

KAMILLA TEIXEIRA CARVALHO

RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE CONTROLE ÓTIMO
ALGÉBRICO-DIFERENCIAIS COM APLICAÇÕES EM
ENGENHARIA



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

2015

KAMILLA TEIXEIRA CARVALHO

**RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE CONTROLE ÓTIMO
ALGÉBRICO-DIFERENCIAIS COM APLICAÇÕES EM ENGENHARIA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para obtenção do título de **MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA.**

Área de concentração: Mecânica dos sólidos e Vibrações.

Orientador: Prof. Dr. Valder Steffen Jr

Coorientador: Prof. Dr. Fran Sérgio Lobato

UBERLÂNDIA – MG

2015

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

C331r
2015

Carvalho, Kamilla Teixeira, 1989

Resolução de problemas de controle ótimo algébrico-diferenciais
com aplicações em engenharia [recurso eletrônico] / Kamilla Teixeira
Carvalho. - 2015.

Orientador: Valder Steffen Junior.

Coorientador: Fran Sérgio Lobato.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Modo de acesso: Internet.

Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2019.1298>

Inclui bibliografia.

Inclui ilustrações.

1. Engenharia mecânica. 2. Mecânica dos sólidos. 3. Vibração. 4. Equações diferenciais. I. Steffen Junior, Valder, 1952, (Orient.). II. Lobato, Fran Sérgio, 1976, (Coorient.). III. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDU: 621

Angela Aparecida Vicentini Tzi Tziboy – CRB-6/947

KAMILLA TEIXEIRA CARVALHO

**RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE CONTROLE ÓTIMO
ALGÉBRICO-DIFERENCIAIS COM APLICAÇÕES EM
ENGENHARIA**

Dissertação de Mestrado defendida por Kamilla Teixeira Carvalho e aprovada em
23 de dezembro de 2015 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Valder Steffen Junior - Orientador

Prof. Dr. Fran Sérgio Lobato – Co-orientador

Prof. Dr. Cleudimar Amaral de Araújo (UFU)

Prof. Dr. Aldemir Aparecido Cavalini Junior (UFU)

Profa.Dra.Adriene Artiga Pfeifer (UFTM)

Dedico este trabalho aos meus pais, Alcides Teixeira Rocha e Jussara Gomes de Carvalho que não mediram esforços para que eu pudesse realizar esta conquista, apoiando-me e fazendo-me acreditar que era capaz.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por Sua infinita misericórdia para comigo, por me conceder forças e capacitar todos os dias. A Ele todo o reconhecimento.

Aos meus pais pelo amor, dedicação e esforços. E aos meus irmãos Ludmilla, Edmilla e Alaor, por me emprestarem inteligência, perseverança e simplicidade, elementos indispensáveis para a realização deste.

A todos os meus amigos, pelo incentivo, pela força e pelas orações, sem vocês certamente eu não teria chegado até aqui. Aos amigos e colegas da cidade de Uberlândia que me acolheram, e me impulsionaram todos os dias. Parafraseando Isaac Newton “se cheguei mais longe, foi porque estive apoiado sobre ombros de gigantes”. A todos os meus amigos, meus sinceros agradecimentos.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Valder Steffen Jr, que acreditou em meu potencial, compreendeu minhas limitações e estimulou o meu melhor. Ao meu coorientador, Prof. Dr. Fran Sérgio Lobato, que dispôs do seu tempo, e dedicou-se para auxiliar-me. A vocês compartilho da minha alegria sendo eternamente grata.

À Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, ao Programa de Pós-Graduação da FEMEC/UFU, ao Laboratório de Mecânica de Estruturas – Prof. José Eduardo Tannús Reis, ao Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Estruturas Inteligentes em Engenharia – INCT-EIE pela oportunidade de realizar este trabalho.

À CAPES pela bolsa de estudos concedida para realização desta dissertação de mestrado.

CARVALHO, K. T. **Resolução de Problemas de Controle Ótimo Algébrico-Diferenciais com Aplicações em Engenharia.** 2015. 120 f. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia/MG, Brasil.

Resumo

O Problema de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial (PCOAD), também conhecido como Problema de Otimização Dinâmica, consiste na determinação do perfil do vetor de variáveis de controle que maximizam (ou minimizam) uma função objetivo (índice de desempenho), sujeita a restrições algébrico-diferenciais. Matematicamente, a complexidade encontrada durante a resolução de uma restrição algébrico-diferencial pode ser mensurada pela definição do índice diferencial. Este representa o número de diferenciações com relação ao tempo que devem ser realizadas de forma a transformar um sistema algébrico-diferencial num sistema puramente diferencial. Em se tratando do PCOAD, a principal dificuldade associada é a flutuação do índice diferencial devido a presença de restrições de desigualdade ou pelo fato do vetor de variáveis de controle ser linear. Tradicionalmente, a resolução numérica do PCOAD têm sido obtida a partir da aplicação de técnicas clássicas de otimização (métodos diretos, indiretos, ou híbridos). Nos últimos anos, devido ao sucesso obtido por abordagens que não fazem uso de informações sobre as derivadas da função objetivo e de suas restrições em aplicações com diferentes graus de complexidade, os denominados métodos bio-inspirados têm sido empregados para a resolução do PCOAD. Dentre estes pode-se citar o Algoritmo de Ciclo de Água (ACA). Esta abordagem evolutiva, proposta por Eskandar et al. (2012), baseia-se na observação do processo de ciclo de água encontrado na natureza para a geração de candidatos em potencial para a solução do problema de otimização. Diante disso, a presente contribuição tem por objetivo aplicar o ACA para a resolução de PCOADs. Neste contexto, a metodologia proposta foi aplicada em problemas matemáticos e no projeto de sistemas de engenharia, onde o vetor de variáveis de controle foi discretizado em elementos de controle. Também foi realizada uma análise de sensibilidade dos principais parâmetros do ACA. Com os resultados obtidos foi possível constatar que o ACA demonstrou ser equivalente, em termos do valor final da função objetivo e do número de avaliações da função objetivo requeridas, quando confrontado com outras estratégias evolutivas.

Palavras Chave: Problema de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial, Algoritmo de Ciclo de Água, Otimização Dinâmica, Índice Diferencial.

CARVALHO, K. T. Resolution of Algebraic-Differential Optimal Control Problems with Applications in Engineering. 2015. 120 f. MSc Dissertation, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia/MG, Brasil.

Abstract

The Algebraic-Differential Optimal Control Problems (ADOCP), also known as Dynamic Optimization Problems, consist in the determination of control variable profiles that maximize (or minimize) an objective function (measure of performance), subject to algebraic-differential constraints. Mathematically, the complexity observed during the resolution of an algebraic-differential constraint is can be measured by using the concept of differential index. It is defined as the minimum number of differentiations with respect to time that the algebraic system of equations has to undergo to convert the original system into a set of ordinary differential equations. In this context, the main difficulty associated with the solution of the ADOCP is the fluctuation of the differential index due to the presence of inequality constraints or the linear characteristic of the control variable vector. Traditionally, the numerical solution of the ADOCP has been obtained by using classic optimization techniques (direct methods, indirect techniques, or hybrid approaches). In the last years, due to the success found by approaches that do not make use of information about the gradient of the objective function and constraints in various applications, so called bio-inspired methods have become popular to solve the ADOCP. Among these, we can cite the Water Cycle Algorithm (WCA). This evolutionary approach, proposed by Eskandar et al. (2012), is based on the observation of water cycle process and how rivers and streams flow to the sea in the real world. In this contribution, the WCA is used to solve ADOCP, with applications to mathematical problems and engineering system design, for which the control variable vector was discretized in control elements. A sensitivity analysis of some parameters of the WCA is performed. The results obtained by using the WCA were considered equivalent to those obtained by other evolutionary competing strategies in relation to the final value for the objective function and the number of objective function evaluations required.

Keywords: *Algebraic-Differential Optimal Control Problem, Water Cycle Water, Dynamic Optimization, Differential Index.*

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Fluxograma adaptado referente à abordagem sequencial.....	42
Figura 2.2 - Fluxograma adaptado referente à abordagem simultânea.....	43
Figura 3.1 - Etapas do ciclo de água na natureza.	48
Figura 3.2 - Influência do número máximo de gerações no valor da função objetivo para a função matemática 1.....	53
Figura 3.3 - Influência do número de gotas de chuva no valor da função objetivo para a função matemática 1.....	54
Figura 3.4 - Influência do número de rios e mar no valor da função objetivo para a função matemática 1.....	55
Figura 3.5 - Influência do fator de evaporação no valor da função objetivo para a função matemática 1.....	56
Figura 3.6 - Influência do número máximo de gerações no valor da função objetivo para a função matemática 2.....	57
Figura 3.7 - Influência do número de gotas de chuva no valor da função objetivo para a função matemática 2.....	58
Figura 3.8 - Influência do número de rios e mar no valor da função objetivo para a função matemática 2.....	58
Figura 3.9 - Influência do fator de evaporação no valor da função objetivo para a função matemática 2.....	59
Figura 3.10 - Influência do número máximo de gerações no valor da função objetivo para a função matemática 3.....	60
Figura 3.11 - Influência do número de gotas de chuva no valor da função objetivo para a função matemática 3.....	61
Figura 3.12 - Influência do número máximo de rios e mar no valor da função objetivo para a função matemática 3.....	61

Figura 3.13 - Influência do fator de evaporação no valor da função objetivo para a função matemática 3.....	62
Figura 3.14 - Tempo de processamento requerido por cada estratégia evolutiva em função da semente considerada.....	64
Figura 4.1 - PCO definido por fases.....	66
Figura 4.2 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema do Reator Batelada.....	70
Figura 4.3 – Perfil das variáveis de estado no problema do Reator Batelada.	71
Figura 4.4 - Perfil da variável de controle pelo tempo no problema do Reator Batelada.	71
Figura 4.5 - Problema de Isaac Newton.	72
Figura 4.6 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Isaac Newton.	74
Figura 4.7 - Perfil das variáveis de estado para o problema de Isaac Newton.	74
Figura 4.8 - Perfil da variável de controle para o problema de Isaac Newton.	75
Figura 4.9 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema do Veículo...	76
Figura 4.10 - Perfil das variáveis de estado (posição e velocidade) do problema do Veículo.77	77
Figura 4.11 - Perfil da variável de controle do problema do Veículo.	77
Figura 4.12 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Mistura de Catalisadores.....	80
Figura 4.13 - Perfil das variáveis de estado para o problema da Mistura de Catalisadores. ...	81
Figura 4.14 - Perfil da variável de controle do problema de Mistura de Catalisadores.	81
Figura 4.15 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema do Pêndulo Linear.....	83
Figura 4.16 - Perfil das variáveis de estado para o problema do Pêndulo Linear.	84
Figura 4.17 - Perfil da variável de controle do problema do Pêndulo Linear.	84
Figura 4.18 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Jacobson - caso 1.	87
Figura 4.19 - Perfil das variáveis de estado para o problema de Jacobson - Caso 1.	87
Figura 4.20 - Perfil da variável de controle para o problema de Jacobson - Caso 1.	88
Figura 4.21 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Jacobson - caso 2	90
Figura 4.22 - Perfil das variáveis de estado para o problema de Jacobson - Caso 2.	91
Figura 4.23 - Perfil das variáveis de controle para o problema de Jacobson - Caso 2.	91

Figura 4.24 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema do Crescimento de Tumores.....	94
Figura 4.25 - Perfil das variáveis de estado do problema do Crescimento de Tumores.....	95
Figura 4.26 - Perfil da variável de controle do problema do Crescimento de Tumores.....	95
Figura 4.27 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Goddard.	98
Figura 4.28 - Perfil da variável de controle do problema de Goddard.	99
Figura 4.29 - Perfil da variável de estado (altitude) do problema de Goddard.	99
Figura 4.30 - Perfil da variável de estado (velocidade) do problema de Goddard.	100
Figura 4.31 - Perfil da variável de estado (massa) do problema de Goddard.....	100
Figura 4.32 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema do Biorreator.	104
Figura 4.33 - Perfil do controle u_1 em horas do problema do Biorreator.....	104
Figura 4.34 - Perfil do controle u_1 em horas do problema do Biorreator.....	105
Figura 4.35 - Perfil da variável x_1 de Estado do problema do Biorreator.....	105
Figura 4.36 - Perfil da variável x_2 de Estado do problema do Biorreator.....	106
Figura 4.37 - Perfil da variável x_3 de Estado do problema do Biorreator.....	106
Figura 4.38 - Perfil da variável x_4 de Estado do problema do Biorreator.....	107
Figura 4.39 - Perfil da variável x_5 de Estado do problema do Biorreator.....	107
Figura 4.40 - Perfil da variável x_6 de Estado do problema do Biorreator.....	108
Figura 4.41 - Perfil da variável x_7 de Estado do problema do Biorreator.....	108

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 - Influência do parâmetro N_{max} no valor da função objetivo para o problema do Reator Batelada.....	68
Tabela 4.2 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema Reator Batelada.	69
Tabela 4.3 - Comparação dos dados obtidos com várias técnicas de controle ótimo.....	70
Tabela 4.4 - Dados obtidos para o problema de Isaac Newton.	73
Tabela 4.5 - Comparação dos dados obtidos com várias técnicas de controle ótimo.....	73
Tabela 4.6 - Dados obtidos para o problema do Veículo.	76
Tabela 4.7 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema da Mistura de Catalisadores.....	79
Tabela 4.8 - Comparação entre os resultados obtidos e reportados na literatura para o problema da Mistura de Catalisadores.....	80
Tabela 4.9 - Eventos e variáveis de controle para o problema da Mistura de Catalisadores. .	82
Tabela 4.10 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema do Pêndulo Linear.....	83
Tabela 4.11 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema de Jacobson - Caso 1.	85
Tabela 4.12 - Comparação dos dados obtidos com várias técnicas de controle ótimo.....	86
Tabela 4.13 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema de Jacobson - Caso 2.	89
Tabela 4.14 - Comparação entre os valores obtidos pelo ACA em relação aos reportados pela literatura para o problema de Jacobson - Caso 2.	90
Tabela 4.15 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema do Crescimento de Tumores.....	93
Tabela 4.16 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema de Goddard.	97

Tabela 4.17 - Comparaço entre os resultados obtidos pelo ACA e por outras estrat�gias evolutivas para o problema de Goddard.....	98
Tabela 4.18 - Comparaço entre os resultados obtidos pelo ACA e por outras estrat�gias evolutivas para o problema de Goddard com rela�o ao tempo.....	98
Tabela 4.19 - Influ�ncia do n�mero de elementos considerados no valor da fun�o objetivo encontrada pelo ACA para o problema do Biorreator.....	102
Tabela 4.20 - Comparaço entre os resultados obtidos pelo ACA e por outras estrat�gias para o problema do Biorreator.....	103

LISTA DE ABREVIATURAS

ACA - Algoritmo de Ciclo de Água

AED - Algoritmo de Evolução Diferencial

AG - Algoritmos Genéticos

BDF - *Backward Differential Formula*

COLDAE - *Collocation Differential Algebraic Equation Method*

DIRCOL - *Direct Collocation Method*

EAD - Equação Algébrico-Diferencial

EDO - Equação Diferencial Ordinária

ID - Índice Diferencial

IDE - Algoritmo de Evolução Diferencial Melhorado (*Improved Differential Evolution Algorithm*)

PCO - Problema de Controle Ótimo

PCOAD - Problema de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial

PDI - Programação Dinâmica Iterativa

PNL - Programação Não Linear

TPBV - *Two-Point Boundary Value*

LISTA DE SÍMBOLOS

Capítulo II

Letras Latinas

$a(t), b(t)$	Função contínua e diferenciável
\mathbf{C}, \mathbf{S}	Vetor de restrição
f, F, J	Função objetivo
\bar{J}	Função adjunta aumentada
g, x, z	Variáveis de estado
H	Função Hamiltoniano
i	Contador
m	m -ésimo componente
q	q -ésimo
t	Tempo
t_0	Tempo inicial
t_f	Tempo final
\mathbf{u}	Vetor de variáveis de controle
$\mathbf{x}_{1_0}, \mathbf{x}_{2_0}, \dot{\mathbf{x}}_{1_0}, \dot{\mathbf{x}}_{2_0}$	Vetor de condições iniciais
$J(\cdot), L(\cdot), \Psi(\cdot), f(\cdot), \varphi(\cdot)$	Funções derivadas
U_{ad}	Conjunto de controles admissíveis ou viáveis
<i>Letras Gregas</i>	
$\Delta \bar{J}$	Incremento do funcional
λ	Variáveis adjuntas ou co-estado
μ	Função escalar
ν	Vetor de multiplicadores de Lagrange
π	Vetor de multiplicadores de Lagrange
φ	Vetor de condições iniciais
Ψ	Componente da função objetivo calculada no tempo final

Capítulo III

Letras Latinas

C	Valor entre 1 e 2
$\text{Cos } x$	Função Cosseno
d	Distância entre o riacho e o rio (ou rio e mar)
d_{max}	Fator de evaporação
f	Função objetivo
i	Contador
LB	Limite inferior das variáveis de projeto
N	Número total de gotas de chuva
N_{max}	Número máximo de gerações
N_{sr}	Número de rios e mares
N_{var}	Número de variáveis de projeto
NS_n	Número de córregos com fluxo
r	coeficiente
$Rand$	Número aleatório entre 0 e 1
UB	Limite superior das variáveis de projeto
X	Distribuição de números aleatórios
x_i	Variáveis de estado

Letras Gregas

μ	Coeficiente que mostra a gama de procura da região perto do mar
-------	---

Capítulo IV

Letras Latinas

a	Aceleração
a_i	Taxa de morte celular

b_i	Capacidade de sobrevivência
c	Impulso específico do combustível de foguete
c_i	Taxas de competição
D	Arrasto aerodinâmico
d_i	Taxa de mortalidade
d_{max}	Fator de evaporação
g	Força gravitacional por unidade de massa
h	Horas
k_1, k_2	Constante de reação
J	Função Objetivo
i	Contador
$I(t), N(t), T(t), x_i$	Variáveis de estado
N	Número total de gotas de chuva
N_{max}	Número máximo de gerações
N_{sr}	Número de rios e mares
Q	Fator custo do indutor no valor da produção de proteína
r	Raio do cone
r_i	Taxas de crescimento associado a cada espécie de célula
s	Taxa de fonte de entrada de células imunes
t, t_f	Tempo total
u	Variável de controle
\dot{v}	Aceleração
$v(t_0)$	Velocidade inicial
$v(t_f)$	Velocidade final
x	Posição, Distância axial
x_1	Concentração do reagente A
x_1	Velocidade vertical
x_1	Volume do reator
x_2	Concentração do reagente B
x_2	Distância radial a partir do centro da Terra
x_2	Concentração celular
x_3	Massa do foguete
x_3	Concentração de nutrientes
x_4	Concentração de proteína heteróloga

x_5	Concentração do indutor
x_6	Fator de choque indutor na taxa de crescimento
x_7	Fator de recuperação de indutor no crescimento celular
$[x_1, x_2, x_3]$	Vetor de condição inicial

Letras Gregas

α	Declividade inversa da curva de resposta imune
ρ	Taxa de resposta imune

SUMÁRIO

CAPÍTULO I - Introdução	19
CAPÍTULO II - Problemas de Controle Ótimo Algébrico-Diferenciais (PCOADs).....	23
2.1. Conceitos Gerais.....	23
2.1.1. <i>Equação algébrico diferencial EAD</i>	23
2.1.2. <i>Índice diferencial</i>	24
2.1.3. <i>Caracterização de um sistema de EADs</i>	24
2.1.4. <i>Consistência de inicialização</i>	25
2.1.5. <i>Métodos de redução do índice diferencial</i>	26
2.1.6. <i>Condições necessárias de otimalidade</i>	27
2.2. Condições Necessárias para Aplicação de PCOADs.....	28
2.2.1. <i>Condições necessárias para aplicação de PCOADs</i>	28
2.2.2. <i>Condições de contorno associadas à PCOADs</i>	31
2.2.3. <i>Função identificadora de fase – FIF</i>	40
2.3. Resolução Numérica de PCOADs	41
2.3.1. <i>Métodos diretos</i>	41
2.3.2. <i>Métodos indiretos</i>	44
2.3.3. <i>Métodos mistos ou híbridos</i>	44
CAPÍTULO III - Métodos Heurísticos	45
3.1. Introdução.....	45

3.2. Algoritmo do Ciclo da Água.....	47
3.2.1. Passos para o algoritmo do ciclo da água.....	51
3.3. Análise de Sensibilidade.....	52
3.4. Comparação entre o Algoritmo do Ciclo da Água, o Algoritmo de Evolução Diferencial e os Algoritmos Genéticos.....	63
CAPÍTULO IV - Resolução de PCOADs via Aplicação do ACA	65
4.1. Metodologia	65
4.2. Estudo de Casos	67
4.2.1. <i>Reator Batelada</i>	67
4.2.2. <i>Isaac Newton</i>	71
4.2.3. <i>Problema do Veículo</i>	75
4.2.4. <i>Mistura de Catalisador</i>	78
4.2.5. <i>Pendulo Linear</i>	82
4.2.6. <i>Jacobson – Caso 1</i>	85
4.2.7. <i>Jacobson – Caso 2</i>	88
4.2.8. <i>Modelagem Matemática do Crescimento de Tumores</i>	91
4.2.9. <i>Problema de Goddard</i>	96
4.2.10. <i>Biorreator</i>	100
CAPÍTULO V - Conclusões e Perspectivas de Trabalhos Futuros.....	110
CAPÍTULO VI - Referências Bibliográficas.....	113

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Nos dias atuais, o projeto de sistemas de engenharia representa uma tarefa desafiadora por demandar a resolução de um problema de otimização formulado com restrições algébrico-diferenciais. Matematicamente, tais modelos, cuja representação se dá geralmente através de sistemas de grande dimensão, representam os balanços de massa, energia e quantidade de movimento, além de restrições geométricas, ambientais, e físicas, dentre outras. Além disso, há que se ressaltar que a modelagem desses sistemas envolve prévio conhecimento de áreas distintas (problema multidisciplinar), abordando diferentes conceitos que devem ser considerados durante sua formulação matemática.

No contexto de otimização, dentre os vários tipos de problemas que podem ser formulados, o Problema de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial (PCOAD) caracteriza-se como um dos mais desafiadores em engenharia e áreas afins. Isto se deve ao fato deste problema apresentar como restrição um sistema de equações algébrico-diferenciais (EADs), o que do ponto de vista matemático pode dificultar a obtenção da solução ótima. No PCOAD deseja-se determinar o perfil do vetor de variáveis de controle que minimizam um determinado índice de desempenho, sujeito a restrições algébrico-diferenciais (restrições algébricas de igualdade, desigualdade e de tempo final, além de restrições diferenciais).

O estudo deste tipo de problema inicializou-se no século XVII quando Johann Bernoulli propôs um desafio matemático para a sociedade científica. Este consistia em determinar a forma de um fio em que um corpo inicialmente em repouso se movimentasse para um ponto específico do domínio sob ação da gravidade e no menor tempo possível (Lobato, 2004). Esse problema é conhecido como Problema da *Braquistócrona* (*brachystos* – mínimo, *chronos* - tempo) (Leitão, 2001).

Este desafio foi solucionado por Isaac Newton em 1697 que, segundo consta, antes de sair para sua rotina de trabalho, desenvolveu o Cálculo Variacional para resolvê-lo (Feehery, 1998). Com o desenvolvimento do Cálculo Variacional foi possível a dedução das condições necessárias e suficientes para a solução de problemas de controle ótimo.

Tradicionalmente, os PCOADs têm sido resolvidos por três abordagens distintas, a saber, a direta, a indireta, e a híbrida (direta+indireta). Na primeira estratégia, o vetor de variáveis de controle é discretizado e o sistema resultante é solucionado através de um método clássico como, por exemplo, o *Sequential Quadratic Programming* (SPQ). Já na abordagem indireta, o problema de controle ótimo original é transformado em um problema de valor no contorno algébrico-diferencial via aplicação da Teoria de Controle Ótimo (Bryson e Ho, 1969). Uma das principais dificuldades observada nesta metodologia é a necessidade do monitoramento da Função Identificadora de Fases (Lobato, 2004), que revela o atendimento das restrições de desigualdade. Em ambas as abordagens, a convergência do problema é altamente dependente da estimativa inicial e do conhecimento prévio do número de fases que caracterizam a flutuação do índice diferencial. Já a abordagem híbrida consiste na resolução do PCOAD via aplicação da abordagem direta e, em seguida, a aplicação da abordagem indireta para fins de refinamento (Lobato, 2004).

Em qualquer uma das abordagens apresentadas, resolver um sistema de EADs é uma tarefa complexa por este ser, frequentemente, um problema com índice diferencial maior que um. O índice diferencial pode ser definido como o número mínimo de vezes que o sistema de EADs ou parte dele deve ser diferenciado, com relação ao tempo, para transformar o sistema de EADs em um sistema puramente diferencial (Bryson e Ho, 1975). Seguindo Unger et al. (1995), o índice diferencial representa uma medida da dificuldade de solução de EADs decorrente de mau condicionamento numérico, instabilidade, singularidade e dificuldade de convergência. Além disso, este representa uma quantidade local, isto é, definida num ponto particular da trajetória de estados, podendo mudar em pontos discretos ao longo desta trajetória (Bryson e Ho, 1975).

Conforme destacado anteriormente, os PCOADs têm sido resolvidos através da aplicação de técnicas de otimização fundamentadas no uso do gradiente da função objetivo e das restrições. Nas últimas décadas, devido ao sucesso da aplicação de métodos computacionais inspiradas na natureza ou em estratégias puramente estruturais, estes têm sido utilizados para a resolução de PCOADs. Dentre estas aplicações pode-se citar a determinação de um protocolo ótimo para a administração de drogas empregado no tratamento de tumores usando o Algoritmo

de Evolução Diferencial (Machado et al., 2010); resolução de PCOADs através de um Algoritmo de Evolução Diferencial Modificado (Lobato et al., 2011); resolução de PCOADs chaveados utilizando o Algoritmo de Busca Gravitacional (Pfeifer e Lobato, 2013); determinação da estratégia ótima de alimentação de substrato no processo de fermentação alcoólica em batelada alimentada via aplicação do Algoritmo de Evolução Diferencial (Nascentes e Murata, 2014), dentre outras aplicações.

Neste cenário, dentre as inúmeras metodologias evolutivas que têm sido adotadas para a resolução de problemas de engenharia e áreas afins, destaca-se o Algoritmo de Ciclo de Água (ACA). Esta técnica evolutiva, proposta recentemente por Eskandar et al. (2012), fundamenta-se no desenvolvimento de uma estratégia de otimização que se baseia no processo do ciclo de água que acontece na natureza. Em termos gerais, as etapas básicas no processo de ciclo de água na natureza podem ser enumeradas de acordo com o Centro de Pesquisa Geológica dos Estados Unidos (*United States Geological Survey*): *i*) o ciclo da água inicia-se com a evaporação das águas dos oceanos, lagos e rios (estado líquido), devido a ação do calor do sol e pela ação dos ventos, neste caso, com a mudança de estado físico; *ii*) em seguida o vapor de água sobe até a atmosfera, onde transforma-se em nuvens; *iii*) quando as temperaturas mais baixas atingem essas nuvens o vapor d' água nelas contido condensa-se, transformando-se em gotículas de água que voltam à superfície em forma de chuva; *iv*) em seguida, parte da água da chuva que não é utilizada pelas plantas vai para os rios, lagos, riachos, bem como formam os lençóis de água, já que a água da chuva também escorre entre superfícies porosas.

Fundamentado neste processo, Eskandar et al. (2012) desenvolveram uma estratégia de otimização em que a localização das gotas de chuva que regressam para o solo representam novos candidatos à solução do problema de otimização. Na literatura especializada podem ser encontradas algumas aplicações do ACA, dentre as quais pode-se citar: determinação de uma estratégia de operação para reservatórios de Karon-4 (Haddad et al., 2014); otimização geométrica (Sadollah et al., 2014); otimização multi-objetivo de funções matemáticas (Ali Sadollah et al., 2014); otimização de funções matemáticas com ou sem restrições usando um ACA melhorado (Ali Sadollah et al., 2015); otimização de um sistema empregado para a gestão de energia (Sarvi e Avanaki, 2015).

Cabe ressaltar que esta dissertação é continuidade de trabalhos realizados na Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia na área de otimização com aplicações em sistemas mecânicos. Dentre estes, pode-se citar o estudo de algoritmos genéticos para o dimensionamento de estruturas tubulares metálicas espaciais com barras cruzadas para

coberturas (Souza Junior, 2005); um estudo comparativo de técnicas de otimização multiobjetivos (Oliveira, 2005); aplicações do Algoritmo de Evolução Diferencial para o projeto de sistemas de engenharia (Oliveira, 2006); desenvolvimento de uma estrutura veicular tipo *spaceframe* usando o método dos elementos finitos associado a métodos de otimização heurísticos (Oliveira, 2007); otimização multi-objetivo para o projeto de sistemas de engenharia usando o Algoritmo de Evolução Diferencial (Lobato, 2008), dentre outras aplicações.

Diante o que foi apresentado, o objetivo geral desta dissertação é definir procedimentos gerais que facilitem a solução de Problemas de Controle Ótimo Algébrico-Diferenciais usando o Algoritmo do Ciclo de Água. Essa dissertação possui a estrutura conforme segue. O Capítulo 2 apresenta conceitos gerais sobre EADs e sobre o PCOAD, a determinação das condições necessárias para a otimalidade, bem como os métodos numéricos empregados na resolução de PCOADs. Já o Capítulo 3 é destinado a apresentação do Algoritmo do Ciclo da Água, acompanhado de uma análise de sensibilidade de parâmetros, bem como a comparação desta metodologia com os Algoritmos Genéticos e o Algoritmo de Evolução Diferencial. No Capítulo 4 o ACA é utilizado para resolver dez PCOADs com diferentes graus de complexidade. Finalmente, as conclusões e sugestões para trabalhos futuros são apresentadas no Capítulo 5.

CAPÍTULO II

PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO ALGÉBRICO-DIFERENCIAL (PCOAD)

2.1. Conceitos gerais

Este capítulo apresenta conceitos e definições importantes para a análise e caracterização de Equações Algébrico-Diferenciais (EADs), bem como com a formulação de PCOADs.

2.1.1. Equação Algébrico-Diferencial (EAD)

O sistema composto por equações algébricas vinculadas a equações diferenciais é conhecido como sendo um sistema de EADs. Matematicamente, tem-se:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), t) = 0 \quad (2.1.1)$$

onde $t \in \mathbb{R}$ é a variável independente, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ é o vetor formado pelas variáveis algébricas e diferenciais e $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^n$. Quando a matriz $\mathbf{F}_{\dot{\mathbf{x}}}$ de derivadas parciais de \mathbf{F} com relação à $\dot{\mathbf{x}}$ é singular, tem-se um sistema de equações algébrico-diferenciais (EAD) (Lourenço, 2002).

As Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) e as Equações Diferenciais Parciais (EDPs) também são exemplos de uma das classes de EADs. O que diferencia uma EAD de uma EDO ou de uma EDP é o fato de existem restrições algébricas na variável de estado (Quinto, 2010).

Alguns sistemas de EADs podem ser resolvidos numericamente por técnicas aplicadas a sistemas de EDOs. A resolução de um sistema de EADs via eliminação das equações

algebricas é a forma usual com que uma EAD é tratada. Neste caso, o sistema original é transformado em um equivalente puramente diferencial, sendo que este último pode ser resolvido por métodos utilizados em sistemas de EDOs (Lourenço, 2002).

Em termos práticos, a transformação de um sistema de EADs em um sistema puramente diferencial é necessário devido à dificuldade de se trabalhar com códigos numéricos que sejam capazes de resolver problemas com índice diferencial maior do que um (Lourenço, 2002).

2.1.2. *Índice diferencial*

O índice diferencial pode ser definido como o número mínimo de vezes que um sistema de EADs (ou parte dele) deve ser diferenciado em relação ao tempo de modo a transformá-lo em um sistema de EDOs (Pantelides, 1988). Matematicamente, a redução do índice diferencial pode ser realizada através da diferenciação de algumas de suas equações antes da integração do sistema. Entretanto, este processo pode ocasionar o surgimento de novas variáveis ou a perda de restrições existentes no sistema original e, caso este processo seja manual, torna-se trabalhoso, em especial para sistemas de ordem elevada (Lourenço e Secchi, 2008).

2.1.3. *Caracterização de um sistema de EADs*

Um sistema de EADs implícito da forma da Equação 2.1.1, onde \mathbf{F} e \mathbf{x} possuem a mesma dimensão pode ser classificado de acordo com as propriedades estruturais de suas matrizes Jacobianas $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}}$ e $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{x}}}$. Uma propriedade de uma matriz é denominada estrutural se todos os seus elementos não nulos podem ser substituídos por valores aleatórios e, mesmo assim, a propriedade continuar valendo (Lourenço, 2002).

Existem vários tipos de sistemas de EADs, conforme descrito na literatura. Segundo Lourenço (2002), estes podem ser implícitos, linearmente implícitos, particionados, semi-implícitos, envolver o sistema de Hessenberg, reduzidos e correspondentes. Não é objeto deste trabalho a descrição desses sistemas; contudo, para uma boa compreensão do capítulo é de relevância a definição dos dois últimos sistemas mencionados acima. Lourenço (2002) define:

- *Sistema reduzido*: Sistemas de EADs de índice 1 (um) ou zero resultante do processo de redução.
- *Sistema estendido correspondente*: é o sistema formado pelas equações originais e por todas as equações resultantes, após as diferenciações necessárias do sistema original, para transformá-lo em um sistema de índice 1 (um) ou zero.

2.1.4. Consistência de inicialização

Para Lourenço (2002), a etapa mais difícil da solução de um sistema de EADs é a determinação das condições iniciais, uma vez que estas devem ser consistentes e fisicamente corretas para obter resultados satisfatórios.

Para o sistema apresentado a seguir:

$$F(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \mathbf{y}, t) = 0 \quad (2.1.2)$$

deve-se definir como condições iniciais consistentes o vetor (x_0, \dot{x}_0, y_0) em t_0 , e não o vetor (x_0, y_0) . É de fundamental importância definir condições iniciais consistentes para que a integração deste sistema possa ser realizada. Se o sistema de EADs não satisfaz nem a condição inicial, ele não irá satisfazer nenhum outro ponto que se queira.

Uma condição necessária, mas não suficiente para que estas condições iniciais sejam consistentes é que elas satisfaçam ao sistema abaixo:

$$F(\mathbf{x}_0, \dot{\mathbf{x}}_0, \mathbf{y}_0, t_0) = 0 \quad (2.1.3)$$

A diferenciação do sistema original para redução a um sistema de EDOs gera novas equações algébricas, denominadas *equações ocultas*, que impõem novas restrições nas condições iniciais que foram especificadas independentemente. Portanto, a inicialização consistente requer a identificação destas novas restrições de modo que os valores de x_0 e suas derivadas no tempo inicial satisfaçam o conjunto formado pelo sistema original e pelas equações escondidas. Ou seja, não basta que o Sistema Original seja satisfeito, pois há a necessidade de que as equações criadas pela diferenciação e manipulações algébricas efetuadas no Sistema Original de modo a transformá-lo em um sistema de EDOs também sejam satisfeitas no tempo inicial (Lobato, 2004).

Um exemplo dessas condições é apresentado por Pantelides (1988), onde torna-se evidente a necessidade de se especificar condições iniciais $(x_{10}, x_{20}, \dot{x}_{10}, \dot{x}_{20})$ consistentes. Seja o sistema de EADs de índice 1:

$$\dot{x}_1 + \dot{x}_2 = a(t) \quad (2.1.4)$$

$$x_1 + x_2^2 = b(t) \quad (2.1.5)$$

onde $a(t)$ e $b(t)$ são funções contínuas e diferenciáveis.

Entretanto, para que exista a consistência, elas devem satisfazer também à equação resultante da diferenciação da segunda equação:

$$x_1 + 2x_2\dot{x}_2 = \dot{b}(t) \quad (2.1.6)$$

Neste caso, para se obter sucesso ao iniciar a integração, os códigos existentes para a integração numérica de sistemas de EADs precisam de condições iniciais consistentes. Caso a integração seja iniciada a partir de um valor inicial inconsistente, a diferença entre o valor inicial consistente e o valor inicial arbitrário representará uma contribuição constante ε_0 para o erro local na primeira etapa de integração. Quinto (2010) ressalta que o erro local não desaparece, mas aproxima-se do valor de ε_0 quando o tamanho do passo de integração é reduzido. Neste caso as várias estratégias de controle do erro implementadas nos códigos de integração de EAD provavelmente falharão.

Lobato (2004) explica que inicialmente os problemas de inicialização consistentes eram considerados uma consequência de formulações de índice superior e resolvidos pela redução do índice até zero. Entretanto, feitas indiscriminadamente, além de muitas vezes desnecessárias, trata-se de uma solução pouco prática em sistemas de grande dimensão, resultando num conjunto muito maior que o original.

2.1.5. *Métodos de redução do índice diferencial*

Do ponto de vista numérico, quanto menor o índice, mais simples será para resolver o sistema (Lourenço, 2002). Para índices superiores (maiores do que um) a estratégia mais conveniente é a redução do índice do sistema para 1 ou para 0.

Um inconveniente gerado pelo processo de redução do índice é o surgimento de novas variáveis, ou a perda de constantes existentes no sistema original, assim como o aumento do número de equações do sistema (Rascol et al. 1998).

Lourenço (2002) explica que o fato das equações algébricas do sistema de EADs tornarem-se equações implícitas no novo sistema de EDOs, conduz à instabilidade nos códigos numéricos.

Um dos códigos mais utilizados para a solução numérica de EADs é o DASSL (*Differential Algebraic System Solver*), desenvolvida por Petzold (1989). O código, desenvolvido em linguagem Fortran, emprega fórmulas do tipo BDF de ordem variável de 1 a 5, e se destina a sistemas implícitos de índice 1 ou sistemas semi-explicíticos de índice 2.

Pantelides (1988) propôs um algoritmo baseado na teoria dos grafos para encontrar condições iniciais consistentes de EADs utilizando a própria estrutura do sistema. Este algoritmo indica quais e quantas vezes cada uma das equações que compõem o sistema de EADS devem ser diferenciadas para obter uma condição inicial consistente, o que pode ser feito a partir de uma informação puramente estrutural. Já Unger et al. (1995) desenvolveram um algoritmo que também determina, a partir da estrutura do sistema algébrico-diferencial, o índice diferencial.

2.1.6. Condições necessárias de optimidade

Em um PCOAD, uma variável de estado $\mathbf{z} = \mathbf{z}(\mathbf{t}) \in \mathbf{R}^n$ depende do tempo e evolui de acordo com uma dada dinâmica (Leitão, 2001).

$$\mathbf{z}'(t) = f(t, \mathbf{z}(t), \mathbf{u}(t)), \quad t > t_0 \quad (2.1.7)$$

com uma condição inicial $\mathbf{z}(t_0) = \mathbf{z}_0$, onde $f: \mathbf{R} \times \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^m \rightarrow \mathbf{R}^n$ corresponde ao modelo estudado, $\mathbf{z}_0 \in \mathbf{R}^n$ é o estado inicial do sistema (variável de estado) e $\mathbf{u}: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}^m$ é um parâmetro livre que influencia a dinâmica do sistema (variável de controle do sistema). Em alguns problemas é fornecida uma condição de contorno final $\mathbf{z}(t_1) = \mathbf{z}_1$, ou ainda uma condição de contorno transversal.

Assim, deseja-se minimizar o seguinte funcional:

$$J(\mathbf{u}, \mathbf{z}) = \int_{t_0}^{t_1} L(t, \mathbf{z}(t), \mathbf{u}(t)) dt \quad (2.1.8)$$

onde $L: \mathbf{R} \times \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^m \rightarrow \mathbf{R}^n$, \mathbf{z} e \mathbf{u} estão relacionados pela dinâmica do sistema e aindaz' = $f(t, \mathbf{z}, \mathbf{u})$, $t \in (t_0, t_1)$ e $\mathbf{z}(0) = \mathbf{z}_0$, $\mathbf{z}(t_1) = \mathbf{z}_1$, $\mathbf{u} \in U_{ad}$.

O conjunto U_{ad} é denominado conjunto de controles admissíveis, ou viáveis (Leitão, 2001).

Resumidamente pode-se formular o problema de controle ótimo como sendo:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } J(\mathbf{u}, \mathbf{z}): = \int_{t_0}^{t_1} L(t, \mathbf{z}(t), \mathbf{u}(t)) dt \\ \text{sujeito a } \mathbf{u} \in U_{ad} \\ \mathbf{z}' = f(t, \mathbf{z}, \mathbf{u}), \quad t \in (t_0, t_1) \\ \mathbf{z}(0) = \mathbf{z}_0, \quad \mathbf{z}(t_1) = \mathbf{z}_1 \end{cases} \quad (2.1.9)$$

A analogia entre os problemas de controle ótimo e os problemas do cálculo variacional se torna evidente quando observamos que no caso particular $f(t, z, u) = u$ o problema acima toma a forma do problema variacional (Leitão, 2001).

2.2. Condições para aplicação de PCOADs

2.2.1 Condições necessárias para aplicação de PCOADs

O desenvolvimento que segue foi baseado nos trabalhos de Bryson e Ho (1975), Lobato (2004) e Pfeifer (2007). Matematicamente, o PCOAD pode ser expresso:

$$\min_{\mathbf{u}(t), t_f} J = \Psi(\mathbf{z}(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} L(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) dt \quad (2.2.1)$$

Este é sujeito ao sistema de EADs:

$$\mathbf{f}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.2.2)$$

com as seguintes condições iniciais:

$$\varphi(\dot{\mathbf{z}}(t_0), \mathbf{z}(t_0), \mathbf{u}(t_0), (t_0)) = 0 \quad (2.2.3)$$

onde $J(\cdot)$, $L(\cdot)$, $\Psi(\cdot) \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathbf{f}(\cdot) \rightarrow \mathbb{R}^{m_x}$, $\varphi(\cdot) \rightarrow \mathbb{R}^{m_x}$; $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{m_x}$ e $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{m_u}$. J é o índice de desempenho (função objetivo ou critério de otimização), Ψ é o componente da função objetivo calculado no tempo final (t_f) .

Nesta formulação as variáveis de estado \mathbf{z} incluem tanto variáveis de estado algébricas, quanto variáveis diferenciais. Assim, pode-se reescrever a função Ψ como:

$$\Psi(\mathbf{z}(t_f), t_f) = \Psi(\mathbf{z}(t_0), t_0) + \int_{t_0}^{t_f} \frac{d\Psi}{dt} dt \quad (2.2.4)$$

Admitindo que o tempo inicial (t_0) e a condição inicial (consistente) $\mathbf{z}(t_0)$ são conhecidas e fixas, pode-se reescrever a função objetivo como sendo:

$$J = \int_{t_0}^{t_f} \bar{L}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) dt \quad (2.2.5)$$

onde:

$$\bar{L}(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}, \mathbf{u}, t) = \frac{d\psi}{dt} + L = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^T \dot{\mathbf{z}} + L \quad (2.2.6)$$

Ao somar à Função Objetivo original as restrições através do uso das variáveis adjuntas $\lambda(t)$ obtém-se a Função Objetivo Aumentada, conforme segue:

$$\bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} [\bar{L}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) + \lambda(t)^T \mathbf{f}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t)] dt \quad (2.2.7)$$

Convenientemente, aqui define-se a função *Hamiltoniano* da seguinte forma:

$$H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) = \bar{L}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) + \lambda^T(t) \mathbf{f}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) \quad (2.2.8)$$

Agora precisa-se definir a variação em relação a este funcional, para se obter as condições necessárias para a obtenção do ótimo. Sabendo que:

$$\bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) dt \quad (2.2.9)$$

O incremento do seu funcional será:

$$\begin{aligned} \Delta \bar{J} = & \int_{t_0}^{t_f + \delta t_f} [H(\dot{\mathbf{z}} + \delta \dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z} + \delta \mathbf{z}, \mathbf{u} + \delta \mathbf{u}, \lambda + \delta \lambda) - H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t)] dt + \\ & \int_{t_0}^{t_f} H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) dt \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

Expandindo o incremento funcional acima em termos da série de Taylor em torno do ponto $(\dot{\mathbf{z}}(t), \mathbf{z}(t), \mathbf{u}(t))$ e logo após extraíndo as condições que são lineares obtém-se a variação de \bar{J} :

$$\delta \bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} \left(\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \delta \dot{\mathbf{z}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}} \delta \mathbf{z} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{u} + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right) dt + H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{u}, \lambda, t) \delta t_f \quad (2.2.11)$$

Integrando por partes o primeiro termo, obtém-se:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J} = & \int_{t_0}^{t_f} \left[\left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right) \right) \delta \mathbf{z} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{u} + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right] dt + \left(\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right)_{t=t_f} \delta \mathbf{z}(t_f) + \\ & + H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) \delta t_f \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

considerando:

$$\delta \mathbf{z}(t_f) = \delta \mathbf{z} f - \dot{\mathbf{z}} \delta t_f \quad (2.2.13)$$

E substituindo a Equação (2.2.13) na Equação (2.2.12) tem-se:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J} = & \left(\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right)_{t=t_f} \delta \mathbf{z}_f \left(H - \frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \dot{\mathbf{z}} \right)_{t=t_f} \delta t_f + \\ & + \int_{t_0}^{t_f + \delta t_f} \left[\left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right) \right) \delta \mathbf{z} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{u} + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right] dt \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

Fixando a variação \bar{J} igual a zero, obtém-se as condições de primeira ordem necessárias para o ótimo:

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right) = 0 \quad (2.2.15)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} = 0 \quad (2.2.16)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \lambda} = 0 \quad (2.2.17)$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right)_{t=t_f} + \left(H - \frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right)_{t=t_f} = 0 \quad (2.2.18)$$

As equações acima definem um sistema de EADs de valor no contorno. Estas podem ser reorganizadas e expandidas em termos que incluem Ψ na Equação (2.2.15). Tem-se então:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} \right) \right] = \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{z} \partial t} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{z}^2} \dot{\mathbf{z}} \right) + \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t \partial \mathbf{z}} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{z}^2} \dot{\mathbf{z}} \right) = 0 \quad (2.2.19)$$

Admitindo que as derivadas parciais de segunda ordem são contínuas, a ordem da diferenciação pode ser mudada e a equação igualada a zero.

Ao fazer a substituição das Equações (2.2.8) e (2.2.9) no sistema formado pelas Equações (2.2.15 - 2.2.18) obtém-se:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{z}} + \lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{z}} - \dot{\lambda}^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} - \lambda^T \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right) = 0 \quad (2.2.20)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} + \lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} = 0 \quad (2.2.21)$$

$$\mathbf{f}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.2.22)$$

$$\left(\lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \right)_{t=t_f} \delta \mathbf{z}_f + \left[\frac{\partial \Psi}{\partial t} + L + \lambda^T \mathbf{f} - \lambda^T \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \dot{\mathbf{z}} \right) \right]_{t=t_f} \delta t_f = 0 \quad (2.2.23)$$

Estas condições são uma generalização das condições necessárias para o ótimo de PCOADS e também são conhecidas como equações de Euler-Lagrange para a otimização dinâmica de EADs.

Na literatura especializada encontram-se casos particulares que envolvem problemas com tempos finais fixos ou livres e problemas com variáveis de estado especificadas no tempo final. A seguir esses casos particulares são apresentados.

2.2.2. Condições de contorno associada à PCOADS:

I. Problemas com o tempo final fixo

Se o tempo final t_f é fixo, logo tem-se que δt_f é igual a zero na Equação (2.2.23). Se a variável de estado não for especificada no tempo final, as condições no ponto final devem satisfazer a equação abaixo:

$$\left(\lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \right)_{t=t_f} \delta \mathbf{z}_f = 0 \quad (2.2.24)$$

Como $\delta \mathbf{z}_f$ é arbitrário, isso implica que $\delta \mathbf{z}_f \neq 0$, logo tem-se que:

$$\left(\lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \right)_{t=t_f} = 0 \quad (2.2.25)$$

II. Problemas com o tempo final livre

Como o t_f neste caso é livre, a suposição de que $\delta t_f = 0$ não pode ser feita. Assim, além das condições dadas pelas Equações (2.2.20 - 2.2.22) para os casos em que se tem as variáveis de estado fixas no tempo ou variáveis de estado livre, o sistema em questão deve atender a seguinte condição:

$$\left(\lambda^T \frac{\partial \Psi}{\partial z} + L + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial z} \dot{z} \right)_{t=t_f} = 0 \quad (2.2.26)$$

III. Algumas variáveis de estado especificadas no tempo final fixo

Seja o problema de otimização definido pelas Equações (2.2.1 - 2.2.3), onde algumas variáveis de estado são especificadas em $t = t_f$. O i -ésimo componente do vetor de estados, z_i , é definido em $t = t_f$, sendo que a variação $\delta z_i(t_f)$ na Equação (2.2.23) não pode ser nula. Assim, faz-se necessário que a Equação (2.2.24) seja satisfeita. A Equação (2.2.21), $\partial H / \partial u = 0$ precisa de outra condição para o problema com restrição final. Neste caso, $\delta u(t)$ é sujeito às seguintes restrições:

$$\delta z_i(t_f) = 0 \quad i = 1, \dots, q \quad (2.2.27)$$

Um conjunto admissível $\delta \mathbf{u}(t)$ pode ser definido como os valores $\delta u(t)$ que satisfazem todas as restrições do problema. Uma vez especificado $z_i(t_f)$ para $i = 1, \dots, q$, é consistente considerar que:

$$\varphi = \varphi(z_{q+1}, \dots, z_n)_{t=t_f} \quad (2.2.28)$$

As Equações (2.2.20 - 2.2.23) não sofrem alterações para este caso. A condição de contorno em $t=t_f$ passa ser expressa por:

$$\lambda^T(t_f) = \begin{cases} 0 & j = 1, \dots, q \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial z_j} \right)_{t=t_f} & j = q + 1, \dots, n \end{cases} \quad (2.2.29)$$

IV. Sistemas com funções de variáveis de estados especificadas no tempo final fixo

Dado o problema de otimização definido pelas equações Equações (2.2.1 – 2.2.3) sujeito às restrições dadas pela equação abaixo, de dimensão q , funções de estado com valor definido no tempo final.

$$\varphi(z(t_f), t_f) = 0 \quad (2.2.30)$$

A Equação (2.2.30) pode ser adicionada à função objetivo através do uso de multiplicadores de *Lagrange* v , com dimensão q .

$$J = \psi(z(t_f), t_f) + v^T \varphi(z(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} L(z, u, t) dt \quad (2.2.31)$$

onde:

$$\Psi = \psi(z(t_f), t_f) + v^T \varphi(z(t_f), t_f) \quad (2.2.32)$$

O conjunto de parâmetros v deve ser escolhido a fim de satisfazer a Equação (2.2.30). Logo as condições necessárias são dadas pelas Equações (2.2.20 – 2.2.23) e por:

$$\lambda^T(t_f) = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} + v^T \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)_{t=t_f} \quad (2.2.33)$$

O vetor $u(t)$ é determinado pela equação Equação (2.2.21), e as Equações (2.2.20 – 2.2.25) formam um sistema de EADs de valor de contorno com q parâmetros v para serem determinados na Equação (2.2.33) tal que a Equação (2.2.30) seja satisfeita.

V. Problemas com restrição de trajetória

Os problemas de otimização com restrição de trajetória podem se aplicar a pontos intermediários ou sobre toda a trajetória. Nesta seção, considera-se alguns desses casos.

i. Restrições de Igualdade na Variável de Controle

O problema é definido da seguinte forma:

$$\min_{u(t), t_f} J = \Psi(\mathbf{z}(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} L(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) dt \quad (2.2.34)$$

$$\varphi(\mathbf{z}(t_f), t_f) = 0 \quad (2.2.35)$$

$$f(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.2.36)$$

$$C(\mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.2.37)$$

onde $C(\mathbf{u}, t)$ é o vetor de restrições de igualdade na variável de controle. Neste caso $\mathbf{u}(t)$ é um vetor de variáveis de controle de dimensão $m \geq 2$ e C é uma função escalar.

A Função *Hamiltoniano* (Equação (2.2.8)) neste caso será definida como:

$$H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) = \bar{L}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) + \lambda^T(t) f(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) + \mu C \quad (2.2.38)$$

As condições necessárias expressas pelas Equação (2.2.20), Equação (2.2.22) e Equação (2.2.23) permanecem inalteradas, ao passo que a Equação (2.2.21) se torna da seguinte forma:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}} + \mu \frac{\partial C}{\partial \mathbf{u}} = 0 \quad (2.2.39)$$

O sistema formado pelas condições necessárias e pela Equação (2.2.37), representam as $m + 1$ condições para determinar o m -ésimo componente do vetor de controle $u(t)$ e a função escalar $\mu(t)$.

ii. Restrição de Igualdade nas Variáveis de Controle e Estado

Neste caso a Equação (2.2.37) será redefinida como:

$$C(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.2.40)$$

As condições obtidas para a seção anterior podem ser aplicadas aqui. Todavia, a Equação (2.2.20) sofrerá um acréscimo de um novo termo, resultando:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{z}} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{z}} + \mu^T \frac{\partial C}{\partial \mathbf{z}} - \dot{\lambda}^T \frac{\partial f}{\partial \dot{\mathbf{z}}} - \lambda^T \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right) = 0 \quad (2.2.41)$$

iii. Restrições de Igualdade na Variável de Estado

Caso a restrição não tiver dependência explícita na variável de controle, uma complexidade adicional será acrescentada. Seja a restrição:

$$S(\mathbf{z}, t) = 0 \quad (2.2.42)$$

Se a restrição acima é aplicada sobre todo o intervalo $t_0 \leq t \leq t_f$, a derivada temporal da restrição é nula ao longo da trajetória:

$$\frac{ds}{dt} = \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial s}{\partial \mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} = \frac{\partial s}{\partial \mathbf{z}} f(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.2.43)$$

A equação acima pode ou não revelar a dependência das variáveis de controle \mathbf{u} . Se ela revelar a dependência de \mathbf{u} , então pode ser tratada como uma restrição do tipo da Equação (2.2.40). Para tanto, deve-se eliminar uma componente de \mathbf{z} como função dos $n - 1$ componentes remanescentes usando a Equação (2.2.42) como condição de contorno em $t = t_0$ ou $t = t_f$. Se a Equação (2.2.43) não revelar a variável de controle explicitamente, deve-se repetir o processo de diferenciar a equação até que a variável de controle u seja explicitamente revelada.

Daí surge o conceito de ordem da restrição de igualdade na variável de controle, que é definida como o número de vezes que a restrição deve ser diferenciada para se ter a dependência da variável de controle \mathbf{u} . A q -ésima derivada temporal da restrição da Equação (2.2.42) é dada por:

$$S^q(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \text{ onde } S^q(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = \frac{d^q s}{dt^q} \quad (2.2.44)$$

Para eliminar os q componentes de \mathbf{z} , deve se manusear os $(n - q)$ componentes remanescentes, usando as q relações:

$$\begin{bmatrix} S(\mathbf{z}, t) \\ S^1(\mathbf{z}, t) \\ \vdots \\ S^{q-1}(\mathbf{z}, t) \end{bmatrix} = 0 \quad (2.2.45)$$

ou adicionando a equação acima (Equação (2.2.45)) como um conjunto de condições de contorno em $t = t_0$ ou $t = t_f$.

Em um PCOAD, a existência de restrições de igualdade nas variáveis de estado pode significar um aumento no índice diferencial. Esse tipo de restrição pode surgir quando um PCO formado por Equações Diferenciais Implícitas do seguinte tipo:

$$F(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \mathbf{u}, p, t) = 0 \quad (2.2.46)$$

onde \mathbf{x} é a variável de estado, \mathbf{u} é a variável de controle e p é o parâmetro. Uma nova variável de controle pode ser escrita como $\mathbf{u}^* = [\mathbf{u}, \mathbf{v}]$, e o Sistema Aumentado definido como:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v} \quad (2.2.47)$$

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{u}, p, \mathbf{v}, t) = 0 \quad (2.2.48)$$

torna-se um sistema de EADs onde a Equação (2.2.48) representa a nova restrição algébrica.

iv. Restrições de Desigualdade na Variável de Controle

Para simplificar a análise, este problema de otimização deverá ser de tempo fixo e sem restrição definida no ponto final, sujeito a uma restrição de desigualdade do tipo:

$$C(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) \leq 0 \quad (2.2.49)$$

Seja o Hamiltoniano definido por: $H^0 = \lambda^T f + L$, considerando que $\delta z_i = 0$ e $\partial H / \partial \lambda = 0$ e, para simplificações, os coeficientes de $\delta \mathbf{z}$ iguais a zero, reescreve-se:

$$\delta J = \int_{t_0}^{t_f} H_u^0 \delta u dt \triangleq \int_{t_0}^{t_f} H_u^0(z, \lambda, u, t) dt \quad (2.2.50)$$

São condições necessárias para este problema as Equações (2.2.20 – 2.2.23). Para minimizar $\mathbf{u}(t)$ necessita-se que $\delta J \geq 0$ para todo o conjunto admissível de $\mathbf{u}(t)$. Isto implica que $\delta H^0 \geq 0$ para todo t e todo o conjunto admissível de $\mathbf{u}(t)$. Os pontos onde ocorrem os valores ótimos de $\mathbf{u}(t)$ possuem as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} \delta H^0 &= H_u^0 \delta \mathbf{u} \geq 0 \\ \delta C &= C_u \delta \mathbf{u} \leq 0 \end{aligned} \quad (2.2.51)$$

Se o Hamiltoniano for definido por a seguinte equação:

$$H = \lambda^T f + L + \mu^T C \quad (2.2.52)$$

As condições necessárias são formadas pelas Equações (2.2.20 – 2.2.22) acrescida da condição abaixo:

$$\mu = \begin{cases} \geq 0 & \text{se } C = 0 \\ = 0 & \text{se } C < 0 \end{cases} \quad (2.2.53)$$

Pode-se interpretar a exigência do multiplicador ser positivo quando $C = 0$ como sendo uma condição para que o gradiente $H_u \equiv \lambda^T f_u + L_u$ seja obtido somente quando as restrições forem violadas.

Se a restrição de desigualdade tornar-se ativa em algumas porções da trajetória, o problema de otimização apresenta arcos com restrições e sem restrição. Nos pontos de junção entre os arcos restritos e não restritos a variável de controle pode ser contínua ou não. Caso $\mathbf{u}(t)$ for descontínua, o ponto é denominado canto (*corner*). Esses, por sua vez, podem ocorrer em qualquer ponto da trajetória, sendo mais provável que ocorram no meio do arco sem restrição do que nos pontos de junção. A princípio não existe método para determinar a existência desses pontos. Se $\mathbf{u}(t)$ for contínua nos cantos, e λ , $\partial H / \partial u$, H , forem contínuas, então $\mu(t)$ também será contínuo.

v. Restrições de Desigualdade nas Variáveis de Controle e Estado

A restrição de desigualdade é dada por:

$$C(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) \leq 0 \quad (2.2.54)$$

Este problema deve ser tratado da mesma forma que o problema de funções de variáveis de estados especificadas no tempo final fixo. O *Hamiltoniano* é definido da seguinte maneira:

$$H = \lambda^T f + L + \mu^T C \quad (2.2.55)$$

Onde:

$$\mu = \begin{cases} >0 & \text{se } C = 0 \\ = 0 & \text{se } C < 0 \end{cases} \quad (2.2.56)$$

Com as equações de *Euler-Lagrange* definidas como:

$$\dot{\lambda}^T = -\frac{\partial H}{\partial z} \begin{cases} -L_z - \lambda^T f_z - \mu C_z & \text{se } C = 0 \\ -L_z - \lambda^T f_z & \text{se } C < 0 \end{cases} \quad (2.2.57)$$

A condição que determina $\mathbf{u}(t)$ é:

$$H_u \equiv \lambda^T f_u + L_u + \mu^T C_u \quad (2.2.58)$$

Para $C = 0$ as Equações (2.2.56) e (2.2.58) determinam $\mathbf{u}(t)$ e $\mu(t)$. Quando $C < 0$ e $\mu = 0$ a equação a seguir (Equação (2.2.59)) determina $u(t)$.

vi. Restrições de Desigualdade nas Variáveis de Estado

Dada a seguinte restrição de desigualdade:

$$S(\mathbf{z}, t) \leq 0 \quad (2.2.59)$$

onde S e u são escalares. A derivada temporal da Equação (2.2.59) e a substituição de \dot{z} devem ser realizadas até que a dependência explícita de u seja revelada. Denomina-se restrição de desigualdade na variável de estado de q -ésima ordem, quando forem necessárias q derivadas temporais na Equação (2.2.59). A q -ésima derivada temporal total de S é representada por $S^q(z, u, t)$ e a Função Hamiltoniana é definida como:

$$H = L + \lambda^T f + \mu S^q \quad (2.2.60)$$

Para a restrição tornar-se ativa deve ser satisfeita a seguinte equação:

$$S^q = 0 \Rightarrow S = 0 \quad (2.2.61)$$

A restrição não é ativa se:

$$\mu = 0 \Rightarrow S < 0 \quad (2.2.62)$$

As condições necessárias são dadas pelas Equações (2.2.20 - 2.2.23), substituindo C por S^q . A condição necessária para $\mu(t)$, caso a restrição seja ativa, é:

$$\mu(t) \geq 0 \Rightarrow S = 0 \quad (2.2.63)$$

Aqui aparecem arcos restritos e arcos não restritos. Os arcos restritos devem ser tangentes aos arcos não restritos nos pontos de junção, ocasionando descontinuidade nos pontos de entrada e saída de qualquer arco. Logo surgem as restrições de tangência, que são denominadas restrições de contorno em pontos interiores, sendo definidas por:

$$N(\mathbf{z}, t) \triangleq \begin{bmatrix} S(\mathbf{z}, t) \\ S^1(\mathbf{z}, t) \\ \vdots \\ S^{q-1}(\mathbf{z}, t) \end{bmatrix} = 0 \quad (2.2.64)$$

É possível escolher o ponto de entrada ao invés do ponto de saída para satisfazer estas restrições interiores. Então λ e H serão descontínuos no ponto de entrada $t = t_1$ e contínuos no ponto de saída. Na Equação (2.2.64) o vetor $N(\mathbf{z}, t)$ representa as condições de salto. Bryson e Ho (1975) demonstraram que as condições de salto no ponto de entrada podem ser obtidas através:

$$\lambda^T(t_1^-) = \lambda^T(t_1^+) + \pi^T \frac{\partial N}{\partial \mathbf{z}(t_1)} \quad (2.2.65)$$

$$H^T(t_1^-) = H^T(t_1^+) + \pi^T \frac{\partial N}{\partial t_1} \quad (2.2.66)$$

onde t_1^- significa o tempo anterior a t_1 e t_1^+ o tempo posterior a t_1 , π é um vetor de multiplicadores de Lagrange de q dimensões usados para adicionar as condições de junção (2.2.66) à função objetivo, que são determinados de tal forma que atendam a estas condições.

Feehery (1998) explica que a solução de PCOs com restrições de desigualdade apresentam desafios, uma vez que se exige o conhecimento da sequência e do número de ativações e desativações ao longo da trajetória. Quando a quantidade de restrições é reduzida, em geral é possível determinar esta sequência ao examinar a solução do problema sem

restrições. Contudo, a presença de um número maior de restrições transforma o problema de natureza combinatória.

Quando a variável de controle não pode ser explicitada em termos de variáveis de estado e das variáveis adjuntas a partir de condições estacionárias, ocorre uma flutuação do índice, provocando na solução arcos singulares (Logsdon; Biegler, 1989). Feehery (1998) ressalta que se o número de restrições de desigualdade for maior que o número de variáveis de controle, implica EADs de índice superior, independente da restrição de desigualdade ser ativa ou não.

2.2.3. Função Identificadora de Fases - FIF

As Funções Identificadoras de Fases (*Switching Functions*) são funções que indicam quando uma restrição que a princípio estava ativa torna-se inativa, e vice e versa (Lobato, 2004).

Um caso particular de grande interesse é quando a variável de controle aparece linearmente na função *Hamiltoniano*. Bryson e Ho (1975) explicam que, em geral, nenhum mínimo existiria para tais problemas a não ser que restrições de desigualdade nas variáveis de estado e /ou controle sejam especificadas. Se as restrições de desigualdade são lineares na variável de controle, a solução mínima, se existir, sempre exigirá que a variável de controle esteja localizada em um ponto ou outro do limite da região viável de controle.

Assim, dado o seguinte sistema de equações:

$$\dot{x} = F(x) + g(x)u \quad (2.3.1)$$

$$x(0) = x_0 \quad (2.3.2)$$

Com variável de controle escalar dada por:

$$u \in [u_{\min}, u_{\max}] \quad (2.3.3)$$

A Função Hamiltoniano é definida como:

$$H = \lambda^T (F(x) + g(x)u) \quad (2.3.4)$$

Tem-se para essa classe de controle:

$$u(t) = \begin{cases} u_{max} & \text{se } \lambda^T g < 0 \\ u_{min} \text{ } \textit{Função} \\ \textit{Identificadora de fase} & \text{se } \lambda^T g = 0 \\ & \text{se } \lambda^T g > 0 \end{cases} \quad (2.3.5)$$

Apresentadas as condições de otimalidade para diferentes condições, no próximo capítulo são apresentadas os métodos para a resolução de PCOADs.

2.3. Resolução Numérica do PCOAD

Na literatura podem ser encontradas três tipos de abordagens para a resolução do PCOAD, a saber, os métodos diretos, os métodos indiretos e os métodos híbridos. A seguir é feita a descrição de cada um deles.

2.3.1. Métodos diretos

Nos métodos diretos, o PCOAD original (contínuo) é transformado em um equivalente discretizado, sendo reescrito como um problema de programação não linear através da parametrização das variáveis de controle e/ou de estado (Souza, 2007). Segundo Biegler e Grossmann (2004), estes podem ser classificados em dois grupos de acordo com o nível de discretização adotado, ou seja, podendo ser discretizado parcialmente (Abordagem Sequencial) ou discretizado totalmente (Abordagem Simultânea). Na discretização parcial apenas a variável de controle é discretizada. O sistema de equações resultante pode ser resolvido por técnicas de programação dinâmica ou por estratégias de programação não-linear (PNL). A característica principal desta técnica é que a cada iteração do código PNL, para um dado valor da variável de controle, o sistema de EADs é integrado (Souza, 2007).

➤ Abordagem sequencial ou parametrização da variável de controle

A estratégia sequencial fundamenta-se na parametrização das variáveis de controle. Aqui, as condições iniciais e o conjunto de parâmetros de controles são conhecidos e o sistema de EADs é discretizado baseando-se em uma aproximação polinomial e, logo após, é resolvido como um problema de programação não linear. Esse procedimento determina o valor da função objetivo e das restrições, permitindo encontrar o valor ótimo dos coeficientes na parametrização do controle (Lobato, 2004).

Uma característica desse método é a necessidade reduzida de manipulação no sistema original de equações. Os parâmetros presentes na expressão funcional e que descrevem o comportamento da variável de controle são estimados a cada iteração do código de otimização (Souza 2007). Feehery (1998) ilustra o algoritmo geral para a resolução de problema de controle ótimo utilizando o método sequencial direto com um agente de resolução PNL, conforme a Figura 2.1.

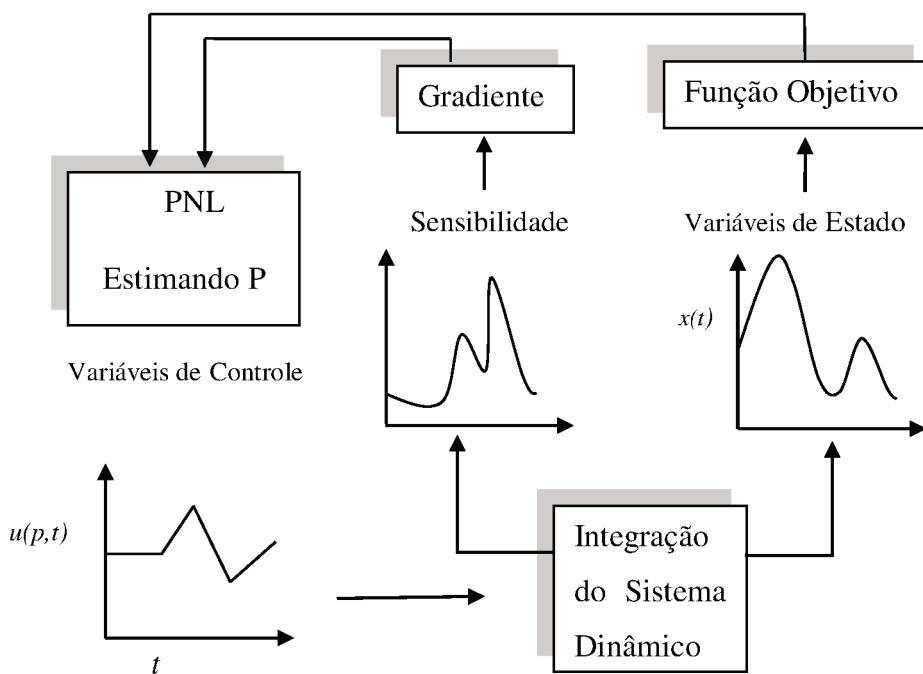


Figura 2.1 - Fluxograma adaptado referente à abordagem sequencial (Feehery, 1998).

Como principais vantagens desta abordagem pode-se citar (Biegler et al., 2002; Lobato, 2004): *i*) fácil implementação quando comparado ao método indireto, pois não é necessária a geração do Sistema Aumentado; *ii*) o perfil de controle é aproximado por um perfil constante por partes, sobre elementos finitos de comprimento variável; Por outro lado, como principais desvantagens pode-se citar (Biegler et al., 2002; Lobato, 2004): *i*) como o sistema de EADs é resolvido em cada iteração, a robustez é garantida somente quando o sistema apresenta índice diferencial menor ou igual a um; *ii*) não permite o manuseio direto de restrições de desigualdade nas variáveis de estado; *iii*) maior esforço computacional quando comparada à estratégia simultânea; *iv*) não recomenda-se a aplicação desta abordagem em sistemas de grande dimensão; *v*) não existe garantia de convergência e de que o ótimo global foi encontrado ao se atender as tolerâncias.

➤ Abordagem simultânea

Na estratégia simultânea as equações que compõem o problema de otimização dinâmica, bem como o conjunto de restrições (igualdade e desigualdade), são discretizados gerando um grande sistema algébrico (linear ou não-linear). A técnica mais empregada para a discretização do sistema de EAD é a aproximação polinomial via coloção ortogonal (Biegler, 1984).

Na Figura 2.2 é apresentado um fluxograma simplificado referente a abordagem simultânea.

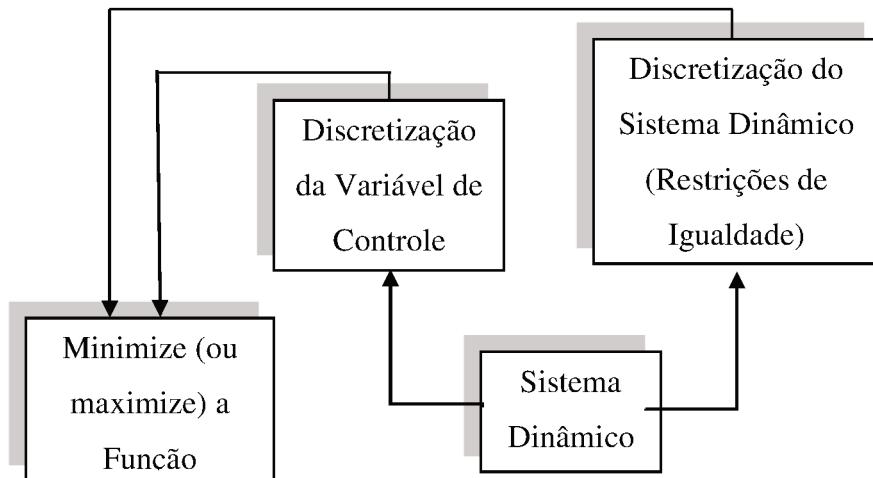


Figura 2.2 - Fluxograma adaptado referente à abordagem simultânea (Biegler, 1984).

Como principais vantagens desta abordagem pode-se citar (Biegler et al., 2002; Lobato, 2004): *i*) são de implementação mais fácil quando comparados ao método indireto, pois não é necessária a geração do sistema aumentado; *ii*) as restrições discretizadas são satisfeitas somente quando a solução é obtida; *iii*) essa abordagem é aplicável para sistemas de grande dimensão; *iv*) é uma abordagem viável para aplicação em problemas com restrição de caminho; *v*) pequeno esforço computacional quando comparado à abordagem sequencial. Por outro lado, como principais desvantagens pode-se citar (Biegler et al., 2002; Lobato, 2004): *i*) é necessário garantir a estabilidade do processo para que esse possa ser otimizado; *ii*) podem surgir problemas relacionados com a convergência e estabilidade do sistema devido a presença de índices altos e arcos singulares; *iii*) não existe garantia de convergência e de que o ótimo global foi encontrado ao se atender as tolerâncias.

2.3.2. *Métodos indiretos*

Os métodos indiretos surgiram com o desenvolvimento do Cálculo Variacional, permitindo a dedução das condições necessárias e suficientes para a solução de problemas de otimização dinâmica (Bryson e Ho, 1975). Esse método segue uma linha de formulação teórica mais consistente se comparado ao método direto (Souza, 2007).

Nesta abordagem gera-se as condições de otimalidade, transformando o problema original em um problema de valor no contorno em dois pontos. Este problema resultante deve ser resolvido pela aplicação de métodos de discretização como nos elementos finitos e diferenças finitas, métodos do “chute” simples e múltiplo (Denham e Bryson, 1964; Dreyfus, 1962; Lobato, 2004). As condições necessárias para o ótimo para problemas nos quais o sistema dinâmico é descrito somente através de equações diferenciais ordinárias são bem constituídas na literatura (Bryson e Ho, 1975).

Atualmente, os métodos indiretos podem ser utilizados de modo eficiente devido ao desenvolvimento dos programas de álgebra computacional, que permitem a obtenção automática das equações diferenciais adjuntas e demais condições de otimalidade (Souza, 2007). Todavia, isso não significa que o mesmo tornou-se uma tarefa fácil (Lobato, 2004).

Na pesquisa de Souza (2007) encontra-se listadas algumas desvantagens desse método, sendo elas: *i*) convergência lenta para o ótimo; *ii*) requer a solução de equações auxiliares e de estado, consequentemente gerando um grande esforço computacional durante a iteração; *iii*) em geral não é aplicável no caso do controle com *feedback*; *iv*) não é conhecida a ordem de grandeza das variáveis adjuntas; *v*) surgimento de singularidades.

2.3.3. *Métodos mistos ou híbridos*

Pfeifer (2007) e Quinto (2010) definem os métodos mistos ou híbridos como sendo uma combinação dos métodos diretos e métodos indiretos. Neste caso, os Métodos Diretos são aplicados a problemas mais simplificados e os resultados servem de estimativas para os Métodos Indiretos, com refinamento da solução.

O desenvolvimento de métodos híbridos mostra-se necessário quando se tem um problema que envolve uma função extremamente complicada, ou seja, repleta de vales, picos e regiões planas (Nery, 2007).

CAPÍTULO III

MÉTODOS HEURÍSTICOS

3.1. Introdução

A escolha de um método de otimização depende de alguns fatores, tais como, a qualidade da solução exigida (nível de refinamento), a quantidade de parâmetros que deve ser definida, o número de avaliações da função objetivo (o que implica no tempo total de processamento) e o uso ou não de informações sobre a derivada da função objetivo e de suas restrições. Não existe uma metodologia que consiga resolver todo e qualquer tipo de problema indistintamente. Além disso, toda e qualquer abordagem existente na literatura apresenta vantagens e desvantagens. Neste caso, para a resolução de um determinado problema, deve-se escolher a metodologia mais atraente, isto é, que consiga satisfazer a relação custo versus benefício da melhor forma possível.

Neste cenário, a partir do desenvolvimento da primeira técnica evolutiva, a saber, os Algoritmos Genéticos (Holland, 1975), a comunidade científica começou a se interessar por este tipo de abordagem devido à qualidade dos resultados obtidos e por representar um metodologia que tem a capacidade de encontrar o ótimo global, além de sua robustez. Estes métodos, denominados de Heurísticos, ganham mais e mais adeptos nos dias de hoje, já que a sofisticação de microcomputadores com grande capacidade de processamento têm sido desenvolvidos a preços aceitáveis.

De acordo com Arroyo (2002), os Métodos Heurísticos podem ser classificados em três classes que se diferem basicamente pela forma como exploram o espaço de soluções dos problemas. Essas classes estão descritas a seguir:

- 1) Construtivas: geram uma solução em potencial pela simples adição de componentes através da aplicação de regras específicas.
- 2) Busca Local ou Busca em Vizinhança: iniciam-se com uma solução completa do problema, sendo gerada uma vizinhança a esta solução candidata, de forma que novas soluções candidatas ainda mais refinadas possam ser obtidas. A eficiência deste tipo de abordagem depende da solução inicial e da forma como este processo de refinamento será conduzido.
- 3) Metaheurísticas: são reconhecidas como métodos inteligentes e flexíveis, pois possuem uma estrutura com componentes genéricos que são adaptados ao problema que se deseja resolver. Estes métodos possuem uma certa facilidade em incorporar novas regras para a exploração do domínio, de modo que ótimos locais possam ser evitados ao longo do processo evolutivo.

Na literatura, inúmeras são as metaheurísticas que podem ser utilizadas. Basicamente, cada uma delas procura imitar o comportamento ou um dado fenômeno que é observado na natureza de modo a definir uma estratégia para a atualização de soluções potenciais do problema de otimização. Dentre as mais empregadas destacam-se:

1. Algoritmos Genéticos: exploram uma população de candidatos em cada iteração através de analogias com a genética de populações (definição de pais, filhos, entre outros aspectos), de modo que várias regiões do espaço de busca possam ser exploradas.
2. Busca Tabu e Recozimento Simulado (*Simulated Annealing*): exploram uma vizinhança a cada iteração de acordo com suas estratégias e escolhem apenas um elemento dessa vizinhança a cada passo. Esse tipo de varredura do espaço de busca gera uma trajetória de soluções obtida pela transição de uma solução para outra de acordo com os movimentos permitidos pelo método.
3. Evolução Diferencial (*Differential Evolution*): possui uma concepção puramente matemática, baseada em operações vetoriais, sendo por esse motivo considerada uma abordagem estrutural (Coelho, 2003; Lobato, 2008).
4. Enxame de Partículas (*Particle Swarm*): baseada em uma população de indivíduos e motivada pela simulação do comportamento social de conjunto de pássaros, peixes ou insetos (Lobato, 2008). Na otimização por colônia de partículas, cada solução candidata

(denominada partícula) possui associada a ela uma velocidade. Tal velocidade é ajustada através de uma equação de atualização que considera a experiência da partícula correspondente, juntamente com a experiência das outras partículas da população (Coelho, 2003).

5. Colônia de Formigas (*Ant Colony*): Coelho (2003) define este código como sendo um algoritmo não-determinístico baseado em mecanismos presentes na natureza, uma vez que ele é baseado no comportamento de formigas para a determinação de caminhos através de suas colônias para procura eficiente de fontes de comida. Trata-se de um algoritmo paralelo e adaptativo, (pois uma população de agentes move-se simultaneamente, de forma independente e sem um supervisor) e ainda um algoritmo cooperativo, pois cada agente (formiga) escolhe um caminho com base na informação (trilhas de feromônios) depositadas por outros agentes que tenham selecionado previamente o mesmo caminho.

Na última década, novas estratégias evolutivas têm sido propostas e empregadas para a resolução de problemas de engenharia e áreas afins. Cada uma delas tem uma concepção conceitual diferente, mas guardam como objetivo principal o desenvolvimento de um mecanismo de busca pela solução global. Dentre estas pode-se citar o Algoritmo de Ciclo de Água (ACA), proposto recentemente por Eskandar et al. (2012). Esta estratégia evolutiva é baseada no processo de ciclo de água que ocorre na natureza para a determinação de soluções em potencial para a resolução do problema de otimização. Assim, o presente capítulo tem por objetivo apresentar a concepção desta nova metaheurística, bem como avaliar a sensibilidade dos seus principais parâmetros na solução de problemas puramente matemáticos.

3.2. Algoritmo do Ciclo da Água

O Algoritmo de Ciclo de Água (ACA) é uma técnica de otimização evolutiva que se fundamenta no ciclo da água (ou hidrológico) encontrado na natureza, conforme apresentado na Figura 3.1 e descrito resumidamente a seguir, pela instituição de Pesquisa Geológica dos Estados Unidos (*United States Geological Survey -USGS*).

➤ Inicialmente, o ciclo da água começa com a evaporação das águas dos oceanos, lagos e rios (estado líquido), em decorrência do calor do sol e pela ação dos ventos. A partir daí, a água passa para o estado gasoso;

- Esse vapor d'água é mais leve que o ar, por isso sobe até a atmosfera, transformando-se em nuvens (são as nuvens com aparência mais “pesadas”, mais acinzentadas);
- Quando as temperaturas mais baixas atingem essas nuvens, o vapor de água nelas contido se condensa, transformando-se em gotículas de água que voltam à superfície da terra na forma de chuva;
- Após cair, a água da chuva fica no solo onde há vegetação, para ser utilizada pelas plantas. A parte desta água que não é utilizada vai para os rios e lagos. É daí que também são formados os lençóis d'água, já que a água da chuva também escorre através do solo poroso. Estes lençóis fluem de volta para os oceanos.
- A partir daí, o ciclo recomeça.

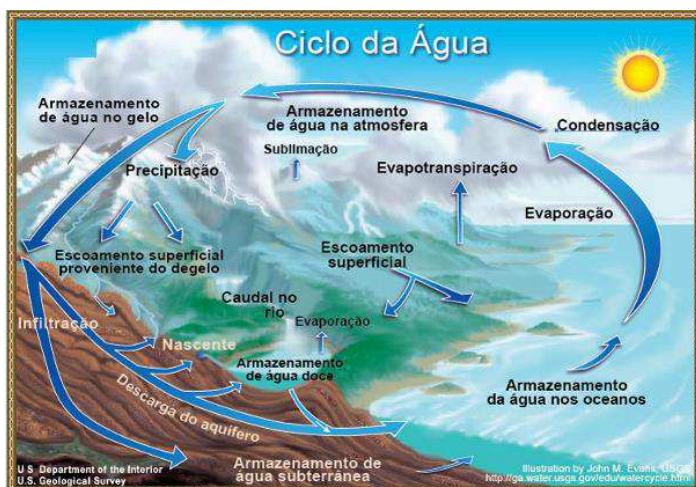


Figura 3.1 - Etapas do ciclo de água na natureza (Fonte: <HTTP://ga.water.usgs.gov>, acessada em 07 de Novembro de 2014).

Esta metaheurística assume a ocorrência de chuva ou precipitação, já que a posição das gotas de chuva, associada à avaliação da função objetivo, é que efetivamente irá representar a evolução da população de candidatos (gotas de chuva) para a solução do problema de otimização. O melhor indivíduo, ou seja, a melhor gota de chuva é escolhida como sendo o mar. Logo após, um número de gotas de chuva, previamente definidas pelo usuário, são escolhidas como o rio e o restante das gotas de chuva são consideradas como riachos que fluem para os rios e para o mar. Neste caso, a posição do mar representará a melhor solução no processo de otimização.

No ACA uma solução candidata (gota de chuva) é representada por uma matriz $1 \times N_{var}$, (onde N_{var} é o número de variáveis de projeto), definida como:

$$\text{Gota de chuva} = [x_1, x_2, x_3, \dots, x_N] \quad (3.2.1)$$

Para dar início ao algoritmo de otimização, gera-se aleatoriamente dentro do espaço de projeto especificado pelo usuário, uma população com N candidatos.

$$\text{População de gotas de chuva} = \begin{bmatrix} \text{Gota 1} \\ \text{Gota 2} \\ \text{Gota 3} \\ \vdots \\ \text{Gota } N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^1 & \dots & x_{N_{var}}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^N & \dots & x_{N_{var}}^N \end{bmatrix} \quad (3.2.2)$$

Assim, cada linha desta matriz deve ser avaliada em termos da função objetivo f :

$$f(x_1^i, x_2^i, x_3^i, \dots, x_{N_{var}}^i) \quad i = 1, 2, 3, -dff \dots, N \quad (3.2.3)$$

Um número N_{sr} de indivíduos é selecionado como sendo o mar e o rio. A gota de chuva que tem valor mínimo, em termos do objetivo, é considerada como o mar. As N_{sr-1} gotas são consideradas como os rios:

$$N_{sr} = \text{Número de Rios} + \frac{1}{\text{Mar}} \quad (3.2.4)$$

$$N_{\text{gotas de chuva}} = N - N_{sr} \quad (3.2.5)$$

Com a finalidade de designar/ atribuir gotas de chuva para os rios e mar, a seguinte equação é proposta:

$$NS_n = volta \left\{ \left| \frac{Custo_n}{\sum_{i=1}^{N_{sr}} Custo_i} \right| \times N_{\text{gotas de chuva}} \right\}; \quad n = 1, 2, \dots, N_{sr} \quad (3.2.6)$$

onde NS_n é o número de riachos com fluxo que corre para os rios ou mar.

Sabe-se que um riacho é formado por gotas de chuvas que se juntam aos rios que, por sua vez, deságuam no mar. Este comportamento, onde as águas de um riacho correm para os rios

também pode ser estendido, ao se considerar o fluxo dos rios para o mar. Matematicamente, este processo pode ser descrito como:

$$X \in (0, C \times d) \quad C > 1 \quad (3.2.7)$$

$$X_{riacho}^{i+1} = X_{riacho}^i + rand \times C \times (X_{rio}^i - X_{riacho}^i) \quad (3.2.8)$$

$$X_{rio}^{i+1} = X_{rio}^i + rand \times C \times (X_{mar}^i - X_{rio}^i) \quad (3.2.9)$$

onde C é um valor entre 1 e 2, d é a distância entre o riacho e o rio (ou, rio e mar); X é uma distribuição de números aleatórios entre 0 e $(C \times d)$; e $rand$ um número aleatório entre 0 e 1.

Na natureza constata-se que o processo de evaporação faz com que a água do mar evapore, assim como os fluxos dos rios e riachos, ao mar. No ACA a evaporação assume um papel fundamental, uma vez que, em termos do processo de otimização, ela pode impedir a convergência para um mínimo local ou até mesmo acelerar o processo de convergência. A seguir é apresentada uma relação para determinar se o rio corre ou não para o mar. Neste caso, se a distância entre um rio e o mar é menor que d_{max} , onde d_{max} é um número pequeno (próximo de zero), observa-se que o rio atingiu ou juntou-se ao mar. Portanto, d_{max} controla a proximidade do mar (a melhor solução), sendo que este decresce adaptativamente da seguinte maneira:

$$d_{max}^{i+1} = d_{max}^i - \frac{d_{max}^i}{N_{max}} \quad (3.2.10)$$

Finalizado o processo de evaporação, a próxima etapa é o regresso da água para o solo, o que se dá pela chuva. Nesta etapa as gotas de chuva, ao retornarem ao solo formam novos fluxos, mas em diferentes locais. Para especificar as novas localizações dos fluxos recém-formados, a seguinte equação é utilizada:

$$X_{riacho}^{novo} = LB + rand \times (UB - LB) \quad (3.2.11)$$

onde LB e UB são limites inferiores e superiores das variáveis de projeto, especificadas para o problema de interesse.

De forma resumida, a gota de água recém-formada que é a melhor avaliada em termos da função objetivo é considerada como um rio que flui para o mar. As outras novas gotas de chuva formarão novos fluxos que correrão para os rios ou poderão fluir diretamente para o mar.

Com a finalidade de aumentar a taxa de convergência do ACA, a Equação (3.1.11) é usada apenas para os córregos que fluem diretamente para o mar. Esta equação tem como objetivo incentivar a geração de fluxos que fluem direto para o mar, a fim de melhorar a exploração perto mar (a melhor solução) na região viável para problemas com restrição.

$$X_{riacho}^{novo} = X_{mar} + r\sqrt{\mu} \times randn(1, N_{var}) \quad (3.2.12)$$

onde r é um coeficiente que mostra a gama de procura da região perto do mar, $randn$ é o número aleatório distribuído normalmente.

Um maior valor para μ aumenta a possibilidade de sair da região viável. Por outro lado, um valor menor pode levar para a região do mar. Eskandar et al. (2012) recomendam usar 0,1 como um bom valor para esse parâmetro.

O processo apresentado continua até que um determinado critério de parada seja alcançado, geralmente o número máximo de gerações.

3.2.1 Passos para o algoritmo do ciclo da água

A seguir são apresentados os passos para a aplicação do ACA (Eskandar et. al., 2012):

Passo 1: Definir os parâmetros de entrada do ACA: Número máximo de gerações N_{max} ; Número de rios e mar N_{sr} ; Número total de gotas de chuva N ; Fator de evaporação d_{max} .

Passo 2: Gerar população inicial aleatoriamente a partir da especificação do domínio do problema de interesse utilizando Equações (3.1.2), (3.1.4) e (3.1.5).

Passo 3: Calcular a função objetivo referente a cada gota de chuva usando a Equação (3.1.3).

Passo 4: Determinar a intensidade do fluxo de rios e do mar usando a Equação (3.1.6).

Passo 5: Determinar o fluxo do riacho para os rios através da Equação (3.1.8).

Passo 6: Garantir que os rios corram para o mar, que é o valor mais baixo, usando Equação (3.1.9)

Passo 7: Se um riacho encontra-se posicionado melhor do que o rio, a posição do rio é trocada com o riacho.

Passo 8: Se um rio encontra-se posicionado melhor do que o mar, a posição do rio é trocada com o mar.

Passo 9: Verificar a taxa de evaporação usando o seguinte pseudocódigo:

se

$$|X^i_{mar} - X^i_{rio}| < d_{max} \quad i = 1, 2, 3, \dots, N_{sr} - 1.$$

fim

Passo 10: Se a condição for satisfeita a evaporação, o processo de chuva irá ocorrer usando as Equações (3.1.11) e (3.1.12).

Passo 11: Atualizar o valor de d_{max} usando a Equação (3.1.10).

Passo 12: Verificar os critérios de parada. Se este for satisfeito, o algoritmo é finalizado, caso contrário retorna ao *Passo 5*.

Descrito o ACA, a seguir será apresentada a aplicação desta estratégia em alguns problemas matemáticos algébricos de modo a avaliar a influência dos parâmetros na qualidade da solução obtida.

3.3. Análise de Sensibilidade

O algoritmo do ciclo da água possui quatro parâmetros que devem ser definidos pelo usuário, a saber: número máximo de gerações N_{max} , o número total de gotas de chuva N , o número de rios e mares N_{sr} e o fator de evaporação d_{max} . Assim como em qualquer técnica de otimização, estes devem influenciar o valor da função objetivo encontrada.

Para fazer um estudo sobre a sensibilidade desses parâmetros, três dos quatro parâmetros foram fixados para que se possa avaliar a influência do outro.

A seguir é apresentada a influência de cada parâmetro usando funções matemáticas algébricas como referência. Os gráficos que seguem apresentam a média e o desvio-padrão, considerando dez execuções independentes para cada combinação de parâmetros.

A) Função 1:

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 - \cos(18x_1) - \cos(18x_2); \quad \text{com } x_i \in [-1, 1] \quad \text{e} \quad (3.3.1)$$

$i = 1, 2.$

Esta função apresenta cerca de 50 mínimos locais e um mínimo global igual a -2 .

A.1) Número máximo de gerações (N_{max}):

Para estudar a influência do parâmetro N_{max} foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N = 25$, $N_{sr} = 4$, $d_{max} = 10^{-8}$ e $N_{max} \{100, 500, 1000\}$. A Figura 3.2, contempla a variação do parâmetro analisado.

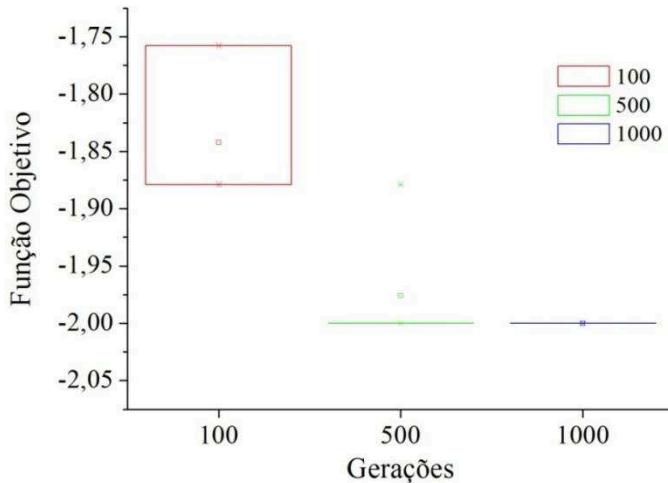


Figura 3.2 - Influência do número máximo de gerações no valor da função objetivo para a função matemática 1

A partir da análise da Figura 3.2 é possível concluir que o aumento do número de gerações faz com que seja encontrado o valor da função objetivo e, além disso, que a população se torne homogênea. Este resultado já era esperado, visto que o aumento no valor deste parâmetro implica num maior refinamento da solução. Todavia, ressalta-se que para um refinamento adequado é necessário mais avaliações da função objetivo.

A.2) Número total de gotas de chuva (N):

Para estudar a influência do parâmetro N foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N_{max} = 100$, $N_{sr} = 4$, $d_{max} = 10^{-8}$ e $N = \{25, 50, 100\}$. A Figura 3.3 contempla a variação do parâmetro analisado.

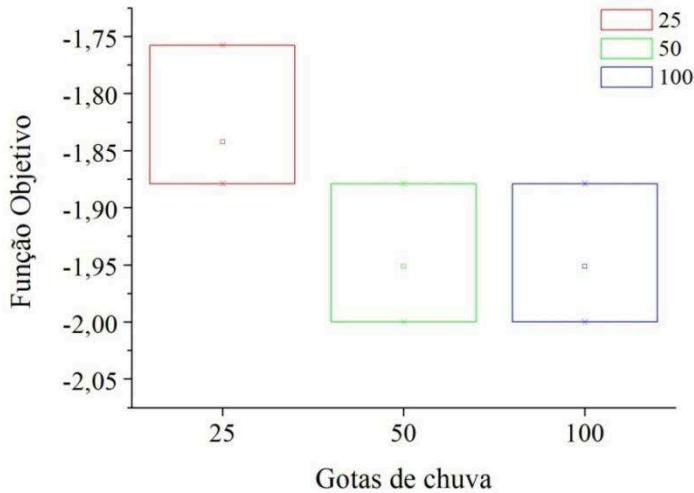


Figura 3.3 - Influência do número de gotas de chuva no valor da função objetivo para a função matemática 1.

Pela Figura 3.3 observa-se que, para uma população com 50 e 100 gotas de chuva, não existe variação significativa dos valores da função objetivo encontradas. Já para uma população com 25 gotas não foi alcançado o valor ótimo referente a esta função. É importante ressaltar que este resultado foi obtido considerando um número relativamente pequeno de gerações (100), o que influencia o processo de convergência, conforme apresentado na Figura 3.2.

A.3) Número de rios e mares (N_{sr}):

Para estudar a influência do parâmetro N_{sr} foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N_{max} = 100$, $N = 25$, $d_{max} = 10^{-8}$ e $N_{sr} = \{4, 8, 12\}$. A Figura 3.4 contempla a variação do parâmetro analisado.

De acordo com a Figura 3.4 conclui-se que valores maiores deste parâmetro conduzem a melhores valores da função objetivo. De forma prática, o aumento deste valor evidencia o refinamento da solução. Todavia, assim como observado na Figura 3.4, o ótimo global não foi alcançado devido ao número de gerações considerados nesta análise.

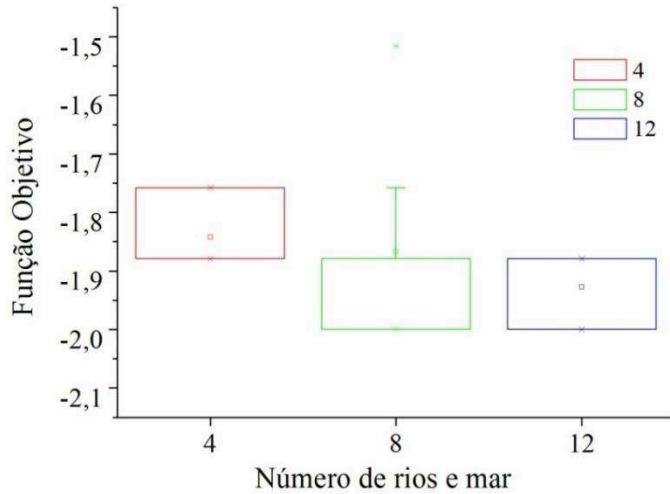


Figura 3.4 - Influência do número de rios e mar no valor da função objetivo para a função matemática 1.

A.4) Fator de evaporação (d_{max}):

Para estudar a influência do parâmetro N_{max} foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N_{max}=100$, $N = 25$, $N_{sr} = 4$, $d_{max} = \{10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-8}\}$.

Para as execuções realizadas nesta análise, percebe-se que 10^{-5} foi o parâmetro para o qual foi obtido o melhor valor da função objetivo, mas sem que se tenha obtido a homogeneidade da população de gotas de chuva. A redução deste parâmetro, que está relacionada com o processo de exploração do espaço de projeto, não resultou na melhora do valor da função objetivo, como se pode observar na Figura 3.5.

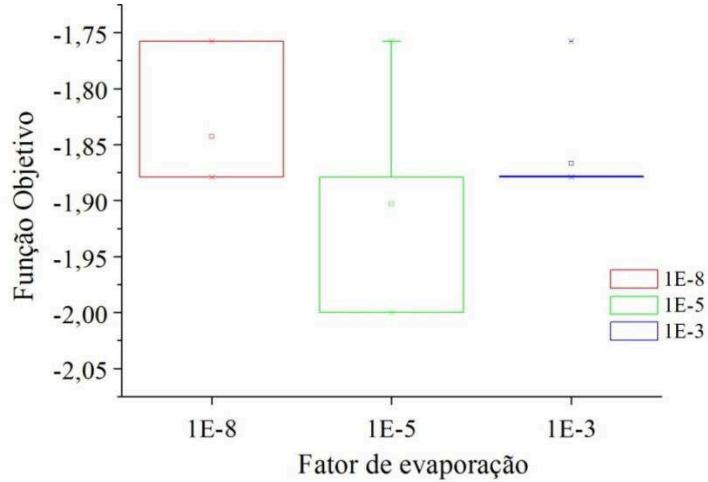


Figura 3.5 - Influência do fator de evaporação no valor da função objetivo para a função matemática 1.

B) Função 2:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n-1} \left(100(x_j^2 - x_{j+1})^2 + (x_j - 1)^2 \right); \text{ com } x_i \in [-5 \quad 10] \text{ e } i = 1 \text{ a } 3 \quad (3.3.2)$$

A função em questão possui inúmeros mínimos locais e um ótimo global igual a 0.

B.1) Número máximo de Gerações (N_{max}):

Para estudar a influência do parâmetro N_{max} na função matemática 2 foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N = 25$, $N_{sr} = 4$, $d_{max} = 10^{-8}$ e $N_{max} \{100, 500, 1000\}$.

A Figura 3.6 indica a variação do parâmetro analisado.

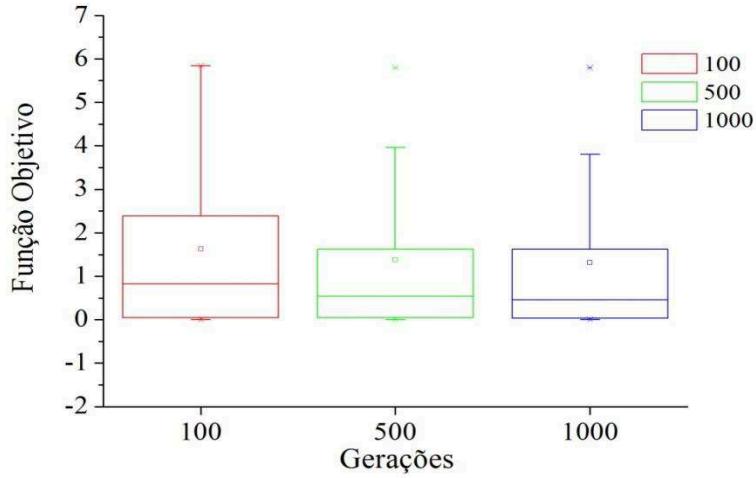


Figura 3.6 - Influência do número máximo de gerações no valor da função objetivo para a função matemática 2.

Assim como observado nos resultados obtidos para a primeira função matemática, o aumento no valor deste parâmetro implica em um melhor valor da função objetivo. Assim, apesar deste aumento significar o incremento no número de avaliações da função objetivo, ressalta-se que, quanto maior o valor deste parâmetro, maior é a chance de convergência do problema, bem como da população tornar-se homogênea.

B.2) Número total de gotas de chuva (N):

Para estudar a influência do parâmetro N foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N_{max} = 25$, $N_{sr} = 4$, $d_{max} = 10^{-8}$ e $N = \{25, 50, 100\}$. A Figura 3.7 como segue, observa-se a variação do parâmetro analisado.

Diferentemente do que foi observado na Figura 3.6, o aumento do número de gotas de chuva incrementa a chance de ser encontrado o ótimo global. Como pode-se constatar pela Figura 3.7. Especificamente, para 100 gotas observa-se que a população tornou-se homogênea para o número de gerações considerados nesta análise.

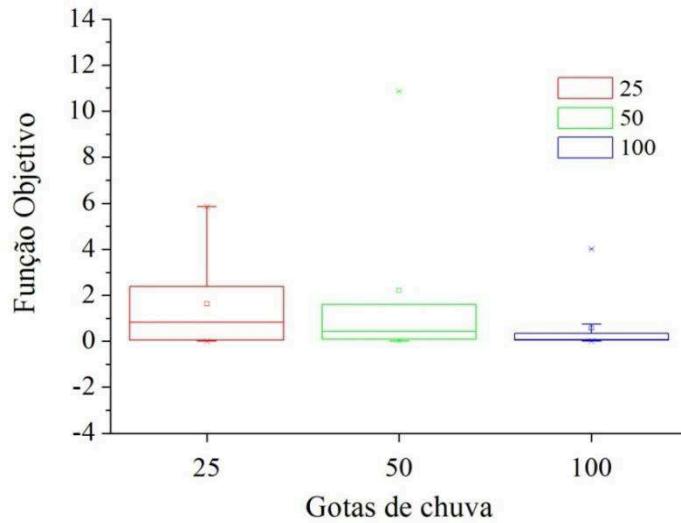


Figura 3.7 - Influência do número de gotas de chuva no valor da função objetivo para a função matemática 2.

B.3) Número de rios e mares (N_{sr}):

Para estudar a influência do parâmetro N_{sr} foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N_{max}=100$, $N = 25$, $d_{max} = 10^{-8}$ e $N_{sr} = \{4, 8, 12\}$.

A figura a seguir contempla a variação do parâmetro analisado. Nesta figura observa-se que o aumento deste parâmetro não resultou na obtenção do ótimo global, conforme constatado na Figura 3.8 para a primeira função matemática.

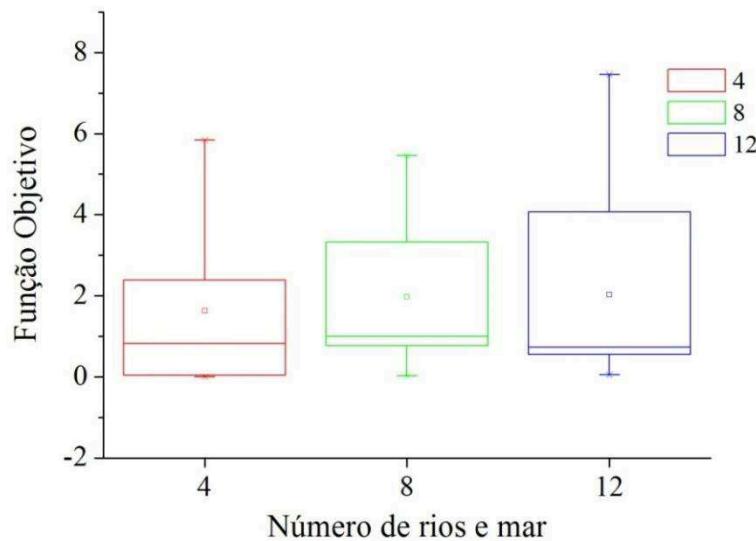


Figura 3.8 - Influência do número de rios e mar no valor da função objetivo para a função matemática 2.

B.4) Fator de evaporação (d_{max}):

Para estudar a influência do parâmetro d_{max} foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N_{max} = 100$, $N = 25$, $N_{sr} = 4$ e $d_{max} = \{10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-8}\}$.

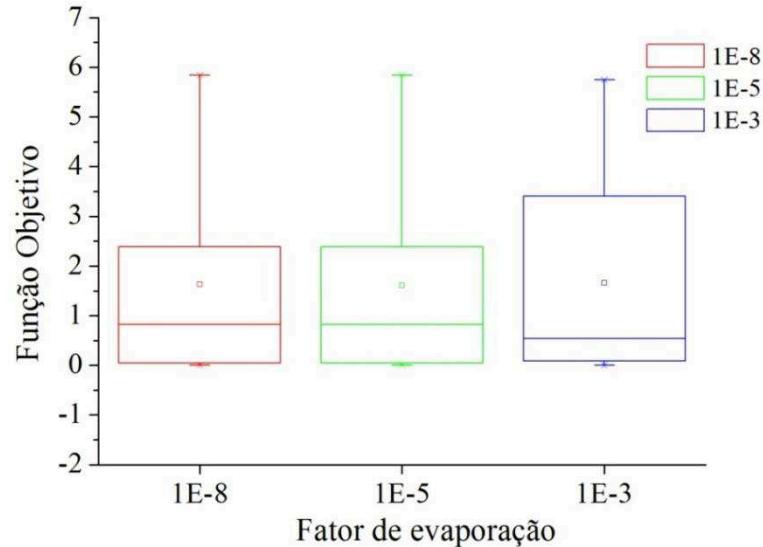


Figura 3.9 - Influência do fator de evaporação no valor da função objetivo para a função matemática 2.

Na Figura 3.9 observa-se um comportamento similar para ambos os valores considerados para este parâmetro. Assim, para esta função não é observada a influência deste parâmetro na qualidade da solução encontrada.

C) Função 3:

$$\begin{aligned}
 f(x) &= x_1^2 - 5x_1 + x_2^2 - 5x_2 + 2x_3^2 - 21x_3 + x_4^2 + 7x_4 + 50 \\
 x_1^2 - x_1 + 2x_2^2 + x_3^2 + 2x_4^2 - x_4 &\leq 10 \\
 x_1^2 + x_1 + x_2^2 - x_2 + x_3^2 + x_3 + x_4^2 - x_4 &\leq 8 \\
 2x_1^2 + 2x_1 + x_2^2 - x_2 + x_3^2 - x_4 &\leq 5
 \end{aligned} \tag{3.3.3}$$

com $x_1 \in [0 ; 2,1]$, $x_2 \in [0,5 ; 2,8]$, $x_3 \in [1,5 ; 3,9]$ e $x_4 \in [-2,1 ; 0]$, sendo 6 o mínimo global.

O ACA foi implementado para a inserção de restrições de desigualdade como, por exemplo, as restrições da Função 3. Nota-se que as Funções 1 e 2 não apresentam restrições de desigualdade.

C.1) Número máximo de Gerações (N_{max}):

Para estudar a influência do parâmetro N_{max} na função matemática 3 foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N = 25$, $N_{sr} = 4$, $d_{max} = 10^{-8}$ e $N_{max} = \{100, 500, 1000\}$. A Figura 3.10 a seguir, observa a variação do parâmetro analisado.

Conforme observado para as duas primeiras funções matemáticas analisadas, o aumento do número de gerações implica o aumento de chance de se obter o ótimo global, apesar disto resultar num incremento significativo do número de avaliações da função objetivo.

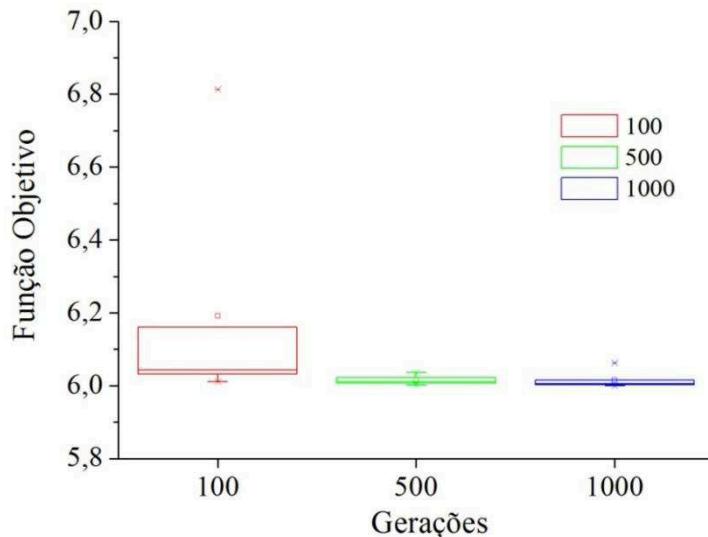


Figura 3.10 - Influência do número máximo de gerações no valor da função objetivo para a função matemática 3.

C.2) Número total de gotas de chuva (N):

Para estudar a influência do parâmetro N na função matemática 3 foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N_{max}=100$, $N_{sr} = 4$, $d_{max} = 10^{-8}$ e $N = \{25, 50, 100\}$. A figura a seguir contempla a variação do parâmetro analisado.

Na Figura 3.11 observa-se, conforme esperado, que o aumento do número de indivíduos na população implica no aumento da probabilidade de se encontrar o ótimo global; além disso, da população tornar-se homogênea.

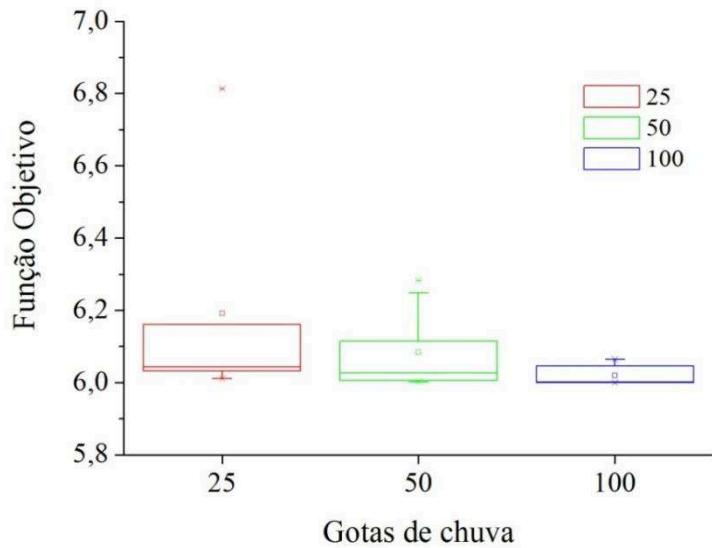


Figura 3.11 - Influência do número de gotas de chuva no valor da função objetivo para a função matemática 3.

C.3) Número de rios e mares (N_{sr}):

Para estudar a influência do parâmetro N_{sr} na função matemática 3 foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N_{max} = 100$, $N = 25$, $d_{max} = 10^{-8}$ e $N_{sr} = \{4, 8, 12\}$. A figura a seguir contempla a variação do parâmetro analisado.

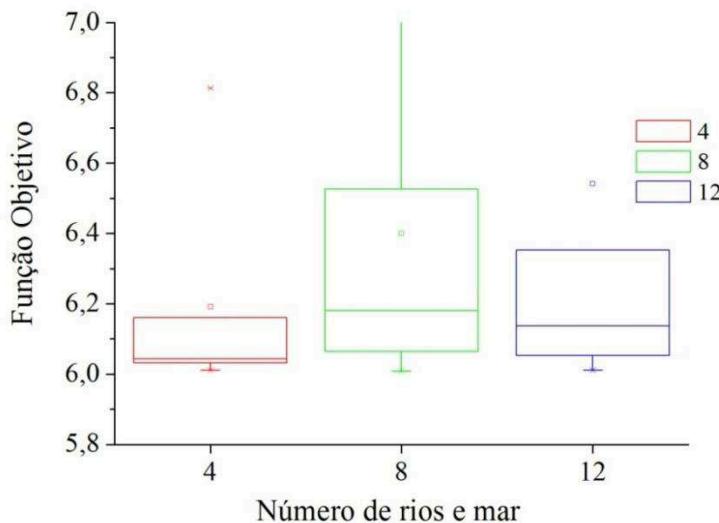


Figura 3.12 - Influência do número máximo de rios e mar no valor da função objetivo para a função matemática 3.

Para a função estudada, observa-se na Figura 12 que qualquer um dos três parâmetros adotados fornecem resultados similares em termos do valor da função objetivo.

C.4) Fator de evaporação (d_{max}):

Para estudar a influência do parâmetro d_{max} na função matemática 3 foram utilizados pelo ACA os seguintes parâmetros: $N_{max} = 100$, $N = 25$, $N_{sr} = 4$, $d_{max} = \{10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-8}\}$.

Ao analisar a Figura 13a seguir, observa-se que o melhor valor para o fator de evaporação, para as condições empregadas neste estudo, é 10^{-3} , pois foi o que conduziu ao melhor valor da função objetivo, bem como o que fez com que a população tenha se tornado homogênea para o vetor de sementes iniciais consideradas.

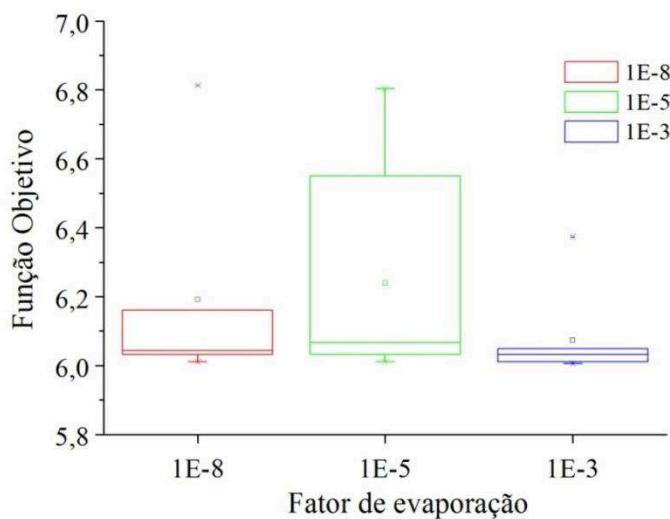


Figura 3.13 - Influência do fator de evaporação no valor da função objetivo para a função matemática 3.

De posse dos resultados obtidos com a análise de sensibilidade dos parâmetros do ACA para as funções matemáticas avaliadas e para o conjunto de parâmetros considerados, conclui-se que uma boa escolha para estes parâmetros é trabalhar com uma população com 100 indivíduos, evoluindo ao longo de 500 gerações, e com 4 (rios+mar) e com uma taxa de evaporação de 10^{-3} . Todavia, ressalta-se que estes parâmetros foram definidos para os estudos de caso analisados, bem como para o conjunto de condições definidos para estes parâmetros.

Assim, para um novo estudo de caso, outros valores podem ser adotados para estes parâmetros.

3.4. Comparação entre o Algoritmo de Ciclo de Água, o Algoritmo de Evolução Diferencial e os Algoritmos Genéticos

Até o presente momento, o Algoritmo de Ciclo de Água foi empregado para a resolução de algumas funções matemáticas com diferentes graus de complexidade. Em termos práticos é importante verificar a eficiência deste algoritmo em relação aos algoritmos evolutivos mais empregados para a resolução de problemas de otimização. Neste cenário, esta seção tem por finalidade apresentar um estudo comparativo entre o Algoritmo de Ciclo de Água, o Algoritmo de Evolução Diferencial (AED) e os Algoritmos Genéticos (AG).

Para fins de comparação será empregada a Função 1 (F_1) definida pela Equação (3.3.1) e reescrita novamente a seguir:

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 - \cos(18x_1) - \cos(18x_2) \quad (3.3.1)$$

Para essa finalidade os seguintes pontos devem ser destacados:

- Parâmetros considerados no ACA: número máximo de Gerações (250), número de gotas de chuva (50); número de rios e mares (8) e taxa de evaporação (10^{-5});
- Parâmetros considerados no AED (Storn e Price, 1995): número máximo de Gerações (250), tamanho da população (50), taxa de perturbação (0,5), probabilidade de cruzamento (0,8) e estratégia de número 7;
- Parâmetros considerados no AG (Houck et. al., 1998): número máximo de Gerações (250), tamanho da população (50), taxa de perturbação (0,5), probabilidade de cruzamento (0,8), probabilidade de mutação (0,02);
- A métrica de comparação considerada é o tempo total de processamento requerido por cada estratégia evolutiva;

É importante ressaltar que, para os parâmetros considerados, o número de avaliações da função objetivo obtidos para os algoritmos foi praticamente equivalente. Assim sendo, a comparação realizada, levando em consideração o tempo de processamento, torna-se mais realística.

Conforme apresentado anteriormente, a função F_1 apresenta 50 mínimos locais e um mínimo global igual a -2. A Figura 3.14 apresenta o tempo total de processamento requerido por cada estratégia evolutiva para a obtenção do ótimo global em função de diferentes sementes iniciais para o gerador de números aleatórios.

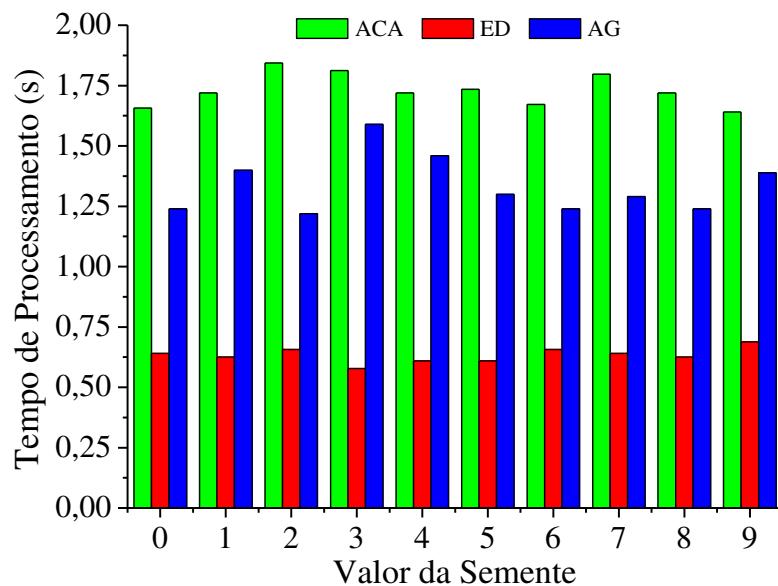


Figura 3.14 - Tempo de processamento requerido por cada estratégia evolutiva em função da semente considerada.

Nesta figura é possível observar que, para a função matemática e para as sementes consideradas, o AED foi a estratégia mais eficiente em termos do tempo total de processamento, seguida pelos AG e pelo ACA, mesmo para um número equivalente de avaliações da função objetivo. Este resultado já era esperado devido à estrutura organizacional de cada um dos algoritmos. No ACA existe um número muito superior de laços de repetição em relação ao AED e aos AG, necessários para testar as ramificações (formação de rios e mares). Esta característica implica, para o mesmo número de indivíduos na população dos outros algoritmos evolutivos considerados, um maior número de testes e, por consequência, em um maior tempo de processamento.

CAPÍTULO IV

RESOLUÇÃO DE PCOADs VIA APLICAÇÃO DO ACA

O presente capítulo tem por objetivo apresentar a aplicação do ACA na resolução de PCOADs com diferentes graus de complexidade, bem como comparar os resultados obtidos com os relatados na literatura especializada. Para essa finalidade, apresenta-se a seguir a metodologia empregada para a transformação do problema original contínuo em relação ao vetor de variáveis de controle em outro equivalente discreto.

4.1 Metodologia

A metodologia proposta nesta dissertação consiste na transformação do PCOAD original, contínuo em relação ao vetor de variáveis de controle, em um problema equivalente através da parametrização do vetor de variáveis de controle u . Neste caso, esse vetor u é discretizado usando n elementos de controle. Em cada subintervalo, o vetor de variáveis de controle u é considerado constante:

$$u \equiv u_i, \text{ para } t_i \leq t \leq t_{i+1} \quad (4.1.1)$$

Com esta aproximação, o problema a ser resolvido consiste na determinação das n variáveis de projeto (u_1, u_2, \dots, u_n), bem como da identificação do intervalo de tempo onde esta variável de controle está ativa.

Assim, deve-se garantir que o somatório de todos os n tamanhos de cada elemento de controle não ultrapasse o domínio do problema original. Neste caso, tem-se um problema com $2n$ variáveis de projeto, conforme ilustrado na Figura 4.1.

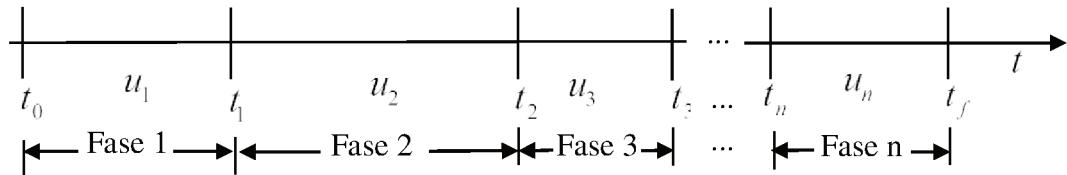


Figura 4.1- PCO definido por fases (reproduzido de Nascentes et al., 2012).

É importante ressaltar que a estratégia adotada para a representação do vetor de variáveis de controle apresenta as seguintes vantagens: *i*) facilidade de implementação e *ii*) facilidade de adequação a situações práticas na indústria e áreas afins. Todavia, enfatiza-se que esta apresenta como principal desvantagem a necessidade do aumento do número de elementos de controle (e, por consequência, do número total de variáveis de projeto) para perfis do vetor de variáveis de controle onde exige-se um maior grau de refinamento. Neste caso, poderia ter sido adotado, por exemplo, uma aproximação linear em cada um dos n elementos de controle.

Com o uso desta abordagem o problema original (contínuo) é convertido em outro equivalente (discretizado) onde deseja-se determinar o tamanho do elemento de controle, bem como o valor da variável de controle neste mesmo elemento. De forma prática, o ACA gera uma população de candidatos à solução do problema de otimização formado pelo tamanho do elemento de controle e do valor do controle. De posse destes valores, o sistema algébrico-diferencial pode ser integrado. Para esta finalidade, em todas as aplicações que serão apresentadas foi utilizado Método de Runge-Kutta 4^a e 5^a Ordem como integrador. Assim, com a integração das restrições, pode-se avaliar a função objetivo e associá-la com o respectivo candidato da população para que o algoritmo selecione a melhor solução na geração corrente e, consequentemente, com o avanço no número de gerações, obter então a solução do PCOAD.

4.2 Estudo de Casos

A seguir são apresentados e discutidos os resultados obtidos com a aplicação do ACA em diferentes PCOADS estudados na literatura especializada. Cabe ressaltar que estes foram escolhidos por apresentar diferentes graus de complexidade e por ter a solução ótima bem documentada na literatura.

4.2.1. Reator Batelada

Seja a reação química consecutiva $A \rightarrow B \rightarrow C$ que ocorre em um reator batelada (sem entrada e saída de massa do reator durante a operação), como apresentado por Bilous e Amundson (1956), e estudado por Marroquin e Luyben (1973), Luus e Okongwu (1999), Lobato e Steffen Jr. (2010) e Lobato et al. (2011).

Neste estudo de caso deseja-se maximizar a produção do componente B ao final do tempo total de operação, de modo que as equações de balanço de massa descritas a seguir sejam atendidas.

$$\frac{dx_1}{dt} = k_1 x_1 \quad x_1(0) = 0,95 \quad (4.2.1)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = k_1 x_1 - k_2 x_2 \quad x_2(0) = 0,05 \quad (4.2.2)$$

Neste equacionamento, x_1 é a concentração do reagente A (mol/l) e x_2 é a concentração do produto desejado B (mol/l). Os símbolos k_1 e k_2 representam as constantes de reação, dadas respectivamente pelas seguintes equações:

$$k_1 = 5,35 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-9000}{u}\right) \quad (4.2.3)$$

$$k_2 = 4,61 \times 10^{17} \exp\left(\frac{-1500}{u}\right) \quad (4.2.4)$$

onde u é variável de controle que deve ser determinada.

O tempo total de operação é fixado em $t_f = 30\text{min}$. Matematicamente, a função objetivo pode ser formulada como segue:

$$J = x_2(t_f) \quad (4.2.5)$$

O problema de controle ótimo padrão é, então, encontrar o perfil de temperatura (u), de modo que o índice de desempenho expresso pela Equação 4.2.5 seja maximizado. A variável de controle é limitada fisicamente por:

$$300 \leq u \leq 400 \quad (4.2.6)$$

Como apresentado por Lobato e Steffen Jr. (2010) e Lobato et al., (2011), este PCOAD possui índice diferencial igual a 1. Neste caso, a priori, não se espera encontrar nenhuma dificuldade de integração do sistema algébrico-diferencial.

Para a resolução deste problema são considerados os seguintes parâmetros no ACA: número máximo de gerações, $N_{max} = \{100, 200, 500\}$; número total de gotas de chuva, $N = 25$; número de rios, $N_{sr} = 8$ e fator de evaporação, $d_{max} = 10^{-5}$. Para a resolução deste problema foi considerado n igual a 10.

A Tabela 4.1 apresenta a influência do número máximo de gerações na qualidade da solução obtida pelo ACA para o problema do reator batelada considerando diferentes execuções com sementes iniciais distintas empregadas no gerador de números aleatórios adotado.

Tabela 4.1 - Influência do parâmetro N_{max} no valor da função objetivo para o problema do reator batelada.

N_{max}	J	N_{max}	J	N_{max}	J
100	0,756536	200	0,766543	500	0,767434
	0,764428		0,752411		0,767937
	0,762515		0,765118		0,767575
	0,755971		0,767571		0,767100
	0,762428		0,767577		0,767485
	0,767397		0,766169		0,767501
	0,767909		0,767094		0,767348
	0,764828		0,767752		0,767446
	0,761431		0,767188		0,767256
	0,761480		0,767728		0,767774

Nesta tabela pode-se observar, como esperado, que o aumento no número de gerações proporciona um resultado mais preciso em relação ao reportado na literatura. Todavia, às custas do aumento do número e avaliações da função objetivo. Já a Tabela 4.2 apresenta a influência do número de elementos de controle na qualidade da solução obtida $u = \{5, 10, 20\}$, considerando diferentes sementes para a execução do ACA. Para essa finalidade são considerados os seguintes parâmetros no ACA, $N_{max}=100$; número total de gotas de chuva, $N = 25$; o número de rios, $N_{sr} = 8$ e o fator de evaporação, $d_{max} = 10^{-5}$.

Tabela 4.2 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema reator batelada.

	J	N_{aval}		J	N_{aval}		J	N_{aval}
$u = 5$	0,767457	2764	$u = 10$	0,756536	2620	$u = 20$	0,739319	2596
	0,766467	2638		0,764428	2450		0,741207	2736
	0,767450	2742		0,762515	2486		0,720248	2696
	0,767241	2840		0,755971	2774		0,726765	2802
	0,767838	2692		0,762428	2528		0,691624	2802
	0,767478	2488		0,767397	2826		0,726538	2446
	0,767272	2852		0,767909	2708		0,742732	2846
	0,767435	2634		0,764828	2514		0,750437	2692
	0,767154	2314		0,761431	2378		0,609347	2338
	0,766869	2646		0,761480	2510		0,753239	2342

Intuitivamente, espera-se que o aumento do número de elementos de controle melhore o valor da função objetivo. Todavia, conforme observado na Tabela 3, esse aumento não resultou necessariamente na melhora do valor da função objetivo para todas as sementes consideradas na análise. Isto se deve ao fato de que o aumento do número de elementos de controle aumenta o número de variáveis do problema, o que implica maiores dificuldades para a obtenção de uma solução mais precisa para os parâmetros considerados pelo ACA nesta aplicação.

A Tabela 3 apresenta a comparação do resultado obtido com o ACA considerando dez elementos de controle com aqueles reportados pela literatura considerando diferentes técnicas de otimização.

Tabela 4.3 - Comparação dos dados obtidos com várias técnicas de controle ótimo.

Referência	J	N_{aval}
Luus e Okongwu (1999) - PDI*	0,768370	-
Lobato e Steffen Jr. (2010) - MPC	0,768311	10250
Lobato et. al. (2011) - ED	0,768369	4525
Lobato et al. (2011) - IDE	0,768370	2950
ACA	0,767909	2708

* Programação Dinâmica Iterativa.

Nesta tabela observa-se que os resultados obtidos pelo ACA são equivalentes aos reportados por outras estratégias em termos do valor da função objetivo. Em se tratando do número de avaliações da função objetivo N_{aval} , observa-se que o desempenho do ACA foi superior quando comparado com outras estratégias evolutivas (redução de quase 74% com relação ao MPC - *Multi-Particle Collision Algorithm*, de 40% com relação ao ED - *Algoritmo de Evolução Diferencial* e de 8% em relação ao IDE – *Improved Differential Evolution Algorithm*).

Na Figura 4.2 é apresentado o progresso do valor da função objetivo ao longo do processo evolutivo. Observa-se que rapidamente o ACA encontra a região onde o ótimo está localizado, sendo que a maior parte do número de gerações consideradas é utilizado para fins de refinamento da solução.

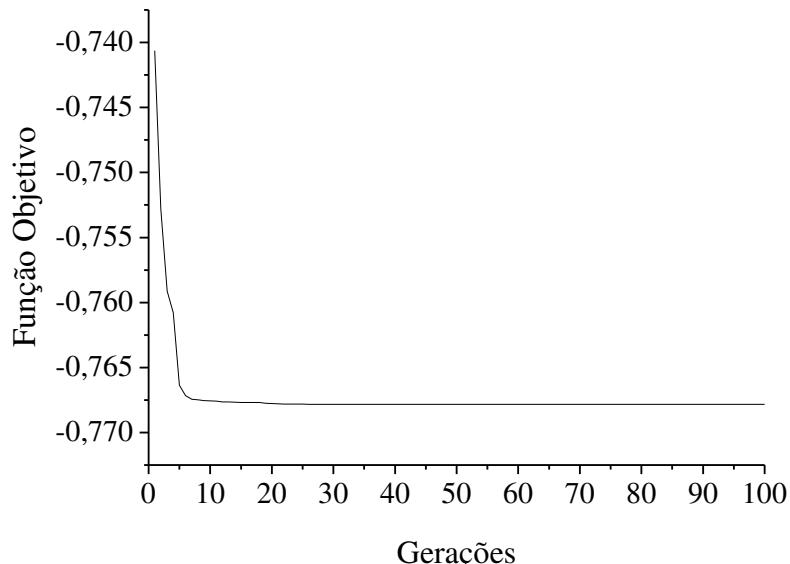


Figura 4.2 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema do reator batelada.

Nas Figuras 4.3 e 4.4 são apresentados os perfis referentes às variáveis de estado (x_1 e x_2) e a variável de controle (u), respectivamente.

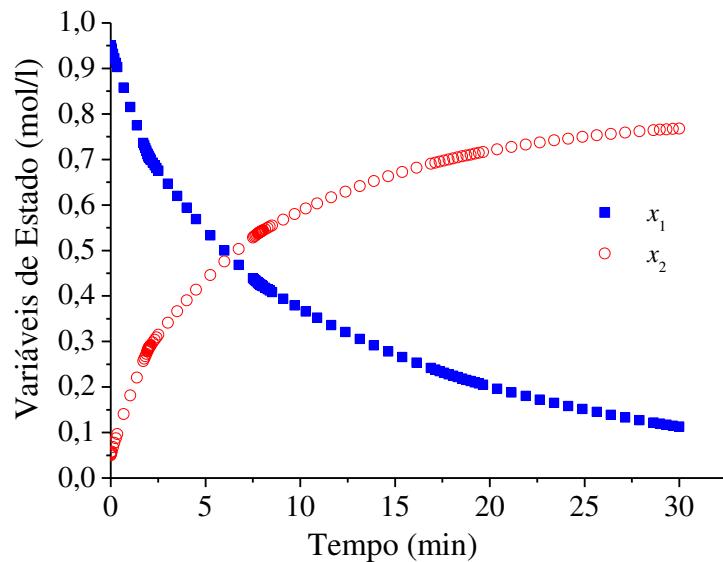


Figura 4.3 – Perfil das variáveis de estado no problema do reator batelada.

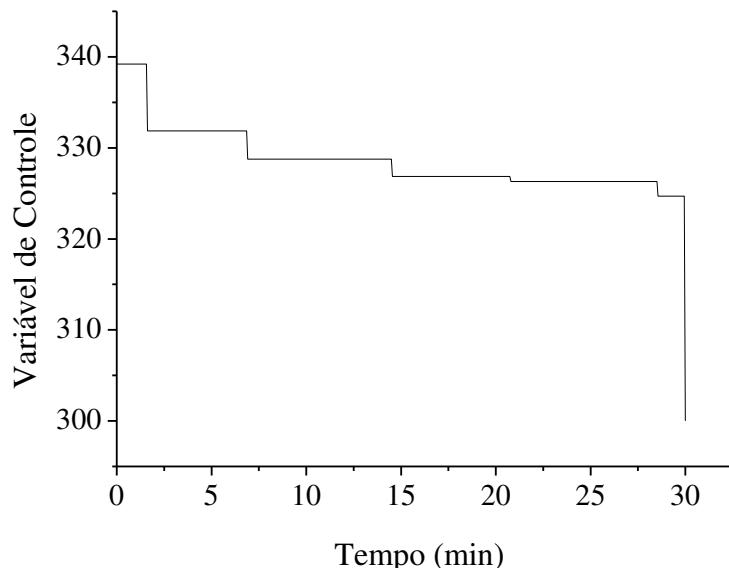


Figura 4.4 – Perfil da variável de controle no problema do reator batelada.

4.2.2. Isaac Newton

Este problema, proposto por Bryson e Ho (1975) e estudado por Feehery (1998), Lobato (2004) e Pfeifer (2007), consiste da minimização do arraste na extremidade de um cone de raio $r(t)$ e comprimento l em um escoamento hipersônico, conforme a Figura 4.5.

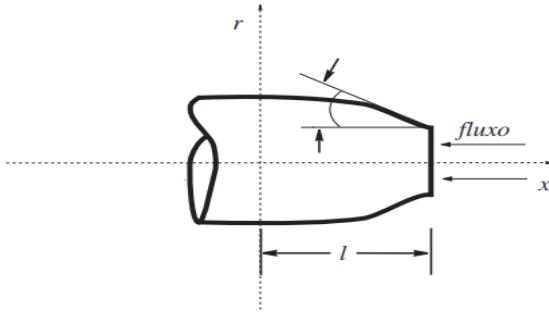


Figura 4.5 - Problema de Isaac Newton (Reproduzido de Pfeifer 2007).

Matematicamente este PCOAD é formulado como segue:

$$J = \min a(l) + \int_0^l b dx \quad (4.2.7)$$

$$\frac{dr}{dx} + u = 0 \quad (4.2.8)$$

$$\frac{da}{dx} + ru = 0 \quad (4.2.9)$$

$$b = \frac{ru^3}{1+u^2} \quad (4.2.10)$$

$$r(0) = r_0 \quad (4.2.11)$$

$$a(0) = \frac{r(0)^2}{2} \quad (4.2.12)$$

onde x é a distância axial, r é o raio do cone, u é a variável de controle e a é a tangente do ângulo entre a direção da velocidade e a tangente local à parede do cone. Conforme descrito por Lobato (2004), este problema apresenta índice diferencial igual a 1.

Para o ACA são utilizados os seguintes parâmetros: Número máximo de gerações, $N_{max} = 100$ número total de gotas de chuva, $N = 25$; o número de rios, $N_{sr} = 8$ e o fator de evaporação $d_{max} = 10^{-5}$, para os seguintes números de elementos de controle: $u = \{15, 20, 25\}$. A Tabela 4.4 apresenta a influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo considerando diferentes execuções com sementes iniciais distintas empregadas pelo gerador de números aleatórios adotado.

Tabela 4.4 - Dados obtidos para o problema de Isaac Newton.

	J	N_{aval}		J	N_{aval}		J	N_{aval}
$u = 15$	0,187484	2806	$u = 20$	0,187605	2982	$u = 25$	0,187960	2954
	0,187463	2778		0,187643	2886		0,188197	2940
	0,187622	2924		0,187592	2944		0,187674	2792
	0,187549	2844		0,187605	2840		0,187827	2962
	0,187612	2958		0,187554	2946		0,187891	2808
	0,187535	2854		0,187696	2776		0,187714	2864
	0,187536	2996		0,187476	2900		0,187587	2910
	0,187784	3040		0,187825	2876		0,187811	2858
	0,187562	2768		0,187550	2960		0,187997	2930
	0,187521	2996		0,187674	3022		0,187773	2776

De forma prática, observa-se nesta tabela (4.4), que um bom valor para a função objetivo é alcançado com 15 elementos de controle e que seu aumento não necessariamente conduz a um valor melhor para a função objetivo. Em termos do número de avaliações da função objetivo (N_{aval}), observa-se que, para os parâmetros considerados, este valor se mantém dentro de uma faixa de avaliações aceitável.

Já na Tabela 4.5 é apresentado um comparativo entre o ACA e os valores reportados na literatura usando os códigos DIRCOL código que resolve PCO descritos por EDOs de primeira ordem sujeitos a restrições de igualdade e/ou desigualdade nas variáveis de controle e/ou estado através da abordagem do método direto; sendo este, um conjunto de sub-rotinas desenvolvido por Stryk (1999) e implementado em Fortran (Lobato, 2004; Quinto, 2010) e COLDAE (sub-rotina geral para a solução de EDOs de valor no contorno, o método implementado é a colocação polinomial por partes em pontos gaussianos, acoplado a um método de projeção de Ascher- Petzold Quinto, 2010).

Tabela 4.5 - Comparaçāo dos dados obtidos com várias técnicas de controle ótimo.

<i>Referência</i>	J	N_{aval}
Lobato (2004) -	0,187408	-
Lobato (2004) -	0,187400	-
ACA	0,187463	2778

Analizando-se a Tabela 4.5 é possível observar que o valor ótimo encontrado é equivalente aos reportados pela literatura, sendo que o melhor valor encontrado pelo ACA é igual a 0,187463.

Nas Figuras. 4.6 - 4.8 são apresentados a evolução do valor da função objetivo, além dos perfis das variáveis de estado e de controle considerando 15 elementos de controle, respectivamente.

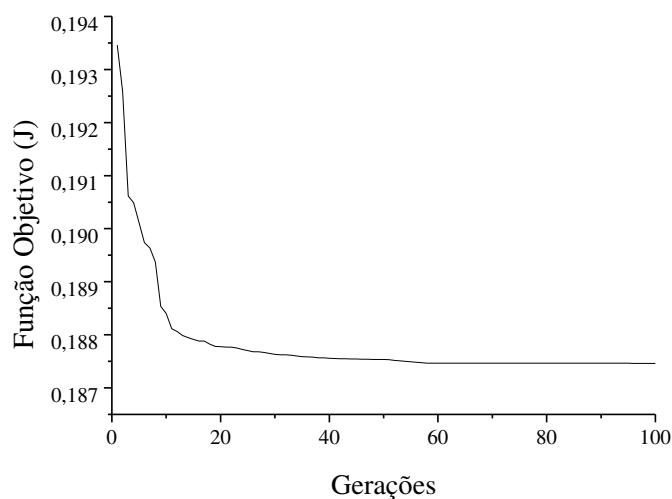


Figura 4.6 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Isaac Newton.

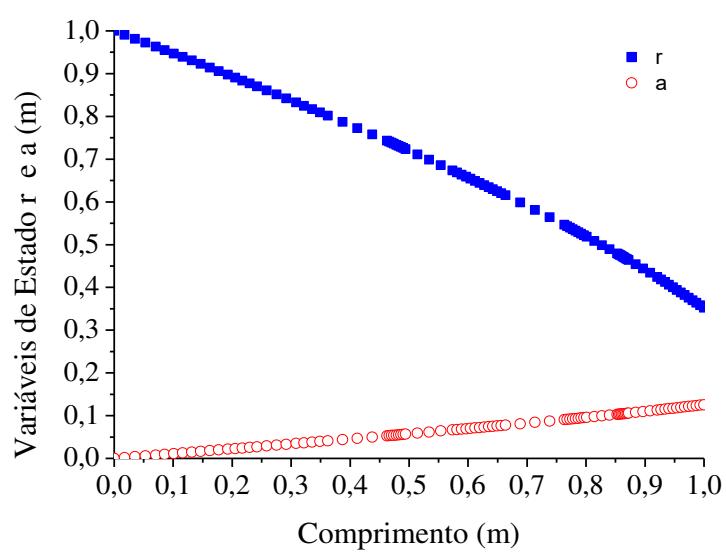


Figura 4.7 - Perfil das variáveis de estado para o problema de Isaac Newton.

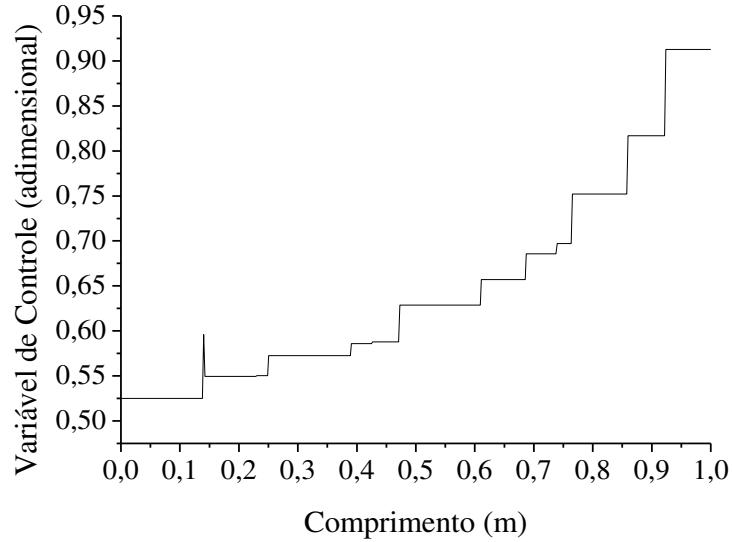


Figura 4.8 - Perfil da variável de controle para o problema de Isaac Newton.

4.2.3. Problema do Veículo

Este problema, estudado por Cuthrel e Biegler (1987), Logsdon e Biegler (1989), Feehery (1998) e Lobato (2004), consiste em minimizar o tempo necessário para que um veículo percorra uma distância sendo a sua posição e a sua velocidade conhecidas no início e no final do percurso. Matematicamente, este problema pode ser formulado como:

$$J = \min t_f \quad (4.2.13)$$

$$\dot{v} = a, \quad v(t_0) = 0, \quad v(t_f) = 0 \quad (4.2.14)$$

$$\dot{x} = v, \quad x(t_0) = 0, \quad x(t_f) = 300 \quad (4.2.15)$$

$$-2 \leq a \leq 1 \quad (4.2.16)$$

onde x e v representam as variáveis de estado (posição e velocidade), a representa a variável de controle (aceleração do Veículo), sujeita a um controle que implementa a ação liga-desliga.

A Tabela 4.6 apresenta a influência do número de elementos de controle na qualidade da solução encontrada pelo ACA considerando os seguintes parâmetros: Número máximo de gerações $N_{max} = 300$; número total de gotas de chuva, $N = 25$; o número de rios $N_{sr} = 8$ e o fator de evaporação $d_{max} = 10^{-5}$. Para essa finalidade são consideradas diferentes sementes iniciais para inicializar o gerador de números aleatórios adotado.

Tabela 4.6 - Dados obtidos para o problema do Veículo.

	J	N_{aval}		J	N_{aval}		J	N_{aval}
$u = 2$	30,003138	21443		30,004228	20817		30,000000	20673
	30,018355	18633		30,000006	21305		30,000000	19177
	30,003138	20245		30,000000	20887		30,051946	21105
	30,003138	20299		30,161643	22337		30,000129	21463
	30,003138	21935		30,000004	20335		30,081882	22021
	30,018355	19257		30,003138	16459		30,018355	20365
	30,003138	21227		30,005725	22235		30,003138	21459
	30,018355	21567		30,003143	21875		30,008559	21261
	30,018355	19603		30,003118	19557		30,000000	19491
	30,003138	17755		30,003138	17971		30,000076	21583

Com os resultados apresentados nesta tabela observa-se uma boa concordância entre o valor obtido pelo ACA (30,003138 min) e o valor analítico apresentado por Cuthrel e Biegler (1987), (30 min.).

A Figura 4.9 apresenta a evolução da função objetivo em relação às gerações. Nesta figura, observa-se que a maior parte do número de gerações requeridas é utilizada para o refinamento da solução. Já nas Figuras 4.10 e 4.11 são apresentados os perfis referentes à variável de estado e de controle considerando 3 elementos de controle, respectivamente.

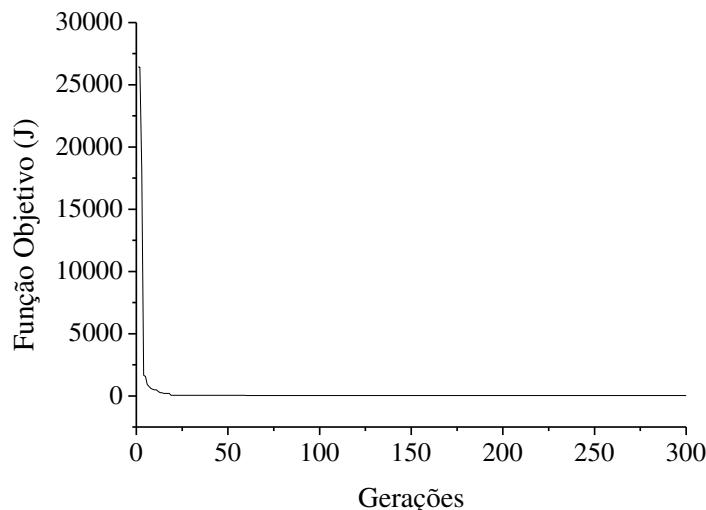


Figura 4.9 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema do Veículo.

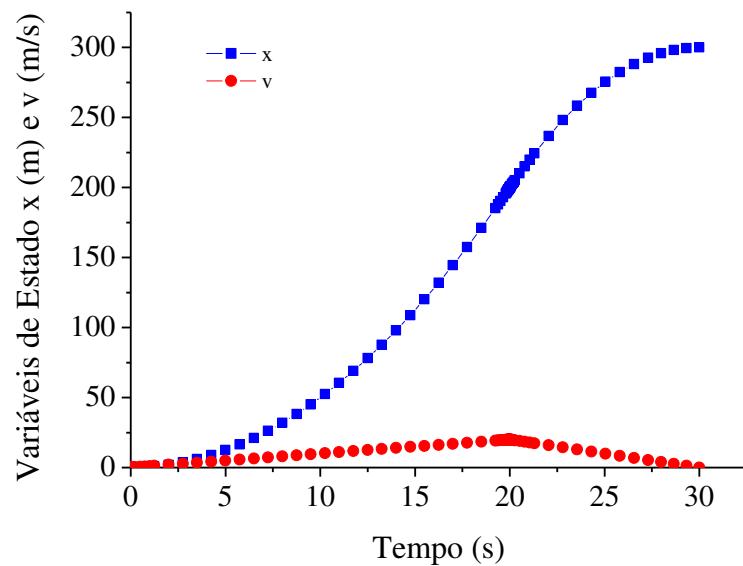


Figura 4.10 - Perfil das variáveis de estado (posição e velocidade) do problema do veículo.

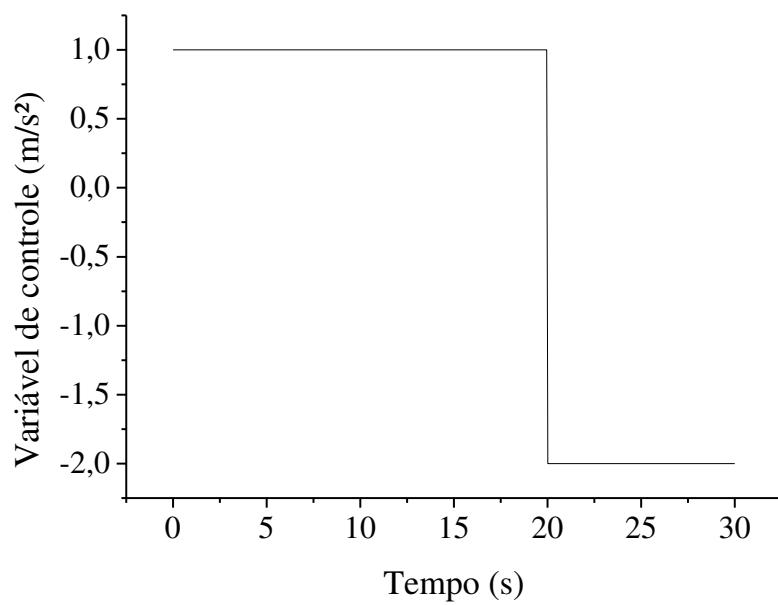


Figura 4.11 - Perfil da variável de controle do problema do veículo.

4.2.4. Mistura de Catalisadores

Este estudo de caso considera um reator de fluxo pistonado com dois catalisadores e duas reações conforme proposto por Gunn e Thomas (1965). Este problema foi posteriormente estudado por Logsdon (1990) utilizando a técnica de colocação ortogonal definida por elementos finitos, por Vassiliadis (1993) utilizando a técnica de parametrização no controle, por Lobato (2004) usando uma abordagem híbrida (abordagem direta associada com a abordagem indireta), e por Lobato e Steffen Jr. (2010) utilizando a parametrização de controle associado ao Algoritmo de Colisão de Partículas. Neste reator acontecem as seguintes reações em sequência:



onde, $S_i (i = 1, 2, 3)$; representam as espécies envolvidas neste sistema reacional, k_1 e k_2 representam as constantes de reação referente à transformação direta e inversa da reação reversível $S_1 \leftrightarrow S_2$, enquanto k_3 representa a constante de reação referente à transformação de $S_2 \leftrightarrow S_3$. Nesta aplicação deseja-se determinar a melhor forma de combinar os dois catalisadores considerados neste sistema reacional para fins da maximização da produção da espécie S_3 . Assim, tem-se:

$$J = 1 - x_1(t_f) - x_2(t_f) \quad (4.2.18)$$

Sujeito aos balanços de massas das espécies $S_1 (x_1)$ e $S_2 (x_2)$:

$$\frac{dx_1}{dt} = u(10x_2 - x_1) \quad x_1(0) = 1 \quad (4.2.19)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = u(x_1 - 10x_2) - (1-u)x_2 \quad x_2(0) = 0 \quad (4.2.20)$$

$$0 \leq u \leq 1 \quad t_f = 1 \quad (4.2.21)$$

em que t representa o tempo total de operação e u representa a fração de mistura dos catalisadores citados.

Conforme provado por Logsdon (1990), este PCOAD apresenta índice diferencial flutuante, que vai de um até três. Isto se deve ao fato da variável de controle aparecer na forma linear neste modelo. Durante a integração deste sistema existem três fases bem distintas, a saber, duas limitadas pela ativação da restrição de desigualdade para o controle e uma singular devido a presença da variável de controle na forma linear. Neste caso, conforme demonstrado por

Lobato (2004), estas três fases podem ser caracterizadas pela obtenção das condições de otimalidade para PCOADs.

A Tabela 4.7 apresenta a influência do número de elementos considerados no valor da função objetivo encontrada pelo ACA, onde os seguintes parâmetros foram considerados: N_{max} número total de gotas de chuva, $N = 25$; o número de rios, $N_{sr} = 8$ e o fator de evaporação, $d_{max} = 10^{-5}$. Foram consideradas sementes iniciais distintas para a inicialização do gerador de números aleatórios.

De forma geral observa-se nesta tabela que os resultados obtidos com diferentes números de elementos de controle são equivalentes em termos do valor da função objetivo, em comparação com os reportados na Tabela 4.8.

Tabela 4.7 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema da Mistura de Catalisadores.

	J	N_{aval}		J	N_{aval}		J	N_{aval}
$u = 3$	0,048056	2628	$u = 5$	0,048055	2914	$u = 10$	0,048016	2936
	0,048056	2528		0,048052	2864		0,048045	2960
	0,048056	2612		0,048053	2732		0,048048	2920
	0,048056	2304		0,048056	2740		0,048049	2894
	0,048056	2526		0,048036	2922		0,048049	3006
	0,048056	2586		0,048056	2828		0,048049	2932
	0,048056	2516		0,048056	2578		0,047976	2898
	0,048056	2514		0,047880	3062		0,048004	2958
	0,048056	2480		0,048054	2804		0,047877	2992
	0,048056	2480		0,048001	2994		0,048047	2908

A partir da análise da tabela acima observa-se que o valor da função objetivo obtido pela aplicação do ACA está em concordância com os reportados na literatura. Além disso, constata-se uma redução, em termos do número de avaliações da função objetivo, da ordem de 80,8%, de 54,15% e de 28,45% com relação aos resultados reportados usando MPC (*Multi-Particle Collision*), ED (*Differential Evolusion*) e o IDE (*Improved Differential Evolusion*), respectivamente.

Tabela 4.8 - Comparação entre os resultados obtidos e reportados na literatura para o problema da Mistura de Catalisadores.

Referência	J	N_{aval}
Lobato (2004)*	0,048057	-
Lobato e Steffen Jr. (2010)	0,047732	12000
Lobato e Steffen Jr. (2011)	0,048080	5025
Lobato e Steffen Jr. (2011)	0,048079	3220
ACA	0,048056	2304

*Método Híbrido

Já as Figuras 4.12 - 4.14 apresentam a evolução do valor da função objetivo em relação às gerações, e os perfis do vetor de variáveis de estado e de controle, respectivamente. Neste caso foram considerados três elementos de controle.

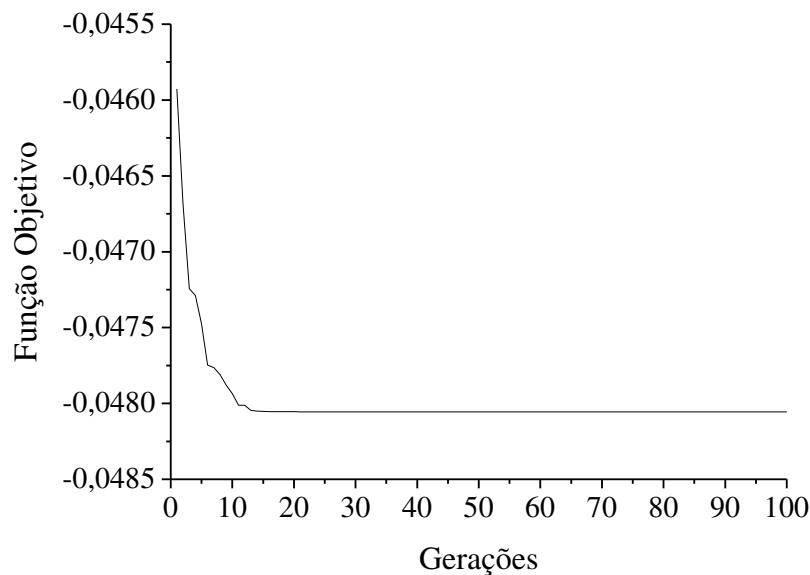


Figura 4.12 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Mistura de Catalisadores.

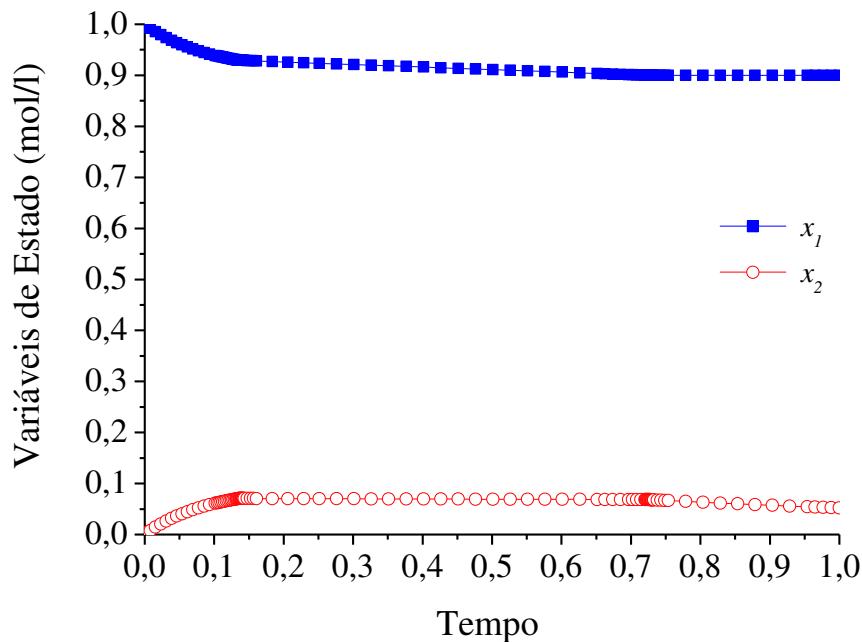


Figura 4.13 - Perfil das variáveis de estado para o problema da Mistura de Catalisadores.

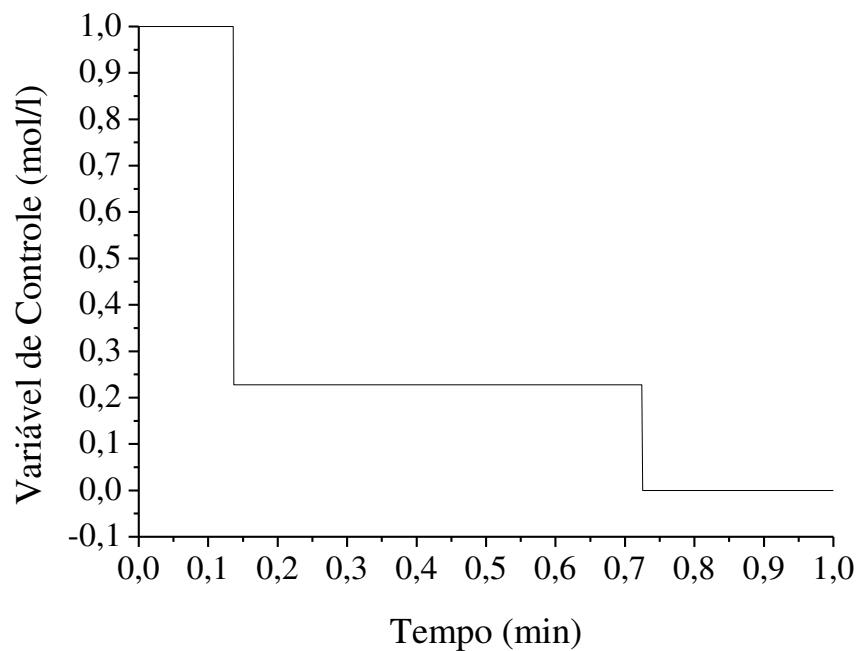


Figura 4.14 - Perfil da variável de controle do problema de Mistura de Catalisador.

A Tabela 4.9 apresenta os valores dos eventos (pontos discretizados que definem o tamanho do elemento de controle) e do valor da variável de controle neste respectivo elemento de controle.

Tabela 4.9 - Eventos e variáveis de controle para o problema da Mistura de Catalisadores.

Referência	t_{s1}	t_{s2}	u_1	u_2	u_3
Lobato (2008)	0,128	0,737	1,000	0,226	0,000
MPC	0,129	0,732	1,000	0,227	0,000
DE	0,128	0,733	1,000	0,227	0,000
IDE	0,128	0,733	1,000	0,226	0,000
ACA	0,136	0,725	1,000	0,227	0,000

Nesta tabela é possível observar que os valores encontrados pelo ACA estão em concordância com aqueles reportados pela literatura.

4.2.5. Pêndulo Linear

Este PCOAD, estudado por Bressan (2003) e por Rutquist e Edvall (2010), consiste num pêndulo linear em que se deseja encontrar a variável de controle u (força externa) de forma a maximizar a variável x_1 (posição), ao final do tempo total de operação t_f ($0 \leq t \leq 20$ min):

$$J = x_1(t_f) \quad (4.2.22)$$

Sujeito às seguintes restrições:

$$\frac{dx_1}{dt} = x_2 \quad (4.2.23)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = u - x_1 \quad (4.2.24)$$

$$x(t_0) = [0,0] \quad (4.2.25)$$

$$-1 \leq u \leq 1 \quad (4.2.26)$$

A Tabela 4.10 apresenta o efeito do número de elementos de controle na qualidade do valor da função objetivo encontrado pelo ACA considerando diferentes sementes para a inicialização do gerador de número aleatórios. Para essa finalidade são considerados os seguintes parâmetros no ACA: Número máximo de gerações $N_{max} = 100$, número total de gotas de chuva, $N = 25$; o número de rios, $N_{sr} = 8$ e o fator de evaporação, $d_{max} = 10^{-5}$.

Tabela 4.10 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema do Pêndulo Linear.

	J	N_{aval}		J	N_{aval}		J	N_{aval}
$u = 5$	8,360441	2868	$u = 10$	11,338431	2818	$u = 15$	12,548872	2828
	8,360441	2868		12,548325	2866		12,389138	2888
	7,408026	2852		12,409019	2796		12,405687	2860
	8,591878	2646		11,338431	2818		12,374550	2934
	8,591878	2646		12,028737	2798		12,258277	2910
	8,585475	2700		12,413759	2856		11,480945	2828
	7,393089	2902		12,549657	2846		10,824878	2746
	7,407771	2868		12,548325	2866		12,408367	2846
	8,591423	2946		12,409019	2796		10,377496	2840
	7,408033	2610		11,520055	2876		10,799080	2882

Nesta tabela é possível observar que, a partir do uso de dez ou mais elementos de controle, os valores obtidos para a função objetivo estão em concordância com o valor reportado por Rutquist e Edvall (2010) de 12,612223, obtido com a aplicação do *solver* CPLEX, sendo possível observar esse valor ótimo após 206 avaliações.

A Figura 4.15 apresenta a evolução do valor da função objetivo em relação ao número de gerações.

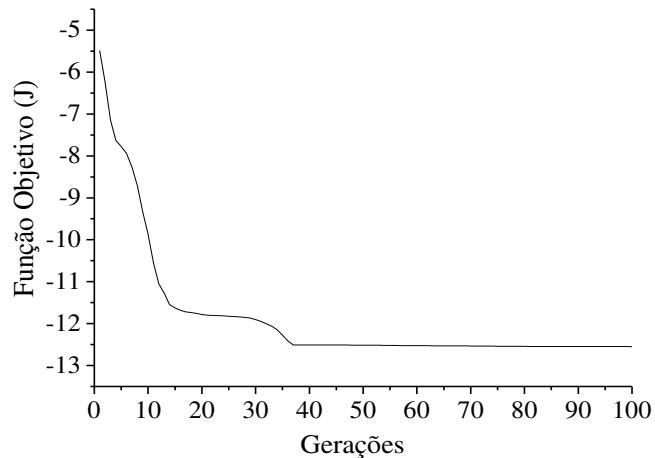


Figura 4.15 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema do Pêndulo Linear.

Já nas Figuras 4.16 e 4.17 são apresentados os perfis das variáveis de estado e de controle, respectivamente.

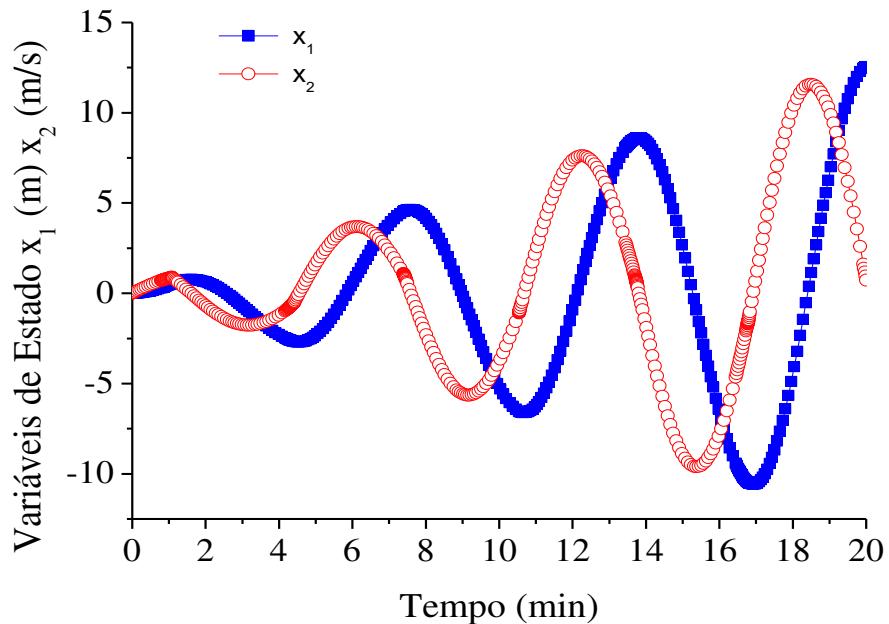


Figura 4.16 - Perfil das variáveis de estado para o problema do Pêndulo Linear.

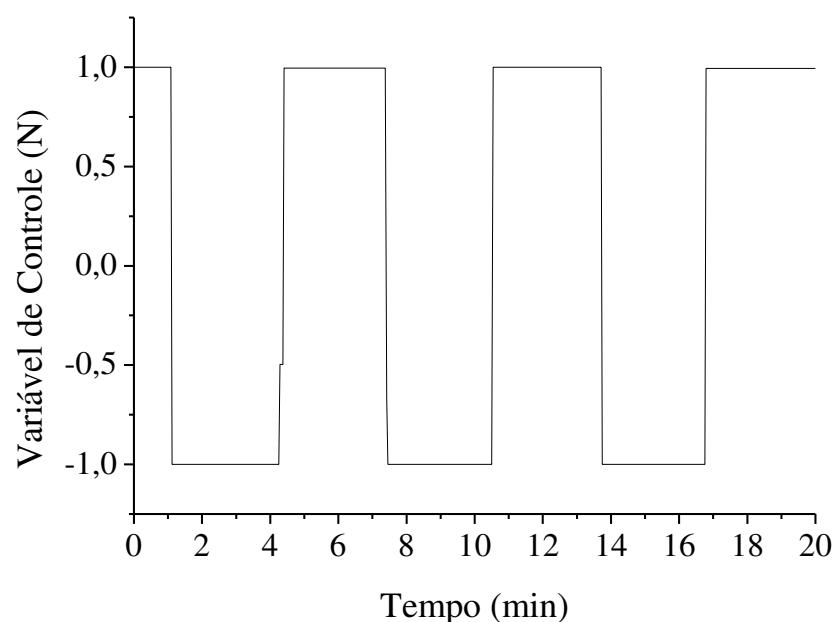


Figura 4.17 - Perfil da variável de controle do problema do Pêndulo Linear.

4.2.6. Jacobson – Caso 1

Este PCOAD com índice diferencial superior (maior que um) foi proposto e resolvido primeiramente por Jacobson et al., (1970) através da aplicação de Programação Dinâmica Iterativa. Matematicamente, este problema com índice diferencial igual a 5 é formulado como segue:

$$J = \min x_3 \quad (t_f = 5) \quad (4.2.27)$$

$$\dot{x}_1 = x_2 \quad x_1(0) = 0 \quad (4.2.28)$$

$$\dot{x}_2 = u \quad x_2(0) = 1 \quad (4.2.29)$$

$$\dot{x}_3 = x_1^2 \quad x_3(0) = 0 \quad (4.2.30)$$

$$-1 \leq u \leq 1 \quad (4.2.31)$$

onde x_i ($i = 1, 2, 3$), é o vetor de variáveis de estado e u é a variável de controle.

Dadebo e McAuley (1995) resolveram este problema utilizando a abordagem direta através da aplicação do algoritmo de Programação Dinâmica Iterativa. Posteriormente, Luus (2001) resolveu o mesmo problema usando o Algoritmo de Luus-Jaakola. Recentemente, Nascentes et al. (2012) resolvem o PCO através da aplicação do Algoritmo de Evolução Diferencial.

Para a aplicação do ACA são consideradas os seguintes parâmetros: Número máximo de gerações (N_{max} número total de gotas de chuva, $N = 25$; o número de rios, $N_{sr} = 8$ e o fator de evaporação $d_{max} = 10^{-5}$. Além disso, considera-se o seguinte conjunto de elementos de controle: $\{3, 5, 10\}$, bem como a execução considerando dez sementes iniciais distintas, conforme descrito na Tabela 4.11.

Tabela 4.11 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema de Jacobson - Caso 1.

	J	N_{aval}		J	N_{aval}		J	N_{aval}
	0,292519	2896		0,277251	3004		0,298090	2878
	0,281411	2810		0,329334	2860		0,325728	2772
	0,269996	2902		0,276322	2798		0,270430	2958
$u = 3$	0,294296	2924	$u = 5$	0,275811	2750	$u = 10$	0,271883	2944
	0,277759	2838		0,268853	2824		0,271334	2984
	0,312311	2752		0,271102	2932		0,289929	2870
	0,292519	2896		0,271753	2970		0,274474	2954

0,281411	2810	0,277327	2842	0,271389	2938
0,269996	2902	0,282702	3000	0,274529	2916
0,294296	2924	0,273006	2826	0,271240	2876

A partir da análise da Tabela 4.11, em comparação com os resultados reportados pela literatura e apresentados na Tabela 4.12, fica evidenciada a qualidade da solução encontrada pelo ACA em comparação com outras abordagens.

Jacobson et al., (1970) encontraram o mínimo em 0,2771; Dadebo e McAuley (1995) encontraram o mínimo em 0,269 usando 80 elementos de controle de tamanho uniforme. Já Luus (1995), encontrou o valor mínimo em 0,268395 usando programação dinâmica iterativa com 4 elementos de controle variáveis. Anos mais tarde, Luus (2001) encontrou o valor de 0,268394 usando 5 elementos de controle variáveis e o Algoritmo de Luus-Jaakola com 200000 avaliações da função objetivo. Já Nascentes et al., (2012) encontraram o valor de 0,268439 através da aplicação do Algoritmo de Evolução Diferencial, envolvendo neste caso 50100 avaliações da função objetivo.

Em termos do número de avaliações da função objetivo, observa-se um ganho da ordem de 985,88% e 94,36% em relação aos Algoritmos de Luus-Jaakola e de Evolução Diferencial, quando comparados ao ACA.

Tabela 4.12 - Comparação dos dados obtidos com várias técnicas de controle ótimo.

Referência	J	N_{aval}
Jacobson et al., (1970)	0,2771	
Dadebo e McAuley (1995)	0,269	-
Luus (1995)	0,268395	-
Luus (2001)	0,268394	200000
Nascentes et. al. (2012)	0,268439	50100
ACA	0,268853	2824

A Figura. 4.18 apresenta a evolução do valor da função objetivo em relação ao número de gerações. Já nas Figuras 4.19 e 4.20 são apresentados os perfis referentes às variáveis de estado e de controle, respectivamente.

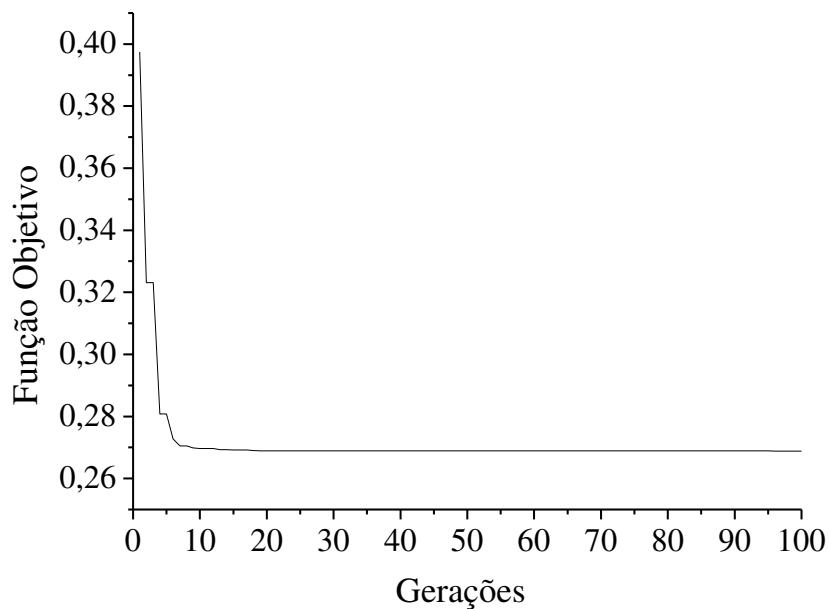


Figura 4.18 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Jacobson - Caso 1.

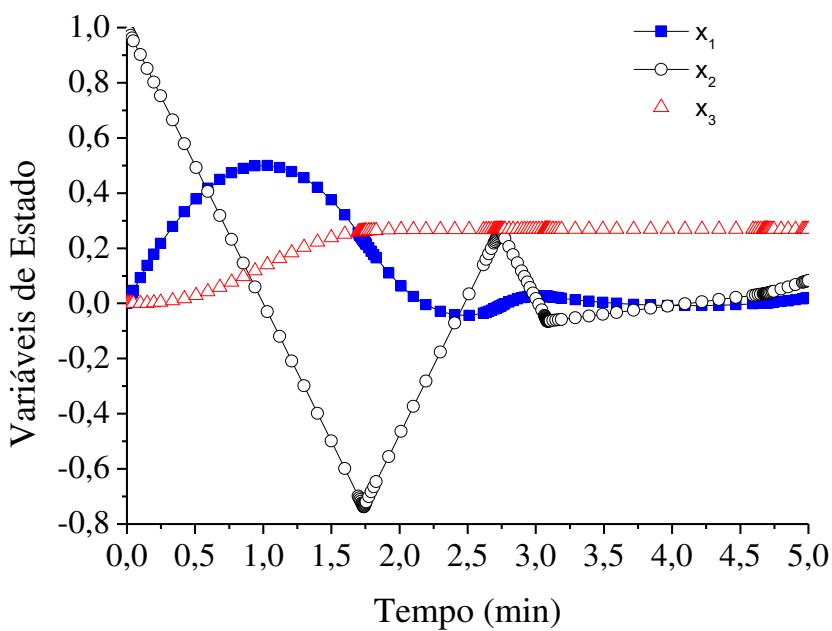


Figura 4.19 - Perfil das variáveis de estado para o problema de Jacobson - Caso 1.

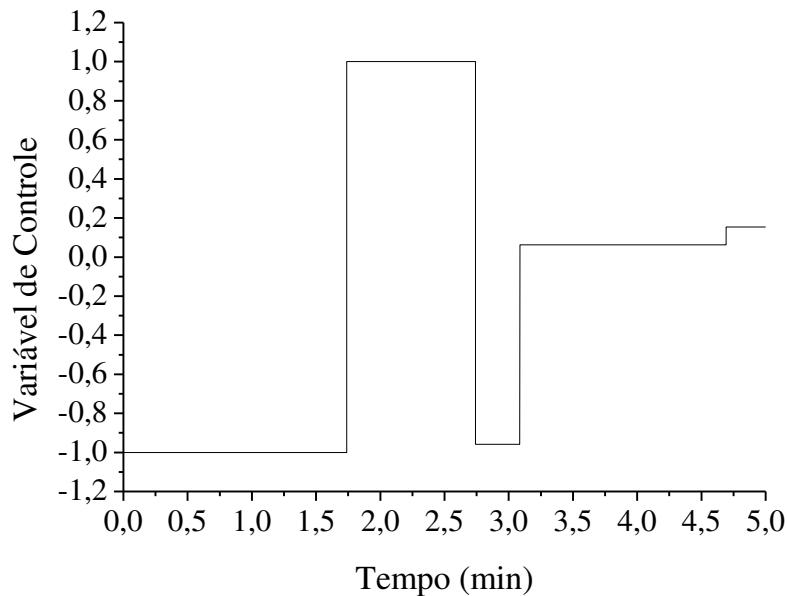


Figura 4.20- Perfil da variável de controle para o problema de Jacobson - Caso 1.

4.2.7. Jacobson – Caso 2

Este estudo de caso também foi proposto por Jacobson et al., (1970) e estudado por Dadebo e McAuley (1995) através da aplicação do algoritmo de Programação Dinâmica Iterativa. Posteriormente, Luus (2001) resolveu o mesmo problema usando o Algoritmo de Luus-Jaakola. Mais recentemente, Nascentes et al. (2012), resolvem o PCO através da aplicação de uma outra técnica evolutiva, a saber, o Algoritmo de Evolução Diferencial. Matematicamente, este PCOAD possui índice diferencial igual a 3 e se difere do estudo de caso anterior pela mudança na terceira equação diferencial:

$$J = \min x_3 \quad (t_f = 5 \text{ min}) \quad (4.2.32)$$

$$\dot{x}_1 = x_2 \quad x_1(0) = 0 \quad (4.2.33)$$

$$\dot{x}_2 = u \quad x_2(0) = 1 \quad (4.2.34)$$

$$\dot{x}_3 = x_1^2 + x_2^2 \quad x_3(0) = 0 \quad (4.2.35)$$

$$-1 \leq u \leq 1 \quad (4.2.36)$$

Para este estudo, Jacobson et al. (1970) reportaram o mínimo em 0,8285. Dadebo e McAuley (1995) encontraram o valor de 0,754016 usando 80 elementos de controle de tamanho uniforme. Luus (1995), usando programação dinâmica iterativa com 10 elementos de variáveis de controle, obteve 0,7539848. Luus (2001), usando 12 elementos de controle e o Algoritmo de

Luus-Jaakola, encontrou o valor ótimo de 0,7539853, com 200000 avaliações da função objetivo. Já Nascentes et al., (2012) encontraram o valor de 0,754151 para o PCOAD usando 5 elementos de controle.

A Tabela 4.13 apresenta a influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo considerando os seguintes parâmetros no ACA: Número máximo de gerações $N_{max} = 100$, número total de gotas de chuva, $N = 25$; o número de rios, $N_{sr} = 8$ e o fator de evaporação, $d_{max} = 10^{-5}$. Além disso, utiliza-se dez sementes iniciais aleatórias empregadas no gerador de números aleatórios para a obtenção dos resultados apresentados a seguir.

Tabela 4.132 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema de Jacobson - Caso 2.

	J	N _{aval}		J	N _{aval}		J	N _{aval}
u=3	0,764235	3000		0,755887	2868		0,774181	2890
	0,763438	2700		0,756992	2852		0,759721	2928
	0,754868	2886		0,774930	2898		0,755783	2938
	0,755604	2932		0,754286	2900		0,764966	2930
	0,766707	2816		0,762900	2880		0,799462	2798
	0,763596	2882		0,754494	2884		0,758766	2830
	0,765942	2906		0,774785	2938		0,769175	2860
	0,766079	2864		0,785802	2792		0,773609	2836
	0,763438	2816		0,764414	2896		0,755666	2814
	0,754533	2892		0,754225	2974		0,767989	2814

Com os resultados obtidos, observa-se boa concordância entre estes e os reportados pela literatura especializada. Todavia, quando compara-se o número de avaliações da função objetivo requeridas pelo processo de otimização, percebe-se uma redução da ordem de 98,51% em relação ao Algoritmo de Luus-Jaakola.

Tabela 4.14 - Comparação entre os valores obtidos pelo ACA em relação aos reportados pela literatura para o problema de Jacobson - Caso 2.

<i>Referência</i>	<i>J</i>	<i>N_{aval}</i>
Jacobson et al. (1970)	0,8285	
Dadebo e McAuley	0,754016	-
Luus (1995)	0,7539848	-
Luus (2001)	0,7539853	200000
Nascentes et. al. (2012)	0,754151	-
ACA	0,754225	2974

A Figura 4.21 apresenta a evolução do valor da função objetivo em relação ao número de gerações. Já nas Figuras. 4.22 e 4.23 são apresentados os perfis referentes às variáveis de estado e de controle, respectivamente.

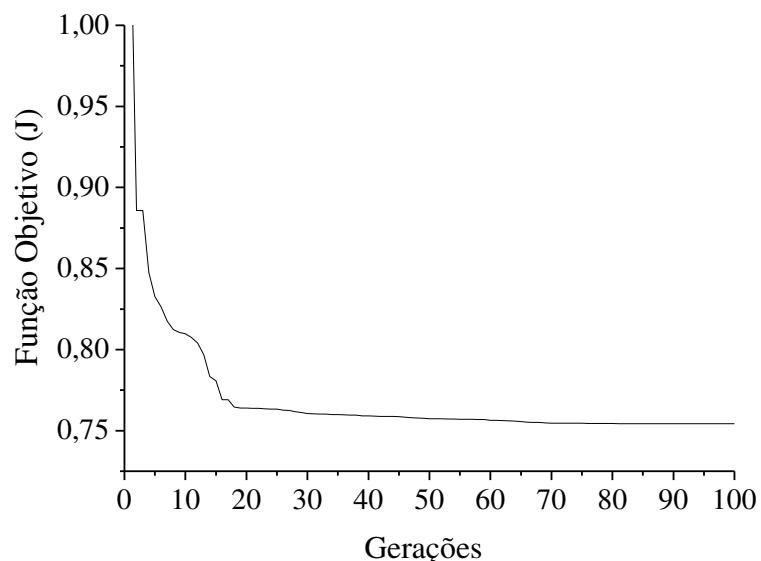


Figura 4.21 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Jacobson - Caso 2

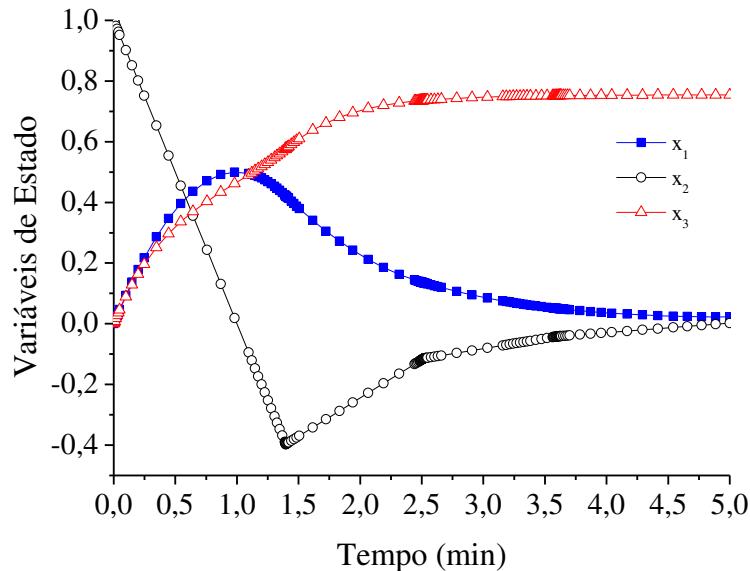


Figura 4.22 - Perfil das variáveis de estado para o problema de Jacobson - Caso 2.

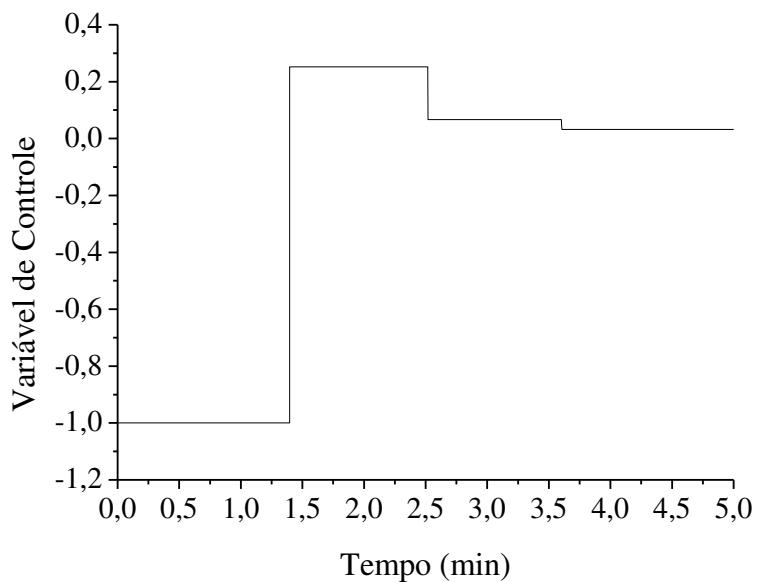


Figura 4.23 - Perfil das variáveis de controle para o problema de Jacobson - Caso 2.

4.2.8. Modelagem Matemática do Crescimento de Tumores

Modelar matematicamente fenômenos complexos caracteriza-se como uma tarefa bastante difícil. Um exemplo prático desta dificuldade é observada em estudos que envolvem a interação entre células normais, imunes e tumorais, observadas na modelagem matemática que representa a evolução destas células em um problema real. Apesar deste modelo apresentar características que o tornam bastante complexo, inúmeros trabalhos na literatura especializada

têm dedicado esforços visando a criação de modelos matemáticos que possam representar satisfatoriamente bem o comportamento destas células. Dentro destes modelos, pode-se citar um dos mais empregados para essa finalidade, a saber, o proposto e estudado por Pillis e Radunskaya (2001; 2003). Este apresenta um sistema de equações diferenciais ordinárias empregado para fins do tratamento de tumores por quimioterapia. Matematicamente, o modelo proposto por estes autores é descrito pelo seguinte conjunto de equações diferenciais:

$$\dot{N} = r_2 N(1 - b_2 N) - c_4 TN - a_3 u \quad (4.2.37)$$

$$\dot{T} = r_1 T(1 - b_1 T) - c_2 IT - c_3 TN - a_2 u \quad (4.2.38)$$

$$\dot{I} = s + \frac{\rho IT}{\alpha + T} - c_1 IT - d_1 l - a_1 u \quad (4.2.39)$$

Neste modelo, $I(t)$ representa a concentração de células imunes do sistema imunológico no tempo t ; $T(t)$ representa a concentração de células tumorais no tempo t ; $N(t)$ representa a concentração de células no tempo t e u representa a variável de controle responsável pela administração de drogas e, consequentemente, pelo controle da concentração de células tumorais. O parâmetro a_i está relacionado com as taxas de morte celular; b_i representa a capacidade de sobrevivência; c_i representa a taxa de competição entre cada uma das espécies envolvidas; d_i representa a taxa de mortalidade; r_i está relacionado com a taxa de crescimento associado a cada espécie de célula; s é a taxa de fonte de entrada de células imunes; α representa a curva de resposta imune do sistema e ρ é a taxa de resposta imune. Os índices $i = 1, 2, 3$, identificam os parâmetros relacionados às células tumorais, normais e imunológicas, respectivamente.

A presença de células tumorais estimula a resposta imunológica, representada pela expressão positiva de crescimento não-linear:

$$\frac{\rho I(t)T(t)}{\alpha + T(t)} \quad (4.2.40)$$

Sabendo que as células tumorais competem conforme um sistema presa-predador, o termo TN aproxima a probabilidade de que ocorra um encontro entre as células tumorais (T) e as normais (N) e o termo IT descreve a interação entre a presa (T) e o predador (I).

Machado et al. (2010), a partir do uso do modelo apresentado, determinaram um protocolo ótimo para a administração de drogas utilizado para o tratamento de tumores através da aplicação do algoritmo MODE (*Multi-objective Optimization Differential Evolution*). Neste

trabalho foram considerados como objetivos a minimização da concentração de células cancerígenas e a minimização da concentração de droga que deve ser administrada ao longo do período de tratamento.

Neste trabalho considera-se apenas um único objetivo, a saber, a minimização da concentração de células tumorais ao final do tratamento, dado pela equação abaixo:

$$J = \min \int T dt \quad (4.2.41)$$

Para fins de aplicação, no presente trabalho foram considerados os parâmetros propostos por Pillis e Radunskaya (2001; 2003) e que não enfatizam nenhum tipo de tumor em particular. Estes foram escolhidos por estes autores de forma a garantir a estabilidade do sistema, bem como a obtenção de uma resposta fisicamente viável para o fenômeno em questão. Assim, são considerados os seguintes parâmetros (Pillis e Radunskaya, 2001): $a_1 = 0,2$; $a_2 = 0,3$; $a_3 = 0,1$; $b_1 = b_2 = 1$; $c_1 = c_3 = c_4 = 1$; $c_2 = 0,5$; $d_1 = 0,2$; $r_1 = 1,5$; $r_2 = 1$; $s = 0,33$; $\alpha = 0,3$ e $\rho = 0,01$. Uma descrição detalhada sobre a escolha dos parâmetros pode ser encontrada em Pillis e Radunskaya, (2001; 2003) e Silveira (2007). Já para a resolução do PCOAD foram utilizados os seguintes parâmetros no ACA: Número máximo de gerações $N_{max} = 50$, número total de gotas de chuva, $N = 20$; o número de rios, $N_{sr} = 8$ e o fator de evaporação $d_{max} = 10^{-5}$, para os seguintes números de elementos de controle: $u = \{5, 10, 15\}$.

A Tabela 4.15 apresenta a influência do número de elementos considerados no valor da função objetivo encontrada pelo ACA considerando diferentes sementes para a inicialização do gerador de números aleatórios.

Tabela 4.15 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema do crescimento de tumores.

	J	N_{aval}		J	N_{aval}		J	N_{aval}
	3,514175	1041		3,514177	1035		3,514183	1037
	3,514175	1063		3,514186	1052		3,514181	1087
	3,514178	1025		3,514175	985		3,514175	1003
$u = 5$	3,514175	1025	$u = 10$	3,514175	991	$u = 15$	3,514178	1035
	3,514175	987		3,514176	993		3,514183	1141
	3,514175	983		3,514179	1029		3,514179	1049
	3,514176	1023		3,514176	1079		3,514175	987
	3,514175	1011		3,514183	1013		3,514176	1121

3,514175	1067	3,514175	989	3,514175	971
3,514175	1011	3,514180	1061	3,514175	1063

Nesta tabela observa-se que o ACA sempre convergiu para um mesmo valor de função objetivo. Apesar desta aplicação não tratar do enfoque multiobjetivo, ressalta-se que o valor encontrado pelo ACA está em concordância com o reportado por Machado et al., (2010).

A Figura 4.24 apresenta a evolução do valor da função objetivo em relação ao número de gerações consideradas pelo ACA. Em termos práticos observa-se que o ACA encontrou rapidamente uma região onde o ótimo está localizado, sendo que a maior parte do tempo de processamento é empregada para o refinamento desta solução. Já nas Figuras. 4.25 e 4.26 são apresentados os perfis referentes às variáveis de estado e de controle, respectivamente.

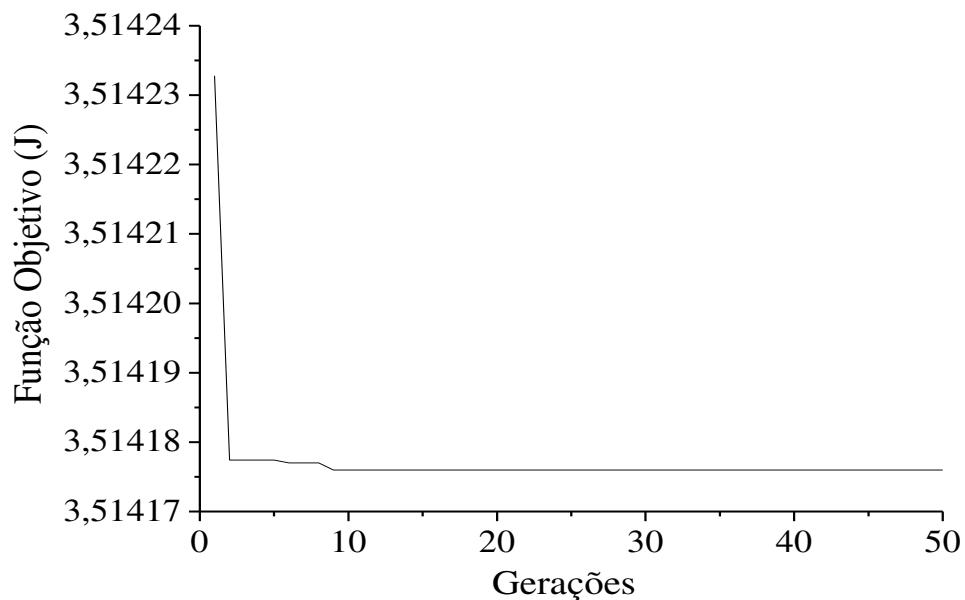


Figura 4.24 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema do Crescimento de Tumores.

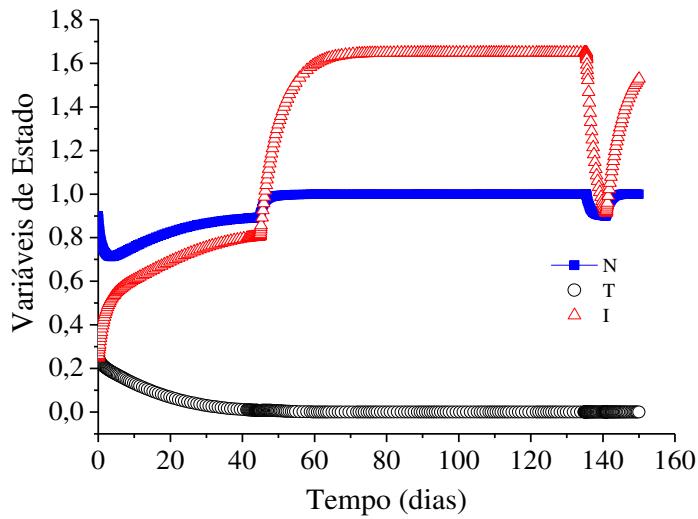


Figura 4.25 - Perfil das variáveis de estado do problema do Crescimento de Tumores.

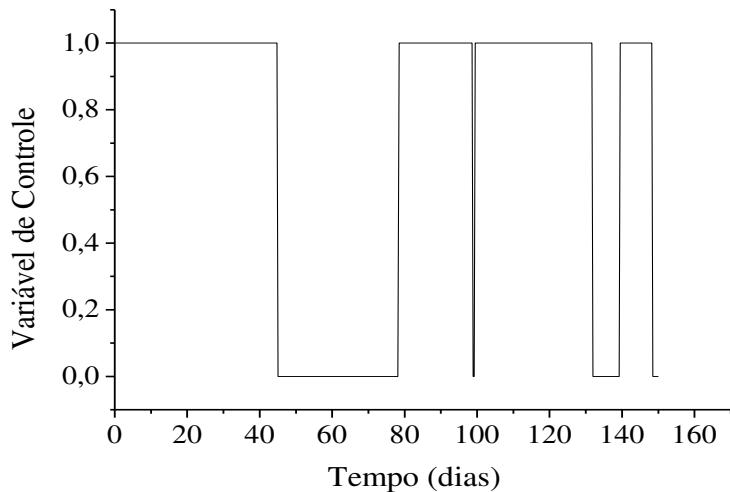


Figura 4.26 - Perfil da variável de controle do problema do Crescimento de Tumores.

Na Figura 4.25 é possível observar que, para a estratégia de controle obtida pelo a concentração de células tumorais rapidamente tende a desaparecer, atendendo neste caso o objetivo do PCOAD. Todavia, observa-se que a concentração de drogas que deve ser administrada é elevada. Neste caso, o paciente poderá apresentar efeitos colaterais oriundos do tratamento. Para reduzir tal efeito, poderia ser adotado o contexto multiobjetivo, conforme sugerido por Machado et al. (2010) ou, alternativamente, poderia ser adicionada uma restrição ao problema resolvido nesta dissertação, levando à limitação da concentração máxima de drogas que deve ser administrada ao paciente.

4.2.9. Problema de Goddard

Este problema foi proposto pelo americano R. H. Goddard em 1919, durante a construção de um foguete para ser disparado verticalmente de modo a atingir altitudes elevadas (um foguete de sondagem), (Lobato et al., 2011). Nesta aplicação deseja-se encontrar o perfil do impulso necessário para que a altitude final do foguete seja maximizada, sendo conhecidas a massa inicial do foguete, a massa de combustível utilizada e as características de arrasto do foguete. Matematicamente, as equações que descrevem esse fenômeno são dadas por:

$$x_3 \dot{x}_1 = u - D(x_1, x_2) - x_3 G(x_2) - x_3 G(x_2) \quad (4.2.42)$$

$$\dot{x}_2 = x_1 \quad (4.2.43)$$

$$c \dot{x}_3 = -u \quad (4.2.44)$$

onde x_1 representa a velocidade vertical, x_2 representa a distância radial a partir do centro da Terra, x_3 representa a massa do foguete, u é o impulso do foguete, D é o arrasto aerodinâmico, g é a força gravitacional por unidade de massa, c é o impulso específico do combustível de foguete (considerado constante) e $[x_1(0) \ x_2(0) \ x_3(0)] = [x_{10} \ x_{20} \ x_{30}]$ representa o vetor das condições iniciais associadas ao sistema diferencial apresentado.

Como descrito anteriormente, deseja-se determinar u de modo a maximizar $x_2(t_f)$, sabendo que $x_3(t_f) = x_{3f}$:

$$J = \max x_2(t_f) \quad (4.2.45)$$

$$0 \leq u \leq u_{max} \quad (4.2.46)$$

Para esta aplicação são considerados os seguintes parâmetros (Lobato et al, 2011): $c = 0,5$; $\beta = 500 \text{ milhas}^{-1}$; $x_{30} = 1$; $x_{3f} = 0,6$; $u_{max} = 620$; $\rho_0 C_D = 620$; $G_0 = 32,2 \text{ kft/sec}^2$ e $x_{20} = 0$ (Raio da Terra = $2,1 \times 10^7$ milhas). Além disso, considera-se ainda que:

$$D = \frac{1}{2} \rho_0 x_2^2 C_D S \exp(-\beta x_1) \quad (4.2.47)$$

$$G = \frac{1}{x_1^2} \quad (4.2.48)$$

Esse problema foi estudado por Lobato et al., (2011), onde foi considerado o Algoritmo de Evolução Diferencial (DE), bem como uma versão melhorada desta técnica, a saber, o IDE (*Improved Differential Evolution*).

A Tabela 4.16 apresenta a influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo encontrada pelo ACA considerando diferentes sementes para a inicialização do gerador de números aleatórios. Para a obtenção dos valores apresentados nesta tabela são considerados os seguintes parâmetros no ACA: Número máximo de gerações N_{max} número total de gotas de chuva, $N = 25$; o número de rios, $N_{sr} = 8$ e o fator de evaporação $d_{max} = 10^{-5}$.

Tabela 4.163 - Influência do número de elementos de controle no valor da função objetivo para o problema de Goddard.

	J	N_{aval}		J	N_{aval}		J	N_{aval}
$u = 3$	50,254428	597	$u = 5$	50,189903	627	$u = 10$	47,543977	745
	50,070017	675		49,260313	689		50,241315	663
	50,174473	575		50,087468	657		50,253122	685
	50,257127	651		50,253385	723		50,077130	751
	42,014159	773		49,132866	791		50,153274	635
	50,251461	633		50,207285	713		50,164577	603
	50,188789	685		50,254445	777		50,252814	663
	49,442141	709		49,027164	641		50,255615	665
	50,189903	627		47,543977	745		49,077920	687
	50,231685	729		50,241315	663		50,228978	639

Pela Tabela 4.16, nota-se que, para os valores de controle analisados, houve uma pequena variação em termos do número de avaliações para diferentes u . A Tabela 4.17 apresenta a comparação entre os resultados obtidos pelo ACA e por outras estratégias evolutivas.

Tabela 4.17 - Comparaçāo entre os resultados obtidos pelo ACA e por outras estratégias evolutivas para o problema de Goddard.

Referência	J	N_{aval}
EAD	50,874	5000
IDE	50,873	2900
ACA	50,257	651

Na Tabela 4.17 é possível observar que o valor ótimo encontrado pelo ACA é menor do que aqueles obtidos através do EAD e do IDE. Todavia, este resultado foi encontrado para um número menor de avaliações da função objetivo do que a referência utilizada. Na Tabela 4.18 são apresentados os eventos computados por diferentes estratégias. Subsequente à Tabela 4.18, a Figura 4.27 contempla a função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Goddard, onde é possível observar o valor ótimo após 10 gerações.

Tabela 4.18 - Comparaçāo entre os resultados obtidos pelo ACA e por outras estratégias evolutivas para o problema de Goddard com relação ao tempo.

Referência	t_{s1}	t_{s2}	t_f
EAD	18,97	58,44	160,24
IDE	18,97	58,43	160,22
ACA	18,97	58,44	160,24

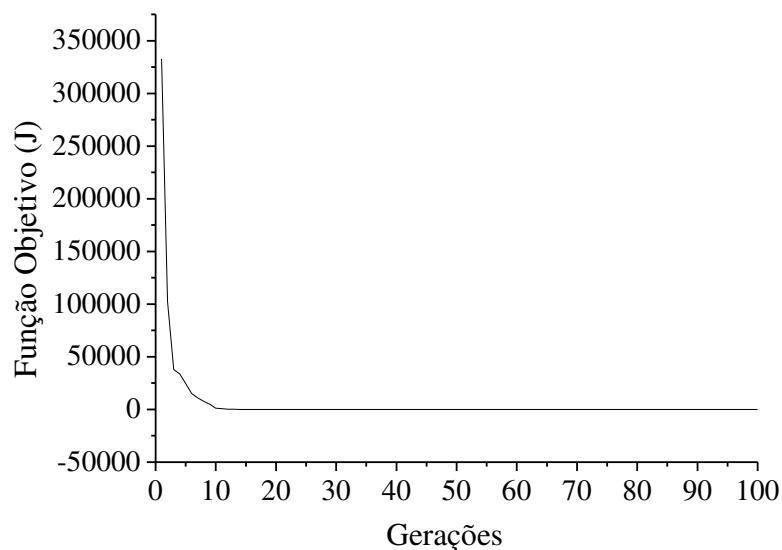


Figura 4.27 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema de Goddard.

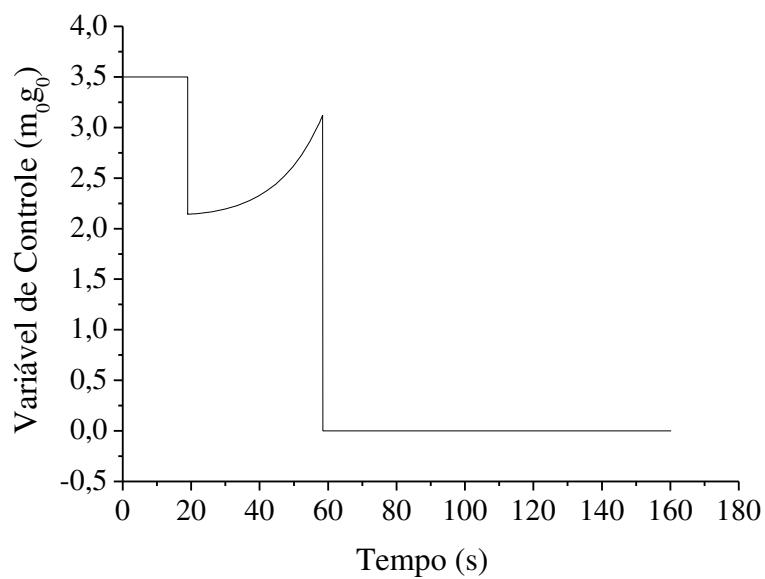


Figura 4.28 - Perfil da variável de controle do problema de Goddard.

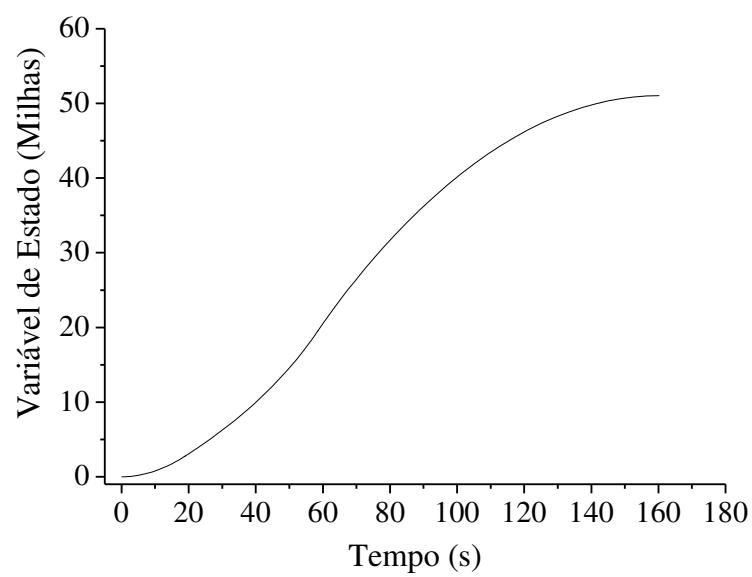


Figura 4.29 - Perfil da variável de estado (altitude) do problema de Goddard.

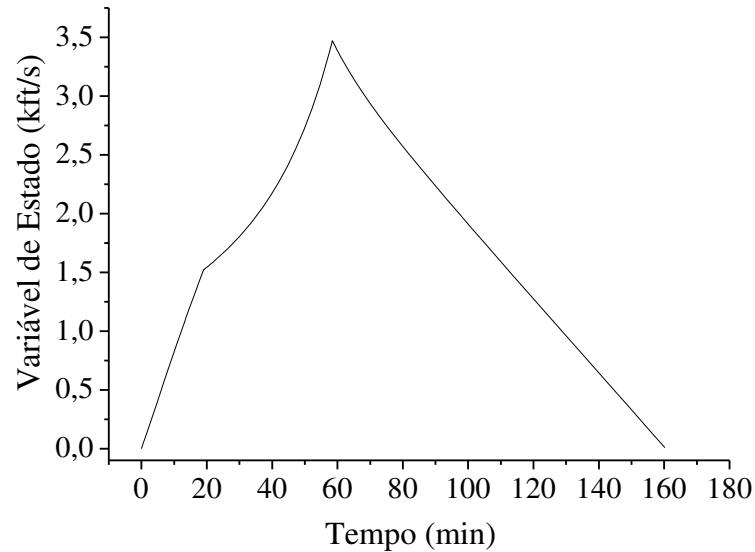


Figura 4.30 - Perfil da variável de estado (velocidade) do problema de Goddard.

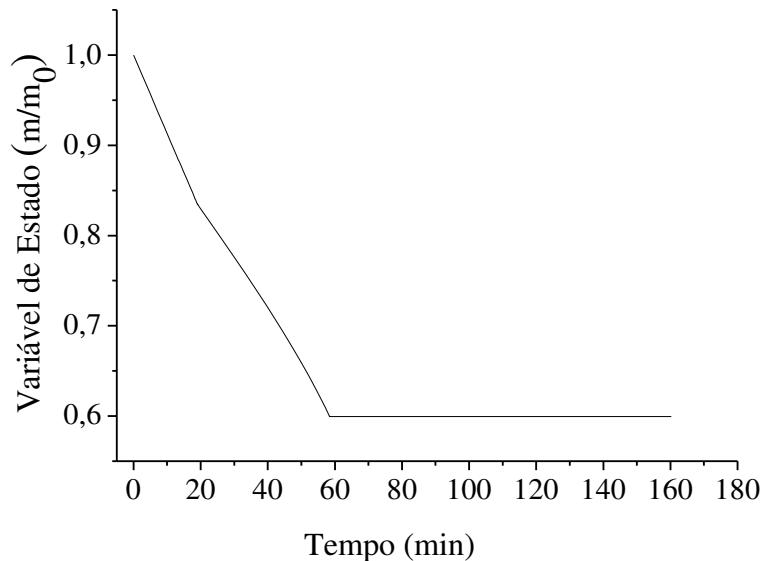


Figura 4.31- Perfil da variável de estado (massa) do problema de Goddard.

4.2.10. Biorreatore

O problema do biorreatore proposto por Lee e Ramirez (1994) apresenta duas variáveis de controle, a saber, u_1 e u_2 que representam as taxas de alimentação de nutriente (glucose) e de indutor, respectivamente. Este equipamento, que opera em regime de operação batelada alimentada, é utilizado para a produção de proteína heteróloga.

Na literatura pode-se encontrar algumas metodologias aplicadas a esse problema, tais como: programação dinâmica iterativa (Tholudur e Ramirez, 1997); algoritmos híbridos usando métodos estocásticos e métodos clássicos (Balsa-Canto et al., 1998) e o uso de informações de derivada de segunda ordem para a atualização das variáveis de projeto pelo algoritmo de Newton (Balsa-Canto et al., 2000). Lobato e Steffen Jr. (2009) também estudaram este problema a partir da aplicação do algoritmo de Evolução Diferencial.

O objetivo deste problema é a determinação das taxas de alimentação u_1 e u_2 que maximizam a diferença entre a quantidade de produto obtido e o custo do indutor em um tempo t_f , conforme representado pelo índice de desempenho:

$$J_{max} = x_4(t_f)x_1(t_f) - Q \int_0^{t_f} u_2 dt \quad (4.2.49)$$

Este problema está sujeito aos balanços de massa, às condições iniciais e aos valores limites das variáveis de controle conforme apresentado a seguir:

$$\frac{dx_1}{dt} = u_1 + u_2 \quad (4.2.50)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \left(\frac{x_3}{14,35+x_3+\frac{x_3^2}{111,5}} \left(x_6 + 0,22 \frac{x_7}{0,22+x_5} \right) \right) x_2 - (u_1 + u_2) \frac{x_2}{x_1} \quad (4.2.51)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = 100 \frac{u_1}{x_1} - (u_1 + u_2) \frac{x_3}{x_1} - \left(\frac{x_3}{14,35+x_3+\frac{x_3^2}{111,5}} \left(x_6 + 0,22 \frac{x_7}{0,22+x_5} \right) \right) \frac{x_2}{0,51} \quad (4.2.52)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = \left(0,233 \frac{x_3}{14,35+x_3+\frac{x_3^2}{111,5}} \left(\frac{0,0005+x_5}{0,22+x_5} \right) \right) x_2 - (u_1 + u_2) \frac{x_4}{x_1} \quad (4.2.53)$$

$$\frac{dx_5}{dt} = 4 \frac{u_2}{x_1} - (u_1 + u_2) \frac{x_5}{x_1} \quad (4.2.54)$$

$$\frac{dx_6}{dt} = - \left(0,09 \frac{x_5}{0,034+x_5} \right) x_6 \quad (4.2.55)$$

$$\frac{dx_7}{dt} = \left(0,09 \frac{x_5}{0,034+x_5} \right) (1 - x_7) \quad (4.2.56)$$

$$x(0) = [1 \ 0,1 \ 40 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0]' \quad (4.2.57)$$

$$0 \leq u_1, u_2 \leq 1 \quad (4.2.58)$$

onde x_1 é o volume do reator, x_2 é a concentração celular, x_3 é a concentração de nutrientes, x_4 é a concentração de proteína heteróloga, x_5 é a concentração de indutor, x_6 é o fator de choque do indutor na taxa de crescimento celular e, x_7 é o fator de recuperação de indutor no crescimento celular. Q é o fator custo do indutor no valor do tempo final. O tempo total de operação é igual a 10 h. Para essa análise foi considerado $Q = 0$.

Para a aplicação do ACA são considerados os seguintes parâmetros: Número máximo de gerações $N_{max} = 200$, número total de gotas de chuva, $N = 50$, número de rios, $N_{sr} = 8$ e fator de evaporação $d_{max} = 10^{-5}$. A Tabela 4.19 apresenta a influência do número de elementos considerados no valor da função objetivo encontrada pelo ACA considerando diferentes sementes para a geração dos números aleatórios.

Tabela 4.19 - Influência do número de elementos considerados no valor da função objetivo encontrada pelo ACA para o problema do Biorreator.

	J	N_{aval}		J	N_{aval}		J	N_{aval}
$u = 5$	6,105411	11973		5,968409	11675		5,481658	11409
	6,103898	11639		5,626656	11347		6,038857	11515
	6,103835	11391		6,050576	11999		6,037687	11329
	6,127973	11949		6,142698	11633		5,756602	11753
	6,105600	12209		4,395729	11451		5,968515	11465
	6,127831	11697	$u = 10$	5,968409	11675	$u = 15$	4,634988	11553
	6,105378	11587		5,626656	11347		4,639190	11323
	6,129403	12157		5,968409	11675		6,107830	11567
	6,127295	11845		6,050576	11999		4,125383	11629
	6,127775	11657		6,142698	11633		6,140144	11633

Conforme observado na Tabela 4.19, o aumento do número de elementos de controle não resultou necessariamente na melhora do valor da função objetivo para todas as sementes consideradas na análise. Isto se deve ao fato de que o aumento do número de elementos de controle aumenta o número de variáveis do problema, o que implica maiores dificuldades para a obtenção de uma solução mais precisa para os parâmetros considerados pelo ACA nesta

aplicação. O melhor valor, aquele mais próximo ao fornecido pela literatura apresentada, é comparado com outras estratégias de otimização, conforme mostrado na Tabela 4.20.

Tabela 4.20 - Comparaçāo entre os resultados obtidos pelo ACA e por outras estratégias para o problema do Biorreator.

Referência	J	N_{aval}
Tholudur e Ramirez (1997)	6,16	-
Balsa-Canto et al. (2000)	6,15160	-
Lobato e Steffen Jr. (2009)	6,13043	7020
ACA	6,142698	11633

A partir dos resultados apresentados nesta tabela é possível concluir que o ACA foi capaz de encontrar um resultado similar aos reportados por outras estratégias como a programação dinâmica interativa (Tholudur e Ramirez, 1997), e o uso de informações de derivada de segunda ordem para atualização das variáveis de projeto conforme realizado pelo algoritmo de Newton (Balsa-Canto et al., 2000). Além disso, observa-se que no trabalho de Lobato e Steffen Jr. (2009) foram considerados 10 elementos de controle envolvendo 7020 avaliações da função objetivo N_{aval} . Já o ACA, com a mesma quantidade de elementos de controle, requereu 11633 avaliações da função objetivo. Sendo assim, para o presente estudo de caso, constata-se que o algoritmo EAD mostrou ser mais eficiente do que o ACA.

A Figura 4.31 apresenta a evolução do valor da função objetivo em relação ao número de gerações. Nas Figuras. 4.32 e 4.33 são apresentados os perfis das variáveis de controle e nas Figuras 4.34 - 4.41 estão apresentadas os perfis das variáveis de estado.

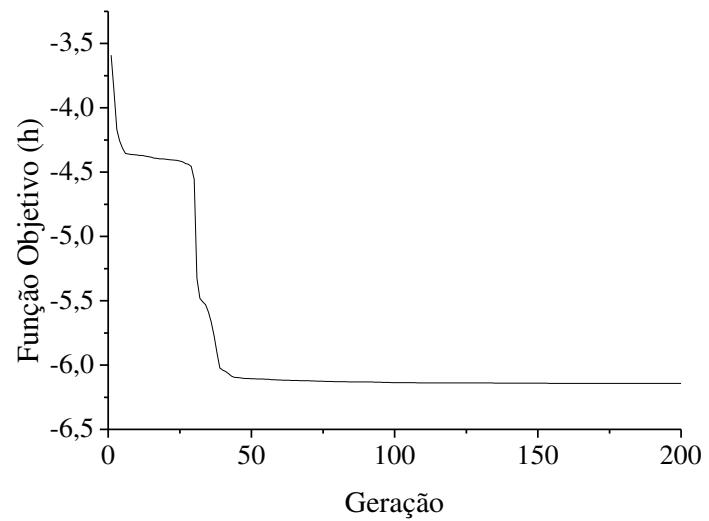


Figura 4.32 - Função objetivo ao longo do processo evolutivo para o problema do Biorreator.

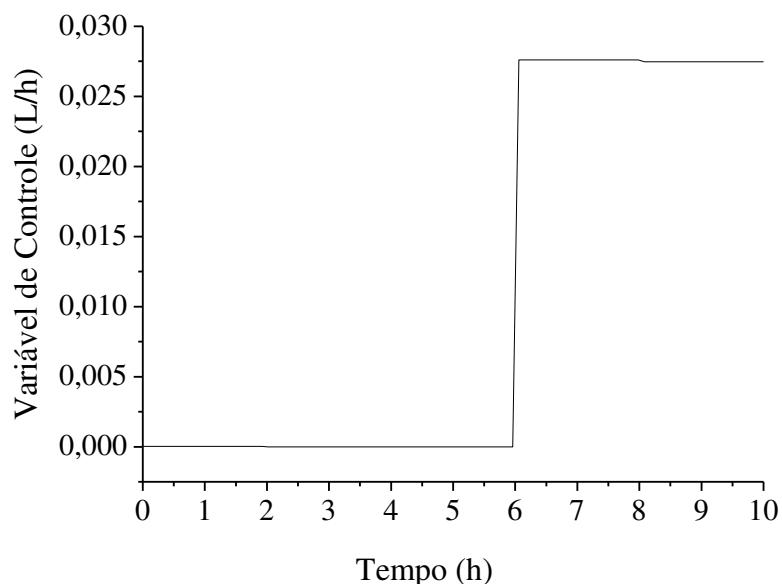


Figura 4.33 - Perfil do controle u_1 em horas do problema do Biorreator.

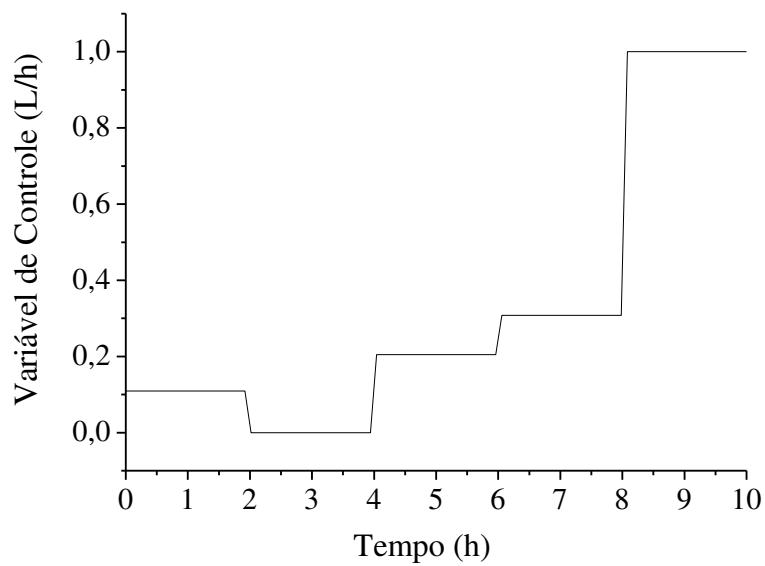


Figura 4.34 - Perfil do controle u_2 em horas do problema do Biorreator.

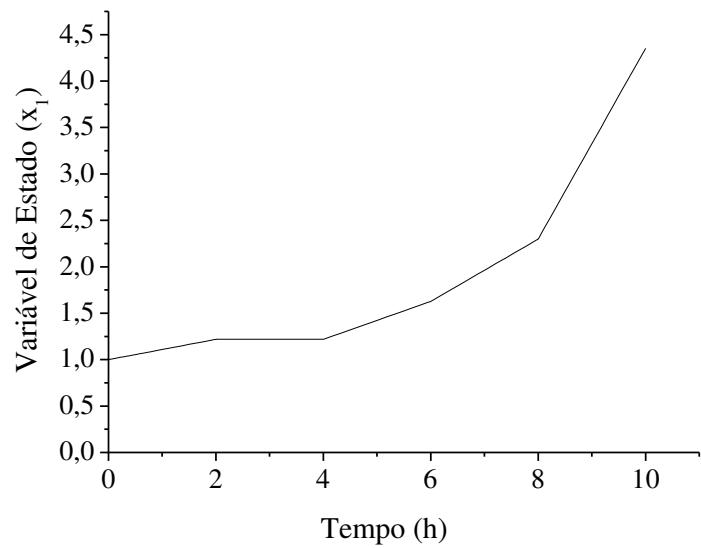


Figura 4.35 - Perfil da variável x_1 de Estado do problema do Biorreator.

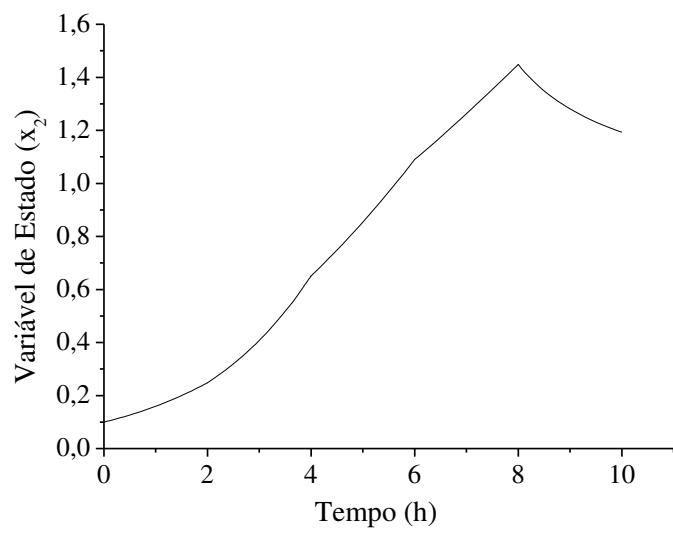


Figura 4.36 - Perfil da variável x_2 de Estado do problema do Biorreatore

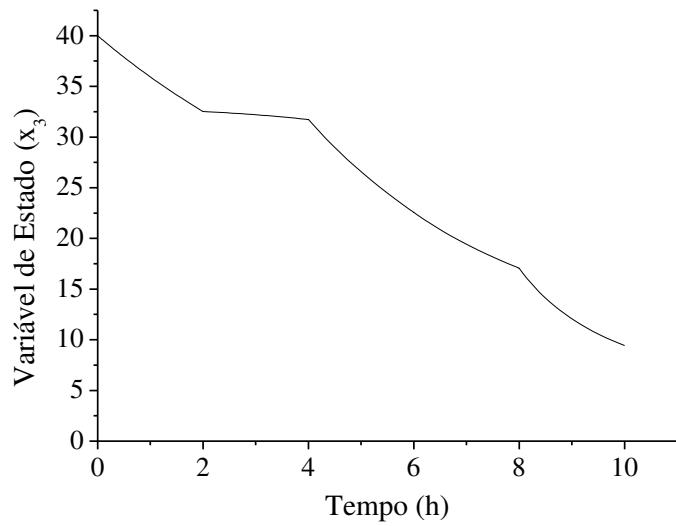


Figura 4.37 - Perfil da variável x_3 de Estado do problema do Biorreatore.

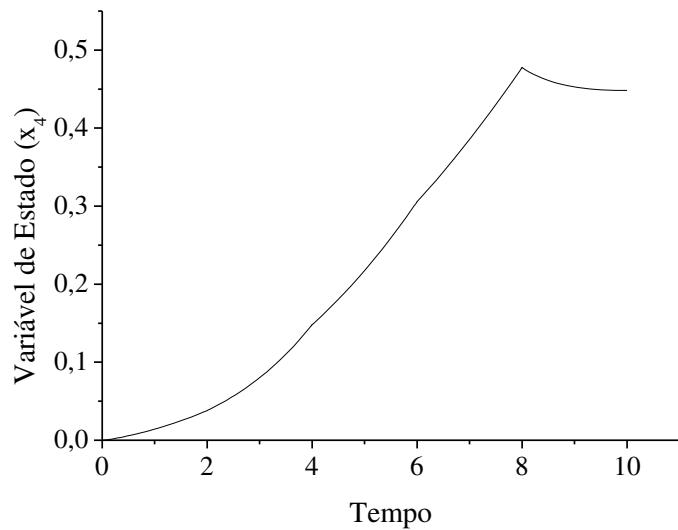


Figura 4.38 - Perfil da variável x_4 de Estado do problema do Biorreator.

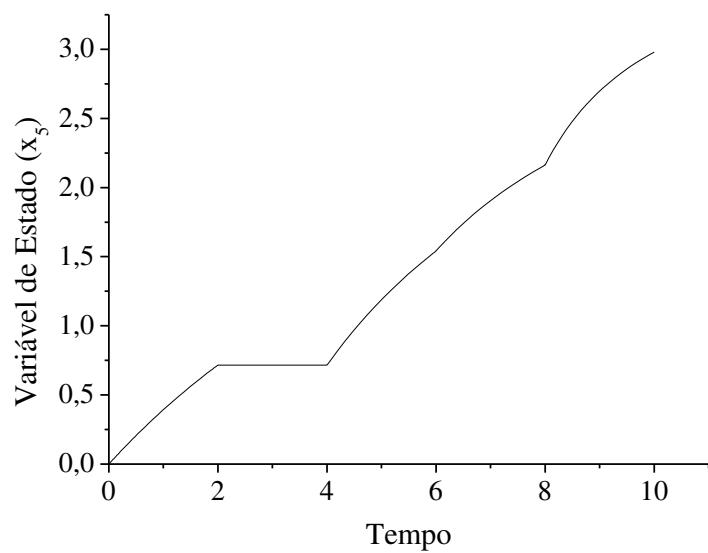


Figura 4.39 - Perfil da variável x_5 de Estado do problema do Biorreator.

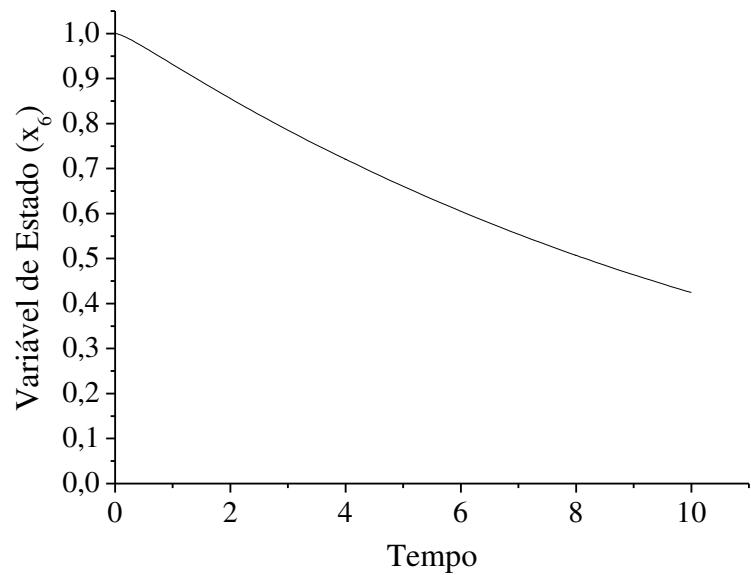


Figura 4.40 - Perfil da variável x_6 de Estado do problema do Biorreatore.

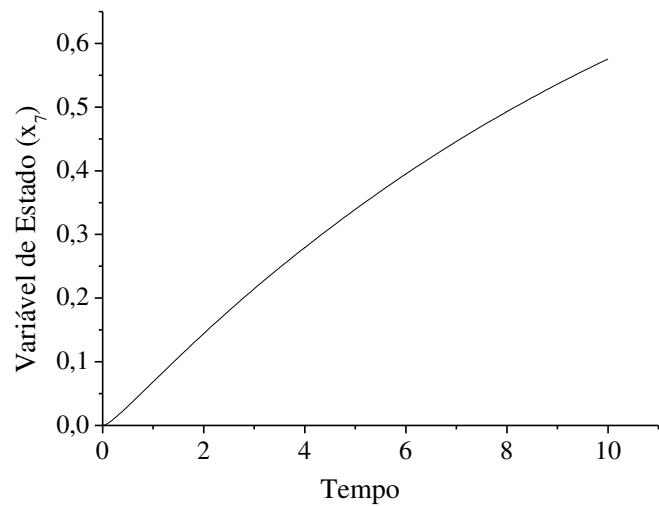


Figura 4.41 - Perfil da variável x_7 de Estado do problema do Biorreatore.

Pode-se observar que para todos os estudos de caso analisados constata-se que o ACA foi capaz de obter resultados similares aos que são reportados na literatura através da aplicação de técnicas clássicas ou evolutivas.

Em todos os estudos de caso considerados o número de avaliações da função objetivo requeridas pelo ACA foi inferior aos valores encontrados por outras estratégias evolutivas, sendo uma única exceção observada para o problema do biorreator. Isso acontece quando há um aumento do número de elementos de controle e, por consequência, do número total de variáveis para perfis do vetor de variáveis de controle mais refinados. Neste caso, poderiam ser adotadas outras abordagens para a discretização do vetor de variáveis de controle.

Portanto, o ACA possui como principais vantagens a facilidade de implementação e facilidade de adequação a situações práticas da indústria e áreas afins, se tornando uma grande ferramenta para otimização.

CAPÍTULO V

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS DE TRABALHOS FUTUROS

O Problema de Controle Ótimo é inherentemente constituído por um sistema de Equações Algébrico-Diferenciais, mesmo se sua formulação inicial for composta apenas por Equações Diferenciais. Assim, nesta dissertação utilizou-se a denominação Problema de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial (PCOAD), cuja caracterização foi realizada a partir do conceito de índice diferencial. De forma geral, nos PCOADs, o índice diferencial pode sofrer flutuações ao longo da trajetória devido à presença de restrições nas variáveis de estado e/ou de arcos singulares que normalmente ocorrem em problemas lineares na variável de controle. Esta característica dificulta a resolução numérica do sistema de equações que formam as restrições deste problema de otimização. Todavia, apesar de muitos dos estudos de caso analisados nesta dissertação possuírem índice diferencial flutuante, a metodologia proposta foi capaz de encontrar resultados coerentes quando comparados com os apresentados pela literatura. Neste caso, ressalta-se que o fato do problema ser redefinido por elementos de controle faz com que o problema seja tratado com um de índice diferencial igual a um em cada um dos elementos de controle. Assim, problemas com índice diferencial flutuante passam a ser tratados como problemas de índice diferencial igual a um em todo o domínio.

Para a resolução dos PCOADs foi empregado o Algoritmo de Ciclo de Água (ACA). Neste cenário, inicialmente foi realizada a análise de sensibilidade dos parâmetros deste algoritmo, a saber, avaliou-se a influência do tamanho da população, do número de gerações, do número de rios e mar e do fator de evaporação sobre o desempenho do algoritmo.

A partir da análise dos resultados obtidos pode-se recomendar, para as funções matemáticas avaliadas, bem como para o conjunto de parâmetros considerados, os seguintes valores para os parâmetros de inicialização do ACA: 100 gotas de chuva (indivíduos) na população, 500 gerações, 4 (rios+mar) e uma taxa de evaporação de 10^{-3} . Todavia, conforme destacado anteriormente, estes parâmetros foram determinados para uma série de funções matemáticas, bem como para um conjunto de condições definidas. Assim, para um novo estudo de caso, outros valores podem ser adotados para estes parâmetros.

No contexto dos problemas de controle ótimo, os dez estudos que compuseram o banco de testes desta dissertação são problemas clássicos apresentados na literatura especializada, sendo escolhidos de forma a representar casos típicos, sem e com flutuação de índice, relacionados portanto, a problemas sem e com arcos singulares e/ou comportamento liga-desliga. Estes apresentam as seguintes características principais: problemas sem restrições, problemas com restrições de igualdade, problemas com restrições de desigualdade, problemas com restrição de fim e problemas com mais de uma variável de controle.

Como descrito anteriormente, a solução numérica dos PCOADs foi obtida através da aplicação do ACA associado à parametrização do vetor de variáveis de controle. Este foi definido constante em cada um dos n elementos de controle adotados. Assim, o problema original contínuo, em relação ao vetor de variáveis de controle, foi convertido em um equivalente discretizado onde, para cada n -esimo elemento de controle, era necessário calcular o valor do vetor de variáveis de controle discretizado. Neste sentido, o PCOAD passa a ter n variáveis de controle, cada uma definida em um elemento de controle. O tamanho de cada elemento de controle também foi uma variável a ser calculada pela estratégia de otimização adotada. Desta forma, o número total de variáveis que ser computadas nesta dissertação foi de $2n$ variáveis (n variáveis de controle mais n variáveis que representam o tamanho do elemento de controle). Cabe ressaltar que neste trabalho, em cada elemento de controle, o valor da variável de controle foi considerada constante, sendo esta uma prática comum na literatura especializada. Esta estratégia tem como principais vantagens: *i*) facilidade de implementação; e *ii*) facilidade de adequação a situações práticas da indústria e áreas afins, já que é muito mais fácil implementar um controle constante do que um que segue uma outra lei de formação. Por outro lado, como principal desvantagem pode-se citar o aumento do número de elementos de controle e, por consequência, do número total de variáveis para perfis do vetor de variáveis de controle mais refinados. Neste caso, poderiam ser adotadas outras abordagens para a discretização do vetor de variáveis de controle.

De forma geral, para todos os estudos de caso analisados constata-se que o ACA foi capaz de obter resultados similares aos que são reportados na literatura através da aplicação de técnicas clássicas ou evolutivas. Em todos os estudos de caso considerados o número de avaliações da função objetivo requeridas pelo ACA foi inferior aos valores encontrados por outras estratégias evolutivas, sendo uma única exceção observada para o problema do biorreator.

Foi realizada a comparação entre o ACA e outras estratégias de otimização evolutivas, a saber, o Algoritmo de Evolução Diferencial (AED) e os Algoritmos Genéticos (AG). Com os resultados obtidos pela aplicação destes três algoritmos em uma função matemática foi possível concluir que o AED foi a estratégia mais eficiente em termos do tempo total de processamento, seguida pelos AG e pelo ACA, considerando um número equivalente de avaliações da função objetivo. Na prática, tal resultado já era esperado em decorrência da estrutura organizacional de cada um dos algoritmos avaliados. No ACA existe um número muito superior de laços de repetição em relação ao AED e aos AG, sendo estes necessários para testar as ramificações (formação de rios e mares). Esta característica implica, para o mesmo número de indivíduos na população dos outros algoritmos evolutivos considerados, um maior número de testes e, por consequência, um maior tempo de processamento.

Perspectivas de Trabalhos Futuros

1. Avaliar o desempenho da metodologia proposta em sistemas com dimensão maior e com mais variáveis de controle.
2. Investigar outras formas de tratamento das restrições de desigualdade, já que o uso de variáveis de folga aumenta significativamente o número de variáveis do problema.
3. Avaliar o desempenho de técnicas de redução do índice diferencial.
4. Comparar o desempenho com outras estratégias clássicas (diretas, indiretas e híbridas) e evolutivas.
5. Avaliar a extensão da metodologia proposta para o contexto multiobjectivo, bem como a paralelização do Algoritmo de Ciclo de Água.

CAPÍTULO VI

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARROYO, J. E. C. **Heurísticas e metaheurísticas para otimização combinatória multiobjetivo.** Tese de doutorado. Universidade Estadual de Campinas. 2002. 231 p.

BALSA-CANTO, E.; ALONSO, A. A.; BANGA, J. R., Dynamic optimization of bioprocesses: deterministic and stochastic strategies. **ACoFop. IV Automatic control of food and biological processes.** Göteborg, Sweden, p. 21 – 23, 1998.

BALSA-CANTO, E.; ALONSO, A. A.; VASSILIADIS, V. S. Efficient optimal control of bioprocess using second-order information. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 39, p.4287- 4295, 2000.

<https://doi.org/10.1021/ie990658p>

BIEGLER, L.T. Solution of dynamic optimization problems by successive quadratic programming and orthogonal collocation. **Computers and chemical engineering**. v. 8, p. 243 - 248, 1984.

[https://doi.org/10.1016/0098-1354\(84\)87012-X](https://doi.org/10.1016/0098-1354(84)87012-X)

BIEGLER, L. T.; CERVANTES, A. M. A. Wachter, Advances in Simultaneous Strategies for Dynamic Process Optimization. **Chemical engineering science**. v. 57, p. 575 – 593, 2002.

[https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(01\)00376-1](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(01)00376-1)

BIEGLER, L. T.; GROSSMAN I. E. Retrospective on optimization. **Computers and chemical engineering**. v. 28, p. 1169 – 1192, 2004.

<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2003.11.003>

BILOUS; AMUNDSON, N. R. Optimum temperature gradients in tubular reactors ii: numerical study. **Chemical engineering science**. v.5, p. 115 -126, 1956.

[https://doi.org/10.1016/0009-2509\(56\)80027-4](https://doi.org/10.1016/0009-2509(56)80027-4)

BRESSAN, A. **Viscocity solutions of hamilton-jacobi equations and optimal control problems**. Technical report, S.I.S.S.A., Trieste, Italy, 2003.

BRYSON JR, A. E.; HO, Y. Applied optimal control: optimization, estimation and control. **Ginn and company**, USA, 1969.

BRYSON JR, A. E.; HO, Y. Applied optimal control. **Hemisphere publishing**, Washington USA, 1975.

COELHO, L.S.; Fundamentos, potencialidades e aplicações de algoritmos evolutivos. Segunda edição. São Carlos-SP: Notas em matemática aplicada, 2003.

CUTHREL, J.; BIEGLER, L. T. On the optimization of differential-algebraic process systems. **AIChE Journal**. v. 33, n. 8, p. 1257–1270, 1987.

<https://doi.org/10.1002/aic.690330804>

DADEBO, S. A., MCAULEY, K. B. On the computation of optimal singular controls. **In Proc. IEEE Conf. on control applications**. p. 150 – 155, 1995.

DENHAM, W. F.; BRYSON, A. E. Optimal programming problems with inequality constraints – II. Solutions by the steepest ascent. **AIAA Journal** **2**, p. 25 – 36, 1964.

<https://doi.org/10.2514/3.2209>

DREYFUS, S. Variational problems with inequality constraints. **Journal of mathematical analysis and applications**. v. 4, p. 297 – 308, 1962.

[https://doi.org/10.1016/0022-247X\(62\)90056-2](https://doi.org/10.1016/0022-247X(62)90056-2)

ESKANDAR, H.; SADOLLAH, A.; BAHREININEJAD, A.; HAMDI, M. Water cycle algorithm - a novel metaheuristic optimization method for solving constrained engineering optimization problems. **Computers and structures**. p. 151 – 166, 2012.

<https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2012.07.010>

FEEHERY, W. F. **Dynamic optimization with path constraints**. Tese de doutorado, Massachusetts Institute of Technology, 1998, 391 p.

GEAR, C. W., Differential algebraic equation index transformations. **SIAM Journal on scientific computing** v. 9, p. 39 - 47, 1988.

<https://doi.org/10.1137/0909004>

GUNN, D. J.; THOMAS, W. J. Mass transport and chemical reaction in multifunctional catalyst systems. **Chemical engineering science**. v. 20, p. 89 – 100, 1965.

[https://doi.org/10.1016/0009-2509\(65\)85002-3](https://doi.org/10.1016/0009-2509(65)85002-3)

HADDAD, O. B.; MORAVEJ, M; LOÁICIGA, H. Application of the water cycle algorithm to the optimal operation of reservoir systems. **American society of civil engineers**. 2014.

[https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)IR.1943-4774.0000832](https://doi.org/10.1061/(ASCE)IR.1943-4774.0000832)

HOLLAND, J. H. **Adaptation in natural and artificial systems**: University of Michigan Press, 1975.

JACOBSON, D. H., GERSHWIN, W. D., LELE, M. M. Computation of optimal singular controls. **IEEE Transactions on automatic control**, v. 15, p. 67-73, 1970.

<https://doi.org/10.1109/TAC.1970.1099360>

LEE, J.; RAMIREZ, W. F. Optimal fed-batch control of induced foreign protein production by recombinant bacteria. **AIChE Journal**. v. 40, p. 899 – 912, 1994.

<https://doi.org/10.1002/aic.690400516>

LEITÃO, A. **Cálculo variacional e controle ótimo**. IMPA. Rio de Janeiro, 2001.

LOBATO, F. S. **Abordagem mista para problemas de otimização dinâmica**, Dissertação de Mestrado, Faculdade de engenharia química, Universidade Federal de Uberlândia, 2004. 204 p.

LOBATO, F. S. **Otimização multi-objetivo para o projeto de sistemas de engenharia**. Tese de doutorado, Faculdade de engenharia mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, 2008. 354 p.

LOBATO, F. S.; STEFFEN JR. V. Solution of optimal control problems using multi-particle collision algoritm. **9th Conference on dynamics, control and their applications**, 2010.

LOBATO, F. S.; STEFFEN JR. V. Otimização dinâmica de biorreatores em operação batelada alimentada com múltiplas variáveis de controle usando o algoritmo de evolução diferencial. **XVII Simpósio nacional de bioprocessos**. Natal, RN, 2009.

LOBATO, F. S.; STEFFEN JR. V. NETO, A. J. S.; Solution of singular optimal control problems using the improved differential evolution algorithm. **Journal of artificial intelligence and soft computing research**. v. 1, n. 3, p. 195-206, 2011.

LOGSDON, J. S. **Efficient determination of optimal control profiles for differential algebraic systems**. Tese de doutorado, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, 1990. 42p.

LOGSDON, J. S.; BIEGLER, L. T. Accurate solution of differential-algebraic optimization problems. **Industrial & engineering chemistry research**. v.28, p. 1628 -1639, 1989.

<https://doi.org/10.1021/ie00095a010>

LOURENÇO, M. **Solução de sistemas de equações algébrico-diferenciais ordinárias de índice superior**. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2002.100 p.

LOURENÇO, M. SECCHI, A. R. Solução de sistemas de equações algébrico-diferenciais ordinárias de índice superior. **Revista Liberato** (Novo Hamburgo), v. 9, p. 19-29, 2008.

<https://doi.org/10.31514/rliberato.2008v9n11.p19>

LUUS, R. Use of Luus-Jaakola optimization procedure for singular optimal control problems. **Nonlinear analysis.** v. 47, p. 5647 – 5658, 2001.
[https://doi.org/10.1016/S0362-546X\(01\)00666-6](https://doi.org/10.1016/S0362-546X(01)00666-6)

LUUS, R.; OKONGWU O. N. Towards practical optimal control of batch reactors. **Chemical engineering journal.** v. 75, p. 1 – 9, 1999.
[https://doi.org/10.1016/S1385-8947\(99\)00019-4](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(99)00019-4)

MACHADO, V. S. LOBATO, F.S. STEFFEN Jr, V. Determinação de uma estratégia ótima para administração de drogas no tratamento de tumores usando algoritmo de evolução diferencial e otimização multi-objetivo. **XII encontro de Modelagem Computacional**, Nova Friburgo, RJ, 2010.

MARROQUIN, G; LUYBEN, W. L. Practical control studies of batch reactors using realistic mathematical models. **Chemical engineering science.** v. 28, p. 993 – 1003, 1973.
[https://doi.org/10.1016/0009-2509\(73\)80001-6](https://doi.org/10.1016/0009-2509(73)80001-6)

NASCENTES, C. L.; MURATA, V.V. Estudo do desempenho do algoritmo de evolução diferencial na solução de um problema de otimização dinâmica de fermentação alcoólica em batelada alimentada. In: **XX Congresso brasileiro de engenharia química**, 2014.
<https://doi.org/10.5151/chemeng-cobeq2014-0601-24764-148412>

NASCENTES, C. L.; MURATA, V.V., LOBATO, F.S. Resolução de problemas de controle ótimo singulares com índice superior usando o algoritmo de evolução diferencial. In: **XV Encontro de modelagem computacional e III Encontro de ciência e tecnologia de materiais**, 2012.

NERY, R. S. **Métodos híbridos para resolução de problemas de programação não-linear.** Monografia de conclusão do curso de matemática aplicada a negócios. Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras, Ribeirão Preto, 2007.

OLIVEIRA, L. S. **Uma Contribuição ao Estudo dos Métodos de Otimização MultiObjetivo**, Dissertação de Mestrado em Engenharia, Universidade Federal de Uberlândia, UFU, p.117. 2005.

OLIVEIRA, G. T.S. **Estudo e aplicações da evolução diferencial**. Dissertação de Mestrado em Engenharia, Universidade Federal de Uberlândia, UFU, p. 126. 2006.

OLIVEIRA, H. C. B. de. **Um modelo híbrido estocástico para tratamento do problema de roteamento de veículos com janela de tempo**. 2007. Dissertação (Mestrado) – Pós-Graduação em Ciência da Computação, Centro de Informática, Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2007.

PANTELIDES, C. The consistent initialization of differential algebraic systems. **SIAM Journal on scientific and statistical computing** v. 9, p. 213 - 231, 1988.

<https://doi.org/10.1137/0909014>

PETZOLD, L. R. **Dassl code, version 1989, computing and mathematics research division**, Lawrence livermore national laboratory, L316, PO Box 808, Livermore, CA 94559, 1989.

PFEIFER, A. A. **Controle ótimo de sistemas algébrico-diferenciais com flutuação do índice diferencial**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, 2007. p. 126.

PFEIFER, A. A.; LOBATO, F. S. Controle ótimo de sistemas algébrico-diferenciais chaveados usando o algoritmo de busca gravitacional. **Tendências em matemática aplicada e computacional**. v. 14, n. 1, p. 81 -94, 2013.

<https://doi.org/10.5540/tema.2013.014.01.0081>

PILLIS L. G; RADUNSKAYA A. A mathematical tumor model with immune resistance and drug therapy: an optimal control approach. **Jornal of theoretical medicine**. v. 3, p. 79 – 100, 2001.

<https://doi.org/10.1080/10273660108833067>

PILLIS L. G;RADUNSKAYA A. The dynamics of an optimally controlled tumor model: a case study. **Mathematical and computer modelling**. v. 37, p. 1221 -1244, 2003.

[https://doi.org/10.1016/S0895-7177\(03\)00133-X](https://doi.org/10.1016/S0895-7177(03)00133-X)

QUINTO, T. C. **Abordagem algébrico-diferencial da otimização dinâmica de processos com índice flutuante**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, 2010. 111 p.

RASCOL, E., MEYER, M., LANN, J.M. LE, PRESVOST, M., Numerical problems encountered in the simulation of reactive absorption: DAE index reduction and consistent initialization, **Computers and Chemical Engineering**. v. 22, p. 929 – 932, 1998.

[https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(98\)00183-5](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(98)00183-5)

RUTQUIST, P. E.; EDVALL, M. M. **PROPT - Matlab optimal control software - one of a kind, lightning fast solutions to your optimal control problems!** Tomlab optimization, 2010.

SADOLLAH, A.; ESKANDAR, H. BAHREININEJAD, A.; KIM, J. H.; Water cycle algorithm for solving multi-objective optimization problems. **Springer-verlag**. Berlin Heidelberg, 2014.

<https://doi.org/10.1007/s00500-014-1424-4>

SADOLLAH, A.; ESKANDAR, H. BAHREININEJAD, A.; KIM, J. H.; Water cycle algorithm with evaporation rate for solving constrainedand unconstrained optimization problems. **Applied soft computing**. v. 30 p. 58–71, 2015.

<https://doi.org/10.1016/j.asoc.2015.01.050>

SADOLLAH, A.;ESKANDAR, H.; KIM, J. H.; YOO, D. G. Sizing optimization of sandwich panels having prismatic core using water cycle algorithm. **Fourth global congress on intelligent systems**, 2013.

<https://doi.org/10.1109/GCIS.2013.58>

SARVI, M.; AVANAKI, I. N. An optimized fuzzy logic controller by water cycle algorithm for power management of stand-alone hybrid green power generation. **Energy conversion and management**. v. 106, p.118–126, 2015.

<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2015.09.021>

SILVEIRA, J. C. **Modelagem matemática do crescimento do câncer de próstata com controle ótimo do tratamento através da radioterapia.** Dissertação de Mestrado. Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul, 2007. 122 p.

SOUZA, D. F. S. **Abordagem algébrico-diferencial da otimização dinâmica de processos.** Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2007. 185 p.

SOUZA JR, D. A. **Otimização pelo Método dos Algoritmos Genéticos e. Dimensionamento de Estruturas Tubulares Metálicas Espaciais com Barras Cruzadas.** Tese de doutorado Universidade Federal de Uberlândia, 2005. 125 p.

STORN, R.; PRICE, K. **Differential Evolution: a simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces.** Technical report TR-95-012, International computer science institute, Berkeley, 1995.

STRYK, O. von. **User's Guide for DIRCOL - a Direct Collocation method for the numerical solution of optimal control problems.** [S.l.], 1999. Technische Universität Darmstadt, Fachgebiet Simulation und Systemoptimierung (SIM).

THOLUDUR, A.; RAMIREZ, W. F. Obtaining smoother singular arc policies using a modified iterative dynamic programming algorithm. **International journal of control.** v. 68, p. 1115 – 1123, 1997.

<https://doi.org/10.1080/002071797223235>

UNGER, J.; KRONER, A.; MARQUARDT, W. Structural analysis of differential algebraic equations systems: theory and applications. **Computers and chemical engineering.** v. 19, p. 867-882, 1995.

[https://doi.org/10.1016/0098-1354\(94\)00094-5](https://doi.org/10.1016/0098-1354(94)00094-5)

U.S. Geological Survey, South Atlantic water science center - Georgia. Disponível em < <http://ga.water.usgs.gov/>> Acesso em 07 de novembro de 2014.

VASSILIADIS, V. **Computational solution of dynamic optimization problems with general differential-algebraic constraints.** Tese de doutorado, Imperial College, University of London, 1993.