EXEMPLOS ILUSTRATIVOS DO MÉTODO DE PONTRYAGIN

Exemplo 2.6.3-Pág. 59-Schechter:

Considere o esquema de reação: $A \rightleftarrows B \rightarrow C$ a ser conduzida em um reator tubular com fluxo empistonado e sem difusão. Os balanços dos componentes A e B podem ser expressos por (forma adimensional):

$$\begin{cases} \text{Balanço de } A: \ \dfrac{dx_1(z)}{dz} = \left(k_{2,0} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_2}{T(z)}}\right) \cdot x_2(z) - \left(k_{1,0} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{T(z)}}\right) \cdot x_1(z) \\ \text{Balanço de } B: \ \dfrac{dx_2(z)}{dz} = \left(k_{1,0} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{T(z)}}\right) \cdot x_1(z) - \left[\left(k_{2,0} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_2}{T(z)}}\right) + \left(k_{3,0} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_3}{T(z)}}\right)\right] \cdot x_2(z) \end{cases}$$

Considerando que: $t = z$, $\left(k_{2,0} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_2}{T}}\right) = \left(k_{1,0} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{T}}\right)^2$, $\left(k_{3,0} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_3}{T}}\right) = 2 \cdot \left(k_{2,0} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_2}{T}}\right)$ e $u(t) = k_{1,0} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{T(t)}}$,

obtêm-se:

obtêm-se: $$\begin{cases} \text{Balanço de } A: \ \dfrac{dx_1(t)}{dt} = \left[u(t)\right]^2 \cdot x_2(t) - u(t) \cdot x_1(t) \ \text{com } x_1(0) = 1 \\ \text{Balanço de } B: \ \dfrac{dx_2(t)}{dt} = u(t) \cdot x_1(t) - 3 \cdot \left[u(t)\right]^2 \cdot x_2(t) \ \text{com } x_2(0) = 0 \end{cases}.$$

O objetivo é obter $u(t)$ que maximiza $x_{2,saida} = x_2(t)\big|_{t=1}$, t_{final}=1 (fixo).

O Hamiltoniano é então:

$$H\left[\boldsymbol{x}(t), u(t), \boldsymbol{\lambda}(t)\right] = \lambda_1 \cdot \frac{dx_1}{dt} + \lambda_2 \cdot \frac{dx_2}{dt} = (\lambda_2 - \lambda_1) \cdot x_1 \cdot u + (\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot x_2 \cdot u^2$$

Sendo: $$\begin{cases} \dfrac{d\lambda_1}{dt} = -\dfrac{\partial H}{\partial x_1} = u \cdot (\lambda_1 - \lambda_2) \rightarrow \lambda_1(1) = 0 \\ \dfrac{d\lambda_2}{dt} = u^2 \cdot (3 \cdot \lambda_2 - \lambda_1) \rightarrow \lambda_2(1) = 1 \end{cases}$$

O valor ótimo de u é o valor que minimiza $H\left[\boldsymbol{x}(t), u(t), \boldsymbol{\lambda}(t)\right]$, assim:

$$\frac{\partial H}{\partial u} = 0 = (\lambda_2 - \lambda_1) \cdot x_1 + 2 \cdot (\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot x_2 \cdot u \Rightarrow u = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2) \cdot x_1}{2 \cdot (\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot x_2}$$

Devido à linearidade das variáveis adjuntas, utiliza-se uma nova variável:

$$\eta(t) = \frac{\lambda_1(t)}{\lambda_2(t)} \Rightarrow \frac{d\eta(t)}{dt} = \frac{1}{\lambda_2} \cdot \frac{d\lambda_1}{dt} - \frac{\lambda_1}{\lambda_2^2} \cdot \frac{d\lambda_2}{dt} = u \cdot (\eta - 1) - u^2 \cdot \eta \cdot (3 - \eta) \rightarrow \eta(1) = 0$$

e $u = \dfrac{(\eta - 1) \cdot x_1}{2 \cdot (\eta - 3) \cdot x_2}$

Note que, em vista de:

$(\lambda_2 - \lambda_1) \cdot x_1 + 2 \cdot (\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot x_2 \cdot u = 0 \Rightarrow (\lambda_2 - \lambda_1) \cdot x_1 \cdot u + 2 \cdot (\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot x_2 \cdot u^2 = 0$, identificando:

$H = (\lambda_2 - \lambda_1) \cdot x_1 \cdot u + (\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot x_2 \cdot u^2$ e como $\dfrac{dH}{dt} = 0$, resulta:

$$H = -(\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot x_2 \cdot u^2 \Rightarrow \frac{d}{dt}\left[(\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot x_2 \cdot u^2\right] = 0 \Rightarrow u \cdot \left[\left(\frac{d\lambda_1}{dt} - 3 \cdot \frac{d\lambda_2}{dt}\right) \cdot u \cdot x_2 + (\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot \left(u \cdot \frac{dx_2}{dt} + 2 \cdot x_2 \cdot \frac{du}{dt}\right)\right] = 0$$

$$\left[(\lambda_1 - \lambda_2) - 3 \cdot u \cdot (3 \cdot \lambda_2 - \lambda_1)\right] \cdot u^2 \cdot x_2 + (\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot \left(u^2 \cdot (x_1 - 3 \cdot u \cdot x_2) + 2 \cdot x_2 \cdot \frac{du}{dt}\right) = 0$$

$$(\lambda_1 - \lambda_2) \cdot u^2 \cdot x_2 + (\lambda_1 - 3 \cdot \lambda_2) \cdot \left(u^2 \cdot x_1 + 2 \cdot x_2 \cdot \frac{du}{dt}\right) = 0$$

Dando origem ao sistema algébrico linear e homogêneo:

$$\begin{cases} (\lambda_1-\lambda_2)\cdot x_1 - 2\cdot(\lambda_1-3\cdot\lambda_2)\cdot x_2\cdot u = 0 \\ (\lambda_1-\lambda_2)\cdot u^2\cdot x_2 + (\lambda_1-3\cdot\lambda_2)\cdot\left(u^2\cdot x_1 + 2\cdot x_2\cdot\dfrac{du}{dt}\right) = 0 \end{cases}$$

Que só apresenta solução não trivial se:

$$x_1\cdot\left(u^2\cdot x_1 + 2\cdot x_2\cdot\frac{du}{dt}\right) + 2\cdot u^3\cdot x_2^2 = 0 \Rightarrow \frac{du}{dt} = -u^2\cdot\left(\frac{x_1}{2\cdot x_2} + \frac{u\cdot x_2}{x_1}\right)$$

Considerando que a variável u está sujeita às restrições: $0 \le u \le 1$, resulta na operação descrita por:

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1(t)}{dt} = x_2(t) - x_1(t) \text{ com } x_1(0) = 1 \\ \dfrac{dx_2(t)}{dt} = x_1(t) - 3\cdot x_2(t) \text{ com } x_2(0) = 0 \end{cases} \quad \text{para } 0 \le t < t_{chaveamento}$$

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1(t)}{dt} = [u(t)]^2\cdot x_2(t) - u(t)\cdot x_1(t) \text{ com } x_1(t_{chavemento}) = x_1^* \\ \dfrac{dx_2(t)}{dt} = u(t)\cdot x_1(t) - 3\cdot[u(t)]^2\cdot x_2(t) \text{ com } x_2(t_{chavemento}) = x_2^* \\ \dfrac{du(t)}{dt} = -\dfrac{[u(t)]^2\cdot x_1(t)}{2\cdot x_2(t)} \text{ com } u(t_{chavemento}) = 1 \end{cases} \quad \text{para } t_{chaveamento} < t \le 1$$

Buscando-se por um procedimento de busca o valor de $t_{chaveamento}$ que maximize $x_2(1)$

Problema 2.6.3-Pág. 67-Schechter:

Considere o esquema de reação: $A \to B \to C$ a ser conduzida em um reator tubular com fluxo empistonado e sem difusão. Os balanços dos componentes A e B podem ser expressos por (forma adimensional):

$$\begin{cases} \text{Balanço de } A: \ \dfrac{dx_1(z)}{dz} = -\left(k_{1,0}\cdot e^{-\frac{\gamma_1}{T(z)}}\right)\cdot x_1(z) \\ \text{Balanço de } B: \ \dfrac{dx_2(z)}{dz} = \left(k_{1,0}\cdot e^{-\frac{\gamma_1}{T(z)}}\right)\cdot x_1(z) - \left(k_{2,0}\cdot e^{-\frac{\gamma_2}{T(z)}}\right)\cdot x_2(z) \end{cases}$$

Considerando que: $t = z$, $\left(k_{2,0}\cdot e^{-\frac{\gamma_2}{T}}\right) = \left(k_{1,0}\cdot e^{-\frac{\gamma_1}{T}}\right)^2$ e $u(t) = k_{1,0}\cdot e^{-\frac{\gamma_1}{T(t)}}$, obtêm-se:

$$\begin{cases} \text{Balanço de } A: \ \dfrac{dx_1(t)}{dt} = -u(t)\cdot x_1(t) \text{ com } x_1(0)=1 \\ \text{Balanço de } B: \ \dfrac{dx_2(t)}{dt} = u(t)\cdot x_1(t) - [u(t)]^2\cdot x_2(t) \text{ com } x_2(0)=0 \end{cases}.$$

O objetivo é obter $u(t)$ que maximiza $x_{2,saida} = x_2(t)\big|_{t=1}$.

O Hamiltoniano é então:

$$H[\boldsymbol{x}(t),u(t),\boldsymbol{\lambda}(t)] = \lambda_1\cdot\frac{dx_1}{dt} + \lambda_2\cdot\frac{dx_2}{dt} = -\lambda_1\cdot u\cdot x_1 + \lambda_2\cdot[u\cdot x_1 - u^2\cdot x_2] = (\lambda_2-\lambda_1)\cdot x_1\cdot u - \lambda_2\cdot x_2\cdot u^2$$

$$\text{Sendo: } \begin{cases} \dfrac{d\lambda_1}{dt} = -\dfrac{\partial H}{\partial x_1} = u\cdot(\lambda_1-\lambda_2) \to \lambda_1(1) = 0 \\ \dfrac{d\lambda_2}{dt} = -\dfrac{\partial H}{\partial x_2} = u^2\cdot\lambda_2 \to \lambda_2(1) = 1 \end{cases}$$

O valor ótimo de u é o valor que minimiza $H[\boldsymbol{x}(z),u(z),\boldsymbol{\lambda}(z)]$, assim:

$$\frac{\partial H}{\partial u} = 0 = (\lambda_2-\lambda_1)\cdot x_1 - 2\cdot\lambda_2\cdot x_2\cdot u \Rightarrow u = \frac{(\lambda_2-\lambda_1)\cdot x_1}{2\cdot\lambda_2\cdot x_2} \text{ e } (\lambda_2-\lambda_1)\cdot x_1\cdot u = 2\cdot\lambda_2\cdot x_2\cdot u^2.$$

Então: $H = \lambda_2\cdot x_2\cdot u^2$ e como $\dfrac{dH}{dt} = 0$, tem-se:

$u\cdot\left(\frac{d\lambda_2}{dt}\cdot x_2\cdot u+\lambda_2\cdot\frac{dx_2}{dt}\cdot u+2\cdot\lambda_2\cdot x_2\cdot\frac{du}{dt}\right)=0$, substituindo as expressões das derivadas, resulta:

$u^2\cdot\lambda_2\cdot x_2\cdot u+\lambda_2\cdot\left(x_1-u\cdot x_2\right)\cdot u^2+2\cdot\lambda_2\cdot x_2\cdot\frac{du}{dt}=\lambda_2\cdot\left(u^2\cdot x_1+2\cdot x_2\cdot\frac{du}{dt}\right)=0$, ou seja:

$$\frac{du}{dt}=-\frac{u^2\cdot x_1}{2\cdot x_2}$$

Na realidade a variável u está sujeita às restrições: $0\le u\le 1$, resultando em uma operação descrita por:

$$\left\{\begin{array}{l}\frac{dx_1(t)}{dt}=-x_1(t)\text{ com } x_1(0)=1\\ \frac{dx_2(t)}{dt}=x_1(t)-x_2(t)\text{ com } x_2(0)=0\end{array}\right.\quad\text{para } 0\le t<t_{chaveamento}$$

e

$$\left\{\begin{array}{l}\frac{dx_1(t)}{dt}=-u(t)\cdot x_1(t)\text{ com } x_1(t_{chavemento})=x_1^*\\ \frac{dx_2(t)}{dt}=u(t)\cdot x_1(t)-\left[u(t)\right]^2\cdot x_2(t)\text{ com } x_2(t_{chavemento})=x_2^*\\ \frac{du(t)}{dt}=-\frac{\left[u(t)\right]^2\cdot x_1(t)}{2\cdot x_2(t)}\text{ com } u(t_{chavemento})=1\end{array}\right.\quad\text{para } t_{chaveamento}<t\le 1$$

Buscando-se por um procedimento de busca o valor de $t_{chaveamento}$ que maximize $x_2(1)$

<u>Problema 2.7.2-Pág. 79-Schechter</u>:

A função objetivo de um sistema de reação química com reciclo é definida por:

$I=\int_{z=0}^{z=1}\left[u^2+x^2\right]\cdot dz$, sendo x a concentração adimensional do reagente que é descrita por:

$(1+r)\frac{dx(z)}{dz}=u(z)-x(z)$, sendo: r a razão de reciclo (adimensional). Considerando o balanço global do reagente: $(1+r)\cdot x(0)=1+r\cdot x(1)$, determine u que minimiza a função I.

Considerando que: $t=z$, $x_1(t)=x(z)$ e $x_2(t)=\int_{z=0}^{z=t}\left[u^2+x^2\right]\cdot dz\Rightarrow\frac{dx_2(t)}{dt}=\left[u(t)\right]^2+\left[x_1(t)\right]^2$, obtêm-se:

$$\left\{\begin{array}{l}(1+r)\frac{dx_1(t)}{dt}=u(t)-x_1(t)\text{ com } (1+r)\cdot x_1(0)=1+r\cdot x_1(1)\\ \frac{dx_2(t)}{dt}=\left[u(t)\right]^2+\left[x_1(t)\right]^2\text{ com } x_2(0)=0\end{array}\right.$$

O objetivo é obter $u(t)$ que minimiza $x_{2,\,final}=x_2(t)\big|_{t=1}$, t_{final}=1 (fixo).

O Hamiltoniano é então:

$$H\left[\boldsymbol{x}(t),u(t),\boldsymbol{\lambda}(t)\right]=\lambda_1\cdot\left(\frac{u(t)-x_1(t)}{1+r}\right)+\lambda_2\cdot\left(\left[u(t)\right]^2+\left[x_1(t)\right]^2\right)$$

$$\left\{\begin{array}{l}\frac{d\lambda_1}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial x_1}=\frac{\lambda_1}{1+r}-2\cdot\lambda_2\cdot x_1\\ \frac{d\lambda_2}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial x_2}=0\to\lambda_2(1)=1\Rightarrow\lambda_2(t)=1\end{array}\right.$$

Adotando: $\lambda_1(t)=\lambda(t)$, tem-se o sistema:

$$\begin{cases} (1+r)\dfrac{dx_1(t)}{dt} = u(t) - x_1(t) \text{ com } (1+r)\cdot x_1(0) = 1 + r\cdot x_1(1) \\ \dfrac{dx_2(t)}{dt} = \left[u(t)\right]^2 + \left[x_1(t)\right]^2 \quad \text{com } x_2(0)=0 \\ \dfrac{d\lambda(t)}{dt} = \dfrac{\lambda(t)}{1+r} - 2\cdot x_1(t) \end{cases}$$

$H\left[\boldsymbol{x}(t), u(t), \lambda(t)\right] = \lambda(t)\cdot\left(\dfrac{u(t)-x_1(t)}{1+r}\right) + \left[u(t)\right]^2 + \left[x_1(t)\right]^2$, então:

$$\frac{\partial H\left[\boldsymbol{x}(t), u(t), \lambda(t)\right]}{\partial u} = 0 = \frac{\lambda(t)}{1+r} + 2\cdot u(t) \Rightarrow u(t) = -\frac{\lambda(t)}{2\cdot(1+r)}$$

A condição relativa à variável $\lambda(t)$ é $(1+r)\cdot\lambda(1) = r\cdot\lambda(0)$.

O problema também poderia ser resolvido eliminando a variável $\lambda(t)$ derivando-se em relação a *t* a expressão: $\dfrac{\lambda(t)}{1+r} + 2\cdot u(t) = 0 \Rightarrow 2\cdot\dfrac{du(t)}{dt} = -\dfrac{1}{1+r}\dfrac{d\lambda(t)}{dt} = -\dfrac{1}{1+r}\left(\dfrac{\lambda(t)}{1+r} - 2\cdot x_1(t)\right) = \dfrac{2}{1+r}\left[u(t) + x_1(t)\right]$

Ou seja: $\dfrac{du(t)}{dt} = \dfrac{1}{1+r}\left[u(t) + x_1(t)\right]$, dando origem ao sistema:

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1(t)}{dt} = \dfrac{u(t) - x_1(t)}{1+r} \text{ com } (1+r)\cdot x_1(0) = 1 + r\cdot x_1(1) \\ \dfrac{dx_2(t)}{dt} = \left[u(t)\right]^2 + \left[x_1(t)\right]^2 \quad \text{com } x_2(0)=0 \\ \dfrac{du(t)}{dt} = \dfrac{u(t) + x_1(t)}{1+r} \end{cases}$$

A condição inicial à variável $u(t) = u_0$ é o valor que minimiza $x_{2,\,final} = x_2(t)\big|_{t=1}$.