

Método de Gradiente Conjugado na otimização de problemas modelados na catalização de polímeros

Camila Becker

Universidade de Santa Cruz do Sul – UNISC – Mestrado em Sistemas e Processos Industriais
96.815-900, Avenida Independência, Santa Cruz do Sul, RS
E-mail: camilabecker@mx2.unisc.br

Ruben Edgardo Panta Pazos

Universidade de Santa Cruz do Sul – UNISC – Departamento de Matemática
96.815-900, Avenida Independência, Santa Cruz do Sul, RS
E-mail: rpazos@unisc.br

Geraldo Lopes Crossetti

Universidade de Santa Cruz do Sul – UNISC – Departamento de Física e Química
96.815-900, Avenida Independência, Santa Cruz do Sul, RS
E-mail: gcrossetti@yahoo.com.br

Resumo:

Cada vez mais as indústrias de produção de polímeros buscam métodos robustos para confirmar características desejadas achando as condições do processo que levem ao rendimento máximo do polímero.

Os processos de polimerização estão sendo aperfeiçoados, colaborando para a obtenção de polímeros cada vez mais sofisticados e baratos. A modelagem do processo de polimerização contribui para isso, uma vez que permite reduzir os custos de desenvolvimento, além de possibilitar compreensão do processo industrial.

Neste trabalho, aborda-se sobre modelos regressivos desenvolvidos para o processo de polimerização.

Inicialmente, formula-se um problema de otimização com vínculo, onde a Massa (M) representa a função objetivo (definida como uma função polinomial quadrática), dependente das variáveis preditoras: temperatura (T), pressão (P), concentração de alumínio (Al) e da taxa concentração de alumínio/concentração de níquel (Al/Ni); e o peso molecular (PM), fixado em determinado valor, é a função restrição (da mesma classe que a função objetivo). Para resolver esse problema de otimização com vínculo, empregam-se modelos quadráticos de regressão multivariada. Visando a resolução do problema de otimização com vínculo, é aplicado o método do Gradiente Conjugado. As ferramentas computacionais utilizadas são a planilha eletrônica (Excel), e um sistema de computação algébrica (Maple).

1. Introdução

Atualmente, as indústrias que envolvem a produção ou a transformação dos polímeros crescem a uma velocidade significativa, atingindo um amplo espectro de áreas diversas.

A produção de novos materiais poliméricos não é simples e, também, o custo de produção é elevado, visto que são necessários inúmeros testes até que se consiga um polímero com as características desejadas. Desta forma, a modelagem do processo de polimerização permite reduzir os custos de desenvolvimento, otimizar as condições de operação, além de possibilitar uma melhor compreensão do comportamento do processo industrial.

Neste trabalho, abordam-se diversos modelos de regressão multivariada de tipo polinomial de grau dois com as variáveis preditoras mais significativas obtidos na modelagem da polimerização de eteno com o sistema catalítico NCS. As funções dependentes básicas foram: o peso molecular e a massa. As variáveis preditoras foram a temperatura (TC) e a pressão (P) em que a reação ocorre, a concentração de cocatalisador, expressa como concentração de alumínio (Al), e a proporção entre essas duas concentrações, a taxa alumínio/níquel (Al/Ni). A partir disso, formulou-se o problema de otimização com vínculo, para obter o melhor rendimento (ou a melhor

massa) tendo como fixo um determinado peso molecular.

O artigo está organizado da forma seguinte. Na próxima seção se determina a forma de resolver o problema, experimentação, correlações e modelos regressivos multivariados de tipo polinomiais de grau dois derivados de experimentos no processo de catalisação de polímeros, bem como se formula o problema de otimização com vínculo e se descreve o funcionamento do método do gradiente conjugado. Na seção seguinte são incluídos resultados numéricos obtidos com Excel e Maple. Finalmente se apresentam conclusões e possíveis extensões da pesquisa.

2. Metodologia

Com os dados resultantes dos experimentos no laboratório, se estabelece:

- Estudo de correlação;
- Depois, escolhem-se as variáveis predictoras de mais relevantes;
- Determinam-se modelos de regressão multivariada, em especial os modelos polinomiais de segunda ordem (fatoriais, quadráticos, etc.);
- Formula-se o problema de otimização com vínculo correspondente (onde se trata de otimizar a atividade ou o rendimento catalíticos), supondo um peso molecular fixo;
- Resolve-se o problema formulado mediante um método de otimização com vínculo.

3. O problema de otimização com vínculo

A partir dos dados do sistema catalítico faz-se a análise estatística, visando obter os modelos que melhor se ajustem aos dados. Inicialmente, foi realizada a análise de correlação, para obter o grau de associatividade entre as variáveis. Posteriormente, foram analisados diferentes modelos para a regressão, objetivando resolver o problema de encontrar um máximo da Atividade Catalítica, tendo um Peso Molecular fixo. Através desse processo, as funções aparecem nas folhas de trabalhos de

Excel e Maple. Trabalhou-se com uma função da mesma família para o Peso Molecular e para a Massa.

RESUMO DOS RESULTADOS M=M(TC,P,...)							
Estatística de regressão							
R múltiplo	0,93713976						
R-Quadrado	0,878223587						
R-Quadrado ajustado	0,695662867						
Erro padrão	1,31264934						
Observações	11						
ANOVA							
	gl	SQ	MQ	F	F de significação		
Regressão	6	49,7067768	8,28446281	4,808027061	0,075195141		
Resíduo	4	6,28201916	1,57050479				
Total	10	56,9887929					
Coeficientes							
	Coeficientes	Erro padrão	Stat t	valor P	95% Inferiores	95% Superiores	Inferior 95,0%
Intercepto	19,60776646	7,01155519	2,7849321	0,04288391	0,142566384	29,7494453	0,14656638
Variável X 1	-0,264835444	0,10253083	-2,5829834	0,061134627	-0,549506678	0,01983979	-0,549506678
Variável X 2	-4,587926196	2,4286327	-1,8893842	0,131887764	-11,33089157	2,156039174	-11,3308915
Variável X 3	-0,055328036	0,02889436	-1,9698447	0,120257031	-0,13333486	0,022674415	-0,13333486
Variável X 4	0,058900136	0,01893287	3,1111965	0,006937662	0,006337049	0,111469231	0,00633704
Variável X 5	0,000828937	0,00037856	2,16863945	0,039566132	-0,000230084	0,001871968	-0,00023008
Variável X 6	0,015886501	0,00946373	1,67972889	0,168308394	-0,010379025	0,042172027	-0,01037902

Figura 1: Planilha em Excel resumo dos resultados da regressão quadrática parcial para M.

Considerando as duas funções encontradas, formulou-se o seguinte problema de otimização com vínculo:

$$\begin{cases} \max M = f(TC, P, Al / Ni) \\ \text{com } PM = g(TC, P, Al / Ni) = PM_0 \end{cases}$$

onde PM_0 representa um peso molecular fixo. Este problema pode resolver-se por diversos métodos. Se as variáveis predictoras são consideradas contínuas, então podem ser aplicados o clássico método de Lagrange, método da descida mais rápida ou ainda o método do Gradiente Conjugado. Entretanto, nestes dois últimos casos, em lugar de maximizar a atividade catalítica, minimiza-se a nova função objetivo: $M_{\max} = M(T, P, Al/Ni)$, onde M_{\max} é o máximo valor de M.

```

> restart: with(linalg):with(plots):
Warning, the protected names norm and trace have been redefined and unprotected
Warning, the name changecoords has been redefined
Observação:
Considere-se f (t, y, z, w) a massa; g (t, y, z, w) o peso molecular; x = TC; y = P; z = AL/Ni e w = DL
> f := (x, y, z) -> 19,60776646 - 0,264835444*x - 4,587926196*y - 0,055328036*z + 0,058900135*x*y
+ 0,000828937*z*x + 0,015886501*y*z
> g := (x, y, z) -> 8,31849433 - 0,182069091*x - 0,539203794*y + 0,029535527*z + 0,0477
45774*x*y - 0,000142962

```

Figura 2: Folha de trabalho da resolução do problema de otimização com vínculo.

4. Método do Gradiente Conjugado

O método do Gradiente Conjugado foi criado visando à resolução de problemas lineares iterativamente. Considerando as matrizes de coeficientes simétricas definidas positivamente, o método converge em um número finito de iterações.

Contudo, quando se trata de matrizes não-simétricas o método não converge da mesma maneira. Cada nova direção do Gradiente Conjugado é uma combinação linear de resíduo corrente com a direção anterior.

O Gradiente Conjugado é o método das direções conjugadas que consiste na seleção de sucessivos vetores direção como uma versão conjugada dos sucessivos gradientes encontrados ao longo do processo de solução.

O método do Gradiente Conjugado, consiste em um método iterativo de busca do mínimo local da função. Desta forma, geram-se aproximações para a solução e, em cada iteração do método, dois produtos internos são realizados para que se calculem dois escalares definidos de forma que a seqüência obedeça condições de ortogonalidade.

A figura abaixo ilustra o caminho seguido pelo Método do Gradiente Conjugado para a função $f(x, y) = x^3 + y^3 - 3x - 3y$, que possui 4 pontos críticos, entre os quais (-1, -1) (máximo local) e (1, 1) (mínimo local) além de dois pontos sela. O ponto inicial sob consideração é (-0,75; -0,25).

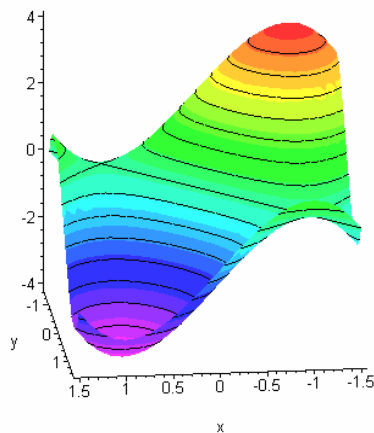


Figura 3: Gráfico da função $f(x, y) = x^3 + y^3 - 3x - 3y$

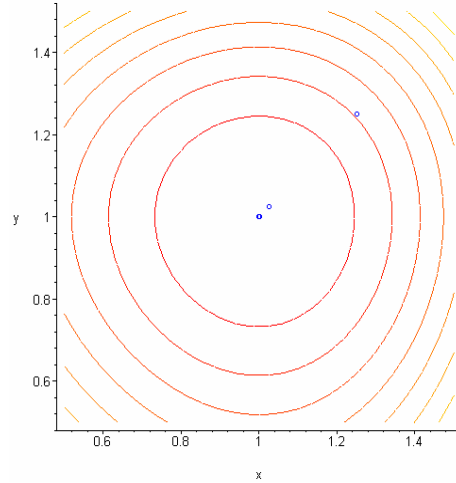


Figura 4: Gráfico das curvas de nível da função $f(x, y) = x^3 + y^3 - 3x - 3y$ mostrando o caminho do método do Gradiente Conjugado em busca do mínimo da função.

ALGORITMO GRADIENTE CONJUGADO, ver Haffner (2004)	
1.	Dado $x_0 \in \mathfrak{R}^n$ (aproximação inicial), calcular $g_0 = \nabla_x f(x_0)$ e fazer $d_0 = -g_0$.
2.	Para $k = 0, 1, \dots, n-1$: a) Fazer: $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, com $\alpha_k = \frac{-g_k^t d_k}{d_k^t \nabla_x^2 f(x_k) d_k}$ b) Calcular $g_{k+1} = \nabla_x f(x_{k+1})$, e verificar se $ g_{k+1} < \varepsilon$ (tolerância). Caso afirmativo, a solução do problema é $x = x_{k+1}$. Caso contrário prosseguir. c) Para $k < n-1$, fazer: i) $d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$, com $\beta_k = \frac{-g_{k+1}^t \nabla_x^2 f(x_k) d_k}{d_k^t \nabla_x^2 f(x_k) d_k}$ ii) Fazer $k = k+1$ e voltar para o Passo 2.
3.	Trocar x_0 por x_n e voltar para o Passo 1.

5. Resultados Numéricos

No decorrer do trabalho, utilizou-se a análise estatística que foi realizada em Excel e simultaneamente em Maple. Foram

apontados os modelos de regressão de tipo polinomial de segundo grau em três variáveis predictoras. Evidentemente em outros modelos regressivos o nível de confiabilidade estatística foi mantido menor ou igual que 0,05, para as duas funções dependentes, a massa e o peso molecular.

Para resolver o problema de otimização foi utilizado o auxílio do sistema de computação algébrica Maple, registrando, entre todas as soluções possíveis, apenas as que aparecem nos conjuntos de valores factíveis, isto é preferentemente para a temperatura ($0 \leq T \leq 50$), pressão ($1 \leq P \leq 3$), ($120 \leq Al/Ni \leq 460$). Entretanto, devido à hipótese de trabalho no sentido que as variáveis predictoras são contínuas, podia-se realizar algumas concessões mais realistas, isto é que os valores sejam próximos aos intervalos de valores de cada variável preditora.

Atingiu-se o objetivo de encontrar um rendimento máximo tendo um determinado peso molecular fixo, para os modelos utilizados. Contudo, nem sempre o modelo obtido pela regressão é um modelo adequado.

Em alguns casos o nível de confiabilidade estatístico (p -level) fica fora da tolerância usual (0,05), e a escolha de um modelo ou outro gera resultados diferentes quando se trata de otimizar (por exemplo) a massa tendo um peso molecular fixo. O estudo da relação entre as formas quadráticas associadas às funções regressivas determinadas para a massa (M) e o peso molecular (PM) é relevante. Uma pequena mudança dos coeficientes de qualquer forma quadrática muda a solução, e em alguns casos não há solução.

Contudo, em relação ao fato do nível de confiabilidade estatística (p -level) do Peso Molecular ser elevado, deve-se a problemas experimentais nas medições.

Neste trabalho, empregou-se o Método do Gradiente Conjugado para resolver o problema de otimização com vínculo. Pode-se perceber que os resultados obtidos foram próximos aos resultados do Método de Multiplicadores de Lagrange, bem

como do Método da Descida mais Rápida (*Steepest Descent*).

Com relação ao Método de Multiplicadores de Lagrange, pode-se perceber que os resultados obtidos tanto com o Método do Gradiente Conjugado quanto com o Método da Descida mais Rápida foram os mesmos, com alguns pequenos erros de arredondamento, uma vez que dois últimos métodos consistem em um método iterativo de busca de um mínimo local.

Como o objetivo deste trabalho consiste em maximizar o rendimento, ou a massa, e os métodos do Gradiente Conjugado bem com o da Descida mais Rápida consistem em métodos de busca do mínimo local, a fórmula utilizada na resolução do problema de otimização foi $-U(T, P, Al/Ni, \lambda)$.

x	y	z	λ
31.41498518	3.385295480	173.9455590	-0.1
32.18490188	2.867563111	174.1331004	-0.1
31.45363764	0.854068954	173.8467156	-0.1
32.46456756	1.343940308	174.1297054	-0.1
31.12179127	83.97061477	176.1848191	-0.1

Tabela 1: Resultados obtidos pelo método do gradiente conjugado.

Para finalizar analisa-se o seguinte gráfico onde é obtido o rendimento máximo em relação a um peso molecular fixo:

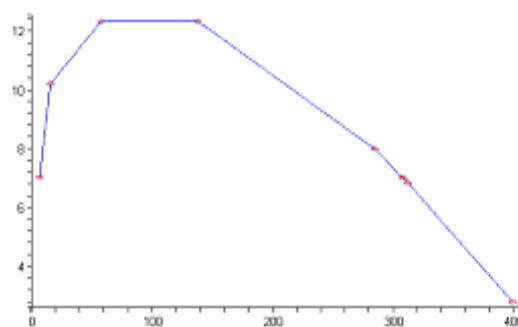


Figura 5: Rendimento ótimo relativo a determinado peso molecular fixo.

6. Conclusões

O objetivo de obter o rendimento máximo tendo um peso molecular fixo tem

sido obtido, ainda por três métodos, depois da realização da modelagem das funções que representam a Massa (M) e o Peso Molecular (PM) tendo como base o sistema catalítico NCS, em termos de três variáveis preditoras (temperatura, pressão e a taxa de concentração de alumínio/níquel).

Para solucionar o problema de otimizar o rendimento (M) tendo um peso molecular fixo, pode-se utilizar o método de multiplicadores de Lagrange, o método da descida mais rápida e o método do gradiente conjugado. Na prática, os resultados obtidos nos três métodos utilizados são os mesmos.

Entretanto, devido ao volume de cálculos, no método da descida mais rápida e no método do gradiente conjugado, uma vez que tratam-se de métodos iterativos, percebe-se mínima diferença entre os resultados.

Agradecimentos

Os autores agradecem à Universidade de Santa Cruz do Sul (UNISC) pelo apoio financeiro. Além disso, a primeira autora agradece de forma especial a CAPES pelo destacável apoio, através da concessão de bolsa de estudos.

Referências

- [1] ANTON, Howard. *Cálculo: um novo horizonte*. Vol. 2. Porto Alegre: Bookman, 2000.
- [2] ANTON, Howard; RORRES, Chris. *Álgebra Linear com aplicações*. Porto Alegre: Bookman, 2001.
- [3] ALMEIDA, P.F.D.; PANTA PAZOS, R.E.; CROSSETTI, G. L., *Otimização do Rendimento de Polímeros Satisfazendo Determinadas Propriedades Mediante a Análise de Regressão e Otimização Discreta*, XXVIII Congresso de Matemática Aplicada e Computacional, Santo Amaro, SP, 2005.
- [4] ALMEIDA, P.F.D.; PANTA PAZOS, R.E.; CROSSETTI, G. L., *Otimização com Vínculo na Modelagem dos Polímeros e a Sensibilidade do Método de Multiplicadores de Lagrange*, XXIX Congresso de Matemática Aplicada e Computacional, Santo Amaro, SP, 2006.
- [5] BECKER, Camila. PANTA PAZOS, R.E.; CROSSETTI, G. L., *Métodos da descida mais rápida para otimizar a atividade catalítica de um polímero*. XXX Congresso de Matemática Aplicada e Computacional, Campinas, SP, 2007.
- [6] BECKER, Camila. PANTA PAZOS, R.E.; CROSSETTI, G. L., *Aproximações quadráticas na otimização não linear na modelagem do processo de catalisação de polímeros*. I Encontro Nacional de Análise Matemática e Aplicações, Rio de Janeiro, RJ, 2007.
- [7] CUNHA, Maria Cristina. *Métodos numéricos*. Campinas: Editora da UNICAMP, 2000.
- [8] FREUND, Robert M., *The Steepest Descent Algorithm for Unconstrained Optimization and a Bisection Line-search Method*, Massachusetts Institute of Technology, USA, 2004.
- [9] HAFFNER, Sérgio. *Técnicas de Otimização (94430-03) Introdução à Otimização em Engenharia*. Porto Alegre, RS, 2004.
- [10] HAIR, J.; ANDERSON, R. ; TATHAM, R.; BLACK, W., *Análise Multivariada de Dados*, Editora Bookman, Porto Alegre, RS, 2005.
- [11] NELE, M.; SAYER, C. e PINTO, J. C. "Computation of Molecular Weight Distributions by Polynomial Approximation with Complete Adaptation Procedures", *Macromolecular Theory and Simulations*, vol. 8, n° 3, 199-213, 1999.
- [12] RARDIN, Ronald, *Optimization in Operations Research*, Prentice Hall, New Jersey, USA, 2000.
- [13] SPERANDIO, Décio; MENDES, João T.; SILVA, Luis H. M. *Cálculo numérico: características matemáticas e computacionais dos métodos numéricos*. São Paulo : Prentice Hall, 2003.