

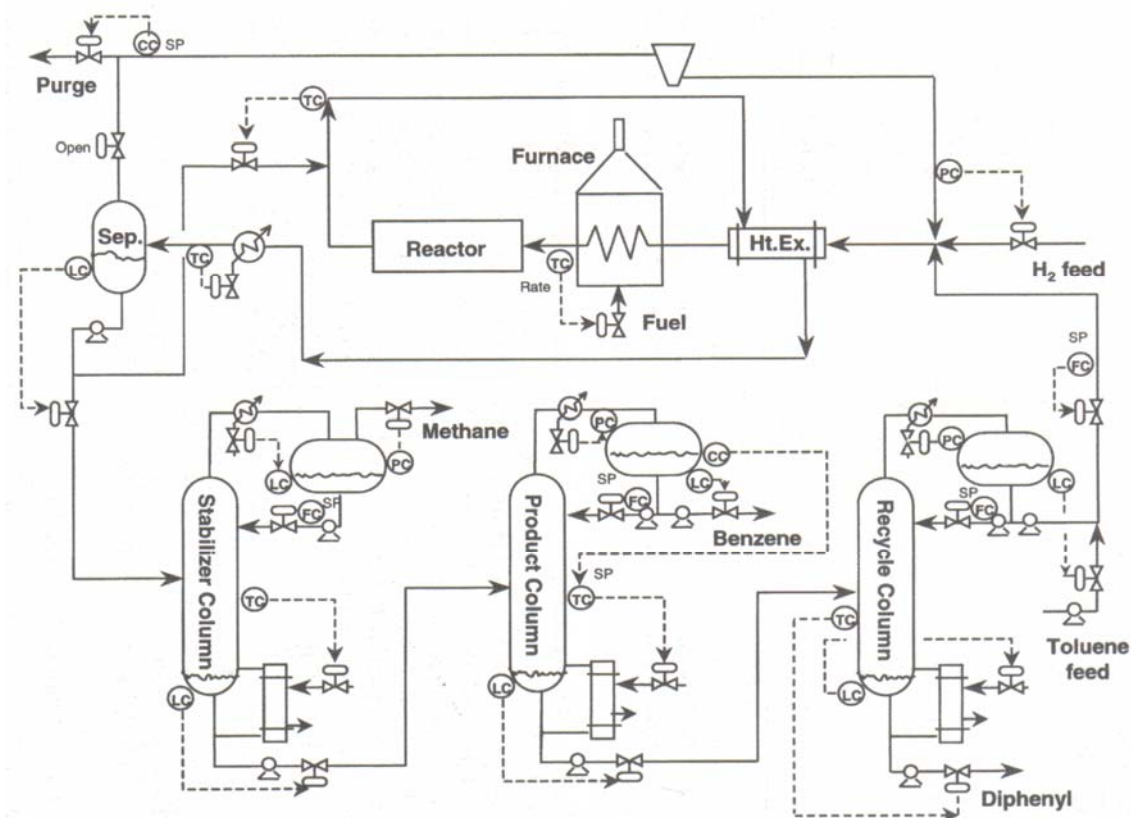


OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS: PROBLEMAS SEM RESTRIÇÕES



TREINAMENTO E CONSULTORIA

Atendimento: [71] 9984.3316
e-mail: LACOI@ufba.br
www.LACOI.ufba.br



Prof. Dr. Ricardo de Araújo Kalid – kalid@ufba.br

Departamento de Engenharia Química da UFBA



Escola Politécnica da UFBA



UFBA

CURRÍCULO DO INSTRUTOR



Ricardo de Araújo Kalid, D. Sc. 04/09/64

kalid@ufba.br

(0xx71) 3203.9811 / 9984.3316

Prof. Dept^o Engenharia Química da UFBA

Doutorado em Engenharia Química – USP (99)

Mestrado em Engenharia Química - UFBA (91)

Graduação em Engenharia Química – UFBA (88)

ÁREAS DE ATUAÇÃO E LINHAS DE PESQUISA

Simulação em Regime Estacionário e Transiente de Processos

Controle de Processos

Otimização de Processos

Simulação, Controle e Otimização de Reatores e Colunas de Destilação

OUTROS

Professor do Mestrado em Engenharia Química da UFBA

Professor (anos 92 e 93) do Curso de Especialização em Instrumentação e Controle (CEINST) promovido pelo Departamento de Engenharia Mecânica da UFBA

Professor de Cursos de Educação Continuada (Controle Avançado, Controle Preditivo Multivariável, Identificação de Processos, Otimização de Processos Químicos, Controle de Colunas de Destilação) para DOW, PETROBRAS, GRIFFIN, EDN, CIQUINE, OXITENO, COPENE.

Professor (98) do Curso de Especialização em Automação de Sistemas Industriais (CEASI) promovido pelo Dept^o de Engenharia Elétrica da UFBA

Professor e Coordenador (99) do Curso de Especialização em Controle e Automação de Processos Industriais (CECAPI) promovido pelos Dept^o de Engenharia Química e Elétrica da UFBA

Professor e Coordenador (2000 a ...) do Curso de Especialização em Instrumentação, Automação, Controle e Otimização de Processos Contínuos (CICOP 1, 2 e 3) promovido pelo Dept^o de Engenharia Química e UFBA e AINST.

PROJETOS COOPERATIVOS E/OU CONSULTORIAS PARA INDÚSTRIAS

DETEN: simulação do reator radial para desidrogenação de parafinas

EDN: participou da equipe de desenvolvimento do plano diretor de automação

COPENE: identificação de processos, sintonia de controladores industriais, simulação, controle e otimização do conversor de acetileno da ETENO II (em andamento)

PDAI-BA - Programa de Desenvolvimento da Automação Industrial, participantes: UFBA, UNIFACS, CEFET-BA, CETIND-SENAI, FIEB, SEPLANTEC, PETROBRAS, NITROCARBONO, DETEN, OXITENO, OPP, POLIBRASIL, POLITENO, COPENE

PROCESSAMENTO DE POLÍMEROS, participantes: UFBA, CETIND, BAPLASTIL

BRASKEM, POLITENO, LYONDELL, DETEN, CARAÍBA, MONSANTO: minimização do uso de água e/ou energia na indústria – otimização ambiental.

INDICADORES DE PRODUÇÃO CIENTÍFICA

Trabalhos apresentados em congressos: 20

Trabalhos publicados em periódicos: 2

Tese de mestrado defendida e aprovada: 1

Tese de doutorado defendida e aprovada: 1

Orientação de iniciação científica: 21 (concluídas) e 8 em andamento

Orientação de dissertações de mestrado: 3 defendidas e 5 (em andamento)

Trabalhos em parceria com indústrias:

N	TEMA	PARTICIPANTES	INSTITUIÇÃO	STATUS
41	Minimização do uso da água na LYONDEL	Ilvio Rocha	LYONDELL	Em desenvolvimento
		Isabel Kenny		
		Asher Kiperstok	UFBA	
		Carlos Maurício Duarte		
		Marconi Maynart		
		Angela Ferreira		
		Jadison Jafé		
		Ricardo Kalid		
40	Índices para avaliação do desempenho de malhas de controle	Flávia	CHEMTEC	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	
39	Controle de colunas de destilação	João Cunha	POLITENO	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	
38	Eficiência de caldeiras	Osmar Serra	BRASKEM	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	
37	Metodologia para análise de dados operacionais para minimização de impactos ambientais	Salvador Ávila Filho	UFBA	Concluído
		Ricardo Kalid		
36	Sistema para gestão de não-conformidades ambientais numa indústria petroquímica	Erisvaldo Cunha	DETEN	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	
35	Integração energética e minimização do uso de água na BRASKEM-UNIB ECO-BRASKEM	Sérgio Bastos	BRASKEM	Em desenvolvimento
		Hélcio Colodete		
		Moisés Silva		
		João Severiano		
		Edgar Almeida		
		Asher Kiperstok	UFBA	
		Emerson Sales		
		Ednildo Torres		
		Ricardo Kalid		
34	Otimização das colunas de destilação de 2-etil-hexanol	Wagner Mônaco	ELEKEIROZ	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	

N	TEMA	PARTICIPANTES	INSTITUIÇÃO	STATUS
33	Otimização das colunas de destilação de octanol	Wagner Mônaco	ELEKEIROZ	Concluído
		Ricardo Kalid	UFBA	
32	Otimização do sistema de separação de efluentes	Alexander Morbeck Brinker	DOW	Concluído
		Ricardo Kalid	UFBA	
31	Otimização de um reator a batelada	Frederico Epstein	BRASKEM	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	
30	Otimização de uma unidade de separação e reforma de nafta	Nadja Fontes	<u>BRASKEM</u>	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	
29	Minimização do uso de água no processo industrial da CARAÍBA AGUAÍBA	José Luiz Bravo	CARAÍBA	Em desenvolvimento
		Péricles Júnior		
		Asher Kiperstok	UFBA	
		Leoni Pustilnik		
		Daniela Fontana		
		Ricardo Kalid		
28	Minimização do uso de água no processo industrial da DETEN DETEN-ÁGUA	Carlos Pessoa	<u>DETEN</u>	Concluído
		Erisvaldo Cunha		
		Cláudio Costa		
		Asher Kiperstok	UFBA	
		Carlos Maurício		
		Salvador Ávila		
		Ricardo Kalid		
27	Desenvolvimento de projetos de controle e otimização de processos	Fábio Carrilho	ZCR	Em desenvolvimento
		Marcone Lopes		
		Ruben Delgado		
		Frede de Oliveira	UFAL	
		Cristiano Fontes	UFBA	
		Ricardo Kalid		
26	Integração energética de plantas de polimerização	Luciano Ferraz	POLITENO	Concluído
		Sebastião Luís		

N	TEMA	PARTICIPANTES	INSTITUIÇÃO	STATUS
	POLITENO-ENERGIA	Jean Cailleaux	UFBA	
		João Nery		
		José Geraldo		
		Asher Kiperstok		
		Ednildo Torres		
		Ricardo Kalid		
25	Integração energética de plantas de química fina GRIFFIN-ENERGIA	João Colonese	GRIFFIN-DUPONT	Concluído
		Klauss V. Serra		
		Nelson Siem		
		Tadeu		
		Aloisio	UFBA	
		Marcone Lopes		
		Asher Kiperstok		
		Ednildo Torres		
		Ricardo Kalid		
24	Diagnóstico e otimização de malhas de controle PID industriais POLICARBOMAX	Antônio Malan	POLICARBONATOS	Concluído
		Carlos Modesto		
		Sérgio Maronato		
		Marcelo Coutinho		
		Gabriella Sá Vieira	UFBA	
		Grazziela Gomes		
		Marcelo Embiruçu		
		Ricardo Kalid		
23	<u>Comparação do desempenho entre controladores clássicos e MPC</u>	Klauss V. Serra	GRIFFIN-DUPONT	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	
22	Software para <u>Sintonia</u> Ótima de Controladores Industriais	Marcone Lopes	ZCR	Em desenvolvimento
		Fábio Carrilho		
		Ruben Delgado		
		Ricardo Kalid	UFBA	

N	TEMA	PARTICIPANTES	INSTITUIÇÃO	STATUS
21	<u>Reuso e reciclagem de efluentes líquidos industriais</u> ECOLOGIA INDUSTRIAL - MONSANTO	Breno	MONSANTO	Concluído
		Maria Mazzarelo		
		Ricardo Kalid	UFBA	
		Daniel Cortes		
		Ednildo Torres		
		José Geraldo		
		Asher Kiperstok		
20	<u>Otimização de um sistema de fornos de pirólise</u>	Ana Carolina Viana	BRASKEM	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	
19	Otimização de reatores a batelada: definição do perfil ótimo de operação	Patricia C.Lima	MONSANTO	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	
18	Diagnóstico de malhas de controle preditivo multivariável MPC	Maurício Santos	BRASKEM	Concluído
		Elaine Santana		
		Nadja Fontes		
		César Moraes		
		Márcia Cunha		
		Lúcio Estrella	POLITENO	
		Ricardo Muller		
		Jean Cailleaux		
		Carlos Pinheiro	UFBA	
		Marcelo Embiruçu		
		Yuri Guerrieri		
		Marcos Britto		
Ricardo Kalid				
17	Minimização do uso de águas industriais na BRASKEM-UNIB BRASKEM-ÁGUA	Moisés Augusto	BRASKEM	Concluído
		Sufredini		
		Carlos Alberto		
		João Severiano		
		Fernando Pelegrini	UFRJ	

N	TEMA	PARTICIPANTES	INSTITUIÇÃO	STATUS
		Roger Zemp	UNICAMP	
		Asher Kiperstok	UFBA	
		José Geraldo		
		Sandra de Oliveira		
		Christiane Perazzo		
		Daniela Fontana		
		Ricardo Kalid		
16	Sistemas de pH dos efluentes da GRIFFIN	Nelson Siem	GRIFFIN	Concluído
		Leandro Caputo	UFBA	
		Ricardo Kalid		
15	Controle otimizante de um trem de separação de xilenos (3 colunas de destilação em série/paralelo) da COPENE	Mauricio Moreno	BRASKEM	Concluído
		Fábio Carrilho	UFBA	
		Ricardo Kalid		
14	Simulação, controle e otimização de reator de leito fluidizado para produção de polietileno	Kleber Lima	BRASKEM	Em desenvolvimento
		Ricardo Kalid	UFBA	
13	Software para reconciliação de balanços de massa	Fábio Carrilho	ZCR	Em desenvolvimento
		Ruben Delgado		
		Cristiano Fontes	UFBA	
		Ricardo Kalid		
12	Reconciliação de dados de processos contínuos	Elcio Pereira	UFBA	Concluído
		Ricardo Kalid		
11	Controle Estatístico de Processos Contínuos	João Colonese	GRIFFIN	Concluído
		Graziela Gomes	UFBA	
		Ricardo Kalid		
10	Modelagem, simulação do reator de desidrogenação de n-parafinas da DETEN	Gian Carlos	DETEN	Concluído
		Mário Mendes	UNICAMP	
		Ricardo Kalid	UFBA	
9	Modelagem por redes neurais híbridas e otimização de reatores de CPD	Luiz Alberto Falcon	BRASKEM	Concluído
		Tatiana Freitas	UFBA	

N	TEMA	PARTICIPANTES	INSTITUIÇÃO	STATUS
		Ricardo Kalid		
8	Estimativa do tempo de campanha de fornos de pirólise da COPENE	Murilo Amorim	BRASKEM	Concluído
		Eliane Santanta	UFBA	
		Ricardo Kalid		
7	Simulação e controle de colunas de destilação de sulfolane da COPENE	Williane Carneiro	BRASKEM	Concluído
		Cathia R. Apenburg	UFBA	
		Ricardo Kalid		
6	Modelagem, simulação, controle e otimização de conversores de acetileno da COPENE	Maurício Moreno	BRASKEM	Concluído
		Paulo Freitas		
		Fabício Brito	UFBA	
		Tatiana Marucci		
		Ricardo Kalid		
5	Sintonia do controlador de topo da coluna de destilação de 3,4 DCA da GRIFFIN	Almir Cotias Filho	GRIFFIN	Concluído
		Klauss V. Serra		
		Ricardo Kalid	UFBA	
4	Simulação e controle de colunas de destilação de BTX da COPENE	Mark Langerhost	BRASKEM	Concluído
		Lueci V. do Vale	UFBA	
		Ricardo Kalid		
3	Sintonia de controladores industriais	Mauricio Moreno	BRASKEM	Concluído
		Gustavo Freitas	UFBA	
		Ricardo Kalid		
2	Identificação de modelos dinâmicos de processos químicos	Mauricio Moreno	BRASKEM	Concluído
		Daniel	UFBA	
		Jes Cerqueira		
		Ricardo Kalid		
1	Plano diretor de automação da EDN (Estireno do Nordeste)	-	EDN	Concluído
		Herman Lepikson	UFBA	
		Francisco Teixeira		
		Cauby Costa		

N	TEMA	PARTICIPANTES	INSTITUIÇÃO	STATUS
		Ricardo Kalid		

CURSOS E APOSTILAS DO INSTRUTOR SOBRE MODELAGEM DE PROCESSOS

1. ***Operações Unitárias em Regime Transiente – Balanços de Massa, Energia e Momentum Aplicados a Processo Químicos.***
Ricardo de Araújo Kalid. DEQ-UFBA.
2. ***Identificação de Processos Químicos.***
Ricardo de Araújo Kalid. DEQ-UFBA.

SIMULAÇÃO DE PROCESSOS

3. ***Programação em MATLAB com Aplicação em Reatores Químicos.*** Ricardo de Araújo Kalid. DEQ-UFBA.

CONTROLE DE PROCESSOS

4. ***Sistemas de Controle dos Principais Equipamentos da Indústria de Processos Químicos e Petroquímicos.***
Ricardo de Araújo Kalid. DEQ-UFBA.
5. ***Controle de Processos Químicos.*** Ricardo de Araújo Kalid. DEQ-UFBA.
6. ***Definição da Estrutura do Sistema de Controle Multimalha de Processos Multivariáveis.*** Ricardo de Araújo Kalid. DEQ-UFBA.
7. ***Controle Avançado de Processos.*** Ricardo de Araújo Kalid. DEQ-UFBA.
8. ***Controle de Coluna de Destilação.*** Ricardo de Araújo Kalid. DEQ-UFBA.
9. ***Controle Preditivo Multivariável: DMC - Controle por Matriz Dinâmica.*** Ricardo de Araújo Kalid. DEQ/UFBA

OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS

10. ***Otimização de Processos Químicos: Problemas sem restrições.***
Ricardo de Araújo Kalid. DEQ-UFBA.
11. ***Otimização de Processos Químicos: Problemas com restrições.***
Ricardo de Araújo Kalid. DEQ-UFBA.

OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS: PROBLEMAS SEM RESTRIÇÕES

Índice

Lista de Abreviaturas	6
Nomenclatura	7
Principais Referências Bibliográficas	7
1. Introdução e Definições	16
1.1. Objetivos deste Curso	16
1.2. Programa do Curso	17
1.3. Referências Bibliográficas Principais.....	18
1.4. Por que Otimizar?	18
1.5. Exemplos de Aplicação de Otimização	19
1.6. Formulação de um Problema de Otimização	19
1.6.1. A Função Objetivo (FO).....	20
1.6.2. As Restrições	22
1.6.3. A Região Viável	23
1.6.4. As Variáveis de Decisão (VD)	24
1.7. Procedimento Geral para Solucionar um Problema de Otimização	24
1.7.1. Mapeamento da Função Objetivo.....	26
1.7.2. Obstáculos à Otimização	29
1.8. Exercícios.....	31
2. Conceitos Matemáticos	32
2.1. Definições	32
2.2. Operações Básicas com Matrizes e Vetores	33
2.3. Independência Linear, Matriz Singular e Rank ou Posto de uma Matriz... ..	36
2.4. Operadores Linha ou Coluna	37
2.5. Solução de Sistema de Equações Lineares	37

2.6.	Graus de Liberdade	38
2.7.	Autovalores e Autovetores.....	39
2.8.	Estudo de Função	39
2.9.	Continuidade de Funções.....	41
2.10.	Funções Unimodais e Multinodais	42
2.11.	Funções Côncavas e Convexas	42
2.12.	Região Convexa	45
2.13.	Condições Necessárias e Condições Suficientes para um Extremo de uma Função Irrestrita.....	48
2.14.	Interpretação da Função Objetivo em Termos de uma Aproximação Quadrática 51	
2.15.	Exercícios.....	55
3.	Formulação Matemática de um Problema de Otimização.....	58
3.1.	A Função Objetivo (FO)	59
3.1.1.	Tolerância ou Critério de Parada.....	60
3.1.2.	Objetivos Econômicos.....	61
3.1.3.	Objetivos Operacionais	69
3.1.4.	Combinação de Objetivos Operacionais com Objetivos Econômicos	73
3.2.	As Funções de Restrição (FR)	74
3.3.	Otimização On-Line	75
3.4.	Exercícios.....	77
4.	Otimização Unidimensional Sem Restrições (OUSR)	84
4.1.	Métodos Indiretos (MI) para OUSR	85
4.1.1.	Método de Newton	86
4.1.2.	Método de Quasi-Newton.....	88
4.1.3.	Método da Secante	89
4.2.	Métodos Diretos (MD) para OUSR.....	90
4.2.1.	Métodos por Diminuição da Região de Busca	90
4.2.2.	Métodos por Aproximação Polinomial - Interpolação Quadrática.....	92
4.2.3.	Métodos por aproximação polinomial - Interpolação cúbica	93
4.3.	Avaliação dos Métodos Unidimensionais de Otimização	94
4.4.	Exercícios.....	96
5.	Otimização Multidimensional Sem Restrições (OMSR).....	97
5.1.	Métodos Indiretos (MI) para OMSR	98

5.1.1.	Método do Gradiente ou Método do Gradiente Descendente	99
5.1.2.	Método do Gradiente Conjugado	101
5.1.3.	Método de Newton	102
5.1.4.	Método de Levenberg-Marquardt.....	103
5.1.5.	Método da Secante ou Quasi-Newton	105
5.2.	Métodos Diretos (MD) para OMSR	107
5.2.1.	Busca Randômica	107
5.2.2.	Grade de Busca.....	108
5.2.3.	Busca Unidimensional.....	108
5.2.4.	Método Simplex ou do Poliedro Flexível.....	109
5.3.	Avaliação dos MD's e MI's para Problemas de OMSR	110
5.4.	Exercícios.....	111
6.	Ajuste de Modelos Matemáticos	113
6.1.	Ajuste de Modelos Lineares nos Parâmetros Com Uma Variável Independente.....	114
6.1.1.	Escolha da Forma do Modelo Linear	115
6.1.2.	Ajuste do Modelo Linear Univariável.....	116
6.2.	Ajuste de Modelos Lineares de Várias Variáveis.....	118
6.3.	Ajuste de Modelos Matemáticos Não-Lineares.....	121
6.3.1.	Ajuste de Modelos por Métodos Diretos - Método do Poliedro Flexível	123
6.3.2.	Ajuste de Modelos por Métodos Indiretos	123
6.4.	Observações e "Macetes"	124
6.4.1.	Procedimento Geral para Ajuste de Modelos.....	126
6.5.	Exercícios.....	127

Lista de Abreviaturas

CKT	-	Condições de Kuhn-Tucker
CO	-	Controle Ótimo
FO	-	Função Objetivo
FR	-	Funções de Restrições
MD	-	Método Direto de otimização
MI	-	Método Indireto de otimização
MV	-	Variável Manipulada
OMCR	-	Otimização Multidimensional Com Restrições
OMSR	-	Otimização Multidimensional Sem Restrições
OUCR	-	Otimização Unidimensional Com Restrições
OUSR	-	Otimização Unidimensional Sem Restrições
PCO	-	Problema de Controle Ótimo
PL	-	Programação Linear
PNL	-	Programação Não-Linear
PPL	-	Problema de Programação Linear
PPNL	-	Problema de Programação Não-Linear
PPQ	-	Problema de Programação Quadrática
PQ	-	Programação Quadrática
PV	-	Variável de Processo (pode ser variáveis controladas e/ou medidas)
s.a.	-	sujeito a
SEANL	-	Sistema de Equações Algébricas Não-Lineares
SP	-	SetPoint
VA	-	Variável Auxiliar (qualquer variável ou constante que não é VDep)
VD	-	Variável de Decisão ou de Projeto ou Independente
VDep	-	Variável Dependente
VI	-	Variável Independente

Nomenclatura

- \bar{Y}_i - valor da média dos experimentos replicados para um certo x_i
- \bar{x} - valor médio da variável independente
- η_i - valor calculado da VI para um certo x_i
- b_j - parâmetro j de um modelo
- n - número total de experimentos realizados
- p_i - número de medidas replicadas para um certo x_i
- x - variável determinística, independente e experimental
- Y - variável estocástica, dependente e experimental
- Y - variável estocástica, dependente e experimental

Principais Referências Bibliográficas

As principais referências utilizadas para confeccionar esta apostila e preparar as aulas são listadas a seguir. Outras referências, que tratam de assuntos específicos, são citadas ao longo do texto:

- R1. **Himmelblau, D. M. and Edgar, T. F.; *Optimization of Chemical Process*. McGraw-Hill, 1989.** Livro essencial para quem quer iniciar e/ou aprofundar seus estudos sobre otimização de processos químicos. Boa parte do conteúdo deste curso e a maioria dos exercícios discutidos/propostos foram retirados deste livro.
- R2. Himmelblau, D. M.; *Process Analysis by Statistical Methods*. John Wiley & Sons, 1970. Livro que traz os algoritmos de vários métodos de otimização e aplica esses métodos principalmente ao ajuste de modelos matemáticos a dados experimentais. Livro texto para o Capítulo 6 desta apostila.
- R3. Beveridge, G. S. and Schechter, R. S.; *Optimization Theory and Practice*. McGraw-Hill, 1970. Traz uma discussão mais profunda a respeito dos fundamentos matemáticos em que os métodos de otimização são baseados.
- R4. Reklaitis, G. V.; Ravindran, A.; Ragsdell, K. M.; *Engineering Optimization: Methods and Applications*. John Wiley & Sons, 1983. Livro importante e complementar ao de Himmelblau e Edgar (R1). Livro texto para os Capítulos 8 e 9 desta apostila.

1. Introdução e Definições

Na natureza somente os mais eficientes sobrevivem. A seleção natural elimina as espécies ou os indivíduos menos capacitados, ao mesmo tempo que *facilita as coisas* para os mais bem dotados, ou seja, existe algum *mecanismo* que procura maximizar o uso dos recursos ou minimizar o efeito da ineficiência dos processos.

O que a natureza sabe fazer com extrema maestria nós devemos imitar, se quisermos suplantarmos nossos adversários e assim sermos os ganhadores.

O problema é que seja qual for o vencedor, a mãe natureza sempre ganha junto, enquanto nós temos que ser mais eficientes que nossos concorrentes. E como a probabilidade de tomar uma decisão errada é muito maior que escolher a opção certa, temos que nos cercar de **informações e procedimentos confiáveis**.

As **informações** que devemos coletar são, por exemplo:

- o(s) objetivo(s) que queremos atingir,
- as condições do mercado fornecedor e consumidor,
- as condições do mercado financeiro,
- as condições dos recursos naturais e humanos disponíveis,
- as limitações de natureza física e/ou social e/ou psicológicas existentes.

Os **procedimentos** que podemos empregar são:

- a experiência acumulada,
- o uso de ferramentas matemáticas adequadas,
- a escolha de estratégias de atuação oportunas.

Se utilizarmos as **informações e procedimentos apropriados** temos boas chances de sermos os vitoriosos. É somente esse o nosso problema.

Neste curso iremos estudar quais são as informações e procedimentos adequados a resolver os problemas de otimização típicos em engenharia química.

1.1. Objetivos deste Curso

Ao final do segundo módulo deste curso seremos capazes de:

- O1. Entender os princípios de funcionamento dos principais algoritmos de otimização.
- O2. Aplicar corretamente os algoritmos de otimização.

O3. Desenvolver um modelo matemático de otimização e resolvê-lo através da utilização de pacotes computacionais.

1.2. Programa do Curso

Para alcançarmos os objetivos propostos o curso terá as seguintes características:

Carga horária total: 60 horas

Programa do curso:

- P1. Introdução e Definições: Visão geral do problema de otimização.
- P2. Conceitos Matemáticos: Ferramentas necessárias.
- P3. Formulação Matemática de um Problema de Otimização:
Construção da Função Objetivo e de Suas Restrições.
- P4. Otimização Unidimensional Sem Restrições: Aspectos matemáticos específicos.
- P5. Otimização Multidimensional Sem Restrições: Aspectos matemáticos específicos.
- P6. Aplicações de Otimização Sem Restrições em Processos Químicos.
- P7. Otimização Multivariável Com Restrições.
- P8. Aplicações de Otimização Multivariável Com Restrições em Processos Químicos.
- P9. Experiências em Otimização de Processos Químicos do LACOI:
 - a) Reconciliação de dados em estado estacionário
 - b) Minimização de uso de água e/ou consumo de energia em processos
 - c) Otimização de processos industriais:
 - Case MONSANTO
 - Case CIQUINE
 - Case BRASKEM-UNIB
 - Case BRASKEM-OPP

Metodologia de ensino:

- M1. Utilizaremos de data-show e da lousa para desenvolver os tópicos.
- M2. Exercícios resolvidos para exemplificar os conhecimentos teóricos abordados.
- M3. Aulas de exercícios para as equipes (2 alunos por equipe).
- M4. Lista de exercícios propostos.
- M5. Distribuição de apostila com o conteúdo do que foi apresentado.
- M6. Sempre que necessária haverá interrupção da aula para esclarecimento de dúvidas.
- M7. Estudo de “cases” industriais que sejam de interesse dos alunos

1.3. Referências Bibliográficas Principais

As principais referências utilizadas para confeccionar esta apostila e preparar as aulas são listadas a seguir. Outras referências, que tratam de assuntos específicos são citadas ao longo do texto:

- R1. **Himmelblau, D. M. and Edgar, T. F., *Optimization of Chemical Process*, McGraw-Hill, 1989.** Livro essencial para quem quer iniciar e/ou aprofundar seus estudos sobre otimização de processos químicos. Boa parte do conteúdo deste curso e a maioria dos exercícios discutidos/propostos foram retirados deste livro.
- R2. Himmelblau, D. M., *Process Analysis by Statistical Methods*, John Wiley & Sons, 1970. Livro que traz os algoritmos de vários métodos de otimização e aplica esses métodos principalmente ao ajuste de modelos matemáticos a dados experimentais.
- R3. Beveridge, G. S. and Schechter, R. S., *Optimization Theory and Practice*, McGraw-Hill, 1970. Traz uma discussão mais profunda a respeito dos fundamentos matemáticos em que os métodos de otimização são baseados.

Além dessas referências outras são listadas no final desta apostila.

1.4. Por que Otimizar?

A otimização pode promover melhorias econômicas [otimização econômica (OE)] e/ou técnicas/operacionais [otimização operacional (OO)]. A otimização de um determinado processo ou sistema pode ter como benefício um (ou mais de um) dos itens a seguir:

- OE.** minimizar o investimento para uma determinada capacidade operacional a ser instalada,
- OE.** maximizar o lucro total,
- OE.** maximizar o lucro por unidade de produção,
- OE.** minimizar os custos operacionais,
- OE.** minimizar os custos de manutenção,
- OO.** maximizar a produção para uma determinada capacidade operacional instalada,
- OO.** minimizar o consumo de matéria-prima e/o energia,
- OO.** minimizar a produção de insumos indesejáveis,
- OO.** minimizar o tempo de batelada,
- OO.** minimizar a diferença entre o valor desejado e o valor alcançado,

Observe que alguns desses objetivos são conflitantes entre si, portanto devemos estabelecer o objetivo a ser alcançado com bastante cuidado.

Porém devemos sempre nos lembrar que a otimização tem um custo e, portanto, *devemos otimizar a otimização*.

Em certos casos o uso de métodos matemáticos de otimização não traz benefícios, por exemplo:

- quando uma solução razoável pode ser obtida baseada em experiências passadas,
- quando existe uma prática padrão em uso,
- quando o tempo necessário para avaliar o problema não contribui para o contexto do projeto global,
- quando as informações necessárias só podem ser obtidas com grande custo.

1.5. Exemplos de Aplicação de Otimização

A otimização pode ser aplicada de inúmeras maneiras em processos e plantas químicas. Típicos projetos onde a otimização tem sido empregada incluem:

1. Determinação do melhor local para construção de uma planta.
2. Escalonamento de tanques para armazenagem de matéria-prima e de produtos.
3. Dimensionamento e layout de pipelines.
4. Projeto de plantas e/ou de equipamentos.
5. Escalonamento de reposição e manutenção de equipamentos.
6. Operação de equipamentos e/ou plantas.
7. Ajuste de modelos a dados experimentais de uma planta.
8. Minimização de inventário.
9. Alocação de recursos ou serviços entre diferentes processos.
10. Planejamento e escalonamento de instalação de plantas.

1.6. Formulação de um Problema de Otimização

Podemos definir[#] a otimização de sistemas das seguintes maneiras:

- D1. Campo da matemática dedicado ao desenvolvimento de métodos eficientes de determinação de máximos e mínimos de funções de uma ou mais variáveis.

[#] As três definições foram transcritas da apostila sobre "Otimização de Processos" de autoria de Fernando Pellegrini Pessoa e Marcelo Castier, ambos professores do DEQ-UFRJ

D2. A ciência que determina as melhores soluções para certos problemas físicos; problemas que são descritos por modelos matemáticos.

D3. Busca da **melhor solução** (solução ótima) dentre as diversas soluções possíveis de um problema, **segundo um critério estabelecido previamente**.

Embora nem todos os problemas de otimização possam ser descritos por equações matemáticas (por exemplo, maximizar as propriedades organolépticas de um alimento), apenas os que podem ser tratados neste curso.

A formulação de um problema prático de otimização contém duas partes:

1. Ao menos uma **função objetivo** a ser alcançada.
2. As **restrições** que devem ser atendidas.

Devemos encontrar uma solução (pois podem existir mais) que minimiza/maximiza a função objetivo e que simultaneamente atenda às restrições, ou seja a solução encontrada deve pertencer à **região viável**.

Para que as condições ótimas sejam alcançadas o sistema deve ter liberdade para manipular as **variáveis de decisão**, também denominadas variáveis de projeto ou ainda variáveis independentes, isto é, algumas condições operacionais são modificadas de forma que o ponto ótimo viável seja alcançado.

1.6.1. A Função Objetivo (FO)

A função objetivo ou critério de desempenho estabelece o alvo a ser alcançado. É uma função matemática cujo máximo ou mínimo se deseja determinar.

As FO's podem ser desenvolvidas a partir de três tipos de critérios:

- C1. **Critério estritamente econômico**: maximizar o lucro anual, minimizar o custo anual, diminuir o tempo de retorno do investimento, etc.
- C2. **Critério estritamente técnico/operacional**: minimizar o consumo de energia ou de matéria-prima, maximizar a produção, etc.
- C3. **Critério técnico-econômico**: minimizar a diferença entre o valor desejado e o valor medido numa planta, ao mesmo tempo em que minimiza o custo operacional.

O estabelecimento correto da função objetivo é fundamental para o sucesso da otimização. Sua determinação é uma tarefa complexa que requer grande conhecimento do processo/sistema a ser otimizado.

A função objetivo pode ser classificada quanto à:

- Continuidade:
 - contínua, por exemplo a temperatura ótima para uma reação reversível

- descontínua
- discreta, por exemplo o diâmetro ótimo de uma tubulação
- Modalidade:
 - unimodal (o extremo local é também o global), figura 1-a.

```

x = -100:100;
a = 4;
b = 2;
c = 5;
y1= -a*x.^2 + b*x + c;
plot(x,y1)
    
```

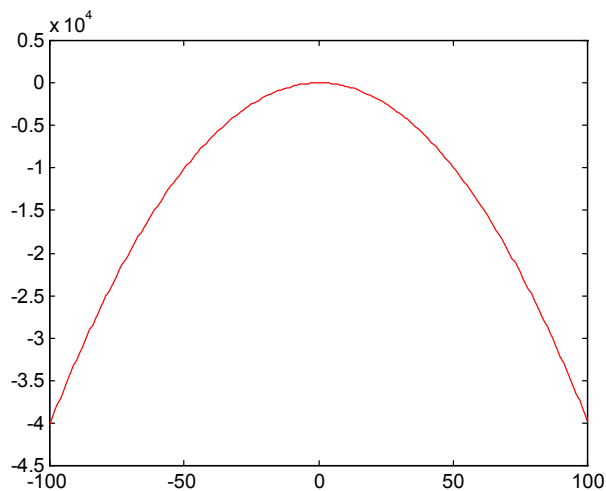


Figura 1-A: Função Unimodal

Função objetivo (FO): $\max y_1$
 $y_1 = -a \cdot x^2 + b \cdot x + c$

Equação 1.6-A

```
max(y1)
```

```
ans = 5
```

Obs: expressões nesta fonte (Courier New 10, verde, em negrito) são comandos do MATLAB.

expressões nesta fonte (Courier New 10, azul) são as respostas geradas pelo MATLAB.

as expressões nesta fonte (Times New Roman 12, preto) são textos em WORD.

Comando `help nome-da-função` permite consultar o manual de referência on-line do MATLAB.

Comando `help optim` permite consultar o manual de referência do toolbox de otimização on-line do MATLAB.

- multimodal (existem vários extremos locais e um deles é o global)

```
y2 = -a*x.^2 + b*x + c + 1000*sin(x);
```

```
plot(x,y2,'-r',x,y1,':b')
```

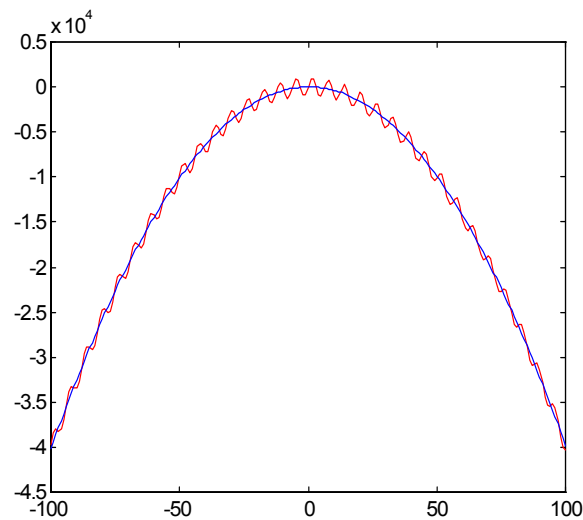


Figura 1-B: Função Unimodal e Multimodal

Função objetivo (FO): maximizar y_2

```
max(y2)
```

```
ans = 902.2974
```

- Convexidade:
 - convexa, a função objetivo é uma função convexa (tem um único mínimo)
 - côncava, a função objetivo é uma função côncava (tem um único máximo)

1.6.2. As Restrições

São os limites impostos ao sistema pelas condições físicas, por exemplo:

- capacidade máxima de processamento de um equipamento,
- temperatura e pressão absolutas só podem assumir valores positivos,

- os balanços de massa e energia de um processos devem ser obedecidos,
- capacidade de absorção do mercado,
- preço máximo de venda ou de compra,
- etc.

As restrições podem ser de igualdade ou de desigualdade.

O modelo matemático (em regime estacionário ou transiente) de um processo é uma restrição de igualdade.

1.6.3. A Região Viável

Região do espaço definida pelas variáveis de decisão, delimitada pelas restrições, em cujo interior ou na fronteira se localiza o máximo ou o mínimo da função objetivo. Também é denominada de região de busca.

O conjunto das restrições determinam uma região onde o ponto ótimo deve estar contido. Portanto a região viável deve ser um espaço não nulo. Por exemplo:

- região viável nula: $x > 50$ e $x < 10$
- região viável: $x > 10$ e $x < 50$

Exemplo;

Função objetivo:

$$\max_x y_1$$

$$y_1 = -a.x^2 + b.x + c$$

Equação 1.6-B

Sujeito a: $10 < x < 20$

```

x = 10:20;
y1= -a*x.^2 + b*x + c;
plot(x,y1)
    
```

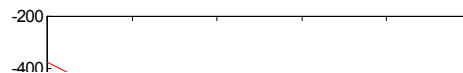


Figura 1-C: Função Objetivo com Restrição

```
max(y1)
```

ans = -375

O estabelecimento da região viável torna-se mais complicado com o aumento do número de variáveis e com a complexidade das expressões que definem as restrições do sistema.

Embora os algoritmos numéricos tenham capacidade de detectar quando uma região viável não existe (região viável nula), eles não podem detectar quando a região de busca está definida de maneira errada. Portanto, máxima atenção deve ser dispensada ao estabelecimento das restrições, ou seja, da região viável.

1.6.4. As Variáveis de Decisão (VD)

As variáveis de decisão ou de projeto ou independentes correspondem, em número, ao excesso de incógnitas em relação ao número de equações, ou seja, sua quantidade é igual ao número de graus de liberdade do sistema.

Se existe apenas uma única solução para o problema, nenhuma otimização é necessária e possível. Portanto, para haver condições de otimizar um processo o mesmo deve ter graus de liberdade maior que zero.

As VD caracterizam os possíveis projetos ou condições operacionais do sistema e devem ter uma certa influência sobre a função objetivo.

Se uma função objetivo é pouco sensível a uma variável de decisão é conveniente simplificar o problema assumindo um valor fixo para essa variável. Por outro lado, se o critério de desempenho é extremamente sensível a uma determinada variável de projeto, talvez seja difícil reproduzir na prática as condições ótimas calculadas.

1.7. Procedimento Geral para Solucionar um Problema de Otimização

Não existe um procedimento ou método que possa ser aplicado eficientemente para todo tipo de problema. A escolha do método depende:

- da característica da função objetivo (linear ou não-linear; contínua, discreta ou mista)
- da natureza das restrições (linear ou não-linear; contínua, discreta ou mista)
- do número de variáveis de decisão.

Podemos estabelecer 6 passos principais a serem seguidos na solução de problemas de otimização:

P1. Analise o processo e estabeleça as variáveis de decisão (VD) e as auxiliares (VA's).

P2. Estabeleça a função objetivo (FO) em função das variáveis identificadas no item P1 e de coeficientes conhecidos.

P3. Estabeleça as restrições:

- balanços de massa e energia funções das VD's e VA's,
- relações constitutivas e/ou empíricas,
- limites operacionais máximos e mínimos,
- faixa de validades das variáveis, por exemplo, temperaturas e pressões absolutas devem ser positivas, frações molares entre 0 e 1, etc.,
- limites externos, por exemplo, capacidade máxima de consumo do mercado.

P4. Se o problema é demasiadamente grande:

- subdivida em partes e/ou
- simplifique a função objetivo e/ou o modelo do processo.

P5. Se possível faça o mapeamento da função objetivo, isto é, verifique graficamente como a FO varia com a mudança das variáveis de decisão.

P6. Aplique as apropriadas técnicas matemáticas de otimização para o problema.

P7. Aplique a análise de sensibilidade da FO, isto é, examine a sensibilidade do ponto de mínimo/máximo e o valor da FO às mudanças nos coeficientes das funções e a alterações nas variáveis decisão.

Os passos P1, P2, P3 e P4 constituem a representação matemática do problema, exigindo que a equipe responsável pela otimização do sistema tenha:

- (a) muito conhecimento a respeito do processo,
- (b) muita atenção e habilidades específicas em modelagem de processos.

Deve-se escolher um modelo o mais simples possível (menor quantidade de variáveis, equações constitutivas enxutas) que representa adequadamente o sistema.

Executando a etapa P5 temos condições de saber sua ordem de grandeza e de verificar como ela varia com determinada VD. O mapeamento da FO nem sempre é simples de realizar embora seja sempre desejável.

A aplicação dos algoritmos de otimização (passo P6) é uma etapa simples, desde que se tenha à mão programas de computador já desenvolvidos e testados. Porém se for necessário implementar ou desenvolver um novo algoritmo será necessário um grande esforço (tempo e recursos humanos).

Na etapa P7, validação dos resultados obtidos, é essencial a participação de engenheiros e de técnicos que conhecem (bem) o sistema/processo otimizado.

1.7.1. Mapeamento da Função Objetivo

Antes de executar algum algoritmo de otimização, é interessante que seja realizado o mapeamento da FO.

Veja o exemplo a seguir de uma função Z de duas incógnitas (X, Y):

```
x = -8:.5:8 ;  
y = x ;  
[X,Y] = meshgrid(x,y) ;  
R = sqrt(X.^2 + Y.^2) + eps ;  
Z = sin(R) ./R ;
```

Utilizamos as funções de traçamento de gráficos do MATLAB para mapear de diversas maneiras a função $Z = \text{seno}(R)/R$. Construímos os gráficos bidimensional (figura 1-d), tridimensional (figura 1-e), das curvas de nível (figura 1-f), combinação do gráfico tridimensional com o das curvas de nível (figura 1-g), curvas de nível pseudo-coloridas (figura 1-h).

```
whitebg
plot(x,Z)
```

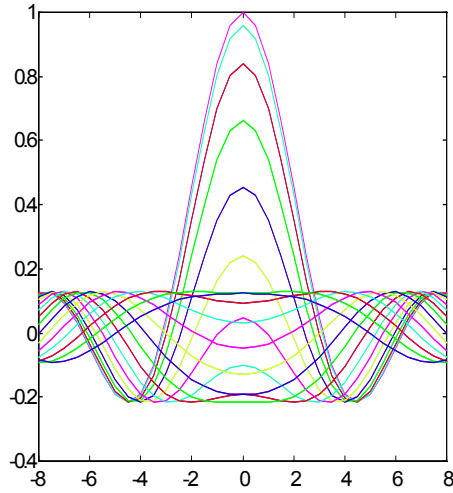


Figura 1-D: Gráfico bidimensional

```
mesh(x,y,Z)
```

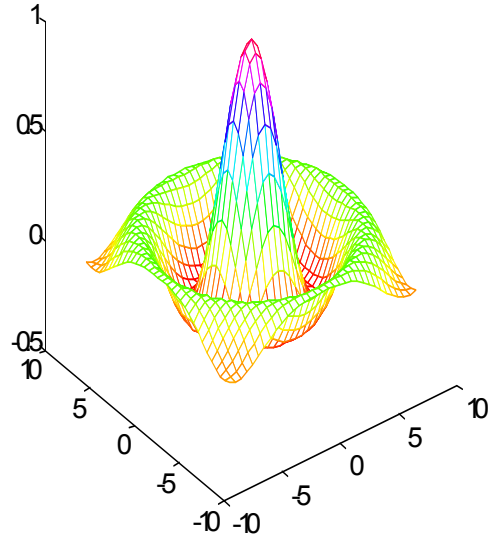


Figura 1-E: Gráfico tridimensional

```
c = contour(x,y,Z) ;
clabel(c) ;
```

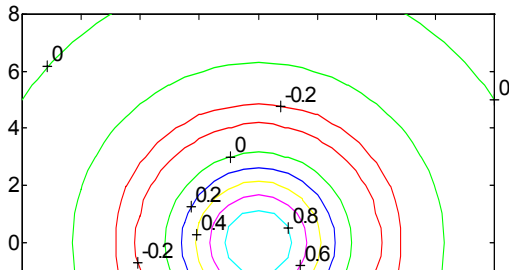


Figura 1-F: Curvas de nível

```
meshc(x,y,Z)
```

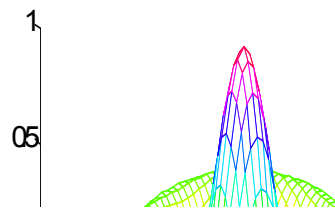


Figura 1-G: Tridimensional com curvas de nível

`pcolor(x, y, Z)`

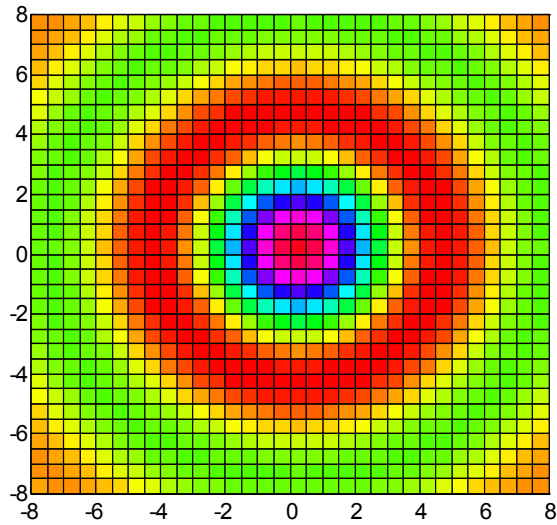


Figura 1-H: Curvas de nível pseudo coloridas

Se a FO tem mais de duas VD's podemos:

- (a) plotar vários gráficos da FO com relação a diferentes pares das variáveis de decisão,

(b) plotar um gráfico bidimensional no qual a ordenada é o valor da FO e na abscissa os conjuntos de valores das variáveis de projeto, Figura 1-I. Por exemplo

```
[nl,nc] = size(Z) ;  
VetorZ = [ ] ;  
for i = 1 : nl  
    for j = 1 : nc  
        VetorZ = [ VetorZ ; Z(i,j) ] ;  
    end  
end  
whitebg  
plot(VetorZ, 'r')
```

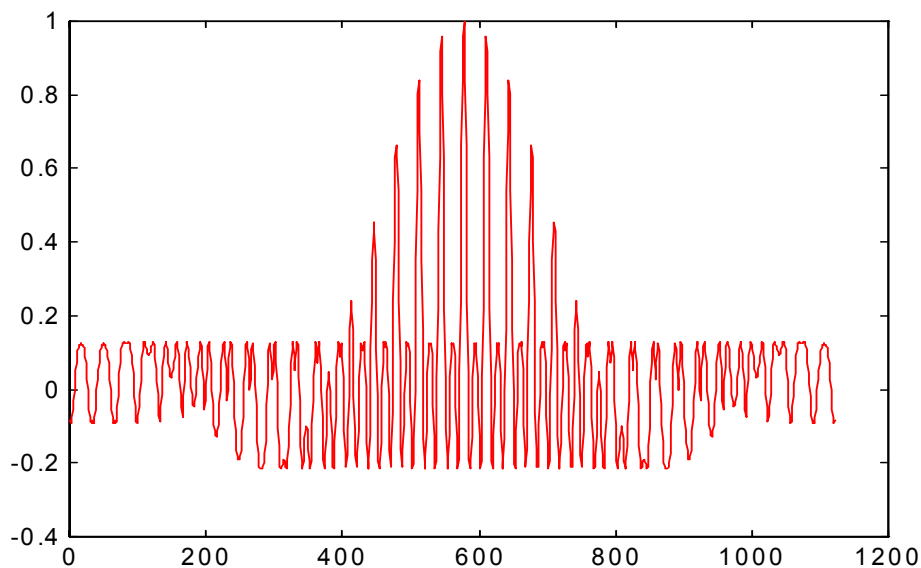


Figura 1-I: Gráfico dos valores alinhados de uma função bidimensional

Quando existem muitas VD's o número de cálculos e/ou de gráficos para mapear a FO fica proibitivo, por exemplo, para 5 variáveis de decisão com 20 pontos para cada, o número de vezes que a FO será avaliada é $20^5 = 3.200.000$.

1.7.2. Obstáculos à Otimização

Se a função objetivo (FO) e as funções de restrições (FR) forem "bem comportadas" a otimização não apresenta grandes problemas. Particularmente se a FO e as restrições forem todas lineares está disponível um poderoso método (Programação Linear) que resolve este problema de maneira satisfatória. Entretanto muitos problemas de otimização são não-lineares.

Muitos dos problemas práticos de otimização em engenharia química apresentam alguns das dificuldades abaixo:

P1. Não disponibilidade de dados ou de um modelo matemático confiável do sistema.

P2. Descontinuidades da FO ou das FR's. Por exemplo, o preço de um compressor ou trocador de calor não varia continuamente como uma função das dimensões, pressão, temperatura, etc. pois o incremento de um parâmetro não afeta o custo em uma certa faixa de variação, porém para uma outra faixa ocorre um salto no valor do equipamento.

P3. Não-linearidade da FO ou FR.

P4. A FO e a FR são definidas através expressões que contém complicadas interações entre as variáveis de decisão. A interação impede a existência de um único ponto ótimo.

P5. A FO ou a FR tem comportamento *achatado* ou exponencial em algumas faixas de variação das variáveis de decisão. Isto significa que o problema é pouco ou extremamente sensível, respectivamente, a mudanças dessas variáveis.

P6. A FO apresenta muitos extremos locais perto da região que contém o extremo global.

Quando não é possível a aplicação dos métodos de otimização podemos:

- (a) fazer um estudo de caso, isto é, escolher criteriosamente um número limitado de opções e analisar qual a melhor alternativa;
- (b) fazer um estudo de sensibilidade, semelhante ao estudo de caso, apenas mais sistematizado e com um número maior de casos a analisar.

1.8. Exercícios

E1.1. Crie uma nova função de duas VD's acrescentando à função Z do item 1.7.1 (página 26) um ruído randômico (a função no MATLAB é `rand`). Construa gráficos bidimensionais, tridimensionais e de contorno. Analise os resultados obtidos assumindo que a nova função Z é uma FO.

E1.2. Desenvolva uma função objetivo para otimizar seus rendimentos. Não esqueça de estabelecer as restrições impostas pelo sistema (patrão, esposa(o), filhos, etc).

E1.3. Dada a função $f(\underline{x}) = 3x_1^2 + 2x_1x_2 + 1.5x_2^2$ construa seu gráficos e ache o ponto de mínimo.

E1.4. Dada a função $f(\underline{x}) = x_1^3 \exp[x_2 - x_1^2 - 10(x_1 - x_2)^2]$, graficamente obtenha o ponto de máximo. Estude a sensibilidade.

2. Conceitos Matemáticos

A busca do ponto ótimo de uma FO é baseada em conceitos matemáticos bem conhecidos e extensamente estudados. Neste capítulo descreveremos e aplicaremos alguns desses conceitos, porém não seremos matematicamente formais. Vamos procurar compreender "intuitivamente" os conceitos matemáticos necessários ao entendimento e utilização dos algoritmos numéricos. Contudo se quisermos implementar algum algoritmo teremos que "entrar no mundo do formalismo matemático" e estudar com maior profundidade álgebra linear, cálculo diferencial, estatística (para problemas de reconciliação de dados e de estimativa de parâmetros) e cálculo numérico.

A complementação dos tópicos aqui apresentados pode ser encontrada nos livros de cálculo, cálculo numérico e/ou álgebra linear.

2.1. Definições

Uma **matriz** é um conjunto de números, símbolos ou funções dispostos em linhas e colunas. Cada elemento de uma matriz \underline{A} é denominado a_{ij} , onde o subscrito i corresponde à linha e o subscrito j à coluna corresponde.

$$\underline{A}_{=n \times m} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix}$$

Equação 2-A

Se o número de linhas (n) for igual ao número de colunas (m) então a matriz é denominada de **matriz quadrada**. Uma matriz quadrada particularmente importante é a **matriz identidade** \underline{I} . Esta matriz tem todos os elementos iguais a zero, exceto os da diagonal principal ($a_{ij} = 1, i = 1, \dots, n$), que são todos iguais a 1 (um).

$$\underline{I}_{=n \times n} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Equação 2-B

Vetores são um tipo especial de matriz e tem apenas uma linha ou uma coluna.

$$\underline{x}_{n \times 1} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

Equação 2-C

A transposta de uma matriz (\underline{A}^T) é a matriz resultante da troca das linhas pelas colunas da matriz original, então o elemento a_{ij} transforma-se no elemento a_{ji} . A transposta de um vetor linha é um vetor coluna e vice-versa.

$$\underline{x}_{1 \times n}^T = [x_1 \quad x_2 \quad \cdots \quad x_n]$$

Equação 2-D

2.2. Operações Básicas com Matrizes e Vetores

Igualdade: $\underline{A} = \underline{B}$ se e somente se $a_{ij} = b_{ij}$, para todo i e j

Adição: $\underline{A} + \underline{B} = \underline{C}$ se e somente se $c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$, para todo i e j
 \underline{A} e \underline{B} devem ter as mesmas dimensões

Multiplicação: $\underline{A}_{n \times m} \times \underline{B}_{m \times l} = \underline{C}_{n \times l}$

O número de colunas da matriz \underline{A} deve ser igual ao número de linhas da matriz \underline{B} . Cada elemento da matriz \underline{C} é obtido pelo somatório do produto dos elementos da i -ésima linha da matriz \underline{A} vezes os correspondentes elementos da j -ésima coluna da matriz \underline{B} :

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^m a_{ik} b_{kj}$$

Equação 2-E

Em geral a multiplicação de matrizes não é comutativa, isto é:

$$\underline{\underline{AB}} \neq \underline{\underline{BA}}$$

Equação 2-F

Multiplicação de uma matriz por um escalar:

Cada elemento da matriz é multiplicada pelo número escalar:

$$\underline{sA} = \underline{B} \Leftrightarrow s.a_{ij} = b_{ij}$$

Equação 2-G

Transposta de um produto de matrizes:

$$(\underline{AB})^T = \underline{B}^T \underline{A}^T$$

Equação 2-H

Produto interno entre dois vetores:

Seja \underline{x} e \underline{y} dois vetores de dimensão n, então

$$\underline{x}^T \underline{y} = \langle \underline{x}, \underline{y} \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

Equação 2-I

$$\underline{x}^T \underline{x} = \sum_{i=1}^n x_i^2 \quad \text{é um escalar}$$

Equação 2-J

Se o resultado do produto interno entre dois vetores é igual a zero, então esses vetores são ortogonais, em vetores bi ou tridimensionais isto significa que os mesmos são perpendiculares entre si.

Inversa de uma matriz:

Não existe a versão matricial da divisão escalar. Por definição a inversa de uma matriz, necessariamente quadrada, é a matriz tal que

$$\underline{A}^{-1} \underline{A} = \underline{A} \underline{A}^{-1} = \underline{I}$$

Equação 2-K

onde \underline{I} é a matriz identidade

Um uso freqüente da inversa de uma matriz é para expressar um conjunto de variáveis em termos de um outro conjunto, uma operação importante em problemas de otimização com restrições. Por exemplo:

$$\underline{z} = \underline{Ax} \Leftrightarrow \underline{A}^{-1} \underline{z} = \underline{x}$$

Equação 2-L

Determinante de uma matriz:

A função determinante, ou simplesmente o determinante de uma matriz (necessariamente quadrada), é denotado por $\det[\underline{A}]$ ou $|\underline{A}|$. É um número escalar indispensável na investigação de sistemas de equações lineares. Não iremos apresentar a definição do determinante, mas apenas como calculá-lo:

- para uma matriz de dimensão 1, $|\underline{A}_{1 \times 1}| = a_{11}$
- para uma matriz de dimensão 2, $|\underline{A}_{2 \times 2}| = a_{11} \cdot a_{22} - a_{12} \cdot a_{21}$
- para uma matriz de dimensão 3,
 $|\underline{A}_{3 \times 3}| = a_{11} \cdot (a_{22} \cdot a_{33} - a_{23} \cdot a_{32}) - a_{12} \cdot (a_{21} \cdot a_{33} - a_{23} \cdot a_{31}) + a_{13} \cdot (a_{21} \cdot a_{32} - a_{22} \cdot a_{31})$
- para uma matriz de dimensão n , utilize o comando do MATLAB: **det(A)**

Derivada de uma função escalar de um campo vetorial:

Seja uma função escalar de um vetor de n variáveis $f(\underline{x})$, define-se vetor gradiente ou simplesmente gradiente de $f(\underline{x})$ ao operador

$$\nabla f(\underline{x}) = \frac{\partial f(\underline{x})}{\partial \underline{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(\underline{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\underline{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Equação 2-M

Define-se a matriz Hessiana ou simplesmente Hessiana(o) de $f(\underline{x})$, $\underline{H}(\underline{x})$, à matriz das derivadas segunda ordem de de $f(\underline{x})$:

$$\underline{H}(\underline{x}) = \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial \underline{x}^2} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

Equação 2-N

Seja o vetor \underline{b} , $n \times 1$, de coeficientes constantes então

$$\frac{\partial \underline{b}^T \underline{x}}{\partial \underline{x}} = \underline{b} \Leftrightarrow \frac{\partial \underline{b}^T f(\underline{x})}{\partial \underline{x}} = \left[\frac{\partial f(\underline{x})}{\partial \underline{x}} \right]^T \underline{b}$$

Equação 2-O

Seja os vetores \underline{x} e \underline{z} , $n \times 1$, e a matriz \underline{A} , $n \times n$, a partir da definição dada pela equação 2-m demonstra-se que:

$$\frac{\partial(\underline{x}^T \underline{Az})}{\partial \underline{x}} = \underline{Az}$$

Equação 2-P

e

$$\frac{\partial(\underline{x}^T \underline{Ax})}{\partial \underline{x}} = \underline{Ax} + \underline{A}^T \underline{x}$$

Equação 2-Q

Se \underline{A} é simétrica vale a seguinte expressão

$$\frac{\partial(\underline{x}^T \underline{Ax})}{\partial \underline{x}} = 2\underline{Ax}$$

Equação 2-R

e a partir da equação 2-n, se \underline{A} além de simétrica for real, então

$$\frac{\partial^2(\underline{x}^T \underline{Ax})}{\partial \underline{x}^2} = 2\underline{A}$$

Equação 2-S

2.3. Independência Linear, Matriz Singular e Rank ou Posto de uma Matriz

Matriz cujo determinante é igual a zero é denominada de *matriz singular*. Isto acontece quando todos os elementos de uma ou mais linhas (ou colunas) são nulos ou quando uma ou mais linhas (ou colunas) da matriz tem uma dependência linear com outra(s) linha(s) [ou coluna(s)], isto é, podemos escrever uma linha (ou coluna) como uma função linear de uma ou mais linhas (ou colunas) da matriz.

Portanto se o determinante de uma matriz é zero, esta matriz é singular e suas linhas ou colunas são linearmente dependentes. Para matrizes quadradas linhas dependentes implicam em colunas dependentes.

Por definição as colunas da matriz \underline{A} , \underline{a}_j , são *linearmente independentes* se

$$\sum_{j=1}^n d_j \underline{a}_j = \underline{0} \quad \text{se e somente se } d_j = 0 \text{ qualquer que seja o } j$$

Equação 2-T

A dependência linear ocorre quando para algum valor não nulo de d_j a equação 2-t é satisfeita.

O *rank* ou *posto* de uma matriz é definido como o número de colunas linearmente independentes ($\leq n$). Também pode ser entendido como a dimensão da maior matriz quadrada não-singular obtida pelo particionamento, de todas as maneiras possíveis, da matriz original.

2.4. Operadores Linha ou Coluna

Operações de multiplicação/divisão de uma linha (ou coluna) por um escalar, bem como adição de uma linha (ou coluna) a outra linha (ou coluna) não modificam o determinante de uma matriz.

Operações nas linhas de uma matriz podem ser utilizadas para obter a inversa da mesma. Para tanto, *auamente* a matriz quadrada \underline{A} com a matriz identidade \underline{I} ,

$$\underline{A}_{aug} = \left[\underline{A} \mid \underline{I} \right]$$

Equação 2-U

então pré-multiplique a matriz aumentada por \underline{A}^{-1}

$$\underline{A}^{-1} \left[\underline{A} \mid \underline{I} \right] = \left[\underline{I} \mid \underline{A}^{-1} \right]$$

Equação 2-V

A equação 2-v demonstra que efetuando operações-linha em \underline{A} da matriz \underline{A}_{aug} , de forma a transformar \underline{A} na matriz \underline{I} , e repetindo as mesmas operações na matriz \underline{I} da matriz \underline{A}_{aug} , obtemos \underline{A}^{-1} na parte aumentada de \underline{A} .

2.5. Solução de Sistema de Equações Lineares

Uma equação linear é uma expressão da forma

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n = b$$

Equação 2-W

Em muitos problemas de otimização é necessário obter a solução de sistemas de equações lineares. Considere que os elementos de uma matriz \underline{A} , de dimensão $n \times n$, são os coeficientes de um sistema de n equações e n incógnitas:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \Leftrightarrow \underline{\underline{Ax}} = \underline{\underline{b}}$$

Equação 2-X

então, para $\underline{\underline{b}} \neq \underline{\underline{0}}$ e se a matriz $\underline{\underline{A}}$ for não singular, isto é, se existir $\underline{\underline{A}}^{-1}$, a solução da equação 2-x é dada por

$$\underline{\underline{x}} = \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{b}}$$

Equação 2-Y

Se o rank da matriz $\underline{\underline{A}}_{n \times n}$ for n , então existe uma única solução, ou seja o sistema de equações é linearmente independente. Caso contrário, ou seja, $|\underline{\underline{A}}| = 0$, então o sistema tem infinitas soluções ou a solução não existe.

Se $\underline{\underline{b}} = \underline{\underline{0}}$, a equação 2-x tem duas soluções:

- a solução trivial: $\underline{\underline{x}} = \underline{\underline{0}}$
- a solução não-trivial: $\underline{\underline{x}} \neq \underline{\underline{0}}$, neste caso $\det[\underline{\underline{A}}] = 0$

2.6. Graus de Liberdade

Seja um sistema com n incógnitas e r equações

- Se $n > r$ o sistema tem $gl = n - r$ graus de liberdade e para *solucioná-lo* tem-se que atribuir valores a gl variáveis.
- Se $n = r$ o sistema não tem graus de liberdade; para sistemas lineares de $gl = 0$ se o mesmo tiver solução, ela é única; para sistemas de equações não lineares de $gl = 0$ nada se pode afirmar, por exemplo, a equação $\text{seno}(x) = 0$ tem infinitas soluções, enquanto uma equação do segundo grau tem até duas soluções.
- Se $n < r$ o sistema tem $gl < 0$; se o sistema é linear ele está sobre-determinado e deve-se eliminar algumas equações para poder ser solucionado; se o sistema é não linear as $(n - r)$ equações a mais podem ser utilizadas para encontrar possíveis conjuntos viáveis.

Da discussão acima verifica-se que os sistemas não-lineares são mais complexos e conseqüentemente de solução mais difícil.

Para otimizar um sistema linear o mesmo deve ter graus de liberdade ($gl > 0$). A otimização se dá através da escolha criteriosa, e por intermédio de um algoritmo numérico, do valor de gl variáveis que maximizem/minimizem uma função objetivo.

Para otimizar um sistema não-linear é desejável que o mesmo tenha graus de liberdade ($g_l > 0$), pois se $g_l = 0$ a pesquisa do ponto ótimo será apenas nas soluções do sistema de equações, enquanto que para $g_l > 0$ o algoritmo de procura tem mais liberdade de agir.

2.7. Autovalores e Autovetores

Uma matriz \underline{A} $n \times n$ tem n autovalores. Define-se um vetor não-nulo $n \times 1$, \underline{v} , de autovetor, o qual está associado com o autovalor α da seguinte forma

$$\underline{A}\underline{v} = \alpha\underline{v}$$

Equação 2-Z

Para cada autovalor corresponde um autovetor. Os autovalores e autovetores fornecem informações a respeito da natureza das funções em uma otimização.

Se todos os autovalores de uma matriz \underline{A} são positivos (maiores que zero), então \underline{A} é positiva definida e tem inversa. Se todos os autovalores de uma matriz \underline{A} são negativos (menores que zero), então \underline{A} é negativa definida.

Rearranjando a equação 2-z obtemos

$$(\underline{A} - \alpha\underline{I})\underline{v} = \underline{0}$$

Equação 2-AA

cujas variáveis desconhecidas são os autovalores α e os autovetores \underline{v} . Devido o lado direito da equação 2-aa ser zero, duas soluções são possíveis:

- a solução é trivial: $\underline{v} = \underline{0}$
- ou existe mais de uma solução, então $\det[\underline{A} - \alpha\underline{I}] = 0$.

2.8. Estudo de Função

Seja uma função de uma única variável, $f(x)$, a *condição necessária, mas não suficiente*, para que um ponto x^* , que não esteja na fronteira do domínio da função, ou simplesmente ponto interno, seja ponto de máximo ou de mínimo é que a derivada da função neste ponto seja nula.

Seja o ponto x^* o *ponto crítico ou ponto estacionário* isto é $f'(x^*) = 0$. Este ponto pode ser um ponto de máximo, de mínimo ou de inflexão, veja a figura 2-a.

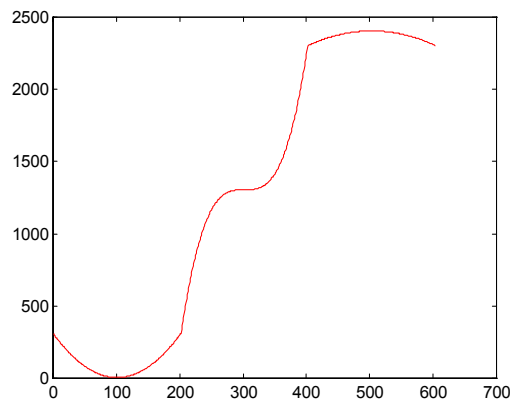


Figura 2-A: Função monovariável

A *condição suficiente* para que x^* seja um mínimo local é que $f'(x^*) = 0$ e $f''(x^*) > 0$, ou seja, se $f'(x^*) = 0$ e $f''(x^*) > 0$ então x^* é ponto de mínimo. Porém existem pontos de mínimo que não atendem a essa condição, daí a condição suficiente. Por exemplo em $f(x) = x^{4/3}$, $x^* = 0$ é o ponto de mínimo, embora $f''(x^*)$ não seja definido neste ponto.

A *condição suficiente* para que x^* seja um máximo local é que $f'(x^*) = 0$ e $f''(x^*) < 0$, ou seja, se $f'(x^*) = 0$ e $f''(x^*) < 0$ então x^* é ponto de máximo. Porém existem pontos de máximo que não atendem a essa condição, daí a condição suficiente.

A *condição necessária* para que o ponto \underline{x}^* de uma função multivariável seja estacionário é que todas as derivadas parciais da função em relação às suas variáveis sejam nulas naquele ponto, isto é, $f'(\underline{x}^*) = \underline{0}$

A *condição suficiente* para que o ponto \underline{x}^* de uma função multivariável seja mínimo local é que a matriz das derivadas parciais de segunda ordem da função em relação a todas as suas variáveis seja positiva definida naquele ponto, isto é, $\underline{H}(\underline{x}^*) > 0$.

A *condição suficiente* para que o ponto \underline{x}^* de uma função multivariável seja máximo local é que a matriz das derivadas parciais de segunda ordem da função em relação a todas as suas variáveis seja negativa definida naquele ponto, isto é, $\underline{H}(\underline{x}^*) < 0$.

Na seção 2.11 será apresentado o conceito de matriz positiva (negativa) definida. Por ora basta entender que existe um paralelo entre esse conceito e o de derivada positiva (negativa) de segunda ordem de uma função monovariável.

2.9. Continuidade de Funções

Em problemas de otimização é melhor que as funções e suas derivadas sejam contínuas. Na figura 2-b vemos um gráfico de uma função descontínua, enquanto que na figura 2-c temos uma função contínua, mas com derivada de 1ª ordem descontínua.

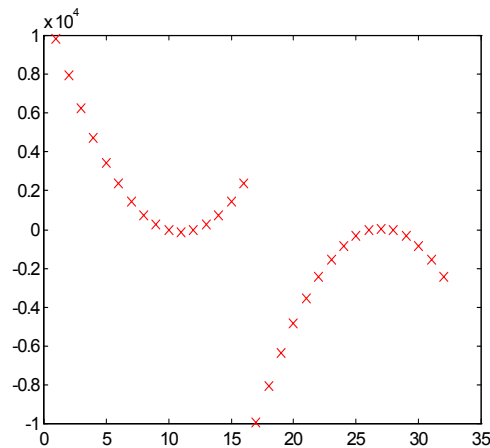


Figura 2-B: Função descontínua

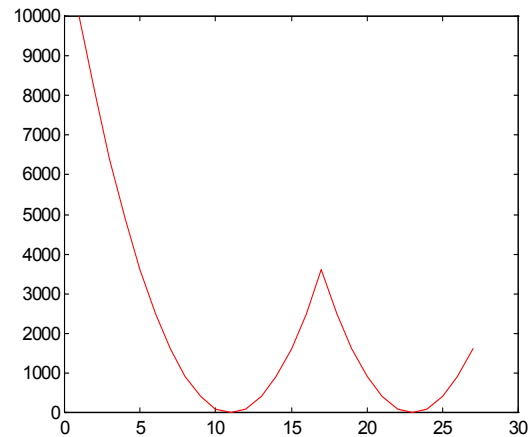


Figura 2-C: Função contínua com derivada descontínua

Uma função monovariável é contínua no ponto x_0 se:

- $f(x_0)$ existe
- $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x)$ existe
- $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = f(x_0)$

Uma função de duas variáveis é contínua no ponto (x_0, y_0) se:

- $f(x_0, y_0)$ existe
- $\lim_{(x,y) \rightarrow (x_0, y_0)} f(x, y)$ existe
- $\lim_{(x,y) \rightarrow (x_0, y_0)} f(x, y) = f(x_0, y_0)$

Quanto mais afastada estiver a descontinuidade do ponto de máximo (mínimo) da função, mais facilmente este ponto é encontrado.

Se uma função não é continuamente diferenciável, veja figura 2-c, métodos de otimização que utilizam derivadas não podem ser empregados, pois a derivada não é definida nos pontos de descontinuidade de $f(x)$.

Um exemplo de descontinuidade acontece no projeto de tubulações. Existe um número finito de diâmetros de tudo disponíveis para compra, veja figura 2-d, portanto a escolha do diâmetro recairá entre uma dessas opções. Para resolver esse problema existem duas alternativas:

- a) considerar funções de restrições discretas e realizar uma otimização discreta, neste caso os algoritmos numéricos são mais complexos;
- b) considerar variações contínuas para o diâmetro da tubulação e aproximar o resultado para a bitola mais próxima (ponto sub-ótimo), para fins de engenharia este procedimento é satisfatório.

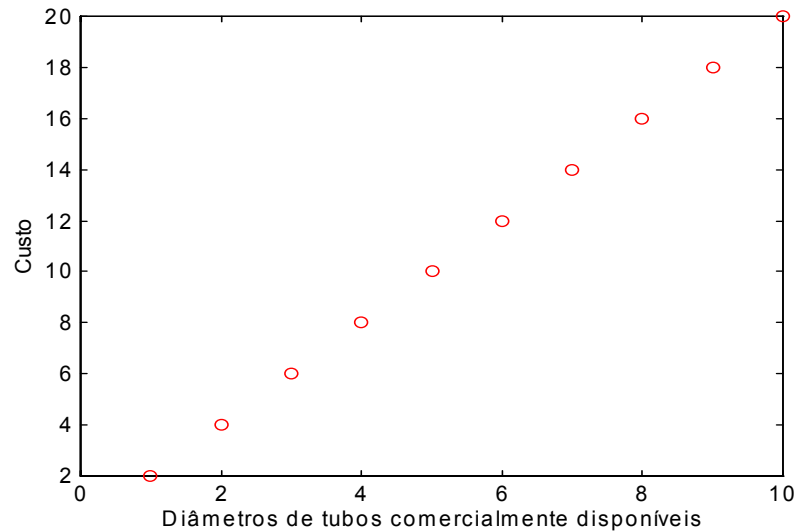


Figura 2-D: Custo de instalação de tubulação em função do diâmetro

2.10. Funções Unimodais e Multinodais

Na formulação de uma função objetivo é melhor, se possível, escolher uma unimodal (que tenha um único ponto de máximo ou de mínimo) que uma multinodal.

Numa função unimodal o extremo local é o extremo global; enquanto que numa função multinodal existem vários extremos locais, um dos quais é o extremo global. Os métodos numéricos apenas detectam extremos locais.

2.11. Funções Côncavas e Convexas

Funções convexas e côncavas são unimodais.

A determinação da convexidade ou concavidade ajuda a estabelecer se um extremo é também o extremo global.

Uma função é denominada *côncava* (tem ponto de máximo, **figura 2-e**) em uma certa região R , se para todos os pares $(\underline{x}_a, \underline{x}_b)$, pertencentes à região R ,

$$f[\theta \underline{x}_a + (1 - \theta) \underline{x}_b] \geq \theta f(\underline{x}_a) + (1 - \theta) f(\underline{x}_b)$$

Equação 2-BB

onde $0 \leq \theta \leq 1$. A função é *estritamente côncava* se apenas a relação de desigualdade ($>$) é atendida.

Uma função é denominada *convexa* (apresenta ponto de mínimo, **figura 2-f**) se na equação 2-bb o sinal de \geq for substituído por \leq , e *estritamente convexa* se o sinal de desigualdade for $<$.

Intuitivamente, uma superfície $f(\underline{x})$ é côncava se um segmento de reta que une dois pontos desta superfície esta sempre na ou sob a superfície. Similarmente $f(\underline{x})$ é convexa se um segmento de reta que une dois pontos desta superfície esta sempre na ou sobre a superfície. Um plano (ou reta, ou função linear) é uma função convexa e côncava ao mesmo tempo, embora não seja estritamente convexa ou côncava.

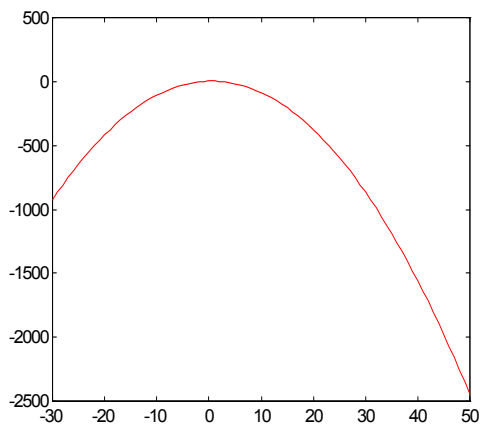


Figura 2-E: Função côncava

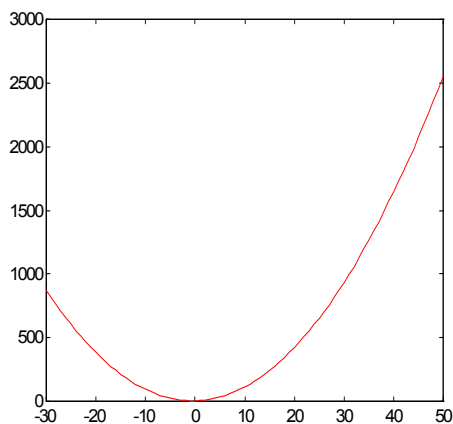


Figura 2-F: Função convexa

A equação 2-bb não é uma maneira conveniente de testar a concavidade ou convexidade de uma função. Em seu lugar utiliza-se a segunda derivada de $f(\underline{x})$, $\nabla^2 f(\underline{x})$, freqüentemente denominada de matriz de Hessian ou matriz Hessiana de $f(\underline{x})$ e denotada por $\underline{H}(\underline{x})$, uma matriz simétrica das derivadas de segunda ordem de $f(\underline{x})$.

Por exemplo, se $f(\underline{x})$ é uma função quadrática de 2ª ordem

$$f(\underline{x}) = h_{11}x_1^2 + h_{12}x_1x_2 + h_{22}x_2^2$$

Equação 2-CC

a Hessiana é dada por

$$\underline{H}(\underline{x}) = \nabla^2 f(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\underline{x})}{\partial x_2^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2h_{11} & h_{12} \\ h_{12} & 2h_{22} \end{bmatrix}$$

Equação 2-DD

Analogamente às funções monovariáveis, a matriz das derivadas segundas de uma função multivariável, ou seja a Hessiana, determina se uma função tem um máximo ou um mínimo em uma região, ou seja, a matriz $\underline{H}(\underline{x})$ estabelece se a função é côncava ou convexa numa dada região, respectivamente.

Resumindo, dada uma função objetivo $f(\underline{x})$ a sua matriz Hessiana $\underline{H}(\underline{x})$ determina a sua natureza:

1. Para $f(\underline{x})$ ser *estritamente convexa* \underline{H} deve ser positiva definida.
Para $f(\underline{x})$ ser *convexa* \underline{H} deve ser positiva semi-definida.
 \underline{H} é *positiva definida* se e somente se $\underline{x}^T \underline{H} \underline{x} > 0$ para todo $\underline{x} \neq \underline{0}$.
 \underline{H} é *positiva semi-definida* se e somente se $\underline{x}^T \underline{H} \underline{x} \geq 0$ para todo $\underline{x} \neq \underline{0}$.
Se todos os autovalores de \underline{H} forem positivos (>0) então \underline{H} é positiva definida.
Se todos os autovalores de \underline{H} forem não-negativos (≥ 0) então \underline{H} é positiva semi-definida.
2. Para $f(\underline{x})$ ser *estritamente côncava* \underline{H} deve ser negativa definida.
Para $f(\underline{x})$ ser *côncava* \underline{H} deve ser negativa semi-definida.
 \underline{H} é *negativa definida* se e somente se $\underline{x}^T \underline{H} \underline{x} < 0$ para todo $\underline{x} \neq \underline{0}$.
 \underline{H} é *negativa semi-definida* se e somente se $\underline{x}^T \underline{H} \underline{x} \leq 0$ para todo $\underline{x} \neq \underline{0}$.
Se todos os autovalores de \underline{H} forem negativos (<0) então \underline{H} é negativa definida.
Se todos os autovalores de \underline{H} forem não-positivos (≤ 0) então \underline{H} é negativa semi-definida.
3. \underline{H} é *indefinida* se $\underline{x}^T \underline{H} \underline{x} < 0$ para alguns \underline{x} e $\underline{x}^T \underline{H} \underline{x} > 0$ para outros.
Se uma função tem um ponto estacionário onde a matriz Hessiana tem autovalores negativos e positivos, a função não é côncava e nem convexa.

4. Para $f(\underline{x})$ ser simultaneamente côncava e convexa $\underline{H} = \underline{Q}$, e neste caso $f(\underline{x})$ é uma função linear.

Algumas vezes utiliza-se o fato de que a soma de funções convexas (côncavas) também é uma função convexa (côncava). Ou seja, podemos analisar $f(\underline{x})$ em termos das funções que a compõe. Se uma função é separável, isto é, $f(\underline{x}) = f_1(\underline{x}) + f_2(\underline{x})$, e se $f_1(\underline{x})$ e $f_2(\underline{x})$ são convexas (côncavas) então $f(\underline{x})$ também é convexa (côncava).

2.12. Região Convexa

São raros os problemas práticos sem restrições. As restrições podem ser impostas aos valores que as variáveis de decisão podem assumir ou sobre a própria função objetivo. Em geral as restrições são expressas em termos de equações e/ou inequações

$$g_k(\underline{x}) = 0 \text{ para } k = 1, 2, \dots, \ell$$

e

$$g_k(\underline{x}) \leq 0 \text{ para } k = \ell + 1, \ell + 2, \dots, \eta$$

Equação 2-EE

É importante o tipo da região de busca definida pelo conjunto de restrições do problema. *Regiões convexas* são mostradas na figura 2-g (a) e (b).

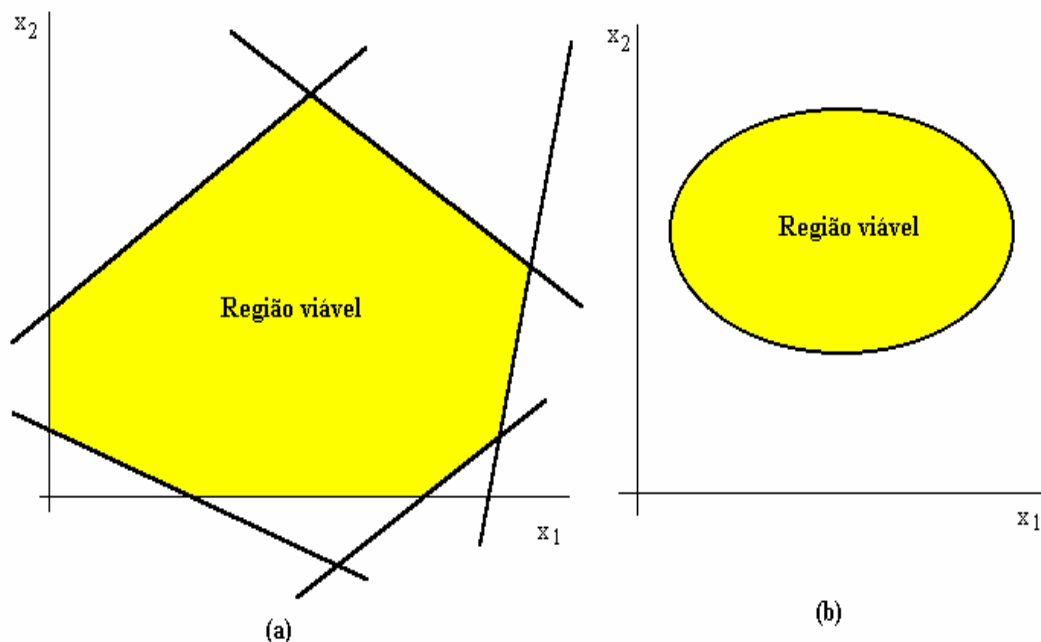


Figura 2-G: Regiões convexas

Na figura 2-h vemos *regiões viáveis não-convexas*.

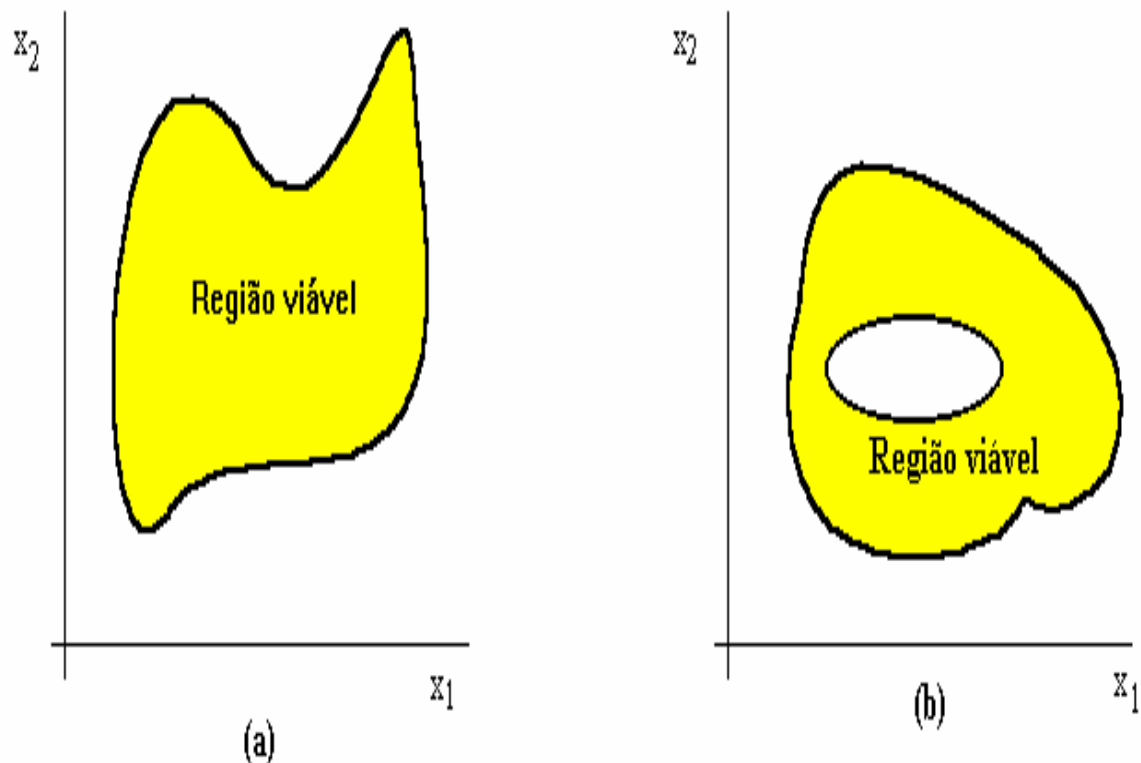


Figura 2-H: Regiões não-convexas

Se uma região é completamente limitada por funções côncavas do tipo $g_i(\underline{x}) \geq \underline{Q}$, então é uma região convexa fechada. Por outro lado se a região de busca é restrita por inequações da forma $g_i(\underline{x}) \leq \underline{Q}$ e convexas, então é uma região convexa aberta.

Encontramos muitas variações quanto ao tipo e número de extremos de uma FO e das suas FR's. No caso geral, é necessário encontrar todos os extremos locais e compará-los para determinar o extremo global. Este procedimento nem sempre é exigido quando certas combinações de FO's e FR's estão presentes.

Considere uma função objetivo côncava restrita por uma região convexa. Como a FO é côncava ela admite máximo local que também será o máximo global, pois se a região é convexa, na figura 2-i(a) e (b) observa-se que apenas um ponto de máximo é encontrado. Este, portanto é o máximo local e global. Observe que se a região não for convexa existem vários máximos locais, veja figura 2-i(c), e a comparação entre os mesmos é necessária. Similarmente para uma função convexa numa região convexa, existirá apenas um ponto de mínimo.

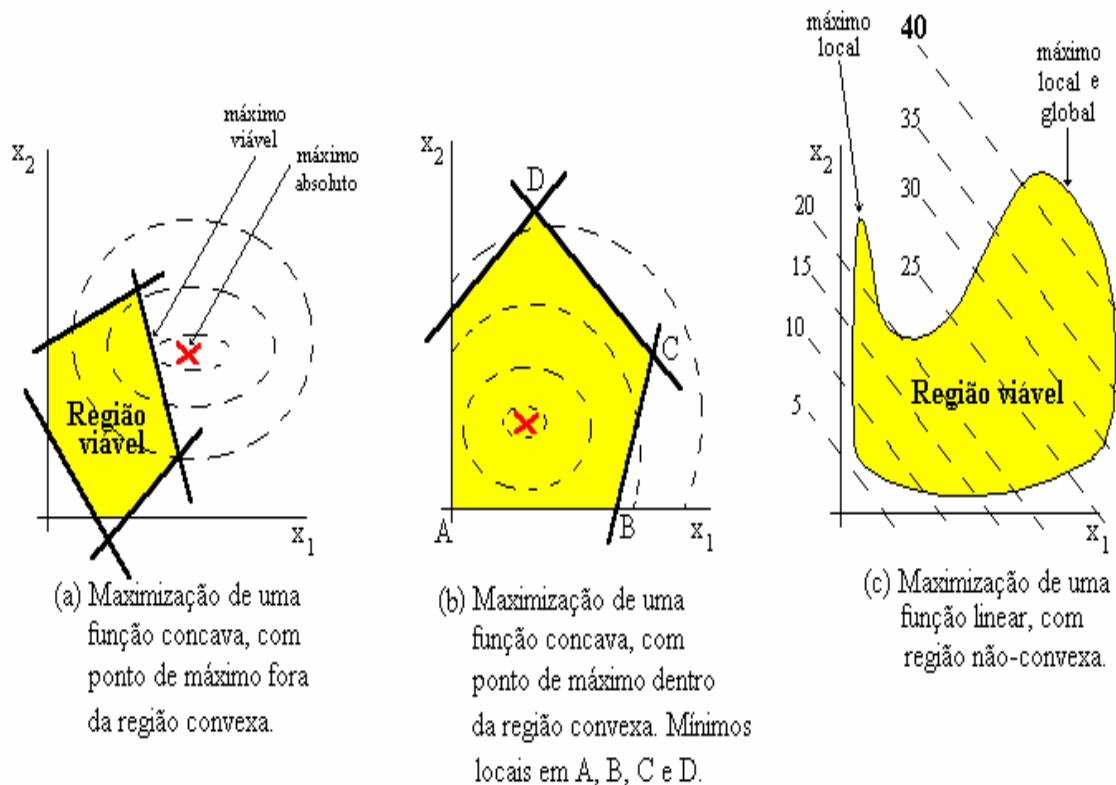


Figura 2-I: Relações entre FO's e regiões viáveis

Por outro lado pode existir mais de um ponto de mínimo numa FO côncava numa região convexa conforme é mostrado na figura 2-i(b), ou mais de um ponto de máximo numa FO convexa de uma região convexa.

Funções lineares são ao mesmo tempo côncavas e convexas, portanto, quando a região de busca é convexa, admite apenas um máximo e um mínimo local.

Assim se a FO's e suas FR's são bem comportadas a procura do ponto ótimo é facilitada.

Se uma FO é bem comportada para a maximização não implica que será na minimização e vice-versa. Assim a minimização de funções côncavas e a maximização de funções convexas envolve mais de um ponto ótimo.

Se na figura 2-i(c) a pesquisa do ponto ótimo começar pelo lado esquerdo da região viável o ponto alcançado será o máximo local (não global), por outro lado se a busca for iniciada pelo lado direito será atingido o máximo global. Portanto, para uma região não-convexa temos que comparar todos os pontos extremos entre si para determinar o extremo global. Uma alternativa para resolver este problema é completar a região não-convexa (área amarela da figura 2-j) de forma a torná-la convexa (área amarela mais azul da figura 2-j) e encontrar o extremo, que será o global se estamos minimizando uma função convexa numa região convexa, ou se maximizando uma função convava numa região convexa..

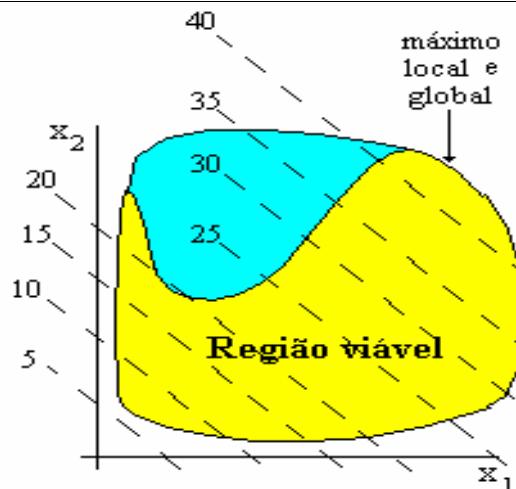


Figura 2-J: Região não-convexa transformada em convexa

2.13. Condições Necessárias e Condições Suficientes para um Extremo de uma Função Irrestrita

A maneira mais fácil de estabelecer as condições necessárias e as condições suficientes para que um ponto \underline{x} seja mínimo ou máximo é através da expansão em série de Taylor da função $f(\underline{x})$ em torno do presumível ponto extremo \underline{x}^*

$$f(\underline{x}) = f(\underline{x}^*) + \nabla^T f(\underline{x}^*) \Delta \underline{x} + \frac{1}{2} (\Delta \underline{x}^T) \nabla^2 f(\underline{x}^*) \Delta \underline{x} + O_3(\Delta \underline{x})$$

Equação 2-FF

onde $\Delta \underline{x} = \underline{x} - \underline{x}^*$. Assumindo que todos os termos da equação 2-ff existem e os termos de ordem igual ou superior a 3 são desprezíveis, pode-se concluir a respeito dos pontos estacionários por intermédio das derivadas de $f(\underline{x})$.

Por definição, um mínimo local no ponto \underline{x}^* é tal que nenhum outro ponto nas vizinhanças de \underline{x}^* gera valores de $f(\underline{x})$ menores que $f(\underline{x}^*)$, ou

$$f(\underline{x}) - f(\underline{x}^*) \geq 0$$

Equação 2-GG

\underline{x}^* é mínimo global se a equação 2-gg é atendida para todo \underline{x} pertencente à região viável. Analogamente, \underline{x}^* é máximo local se

$$f(\underline{x}) - f(\underline{x}^*) \leq 0$$

Equação 2-HH

Examinando o segundo termo do lado direito da equação 2-ff: $\nabla^T f(\underline{x}) \Delta \underline{x}$, chega-se à conclusão que $\nabla^T f(\underline{x}^*) = 0$, pois como $\Delta \underline{x}$ assume valores negativos e positivos, para que a condição de mínimo (equação 2-gg) ou de

máximo (equação 2-hh) seja sempre satisfeita, por menor que que seja $\Delta \underline{x}$, $\nabla^T f(\underline{x}^*)$ deve ser sempre nulo, senão essa condição seria violada, pois, para valores muito pequenos de $\Delta \underline{x}$, os termos das derivadas de ordem igual ou superior a 2 são desprezíveis em relação ao elemento das derivadas de 1^a.

Portanto para \underline{x}^* ser ponto estacionário o gradiente de $f(\underline{x})$ deve ser nulo em \underline{x}^* , $\nabla^T f(\underline{x}^*) = \underline{0}$. Essa condição é apenas necessária pois o ponto \underline{x}^* pode ser ponto de sela ou ponto de inflexão.

Se a condição necessária ($\nabla^T f(\underline{x}^*) = \underline{0}$) é atendida, então $\nabla^2 f(\underline{x}^*)$ deve ser maior que zero para que \underline{x}^* seja ponto mínimo, pois a equação 2-gg deve ser satisfeita mesmo para valores muito pequenos de $\Delta \underline{x}$, e nesse caso os termos de ordem igual ou superior a 3 da equação 2-ff são desprezíveis em relação ao termo da derivada 2^a. Raciocínio análogo com a equação 2-hh pode ser feito para interpretar se um ponto estacionário é máximo.

Logo para \underline{x}^* ser ponto de mínimo, $\nabla^T f(\underline{x}^*) = \underline{0}$ e $\nabla^2 f(\underline{x}^*) > \underline{0}$. Essa condição é apenas suficiente pois pode ser que a 2^a derivada não exista no ponto \underline{x}^* , apesar deste ser ponto de mínimo. Similarmente raciocina-se para o ponto de máximo.

Se $\nabla f(\underline{x}^*) = \underline{0}$ e $\nabla^2 f(\underline{x}^*) = \underline{0}$ então \underline{x}^* é ponto de sela.

Resumindo as condições necessárias (CN1 e CN2 abaixo) e as condições suficientes (CS3 e CS4) que garantem que \underline{x}^* é um extremo são as seguintes:

CN1. $f(\underline{x})$ seja uma vez diferenciável no ponto \underline{x}^* .

CN2. $\nabla f(\underline{x}^*) = \underline{0}$, isto é, \underline{x}^* seja um ponto estacionário.

CS1. $f(\underline{x})$ seja duas vezes diferenciável no ponto \underline{x}^* .

CS2. $\nabla^2 f(\underline{x}^*) = \underline{H}(\underline{x}^*)$ seja positiva definida para que um mínimo exista em \underline{x}^* , e seja negativa definida para que um máximo exista em \underline{x}^* .

Na tabela 2-a vê-se um resumo das condições discutidas nesta seção.

Tabela 2-A

$\nabla f(\underline{x}^*)$	$\underline{H}(\underline{x}^*) = \nabla^2 f(\underline{x}^*)$	$\Delta \underline{x}^T \cdot \nabla^2 f(\underline{x}^*) \cdot \Delta \underline{x}$	Próximo de \underline{x}^* $f(\underline{x}) - f(\underline{x}^*)$	Pode-se afirmar que
$\neq \underline{0}$	não é ponto estacionário			
$= \underline{0}$	positiva definida	$> \underline{0}$	$> \underline{0}$	existe mínimo
$= \underline{0}$	positiva semi- definida	$\geq \underline{0}$	possivelmente $> \underline{0}$	possivelmente existe mínimo
$= \underline{0}$	negativa definida	$< \underline{0}$	$< \underline{0}$	existe máximo
$= \underline{0}$	negativa semi- definida	$\leq \underline{0}$	possivelmente $< \underline{0}$	possivelmente existe máximo
$= \underline{0}$	indefinida	ambos $\geq \underline{0}$ e $\geq \underline{0}$, dependendo de $\Delta \underline{x}$	$> \underline{0}$, $< \underline{0}$ ou nenhum dos dois	nada se pode afirmar

Observações:

- $\nabla f(\underline{x})$ que é o gradiente da função $f(\underline{x})$.
- $\underline{H}(\underline{x}) = \nabla^2 f(\underline{x})$ é denominada de matriz Hessiana de $f(\underline{x})$, ou simplesmente Hessiano(a) de $f(\underline{x})$.
- Alguns autores denominam o determinante de $\nabla^2 f(\underline{x})$ de Hessiano de $f(\underline{x})$, ou seja, $\underline{H}(\underline{x}) = \det[\nabla^2 f(\underline{x})]$, porém esta **não** é a nomenclatura adotada neste trabalho.

2.14. Interpretação da Função Objetivo em Termos de uma Aproximação Quadrática

Se uma função de duas variáveis é ou pode ser aproximada por uma função quadrática do tipo

$$f(\underline{x}) = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{12}x_1x_2$$

Equação 2-II

então os autovalores da matriz Hessiana de $f(\underline{x})$ podem ser utilizados para interpretar a natureza de $f(\underline{x})$ nos pontos estacionários \underline{x}^* . A tabela 2-b lista as conclusões que podem ser alcançadas examinando os autovalores de $\underline{H}(\underline{x}^*)$, e as ilustram as diferentes superfícies correspondentes a cada tipo de função quadrática.

Tabela 2-B: Interpretação geométrica de uma função quadrática

Caso	Relação entre os autovalores	Sinal α_1	Sinal α_2	Tipo de contorno	Interpretação geométrica	Ponto estacionário	Problema de otimização	Fig.
1	$\alpha_1 = \alpha_2$	-	-	Círculo	Monte circular	Máximo	bem-comportado e raro na prática	2.11
2	$\alpha_1 = \alpha_2$	+	+	Círculo	Vale circular	Mínimo	bem-comportado e raro na prática	2.11
3	$\alpha_1 > \alpha_2$	-	-	Elipse	Monte elíptico	Máximo	bem-comportado e mais freqüente	2.12
4	$\alpha_1 > \alpha_2$	+	+	Elipse	Vale elíptico	Mínimo	bem-comportado e mais freqüente	2.12
5	$ \alpha_1 = \alpha_2 $	+	-	Hipérbole	Sela simétrica	Ponto de sela	degenerado	2.13
6	$ \alpha_1 = \alpha_2 $	-	+	Hipérbole	Sela simétrica	Ponto de sela	degenerado	2.13
7	$\alpha_1 > \alpha_2$	+	-	Hipérbole	Sela alongada	Ponto de sela	degenerado	2.13
8	$\alpha_2 = 0$	-		Reta	Cordilheira estacionária	Infinitos	degenerado	2.15
9	$\alpha_2 = 0$	+		Reta	Vale estacionário	Infinitos	degenerado	2.15
10	$\alpha_2 = 0$	-		Parábola	Cordilheira crescente	No ∞	degenerado	2.16
11	$\alpha_2 = 0$	+		Parábola	Cordilheira decrescente	No ∞	degenerado	2.16

Uma função objetivo é dita bem-comportada quando seus contornos formam uma região convexa.

Como mostrado na tabela 2-b os autovalores da matriz Hessiana de $f(\underline{x})$ indicam a forma da superfície formada por $f(\underline{x})$. Por sua vez os autovetores de $\underline{H}(\underline{x})$ correspondem às direções dos principais eixos dos contornos de $f(\underline{x})$. Esta informação pode ser utilizada para definir direções de pesquisa mais eficientes.

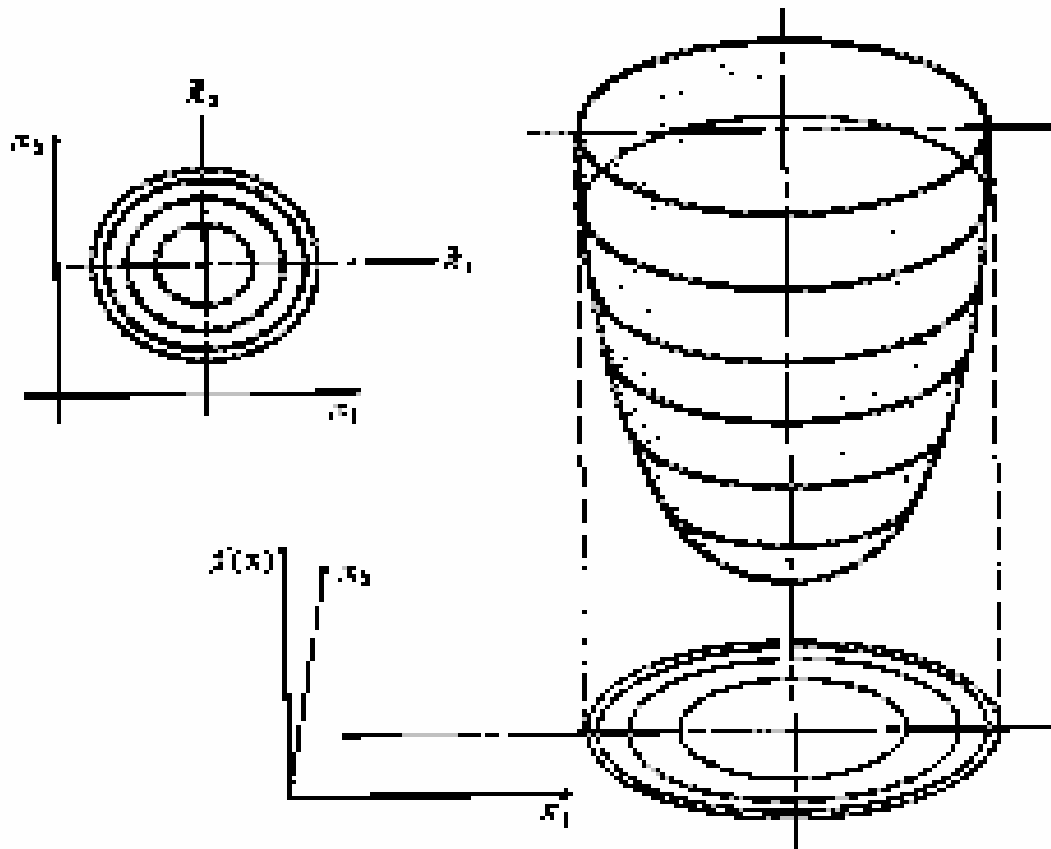


Figura 2-K: Geometria de FO de 2^a ordem de duas VD's: contornos circulares

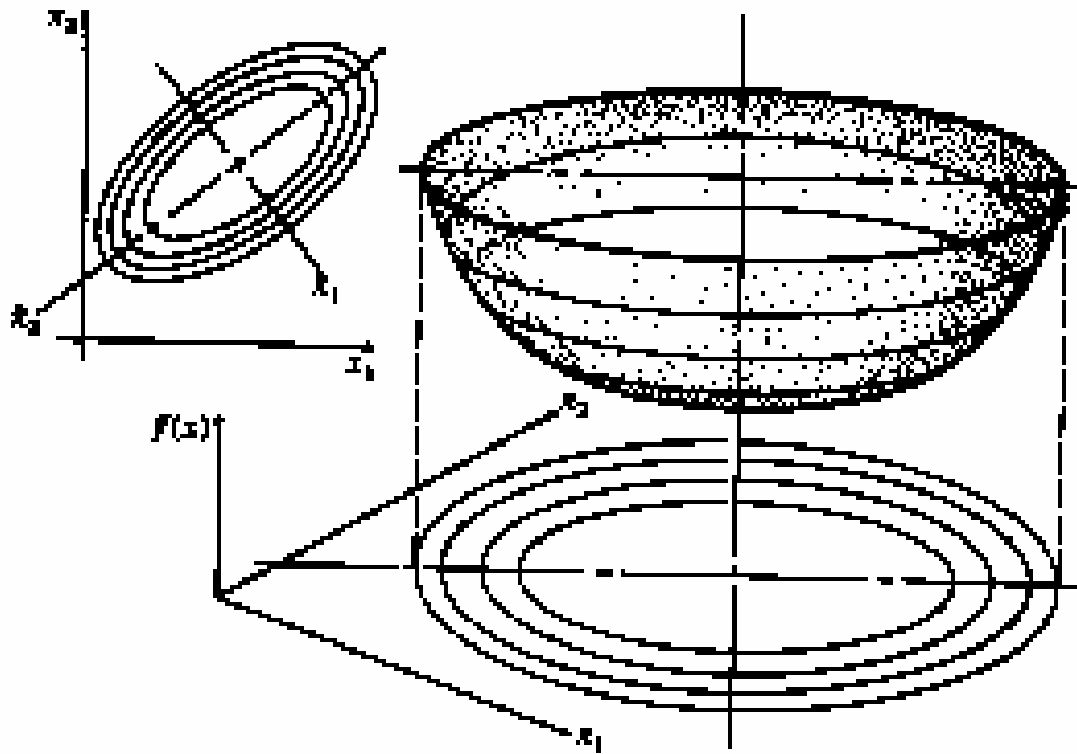


Figura 2-L: Geometria de FO de 2ª ordem de duas VD's: contornos elípticos

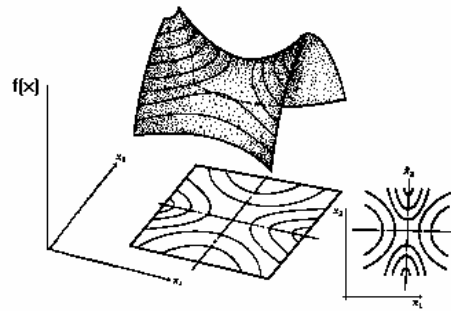


Figura 2-M: Geometria de FO de 2ª ordem de duas VD's: ponto de sela

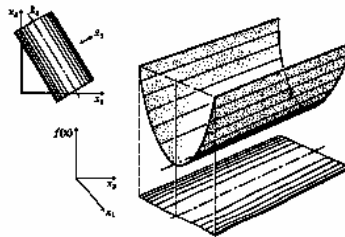


Figura 2-N: Geometria de FO de 2ª ordem de duas VD's: vale

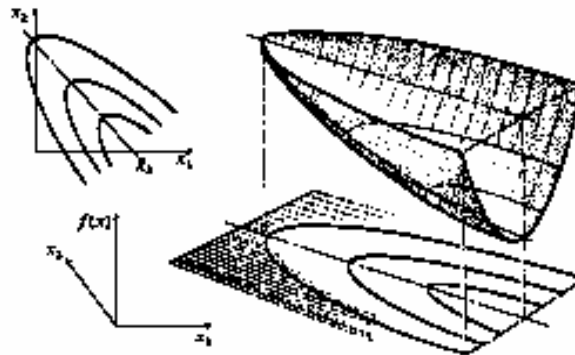


Figura 2-O: Geometria de FO de 2ª ordem de duas VD's: cordilheira decrescente

2.15. Exercícios

E2.1. Utilizando a definição de inversa de uma matriz, expresse o vetor \underline{x} em função do vetor \underline{z} .

$$z_1 = x_1 + x_2$$

$$z_2 = 2x_1 + x_2$$

E2.2. Utilizando a técnica da matriz aumentada (operadores-linha) calcule a inversa de \underline{A} :

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

Compare a matriz \underline{A}^{-1} com a inversa calculada pelo comando `inv(A)` do MATLAB.

E2.3. Calcule a solução dos seguintes sistemas de equações lineares: $\underline{A} \underline{x} = \underline{b}$

(a) $\underline{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}; \underline{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

(b) $\underline{A} = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}; \underline{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 5 \end{bmatrix}$

(c) $\underline{A} = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}; \underline{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 3 \end{bmatrix}$

E2.4. Utilizando a equação $\det[\underline{A} - \alpha \underline{I}] = 0$ calcule os autovetores e autovalores da matriz $\underline{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$. Compare os resultados com os obtidos pelo comando `[v,d] = eig(A)`

E2.5. Determine os pontos estacionários da função $f(x) = \frac{1}{x^4 + 2x^3 + x^2 + 1}$ e classifique-os.

E2.6. Verifique a região na qual $f(x)$ e $f'(x)$ são contínuas:

a) $f(x) = \frac{1}{x}$

b) $f(x) = \ln(x)$

E2.7. Estude a variação da função $f(x) = 2x^2 - x^3$, isto é, estabeleça as regiões de concavidades e/ou convexidades, calcule os pontos estacionários e obtenha o valor de $f(x)$ nesses pontos. Trace gráficos de $f(x)$.

E2.8. Determine a convexidade/concavidade das funções abaixo:

a) $f(\underline{x}) = 2x_1^2 - 3x_1x_2 + 2x_2^2$

b) $f(\underline{x}) = x_1^2 + x_1x_2 + 2x_2 + 4$

c) $f(\underline{x}) = 2x_1 + 3x_2 + 6$

d) $f(\underline{x}) = 2x_1^2 + 2x_1x_2 + 1,5x_2^2 + 7x_1 + 8x_2 + 24$

E2.9. Determine a região viável e verifique, através da Hessiana e de gráficos, se a mesma é convexa ou não:

a) $-x_1^2 + x_2 \geq 1$; $x_1 - x_2 \geq -2$ b) $-x_1^2 + x_2 \geq 1$; $x_1 - x_2 \leq -2$

c) $x_1 \leq 6$; $x_2 \leq 6$; $x_1 \geq 0$; $x_2 \geq 0$; $x_1 + x_2 \leq 6$

E2.10. Classifique os pontos estacionários e verifique se as condições necessárias e as suficientes são atendidas:

a) $f(\underline{x}) = x^{4/3}$

b) $f(\underline{x}) = 4x^3$

c) $f(\underline{x}) = x_1^3 + x_2^2 - 3x_1 + 8x_2 + 2$

d) $f(\underline{x}) = 4 + 4,5x_1 - 4x_2 + x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 + x_1^4 - 2x_1^2x_2$

E2.11. Happel e Jordan (*Chemical Process Economics*, Marcel Dekker, New York, 1975, p. 178) desenvolveram uma função objetivo (custo) para uma coluna de destilação:

$$f(n, P, R) = 14720(100 - P) + 6560R - 30,2PR + 6560 - 30,2P + \\ 19,5n(5000R - 23PR + 5000 - 23P)^{0,5} + \\ 23,2(5000R - 23PR + 5000 - 23P)^{0,62}$$

onde n é o número de estágios teóricos, R é a razão de refluxo e P é o percentual de recuperação da corrente do fundo. Qual o ponto ótimo? Neste ponto a FO é convexa? Existe alguma região não convexa nas vizinhanças do ponto ótimo?

E2.12. Uma reação homogênea converte 2 compostos orgânicos (A e B) num produto P pelo aquecimento do meio reacional. Os reagentes podem ser injetados no reator, enquanto que vapor passa por uma serpentina para aquecer o meio reacional.

O produto P pode ser vendido a 50\$/kg-mol. Para 1 kg-mol de alimentação, o custo da alimentação (em \$/kg-mol) é uma função da fração molar de A (x_A) e é dado por $f(x_A) = 2 + 10x_A + 20x_A^2$. O custo do vapor (em dolares) é uma função de S (kg de vapor/kg-mol de alimentação) e é $g(S) = 1 + 0,003S + 2 \times 10^{-6}S^2$. O rendimento a P é dado por $y_P(x_A, S) = 0,1 + 0,3x_A + 0,001S + 0,0001x_AS$, onde as unidades de y_P são kg-mol de P /kg-mol da alimentação. Pede-se

- Obtenha a função lucratividade (base de 1 kg-mol de alimentação) em função de x_A e S
- Maximize a FO sujeita às seguintes restrições: $0 \leq x_A \leq 1$ e $S \geq 0$
- Demonstre matematicamente se f é uma função côncava ou convexa?
- A região viável é convexa? Por que?

Ref.: Todos os exercícios foram extraídos ou adaptados de Edgar, T. F. & Himmelblau, D. M. "Optimization of Chemical Processes".

3. Formulação Matemática de um Problema de Otimização

Podemos sub-dividir o problema de otimização em três etapas:

E1. Expressão em linguagem matemática do problema.

- Identificação das variáveis de decisão (VD's) e das auxiliares (VA's, todas as demais variáveis e constantes)
- Identificação do objetivo (FO)
- Identificação das restrições (FR's)

E2. Resolução das equações e obtenção do(s) ponto(s) ótimo(s).

E3. Interpretação dos resultados.

Dessas três etapas, sem dúvida nenhuma, a primeira, ou seja, a formulação matemática do problema é a mais difícil e crítica. Difícil pois requer um profundo conhecimento do sistema a ser otimizado e o levantamento de informações nem sempre disponíveis ou quantificáveis de maneira precisa. Crítica porque as demais etapas dependem dela.

O desenvolvimento da função objetivo e de suas restrições requer que sejam arbitradas hipóteses simplificadoras, que preservem as principais características do sistema e que possibilitem a resolução do problema. Ou seja, deve-se estabelecer um modelo matemático simultaneamente simples e fiel aos fenômenos do sistema. Não existe um procedimento padronizado para desenvolver um modelo matemático de um sistema. Na verdade esta tarefa é uma *arte* que deve ser aprendida a partir da realização de vários exercícios e exemplos.

A resolução do problema de otimização se resume a aplicação de algoritmos numéricos adequados a cada classe de problemas. Esta tarefa não é complicada, embora o desenvolvimento e implementação de novos algoritmos o seja. Porém já estão comercialmente disponíveis ótimos "pacotes computacionais":

PCO1. IMSL (International Mathematical and Statistical Library),

PCO2. NAG (Numerical Algorithms Group),

PCO3. HARWELL,

PCO4. NUMERICAL RECIPES in C, FORTRAN, PASCAL,

PCO5. **TOOLBOX DE OTIMIZAÇÃO DO MATLAB.**

Neste curso ficaremos mais interessados em aplicar corretamente os algoritmos implementados no MATLAB.

A interpretação dos resultados obtidos é outra etapa que requer muita atenção e conhecimento a respeito do sistema. Por exemplo, quando existe a

multiplicidade de pontos extremos a escolha do melhor pode recair sobre um extremo local diferente do global, mas que apresente características mais apropriadas para o sistema.

Como foi dito no Capítulo 1, a expressão matemática de um problema de otimização tem duas partes:

P1. a *função objetivo* (FO), ou seja, o critério de desempenho a ser atingido, cuja especificação é obrigatória;

P2. as *restrições ou funções de restrição* (FR), que estão quase sempre presentes.

De maneira geral as restrições podem ser escritas sob a forma de equações (algébricas ou diferenciais) e/ou inequações (algébricas ou diferenciais).

Genericamente o problema de otimização pode ser formulado da seguinte forma

$$\begin{aligned} \min_{\underline{x}} f(\underline{x}) \\ \text{sujeito a } g(\underline{x}) = \underline{0} \\ \text{e/ou } h(\underline{x}) \leq \underline{0} \end{aligned}$$

Equação 3-A

Para resolver os problemas lineares ou não-lineares de otimização com ou sem restrições existem inúmeros métodos numéricos. Nos capítulos 4, 5, e 6 descreveremos alguns dos algoritmos mais utilizados nos problemas de engenharia química.

Nas seções 3.1, 3.2 e 3.3 estudaremos como definir a FO e suas FR's.

3.1. A Função Objetivo (FO)

Devemos ser capazes de *traduzir* expressões verbais do tipo maximização do lucro ou minimização dos custos em termos matemáticos. Devemos expressar a FO em termos de unidades monetárias ou em unidades quantificáveis, e omitir expressões filosóficas do tipo "construir um mundo melhor" ou "desenvolver uma sociedade mais humana". Também não trataremos de problemas que envolvem múltiplas funções objetivos.

Na definição da FO podemos considerar apenas **objetivos econômicos** (maximizar a lucratividade, por exemplo) ou apenas **objetivos operacionais** (diminuir a diferença entre o valor desejado e o valor medido na operação de um equipamento) ou combinar os dois tipos de objetivos numa única FO.

Todos os procedimentos numéricos de otimização requerem que seja definido um **critério de parada ou tolerância**, pois a solução exata nunca é encontrada, mas apenas uma aproximação da mesma.

3.1.1. Tolerância ou Critério de Parada

Como dissemos anteriormente, o ponto ótimo obtido está numa vizinhança do ótimo verdadeiro. Esta vizinhança pode ser tão pequena quanto a precisão das informações utilizadas, mas sempre será necessário arbitrar tal aproximação, isto é, a tolerância.

Um dos seguintes critérios podem ser utilizados para interromper os processos iterativos de procura do ponto ótimo:

Erro absoluto na FO:

$$|f(\underline{x}^{k+1}) - f(\underline{x}^k)| < \varepsilon_1$$

Equação 3-B

Erro relativo na FO:

$$\left| \frac{f(\underline{x}^{k+1}) - f(\underline{x}^k)}{f(\underline{x}^k)} \right| < \varepsilon_2$$

Equação 3-C

Erro absoluto no ponto ótimo:

$$|x_i^{k+1} - x_i^k| < \varepsilon_3 \quad \forall i \leq n$$

Equação 3-D

ou

$$\|x_i^{k+1} - x_i^k\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i^{k+1} - x_i^k)^2} < \varepsilon_4$$

Equação 3-E

Erro relativo no ponto ótimo:

$$\left| \frac{x_i^{k+1} - x_i^k}{x_i^k} \right| < \varepsilon_5 \quad \forall i \leq n$$

Equação 3-F

Erro absoluto na direção de busca:

$$\|\nabla f(\underline{x}^k)\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial f(x)}{\partial x} \Big|_{\underline{x}^k} \right]^2} < \varepsilon_6 \quad \forall i \leq n$$

Equação 3-G

Na verdade devemos utilizar no mínimo 2 critérios para caracterizar que as tolerâncias especificadas foram alcançadas.

3.1.2. Objetivos Econômicos

A FO pode ser escrita em relação ao lucro e/ou custo, ou simplesmente em termos da *lucratividade* de um dado projeto.

O termo *lucratividade* é utilizado para mensurar a quantidade de lucro gerado, tal medida pode ser expressa de diferentes maneiras. Qual a forma mais adequada depende do ambiente onde esta inserido o problema.

Para desenvolver uma FO que leve em conta a *lucratividade* de um dado empreendimento é necessário compreender conceitos tais como depreciação, fluxo de caixa, custos de capital, custos operacionais, valor presente e valor futuro, inflação, vida econômica, investimento inicial, capital de giro, taxa de retorno de investimento, valor presente líquido, tempo de retorno, etc. Infelizmente não temos tempo para discutir com profundidade tais temas e por isso não os trataremos, com excessão para os **custos de capital e operacional** que abordaremos a seguir.

Podemos estabelecer os seguintes objetivos econômicos:

OE1. A minimização dos custos ou maximização dos lucros operacionais.

OE2. A minimização dos custos de investimento (ou de capital).

OE3. A minimização de uma função que inclua os custos de capital e operacional.

A primeira categoria de funções objetivo (OE1) envolvem apenas custos variáveis e a receita com as vendas e é encontrada em situações onde o custo de capital é uma quantia fixa (os equipamentos já estão comprados e funcionando).

A segunda categoria (OE2) aparece em situações onde não existem custos variáveis, por exemplo, em muitos problemas de projeto mecânico de equipamentos.

A terceira categoria (OE3) inclui simultaneamente custo de capital e custo operacional. Por exemplo na decisão de implantar uma nova fábrica ou ampliar uma já existente. Este tipo de problema é mais complexo e difícil de equacionar.

O Exemplo 3.1 apresenta um problema de otimização cuja FO é função apenas dos custos operacionais.

Exemplo 3.1: FO função apenas dos custos e receitas operacionais. Tempo ótimo de campanha de um reator catalítico.

Considere um ciclo de operação de um reator catalítico que sofre regeneração periódica de seu leito. Seja x_1 o número de dias nos quais o catalisador é utilizado no reator e x_2 o número de dias necessários para a regeneração. Portanto cada ciclo dura $x_1 + x_2$ dias.

As seguintes hipóteses podem ser consideradas:

H.1. A operação do reator apenas pode ser inicializada no turno da manhã, portanto $x_1 + x_2$ deve ser um número inteiro.

H.2. Vazão constante de alimentação do reator q [=] kg/dia

H.3. Custo constante da matéria-prima C_1 [=] \$/kg

H.4. Valor constante do produto C_2 [=] \$/kg

H.5. Custo constante de regeneração C_3 [=] \$/ciclo de regeneração

H.6. Atividade catalítica (A) obedece a equação $A = 1 - K.x_1$

onde A é a fração massica convertida de matéria-prima, 1 é a atividade no início da operação do reator, K é um fator constante. $q.A$ é a quantidade de matéria-prima convertida em produto em um dia.

H.7. Custo da separação entre reagente e produto é desprezível.

H.8. Custo de recirculação de reagente é negligenciável.

Desenvolva uma função objetivo em relação ao custo e receita operacional e encontre o ponto ótimo. Para $x_2 = 2$, $K = 0,02$, $q = 1000$, $C_1 = 0,4$, $C_2 = 1$, $C_3 = 1000$ qual o valor de x_1^{opt} .

Solução: *Identificação da VD:* Exceto x_1 , todas as demais variáveis são fixas, portanto esta é a variável de decisão.

Identificação do objetivo: Para um ciclo completo de operação e regeneração ($x_1 + x_2$), a FO definida como a maximização do lucro diário (receita - despesa) pode ser escrita como:

maximizar o Lucro/dia

Onde:

Lucro/dia=(receita diária)-(custo diário matéria-prima)-(custo diário regeneração)

Lucro/dia = $f(q, x_1, x_2, C_1, C_2, C_3, A)$

receita diária = (preço de venda do produto) x (produção diária)

(produção diária) = (produção total)/(número total de dias)

(produção diária) = $(q.A_{med}.x_1)/(x_1 + x_2)$

$$A_{med} = \frac{\int_0^{x_1} A dx_1}{\int_0^{x_1} dx_1} = \frac{\int_0^{x_1} (1 - Kx_1) dx_1}{x_1} = \frac{x_1 - K \frac{x_1^2}{2}}{x_1} = 1 - K \frac{x_1}{2}$$

custo diário matéria-prima=(preço matéria-prima)x(consumo diário matéria-prima)

consumo diário matéria-prima = (consumo total) / (número total de dias)

consumo diário matéria-prima = $q.x_1/(x_1 + x_2)$

custo diário regeneração=(custo de regeneração por ciclo)/(número total dias)

Portanto a FO é:

$$f(q, x_1, x_2, C_1, C_2, C_3, A) = \frac{C_2 q A_{med} x_1}{x_1 + x_2} - \frac{C_1 q x_1}{x_1 + x_2} - \frac{C_3}{x_1 + x_2} = \frac{C_2 q A_{med} x_1 - C_1 q x_1 - C_3}{x_1 + x_2}$$

Identificação das restrições: Não existem restrições.

Para encontrar o ponto ótimo temos que derivar a FO em relação a x_1 e igualar a zero, e resolvendo para x_1 encontramos

$$x_1^{opt} = x_1^* = \sqrt{\left[x_2^2 + \left(\frac{2}{K} \right) \left(x_2 - \frac{C_1 x_2}{C_2} + \frac{C_3}{q C_2} \right) \right]} - x_2$$

Para $x_2 = 2$, $K = 0,02$, $q = 1000$, $C_1 = 0,4$, $C_2 = 1$, $C_3 = 1000$, então $x_1^{opt} = 12,97$. Obviamente x_1 é uma variável inteira, logo x_1^{opt} deve ser aproximada para 13, este procedimento é satisfatório se x_1^{opt} assume valores elevados (12, 13, 14, 15, etc.), mas é inapropriado se x_1^{opt} está em torno de 1, 2 ou 3, neste caso devemos redefinir x_1 para unidades tais como horas ou turno.

O Exemplo 3.2 trata do caso em que apenas o custo de capital é importante.

Exemplo 3.2: FO função apenas dos custos de capital. Projeto de um vaso de pressão.

Suponha que nós queremos encontrar a configuração ótima que minimiza os custos de investimento num vaso cilíndrico de pressão. O volume (V) desse vaso é conhecido e fixo. Desenvolva uma FO conveniente para este problema. Encontre a relação ótima entre altura (L) e diâmetro (D), $(L/D)^{opt}$, e compare o resultado obtido com o critério empírico de projeto $(L/D)^{opt} = 3$.

Solução: *Identificação da(s) VD's:* obviamente são a altura L e o diâmetro D .

Identificação do objetivo: Para um ciclo completo de operação e regeneração A FO pode ser definida como:

minimizar o custo de fabricação do vaso de pressão

Para *matematizar* a expressão da FO temos que inicialmente estabelecer algumas hipóteses simplificadores da geometria do vaso

H1. Topo e fundo planos.

H2. Paredes (lateral, topo e fundo) tem espessura (t) e massa específica (ρ) constantes, e a espessura não depende da pressão.

H3. O custo de fabricação da lateral, do fundo e do topo é o mesmo, em S (\$/unidade de peso).

H4. Não existe perda de material durante a fabricação do vaso, pois existem chapas de metal de todas as dimensões

Admitindo as hipóteses H1-4 o custo do vaso fica apenas em função da quantidade de material empregada na fabricação do mesmo:

custo = $S \times$ (peso do material empregado na fabricação do vaso)

e a expressão matemática da FO é:

$$\min_{S, \rho, t, D, L} f_1$$

$$\text{onde } f_1(S, \rho, t, D, L) = S\rho \left(2\frac{\pi D^2}{4} + \pi DL \right) t \quad \text{em unidade de custo em \$}$$

Como S , ρ e t são constantes então a FO também pode ser

$$\min_{t, D, L} f_2$$

$$\text{onde } f_2(\rho, t, D, L) = \rho \left(\frac{\pi D^2}{2} + \pi DL \right) t \quad \text{em unidades de peso}$$

ou

$$\min_{D, L} f_3$$

$$\text{onde } f_3(D, L) = \left(\frac{\pi D^2}{2} + \pi DL \right) \quad \text{em unidades de area}$$

Note que as três FO's diferem apenas de fatores multiplicativos constantes, portanto a inclusão ou não desses fatores apenas afetará o valor da FO, mas não alterará o valor das variáveis de projeto. Logo, por simplicidade, utilizaremos a FO em unidades de área.

Como o volume do vaso cilíndrico é constante existe uma relação entre altura e diâmetro do mesmo:

$$V = \frac{\pi D^2}{4} L \Leftrightarrow L = \frac{4V}{\pi D^2}$$

Assim existe apenas uma variável de decisão e podemos reescrever a FO da seguinte forma

$$\min_D f_4$$

$$\text{onde } f_4(D) = \left(\frac{\pi D^2}{2} + \frac{4V}{D} \right) \quad \text{em unidades de area}$$

Identificação da(s) restrições: não existem restrições.

Para encontrar o ponto ótimo temos que diferenciar f_4 em relação a variável de projeto igualar a zero, resultando em

$$D^{opt} = \left(\frac{4V}{\pi} \right)^{1/3}$$

e, conseqüentemente

$$L^{opt} = \left(\frac{4V}{\pi} \right)^{1/3}$$

ou seja

$$\left(\frac{L}{D} \right)^{opt} = 1$$

Logo a razão $(L/D)^{opt}$ obtida é significativamente diferente da esperada ($L/D = 3$). Esta diferença pode ser devida a escolha de hipóteses inapropriadas.

Brummerstedt (1944)[#] e Happel e Jordan (1975)[@] desenvolveram hipóteses mais realistas para o problema do dimensionamento de vasos de pressão:

- H1. Topo e fundo tem o formato de elipses 2:1, com uma área dada por $2(1,16D^2) = 2,32D^2$
- H2. Custo de fabricação das extremidades é maior que para a lateral; Happel sugere um fator de 1,5.
- H3. O custo de fabricação por unidade de peso S (\$/unidade de peso) e massa específica (ρ) são constantes.
- H4. A espessura t é função do diâmetro do vaso, do esforço a que o aço será submetido, da pressão e da corrosão admissíveis. Por exemplo, para uma pressão de projeto de 250 psi (17 atm) e uma corrosão prevista de 1/8 in, a espessura t (em polegadas) em função do diâmetro D (em pés):

$$t = 0,0108D + 0,125$$

Identificação da(s) variáveis de decisão: considerando as discussões anteriores a única VD é o diâmetro D do vaso.

[#] Brummerstedt, E. F., *Natl. Pet. News*, **36**, R282, R362, R497 (1944).

[@] Happel, J. e D. G. Jordan, *Chemical Process Economics*, 2^a. edição, Marcel Dekker, New York (1975).

Identificação do objetivo: é o mesmo anterior, ou seja, minimizar o custo de fabricação do vaso de pressão

As novas hipóteses forçam a FO a ser expressa em dólares, pois a área ou o peso não são mais diretamente proporcionais ao custo, assim a nova FO é

$$\min_{S, \rho, t, D, L} f_5$$

$$\text{onde } f_5(S, \rho, t, D, L) = S\rho[1,5(2,32D^2) + \pi DL]t \quad \text{unidade de custo em \$}$$

Substituindo $t(D)$ em f_5 e lembrando que S e ρ são constantes e que

$$V = \frac{\pi D^2}{4} \left(L + \frac{D}{3} \right)$$

obtemos

$$\min_D f_6$$

$$\text{onde } f_6(D) = 0,0432V + 0,5\frac{V}{D} + 0,3041D^2 + 0,0263D^3 \quad \text{unidade de custo em \$}$$

Identificação da(s) restrições: não existem restrições.

Ao solucionar este problema para diferentes níveis de pressão Happel apresentou a seguintes soluções:

Ponto ótimo: $(L/D)^{\text{opt}}$			
Capacidade (ft ³)	Pressão de projeto (psi)		
	100	250	400
2500	1,7	2,4	2,9
25000	2,2	2,9	4,3

Observe que o ponto ótimo se aproxima da razão 1 à medida que a pressão e a capacidade do tanque diminuem e que o valor empírico ($L/D = 3$) pode estar errado em $\pm 50\%$ em relação ao $(L/D)^{\text{opt}}$.

Ainda é necessária uma interpretação cautelosa desses resultados pois não foram consideradas as perdas de material durante a fabricação.

Consideremos agora um exemplo que leva em conta os custos de capital e operacionais.

**Exemplo 3.3: FO função dos custos de capital e operacionais.
Especificação da espessura ótima de um isolamento.**

Suponha que nós queremos encontrar a espessura do isolamento para uma tubulação. Neste caso é necessário considerar os custos de investimento e a da energia economizada devido ao incremento do isolamento. Neste exemplo iremos determinar a espessura ótima de isolamento para uma tubulação larga que contém um líquido aquecido. Rubin (1982)[&] apresentou tabelas que mostram a espessura econômica de isolamento como uma função da dimensão da tubulação, custo de combustível e temperatura do tubo, baseado num ambiente com ventos a 7.5 milhas por hora (12 km/h) a 60°F (15,5 °C).

Hipóteses:

- H1. A taxa de perda de calor por um cilindro largo e isolado, no qual a espessura de isolamento é muito menor que o diâmetro do cilindro e que o coeficiente de transferência de calor do lado de dentro do tubo é grande, pode ser aproximado por:

$$Q = \frac{A\Delta T}{\frac{x}{k} + \frac{1}{h_c}} \quad (a)$$

onde:

ΔT - diferença média de temperatura entre o fluido e o ambiente [=] °F

A - área da superfície do tubo [=] ft²

x - espessura do isolamento [=] ft

h_c - coeficiente externo de transferência de calor [=] Btu/(h.ft².°F)

k - condutividade térmica do isolante [=] Btu/(h.ft.°F)

Q - perda de calor [=] Btu/h

Todos os parâmetros na Equação (a) tem valor fixo, exceto x a variável a ser otimizada (variável de decisão).

- H2. O custo de instalação do isolamento por unidade de área pode ser expresso por $F_0 + F_1.x$, onde F_0 e F_1 são constantes (F_0 = custo fixo de instalação e F_1 = custo variável por espessura do isolamento em ft).
- H3. O isolamento tem um tempo de vida de 5 anos e deve ser trocado ao final deste período.
- H4. A verba para compra e instalação do isolamento é obtida por empréstimo e será paga em 5 prestações anuais.

Defina:

[&] Rubin, F. L., "Can you Justify more Piping Insulation," *Hydrocarbon Process*, p. 152 (July, 1982).

r como a fração do custo de instalação que será pago a cada ano ao banco. O valor de r depende da taxa de juros do empréstimo ($r > P/5$). Alternativamente, pode-se utilizar verbas próprias, e neste caso uma taxa mínima de retorno deve ser especificada.

H_t (\$/10⁶Btu) o custo de reposição do calor perdido

Y o número de horas de operação por ano.

Formule uma função objetivo para maximizar a lucratividade da instalação do isolamento. Obtenha uma solução analítica para x^{opt} .

Solução: *Identificação dos variáveis de decisão:* espessura do isolamento.

Identificação do objetivo: FO pode ser definida como

maximizar a economia de energia menos o custo anual do isolamento.

Temos que inicialmente estabelecer uma unidade comum a todos, por exemplo, \$/ano. Assim o pagamento por ano (P) que deve ser feito ao banco é

$$P = r(F_0 + F_1 x)A \quad (b)$$

A energia economizada devido ao isolamento pode ser calculada a partir da diferença entre o calor perdido com (Q) e sem isolamento [$Q(x = 0)$ ou Q_0]:

$$Q_0 - Q = h_c A \Delta T - \frac{A \Delta T}{\frac{x}{k} + \frac{1}{h_c}} \quad (c)$$

Assim a expressão matemática da FO (em dólares por ano) é

$$\begin{aligned} \min_x f(h_c, A, \Delta T, k, F_0, F_1, r, x) \\ \text{onde } f(h_c, A, \Delta T, k, F_0, F_1, r, x) = (Q_0 - Q)Y.H_t - (F_0 + F_1 x).A.r \end{aligned} \quad (d)$$

Identificação da(s) restrições: não existem restrições.

Substituindo (c) em (d), diferenciando f em relação a x e igualando a zero, obtemos:

$$x^{opt} = k \left[\sqrt{\left(\frac{H_t \cdot Y \cdot \Delta T}{10^6 \cdot k \cdot F_1 \cdot r} \right)} - \frac{1}{h_c} \right] \quad (e)$$

3.1.3. Objetivos Operacionais

Podemos ainda escrever funções objetivos que minimizem o tempo de processamento, ou maximizem a produção, ou minimizem a diferença entre o valor desejado e o valor medido das variáveis de processo. Em todos esses casos não consideramos o custo, ou lucro, ou qualquer outro valor econômico, mas apenas critérios técnicos.

No Exemplo 3.4. temos um problema de reconciliação de dados, que nada mais é que um problema de otimização cuja FO leva em conta apenas objetivos operacionais.

Exemplo 3.4: FO função apenas de um objetivo operacional/técnico. Reconciliação de dados de Processos.

Suponha que as vazões de alimentação e descarga de um processo são medidas periodicamente. Determine o melhor valor da vazão mássica da corrente A (M_A) em kg/h para o processo mostrado na figura 3-p. As correntes B e C foram medidas em intervalos de 1 hora.

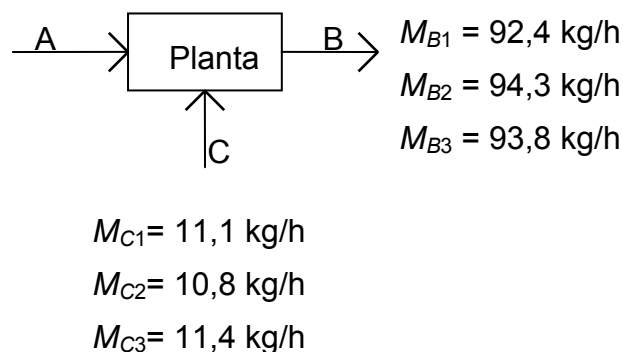


Figura 3-P: Diagrama de blocos do processo do Exemplo 3.4.

Solução: *Identificação da(s) variáveis de decisão:* obviamente M_A

Identificação do objetivo: A FO pode ser definida como:

minimizar a soma dos quadrados dos desvios entre M_A medido e esperado

Para *matematizar* a expressão da FO temos que inicialmente estabelecer algumas hipóteses simplificadores do sistema:

H.1. O processo está em estado estacionário.

H.2. As medições das correntes B (M_B) e C (M_C) estão corretas.

Modelo do processo (balanço de massa): o que entra = o que sai

$$M_A + M_C = M_B \quad (a)$$

então a FO pode ser escrita como:

$$\min_{M_A} f(M_A)$$

$$\text{onde } f(M_A) = \sum_{i=1}^{\text{no.exp}} [M_A^{\text{rec}} - (M_{B_i} - M_{C_i})]^2 \quad (\text{b})$$

para os dados deste problema:

$$f(M_A) = [M_A - (92,4 - 11,1)]^2 + [M_A - (94,3 - 10,8)]^2 + [M_A - (93,8 - 11,4)]^2 \quad (\text{c})$$

Identificação da(s) restrições: não existem restrições.

Diferenciando (c) em relação a M_A e igualando a zero, obtemos $M_A^{\text{opt}} = 82,4$.

$$\text{Neste caso } M_A^{\text{opt}} = M_b^{\text{med}} - M_C^{\text{med}}$$

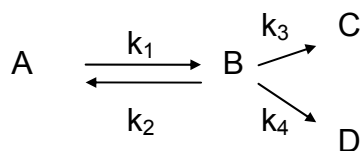
O valor mínimo que $f(M_A)$ pode alcançar é zero.

Outros métodos de reconciliação de balanços de massa e energia são discutidos por Tamhane e Mah (1985)@.

No Exemplo 3.5. temos outro caso de FO com critério apenas técnico/operacional.

**Exemplo 3.5: FO função apenas de um objetivo operacional.
Tempo de residência ótimo de um reator a batelada.**

O esquema reacional abaixo acontece num reator a batelada bem agitado.



Para as concentrações iniciais e constantes das taxas

$$C_{A_0} = 50 \text{ g-mol/L} \quad k_1 = 2,0 \text{ h}^{-1}$$

$$C_{B_0} = 5 \text{ g-mol/L} \quad k_2 = 1,0 \text{ h}^{-1}$$

$$C_{C_0} = 0 \text{ g-mol/L} \quad k_3 = 0,2 \text{ h}^{-1}$$

$$C_{D_0} = 0 \text{ g-mol/L} \quad k_4 = 0,6 \text{ h}^{-1}$$

calcule o tempo de residência ótimo para obter um máximo rendimento a C_B .

Solução: *Identificação das variáveis de decisão:* a priori $k_1, k_2, k_3, k_4, C_A, C_B, C_C, C_D$ e tempo de residência

@ Tamhane, A. C., e R. S. H. Mah, "Data Reconciliation and Gross Error Detection in a Chemical Process Network", *Technometrics*, **27**: 409 (1985).

Identificação do objetivo: A FO pode ser definida como

maximizar a concentração do produto desejado B

ou

$$\max C_B(k_1, k_2, k_3, k_4, C_A, C_B, C_C, C_D, t) \quad (a)$$

Para *matematizar* a expressão da FO temos que inicialmente estabelecer algumas hipóteses simplificadores do sistema:

H1. O sistema não troca massa com o meio.

H2. Reator opera isotermicamente.

H3. Equações das taxas de 1ª ordem.

H4. Reação em fase líquida, portanto podemos admitir volume constante.

Modelo do processo

balanço de massa por componente: acúmulo = formado - consumido

$$\frac{dC_A}{dt} = k_2 C_B - k_1 C_A \quad (b)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - (k_2 + k_3 + k_4) C_B \quad (c)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_3 C_B \quad (d)$$

$$\frac{dC_D}{dt} = k_4 C_B \quad (e)$$

balanço de massa global: massa inicial = massa final

ou, lembrando que os coeficientes estequiométricos das reações são todos iguais, em termos do número de moles, o balanço global pode ser escrito como:

$$n^\circ \text{ moles inicial} = n^\circ \text{ moles final}$$

Lembrando ainda que o volume reacional é constante, o balanço global pode ser escrito em termos da concentração dos reagentes e produtos como:

$$\text{concentração inicial reag. + prod.} = \text{concentração final reag. + prod.}$$

ou

$$C_{A0} + C_{B0} + C_{C0} + C_{D0} = C_A + C_B + C_C + C_D \quad (f)$$

Queremos apenas encontrar o tempo de residência que maximiza C_B , portanto tentaremos escrever a C_B como uma função apenas do tempo.

Resolvendo a equação (c) para C_A

$$C_A = \frac{1}{k_1} \left[\frac{dC_B}{dt} + (k_2 + k_3 + k_4)C_B \right] \quad (g)$$

Diferenciando (g) em relação ao tempo

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{k_1} \left[\frac{d^2C_B}{dt^2} + (k_2 + k_3 + k_4) \frac{dC_B}{dt} \right] \quad (h)$$

Substituindo (g) e (h) em (b) obtemos uma equação de segunda ordem linear homogênea em C_B :

$$\frac{d^2C_B}{dt^2} + (k_1 + k_2 + k_3 + k_4) \frac{dC_B}{dt} + [k_1(k_2 + k_3 + k_4) - k_1k_2]C_B = 0 \quad (i)$$

cuja solução, para este caso em que as raízes da equação característica são reais e distintas, é dada por

$$C_B(t) = \alpha_1 e^{\beta_1 t} + \alpha_2 e^{\beta_2 t} \quad (j)$$

onde β_1 e β_2 são as raízes da equação

$$m^2 + (k_1 + k_2 + k_3 + k_4).m + [k_1(k_2 + k_3 + k_4) - k_1k_2] = 0 \quad (k)$$

As constantes α_1 e α_2 são obtidas aplicando as condições iniciais às equações (j) e (g).

Substituindo os valores numéricos nas respectivas variáveis, encontramos

$$\alpha_1 = 37,940$$

$$\alpha_2 = -32,940$$

$$\beta_1 = -0,482$$

$$\beta_2 = -3,318$$

Identificação da(s) restrições: não existem restrições.

Finalmente diferenciando (j) em relação a t e igualando a zero obtemos o ponto t^* que maximiza C_B :

$$t^* = 0,63 \text{ h} \quad ; \quad C_B^* = 23,04 \text{ g-mol/L}$$

Um outro tipo de FO que depende apenas de objetivos operacionais aparece em problemas de controle ótimo e de controle preditivo* com otimização on-line.

Em um sistema de controle é impossível eliminar por completo as diferenças entre os valores desejados ou setpoints (SP 's) e os valores

* Maiores informações sobre controle preditivo pode ser encontrado em *DMC: Controle por Matriz Dinâmica. Apóstila de Curso Ministrado na Copene* de autoria de Ricardo de Araújo Kalid e Darci Odloak, setembro de 1994.

medidos das variáveis controladas ou variáveis de processo (PV 's), portanto os sistemas de controle procuram minimizar essas diferenças, ou seja

$$\min | \underline{SP}(t) - \underline{PV}(t) |$$

Equação 3-H

A barra embaixo das variáveis indica que a variável é um vetor, quando o sublinhado for duplo indica matriz, pois no caso geral e mais freqüente o sistema de controle é MIMO (multiple-input-multiple-output).

Contudo a manipulação matemática da função módulo é muito complexa, por isso é preferível escrever a função objetivo através de uma função quadrática. Assim a equação 3-h é transformada em:

$$\min \{ [\underline{SP}(t) - \underline{PV}(t)]^2 \}$$

Equação 3-I

ou

$$\min \{ \underline{E}(t)^2 \} \Leftrightarrow \min \{ \underline{E}(t)^T \underline{E}(t) \}$$

Equação 3-J

onde

$\underline{E} = \underline{SP} - \underline{PV} \rightarrow$ vetor dos desvios (erro) entre o valor desejado e os valores previstos

Porém atender a **equação 3-j** pode significar aplicar uma energia muito grande ao processo, ou seja as MV 's assumiriam valores muito grandes (ou pequenos) que violariam as restrições de qualquer sistema físico. Para amenizar este problema acrescentamos à função objetivo um termo que limite a variação das MV 's:

$$\min \{ \underline{E}(t)^T \underline{W}_1 \underline{E}(t) + [\underline{\Delta MV}(t)]^T \underline{W}_2 [\underline{\Delta MV}(t)] \}$$

Equação 3-K

onde \underline{W}_1 matriz diagonal que define a importância relativa das PV 's entre si

\underline{W}_2 matriz diagonal que limita a variação das MV 's

3.1.4. Combinação de Objetivos Operacionais com Objetivos Econômicos

Podemos ainda acrescentar à função objetivo descrita pela equação 3-k critérios econômicos, como por exemplo minimização dos custos operacionais (minimizar consumo de utilidades ou de energia), desta forma o objetivo do sistema de controle seria determinado por

$$\min \{ \underline{E}(t)^T \underline{W}_1 \underline{E}(t) + [\underline{\Delta MV}(t)]^T \underline{W}_2 [\underline{\Delta MV}(t)] + [\theta(\underline{MV}(t))]^2 \}$$

Equação 3-L

onde $\theta(MV)$ função que pondera a importância dos objetivos econômicos em comparação com os objetivos de controle (operacionais).

A formulação do problema de controle preditivo* ótimo se dá na medida em que a função objetivo, equação 3-1, é avaliada não apenas para o instante de tempo atual, mas para um certo horizonte no futuro (horizonte de otimização).

3.2. As Funções de Restrição (FR)

A grande maioria dos problemas de otimização de interesse prático tem que atender a um conjunto de restrições de natureza

R1.operacional, por exemplo as MV's devem permanecer dentro de limites máximos e mínimos e/ou a variação das MV's (ΔMV) menor que uma variação máxima, etc;

R2.física, por exemplo limites máximo para temperaturas a depender dos materiais presentes no processo, máxima capacidade produtiva da unidade, fechamento dos balanços de massa e energia, fração molar deve estar entre 0 e 1, temperatura e pressão absoluta maior que 0, etc;

R3.mercadológica, por exemplo deve atender a uma demanda mínima e/ou consumir uma quantidade máxima de matéria-prima e/ou de energia, etc.

Portanto para que o problema de otimização tenha uma solução correta tais restrições devem ser explícita e matematicamente escritas.

A formulação do problema de otimização só estará completa se estabelecermos a FO e as suas FR's.

No Exemplo 3.1. a hipótese H1. na verdade é uma restrição operacional. Não a levamos em conta no momento da solução do problema matemático, mas para validar a resposta tivemos que *arredondar* a mesma. Não raro este procedimento é observado na prática, porém devemos ter sempre em mente que encontraremos apenas uma solução sub-ótima.

No Exemplo 3.2. a consideração de volume fixo é uma restrição física (capacidade necessária para o equipamento). Neste caso foi possível incorporar diretamente a restrição na FO, o que simplifica a resolução do problema.

Também nos problemas de controle ótimo devemos incorporar restrições quanto a variação das MV's e aos valores extremos que as mesmas podem atingir. Assim a equação 3-1 deve ser reescrita da maneira que se segue

* Maiores informações sobre controle preditivo podem ser encontradas em *DMC: Controle por Matriz Dinâmica. Apostila de Curso Ministrado na Copene* de autoria de Ricardo de Araújo Kalid e Darci Odloak, janeiro de 1995.

$$\min \left\{ \underline{E}(t)^T \underline{W}_1 [\underline{E}(t)] + [\underline{\Delta MV}(t)]^T \underline{W}_2 [\underline{\Delta MV}(t)] + [\theta(MV(t))]^2 \right\}$$

sujeito a $\underline{MV}(t)_{\min} \leq MV(t) \leq \underline{MV}(t)_{\max}$
 $\underline{\Delta MV}(t)_{\min} \leq \Delta MV(t) \leq \underline{\Delta MV}(t)_{\max}$

Equação 3-M

3.3. Otimização On-Line

Neste ponto vale a pena comentar um pouco sobre a otimização on-line de processos químicos. Como o próprio nome já diz, é um problema de otimização, como os vistos anteriormente, cujas variáveis são atualizadas automaticamente com as atuais condições operacionais do processo e resolvido, isto é, o valor das variáveis de decisão é encontrado, com uma frequência relativamente elevada, por exemplo 20 vezes por hora.

Porém só podemos pensar na implementação da otimização on-line do processo, ou seja, na implantação de uma metodologia que periodicamente defina qual os set-points para que uma determinada unidade ou planta opere nas condições economicamente ótimas, uma vez estabilizada a operação da unidade, por exemplo através da implementação de um algoritmo tipo MPC♦ (multivariable predictive control ou controle preditivo multivariável, tais como DMC, DMCL, LDMC, QDMC, GPC).

Essa otimização em linha pode ser implementada de duas formas:

- a) Um MPC seguindo setpoints enviados por um otimizador hierarquicamente superior, figura 3-q, neste caso é necessário um sistema supervisor que calcule e envie para o MPC os SP's.

♦ Maiores informações sobre controle preditivo podem ser encontradas em *DMC: Controle por Matriz Dinâmica. Apostila de Curso Ministrado na Copene* de autoria de Ricardo de Araújo Kalid e Darci Odloak, setembro de 1994.

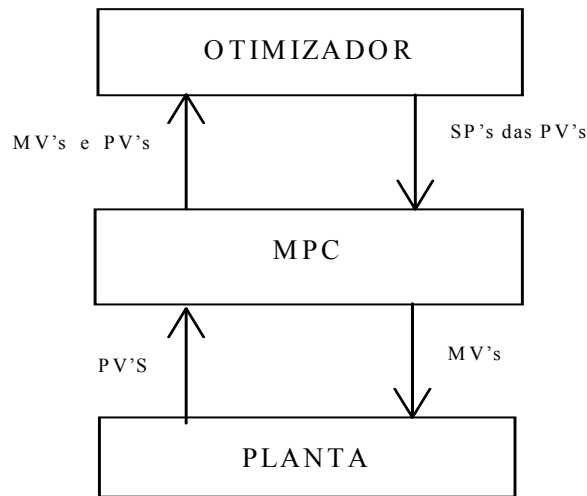


Figura 3-Q: MPC Supervisionado por Otimizador On-Line

b) MPC com otimização intrínseca, figura 3-r, neste caso a condição operacional ótima é obtida simultaneamente com o atendimento das restrições operacionais. Esta configuração é mais moderna e aparenta ser mais eficiente que a anterior, mas ainda se encontra em fase de desenvolvimento nos meios acadêmicos.

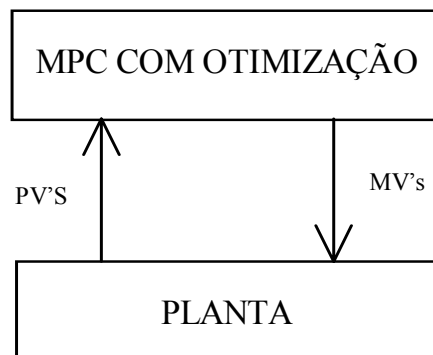


Figura 3-R: MPC com Otimização Intrínseca

3.4. Exercícios

E3.1. Uma central de insumos básicos produz, armazena e distribui várias matérias-primas para outras empresas, conforme a figura 3-s.

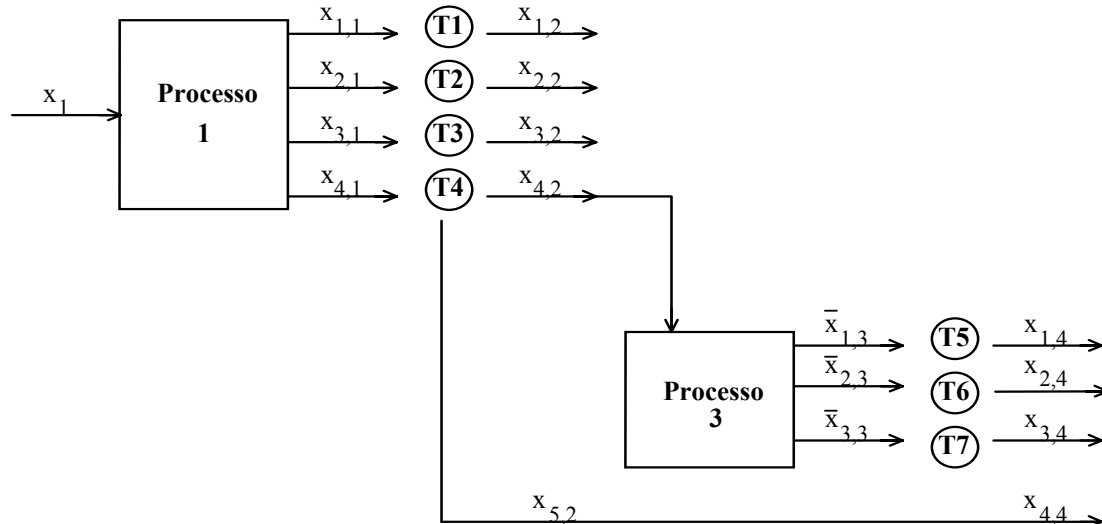


Figura 3-S: Diagrama de blocos do parque de tancagem

onde T_i ($i = 1, \dots, 7$) são tanques de armazenamento. Para a distribuição dos produtos são feitos contratos por períodos pré-determinados, com demandas mínimas a serem necessariamente atendidas pela empresa.

Desenvolva uma Função Objetivo com suas restrições que minimizem o custo de armazenamento. Escreva a FO em função dos custos C_i e da massa armazenada em cada tanque m_i .

onde: C_i = custo do produto armazenado;

m_i = massa do produto armazenado.

Dados referentes ao processo:

Restrições de processamento :

$$10 \text{ ton/h} \leq x_1 \leq 50 \text{ ton/h}$$

$$6 \text{ ton/h} \leq x_3 \leq 30 \text{ ton/h.}$$

Capacidade de armazenamento dos tanques:

$$100 \text{ ton} \leq m_i \leq 500 \text{ ton}, \quad i = 1, \dots, 7$$

Inicialmente todos os tanques estão com 120 ton.

O balanço de massa tem que ser atendido:

$$x_{1,1} = a_{1,1} + b_{1,1} x_1 \quad x_{1,3} = a_{1,3} + b_{3,1} x_3$$

$$x_{2,1} = a_{2,1} + b_{2,1} x_1 \quad x_{2,3} = a_{2,3} + b_{2,3} x_3$$

$$x_{3,1} = a_{3,1} + b_{3,1} x_1 \quad x_{3,3} = a_{3,3} + \bar{b}_{3,3} x_3$$

$$x_{4,1} = a_{4,1} + b_{4,1} x_1$$

As demandas dos seguintes produtos são conhecidas:

$$\begin{aligned}x_{1,2} &= 6t/h & x_{1,4} &= 3t/h \\x_{2,2} &= 4t/h & x_{2,4} &= 7t/h \\x_{3,2} &= 3.5t/h & x_{3,4} &= 4t/h \\& & x_{4,4} &= 5t/h\end{aligned}$$

Custos de estocagem em dólares/ton.

$$\begin{aligned}C_1 &= 500 & C_5 &= 1000 \\C_2 &= 600 & C_6 &= 700 \\C_3 &= 900 & C_7 &= 1500 \\C_4 &= 200 & &\end{aligned}$$

As constantes das relações lineares são conhecidas:

$$\begin{aligned}b_{1,1} &= 0.2 \\b_{2,1} &= 0.1 & a_{i,1} &= 0 \quad i = 1, \dots, 4 \\b_{3,1} &= 0.1 \\b_{4,1} &= 0.6 \\b_{1,3} &= 0.2 \\b_{2,3} &= 0.5 & a_{i,3} &= 0 \quad i = 1, 2, 3. \\b_{3,3} &= 0.3\end{aligned}$$

Ref: Curso de Otimização ministrado pelo LSCP/DEQ/EPUSP à PETROBRAS.

E3.2. Uma planta química faz três produtos (E, F, G) e utiliza três matérias-primas (A, B, C) cujo suprimento é limitado. Cada um dos três produtos é obtido em processo separado (1, 2, 3) de acordo com o esquema mostrado na figura 3-t.

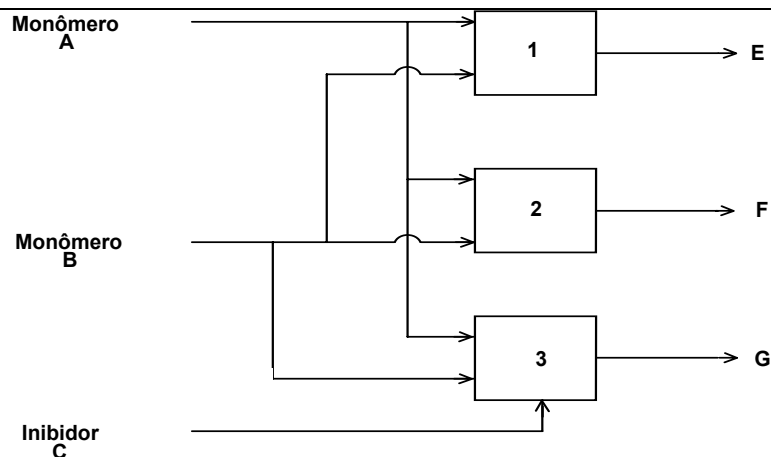


Figura 3-T: Diagrama de blocos de uma planta multiprodutora

As matérias-primas A, B e C não têm de ser totalmente consumidas.

Dados do processo:

Matéria Prima	Máximo disponível, lb / dia	Custo \$ / 100 lb
A	4000	1.50
B	3000	2.00
C	2500	2.50

Processo	Produto	Reagentes necessários (lb) por lb produto	Custo Operacional	Preço de venda do produto
1	E	2/3 A, 1/3 B	\$1.50/100 lb A (consumido em 1)	\$4.00/100 lb E
2	F	2/3 A, 1/3 B	\$0.50/100 lb A (consumido em 2)	\$3.30/100 lb F
3	G	1/2 A, 1/6 B, 1/3 C	\$1.00/100 lb G (produzido em 3)	\$3.80/100 lb G

Desenvolva a função objetivo e as restrições deste problema de otimização.

Assumindo que há uma demanda mínima de produtos a ser atendida, conforme a tabela abaixo, como ficaria a FO? e as FR's?

Produto	Demanda Mínima, lb / dia
E	2500
F	1500
G	1800

Ref: Edgar, T. F. & Himmelblau, D. M. "Optimization of Chemical Processes"

E3.3. Programação de produção de uma refinaria. A figura 3-u mostra as alternativas de carga e os produtos possíveis de serem obtidos numa refinaria de petróleo (custo e preço de venda estão entre parenteses). A tabela 3-a lista o rendimento da unidade a depender do tipo de carga processada. Note que os rendimentos para os vários produtos são bastante diferentes para os dois tipos de petróleo. A tabela 3-a também lista todas as limitações impostas pelo mercado em termos de produção máxima diária admissível para cada produto e o custo de processamento de cada tipo de carga.

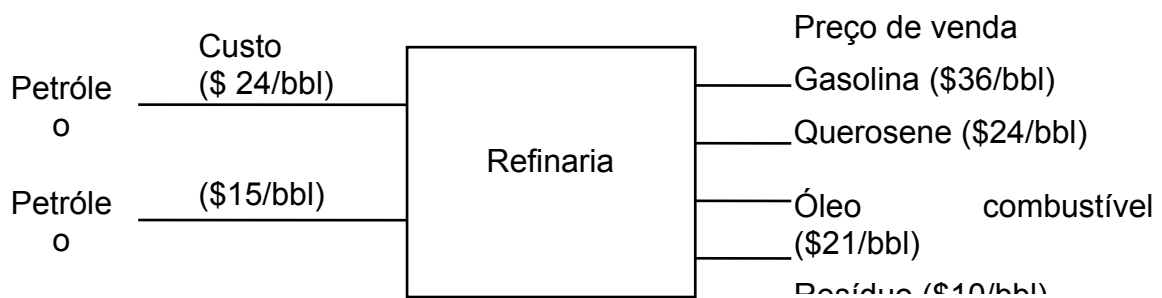


Figura 3-U: Diagrama de blocos de uma refinaria

Tabela 3-A: Dados de rendimento da refinaria e do mercado

	Porcentagem de rendimento volumétrico		Produção máxima (bbl/dia)
	Petróleo tipo 1	Petróleo tipo 2	
Gasolina	80,0	44,0	24000
Querosene	5,0	10,0	2000
Óleo combustível	10,0	36,0	6000
Resíduo	5,0	10,0	
Custo de processamento (\$/bbl)	0,5	1,0	

Pede-se:

- Desenvolva uma função objetivo linear.
- Estabeleça as restrições.
- Desenhe num gráfico as curvas das restrições.
- Identifique no gráfico a região viável.
- Calcule nas interseções entre as curvas das restrições o valor alcançado pela FO e verifique qual o ponto ótimo.

Ref: Edgar, T. F. & Himmelblau, D. M. "Optimization of Chemical Processes".

E3.4. Programação de uma unidade de craqueamento térmico. A figura 3-v mostra os vários componentes da alimentação e a correspondente conversão aos vários produtos devido ao craqueamento térmico. As possíveis cargas incluem etano, propano, gasolina natural debutanizada (DNG) e gasóleo, algumas das quais podem ser alimentadas simultaneamente. Oito produtos podem ser produzidos em várias proporções de acordo com a matriz mostrada na tabela 3-b.

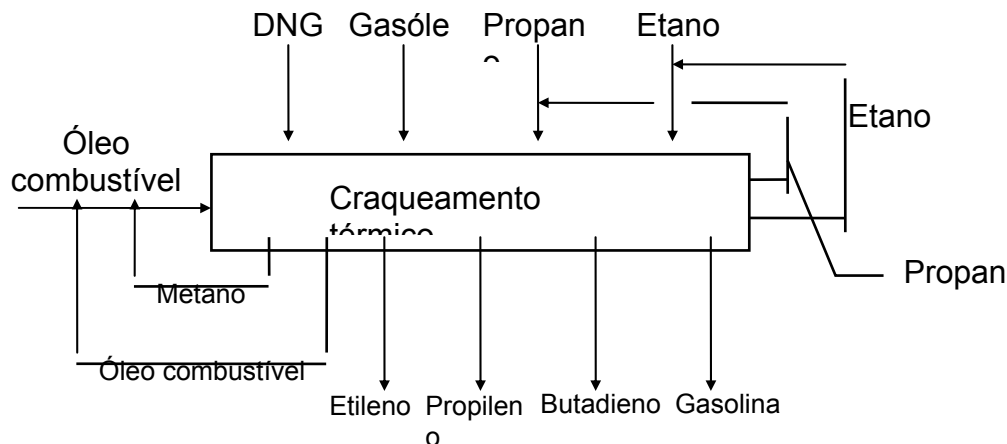


Figura 3-V: Diagrama de blocos do craqueamento térmico

Tabela 3-B: Rendimento aos produtos (fração mássica)

Produto	Alimentação			
	Etano	Propano	Gasóleo	DNG
Metano	0,07	0,25	0,10	0,15
Etano	0,40	0,06	0,04	0,05
Etileno	0,50	0,35	0,20	0,25
Propano	---	0,10	0,01	0,01
Propileno	0,01	0,15	0,15	0,18
Butadieno	0,01	0,02	0,04	0,05
Gasolina	0,01	0,07	0,25	0,30
Óleo combustível	---	---	0,21	0,01

A capacidade de processamento do craqueador é de 90,7 ton/h (vazão total baseada numa mistura média). Etano usa o equivalente a 1,1 ton da capacidade por ton de etano; propano usa o equivalente a 0,9 ton da capacidade por ton de propano; gasóleo usa o equivalente a 1,1 ton da capacidade por ton de gasóleo; e DNG utiliza uma razão de 1,0.

As unidades a jusante tem uma capacidade máxima de processamento limitada a 22,7 ton/h de etileno e 9,1 ton/h de propileno. O combustível necessário ao processamento de cada tipo de substância presente na carga é apresentado na tabela 3-c.

Tabela 3-C: Consumo de combustível por tipo de carga

Componente da carga	Combustível requerido para processamento
Etano	$4,65 \times 10^3$ kcal/kg
Propano	$2,79 \times 10^3$ kcal/kg
Gasóleo	$2,17 \times 10^3$ kcal/kg
DNG	$2,53 \times 10^3$ kcal/kg

O metano e óleo combustível produzido pela unidade são reciclados como combustível. Todo o etano e propano não convertidos são reciclados para a alimentação. A energia fornecida por cada tipo de combustível é mostrada na tabela 3-d.

Tabela 3-D: Calor fornecido pelos combustíveis

Tipo de combustível	Energia liberada na combustão
Gás natural	$11,96 \times 10^3$ kcal/kg
Metano	$11,96 \times 10^3$ kcal/kg
Óleo combustível	$10,00 \times 10^3$ kcal/kg

Devido a perda de calor a energia necessária para a pirólise, uma quantidade fixa de energia igual a 5,04 kcal/h, deve ser fornecida ao forno. O preço de compra dos combustíveis, da carga e dos produtos são mostrados na tabela 3-e.

Tabela 3-E: Preço de compra e venda dos insumos

Substância	Preço (\$/kg)
Etano (preço de compra)	0,1444
Propano (preço de compra)	0,2145
Gasóleo (preço de compra)	0,2756
DNG (preço de compra)	0,2235
Metano (preço de venda como combustível)	0,1186
Etileno (preço de venda)	0,3913
Propileno (preço de venda)	0,3040
Butadieno (preço de venda)	0,5873
Gasolina (preço de venda)	0,2189
Óleo combustível (preço de venda como combustível)	0,0992

Pede-se:

a) Desenvolva uma função objetivo linear que maximize o lucro da unidade.

b) Estabeleça as restrições operacionais e/ou físicas e/ou de mercado a que o craqueador esta submetido.

Ref: Edgar, T. F. & Himmelblau, D. M. "Optimization of Chemical Processes".

E3.5. Discuta as duas FO's abaixo, compare-as apontando suas igualdades e diferenças.

$$FO_1 = \min \left\{ \underline{W}_1 \underline{E}(t) \right]^T \left[\underline{W}_1 \underline{E}(t) \right] + \left[\underline{W}_2 \Delta \underline{MV}(t) \right]^T \left[\underline{W}_2 \Delta \underline{MV}(t) \right] + \left[\underline{I}\theta(\underline{MV}(t)) \right]^T \left[\underline{I}\theta(\underline{MV}(t)) \right] \right\}$$

$$FO_2 = \min \left\{ \left[\underline{W}_1 \underline{E}(t) + \underline{W}_2 \Delta \underline{MV}(t) + \underline{I}\theta(\underline{MV}(t)) \right]^T \left[\underline{W}_1 \underline{E}(t) + \underline{W}_2 \Delta \underline{MV}(t) + \underline{I}\theta(\underline{MV}(t)) \right] \right\}$$

4. Otimização Unidimensional Sem Restrições (OUSR)

O estudo de métodos de otimização unidimensionais sem restrições (OUSR) é necessário por quatro motivos:

- M1. Alguns problemas sem restrição são também unidimensionais.
- M2. Em muitos problemas as restrições podem ser incorporadas à função objetivo reduzindo, desta forma, o problema a uma variável.
- M3. As técnicas para problemas multidimensionais com e sem restrições geralmente envolvem repetir inúmeras vezes a resolução de um problema unidimensional sem restrições.
- M4. Ajuda na solução de problemas de otimização cujo intervalo de busca (região viável) **não** é conhecido.

Podemos classificar os métodos numéricos para resolução dos problemas de OUSR em:

- C1. Métodos diretos (MD's): procedimentos de busca do ponto ótimo através da comparação direta do valor assumido pela FO em uma seqüência de pontos viáveis. **Não envolve o cálculo de derivadas** analíticas ou numéricas.
- C2. Métodos Indiretos (MI's): utiliza as condições necessárias para existência de pontos estacionários, ou seja, **usa a derivada para calcular o ponto ótimo**.

Se o cálculo da derivada for realizado numericamente a distinção entre os métodos diretos e indiretos fica comprometida, pois ambos os métodos vão avaliar a FO em uma seqüência de pontos.

Os métodos indiretos, quando aplicáveis, isto é quando existe a derivada, geralmente são mais rápidos que os métodos diretos. Entretanto como nos problemas de engenharia a precisão necessária para os resultados freqüentemente é baixa, devido às incertezas presentes na função objetivo, esta vantagem é neutralizada.

Por outro lado, os métodos diretos tem a vantagem de tratar mais facilmente problemas que tem descontinuidade e/ou pontos de inflexão.

Em problemas de Otimização Multidimensional Sem Restrições (OMSR), com a FO não-linear e com mais de uma variável os MD's tem se mostrando superior em relação aos MI's. Por exemplo, suponha que a função não-linear $f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ deva ser minimizada. As condições necessárias para encontrar os pontos estacionários são

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(\underline{x})}{\partial x_1} &= f_{x_1}(\underline{x}) = 0 \\ \frac{\partial f(\underline{x})}{\partial x_2} &= f_{x_2}(\underline{x}) = 0 \\ &\vdots \\ \frac{\partial f(\underline{x})}{\partial x_n} &= f_{x_n}(\underline{x}) = 0\end{aligned}$$

Equação 4-A

Cada derivada parcial igualada a zero constitui uma equação não-linear, assim o problema de OMSR transformou-se num sistema algébrico de equações não-lineares, um problema tão difícil de resolver quanto o original. Além disso, enquanto que a matriz Hessiana $\underline{H}(\underline{x})$ de $f(\underline{x})$ é simétrica, o Jacobiano das equações das condições necessárias tem uma estrutura arbitrária, o que dificulta a resolução do problema. Assim, muitos engenheiros preferem atacar o problema de minimização/maximização por MD's em lugar de utilizar MI's.

A seguir, na seção 4.1 apresentaremos os MI's mais utilizados em problemas de OUSR da engenharia química, enquanto na seção 4.2 estudaremos os MD's.

4.1. Métodos Indiretos (MI) para OUSR

Existem basicamente 4 procedimentos para resolver problemas de OUSR envolvendo a aplicação das condições necessárias de otimalidade para uma função:

MI1. Método de Newton

MI2. Aproximação por diferenças finitas do método de Newton, também chamado de método de quasi-Newton

MI3. Método da secante

Para comparar a eficiência desses métodos é conveniente examinar a **taxa de convergência** de cada um, isto é, a velocidade com que a solução é alcançada. A taxa de convergência pode ser expressa de várias maneiras, mas uma classificação comum é a seguinte:

Linear:

$$\frac{\|\underline{x}^{k+1} - \underline{x}^*\|}{\|\underline{x}^k - \underline{x}^*\|} \leq \alpha \quad 0 \leq \alpha \leq 1$$

Equação 4-B

Onde o super-escrito k se refere a iteração k e não é uma potência de x . Na resolução de problemas práticos se o método apresenta uma taxa de convergência linear sua velocidade é lenta.

O símbolo $\| \cdot \|$ indica a norma Euclidiana de um vetor. Para x n -dimensional:

$$\|x\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$$

Equação 4-C

Ordem p :

$$\frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|^p} \leq \alpha \quad 0 \leq \alpha \leq 1$$

Equação 4-D

Na resolução de problemas práticos se o método apresenta uma taxa de convergência de ordem $p > 1$ sua velocidade é rápida. Se $p = 2$, a ordem de convergência é dita quadrática.

Superlinear:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|} = 0 \quad \text{ou } \alpha_k \text{ e } \alpha_k \rightarrow 0 \text{ quando } k \rightarrow \infty$$

Equação 4-E

Na resolução de problemas práticos se o método apresenta uma taxa de convergência superlinear sua velocidade é rápida.

O algoritmo de qualquer um dos MI's para minimizar $f(x)$ pode ser resumido da seguinte forma:

P1. Escolha um intervalo de busca que contenha o ponto de mínimo e que a FO seja unimodal neste intervalo.

P2. Defina uma tolerância.

P3. Aplique o método até que a tolerância seja alcançada, certificando-se a cada iteração que $f(x^{k+1}) < f(x^k)$.

Quanto mais positivo for $f''(x^k)$, ou sua aproximação, mais rapidamente $f(x)$ diminuirá. Para maximizar $f(x)$, minimize $-f(x)$.

4.1.1. Método de Newton

Lembremos sempre que o objetivo é minimizar (ou maximizar) uma certa função $f(x)$, lembremos também que no momento estamos estudando apenas o caso monovariável.

Vamos rever o método de Newton para resolução de uma equação não-linear. Este método está baseado na expansão da função em série de Taylor e truncamento da mesma no segundo termo. Assim expandindo $f(x)$ em torno de um ponto x^k obtemos:

$$f(x) = f(x^k) + (x - x^k) \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x^k} \Leftrightarrow f(x) = f(x^k) + (x - x^k) \cdot f'(x^k)$$

Equação 4-F

como qualquer função pode ser escrita da forma $f(x) = 0$, então podemos reescrever a equação 4-f, se a aproximação e truncamento executado acima forem válidos, da seguinte maneira:

$$f(x) = f(x^k) + (x - x^k) \cdot f'(x^k) = 0 \Leftrightarrow x = x^k - \frac{f(x^k)}{f'(x^k)}$$

Equação 4-G

Ao trocar x por x^{k+1} na equação 4-g obtemos o método de Newton para resolução de uma equação não-linear.

Agora podemos resolver o problema de OUSR, ou seja resolver a equação não-linear $f(x) = g(x) = 0$ pelo método de Newton, utilizando a fórmula de recorrência:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{g(x^k)}{g'(x^k)} \Leftrightarrow x^{k+1} = x^k - \frac{f'(x^k)}{f''(x^k)}$$

Equação 4-H

Como a convergência deste método não é garantida temos que nos assegurar que a cada iteração $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ para que o mínimo seja alcançado [$f(x^{k+1}) > f(x^k)$ para o máximo].

As vantagens do método de Newton são:

- V1. O procedimento é tem convergência quadrática local ($p = 2$ na equação 4-d) se $f''(x) \neq 0$ no ponto ótimo.
- V2. Para uma FO quadrática o mínimo é obtido em uma iteração, pois a expansão e truncamento da série de Taylor da função $f(x)$ até o termo da 2ª derivada (inclusive) é exata.
- V3. Converte rapidamente quando a estimativa inicial é boa.

As desvantagens do método de Newton são:

- D1. Só se aplica a funções onde existam $f'(x)$ e $f''(x)$.
- D2. Deve-se calcular a cada iteração $f'(x)$ e $f''(x)$.

D3. Sensível à estimativa inicial.

D4. Se $f''(x) \rightarrow 0$ a convergência é lenta.

D5. Se existe mais de um extremo o método pode não convergir para o ponto desejado ou pode oscilar.

4.1.2. Método de Quasi-Newton

Um método de quasi-Newton é uma variante do método de Newton. Quando $f(x)$ não é dada por uma fórmula, ou a fórmula é muito complicada para ser analiticamente derivada, podemos trocar as derivadas que aparecem na equação 4-h por aproximações de diferenças finitas.

Existem várias maneiras de utilizar aproximação de derivadas por diferenças finitas, por exemplo:

DF1. Diferenças finitas para trás:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x}$$
$$f''(x) = \frac{f(x) - 2f(x - \Delta x) + f(x - 2\Delta x)}{\Delta x^2}$$

Equação 4-I

DF2. Diferenças finitas para frente:

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$
$$f''(x) = \frac{f(x + 2\Delta x) - 2f(x + \Delta x) + f(x)}{\Delta x^2}$$

Equação 4-J

DF3. Diferenças finitas para central:

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x}$$
$$f''(x) = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2}$$

Equação 4-K

Todas essas aproximações podem ser deduzidas utilizando a expansão em série de Taylor.

Portanto definindo $h = \Delta x$ e substituindo, por exemplo, a equação 4-k na equação 4-h, obtemos a seguinte fórmula de recorrência

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f'(x^k)}{f''(x^k)} \cong x^k - \frac{\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}}{\frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}} = x^k - \frac{[f(x+h) - f(x-h)] / 2h}{[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)] / h^2}$$

Equação 4-L

Esse método tem duas desvantagens em relação ao método de Newton:

- D1. Necessidade de definir o passo h .
- D2. Uma função deve ser avaliada a mais a cada iteração (três na equação 4-l enquanto duas na equação 4-h).

4.1.3. Método da Secante

Expandindo uma função $f(x) = 0$ em série de Taylor e truncando no terceiro termo, obtemos

$$f(x) = f(x^k) + (x - x^k) \cdot f'(x^k) + \frac{(x - x^k)^2 \cdot f''(x^k)}{2!} = 0$$

Equação 4-M

Diferenciando a equação 4-m em relação a x e igualando a zero obtemos

$$f'(x^k) + (x - x^k) f''(x^k) = 0$$

Equação 4-N

Agora em lugar de utilizar a função $f''(x^k)$ usamos a função

$$m = \frac{f'(x^q) - f'(x^p)}{x^q - x^p}$$

Equação 4-O

e resolvendo para o ponto ótimo aproximado x_{apr}^* temos a fórmula de recorrência

$$x_{apr}^* = x^q - \frac{f'(x^q)}{[f'(x^q) - f'(x^p)] / (x^q - x^p)}$$

Equação 4-P

O ponto ótimo x^* é encontrado após algumas iterações utilizando a equação 4-p. A derivada $f'(x)$ pode, obviamente ser calculada por diferenças finitas.

O algoritmo do método da secante é o seguinte

- a) Escolha dois pontos x^p e x^q com derivadas de sinal contrário.
- b) Calcule x_{apr}^* através da equação 4-p.

- c) Calcule $f(x_{apr})$.
- d) Escolha o novo par de pontos que mantém o sinal contrário entre as derivadas.
- e) Volte à etapa b até que a tolerância adimitida seja alcançada.

Este método também é denominado de "regula falsi" ou de falsa posição.

O método da secante parece um pouco forçado, mas funciona bem em trabalhos práticos. A sua ordem de convergência é de aproximadamente 1,6 para um problema monovariável, apesar dessa convergência ser menor que no método quasi-Newton, termina por ser mais eficiente pois precisa avaliar um número menor de funções.

4.2. Métodos Diretos (MD) para OUSR

Podemos subdividir os MD's em dois grandes grupos:

- G1. Métodos por diminuição da região de busca.
- G2. Métodos por aproximação polinomial da FO.

4.2.1. Métodos por Diminuição da Região de Busca

O algoritmo desses métodos para minimização de uma $f(x)$ pode ser assim descrito:

- P1. Escolha uma região viável (a,b) que contenha uma função unimodal (função convexa).
- P2. Calcule $f(x)$ em dois ou mais pontos.
- P3. Compare os valores de $f(x)$ eliminando as regiões que apresentam valores de $f(x)$ maiores.

Na figura 4-a(a), a região a esquerda de x_1 contém os valores de $f(x) > f(x_1)$ e por isso deve ser eliminada na busca do mínimo de $f(x)$. Analogamente a região à direita de x_2 na figura 4-a(c), $f(x) > f(x_2)$, também deve ser descartada. Porém na figura 4-a(b) a função é suave e o ponto de mínimo pode estar em qualquer lugar do intervalo (a,b). Na verdade quando estamos bem próximos do ponto ótimo este caso ocorre e $b - a \approx 0$.

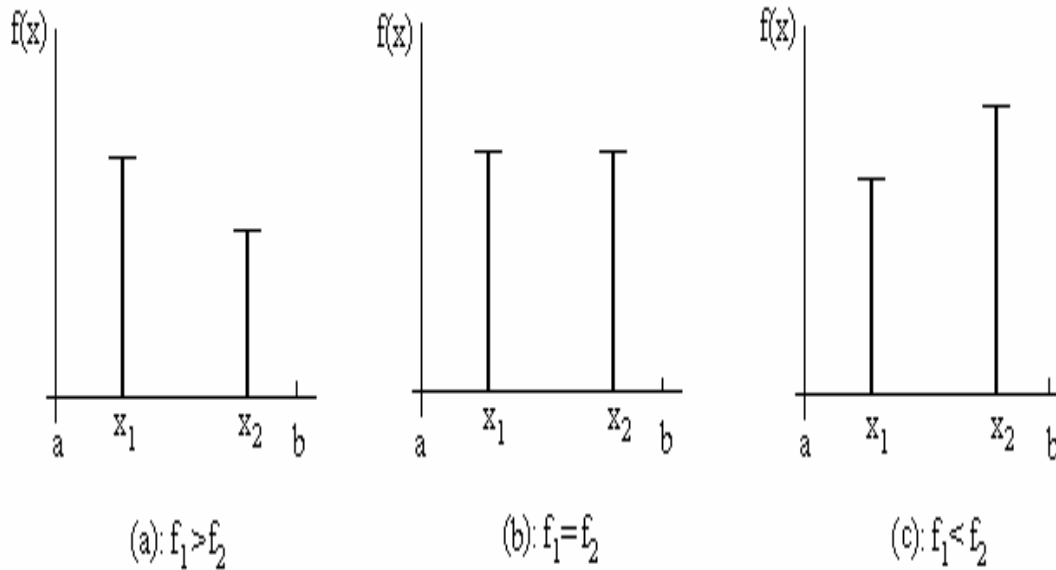


Figura 4-A: 3 possibilidades para $f(x)$ após dividido o intervalo (a,b) por 2 pontos.

Conforme seja escolhida a localização dos pontos x_1 e x_2 este método torna-se mais ou menos eficiente:

M1. *Três intervalos iguais de busca*, isto é, $x_1 - a = b - x_2 = x_2 - x_1$ neste caso o intervalo é reduzido de $1/3$ a cada iteração, assim se L^0 é o intervalo de busca original $(b - a)$ e L^k é o intervalo após k iterações, então

$$L^k = \left(\frac{2}{3}\right)^k L^0$$

Equação 4-Q

Observe que é necessário avaliar duas vezes a função $f(x)$ a cada iteração.

M2. *Método da seção áurea*, neste caso o intervalo eliminado manterá sempre uma mesma proporção com o intervalo original. Na figura 4-b e na equação 4-r observamos as distâncias utilizadas neste procedimento.

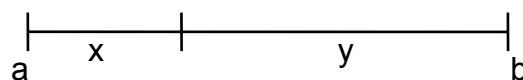


Figura 4-B: Seção áurea

$$\begin{aligned}
 x + y &= 1 \\
 \frac{x + y}{y} &= \frac{y}{x} \Rightarrow \frac{1}{y} = \frac{y}{x} = \frac{y}{1-y} \Rightarrow y = 0,618
 \end{aligned}$$

Equação 4-R

e

$$L^k = (0,618)^k L^0$$

Equação 4-S

Seja a^k e b^k são os contornos do intervalo de busca na iteração k , então o algoritmo para este método é o seguinte:

P1. determine a^k e b^k , e a tolerância ε

P2. Calcule $L^k = b^k - a^k$, $x_1^k = a^k + 0,382.L^k$ e $x_2^k = b^k - 0,618.L^k$

P3. Calcule $f(x_1^k)$ e $f(x_2^k)$

P4. Se $f(x_1^k) > f(x_2^k)$ então $a^{k+1} = x_1^k$, $b^{k+1} = b^k$, $x_1^{k+1} = x_2^k$

Se $f(x_1^k) < f(x_2^k)$ então $b^{k+1} = x_2^k$, $a^{k+1} = a^k$, $x_2^{k+1} = x_1^k$

P5. Se a tolerância não foi atingida volte ao passo P2.

Veja a figura 4-c.

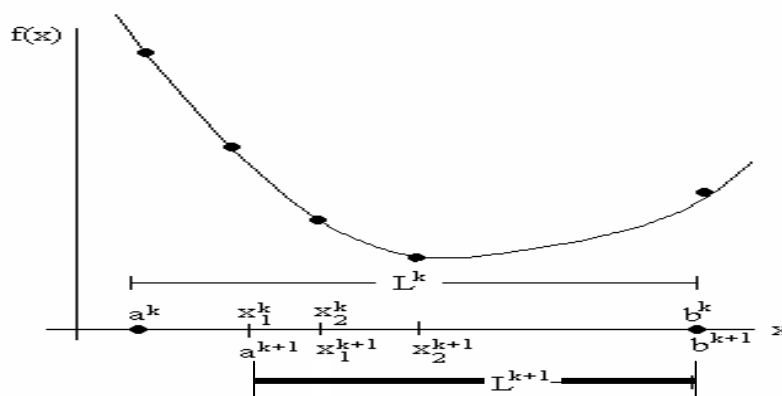


Figura 4-C: Seleção dos pontos interiores pela seção áurea

4.2.2. Métodos por Aproximação Polinomial - Interpolação Quadrática

Outros tipos de MD são os métodos por aproximação polinomial, entre os quais destacamos o da interpolação quadrática. Nesses métodos a função $f(x)$ é aproximada por extrapolação ou interpolação utilizando um polinômio. Coggins (1964)* discutiu várias técnicas envolvendo um polinômio aproximador, chegando à conclusão que esses são levemente mais eficientes que o método da seção áurea.

Admitindo que $f(x)$ é unimodal e conhecendo um intervalo de busca que contenha o ponto de mínimo, avaliamos $f(x)$ em x_1 , x_2 e x_3 e obtemos $f(x_1)$

* Coggins, G. F., Univariate Search Methods, Imperial Chemical Industries Ltd., Central Instr. Lab. Res. Note 64/11, 1964

, $f(x_2)$ e $f(x_3)$. Suponha que a função $f(x)$ possa ser aproximada, numa vizinhança do ponto ótimo $x_{f(x)}^*$, por uma função quadrática $g(x)$ então

$$\begin{aligned} f(x_1) &\cong g(x_1) = a + b.x_1 + c.x_1^2 \\ f(x_2) &\cong g(x_2) = a + b.x_2 + c.x_2^2 \\ f(x_3) &\cong g(x_3) = a + b.x_3 + c.x_3^2 \end{aligned}$$

Equação 4-T

Mas o mínimo da função quadrática $g(x)$ é dado por é dado por

$$x_{g(x)}^* = -\frac{b}{2c}$$

Equação 4-U

Resolvendo a equação 4-t para obter os valores de b e c e substituindo o resultado na equação 4-u obtemos

$$x_{g(x)}^* = \frac{1}{2} \left[\frac{(x_2^2 - x_3^2)g(x_1) + (x_3^2 - x_1^2)g(x_2) + (x_1^2 - x_2^2)g(x_3)}{(x_2 - x_3)g(x_1) + (x_3 - x_1)g(x_2) + (x_1 - x_2)g(x_3)} \right]$$

Equação 4-V

então podemos escrever a função de recorrência

$$x_{f(x)}^* \cong \frac{1}{2} \left[\frac{(x_2^2 - x_3^2)f(x_1) + (x_3^2 - x_1^2)f(x_2) + (x_1^2 - x_2^2)f(x_3)}{(x_2 - x_3)f(x_1) + (x_3 - x_1)f(x_2) + (x_1 - x_2)f(x_3)} \right]$$

Equação 4-W

Calculando o valor de $f(x_{f(x)}^*)$ e comparando com os valores de $f(x_1)$, $f(x_2)$ e $f(x_3)$ eliminamos a região com maior valor de $f(x)$ e aplicamos a equação 4-w. Esse procedimento é repetido até atingir a tolerância especificada. Note que a cada iteração apenas uma função $f(x)$ é avaliada.

4.2.3. Métodos por aproximação polinomial - Interpolação cúbica

Nesses métodos a função $f(x)$ é aproximada por extrapolação ou interpolação utilizando um polinômio cúbico.

Admita que $f(x)$ é unimodal e que conhecemos um intervalo de busca que contenha o ponto de mínimo. Suponha que a função $f(x)$ possa ser aproximada, numa vizinhança do ponto ótimo $x_{f(x)}^*$, por uma função cúbica $g(x)$ então

$$f(x) \cong g(x) = a_1 \cdot x^3 + a_2 \cdot x^2 + a_3 \cdot x + a_4$$

Equação 4-X

Avaliamos $f(x)$ em x_1, x_2, x_3 e x_4 e obtemos $f(x_1), f(x_2), f(x_3)$ e $f(x_4)$ então podemos escrever um sistema linear de quatro equações [$f(x_1), f(x_2), f(x_3), f(x_4)$] e quatro incógnitas (a_1, a_2, a_3, a_4):

$$\underline{X} = \begin{bmatrix} x_1^3 & x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^3 & x_2^2 & x_2 & 1 \\ x_3^3 & x_3^2 & x_3 & 1 \\ x_4^3 & x_4^2 & x_4 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\underline{F}^T = [f(x_1) \quad f(x_2) \quad f(x_3) \quad f(x_4)]$$

$$\underline{A}^T = [a_1 \quad a_2 \quad a_3 \quad a_4]$$

$$\underline{F} = \underline{X} \underline{A}$$

Equação 4-Y

Onde o extremo de $f(x)$ é obtido derivando $f(x)$ e igualando a zero

$$\frac{f(x)}{dx} \cong 3a_1 \cdot x^2 + 2a_2 \cdot x^1 + a_3 = 0$$

$$x_{apr}^* = \frac{-2a_2 \pm \sqrt{4a_2^2 - 12a_1 \cdot a_3}}{6a_1}$$

Equação 4-Z

O sinal apropriado depende da derivada de 2ª ordem de $f(x_{apr}^*)$, isto é, depende se estamos procurando o mínimo ou o máximo da função. O vetor \underline{A} é obtido de

$$\underline{A} = \underline{X}^{-1} \underline{F}$$

Equação 4-AA

Após obter a primeira aproximação do ponto ótimo x^* , o valor da função neste ponto é comparado com os valores nos outros pontos e descartado o maior deles (menor para maximização de $f(x)$).

4.3. Avaliação dos Métodos Unidimensionais de Otimização

Como observamos para que os métodos estudados sejam eficientes é necessário que

- a função seja unimodal,
- seja conhecida a região de busca que contenha o extremo da função;

- nos MI's seja dada uma estimativa inicial;
- nos MI's as derivadas de 1^a e/ou de 2^a ordem existam.

Devido as maiores exigências dos MI's, os MD's são preferidos nos meios acadêmicos e industrial, e dentre esses os métodos de interpolação quadrática ou cúbica são mais utilizados.

Os códigos de programação dos pacotes comerciais de otimização contém várias regras heurísticas que visam resolver problemas com

- múltiplos extremos,
- erros de arredondamento,
- gradiente muito grande da FO,
- FO com gradiente próximo a zero,
- outros comportamentos indesejados da FO.

Portanto é necessário conhecer quais os *macetes* que os programas utilizam para avaliar se os mesmos estão sendo usados corretamente e poder interpretar com segurança os resultados obtidos.

E lembremos sempre que

o julgamento do engenheiro é essencial na aceitação ou não das soluções encontradas

pelos pacotes computacionais.

4.4. Exercícios

E4.1. Utilizando variados métodos indiretos obtenha o extremo das funções

- a) y_1 da Equação 1-A
- b) $f(x)$ do exercício E2.5
- c) $f(x)$ do exercício E2.6.a
- d) $f(x)$ do exercício E2.6.b
- e) $f(x)$ do exercício E2.7
- f) $f(x)$ do exercício E2.10.a
- g) $f(x)$ do exercício E2.10.b

E4.2. No Exemplo 3.2, verifique se os pontos de mínimo da equação $f_6(D)$ para uma pressão de projeto de 250 psi, estão corretos. Resolva este problema utilizando um método indireto e um método direto. Compare o número de iterações necessário para cada procedimento.

E4.3. No Exemplo 3.5, verifique se o ponto de máximo da equação (j) está correto. Resolva este problema utilizando o método de Newton, o quasi-Newton e o da secante. Compare o número de iterações necessárias para cada procedimento.

E4.4. Utilizando a função `fmin('f',x)` do toolbox de otimização do MATLAB resolva os problemas E4.2 e E4.3. Modifique os parâmetros do método numérico e verifique o comportamento do mesmo. Se necessário digite `help fmin` para ver como é a sintaxe deste comando, ou recorra ao manual de referência do toolbox de otimização do MATLAB.

5. Otimização Multidimensional Sem Restrições (OMSR)

A otimização numérica de FO multivariáveis não-lineares requer técnicas eficientes e robustas. A eficiência é importante pois os procedimentos para solucionar o problema são sempre iterativos e a tentativa-e-erro torna-se impraticável quando estão envolvidas mais de 3 ou 4 variáveis de decisão. A robustez (habilidade de encontrar a solução) é uma propriedade desejável pois as FO's não-lineares tem um comportamento imprevisível, pois podem ter múltiplos extremos, pontos de sela, regiões convexas e não convexas, etc. Mas felizmente estão disponíveis algoritmos numéricos poderosos e que solucionam a maioria dos problemas práticos.

Neste capítulo discutiremos a solução dos problemas OMSR que tem a seguinte formulação geral

$$\text{encontre } \underline{x}^* = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^T \text{ que minimiza } f(\underline{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

A maioria dos procedimentos iterativos tem duas etapas que se alternam até que a tolerância desejada seja alcançada, assim podemos descrever os algoritmos da seguinte forma

P1. escolha uma estimativa inicial para o vetor das variáveis de decisão

$$\underline{x}^0 = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^T,$$

P2. calcule a direção de busca \underline{s}^k ,

P3. minimize, seguindo a direção \underline{s}^k , a FO, isto é calcule $\underline{x}^{k+1} = \underline{x}^k + \Delta \underline{x}^k$, onde $\Delta \underline{x}^k = \lambda \underline{s}^k$,

P4. verifique se a tolerância foi atingida, se não volte ao passo P2.

Os vários métodos de programação não-linear (NLP - *nonlinear programming*) diferem uns dos outros principalmente na maneira como obtêm a direção de busca \underline{s}^k . Alguns NLP utilizam as derivadas para definir a direção de busca (métodos indiretos) ou apenas a FO (métodos diretos). Os métodos que utilizam derivadas analíticas em geral usam menos tempo de computação, porém requerem maior tempo do engenheiro para a análise do problema. Também é importante lembrarmos que a natureza da FO influencia na escolha e no desempenho do algoritmo de otimização.

A seguir, na seção 4.1 apresentaremos os MI's mais utilizados em problemas de OMSR da engenharia química, enquanto na seção 4.2 estudaremos os MD's.

5.1. Métodos Indiretos (MI) para OMSR

Os métodos indiretos utilizam as derivadas para encontra o ponto ótimo \underline{x}^* . A direção de pesquisa \underline{s} na minimização é denominada *direção descendente* pois como

$$f(\underline{x}^{k+1}) < f(\underline{x}^k)$$

Equação 5-A

o produto dos vetores $\nabla^T f(\underline{x})$ e \underline{s} é sempre negativo, ou seja

$$\nabla^T f(\underline{x}) \cdot \underline{s} < 0$$

Equação 5-B

Para provar esta afirmação examine os vetores $\nabla^T f(\underline{x}^k)$ e \underline{s}^k na figura 5-a. O ângulo entre eles é θ , assim

$$\nabla^T f(\underline{x}^k) \cdot \underline{s}^k = |\nabla^T f(\underline{x}^k)| \cdot |\underline{s}^k| \cdot \cos \theta$$

Equação 5-C

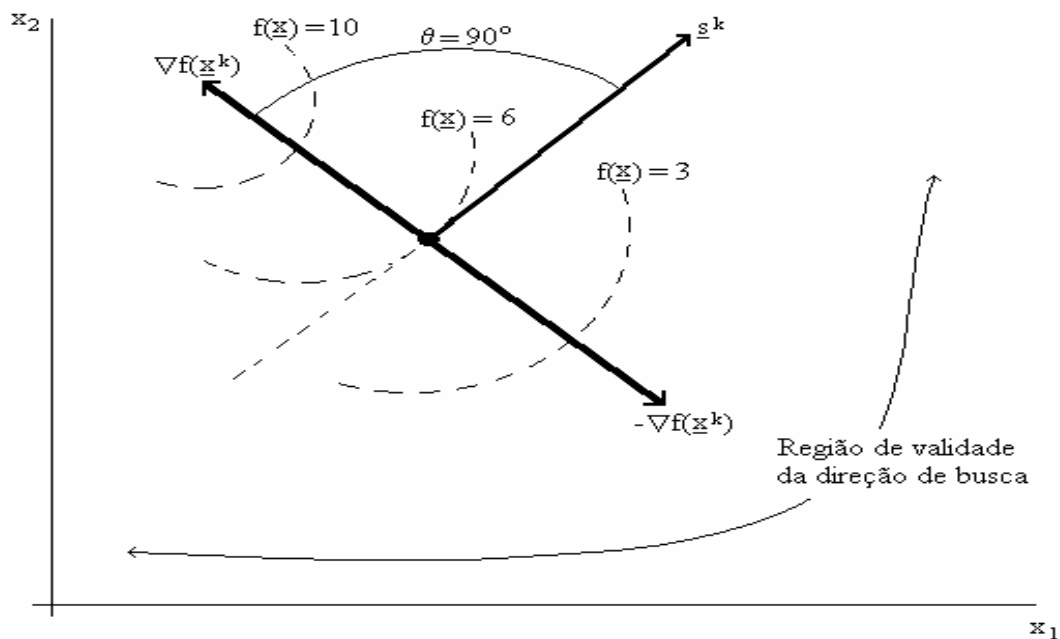


Figura 5-A: Identificação da região das possíveis direções de busca

Se $\theta = 90^\circ$ como na figura 5-a, então a direção de busca (ao longo de \underline{s}^k) não irá diminuir o valor da FO. Se $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ então haverá um aumento da FO, portanto para atingir o objetivo, ou seja, minimizar $f(\underline{x})$, $180^\circ \geq \theta \geq 90^\circ$ e $\cos \theta \leq 0$, conseqüentemente $\nabla^T f(\underline{x}^k) \cdot \underline{s}^k < 0$.

Existem basicamente 3 classes de MI's para resolver problemas de OMSR:

MI1. Métodos de 1ª ordem: gradiente, gradiente conjugado

MI2. Métodos de 2ª ordem: Newton, Levenberg-Marquardt

MI3. Métodos da secante ou métodos quasi-Newton: Broyden, Powell, Davidson-Fletcher-Powell (DFP), Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shano (BFGS), Davidson

5.1.1. Método do Gradiente ou Método do Gradiente Descendente

Este método utiliza apenas a derivada de 1ª ordem para atender a FO.

O gradiente é um vetor no ponto \underline{x} que indica (localmente) a direção na qual a função $f(\underline{x})$ mais cresce e é ortogonal (perpendicular) à tangente do contorno de $f(\underline{x})$ no ponto \underline{x} . Na maximização utilizaremos diretamente o gradiente e o algoritmo é denominado de "gradiente ascendente", enquanto que na minimização usaremos a negativa do gradiente, por isso o nome "gradiente descendente".

Portanto no método do gradiente descendente a direção de busca é igual a negativa do gradiente

$$\underline{s}^k = -\nabla f(\underline{x}^k)$$

Equação 5-D

Porém na maioria das vezes é conveniente utilizar o gradiente apenas para indicar o sentido do passo, mas não a amplitude do mesmo e o ponto ótimo é atualizado da seguinte forma

$$\underline{x}^{k+1} = \underline{x}^k + \Delta \underline{x}^k = \underline{x}^k + \lambda^k \underline{s}^k = \underline{x}^k - \lambda^k \nabla f(\underline{x}^k)$$

Equação 5-E

onde $\Delta \underline{x}^k = \underline{x}^{k+1} - \underline{x}^k$ é o vetor de \underline{x}^k a \underline{x}^{k+1}

\underline{s}^k direção de busca, a direção do gradiente descendente

λ^k escalar que determina o comprimento a ser percorrido na direção \underline{s}^k

O método utiliza a equação 5-e recursivamente até que a tolerância seja atingida. No ponto mínimo o valor do gradiente deve ser igual a zero.

Para definir o valor de λ^k existem vários métodos, mas citaremos apenas dois deles:

(a) $\lambda^k = \lambda = \text{constante}$, neste caso o passo utilizado raramente é o apropriado.

(b) $\lambda^k = \lambda^{\text{opt}}$ é calculado por

$$\lambda^{\text{opt}} = -\frac{\nabla^T f(\underline{x}^k) \underline{s}^k}{(\underline{s}^k)^T \underline{H}(\underline{x}^k) \underline{s}^k}$$

Equação 5-F

O método gradiente apresenta três dificuldades:

É eficiente nas primeiras iterações, quando o ponto encontra-se afastado do ponto ótimo, porém sua taxa de convergência diminui drasticamente à medida que se aproxima da solução ótima.

- D1. Se os eixos das curvas de nível da FO são paralelos aos eixos formados pelas variáveis de decisão, por exemplo quando não existe interação entre as variáveis de decisão [$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$], a direção de busca apontará diretamente para o ótimo, figura 5-b e figura 5-c. Porém quando esses eixos **não** são paralelos, a taxa de convergência cai drasticamente, por exemplo quando existe interação entre as variáveis de busca [$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 + x_1 \cdot x_2$], figura 5-d e figura 5-e. Podemos resumir esta dificuldade dizendo que este método é muito sensível a forma das curvas de nível.
- D2. O gradiente descendente determina um ponto estacionário, não distinguindo se o mesmo é um extremo ou ponto de sela. Se for um ponto de sela é necessário empregar um método que não usa o gradiente para mover o ponto para fora dessa região. A estacionaridade do ponto pode ser testada examinando a matriz Hessiana da FO, conforme descrito no capítulo 2.

D3.

```

x1 = -2:0.1:2; x2 = -2:0.1:2;
[X1,X2] = meshgrid(x1,x2) ;
fx1 = X1.^2 + X2.^2;
mesh(x1,x2,fx1)
    
```

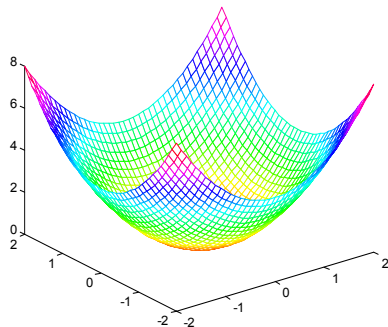


Figura 5-B: Gráfico de f_{x1}

```

v1 = [0.1,0.5,1,1.5,2,3,4,6];
c = contour(x1,x2,fx1,v1);
clabel(c);
    
```

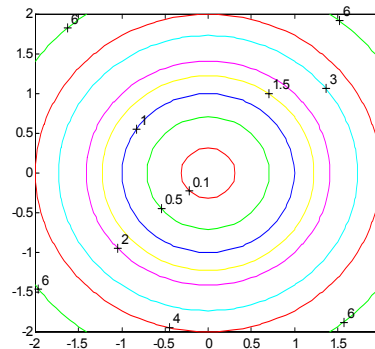


Figura 5-C: Curvas de nível de f_{x1}

```

x1 = -2:0.1:2; x2 = -2:0.1:2;
[X1,X2] = meshgrid(x1,x2) ;
fx2 = X1.^2 + X2.^2 + X1.*X2;
mesh(x1,x2,fx2)
    
```

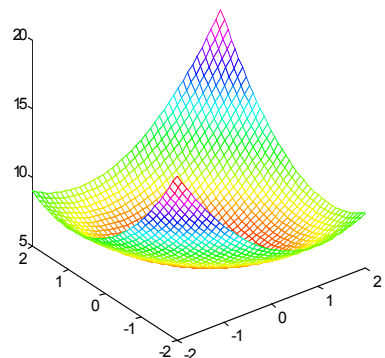


Figura 5-D: Gráfico de f_{x2}

```

v2 = [0.1,0.5,1,1.5,2,3,4,6];
c = contour(x1,x2,fx,v2);
clabel(c);
    
```

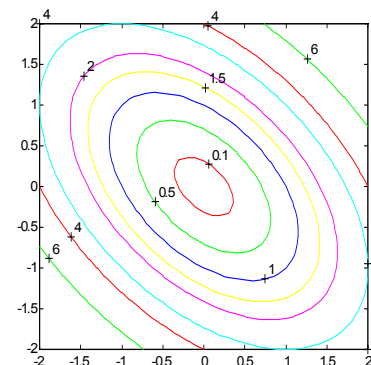


Figura 5-E: Curvas de nível de f_{x2}

5.1.2. Método do Gradiente Conjugado

Este método, também de 1ª ordem, combina (linearmente) o gradiente da iteração atual com o da anterior definindo a nova direção de busca, daí o nome gradiente conjugado. Também tem taxa de convergência quadrática e tem um desempenho superior ao método do gradiente descendente sem aumentar significativamente o esforço computacional. A demonstração desta última afirmação é encontrada em Himmelblau e Edgar (1980), página 219.

O algoritmo do método do gradiente conjugado pode ser assim resumido:

- P1. Defina uma estimativa inicial \underline{x}^0
- P2. Calcule $f(\underline{x}^0)$ e $\nabla f(\underline{x}^0)$, faça $\underline{s}^0 = -\nabla f(\underline{x}^0)$
- P3. Compute $\underline{x}^1 = \underline{x}^0 + \lambda^0 \cdot \underline{s}^0$. λ^0 é o escalar que minimiza $f(\underline{x})$ na direção \underline{s}^0 , ou seja é obtido através de uma busca unidimensional.
- P4. Calcule $f(\underline{x}^1)$ e $\nabla f(\underline{x}^1)$. A nova direção de busca é uma combinação linear entre \underline{s}^0 e $\nabla f(\underline{x}^1)$:

$$\underline{s}^1 = -\nabla f(\underline{x}^1) + \underline{s}^0 \frac{[\nabla f(\underline{x}^1)]^T [\nabla f(\underline{x}^1)]}{[\nabla f(\underline{x}^0)]^T [\nabla f(\underline{x}^0)]}$$

Equação 5-G

Para a k-ésima iteração:

$$\underline{s}^{k+1} = -\nabla f(\underline{x}^{k+1}) + \underline{s}^k \frac{[\nabla f(\underline{x}^{k+1})]^T [\nabla f(\underline{x}^{k+1})]}{[\nabla f(\underline{x}^k)]^T [\nabla f(\underline{x}^k)]}$$

Equação 5-H

- P5. Teste se a FO esta sendo minimizada, se não volte ao passo P4.
- P6. Termine o algoritmo quando $\|\underline{s}^k\|$ for menor que a tolerância desejada.

Um problema com este método é que se a razão entre os produtos internos dos gradientes entre as iterações k+1 e k for pequena recaímos no algoritmo do gradiente descendente.

5.1.3. Método de Newton

Este é um método indireto de 2ª ordem. Vamos aproximar a FO por uma série de Taylor truncada no 3º termo.

$$f(\underline{x}) \cong f(\underline{x}^k) + [\nabla f(\underline{x}^k)]^T \Delta \underline{x}^k + \frac{1}{2} (\Delta \underline{x}^k)^T \underline{H}(\underline{x}^k) (\Delta \underline{x}^k)$$

Equação 5-I

O mínimo de $f(\underline{x})$ na direção \underline{x}^k é obtido derivando a equação 5-i em relação a \underline{x} e igualando a zero

$$\nabla f(\underline{x}^k) + \underline{H}(\underline{x}^k) (\Delta \underline{x}^k) = \underline{0}$$

Equação 5-J

ou

$$\Delta \underline{x}^k = \underline{x}^{k+1} - \underline{x}^k = -[\underline{H}(\underline{x}^k)]^{-1} \nabla f(\underline{x}^k)$$

Equação 5-K

onde $[\underline{H}(\underline{x}^k)]^{-1}$ é o inverso da matriz Hessiana.

Observe que a equação 5-k define simultaneamente o sentido e a magnitude $\{-[\underline{H}(\underline{x}^k)]^{-1}\nabla f(\underline{x}^k)\}$ do passo de atualização $(\Delta \underline{x}^k)$ das variáveis de decisão (\underline{x}^k) .

Se $f(\underline{x})$ for realmente quadrática então o mínimo é alcançada em uma iteração. Entretanto, em geral para uma FO não-linear são necessários várias iterações. Neste caso é interessante alterar a equação 5-k modificando a amplitude do passo da seguinte maneira

$$\Delta \underline{x}^k = \underline{x}^{k+1} - \underline{x}^k = -\lambda^k \cdot [\underline{H}(\underline{x}^k)]^{-1} \nabla f(\underline{x}^k) = \lambda^k \cdot \underline{s}^k$$

Equação 5-L

onde λ^k (amplitude do passo) pode ser calculado pela equação 5-f. No método de Newton $\lambda = 1$ em cada passo.

Note também que para avaliar $\Delta \underline{x}^k$ não é preciso inverter a matriz Hessiana, pois podemos reescrever equação 5-j em forma de sistema de equações lineares

$$\underline{H}(\underline{x}^k)(\Delta \underline{x}^k) = -\nabla f(\underline{x}^k)$$

Equação 5-M

que tem solução relativamente fácil, e que diminui os erros de arredondamento cometidos durante a inversão de matrizes.

O método de Newton, quando converge, é bastante rápido. Porém tem as seguintes desvantagens:

- D1. Encontra apenas o mínimo local.
- D2. Requer a inversão de uma matriz, ou pelo menos a solução de um sistema linear a cada iteração.
- D3. Requer a avaliação analítica das derivadas de 1ª e 2ª ordem.
- D4. Pode convergir para um ponto de sela se $\underline{H}(\underline{x})$ não é positiva definida.
- D5. Tem desempenho fraco quando a estimativa inicial é ruim.

A dificuldade D3 pode ser amenizada aproximando a derivada por uma fórmula apropriada de diferenças finitas.

Se $\underline{H}(\underline{x})$ for positiva-definida e se a FO pode ser aproximada por uma função quadrática, o método de Newton tem a vantagem de ter uma taxa de convergência quadrática nas vizinhanças do ponto ótimo, ou seja, na região onde o gradiente descendente ou conjugado tem um desempenho ruim. Porém em regiões afastadas do mínimo o método de newton tem uma taxa de convergência pequena.

5.1.4. Método de Levenberg-Marquardt

Levenberg, Marquardt e outros pesquisadores sugeriram que a matriz Hessiana de $f(\underline{x})$, $\underline{H}(\underline{x})$, seja modificada a cada iteração de forma a garantir

que a nova matriz Hessiana, $\underline{\tilde{H}}(\underline{s})$, seja sempre positiva-definida e bem-condicionada. Isto é efetuado adicionando a $\underline{H}(\underline{x})$ uma matriz diagonal

$$\underline{\tilde{H}}(\underline{x}) = \underline{H}(\underline{x}) + \beta \underline{I}$$

Equação 5-N

onde β é uma constante positiva, suficientemente grande para garantir que $\underline{\tilde{H}}(\underline{s})$ seja positiva-definida quando $\underline{H}(\underline{x})$ não é. Também é possível usar

$$[\underline{\tilde{H}}(\underline{x})]^{-1} = [\underline{H}(\underline{x})]^{-1} + \gamma \underline{I}$$

Equação 5-O

onde γ é uma constante com finalidades análogas aos de β .

Para definir a magnitude de β precisamos estimar qual o menor (mais negativo) autovalor de $\underline{H}(\underline{x})$, α_1 , e fazer com que $\beta > -\min(\alpha_1)$. Note que se β for suficientemente grande $\beta \underline{I}$ pode subjugar a $\underline{H}(\underline{x})$ e neste caso o algoritmo se aproxima do gradiente descendente.

O método de Levenberg-Marquardt para minimizar uma função pode ser implementado segundo o algoritmo abaixo:

P1. Defina uma estimativa inicial \underline{x}^0 e uma tolerância ε .

P2. Para $k = 0$ faça $\beta^0 = 10^3$.

P3. Calcule $\nabla f(\underline{x}^k)$.

P4. Verifique se a tolerância foi atingida, se não continue.

P5. Calcule $\underline{s}^k = -[\underline{H} + \beta^k \underline{I}]^{-1} \nabla f(\underline{x}^k)$.

P6. Compute $\underline{x}^{k+1} = \underline{x}^k + \lambda^k \cdot \underline{s}^k$. λ^k é calculada pela equação 5-f.

P7. Se $f(\underline{x}^{k+1}) < f(\underline{x}^k)$ vá ao passo P8, se não vá ao passo P9.

P8. $\beta^{k+1} = 0,25\beta^k$, e $k = k + 1$. Volte ao passo P3.

P9. $\beta^k = 2\beta^k$. Volte ao passo P3.

Portanto o método de Levenberg-Marquardt no início se comporta como um gradiente descendente (β grande), mas a medida que se aproxima do ponto ótimo tende a se comportar como o método de Newton ou o de quasi-Newton (β pequeno).

5.1.5. Método da Secante ou Quasi-Newton

Por analogia com o método da secante para funções de uma variável, os procedimentos descritos nesta seção minimizam $f(\underline{x})$ utilizando apenas os valores de $f(\underline{x})$ e de $\nabla f(\underline{x})$; a Hessiana de $f(\underline{x})$ é aproximada por combinação desses valores, $\hat{\underline{H}}(\underline{x})$.

Esses métodos também são afetados pela estimativa inicial de \underline{x}^0 .

Os algoritmos dos métodos quasi-Newton podem ser resumido da seguinte maneira:

Passo 0 (zero)

P1. Defina uma estimativa inicial \underline{x}^0 e uma tolerância ε .

P2. Selecione a direção inicial de busca \underline{s}^0 . Usualmente $\underline{s}^0 = -\nabla f(\underline{x}^0)$.

P3. Calcule $\hat{\underline{H}}^0 \equiv \hat{\underline{H}}(\underline{x}^0)$, freqüentemente $\hat{\underline{H}}^0 = \underline{I}$ se $\hat{\underline{H}}(\underline{x}^0)$ não for positiva-definida

Passo k

P1. Calcule o escalar λ^k , por exemplo pela equação 5-f, ou faça $\lambda = 1$.

P2. Calcule \underline{x}^{k+1} que minimiza $f(\underline{x})$: $\underline{x}^{k+1} = \underline{x}^k + \lambda^k \left(\hat{\underline{H}}^k \right)^{-1} \underline{s}^k$.

P3. Calcule $f(\underline{x}^{k+1})$ e $\nabla f(\underline{x}^{k+1})$.

P4. Calcule $\Delta \underline{x}^k = \underline{x}^{k+1} - \underline{x}^k$ e $\Delta \underline{g}^k = \nabla f(\underline{x}^{k+1}) - \nabla f(\underline{x}^k)$.

P5. Calcule $\hat{\underline{H}}^{k+1} = \hat{\underline{H}}^k + \Delta \left(\hat{\underline{H}}^k \right)$ ou $\left[\hat{\underline{H}}^{k+1} \right]^{-1} = \left[\hat{\underline{H}}^k \right]^{-1} + \left[\Delta \left(\hat{\underline{H}}^k \right) \right]^{-1}$ escolhendo uma das equações entre equação 5-p e equação 5-t.

P6. Calcule a nova direção de busca por

- $\underline{s}^{k+1} = - \left[\hat{\underline{H}}^{k+1} \right]^{-1} \nabla f(\underline{x}^{k+1})$ através da inversão de matriz ou
- $\hat{\underline{H}}^{k+1} \underline{s}^{k+1} = -\nabla f(\underline{x}^{k+1})$ pela solução do sistema linear,.

Passo k + 1

P1. Verifique se a tolerância ε foi atingida

P2. Se o critério de convergência foi satisfeito, pare. Se não, retorne ao passo k.

Algumas equações que realizam a aproximação da matrix Hessiana ou de sua inversa são mostradas a seguir:

Broyden:

$$\Delta(\underline{\hat{H}}^k)^{-1} = \frac{\left[\underline{\Delta x}^k - (\underline{\hat{H}}^k)^{-1} \underline{\Delta g}^k \right] \left[\underline{\Delta x}^k - (\underline{\hat{H}}^k)^{-1} \underline{\Delta g}^k \right]^T}{\left[\underline{\Delta x}^k - (\underline{\hat{H}}^k)^{-1} \underline{\Delta g}^k \right]^T \underline{\Delta g}^k}$$

Equação 5-P

Davidson-Fletcher-Powell (DFP):

$$\Delta(\underline{\hat{H}}^k)^{-1} = \frac{(\underline{\Delta x}^k)(\underline{\Delta x}^k)^T}{(\underline{\Delta x}^k)^T(\underline{\Delta g}^k)} - \frac{(\underline{\hat{H}}^k)^{-1}(\underline{\Delta g}^k)(\underline{\Delta g}^k)^T \left[(\underline{\hat{H}}^k)^{-1} \right]^T}{(\underline{\Delta g}^k)^T (\underline{\hat{H}}^k)^{-1} (\underline{\Delta g}^k)}$$

Equação 5-Q

ou sua equivalente

$$\Delta(\underline{\hat{H}}^k) = \frac{(\underline{\Delta g}^k - \underline{\hat{H}}^k \underline{\Delta x}^k)(\underline{\Delta g}^k)^T + \underline{\Delta g}^k (\underline{\Delta g}^k - \underline{\hat{H}}^k \underline{\Delta x}^k)^T}{(\underline{\Delta g}^k)^T (\underline{\Delta x}^k)} - \frac{(\underline{\Delta g}^k - \underline{\hat{H}}^k \underline{\Delta x}^k)^T \underline{\Delta x}^k \underline{\Delta g}^k (\underline{\Delta g}^k)^T}{\left[(\underline{\Delta g}^k)^T (\underline{\Delta x}^k) \right] \left[(\underline{\Delta g}^k)^T (\underline{\Delta x}^k) \right]}$$

Equação 5-R

Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS):

$$\Delta(\underline{\hat{H}}^k)^{-1} = \frac{\left[\underline{\Delta x}^k - (\underline{\hat{H}}^k)^{-1} \underline{\Delta g}^k \right] (\underline{\Delta x}^k)^T + \underline{\Delta x}^k \left[\underline{\Delta x}^k - (\underline{\hat{H}}^k)^{-1} \underline{\Delta g}^k \right]^T}{(\underline{\Delta g}^k)^T (\underline{\Delta x}^k)} - \frac{\left[\underline{\Delta x}^k - (\underline{\hat{H}}^k)^{-1} \underline{\Delta g}^k \right] \underline{\Delta g}^k \underline{\Delta x}^k (\underline{\Delta x}^k)^T}{\left[(\underline{\Delta g}^k)^T \underline{\Delta x}^k \right] \left[(\underline{\Delta g}^k)^T \underline{\Delta x}^k \right]}$$

Equação 5-S

ou sua equivalente

$$\Delta(\underline{\hat{H}}^k) = \frac{\underline{\Delta g}^k (\underline{\Delta g}^k)^T}{(\underline{\Delta g}^k)^T (\underline{\Delta x}^k)} - \frac{\underline{\hat{H}}^k \underline{\Delta x}^k (\underline{\Delta x}^k)^T \underline{\hat{H}}^k}{(\underline{\Delta x}^k)^T \underline{\hat{H}}^k \underline{\Delta x}^k}$$

Equação 5-T

Algumas desvantagens desses método são

- D1. $\underline{\hat{H}}^k$ ou $\left(\underline{\hat{H}}^k\right)^{-1}$ pode deixar de ser positiva-definida, neste caso devemos utilizar um dos métodos descritos na seção 5.1.4.
- D2. A correção $\Delta\left(\underline{\hat{H}}^k\right)$ ou $\Delta\left(\underline{\hat{H}}^k\right)^{-1}$ pode tornar-se ilimitada devido aos erros de arredondamento.
- D3. Se $\Delta\underline{x}^k = -\lambda^k\left(\underline{\hat{H}}^k\right)^{-1}\nabla f\left(\underline{x}^k\right)$ por acaso tem a mesma direção da iteração anterior então $\underline{\hat{H}}^{k+1}$ ou $\left(\underline{\hat{H}}^{k+1}\right)^{-1}$ torna-se singular ou indeterminada.

5.2. Métodos Diretos (MD) para OMSR

Métodos diretos não utilizam as derivadas para determinar a direção da busca. Às vezes os MD's são mais efetivos que os MI's, porém esses últimos tem uma taxa maior de convergência. Os MD's apresentam a vantagem de serem fáceis de entender e implementar.

Os MD's mais utilizados em problemas de engenharia química são:

- MD1. Busca randômica.
- MD2. Grade de busca.
- MD3. Busca unidirecional.
- MD4. Método simplex ou do poliedro flexível.

5.2.1. Busca Randômica

O algoritmo deste procedimento é o seguinte

- P1. Fazer $k = 0$
- P2. Randômicamente escolher um vetor \underline{x}^k
- P3. Avaliar $f(\underline{x}^k)$
- P4. Verificar se a tolerância foi atingida, se não retornar ao passo P2.

Alguns métodos escolhem a direção de busca randomicamente e minimizam nessa direção a função $f(\underline{x})$. Obviamente, a solução ótima só pode ser obtida com 100% de probabilidade quando $k \rightarrow \infty$, mas se a FO for muito suave esse método é razoável.

Uma alternativa interessante é utilizar esse procedimento como ponto de partida para outro algoritmo: realiza-se uma série de buscas randômicas escolhendo a que representar menor valor para $f(\underline{x})$.

Também podemos utilizar a busca randômica para certificar que o ponto ótimo é apenas um extremo local. Neste caso damos uma *perturbada* na solução ótima e se após várias perturbações verificamos que voltamos ao mesmo ponto ótimo, temos uma boa probabilidade de termos encontrado o máximo global numa certa região. Por exemplo, na Figura 1-2, do capítulo 1, a FO tem inúmeros vales e montes próximo ao ponto ótimo. Se, ao encontrar um ponto candidato ao ótimo, o perturbarmos por pequenos incrementos randômicos e, ao continuar com a busca, verificamos que fomos para outro ponto estacionário temos a certeza que existem multiplicidade de pontos estacionários e a procura do ponto ótimo deve ser melhor investigada.

5.2.2. Grade de Busca

Esse algoritmo simplesmente faz o mapeamento da FO ao longo de pontos afastados um do outro segundo uma geometria previamente determinada, figura 5-f. Escolhemos o ponto que minimiza (maximiza) $f(\underline{x})$, neste ponto repete-se a grade e assim sucessivamente, até encontrar o ponto ótimo.

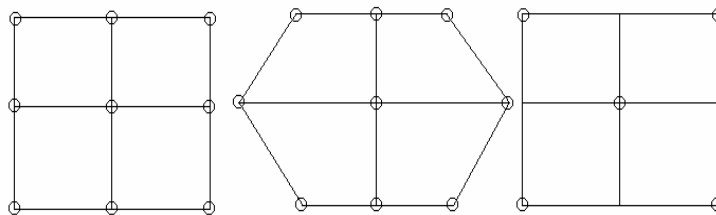


Figura 5-F: Várias tipos de grades de busca

O método da grade de busca requer um elevado esforço computacional para problemas multivariável.

5.2.3. Busca Unidimensional

O algoritmo desse método pode ser assim resumido:

- P1. Fazer $k = 0$ e estimar um vetor \underline{x}^0 .
- P2. Escolher uma componente j do vetor \underline{x}^k .
- P3. Utilizando um método de otimização unidimensional, encontrar o ponto ótimo na direção j .
- P4. Escolher outra direção j e retornar ao passo P3 até ter percorrido todas n direções possíveis.
- P5. Verificar se a tolerância foi atingida, se não retornar ao passo P2.

Esse método só é mais eficiente quanto mais quadrática for a FO, isto é, quanto mais alinhado estiverem os eixos das curvas de nível com os eixos das variáveis de decisão.

```

x1 = -2:0.1:2; x2 = -2:0.1:2;
[X1,X2] = meshgrid(x1,x2) ;
fx1 = X1.^2 + 10*X2.^2;
v1 = [0.1,0.5,1,1.5,2,3,4,6];
c = contour(x1,x2,fx1,v1);
clabel(c);
    
```

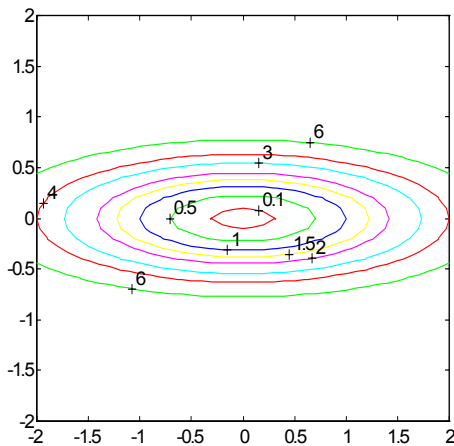


Figura 5-G: Curvas de nível com os eixos alinhados

```

x1 = -2:0.1:2; x2 = -2:0.1:2;
[X1,X2] = meshgrid(x1,x2) ;
fx2 = X1.^2 + X2.^2 + X1.*X2;
v2 = [0.1,0.5,1,1.5,2,3,4,6];
c = contour(x1,x2,fx,v2);
clabel(c);
    
```

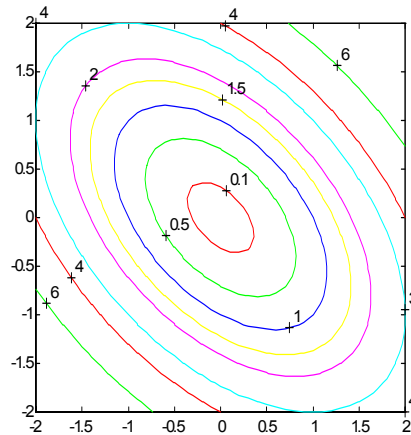


Figura 5-H: Curvas de nível com os eixos desalinhados

5.2.4. Método Simplex ou do Poliedro Flexível

Esse método utiliza uma figura geométrica regular (um simplex) para selecionar o ponto, um dos vértices do simplex, que minimiza $f(\underline{x})$. Em duas dimensões o simplex é um triângulo, em três dimensões, um tetraedro, e assim sucessivamente. Para entender o método vamos assumir uma função de duas variáveis e que o triângulo seja equilátero.

Na primeira iteração para minimizar $f(\underline{x})$, $f(\underline{x})$ é avaliada em três pontos, os vértices de um triângulo, figura 5-i(a). A direção de busca é orientada a partir do ponto de maior valor de $f(\underline{x})$ passando pelo centróide do simplex, assim uma vez determinada a direção e como o triângulo é equilátero está determinado um novo ponto, figura 5-i(a). A FO é avaliada neste novo ponto e uma nova direção de busca é determinada. O procedimento é repetido, sempre rejeitando um vértice, figura 5-i(b). Também devem ser desconsiderados vértices já visitados. Quando nenhum novo vértice é encontrado devemos diminuir o tamanho da aresta do triângulo e continuar com a busca do ponto ótimo até atingir o critério de parada.

Nelder e Mead (1965)[▲] descrevem uma versão do método mais eficiente e mais complexa, que permite estabelecer figuras geométricas que expandem e contraem suas arestas continuamente durante a busca do ponto ótimo

▲ Nelder, J. A., e R. Mead, "A Simplex Method for Function Minimization", *The Computer Journal*, 7: 308 (1965)

(poliedro flexível). Detalhes deste método e um código computacional são encontrados em Himmelblau (1970)[@] e (1972)[#]

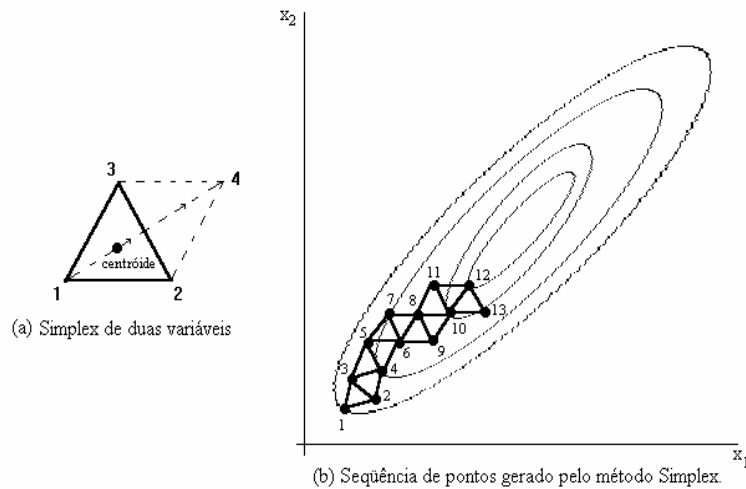


Figura 5-I: Representação do método Simplex

5.3. Avaliação dos MD's e MI's para Problemas de OMSR

Os MD's foram os primeiros métodos propostos para resolver problemas de OMSR e são utilizados na indústria química devido ao fato de serem simples de entender e implementar, entretanto são menos eficientes e robustos que os modernos MI's. Porém para problemas com duas variáveis de decisão os MD's são frequentemente satisfatórios.

Os MI's, por outro lado, necessitam de conhecer as derivadas da FO. Se utilizarmos as derivadas analíticas temos menor esforço computacional ao custo de um maior esforço *cerebral*. Se utilizarmos as derivadas aproximadas por diferenças finitas estamos mais sujeitos a erros de truncamento. Na tabela 5-a vemos a comparação entre MI's e MD's.

Tabela 5-A: Comparação entre MI's e MD's

Métodos numéricos de otimização	
Método Indireto (MI)	Método Direto (MD)
Utilizam $f(x)$ e $f'(x)$ a cada iteração	Utilizam $f(x)$ a cada iteração
Menor número de iterações	Maior número de iterações
Maior tempo por iteração	Menor tempo por iteração

[@] Himmelblau, D. M., *Process Analysis by Statistical Methods*, John Wiley & Sons, New York, 1970.

[#] Himmelblau, D. M., *Applied Nonlinear Programming*, McGraw-Hill, New York, 1972.

Fornecem apenas uma solução aproximada do ponto ótimo

Para que os métodos estudados sejam eficientes é necessário que:

- a função seja unimodal,
- seja conhecida a região de busca que contenha o extremo da função,
- nos métodos indiretos (MI) seja dada uma boa estimativa inicial.

E lembremos sempre que **o julgamento do engenheiro é essencial na aceitação ou não das soluções encontradas** pelos pacotes computacionais.

5.4. Exercícios

E5.1. Nas funções apresentadas nos exercícios E2.8., E2.10.(c) e E2.10.(d) encontre os pontos estacionários e classifique-os.

E5.2. Utilizando as funções `fminu('f',x)` e `fmins('f',x)` do toolbox de otimização do MATLAB resolva os exercícios E2.11 e E2.12. Compare as respostas obtidas e o desempenho dos métodos numéricos empregados.

E5.3. Através da análise dimensional, o problema de transferência de calor pode ser expresso por:

$$Nu = \alpha Re^\beta$$

onde Nu = número de Nusselt

Re = número de Reynolds

α e β = constantes

Defina uma FO e Obtenha a melhor estimativa de α e β baseada nos seguintes dados experimentais:

Tabela 5-B: Dados experimentais para o exercício E5.3.

Re	100	100	200	200	300	300	400	400	500	500
Nu	31	36	33	40	40	42	43	45	36	49

Ref.: Himmelblau, D. M., *Process Analysis by Statistical Methods*, John Wiley & Sons, New York, 1970.

E5.4. Ajuste a equação de estado de Berthelot (para 1 mol):

$$P = \frac{RgT}{V-b} - \frac{a}{TV^2}$$

para o SO₂ a partir dos seguintes dados:

Tabela 5-C: Dados para o exercício E5.4.

V (cm ³ /g)	P (atm)	massa de gás (g)	T (°C)
67,810	5,651	0,2948	50
50,882	7,338		
45,280	8,118		
72,946	5,767	0,2948	75
49,603	8,237		
23,331	15,710		
80,170	5,699	0,2948	100
45,664	9,676		
25,284	16,345		
15,285	24,401		
84,581	5,812	0,2948	125
42,675	11,120		
23,480	19,017		
14,735	27,921		
23,913	20,314	1,9533	150
18,241	25,695		
7,2937	51,022		
4,6577	63,730		
20,685	26,617	1,9533	200
10,595	47,498		
5,8481	74,190		

Ref.: Himmelblau, D. M., *Process Analysis by Statistical Methods*, John Wiley & Sons, New York, 1970.

6. Ajuste de Modelos Matemáticos

Neste capítulo estudaremos o ajuste de modelos matemáticos lineares com uma variável independente (seção 6.1), com várias variáveis independentes (seção 6.2) e o ajuste de modelos matemáticos não-lineares (seção 6.3) a dados experimentais. Veremos também algumas observações e "dicas" (seção 6.4) que podem acelerar a convergência dos métodos numéricos utilizados no ajuste de modelos matemáticos. Por fim, mas não por último, resolveremos alguns exercícios (seção 6.5) que ajudarão a fixar os conceitos discutidos neste capítulo.

Como já dissemos anteriormente, o tratamento rigoroso e correto de ajuste de modelos emprega conceitos e procedimentos estatísticos, porém neste curso faremos um estudo mais "pragmático" e superficial deste problema. Abordaremos o ajuste de modelos do ponto de vista de um problema de otimização. Entretanto, alguns conceitos estatísticos serão necessários e citados/definidos nos momentos oportunos.

Devemos ter claro o significado de **variável determinística** e de **variável estocástica**:

Variável determinística - assume um único valor com probabilidade de 100% de ocorrer;

Variável estocástica - pode assumir um valor com uma certa probabilidade (menor que 100% de ocorrer).

Simplificadamente, podemos definir que uma variável estocástica tem uma parte determinística e uma parte randômica ou aleatória, que denominamos **desvio padrão**, ou seja

Variável estocástica = parte (variável) determinística ± desvio padrão

AS VARIÁVEIS ESTOCÁSTICAS SERÃO REPRESENTADAS EM LETRAS MAIÚSCULAS, com a exceção do desvio padrão que será representado pela letra grega sigma (σ), enquanto que as determinísticas em letras minúsculas.

Na figura 6-a observamos algumas representações esquemáticas de modelos matemáticos. O diagrama de blocos letra (c) é o adequado à formulação matemática de uma variável estocástica adotada neste curso:

$$Y(t) = f(x(t)) + \sigma(t) = y(t) + \sigma(t)$$

Equação 6-A

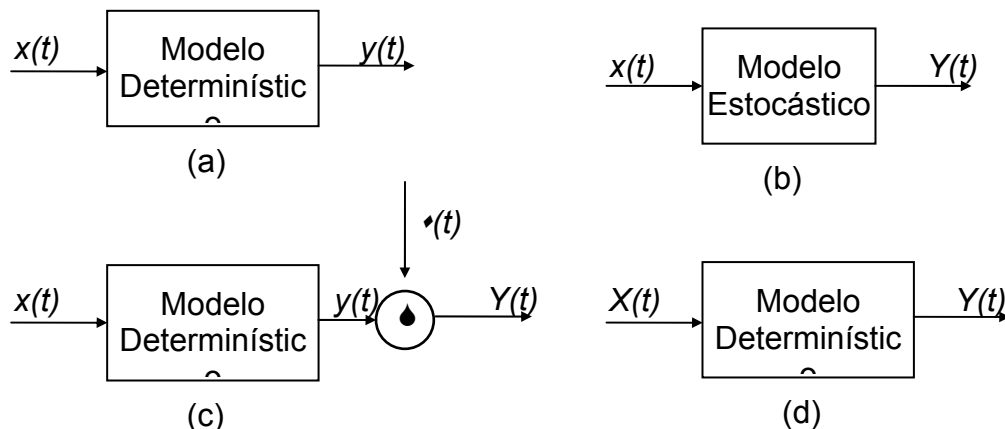


Figura 6-A: Diagramas de blocos de modelo determinístico (a) e estocásticos (b,c,d)

São sinônimos de variável estocástica: variável aleatória e/ou variável randômica ("random or stochastic variable").

A bibliografia recomendada para este capítulo é:

Himmelblau, David M. Process Analysis by Statistical Methods. John Wiley & Sons, Inc. 1970

6.1. Ajuste de Modelos Lineares nos Parâmetros Com Uma Variável Independente

Vamos assumir que apenas a variável dependente (VDep) é estocástica e que a variável independente (VI) é determinística, isto é, à VDep está associado um certo desvio padrão, enquanto que o valor assumido pela VI é conhecido e sem erros (desvios) de medição ou de qualquer outra natureza.

Neste texto vamos nos referir a modelos lineares apenas nos parâmetros, sendo que a variável independente pode ou não ser linear, por exemplo:

a) Modelo linear nos parâmetros e na VI:

$$Y(t) = b_0 + b_1 \cdot x(t)$$

Equação 6-B

b) Modelo linear nos parâmetros e não-linear na VI:

$$Y(t) = b_0 + b_1 \cdot \sqrt{x(t)}$$

Equação 6-C

c) Modelo não-linear nos parâmetros e na VI:

$$Y(t) = \exp(b_0 \cdot b_1) \cdot \sqrt{x(t)} + b_0$$

Equação 6-D

Neste capítulo estudaremos modelos conforme a equação 6-b ou a equação 6-c. Para reconhecer se um modelo é linear em relação a um dado parâmetro basta derivar parcialmente o modelo em relação ao parâmetro, se o resultado não depender do parâmetro então o modelo é linear em relação ao mesmo.

6.1.1. Escolha da Forma do Modelo Linear

Na maioria das vezes a relação entre as VI's e VDep's é não-linear, nesses casos, para aplicar a regressão linear, devemos estabelecer uma relação linear entre essas variáveis, aplicando transformações às mesmas. Alguns exemplos de transformações podem ser observadas na tabela 6-a.

Tabela 6-A: Transformações para forma linear de funções de uma variável

Equação na Forma Não-Linear	Coordenadas na Forma Linear		Equação na Forma Linear
	Eixo X	Eixo Y	
$\frac{1}{y} = b_0 + b_1 \cdot x$	x	$y^\# = \frac{1}{y}$	$y^\# = b_0 + b_1 \cdot x$
$y = b_0 + b_1 \cdot \frac{1}{x}$	$x^\# = \frac{1}{x}$	y	$y = b_0 + b_1 \cdot x^\#$
$\frac{x}{y} = b_0 + b_1 \cdot x$	x	$y^\# = \frac{x}{y}$	$y^\# = b_0 + b_1 \cdot x$
$y = b_0 \cdot x^{b_1} + b_2$	$x^\# = \log(x)$	$y^\# = \log(y - b_2)$	$y^\# = \log(b_0) + b_1 \cdot x^\#$

Se uma relação linear entre a VI e a VDep é estabelecida, através de uma transformação, os parâmetros do modelo não-linear podem ser estimados por regressão linear. No entanto, o tratamento dos erros de medição da VDep torna-se mais complexo, pois a transformação linear não pode ser aplicada ao tratamento do erro. Por exemplo, seja a relação não-linear:

$$Y = y + \varepsilon = b_0 \cdot x^{b_1} + \varepsilon$$

Equação 6-E

Linearizando a equação 6-e, **não** obteremos o resultado abaixo:

$$\log(Y) = \log(b_0) + b_1 \cdot \log(x) + \varepsilon$$

Equação 6-F

Outro fato relevante, quanto à forma do modelo a ser ajustado, é a independência entre os parâmetros do mesmo. Isto é, quanto mais independente os parâmetros entre si, mais fácil e confiável o ajuste. Para modelos lineares de 1ª ordem uma forma de estabelecer a independência entre os parâmetros é escrever o modelo da seguinte maneira:

$$Y = b_0 + b_1 \cdot (x - \bar{x})$$

Equação 6-G

onde \bar{x} é a média dos valores de x .

6.1.2. Ajuste do Modelo Linear Univariável

A obtenção das melhores estimativas[†] dos parâmetros de um modelo é um problema de otimização. Portanto é necessário estabelecer:

- a) a função objetivo (FO) a ser alcançada;
- b) a(s) função(ões) de restrição(ões) (FR), estas não serão consideradas neste capítulo;
- c) o critério de parada, quando for utilizado um método numérico.

A função objetivo (FO) pode ser, por exemplo, a minimização da soma dos quadrados dos erros, entre valor medido e valor calculado pelo modelo da VI; ou a maximização da função de verossimilhança; ou minimização da soma do módulo dos erros.

A estimativa através da função de máxima verossimilhança requer o conhecimento de conceitos estatísticos que fogem ao escopo deste curso e, por isso, não será aqui estudada.

A utilização da função módulo sempre leva a um tratamento matemático complexo e não necessariamente mais adequado.

Portanto o uso dos mínimos quadrados é conveniente aos nossos propósitos. Além disso conduz a problemas de otimização com solução analítica.

Seja a FO a seguir:

[†] Melhores estimativas, pois nunca obteremos o valor real do parâmetro, apenas uma estimativa ótima, segundo um certo critério, do mesmo.

$$f = \min \phi$$

$$\phi = \sum_{i=1}^n \left[(\bar{Y}_i - \eta_i)^2 \cdot p_i \right]$$

Equação 6-H

onde

$$\eta_i = b_0 + b_1 \cdot (x_i - \bar{x})$$

Equação 6-I

n - número total de experimentos realizados

η_i - valor calculado da VDep para um certo x_i

p_i - número de medidas replicadas para um certo x_i

\bar{Y}_i - valor da média dos experimentos replicados para um certo x_i

\bar{x} - valor médio da variável independente

Substituindo a equação 6-i na equação 6-h, obtemos

$$f = \min_{b_0, b_1} \phi = \min_{b_0, b_1} \left\{ \sum_{i=1}^n \left[(\bar{Y}_i - b_0 - b_1 \cdot (x_i - \bar{x}))^2 \cdot p_i \right] \right\}$$

Equação 6-J

Como queremos minimizar em relação aos parâmetros devemos derivar a função ϕ em relação aos mesmos e igualar a zero:

$$\frac{\partial \phi}{\partial b_0} = \frac{\partial \left\{ \sum_{i=1}^n \left[(\bar{Y}_i - b_0 - b_1 \cdot (x_i - \bar{x}))^2 \cdot p_i \right] \right\}}{\partial b_0} = -2 \sum_{i=1}^n \left\{ [\bar{Y}_i - b_0 - b_1 \cdot (x_i - \bar{x})] \cdot p_i \right\} = 0$$

Equação 6-K

$$\frac{\partial \phi}{\partial b_1} = \frac{\partial \left\{ \sum_{i=1}^n \left[(\bar{Y}_i - b_0 - b_1 \cdot (x_i - \bar{x}))^2 \cdot p_i \right] \right\}}{\partial b_1} = -2 \sum_{i=1}^n \left\{ [\bar{Y}_i - b_0 - b_1 \cdot (x_i - \bar{x})] \cdot (x_i - \bar{x}) \cdot p_i \right\} = 0$$

Equação 6-L

Abrindo essas equações, obtemos

$$\sum_{i=1}^n [\bar{Y}_i \cdot p_i] = b_0 \cdot \sum_{i=1}^n [p_i] + b_1 \cdot \sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x}) \cdot p_i]$$

Equação 6-M

$$\sum_{i=1}^n [\bar{Y}_i \cdot (x_i - \bar{x}) \cdot p_i] = b_0 \cdot \sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x}) \cdot p_i] + b_1 \cdot \sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x})^2 \cdot p_i]$$

Equação 6-N

mas

$$\sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x}) \cdot p_i] = \sum_{i=1}^n [x_i \cdot p_i] - \bar{x} \cdot \sum_{i=1}^n [p_i] = \sum_{i=1}^n [x_i \cdot p_i] - \frac{\sum_{i=1}^n [x_i \cdot p_i]}{\sum_{i=1}^n [p_i]} \cdot \sum_{i=1}^n [p_i] = 0$$

Equação 6-O

então, resolvendo para b_0 e b_1 , obtemos:

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^n [\bar{Y}_i \cdot p_i]}{\sum_{i=1}^n [p_i]} = \bar{Y}$$

Equação 6-P

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^n [\bar{Y}_i \cdot (x_i - \bar{x}) \cdot p_i]}{\sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x})^2 \cdot p_i]}$$

Equação 6-Q

A equação 6-p e a equação 6-q dão as estimativas dos parâmetros b_0 e b_1 .

6.2. Ajuste de Modelos Lineares de Várias Variáveis

Nesta seção estamos interessados no mesmo problema da seção anterior, apenas a complexidade matemática aumenta, pois agora existem várias variáveis independentes.

Novamente a função objetivo é a minimização da soma dos quadrados dos erros:

$$f = \min_{b_0, b_1, \dots, b_q} \phi$$

$$\phi = \sum_{i=1}^n [(\bar{Y}_i - \eta_i)^2 \cdot p_i] = \sum_{i=1}^n [e_i^2 \cdot p_i]$$

Equação 6-R

onde

$$\eta_i = b_0 + b_1 \cdot (x_{i,1} - \bar{x}_1) + b_2 \cdot (x_{i,2} - \bar{x}_2) + \dots + b_q \cdot (x_{i,q} - \bar{x}_q)$$

Equação 6-S

n - número total de experimentos realizados

η_i - valor calculado da VDep para um certo ponto $(x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,q})$

p_i - número de medidas replicadas para um certo ponto $(x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,q})$

\bar{Y}_i - valor da média dos experimentos replicados para um certo ponto $(x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,q})$

\bar{x}_k - valor médio da variável independente x_k

$x_{i,k}$ - variável independente, onde o índice i indica a linha da matriz \underline{x} , ou seja o índice do conjunto de dados ($1 \leq i \leq n$); o índice k indica a coluna da matriz \underline{x} , ou seja o índice da variável independente (sendo que para $k = 0, x_{i,0} = 1$) ou dos coeficientes ($0 \leq k \leq q$).

Como queremos minimizar em relação aos parâmetros devemos derivar a função χ^2 em relação aos mesmos e igualar a zero:

$$\frac{\partial \phi}{\partial b_0} = -2 \sum_{i=1}^n \left\{ \left[\bar{Y}_i - b_0 - b_1 \cdot (x_{i1} - \bar{x}_1) - b_2 \cdot (x_{i2} - \bar{x}_2) - \dots - b_q \cdot (x_{iq} - \bar{x}_q) \right] p_i \right\} = 0$$

Equação 6-T

$$\frac{\partial \phi}{\partial b_1} = -2 \sum_{i=1}^n \left\{ \left[\bar{Y}_i - b_0 - b_1 \cdot (x_{i1} - \bar{x}_1) - b_2 \cdot (x_{i2} - \bar{x}_2) - \dots - b_q \cdot (x_{iq} - \bar{x}_q) \right] (x_{i1} - \bar{x}_1) p_i \right\} = 0$$

Equação 6-U

...

$$\frac{\partial \phi}{\partial b_q} = -2 \sum_{i=1}^n \left\{ \left[\bar{Y}_i - b_0 - b_1 \cdot (x_{i1} - \bar{x}_1) - b_2 \cdot (x_{i2} - \bar{x}_2) - \dots - b_q \cdot (x_{iq} - \bar{x}_q) \right] (x_{iq} - \bar{x}_q) p_i \right\} = 0$$

Equação 6-V

Reescrevendo essas equações de forma apropriada:

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^n [\bar{Y}_i \cdot p_i]}{\sum_{i=1}^n [p_i]} = \bar{Y}$$

Equação 6-W

pois

$$\sum_{i=1}^n [(x_{ik} - \bar{x}_k) p_i] = 0$$

Equação 6-X

$$b_1 \left\{ \sum_{i=1}^n [(x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i1} - \bar{x}_1) p_i] \right\} + b_2 \left\{ \sum_{i=1}^n [(x_{i2} - \bar{x}_2)(x_{i1} - \bar{x}_1) p_i] \right\} + \dots$$

$$+ b_q \left\{ \sum_{i=1}^n [(x_{iq} - \bar{x}_q)(x_{i1} - \bar{x}_1) p_i] \right\} = \sum_{i=1}^n [\bar{Y}_i (x_{i1} - \bar{x}_1) p_i]$$

Equação 6-Y

$$b_1 \left\{ \sum_{i=1}^n [(x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2) p_i] \right\} + b_2 \left\{ \sum_{i=1}^n [(x_{i2} - \bar{x}_2)(x_{i2} - \bar{x}_2) p_i] \right\} + \dots$$

$$+ b_q \left\{ \sum_{i=1}^n [(x_{iq} - \bar{x}_q)(x_{i2} - \bar{x}_2) p_i] \right\} = \sum_{i=1}^n [\bar{Y}_i (x_{i2} - \bar{x}_2) p_i]$$

Equação 6-Z

...

$$b_1 \left\{ \sum_{i=1}^n [(x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{iq} - \bar{x}_q) p_i] \right\} + b_2 \left\{ \sum_{i=1}^n [(x_{i2} - \bar{x}_2)(x_{iq} - \bar{x}_q) p_i] \right\} + \dots$$

$$+ b_q \left\{ \sum_{i=1}^n [(x_{iq} - \bar{x}_q)(x_{iq} - \bar{x}_q) p_i] \right\} = \sum_{i=1}^n [\bar{Y}_i (x_{iq} - \bar{x}_q) p_i]$$

Equação 6-AA

A equação 6-y e a equação 6-aa constituem um sistema linear de equações.

Definindo os seguintes vetores e matrizes:

$$\underline{Y} = \begin{bmatrix} \bar{Y}_1 \\ \bar{Y}_2 \\ \vdots \\ \bar{Y}_n \end{bmatrix}_{n \times 1}, \quad \underline{b} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_q \end{bmatrix}_{(q+1) \times 1}, \quad \underline{x} = \begin{bmatrix} 1 & (x_{11} - \bar{x}_1) & (x_{12} - \bar{x}_2) & \dots & (x_{1q} - \bar{x}_q) \\ 1 & (x_{21} - \bar{x}_1) & (x_{22} - \bar{x}_2) & \dots & (x_{2q} - \bar{x}_q) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & (x_{n1} - \bar{x}_1) & (x_{n2} - \bar{x}_2) & \dots & (x_{nq} - \bar{x}_q) \end{bmatrix}_{n \times (q+1)}$$

$$\underline{p} = \begin{bmatrix} p_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & p_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & p_n \end{bmatrix}_{n \times n}, \quad \underline{e} = \begin{bmatrix} \bar{Y}_1 \\ \bar{Y}_2 \\ \vdots \\ \bar{Y}_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & (x_{11} - \bar{x}_1) & (x_{12} - \bar{x}_2) & \dots & (x_{1q} - \bar{x}_q) \\ 1 & (x_{21} - \bar{x}_1) & (x_{22} - \bar{x}_2) & \dots & (x_{2q} - \bar{x}_q) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & (x_{n1} - \bar{x}_1) & (x_{n2} - \bar{x}_2) & \dots & (x_{nq} - \bar{x}_q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_q \end{bmatrix}$$

Equação 6-BB

obtemos

$$\underline{\eta} = \underline{x} \cdot \underline{b}, \quad \underline{e} = \underline{Y} - \underline{\eta}, \quad \phi = \sum_{i=1}^n [e_i^2 \cdot p_i] = \underline{e}^T \cdot \underline{p} \cdot \underline{e}$$

$$\phi = (\underline{Y} - \underline{\eta})^T \cdot \underline{p} \cdot (\underline{Y} - \underline{\eta}) = (\underline{Y} - \underline{x} \cdot \underline{b})^T \cdot \underline{p} \cdot (\underline{Y} - \underline{x} \cdot \underline{b})$$

Equação 6-CC

Derivando ϕ em relação ao vetor \underline{b} e igualando a zero:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \underline{b}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial b_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial \phi}{\partial b_q} \end{bmatrix} = \frac{\partial (\underline{e}^T \cdot \underline{p} \cdot \underline{e})}{\partial \underline{b}} = 2 \cdot \frac{\partial (\underline{e}^T)}{\partial \underline{b}} \cdot \underline{p} \cdot \underline{e} = 2 \cdot \frac{\partial [(\underline{Y} - \underline{x} \cdot \underline{b})^T]}{\partial \underline{b}} \cdot \underline{p} \cdot \underline{e} = -2 \cdot \underline{x}^T \cdot \underline{p} \cdot (\underline{Y} - \underline{x} \cdot \underline{b}) = 0$$

Equação 6-DD

Resolvendo a equação 6-dd em relação ao vetor \underline{b} :

$$\underline{x}^T \cdot \underline{p} \cdot \underline{Y} = \underline{x}^T \cdot \underline{p} \cdot \underline{x} \cdot \underline{b} \Leftrightarrow \underline{b} = (\underline{x}^T \cdot \underline{p} \cdot \underline{x})^{-1} (\underline{x}^T \cdot \underline{p} \cdot \underline{Y}) = \underline{c} \cdot \underline{G}, \quad \underline{c} = (\underline{x}^T \cdot \underline{p} \cdot \underline{x})^{-1} \neq 0$$

Equação 6-EE

A matriz \underline{p} pode ser interpretada como uma ponderação da precisão e/ou importância das medições experimentais da VDep. Desta forma, se conhecermos as variâncias das medidas experimentais da VDep (σ_i^2) podemos escrever:

$$\underline{p} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2^2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sigma_n^2} \end{bmatrix}$$

Equação 6-FF

6.3. Ajuste de Modelos Matemáticos Não-Lineares

Nas seções anteriores deste capítulo, aprendemos como ajustar modelos lineares nos parâmetros a dados experimentais. No entanto, tal procedimento nem sempre é possível ou leva a resultados adequados. Por exemplo, no Exercício E6.4, para aplicar a regressão linear tivemos que "forçar a barra" e a resposta obtida foi inadequada. Nesses casos temos que executar uma regressão não-linear.

Por regressão não-linear entende-se um problema de otimização cuja função objetivo é a minimização dos resíduos (soma dos quadrados dos erros) entre os valores medidos e os calculados da VDep.

O modelo ajustado é da seguinte forma

$$\eta_i = \eta_i(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iq}, b_1, b_2, \dots, b_m)$$

Equação 6-GG

onde q é o número de variáveis independentes e m o número de parâmetros do modelo.

Em notação matricial a equação 6-GG seria

$$\underline{\eta} = \underline{\eta}(\underline{x}, \underline{b})$$

Equação 6-HH

onde

$$\underline{x} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1q} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nq} \end{bmatrix}, \quad \underline{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Equação 6-II

com $n > m$, isto é, o número de conjuntos de dados experimentais (n) deve ser maior que o número de parâmetros a ajustar (m). Cada valor observado da VD, Y_i , associado a um conjunto de x 's, denominado $x_i = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iq}]$, e esta relacionado com um valor esperado da VD, \hat{y}_i , ou seja

$$Y_i = \eta_i + e_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Equação 6-JJ

onde e_i representa a soma dos erros de medição e da forma do modelo.

A equação de regressão (modelo a ser ajustado) é o seguinte

$$\underline{Y} = \underline{\eta}(x_1, x_2, \dots, x_q, b_1, b_2, \dots, b_m) + \underline{e}$$

Equação 6-KK

A função objetivo que almejamos é

$$f = \min_{\underline{b}} \phi$$

$$\phi = \sum_{i=1}^n \{ [Y_i - \eta_i(\underline{x}_i, \underline{b})]^2 \cdot p_i \}$$

Equação 6-LL

A solução analítica deste problema conduz a um sistema de equações algébricas não-lineares. Um problema com grau de dificuldade igual ou maior ao problema de otimização original. Por isso a abordagem numérica do problema de otimização é a mais adequada.

Podemos utilizar métodos de otimização diretos ou indiretos, conforme estudado no capítulo 5. Em qualquer dos casos, um ou mais critérios de parada devem ser estabelecidos, veja a seção 3.1.1.

6.3.1. Ajuste de Modelos por Métodos Diretos - Método do Poliedro Flexível

Podemos usar qualquer método direto (que não utiliza derivadas) para resolver o problema proposto pela equação 6-II. Para ilustrar utilizaremos o método do poliedro flexível ou simplex. No MATLAB a função que invoca esse algoritmo é **fmins**. Para verificar o seu procedimento de chamada digite **help fmins** na linha de comando e consulte o parte manual do TOOLBOX DE OTIMIZAÇÃO DO MATLAB incluída no final desta apostila.

6.3.2. Ajuste de Modelos por Métodos Indiretos

Se o modelo a ser ajustado for não-linear podemos expandi-lo em uma série de Taylor, truncando a aproximação no segundo termo. Este procedimento leva ao método denominado de Gauss-Siedel, equivalente ao método de Newton (ou quasi-Newton). Desta forma obtemos um modelo recursivo linear, que é resolvido conforme procedimento análogo ao visto na seção 6.2.

Uma outra alternativa é a linearização da função objetivo. Neste caso caímos em algoritmos por nós já estudados: gradiente descendente ou gradiente conjugado.

A tabela 6-b compara os métodos indiretos para ajuste de modelos matemáticos a dados experimentais.

Tabela 6-B: Métodos Indiretos para Ajuste de Modelos

Método	Linearização	Taxa de Convergência		Fórmula de Recorrência
		longe da solução	perto da solução	
Gauss-Seidel	do modelo	lenta	alta	análoga à equação 6-ee
Gradiente (descendente ou conjugado)	da função objetivo	alta	lenta	análoga à Equação 5-E ou 5-H
Marquardt	combina a linearização do modelo com a da função objetivo	inicia conforme o método do gradiente e depois se comporta como o de Gauss-Seidel		análoga à Equação 5-N

6.4. Observações e "Macetes"

Nesta seção descreveremos um procedimento geral, mas não infalível, para ajuste de modelos matemáticos a resultados experimentais. Veremos, também, alguns "macetes" que podem nos auxiliar e reduzir problemas de ordem numérica, tais como mal-condicionamento ou quase singularidades de matrizes.

Como vimos o problema da estimativa de parâmetros é um caso particular de um problema de otimização. Semelhante à estimativa de parâmetros são os problemas de:

- a) estimativa de estado;
- b) simultânea estimativa de parâmetros e de estado;
- c) reconciliação de dados;
- d) simultânea reconciliação e estimativa de parâmetros.

Podemos utilizar qualquer algoritmo numérico para resolver os problemas de estimativa de parâmetros. Particularmente, no TOOLBOX DE OTIMIZAÇÃO DO MATLAB estão disponíveis os seguintes algoritmos:

- 1) Método Quasi-Newton: Broyden-Fletcher-Golfarb-Shanno (BFGS).
Comando do MATLAB **fminu**, com **foptions(6) = 0**
- 2) Método Quasi-Newton: Davidon-Fletcher-Powell (DFP).
Comando do MATLAB **fminu**, com **foptions(6) = 1**
- 3) Método Gradiente Descendente.
Comando do MATLAB **fminu**, com **foptions(6) = 2**

- 4) Método Poliedro flexível (Simplex)
Comando do MATLAB **fmins**, com **foptions(5) = 1**
- 5) Método dos Mínimos Quadrados Não-Linear: Levenberg-Marquardt.
Comando do MATLAB **leastsq**, com **foptions(5) = 0**
- 6) Método dos Mínimos Quadrados Não-Linear: Gauss-Newton.
Comando do MATLAB **leastsq**, com **foptions(5) = 1**
- 7) Método do Mínimo Máximo.
Comando do MATLAB **minimax**, com **foptions default**

6.4.1. Procedimento Geral para Ajuste de Modelos

Via de regra, os passos a serem seguidos no ajuste de modelos podem ser assim resumidos:

- P1. **Eliminação dos "outliers"**. Ou seja, retirada das informações discrepantes. Isto pode ser feito através da análise de gráficos e/ou por intermédio de algoritmos[‡].
- P2. **Normalização dos dados**. A normalização das VD's e VI's influencia decisivamente no comportamento dos algoritmos numéricos. A normalização deve ser realizada de forma que todas as variáveis e suas variações pertençam a uma faixa restrita de valores.
- P3. **Escolha da forma do modelo**. É importante eliminar ou minimizar a interação entre as variáveis[^]. Por exemplo, conforme procedimento análogo ao descrito na seção escolha da forma do modelo linear. Para a escolha entre modelos cinéticos concorrentes o livro *Chemical Reactor Analysis and Design*. 2ª edição, 1990 de Kenneth B. BISCHOFF, e Gilbert F. FROMENT, tem um procedimento muito útil e eficiente. Na escolha do modelo, sempre que possível, parta da análise dos princípios físico-químicos dos fenômenos envolvidos.
- P4. **Estimativa inicial dos parâmetros do modelo**. Um procedimento eficiente, quando possível, é o ajuste linear dos parâmetros do modelos. Se for possível faça inicialmente uma regressão linear, mesmo que tenha que linearizar o modelo a ser ajustado, pois este ajuste geralmente conduz a boas estimativas iniciais para a regressão não-linear. Outra possibilidade é a escolha de um certo número de conjuntos de dados de forma que o sistema de equações tenha graus de liberdade zero. Resolvendo este sistema temos uma estimativa inicial dos parâmetros do modelos não-linear.
- P5. **Normalização dos parâmetros do modelo e/ou normalização da FO**. Efetue transformações de forma que os parâmetros e/ou as parcelas da FO estejam na mesma ordem de grandeza* .
- P6. **Ajuste dos parâmetros do método numérico**. Tendo uma boa estimativa inicial dos parâmetros, ajuste os parâmetros dos métodos numéricos de forma a minimizar o tempo necessário ao ajuste e/ou a aumentar a precisão dos resultados obtidos.
- P7. **Ajuste não-linear dos parâmetros do modelo**.
- P8. **Estude a sensibilidade da FO**. Verifique como se comporta a FO frente a variações nas VDep's e nos parâmetros do modelo[¥].

[‡] Himmelblau, D. M., *Process Analysis by Statistical Methods*. John Wiley & Sons, New York, 1970. Pg's 77, 78, 135 e 136

[^] Idem pg 194.

^{*} Idem pg's 148, 149, 193 e 194.

[¥] Idem pg 147 e 148

P9. Defina o intervalo de confiança e/ou a região conjunta de confiança dos parâmetros. Embora fuja ao escopo deste curso, a análise da variância dos parâmetros deve sempre ser realizada[§].

P10. Realize simulações com os parâmetros ajustados, interpretando os resultados.

No Apêndice I estão reproduzidas as páginas citadas no rodapé.

6.5. Exercícios

E6.1. Determine qual a forma linear que melhor se ajusta aos dados experimentais da tabela abaixo.

Dados de um experimento

x	Y					
1	62.1					
2	87.2					
3	109. 5					
4	127. 3					
5	134. 7					
6	136. 2					
7	134. 9					

E6.2. Utilizando a equação 6-b e a equação 6-g demonstre que esta última conduz a parâmetros mutuamente independentes.

[§] Idem pg's 154 a 164, 197 a 200

E6.3. Os seguintes dados de equilíbrio de SO_3 em hexano são disponíveis. Determine um modelo linear adequado a esse experimento.

Dados experimentais do equilíbrio do SO_3 em hexano

x	Y				
Pressão (psia)	Fração Molar do Hexano				
200	0.848				
400	0.573				
600	0.401				
800	0.288				
1000	0.209				
1200	0.153				
1400	0.111				
1600	0.078				

Obs.: no diretório de trabalho existe o arquivo E6_3.dat com os dados da tabela acima.

E6.4. Ajuste, através de uma regressão linear e de uma não-linear, a equação de estado de Berthelot (para 1 mol):

$$P = \frac{RgT}{V - b} - \frac{a}{TV^2}$$

para o SO₂ a partir dos seguintes dados:

V (cm ³ /g)	P (atm)	massa de gás (g)	T (°C)
67,810	5,651	0,2948	50
50,882	7,338		
45,280	8,118		
72,946	5,767	0,2948	75
49,603	8,237		
23,331	15,710		
80,170	5,699	0,2948	100
45,664	9,676		
25,284	16,345		
15,285	24,401		
84,581	5,812	0,2948	125
42,675	11,120		
23,480	19,017		
14,735	27,921		
23,913	20,314	1,9533	150
18,241	25,695		
7,2937	51,022		
4,6577	63,730		
20,685	26,617	1,9533	200
10,595	47,498		
5,8481	74,190		

Ref.: Himmelblau, D. M., *Process Analysis by Statistical Methods*, John Wiley & Sons, New York, 1970. Exemplo também utilizado no curso de otimização oferecido pelo LSCP/DEQ/EPUSP à PETROBRAS.

Interprete os resultados obtidos comparando-os com a solução encontradas por vocês no exercício E5.4.

Obs.: no diretório de trabalho existe o arquivo E6_4.dat com os dados da tabela acima.

E6.5. Óxido de nitrogênio é absorvido numa solução reacional para produzir um certo composto. Os dados do experimentos estão a seguir. Aplicando o roteiro descrito na seção 6.4.1, estime os coeficientes do modelo b_1 , b_2 e b_3 .

$$y = b_1 \cdot \exp(b_2 \cdot x) \cdot x^{b_3}$$

Dados do experimento

x	Y			
Óxido de Nitrogênio Absorvido (g/l)	Concentração do Produto (g/l)			
0.09	15.1			
0.32	57.3			
0.69	103.3			
1.51	174.6			
2.29	191.5			
3.06	193.2			
3.39	178.7			
3.63	172.3			
3.77	167.5			

Obs.: no diretório de trabalho existe o arquivo E6_5.dat com os dados da tabela acima.

Utilize o método do poliedro flexível.

E6.6. Ajuste a equação de Antoine

$$\log_{10} p = A - \frac{B}{T}$$

onde p é a pressão de vapor em milímetros de mercúrio, T é a temperatura em Kelvin, e A e B são constantes a serem determinadas.

Pressão do vapor para H₂SO₄ (95 % peso) em H₂O para diferentes temperaturas

Pressão de Vapor, p (mm Hg)		Temperatura Absoluta (K)	
0.00150	8.39	308.16	438.16
0.00235	10.30	313.16	443.16
0.00370	12.90	318.16	448.16
0.00580	15.90	323.16	453.16
0.00877	20.20	328.16	458.16
0.01330	24.80	333.16	463.16
0.01960	30.70	338.16	468.16
0.02880	36.70	343.16	473.16
0.04150	45.30	348.16	478.16
0.06060	55.00	353.16	483.16
0.08790	66.90	358.16	488.16
0.12300	79.80	363.16	493.16
0.17200	95.50	368.16	498.16
0.23700	115.00	373.16	503.16
0.32100	137.00	378.16	508.16
0.43700	164.00	383.16	513.16
0.59000	193.00	388.16	518.16
0.78800	229.00	393.16	523.16
1.0700	268.00	398.16	528.16
1.4200	314.00	403.16	533.16
1.8700	363.00	408.16	538.16
2.4000	430.00	413.16	543.16
3.1100	500.00	418.16	548.16
4.0200	580.00	423.16	553.16
5.1300	682.00	428.16	558.16
6.4700	790.00	433.019	563.16

Obs.: no diretório de trabalho existe o arquivo E6_6.dat com os dados da tabela acima.