Termodinámica estadística: Multiplicadores de Lagrange

Jesús Hernández Trujillo
Facultad de Química, UNAM

Agosto de 2024

Considerar siguiente el problema de optimización:

Encontrar el extremo de la función

$$f = f(x, y, z) \tag{1}$$

sujeto a la restricción:

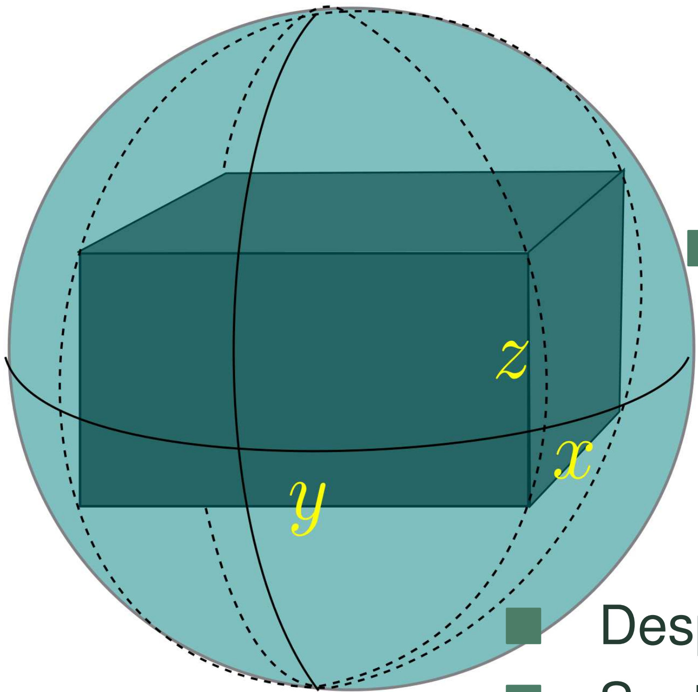
$$g(x, y, z) = 0 \tag{2}$$

Una posibilidad de solución: la sustitución directa.

- Despejar una variable de (2)
- Sustituir en (1)
- Obtener el extremo de la función de 2 variables sin restricción.

Ejemplo:

Obtén las dimensiones de la caja de mayor volumen que puede inscribirse en una esfera de radio R.



Etapas:

- La función y la restricción son

$$\begin{aligned} V(x,y,z) &= xyz \\ \frac{x^2}{4}+\frac{y^2}{4}+\frac{z^2}{4}-R^2 &= 0 \end{aligned}$$

- Despeja una variable de la restricción (ej. z).
- Sustituye z en $V(x,y,z)$.
- Resuelve $\nabla V = \bar{0}$ para encontrar $\{x_c, y_c\}$.
- Encuentra z_c a partir de $\{x_c, y_c\}$ y de allí el volumen máximo.

Resp:

$$V = \frac{8R^3}{3\sqrt{3}}$$

Consideraciones adicionales:

- El método de sustitución directa es simple para problemas sencillos.
- Por las restricciones, frecuentemente conduce a sistemas de ecuaciones no lineales.
- El método de los multiplicadores de Lagrange proporciona un tratamiento sistemático del problema de optimización con restricciones.

- En una optimización sin restricciones:

  La condición para que $f(x, y, z)$ sea un extremo es

$$\nabla f(x, y, z) = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z} \right) = (0, 0, 0) \tag{3}$$

- Cuando se impone la restricción (2)

$$g(x, y, z) = 0$$

  las variables $\{x, y, z\}$ ya no son independientes y no necesariamente se cumple (3).

El método de los multiplicadores de Lagrange permite transformar el problema en uno equivalente sin restricciones mediante la introducción de un conjunto de parámetros.

Obtener el extremo sin restricciones de

$$L(x, y, z, \lambda) = f(x, y, z) - \lambda g(x, y, z) \tag{4}$$

λ es el multiplicador de Lagrange

Sea $p_c(x_c, y_c, z_c, \lambda_c)$ el extremo de L:

Dado que $g(x_c, y_c, z_c) = 0$, p_c también es extremo de f pues

$$L(x_c, y_c, z_c, \lambda_c) = f(x_c, y_c, z_c) - \lambda_c g(x_c, y_c, z_c)$$

El resultado es:

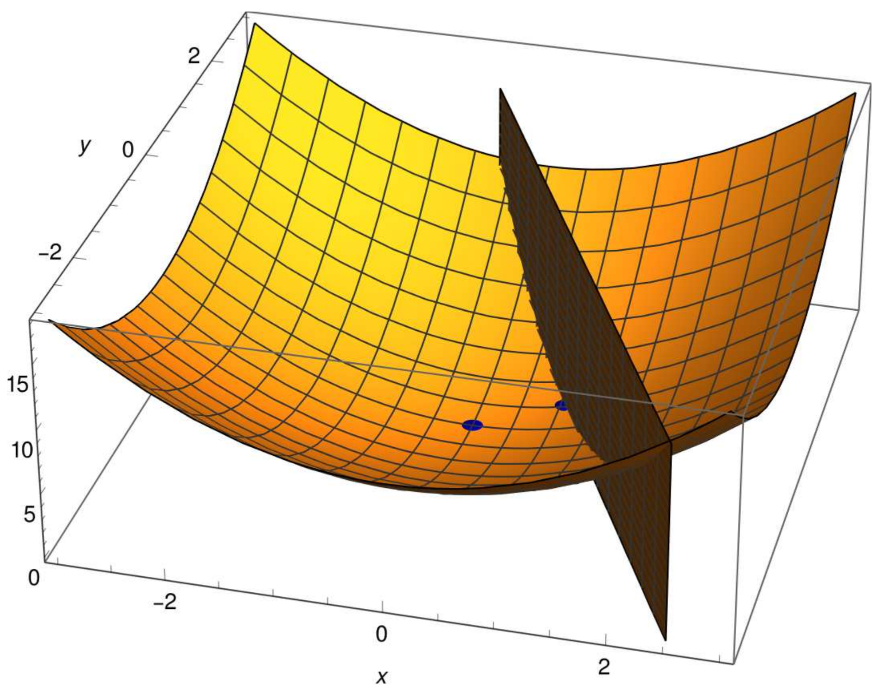
$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial x} - \lambda\frac{\partial g}{\partial x} &= 0 \qquad (5)\\
\frac{\partial f}{\partial y} - \lambda\frac{\partial g}{\partial y} &= 0 \qquad (6)\\
\frac{\partial f}{\partial z} - \lambda\frac{\partial g}{\partial z} &= 0 \qquad (7)
\end{aligned}$$

Se resuelve el sistema (2),(5),(6) y (7) para encontrar

$$\{x, y, z, \lambda\}.$$

Tarea:

Minimiza $f(x,y) = x^2 + y^2$ sujeto a $g(x,y) = 2x + y - 2 = 0$ por el método de multiplicadores de Lagrange. Representa geométricamente este problema.



Extensión al caso general:

Encontrar el extremo de un campo escalar en n variables:

$$f = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \tag{8}$$

sujeto a las restricciones:

$$g_k(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0, \qquad k = 1, \ldots, m \tag{9}$$

– Se introduce un multiplicador por cada restricción: $\{\lambda_k\}$.

– Las condiciones necesarias para el extremo son:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} - \sum_k^m \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_i} = 0, \qquad i = 1, \ldots, n \tag{10}$$

– El sistema de ecs. (9)–(10) se resuelve para $\{x_i\}$ y $\{\lambda_k\}$.