdades e desigualdades). Os resultados aqui apresentados estão arranjados de forma a sustentarem o resultado mais geral sobre problemas de otimização: o Teorema de Karush-Kuhn-Tucker. No segundo capítulo, procuramos explicar o que nos motivou a este estudo, que inicia-se na produção de biodiesel na usina Barralcool S/A e acaba no processo de retificação do metanol em uma coluna de destilação. Ainda neste capítulo, fazemos uma explanação do processo de destilação fracionada, das partes e do funcionamento de uma coluna de destilação. Além disso, comentamos sobre a tentativa de Moré de encontrar um ponto de equilíbrio na destilação de uma mistura binária em uma coluna de destilação, formulado em seu artigo *A Collection of Nonlinear Model Problems* (cfe [24]), o qual tornou-se a base para a formulação do nosso problema de otimização. Reservamos o terceiro capítulo para descrever as relações físico-químicas das equações descritas por Moré e os seus resultados com misturas ternárias. O quarto e último capítulo, inicia-se com a solução do sistema de equilíbrio que Moré deixa em aberto em seu artigo. Em seguida, tem-se a formulação do problema de otimização sobre o qual fazemos nossa investigação numérica com a utilização do *software* `MatLab` e da sua rotina de otimização denominada `fmincon`. Também fazemos uma descrição dessa ferramenta para esclarecer nossa análise sobre os resultados encontrados. Na seqüência, apresentamos os resultados da nossa investigação, uma análise matemática e físico-química sobre cada resultado, as estratégias adotadas ao longo da investigação e, finalmente, uma síntese dos resultados.

Capítulo 1

Definições e alguns fatos básicos sobre otimização

A luta pela sobrevivência impôs ao homem o entendimento e o domínio de seu meio ambiente. A complexidade de lidar diretamente com o mundo real o levou à criação de modelos que permitissem estudar as relações envolvidas e conseqüentemente encontrar respostas para inferir sobre o problema real. Uma vez que se obtém um modelo que representa um determinado evento, é natural que se deseje encontrar uma forma mais eficiente de realizá-lo, ou seja, otimizar (maximizar ou minimizar) seu desempenho.

Tais modelos podem ser representados com poucas ou várias variáveis e sua complexidade está, em geral, ligada às relações entre essas variáveis. A fim de analisar a influência de uma(s) variável(is) sobre outra(s), escreve-se um modelo explicitando a variável de interesse em função da(s) outra(s). Surge então, a importância de um estudo detalhado sobre funções e condições de otimalidade.

Portanto, neste capítulo, apresentaremos os fatos básicos sobre os problemas de otimização que serão necessários no desenvolvimento da nossa proposta. Para isso, nos baseamos nas seguintes bibliografias: [2], [3], [10], [11], [12], [17], [18], [19], [20], [21] e [30].

1.1 Função escalar de várias variáveis

Por definição, função é uma relação entre dois conjuntos dada por uma lei de formação tal que, para todo elemento do conjunto de partida, denominado de domínio da função, existe um único elemento correspondente no conjunto de chegada, denominado de contradomínio da função.

Neste trabalho, estaremos particularmente interessados nas funções que associam a cada $n - upla$ de números reais do conjunto de partida um número real no conjunto de chegada. Assim, se definirmos por D o domínio de uma função f e por \mathbf{x} a $n - upla$ de números reais pertencentes ao conjunto D , podemos utilizar uma notação mais compacta para escrever a função f , ou seja

$$\begin{aligned} f : D \subset \mathbb{R}^n &\rightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} &\mapsto f(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

onde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$. Quando $n = 1$ dizemos que a função é de uma variável. Para $n \geq 2$ dizemos que a função é de várias variáveis. Muitos problemas são modelados via função de várias variáveis, por exemplo, o volume de uma caixa retangular é uma função de três variáveis $v : D \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, que associa a cada terna ordenada $(x_1, x_2, x_3) \in D$ um número real V , o volume da caixa.

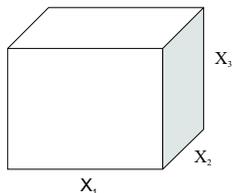


Figura 1.1: Caixa retangular com dimensões x_1 , x_2 e x_3 .

O volume V é então definido pela lei de formação $V = v(x_1, x_2, x_3) = x_1x_2x_3$ onde x_1 , x_2 e x_3 são, respectivamente, o comprimento, a largura e a altura da caixa (ver Figura 1.1). Neste caso, o conjunto D , domínio da função v , é o conjunto de todas as ternas ordenadas de números reais tais que $(x_1, x_2, x_3) \geq 0$, ou seja, todas as componentes do

vetor (x_1, x_2, x_3) devem ser maiores que ou iguais zero, pois as dimensões da caixa não podem ser negativas.

Definição 1 (Gráfico de uma função de n variáveis). Dada uma função $f : D \subset \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}$ de $n - 1$ variáveis, o gráfico de f é o subconjunto do espaço euclidiano n -dimensional \mathbb{R}^n , definido por

$$\{(x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n \mid (x_1, x_2, \dots, x_{n-1}) \in D \text{ e } x_n = f(x_1, x_2, \dots, x_{n-1})\}$$

Por exemplo, o gráfico da função de duas variáveis $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ definida para todo ponto $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ é o conjunto de ternas ordenadas $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ tal que $x_3 = f(x_1, x_2)$, conforme a Figura 1.2.

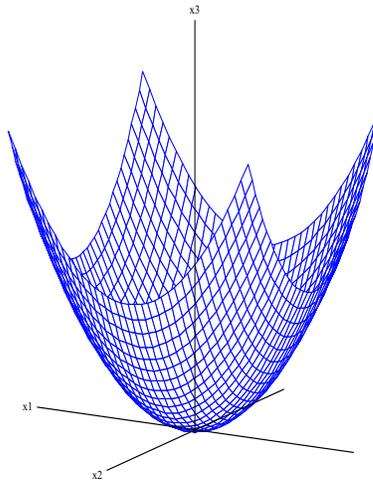


Figura 1.2: Superfície $x_3 = x_1^2 + x_2^2$, gráfico da função $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$.

Fazer a intersecção do gráfico de uma função f de n variáveis com um hiperplano da forma $f(\mathbf{x}) = k$ com $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, significa obter o conjunto de pontos do domínio da função f que são levados na mesma imagem. Esse conjunto de pontos é denominado *hipersuperfície de nível*.

Definição 2 (Hipersuperfície de nível). Seja $f : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de n variáveis com domínio D . Dado o número real k , o conjunto de pontos

$$\{(x_1, x_2, \dots, x_n) \in D \subset \mathbb{R}^n \mid f(x_1, x_2, \dots, x_n) = k\}$$

é definido como a hipersuperfície de nível associada ao nível k .

O que pretendemos aqui é apresentar ferramentas de cálculo diferencial para resolver problemas de otimização, ou seja, encontrar pontos em $D_f \subset \mathbb{R}^n$ tais que o valor de f seja máximo ou mínimo em um conjunto dado D . Esses problemas podem ser escritos como

$$\max f(\mathbf{x}), \text{ sujeito a } \mathbf{x} \in D \quad (1.1.1)$$

ou

$$\min f(\mathbf{x}), \text{ sujeito a } \mathbf{x} \in D \quad (1.1.2)$$

Para isso, apresentamos as definições de máximos e mínimos de funções de n variáveis.

1.2 Máximos e mínimos

Definição 3 (Máximo e Mínimo Global). Seja f uma função de n variáveis definida para todo $\mathbf{x} \in D_f \subset \mathbb{R}^n$ e D um subconjunto de D_f

$$f : D_f \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}.$$

Dizemos que $\mathbf{q} \in D$ é um **ponto de máximo global** de f em D se

$$f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{q})$$

para todo $\mathbf{x} \in D$. O número real $f(\mathbf{q})$ é denominado **valor máximo** de f . De forma análoga, dizemos que $\mathbf{q} \in D$ é um **ponto de mínimo global** de f em D se

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{q})$$

para todo $\mathbf{x} \in D$. Neste caso, o número real $f(\mathbf{q})$ é denominado **valor mínimo** de f .

Definição 4 (Máximo e Mínimo Local). Seja f uma função de n variáveis definida para todo $\mathbf{x} \in D_f \subset \mathbb{R}^n$ e D um subconjunto de D_f

$$f : D_f \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$$

Dizemos que $\mathbf{q} \in D$ é um **ponto de máximo local** de f em D se existir uma bola aberta $B_\varepsilon(\mathbf{q})$ centrada em \mathbf{q} e raio $\varepsilon > 0$ tal que

$$f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{q})$$

para todo $\mathbf{x} \in B_\varepsilon(\mathbf{q}) \cap D$. De forma análoga, dizemos que $\mathbf{q} \in D$ é um **ponto de mínimo local** de f em D se existir uma bola aberta $B_\varepsilon(\mathbf{q})$ centrada em \mathbf{q} e raio $\varepsilon > 0$ tal que

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{q})$$

para todo $\mathbf{x} \in B_\varepsilon(\mathbf{q}) \cap D$.

Segue ainda por definição que $\mathbf{q} \in D$ é um **extremante** de f em D . Doravante, a função f será denominada **função objetivo** e o conjunto D , **conjunto admissível** ou **viável** do problema de otimização.

Do ponto de vista matemático, não existe nenhuma diferença relevante entre os problemas de minimização ou maximização, pois os pontos de ótimo para ambos os problemas são os mesmos, mas com sinais opostos.

Ainda pelas definições acima, todo minimizador global também é um minimizador local, mas não reciprocamente. Sob algumas condições, podemos garantir a existência de soluções globais, conforme veremos na próxima seção.

1.3 Condições de otimalidade

Embora o objetivo maior de um otimizador seja encontrar soluções globais, este é um desafio ainda aberto na otimização moderna para os problemas não lineares gerais do tipo (1.1.1) e (1.1.2). As condições de otimalidade são propriedades que, ao serem satisfeitas por pontos do conjunto admissível, ou são implicadas por soluções globais (ou locais) - chamadas condições necessárias - ou então, garantem a obtenção de soluções globais (ou locais) - chamadas condições suficientes. Tais condições têm importância tanto teórica quanto prática. Do ponto de vista teórico, por exemplo, as condições suficientes de segunda ordem permitem classificar pontos extremos. Condições necessárias, por outro lado, caracterizam os denominados pontos críticos ou estacionários do problema em questão, constituindo critérios de parada para algoritmos (usualmente iterativos) que geram uma seqüência de aproximações para a solução procurada.

Aos diferentes tipos de restrições que definem o conjunto admissível estão associadas distintas condições que garantem a existência de soluções dos problemas de otimização. Vejamos os principais resultados.

Teorema 1 (Teorema de Weierstrass). *Sejam $D \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto compacto não vazio e $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua. Então, os problemas (1.1.1) e (1.1.2) têm soluções globais.*

Demonstração. Queremos mostrar que toda função real, contínua num conjunto compacto de \mathbb{R}^n (limitado e fechado) D , possui pontos \mathbf{x}_0 e $\mathbf{x}_1 \in D \subset \mathbb{R}^n$ tais que $f(\mathbf{x}_0) \leq f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_1)$ para todo $x \in D$. Seja $f(D) = \{f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R} | \mathbf{x} \in D\}$, D um conjunto compacto (não vazio) e f uma função contínua em D . Logo, $f(D)$ é compacto pois toda aplicação contínua leva um compacto noutra e os números $y_0 = \inf f(D)$ e $y_1 = \sup f(D)$ pertencem a $f(D)$, isto é, existem pontos $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1 \in D$ tais que $y_0 = f(\mathbf{x}_0)$ e $y_1 = f(\mathbf{x}_1)$. Então, $f(\mathbf{x}_0) \leq f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_1)$ para todo $\mathbf{x} \in D$. \square

Observe que o teorema de Weierstrass só garante a existência de solução global para os problemas (1.1.1) e (1.1.2) se f for contínua e definida em um conjunto compacto D não vazio. Assim, para o caso de problemas de minimização irrestritos

$$\min f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \tag{1.3.1}$$

outras ferramentas devem ser usadas para decidir se f possui ou não minimizador global.

As condições que devem ser satisfeitas quando um ponto $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$ dado é minimizador local do problema (1.3.1) são chamadas de *condições necessárias de otimalidade*, enquanto que as condições que garantem que um ponto dado é minimizador do problema são chamadas de *condições suficientes de otimalidade*.

Teorema 2 (Condição Necessária de Primeira Ordem). *Suponhamos que a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ seja diferenciável no ponto $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$. Então, se \mathbf{q} é um minimizador local do problema (1.3.1), temos*

$$\nabla f(\mathbf{q}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{q}), \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{q}), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{q}) \right) = (0, 0, \dots, 0) = \mathbf{0}$$

Demonstração. Seja $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_n) \in \mathbb{R}^n$, arbitrário, porém fixo. Pela definição de minimizador local, existe $\varepsilon > 0$ tal que

$$f(\mathbf{q}) \leq f(\mathbf{q} + t\mathbf{v}), \quad \forall t \in [0, \varepsilon].$$

Pela diferenciabilidade de f em \mathbf{q} ,

$$\begin{aligned} f(\mathbf{q} + t\mathbf{v}) &= f(\mathbf{q}) + t \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{q})v_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{q})v_2 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{q})v_n \right) + r(t\mathbf{v}) \\ &= f(\mathbf{q}) + t\langle \nabla f(\mathbf{q}), \mathbf{v} \rangle + r(t\mathbf{v}) \end{aligned}$$

onde $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{r(t\mathbf{v})}{t} = 0$.

Logo

$$t\langle \nabla f(\mathbf{q}), \mathbf{v} \rangle + r(t\mathbf{v}) \geq 0.$$

Dividindo por $t \geq 0$, temos que

$$\langle \nabla f(\mathbf{q}), \mathbf{v} \rangle + \frac{r(t\mathbf{v})}{t} \geq 0$$

e tomando o limite quando $t \rightarrow 0$, obtemos

$$\langle \nabla f(\mathbf{q}), \mathbf{v} \rangle \geq 0.$$

Como \mathbf{v} é arbitrário, podemos tomar $\mathbf{v} = -\nabla f(\mathbf{q})$, o que resulta na condição

$$0 \leq \langle \nabla f(\mathbf{q}), \mathbf{v} \rangle = -\|\nabla f(\mathbf{q})\|^2,$$

donde segue que $\nabla f(\mathbf{q}) = 0$. □

O teorema acima garante que todo ponto de máximo ou mínimo de uma função é necessariamente *crítico*.

Definição 5. Dizemos que um ponto $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$ é um ponto *crítico* ou *estacionário* de uma função f derivável em \mathbf{q} , quando $\nabla f(\mathbf{q}) = 0$.

Porém, a recíproca não é verdadeira. Ou seja, o fato do gradiente de f em um ponto ser nulo não implica que este ponto é de máximo ou mínimo da função. Portanto, para garantirmos que um ponto, digamos \mathbf{q} , seja um ponto ótimo de um problema otimização, temos que verificar mais uma condição.

Teorema 3 (Condição Suficiente de Segunda Ordem). *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função duas vezes diferenciável no ponto $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$, \mathbf{q} um ponto crítico de f e $H(\mathbf{q})$ a matriz hessiana de f em \mathbf{q} , então*

i. Se $H(\mathbf{q})$ é definida positiva, isto é, $\mathbf{h}^T H(\mathbf{q}) \mathbf{h} > 0$ para todo $\mathbf{h} \neq 0$, então \mathbf{q} é um ponto de mínimo local.

ii. Se $H(\mathbf{q})$ é definida negativa, isto é, $\mathbf{h}^T H(\mathbf{q}) \mathbf{h} < 0$ para todo $\mathbf{h} \neq 0$, então \mathbf{q} é um ponto de máximo local.

iii. Se $H(\mathbf{q})$ é indefinida, ou seja, se existirem $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in \mathbb{R}^n$ tais que $\mathbf{h}_1^T H(\mathbf{q}) \mathbf{h}_1 < 0$ e $\mathbf{h}_2^T H(\mathbf{q}) \mathbf{h}_2 > 0$, então \mathbf{q} é um ponto de sela.

Demonstração. Seja $Q(\mathbf{h}) = \mathbf{h}^T H(\mathbf{q}) \mathbf{h}$. O polinômio de Taylor de segunda ordem em torno de \mathbf{q} nos dá

$$f(\mathbf{q} + \mathbf{h}) - f(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} Q(\mathbf{h}) + \|\mathbf{h}\|^2 R_2(\mathbf{q}, \mathbf{h})$$

onde $R_2(\mathbf{q}, \mathbf{h}) \rightarrow 0$ quando $\mathbf{h} \rightarrow 0$. Provaremos que existe um número real r tal que, se $0 < \|\mathbf{h}\| < r$, o sinal de $f(\mathbf{q} + \mathbf{h}) - f(\mathbf{q})$ é igual ao sinal de $Q(\mathbf{h})$.

Assumimos primeiramente que todos os autovalores

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$$

de $Q(\mathbf{h})$ são positivos. Seja α o menor autovalor. Se $u < \alpha$, os n números

$$\lambda_1 - u, \dots, \lambda_n - u$$

são todos positivos. Estes números são autovalores da matriz simétrica $H(\mathbf{q}) - uI$, onde I é a matriz identidade $n \times n$. Logo, $\mathbf{h}^T [H(\mathbf{q}) - uI] \mathbf{h}$ é definida positiva e portanto, $\mathbf{h}^T [H(\mathbf{q}) - uI] \mathbf{h} > 0$ para todo $\mathbf{h} \neq 0$. Portanto

$$\mathbf{h}^T H(\mathbf{q}) \mathbf{h} > \mathbf{h}^T (uI) \mathbf{h} = u \|\mathbf{h}\|^2$$

para todo real $u < \alpha$.

Tomando $u = \frac{1}{2}\alpha$, obtemos a desigualdade

$$Q(\mathbf{h}) > \frac{1}{2}\alpha \|\mathbf{h}\|^2$$

para todo $\mathbf{h} \neq 0$. Visto que $R_2(\mathbf{q}, \mathbf{h}) \rightarrow 0$ quando $\mathbf{h} \rightarrow 0$, existe um número real r tal que

$$|R_2(\mathbf{q}, \mathbf{h})| < \frac{1}{4}\alpha$$

sempre que $0 < \|\mathbf{h}\| < r$. Para tal \mathbf{h} temos

$$0 \leq \|\mathbf{h}\|^2 |R_2(\mathbf{q}, \mathbf{h})| < \frac{1}{4}\alpha \|\mathbf{h}\|^2 < \frac{1}{2}Q(\mathbf{h}).$$

Portanto, segue que

$$f(\mathbf{q} + \mathbf{h}) - f(\mathbf{q}) \geq \frac{1}{2}Q(\mathbf{h}) - \|\mathbf{h}\|^2 |R_2(\mathbf{q}, \mathbf{h})| > 0$$

sempre que f tem um mínimo local em \mathbf{q} . Fica provado o item (i).

Para provar (ii) basta usar o mesmo argumento para $-f$.

Para provar (iii), consideramos que λ_1 e λ_2 sejam dois autovalores de $Q(\mathbf{q})$ com sinais opostos. Seja $\beta = \min \{|\lambda_1|, |\lambda_2|\}$. Então para cada real u satisfazendo $-\beta < u < \beta$ os números

$$\lambda_1 - u \text{ e } \lambda_2 - u$$

são autovalores com sinais opostos da matriz $[Q(\mathbf{h}) - uI]$. Portanto, se $u \in (-\beta, \beta)$ a forma quadrática $Q(\mathbf{q}) - uI$, assume valores positivos e negativos na vizinhança de $\mathbf{h} = 0$. Escolhendo $r > 0$ como acima de modo que $|R_2(\mathbf{q}, \mathbf{h})| < \frac{1}{4}\beta$ sempre que $0 < \|\mathbf{h}\| < r$, então, com o argumento anterior, vemos que para cada \mathbf{h} o sinal de $f(\mathbf{q} + \mathbf{h}) - f(\mathbf{q})$ é o mesmo que o de $Q(\mathbf{h})$. Desde que os valores positivos e negativos ocorrem quando $\mathbf{h} \rightarrow 0$, f tem um ponto de sela em \mathbf{q} . \square

Os resultados aqui apresentados também são verdadeiros para um problema com restrição do tipo (1.1.1) ou (1.1.2), desde que o ponto de interesse $\mathbf{q} \in D$ esteja no interior do conjunto admissível, isto é, desde que exista uma bola aberta $B(\mathbf{q}, \varepsilon)$ em torno de \mathbf{q} tal que $B(\mathbf{q}, \varepsilon) \subset D$.

Porém, as condições de segunda ordem (Teorema 3) nada afirmam sobre a globalidade do extremante. Um exemplo clássico da literatura e que ilustra essa situação, trata-se da função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^1 definida por $f(x, y) = x^2 + (1 - x)^3 y^2$ (ver Figura 1.3) . A função possui um único ponto crítico em $\mathbf{q} = (0, 0)$ e que é ponto de mínimo local mas não é global.

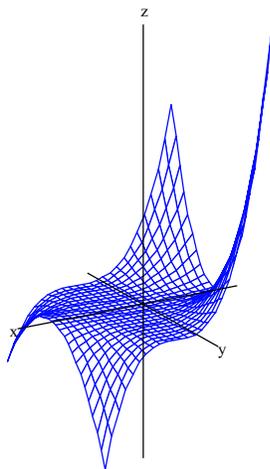


Figura 1.3: Gráfico da função $f(x, y) = x^2 + (1 - x)^3 y^2$ em $D_f = [-3, 4] \times [-3, 4]$.

No entanto, se a função f for definida para uma única variável real e, mantendo as hipóteses sobre a continuidade de f e sua primeira derivada, se f possui um único ponto crítico \mathbf{q} e, digamos que seja um ponto de mínimo local, então pode-se garantir que \mathbf{q} é um ponto de mínimo global de f .

Contudo, existe uma classe específica de funções para as quais é possível garantir a globalidade de pontos extremantes, a saber, as funções convexas e côncavas.

Definição 6 (Conjuntos Convexos). Dizemos que $D \subset \mathbb{R}^n$ é um *conjunto convexo* se, e somente se, para quaisquer $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$ tem-se

$$(1 - t).\mathbf{x} + t.\mathbf{y} \in D,$$

para todo $t \in [0, 1]$.

Isso significa que se D é um conjunto convexo, então, todo segmento de reta que une dois pontos quaisquer de D está sempre contido em D (ver Figura 1.4).

Se um conjunto não é convexo, ele é denominado *não-convexo*. Ou seja, a nomenclatura côncavo é utilizada somente para a definição de funções côncavas, conforme

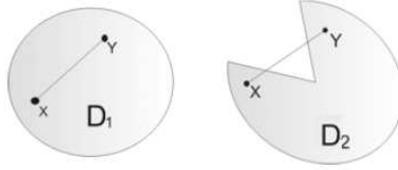


Figura 1.4: O conjunto D_1 é convexo; o conjunto D_2 não é convexo.

veremos a seguir.

Definição 7 (Funções Convexas). Seja um conjunto $D \subset \mathbb{R}^n$, dizemos que a função $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa em D quando para quaisquer $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$ e qualquer $t \in [0, 1]$, tem-se

$$f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}) \leq tf(\mathbf{x}) + (1-t)f(\mathbf{y}). \quad (1.3.2)$$

Geometricamente, uma função f é convexa em um conjunto convexo D , se todo segmento de reta secante que passa pelos pontos $(\mathbf{x}, f(\mathbf{x}))$ e $(\mathbf{y}, f(\mathbf{y}))$, para todo $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$, sempre está acima ou coincide com o gráfico de f (conforme Figura 1.5).

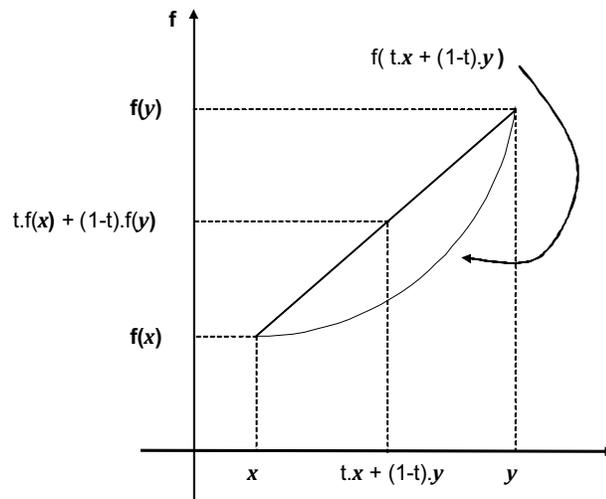


Figura 1.5: Ilustração da definição de função convexa.

Definição 8 (Funções Côncavas). Seja um conjunto $D \subset \mathbb{R}^n$, dizemos que a função $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ é côncava em D quando para quaisquer $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$ e qualquer $t \in [0, 1]$, tem-se

$$f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}) \geq tf(\mathbf{x}) + (1-t)f(\mathbf{y}). \quad (1.3.3)$$

Neste caso, dados dois pontos quaisquer do conjunto convexo D , digamos \mathbf{x} e \mathbf{y} , o segmento de reta secante que passa pelos pontos $(\mathbf{x}, f(\mathbf{x}))$ e $(\mathbf{y}, f(\mathbf{y}))$ sempre está abaixo ou coincide com o gráfico de f .

Equivalentemente, uma função f é classificada de côncava quando, definida em um convexo $D \subset \mathbb{R}^n$, $(-f)$ é convexa em D .

Por sua vez, funções estritamente convexas ou estritamente côncavas, são definidas da seguinte forma:

Definição 9 (Funções Estritamente Convexas). Seja um conjunto $D \subset \mathbb{R}^n$, dizemos que a função $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa em D quando para quaisquer $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$ e qualquer $t \in [0, 1]$, tem-se

$$f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}) < tf(\mathbf{x}) + (1-t)f(\mathbf{y}). \quad (1.3.4)$$

Definição 10 (Funções Estritamente Côncavas). Seja um conjunto $D \subset \mathbb{R}^n$, dizemos que a função $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ é côncava em D quando para quaisquer $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$ e qualquer $t \in [0, 1]$, tem-se

$$f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}) > tf(\mathbf{x}) + (1-t)f(\mathbf{y}). \quad (1.3.5)$$

Valendo-se da continuidade das derivadas de primeira ordem de uma função f , definida em um conjunto convexo D , temos ainda que f é convexa se, e somente se, cada hiperplano tangente ao gráfico de f está sempre abaixo ou coincide com o gráfico de f . Esta idéia é sistematizada no resultado a seguir.

Teorema 4. *Suponhamos que $f : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ seja uma função de classe C^1 definida em um conjunto convexo D , então dizemos que:*

i. f é uma função convexa em D se, e somente se,

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{y}) + \langle \nabla f(\mathbf{y}), (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rangle,$$

para todo $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$.

ii. f é uma função côncava em D se, e somente se,

$$f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{y}) + \langle \nabla f(\mathbf{y}), (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rangle,$$

para todo $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$.

Note que o segundo item do Teorema 4 pode ser obtido considerando que f é côncava em D quando $-f$ é convexa. A demonstração desse teorema pode ser encontrada em [21].

No entanto, o resultado mais importante dessa seção, a respeito das funções convexas, será enunciado e demonstrado abaixo. Ele nos garante que as condições necessárias de otimalidade passam a ser suficientes, dada a convexidade de f definida em um conjunto convexo D , ou seja, todo ponto crítico torna-se uma solução do problema (1.1.1) ou (1.1.2). Em particular, qualquer minimizador local é global.

Teorema 5 (Teorema da Minimização Convexa). *Sejam $D \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ uma função convexa em D . Então*

i. Todo minimizador local do problema (1.1.2) é global.

ii. O conjunto de minimizadores é convexo.

iii. Se f for estritamente convexa, não pode haver mais de um minimizador.

Demonstração. A demonstração do primeiro item é feita por contradição. Suponhamos que $\mathbf{q} \in D$ seja um minimizador local de f que não é global. Então existe $\mathbf{x} \in D$ tal que $f(\mathbf{x}) < f(\mathbf{q}) \Rightarrow f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{q}) < 0$. Definimos agora o segmento de reta que une \mathbf{x} e \mathbf{q} por $g(t) = t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{q}$, $t \in [0, 1]$. Pela convexidade de f , para todo $t \in (0, 1]$, tem-se

$$\begin{aligned} f(g(t)) &\leq tf(\mathbf{x}) + (1-t)f(\mathbf{q}) \\ &= f(\mathbf{q}) + t(f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{q})) < f(\mathbf{q}) \end{aligned}$$

Tomando $t > 0$ suficientemente pequeno, podemos garantir que o ponto $g(t)$ é arbitrariamente próximo do ponto \mathbf{q} , e ainda, que $f(g(t)) < f(\mathbf{q})$ com $g(t) \in D$. Isso contradiz o fato de \mathbf{q} ser minimizador local do problema (1.1.2). Portanto, qualquer solução local deve ser global.

Para provar (ii), tomamos $M \subset D$ como o conjunto dos minimizadores globais de f e $w \in \mathbb{R}$, o valor ótimo do problema, ou seja, $f(\mathbf{x}) = w$ para qualquer $\mathbf{x} \in M$. Logo,

para quaisquer $\mathbf{x}, \mathbf{q} \in M$ e qualquer $t \in (0, 1]$, pela convexidade de f , temos

$$\begin{aligned} f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{q}) &\leq tf(\mathbf{x}) + (1-t)f(\mathbf{q}) \\ &= tw + (1-t)w = w, \end{aligned}$$

que implica que M é convexo.

Por contradição provaremos o último item. Suponhamos agora que f seja estritamente convexa, ou seja,

$$f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}) < tf(\mathbf{x}) + (1-t)f(\mathbf{y})$$

para quaisquer $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$ e qualquer $t \in (0, 1)$; e que existam $\mathbf{x}, \mathbf{q} \in M$ com $\mathbf{x} \neq \mathbf{q}$. Como \mathbf{x} e \mathbf{q} são minimizadores globais e $t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{q} \in D$, para $t \in (0, 1)$, pela convexidade de D , segue que

$$f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{q}) \geq f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{q}) = w.$$

No entanto, pela convexidade estrita de f ,

$$\begin{aligned} f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{q}) &< tf(\mathbf{x}) + (1-t)f(\mathbf{q}) \\ &= tw + (1-t)w = w \end{aligned}$$

Portanto, partindo da premissa que havia mais de um minimizador global, chegamos a uma contradição. Conclui-se, neste caso, que o minimizador é único. \square

Vimos até aqui, algumas condições que garantem a existência de solução para os problemas de otimização da forma (1.1.1) ou (1.1.2). Nelas, várias hipóteses foram feitas sobre a função objetivo f e sobre o conjunto admissível ou viável D . A forma do conjunto admissível também foi parcialmente omitida (exceto as hipóteses que na ocasião precisavam ser consideradas). No entanto, a forma como é definido o conjunto de restrições para a função objetivo, implica no conjunto de resultados que será utilizado para garantir a existência de soluções dos problemas de otimização sujeitos a essas restrições bem como a metodologia a ser utilizada para a obtenção das mesmas. Por isso, de agora em diante, apresentaremos as formas mais comuns do conjunto admissível D .

Típicamente, o conjunto admissível de um problema de otimização é definido por um sistema de igualdades e/ou desigualdades e/ou uma inclusão (misto), como por exemplo

$$D = \left\{ \mathbf{x} \in \Omega \mid \begin{array}{l} h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, m \\ g_j(\mathbf{x}) \geq 0, \quad j = 1, \dots, k \end{array} \right\} \quad (1.3.6)$$

ou ainda

$$D = \{ \mathbf{x} \in \Omega \mid h_1(\mathbf{x}) = 0, \dots, h_m(\mathbf{x}) = 0, g_1(\mathbf{x}) \leq 0, \dots, g_k(\mathbf{x}) \leq 0 \}$$

onde $\Omega \in \mathbb{R}^n$, $h : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^k$. O conjunto Ω é chamado de *restrições diretas* e as restrições de igualdade e desigualdade se chamam *restrições funcionais*. Normalmente, incluem-se restrições simples de serem verificadas, por exemplo, $\mathbf{x} \geq 0$ ou $\mathbf{l} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{u}$, com $\mathbf{l}, \mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$.

Se em (1.3.6) tem-se $k = 0$, então o problema (1.1.2), ou seja,

$$\min f(\mathbf{x}), \text{ sujeito a } \mathbf{x} \in D$$

é caracterizado como um problema de otimização com restrições de igualdade.

1.4 Otimização com restrições de igualdade

Para motivar o assunto e poder representá-lo graficamente, buscaremos inicialmente a solução do seguinte problema

$$\begin{array}{l} \min f(\mathbf{x}) \\ \text{sujeito a } \mathbf{x} \in D = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \mid h(\mathbf{x}) = k\}, \end{array} \quad (1.4.1)$$

onde $f, h : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ e k é uma constante real (ver Figura 1.6).

Vimos que $h(x_1, x_2) = k$ (Definição 2), é uma curva de nível da função h . Portanto, queremos obter um ponto \mathbf{q} que pertence ao conjunto admissível D , ou seja, à curva de nível k da função h e que minimiza a função f . Por outro lado, para cada valor real z que f assume em $\mathbf{x} \in D$, temos uma curva de nível z da função f . Assim, o problema de obter um ponto \mathbf{q} em D tal que o valor de f seja mínimo, pode ser visto como sendo

o problema de encontrar a curva de menor nível de f que tem ponto/pontos em comum com a curva (ou superfície) de nível de h .

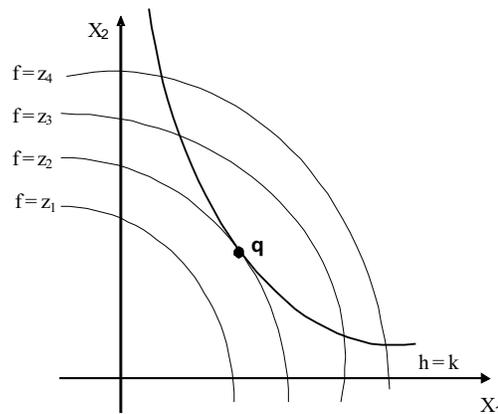


Figura 1.6: Curvas de nível das funções f e h .

No caso em que o conjunto admissível D dos pontos que formam a curva de nível $f(\mathbf{x}) = k$ seja compacto, pelo teorema de Weierstrass, o problema possui solução global. Porém, essa compacidade nem sempre ocorre. Além disso, nesse caso o conjunto D não possui interior, isto é, todo ponto de D não é interior a D , pois para todo $x \in D \subset \mathbb{R}^2$, a bola aberta de raio $r > 0$ possui pontos que não pertencem a D , (cf. Figura 1.7).

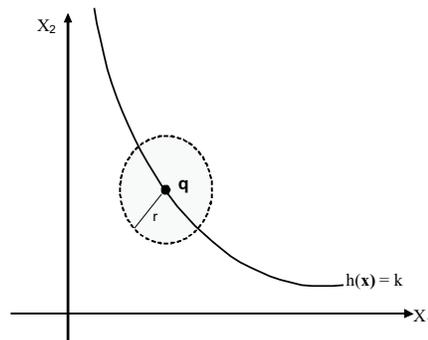


Figura 1.7: Bola aberta de raio $r > 0$ em torno de um ponto do conjunto admissível D .

Portanto, como o ponto \mathbf{q} é solução deste problema mas não é interior do conjunto admissível D , então não é necessário que \mathbf{q} seja um ponto crítico de f . No sentido estabelecido pelo Teorema 2, os pontos de D são denominados *pontos de fronteira*, denotados por ∂D , pois toda bola aberta em qualquer $\mathbf{x} \in D$ contém pontos de D e de seu complementar, assim, não podemos usar o referido teorema para encontrar o ponto \mathbf{q} .

Observe que surge naturalmente, para os problemas de otimização com restrição de igualdade, a necessidade de outra metodologia para determinar a solução. Apresentaremos aqui, a metodologia dos *multiplicadores de Lagrange*, assim chamados em homenagem ao matemático franco-italiano Joseph-Louis Lagrange (1736-1813). Os principais resultados deste método serão explanados com detalhes nesta próxima seção e nortearão o desenvolvimento da proposta deste trabalho.

1.5 Multiplicadores de Lagrange

Admitindo que na Figura 1.6 temos $z_1 < z_2 < z_3 < z_4$, ou seja, o valor da função f é maior quanto maior for o nível (altura) do corte, fica fácil observar que o ponto \mathbf{q} é solução do problema (1.4.1). Observa-se ainda que a curva de nível de f , mais especificamente $f(\mathbf{x}) = z_2$, que passa pelo ponto \mathbf{q} , é tangente à curva $h(x) = k$, que define o conjunto admissível D . Tal propriedade será fundamental para caracterizarmos algebricamente este ponto. A definição abaixo e os dois teoremas seguintes nos auxiliarão a definir esse ponto.

Definição 11 (Ponto Regular). Seja $f : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^k , com $k \geq 1$. O ponto $\mathbf{q} \in D$ é regular em f se

$$\nabla f(\mathbf{q}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{q}), \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{q}), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{q}) \right) \neq (0, 0, \dots, 0) = \mathbf{0}$$

Ou seja, o ponto \mathbf{q} é regular de f se pelo menos uma das coordenadas do vetor gradiente de f em \mathbf{q} é diferente de zero.

Além disso, sob certas condições, podemos tratar a curva de nível $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2) = z_2$ como o gráfico de uma outra função g tal que $x_2 = g(x_1)$ e com isso, aplicar toda teoria desenvolvida para gráficos no estudo de conjuntos de nível de funções. O resultado que nos garante isso é o Teorema da Função Implícita, que será demonstrado abaixo para \mathbb{R}^2 .

Teorema 6 (Teorema da Função Implícita para \mathbb{R}^2). *Sejam $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^k com $k \geq 1$, definida num aberto $U \subset \mathbb{R}^2$, e $(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \in U$ tal que*

$f(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = z$, com

$$\frac{\partial f}{\partial x_2}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \neq 0.$$

Então existe um retângulo aberto $A \times B$, de centro em (\bar{x}_1, \bar{x}_2) , tal que $f^{-1}(z) \cap (A \times B)$ é o gráfico de uma função $g : A \rightarrow B$ de classe C^k e

$$g'(\bar{x}_1) = -\frac{\frac{\partial f}{\partial x_1}(\bar{x}_1, \bar{x}_2)}{\frac{\partial f}{\partial x_2}(\bar{x}_1, \bar{x}_2)}$$

onde $g(\bar{x}_1) = \bar{x}_2$.

A afirmação de que $f^{-1}(z) \cap (A \times B)$ é o gráfico de uma função $g : A \rightarrow B$ significa que, para cada $x_1 \in A$, existe um único $x_2 \in B$ com $f(x_1, x_2) = z$. Pondo $x_2 = g(x_1)$, dizemos que a função $g : A \rightarrow B$ é *definida implicitamente* pela equação $f(x_1, x_2) = z$ no aberto $A \times B$, conforme ilustrado na Figura 1.8.

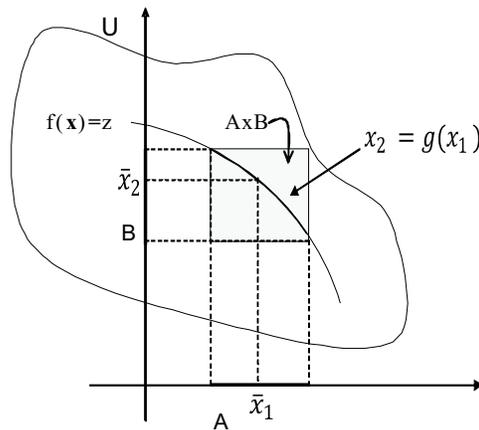


Figura 1.8: A função $g : A \rightarrow B$ é definida implicitamente pela equação $f(x_1, x_2) = z$.

Demonstração. Suponhamos, sem perda de generalidade, que $\frac{\partial f}{\partial x_2}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) > 0$. Como $\frac{\partial f}{\partial x_2}$ é contínua, existem $\delta > 0$ e $\varepsilon > 0$ tais que, pondo $A = (\bar{x}_1 - \delta, \bar{x}_1 + \delta)$ e $B = (\bar{x}_2 - \varepsilon, \bar{x}_2 + \varepsilon)$, temos $A \times \bar{B} \subset U$ (\bar{B} é o fecho de B) e $\frac{\partial f}{\partial x_2}(x_1, x_2) > 0$ para todo $(x_1, x_2) \in A \times \bar{B}$. Então para todo $x_1 \in A$, a função $x_2 \mapsto f(x_1, x_2)$ é estritamente crescente no intervalo \bar{B} . Pela continuidade de f , podemos supor δ suficientemente pequeno e tal que, para todo $x \in A$, tenhamos $f(x, x_2 - \varepsilon) < z$ e $f(x, x_2 + \varepsilon) > z$.

Logo, pelo Teorema do Valor Intermediário (ver [19]) existe, para cada $x \in A$, um único $x_2 = g(x_1) \in \bar{B}$ tal que $f(x_1, x_2) = z$. Tem-se obrigatoriamente que $x_2 \in B$, portanto $f^{-1}(z) \cap (A \times \bar{B}) = f^{-1}(z) \cap (A \times B)$ é o gráfico de uma função $g : A \rightarrow B$.

Basta mostrar agora que g é de classe C^k , ou seja, que existe $g'(x_1)$ para $x_1 \in A$ e g' é de classe C^{k-1} . Derivando $f(x_1, g(x_1)) = z$ em (\bar{x}_1, \bar{x}_2) , temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_1}(\bar{x}_1, g(\bar{x}_1)) \frac{dx_1}{dx_1}(\bar{x}_1) + \frac{\partial f}{\partial x_2}(\bar{x}_1, g(\bar{x}_1)) \frac{dg(x_1)}{dx_2}(\bar{x}_1) &= 0 \\ \frac{\partial f}{\partial x_1}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) + \frac{\partial f}{\partial x_2}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) g'(\bar{x}_1) &= 0. \end{aligned}$$

Explicitando g' , obtemos

$$g'(\bar{x}_1) = - \frac{\frac{\partial f}{\partial x_1}(\bar{x}_1, \bar{x}_2)}{\frac{\partial f}{\partial x_2}(\bar{x}_1, \bar{x}_2)}.$$

Por hipótese, $\frac{\partial f}{\partial x_1}$ e $\frac{\partial f}{\partial x_2}$ são contínuas e admitindo a continuidade de g (a demonstração da continuidade da função g pode ser obtida em [19]), então g' é contínua, logo $g \in C^1$. Como $f \in C^2$ e $g \in C^1$, a fórmula que dá g' mostra que g' é também de classe C^1 , assim $g \in C^2$. Portanto, mantendo essa idéia, se $f \in C^k$ tem-se $g \in C^k$. \square

A demonstração para uma função de n variáveis é feita de forma análoga ao caso de duas variáveis e o enunciado fica da seguinte forma:

Teorema 7 (Teorema da Função Implícita para \mathbb{R}^n). *Seja $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^k com $k \geq 1$, definida num aberto $U \subset \mathbb{R}^n$, e $\mathbf{p} = (\mathbf{x}_0, y_0) \in U$ tal que $f(\mathbf{p}) = z$ com*

$$\frac{\partial f}{\partial y}(\mathbf{p}) \neq 0.$$

Então existem uma bola aberta $B = B(\mathbf{x}_0, \delta) \subset \mathbb{R}^{n-1}$ e um intervalo $J = (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon) \subset \mathbb{R}$ tais que $f^{-1}(z) \cap (B \times J)$ é o gráfico de uma função $g : B \rightarrow J$ de classe C^k e

$$\frac{\partial g}{\partial x_i}(\mathbf{x}) = - \frac{\frac{\partial f}{\partial x_i}(\mathbf{x}, g(\mathbf{x}))}{\frac{\partial f}{\partial y}(\mathbf{x}, g(\mathbf{x}))}, \quad \forall i = 1, \dots, n-1$$

e para todo $\mathbf{x} \in B$.

Seja $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. O número real z é

denominado *valor regular* de f quando não existirem pontos críticos de f no nível z . Portanto, para todo valor regular z de f , o conjunto $f^{-1}(z)$ (se não for vazio) é uma curva de classe C^k . Caso existam pontos críticos $\mathbf{x} \in U$ tais que $f(\mathbf{x}) = z$, então z é chamado de *nível crítico* de f .

Além disso, a regularidade de uma função em um ponto, garante que o vetor gradiente não nulo nesse ponto seja perpendicular à curva de nível que passa por este ponto (conforme ilustrado na Figura 1.9). Vejamos agora o enunciado desse resultado e sua demonstração.

Teorema 8. *Seja $f : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^k , com $k \geq 1$. Se \mathbf{q} é um ponto regular de f então o vetor gradiente $\nabla f(\mathbf{q})$ é ortogonal ao conjunto de nível de f que passa por \mathbf{q} .*

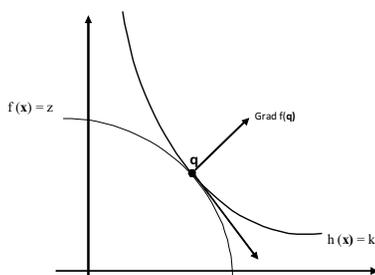


Figura 1.9: Vetor gradiente de f em \mathbf{q} é ortogonal ao conjunto de nível $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{q})$

Demonstração. Seja $f^{-1}(z) = \{\mathbf{x} \in D \mid f(\mathbf{x}) = z\}$ o conjunto ou hipersuperfície de nível z da função f e $\mathbf{w} = \nabla f(\mathbf{q})$, o vetor gradiente de f em $\mathbf{q} = (\mathbf{x}_0, y_0)$. Se $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ é ortogonal ao conjunto de nível $f^{-1}(z)$, então, para todo caminho $\lambda : (-\delta, \delta) \rightarrow f^{-1}(z)$ diferenciável no ponto $t = 0$ e tal que $\lambda(0) = \mathbf{q}$ tem-se $\langle \mathbf{w}, \lambda'(0) \rangle = 0$. De fato, como \mathbf{q} é um ponto regular de f , pelo Teorema da Função Implícita, existe uma bola aberta $B = B(\mathbf{x}_0, \delta) \subset \mathbb{R}^n$ e um intervalo $J = (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon) \subset \mathbb{R}$ tais que $f^{-1}(z) \cap (B \times J)$ é o gráfico de uma função $g : B \rightarrow J$ de classe C^k tal que $\mathbf{x}_0 \in B$, $g(\mathbf{x}_0) = y_0$ e $f(\mathbf{x}, g(\mathbf{x})) = z = f(\mathbf{x}_0, y_0)$ para todo $\mathbf{x} \in B$. Com o uso da função g , podemos construir uma curva parametrizada

$$\begin{aligned} \lambda : (-\delta, \delta) &\rightarrow f^{-1}(z) \\ t &\mapsto \lambda(t) = (\mathbf{x}(t), g(\mathbf{x}(t))) \end{aligned}$$

para $t \in (-\delta, \delta)$ com $\lambda(0) = \mathbf{q}$ e, cujo traço coincide com o gráfico de g e, portanto, também coincide com o conjunto de nível $f^{-1}(z)$. Assim $f(\lambda(t)) = z$ para todo $t \in (-\delta, \delta)$. Isso significa que a função composta $f \circ \lambda : (-\delta, \delta) \rightarrow \mathbb{R}$ é constante. Portanto, pela regra da cadeia,

$$\begin{aligned} (f \circ \lambda)'(0) &= \langle f'(\lambda(0)), \lambda'(0) \rangle \\ &= \langle f'(\mathbf{q}), \lambda'(0) \rangle \\ &= \langle \mathbf{w}, \lambda'(0) \rangle = 0 \end{aligned} \tag{1.5.1}$$

Por outro lado, pela desigualdade de Schwarz, temos que

$$|\langle \mathbf{w}, \lambda'(0) \rangle| \leq \|\mathbf{w}\| \cdot \|\lambda'(0)\|.$$

Reescrevendo a expressão obtemos

$$\frac{|\langle \mathbf{w}, \lambda'(0) \rangle|}{\|\mathbf{w}\| \cdot \|\lambda'(0)\|} \leq 1,$$

e portanto, existe um ângulo θ entre zero e π radianos tal que

$$\cos \theta = \frac{|\langle \mathbf{w}, \lambda'(0) \rangle|}{\|\mathbf{w}\| \cdot \|\lambda'(0)\|}, \tag{1.5.2}$$

onde θ é o ângulo entre os vetores \mathbf{w} e $\lambda'(0)$. Portanto por (1.5.1) e por (1.5.2), concluímos que $\theta = \frac{\pi}{2}$, ou seja, o vetor gradiente de f em \mathbf{q} é ortogonal ao vetor velocidade no ponto $\mathbf{q} = \lambda(0)$. \square

Outra propriedade importante do vetor gradiente é que ele aponta para a direção em que a função tem máximo crescimento.

Voltando ao problema (1.4.1) podemos nos indagar como o fato do vetor gradiente de f em \mathbf{q} $\nabla f(\mathbf{q})$, ortogonal ao conjunto de nível $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{q})$, pode ser importante para caracterizar o ponto \mathbf{q} , solução do problema? Obviamente, o gradiente da função h no ponto \mathbf{q} também é ortogonal à curva $h(\mathbf{x}) = k$ (que define o conjunto D). Por outro lado, como já mencionamos, as curvas de nível $h(\mathbf{x}) = k$ e $f(\mathbf{x}) = z_2$, são tangentes no ponto \mathbf{q} (solução do problema), ou seja, possuem a mesma reta tangente nesse ponto (veja Figura 1.10). Portanto, em \mathbf{q} temos que os vetores $\nabla f(\mathbf{q})$ e $\nabla h(\mathbf{q})$ devem ser

paralelos, isto é, existe um número real λ tal que

$$\nabla f(\mathbf{q}) = \lambda \nabla h(\mathbf{q}). \quad (1.5.3)$$

O número real λ é chamado de *multiplicador de Lagrange*. Dependendo do sinal de λ , eles podem ter o mesmo sentido ou sentidos opostos, mas a direção é sempre a mesma.

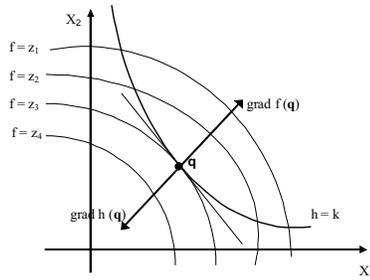


Figura 1.10: Os vetores gradientes de f e h em \mathbf{q} são paralelos.

Enfim, um ponto $\mathbf{q} \in D$ é solução do problema (1.4.1) se, e somente se, existir um escalar $\lambda \in \mathbb{R}$ tal que a equação (1.5.3) seja satisfeita. Essa metodologia usada para encontrar o ponto \mathbf{q} é chamada de *método dos multiplicadores de Lagrange*. Neste problema, o multiplicador de Lagrange é unidimensional, no entanto, para problemas de otimização com várias restrições de igualdade serão necessários vários multiplicadores.

O exemplo utilizado explicita este método; porém, algumas condições não foram mencionadas a fim de facilitar o entendimento, mas serão apresentadas e discutidas no teorema a seguir.

Teorema 9 (Teorema dos Multiplicadores de Lagrange). *Sejam f e h funções de classe C^1 de n -variáveis e seja \mathbf{q} um extremo local de f no conjunto admissível*

$$D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid h(\mathbf{x}) = k\}.$$

Suponha que \mathbf{q} seja um ponto regular da função h , ou seja,

$$\nabla h(\mathbf{q}) \neq 0.$$

Então, existe um número real λ^* (o multiplicador de Lagrange) tal que

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{q}) &= \lambda^* \nabla h(\mathbf{q}) \\ h(\mathbf{q}) &= k \end{cases}$$

isto é, o ponto $(\mathbf{q}, \lambda^*) \in \mathbb{R}^{n+1}$ é solução do sistema

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{q}) &= \lambda^* \frac{\partial h}{\partial x_1}(\mathbf{q}) \\ \vdots &= \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{q}) &= \lambda^* \frac{\partial h}{\partial x_n}(\mathbf{q}) \\ h(\mathbf{q}) &= k \end{cases}$$

denominado de condições de primeira ordem para o problema: $\text{Min } f(\mathbf{x})$ sujeito a $\mathbf{x} \in D$.

Demonstração. Suponhamos que $\mathbf{q} \in D$ seja um ponto de mínimo local de f em D , isto é, existe uma bola aberta $B = B(\mathbf{q}, \delta)$ tal que

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{q})$$

para todo $\mathbf{x} \in D \cap B$.

Pelo Teorema da Função Implícita, existe uma curva diferenciável $\gamma : (-\varepsilon, \varepsilon) \rightarrow f^{-1}(k)$ tal que $\gamma(0) = \mathbf{q}$ e $\gamma'(0) \neq 0$. Tem-se então, que $h(\gamma(t)) = 0$ para todo $t \in (-\varepsilon, \varepsilon)$. Da continuidade de γ e tomando ε adequadamente tal que para $t \in (-\varepsilon, \varepsilon)$ tem-se $\gamma(t) \in D \cap B$, e segue que

$$f(\gamma(t)) \geq f(\gamma(0))$$

para todo $t \in (-\varepsilon, \varepsilon)$.

Assim, zero é ponto de mínimo local de $F(t) = f(\gamma(t))$, portanto, pelo Teorema 2, $F'(0) = 0$, ou seja,

$$\langle \nabla f(\gamma(0)), \gamma'(0) \rangle = 0.$$

Por outro lado, de $h(\gamma(t)) = k$ em $(-\varepsilon, \varepsilon)$, tem-se

$$\langle \nabla h(\gamma(0)), \gamma'(0) \rangle = 0.$$

Tendo em vista a regularidade da função h em \mathbf{q} e que $\gamma'(0) \neq 0$, segue das duas igualdades acima que os vetores $\nabla f(\gamma(0))$ e $\nabla h(\gamma(0))$ são ambos ortogonais ao vetor velocidade $\gamma'(0)$ e portanto, possuem mesma direção, ou seja, existe um escalar real λ tal que

$$\nabla f(\mathbf{q}) = \lambda \nabla h(\mathbf{q}).$$

Logo, o ponto \mathbf{q} é um extremante local se, e somente se, satisfizer às duas condições:

1. $h(\mathbf{q}) = k$;
2. $\nabla f(\mathbf{q}) = \lambda \nabla h(\mathbf{q})$.

Essas condições representam um sistema de $n + 1$ equações nas $n + 1$ incógnitas x_1, x_2, \dots, x_n (coordenadas de \mathbf{x}) e λ . É a presença do fator λ que torna o número de incógnitas igual ao número de equações, o que viabiliza a solução do sistema, ou seja, se \mathbf{q} é um extremante local de f restrito a D , então, o ponto (\mathbf{q}, λ) deve ser solução do sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{q}) = \lambda \frac{\partial h}{\partial x_1}(\mathbf{q}) \\ \vdots = \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{q}) = \lambda \frac{\partial h}{\partial x_n}(\mathbf{q}) \\ h(\mathbf{q}) = k \end{array} \right. \quad (1.5.4)$$

□

Observe que o Teorema 9 não exige a regularidade de f no ponto \mathbf{q} , logo se \mathbf{q} for um extremante local de f então, pelo Teorema 2, $\nabla f(\mathbf{q}) = 0$. Neste caso, basta tomarmos $\lambda = 0$ para que o sistema (1.5.4) seja satisfeito.

Para elucidar melhor as condições necessárias e a força desse teorema, tomamos o seguinte problema:

Exemplo 1. *Uma empresa de barracas para acampamento quer fabricar barracas inspiradas nas tendas de formato de cone como as de algumas tribos de índios americanos, sendo que a soma da altura com o raio deve ser igual a 4.5 metros. Nessas condições, deseja-se saber as dimensões da barraca de volume máximo a fim de dar melhor comodidade para os usuários.*

Solução: Sejam $V \equiv V(r, h) = \frac{1}{3}\pi r^2 h$ e $H(r, h) = r + h$ funções definidas para todo $(r, h) \in \mathbb{R}_+^2$, onde r é o raio da base circular da barraca e h a altura. A função V expressa o volume da barraca em função da altura e do raio, enquanto que a função H dá a soma dessas duas dimensões. O problema acima pode então ser escrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \max \quad & V(r, h) = \frac{1}{3}\pi r^2 h \\ \text{sujeito a} \quad & D = \{(r, h) \in \mathbb{R}_+^2 \mid H(r, h) = 4.5\} \end{aligned} \tag{1.5.5}$$

ou seja, trata-se de um problema de otimização com uma restrição de igualdade onde o objetivo é encontrar o ponto $\mathbf{q} = (\bar{r}, \bar{h})$ restrito a D tal que V seja máximo. O gráfico da Figura 1.11 mostra a superfície da função V (em azul) e a curva (em vermelho) dos valores de V restritos ao conjunto D .

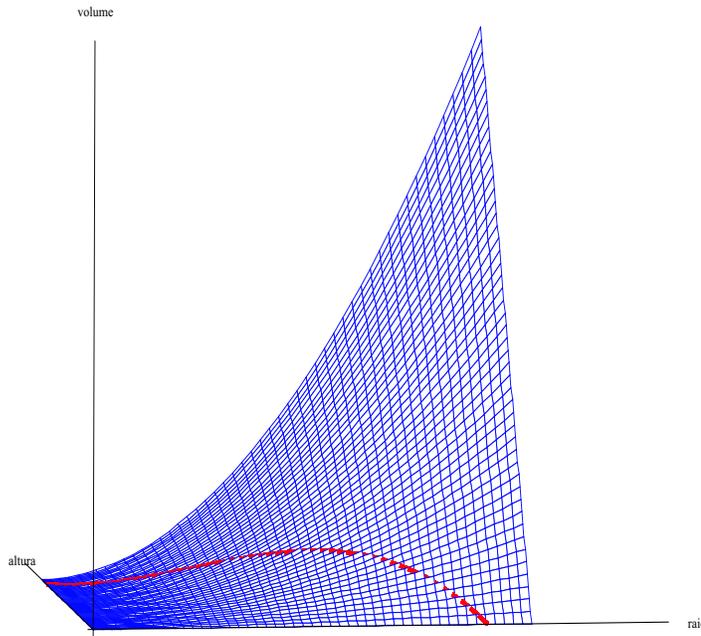


Figura 1.11: Gráfico da função V e da curva restrição D sobre o gráfico de V .

Para aplicarmos o Teorema dos Multiplicadores de Lagrange, devemos confirmar primeiramente as hipóteses do teorema.

1. *Se as funções V e H são de classe C^1 .*

Observa-se que as funções V e H são de classe C^1 pois são formuladas com multiplicação e soma de funções de classe C^1 .

2. Regularidade de H em \mathbf{q} .

Devemos mostrar que $\nabla H(\mathbf{q}) \neq 0$, onde \mathbf{q} é solução local do problema. Essa tarefa parece um pouco absurda pois devemos verificar a condição de regularidade da função H em \mathbf{q} sem conhecer (se existir) quem é \mathbf{q} . Alternativamente, podemos mostrar que todos os pontos do conjunto admissível D satisfazem a condição de regularidade. Assim, caso exista alguma solução para o problema de otimização, certamente irá satisfazer a condição de regularidade. Para o nosso caso, sendo $H(r, h) = r + h$ temos que

$$\nabla H(r, h) = \left(\frac{\partial H}{\partial r}(r, h), \frac{\partial H}{\partial h}(r, h) \right)^T = (1, 1)^T \neq 0$$

para todo $(r, h) \in D$. Isso garante que o vetor gradiente $\nabla H(\mathbf{q})$ é perpendicular à curva de nível $H(r, h) = 4.5$ no ponto \mathbf{q} (conforme ilustrado na Figura 1.12).

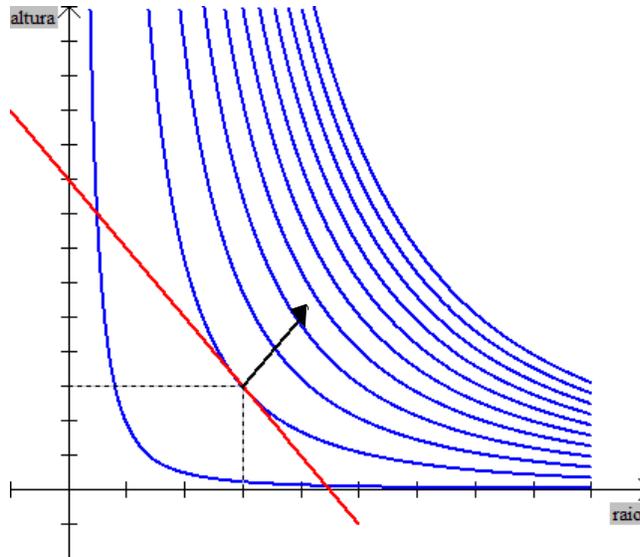


Figura 1.12: Curvas de nível da função V (azul), a curva de H (vermelho) e o vetor gradiente de H em \mathbf{q} .

Satisfeitas as condições, o Teorema dos Multiplicadores de Lagrange garante que existe um escalar λ tal que o sistema (1.5.4) tem solução e a solução é o ponto (\mathbf{q}, λ) .

Segue então,

$$\begin{cases} \frac{2}{3}\pi r h = \lambda \\ \frac{1}{3}\pi r^2 = \lambda \\ r + h = 4.5, \end{cases} \quad (1.5.6)$$

um sistema não-linear de três equações e três incógnitas. Igualando a primeira e a segunda equação, reduzimos o sistema para duas equações e duas incógnitas, conforme segue

$$\begin{cases} \frac{2}{3}\pi r h = \frac{1}{3}\pi r^2 \\ r + h = 4.5, \end{cases}$$

ou ainda, se $r \neq 0$ (que é óbvio!), temos

$$\begin{cases} 2h = r \\ r + h = 4.5. \end{cases}$$

Logo, se $r = 2h \Rightarrow h = 1.5$ e conseqüentemente, $r = 3$ e $\lambda = 3\pi$. Portanto, o ponto $(3, 1.5, 3\pi)$ é a única solução do sistema correspondente às condições de primeira ordem e $\mathbf{q} = (\bar{r}, \bar{h}) = (3, 1.5)$ é um extremante local do problema de otimização.

No entanto, o teorema não garante, apesar de termos obtido uma única solução para o sistema correspondente às condições de primeira ordem, que o ponto $\mathbf{q} = (3, 1.5)$, seja ponto de máximo da função. Ou seja, será necessário outro resultado para classificar os pontos que encontrados. Por hora, vamos nos valer da Figura 1.12 para classificar o ponto $(3, 1.5)$.

Temos que $V(\mathbf{q}) = V(3, 1.5) = 4.5\pi$ e que o ponto $\mathbf{q} \in D$, satisfaz o sistema correspondentes às condições de primeira ordem para o problema (1.5.5). Assim, temos que \mathbf{q} é ponto de máximo de V se $V(3, 1.5) < V(3 + t, 1.5 - t)$ para todo $|t|$ suficientemente pequeno, ou seja, se para todo valor de V , na vizinhança do ponto $(3, 1.5)$, tem-se valores menores que $V(3, 1.5)$. De fato, seja $|t|$ suficientemente pequeno e tomando $r = 3 + t$ e $h = 1.5 - t$, então,

$$V(3 + t, 1.5 - t) = 4.5\pi - t^2(4.5 + t) < 4.5\pi.$$

Portanto, $\mathbf{q} = (3, 1.5)$ é ponto de máximo de V restrito a D .

Por outro lado, tomando $f(t) = V(3 + t, 1.5 - t)$ e calculando a derivada de f em $t = 0$, temos

$$\frac{d}{dt}f(0) = 0.$$

O que implica que $t = 0$ é ponto crítico de f . Calculando a derivada segunda de f nesse ponto, tem-se

$$\frac{d^2}{dt^2}f(0) = -9 < 0,$$

para todo $t \in \mathbb{R}$, de onde segue, pelo Teorema 3, que $t = 0$ é ponto de máximo de f .

Portanto, o ponto $\mathbf{q} = (3, 1.5)$ é ponto de máximo de V .

Observe que o sistema (1.5.6) pode escrito da seguinte forma

$$\begin{cases} \frac{2}{3}\pi r h - \lambda = 0 \\ \frac{1}{3}\pi r^2 - \lambda = 0 \\ r + h - 4.5 = 0. \end{cases}$$

Esse sistema equivale às condições de primeira ordem para determinar o pontos críticos da função de três variáveis

$$L(r, h, \lambda) = V(r, h) - \lambda \cdot [H(r, h) - 4.5]$$

denominada *lagrangiano*. Em outras palavras, o sistema acima é dado por

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial r}(r, h, \lambda) = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial h}(r, h, \lambda) = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda}(r, h, \lambda) = 0 \end{cases}$$

Portanto, o ponto $(\bar{r}, \bar{h}, \lambda)$, solução do sistema (1.5.6), corresponde ao ponto crítico do lagrangiano. Assim, o Teorema 9 pode ser escrito da seguinte forma:

Teorema 10 (Multiplicadores de Lagrange). *Sejam f e h funções de classe C^1 de n variáveis e seja \mathbf{q} um extremo (máximo ou mínimo) local de f no conjunto admissível*

$$D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid h(\mathbf{x}) = k\}.$$

Suponha que \mathbf{q} seja um ponto regular da função h , ou seja,

$$\nabla h(\mathbf{q}) \neq 0.$$

Então, existe um número real λ (o multiplicador de Lagrange), tal que (\mathbf{q}, λ) é o ponto crítico do lagrangiano

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) - \lambda \cdot [h(\mathbf{x}) - k,]$$

ou seja,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial L}{\partial x_1}(\mathbf{q}, \lambda) = 0 \\ \vdots = \vdots \\ \frac{\partial L}{\partial x_n}(\mathbf{q}, \lambda) = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda}(\mathbf{q}, \lambda) = 0 \end{array} \right.$$

Neste próximo exemplo, vamos destacar a importância de ser satisfeita a condição de regularidade para a veracidade do Teorema dos Multiplicadores de Lagrange.

Exemplo 2.

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 \\ \text{sujeito a} & D = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \mid h(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^3 = 0\}. \end{array} \quad (1.5.7)$$

Solução: As funções f e h são de classe C^1 e o lagrangiano desse problema é

$$L(x_1, x_2, \lambda) = f(x_1, x_2) - \lambda \cdot [h(x_1, x_2)] = x_1^2 + x_2^2 - \lambda \cdot (x_1^2 + x_2^3).$$

As condições de primeira ordem são dadas pelo sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial L}{\partial x_1}(\mathbf{q}, \lambda) = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial x_2}(\mathbf{q}, \lambda) = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda}(\mathbf{q}, \lambda) = 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} 2x_1 - 2x_1\lambda = 0 \\ 2x_2 - 3x_2^2\lambda = 0 \\ -x_2^2 - x_2^3 = 0 \end{array} \right. \quad (1.5.8)$$

Estamos interessados em encontrar um ponto $\mathbf{q} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2) \in D$ tal que h seja regular

em \mathbf{q} , isto é,

$$\nabla h(\mathbf{q}) = (2\bar{x}_1, 2\bar{x}_2)^T \neq 0,$$

e que o ponto $(\mathbf{q}, \lambda) \in \mathbb{R}^3$, seja crítico do lagrangiano.

Observando a primeira equação do sistema (1.5.8), temos que:

1. Se $x_1 \neq 0 \Rightarrow \lambda = 1$. Na segunda equação $x_2 = 0$ ou $x_2 = \frac{2}{3}$. Substituindo o valor x_2 na última equação, obtemos uma inconsistência
2. Se $x_1 = 0$, da terceira equação têm-se $x_2 = 0$ e o sistema se cumpre para qualquer $\lambda \in \mathbb{R}$. Porém, $\nabla h(\mathbf{q}) = (2 \cdot 0, 2 \cdot 0)^T = \mathbf{0}$, ou seja, o ponto $\mathbf{0} = (0, 0)$ não satisfaz a condição de regularidade do problema, logo não existe $(x_1, x_2) \in D$ que seja regular e satisfaça o sistema.

Podemos dizer então que o sistema associado às condições de primeira ordem não possui solução. No entanto, vemos através do gráfico da f (Figura 1.13) que o ponto $(0, 0) \in D$ é ponto de mínimo de f , tanto do problema irrestrito de minimizar f , quanto do problema (1.5.7).

Assim, apesar de parecer, este exemplo não compromete a veracidade do Teorema dos Multiplicadores de Lagrange. O Teorema garante que qualquer extremante \mathbf{q} de uma função f de classe C^1 em um conjunto admissível D , formado por uma curva de nível de uma função h também de classe C^1 , irá satisfazer as condições de primeira ordem desde que $\nabla h(\mathbf{q}) \neq 0$. Como no problema (1.5.7), a regularidade de h não foi satisfeita em $\mathbf{q} = (0, 0)$, não podemos esperar, através do Teorema 10, que esse ponto seja extremante do problema de otimização.

Observe ainda que o Teorema dos Multiplicadores de Lagrange não exige a regularidade de f no ponto \mathbf{q} , embora tivéssemos considerado esse fato na análise do problema (1.4.1) para ilustrar a idéia geométrica por trás deste Teorema. Logo, fica explicitado com esse exemplo, que um ponto \mathbf{q} tal que $\nabla f(\mathbf{q}) = 0$, pode ser um possível candidato a solução de um problema de otimização, mesmo que não satisfaça a hipótese de regularidade de h no ponto \mathbf{q} .

Neste próximo exemplo, vamos apresentar um problema de otimização com duas restrições de igualdade e através dele, explorar a idéia geométrica por trás da metodologia dos multiplicadores de Lagrange, bem como das hipóteses a serem verificadas.

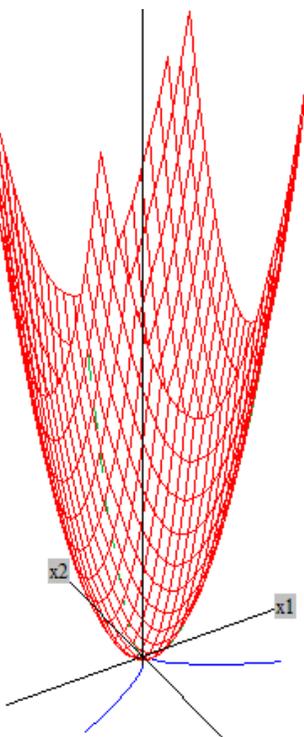


Figura 1.13: Gráfico da função $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ e da curva $h(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^3 = 0$.

Exemplo 3. Determine o valor máximo da função $f(x_1, x_2, x_3) = x_1 + 2x_2 + 3x_3$ na curva da intersecção do plano $x_1 - x_2 + x_3 = 1$ com o cilindro $x_1^2 + x_2^2 = 1$.

Reescrevendo a questão na forma de um problema de otimização, temos:

$$\begin{aligned} \max \quad & f(x_1, x_2, x_3) = x_1 + 2x_2 + 3x_3 \\ \text{sujeito a } \quad & D = \{ \mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid h_1(\mathbf{x}) = 1 \text{ e } h_2(\mathbf{x}) = 1 \} \end{aligned} \quad (1.5.9)$$

onde $h_1(\mathbf{x}) = x_1 - x_2 + x_3$ e $h_2(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2$.

Estamos então interessados em um ponto (ou vários) que maximize a função f restrita ao conjunto admissível D dado pelos pontos que satisfazem as duas equações (restrições de igualdade). Ou seja, estamos interessados em encontrar os extremos de uma função f de três variáveis no conjunto admissível

$$D = \{ \mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid h_1(\mathbf{x}) = k_1 \text{ e } h_2(\mathbf{x}) = k_2 \}$$

formado por todos os pontos $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ que satisfazem simultaneamente as duas restrições.

Podemos ainda olhar para o conjunto D como o conjunto de nível da função vetorial $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = (h_1(\mathbf{x}), h_2(\mathbf{x}))$, de \mathbb{R}^3 para \mathbb{R}^2 , associado ao nível $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$, ou seja

$$D = F_{\mathbf{k}} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{h}(\mathbf{x}) = (h_1(\mathbf{x}), h_2(\mathbf{x})) = (k_1, k_2) = \mathbf{k}\}$$

A metodologia proposta pelo Teorema de Lagrange, conforme Teoremas 9 e 10, é válida apenas para problemas de otimização com uma única restrição de igualdade, portanto, surge a necessidade de estender a idéia deste Teorema para várias restrições de igualdade, em particular, para duas.

Para estendermos a idéia do Teorema dos Multiplicadores de Lagrange para este caso, precisamos garantir, assim como no caso de uma única restrição de igualdade, que o conjunto de nível $D = F_{\mathbf{k}}$, possa ser escrito como o gráfico de uma função (vetorial). Anteriormente, o resultado que nos garantia isso era o Teorema da Função Implícita (Teorema 7 deste texto) para funções escalares de \mathbb{R}^n em \mathbb{R} . No entanto, estamos lidando com uma função vetorial \mathbf{h} de \mathbb{R}^3 em \mathbb{R}^2 , logo, faz-se necessário verificar se esse Teorema também estende-se para funções desse tipo e, caso seja possível, quais as hipóteses que devem ser verificadas.

Para isso, consideramos a forma mais geral de uma função vetorial $F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$ não-linear

$$F(x_1, x_2, x_3) = (F_1(\mathbf{x}), F_2(\mathbf{x})), \quad (1.5.10)$$

com ambas as funções coordenadas F_1 e F_2 de classe C^k , com $k \geq 1$, um ponto $\mathbf{p}^* = (x_1^*, x_2^*, x_3^*)$ e o conjunto de nível

$$F_{\mathbf{k}} = \{\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{F}(x_1, x_2, x_3) = \mathbf{k} = \mathbf{F}(x_1^*, x_2^*, x_3^*)\}$$

de F que passa por \mathbf{p}^* .

De forma análoga ao que foi visto no Teorema 7 para funções $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, precisamos saber se o conjunto $F_{\mathbf{k}}$ pode ser representado como gráfico de uma função em uma vizinhança de \mathbf{p}^* . Olhamos então para a aproximação linear de \mathbf{F} em torno do ponto \mathbf{p}^* ,

ou seja

$$\mathbf{l}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{p}^*) + D\mathbf{F}(\mathbf{p}^*) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{p}^*)$$

onde

$$D\mathbf{F}(\mathbf{p}^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_1}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_2}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix},$$

que é a forma mais simples de aproximar \mathbf{F} e, conseqüentemente, a forma mais fácil que se tem para trabalhar com essa função vetorial. Portanto, ao invés de verificar se o conjunto $F_{\mathbf{k}}$ pode ser representado como gráfico de uma função em uma vizinhança de \mathbf{p}^* , podemos verificar se o conjunto de nível

$$L_{\mathbf{k}} = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{l}(\mathbf{x}) = \mathbf{k} = \mathbf{l}(\mathbf{p}^*)\}$$

de \mathbf{l} que passa em \mathbf{p}^* , pode ser escrito como o gráfico de uma função em uma vizinhança desse ponto.

Note que, se $\mathbf{x} \in L_{\mathbf{k}}$, então $\mathbf{l}(\mathbf{x}) = \mathbf{k}$, logo,

$$\mathbf{k} = \mathbf{F}(\mathbf{p}^*) + D\mathbf{F}(\mathbf{p}^*) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{p}^*).$$

Rearranjando essa equação, temos que

$$D\mathbf{F}(\mathbf{p}^*) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{p}^*) = \mathbf{k} - \mathbf{F}(\mathbf{p}^*).$$

Como $\mathbf{F}(\mathbf{p}^*)$ também é igual a \mathbf{k} , tem-se que

$$D\mathbf{F}(\mathbf{p}^*) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{p}^*) = \mathbf{0}$$

ou, em termos de coordenadas,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_1}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_2}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - x_1^* \\ x_2 - x_2^* \\ x_3 - x_3^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Pela multiplicação de matrizes, obtemos da equação acima um sistema linear de duas

equações e três incógnitas:

$$\begin{cases} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*)(x_1 - x_1^*) + \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*)(x_2 - x_2^*) + \frac{\partial F_1}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*)(x_3 - x_3^*) = 0 \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*)(x_1 - x_1^*) + \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*)(x_2 - x_2^*) + \frac{\partial F_2}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*)(x_3 - x_3^*) = 0 \end{cases} \quad (1.5.11)$$

Assim, para saber se o conjunto de nível $L_{\mathbf{k}}$ de \mathbf{l} pode ser escrito como o gráfico de uma função vetorial em uma vizinhança de \mathbf{p}^* , devemos estudar o sistema (1.5.11).

Como temos duas equações e três incógnitas, é razoável admitir que é possível escrever duas delas, digamos x_1 e x_2 , em função da terceira, x_3 , ao menos em uma vizinhança de (x_1^*, x_2^*, x_3^*) . Passando os termos em x_3 das equações do sistema (1.5.11) para o segundo membro de suas respectivas equações, obtemos

$$\begin{cases} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*)(x_1 - x_1^*) + \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*)(x_2 - x_2^*) = -\frac{\partial F_1}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*)(x_3 - x_3^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*)(x_1 - x_1^*) + \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*)(x_2 - x_2^*) = -\frac{\partial F_2}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*)(x_3 - x_3^*) \end{cases}$$

ou, na forma matricial

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - x_1^* \\ x_2 - x_2^* \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*)(x_3 - x_3^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*)(x_3 - x_3^*) \end{bmatrix}. \quad (1.5.12)$$

Contudo, se quisermos escrever x_1 e x_2 como uma função de x_3 , o sistema (1.5.12) deve possuir uma única solução para cada valor de x_3 . Ou seja, a matriz

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix} \quad (1.5.13)$$

precisa ser inversível, com inversa dada por

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix}^{-1}.$$

Assim, admitindo a existência da inversa da matriz (1.5.13), segue que

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*)(x_3 - x_3^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*)(x_3 - x_3^*) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{bmatrix}.$$

Portanto, a função vetorial $\mathbf{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ definida por

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \mathbf{f}(x_3) = - \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*)(x_3 - x_3^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_3}(\mathbf{p}^*)(x_3 - x_3^*) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{bmatrix},$$

é tal que seu gráfico coincide com o conjunto de nível $F_{\mathbf{k}}$ numa vizinhança de \mathbf{p}^* .

É natural nos indagarmos se seria possível definir outra função vetorial usando um par de variáveis, diferente do já utilizado. A resposta para este questionamento depende da matriz das derivadas primeiras da função vetorial, definida pelas restrições do problema, em relação às variáveis que se está tomando como variáveis independentes para essa função. Ou melhor dizendo, depende da existência ou não da inversa da matriz correspondente, assim como foi destacado no desenvolvimento da idéia acima.

Em suma, dada uma função vetorial $\mathbf{F} : \mathbb{R}^{2+1} \rightarrow \mathbb{R}^2$, definida por

$$\mathbf{F}(x_1, x_2, x_3) = (F_1(x_1, x_2, x_3), F_2(x_1, x_2, x_3))$$

de classe C^k com $k \geq 1$, um ponto $\mathbf{p}^* = (x_1^*, x_2^*, x_3^*)$ e o conjunto de nível

$$F_{\mathbf{k}} = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^{2+1} \mid \mathbf{F}(x_1, x_2, x_3) = \mathbf{k} = \mathbf{F}(x_1^*, x_2^*, x_3^*)\}$$

de \mathbf{F} que passa por \mathbf{p}^* . Se a matriz 2×2

$$D\mathbf{F}(\mathbf{p}^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix}$$

é inversível, então existe uma função vetorial $\mathbf{f} : B \subset \mathbb{R}^1 \rightarrow \mathbb{R}^2$ definida em uma bola aberta B contendo o ponto x_3^* tal que $x_1^* = f_1(x_3^*)$, $x_2^* = f_2(x_3^*)$, $\mathbf{F}(f_1(x_3^*), f_2(x_3^*), x_3) = \mathbf{k}$, $\forall x_3 \in B$ e

$$D\mathbf{F}(x_1^*, x_2^*, x_3^*) = -D_{(x_1, x_2)}\mathbf{F}(\mathbf{p}^*)^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_3} \end{bmatrix}.$$

Assim, vemos que o Teorema da Função Implícita pode ser estendido para funções vetoriais de \mathbb{R}^3 em \mathbb{R}^2 desde que satisfaça certas hipóteses.

O próximo Teorema generaliza as conclusões obtidas com o caso particular supracitado e constitui a forma mais geral do Teorema da Função Implícita.

Teorema 11 (Teorema da Função Implícita). *Considere uma função vetorial $\mathbf{F} : \mathbb{R}^{m+n} \rightarrow \mathbb{R}^m$, definida por*

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (F_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}), F_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \dots, F_m(\mathbf{x}, \mathbf{y}))$$

de classe C^k com $k \geq 1$, um ponto $\mathbf{p}^ = (\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)$ e o conjunto de nível*

$$F_k = \{(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}^{m+n} \mid \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{k} = \mathbf{F}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)\}$$

de \mathbf{F} que passa por \mathbf{p}^ , onde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$, $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)$, $\mathbf{x}^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)$ e $\mathbf{y}^* = (y_1^*, \dots, y_m^*)$. Se a matriz*

$$D_{\mathbf{y}}\mathbf{F}(\mathbf{p}^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial y_1}(\mathbf{p}^*) & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial y_m}(\mathbf{p}^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_m}{\partial y_1}(\mathbf{p}^*) & \cdots & \frac{\partial F_m}{\partial y_m}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix}_{m \times m}$$

é inversível, então existe uma função vetorial $\mathbf{f} : B \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ de classe C^k definida em uma bola aberta B de \mathbb{R}^n tal que

a) $\mathbf{x}^* \in B$,

b) $\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{f}(\mathbf{x})) = \mathbf{k}$ para todo $\mathbf{x} \in B$,

c) $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{y}^*$ e

d) a matriz jacobiana de \mathbf{f} no ponto \mathbf{x}^* pode ser calculada em termos da matriz jacobiana de \mathbf{F} no ponto $\mathbf{p}^* = (\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)$:

$$D\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = -(D_{\mathbf{y}}\mathbf{F}(\mathbf{p}^*))^{-1} \cdot D_{\mathbf{x}}\mathbf{F}(\mathbf{p}^*).$$

Dizemos que $\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{k}$ define implicitamente \mathbf{y} como uma função vetorial \mathbf{f} de \mathbf{x} em uma vizinhança do ponto $\mathbf{p}^ = (\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) = (x_1^*, \dots, x_n^*, y_1^*, \dots, y_m^*)$.*

Voltando ao problema do Exemplo 3, precisamos estender agora a idéia do Teorema dos Multiplicadores de Lagrange para duas restrições de igualdade. O Teorema 11 nos garante que podemos escrever o conjunto de nível $D = F_{\mathbf{k}}$ como o gráfico de uma função

(vetorial), desde de que a matriz das derivadas primeiras das funções coordenadas da função vetorial \mathbf{h} , em relação às variáveis que se queira tomar como independentes para a função vetorial \mathbf{f} (cujo gráfico é o conjunto de nível D), seja inversível. Em outras palavras, é suficiente que a matriz jacobiana

$$Jac(\mathbf{p}^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \cdots & \frac{\partial h_1}{\partial x_n}(\mathbf{p}^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial h_m}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \cdots & \frac{\partial h_m}{\partial x_n}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix}_{m \times n} \quad (1.5.14)$$

de \mathbf{h} no ponto \mathbf{p}^* possua uma submatriz $m \times m$ inversível. Ou seja, basta existir uma escolha de variáveis $x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_m} \in D \subset \mathbb{R}^{m+n}$ para as quais a matriz

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_{i_1}}(\mathbf{p}^*) & \cdots & \frac{\partial h_1}{\partial x_{i_m}}(\mathbf{p}^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial h_m}{\partial x_{i_1}}(\mathbf{p}^*) & \cdots & \frac{\partial h_m}{\partial x_{i_m}}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix}_{m \times m}$$

é inversível.

Entretanto, na prática, é mais fácil verificar se a matriz jacobiana (1.5.14) tem posto m , isto é, o número de linhas não nulas da matriz escalonada equivalente à matriz jacobiana de \mathbf{h} é igual a m (o número de restrições do problema).

Como no Exemplo 3, o conjunto de restrições é dado por

$$D = F_k = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{h}(\mathbf{x}) = (h_1(\mathbf{x}), h_2(\mathbf{x})) = (k_1, k_2) = \mathbf{k}\},$$

ou ainda,

$$D = F_k = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{h}(\mathbf{x}) = (x_1 - x_2 + x_3, x_1^2 + x_2^2) = (1, 1)\}$$

temos que \mathbf{h} é uma aplicação de \mathbb{R}^3 em \mathbb{R}^2 . Logo, a jacobiana de \mathbf{h} em $\mathbf{x} \in D$ é a matriz

$$\begin{bmatrix} \nabla h_1(\mathbf{x})^T \\ \nabla h_2(\mathbf{x})^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial h_1}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \frac{\partial h_1}{\partial x_3}(\mathbf{x}) \\ \frac{\partial h_2}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial h_2}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \frac{\partial h_2}{\partial x_3}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}_{2 \times 3}$$

ou seja,

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 2x_1 & 2x_2 & 0 \end{bmatrix}.$$

Antes de afirmar se a matriz possui ou não posto $m = 2$, devemos estudar todas as possibilidades para os valores de x_1 e x_2 .

Se $x_1 = 0$, da equação $h_2(\mathbf{x}) = 1$, tem-se que $x_2 = \pm 1$. Logo, a matriz jacobiana fica da seguinte forma

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 0 & \pm 2 & 0 \end{bmatrix}.$$

Escalonando, obtemos a matriz

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & \pm 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Portanto, a jacobiana tem posto $m = 2$ para $x_1 = 0$.

Por sua vez, se $x_1 \neq 0$, temos que a matriz escalonada equivalente à jacobiana de \mathbf{h} em \mathbf{x}

$$\begin{bmatrix} 1 & -\frac{x_2}{x_1} & 1 \\ 0 & x_2 + x_1 & -x_1 \end{bmatrix},$$

também tem posto $m = 2$. Como para todo $\mathbf{x} \in D$, a matriz jacobiana de \mathbf{h} tem posto igual a dois (o número de restrições), o Teorema 11 garante a existência de uma função vetorial \mathbf{f} de \mathbb{R} em \mathbb{R}^2 cujo gráfico coincide com o conjunto de nível D das restrições do problema. A Figura 1.14 mostra a curva de nível $D = F_{\mathbf{k}}$ (uma elipse), equivalente à curva de intersecção do plano $h_1(\mathbf{x}) = 1$ com o cilindro $h_2(\mathbf{x}) = 1$.

A matriz jacobiana ter posto dois significa que as duas linhas desta matriz não são múltiplas uma da outra, ou ainda, que o vetor gradiente de h_1 não é paralelo ao vetor gradiente de h_2 . Dizemos também que os vetores $\nabla h_1(\mathbf{x})$ e $\nabla h_2(\mathbf{x})$ são LI_s (linearmente independentes) para todo $\mathbf{x} \in D$.

Estendendo a Definição 11 (Ponto Regular), para funções de \mathbb{R}^n em \mathbb{R}^m , temos o

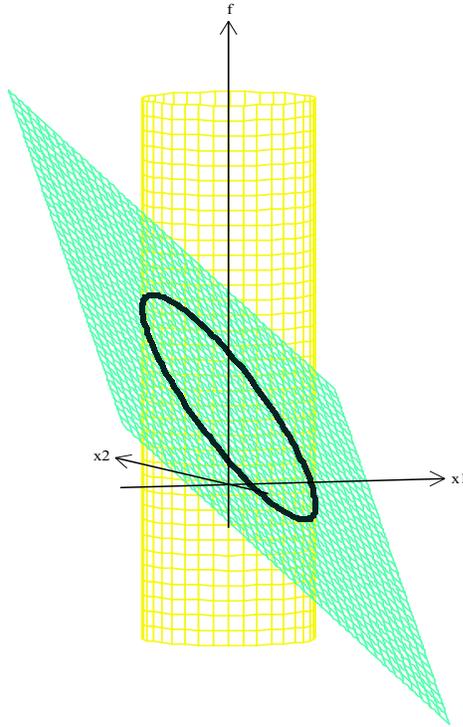


Figura 1.14: Gráficos das equações $h_1(\mathbf{x}) = 1$, $h_2(\mathbf{x}) = 1$ e da curva de nível $D = F_{\mathbf{k}}$.

seguinte enunciado:

Definição 12. Seja $f : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ com $m < n$ e funções coordenadas f_1, \dots, f_m de classe C^k , para $k \geq 1$. O ponto \mathbf{p} é regular em f se a matriz jacobiana

$$Jac(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\mathbf{p}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(\mathbf{p}) & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(\mathbf{p}) \end{bmatrix}_{m \times n}$$

tiver posto m .

Da definição acima, podemos dizer então, que todo ponto $\mathbf{p}^* \in D$, do Exemplo 3, é regular em \mathbf{h} . Além disso, cada função coordenada, h_1 e h_2 , é função de \mathbb{R}^3 em \mathbb{R} e de classe C^k , com $k \geq 1$. Logo, pelo Teorema 8, os vetores gradientes $\nabla h_1(\mathbf{p}^*)$ e $\nabla h_2(\mathbf{p}^*)$ são ortogonais aos conjuntos $h_1(\mathbf{x}) = 1$ e $h_2(\mathbf{x}) = 1$, respectivamente, no ponto \mathbf{p}^* (ver Figura 1.15).

Suponhamos que o ponto $\mathbf{p}^* = (x_1^*, x_2^*, x_3^*) \in D$, além de satisfazer a regularidade em \mathbf{h} , seja um extremante local de f , digamos máximo, no conjunto admissível D . Assim,

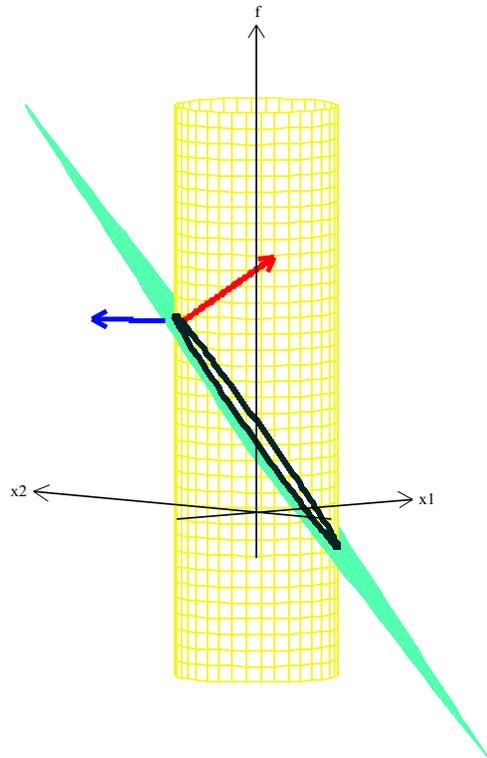


Figura 1.15: Figura ilustrando os gradientes, $\nabla h_1(\mathbf{x}^*)$ (em vermelho) e $\nabla h_2(\mathbf{x}^*)$ (em azul), ortogonais aos conjuntos $h_1(\mathbf{x}) = 1$ e $h_2(\mathbf{x}) = 1$, respectivamente, em um ponto $\mathbf{x}^* \in D$.

existe uma bola aberta B de centro (x_1^*, x_2^*, x_3^*) tal que, para todo $\mathbf{x} \in B \cap D$,

$$f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{p}^*).$$

Consideremos agora uma curva diferenciável $\lambda : I \rightarrow \mathbb{R}^3$, onde I é um intervalo aberto, tal que $\gamma(t^*) = (x_1^*, x_2^*, x_3^*)$, $\gamma'(t^*) \neq \mathbf{0}$ e $\gamma(t) \in D$ para todo t em I , conforme Figura 1.16. A existência dessa curva parametrizada é garantida pelo Teorema 11 das funções implícitas.

Da continuidade de γ , segue que existe $\delta > 0$ tal que

$$t \in]t^* - \delta, t^* + \delta[\Rightarrow \gamma(t) \in B \cap D.$$

Logo, para todo $t \in]t^* - \delta, t^* + \delta[$ tem-se

$$f(\gamma(t)) \leq f(\gamma(t^*)).$$

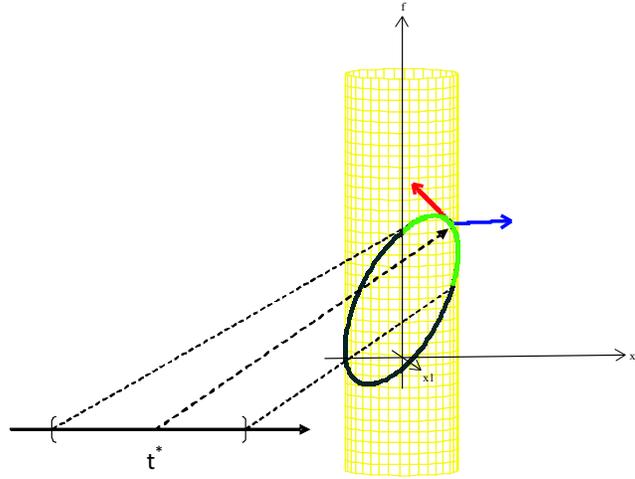


Figura 1.16: A função γ leva os valores do intervalo I da reta, na curva (em verde) em D .

Dessa forma, t^* é ponto de máximo local de $F(t) = f(\gamma(t))$ e, pelo Teorema 2, $F'(t^*) = 0$, ou seja,

$$\langle \nabla f(\gamma(t)), \gamma'(t^*) \rangle = 0.$$

Por outro lado, de $\gamma(t) \in D$ para todo $t \in I$, segue que $h_1(\gamma(t)) = 1$ e $h_2(\gamma(t)) = 1$. Logo,

$$\langle \nabla h_1(\lambda(t^*)), \gamma'(t^*) \rangle = 0 \text{ e } \langle \nabla h_2(\gamma(t^*)), \gamma'(t^*) \rangle = 0.$$

Assim, temos que os vetores $\nabla h_1(\mathbf{p}^*)$, $\nabla h_2(\mathbf{p}^*)$ e $\nabla f(\mathbf{p}^*)$, em \mathbf{p}^* (extremante de f), são ortogonais ao vetor $\gamma'(t^*)$, tangente à curva $\gamma : I \rightarrow \mathbb{R}^3$. Isso implica, que os três vetores gradientes estão no mesmo plano, ou ainda, que os vetores gradientes geram o plano dos vetores ortogonais ao vetor $\gamma'(t^*)$, denominado *Complemento Ortogonal*. No entanto, o Complemento Ortogonal do vetor $\gamma'(t^*)$ tem dimensão 2 e é sabido que um subespaço de dimensão n é gerado por uma base com n vetores LI_s . Além disso, para qualquer base formada por n vetores LI mais m vetores LD_s (linearmente dependentes), esses m vetores podem ser escritos como combinação linear dos n vetores LI_s (Mais detalhes sobre esse assunto podem ser encontrados em [5] e [17]). Assim, como os vetores

$\nabla h_1(\mathbf{p}^*)$ e $\nabla h_2(\mathbf{p}^*)$ são LI_s , conclui-se que o vetor $\nabla f(\mathbf{p}^*)$ pode ser escrito como combinação linear dos dois primeiros (ver Figura 1.17), ou seja, existem escalares $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ tais que

$$\nabla f(\mathbf{p}^*) = \lambda_1 \nabla h_1(\mathbf{p}^*) + \lambda_2 \nabla h_2(\mathbf{p}^*)$$

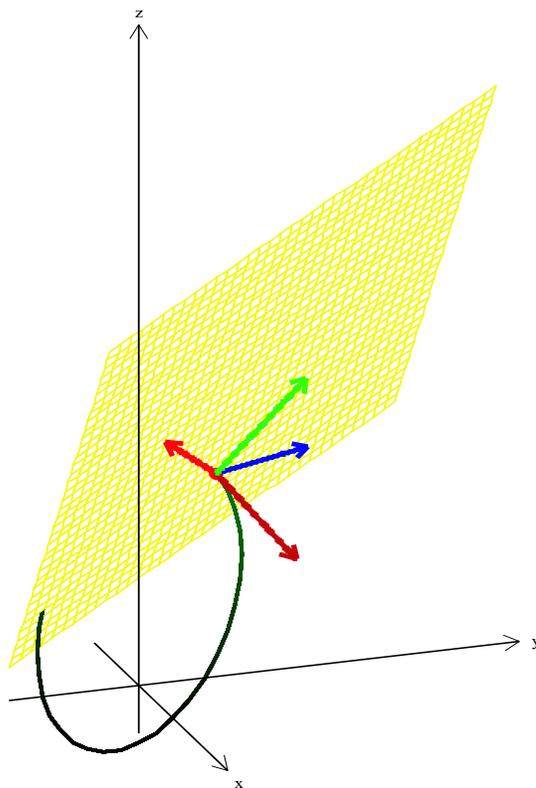


Figura 1.17: Os vetores $\nabla f(\mathbf{p}^*)$ (em verde), $\nabla h_1(\mathbf{p}^*)$ (em vermelho) e $\nabla h_2(\mathbf{p}^*)$ (em azul) são coplanares no plano dos vetores ortogonais ao vetor tangente (em vinho) à curva de nível D .

Em suma, se o ponto \mathbf{p}^* , restrito ao conjunto de nível D e regular de \mathbf{h} , for um extremante (máximo ou mínimo) local da função f de classe C^k com $k \geq 1$, então, devem existir escalares λ_i tais que o vetor gradiente da f possa ser escrito como uma combinação linear dos gradientes das funções coordenadas de \mathbf{h} , também de classe C^k para $k \geq 1$. Assim, existem pontos $(\mathbf{p}^*, \boldsymbol{\lambda}) = (x_1^*, x_2^*, x_3^*, \lambda_1, \lambda_2)$ que satisfazem o sistema

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{p}^*) = \lambda_1 \nabla h_1(\mathbf{p}^*) + \lambda_2 \nabla h_2(\mathbf{p}^*) \\ h_1(\mathbf{p}^*) = 1 \\ h_2(\mathbf{p}^*) = 1 \end{cases}, \quad (1.5.15)$$

ou ainda,

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 = \lambda_1 + \lambda_2(2x_1) \\ 2 = -\lambda_1 + \lambda_2(2x_2) \\ 3 = \lambda_1 + \lambda_2(0) \\ x_1 - x_2 + x_3 = 1 \\ x_1^2 + x_2^2 = 1 \end{array} \right. ,$$

para $\mathbf{p}^* \in D$.

Resolvendo esse sistema, obtemos os pontos $\mathbf{p}^* = \left(\frac{2}{\sqrt{29}}, -\frac{5}{\sqrt{29}}, \frac{1}{29}(29 - 7\sqrt{29}) \right)$ e $\mathbf{q}^* = \left(-\frac{2}{\sqrt{29}}, \frac{5}{\sqrt{29}}, 1 + \frac{7}{\sqrt{29}} \right)$, que pertencem a D , são regulares e satisfazem o sistema (1.5.11), portanto, são extremantes de f . Por simples substituição dos pontos em f , constata-se ainda que, o primeiro é ponto de mínimo e o segundo é ponto de máximo local da função, solução do problema.

Essa idéia desenvolvida para resolver o problema de otimização do Exemplo 3, constitui a metodologia dos multiplicadores de Lagrange para problemas de otimização restritos a várias equações de igualdade. Esse resultado é melhor apresentado com o enunciado do Teorema abaixo, que é a forma mais geral do Teorema dos Multiplicadores de Lagrange para o caso de várias restrições de igualdade.

Teorema 12 (Teorema dos Multiplicadores de Lagrange). *Seja f uma função de n variáveis de classe C^k , com $k \geq 1$, e seja \mathbf{p} um extremo (máximo ou mínimo) local de f no conjunto admissível*

$$D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{h}(\mathbf{x}) = (h_1(\mathbf{x}), \dots, h_m(\mathbf{x})) = (k_1, \dots, k_m) = \mathbf{k}\},$$

com funções coordenadas também de classe C^k , com $k \geq 1$. Suponha que \mathbf{p} satisfaça a seguinte condição de regularidade: o posto da matriz jacobiana

$$Jac(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} \nabla h_1(\mathbf{p})^T \\ \vdots \\ \nabla h_m(\mathbf{p})^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \cdots & \frac{\partial h_1}{\partial x_n}(\mathbf{p}^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial h_m}{\partial x_1}(\mathbf{p}^*) & \cdots & \frac{\partial h_m}{\partial x_n}(\mathbf{p}^*) \end{bmatrix}_{m \times n}$$

é igual a m (o número de restrições). Então existem reais $\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*$ (os multiplicadores

de Lagrange) tais que

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla f(\mathbf{p}) = \lambda_1^* \nabla h_1(\mathbf{p}) + \cdots + \lambda_m^* \nabla h_m(\mathbf{p}) \\ h_1(\mathbf{p}) = k_1 \\ \vdots \\ h_m(\mathbf{p}) = k_m. \end{array} \right.$$

O sistema acima é denominado de condições de primeira ordem para o problema de otimização. Equivalentemente, o ponto $(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) = (p_1, \dots, p_n, \lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*)$ é o ponto crítico do lagrangiano

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) - \lambda_1[h_1(\mathbf{x}) - k_1] - \cdots - \lambda_m[h_m(\mathbf{x}) - k_m].$$

Enfim, a resolução do problema de otimização do Exemplo 3, nos forneceu um contexto para desenvolver e apresentar a ferramenta para abordar problemas de otimização para funções objetivo com várias variáveis restritas a várias equações de igualdade. Observamos também que a condição de regularidade não pode ser omitida mesmo para o caso mais geral do Teorema dos Multiplicadores de Lagrange. Contudo, não podemos nos dar ao luxo de dizer que esse Teorema contempla todas as formas dos problemas de otimização. Segundo (Bortolossi, 2002): *a grande maioria dos problemas de otimização em engenharia e economia são modelados de tal forma que o conjunto admissível é constituído com o uso de desigualdades:*

$$D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_1(\mathbf{x}) \leq k_1, \dots, g_m(\mathbf{x}) = k_m\}.$$

Visto isto, dedicaremos a próxima seção, à discussão desse tipo de problema. Iniciaremos com problemas com uma restrição de desigualdade e, de forma análoga ao caso dos problemas com restrições de igualdade, estenderemos o resultado para várias restrições de desigualdade.

1.6 Otimização com restrições de desigualdade

Para abordarmos problemas desse tipo, tomaremos um caso bem simples para, a partir deste, construir a teoria necessária para caracterizar algebricamente os candidatos a extremo de uma função objetivo em um conjunto admissível envolvendo uma desigualdade.

Exemplo 4. Consideremos o problema de maximizar a função $f(x_1, x_2) = x_1 - x_2 + 3$ restrita ao conjunto de pontos definidos por $g(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 \leq 1$ (ver Figura 1.18). Ou seja,

$$\begin{aligned} & \text{maximizar} && f(x_1, x_2) = x_1 - x_2 + 3 \\ & \text{sujeito a} && D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid g(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 \leq 1\}. \end{aligned} \tag{1.6.1}$$

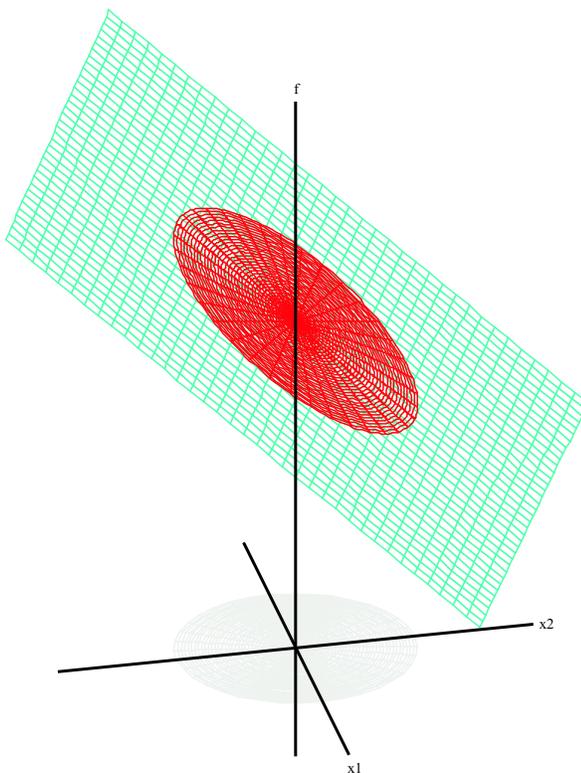


Figura 1.18: Visualização dos valores da função f (em vermelho) para os quais o domínio é o conjunto D da restrição de f .

Suponhamos que o ponto \mathbf{p} seja a solução do problema (1.6.1), isto é, \mathbf{p} é ponto de máximo de f no conjunto admissível D . Assim, tem-se duas possibilidades para esse ponto: $g(\mathbf{p}) = 1$ ou $g(\mathbf{p}) < 1$. Melhor dizendo, ou o ponto \mathbf{p} está sobre o conjunto

de nível $D_1 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid g(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 = 1\}$ ou, está na região interna do conjunto $D_2 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid g(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 < 1\}$, tal que $D = D_1 \cup D_2$.

Vamos tratar esses dois casos separadamente.

1. Se $g(\mathbf{p}) = 1$

Neste caso, dizemos que a restrição g está *ativa* no ponto \mathbf{p} . Geometricamente, isso significa dizer que o ponto está na *fronteira* do conjunto admissível D_1 .

Observe que esta situação é semelhante ao que apresentamos nas Seções 1.4 e 1.5, quando discutimos problemas de otimização com uma ou mais restrições de igualdade. Logo, podemos nos valer do Teorema 9 para concluir que: se \mathbf{p} é ponto de máximo de f em D_1 , então

$$\nabla f(\mathbf{p}) = \lambda^* \nabla g(\mathbf{p}).$$

No entanto, a condição $\lambda^* \geq 0$ também deve ser satisfeita para esse caso. Para explicitar essa idéia, plotamos algumas curvas de nível da função f do problema (1.6.1), conforme Figura 1.19.

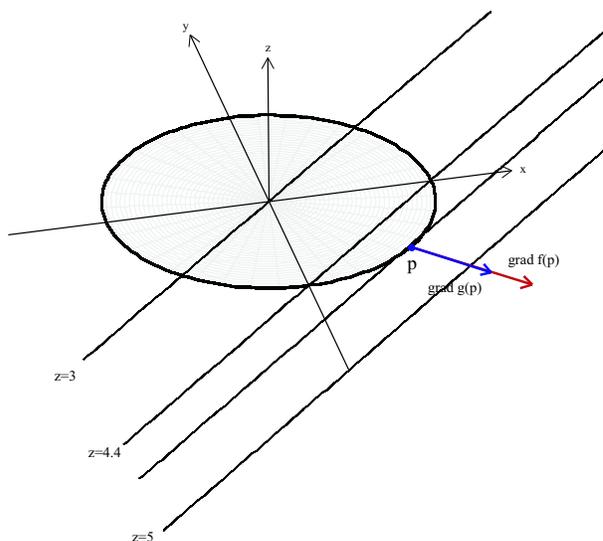


Figura 1.19: O ponto \mathbf{p} está sobre a fronteira do conjunto admissível D e o vetor $\nabla f(\mathbf{p})$, aponta para a direção de crescimento de f .

O vetor gradiente $\nabla g(\mathbf{p})$, é ortogonal ao conjunto de nível D_1 em \mathbf{p} , conforme o Teorema 8, e aponta para fora do conjunto D . Pelo mesmo Teorema, o gradiente

da função f em \mathbf{p} , $\nabla f(\mathbf{p})$, é ortogonal às curvas de nível de f e aponta na direção de crescimento dessas curvas. Portanto, os gradientes devem ser não só paralelos, mas ter o mesmo sentido, ou seja,

$$\nabla f(\mathbf{p}) = \lambda^* \nabla g(\mathbf{p}), \text{ com } \lambda^* \geq 0.$$

De fato, se $\lambda^* < 0$ então \mathbf{p} não seria um ponto de máximo do problema (1.6.1), pois seria possível sair viavelmente (em D_1 ou D_2) aumentando o valor de f .

Em suma, o ponto $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$, regular em g , é um extremo local de f em D_1 , se existir um $\lambda^* \in \mathbb{R}$ tal que o ponto (\mathbf{p}, λ^*) satisfaça o sistema

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{p}) = \lambda^* \nabla g(\mathbf{p}) \\ \lambda^* \geq 0 \\ g(\mathbf{p}) = 1 \end{cases} . \quad (1.6.2)$$

Considerando os valores de f e D , apresentados no enunciado do Exemplo 4, para o sistema (1.6.2), segue que

$$\begin{cases} 1 = 2\lambda^* p_1 \\ -1 = 2\lambda^* p_2 \\ \lambda^* \geq 0 \\ p_1^2 + p_2^2 = 1 \end{cases} ,$$

cuja solução é o ponto $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$. Portanto, o ponto $\mathbf{p} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$ é solução do problema (1.6.1).

2. Se $g(\mathbf{p}) < 1$

Dessa hipótese, dizemos que o ponto \mathbf{p} é interior ao conjunto D_2 , isto é, existe um real $\delta \in \mathbb{R}$ tal que a bola aberta de raio δ , centrada em \mathbf{p} , $B_\delta(\mathbf{p})$, esteja contida no conjunto D_2 . Geometricamente, podemos simplesmente dizer que o ponto \mathbf{p} está no interior desse conjunto. Neste caso, dizemos ainda que a restrição g *não está ativa* no ponto \mathbf{p} .

Tal situação assemelha-se aos problemas de otimização sem restrições discutidos

na Seção 1.3. Dessa maneira, se \mathbf{p} é ponto de máximo local de f em D_2 , então \mathbf{p} deve satisfazer a da restrição $g(\mathbf{p}) < 1$ e o Teorema 2, isto é, \mathbf{p} deve ser ponto crítico de f ,

$$\nabla f(\mathbf{p}) = 0.$$

Ou seja, \mathbf{p} deve satisfazer o sistema

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{p}) = 0 \\ g(\mathbf{p}) < 1 \end{cases}. \quad (1.6.3)$$

Apesar de já termos resolvido nosso problema, vale a pena verificar que não existe outro ponto $\mathbf{p} \in D_2$ que maximize f restrita a D . Temos que o gradiente da função $f(x_1, x_2) = x_1 - x_2 + 3$, é o vetor $\nabla f(\mathbf{x}) = (1, -1)$ para todo $\mathbf{x} \in D_2$. Ou seja, não existe nenhum ponto \mathbf{p} , no conjunto admissível D_2 , que satisfaça o sistema (1.6.3).

Do problema anterior, concluímos que, um ponto $\mathbf{p} \in D$ é máximo local de uma função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, sujeita a um conjunto admissível $D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid g(\mathbf{x}) \leq k\}$, se satisfizer o sistema

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{p}) = \lambda^* \nabla g(\mathbf{p}) \\ \lambda^* \geq 0 \\ g(\mathbf{p}) = k \end{cases}, \quad (1.6.4)$$

quando g está ativa em \mathbf{p} , ou seja, $g(\mathbf{p}) = k$, supondo é claro, que \mathbf{p} é regular em g . Ou, se satisfizer

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{p}) = 0 \\ g(\mathbf{p}) < k \end{cases}, \quad (1.6.5)$$

quando g não está ativa em \mathbf{p} , ou seja, $g(\mathbf{p}) < k$.

É devida a Karush-Kuhn-Tucker, uma maneira de unificar esses dois casos. Basta considerar a seguinte equação

$$\lambda^* \cdot [g(\mathbf{p}) - k] = 0, \quad (1.6.6)$$

conhecida como *condição de complementaridade*, para se obter a forma unificada dos

casos, conforme segue abaixo

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla f(\mathbf{p}) = \lambda^* \nabla g(\mathbf{p}) \\ \lambda^* \cdot [g(\mathbf{p}) - k] = 0 \\ \lambda^* \geq 0 \\ g(\mathbf{p}) \leq k. \end{array} \right.$$

Observe que se tivermos lidando com um problema em que $g(\mathbf{p}) = k$, então, da equação (1.6.6), temos que $[g(\mathbf{p}) - k] = 0$ e as condições se reduzem ao sistema (1.6.4). Caso estejamos lidando com um problema em que $g(\mathbf{p}) < k$, tem-se então, que $[g(\mathbf{p}) - k] < 0$ e sendo $\lambda^* \cdot [g(\mathbf{p}) - k] = 0$, implica que $\lambda^* = 0$. Logo, as condições se reduzem ao sistema (1.6.5).

Teorema 13. *Sejam f e g funções de classe C^1 de duas variáveis e seja $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ uma solução (local) do problema de otimização*

$$\begin{array}{ll} \text{maximizar} & f(x_1, x_2) \\ \text{sujeito a} & D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid g(\mathbf{x}) \leq k\}. \end{array}$$

Suponha que \mathbf{p} satisfaça a seguinte condição de regularidade: se a restrição h está ativa em \mathbf{p} , então $\nabla g(\mathbf{x}) \neq 0$. Então existe um número real λ^ tal que $(\mathbf{p}, \lambda^*) = (p_1, p_2, \lambda^*)$ satisfaz as condições de primeira ordem*

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla f(\mathbf{p}) = \lambda^* \nabla g(\mathbf{p}) \\ \lambda^* \cdot [g(\mathbf{p}) - k] = 0 \\ \lambda^* \geq 0 \\ g(\mathbf{p}) \leq k \end{array} \right. .$$

Ou, em termos do lagrangiano

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) - \lambda \cdot [g(\mathbf{x}) - k],$$

da seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial L}{\partial x_1}(x_1, x_2, \lambda^*) = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial x_2}(x_1, x_2, \lambda^*) = 0 \\ \lambda^* \cdot [g(\mathbf{p}) - k] = 0 \\ \lambda^* \geq 0 \\ g(\mathbf{p}) \leq k \end{array} \right. .$$

Retornando ao Exemplo 4, usaremos o Teorema 13 para resolver novamente o problema (1.6.1), a fim de mostrar a metodologia da forma unificada das condições do problema proposta por Karush-Kuhn-Tucker em termos do lagrangiano.

De acordo com os dados do problema, temos então, que o lagrangiano é dado por

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = (x_1 - x_2 + 3) - \lambda \cdot [(x_1^2 + x_2^2) - 1],$$

donde segue o sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 - \lambda^* 2p_1 = 0 \\ -1 - \lambda^* 2p_2 = 0 \\ \lambda^* \cdot [(p_1^2 + p_2^2) - 1] = 0 \\ \lambda^* \geq 0 \\ p_1^2 + p_2^2 \leq 1 \end{array} \right. .$$

correspondente às condições de primeira ordem.

As funções f e g são de classe C^1 e $\nabla g(\mathbf{x}) = (2x_1, 2x_2) \neq \mathbf{0}$ para todo (x_1, x_2) para o qual a restrição g está ativa.

Para resolver o sistema, devemos considerar a duas possibilidades impostas pelo sistema para λ^* , a saber

$$\lambda^* = 0 \quad \text{ou} \quad \lambda^* > 0.$$

Se $\lambda^* = 0$, obtemos das duas primeiras equações do sistema $1 = 0$ e $-1 = 0$, que é absurdo.

Se $\lambda^* > 0$, tem-se, da terceira equação, que $p_1^2 + p_2^2 = 1$ e, das duas primeiras, que

$\lambda^* = \frac{1}{2p_1}$ e $\lambda^* = \frac{-1}{2p_2}$. Igualando, obtemos

$$p_2 = -p_1,$$

donde segue que $2p_1^2 = 1$ e, portanto,

$$p_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

e

$$p_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Note que $p_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ não convém pois implica em $\lambda^* = -\frac{\sqrt{2}}{2} < 0$. Finalmente, o único ponto que satisfaz às condições de primeira ordem do problema, é o ponto

$$\mathbf{p} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right),$$

logo, é solução local (ver Figura 1.19).

O Teorema 13, de forma análoga ao Teorema dos Multiplicadores de Lagrange para problemas de otimização com várias restrições de igualdade, generaliza-se para o caso de várias restrições de desigualdade. O enunciado desse Teorema delinea a forma mais geral dessa metodologia para tratar problemas de otimização com várias variáveis e várias restrições de desigualdade.

Teorema 14. *Sejam f, g_1, \dots, g_m funções de classe C^1 de n variáveis definidas em um aberto de \mathbb{R}^n e seja $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ um máximo local de f no conjunto admissível*

$$D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_1(\mathbf{x}) \leq k_1, \dots, g_j(\mathbf{x}) \leq k_j, \dots, g_m(\mathbf{x}) \leq k_m\}.$$

tal que g_1, \dots, g_j correspondem às j restrições ativas em \mathbf{p} .

Suponha que \mathbf{p} satisfaça a seguinte condição de regularidade: o posto da matriz ja-

cobiana

$$Jac(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} \nabla g_1(\mathbf{p})^T \\ \vdots \\ \nabla g_j(\mathbf{p})^T \end{bmatrix}_{j \times n} = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}) & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n}(\mathbf{p}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_j}{\partial x_1}(\mathbf{p}) & \cdots & \frac{\partial g_j}{\partial x_n}(\mathbf{p}) \end{bmatrix}_{j \times n}$$

é igual a j (o número de restrições ativas em \mathbf{p}), ou seja, o posto da matriz formada pelos gradientes das restrições que estão ativas na solução do problema deve ser completo. Então existem multiplicadores $\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*$ tais que o ponto $(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) = (p_1, \dots, p_n, \lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*)$ satisfaz o sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla f(\mathbf{p}) = \lambda_1^* \nabla g_1(\mathbf{p}) + \cdots + \lambda_m^* \nabla g_m(\mathbf{p}) \\ \lambda_1^* \cdot [g_1(\mathbf{p}) - k_1] = 0 \\ \vdots \\ \lambda_m^* \cdot [g_m(\mathbf{p}) - k_m] = 0 \\ \lambda_1^* \geq 0 \\ \vdots \\ \lambda_m^* \geq 0 \\ g_1(\mathbf{p}) \leq k_1 \\ \vdots \\ g_m(\mathbf{p}) \leq k_m \end{array} \right.$$

Ou ainda, equivalentemente, em termos do lagrangiano

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) - \lambda_1 \cdot [g_1(\mathbf{x}) - k_1] - \cdots - \lambda_m \cdot [g_m(\mathbf{x}) - k_m],$$

da seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{L}{\partial x_1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) = 0, \dots, \frac{L}{\partial x_n}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) = 0 \\ \lambda_1^* \cdot [g_1(\mathbf{p}) - k_1] = 0 \\ \vdots \\ \lambda_m^* \cdot [g_m(\mathbf{p}) - k_m] = 0 \\ \lambda_1^* \geq 0 \\ \vdots \\ \lambda_m^* \geq 0 \\ g_1(\mathbf{p}) \leq k_1 \\ \vdots \\ g_m(\mathbf{p}) \leq k_m \end{array} \right. .$$

Estes sistemas são denominados de condições de primeira ordem do problema.

Observe que a condição de regularidade desse Teorema envolve apenas as restrições que estão ativas, pois as não ativas não desempenham nenhum papel nas condições de primeira ordem. Assim, tratamos as restrições ativas do mesmo modo que tratamos as restrições de igualdade, ou seja, o posto da matriz jacobiana formada pelos gradientes das restrições ativas deve ser máximo.

Um melhor detalhamento dessa teoria, o leitor poderá consultar [6, p.497]. Detalharemos apenas um exemplo para o caso de problemas de otimização com restrições mistas, que discutiremos na próxima Seção, pois contempla toda a teoria discutida até agora.

1.7 Otimização com restrições mistas

Apresentamos e discutimos até agora os principais resultados para lidar com problemas de otimização com várias variáveis restritos a várias restrições de igualdade e desigualdade, separadamente. No entanto, na prática, é mais comum termos restrições mistas (com igualdades e desigualdades) do que separadamente (somente igualdades ou somente desigualdades). Por exemplo, um problema de otimização envolvendo igualdades, mas onde uma das variáveis é o tempo t , deve-se obrigatoriamente conter a desigualdade $t \geq 0$.

Veremos também que o problema de otimização que formulamos para este trabalho, constitui um problema de otimização com restrições mistas. Por isso, consideramos o Teorema que será aqui apresentado, um dos mais importantes no contexto desse trabalho. Para frisar bem a teoria sobre esse tipo de problema, consideremos inicialmente um problema mais simples para visualizarmos a força da metodologia que apresentaremos.

Exemplo 5.

$$\begin{aligned} & \text{maximizar} && f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 + x_3 \\ & \text{sujeito a} && D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid h(\mathbf{x}) = 1 \text{ e } g(\mathbf{x}) \leq 1\} \end{aligned} \tag{1.7.1}$$

com $g(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2$ e $h(\mathbf{x}) = x_1 - x_2 + x_3$. Ou seja, encontrar um ponto \mathbf{p} (ou vários), do conjunto admissível D , que maximize a função f (ver Figura 1.20).

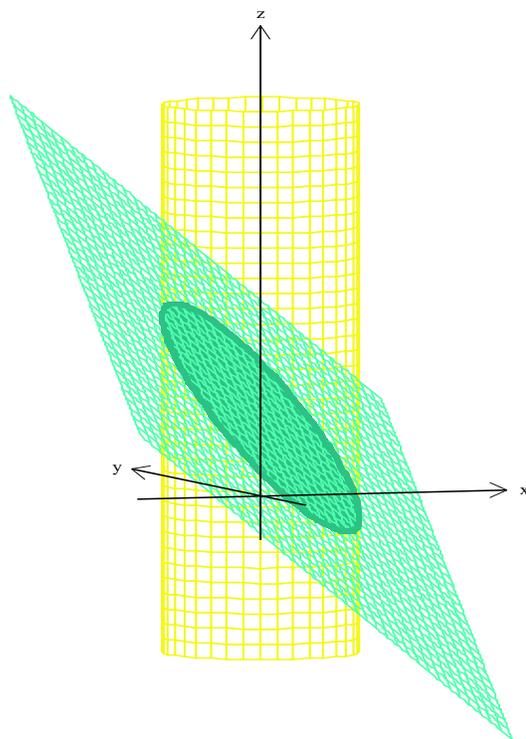


Figura 1.20: A intersecção do sólido $g(\mathbf{x}) \leq 1$ com o plano $h(\mathbf{x}) = 1$, define a região elíptica correspondente ao conjunto D que restringe f .

A estratégia para resolver esse problema com restrições mistas é combinar os resultados do Teorema para problemas de otimização com várias restrições de igualdade (Teorema dos Multiplicadores de Lagrange) com o Teorema para várias restrições de de-

sigualdade, ou seja, o Teorema 14. Essa combinação é atribuída a Karush-Kuhn-Tucker e corresponde ao resultado mais geral dos problemas de otimização restritos.

Teorema 15 (De Karush-Kuhn-Tucker). *Sejam $f, g_1, \dots, g_k, h_1, \dots, h_m$ funções de classe C^1 de n variáveis definidas em um aberto de \mathbb{R}^n e seja $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ um máximo local de f no conjunto admissível*

$$D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid h_1(\mathbf{x}) = c_1, \dots, h_m(\mathbf{x}) = c_m, g_1(\mathbf{x}) \leq b_1, \dots, g_k(\mathbf{x}) \leq b_k\}$$

formado com m restrições de igualdade e k restrições de desigualdades. Caso alguma restrição de desigualdade esteja ativa em \mathbf{p} , renomeamos de forma que elas sejam as l primeiras: g_1, \dots, g_l . Suponha que \mathbf{p} satisfaça a seguinte condição de regularidade: o posto da matriz jacobiana

$$Jac(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} \nabla h_1(\mathbf{p})^T \\ \vdots \\ \nabla h_m(\mathbf{p})^T \\ \nabla g_1(\mathbf{p})^T \\ \vdots \\ \nabla g_l(\mathbf{p})^T \end{bmatrix}_{(m+l) \times n} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}) & \cdots & \frac{\partial h_1}{\partial x_n}(\mathbf{p}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial h_m}{\partial x_1}(\mathbf{p}) & \cdots & \frac{\partial h_m}{\partial x_n}(\mathbf{p}) \\ \frac{\partial g_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}) & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n}(\mathbf{p}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_l}{\partial x_1}(\mathbf{p}) & \cdots & \frac{\partial g_l}{\partial x_n}(\mathbf{p}) \end{bmatrix}_{(m+l) \times n}$$

é igual a $(m+l)$ (o número de restrições ativas em \mathbf{p}), ou seja, o posto da matriz formada pelos gradientes das restrições de igualdade e das restrições de desigualdade que estão ativas em \mathbf{p} deve ser máximo. Então existem multiplicadores $\lambda_1^, \dots, \lambda_m^*, \mu_1^*, \dots, \mu_k^*$ tais que o ponto $(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) = (p_1, \dots, p_n, \lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*, \mu_1^*, \dots, \mu_k^*)$ satisfaz o sistema*

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla f(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \cdot \nabla h_i(\mathbf{p}) + \sum_{j=1}^k \mu_j^* \cdot \nabla g_j(\mathbf{p}) \\ h_1(\mathbf{p}) = c_1 \\ \vdots \\ h_m(\mathbf{p}) = c_m \\ \mu_1^* \cdot [g_1(\mathbf{p}) - b_1] = 0 \\ \vdots \\ \mu_k^* \cdot [g_k(\mathbf{p}) - b_k] = 0 \\ \mu_1^* \geq 0 \\ \vdots \\ \mu_k^* \geq 0 \\ g_1(\mathbf{p}) \leq b_1 \\ \vdots \\ g_k(\mathbf{p}) \leq b_k \end{array} \right.$$

Ou ainda, equivalentemente, em termos do lagrangiano

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^m \lambda_i \cdot [h_i(\mathbf{x}) - c_i] - \sum_{j=1}^k \mu_j \cdot [g_j(\mathbf{x}) - b_j],$$

da seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{L}{\partial x_1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) = 0, \dots, \frac{L}{\partial x_n}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) = 0 \\ h_1(\mathbf{p}) = c_1 \\ \vdots \\ h_m(\mathbf{p}) = c_m \\ \mu_1^* \cdot [g_1(\mathbf{p}) - b_1] = 0 \\ \vdots \\ \mu_k^* \cdot [g_k(\mathbf{p}) - b_k] = 0 \\ \mu_1^* \geq 0 \\ \vdots \\ \mu_k^* \geq 0 \\ g_1(\mathbf{p}) \leq b_1 \\ \vdots \\ g_k(\mathbf{p}) \leq b_k \end{array} \right. .$$

Estes sistemas são denominados de condições de primeira ordem para o ponto de máximo (local) \mathbf{p} .

Voltando ao problema (1.7.1), vamos verificar a regularidade dos pontos do conjunto admissível D . De acordo com o Teorema 15, a condição de regularidade exige que o posto da matriz, formada pelos vetores gradientes das restrições ativas em D , seja máximo. A restrição $h(\mathbf{x}) = 1$ é ativa em qualquer ponto do conjunto admissível, mas a restrição $g(\mathbf{x}) \leq 1$, é ativa somente para alguns pontos, logo, dependendo do ponto, podemos ter uma ou duas restrições ativas. Assim, devemos mostrar que o posto da matriz é sempre igual ao número de restrições ativas em qualquer caso.

1. Se g não é ativa

Neste caso, a matriz é formada somente pelo gradiente de h ,

$$\left[\nabla h(\mathbf{x})^T \right] = \left[\begin{array}{ccc} 1 & -1 & 1 \end{array} \right].$$

Como $h(\mathbf{x}) = x_1 - x_2 + x_3 = 1$, a matriz tem posto 1.

2. Se g é ativa

como $g(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 = 1$ e $h(\mathbf{x}) = x_1 - x_2 + x_3 = 1$, tem-se que os pontos onde as restrições estão ativas simultaneamente pertencem à curva parametrizada

$$C = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid x = \cos(t), y = \sin(t), z = 1 - \cos(t) + \sin(t); t \in [0, 2\pi]\},$$

que equivale ao conjunto dos pontos de intersecção das duas superfícies, conforme Figura 1.21.

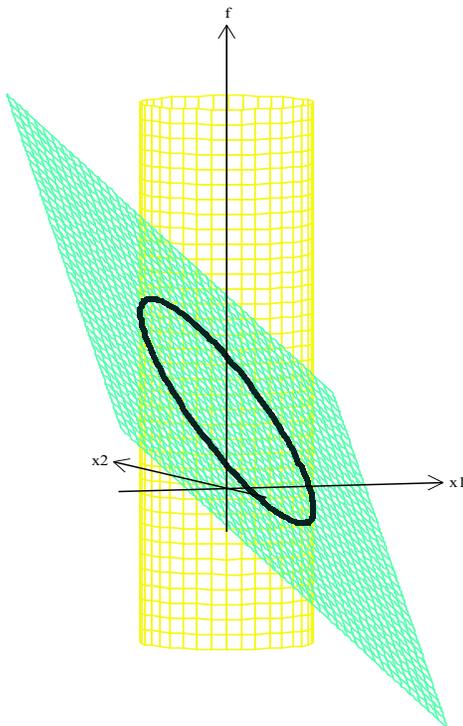


Figura 1.21: A Figura mostra a curva C de intersecção das superfícies $h(\mathbf{x}) = 1$ e $g(\mathbf{x}) = 1$.

Segue, que a matriz formada pelos gradientes de g e h

$$\begin{bmatrix} \nabla g(\mathbf{x})^T \\ \nabla h(\mathbf{x})^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 & 2x_2 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix},$$

tem posto 2, pois x_1 e x_2 não se anulam simultaneamente.

Logo, todo $\mathbf{x} \in D$ satisfaz a condição de regularidade e, além disso, f , h e g são de classe C^1 . Portanto, pelo Teorema 15, existem multiplicadores $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ tais que os

sistema das condições de primeira ordem do lagrangiano

$$L(x_1, x_2, x_3, \lambda, \mu) = x_1^2 + x_2^2 + x_3 - \lambda \cdot [x_1 - x_2 + x_3 - 1] - \mu \cdot [x_1^2 + x_2^2 - 1],$$

tenha solução para pontos em D . Segue que,

$$\left\{ \begin{array}{l} 2x_1 - \lambda - 2\mu x_1 = 0 \\ 2x_2 + \lambda - 2\mu x_2 = 0 \\ 1 - \lambda = 0 \\ x_1 - x_2 + x_3 = 1 \\ \mu \cdot [x_1^2 + x_2^2 - 1] = 0 \\ \mu \geq 0 \\ x_1^2 + x_2^2 \leq 1 \end{array} \right.$$

Resolvendo o sistema: Se $\mu = 0$, $\lambda = 1$, temos a seguinte solução

$$\mathbf{P}_1^* = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0, 1, 0 \right).$$

Enquanto que para $\mu > 0$, obtemos os seguintes pontos

$$\mathbf{P}_2^* = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2}, 1, 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \right),$$

$$\mathbf{P}_3^* = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 1 + \sqrt{2}, 1, 1 + \frac{\sqrt{2}}{2} \right).$$

Observe na Figura 1.22 que os três pontos encontrados pertencem à região elíptica, ou seja, são pontos do conjunto admissível D . Além disso, os pontos satisfazem as condições de primeira ordem do Teorema 15. Logo, entre eles, deve existir um (ou mais) ponto no qual a função f seja máxima. Resta-nos então, classificar esses pontos.

Simplesmente avaliando a função f nesses pontos, tem-se que:

$$f\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0\right) = 0.5,$$

$$f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2}\right) = 0.5857$$

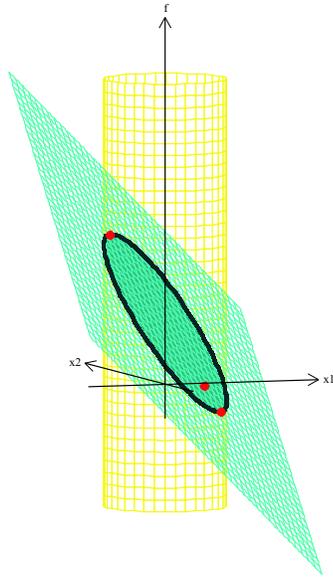


Figura 1.22: A Figura mostra os três pontos encontrados sobre a região elíptica.

e

$$f\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 1 + \sqrt{2}\right) = 3.4142.$$

Donde segue que

$$\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 1 + \sqrt{2}\right),$$

é ponto de máximo local de f no conjunto admissível D , e

$$\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0\right),$$

é ponto de mínimo local de f em D . Mas o que dizer do ponto

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2}\right)?$$

Fica clara, a necessidade de um critério para a classificação dos pontos que satisfazem as condições de primeira ordem do problema, pois, como podemos ver, isso não garante que todos sejam extremos locais de f em D .

Na próxima seção apresentaremos, resumidamente, dois resultados importantes para a classificação dos pontos que satisfazem as condições de primeira ordem para problemas de otimização com restrições de igualdade e com restrições mistas. E no final dessa

seção, usaremos esses resultados para a classificação do ponto $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2}\right)$ do problema (1.7.1).

1.8 Condições de segunda ordem

Na Seção 1.3, vimos que o Teorema 3, garante, sob certas condições, a classificação de pontos críticos de problemas de otimização sem restrições. Esse resultado pode ser estendido para problemas com restrições de igualdade e restrições mistas.

Faremos aqui, simplesmente a apresentação desse resultado sem demonstração de sua validade. O leitor porém, poderá consultar as referências [6] e [19].

1.8.1 Condições de segunda ordem para problemas de otimização com restrições de igualdade

Sejam f, h_1, \dots, h_m funções de classe C^2 de n variáveis, definidas em um aberto de \mathbb{R}^n e seja $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ um ponto do conjunto admissível

$$D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{h}(\mathbf{x}) = (h_1(\mathbf{x}), \dots, h_m(\mathbf{x})) = (c_1, \dots, c_m)\}$$

para o qual existem reais $\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*$ que satisfazem as condições de primeira ordem

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{p}) &= \lambda_1^* \cdot \nabla h_1(\mathbf{p}) + \dots + \lambda_m^* \cdot \nabla h_m(\mathbf{p}) \\ \nabla h_1(\mathbf{p}) &= c_1 \\ &\vdots \\ \nabla h_m(\mathbf{p}) &= c_m \end{cases} .$$

Defina o lagrangiano

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^m \lambda_i \cdot [h_i(\mathbf{x}) - c_i],$$

a matriz hessiana

$$D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 L}{\partial^2 x_1^2}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) & \cdots & \frac{\partial^2 L}{\partial x_1 \partial x_n}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 L}{\partial x_n \partial x_1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) & \cdots & \frac{\partial^2 L}{\partial^2 x_n}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) \end{bmatrix}_{n \times n},$$

e $D\mathbf{h}(\mathbf{p})$, a matriz jacobiana de \mathbf{h} em \mathbf{p} . Então,

1. Se para todo $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ com $D\mathbf{h}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{v} = 0$ tem-se que

$$Q(\mathbf{v}) = \mathbf{v}^T D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) \mathbf{v} < 0,$$

então \mathbf{p} é um ponto de máximo local de f no conjunto admissível D .

2. Se para todo $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ com $D\mathbf{h}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{v} = 0$ tem-se que

$$Q(\mathbf{v}) = \mathbf{v}^T D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) \mathbf{v} > 0,$$

então \mathbf{p} é um ponto de mínimo local de f no conjunto admissível D .

3. Se existem vetores $\mathbf{v}_1 \neq \mathbf{0}$ e $\mathbf{v}_2 \neq \mathbf{0}$ tais que $D\mathbf{h}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{v}_1 = 0$ e $D\mathbf{h}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{v}_2 = 0$,

$$Q(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) \mathbf{v}_1 < 0$$

e

$$Q(\mathbf{v}_2) = \mathbf{v}_2^T D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) \mathbf{v}_2 > 0,$$

então \mathbf{p} não é ponto de máximo local e nem ponto de mínimo local de f no conjunto admissível D .

Observe que esse resultado é extensão do Teorema 3. Ao escrevermos o lagrangiano do problema, é a curvatura dessa função que nos permite classificar o ponto encontrado com base em vetores do espaço tangente das restrições.

Para os problemas com restrições mistas, considerações adicionais devem ser tomadas, como veremos a seguir.

1.8.2 Condições de segunda ordem para problemas de otimização com restrições mistas

Sejam $f, h_1, \dots, h_m, g_1, \dots, g_k$ funções de classe C^2 de n variáveis definidas em um aberto de \mathbb{R}^n e seja $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ um ponto do conjunto admissível

$$D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid h_1(\mathbf{x}) = c_1, \dots, h_m(\mathbf{x}) = c_m, g_1(\mathbf{x}) \leq b_1, \dots, g_k(\mathbf{x}) \leq b_k\}$$

para o qual existem reais $\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*, \mu_1^*, \dots, \mu_k^*$ que satisfazem as condições de primeira ordem

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla f(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \cdot \nabla h_i(\mathbf{p}) + \sum_{j=1}^k \mu_j^* \cdot \nabla g_j(\mathbf{p}) \\ h_1(\mathbf{p}) = c_1 \\ \vdots \\ h_m(\mathbf{p}) = c_m \\ \mu_1^* \cdot [g_1(\mathbf{p}) - b_1] = 0 \\ \vdots \\ \mu_k^* \cdot [g_k(\mathbf{p}) - b_k] = 0 \\ \mu_1^* \geq 0 \\ \vdots \\ \mu_k^* \geq 0 \\ g_1(\mathbf{p}) \leq b_1 \\ \vdots \\ g_k(\mathbf{p}) \leq b_k \end{array} \right.$$

Defina o lagrangiano

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^m \lambda_i \cdot [h_i(\mathbf{x}) - c_i] - \sum_{j=1}^k \mu_j \cdot [g_j(\mathbf{x}) - b_j],$$

e a matriz hessiana

$$D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 L}{\partial x_1^2}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) & \cdots & \frac{\partial^2 L}{\partial x_1 \partial x_n}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 L}{\partial x_n \partial x_1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) & \cdots & \frac{\partial^2 L}{\partial x_n^2}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \end{bmatrix}_{n \times n}.$$

Caso haja restrição de desigualdade ativa em \mathbf{p} , vamos renomeá-las de forma que sejam as l primeiras: g_1, \dots, g_l . Denotamos também $\mathbf{g}_A(\mathbf{x}) = (g_1(\mathbf{x}), \dots, g_l(\mathbf{x}))$ a função vetorial cujas funções coordenadas são as restrições de desigualdade que estão ativas em \mathbf{p} . Portanto,

1. Se para todo $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ com $D\mathbf{h}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{v} = 0$ e $D\mathbf{g}_A(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{v} = 0$, tem-se que

$$Q(\mathbf{v}) = \mathbf{v}^T D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \mathbf{v} < 0,$$

então \mathbf{p} é um ponto de máximo local de f no conjunto admissível D .

2. Se para todo $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ com $D\mathbf{h}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{v} = 0$ e $D\mathbf{g}_A(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{v} = 0$, tem-se que

$$Q(\mathbf{v}) = \mathbf{v}^T D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \mathbf{v} > 0,$$

então \mathbf{p} é um ponto de mínimo local de f no conjunto admissível D .

3. Se existem vetores $\mathbf{v}_1 \neq \mathbf{0}$ e $\mathbf{v}_2 \neq \mathbf{0}$ nos núcleos das jacobianas avaliadas em \mathbf{p} e

$$Q(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \mathbf{v}_1 < 0$$

e

$$Q(\mathbf{v}_2) = \mathbf{v}_2^T D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \mathbf{v}_2 > 0,$$

então \mathbf{p} não é ponto de máximo local e nem ponto de mínimo local de f no conjunto admissível D .

Com esse resultado, temos as ferramentas necessárias para classificar os pontos que satisfazem as condições de primeira ordem do Teorema 15.

Para aplicar as condições “suficientes” de segunda ordem para a classificação de pontos, retornamos ao problema (1.7.1), mais especificamente a classificação do ponto

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2} \right).$$

Apenas para recordar, vimos que os pontos

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2} \right)$$

$$\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0 \right),$$

e

$$\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 1 + \sqrt{2} \right)$$

satisfazem as condições de primeira ordem e, avaliando a função nesses pontos, observamos que os dois últimos são pontos de mínimo e máximo local de f em D , respectivamente. No entanto, o primeiro ponto, não pode ser classificado dessa forma. Assim, utilizaremos o resultado supracitado para classificá-lo.

Primeiramente, devemos construir a matriz $D_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$ no ponto

$$\mathbf{p} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2} \right), \quad \lambda^* = 1 \text{ e } \mu^* = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$D_{\mathbf{x}}^2 L \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2}, 1, 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Analisando a jacobiana das funções g e h calculadas no ponto \mathbf{p} ,

$$Dg \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2} \right) = \left[\frac{2}{\sqrt{2}} \quad -\frac{2}{\sqrt{2}} \quad 0 \right],$$

e

$$Dh \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2} \right) = \left[1 \quad -1 \quad 1 \right],$$

Vemos que $\mathbf{v} = (a, a, 0)^T$ para todo real $a \neq 0$, é a forma geral do núcleo das jacobianas de g e h em \mathbf{p} . De fato,

$$\begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{2}} & -\frac{2}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ a \\ 0 \end{bmatrix} = 0$$

e

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ a \\ 0 \end{bmatrix} = 0$$

para todo $a \neq 0$.

Escrevendo a quádrlica Q no vetor \mathbf{v} do núcleo das jacobianas, temos que

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{v}) &= \mathbf{v}^T D_{\mathbf{x}}^2 L \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2}, 1, 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \mathbf{v} \\ &= \begin{bmatrix} a & a & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ a \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= 2\sqrt{2}a^2 > 0, \quad \forall a \neq 0. \end{aligned}$$

Como $Q(\mathbf{v}) > 0$ para todo vetor não nulo do núcleo das jacobianas de h e g em \mathbf{p} então, o ponto $\mathbf{p} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 - \sqrt{2} \right)$ é ponto de mínimo local de f em D .

As condições de segunda ordem descritas acima, não garantem a *globalidade* do ponto. No entanto, é possível, sobre certas condições, obter a globalidade, a exemplo dos problemas irrestritos discutidos na Seção 1.3. Uma discussão sobre essa questão pode ser encontrada em [6].

Além disso, vale a pena frisar que, embora o Teorema 15 seja aplicável apenas para problemas de *maximização*, onde as restrições de desigualdade devem estar na forma \leq , todo problema de otimização pode ser convertido para satisfazer o Teorema 15. Assim, se o problema for de *minimização*, basta maximizar a oposta da função objetivo. Caso alguma restrição tenha desigualdade da forma \leq , basta multiplicá-la por -1 para inverter a desigualdade. Ou seja, todo problema de otimização pode ser escrito na forma padrão do Teorema 15.

Finalizando, gostaríamos de destacar a importância de todos os resultados expostos neste Capítulo, no estudo de problemas de otimização. Tais resultados foram organizados de tal forma a convergirem ao resultado mais geral desse estudo, o Teorema de Karush-Kuhn-Tucker. É dele, a metodologia para resolução do problema de destilação que propomos neste trabalho.

Capítulo 2

Preliminares do problema

No capítulo anterior, explanou-se sobre a teoria que sustenta a metodologia para atacar os problemas de otimização. São resultados importantes apoiados sobre hipóteses que devem ser satisfeitas para que estes sejam validados. Além disso, alguns exemplos direcionados foram utilizados para auxiliar a compreensão dessa teoria. No entanto, na prática, os problemas de otimização nunca estão prontos e bem definidos, e muitas vezes, nem mesmo têm solução analítica. É importante que o estudante de matemática que queira se aventurar pelos caminhos da matemática aplicada, em particular, da otimização, saiba que existe uma grande diferença entre problemas reais e problemas encontrados na literatura usual, como os que abordamos no capítulo anterior, pois o segundo tipo vive num “mundo perfeito”, onde as leis que os governam lidam com o caso ideal de sua natureza, o que não acontece com os do primeiro tipo. Nestes, muitas simplificações são feitas e em alguns casos, até variáveis são desprezadas para que o problema possa ser resolvido com grau de aproximação satisfatório.

Portanto, será apresentado nesta seção, um pouco da história em torno do problema de otimização que motivou este trabalho.

2.1 A motivação

Na maioria das vezes, pode-se dizer que são os problemas que procuram os matemáticos e não o contrário. Mas neste caso, digamos que foi “dada uma força”. Atualmente, nos deparamos freqüentemente com notícias na mídia sobre efeito estufa e a busca por fontes mais limpas de combustíveis. Os combustíveis fósseis, utilizados no mundo inteiro,

além de serem limitados, são apontados por estudiosos da área como um dos fatores que mais contribuem com o efeito estufa. Portanto, a busca por fontes mais limpas não é só importante como também fundamental. Nesse sentido, o Brasil vem obtendo sucesso, primeiramente com o etanol (álcool derivado da cana-de-açúcar) e atualmente com o biodiesel. Este último vem ainda tentando se firmar no cenário sócio-econômico. Embora o Brasil seja o detentor de pesquisas avançadas sobre a produção de biodiesel, muito se têm a pesquisar e desenvolver em torno deste promissor combustível. Nesse contexto, a matemática e as áreas correlacionadas têm as ferramentas necessárias para apontar alternativas na busca do aprimoramento da produção.

Foi com este pensamento que procuramos a Usina Barralcool S/A, instalada no município de Barra do Bugres-MT para oferecer uma ferramenta matemática que, à primeira vista, é entendida por qualquer cidadão, em particular, por qualquer usineiro: a otimização. Embora sem conhecerem a metodologia matemática à qual nos referimos, a palavra otimização lhes caiu muito bem, pois para eles, é significado de maior produção e menor custo. Foi assim, que nosso apetite em aplicar o conhecimento sobre otimização encontrou o problema da coluna de destilação do metanol.

2.2 A usina Barralcool

Localizada a 170 km da capital do estado de Mato Grosso, no município de Barra do Bugres, a usina Barralcool S/A tem capacidade para produzir 1.2 milhões de litros de álcool (anidro, hidratado e neutro) e 600.000 kg de açúcar por dia, além de possuir a capacidade de produção de 57 milhões de litros de biodiesel por ano.

Foi constituída em setembro de 1980 e até 1994, sua produção se restringia ao álcool. Após esse ano, começou a produzir também o açúcar. Mas foi somente em novembro de 2006 que a usina inaugurou sua unidade para produção de biodiesel, que opera tanto com a rota metílica quanto com a etílica, tornando-se a primeira no mundo a ter uma planta de biodiesel integrada a uma usina de açúcar e álcool.

A tecnologia desta unidade instalada na usina Barralcool foi totalmente desenvolvida, fornecida e instalada pela indústria de base Dedine S/A situada em Piracicaba-SP. A parceria destas empresas vem desde 1982, mas pode-se tranquilamente dizer que este projeto de “produção de biodiesel integrado à usina de açúcar e álcool”, é o mais notório



Figura 2.1: Usina Barralcool localizada no município de Barra do Bugres - MT (Foto extraída de [4]).



Figura 2.2: Foto do Presidente da República e do Governador do estado de Mato Grosso na inauguração da unidade de produção de biodiesel da usina Barralcool (Foto extraída de [1]).

do país, tendo sido premiado no evento mais importante de tecnologia sucroalcooleira do mundo, o congresso da ISSCT (*International Society of Sugar Cane Technologists*), que ocorreu de 29 de julho a 2 de agosto de 2007 na África do Sul (ver [26]).

Fica clara a importância da unidade de produção de biodiesel para essas duas empresas, em especial para a Dedine, detentora do conhecimento científico sobre a planta. Tal fato, como veremos mais adiante, será o grande encaixe para o desenvolvimento de nossa proposta junto à torre de destilação.

2.3 O biodiesel

Como vimos na seção anterior, a usina Barralcool iniciou suas atividades com a produção de álcool e açúcar e vem atualmente investindo também na produção de biodiesel. O

biodiesel foi definido pela *National Biodiesel Board* como o derivado alquil éster de ácidos graxos (gorduras) de cadeia longa, provenientes de fontes renováveis como óleos vegetais ou gordura animal. No caso da usina em questão, são usados o óleo extraído da soja e a gordura animal.

Embora o biodiesel pareça não ter associação com o processo de destilação do metanol, veremos que ambos estão relacionados.

De acordo com Kucek, 2004 (ver [16]), o processo químico empregado mundialmente para a produção de biodiesel é o da transesterificação ou álcoolise, na qual um óleo triglicéridico reage com um álcool (comumente metanol ou etanol) na presença de um catalizador (usualmente alcalino) para formar, majoritariamente, ésteres monoalquílicos (biodiesel) e glicerol. No entanto, ainda segundo (Kucek, 2004), a transesterificação com metanol é tecnicamente mais viável do que com etanol comercial porque a água existente no etanol (de 4% a 6%) diminui o rendimento da reação.

Uma outra observação importante é que o processo de transesterificação de óleos vegetais em meio alcalino é reversível, portanto, o rendimento dependerá do deslocamento do equilíbrio químico em favor dos ésteres através do emprego excedente do agente transesterificante (álcool) na reação. De acordo com a literatura, para produção em nível industrial, a reação exige uma razão molar álcool/óleo de 6/1 (seis por um) e de 4% de catalisador. Com essas proporções, a reação de transesterificação deve ser completa, resultando em biocombustível de alta pureza, contendo somente traços de glicerina, de catalisador residual ou de álcool excedente da reação.

Esse excedente de álcool (metanol) na reação, é removido por destilação a baixa pressão e destinado a uma coluna de destilação para retificação, ou seja, para obtenção de metanol na especificação desejada, neste caso 99,98%, para posteriormente servir de reagente transesterificante novamente.

2.4 O metanol

O álcool (metanol ou etanol) é um reagente indispensável na produção do biodiesel e assim, como a maioria das usinas de biodiesel, a Barralcool também faz uso do metanol como reagente transesterificante devido ao fator rendimento, embora tenha tecnologia para trabalhar com a rota etílica. No entanto, esse produto é derivado de petróleo e

poucas empresas no Brasil o produzem, sem conseguir atender à crescente demanda e por isso, a maior parte desse produto é importado. Esse fato e as constantes altas do barril de petróleo são repassados ao preço da tonelada de metanol cotada atualmente a US\$ 700 a tonelada e, conseqüentemente, elevam o custo da produção de biodiesel.

Contudo, o metanol entra no rol dos elementos de despesa que juntos correspondem a apenas 20%, aproximadamente, do custo de produção. Uma frase do ex-diretor do departamento de combustíveis renováveis do Ministério de Minas e Energia, Ricardo Dornelles, à revista CT, uma publicação da Assessoria de Comunicação do Ministério da Ciência e Tecnologia (ver [8]), em novembro de 2006, retrata o impacto dos custos de produção: “Nesse segmento de combustíveis, é preciso olhar para terceira, quarta, quinta casa decimal”. Ou seja, qualquer centavo economizado no processo produtivo significa milhões de reais no caixa da empresa.

Assim, fica claro a importância do processo de retificação do metanol dentro do processo produtivo do biodiesel, bem como, pelas palavras de Dornelles, da otimização desse processo para a redução de custos.

Dessa forma, configurou-se o problema de otimização da coluna de destilação, a saber, o problema de minimizar o custo do processo de destilação da mistura metanol e água. Mas, apesar de ser relativamente fácil escrever uma função custo de produção, é extremamente importante conhecer o assunto que se está tratando, pois apesar da metodologia matemática que será utilizada para abordar o problema ser sustentada por uma seqüência lógica de teoremas cuidadosamente demonstrados ao longo da história dessa ciência, seus resultados podem não ter significado para o problema em questão e, neste caso, o conhecimento sobre o tema é que fará a diferença na análise dos resultados. Além disso, é necessário saber como se relacionam as variáveis desse problema para que sua representação matemática o retrate com grau de aproximação satisfatório.

2.5 O processo de destilação fracionada

Para os alquimistas, a destilação era a técnica de “separar o puro do impuro”. Atualmente, é um dos processos químicos mais comum nas indústrias químicas. É utilizado para separar um líquido de eventuais misturas por diferença de ponto de ebulição de seus componentes. A mistura líquida é vaporizada e seus componentes são separados e

recolhidos num reservatório após serem condensados. Os compostos orgânicos, quimicamente puros, apresentam pontos de ebulição distintos e definidos, o que garante a aplicação desse processo, não somente para separá-los de misturas, como também para purificá-los. No entanto, se a diferença entre os pontos de ebulição das componentes da mistura for inferior a 80°C, a separação não é conseguida por destilação simples, sendo então necessário o uso de uma coluna de fracionamento, onde são criadas várias regiões de equilíbrio líquido-vapor para que o vapor fique cada vez mais rico na componente mais volátil, enquanto o líquido fica rico na componente menos volátil. Esse processo é denominado *destilação fracionada*.

No processo de destilação há um contato entre a fase líquida e a de vapor e à medida que a vaporização ocorre, o número de moléculas no estado gasoso aumenta, resultando num aumento de pressão do gás e no aumento da velocidade de condensação. Conseqüentemente, aumenta o número de choques das moléculas gasosas, não só com a parede do recipiente, mas também com a superfície líquida. Assim, existindo líquido em quantidade suficiente, será atingida uma situação de equilíbrio dinâmico na qual a velocidade de condensação se iguala à de vaporização. Ver [28].

Devido à transferência seletiva das componentes da mistura entre as duas fases, a destilação também é denominada uma operação de transferência de massa. Estas operações, por sua vez, são conhecidas como operações de fracionamento, pois dão origem a frações de composição diferentes da original. Porém, essas frações não são puras, pois os componentes se transferem entre as duas fases nos dois sentidos.

Uma forma de enriquecer o vapor produzido é a utilização de um equipamento denominado coluna de fracionamento ou de *destilação*. O funcionamento deste equipamento, baseia-se na constituição de pontos na coluna onde se estabelece um equilíbrio-termodinâmico, chamados de pratos teóricos, de forma que o líquido e o vapor, a uma dada temperatura, tenham composições que correspondam a um estado de equilíbrio.

Para dar uma idéia de como uma determinada substância (a mais volátil), numa mistura bifásica, vai enriquecendo a cada ponto de estado de equilíbrio enquanto a outra vai empobrecendo em relação à substância mais volátil, montamos o esquema a seguir.

Considere que essa mistura é composta pelas substâncias **a** (a mais volátil) e **b** (a menos volátil), cuja composição molar¹ é $x_a = 0.1$ e $x_b = 0.9$. Quando a mistura atinge

¹Segundo Macedo e Carvalho, 2001 (ver [22]), composição molar é definida pela razão entre o número

a temperatura de ebulição no ponto L_1 a substância mais volátil a começa a evaporar até atingir o ponto de névoa, ou seja, o ponto de equilíbrio líquido-vapor no ponto V_1 , conforme Figura 2.3. Em outras palavras, partindo de um líquido de composição $L_1 = (x_a, x_b) = (0.1, 0.9)$ e vaporizando-o, produz um vapor de composição V_1 . Isso corresponde a um prato teórico numa coluna de destilação.

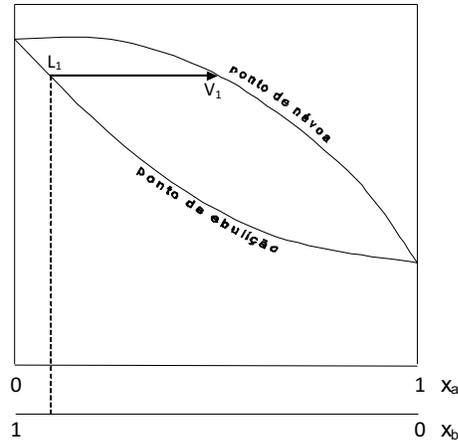


Figura 2.3: Curvas de equilíbrio-termodinâmico da fase líquida e de vapor para uma mistura de duas fases.

Na Figura 2.3, a curva inferior fornece a temperatura crítica de ebulição da mistura cuja composição molar, num determinado instante t , é representada pelo par ordenado (x_{at}, x_{bt}) . Por sua vez, a curva superior fornece a temperatura crítica de condensação do vapor dessa mistura.

Em seguida, o vapor V_1 é condensado no líquido L_2 com proporção molar do composto mais volátil igual a $x_a = 0.5$, enquanto a composição molar do composto menos volátil é $x_b = 0.5$ (ver Figura 2.4).

O líquido L_2 , após atingir a sua temperatura de ebulição, evapora até atingir novamente o ponto de equilíbrio líquido-vapor no ponto V_2 , formando assim, mais um prato teórico. O vapor V_2 , com composição molar $x_a = 0.9$ e $x_b = 0.1$, agora é condensado para se transformar no líquido L_3 com mesma composição molar de V_2 , conforme ilustra a Figura 2.5.

Pode-se observar que a cada prato teórico na coluna de destilação, a mistura está cada vez mais enriquecida na substância mais volátil.

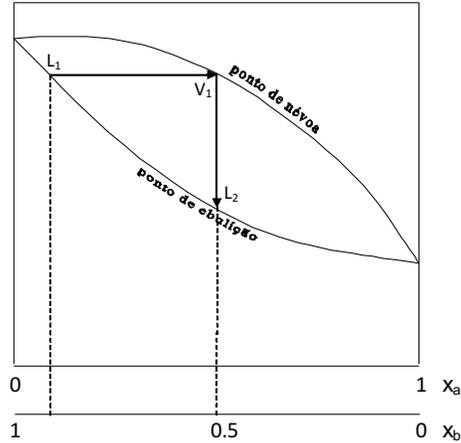


Figura 2.4: O vapor V_1 é condensado e transforma-se no líquido L_2 com composição $x_a = 0.5$ e $x_b = 0.5$.

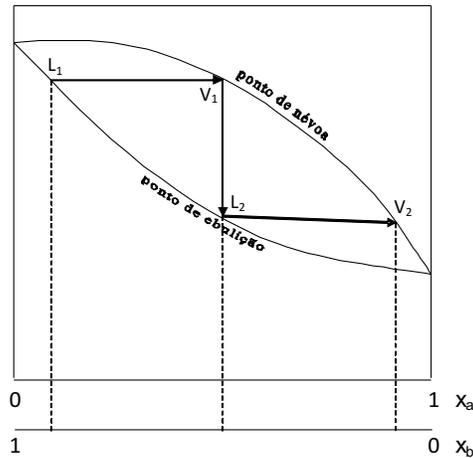


Figura 2.5: O vapor V_2 é condensado e transforma-se no líquido L_3 com composição $x_a = 0.9$ e $x_b = 0.1$.

vez mais rica na componente mais volátil e cada vez mais pobre na menos volátil. Note ainda que, neste caso hipotético, com três pratos teóricos (Figura 2.6), conseguimos obter um líquido L_3 composto por 99% da substância mais volátil e somente 1% da substância menos volátil.

Assim, com curvas desse tipo, é possível determinar o número de pratos teóricos para se obter um destilado com especificação (grau de pureza) desejada. Contudo, um prato teórico é definido sobre hipóteses ideais, ou seja, a mistura deve ser composta por substâncias puras e o processo deve ocorrer sob pressão constante, o que é impossível na

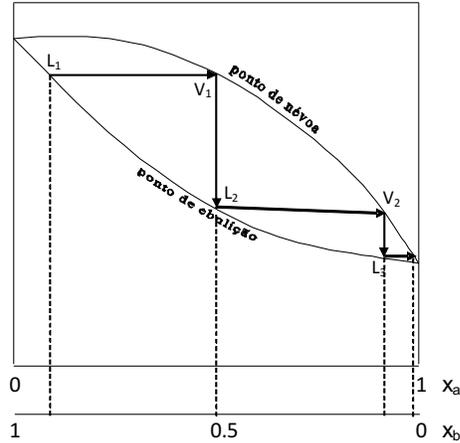


Figura 2.6: O vapor V_3 é condensando num líquido cuja composição é rica na substância mais volátil.

prática, pois numa coluna tem-se pressões diferentes em cada ponto e nem as substâncias que compõem a mistura, em geral, são puras.

2.6 A coluna ou torre de destilação

As colunas ou torres de destilação são os equipamentos usados para a separação de misturas por destilação fracionada, mas são os dispositivos colocados no interior dessas torres, denominados “*internos de torres*” que são responsáveis pelo funcionamento adequado das mesmas. Eles são usados para garantir ao máximo o contato líquido-vapor, essencial para que ocorra o equilíbrio termodinâmico entre as fases - princípio fundamental do funcionamento das colunas de destilação.

Segundo CALDAS et al., 2007 (ver [7]), existe uma variedade de dispositivos de contato líquido-vapor utilizados como internos de torres, mas os principais são os pratos e os recheios. Mesmo entre eles, existe uma variedade de dispositivos, por exemplo, pratos com borbulhadores, pratos perfurados, valvulados, de alta capacidade, com *downcomer*, sem *downcomer* e outros. Quanto aos recheios tem-se os recheios randômicos, estruturados, estruturados tradicionais e de alta capacidade, entre outros. Essa variedade se deve principalmente à busca de um melhor desempenho do processo de destilação.

Outro fator que influi no projeto de uma coluna de destilação está relacionado com a natureza da mistura a ser separada, a dizer, binária ou multi-componentes. Numa

mistura binária, a corrente que alimenta a coluna contém apenas duas componentes, enquanto que na mistura multi-componentes a corrente de alimentação possui mais de duas componentes.

As colunas ainda podem ser de lotes, quando uma determinada carga (lote) da mistura é introduzido na coluna e processada até atingir a especificação desejada para somente depois outra carga ser introduzida na coluna; ou contínua, caso em que não há interrupção na alimentação e portanto, são as mais utilizadas.

No entanto, a escolha do tipo de coluna de destilação depende do tipo específico de separação que se deseja fazer, seja por lote ou contínua, para mistura binária ou multi-componente, de pratos ou recheio, o princípio de funcionamento é o mesmo, a constituição de pontos na coluna onde se estabelece um equilíbrio-termodinâmico, ou seja, a constituição de pratos teóricos.

2.6.1 Principais componentes da coluna de destilação

Assim como há uma variedade de internos de torres, também há uma diversidade de modelos de colunas de destilação, principalmente devido ao tipo de separação que se almeja. Iremos apresentar os principais componentes de uma coluna de destilação clássica com processo contínuo para uma mistura binária na alimentação e com retirada do destilado pelo topo e de produto de fundo pela base, na qual desenvolvemos nossa proposta de otimização e que será descrita mais adiante.

Os principais componentes são: O esqueleto ou armação (*shell*), os internos de torres, o refeedor (*reboiler*), o condensador (*condenser*) e o tambor de refluxo (*reflux drum*), conforme podemos ver na Figura 2.7.

O esqueleto ou armação da coluna de destilação é responsável por sustentar os internos de torres e dentro dele ocorre a dinâmica do processo. A parte localizada acima da alimentação é denominada seção de retificação (*rectification section*) e a parte inferior, de esgotamento (*stripping section*).

Os internos de torres, já mencionados anteriormente, são do tipo pratos (bandejas) e/ou recheios e, como o próprio nome sugere, formam o interior das colunas. São os internos os responsáveis por manter o contato líquido-vapor fundamental para que ocorra a separação da mistura.

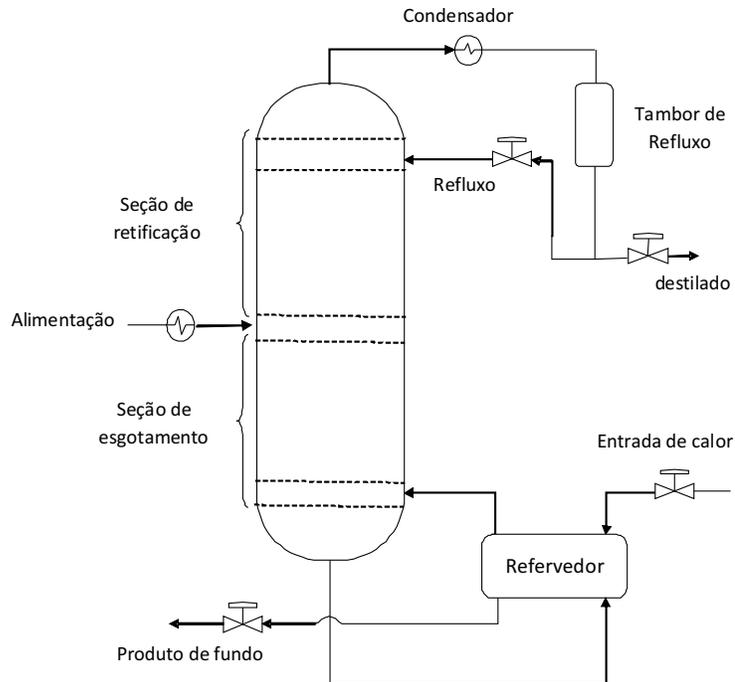


Figura 2.7: A esquemática de uma típica coluna de destilação.

O condensador é o equipamento responsável por arrefecer e condensar o vapor que sai pelo topo da coluna. Em geral, é usado água à temperatura ambiente como líquido refrigerante. O vapor condensado é então encaminhado para o tambor de refluxo.

O tambor de refluxo consiste um recipiente de especificação do vapor condensado. Se o líquido não atingir a especificação desejada, então é redirecionado novamente ao topo da coluna para ser reciclado. Esse líquido é chamado de *refluxo*. Caso contrário, esse líquido é removido do sistema e então é chamado de *destilado* ou *produto de topo*.

O refrervador é responsável em fornecer vapor à coluna. Ele recebe calor, na maioria das vezes na forma de vapor de uma unidade externa (caldeira, por exemplo), para aquecer o líquido que recebe da base da coluna a fim de ser vaporizado e redirecionado novamente à coluna. O líquido retirado do refrervador é denominado *produto de fundo*.

A corrente de alimentação contém os componentes que serão separados na coluna e sua entrada se faz, aproximadamente, no meio da coluna. Algumas colunas, como a da Figura 2.7, possuem mais um componente, um aquecedor da corrente de alimentação, para que a coluna não tenha um perda de calor com a entrada da carga.

2.6.2 O funcionamento

A partida de uma coluna de destilação requer atenção especial, e muitas técnicas são desenvolvidas para esse fim. No entanto, quando atingido o ponto de estabilidade, tem-se que seu funcionamento segue o princípio descrito nas seções anteriores. Para dar idéia de como o processo de destilação ocorre dentro da coluna, tomaremos como exemplo, uma coluna composta por cinco pratos perfurados e cuja alimentação de uma mistura binária é feita no segundo prato.

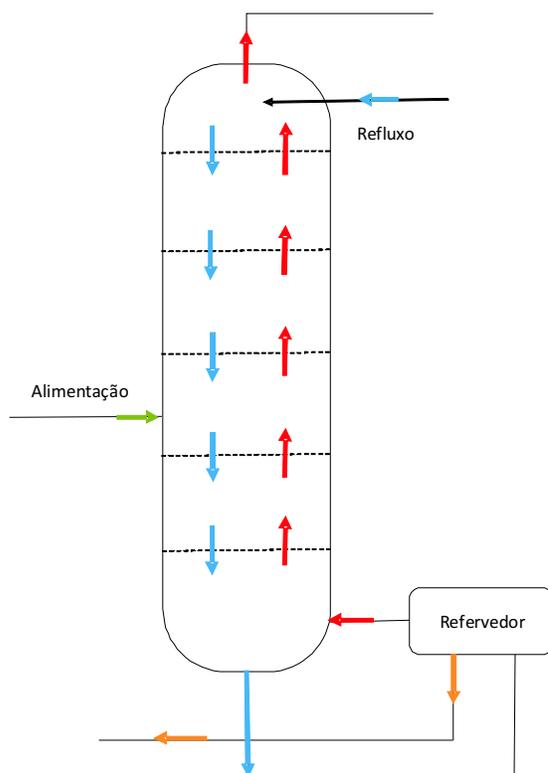


Figura 2.8: Coluna de destilação com cinco pratos.

Admitindo que a coluna esteja estável, tem-se um fluxo interno e um fluxo externo de correntes, a dizer, no fluxo interno, tem-se vapor subindo e líquido descendo, enquanto o externo, tem-se a corrente de alimentação e de refluxo entrando na coluna e as correntes de produto de fundo e de topo, saindo.

Os pratos perfurados têm o objetivo de reter líquido para que haja contato líquido-vapor e possibilite que se atinja o equilíbrio termodinâmico entre as fases. Eles possuem

orifícios que permitem a passagem do vapor que está subindo pela coluna, além de uma abertura maior para permitir que o excesso de líquido escoe para o prato abaixo.

Existe uma diversidade de modelos de pratos e a diferença básica está relacionada com a forma dessas aberturas para a passagem de vapor e líquido. Um exemplo é o prato perfurado com *downcomer* como o da Figura 2.9 que, segundo (CALDAS et al., 2007), na atualidade, é o mais usado nos projetos de colunas, além dos valvulados.

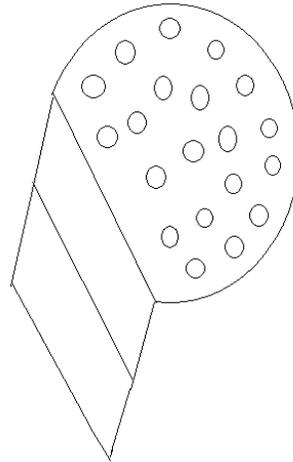


Figura 2.9: Prato perfurado com *downcomer*.

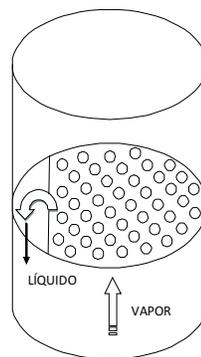


Figura 2.10: Esquema de uma coluna de destilação dotada com prato perfurado com *downcomer*.

O vapor fornecido pelo refeedor tem pressão suficientemente elevada para atravessar pelos orifícios de cada prato sem permitir que o líquido desça por eles. O vapor irá

aquecer o líquido sobre os pratos procurando estabelecer o equilíbrio líquido-vapor. Daí a necessidade dos pratos como anteparos para favorecer o contato entre o líquido e o vapor. Com isso, procura-se criar condições para que os pratos reais funcionem como se fossem pratos teóricos. Mesmo sendo impossível tal eficiência dos pratos reais, a separação ainda é possível usando um número maior de pratos reais em relação ao número de pratos teóricos.

O vapor que sobe pela coluna chega até o condensador. Em cada estágio, o vapor vai se enriquecendo com a componente mais volátil, enquanto que o líquido que desce devido à gravidade, vai se enriquecendo com a componente menos volátil, ou se empobrecendo com a mais volátil, até chegar ao refeedor, onde parte dele será reaquecido e devolvido à coluna e a outra parte (que a essa altura não contém praticamente nenhum traço da componente mais volátil) é retirada do processo como sendo produto de fundo.

No topo da coluna, o vapor condensado que estiver com a especificação desejada, também é retirado do processo, passando a se chamar destilado ou produto de topo. Caso contrário, retorna à coluna para ser reciclado e passando a se chamar refluxo.

A taxa de refluxo tem um papel importante no projeto de uma torre de destilação, pois altera o número de pratos teóricos e, conseqüentemente, o número de pratos reais, pois existe uma relação entre estes que depende da eficiência de cada prato, ou seja, o quanto ele se assemelha a um prato teórico.

A carga que entra na coluna, se tiver na mesma temperatura do prato de recepção, será incorporada ao líquido que desce, afetando a composição do líquido do prato inferior e a composição do vapor do prato superior. Caso a temperatura da carga seja diferente da temperatura do prato de alimentação, a alimentação afetará o equilíbrio energético da coluna e isso irá provocar alteração da composição do destilado. Além disso, a composição da carga também tem grande influência sobre a operação da coluna, no entanto, essa variável muito raramente pode ser controlada e portanto, o projeto da coluna deve estar preparado para operar dentro de uma certa faixa de variação.

Enfim, uma carga que entra na coluna tem suas componentes separadas devido aos vários estágios de equilíbrio líquido-vapor criados no interior da coluna pelas correntes de líquido e vapor e garantidos pelos internos de torres, neste caso, pelos pratos. Mas, nem tudo que reluz é ouro! A simplicidade das idéias camuflam a complexidade desse sistema de escoamento. Como veremos, vazões muito baixas ou altas de líquido ou vapor

podem provocar vários problemas no processo de destilação, o que implica que certas restrições das condições operacionais da coluna de destilação devem ser satisfeitas.

2.6.3 Restrições hidráulicas da coluna de destilação

Embora uma descrição técnica detalhada das restrições hidráulicas de uma coluna de destilação esteja fora do escopo deste texto, vale destacar que podem ocorrer vários problemas relacionados com as vazões de líquido e vapor, dentre eles tem-se:

a) Arraste de líquido (*Entrainment*)

Uma grande quantidade de energia fornecida ao refeedor pode provocar um aumento da quantidade e velocidade do vapor e provocar o arraste de líquido de um prato inferior para o imediatamente superior, contaminando este último com porções de líquido com maior proporção molar da componente menos volátil.

b) Formação de cones de vapor

Se a vazão de líquido, que escorre do topo para a base, é pequena, poderá haver uma altura insuficiente de líquido sobre as fendas do prato, formando assim regiões isentas de líquido sobre este, conseqüentemente, as fases não estarão em contato e não ocorrerá a transferência de massa.

c) Pulsação

Caso a vazão de vapor seja pequena, pode ser que o vapor presente num prato inferior não tenha pressão suficiente para vencer a resistência oferecida ao seu escoamento, acumulando-se neste prato até o momento em que a pressão aumenta forçando a passagem brusca do vapor. Após este instante, a pressão do vapor diminui rapidamente e novamente acontece o bloqueio da vazão de vapor. Este ciclo se repete, originando uma vazão em pulsos.

d) Passagem de líquido ou gotejamento (*Weeping*)

Este fenômeno é causado pelo baixo fluxo de vapor. A pressão exercida pelo vapor é insuficiente para manter o líquido sobre o prato, que escoar pelas perfurações diminuindo a eficiência da separação.

e) Inundação (*Flooding*)

A inundação de uma coluna ocorre quando o nível de líquido nos tubos de queda (*downcomer*) atinge o prato superior, causando retorno de líquido. Também pode ser causada pelo arraste de líquido.

f) Formação excessiva de espuma (*Foaming*)

A formação de espumas é desejável para que haja aumento da transferência de massa. Porém, o excesso de espuma causa arraste e/ou inundação do prato.

Mais detalhes sobre esses problemas podem ser encontrados em [7], [14], [15] e [31].

2.7 Os trabalhos de Moré e Fletcher

No complexo sistema de escoamento de uma coluna de destilação, todas as variáveis estão “fortemente” relacionadas e, portanto, qualquer perturbação em qualquer uma das variáveis provoca variação das demais, podendo causar alguns dos problemas citados no item acima. Por outro lado, certos ajustes devem ser feitos para que a coluna tenha o máximo desempenho e o menor custo operacional, ou seja, é necessário procurar, dentro do grau de liberdade de cada uma das variáveis que influem sobre o processo de destilação, os pontos que produzem um melhor desempenho da coluna, ditos pontos ótimos, e que minimizem o custo da operação.

Tal tarefa caracteriza um problema de otimização, o qual procura por pontos críticos ou estacionários do problema, dentro de um conjunto de pontos ditos viáveis definidos pelo conjunto de restrições do problema. E ainda, constitui o cerne deste trabalho, que como já comentamos na Seção 2.1, emergiu do processo de produção de biodiesel e tornou-se a motivação para elaboração deste material.

No entanto, para esse fim, bem como para modelar qualquer problema de otimização, o primeiro passo é transcrever o problema para uma linguagem onde possamos aplicar toda a teoria descrita no primeiro capítulo, ou seja, para a linguagem matemática. Neste ponto, foi no trabalho de MORÉ, 1990, p.723-762 (ver [24]), que encontramos a base para delinear nosso trabalho.

O artigo de Moré consiste na apresentação de uma coleção de problemas não-lineares que surgiram de alguma área aplicada e foram baseados em sugestões de vários autores

(ver [24]). Segundo MORÉ, *a solução dos problemas desta coleção é um importante desafio para o desenvolvimento de algoritmos*, visto que, na maioria das vezes, os problemas são escritos como sistemas de equações não-lineares de difícil solução. Dentre eles, em particular, Moré procura resolver o problema proposto por R. Fletcher (ver [9]), denominado *Distillation column test problem*, através da resolução de um sistema não-linear cujas equações, na sua maioria, descrevem o balanço de material e calor em cada estágio da coluna. O problema e as relações entre as variáveis serão apresentados no próximo capítulo.

Moré resolveu o problema da coluna para as misturas ternárias denominadas hidrocarbono-6 (seis estágios) e hidrocarbono-20 (vinte estágios), porém, não foi bem sucedido com a mistura água e metanol-8 (oito estágios). As soluções dos dois primeiros problemas podem ser encontradas em [24].

Portanto, Moré deixa em aberto o problema do metanol-8 (forma como trataremos daqui por diante o problema da mistura de água e metanol na coluna com oito estágios) como desafio para que outros pesquisadores, com outras ferramentas, pudessem resolvê-lo. Assim, o problema do metanol-8, fornecido por Fletcher e delineado por Moré, tornou-se o ponto de partida para nosso trabalho.

Capítulo 3

Otimização da coluna de destilação

Vimos que uma típica coluna de destilação, como a que apresentamos no capítulo anterior, é um complexo sistema de escoamento e constitui um dos equipamentos mais importantes na indústria química. Para este trabalho, no entanto, é sua utilidade dentro da planta de uma usina de biodiesel, em particular, da usina Barralcool, que nos chamou atenção a ponto de elaborarmos esse trabalho.

O ponto de partida será o trabalho de Moré sobre o processo de destilação de uma mistura binária de água e metanol numa coluna com oito estágios de destilação, deixado em aberto por Moré (ver [24]). Em seguida, daremos ao problema uma nova roupagem, abordando-o do ponto de vista da otimização, mais especificamente, através da metodologia dos multiplicadores de Lagrange, minimizando uma função custo de produção, idealizada da nossa vivência com o problema de retificação do metanol na coluna de destilação da usina barralcool, restrita a um conjunto de equações e inequações, na sua maioria não lineares.

O problema do metanol-8 é um caso particular do problema proposto por R. Fletcher sobre destilação de uma mistura de m componentes numa típica coluna de destilação constituída por n estágios. Porém, antes de abordarmos o trabalho de Moré sobre o metanol-8, torna-se necessário uma descrição bem sistematizada do problema proposto por R. Fletcher de forma a elucidar as relações que compõem o conjunto de restrições do processo de destilação.

3.1 O Problema da coluna de destilação

O problema proposto por Fletcher consiste na tarefa de destilar uma mistura de m componentes numa típica coluna de destilação dividida em n estágios, conforme a Figura 3.1.

Nessa típica coluna, a alimentação é feita no estágio $i = k$ e as retiradas de produto são feitas pelo topo (destilado) e pela base (produto de fundo), denotados por d e b , respectivamente.

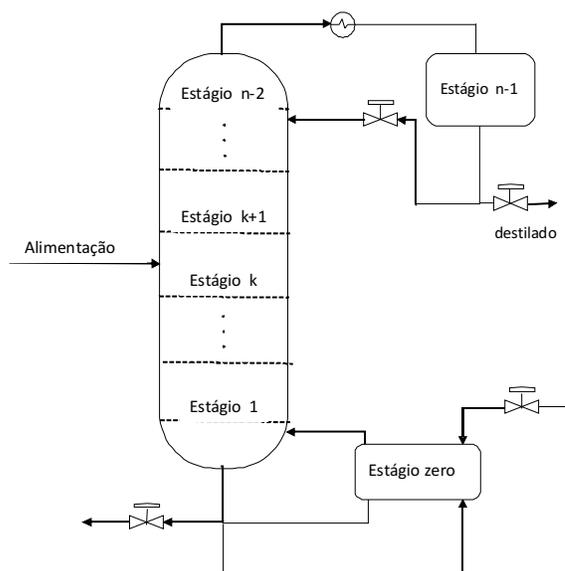


Figura 3.1: Coluna de destilação de n estágios com alimentação no k -ésimo estágio.

O calor é fornecido à coluna pelo reboiler (estágio $i = 0$) na base e vai subindo e transpassando os $n - 2$ pratos (perfurados ou valvulados) que correspondem aos estágios indexados por $i = 1, \dots, n - 2$. O vapor que atinge o topo é condensado e encaminhado para o tambor de refluxo (estágio $n - 1$) para ser especificado. Os detalhes do funcionamento da coluna estão descritos nas Seções 2.5 e 2.6 deste texto.

A cada prato da coluna, o deslocamento de matéria (líquido e vapor) deve satisfazer certas condições de equilíbrio e, uma delas, estabelece que a quantidade de matéria que chega num certo prato, digamos o i -ésimo, deve ser igual à quantidade de matéria que sai desse prato.

Observe na Figura 3.2 que as porções de material que chegam no prato i correspondem

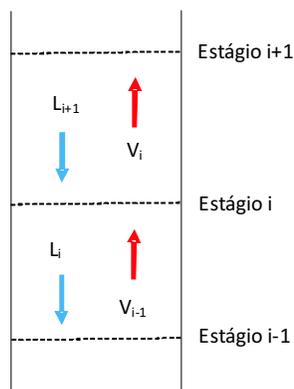


Figura 3.2: Esquema mostrando o fluxo de matéria pelo estágio i .

ao vapor que sobe do prato $i - 1$, denotado por v_{i-1} , e ao líquido que desce do prato $i + 1$, denotado por l_{i+1} , enquanto que as porções de material que saem do prato i são o vapor que sobe ao prato $i + 1$ e o líquido que escorre ao prato $i - 1$, denotados por v_i e l_i , respectivamente. Assim, podemos escrever essa relação de equilíbrio de material da seguinte forma

$$v_{i-1} + l_{i+1} = v_i + l_i. \quad (3.1.1)$$

No entanto, cada porção de material - líquido ou vapor - é composta por m componentes da mistura, cada qual com suas composições molares. Portanto, denotando por $x_{i,j}$ e $y_{i,j}$, a composição molar da componente j no líquido l_i e no vapor v_i , respectivamente, podemos reescrever a equação (3.1.1) da seguinte forma

$$v_{i-1}y_{i-1,j} + l_{i+1}x_{i+1,j} = v_iy_{i,j} + l_ix_{i,j}, \quad j = 1, \dots, m \quad (3.1.2)$$

para $i = 1, \dots, k - 1, k + 2, \dots, n - 2$.

Essa condição de equilíbrio sobre as massas não é válida para os estágios $i = 0$, $i = k$, $i = k + 1$ e $i = n - 1$, ou seja, para o refeedor, o prato de alimentação, o prato imediatamente acima deste e para o tambor de refluxo, respectivamente, pois nesses casos têm-se entrada e/ou retirada de produto do processo. Isso justifica o fato

da relação (3.1.2) não ser definida para esses estágios.

No estágio $i = 0$ (refervedor), tem-se que a única porção de material que entra no refervedor é o líquido que escorre do primeiro prato da coluna. De acordo com a Figura 3.1, observa-se ainda que o refervedor também recebe uma carga de vapor, mas sua finalidade restringe-se apenas em aquece-lo, e assim, não altera a quantidade de material. Por outro lado, a porção de vapor que sai dele, denotado por v_0 e que entra na coluna abaixo do primeiro prato, junto com a porção de líquido b , que é retirado do processo na forma de produto de fundo, contribuem com o balanço de material desse estágio. Portanto, equaciona-se essa condição de equilíbrio da seguinte forma

$$l_1 x_{1,j} = v_0 y_{0,j} + b x_{0,j}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (3.1.3)$$

No topo, todo vapor que sai do último prato (estágio $n - 2$) é condensado e armazenado no tambor de refluxo (estágio $n - 1$). O líquido, neste caso, deve ter a mesma proporção molar do vapor que entrou no condensador, logo tem-se a seguinte relação

$$y_{n-2,j} = x_{n-1,j}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (3.1.4)$$

Outra consideração importante sobre o balanço de material na coluna é feito com relação ao prato de alimentação, denotado por k . A corrente de alimentação pode estar nas duas fases (líquida e vapor), quando é suficientemente aquecida antes de entrar na coluna, ou somente na fase líquida (o que ocorre na maioria das colunas). Denotando por f_j^l e f_j^v , as porções de material que compõem a corrente de alimentação da coluna na fase líquida e na fase de vapor, respectivamente, e admitindo que f_j^l será incorporado ao líquido que escorre do prato $i = k + 1$ para o prato $i = k$, enquanto que f_j^v é incorporado ao vapor que sai do prato $i = k$ para o prato $i = k + 1$, têm-se, para os estágios $i = k$ e $i = k + 1$, as seguintes relações

$$f_j^l + v_{i-1} y_{i-1,j} + l_{i+1} x_{i+1,j} = v_i y_{i,j} + l_i x_{i,j}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (3.1.5)$$

e

$$f_j^v + v_{i-1} y_{i-1,j} + l_{i+1} x_{i+1,j} = v_i y_{i,j} + l_i x_{i,j}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (3.1.6)$$

respectivamente.

Sobre a seção de retificação, que ocorre nos estágios $i = k + 1, \dots, n - 2$, é estabelecida uma condição de equilíbrio global, a dizer, todo líquido que escoar de um estágio $i = k + 1, \dots, n - 1$, tem volume igual à diferença entre o volume de vapor que sobe do estágio imediatamente abaixo, estágio $i - 1$, pelo volume de destilado retirado no topo. Reescrevendo essa condição, obtém-se a relação

$$l_i = v_{i-1} - d, \quad i = k + 1, \dots, n - 1. \quad (3.1.7)$$

De forma análoga, para a seção de esgotamento, correspondentes aos estágios $i = 1, \dots, k$, é estabelecida a mesma condição de equilíbrio, apenas levando-se em consideração que a retirada de produto é feita na base da coluna, mais especificamente pelo refeedor, conforme apresentado por Moré e ilustrado na Figura (3.1). Assim, a relação que descreve essa condição é dada por

$$l_i = v_{i-1} + b, \quad i = 1, \dots, k. \quad (3.1.8)$$

Além disso, deve-se considerar que a entrada e saída de material da coluna devem estar balanceadas, ou seja, o volume da carga que entra na coluna através da corrente de alimentação deve ser igual ao volume de material que deixa a coluna na forma de destilado e produto de fundo. Essa condição pode ser escrita da seguinte forma

$$\sum_{j=1}^m (f_j^v + f_j^l) = d + b. \quad (3.1.9)$$

Admitindo que não há troca de calor entre a coluna e o meio, são consideradas também as relações de balanço energético para cada estágio de destilação. De forma análoga ao balanço de massa, o calor fornecido a um estágio i deve ser igual ao calor liberado por este.

No estágio $i = 0$, o calor é fornecido tanto pelo refeedor, a uma taxa q , quanto pelo líquido l_1 que escorre do primeiro prato da coluna. A retirada de calor desse estágio é feita pela corrente de vapor v_0 e pela corrente de produto de fundo. Assim, denotando por h_i o calor fornecido pelo líquido l_i e por H_i o calor fornecido pelo vapor v_i , tem-se

que a equação de balanço de calor para o estágio $i = 0$ é

$$l_1 h_1 + q = v_0 H_0 + b h_0. \quad (3.1.10)$$

Segundo Moré (ver [24]), h_i e H_i são funções em x_{ij} e t_i , e y_{ij} e t_i , respectivamente, definidas da seguinte forma

$$h_i = \sum_{j=1}^m x_{ij} (\alpha_j + \alpha'_j t_i + \alpha''_j t_i^2) \quad (3.1.11)$$

onde $\alpha_j, \alpha'_j, \alpha''_j$ para $j = 1, \dots, m$, são constantes de entalpia do líquido l_i ; e

$$H_i = \sum_{j=1}^m y_{ij} (\beta_j + \beta'_j t_i + \beta''_j t_i^2) \quad (3.1.12)$$

onde $\beta_j, \beta'_j, \beta''_j$ para $j = 1, \dots, m$, são constantes de entalpia do vapor v_i .

Para os estágios $i = 1, \dots, k-1, k+2, \dots, n-2$, tem-se a seguinte equação para o balanço de calor

$$v_{i-1} H_{i-1} + l_{i+1} h_{i+1} = v_i H_i + l_i h_i. \quad (3.1.13)$$

Isso significa que o calor liberado pelas correntes de vapor v_{i-1} e líquido l_{i+1} que chegam no estágio i , é igual ao calor retirado desse estágio pelas correntes v_i e líquido l_i que saem dele.

A carga de alimentação provoca um desequilíbrio energético nos estágios $i = k$ (prato de alimentação) e $i = k+1$, devido à temperatura das fases líquida e vapor que compõem a corrente de alimentação. Assim, para compensar a perda ou aumento de calor, adiciona-se o termo h_f no primeiro termo da equação (3.1.13) quando $i = k$ e o termo H_f no segundo termo quando $i = k+1$. Ou seja, para $i = k$, temos

$$h_f + v_{i-1} H_{i-1} + l_{i+1} h_{i+1} = v_i H_i + l_i h_i \quad (3.1.14)$$

e para $i = k+1$,

$$H_f + v_{i-1} H_{i-1} + l_{i+1} h_{i+1} = v_i H_i + l_i h_i. \quad (3.1.15)$$

Ainda segundo Moré (ver [24]), h_f e H_f são definidas da seguinte forma

$$h_f = \sum_{j=1}^m f_j^l (\alpha_j + \alpha'_j t_f + \alpha''_j t_f^2) \quad (3.1.16)$$

e

$$H_f = \sum_{j=1}^m f_j^v (\beta_j + \beta'_j t_f + \beta''_j t_f^2), \quad (3.1.17)$$

onde t_f é a temperatura da corrente de alimentação.

Além das equações de balanço de material e de calor, outras equações de restrições devem ser consideradas e são devidas às leis da química que governam as relações entre líquidos e vapores. Mais especificamente são as leis de Dalton e Raoult, que juntas, estabelecem uma condição de equilíbrio entre as composições molares de vapor y_{ij} e as composições molares de líquido x_{ij} .

A lei de Dalton ou *Lei das Pressões Parciais*, afirma que a pressão parcial de um gás ideal em uma mistura seria aquela que ele exerceria se estivesse sozinho, nas mesmas condições de volume e temperatura da mistura.

Essa lei pode ser expressa pela equação

$$p_j = y_j P, \quad (3.1.18)$$

onde p_j é a pressão parcial da componente j , P é a pressão total da mistura gasosa e y_j a composição molar da componente j na fase de vapor.

Por sua vez, a Lei de Raoult afirma que a pressão parcial de vapor de qualquer constituinte volátil de uma solução ideal é igual à pressão de vapor do constituinte puro multiplicada pela sua composição molar na mistura, quando estiver na mesma temperatura da solução. Ou seja,

$$p_j = x_j P_j, \quad (3.1.19)$$

onde x_j é a composição molar da componente j na fase líquida e P_j é a pressão de vapor dos j constituintes puros.

Das equações (3.1.18) e (3.1.19), tem-se que

$$y_j = \frac{P_j}{P} x_j. \quad (3.1.20)$$

Mas como em geral, as soluções (misturas) afastam-se da situação ideal, a pressão parcial do componente j , P_j , deve ser determinada em função da temperatura e composição.

A equação encontrada na literatura usual que relaciona a pressão de vapor dos líquidos puros com a temperatura é a equação de Antoine

$$\ln P_j = a_j + \frac{b_j}{c_j + t}, \quad (3.1.21)$$

onde t é a temperatura da mistura e a_j , b_j e c_j são as constantes de Antoine para a componente j .

Definindo $k_{ij} = \frac{P_{ij}}{P_i}$ como o fator de x_j em (3.1.20), para cada estágio $i = 1, \dots, n-1$ do processo de destilação e, usando a equação de Antoine para determinar a pressão de vapor dos líquidos puros para cada um desses estágios, obtemos a seguinte relação

$$k_{ij} = \frac{1}{P_i} \exp \left(a_j + \frac{b_j}{c_j + t_i} \right) \quad j = 1, \dots, m \quad (3.1.22)$$

para $i = 0, \dots, n-1$.

Assim, podemos reescrever a relação (3.1.20), obtida pelas leis de Dalton e Raoult, para cada estágio $i = 0, \dots, n-1$, da seguinte forma:

$$y_{ij} = k_{ij} x_{ij}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (3.1.23)$$

Além disso, como as componentes do líquido e do vapor são dadas percentualmente, tem-se que as equações

$$\sum_{j=1}^m x_{ij} = 1 \quad (3.1.24)$$

e

$$\sum_{j=1}^m y_{ij} = 1, \quad (3.1.25)$$

devem ser satisfeitas para cada estágio $i = 0, \dots, n - 1$.

Enfim, esse conjunto de equações, oriundas na sua maioria das condições de balanço de material, de calor e de soma unitária, constituem o sistema de equilíbrio do processo de destilação proposto por Fletcher.

Moré incluiu esse problema em sua obra *A Collection of Nonlinear Model Problems* e considerou três situações de misturas para serem destiladas na coluna proposta por Fletcher. São elas: duas mistura ternárias denominadas, hidrocarbono-6 e hidrocarbono-20 e, uma mistura binária de metanol-8. Os índices que acompanham as misturas indicam o número de estágios de destilação da coluna, 6, 20 e 8, respectivamente.

Uma discussão e apresentação dos resultados do trabalho de Moré sobre a destilação dessas misturas será feita na próxima seção.

3.2 Os resultados de Moré

Como já afirmamos no início deste Capítulo, daremos ao problema de destilação, mais especificamente para o problema do metanol-8, uma abordagem através dos multiplicadores de Lagrange. Inicialmente, trabalharemos com a mesma formulação proposta por Moré para modelar o problema, por dois motivos: em primeiro lugar, para obter uma solução do problema de equilíbrio associado à destilação do metanol-8, visto que Moré não obteve sucesso para este problema com as ferramentas por ele utilizadas; e, em segundo lugar, para utilizarmos tais resultados como ponto de partida na solução do problema de otimização proposto neste trabalho e confrontar os resultados.

Moré define como variáveis do problema, as composições molares x_{ij} dos líquidos $j = 1, \dots, m$ para cada estágio $i = 0, \dots, n - 1$; as temperaturas t_i para $i = 0, \dots, n - 1$ e as quantidades de vapor v_i para $i = 0, \dots, n - 2$. As quantidades l_i , y_{ij} , k_{ij} , h_i e H_i são definidas pelas equações (3.1.8) e (3.1.7), (3.1.23), (3.1.22), (3.1.11) e (3.1.12), respectivamente. No entanto, as relações de equilíbrio que devem ser satisfeitas são as equações (3.1.2)-(3.1.4), (3.1.10), (3.1.13) e (3.1.25), definidas na seção anterior. Esse

conjunto de equações formam um sistema não linear de $n.(m + 2) - 1$ equações e $n.(m + 2) - 1$ incógnitas.

Alguns dados são requeridos para definir o problema. São eles: as constantes de Antoine a_j , b_j e c_j em (3.1.22); as constantes de entalpia do líquido α_j , α'_j e α''_j em (3.1.11); as constantes de entalpia do vapor β_j , β'_j e β''_j em (3.1.12); as constantes que compõem a carga de alimentação da coluna, f_j^l e f_j^v e, a temperatura dessa carga, t_f em (3.1.16) e (3.1.17); as quantidades de produto de fundo, destilado e calor do refeedor, denotadas por b , d e q , respectivamente, em (3.1.3), (3.1.7), (3.1.8) e (3.1.10) e os valores das pressões π_i em (3.1.22).

Como foi mencionado no final da seção anterior, Moré ataca o problema da coluna de destilação com três situações distintas envolvendo duas mistura ternárias de hidrocarbono e um mistura binária de metanol, sendo que para cada uma delas, são considerados números de estágios de destilação diferentes, a dizer, 6, 20 e 8, respectivamente. Assim, para cada uma delas, temos diferentes valores para as constantes mencionadas acima. No entanto, apresentaremos somente os dados do problema do metanol-8, visto que, os problemas envolvendo as misturas de hidrocarbono-6 e hidrocarbono-20 foram resolvidos por Moré e o estudo da destilação de tais misturas não constituem o cerne deste trabalho.

O trabalho de Moré se resume em determinar uma solução para os sistemas não lineares de $n.(m + 2) - 1$ equações e $n.(m + 2) - 1$ incógnitas constituídos para cada uma dos três problemas supracitados. Para isso, ele utiliza uma subrotina padrão de Gauss-Newton. Os problemas do hidrocarbono-6 e hidrocarbono-20, com 29 e 99 variáveis, respectivamente, foram resolvidos em 5 e 13 iterações. Porém, o problema do metanol-8, com 31 variáveis, não foi resolvido pela rotina empregada por Moré.

Os valores das constantes do problema do metanol-8 utilizadas por Moré são os

seguintes:

$$\begin{aligned}
n &= 8, & m &= 2, & k &= 2; \\
a_1 &= 18.5751, & b_1 &= -3632.649, & c_1 &= 239.2, \\
a_2 &= 18.3443, & b_2 &= -3841.2203, & c_2 &= 228; \\
\alpha_1 &= 0, & \alpha'_1 &= 15.97, & \alpha''_1 &= 0.0422, \\
\alpha_2 &= 0, & \alpha'_2 &= 18.1, & \alpha''_1 &= 0; \\
\beta_1 &= 9566.67, & \beta'_1 &= -1.59, & \beta''_1 &= 0.0422, \\
\beta_2 &= 10834.67, & \beta'_2 &= 8.74, & \beta''_2 &= 0; \\
f_1^l &= 451.25, & f_2^l &= 684.25, & f_1^v &= 0, & f_2^v &= 0; \\
t_f &= 89, & b &= 693.37, & d &= 442.13, & q &= 8386200; \\
\pi_0 &= 1210, & \pi_1 &= 1200, & \pi_2 &= 1190, & \pi_3 &= 1180, \\
\pi_4 &= 1170 & \pi_5 &= 1160 & \pi_6 &= 1150 & \pi_7 &= 1140.
\end{aligned} \tag{3.2.1}$$

Observe que o número de componentes da mistura m , é igual a dois, ou seja, trata-se de uma mistura binária.

Provavelmente, devido à diferença de ordem de grandeza entre as constantes e as unidades envolvidas, Moré escalou certas equações que constituem o sistema não linear do problema. As equações (3.1.3) e (3.1.2) foram multiplicadas por 0.01 e as equações (3.1.10) e (3.1.13), por 10^{-6} .

Além disso, como Moré utiliza um método iterativo para resolver os sistemas, é necessária a atribuição de valores iniciais para as variáveis. Para o caso do metanol-8, os dados utilizados por Moré foram os seguintes:

$$\begin{aligned}
x_{01} &= 0.09203, & x_{02} &= 0.908, & x_{11} &= 0.1819, & x_{12} &= 0.8181, & x_{21} &= 0.284, \\
x_{22} &= 0.716, & x_{31} &= 0.3051, & x_{32} &= 0.6949, & x_{41} &= 0.3566, & x_{42} &= 0.6434, \\
x_{51} &= 0.468, & x_{52} &= 0.532, & x_{61} &= 0.6579, & x_{62} &= 0.3421, & x_{71} &= 0.8763, \\
x_{72} &= 0.1234, \\
t_0 &= 120, & t_1 &= 110, & t_2 &= 100, & t_3 &= 88, & t_4 &= 86, \\
t_5 &= 84, & t_6 &= 80, & t_7 &= 76, \\
v_0 &= 886.37, & v_1 &= 910.01, & v_2 &= 922.52, & v_3 &= 926.45, & v_4 &= 935.56, \\
v_5 &= 952.83, & v_6 &= 975.73
\end{aligned} \tag{3.2.2}$$

Embora a rotina utilizada por Moré não tenha resolvido o problema do metanol-8, isso não implica que o problema não tenha solução. Portanto, no próximo capítulo, retomamos o sistema não linear do problema do metanol-8 na tentativa de obtermos uma solução utilizando, para isso uma rotina do método de Newton implementada no *software Maxima*. E finalmente, fazendo uso das equações de equilíbrio fornecidas por R. Fletcher (Seção 3.1, deste trabalho) e das informações e conhecimentos adquiridos com a coluna de destilação da usina Barralcool, delinearemos o problema da destilação do metanol do ponto de vista da otimização, ou seja, conduzindo o sistema não linear de equilíbrio ao problema de encontrar um ponto ótimo de uma função objetivo restrita a um conjunto de equações e inequações de equilíbrio da coluna. Para resolução do problema, utilizamos uma implementação numérica da metodologia dos multiplicadores de Lagrange do *software Matlab* (rotina `fmincon`).

Capítulo 4

Uma abordagem via multiplicadores de Lagrange

A metodologia dos multiplicadores de Lagrange constitui uma importante ferramenta para atacar problemas de otimização com restrições de igualdades, desigualdades ou mistas. Alguns exemplos para mostrar a força dessa ferramenta, bem como a parte teórica que a sustenta, foram apresentados no primeiro capítulo desse trabalho. Na ocasião, utilizamos situações-problemas, didaticamente preparadas, de forma que a solução pudesse ser obtida analiticamente. No entanto, os problemas de otimização encontrados dentro das diversas áreas do conhecimento, em geral, possuem muitas restrições e alto grau de não linearidade tanto nas restrições quanto na função objetivo. Nestes casos, é inevitável o uso de *softwares* e métodos numéricos para procurar por solução ou soluções desses problemas. Conseqüentemente, faz-se também necessária, a utilização de estimativas iniciais para as variáveis a serem determinadas, visto que a maioria dos métodos numéricos são iterativos e partem de um ponto dado até convergirem para um ponto dentro de certo grau de satisfação. A escolha desses valores iniciais merece atenção especial do usuário do algoritmo, pois apesar de ser programado para executar sua tarefa, dados quaisquer valores, ele também é programado para interromper sua tarefa quando, por exemplo, atingir o número máximo de iterações, mesmo sem ter atingido o grau de precisão desejado. Tal problema, muitas vezes é contornado, melhorando a escolha desses valores iniciais.

A abordagem que daremos ao problema do metanol-8, usando a metodologia dos

multiplicadores de Lagrange, também recai num sistema não linear inviável de se resolver analiticamente, ou seja, assim como Moré, faremos uso de uma rotina numérica para obter uma solução aproximada do problema.

Moré, na sua tentativa de resolver o sistema não linear do problema do metanol-8, não justifica a escolha dos valores iniciais para as variáveis do problema. Logo, não se sabe se esses valores foram obtidos de uma coluna em funcionamento ou se provêm da literatura, ou ainda, se foram simplesmente inventados por ele. Portanto, podemos até desconfiar que a escolha desses valores iniciais podem ter contribuído para o fracasso da solução do problema, visto que ele utilizou um algoritmo numérico.

Essa possibilidade só nos deixa mais preocupados quanto à escolha dos valores iniciais. Assim, iniciaremos nosso trabalho resolvendo o sistema proposto por Moré, com o objetivo de utilizar a solução encontrada como estimativa de partida das variáveis do algoritmo escolhido para resolver o problema de otimização que formularemos.

4.1 Solução do sistema não linear de Moré

Utilizaremos para essa tarefa, o *software* livre **Maxima**. Esse *software* possui um pacote denominado *mnewton* para obter solução numérica de sistemas não lineares através do Método de Newton.

As equações que definem o sistema estão definidas na última seção do capítulo anterior, bem como, as variáveis do problema. Utilizamos para a estimativa inicial das variáveis, os mesmos valores utilizados por Moré (ver Tabela 3.2.2), apesar de, como já afirmamos, desconhecermos sua origem. As equações também foram escaladas conforme sugestão de Moré.

Dos valores expressos em (3.2.1) e (3.2.2), observamos que $j = 1$ é usado para indicar a componente metanol enquanto que $j = 2$ indica a componente água. A partir de agora, ao longo do texto, sempre utilizaremos os índices $j = 1$ e $j = 2$ para indicar os componentes metanol e água da mistura, respectivamente.

O programa **Maxima** requer a seguinte sintaxe *mnewton (FuncList, VarList, GuessList)*, onde *FuncList* é a lista de equações do sistema, *VarList* é a lista das variáveis do problema e *GuessList* são os valores iniciais das variáveis. Seguem abaixo os comandos utilizados no **Maxima**, com suas respectivas saídas:

```

(%i36) load ("mnewton");
(%o36) C:/PROGRA 1/MAXIMA 1.0/share/maxima/5.13.0/share/contrib /mnewton.mac
(%i38) b1:0.01;
(%o38) 0.01
(%i39) b2:10^(-6);
(%o39) 1/1000000
(%i40) mnewton([b1*MaterialZero(1), b1*MaterialZero(2), b1*Material(1,1),
b1*Material(1,2), b1*Material(3,1), b1*Material(3,2), b1*Material(4,1),
b1*Material(4,2), b1*Material(5,1), b1*Material(5,2), b1*Material(6,1),
b1*Material(6,2), b1*MaterialK(1), b1*MaterialK(2), MaterialSete(1), MaterialSete(2),
CondicoesY(1), CondicoesY(2), CondicoesY(3), CondicoesY(4), CondicoesY(5), Condi-
coesY(6), CondicoesY(7), CondicoesY(8),
b2*TermicoZero(0), b2*Termico(1), b2*Termico(3), b2*Termico(4),
b2*Termico(5), b2*Termico(6), b2*TermicoK(2)], [t0, t1, t2, t3, t4, t5, t6, t7, v0, v1, v2,
v3, v4, v5, v6, x01, x02, x11, x12, x21, x22, x31, x32, x41, x42, x51, x52, x61, x62, x71,
x72], [120, 110, 100, 88, 86, 84, 80, 76, 886.37, 910.01, 922.52, 926.45, 935.56, 952.83,
975.73, 0.09203, 0.908, 0.1819, 0.8181, 0.284, 0.716,0.3051, 0.6949, 0.3566, 0.6434, 0.468,
0.532, 0.6579, 0.3421, 0.8763, 0.1237]);
(%o40)
[[t0=107.7653795798063, t1=102.6849890859843, t2=97.71772476055264,
t3=96.57726115013136, t4=94.26309926727774, t5=89.98899748591786,
t6=83.97342066984533, t7=78.32157508655418, v0=886.7137742582908,
v1=910.3656929177114, v2=922.1591291059582, v3=926.0766775727482,
v4=935.1735260591253, v5=952.4236258294621, v6=975.0192103423751,
x01=0.092257232364219, x02=0.90774276763578, x11=0.18219952853121,
x12=0.81780047146879, x21=0.28421889854367, x22=0.71578110145633,
x31=0.30530731675986, x32=0.69469268324014, x41=0.35664901039732,
x42=0.64335098960268, x51=0.46779111102816, x52=0.53220888897184,
x61=0.65738959668631, x62=0.34261040331369, x71=0.87594509034814,
x72=0.12405490965186]]

```

Apenas para esclarecer, a nomenclatura usada para expressar as equações decorre da implementação das mesmas no software.

Como podemos observar, o algoritmo utilizado pelo *software* **Maxima** conseguiu encontrar uma solução que satisfaz o sistema não linear do problema do metanol-8. Assim, poderíamos até nos considerar satisfeitos, pois já temos uma solução para o complexo sistema de destilação do metanol-8. No entanto, a nossa breve passagem pela usina Barralcool, em Mato Grosso, foi suficiente para constatar que certos valores encontrados e até mesmo alguns utilizados para definir o problema, como por exemplo a temperatura da carga de alimentação, são impraticáveis na indústria. Uma forte evidência desse fato pode ser observada com o valor da variável $x_{7,1}$. Pela equação (3.1.4), tem-se que essa variável é a composição do metanol retirado da coluna pelo topo e que será armazenado no tambor de refluxo para especificação. No entanto, a porcentagem obtida é inferior à desejada pela maioria das usinas que necessitam retificar o metanol as quais necessitam de porcentagens em torno de 99%. A consequência disso e de outros valores impraticáveis, recaem sobre a indústria como aumento de custo.

Assim, fica mais evidente a importância de uma metodologia que nos possibilite inferir mais no problema afim de otimizarmos as variáveis que implicam maior produção e/ou diminuição dos custos, sem que sejam violadas as restrições do problema.

A nosso ver, uma abordagem do problema do ponto de vista da otimização, utilizando a metodologia dos multiplicadores de Lagrange, nos dará as ferramentas necessárias para inferir no problema do metanol-8 e, ao mesmo tempo, atender uma das metas das indústrias desse setor, a diminuição de custos.

4.2 A influência da coluna de destilação da usina Barralcool

4.2.1 O contato com a usina

Como já mencionamos no início do capítulo 2, atraídos pelo ascensão do biodiesel como fonte alternativa de combustível, nos deparamos com o processo de retificação do metanol na coluna de destilação da usina Barralcool (ver Figura 4.1). Foi através de uma parceria ente a Universidade do Estado de Mato Grosso e a usina Barralcool, que possibilitou o nosso primeiro contato com o assunto e com a coluna de retificação do metanol.

A princípio, ocorreram muitas especulações de ambas as partes. Da nossa parte, a



Figura 4.1: Ao centro da foto, a coluna de destilação da usina Barralcool (foto tirada em 04/01/2008).

sede por conhecimento e compreensão do processo e, da parte deles, saber exatamente que de tipo de trabalho iríamos fazer e de que forma esse trabalho poderia contribuir com a melhora do processo. Então, depois de algumas reuniões, ficou acertado a realização de um trabalho sobre o processo de retificação do metanol em sua coluna de destilação. Era o primeiro passo de uma caminhada que logo descobriríamos que se transformaria numa longa maratona.

4.2.2 As dificuldades e a parceria com a Súzan

As primeiras visitas à usina, após autorização para execução do trabalho, foram para ampliar a visão sobre o funcionamento do processo e conhecer a estrutura da planta que suporta a coluna. Aos poucos nos deparamos com um complexo sistema e poucas informações relevantes que pudessem servir de base para a construção de relações entre as variáveis que poderiam ser controladas.

Além disso, certas válvulas, que controlavam taxas de vazão, estavam com defeito e informavam apenas a porcentagem de abertura. Ainda mais, era impossível calcular manualmente as taxas pois não se conhecia o dimensionamento das válvulas.

A coleta de dados também constituiu-se num grande problema, pois o único local

onde podíamos coletar informação era, literalmente, na tela de monitores da mesa de controle. Os computadores não possuíam *drivers* para fazer cópias das informações, logo, a única forma de extraí-las era por foto digital da tela ou cópia manual. Isso requeria muito tempo, o qual também era escasso pois só tínhamos acesso nos períodos em que a coluna estava parada, que eram raros.

Mas o problema mais sério disso tudo, era a falta de informações fundamentais, como por exemplo, o tipo de recheio da torre e o número de estágios de destilação. Tais informações não eram conhecidas nem pelo engenheiro responsável pela planta. Só quem detinha essas informações era a empresa que instalou a coluna, que as guardava como segredo industrial.

Em meio a essas dificuldades, surgiu a idéia da parceria com a acadêmica Súzan G. Benetti de Pádua, também aluna do Mestrado Profissional em Matemática, que também almejava a realização de um trabalho na área de otimização. A parceria foi fundamental para compreendermos o processo e suas relações e, principalmente, para concluirmos que era impossível, diante da falta de informação, otimizar a coluna de retificação do metanol da usina Barralcool.

Era difícil admitir, mas precisávamos de uma outra estratégia para nos mantermos na mesma linha de trabalho sem dependermos daquelas informações desconhecidas da coluna da usina e mesmo assim, que o resultados obtidos com esse trabalho pudesse ter alguma validade para a usina.

4.2.3 A estratégia

A essa altura do trabalho, já tínhamos em mãos o trabalho de Moré sobre a destilação do metanol-8. Observávamos que não havia indícios que os dados utilizados por ele tivessem sido extraídos de alguma coluna de destilação. Além disso, o sistema proposto por Moré para abordar o problema é muito “engessado”, no sentido que fica difícil melhorar o resultado encontrado. Portanto, a estratégia utilizada foi tentar validar a metodologia para o problema hipotético do metanol-8 mas inserindo algumas informações adquiridas durante o estudo do processo de destilação na coluna da usina Barralcool.

Essas informações ajudaram a refinar a modelagem do problema de tal forma, que os valores obtidos como solução, tornaram-se compatíveis com os valores de uma coluna

de destilação em funcionamento.

4.3 A formulação do problema

Para formular o problema do metanol-8 em termos de um problema de otimização precisamos, primeiramente, definir a função objetivo. Matematicamente, poderíamos evidenciar qualquer variável das equações de equilíbrio descritas na Seção 3.1 deste trabalho e considerá-la com função objetivo a ser otimizada. No entanto, o resultado obtido deve fazer algum sentido para o problema do ponto de vista físico-químico e nosso caso, gostaríamos que sua otimização trouxesse algum benefício ao processo. Portanto, algumas possíveis variáveis a serem otimizadas eram: x_{01} , a porcentagem molar do metanol que vai para o refeedor; x_{71} , a porcentagem molar do metanol obtido no topo; q , a quantidade de calor fornecida pelo refeedor; t_f , temperatura da carga de alimentação; além de funções, envolvendo essas e outras variáveis, que representam, por exemplo, eficiência da coluna, quantidade de energia consumida, custo ou produção.

Da vivência com o processo de retificação do metanol da usina Barralcool, optamos por formular uma função custo de energia térmica envolvendo as variáveis q e t_f , que são as responsáveis por fornecer calor à coluna e gerar custo para o processo devido à quantidade de energia requerida.

A variação do valor de q , ou seja, do calor fornecido ao refeedor, provoca variação do volume de vapor fornecido à coluna. Tal variação deve ser controlada entre um valor mínimo e um valor máximo - que dependem também de outros fatores - para que não ocorra nenhum dos problemas citados na Seção 2.6.3 deste trabalho. Além disso, trabalhando-se com valores de q próximos do mínimo desse intervalo, afim de economizar energia, pode ocorrer de se obter destilado abaixo da especificação desejada, e conseqüentemente, retornará à coluna para ser destilado novamente, aumentando o tempo e o custo do processo. Logo, deve haver um valor ótimo para q tal que se possa obter a maior quantidade possível de destilado, na especificação desejada, com o mínimo de calor possível fornecido ao refeedor.

A temperatura t_f , imprimida à carga de alimentação da coluna, também é um fator de custo ao processo, pois é necessário fornecer uma determinada quantidade de energia para elevar a temperatura ambiente da carga até a temperatura t_f . Por outro lado, se a

carga for inserida na coluna com temperatura muito inferior à temperatura do prato de alimentação, ela provocará perda de energia térmica da coluna, podendo desequilibrar o processo.

Nesses termos, propomos uma função objetivo com a seguinte formulação:

$$f(\cdot) = c_1 q + c_2 \left[\frac{1000}{4.2} (f_1^l c_m + f_2^l c_a)(t_f - t_0) \right], \quad (4.3.1)$$

onde c_1 e c_2 são os custos por unidade de calor do refeedor e da carga de alimentação, respectivamente, c_m é o calor específico do metanol, c_a é o calor específico da água, f_1^l e f_2^l são as massas de água e metanol, que juntas compõem a carga de alimentação da coluna, t_0 é a temperatura ambiente da carga de alimentação e t_f é a temperatura à qual será elevada essa carga antes de ser inserida na coluna. Destes valores, c_1 , c_2 , c_m , c_a , f_1^l , f_2^l e t_0 são constantes dadas, logo, somente as variáveis q e t_f serão otimizadas. A princípio, não serão indicadas explicitamente as variáveis de f , pois uma análise mais detalhada será feita mais adiante.

As unidades das variáveis são omitidas no artigo de Moré, o qual está sendo usado como base para formulação desse problema. No entanto, da nossa vivência com o processo de retificação do metanol na usina Barralcool, conjecturamos que a unidade de q seja kJ/h (quilo Joule por hora), a das temperaturas, $^{\circ}C$ (grau Celsius), e das constantes f_1^l e f_2^l seja kg/h (quilograma por hora). Da função objetivo, é conhecida apenas as unidades de c_m e c_a , a saber, $cal/(g \cdot ^{\circ}C)$ (caloria por grama vezes grau Celsius) pois são propriedades intrínsecas da matéria, e das constantes de custo $R\$/kJ$ (reais por quilo Joule). O fator $\frac{1000}{4.2}$ no termo em t_f da função, é devido à unidade do calor específico e de q , ou seja, deve-se converter kg em gramas e caloria em Joule¹. Assim, por essa conjectura, temos que o valor de f é dado em unidades de reais por quilo Joule fornecido.

$$f(\cdot) = \frac{R\$}{kJ} \cdot \frac{kJ}{h} + \frac{R\$}{kJ} \left[\frac{1000}{4.2} \left(g \frac{cal}{g \cdot ^{\circ}C} \right) (^{\circ}C) \right] \frac{1}{h} = \frac{R\$}{h}.$$

Embora não tenhamos certeza sobre a verdadeira natureza dessas unidades, tal fato não coloca em risco o mérito deste trabalho, pois bastaria re-calibrar as constantes de custo para ajustar o problema às novas unidades.

¹1 Joule \cong 4.2 calorias

Baseados no artigo de Moré, tomamos como restrições do problema as equações de balanço de massa dos estágios $i = 0, \dots, n - 1$: (3.1.3), (3.1.5), (3.1.6), (3.1.2) e (3.1.4); as equações de balanço de calor dos estágios $i = 0, \dots, n - 2$: (3.1.10), (3.1.13), (3.1.14) e (3.1.15); as equações de soma unitária das proporções molares das componentes no vapor para cada estágio $i = 0, \dots, n - 1$, (3.1.25) e a equação de balanço global da coluna, (3.1.9).

Exceto a última, todas as demais equações foram usadas por Moré na composição de seu sistema não linear de equilíbrio, que resolvemos na Seção 4.1. Optamos por inserir a equação

$$\sum_{j=1}^2 (f_j^v + f_j^l) = d + b$$

pois estamos considerando b e d com variáveis em nosso problema. Assim, temos um conjunto com 32 restrições de igualdade no problema, uma equação a mais que o sistema de Moré.

O número de variáveis do nosso problema também é maior que o considerado por Moré. De imediato, observe que a função objetivo depende de t_f , ou seja, t_f é uma variável, ao contrário de Moré que a tomava como constante. Ainda observando a função objetivo, temos que q também é uma variável. Por outro lado, pela equação (3.1.10), ou seja,

$$l_1 h_1 + q = v_0 H_0 + b h_0,$$

vemos que q depende de b, v_0, h_0, h_1, H_0 e l_1 , onde

$$l_1 = l(v_0, b),$$

$$h_0 = h(x_{01}, x_{02}, t_0),$$

$$h_1 = h(x_{11}, x_{12}, t_1),$$

e

$$H_0 = H(y_{01}, y_{02}, t_0),$$

e que, por sua vez,

$$y_{0,j} = y(x_{0j}, t_0, \pi_0), \quad j = 1, 2,$$

conforme definido na Seção 3.1 deste trabalho. Logo, q é função das variáveis

$$v_0, x_{01}, x_{02}, x_{11}, x_{12}, y_{01}, y_{02}, t_0, t_1, \pi_0.$$

Além disso, tem-se variáveis que não configuram no enunciado da função objetivo mas aparecem nas restrições, portanto, as variáveis do problema que vamos resolver são as seguintes:

$$\begin{array}{l} t_0, \quad \dots, \quad t_{n-1}, \quad t_f \\ v_0, \quad \dots, \quad v_{n-2} \\ x_{01}, \quad \dots, \quad x_{0m}, \quad x_{11}, \quad \dots, \quad x_{1m}, \quad x_{n-1,1}, \quad \dots, \quad x_{n-1,m} \\ \pi_0, \quad \dots, \quad \pi_{n-1} \\ b, \quad d, \quad q, \end{array}$$

Tabela 4.1: Variáveis do problema.

onde $n = 8$ (número de estágios de destilação da coluna) e $m = 2$ (número de componentes da mistura).

Observe na Tabela (4.1) que tornamos variáveis muitas das constantes consideradas por Moré. O objetivo é ampliar os graus de liberdade do problema, pois as variáveis são “fortemente” relacionadas umas com as outras e quanto mais liberdade pudermos dar ao conjunto viável, é de se esperar que melhor exploremos a situação-problema em questão, obtendo com isso um resultado a contento. Assim, além das constante de entalpia e de Antoine, somente as quantidades de material que compõem a alimentação foram mantidas constantes, conforme Tabela (4.2).

$$\begin{array}{lll} a_1 = 18.5751, & b_1 = -3632.649, & c_1 = 239.2, \\ a_2 = 18.3443, & b_2 = -3841.2203, & c_2 = 228; \\ \alpha_1 = 0, & \alpha'_1 = 15.97, & \alpha''_1 = 0.0422, \\ \alpha_2 = 0, & \alpha'_2 = 18.1, & \alpha''_2 = 0; \\ \beta_1 = 9566.67, & \beta'_1 = -1.59, & \beta''_1 = 0.0422, \\ \beta_2 = 10834.67, & \beta'_2 = 8.74, & \beta''_2 = 0; \\ f_1^l = 451.25, & f_2^l = 684.25, & f_1^v = 0, \quad f_2^v = 0. \end{array}$$

Tabela 4.2: Constantes do problema.

O uso de ferramenta computacional é essencial para a resolução desse problema, vistos a complexidade e o número de restrições. Porém, quando fazemos uso desse recurso,

temos que tomar alguns cuidados para que o algoritmo não convirja para um ponto que, embora satisfaça as condições de primeira ordem, não tenha sentido prático para o problema. A fim de garantir um resultado satisfatório tanto do ponto de vista matemático quanto do prático, vamos inserir restrições às variáveis envolvendo desigualdades na forma de caixa.

Iniciando pela temperatura, é natural impor que sejam positivas, assim, vamos estabelecer apenas um limitante superior. Para isso, devemos considerar que na base da coluna, as temperaturas ultrapassam os 100°C e no topo, essa temperatura está mais próxima da temperatura de ebulição da componente mais volátil, no caso, do metanol, ou seja, por volta de 65°C à pressão de 1 atm. A temperatura t_f porém, não pode ser inferior a 25°C , pois teríamos uma variação de temperatura negativa, o que na prática significaria ter temperatura da carga de alimentação inferior à temperatura ambiente, o que requer resfriamento, prática não utilizada nesse segmento da indústria. Assim, estabelecemos que

$$\begin{aligned} 0 \leq t_i \leq 200, \quad \text{para } i = 0, \dots, 7, \\ 25.01 \leq t_f \leq 200. \end{aligned} \tag{4.3.2}$$

Os vapores v_i devem variar entre um valor mínimo em torno da metade da carga de alimentação e um valor máximo maior que duas vezes o valor de destilado, visto que todo vapor que chega ao condensador torna-se destilado e refluxo e que, de acordo com literatura (ver [23]), sua quantidade varia entre 1.1 a 1.4 vezes mais que o destilado. Logo, estabelecemos os seguintes limites para os vapores,

$$500 \leq v_i \leq 1000, \quad \text{para } i = 0, \dots, 6. \tag{4.3.3}$$

As composições molares x_{ij} das componentes $j = 1, 2$ na fase líquida para cada estágio $i = 0, \dots, 7$, como devem somar 1, pela equação (3.1.24), devem estar compreendidas entre 0 e 1, ou seja,

$$0 \leq x_{ij} \leq 1, \quad \text{para } i = 0, \dots, 7 \text{ e } j = 1, 2. \tag{4.3.4}$$

Quanto às pressões, cuja unidade acreditamos que seja mm Hg (milímetros de mercúrio),

devem ser maiores que 760mm Hg (equivalente a 1 atm²) devido à grande massa de vapor dentro da coluna. Por outro lado, baseados nos resultados obtido com a resolução do sistema de Moré, os valores não ultrapassam 2 atm, ou seja, 1520mm Hg. No entanto, para não cometermos o erro de impedir alguma possível solução envolvendo pressões acima de 2 atm, ampliamos esse limite para 2000mm Hg. Então, temos que

$$760 \leq \pi_i \leq 2000, \quad \text{para } i = 0, \dots, 7. \quad (4.3.5)$$

Os valores das variáveis b e d , estão relacionadas pela equação (3.1.9), logo

$$0 \leq b \leq 1135.5 \quad (4.3.6)$$

e

$$0 \leq d \leq 1135.5. \quad (4.3.7)$$

O calor do refervedor, nosso “gigante” dos valores, é limitado pelas restrições hidráulicas da coluna, descritas na Seção 2.6.3 deste trabalho. No entanto, faz-se necessário o conhecimento de outras variáveis como por exemplo, velocidade com que o líquido desce pela coluna e abertura dos orifícios dos pratos. Assim, para evitar introduzir qualquer dificuldade adicional com os limitantes dessa variável, estabelecemos um intervalo de segurança, conforme segue,

$$1000000 \leq q \leq 15000000. \quad (4.3.8)$$

Enfim, adicionando as desigualdades (4.3.2)-(4.3.8) com as equações sugeridas acima, constituímos o conjunto de restrições ou conjunto admissível do problema (4.3.1). Escrevendo esse problema na forma padrão como são apresentados os problemas de otimização, temos o seguinte enunciado:

²1 atm ou 1 atmosfera é a pressão exercida pela massa de ar ao nível do mar

$$\text{Minimizar } f(\mathbf{x}) = c_1 \cdot q + c_2 \left[\frac{1000}{4.2} (f_1^l \cdot c_m + f_2^l \cdot c_a)(t_f - t_0) \right]$$

restrita a

$$\begin{aligned}
& l_1 x_{1,j} = v_0 y_{0,j} + b x_{0,j} \quad \text{para } j = 1, 2 \\
& f_j^l + v_{i-1} y_{i-1,j} + l_{i+1} x_{i+1,j} = v_i y_{i,j} + l_i x_{i,j} \quad \text{para } j = 1, 2 \text{ e } i = 2 \\
& f_j^v + v_{i-1} y_{i-1,j} + l_{i+1} x_{i+1,j} = v_i y_{i,j} + l_i x_{i,j} \quad \text{para } j = 1, 2 \text{ e } i = 3 \\
& v_{i-1} y_{i-1,j} + l_{i+1} x_{i+1,j} = v_i y_{i,j} + l_i x_{i,j} \quad \text{para } j = 1, 2 \text{ e } i = 1, 3, 4, 5, 6 \\
& y_{6,j} = x_{7,j} \quad \text{para } j = 1, 2 \\
& l_1 h_1 + q = v_0 H_0 + b h_0 \\
& v_{i-1} H_{i-1} + l_{i+1} h_{i+1} = v_i H_i + l_i h_i \quad \text{para } i = 1, 3, 4, 5, 6 \\
& h_f + v_{i-1} H_{i-1} + l_{i+1} h_{i+1} = v_i H_i + l_i h_i \quad \text{para } i = 2 \\
& H_f + v_{i-1} H_{i-1} + l_{i+1} h_{i+1} = v_i H_i + l_i h_i \quad \text{para } i = 3 \\
& \sum_{j=1}^2 y_{ij} = 1 \quad \text{para } i = 1, \dots, 7 \\
& \sum_{j=1}^2 (f_j^v + f_j^l) = d + b \\
& 0 \leq t_i \leq 200 \quad \text{para } i = 0, \dots, 7 \\
& 25.1 \leq t_f \leq 200 \\
& 500 \leq v_i \leq 1000 \quad \text{para } i = 0, \dots, 6 \\
& 0 \leq x_{ij} \leq 1 \quad \text{para } j = 1, 2 \text{ e } i = 0, \dots, 7 \\
& 760 \leq \pi_i \leq 2000 \quad \text{para } i = 0, \dots, 6 \\
& 0 \leq b \leq 1135.5 \\
& 0 \leq d \leq 1135.5 \\
& 1000000 \leq q \leq 15000000
\end{aligned} \tag{4.3.9}$$

Trata-se portanto, de um problema de otimização com restrições mistas, a saber, com 32 restrições de igualdade e 16 restrições de desigualdade envolvendo inequações do tipo caixa. O Teorema de Karush-Kuhn-Tucker, visto no Capítulo 1 deste trabalho, nos dá as ferramentas necessárias para caracterizarmos uma solução desse problema. No entanto, optamos por um tratamento numérico através de *softwares* matemáticos, devido

a dificuldade de se resolver analiticamente.

4.3.1 As ferramentas computacionais

Optamos pelo *software* **MatLab** devido ao seu desempenho numérico e por conter uma rotina específica para problemas de otimização, mais especificamente, para problemas de minimização com restrições. Também utilizamos os *softwares* **Maxima** e **Mathematica**. O primeiro, para resolução do sistema de Moré e para nos auxiliar com a implementação das equações no **MatLab** e o segundo, devido sua qualidade gráfica, para a construção de gráficos para análise dos valores obtidos.

A rotina do **MatLab**, denominada **fmincon**, utiliza o método de programação quadrática seqüencial, SQP (*sequential quadratic programming*) que consiste, como o nome sugere, na resolução de uma seqüencia de problemas de programação quadrática, ou problemas de otimização com restrições lineares e função objetivo quadrática, que aproximam, em cada iteração, o problema original dado (ver [13]). Além disso, o algoritmo utiliza o sistema das condições de primeira ordem do problema, conforme o Teorema de Karush-Kuhn-Tucker, como critério de parada.

De forma geral, ela procura resolver o seguinte problema:

$$\begin{aligned} & \text{Min} && f(\mathbf{x}) \\ & \text{restrita a} && \\ & c(\mathbf{x}) &= & \mathbf{0} \\ & ceq(\mathbf{x}) &= & \mathbf{0} \\ & A \mathbf{x} &\leq & \mathbf{b} \\ & Aeq \mathbf{x} &= & \mathbf{beq} \\ & \mathbf{lb} &\leq & \mathbf{x} \leq \mathbf{ub} \end{aligned} \tag{4.3.10}$$

onde \mathbf{x} , \mathbf{b} , \mathbf{beq} , \mathbf{lb} e \mathbf{ub} são vetores, A e Aeq são matrizes, $c(\mathbf{x})$ e $ceq(\mathbf{x})$ são funções que retornam vetores e $f(\mathbf{x})$ é a função objetivo que retorna um escalar.

Os vetores \mathbf{lb} e \mathbf{ub} são os limitantes, inferior e superior, respectivamente, das coordenadas do vetor \mathbf{x} (variáveis do problema). Os vetores \mathbf{b} e \mathbf{beq} são formados pelos termos independentes das equações lineares de igualdade e desigualdades, respectivamente, que compõem o conjunto admissível do problema. Essas equações lineares são

também definidas pelas matrizes A e Aeq , enquanto as equação não lineares do conjunto admissível dão origem às funções vetoriais $c(\mathbf{x})$ e $ceq(\mathbf{x})$.

A rotina contém algumas ferramentas que nos permitem avaliar a qualidade da solução encontrada pelo algoritmo. Vamos comentar aquelas nas quais nos orientaremos para fazer nossa análise sobre os valores encontrados. São elas: *exitflag*, *Output* e *Display*.

A saída *exitflag* retorna uma das seguintes bandeiras:

- *flag 1*

A bandeira 1 (a bandeira almejada) indica que as condições de otimalidade de primeira ordem foram satisfeitas para a tolerância especificada.

- *flags 2 e 3*

Essas bandeiras informam que variações no vetor \mathbf{x} e no valor da função objetivo foram menores que a tolerância especificada, respectivamente.

- *flags 4 e 5*

As bandeiras 4 e 5 indicam que a magnitude da direção procurada e da derivada direcional foram menores que a tolerância especificada, respectivamente. Além disso, que a violação das restrições foi menor que a especificada na opção `TolCon`.

- *flag 0*

A rotina acusa essa bandeira quando o número de iterações ou o número de avaliações da função é excedido. Esses valores podem ser controlados pelas opções `MaxIter` e `FunEvals`.

- *flag -1*

Indica que o algoritmo foi interrompido por uma função de saída programada pelo usuário (`Output Function`).

- *flag -2*

Indica que não foi encontrado um ponto viável que satisfaça as restrições dadas.

A saída *Output* mostra algumas informações sobre a otimização: o número de iterações, o número de avaliações da função e outras. Mas, em particular, olharemos para

o valor do item `firstorderopt` que nos fornece uma medida da qualidade da solução obtida em termos da verificação do sistema de Karush-kuhn-Tucker.

Finalmente, a opção `Display` nos fornece informações sobre o desenvolvimento do processo de otimização pelo algoritmo, onde pode-se verificar por exemplo, qual o valor máximo da violação das restrições do ponto encontrado pelo algoritmo.

4.3.2 A implementação do problema no MatLab

Implementamos a função objetivo no MatLab com a nomenclatura $funobj(\mathbf{x})$, onde \mathbf{x} é o vetor das variáveis do problema, conforme especificadas na Tabela (4.1), ou seja,

$$x_0 = (t_0, \dots, t_7, t_f, v_0, \dots, v_6, x_{11}, x_{12}, \dots, x_{71}, x_{72}, \pi_0, \dots, \pi_7, b, d, q)^T. \quad (4.3.11)$$

Para as constantes de custo, tomamos os seguintes valores hipotéticos

$$c_1 = 4.5 \times 10^{-5} \quad \text{e} \quad c_2 = 5 \times 10^{-6}.$$

Valores reais para esses custos dependem de uma análise minuciosa de todos os fatores envolvidos no fornecimento da energia térmica à coluna. Além disso, cada estrutura industrial que contém uma coluna de destilação tem suas particularidades, logo, o custo de uma provavelmente é diferente do custo de outra. Da nossa vivência com esse processo na usina Barralcool, também não foi possível obter informação sobre tais custos. Por esse motivo, consideramos tais valores para c_1 e c_2 para que pudéssemos analisar o comportamento da função objetivo e do conjunto de restrições. A diferença adotada para os valores dessas constantes justifica-se pelo fato que o aquecimento da carga de alimentação não é feito pelo refeedor, ou seja, requer outro equipamento e provavelmente gere um custo diferente, no caso, menor.

Os valores dos calores específicos do metanol e da água, valem

$$c_m = 0.599, \quad \text{e} \quad c_a = 1,$$

respectivamente, cuja a unidade de medida é $cal.g^{-1}.\text{°C}^{-1}$.

Para construirmos a função (vetorial) $ceq(\mathbf{x})$ das restrições de igualdade, primeira-

mente implementamos essas equações no *software* **Maxima**, devido a sua facilidade algébrica e compatibilidade de linguagem com o **MatLab**, para posteriormente migrarmos para este último, onde criamos o vetor $ceq(\mathbf{x})_{32 \times 1}$. Esse vetor é uma função vetorial de \mathbb{R}^{43} em \mathbb{R}^{32} , cujas funções coordenadas correspondem às restrições de igualdade com termo independente nulo.

A rotina `fmincon` necessita das jacobianas das funções $ceq(\mathbf{x})$ (vetorial) e $f(\mathbf{x})$, que podem ser calculadas automaticamente através de diferenças finitas. No entanto, isso pode, é claro, gerar erros de aproximação que podem dificultar a convergência do algoritmo. Por outro lado, ao se calcular as derivadas uma a uma e ainda migrá-las de um *software* para outro, também pode-se cometer alguma falha humana. Contudo, a saída `firstorderopt` nos permite avaliar a necessidade de entrar ou não com as jacobianas “exatas”. A princípio, entraremos com gradiente da função objetivo e deixaremos para a rotina a construção da jacobiana da $ceq(\mathbf{x})$.

Os vetores \mathbf{lb} e \mathbf{ub} são definidos de acordo com as restrições de desigualdade conforme (4.3.9).

Além disso, ajustamos a rotina para que o algoritmo pare quando atingir o número máximo de 1500 iterações ou 15000 avaliações da função objetivo. Quanto às tolerâncias para o valor da função e para a violação das restrições, ajustamos ambas para a ordem de 10^{-8} .

Finalmente, com o problema inserido e ajustado, só nos resta investigar se a metodologia que estamos utilizando nos dará resultados satisfatórios.

4.4 A investigação numérica

Apresentaremos aqui os resultados obtidos e uma análise matemática na busca de uma validação físico-química do processo de destilação. Dividiremos essa seção de acordo com a ordem das investidas sobre o problema que fizemos ao longo dessa investigação, a começar pelos valores obtidos com a solução do sistema de equilíbrio de Moré.

Os resultados obtidos com a rotina, para cada um dos casos que veremos, podem ser consultados na íntegra no anexo deste trabalho.

4.4.1 Estimativas iniciais do sistema de equilíbrio de Moré

Iniciamos nossa investigação fornecendo ao algoritmo o vetor inicial \mathbf{x}_0 com os seguintes valores para as variáveis que o constituem:

$$\begin{aligned}
 t_0 &= 107.76, & t_1 &= 102.68, & t_2 &= 97.71, & t_3 &= 96.57, & t_4 &= 94.26, \\
 t_5 &= 89.98, & t_6 &= 83.97, & t_7 &= 78.32, & t_f &= 89, \\
 v_0 &= 886.37, & v_1 &= 910.01, & v_2 &= 922.52, & v_3 &= 926.45, & v_4 &= 935.56, \\
 v_5 &= 952.83, & v_6 &= 975.73 \\
 x_{01} &= 0.09203, & x_{02} &= 0.908, & x_{11} &= 0.1819, & x_{12} &= 0.8181, & x_{21} &= 0.284, \\
 x_{22} &= 0.716, & x_{31} &= 0.3051, & x_{32} &= 0.6949, & x_{41} &= 0.3566, & x_{42} &= 0.6434, \\
 x_{51} &= 0.468, & x_{52} &= 0.532, & x_{61} &= 0.6579, & x_{62} &= 0.3421, & x_{71} &= 0.8763, \\
 x_{72} &= 0.1234, \\
 \pi_0 &= 1210, & \pi_1 &= 1200, & \pi_2 &= 1190, & \pi_3 &= 1180, & \pi_4 &= 1170, \\
 \pi_5 &= 1160, & \pi_6 &= 1150, & \pi_7 &= 1140, \\
 b &= 693.37, & d &= 442.13, & q &= 8386200.
 \end{aligned}$$

Tabela 4.3: Estimativas iniciais para o problema de otimização.

Os valores iniciais para t_i , x_{ij} e v_i correspondem aos valores encontrados com a solução do sistema de equilíbrio de Moré, conforme Seção 3.2. Os demais, que não eram variáveis antes mas são agora, correspondem aos valores dado por Moré, conforme (3.2.1).

Vejamos alguns valores obtidos pelo `MatLab`:

$$\begin{aligned}
 t_f &= 25.01 \\
 d &= 368.03 \\
 q &= 8386200.06 \\
 fval &= 377.39 && (4.4.1) \\
 exitflag &= 4 \text{ (magnitude da direção procurada menor que a especificada)} \\
 firstorderopt &= 4.5e - 005 \\
 Max\ constraint &= 9.313e - 009
 \end{aligned}$$

O algoritmo exibiu bandeira 4, o que implica que a otimização foi finalizada pois a magnitude da direção procurada ficou menor que a definida na opção `TolX`. Isso pode significar que o algoritmo encontrou um ponto estacionário, que pode ser de mínimo ou não. A saída `firstorderopt` nos mostra que a condição necessária de primeira ordem (sistema KKT) está satisfeita dentro da precisão 10^{-5} e o valor atingido `Max constraint` informa que a solução obtida pelo algoritmo satisfaz as restrições do problema.

Comparando-se o valor da função objetivo obtido

$$f(\dots, \underbrace{25.01}_{t_f}, \dots, \underbrace{8386200.06}_q) = 377.39,$$

com o valor da função calculada nas variáveis anteriores à otimização,

$$f(\dots, \underbrace{89}_{t_f}, \dots, \underbrace{8386200}_q) = 450.10,$$

observa-se que o algoritmo conseguiu reduzir o custo. No entanto, o valor da variável q , principal responsável pelo valor da função f , praticamente não se alterou, enquanto que t_f , atingiu seu limite mínimo.

Não podemos nos contentar com o valor de f obtido, sem levar em consideração a influência das demais variáveis no processo de destilação. Ou seja, precisamos validar o resultado obtido.

Preparando alguns gráficos para ajudar na visualização, a começar pelas temperaturas nos estágios $i = 0, \dots, 7$ (Figura 4.2), vemos que estas estão de acordo com que se espera para o processo de destilação, ou seja, temperaturas acima de 100°C para que água e metanol entrem em ebulição na base da coluna, e temperaturas por volta de 64.4°C (temperatura de ebulição do metanol à pressão de 1 atm) no topo.

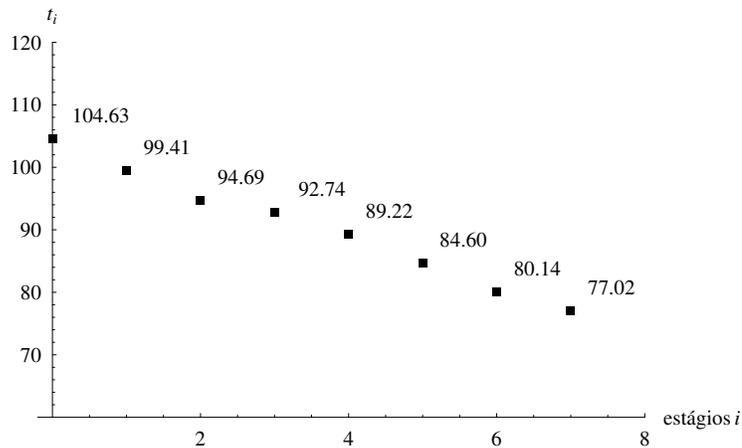


Figura 4.2: Gráfico das temperaturas para cada estágio i .

A porcentagem molar do líquido x_{ij} que escorre pela coluna nos dá idéia de como o metanol vai se purificando a cada estágio. A Figura 4.3 mostra as composições obtidas

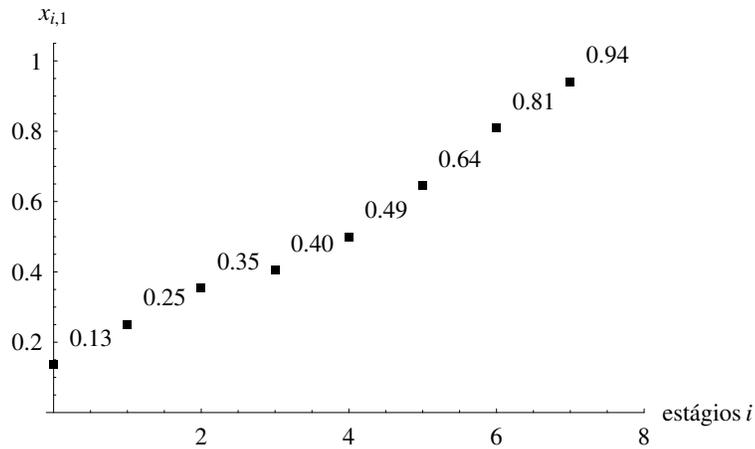


Figura 4.3: Gráfico das composições molares do metanol em cada estágio i .

com a otimização da função f . Vale dizer que a porcentagem de metanol do destilado que sai da coluna é de 94.11%.

Para os vapores, era esperado que o volume aumentasse a cada estágio. No entanto, conforme podemos observar na Figura 4.4, temos uma diminuição do volume na passagem do segundo para o terceiro estágio, ou seja, do primeiro prato para o prato de alimentação $i = k = 2$. Isso possivelmente ocorreu devido à minimização do valor da variável t_f . Do ponto de vista do processo de destilação, se a temperatura da carga de alimentação for muito inferior à temperatura do prato de alimentação, a massa da carga irá absorver calor da coluna e reduzir o volume de vapor nesse estágio e, conseqüentemente, nos estágios posteriores.

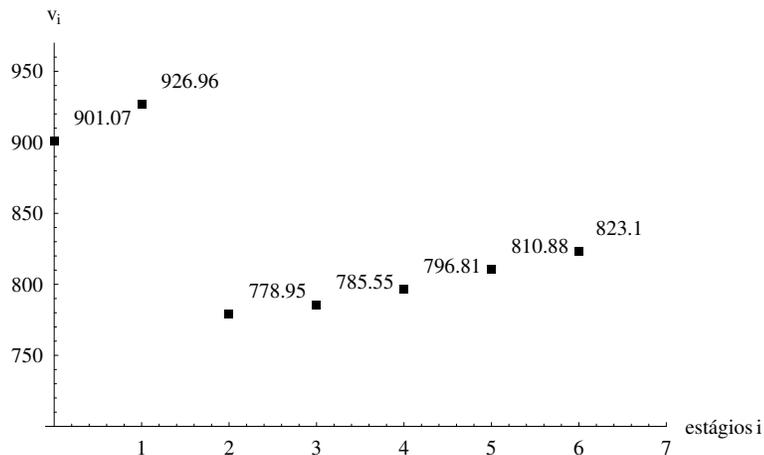


Figura 4.4: Gráfico dos vapores para cada estágio i .

Do ponto de vista matemático, colocando v_2 em função de t_f na equação

$$h_f + v_{i-1}H_{i-1} + l_{i+1}h_{i+1} = v_iH_i + l_ih_i,$$

para $i = 2$, podemos ver, por meio de seu gráfico (Figura 4.5) que essa massa de vapor é maior quanto maior for a temperatura da carga de alimentação. A linearidade aparente do gráfico dessa função, é devido simplesmente a uma questão de escala, pois a função $v_2 = v(t_f)$ é quadrática em t_f . Esses termos quadráticos decorrem da definição de h_f , como pode ser visto na Seção 3.1. As demais variáveis foram mantidas constantes para que pudéssemos ver a relação dessas duas variáveis.

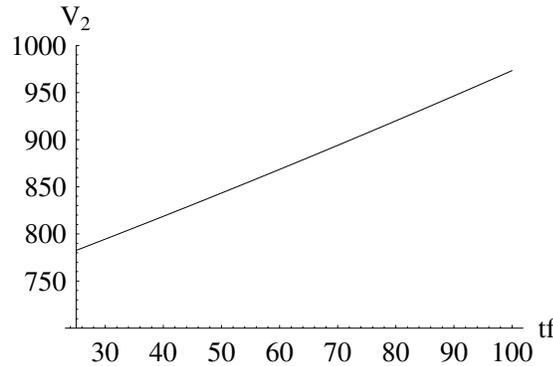


Figura 4.5: Gráfico do vapor v_2 em função da temperatura t_f da carga de alimentação.

Outra observação importante na solução do problema é que a quantidade de destilado diminuiu em relação ao valor inicial. Assim, se fizermos uma relação entre custo e destilado, temos

$$\frac{\text{custo}}{\text{destilado}} = \frac{377.39}{368.03} = 1.02543,$$

que corresponde ao custo por unidade de destilado.

Contudo, esperávamos que o algoritmos exibisse *flag 1*, que indica que a solução satisfaz as condições de primeira ordem de otimalidade. Portanto, vamos ajustar nosso problema e prosseguir com a investigação.

4.4.2 Estimativas iniciais do sistema de equilíbrio de Moré com escalamento das equações

Numericamente, quando se opera com grandezas de ordem muito distintas pode-se perder valores significativos do problema. Moré, em seu artigo, já sugeria um escalamento das equações de equilíbrio de seu sistema. Apesar de termos acatado sua sugestão para a resolução do sistema (ver Seção 4.1), não a consideramos para o caso anterior. No entanto, vamos considerá-la agora e analisar sua influência na solução obtida para o problema.

De acordo com Moré, multiplicamos as equações de balanço de material: (3.1.2), (3.1.3), (3.1.5) e (3.1.6), por 0.01 e as equações de balanço de calor: (3.1.10), (3.1.13), (3.1.14) e (3.1.15), por 10^{-6} . Como incluímos uma equação a mais, a equação (3.1.9), ao sistema de equilíbrio, multiplicamos essa por 0.01.

Fazendo então os ajustes sugeridos nas equações do conjunto admissível do problema, o algoritmo nos devolveu o resultado abaixo:

$$\begin{aligned}t_f &= 25.01 \\d &= 368.07 \\q &= 8386200.06 \\fval &= 377.39 \\exitflag &= 5 \text{ (magnitude da derivada direcional menor que a especificada)} \\firstorderopt &= 4.5e - 005 \\Max\ constraint &= 9.313e - 009,\end{aligned}\tag{4.4.2}$$

Ou seja, o resultado é semelhante, exceto pela bandeira. Assim, pensamos em escalar também a função objetivo pois contém variáveis de ordem de grandeza bastante distintas. Multiplicamos então a função por 10^{-6} , visto que Moré usa esse fator para escalar a equação (3.1.10) (equação de balanço de calor do estágio zero), que também contém a

variável q , de maior ordem da função objetivo. Com isso, obtivemos o seguinte resultado:

$$\begin{aligned}
 t_f &= 88.945 \\
 d &= 442.19 \\
 q &= 8386200 \\
 fval &= 450.04 \\
 exitflag &= 4 \text{ (magnitude da direção procurada menor que a especificada)} \\
 firstorderopt &= 4.1239e - 007 \\
 Max\ constraint &= 3.725e - 009,
 \end{aligned}
 \tag{4.4.3}$$

Apesar do valor da função objetivo ter aumentado em relação ao resultado anterior, tem-se que o custo por litro de destilado,

$$\frac{\text{custo}}{\text{destilado}} = \frac{450.04}{442.19} = 1.0178,$$

melhorou, pois também aumentou a quantidade de destilado.

Novamente, o valor de q não se alterou. Isso implica, como pode ser visto no resultado (4.4.3), que o valor de t_f foi o responsável por levar o valor de f para cima e por isso, outras alterações importantes também ocorreram, a começar pelo comportamento dos vapores, como pode ser visto no gráfico da Figura 4.6.

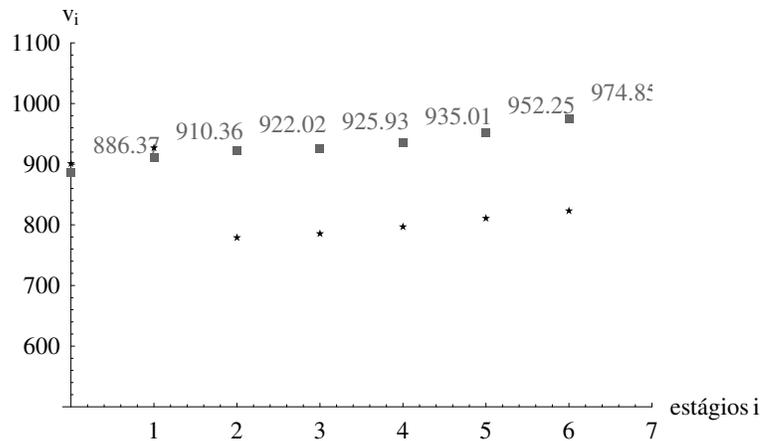


Figura 4.6: O gráfico mostra as massas de vapor v_i do primeiro caso (com estrelas) e deste caso (com retângulos), para cada estágio i .

Observe que neste caso não ocorreu o fenômeno da redução da massa de vapor do

prato de alimentação para o prato imediatamente superior. A entrada da carga de alimentação com temperatura próxima à temperatura do prato de alimentação consome menos energia e conseqüentemente há maior produção de vapor.

As temperaturas, para cada estágio de destilação, são mais altas comparadas com o resultado anterior, conforme podemos observar na Figura 4.7.

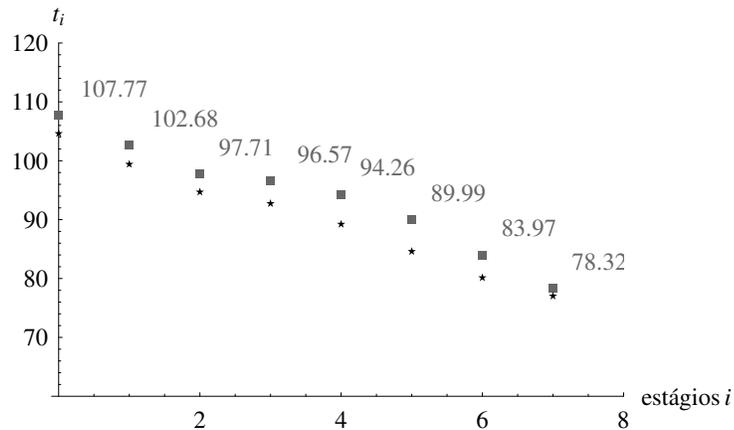


Figura 4.7: Gráfico mostrando as temperaturas t_i do primeiro caso (com estrelas) e deste caso (com retângulos) para cada estágio i .

No entanto, as composições molares do metanol no líquido que escorre pela coluna, em cada estágio de destilação, foram menores na otimização dessa nova formulação do problema quando comparada também com a otimização do problema na formulação inicial (ver Figura 4.8).

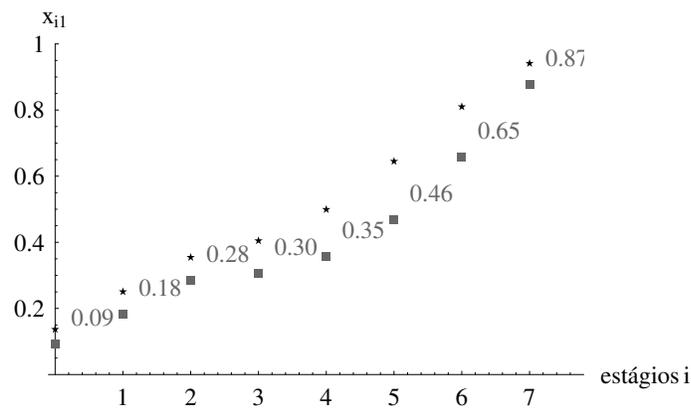


Figura 4.8: Gráfico mostrando as composições molares do metanol, para cada estágio i , obtidas com a otimização da função f no primeiro caso (estrelas) e caso atual (retângulos).

As pressões, por sua vez, permanecem praticamente com os mesmos valores de suas estimativas iniciais, ou seja, com os valores propostos por Moré.

Percebemos com esses dois casos que a rotina não conseguiu minimizar o valor q e que t_f tem uma relação direta com as massas de vapor na seção de retificação. Além disso, percebemos que o escalamento das restrições e da função objetivo afetam a otimização do problema. Portanto, nos fizemos o seguinte questionamento: Será que existe uma calibração ideal do problema que nos leve a obter uma solução satisfatória dos pontos de vista matemático e físico-químico? Na busca da resposta a esse questionamento, chegamos nos resultados que seguem na próxima seção.

4.4.3 A influência do escalamento

Para melhor visualizar como as equações estão sendo escaladas, vamos reescrever o problema que estamos otimizando e incluir esses escalares.

$$\begin{array}{l} \text{Minimizar } f(\mathbf{x}) = b_1 \cdot \left\{ c_1 \cdot q + c_2 \left[\frac{1000}{4.2} (f_1^l \cdot c_m + f_2^l \cdot c_a) (t_f - t_0) \right] \right\} \\ \text{restrita a} \end{array}$$

$$\begin{aligned}
& b_2.[l_1x_{1,j} - v_0y_{0,j} - bx_{0,j}] = 0 \quad \text{para } j = 1, 2 \\
& b_2.[f_j^l + v_{i-1}y_{i-1,j} + l_{i+1}x_{i+1,j} - v_iy_{i,j} - l_ix_{i,j}] = 0 \quad \text{para } j = 1, 2 \text{ e } i = 2 \\
& b_2.[f_j^v + v_{i-1}y_{i-1,j} + l_{i+1}x_{i+1,j} - v_iy_{i,j} - l_ix_{i,j}] = 0 \quad \text{para } j = 1, 2 \text{ e } i = 3 \\
& b_2.[v_{i-1}y_{i-1,j} + l_{i+1}x_{i+1,j} - v_iy_{i,j} - l_ix_{i,j}] = 0 \quad \text{para } j = 1, 2 \text{ e } i = 1, 3, 4, 5, 6 \\
& b_3.[y_{6,j} - x_{7,j}] = 0 \quad \text{para } j = 1, 2 \\
& b_4.[l_1h_1 + q - v_0H_0 - bh_0] = 0 \\
& b_5.[v_{i-1}H_{i-1} + l_{i+1}h_{i+1} - v_iH_i - l_ih_i] = 0 \quad \text{para } i = 1, 3, 4, 5, 6 \\
& b_5.[h_f + v_{i-1}H_{i-1} + l_{i+1}h_{i+1} - v_iH_i - l_ih_i] = 0 \quad \text{para } i = 2 \\
& b_5.[H_f + v_{i-1}H_{i-1} + l_{i+1}h_{i+1} - v_iH_i - l_ih_i] = 0 \quad \text{para } i = 3 \\
& b_6. \left[\sum_{j=1}^2 y_{ij} - 1 \right] = 0 \quad \text{para } i = 1, \dots, 7 \\
& b_7. \left[\sum_{j=1}^2 (f_j^v + f_j^l) - d - b \right] = 0 \\
& 0 \leq t_i \leq 200 \quad \text{para } i = 0, \dots, 7 \\
& 0 \leq t_f \leq 200 \\
& 500 \leq v_i \leq 1000 \quad \text{para } i = 0, \dots, 6 \\
& 0 \leq x_{ij} \leq 1 \quad \text{para } j = 1, 2 \text{ e } i = 0, \dots, 7 \\
& 760 \leq \pi_i \leq 2000 \quad \text{para } i = 0, \dots, 6 \\
& 0 \leq b \leq 1135.5 \\
& 0 \leq d \leq 1135.5 \\
& 1000000 \leq q \leq 15000000
\end{aligned}$$

Dois resultados valem a pena ser apresentados para incrementar a discusso da in-
fluncia do escalamento. O primeiro deles, corresponde ao problema escalado com as
seguintes constantes:

$$\begin{aligned}
& b_1 = 10^{-4}, \quad b_2 = 10^{-3} \\
& b_3 = 1, \quad b_4 = 10^{-8} \\
& b_5 = 10^{-3}, \quad b_6 = 10^{-3} \\
& b_7 = 1,
\end{aligned}$$

a qual produziu o seguinte resultado:

$$\begin{aligned}t_f &= 88.555 \\d &= 441.74 \\q &= 8386200 \\fval &= 449.6 \\exitflag &= 0 \text{ (excedeu o número de avaliação da função)} \\firstorderopt &= 0.94954 \\Max\ constraint &= 9.332e - 007.\end{aligned}\tag{4.4.4}$$

A temperatura t_f , o destilado d e função objetivo tiveram uma pequena alteração, diferentemente das demais variáveis. No entanto, o algoritmo exibiu *flag 0* pois excedeu o número de avaliações da função. Além disso, as condições de primeira ordem não foram adequadamente satisfeitas.

O segundo e melhor resultado obtido da otimização desse problema, deu-se com o seguinte escalamento:

$$\begin{aligned}b_1 &= 10^{-8}, \quad b_2 = 10^{-4}, \\b_3 &= 1, \quad b_4 = 10^{-8}, \\b_5 &= 10^{-6}, \quad b_6 = 10^{-2}, \\b_7 &= 10^{-2},\end{aligned}$$

com o qual obteve-se os resultados,

$$\begin{aligned}t_f &= 88.945 \\d &= 442.19 \\q &= 8386200 \\fval &= 450.04 \\exitflag &= 1 \text{ (satisfaz as condições de otimalidade)} \\firstorderopt &= 4.1239e - 009 \\Max\ constraint &= 1.863e - 009.\end{aligned}\tag{4.4.5}$$

Observe que o algoritmo exibiu agora *flag 1*, que significa que as condições de otimalidade de primeira ordem foram satisfeitas. Além disso, a violação das restrições são tão pequenas ($Max\ constraint=1.863e-009$) quanto o valor do *firstorderopt* (que é

4.1239e-009). Contudo, os demais valores são praticamente idênticos aos obtidos na Seção 4.4.2, conforme resultado (4.4.3). Os que diferem um pouco, apresentam essa diferença na casa dos centésimos.

Outros escalamentos, além dos apresentados, foram experimentados e exceto pelas bandeiras, que se alternavam entre *flag 4* e *flag 5*, os valores das variáveis ficaram praticamente idênticos aos do resultado (4.4.5) os quais, a não ser pela casa dos décimos de algumas variáveis, são idênticos aos respectivos valores dados ao algoritmo como estimativas iniciais. Ou seja, o ponto encontrado é praticamente idêntico à solução que obtivemos para o sistema de equilíbrio proposto por Moré.

Com esses resultados, portanto, concluímos que os vários escalamentos para esse problema pouco influenciaram na convergência do algoritmo, embora tenhamos notado que o não escalamento tenha conduzido o algoritmo para uma solução diferente (Seção 4.4.1). Contudo, a estimativa inicial do vetor das variáveis do problema pode estar contribuindo para essa acomodação da solução, principalmente se essa estimativa for, ou estiver muito próxima de um ponto de atração do problema.

Como a nossa estimativa inicial para as variáveis é, em parte, solução de um sistema de equilíbrio construído com quase todas as equações que constituem o conjunto admissível do nosso problema de otimização, e noutra parte, pelos valores dados por Moré a esse sistema, é de se esperar que esse ponto seja de grande atração do método e possa estar conduzindo o algoritmo para a mesma solução, independentemente do escalamento tomado. É claro que, quando dizemos “independentemente do escalamento”, estamos nos referindo a escalares que de fato visam equiparar a ordem de grandeza das equações do problema.

Diante dessa hipótese, uma perturbação das variáveis iniciais foi testada. Os resultados seguem na próxima seção.

4.4.4 Utilizando uma nova estimativa inicial para as variáveis

Mantendo o mesmo escalamento da seção anterior, mas fornecendo ao algoritmo o vetor inicial arbitrário cujo valor das componentes é dado pela Tabela 4.4, obtivemos os

$$\begin{array}{ccccccccc}
t_0 = 90, & t_1 = 90, & t_2 = 90, & t_3 = 90, & t_4 = 90, & & & & & \\
t_5 = 90, & t_6 = 90, & t_7 = 90, & t_f = 90, & v_0 = 800, & & & & & \\
v_1 = 800, & v_2 = 800, & v_3 = 800, & v_4 = 800, & v_5 = 800, & & & & & \\
v_6 = 800, & x_{01} = 0.5, & x_{02} = 0.5, & x_{11} = 0.5, & x_{12} = 0.5, & & & & & \\
x_{21} = 0.5, & x_{22} = 0.5, & x_{31} = 0.5, & x_{32} = 0.5, & x_{41} = 0.5, & & & & & \\
x_{42} = 0.5, & x_{51} = 0.5, & x_{52} = 0.5, & x_{61} = 0.5, & x_{62} = 0.5, & & & & & \\
x_{71} = 0.5, & x_{72} = 0.5, & \pi_0 = 1400, & \pi_1 = 1400, & \pi_2 = 1400, & & & & & \\
\pi_3 = 1400, & \pi_4 = 1400, & \pi_5 = 1400, & \pi_6 = 1400, & \pi_7 = 1400, & & & & & \\
b = 500, & d = 400, & q = 12.10^6 & & & & & & &
\end{array}$$

Tabela 4.4: Estimativas iniciais arbitrárias para as variáveis do problema de otimização.

seguintes resultados:

$$\begin{aligned}
t_f &= 26.21 \\
d &= 613.22 \\
q &= 6253700 \\
fval &= 282.79 && (4.4.6) \\
exitflag &= 1 \text{ (satisfaz as condições de otimalidade)} \\
firstorderopt &= 3.9853e - 009 \\
Max\ constraint &= 4.657e - 009.
\end{aligned}$$

Observe que as saídas da rotina que indicam se o ponto encontrado satisfaz as condições de otimalidade do problema (`exitflag`, `firstorderopt`, `Max constraint`), validam os resultados obtidos do ponto de vista matemático. Além disso, a perturbação no ponto inicial fez com que o algoritmo encontrasse uma nova solução para o problema de otimização.

Observe que neste caso, tanto a variável t_f quanto a q , foram minimizadas e conseqüentemente, foi reduzido o valor da função objetivo. Temos agora que

$$f(\dots, \underbrace{26.21}_{t_f}, \dots, \underbrace{6253700}_q) = 282.79.$$

Também obtivemos um valor maior para o destilado. Assim, o custo por unidade de destilado ficou igual a

$$\frac{\text{custo}}{\text{destilado}} = \frac{282.79}{613.22} = 0.4610$$

reais por unidade de destilado.

Porém, esses bons resultados não se estenderam para as demais variáveis. Os vapores repetiram o mesmo comportamento de redução da massa de vapor no prato de alimentação, além de apresentarem valores bem menores quando comparados com os valores obtidos usando o ponto inicial de Moré (como passaremos a denominar o conjunto das estimativas iniciais formado pelas variáveis obtidas com a solução do sistema de equilíbrio de Moré e pelos valores dados por este às variáveis que acrescentamos no nosso problema), conforme pode-se observar na Figura 4.9.

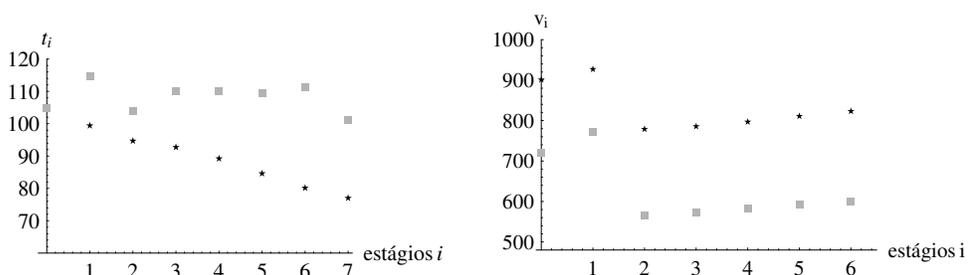


Figura 4.9: Os gráficos mostram os resultados das temperaturas e dos vapores obtidos na otimização usando o ponto inicial de Moré (estrela) e o ponto arbitrário (retângulos).

As temperaturas, além de valores maiores que os obtidos anteriormente, apresentaram comportamento atípico para uma coluna de destilação. Conforme pode-se observar na Figura 4.9, as temperaturas estão aumentando e diminuindo ao longo da coluna, contradizendo o que era esperado, a saber, uma seqüência decrescente de temperaturas.

As pressões, que até o momento não variavam, também apresentaram valores fora dos padrões. Primeiramente, os valores estão muito altos, o que pode vir a causar problemas hidráulicos na coluna (conforme apresentado na Seção 2.6.3 deste trabalho) e, posteriormente, por apresentar um comportamento oscilatório, conforme mostra a Figura 4.10.

Para finalizar e comprovar definitivamente que essa solução não satisfaz o que se esperava de um processo de destilação, embora matematicamente tenha sido o melhor resultado obtido até momento, basta acompanhar a composição molar do metanol para cada estágio da coluna, na Figura 4.11. O gráfico mostra que a coluna não está destilando o metanol corretamente, inclusive, em certo ponto, ele até perde pureza, o que pode indicar um arraste de líquido pelo vapor conforme descrevemos na Seção 2.6.3. Além disso, o volume de vapor que chega ao topo e a quantidade de destilado que sai da coluna

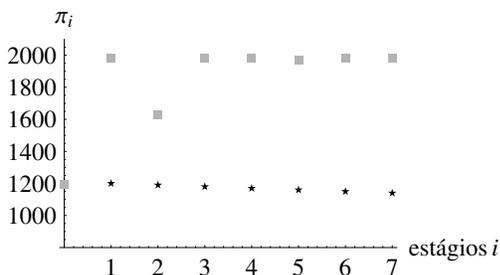


Figura 4.10: Gráfico mostrando os valores das pressões em cada estágio i obtidos na otimização do problema, primeiramente usando o ponto inicial de Moré (em estrela) e posteriormente, com um ponto arbitrário (em retângulos).

não são compatíveis.

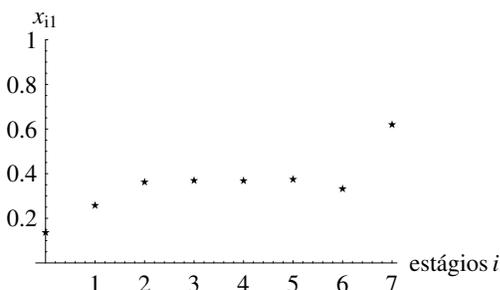


Figura 4.11: Gráfico mostrando a composição molar do metanol para cada estágio i de destilação.

No entanto, embora o resultado não tenha sido satisfatório do ponto de vista do processo de destilação, ele nos mostrou que o algoritmo conseguiu escapar da atração do ponto de Moré. Assim, talvez seja uma questão de ajustar o escalamento e/ou incluir mais algumas restrições para “amarrar” melhor as variáveis a fim de obtermos um resultado satisfatório de forma geral.

4.4.5 Inserindo restrições ao refluxo

Na literatura, encontramos que a taxa de refluxo,

$$r = \frac{l_7}{d},$$

em geral, varia entre 1.1 e 1.4 (ver [23]), ou seja,

$$1.1 \leq r \leq 1.4.$$

Ela é responsável por manter o equilíbrio da coluna e garantir maior grau de pureza do destilado. Portanto, resolvemos inserir essa condição por meio das duas inequações que seguem

$$\begin{aligned} v_6 - 2.4 d &\leq 0 \\ 2.1 d - v_6 &\leq 0, \end{aligned} \tag{4.4.7}$$

Essas inequações decorrem do fato de $l_7 = v_6 - d$ e $r = \frac{l_7}{d}$, donde resulta na desigualdade

$$2.1 \leq \frac{v_6}{d} \leq 2.4,$$

e conseqüentemente em (4.4.7).

Tomamos para essas duas inequações um escalamento por 10^{-2} e obtivemos os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} t_f &= 28.1828 \\ d &= 265.63 \\ q &= 6638133.45 \\ fval &= 302.33 \\ exitflag &= 1 \text{ (satisfaz as condições de otimalidade)} \\ firstorderopt &= 4.0769e - 009 \\ Max\ constraint &= 8.382e - 009. \end{aligned} \tag{4.4.8}$$

De acordo com os valores de `firstorderopt` e de `Max constraint`, temos que o vetor solução dado pelo algoritmo satisfaz as condições do problema. O valor da função objetivo é o melhor dos valores válidos encontrados até agora. Analisando a razão entre custo e destilado, podemos ter uma noção melhor de quanto esse valor é significativo para o processo. Nesse caso, essa razão é

$$\frac{302.33}{265.63} = 1.138.$$

A otimização conseguiu minimizar os valores de t_f e de q . A temperatura t_f ficou próxima do mínimo, e portanto, alterou as massas de vapor na seção de retificação (ver Figura 4.12), semelhante ao resultado obtido na otimização do problema usando o ponto inicial de Moré, conforme vimos na Seção 4.4.1.

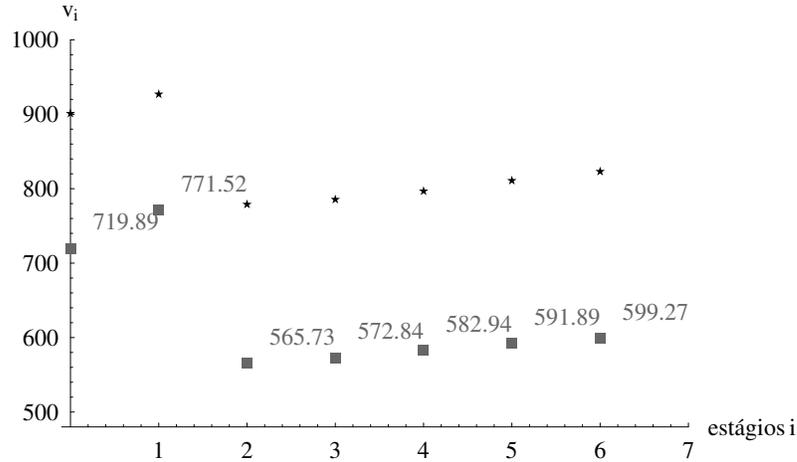


Figura 4.12: Gráfico mostrando os vapores v_i encontrados na otimização do problema que inclui as inequações do refluxo (retângulos) e da otimização do problema na formulação inicial usando o ponto inicial de Moré (estrelas).

As inequações das condições de refluxo inseridas no conjunto admissível garantiram melhor desempenho da coluna, conforme se observa analisando a composição molar do metanol em cada estágio i da coluna (ver Figura 4.13).

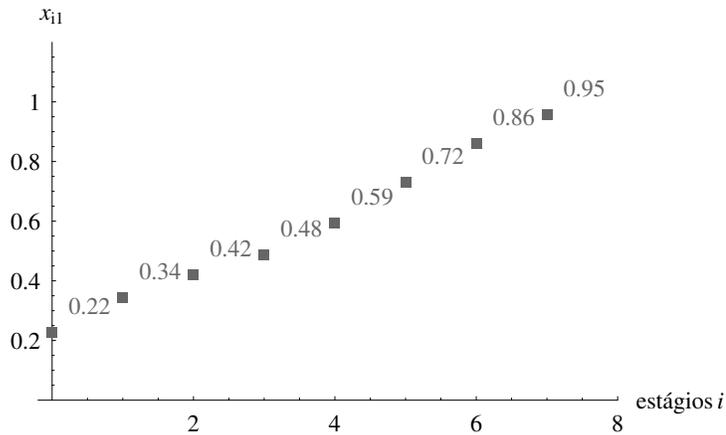


Figura 4.13: O gráfico mostra os resultados obtidos na otimização do problema para a composição molar do metanol em cada estágio i .

As temperaturas, apesar da diminuição da energia do refeedor, apresentaram val-

ores mais altos comparados com os valores obtidos nas otimizações anteriores. Por exemplo, uma comparação com os valores obtidos usando o ponto inicial de Moré, é mostrada na Figura 4.14.

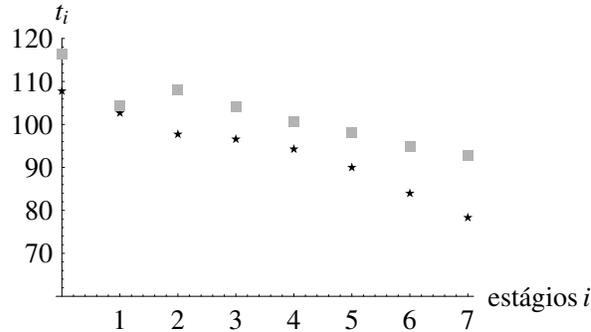


Figura 4.14: O gráfico mostra os valores das temperaturas em cada estágio i da coluna obtidos da otimização usando ponto inicial de Moré e escalamento do problema (estrela) e da otimização usando ponto inicial arbitrário e condição para o refluxo.

Ainda pela Figura 4.14, percebe-se que a temperatura t_1 (temperatura do prato imediatamente abaixo do prato de alimentação) sofreu uma redução drástica e logo depois, no estágio $i = 2$, voltou a subir e seguiu o padrão dos demais casos. Fazendo uma análise superficial, esse fato pode estar relacionado com a temperatura t_f da carga de alimentação que ocorre no estágio $i = 2$. Possivelmente, como o valor de t_f é baixo, a carga de alimentação absorve energia térmica ao entrar na coluna e, além da diminuição do volume de vapor que sobe para o próximo prato (conforme Figura 4.12), ocorre um aumento do líquido que escorre para o prato do estágio $i = 1$, que acaba provocando uma queda de temperatura nesse estágio. Talvez isso também justifique o alto valor de produto de fundo, a saber, $b = 869.87$.

Os valores das pressões podem também estar relacionados com esse comportamento das temperaturas. Observe, na Figura 4.15, que a pressão no estágio $i = 1$ também sofre uma redução e volta a aumentar no estágio $i = 2$, assim como as temperaturas. Em seguida, há uma leve queda e depois volta a subir, mostrando uma certa tendência a se estabilizar. Além disso, a pressão de cada estágio é fortemente influenciada pela temperatura e pelo volume de vapor, que conforme podemos observar nas Figuras 4.14 e 4.12, apresentam comportamento que justifica os valores das pressões.

Em suma, a inserção das duas inequações (4.4.7) ao conjunto admissível, propor-

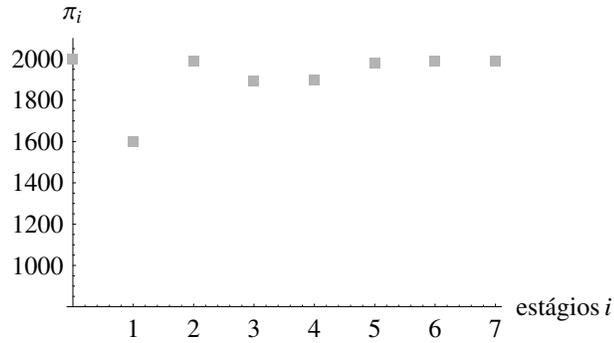


Figura 4.15: Gráfico com os valores das pressões em cada estágio i da coluna.

cionou uma dinâmica diferente do processo. Dizer que os valores encontrados são adequados ou não para uma coluna de destilação, foge do nosso alcance. No entanto, apesar de não ser o objetivo desse trabalho, é sabido que as indústrias que utilizam colunas para retificar metanol, desejam obtê-lo com maior grau de pureza possível, como por exemplo a Barralcool, que requer um grau de pureza de 99.98%. Assim, dos resultados obtidos até o momento, foi com essa formulação do problema que o melhor grau de pureza do destilado foi alcançado (95% de pureza), apesar de seu volume ter diminuído. O valor da função custo energético, o qual propomos minimizar, parece fazer mais sentido quando relacionamos com o volume de destilado, como fizemos em todos os casos. Portanto, numa última tentativa de aprimorarmos o problema, resolvemos modificar a função objetivo, inserindo o destilado de tal forma que ao invés de termos uma função custo energético, tenhamos a função custo energético por unidade de destilado. Ou seja, a nova função objetivo tem a seguinte formulação:

$$g(\mathbf{x}) = \frac{c_1 \cdot q + c_2 \left[\frac{1000}{4.2} (f_1^l \cdot c_m + f_2^l \cdot c_a) (t_f - t_0) \right]}{d}, \quad (4.4.9)$$

onde \mathbf{x} é definido conforme (4.3.11).

O objetivo é fazer com que o algoritmo, na busca por um valor mínimo de f , maximize o valor do destilado que, por sua vez, como está relacionado com as inequações (4.4.7), possa influenciar sobre o volume dos vapores na seção de retificação e com isso, estabilizar as pressões. Os resultados encontrados dessa nova formulação do problema seguem na próxima seção.

4.4.6 A função custo por unidade

Para nos referirmos a essa nova formulação do problema de otimização, daqui por diante, trataremos como o problema da função custo por unidade. Os resultados obtidos com a otimização desse problema são:

$$\begin{aligned}t_f &= 25.01 \\d &= 307.87 \\q &= 7414800 \\fval &= 1.0838 \\exitflag &= 1 \text{ (satisfaz as condições de otimalidade)} \\firstorderopt &= 1.4593e - 011 \\Max\ constraint &= 3.725e - 009.\end{aligned}\tag{4.4.10}$$

Primeiramente, observe que a medida `firstorderopt` é melhor que o resultado obtido anteriormente (ver resultado 4.4.8) e que a violação das restrições, indicada pela saída `Max constraint`, é tão pequena quanto a outra. Além disso, a bandeira 1 nos diz que o ponto encontrado pelo algoritmo está satisfazendo as condições de otimalidade de primeira ordem.

Diante das informações sobre o ponto encontrado, vamos comparar os resultados com o caso anterior, a começar pelo valor da função objetivo.

Como tratam-se de funções diferentes, vamos deduzir o valor do custo energético anterior através da relação

$$g(\mathbf{x}) = \frac{f(\mathbf{x})}{d},$$

onde $f(\mathbf{x})$ é a função custo energético definida em (4.3.1). Daí, como $d = 307.87$ e $g(\mathbf{x}) = 1.0838$, tem-se

$$f(\mathbf{x}) = 333.67,$$

isto é, o valor da função f é maior que o resultado anterior. Isso ocorre porque o aumento da variável q contribui mais para o aumento do valor de f do que a diminuição de t_f consegue reduzi-lo. Aliás, t_f encostou no limitante inferior.

Por outro lado, quando analisamos o custo por unidade, tem-se que

$$g(\mathbf{x}) = 1.0838,$$

é menor que o custo anterior.

As temperaturas dos estágios da coluna, nessa nova formulação do problema, também repetiram o mesmo comportamento do resultado anterior, mas de forma menos acentuada conforme podemos observar na Figura 4.16.

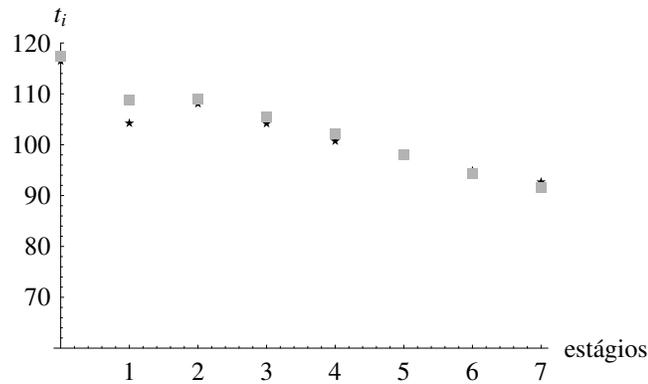


Figura 4.16: Gráfico dos valores das temperaturas em cada estágio i da coluna para a otimização incluindo as inequações do refluxo (estrelas) e para a otimização da nova formulação do problema (retângulos).

Os vapores também repetiram o mesmo comportamento (ver Figura 4.17), no entanto, o volume em cada estágio aumentou, o que pode justificar o volume maior de destilado no topo.

Suavizados também ficaram os valores das pressões, mas a oscilação dos valores nos primeiros estágios da coluna se repetiu, estabilizando-se do estágio $i = 3$ em diante (ver Figura 4.18). Além disso, a pressão no estágio $i = 2$ atingiu o limite máximo estabelecido para essa variável.

Porém, aumentando um pouco esse limite (de 2000 para 2100), obtivemos, além de diferentes valores para as pressões, alteração das demais variáveis, e inclusive da função objetivo.

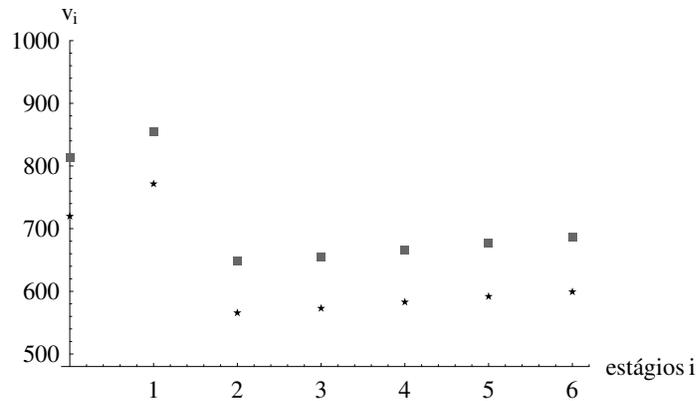


Figura 4.17: Gráfico dos valores dos vapores em cada estágio i da coluna para a otimização incluindo as inequações do refluxo (estrelas) e para a otimização da nova formulação do problema (retângulos).

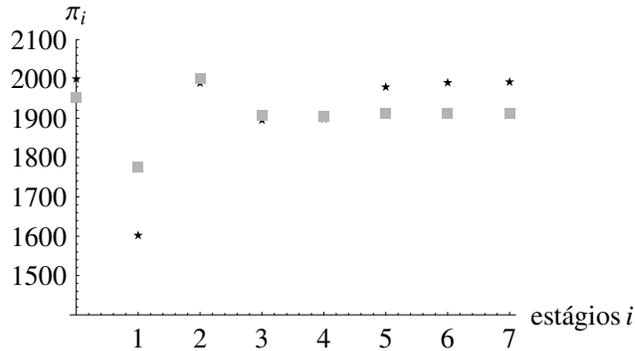


Figura 4.18: O gráfico mostra os valores das pressões em cada estágio i da coluna obtidos na otimização que inclui as inequações do refluxo (estrelas) e na otimização da nova formulação do problema (retângulos).

A saída da rotina para essa nova situação é a seguinte:

$$\begin{aligned}
 t_f &= 25.01 \\
 d &= 328.95 \\
 q &= 7494500 \\
 fval &= 1.0253 \\
 exitflag &= 1 \text{ (satisfaz as condições de otimalidade)} \\
 firstorderopt &= 1.1917e - 011 \\
 Max\ constraint &= 7.451e - 009.
 \end{aligned}
 \tag{4.4.11}$$

Observe que o valor da função objetivo foi minimizado ainda mais. O valor de t_f

continuou o mesmo, embora desta vez, a rotina não tenha acusado que essa variável encostou no limitante inferior. Nenhuma das pressões, com essa folga de 100 unidades, encostou no limitante superior, como pode ser observado na Figura 4.19. Vale a pena dizer que $\pi_2 = 2095.82 < 2100$.

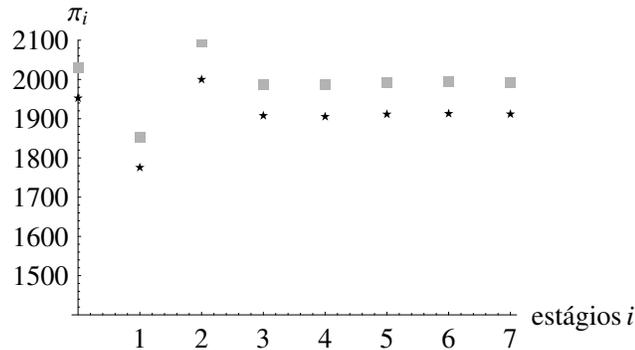


Figura 4.19: O gráfico mostra os valores das pressões em cada estágio i da coluna obtidos na otimização que inclui as inequações do refluxo (estrelas) e na otimização da nova formulação do problema com aumento dos limitantes das pressões (retângulos).

Vapores e temperaturas também tiveram um pequeno aumento, como pode ser observado no Anexo deste trabalho, mas mantiveram o mesmo comportamento visto nas Figuras 4.17 e 4.16.

A composição molar do metanol em cada estágio diminuiu, em particular, a x_{71} (a composição molar do destilado), baixou para 0.9246, enquanto que no caso anterior, seu valor era de 0.9459.

A nova formulação da função objetivo, embora não tenha eliminado, parece ter suavizado os picos encontrados nos valores das variáveis obtidos na otimização anterior.

A otimização desse novo problema usando o ponto inicial de Moré resultou nos mesmos valores das variáveis obtidos na formulação anterior a essa, conforme pode ser observado comparando as saídas dos dois casos colocadas no anexo, exceto é claro, pelo valor da função objetivo, já que agora seu valor expressa custo energético por unidade de destilado.

Assim, como essa nova formulação do problema não altera os resultados obtidos anteriormente com o ponto inicial de Moré, mas é fundamental para a sua otimização partindo de um ponto arbitrário, tomaremos essa nova função como base para discutir os resultados da nossa investigação numérica. Para isso, apresentaremos na forma de

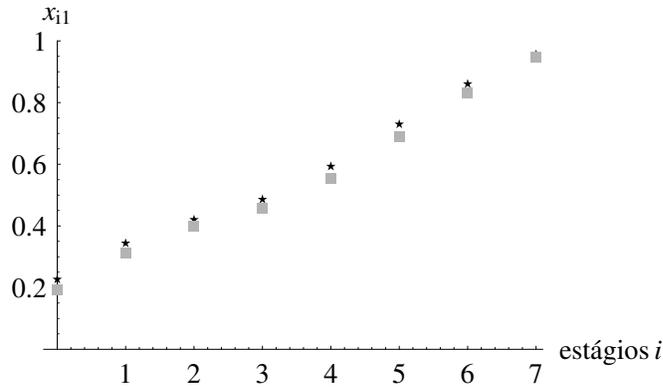


Figura 4.20: O gráfico mostra os valores da composição molar do metanol em cada estágio i da coluna obtidos na otimização que inclui as inequações do refluxo (estrelas) e na otimização da nova formulação do problema com aumento dos limitantes das pressões (retângulos).

tabela todos os resultados obtidos nas várias investidas sobre o problema e as principais características de cada um.

Tabela 4.5: Tabela resumo dos resultados da investigação numérica.

TENTATIVA	RESULTADOS	PRINCIPAIS CARACTERÍSTICAS
0 valores iniciais	$t_f = 89$ $d = 442.13$ $q = 8386200$ $fval = 450.10$ $\frac{custo}{dest} = 1.0178$	Esses são os dados iniciais do problema a serem otimizados. Em especial, o valor da função objetivo ($fval$).
1	$t_f = 25.01$ $d = 368.03$ $q = 8386200.06$ $fval = 377.39$ $flag = 4$ $\frac{custo}{dest} = 1.0254$	A t_f atingiu o limite inferior. Redução das demais temperaturas. Composição do destilado de 94.11%. Redução do vapor no estágio $i = 2$ e manteve o comportamento nos demais.
2	$t_f = 25.01$ $d = 368.07$ $q = 8386200.06$ $fval = 377.39$ $flag = 5$	Nessa tentativa, foram escaladas as equações do conjunto admissível. O resultado é semelhante, exceto pela bandeira.

TENTATIVA	RESULTADOS	PRINCIPAIS CARACTERÍSTICAS
3	$t_f = 88.945$ $d = 442.19$ $q = 8386200$ $fval = 450.04$ $flag = 4$ $\frac{custo}{dest} = 1.0178$	Aqui, além das equações, também foi escalada a função objetivo. Os valores se aproximaram das estimativas iniciais fornecidas às variáveis do problema.
4	$t_f = 88.555$ $d = 441.74$ $q = 8386200$ $fval = 449.6$ $flag = 0$	Testando outros escalamentos para o conjunto admissível, obteve-se este resultado. Este é o pior resultado entre as tentativas realizadas.
5	$t_f = 88.555$ $d = 441.74$ $q = 8386200$ $fval = 449.6$ $flag = 0$	Com o melhor escalamento encontrado o algoritmo encontrou uma solução que satisfaz as condições de otimalidade. A solução coincide com o ponto inicial de Moré.
6	$t_f = 26.21$ $d = 613.22$ $q = 6253700$ $fval = 282.70$ $flag = 1$ $\frac{custo}{dest} = 0.4610$	Utilizando um ponto arbitrário, o algoritmo encontrou uma solução diferente da anterior. Porém, não satisfaz as relações físico-químicas do processo. Pela primeira vez, o valor de q variou significativamente.
7	$t_f = 28.18$ $d = 265.63$ $q = 6638133.45$ $fval = 302.33$ $flag = 1$ $\frac{custo}{dest} = 1.138$	Foi inserida uma condição para o refluxo. Isso corrigiu alguns problemas físico-químicos. Porém manteve-se o comportamento oscilatório em torno do prato de alimentação e o custo por unidade aumentou.
8	$t_f = 25.01$ $d = 307.87$ $q = 7414800$ $fval = 1.0838$ $flag = 1$	Transformando a função objetivo em uma função custo por unidade de destilado, melhorou o resultado. No entanto, uma das pressões encostou no limitante superior.
9	$t_f = 25.01001$ $d = 328.95$ $q = 7494500$ $fval = 1.0253$ $flag = 1$	Com o aumento dos limitantes superiores das pressões, nenhuma variável encostou nos limitantes. O valor da função objetivo diminuiu. Suavizou o comportamento oscilatório das variáveis em torno do prato de alimentação.

4.5 Síntese da análise numérica

Em geral, nos clássicos problemas de otimização encontrados nos livros didáticos, quando encontramos um ou mais pontos do conjunto admissível tais que o valor da função objetivo seja mínimo, dizemos que encontramos a solução do problema.

No entanto, num problema onde as variáveis envolvidas devem satisfazer certas relações físico-químicas, isso não é tão direto. A solução do nosso problema deve, além de minimizar a função objetivo, satisfazer os aspectos físico-químicos da coluna de destilação. Nesse sentido, tanto o resultado da otimização do problema usando o ponto inicial de Moré

$$\frac{f(\cdots, \underbrace{88.975}_{t_f}, \cdots, \underbrace{8386200}_q)}{d} = \frac{450.04}{442.19} = 1.0178,$$

quanto o resultado obtido usando um ponto arbitrário,

$$g(\cdots, \underbrace{25.01001}_{t_f}, \cdots, \underbrace{328.95}_d, \underbrace{7494500}_q) = 1.0253$$

são soluções do problema (4.4.5). Matematicamente, elegeríamos o primeiro desses resultados como o melhor, mas do ponto de vista do processo de destilação, devemos olhar também para outros valores, como por exemplo, a composição molar do destilado, o que também é almejado por usinas que retificam metanol. Assim, sintetizaremos as principais características observadas.

Nos resultados obtidos com o ponto inicial de Moré, variáveis como temperatura, vapor e pressão, apresentam um comportamento com melhor consistência em relação a um processo de destilação, como podemos observar pelos gráficos comparativos das Figuras 4.21 e 4.22.

Por sua vez, as composições molares neste caso são maiores em todos os estágios da coluna quando comparadas ao resultado dessas na otimização com o ponto inicial de Moré (ver Figura 4.23). Logo, tem-se destilado com menor grau de pureza.

Já os resultados obtidos da otimização com o ponto arbitrário, mostram-se mais elevados e com alguns picos, como podemos observar nas Figuras 4.21 e 4.22. Embora, não tenhamos condições de afirmar se esses valores são ou não impraticáveis, podemos dizer que são “aceitáveis”. Além disso, um processo de destilação baseado em tais

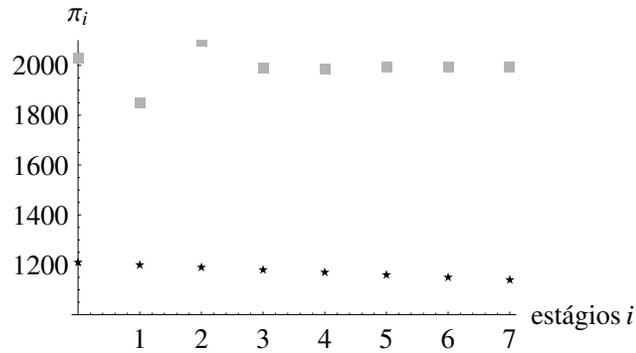


Figura 4.21: Gráfico da pressão para cada estágio i da coluna obtidos na otimização da função g usando o ponto inicial de Moré (estrela) e o ponto arbitrário (retângulos).

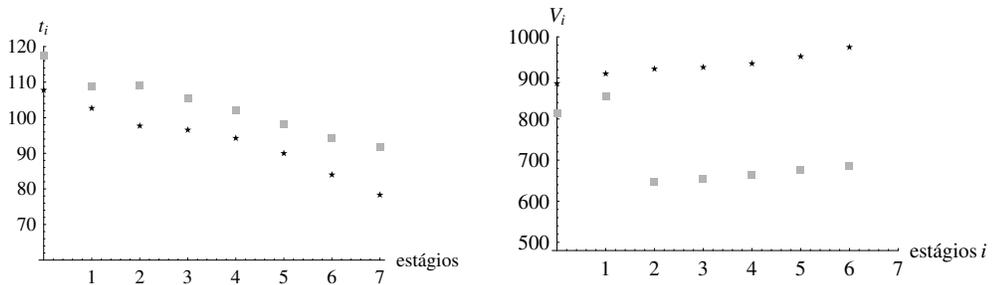


Figura 4.22: Os gráficos mostram as temperaturas e os vapores para cada estágio i da coluna obtidos na otimização da função g usando o ponto inicial de Moré (estrela) e o ponto arbitrário (retângulos).

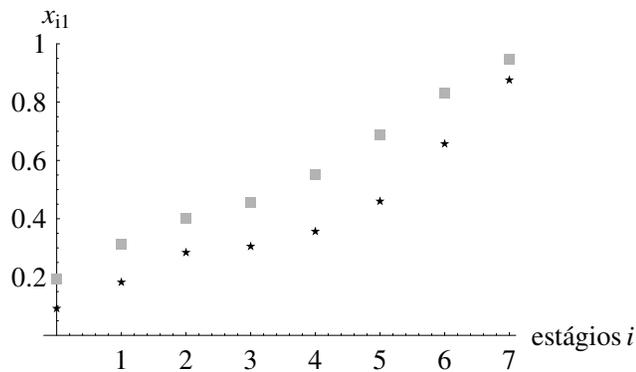


Figura 4.23: Gráfico da composição molar do metanol para cada estágio i da coluna obtidos na otimização da função g usando o ponto inicial de Moré (estrela) e o ponto arbitrário (retângulos).

resultados dispensaria o aquecimento da carga de alimentação e obteria destilado com maior grau de pureza, embora tenha um custo energético maior para cada unidade

produzida.

Portanto, concluímos que é possível otimizar problemas de destilação restritos a condições de equilíbrio através de uma abordagem via multiplicadores de Lagrange. Quanto a afirmar qual das respostas obtidas com a nossa investigação numérica é uma solução efetiva do problema, deixaremos em aberto, assim como fez Moré com seu sistema de equilíbrio, para que outros, a partir deste trabalho, possam avançar e acrescentar mais condições a fim de eliminar qualquer suspeita sobre a viabilidade físico-química da solução.

Considerações Finais

Baseados no artigo de Moré (ver [24]), formulamos um problema de otimização que consiste na minimização de uma função f , que fornece o custo energético para destilar metanol numa coluna de destilação com oito estágios, e restrito a várias condições de equilíbrio. No decorrer do desenvolvimento da investigação numérica, realizada com o *software* `MatLab` e sua rotina `fmincon`, nos deparamos com algumas particularidades do problema e a necessidade de diversos ajustes.

Desde o princípio da otimização do problema percebemos a necessidade de um escalamento do seu conjunto admissível, visto que este era composto por equações (restrições) com variáveis de grandezas distintas. Essa mesma idéia foi usada também para a função objetivo, como pode ser visto através dos resultados expostos na Seção 4.4.1. O escalamento mostrou-se fundamental, porém não necessitamos de uma análise rigorosa para chegar na melhor escolha para os escalares do problema. Para essa conclusão, foram testados várias combinações de escalares (que fizessem sentido de serem usadas) para o escalamento do problema. Embora para cada escalamento usado, o algoritmo fosse encerrado por algum outro motivo que não o de ter satisfeito a condição de otimalidade do problema dentro da tolerância especificada (*flag 1*), os resultados praticamente não variavam de um escalamento para outro, como podemos ver pelos resultados 4.4.4 e 4.4.5, que são o pior e o melhor dos resultados conseguidos após vários escalamentos. Apesar das *flags* distintas de 1, os valores do `firstorderopt` e do `Max constraint` indicavam que o ponto encontrado poderia ser tomado como uma solução do problema. Contudo, essa convergência, independente de um ajuste fino dos escalares, pode ter sido uma consequência das estimativas iniciais às variáveis do problema fornecidas ao algoritmo, que consistem em parte, nos valores encontrados para a solução do sistema de equilíbrio de Moré (ver Seção 4.1), e o restante, com os valores dado por ele às variáveis

que acrescentamos ao problema. Essa estimativa passou a ser chamada de ponto inicial de Moré.

Na formulação do nosso problema de otimização foram incluídas algumas variáveis que Moré tomara como constantes de entrada em sua tentativa de resolução de seu sistema não linear, formulado com equações de equilíbrio para o processo de destilação do metanol-8. Moré não conseguiu resolver esse sistema, mas nós tivemos sucesso, trabalhando no **Maxima** (rotina `mnewton`). Esse sucesso nos levou à formulação de um problema de otimização, o qual inclui em seu conjunto admissível todas as equações de equilíbrio do sistema de Moré. Conseqüentemente, quando inicializávamos o algoritmo com o ponto inicial de Moré, ele não conseguia melhorar o valor da função objetivo, pois encontrava-se muito próximo do ponto que satisfazia sua condição de otimalidade, ou seja, de um ponto atrator do problema. Esse talvez seja o motivo que pelo qual o problema não tenha necessitado de um ajuste tão fino do escalamento.

Assim, aceitamos definitivamente que o ponto inicial de Moré, encontrado por nós com o uso do *software* **Maxima**, consistia na solução do nosso problema de otimização. No entanto, Moré tomou arbitrariamente valores para elementos essenciais na formulação do sistema como por exemplo, destilado, produto de fundo, temperatura da carga de alimentação e por meio do sistema, procurou por valores para as demais variáveis de forma que se cumprissem as condições de equilíbrio da coluna. Em outras palavras, essas variáveis deveriam se ajustar aos dados de entrada fornecidos por Moré. Mas como garantir a viabilidade desses dados de entrada? Esse motivo nos levou a tornar variáveis algumas das constantes utilizadas por Moré. Além disso, de acordo com o que vimos na coluna de destilação da usina Barralcool, valores altos para a variável t_f , temperatura da carga de alimentação da coluna, parecem não ser praticáveis, como também parecem não ser praticáveis valores baixos para a porcentagem molar do destilado, x_{71} , como são encontrados na solução de Moré. Portanto, gostaríamos de ter encontrado um ponto que não fosse igual ao de Moré, embora tenhamos percebido ser praticamente impossível que o algoritmo encontrasse outro ponto se continuássemos fornecendo o ponto inicial de Moré, ou seja, se continuássemos fornecendo um ponto que satisfazia as condições de otimalidade do problema. Nesse sentido é que prosseguimos nossa investigação utilizando então um ponto arbitrário para que o algoritmo “escapasse” do campo de atração do ponto de Moré.

Com as novas estimativas iniciais (ver Tabela 4.4) o algoritmo conseguiu encontrar um ponto viável satisfazendo as condições de otimalidade do problema e que fosse diferente do ponto de Moré, conforme podemos ver no resultado 4.4.6. Porém, se tratando de um problema físico-químico, a validação dos valores obtidos para as variáveis do problema é tão importante quanto o valor ótimo da função objetivo. Assim, embora tenhamos conseguido reduzir o valor da função objetivo, as demais variáveis invalidaram essa solução, pois apresentaram um comportamento completamente atípico para um processo de destilação. Um exemplo disso pode ser visualizado no gráfico das temperaturas na Figura 4.24.

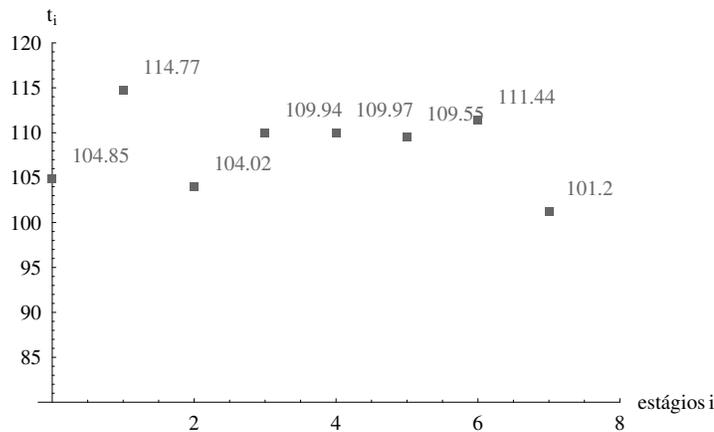


Figura 4.24: Gráfico das temperaturas obtidas na otimização da função g usando um ponto inicial arbitrário.

Esses novos valores nos levaram a uma reflexão sobre nosso conjunto de restrições do problema. Começamos a pensar até que ponto as restrições impostas ao problema garantiriam uma solução que atendesse às exigências físico-químicas da coluna de destilação, e em quais poderíamos tentar inferir alguma alteração para melhorar a solução. Cruzando alguns valores obtidos, percebemos que a quantidade de vapor que chegava até o topo seria insuficiente para gerar a quantidade de destilado que estava saindo (veja a Tabela 4.6).

vapor	526.8
destilado	613.22

Tabela 4.6: Valores do vapor que atinge o condensador e do destilado obtidos com a otimização da função f , utilizando o ponto arbitrário como estimativa inicial.

Percebemos então, que o destilado d relaciona-se com o vapor v_6 (que chega ao

condensador) somente por meio da relação

$$l_7 = v_6 - d,$$

onde l_7 é o líquido que retorna ao topo da coluna (refluxo). Pelos valores obtidos, temos que $l_7 < 0$. Assim, no processo de destilação, ao invés desse líquido escorrer pela coluna, de cima para baixo, ele estaria subindo pela coluna, o que não faz nenhum sentido. Logo, percebemos que seria necessário garantir que isso não acontecesse. Indo mais além, na literatura (ver [23]) encontramos que a taxa de refluxo,

$$r = \frac{l_7}{d},$$

deve variar entre 1.1 e 1.4 para garantir um bom grau de pureza do destilado. Portanto, a inclusão dessa condição, além de melhorar a quantidade de destilado, poderia também melhorar a composição molar de metanol. Isso resultou no acréscimo de duas inequações:

$$v_6 - 2.4 d \leq 0 \quad \text{e} \quad 2.1 d - v_6 \leq 0,$$

ao conjunto admissível do nosso problema, que agora é formado por 32 restrições de igualdade e 18 restrições de desigualdade.

Os valores das variáveis obtidos com essa nova formulação foram bastante satisfatórios do ponto de vista físico-químico do processo de destilação, exceto para as pressões, que apresentaram um comportamento oscilatório, conforme pode ser visto na Figura 4.15. Houve também uma queda da temperatura no estágio $i = 1$ (Figura 4.14) e da quantidade de vapor no estágio $i = 2$ (Figura 4.12), mas como mostramos, foram afetadas pela diminuição da temperatura de alimentação feita neste estágio. No entanto, essa condição fez com que o volume de destilado diminuísse em relação aos volumes obtidos nos resultados anteriores e, conseqüentemente, o custo por unidade aumentou.

O custo por unidade de destilado foi adotado como uma medida que calibrou a análise ao longo da investigação, pois tornou-se difícil avaliar o quão bom era o valor da função objetivo encontrado, já que os valores mudavam a todo momento. Essa idéia que surgiu para ajudar a avaliar o resultado constituiu-se na estratégia para recuperar o valor do destilado perdido com a inclusão da condição do refluxo.

Desta vez, ao invés de alterar o conjunto admissível, alteramos a função objetivo. Convertemos a função *custo energético* em uma função *custo por unidade de destilado*. Isso vinha sendo feito com os valores obtidos após cada otimização da função custo, simplesmente dividindo o valor encontrado pelo valor de destilado. Na nova formulação, o destilado passa a fazer parte da função objetivo, e por estar no denominador da expressão que queremos minimizar, seu valor deve ser maximizado.

A otimização dessa nova formulação do problema nos rendeu resultados ainda melhores, principalmente para a função objetivo, o que implica que o valor do destilado foi maior. O aumento do destilado também fez com que aumentasse o volume de vapor na seção de retificação. Em suma, os valores conseguidos com a otimização dessa nova versão do problema foram melhores que os da versão anterior. O comportamento das pressões, constatado no caso anterior, se repetiu mas de forma bem mais suave, como pode ser visto na Figura 4.19. Uma das pressões encostou no limitante superior. Foi dada então um folga maior para o intervalo das pressões e com isso, o problema foi resolvido.

Percebemos que o aumento da intervalo das pressões fez com que essas, as temperaturas e os vapores tivessem um pequeno aumento nos seus valores, mas mantiveram o mesmo comportamento apresentado no último resultado.

Para finalizar, acreditamos que um estudo mais detalhado das relações físico-químicas do processo de destilação possa apontar novas condições a serem acrescentadas na forma de restrições adicionais ao problema. No entanto, para este trabalho, dentro das nossas limitações de tempo, e por que não dizer, de conhecimentos físico-químicos, temos a certeza que cumprimos nosso objetivo a contento. O desafio de ir a campo e construir um problema de otimização associado a um modelo real foi, de alguma maneira, vencido. As dificuldades enfrentadas no decorrer do processo não podem ser deixadas de lado. Uma coisa é resolver um problema-modelo de um livro-texto, outra, bastante diferente, é formular um problema para então tentar resolvê-lo, sobretudo quando envolve questões relacionadas a sigilo industrial. O uso que fizemos dos pacotes computacionais também merece destaque. Por um lado, dispor de uma rotina que resolva o problema em questão é algo cômodo, mas, por outro lado, encará-la como uma “caixa-preta” não nos permitiu interagir mais com o procedimento adotado. Certamente, conhecer mais sobre o método utilizado é algo que fugiu ao escopo desse trabalho, mas que também seria bastante

enriquecedor para a própria análise dos resultados. De qualquer forma, esperamos que esse texto sirva de motivação ao leitor e estímulo a novas investidas.

Anexo

Seguem em anexo, as saídas da rotina `fmincon` para cada escalamento das restrições do problema que foram discutidos no corpo deste trabalho.

```

z =
Columns 1 through 9
104.63 99.417 94.694 92.74 89.229 84.607 80.14 77.026 25.01
Columns 10 through 18
901.07 926.96 778.95 785.55 796.81 810.88 823.1 0.13666 0.86334
Columns 19 through 27
0.25056 0.74944 0.35444 0.64556 0.40475 0.59525 0.49932 0.50068 0.645
Columns 28 through 36
0.355 0.81008 0.18992 0.94113 0.058873 1183.8 1198.9 1183.8 1181.6
Columns 37 through 43
1171.5 1161.9 1152.5 1145 767.47 368.03 8.3862e+006

fval =
377.39

exitflag =
4

```

Figura 4.25: Dados de saída da rotina `fmincon` mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Aqui foram fornecidos ao algoritmo, como estimativas iniciais, os valores encontrados na solução do sistema de equilíbrio de Moré.

```

Columns 1 through 9
107.77 102.68 97.716 96.578 94.266 89.995 83.979 78.324 88.945
Columns 10 through 18
886.71 910.36 922.02 925.93 935.01 952.25 974.85 0.092259 0.90774
Columns 19 through 27
0.1822 0.6178 0.28423 0.71577 0.30529 0.69471 0.35657 0.64343 0.46762
Columns 28 through 36
0.53238 0.65717 0.34283 0.87584 0.12416 1210.1 1199.9 1190 1180
Columns 37 through 43
1170 1160 1150 1140 1140 693.31 442.19 8.3862e+006
fval =
0.00045004
exitflag =
4

```

Figura 4.26: Dados de saída da rotina `fmincon` mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Aqui, além das estimativas iniciais, também foram escaladas as restrições de acordo com Moré.

```

Columns 1 through 9      107.76      102.67      97.7      96.556      94.24      89.964      83.954      76.315      88.555
Columns 10 through 18   886.76      910.45      921.09      925.02      934.12      951.35      973.88      0.092473      0.90753
Columns 19 through 27   0.18255      0.81745      0.28461      0.71539      0.30578      0.69422      0.35725      0.64275      0.46854
Columns 28 through 36   0.53146      0.65811      0.34189      0.8763      0.1237      1210.1      1199.9      1189.9      1179.9
Columns 37 through 43   1170      1160      1150      1140      693.76      441.74      8.3862e+006
fval =
    0.04496
exitflag =
    0

```

Figura 4.27: Dados de saída da rotina `fmincon` mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Para este resultado foi utilizado um escalamento diferente do sugerido por Moré, mas foram mantidas as mesmas estimativas iniciais propostas por ele.

```

x =
Columns 1 through 9
107.77    102.68    97.716    96.578    94.266    89.995    83.979    78.324    88.945
Columns 10 through 18
886.71    910.36    922.02    925.93    935.01    952.25    974.85    0.092259    0.90774
Columns 19 through 27
0.1822    0.8178    0.28423    0.71577    0.30529    0.69471    0.35657    0.64343    0.46762
Columns 28 through 36
0.53238    0.65717    0.34283    0.87584    0.12416    1210.1    1199.9    1190    1180
Columns 37 through 43
1170    1160    1150    1140    693.31    442.19    8.3862e+006
fval =
4.5004e-006
exitflag =
1

```

Figura 4.28: Dados de saída da rotina `fmincon` mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Para este resultado foi utilizado o melhor ajuste dos escalares e vetor inicial de Moré.

```

Columns 1 through 9
104.85 114.77 104.02 109.94 109.97 109.55 111.44 101.24 26.211

Columns 10 through 18
712.84 707.59 533.63 530.88 530.83 531.5 526.8 0.13628 0.86372

Columns 19 through 27
0.25769 0.74231 0.3623 0.6377 0.36936 0.63064 0.36845 0.63155 0.37447

Columns 28 through 36
0.62553 0.33217 0.66783 0.6198 0.3802 1191.6 1984.4 1629 1982.1

Columns 37 through 43
1981.6 1970.5 1981.1 1981.3 522.28 613.22 6.2537e+006

ival =
2.8279e-006

exitflag =
1

```

Figura 4.29: Dados de saída da rotina `fmincon` mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Para este resultado foi utilizado o escalamento anterior mas com um vetor inicial arbitrário.

```

Columns 1 through 9
116.48      104.24      104.17      108.08      100.72      98.048      94.867      92.673      28.183

Columns 10 through 18
719.89      771.52      572.94      565.73      582.94      591.89      599.27      0.22688      0.77312

Columns 19 through 27
0.34403      0.65597      0.57955      0.42045      0.48606      0.51394      0.5931      0.4069      0.72996

Columns 28 through 36
0.27004      0.86062      0.95583      0.13938      0.044174      2000      1602.1      1989.6      1895.3

Columns 37 through 43
1898.5      1979.4      1992.2      1990.5      869.87      265.63      6.6381e+006

fval =
3.0233e-006

exitflag =
1

```

Figura 4.30: Dados de saída da rotina `fmincon` mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Esses dados foram obtidos com a otimização do problema com inclusão de duas inequações no conjunto admissível.

```

Columns 1 through 9      117.35    106.75    109      105.45    102.11    98.115    94.338    91.652    25.01
Columns 10 through 18   812.92    855.18    647.91    655.19    665.15    676.61    686.41    0.19336    0.80664
Columns 19 through 27   0.31289    0.68711    0.40065    0.59935    0.45567    0.54433    0.55258    0.44742    0.6885
Columns 28 through 36   0.3115    0.83277    0.16723    0.94592    0.054081    1952.5    1775.6    2000    1907.8
Columns 37 through 43   1905.4    1911.4    1913    1911.8    827.63    307.87    7.4148e+006
fval =
1.0638e-008
exitflag =
1

```

Figura 4.31: Dados de saída da rotina `fmincon` mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Esses dados foram obtidos com a otimização da função g restrita ao conjunto admissível inicial adicionado com as condições do refluxo.

```

Columns 1 through 9
119.2 110.64 110.91 107.78 105.1 101.29 96.952 93.386 25.01
Columns 10 through 18
820.69 864.21 653.51 659.13 667.43 678.91 690.79 0.18237 0.81763
Columns 19 through 27
0.29987 0.70013 0.39049 0.60951 0.42769 0.57231 0.50209 0.49791 0.62381
Columns 28 through 36
0.37619 0.7794 0.2206 0.92465 0.075351 2031.1 1851.3 2095.8 1987.9
Columns 37 through 43
1985.9 1992.1 1993.5 1992.5 806.55 328.95 7.4945e+006
fval =
1.0253e-008
exitflag =
1

```

Figura 4.32: Dados de saída da rotina `fmincon` mostrando os valores de todas variáveis do problema, da função objetivo e da bandeira exibida pelo algoritmo. Esses dados foram obtidos com a otimização da função g restrita ao conjunto admissível inicial adicionado com as condições do refluxo e aumento dos limitantes dos vapores.

Referências Bibliográficas

- [1] AGÊNCIA BRASIL, *Primeira usina integrada de biodiesel e álcool é inaugurada no Mato Grosso*. Disponível em: <http://www.agenciabrasil.gov.br/noticias/2006/11/21/materia.2006-11-21.9932096957/view>. Acesso em: 12/12/2007.
- [2] ANTON, H. *Cálculo: Um Novo Horizonte*. Volume 2, (Sexta edição), Trad.: C. C. Patarra e M. Tamanaha. Porto Alegre: Editora Bookman, 2000.
- [3] APOSTOL, T. M. *Calculus*. Volume 2, (Segunda edição), New York: John Wiley & Sons, 1969.
- [4] BARRALCOOL, *Usina Barralcool S/A*. Disponível em: <http://www.barralcool.com.br/index.htm>. Acesso em: 12/12/2007.
- [5] BOLDRINI, J. L., COSTA, S. I. R., FIGUEIREDO, V. L. e WETZLER, H. G. *Álgebra Linear* (Terceira edição), São Paulo: Editora Harbra, 1986.
- [6] BORTOLOSSI, H. J. *Cálculo Diferencial a Várias Variáveis: Uma Introdução à Teoria de Otimização*, Rio de Janeiro: Editora PUC-Rio, 2002.
- [7] CALDAS, J. N., LACERDA, A. I., VELOSO, E. e PASCHOAL, L. C. M. *Internos de Torres: pratos e recheios*, (Segunda edição), Rio de Janeiro: Interciência: Petrobras, 2007.
- [8] CARDOSO, D. *Metanol abala marketing do biodiesel*, disponível em: <http://agenciact.mct.gov.br/index.php/content/view/42173.html>. Acesso em: 27/11/2007.
- [9] FLETCHER, R. *Practical methods of optimization*, Chichester: J. Wiley, 1987.

- [10] GUIDORIZZI, H. L. *Um Curso de Cálculo*. Volume 1, (Quinta edição), Rio de Janeiro: Editora LTC, 2001.
- [11] GUIDORIZZI, H. L. *Um Curso de Cálculo*. Volume 2, (Quinta edição), Rio de Janeiro: Editora LTC, 2001.
- [12] IZMAILOV, A. e SOLODOV, M. *Otimização: Condições de Otimalidade, Elementos de Análise Convexa e de Dualidade*, volume 1, Rio de Janeiro: IMPA, 2005.
- [13] IZMAILOV, A. e SOLODOV, M. *Otimização: Métodos Computacionais*, volume 2, Rio de Janeiro: IMPA, 2005.
- [14] KALID, R. A. *Análise em Regime Transiente de Processos Contínuos: Balanços de Massa, Energia e Momentum Aplicado a Operações Unitárias da Indústria Química*, Apostila, disponível em: http://www.lacoi.ufba.br/imagens_Lacoi/docs_pdf/CICOP305KalidAnalisedeProcessosemRegimeTransiente.pdf. Acesso em: 14/1/2008.
- [15] KALID, R. A. *Controle de Coluna de Destilação*, Apostila, disponível em: http://www.lacoi.ufba.br/imagens_Lacoi/docs_pdf/Controle%20de%20Coluna%20de%20Destilacao.pdf. Acesso em: 10/12/2007.
- [16] KUCEK, K. T. *Otimização da Transesterificação Etilica do Óleo de Soja em Meio Alcalino*, Dissertação (Mestrado em Química Orgânica), UFPR, Curitiba, 2004.
- [17] LIMA, E. L. *Álgebra Linear*. (Sétima edição). Coleção Matemática Universitária, Rio de Janeiro: IMPA, 2004.
- [18] LIMA, E. L. *Curso de Análise*. Volume 1, (Décima primeira edição). Projeto Euclides, Rio de Janeiro: IMPA, 2004.
- [19] LIMA, E. L. *Curso de Análise*. Volume 2, (Oitava edição). Projeto Euclides, Rio de Janeiro: IMPA, 2005.
- [20] LIMA, E. L. *Análise Real*. Volume 1, (Oitava edição). Coleção Matemática Universitária, Rio de Janeiro: IMPA, 2006.

- [21] LIMA, E. L. *Análise Real*. Volume 2. Coleção Matemática Universitária, Rio de Janeiro: IMPA, 2004.
- [22] MACEDO, M. U. e CARVALHO, A. *Química*. Coleção Horizontes, São Paulo: IBEP, 2001.
- [23] MARANGONI, C. *Implementação de uma Estratégia de Controle com Ação Distribuída em uma Coluna de Destilação*. Tese (Doutorado em Engenharia Química), Florianópolis, 2005.
- [24] MORÉ, J. J. *A Collection of Nonlinear Model Problems*, In: Computational Solutions of Nonlinear Systems of Equations, E.L. Allgower and K.Georg (eds.) Lectures in Applied Mathematics, 26, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1990, pp.723-762.
- [25] PÁDUA, S. G. B. *Multiplicadores de Lagrange: aspectos geométricos e algébricos e uma aplicação em engenharia química na destilação do metanol*. Dissertação (Mestrado Profissional em Matemática), UNICAMP, Campinas-SP, 2008.
- [26] PORTAL FATOR BRASIL, *Prêmios & Homenagens*. Disponível em: http://www.revistafatorbrasil.com.br/ver_noticia.php?not=16610. Acesso em: 12/12/2007.
- [27] SARGENT, R.W.H. e GAMINIBANDARA, K. *Optimum Design of Plate Distillation Columns*, In: Optimization in Action, L. C. W. Dixon (ed.) Academic Press, London, 1976.
- [28] SCHOEFFEL, G.; ARCHER, L. B.; HILGENSTIELER, M. L. e SCHMITT, S. *Destilação Fracionada*. Disponível em: http://home.furb.br/gisielly/Laboratorio_III/LabIII-Coluna_de_destila%E3o.doc. Acesso em: 09/08/2007.
- [29] SOUZA, L. C.; LOSSÁVARO, D. C.; MOTTA, L. J. M. e BARROS, M. A. S. D. *Projeto/Análise de Colunas de Destilação Binária Assistidos por Computador - Fase 1: Método McCabe-Thiele*. Disponível em: <http://www.feq.unicamp.br/~cobeqic/tMD18.pdf>. Acesso em: 21/08/2007.
- [30] STEWART, J. *Cálculo*, volume 2, (Quarta edição), Trad.: C. C. Patarra, M. Tamanaha, C. Asano e A. F. Humes. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2002.

[31] THAM, M.T. *Destilação*. Disponível em: <http://lorien.ncl.ac.uk/ming/distil/distilo.htm>. Acesso em: 24/11/2007.

Índice Remissivo

Conjunto

- admissível, 7
- compacto, 8
- convexo, 12

Desigualdade de Schwartz, 23

Extremante, 7

Função

- côncava, 14
- convexa, 13
- objetivo, 7

Hipersuperfície de nível, 6

Lagrangiano, 30

Matriz

- hessiana, 10
- Jacobiana, 39

Multiplicador de Lagrange, 24

Ponto

- crítico, 9
- fronteira, 18
- interior, 18
- máximo, 6
- mínimo, 6
- regular, 19, 41

Teorema

- da Função Implícita, 19, 21, 38
- de Karush-Kuhn-Tucker, 57
- de Weierstrass, 8
- dos Multiplicadores de Lagrange, 24, 45