



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA  
MECÂNICA

RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE  
CONTROLE ÓTIMO FRACIONÁRIOS  
APLICADOS À ENGENHARIA

JULIANA VEIGA CARDOSO FERNANDES DE LIMA

UBERLÂNDIA, MG

2022

JULIANA VEIGA CARDOSO FERNANDES DE LIMA

RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE CONTROLE ÓTIMO  
FRACIONÁRIOS APLICADOS À ENGENHARIA

**Tese** apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos para obtenção do título de **Doutora em Engenharia Mecânica**.

**Área de Concentração:** Mecânica dos Sólidos e Vibrações.

**Linha de Pesquisa:** Projetos de Sistemas Mecânicos.

Universidade Federal de Uberlândia (UFU)

Faculdade de Engenharia Mecânica

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Orientador: Fran Sérgio Lobato

Uberlândia, MG

2022

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

---

L7326r      Lima, Juliana Veiga Cardoso Fernandes de, 1986-  
2022          Resolução de problemas de controle ótimo fracionários aplicados à  
              engenharia [recurso eletrônico] / Juliana Veiga Cardoso Fernandes de  
              Lima. - 2022.

                  Orientador: Fran Sérgio Lobato.  
                  Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Programa  
de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.  
                  Modo de acesso: Internet.  
                  Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2022.5025>  
                  Inclui bibliografia.

                  1. Engenharia Mecânica. I. Lobato, Fran Sérgio, (Orient.). II.  
Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia Mecânica. III. Título.

---

CDU: 621.01

André Carlos Francisco  
Bibliotecário – CRB-6/3408

JULIANA VEIGA CARDOSO FERNANDES DE LIMA

**RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE CONTROLE ÓTIMO  
FRACIONÁRIOS APLICADOS À ENGENHARIA**

**Tese** apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos para obtenção do título de **Doutora em Engenharia Mecânica**.

**Área de Concentração:** Mecânica dos Sólidos e Vibrações.

**Linha de Pesquisa:** Projetos de Sistemas Mecânicos.

Trabalho aprovado. Uberlândia, MG, 7 de Julho de 2022:

---

**Fran Sérgio Lobato**  
Orientador - FEQ/PPGEM-UFU

---

**Valder Steffen Jr**  
FEMEC/PPGEM-UFU

---

**João Marcelo Vedovotto**  
FEMEC/PPGEM-UFU

---

**Gustavo Mendes Platt**  
PPGSPA-FURG

---

**Gustavo Matheus de Almeida**  
DEQ/PPGEQ-UFMG

Uberlândia, MG

2022


**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA**

Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica  
 Av. João Naves de Ávila, nº 2121, Bloco 1M, Sala 212 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902  
 Telefone: (34) 3239-4282 - www.posgrad.mecanica.ufu.br - secposmec@mecanica.ufu.br


**ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO**

|                                    |  |                 |       |                       |       |
|------------------------------------|--|-----------------|-------|-----------------------|-------|
| Programa de Pós-Graduação em:      | Engenharia Mecânica  |                 |       |                       |       |
| Defesa de:                         | Tese de Doutorado Acadêmico, nº 326, COPEM                                   |                 |       |                       |       |
| Data:                              | 07/07/2022   | Hora de início: | 08:00 | Hora de encerramento: | 11:30 |
| Matrícula do Discente:             | 11913EMC021  |                 |       |                       |       |
| Nome do Discente:                  | Juliana Veiga Cardoso Fernandes de Lima                                      |                 |       |                       |       |
| Título do Trabalho:                | Resolução de Problemas de Controle Ótimo Fracionários Aplicados à Engenharia |                 |       |                       |       |
| Área de concentração:              | Mecânica dos Sólidos e Vibrações   |                 |       |                       |       |
| Linha de pesquisa:                 | Projeto de Sistemas Mecânicos  |                 |       |                       |       |
| Projeto de Pesquisa de vinculação: |  |                 |       |                       |       |

Reuniu-se na via webconferência a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Professores Doutores: Valder Steffen Júnior - FEMEC/UFU; João Marcelo Vedovotto - FEMEC/UFU; Gustavo Matheus de Almeida - UFMG; Gustavo Mendes Platt - FURG; e Fran Sérgio Lobato - FEQUI/UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos, o presidente da mesa, Dr. Fran Sérgio Lobato, apresentou a Comissão Examinadora e a candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu à Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação da Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovado.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **Fran Sergio Lobato, Professor(a) do Magistério Superior**, em 07/07/2022, às 11:23, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).

---



Documento assinado eletronicamente por **Valder Steffen Junior, Professor(a) do Magistério Superior**, em 07/07/2022, às 11:23, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).

---



Documento assinado eletronicamente por **João Marcelo Vedovotto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 07/07/2022, às 11:24, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).

---



Documento assinado eletronicamente por **Gustavo Mendes Platt, Usuário Externo**, em 07/07/2022, às 11:33, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).

---



Documento assinado eletronicamente por **Gustavo Matheus de Almeida, Usuário Externo**, em 07/07/2022, às 11:34, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).

---



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://www.sei.ufu.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **3726225** e o código CRC **19D9256D**.

---

*“O que sabemos é uma gota, o que ignoramos, um oceano”.*

*Isaac Newton*





# AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha mãe Elizabeth Veiga Cardoso e ao meu pai João Fernandes de Lima Filho que muito batalharam para me oferecer uma educação de qualidade e sempre perseveraram comigo, me apoiando em todos os momentos.

Ao meu namorado Leonardo Alves de Freitas que sempre acreditou no meu potencial, me incentivando e me alegrando nos tempos mais difíceis.

Ao meu orientador Dr. Fran Sérgio Lobato, que durante todo o processo do meu doutorado esteve ao meu lado contribuindo para ampliar meu conhecimento e meu horizonte de compreensão sobre determinados campos da engenharia.

Ao meus amigos e familiares que sempre estiveram presentes nessa longa caminhada me apoiando e incentivando.

A todos os professores, colegas e funcionários do Departamento de Engenharia Mecânica pela amizade.

A CAPES pela concessão de bolsa de estudo.

Por fim, manifesto aqui a minha gratidão à Deus que me deu força, paciência e energia para realizar meu sonho de concluir o doutorado.

# RESUMO

O estudo de Problemas de Controle Ótimo (PCOs) configura uma área de grande interesse e importância em engenharia e áreas afins devido ao número de aplicações que podem ser desenvolvidas. Em linhas gerais, o PCO consiste na determinação do perfil da variável de controle que maximiza (ou minimiza) uma função objetivo sujeito à restrições algébrico-diferenciais. Comumente, para resolver este tipo de problema pode-se empregar duas classes de abordagens, a saber, a Direta e a Indireta, bem como considera-se que as restrições diferenciais apresentam ordem inteira. Na prática isto simplifica a análise do problema, mas deixa de considerar o efeito da ordem fracionária nos perfis obtidos. Diante do que foi apresentado, esta tese tem como principal objetivo resolver PCOs com restrições algébrico-diferenciais fracionárias (Problema de Controle Ótimo Fracionário - PCOF). Para essa finalidade propõem-se a extensão do Método da Colocação Ortogonal (MCO) para o contexto fracionário como ferramenta para integrar os modelos algébrico-diferenciais fracionários que constituem o PCO. Neste cenário são apresentados resultados considerando: *i*) a validação da técnica de simulação proposta em problemas matemáticos e de engenharia; *ii*) a aplicação do MCO no contexto fracionário em um problema inverso usando dados experimentais reais; *iii*) a resolução de PCOFs usando a abordagem Indireta; *iv*) a resolução de um PCOF com restrição de fim para a variável de estado; e *v*) a resolução de PCOFs usando a abordagem Direta no contexto mono e multi-objetivo. Para esta última classe de problemas é proposta uma nova estratégia de otimização multi-objetivo que consiste da associação entre o algoritmo de Busca Fractal Estocástica e os operadores para a avaliação do critério de dominância de Pareto e distância da multidão. Os resultados obtidos com a simulação usando o MCO indicam que a metodologia numérica proposta configura-se como uma abordagem interessante para a resolução de problemas diferenciais fracionários. Ao avaliar o problema inverso proposto observa-se que a ordem fracionária pode ser empregada para aumentar a qualidade do ajuste. A partir da resolução de PCOFs usando abordagens Indiretas e Diretas pode-se verificar a influência da ordem fracionária nos perfis ótimos encontrados. Para o PCOF com restrição de fim na variável de estado foi possível concluir que, a depender do valor da ordem fracionária, não é possível encontrar uma solução ótima. Finalmente, ao se avaliar o algoritmo multi-objetivo proposto é possível constatar a qualidade dos resultados obtidos em relação ao outra abordagem tradicional da literatura, bem como a influência da ordem fracionária nos perfis ótimos obtidos.

**Palavras-chave:** Problema de Controle Ótimo, Equação Algébrico-Diferencial Fracionária, Ordem Fracionária, Otimização Mono e Multi-objetivo.

# ABSTRACT

The study of Optimal Control Problems (OCPs) is an area of great interest and importance in engineering and related areas due to applications that can be developed. In general, the OCP consists of determining the control variable profile that maximizes (or minimizes) an objective function subject to differential-algebraic constraints. Commonly, to solve this type of problem, two classes of approaches can be used, namely, the Direct and the Indirect, as well as it is considered that differential constraints present integer order. In practice, this simplifies the problem analysis, but fails to consider the effect of the fractional order on the obtained profiles. This thesis has as aim goal to solve Fractional Optimal Control Problems (FOCPs). For this purpose, the extension of Orthogonal Collocation Method (OCM) to fractional context to integrate the fractional differential algebraic models is proposed. In this scenario, the following results are presented: *i*) validation of the proposed simulation technique in mathematical and engineering problems; *ii*) application of the OCM in an inverse problem using real experimental data; *iii*) resolution of FOCPs by using the Indirect approach; *iv*) resolution of a FOCP with specified state variable; and *v*) resolution of FOCPs by using the Direct approach in mono and multi-objective contexts. For this last class, a new multi-objective optimization strategy is proposed. This consists of association between the Stochastic Fractal Search algorithm and two operators: Pareto' dominance and crowding distance. The results obtained with the simulation by using the OCM indicate that the proposed numerical methodology configures as an interesting approach for solving fractional differential problems. For the proposed inverse problem, it is observed that the fractional order can be used to increase the quality of fit. From the resolution of FOCPs using Indirect and Direct approaches, it is possible to verify the influence of the fractional order on optimal profiles found. For the FOCP with specified state variable, it is possible to conclude that, depending on the fractional order value, is not possible to find an optimal solution. Finally, for the proposed multi-objective algorithm, it is possible to verify the quality of obtained results in relation to other traditional approach, as well as evaluate the influence of the fractional order on the obtained optimal profiles.

**Keywords:** Optimal Control Problem, Fractional Differential Algebraic Equation, Fractional Order, Mono and Multi-objective Optimization.



# LISTA DE FIGURAS

|  |    |
|--|----|
| Figura 1 – Representação esquemática do problema do pêndulo . . . . .  | 8  |
| Figura 2 – Interpretação geométrica de Podlubny . . . . .  | 40 |
| Figura 3 – Interpretação geométrica de Tenreiro . . . . .  | 41 |
| Figura 4 – Representação esquemática da difusão de uma partícula . . . . .   | 54 |
| Figura 5 – Fluxograma do algoritmo <i>Multi-Objective Optimization Stochastic Fractal Search</i> . . . . .   | 61 |
| Figura 6 – Consolidado dos problemas avaliados nesta tese . . . . .  | 63 |
| Figura 7 – Influência do tipo de derivada fracionária na diferenciação de uma função polinomial do segundo grau . . . . .  | 67 |
| Figura 8 – Representação esquemática de um sistema massa-mola-amortecedor . . . . .  | 68 |
| Figura 9 – Sistema massa-mola com uma fonte constante . . . . .  | 71 |
| Figura 10 – Sistema massa-mola com uma fonte periódica . . . . .   | 73 |
| Figura 11 – Sistema amortecedor-mola com uma fonte constante . . . . .   | 74 |
| Figura 12 – Sistema amortecedor-mola com uma fonte periódica . . . . .   | 76 |
| Figura 13 – Sistema massa-mola-amortecedor sem força externa . . . . .   | 77 |
| Figura 14 – Concentrações de células, substrato e produto considerando diferentes valores de ordem fracionária no processo de fermentação da enzima lacase . . . . . | 80 |
| Figura 15 – Concentrações de células, substrato e produto experimentais e simuladas no processo de fermentação da enzima lacase . . . . .                            | 82 |
| Figura 16 – Influência do NPC nos perfis das variáveis de controle, estado e adjuntas no PCOF matemático . . . . .   | 84 |
| Figura 17 – Influência da ordem fracionária nos perfis das variáveis de estado, co-estado e controle para o primeiro PCOF matemático . . . . .                       | 85 |
| Figura 18 – Influência do NPC nos perfis das variáveis de controle, estado e adjuntas para o segundo PCOF matemático . . . . .                                       | 88 |
| Figura 19 – Influência da ordem fracionária nos perfis das variáveis de controle, estado e adjuntas para o segundo PCOF matemático . . . . .                         | 89 |
| Figura 20 – Influência da ordem fracionária na função objetivo e nas variáveis de controle e estado para o PCO singular 1 . . . . .                                  | 91 |
| Figura 21 – Influência da ordem fracionária na função objetivo e nas variáveis de controle e estado para o PCO singular 2 . . . . .                                  | 94 |
| Figura 22 – Influência da ordem fracionária no valor da função objetivo e dos perfis de estado e controle para o problema da mistura de catalisadores . . . . .      | 96 |
| Figura 23 – Influência da ordem fracionária no valor da função objetivo e perfis de estado e controle para o problema reator de batela . . . . .                     | 98 |
| Figura 24 – Sistema massa-mola-amortecedor com dois graus de liberdade . . . . .   | 99 |

|   |     |
|---|-----|
| Figura 25 – Influência da ordem fracionária no valor da função objetivo e atendimento das condições de fim . . . . .  | 101 |
| Figura 26 – Influência da ordem fracionária no valor dos perfis de estado e controle para o problema da massa-mola-amortecedor com restrição de fim . . . . . | 103 |
| Figura 27 – Curvas de Pareto para o problema da mistura de catalisadores . . . . .  | 105 |
| Figura 28 – Perfis de variáveis de estado e de controle considerando diferentes ordens fracionárias para o problema mistura do catalisador. . . . .           | 106 |
| Figura 29 – Curvas de Pareto para o problema do reator batela considerando diferentes valores do parâmetro $\alpha$ . . . . .                                 | 108 |
| Figura 30 – Perfis de variáveis de estado e de controle considerando diferentes ordens fracionárias para o problema reator batelada . . . . .                 | 110 |

# LISTA DE TABELAS

|   |     |
|---|-----|
| Tabela 1 – Influência do NPC na qualidade e no tempo de processamento da solução obtida considerando a metodologia proposta em EDOFs . . . . .                  | 68  |
| Tabela 2 – Erros absolutos e tempo de processamento considerando o MCO e o MPC para o sistema massa-mola com fonte constante . . . . .                          | 70  |
| Tabela 3 – Erros absolutos e tempo de processamento considerando o MCO e o MPC para o sistema massa-mola com uma fonte periódica . . . . .                      | 72  |
| Tabela 4 – Erros absolutos e tempo de processamento considerando o MCO e o MPC para o sistema mola-amortecedor com fonte constante . . . . .                    | 73  |
| Tabela 5 – Erros absolutos e tempo de processamento considerando o MCO e o MPC para o sistema mola-amortecedor com fonte periódica . . . . .                    | 75  |
| Tabela 6 – Erros absolutos e tempo de processamento considerando o MCO e o MCP para o sistema massa-mola-amortecedor sem força externa . . . . .                | 77  |
| Tabela 7 – Pontos experimentais (células, substrato e produto) no processo de fermentação da enzima lacase . . . . .  | 79  |
| Tabela 8 – Parâmetros estimados pelo algoritmo de ED no processo de fermentação da enzima lacase considerando modelos com ordem inteira e fracionária . . . . . | 81  |
| Tabela 9 – Influência do NPC no valor de $J$ e dos erros absolutos médios para o primeiro PCOF matemático . . . . .   | 83  |
| Tabela 10 – Influência da ordem fracionária no valor de $J$ e dos erros absolutos médios para o PCOF matemático . . . . .                                       | 85  |
| Tabela 11 – Influência do NPC no valor de $J$ e dos erros absolutos médios para o segundo PCOF matemático . . . . .   | 87  |
| Tabela 12 – Influência da ordem fracionária no valor de $J$ e dos erros absolutos médios para o segundo PCOF matemático . . . . .                               | 87  |
| Tabela 13 – Resultados obtidos para o problema singular 1 considerando diferentes valores para $\alpha$ . . . . .   | 90  |
| Tabela 14 – Resultados obtidos para o problema singular 2 considerando diferentes valores para $\alpha$ . . . . .   | 93  |
| Tabela 15 – Resultados obtidos para o problema de mistura de catalisadores considerando diferentes valores para $\alpha$ . . . . .                              | 95  |
| Tabela 16 – Resultados obtidos para o problema do reator batelada considerando diferentes valores de $\alpha$ . . . . .   | 98  |
| Tabela 17 – Resultados obtidos para o problema massa-mola-amortecedor considerando diferentes valores para $\alpha$ . . . . .                                   | 101 |
| Tabela 18 – Pontos da curva de Pareto para o problema de mistura do catalisadores. . . . .  | 105 |
| Tabela 19 – Pontos da curva de Pareto para o problema do reator batelada . . . . .  | 109 |





# SUMÁRIO

|         |  |    |
|---------|--|----|
| 1       | INTRODUÇÃO . . . . .   | 1  |
| 2       | ASPECTOS GERAIS . . . . .  | 5  |
| 2.1     | CONCEITOS GERAIS RELACIONADOS AO PCO . . . . .                         | 5  |
| 2.2     | FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DE UM PCO . . . . .                              | 6  |
| 2.3     | CONSISTÊNCIA DE INICIALIZAÇÃO . . . . .                                | 7  |
| 2.4     | ÍNDICE DIFERENCIAL PARA ORDEM INTEIRA . . . . .                        | 8  |
| 2.5     | CONDIÇÕES DE OTIMALIDADE PARA PCOs COM ORDEM INTEIRA . . . . .         | 9  |
| 3       | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA . . . . .  | 19 |
| 3.1     | MÉTODOS PARA A SOLUÇÃO DE PCOs . . . . .                               | 19 |
| 3.1.1   | MÉTODO INDIRETO . . . . .  | 19 |
| 3.1.1.1 | CÓDIGOS COMPUTACIONAIS . . . . .                                       | 19 |
| 3.1.1.2 | APLICAÇÕES DO MÉTODO INDIRETO . . . . .                                | 20 |
| 3.1.2   | MÉTODOS DIRETOS . . . . .  | 21 |
| 3.1.2.1 | PARAMETRIZAÇÃO DA VARIÁVEL DE CONTROLE . . . . .                       | 22 |
| 3.1.2.2 | PARAMETRIZAÇÃO DA VARIÁVEL DE CONTROLE E ESTADO . . . . .              | 22 |
| 3.1.2.3 | MÉTODO PARA A SOLUÇÃO DE NLPs . . . . .                                | 23 |
| 3.1.2.4 | CÓDIGOS COMPUTACIONAIS . . . . .                                       | 25 |
| 3.1.2.5 | APLICAÇÕES DO MÉTODO DIRETO . . . . .                                  | 26 |
| 3.1.3   | MÉTODOS HÍBRIDOS . . . . .   | 26 |
| 3.2     | FERRAMENTAS PARA A CARACTERIZAÇÃO DE EADs . . . . .                    | 27 |
| 3.2.1   | CÓDIGO ALGO . . . . .  | 28 |
| 3.2.2   | CÓDIGO PALGO . . . . .   | 28 |
| 3.3     | FERRAMENTAS PARA A CARACTERIZAÇÃO DE PCOs . . . . .                    | 29 |
| 3.3.1   | INDEX . . . . .  | 29 |
| 3.3.2   | ACIG . . . . .   | 29 |
| 3.3.3   | OTIMA . . . . .  | 30 |
| 3.4     | MODELOS DIFERENCIAIS FRACIONÁRIOS . . . . .                            | 30 |
| 3.4.1   | FERRAMENTAS DERIVATIVAS . . . . .                                      | 30 |
| 3.4.2   | CRITÉRIOS DE UM OPERADOR FRACIONÁRIO . . . . .                         | 31 |
| 3.4.3   | TIPOS DE DERIVADAS FRACIONÁRIAS . . . . .                              | 33 |
| 3.4.4   | INTERPRETAÇÃO GEOMÉTRICA E FÍSICA DAS DERIVADAS FRACIONÁRIAS . . . . . | 39 |
| 3.4.5   | ÍNDICE DIFERENCIAL PARA ORDEM FRACIONÁRIA . . . . .                    | 41 |
| 3.4.6   | CONSISTÊNCIA DIMENSIONAL DE MODELOS FRACIONÁRIOS . . . . .             | 42 |

|         |   |    |
|---------|---|----|
| 3.4.7   | APLICAÇÕES DO CÁLCULO FRACIONÁRIO . . . . .   | 44 |
| 3.5     | PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO FRACIONÁRIO . . . . .                                      | 47 |
| 3.5.1   | CONDIÇÕES DE OTIMALIDADE PARA PCOs COM ORDEM FRACIONÁRIA . . . . .                    | 47 |
| 3.5.2   | ESTRATÉGIAS NUMÉRIAS APLICADAS À PCOFs . . . . .                                      | 49 |
| 3.5.3   | APLICAÇÕES NO CAMPO DO CONTROLE ÓTIMO FRACIONÁRIO . . . . .                           | 50 |
| 3.6     | PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO . . . . .  | 51 |
| 3.6.1   | FORMULAÇÃO MATEMÁTICA . . . . .   | 51 |
| 3.6.1.1 | ÓTIMO DE PARETO . . . . .   | 51 |
| 3.6.2   | MÉTODOS HEURÍSTICOS . . . . .   | 52 |
| 3.6.2.1 | EVOLUÇÃO DIFERENCIAL . . . . .  | 52 |
| 3.6.2.2 | BUSCA FRACTAL ESTOCÁSTICA . . . . .   | 53 |
| 3.7     | MÉTODO DA COLOCAÇÃO ORTOGONAL . . . . .   | 56 |
| 4       | METODOLOGIA . . . . .   | 59 |
| 4.1     | EXTENSÃO DO MCO PARA O CONTEXTO FRACIONÁRIO . . . . .                                 | 59 |
| 4.2     | EXTENSÃO DO CÓDIGO OTIMA PARA O CONTEXTO FRACIONÁRIO . . . . .                        | 60 |
| 4.3     | ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO MULTI-OBJETIVO BASEADO NA BUSCA FRACTAL ESTOCÁSTICA . . . . . | 60 |
| 5       | RESULTADOS E DISCUSSÕES . . . . .   | 63 |
| 5.1     | INFLUÊNCIA DO TIPO DE DERIVADA FRACIONÁRIA . . . . .                                  | 65 |
| 5.2     | SIMULAÇÃO DE EDOFs MATEMÁTICAS . . . . .  | 66 |
| 5.3     | SIMULAÇÃO DO SISTEMA MASSA-MOLA-AMORTECE-DOR . . . . .                                | 68 |
| 5.3.1   | PRIMEIRO CASO . . . . .   | 69 |
| 5.3.2   | SEGUNDO CASO . . . . .  | 71 |
| 5.3.3   | TERCEIRO CASO . . . . .   | 72 |
| 5.3.4   | QUARTO CASO . . . . .   | 74 |
| 5.3.5   | QUINTO CASO . . . . .   | 76 |
| 5.4     | PROCESSO DE FERMENTAÇÃO DA LACASE . . . . .   | 78 |
| 5.5     | RESOLUÇÃO DE PCOFs USANDO O MÉTODO INDIRETO . . . . .                                 | 81 |
| 5.5.1   | PRIMEIRO CASO . . . . .   | 82 |
| 5.5.2   | SEGUNDO CASO . . . . .  | 86 |
| 5.6     | RESOLUÇÃO DE PCOFs MATEMÁTICOS SINGULARES USANDO O MÉTODO DIRETO . . . . .            | 87 |
| 5.6.1   | PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO SINGULAR 1 . . . . .                                       | 88 |
| 5.6.2   | PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO SINGULAR 2 . . . . .                                       | 91 |
| 5.7     | RESOLUÇÃO DE PCOFs MONO-OBJETIVOS USANDO O MÉTODO DIRETO . . . . .                    | 93 |

|       |  |     |
|-------|--|-----|
| 5.7.1 | MISTURA DE CATALISADORES . . . . .                                       | 93  |
| 5.7.2 | REATOR BATELADA . . . . .  | 96  |
| 5.7.3 | SISTEMA MASSA-MOLA-AMORTECEDOR . . . . .                                 | 99  |
| 5.8   | RESOLUÇÃO DE PCOFs MULTI-OBJETIVOS USANDO O MÉ-<br>TODO DIRETO . . . . . | 102 |
| 5.8.1 | MISTURA DE CATALISADORES . . . . .                                       | 102 |
| 5.8.2 | REATOR BATELADA . . . . .  | 106 |
| 5.9   | CONSIDERAÇÕES FINAIS . . . . .   | 108 |
| 6     | CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS . . . . .                                 | 111 |
| 6.1   | CONCLUSÕES . . . . .   | 111 |
| 6.2   | CONTRIBUIÇÕES DA TESE . . . . .  | 114 |
| 6.3   | SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS . . . . .                               | 115 |
|       | REFERÊNCIAS . . . . .  | 117 |



# 1 INTRODUÇÃO

Os primeiros estudos sobre a teoria de controle datam de 1750 e desde essa época ela vem se desenvolvendo e se aprimorando. De maneira geral, a teoria de controle pode ser subdividida em três grandes classes, a saber, a clássica, a moderna e a robusta. A primeira é marcada pela análise de respostas no domínio da frequência através do uso de funções de transferência e com aplicabilidade em modelos representados por sistemas lineares invariantes no tempo com uma única entrada e uma única saída. Já na segunda, a análise de respostas se dá no domínio do tempo e trabalha com sistemas lineares ou não, modelos invariantes no tempo e compostos de múltiplas entradas e múltiplas saídas. Por fim, a robusta é caracterizada pela junção das particularidades das duas anteriores e trabalha com problemas não estáveis calculando uma projeção de erros do controlador (OGATA, 2010).

Com origem na teoria de controle moderno, o Problema de Controle Ótimo (PCO) é uma abordagem focada na resolução de estudos de caso dinâmicos que são representados por modelos no domínio espaço-tempo. O seu objetivo é determinar o perfil do vetor de variáveis de controle que maximizam (ou minimizam) uma determinada função objetivo (também chamada de função custo ou índice de desempenho) (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979). Nas últimas décadas, a aplicabilidade dos conceitos relacionados ao PCO na indústria tem aumentado significativamente. Isto se deve, entre outros fatores, à popularidade das ferramentas numéricas associadas a necessidade de atender a demanda de melhor desempenho das operações de processo, estas sujeitas a cada vez mais restrições (LOGSDON; BIEGLER, 1989). Neste cenário, como aplicações práticas pode-se citar: a determinação das condições de operação ótimas para plantas químicas sujeitas à restrições de segurança, condições operacionais e ambientais (FEEHERY, 1998; MODAK; LIM; TAYEB, 1986) e a determinação da trajetória de robôs mecânicos (STRYK; HEIM, 2000). Outras aplicações podem ser vistas em processos industriais, sistemas de energia, veículos (terrestres, marítimos, fluviais, aéreos e espaciais), otimização estrutural, navegação, identificação de sistemas e etc (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979). No caso específico da área espacial, grande impulsionadora do desenvolvimento do controle ótimo, as aplicações estão na otimização de trajetórias de lançamento, determinação de órbitas e de atitude (estimação de estado), em órbitas intermediárias, otimização de órbita de transferência, determinação de órbita e de altitude na órbita de missão, correção de órbita entre outros (RIOS NETO, 2012).

Em linhas gerais, a resolução do PCO pode ser realizada considerando, basicamente, dois tipos de abordagens numéricas, a saber, o Método Direto (MD) e o Método Indireto (MI) (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979; LOGSDON; BIEGLER, 1989). O MD tem por objetivo transformar o problema original em um Problema de Programação Não Linear (PPNL) através de parametrização das variáveis de controle e/ou de estado (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979; LOGSDON; BIEGLER, 1989; STRYK; BULIRSCH, 1992; FEEHERY, 1998; LOBATO, 2004).

Este tipo de metodologia pode ser classificada em dois sub grupos, a sequencial e o simultâneo (BIEGLER; GROSSMANN, 2004). A estratégia sequencial consiste na discretização das variáveis de controle, enquanto que a estratégia simultânea consiste na discretização de ambas, controle e estado (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979). Na literatura especializada podem ser encontrados estudos de caso baseados na discretização usando aproximações por colocação ortogonal (OH; LUUS, 1977; BIEGLER, 1984), expansões em séries (ÇELIK; KARADUMAN; BAYRAM, 2003) e colocação ortogonal em elementos finitos (RENFRO, 1986; RENFRO; MORSHEDI; ASBJORNSEN, 1987; CUTHRELL; BIEGLER, 1987; LOGSDON; BIEGLER, 1989; LOGSDON; BIEGLER, 1992). Conforme destacado por Bryson, Ho e Siouris (1979), os MDs podem fornecer soluções sub-ótimas e resultados menos precisos quando comparada ao MIs. Todavia, têm como principal vantagem uma rápida convergência.

Por outro lado, o MI é caracterizado pela transformação do Problema de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial (PCOAD) em um equivalente algébrico-diferencial de valor no contorno a partir da aplicação das condições de otimalidade (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979). Esta abordagem surgiu graças ao desenvolvimento do Cálculo Variacional, permitindo desta forma a dedução das condições necessárias e suficientes para a solução de problemas de otimização dinâmica (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979). Os trabalhos de Bryson, Ho e Siouris (1979), Lynn, Parkin e Zahradnik (1970a) e Lynn e Zahradnik (1970b) aplicaram o princípio de Pontryagin (que fornece as condições de otimalidade), gerando as equações diferenciais adjuntas (ou de co-estado) e a condição estacionária necessária para a minimização da função Hamiltoniano. Atualmente, tal equacionamento pode ser facilmente obtido a partir do uso de programas de álgebra computacional simbólica, dentre os quais pode-se citar o código OTIMA (GOMES, 2000) e suas atualizações (LOBATO, 2004; PFEIFER, 2007). Em termos da qualidade, a solução via aplicação do MI é mais precisa do que aquela encontrada usando os MDs, já que as condições de otimalidade são atendidas. Por outro lado, o MI tem uma faixa de convergência restrita, bem como apresenta dificuldade de convergência já que é difícil definir uma estimativa inicial para o vetor de variáveis adjuntas (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979; LOBATO, 2004).

Como observado, ambas as abordagens apresentam vantagens e desvantagens. Para aliar as principais vantagens dos MDs (convergência) e do MI (precisão), vários autores têm propostos o acoplamento entre estas duas classes de métodos de forma a desenvolver a denominada estratégia híbrida (BULIRSCH; MONTRONE; PESCH, 1991b; BULIRSCH; MONTRONE; PESCH, 1991a; BULIRSCH; NERZ; PESCH, 1993; STRYK; BULIRSCH, 1992; LOBATO; OLIVEIRA-LOPES; MURATA, 2007). Neste cenário, emprega-se um MD para resolver o problema original (ou em equivalente sem restrições) de forma que a solução obtida possa ser utilizada como estimativa inicial para a resolução considerando o MI. Com esta estratégia objetiva-se aumentar, gradativamente, a complexidade do problema de forma que ao final do processo uma solução mais precisa possa ser obtida (BULIRSCH; MONTRONE; PESCH, 1991b; BULIRSCH; MONTRONE; PESCH, 1991a).

Nas últimas duas décadas, o desenvolvimento de novas técnicas numéricas empregadas para a resolução de PCOs associadas ao aprimoramento de processadores têm permitido avaliar aplicações mais complexas. Como exemplo, pode-se citar o estudo do Problema de Controle Ótimo Fracionário (PCOF), i.e., um PCO que apresenta restrições algébrico-diferenciais com ordem diferencial diferente da unidade. Assim, o PCOF se torna uma generalização do tradicional PCO. Do ponto de vista matemático, a ordem fracionária presente nestes modelos configura um novo parâmetro que deve ser avaliado no PCOF, visto que a variação do mesmo implica diretamente na dinâmica do modelo algébrico-diferencial que compõe as restrições no PCOF e, conseqüentemente, no valor da função objetivo obtida (LIMA; LOBATO; STEFFEN JR, 2021a; LIMA; LOBATO; STEFFEN JR, 2021b). Para o PCOF, naturalmente, faz-se necessário o desenvolvimento/aprimoramento de novas abordagens para a resolução deste tipo de problema, i.e., da obtenção das condições de otimalidade para problemas sem restrições (de igualdade e desigualdade) e com condições de fim para o contexto fracionário (BISWAS; SEN, 2011) e de estratégias para a integração deste tipo de modelo, como por exemplo o Método Pseudo-Espectral Fracionário (TANG; SHI; WANG, 2017), o uso de Polinômios Ortogonais de Chebyhev associado a Fórmula de Quadratura de Legendre-Gauss (BHRAWY et al., 2017) e a aplicação de Polinômios Ortonormais de Jacobi (DOHA et al., 2015).

O PCO e o PCOF configuram-se como estudos de caso complexos em engenharia e áreas afins. Isto se deve à presença de singularidades em modelos em que a variável de controle apresenta-se na forma linear e/ou as restrições de desigualdade não apresentam, explicitamente, a variável de controle (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979). Neste caso, utiliza-se o conceito de índice diferencial como ferramenta para a caracterização deste tipo de problema. Este pode ser definido como sendo o número mínimo de vezes em que um sistema algébrico-diferencial deve ser diferenciado, com relação ao vetor de variáveis independentes, de forma que o mesmo se torne um sistema puramente diferencial (PETZOLD, 1982). Em se tratando do PCO e do PCOF, as singularidades surgem devido à flutuação do índice diferencial, i.e.; existem regiões (ou fases) dentro do domínio em que existem ativações e desativações das restrições de desigualdade na variável de controle, o que, geralmente, proporciona, para cada fase, índices diferenciais distintos (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979).

Nos últimos anos, vários trabalhos têm sido desenvolvidos para o tratamento de PCOFs. Todavia, apesar disso, a grande maioria das aplicações analisadas ainda são da área da matemática, o que, na prática, implica na ausência de interpretações dos perfis obtidos sob o ponto de vista físico. Neste contexto, o principal objetivo desta tese é resolver PCOFs com diferentes características, avaliando a influência da ordem fracionárias nos perfis obtidos. Como objetivos secundários, pretende-se: *i*) propor a extensão do Método da Colocação Ortogonal (MCO), desenvolvido originalmente para a resolução de modelos diferenciais com ordem inteira, para o contexto fracionário; *ii*) validar a técnica de simulação proposta em problemas matemáticos e de engenharia; *iii*) propor e resolver um problema inverso considerando dados experimentais reais considerando o MCO no contexto fracionário para a determinação da ordem fracionária; *iv*)

atualizar o código OTIMA (GOMES, 2000; LOBATO, 2004; PFEIFER, 2007), responsável pela geração automática das condições de otimalidade em problemas de controle ótimo e proposto originalmente para derivadas inteiras, para o contexto fracionário; *v*) resolver PCOFs usando a abordagem indireta; *vi*) resolver PCOFs usando a abordagem direta no contexto mono e multi-objetivo. Para esta última classe de estudos de caso objetiva-se propor uma nova estratégia de otimização multi-objetivo, a saber o algoritmo *Multi-objective Optimization Stochastic Fractal Search* (MOSFS), baseado na associação entre o algoritmo de Busca Fractal Estocástica (SALIMI, 2015) e os operadores para a avaliação do critério de dominância de Pareto (PARETO, 1896) e distância da multidão (DEB, 2001).

Essa tese está organizada como segue. O Capítulo 2 apresenta aspectos gerais sobre a formulação do PCO, conceitos gerais empregados para caracterizar equações algébrico-diferenciais e condições de otimalidade. No Capítulo 3 é apresentado o estado da arte no que tange a classificação das abordagens para a resolução do PCO, sobre o cálculo fracionário e o MCO. Já o Capítulo 4 apresenta a metodologia proposta para simular modelos algébrico-diferenciais fracionários e, conseqüentemente, tratar PCOFs. O Capítulo 5 apresenta os resultados e discussões considerando estudos de caso com diferentes complexidades e características. Por fim, o Capítulo 6 apresenta as conclusões e as sugestões para trabalhos futuros.



## 2 ASPECTOS GERAIS

Neste capítulo são apresentados conceitos gerais sobre o Problema de Controle Ótimo (PCO), sua formulação matemática e definições sobre o índice diferencial e as condições de otimalidade considerando a ordem inteira.

### 2.1 CONCEITOS GERAIS RELACIONADOS AO PCO

Com origem fundamentada na teoria de Controle Moderno, o PCO pode ser descrito como um estudo de caso em que se deseja determinar o vetor de variáveis de controle para fins da maximização (ou minimização) de uma função objetivo (também denominada de função custo ou índice de desempenho). Uma característica muito importante é que este problema é constituído por restrições algébrico-diferenciais escritas em termos do vetor de variáveis de estado (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979). Para um bom entendimento do PCO sujeito à restrições algébrico-diferenciais, a seguir são apresentados, brevemente, alguns conceitos.

- Um sistema de Equações Algébrico-Diferenciais (EADs) consiste de um conjunto  $F$  definido genericamente por  $F(\dot{x}, x, y, t) = 0$  (em que  $x$  é um vetor de variáveis que está na forma algébrico-diferencial e  $y$  é um vetor de variáveis que está na forma algébrica) (PETZOLD, 1982).
- Uma das definições mais importantes empregadas para a caracterização de uma EAD é o Índice Diferencial. Este representa o número mínimo de vezes que o sistema algébrico-diferencial ou parte dele é diferenciado em relação à variável independente de forma que o vetor de variáveis que está na forma algébrica ( $y$ ) seja escrita na forma diferencial  $\dot{y}$  (PANTELIDES, 1988). Neste mesmo contexto, tem-se os conceitos de Índice Superior e de Redução de Índice. EADs de índice superior são sistemas de equações que apresentam ID maior do que a unidade. Devido à dificuldade associada à solução deste tipo de EADs, é desejável que o ID seja o menor possível, i.e., igual a unidade, visto que os *solvers* existentes para a integração destes modelos algébrico-diferenciais só são capazes de lidar com sistemas com ID igual a unidade (PETZOLD, 1982). Assim, para sistemas com índice superior faz-se necessário a redução do mesmo. Esta pode ser obtida por simples diferenciação das restrições que compõem o modelo original de forma que no final deste processo o ID seja igual a unidade.
- O Sistema Estendido Correspondente é constituído pelo conjunto de equações algébrico-diferenciais com índice superior que é reduzido a unidade, bem como de todas as relações matemáticas obtidas em decorrência desta redução. A obtenção deste sistema estendido

é muito importante, visto que este é necessário a inicialização consistente do modelo matemático para fins da integração e da geração das equações de otimalidade (LOBATO, 2004).

- Todo PCO apresenta, no mínimo, restrições algébrico-diferenciais. Todavia, a depender do estudo de caso abordado também podem ser consideradas restrições de fim (terminais) e de igualdade/desigualdade. A primeira restrição diz respeito às condições que o vetor de variáveis de estados deve satisfazer (iniciais e finais). Já o segundo tipo de restrição diz respeito a presença de restrições de igualdade e/ou desigualdade que devem ser satisfeitas ao longo da integração do modelo. Como esperado, a inclusão deste tipo de restrições implica no aumento da complexidade associada ao PCO.
- Por fim, ressalta-se o conceito de *Eventos*. Estes consistem de pontos específicos no domínio das variáveis independentes em que ocorre a flutuação do ID, i.e.; onde podem ocorrer descontinuidades no vetor de variáveis de estado e de controle no PCO (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979). Naturalmente, a localização destes pontos é de grande importância para a resolução de PCOs, bem como na identificação das fases que caracterizam a flutuação do ID e da ativação e desativação de restrições (LOBATO, 2004).

## 2.2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DE UM PCO

O PCO pode ser definido como (LOGSDON; BIEGLER, 1989):

$$\min_{u(t)} J = \Psi(x(t_f), t_f) + \int_0^{t_f} L(x, u, t) dt \quad (2.1)$$

sujeito às seguintes restrições algébrico-diferenciais:

$$h(\dot{x}, x, u, t) = 0 \quad (2.2a)$$

$$g(x, u, t) \leq 0 \quad (2.2b)$$

$$x^{\min} \leq x(t) \leq x^{\max} \quad (2.2c)$$

$$u^{\min} \leq u(t) \leq u^{\max} \quad (2.2d)$$

onde  $t$  é o tempo,  $x(t)$  é o vetor das variáveis de estado,  $u(t)$  é o vetor das variáveis de controle,  $\Psi$  e  $L$  representam o primeiro e o segundo termos da função objetivo  $J$ , sendo  $\Psi$  definida no tempo final  $t_f$ ,  $h$  e  $g$  representam os vetores de restrições de igualdade (algébricas e diferenciais) e desigualdade, respectivamente. Os superscritos min e max identificam, respectivamente, os limites inferior e superior do vetor de variáveis de estado e de controle. Para  $x \in \mathbb{R}^{n_x}$ ,  $u \in \mathbb{R}^{n_u}$ ,  $t \in \mathbb{R}^1$ ,  $\Psi : \mathbb{R}^{n_x} \rightarrow \mathbb{R}^1$ ,  $L : \mathbb{R}^{n_x+n_u+1} \rightarrow \mathbb{R}^1$ ,  $h : \mathbb{R}^{n_x+n_u+1} \rightarrow \mathbb{R}^{n_g}$  e  $g : \mathbb{R}^{n_x+n_u+1} \rightarrow \mathbb{R}^{n_h}$ .

## 2.3 CONSISTÊNCIA DE INICIALIZAÇÃO

Para que um sistema algébrico-diferencial possa ser resolvido é necessário estabelecer condições iniciais consistentes, i.e., um ponto de partida que atenda todas as equações que fazem parte do modelo a ser resolvido. Para analisar este conceito considere um sistema de EADs na sua forma geral:

$$F(x, \dot{x}, y, t) = 0 \quad (2.3)$$

em que  $t$  é a variável independente,  $x$  e  $y$  representam os vetores de variáveis na forma diferencial e algébrica, respectivamente.

Uma condição necessária mas não suficiente para que as condições iniciais sejam consistentes é que estas satisfaçam ao sistema, i.e.:

$$F(x_0, \dot{x}_0, y_0, t_0) = 0 \quad (2.4)$$

onde  $x_0$ ,  $\dot{x}_0$ ,  $y_0$  e  $t_0$  são as condições iniciais para as variáveis dependentes e independentes que constituem o modelo algébrico-diferencial original.

Como aplicação prática considere o seguinte modelo com ID igual a 1 e com condições iniciais dadas como  $x_{1_0}$ ,  $x_{2_0}$ ,  $\dot{x}_{1_0}$  e  $\dot{x}_{2_0}$  (PANTELIDES, 1988):

$$\frac{dx_1}{dt} + \frac{dx_2}{dt} = a(t) \quad (2.5)$$

$$x_1 + x_2^2 = b(t) \quad (2.6)$$

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

Para reescrever o modelo acima (algébrico-diferencial) como um puramente diferencial faz-se necessário transformar a equação algébrica em uma equivalente diferencial. Isto pode ser realizado via diferenciação da equação algébrica com relação a variável independente  $t$ . Neste caso, para que se tenha uma inicialização consistente, o modelo final deve, obrigatoriamente, satisfazer a equação resultante da diferenciação, i.e.:

$$\frac{dx_1}{dt} + 2x_2 \frac{dx_2}{dt} = \dot{b}(t) \quad (2.7)$$

Portanto, mesmo os sistemas com ID igual a unidade podem apresentar problemas de inicialização, que são inerentes a todos os sistemas de índice superior. Em outras palavras, enquanto a inicialização da maioria dos sistemas de índice 1 é similar à das EDOs, todos os sistemas de índice superior e alguns sistemas de índice 1 apresentam dificuldades. Além disto, é preciso localizar e evitar as diferenciações de equações que não trazem informações adicionais. O que se busca, portanto, são formas de extrair dos sistemas informações fundamentais contidas nos mesmos, mas que não são aparentes. Conforme destacado por Petzold (1982), os atuais códigos numéricos empregados para a resolução de EADs frequentemente falham ou se tornam extremamente ineficientes se os valores iniciais são inconsistentes.

## 2.4 ÍNDICE DIFERENCIAL PARA ORDEM INTEIRA

Como descrito anteriormente, o ID está relacionado com o número de vezes necessárias para a transformação de um modelo algébrico-diferencial em um puramente diferencial. Para ilustrar este conceito, considere o tradicional problema do pêndulo conforme a Figura 1. Este é formado por um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) de segunda ordem relativas às equações do movimento em coordenadas cartesianas associada a uma equação algébrica geométrica.

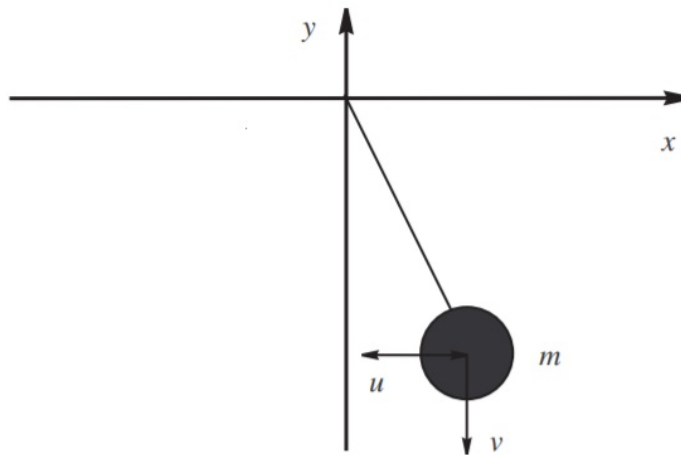


Figura 1 – Representação esquemática do problema do pêndulo.

Para fins de aplicação, o modelo original (de segunda ordem) é reescrito como um de primeira ordem:

$$\frac{dx}{dt} = u \quad (2.8)$$

$$\frac{dy}{dt} = v \quad (2.9)$$

$$\frac{du}{dt} = -\frac{x\lambda}{m} \quad (2.10)$$

$$\frac{dv}{dt} = -g - \frac{y\lambda}{m} \quad (2.11)$$

Já a restrição geométrica é dada como:

$$x^2 + y^2 = L^2 \quad (2.12)$$

onde  $t$  é o tempo,  $x$  e  $y$  representam os deslocamentos,  $u$  e  $v$  representam as velocidades,  $g$  é aceleração da gravidade,  $L$  o comprimento do fio,  $m$  a massa da esfera,  $\lambda$  o multiplicador associado à variável de estado algébrica  $T$ , onde  $T = \lambda/m$ . Observe que  $dT/dt$  pode ser obtido derivando Eq. (2.10) e Eq. (2.11), mas isto introduziria derivadas segundas que não poderiam ser eliminadas. Portanto, derivando a Eq. (2.12) com relação ao tempo e substituindo as derivadas

definidas em Eq. (2.8) e em Eq. (2.9) tem-se:

$$x \frac{dx}{dt} + y \frac{dy}{dt} = 0 \quad (2.13)$$

$$xu + yv = 0 \quad (2.14)$$

Diferenciando a Eq. (2.14) e fazendo as substituições necessárias obtém-se Eq. (2.15) e Eq. (2.16), respectivamente:

$$x \frac{du}{dt} + y \frac{dv}{dt} + u^2 + v^2 = 0 \quad (2.15)$$

$$-x^2T - yg - y^2T + u^2 + v^2 = 0 \Rightarrow T = \frac{u^2 + v^2 - yg}{L^2} \quad (2.16)$$

Diferenciando a Eq. (2.16) e substituindo as respectivas derivadas obtém-se:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-3vg - 2T(uv + yv)}{L^2} \quad (2.17)$$

Portanto, após 3 diferenciações as equações algébrico-diferenciais originais foram transformadas num conjunto de equações puramente diferenciais dadas pelas Eqs. (2.8-2.11) e pela Eq. (2.17). Isto significa que o índice diferencial deste sistema é igual a 3. Além disso, pode-se integrar o modelo formado por  $\dot{x}$ ,  $\dot{y}$ ,  $\dot{v}$ ,  $\dot{u}$  e  $\dot{T}$  a partir de uma inicialização consistente, i.e.; definido os valores iniciais para as variáveis  $x$ ,  $y$ ,  $v$  e  $u$  e conhecendo-se os valores dos parâmetros  $g$  e  $L$  obtém-se a condição inicial consistente para a variável  $T$  usando todas as relações encontradas durante a redução do ID.

## 2.5 CONDIÇÕES DE OTIMALIDADE PARA PCOS COM ORDEM INTEIRA

Considere o seguinte PCO (FEEHERY, 1998):

$$\min_{u(t)} J = \Psi(x(t_f), t_f) + \int_0^{t_f} L(x, u, t) dt \quad (2.18)$$

sujeito ao sistema de EADs totalmente implícito:

$$f(\dot{x}, x, u, t) = 0 \quad (2.19)$$

e com condições iniciais consideradas consistentes dadas por:

$$\varphi(\dot{x}(t_0), x_0, u(t_0), t_0) = 0 \quad (2.20)$$

onde  $x$  e  $u$  representam os vetores de variáveis de estado (na forma algébrica e diferencial) e controle, respectivamente,  $t$  é o tempo ( $t_f$  é o tempo final),  $\Psi$  e  $L$  representam o primeiro e

o segundo termos da função objetivo  $J$ . Além disso,  $J(\cdot), L(\cdot), \Psi(\cdot) \rightarrow \mathbb{R}, f(\cdot), \varphi(\cdot) \rightarrow \mathbb{R}^{m_x}$ ,  $x \in \mathbb{R}^{m_x}$  e  $u \in \mathbb{R}^{m_u}$ .

A função  $\Psi$  na Eq. (2.18) pode ser expressa como:

$$\Psi(x(t_f), t_f) = \Psi(x(t_0), t_0) + \int_{t_0}^{t_f} \frac{d\Phi}{dt} dt \quad (2.21)$$

Admitindo que o tempo inicial ( $t_0$ ) e a condição  $x(t_0)$  são fixos, a função objetivo (Eq. (2.18)) pode ser reescrita como:

$$J = \int_{t_0}^{t_f} \bar{L}(\dot{x}, x, u, t) dt \quad (2.22)$$

onde:

$$\bar{L}(\dot{x}, x, u, t) = \frac{\partial \Psi}{\partial t} + L = \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^T \dot{x} + L \quad (2.23)$$

A função objetivo *aumentada* é obtida pela junção das restrições à função objetivo original através do uso de variáveis adjuntas  $\lambda(t)$ :

$$\bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} [\bar{L}(\dot{x}, x, u, t) + \lambda(t)^T f(\dot{x}, x, u, t)] dt \quad (2.24)$$

Por conveniência a função *Hamiltoniano* é definida como:

$$H(\dot{x}, x, u, \lambda, t) = \bar{L}(\dot{x}, x, u, t) + \lambda(t)^T f(\dot{x}, x, u, t) \quad (2.25)$$

Para obter as condições necessárias de otimalidade, é necessário definir a variação de um funcional:

$$\bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} H(\dot{x}, x, u, \lambda, t) dt \quad (2.26)$$

O incremento do funcional é:

$$\Delta \bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} [H(\dot{x} + \delta \dot{x}, x + \delta x, u + \delta u, \lambda + \delta \lambda, t) - H(\dot{x}, x, u, \lambda, t)] dt + \int_{t_f}^{t_f + \delta t} H(\dot{x}, x, u, \lambda, t) dt$$

Expandindo o incremento em uma série de Taylor em torno do ponto  $(\dot{x}(t), x(t), u(t))$  e extraíndo as condições que são lineares tem-se a variação de  $\bar{J}$ :

$$\delta \bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} \left( \frac{\partial H}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} + \frac{\partial H}{\partial x} \delta x + \frac{\partial H}{\partial u} \delta u + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right) dt + H(\dot{x}, x, u, \lambda, t) \delta t_f \quad (2.27)$$

que pode ser simplificada através da integração por partes do primeiro termo:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} \left( \left( \frac{\partial H}{\partial x} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial H}{\partial \dot{x}} \right) \right) \delta x + \frac{\partial H}{\partial u} \delta u + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right) dt + \left( \frac{\partial H}{\partial \dot{x}} \right)_{t=t_f} \delta x(t_f) + \\ + H(\dot{x}, x, u, \lambda, t) \delta t_f \end{aligned} \quad (2.28)$$

Usando a seguinte relação:

$$\delta x(t_f) = \delta x_f - \dot{x} \delta t_f \quad (2.29)$$

e substituindo a Eq. (2.29) na Eq. (2.28) tem-se:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J} = & \left( \frac{\partial H}{\partial \dot{x}} \right)_{t=t_f} \delta x_f + \left( H - \frac{\partial H}{\partial \dot{x}} \right)_{t=t_f} \delta t_f + \\ & + \int_{t_0}^{t_f} \left( \left( \frac{\partial H}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial H}{\partial \dot{x}} \right) \right) \delta x + \frac{\partial H}{\partial u} \delta u + \frac{\partial \lambda}{\partial x} \delta \lambda \right) dt \end{aligned} \quad (2.30)$$

As condições necessárias de primeira ordem para o ótimo podem ser determinadas fixando a variação de  $\bar{J}$  igual a zero. As condições são:

$$\left( \frac{\partial H}{\partial x} \right) - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial H}{\partial \dot{x}} \right) = 0 \quad (2.31a)$$

$$\frac{\partial H}{\partial u} = 0 \quad (2.31b)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \lambda} = 0 \quad (2.31c)$$

$$\left( \frac{\partial H}{\partial \dot{x}} \right)_{t=t_f} + \left( H - \frac{\partial H}{\partial \dot{x}} \right)_{t=t_f} = 0 \quad (2.31d)$$

As Eqs. (2.31a)-(2.31d) definem um sistema de EADs de valor no contorno. Estas condições podem ser simplificadas, expandindo os termos que incluem  $\Phi$  na Eq. (2.31a):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial}{\partial \dot{x}} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial \dot{x}} \dot{x} \right) \right) \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial t} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \dot{x} \right) + \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t \partial x} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \dot{x} \right) = 0$$

Admitindo que as derivadas parciais de segunda ordem são contínuas, a ordem de diferenciação pode se mudada e a expressão inteira igualada a zero.

Substituindo Eqs. (2.25) e (2.26) no sistema constituído pelas Eq. (2.31a) a Eq. (2.31d) obtêm-se:

$$\frac{\partial L}{\partial x} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial x} - \dot{\lambda}^T \frac{\partial f}{\partial x} - \lambda^T \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \right) = 0 \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial L}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial u} = 0 \quad (2.33)$$

$$f(\dot{x}, x, u, t) = 0 \quad (2.34)$$

$$\left( \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)_{t=t_f} \delta x_f + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} + L + \lambda^T f - \lambda^T \left( \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \right) \dot{x} \right)_{t=t_f} \delta t_f = 0 \quad (2.35)$$

Estas condições são uma generalização das condições necessárias para o ótimo definidas a partir de PCOs.

A abordagem algébrico-diferencial faz com que a dimensão do vetor de variáveis adjuntas na forma diferencial seja igual à dimensão do vetor das variáveis de estado que estão na forma diferencial. Entretanto, quando a abordagem está na forma puramente diferencial, a dimensão das variáveis adjuntas é igual à dimensão de todas as variáveis de estado, independentemente de estas estarem na forma algébrica ou diferencial. Por se tratar de um problema de valor no contorno, a solução do sistema se torna interessante pois o número de condições de contorno a serem especificadas na abordagem algébrico-diferencial é menor do que na puramente diferencial. Por exemplo, o número de variáveis adjuntas definidas em  $t = t_f$  será menor.

Na sequência serão apresentados casos particulares que envolvem problemas com tempos fixos finais ou livres, como também, problemas com variáveis de estado especificadas no tempo final.

*a) Problemas com Tempo Final Fixo*

Se  $t_f$  é fixo então  $\delta t_f$  é igual a zero na Eq. (2.35). Se a variável de estado não for especificada no tempo final, as condições no ponto final têm que satisfazer a:

$$\left( \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{t=t_f} \delta x_f = 0 \quad (2.36)$$

Como  $\delta x_f$  é arbitrário, isso implica que  $\delta x_f \neq 0$ , portanto temos nesse caso:

$$\left( \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{t=t_f} = 0 \quad (2.37)$$

As condições necessárias são dadas pelas Eqs. (2.32) a (2.34).

*b) Problemas com Tempo Final Livre*

Como  $t_f$  é livre, não é possível fazer a suposição de que  $\delta t_f = 0$ . Assim, neste caso, além das condições dadas pelas equações Eqs. (2.32) a (2.34), para o caso em que se tem as variáveis de estado fixas no tempo final ou variáveis de estado livre, o sistema deverá atender a seguinte condição:

$$\left( \lambda^T \frac{\partial \psi}{\partial x} + L + \lambda^T f - \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \dot{x} \right)_{t=t_f} = 0 \quad (2.38)$$

*c) Algumas Variáveis são Especificadas no Tempo Final Fixo*

Seja o problema de otimização definido pelas Eqs. (2.18) a (2.20), com algumas variáveis de estado especificadas em  $t = t_f$ . Se  $x_i$ , o  $i$ -ésimo componente do vetor de estado  $x$ , é definido em  $t = t_f$ , então como a variação  $\delta x_i(t_f)$  na Eq. (2.35) não pode ser nula, é necessário que a Eq. (2.36) seja satisfeita. A Eq. (2.38),  $\partial H / \partial u = 0$  necessita de uma condição adicional para o problema com restrição final. No presente caso,  $\delta u(t)$  não é completamente arbitrário, o conjunto admissível de  $\delta u(t)$  é sujeito às restrições:

$$\delta x_i(t_f) = 0, \quad i = 1, \dots, q \quad (2.39)$$



Um conjunto admissível de  $\delta u(t)$  pode ser definido como os valores de  $\delta u(t)$  que satisfazem todas as restrições do problema, como por exemplo a Eq. (2.39). Desde que  $x_i(t_f)$  especificado para  $i = 1, \dots, q$ , é consistente considerar que:

$$\varphi = \varphi(x_{q+1}, \dots, x_n)_{t=t_f} \quad (2.40)$$

As Eqs. (2.32) a (2.34) permanecem inalteradas para este caso, apenas a condição de contorno em  $t = t_f$  passa a ser dada por:

$$\lambda_i(t_f) = \begin{cases} 0, & \text{para } j = 1, \dots, q \\ \left( \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)_{t=t_f}, & \text{para } j = q + 1, \dots, n \end{cases} \quad (2.41)$$

#### d) Funções de Variáveis de Estado Especificadas no Tempo Final Fixo

Seja o problema de otimização definido pelas Eqs. (2.18) a (2.20) sujeito a restrição definida pela Eq. (2.42), de dimensão  $q$ , função das variáveis de estado e com o valor definido no tempo final.

$$\varphi(x(t_f), t_f) = 0 \quad (2.42)$$

A Eq. (2.42) pode ser adicionada à função objetivo através de multiplicadores de Lagrange  $\nu$ , um vetor de dimensão  $q$ .

$$J = \psi(x(t_f), t_f) + \nu^T \varphi(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} L(x, u, t) dt \quad (2.43)$$

Definindo:

$$\Psi = \psi(x(t_f), t_f) + \nu^T \varphi(x(t_f), t_f) \quad (2.44)$$

O conjunto de parâmetros  $\nu$  devem ser escolhidos para satisfazer a Eq. (2.42). Portanto as condições necessárias são dadas pelas Eqs. (2.32) a (2.34) e por:

$$\lambda^T(t_f) = \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \nu^T \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_{t=t_f} \quad (2.45)$$

A Eq. (2.33) determina o vetor  $u(t)$ , as Eqs. (2.32) a (2.37) formam um sistema de EADs de valor no contorno com  $q$  parâmetros  $\nu$  para serem determinados na Eq. (2.45) tal que a Eq. (2.42) seja satisfeita.

#### e) Problemas com Restrição de Trajetória

Nesta seção consideraremos os problemas de otimização com restrições de trajetória, que se aplicam a pontos intermediários ou sobre toda a trajetória.

### *i) Restrições de Igualdade na Variável de Controle*

Seja o seguinte PCO definido como:

$$\min_{u(t)} J = \Psi(x(t_f), t_f) + \int_0^{t_f} L(x, u, t) dt \quad (2.46)$$

$$\varphi(x(t_f), t_f) = 0 \quad (2.47)$$

$$f(\dot{x}, x, u, t) = 0 \quad (2.48)$$

$$C(u, t) = 0 \quad (2.49)$$

onde  $C(u, t)$  é o vetor de restrições de igualdade em termos da variável de controle. Neste caso  $u(t)$  é um vetor de variáveis de controle de dimensão  $m \geq 2$  e  $C$  é uma função escalar. O *Hamiltoniano* (Eq. (2.25)) será redefinido como:

$$H(\dot{x}, x, u, \lambda, t) = \bar{L}(\dot{x}, x, u, t) + \lambda^T f(\dot{x}, x, u, t) + \mu C(u, t) \quad (2.50)$$

As condições necessárias (Eqs. (2.32), (2.34) e (2.35)) permanecem inalteradas, sendo que Eq. (2.33) será redefinida como:

$$\frac{\partial L}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial u} + \mu \frac{\partial C}{\partial u} = 0 \quad (2.51)$$

O sistema formado pelas condições necessárias e pela Eq. (2.49), representa as  $m + 1$  condições para determinar o  $m$ -ésimo componente do vetor de controle  $u(t)$  e a função escalar  $\mu(t)$ .

### *ii) Restrições de Igualdade nas Variáveis de Controle e Estado*

Neste caso a Eq. (2.49) será substituída por:

$$C(x, u, t) = 0 \quad (2.52)$$

Aqui as condições obtidas para seção anterior podem ser aplicadas, entretanto um novo termo será acrescentado à Eq. (2.32), que é reescrita como:

$$\frac{\partial L}{\partial x} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial x} + \mu^T \frac{\partial C}{\partial x} - \dot{\lambda}^T \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} - \lambda^T \frac{d}{dt} \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} = 0 \quad (2.53)$$

### *iii) Restrições de Igualdade na Variável de Estado*

Se a restrição não tiver dependência explícita na variável de controle, ocorre uma complexidade adicional. Assim, considere a seguinte restrição:

$$S(x, t) = 0 \quad (2.54)$$

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

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} \dot{x} = \frac{\partial S}{\partial x} f(x, u, t) = 0 \quad (2.55)$$

A Eq. (2.55) pode ou não revelar a dependência da variável de controle  $u$ . Se a Eq. (2.32) revelar a dependência de  $u$ , então pode ser tratada como uma restrição do tipo da Eq. (2.52). Para isto, deve-se eliminar um componente de  $x$  como função dos  $n - 1$  componentes remanescentes usando a Eq. (2.54) como uma condição de contorno em  $t = t_0$  ou  $t = t_f$ . Se a Eq. (2.55) não revelar a variável de controle explicitamente, deve-se repetir o processo de diferenciar a equação até que a variável de controle  $u$  seja revelada explicitamente. Surge então 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 que se obtenha a dependência da variável de controle  $u$ . A  $q$ -ésima derivada temporal da restrição da Eq. (2.54), é representada por:

$$S^q(x, u, t) = 0 \quad \text{onde} \quad S^q(x, u, t) = \frac{d^q S}{dt^q} \quad (2.56)$$

Neste caso  $q$  componentes de  $x$  devem ser eliminados manuseando os  $(n - q)$  componentes remanescentes, usando as  $q$  relações:

$$\begin{bmatrix} S(x, t) \\ S^1(x, t) \\ \vdots \\ S^{q-1}(x, t) \end{bmatrix} = 0 \quad (2.57)$$

ou adicionando a Eq. (2.57) como um conjunto de condições de contorno em  $t = t_0$  ou  $t = t_f$ .

A existência de restrições de igualdade nas variáveis de estado em um PCO pode aumentar o ID. É interessante observar que uma restrição de igualdade pode surgir quando um PCO é formado por Equações Diferenciais Implícitas do tipo:

$$F(\dot{x}, x, u, p, t) = 0 \quad (2.58)$$

onde  $u$  é a variável de controle,  $p$  é o parâmetro e  $x$  é a variável de estado, é reescrito definindo uma nova variável de controle  $u^* = [u, v]$  tal que o Sistema Aumentado definido como:

$$\dot{x} = v \quad (2.59)$$

$$G(x, u, p, v, t) = 0 \quad (2.60)$$

Os teoremas a seguir estabelecem as condições em que a adição da restrição de igualdade no estado ao sistema original resultará em um sistema aumentado de EADs de índice superior (FEEHERY, 1998):

**Teorema 2.2.1** : Sejam  $n_g \leq n_u$  restrições de estado do seguinte tipo:

$$g(x) = 0 \quad (2.61)$$

onde  $n_g$  é o número de restrições de igualdade e  $n_u$  o número de variáveis de controle e existe algum  $\chi \subseteq x$ ,  $\chi \in \mathbb{R}^{n_g}$  tal que  $\partial g / \partial \chi$  é não singular. Para explicitar a variável de controle são necessárias no mínimo 2 diferenciações, por exemplo, gera-se uma EAD com  $i \geq 2$ , supondo que a EAD é solucionável.

$$\dot{x} - \phi(x, u, t) = 0 \quad (2.62)$$

**Teorema 2.2.2** : Sejam  $n_g \leq n_u$  restrições de estado do tipo:

$$g(x, u) = 0 \quad (2.63)$$

Se a EAD é solucionável, então ao explicitar a EDO da forma Eq. 2.63, gera-se uma EAD com  $i \geq 1$ .

#### iv) Restrições de Desigualdade nas Variáveis de Controle

Neste caso o problema de otimização considerado para simplificar a análise, é de tempo fixo e sem restrição definida no ponto final, sujeito a uma restrição de desigualdade do tipo:

$$C(u, t) \leq 0 \quad (2.64)$$

Se o *Hamiltoniano* for definido por:  $H^0 = \lambda f + L$  (Eq. 2.25), considerando que  $\delta x_i = 0$ ,  $\partial H / \partial \lambda = 0$  e para simplificações os coeficientes de  $\delta x$  são iguais a zero, pode ser reescrita como:

$$\delta J = \int_0^{t_f} H_u^0 \delta u dt = \int_0^{t_f} H_u^0(x, \lambda, u, t) dt \quad (2.65)$$

As condições necessárias para este problema são as Eqs. (2.32) a (2.35). Para  $u(t)$  ser minimizado,  $\delta J \geq 0$  para todo o conjunto admissível de  $u(t)$ . Isto implica que  $\delta H^0 \geq 0$  para todo  $t$  e todo conjunto admissível  $u(t)$ . Os pontos onde ocorrem os valores ótimos de  $u(t)$  tem a seguinte propriedade:

$$\delta H^0 = \delta H_u^0 \delta u \geq 0 \quad (2.66)$$

$$\delta C = C_u \delta u \leq 0 \quad (2.67)$$

Se o *Hamiltoniano* for definido por:

$$H = \lambda^T f + L + \mu^T C \quad (2.68)$$

Aqui as condições necessárias são dadas pelas equações Eqs. (2.32) a (2.34), com uma condição adicional:

$$\mu = \begin{cases} \geq 0, & \text{se } C = 0 \\ = 0, & \text{se } C < 0 \end{cases} \quad (2.69)$$

A exigência do multiplicador ser positivo quando  $C = 0$ , pode ser interpretada como uma condição para que o gradiente  $H_u \equiv \lambda^T f_u + L_u$  seja obtido somente violando as restrições. Quando a restrição de desigualdade torna-se ativa em algumas porções da trajetória, o problema de otimização apresenta arcos com restrição e sem restrição. Nos pontos de junção, entre os arcos restritos e não restritos, a variável de controle, pode ou não ser contínua. Se  $u(t)$  for descontínuo, o ponto é chamado de canto (*corner*). Os *Corners* podem ocorrer em qualquer ponto da trajetória, mas não são mais prováveis de ocorrer nos pontos de junção que no meio do arco sem restrição. *A priori* não existe método para determinar a existência dos cantos. Se  $u(t)$  for contínuo nos pontos de junção, seguido da continuidade de  $\lambda$ ,  $\partial H/\partial u$ ,  $H$  então  $\mu(t)$  também é contínuo.

v) **Restrições de Desigualdade nas Variáveis de Controle e Estado**

Neste caso a restrição de desigualdade é dada por:

$$C(x, u, t) \leq 0 \quad (2.70)$$

O problema é manuseado da mesma forma que o problema de funções de variáveis de estado especificadas no tempo final fixo.

O *Hamiltoniano* é definido como Eq. (2.68):

$$H = \lambda^T f + L + \mu^T C \quad (2.71)$$

em que

$$\mu = \begin{cases} > 0, & \text{se } C = 0 \\ = 0, & \text{se } C < 0 \end{cases} \quad (2.72)$$

e as equações de Euler-Lagrange são assim definidas:

$$\dot{\lambda}^T = -\frac{\partial H}{\partial x} \begin{cases} -L_x - \lambda^T f_x - \mu C_x, & \text{se } C = 0 \\ -L_x - \lambda^T f_x, & \text{se } C < 0 \end{cases} \quad (2.73)$$

A condição que determina  $u(t)$  é dada por:

$$H_u \equiv L_u + \lambda^T f_u + \mu C_u \quad (2.74)$$

Quando  $C < 0$ ,  $\mu = 0$  a Eq. (2.74) determina  $u(t)$ . Para  $C = 0$ , a Eqs. (2.72) e (2.74) determinam  $\mu(t)$  e  $u(t)$  simultaneamente.

vi) **Restrições de Desigualdade nas Variáveis de Estado**

Seja a restrição de desigualdade dada por:

$$S(x, t) \leq 0 \quad (2.75)$$

Considere que  $S$  e  $u$  são escalares. A derivada temporal da Eq. (2.75) e a substituição de  $\dot{x}$  devem ser realizadas até que seja revelada a dependência explícita de  $u$ . Se forem necessárias

$q$  derivadas temporais, a Eq. (2.75) é denominada restrição de desigualdade na variável de estado de  $q$ -ésima ordem. Aqui  $S^q(x,u,t)$  representa a  $q$ -ésima derivada temporal total de  $S$ . O Hamiltoniano é definido como:

$$H \equiv L + \lambda^T f + \mu S^q \quad (2.76)$$

onde a restrição está ativa se:

$$S^q = 0 \Rightarrow S = 0 \quad (2.77)$$

A restrição não está ativa se:

$$\mu = 0 \Rightarrow S < 0 \quad (2.78)$$

As condições necessárias são dadas pelas Eqs. (2.32) a (2.34), substituindo  $C$  por  $S^q$ . A condição necessária para  $\mu(t)$  se a restrição está ativa é

$$\mu(t) \geq 0 \Rightarrow S = 0 \quad (2.79)$$

Aqui também ocorre o aparecimento de arcos restritos e arcos não restritos. Os arcos restritos devem ser tangentes aos arcos não restritos nos pontos de junção, o que faz com que apareçam descontinuidades nos pontos de entrada e saída de qualquer arco. Daqui surgem as restrições de tangência, que são denominadas restrições de contorno em pontos interiores, definidas por:

$$N(x,t) = \begin{bmatrix} S(x,t) \\ S^1(x,t) \\ \vdots \\ S^{q-1}(x,t) \end{bmatrix} = 0 \quad (2.80)$$

Pode-se escolher o ponto de entrada em vez do ponto de saída para satisfazer estas restrições interiores, então os  $\lambda$  e o  $H$  serão descontínuos no ponto de entrada  $t = t_1$  e contínuos no ponto de saída. O vetor  $N(x,t)$  (Eq. (2.80)) representa as condições de salto. Bryson, Ho e Siouris (1979) através de manipulações semelhantes mostraram que as condições de salto no ponto de entrada podem ser obtidas por:

$$\lambda^T(t_1^-) = \lambda^T(t_1^+) + \pi^T \frac{\partial N}{\partial x(t_1)} \quad (2.81)$$

$$H^T(t_1^-) = H^T(t_1^+) + \pi^T \frac{\partial N}{\partial t_1} \quad (2.82)$$

onde  $t_1^-$  significa o tempo anterior a  $t_1$  e  $t_1^+$  o tempo logo após o  $t_1$ ,  $\pi$  é um vetor de multiplicadores de Lagrange de dimensão  $q$  usados para adicionar as condições de junção (Eq. (2.82)) à função objetivo, que são determinados de tal forma que atendam a estas condições.

## 3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 3.1 MÉTODOS PARA A SOLUÇÃO DE PCOS

#### 3.1.1 MÉTODO INDIRETO

O Método Indireto (MI) tem a sua fundamentação baseada no desenvolvimento do Cálculo Variacional. Este consiste na dedução das condições necessárias e suficientes para a resolução de PCO (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979). Trabalhos desenvolvidos por Lynn, Parkin e Zahradnik (1970a), Bryson, Ho e Siouris (1979) e Lynn e Zahradnik (1970b) demonstram o denominado Princípio de Pontryagin (PP). Este consiste na transformação do PCO original em um equivalente de valor no contorno algébrico-diferencial. Isso se deve a geração das equações diferenciais adjuntas (também conhecidas como co-estado) e da condição estacionária, ambas definidas em função do Hamiltoniano.

Uma das principais vantagens do MI é a precisão associada a este tipo de abordagem (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979; CHUDEJ; GÜNTHER, 1999). Por outro lado, a geração das equações de otimalidade para PCOs não é uma tarefa simples, dada a não linearidade inerente neste tipo de problema. Todavia, esta tarefa se torna simples já que existem vários *softwares* de álgebra computacional simbólicos capazes de obter tal equacionamento de forma automática. Uma outra importante desvantagem é a dificuldade de convergência devido à natureza do problema de valor no contorno algébrico-diferencial resultante da aplicação das condições de otimalidade (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979).

A seguir são apresentadas as condições necessárias de otimalidade para PCOs com diferentes características.

##### 3.1.1.1 CÓDIGOS COMPUTACIONAIS

A seguir são apresentados alguns dos principais códigos computacionais usados para solucionar as equações de otimalidade (problemas representados como EADs de valor no contorno):

- COMMIN (*Continuous Optimization using the Maximum Principle with Minimum Programming*) (OUELLET; BUI, 1993): baseado no método de Euler, o código utiliza aproximações centrais para resolver o PCO resultante da aplicação do PP. O sistema é resolvido usando o método de Newton-Raphson com refinamento da malha através da extrapolação de Richardson.
- COLDAE (*Collocation Differential Algebraic Equation Method*) (ASCHER; SPITERI,

1994): código que trabalha com MIs e é caracterizado por ser subrotina geral para a solução de EDOs de valor no contorno. Ele é usado em EADs de valor no contorno não lineares semi-implícitas de índice no máximo 2 e totalmente implícitos de índice 1. Como método, o código utiliza a colocação polinomial por partes em pontos gaussianos associado ao método de projeção de Ascher-Petzold.

- COLFIT (*COLlocation FITting*) (SCHULZ, 1996): utiliza o método de colocação e foi desenvolvido na plataforma Fortran. O autor conseguiu demonstrar a aplicação em PCO singular e com restrições no estado de índice 1. Para determinar as variáveis algébricas, o código utiliza as condições de consistência em cada nó. As invariantes decorrentes da redução do índice são empregadas para garantir a estabilização da solução.
- PARFIT (*PARAmeter FITting*) (SCHULZ, 1996): implementa o método do chute múltiplo na plataforma Fortran para explorar as invariantes decorrentes da redução do índice, que por sua vez, são empregadas para garantir a estabilização da solução.

### 3.1.1.2 APLICAÇÕES DO MÉTODO INDIRETO

Lynn, Parkin e Zahradnik (1970a) aplicaram o PP para gerar as equações adjuntas e a condição necessária para fins da otimização da conversão de reações consecutivas em um reator tubular com dispersão axial. Para isso, estes autores consideraram um problema de valor no contorno puramente diferencial e o resolveram pelo método de resíduos ponderados. Já Lynn e Zahradnik (1970b) também aplicaram o PP para gerar as equações adjuntas e a condição necessária mas em sistemas distribuídos que eram representados por equações diferenciais parciais hiperbólicas de primeira ordem e foi nomeada como uma aproximação de trajetória para controle quase ótimo. San e Stephanopoulos (1984) estudaram a cinética de crescimento da biomassa e a estratégia de alimentação para a otimização da biomassa final produzida em um reator batelada. Para esse problema singular foi detectada a ativação dos arcos singulares e determinadas as condições ao longo e na trajetória final do arco singular. Modak, Lim e Tayeb (1986) apresentaram, didaticamente, a definição de arcos singulares e de controle singular, explorando a forma dos perfis de controle ótimo a partir da análise de existência destes arcos em diversas situações em reator batelada alimentada. Ouellet e Bui (1993) propuseram um método numérico na solução de um problema de controle ótimo envolvendo processos térmicos industriais. Gomes (2000) e Lobato (2004) utilizaram o código COLDAE para a resolução de PCOs em diferentes campos da ciência usando o MI. Simeoni et al. (2012) usaram a técnica do simples chute para resolver uma série de PCO aplicando o MI. Segundo estes autores a técnica utilizada mostrou-se rápida e confiável, sendo a convergência quase sempre obtida automaticamente, sem qualquer interferência do usuário. Foram analisados estudos de caso clássicos no campo do controle ótimo. Pereira (2021) emprega o PP para a resolução de um PCO que modela a operação de sistemas de drones usados em operações de busca e salvamento após desastres, terremotos, inundações, tsunamis, eventos climáticos extremos, entre outros. O



autor focou em problemas que surgem em vários sistemas de drones durante a comunicação, planejamento e a execução de operações de busca e de salvamento ágeis e eficazes em diversos cenários de desastres. Recentemente, [Moussouni e Aliane \(2021\)](#) propuseram um PCO para fins da maximização do número de pessoas recuperadas e a minimização do número de infectados considerando o modelo SEIR (*Susceptible-Exposed-Infectious-Recovered*). O problema foi resolvido usando o Princípio Pontryagin e seus resultados foram comparados com aqueles obtidos considerando outras abordagens. [Din, Li e Shah \(2021\)](#) propuseram um PCO para fins da erradicação da hepatite B da população. Para essa finalidade foram consideradas como variáveis de controle o isolamento dos indivíduos não infectados e indivíduos infectados, o tratamento da doença e a vacinação. Uma vez formulado o PCO, foi provada a sua existência e caracterizada as condições de otimalidade usando o PP.

### 3.1.2 MÉTODOS DIRETOS

Uma revisão da literatura revela que, tradicionalmente, os Métodos Diretos (MDs) têm sido, preferencialmente, empregados para resolver PCOs em comparação com o MI. Isto se deve ao desenvolvimento e aprimoramento dos algoritmos empregados para a solução de problemas de Programação Não Linear (NLP) ([BIEGLER, 1984](#); [RENFRO](#); [MORSHEDI](#); [ASBJORNSEN, 1987](#); [CERVANTES](#); [BIEGLER, 1998](#); [BIEGLER](#); [CERVANTES](#); [WÄCHTER, 2002](#)). Os MDs consistem em transformar o PCO em um problema NLP utilizando a técnica de parametrização das variáveis de controle e/ou de estado. Essa técnica é dividida em duas estratégias, a saber, a sequencial e a simultânea. A estratégia sequencial baseia-se na parametrização do vetor de variáveis de controle. Neste caso, o sistema de EADs é discretizado utilizando-se uma aproximação polinomial e, na sequência, é resolvido por um *solver* NLP. Por outro lado, a estratégia simultânea fundamenta-se na parametrização dos vetores de variáveis de controle e estado ([BIEGLER](#); [CERVANTES](#); [WÄCHTER, 2002](#)).

Com relação a técnica de discretização, inúmeros são os trabalhos existentes sobre o assunto. Neste caso podem ser observadas estratégias de discretização baseadas em colocação ortogonal ([OH](#); [LUUS, 1977](#); [BIEGLER, 1984](#)), em expansões em séries ([ÇELIK](#); [KARA-DUMAN](#); [BAYRAM, 2003](#)) e em colocação ortogonal em elementos finitos ([RENFRO, 1986](#); [RENFRO](#); [MORSHEDI](#); [ASBJORNSEN, 1987](#); [CUTHRELL](#); [BIEGLER, 1987](#); [LOGSDON](#); [BIEGLER, 1989](#); [LOGSDON](#); [BIEGLER, 1992](#)). Nesta última classe o tamanho e o número de elementos podem ser determinados de forma a proporcionar um menor erro no que tange a discretização ([LOGSDON](#); [BIEGLER, 1989](#); [VASANTHARAJAN](#); [BIEGLER, 1990](#)).

A discretização tem duas naturezas: a local que usa os métodos de diferenças finitas e volumes finitos e a global que trabalha com colocação ortogonal padrão e em elementos finitos ([BIEGLER](#); [CERVANTES](#); [WÄCHTER, 2002](#)). A primeira geralmente requer uma grande quantidade de pontos na discretização para conseguir obter uma solução final mais próxima possível da solução real. Para isso, conjuntos de dezenas ou centenas de equações devem ser

resolvidos simultaneamente embora o processo de geração das equações seja simples e pode ser automatizado. Já a segunda, permite uma excelente redução da malha de discretização. Como contraponto, o processor de geração das equações discretizadas se torna extremamente complexo.

De acordo com [Biegler, Cervantes e Wächter \(2002\)](#) a principal vantagem dos MDs é a facilidade de implementação em comparação aos MIs pois não necessitam da geração de um sistema aumentado e o perfil de controle é aproximado por um perfil constante por partes sobre elementos finitos de comprimento variável. Como desvantagens pode-se citar: *i*) o sistema EADs é resolvido em cada iteração; *ii*) não existe o manuseio direto das restrições de desigualdade nas variáveis de estado; *iii*) pode requerer um elevado custo computacional, a depender do tipo de abordagem (sequencial ou simultânea); *iv*) não existe garantia de convergência, assim como em qualquer estratégia de otimização.

### 3.1.2.1 PARAMETRIZAÇÃO DA VARIÁVEL DE CONTROLE

O MD tem como vantagem a facilidade e generalidade de implementação, i.e., as variáveis podem ser discretizadas em elementos finitos através de polinômios ou qualquer função de base. Neste caso, os coeficientes dos polinômios e o tamanho dos elementos são adicionados como variáveis de decisão ao NLP. O método de parametrização do controle se distingue dos métodos simultâneos por resolver repetidamente um problema de valor inicial. Na literatura é possível encontrar inúmeros trabalhos que utilizam a discretização apenas no controle, como por exemplo os trabalhos de [Cuthrell e Biegler \(1987\)](#), [Goh e Teo \(1988\)](#) e [Wong e Luus \(1982\)](#).

Para fins de aplicação, a variável de controle  $u$  pode ser discretizada utilizando colocação ortogonal em elementos finitos como segue:

$$u_K(t) = \sum_{j=1}^K u_{ij} \theta_j(t) \quad (3.1)$$

onde  $K$  é o número de pontos de colocação ortogonal,  $i$  é o número de elementos finitos e  $\theta$  são as funções definidas como ([BIEGLER; CERVANTES; WÄCHTER, 2002](#)):

$$\theta_j(t) = \prod_{k=1, j}^K \frac{t - t_{ik}}{t_{ij} - t_{ik}} \quad (3.2)$$

### 3.1.2.2 PARAMETRIZAÇÃO DA VARIÁVEL DE CONTROLE E ESTADO

A discretização tanto da variável de controle quanto da variável de estado tem sido empregada em inúmeros trabalhos ([CUTHRELL; BIEGLER, 1987](#); [LOGSDON; BIEGLER, 1989](#); [VASANTHARAJAN; BIEGLER, 1990](#); [CERVANTES; BIEGLER, 1998](#); [HUANG; RE-KLAITIS; VENKATASUBRAMANIAN, 2002](#)). Isto se deve a estabilidade e propriedades de precisão observadas ([BIEGLER; CERVANTES; WÄCHTER, 2002](#)). A seguir é apresentada a discretização para o controle  $u$  e o estado  $x$ :

$$x_{K+1}(t) = \sum_{k=0,j}^K x_{ij}\phi_j(t) \quad (3.3)$$

$$u_K(t) = \sum_{j=1}^K u_{ij}\theta_j(t) \quad (3.4)$$

onde  $K$  é o número de pontos de colocação ortogonal,  $i$  é o número de elementos finitos. Deve-se salientar que a diferença entre as ordens é devido à existência das condições iniciais para  $x(t)$ , para cada elemento,  $\phi$  e  $\theta$  são as funções definidas como (BIEGLER; CERVANTES; WÄCHTER, 2002):

$$\phi_j(t) = \prod_{k=0,j}^K \frac{t - t_{ik}}{t_{ij} - t_{ik}} \quad (3.5)$$

$$\theta_j(t) = \prod_{k=1,j}^K \frac{t - t_{ik}}{t_{ij} - t_{ik}} \quad (3.6)$$

### 3.1.2.3 MÉTODO PARA A SOLUÇÃO DE NLPs

Os problemas de PNL podem ser representados como segue (BIEGLER; CERVANTES; WÄCHTER, 2002):

$$\min S(x) \quad (3.7)$$

sujeito a:

$$h_j(x) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (3.8)$$

$$g_j(x) \leq 0, \quad j = 1, 2, \dots, p \quad (3.9)$$

onde  $S$  é a função objetivo,  $x$  é o vetor de variáveis de projeto,  $h_j(x)$  e  $g_j(x)$  representam as  $m$  e  $p$  restrições de igualdade e desigualdade, respectivamente. A grande maioria dos algoritmos de programação não linear procuram linearizar localmente a fronteira da região viável de forma a gerar restrições lineares. Alguns aproximam a função objetivo por funções quadráticas e outros por funções lineares. Portanto, os problemas de programação linear e quadrática são os mais difundidos na literatura (BIEGLER; CERVANTES; WÄCHTER, 2002). A seguir serão apresentadas as condições necessárias para a determinação das condições de otimalidade e o significado dos multiplicadores de Lagrange.

#### *As Condições de Kuhn-Karush-Tucker*

As condições necessárias de otimalidade para o problema de PNL são (EDGAR et al., 2001):

#### *1) Condição Necessária de Primeira Ordem*

Para que  $x^*$  seja um ótimo local do problema com restrições, com  $S(x)$ ,  $g(x)$  e  $h(x)$  diferenciáveis em  $x^*$ , é necessário que os gradientes das restrições de desigualdade ativas,  $\nabla g_j(x^*)$ , e das

restrições de igualdade,  $\nabla h(x^*)$ , sejam linearmente independentes e que as seguintes condições sejam satisfeitas:

$$\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = \nabla S(x^*) + (\lambda_{x^*}^*)^T \nabla h(x^*) + (\mu_{x^*}^*)^T \nabla g(x^*) = 0 \quad (3.10)$$

$$h(x^*) = 0 \quad (3.11)$$

$$g(x^*) \leq 0 \quad (3.12)$$

$$\mu_j^* g_j(x^*) = 0 \quad j = 1, 2, \dots, p \quad (3.13)$$

$$\mu_j^* \geq 0 \quad (3.14)$$

### 2) Condição Necessária de Segunda Ordem

Para que  $x^*$  seja um ótimo local do problema com restrições, com  $S(x)$ ,  $g(x)$  e  $h(x)$  diferenciáveis em  $x^*$ , é necessário que a condição de primeira ordem de Kuhn-Karush-Tucker seja satisfeita e que a matriz Hessiana da função de Lagrange,  $\nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)$ , seja positiva semidefinida para todo vetor não nulo  $d$  tal que:

$$d^T \nabla h_i(x^*) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (3.15)$$

$$d^T \nabla g_i(x^*) = 0 \quad (3.16)$$

para as  $g_j(x^*)$  isto é,  $d^T \nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d \geq 0$ .

### 3) Condição Suficiente

Para que  $x^*$  seja um mínimo local do problema com restrições, com  $S(x)$ ,  $g(x)$  e  $h(x)$  duas vezes diferenciáveis em  $x^*$ , é suficiente que a condição de primeira ordem de Kuhn-Karush-Tucker seja satisfeita e, que a matriz Hessiana da função de Lagrange,  $\nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)$ , seja positiva definida para todo vetor não nulo  $d$  tal que:

$$d^T \nabla h_i(x^*) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (3.17)$$

$$d^T \nabla g_i(x^*) = 0 \quad (3.18)$$

para as  $g_j(x^*)$  ativas [ $g_j(x^*) = 0$  e  $\mu_j(x^*) \geq 0$ ].

$$d^T \nabla g_i(x^*) \geq 0 \quad (3.19)$$

para as  $g_j(x^*)$  inativas [ $g_j(x^*) < 0$  e  $\mu_j(x^*) = 0$ ] isto é,  $d^T \nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d > 0$ . A positividade da matriz Hessiana com restrição, isto é:

$$d^T \nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d > 0 \in \left[ \frac{d}{d^T \nabla h_i(x^*)} = 0, d^T \nabla g_i(x^*) = 0, d \neq 0 \right] \quad (3.20)$$

é garantida se todas as raízes do polinômio característico

$$\begin{vmatrix} \lambda I - \nabla_x^2 L & M \\ M^T & 0 \end{vmatrix} \quad (3.21)$$

forem positivas, onde  $M$  é a matriz formada pelos gradientes de  $h(x^*)$  e  $g(x^*)$  ativas, isto é, a matriz tal que  $d^T M = 0$ , com  $m + p^a < n$  e com o posto completo ( $p^a$  é o número de restrições  $g$  ativas).

### 3.1.2.4 CÓDIGOS COMPUTACIONAIS

Nesta seção são apresentados alguns códigos computacionais desenvolvidos para a resolução de PCO no contexto dos MDs.

- **gPROMS** (*Generalised Process Modelling System*) ([VASSILIADIS; SARGENT; PANTELIDES, 1994](#)): é um código capaz de trabalhar com Equações Diferenciais Parciais (EDPs) onde as discretizações são realizadas mediante opções previamente escolhidas pelo usuário. O sistema resultante da discretização é resolvido utilizando o pacote do C++ **DASOLV** (*Differential-Algebraic Equation Solver*) ([JARVIS; PANTELIDES, 1992](#)).
- **COOPT** (*Control and Optimization of Dynamic Systems*) ([SERBAN; PETZOLD, 2001](#)): código baseado na implementação do método do chute múltiplo modificado usado para solucionar PCOs sujeitos a EADs. Através do chute múltiplo, ele trabalha subdividindo o intervalo e na sequência o problema de otimização é resolvido por programação quadrática sucessiva. São geradas matrizes das derivadas parciais através de um pacote específico para análise da sensibilidade da EADs.
- **DIRCOL** (*Direct collocation method*) ([STRYK, 1999](#)): pacote numérico capaz de resolver PCOs descritos por equações diferenciais de primeira ordem sujeito a restrições de igualdade e/ou desigualdade nas variáveis de controle e/ou variáveis de estado. Este utiliza o método de colocação direto para a discretização das variáveis de estado e de controle por aproximações polinomiais cúbicas e lineares, respectivamente. O problema de PNL é resolvido através de Programação Quadrática Sequencial pelo método **NPSOL** (*Nonlinear Programming at Systems Optimization Laboratory*) ([GILL et al., 1986](#)). O código informa estimativas para as variáveis adjuntas, bem como informa os eventos.
- **MUSCOD II** (*Multiple Shooting Code for Optimal Control*) ([KÜHL et al., 2007](#)): é um algoritmo destinado a resolução de PCOs descritos por sistemas EDOs e de EADs. Baseia-se no método de chute múltiplo direto, onde o horizonte de otimização é particionado em vários subintervalos e as equações diferenciais são resolvidas de forma independente de cada intervalo. A aproximação reformula ótimo problema de controle em um NLP.

### 3.1.2.5 APLICAÇÕES DO MÉTODO DIRETO

Cuthrell e Biegler (1987) resolveram PCOs sujeitos a restrições de desigualdade nos perfis de estado e controle, bem como com dependência linear no controle (arcos singulares ou perfis *on-off*) considerando a discretização do controle e do estado. Feehery (1998) aplicaram a parametrização no controle de PCOs submetidos a restrições nas variáveis de estado. Para essa finalidade foram analisados estudos de caso com flutuação do índice diferencial. Neste caso, foi proposto um algoritmo para detectar a ativação e a desativação das restrições durante a solução do problema de valor inicial Diehl et al. (2002) utilizam a técnica de múltiplos chutes para resolver um PCO formado por EADs semi-implícitas de índice 1 submetido a restrições terminais e restrições de desigualdade no estado e no controle. O NLP resultante foi resolvido considerando a Programação Quadrática Sequencial. O algoritmo proposto foi empregado na otimização de uma coluna de destilação de alta pureza. Chen-Charpentier e Jackson (2020) propuseram um PCO composto por EDOs para fins da modelagem da interação entre plantas, vetores e predadores. O intuito do estudo foi auxiliar os agricultores a determinar o equilíbrio certo de inseticida e predadores para minimizar o custo total. O PCO formulado foi resolvido através da discretização de ambas as variáveis (controle e estado).

### 3.1.3 MÉTODOS HÍBRIDOS

O desenvolvimento dos Métodos Híbridos surge como uma tentativa de combinação entre os MDs e o MI. O intuito é ultrapassar as dificuldades inerentes de cada um destes métodos. De forma geral, o MI utiliza a técnica de chutes múltiplos como solução numérica e esta requer uma boa estimativa inicial para que o processo convirja, o que não é uma tarefa muito fácil visto que é necessário estimar o perfil do vetor de variáveis de co-estado (LOBATO, 2004). Já os MDs não são tão precisos quanto o MI. Assim, a ideia é associar a precisão do MI com a grande facilidade de trabalho dos MDs de forma a encontrar estimativas para as variáveis obtidas (estado e controle) usando os MDs. Com isso, os MDs passam a ser aplicados em problemas mais simplificados e os resultados obtidos são usados em estimativa para os MIs de fazerem um refinamento da solução ótima (STRYK; BULIRSCH, 1992; LOBATO, 2004; PFEIFER, 2007). Neste contexto, Stryk e Bulirsch (1992) associam o método direto de colocação com o método de chute múltiplo. Através da abordagem híbrida proposta, os pontos de discretização obtidos pelo MD se tornam uma boa estimativa para o método de chute múltiplo. Para as aplicações realizadas, o desvio referente ao valor da função objetivo e do tempo final pelo método direto, comparado ao método de múltiplo chute, foi de 1%. Stryk e Schlemmer (1994) utilizaram um MD para determinar os perfis em um problema onde deseja-se a minimização de energia e de tempo de operação de um robô industrial. Os resultados obtidos foram empregados como estimativas iniciais usando o MI. Oberle e Sothmann (1999) otimizaram o processo de fermentação batelada alimentada para a biossíntese de penicilina. Para essa finalidade estes autores associaram um MD (com discretização do estado e do controle) com o MI. Lobato (2004) associou o código DIRCOL

com o código COLDAE para a resolução de PCOs com diferentes características, dentre as quais a flutuação do ID. Maurer e Pesch (2008) utilizaram a abordagem híbrida para resolver um problema muito complexo de microeconomia. Este era composto por quatro variáveis de controle lineares no sistema EADs e por várias restrições de desigualdade. Cots, Gergaud e Goubinat (2018) otimizaram ambos o tempo mínimo e o consumo de combustível em uma aeronave em fase de subida. Os controles considerados são o empuxo e o coeficiente de sustentação e as restrições de estado são levadas em consideração: inclinação do ar e velocidade limitações. Para essa finalidade foi utilizado o acoplamento entre o MD com discretização do controle e do estado com o MI.

## 3.2 FERRAMENTAS PARA A CARACTERIZAÇÃO DE EADS

Os problemas constituídos por EADs despertam grande interesse devido à sua importância em processos dinâmicos e às dificuldades numéricas oriundas nos códigos computacionais disponíveis (PETZOLD, 1982). Segundo Gear e Petzold (1984), os pacotes computacionais utilizados e explorados para a resolução das EDOs podem ser utilizados somente para uma subclasse de EADs, as EADs lineares de índice qualquer e as EADs com ID inferior a 1. Por isso, devido a essas restrições é necessário caracterizar o conjunto de equações a serem estudadas. Os métodos de caracterização estão relacionados à estrutura, à resolubilidade, à inicialização e ao índice diferencial das EADs.

Quando se trabalha com EADs lineares em geral e EADs não lineares de índice superior não existem pacotes computacionais capazes de resolver tais sistemas. Isso acontece porque o conjunto de soluções das EDOs subordinadas obtidas pela redução do índice é maior do que o conjunto de soluções das EADs originais surgindo então uma inconsistência. Além disso, como as equações algébricas das EADs se tornam apenas implícitas nas EDOs subordinadas, a solução numérica frequentemente produz flutuações nas restrições algébricas porque estas não se preservam com a discretização, exceto se elas forem lineares, e levam a instabilidades (PETZOLD, 1982). Assim, o principal parâmetro de caracterização de EADs é o ID, que representa o número mínimo de vezes que o sistema de EADs precisa ser diferenciado, em relação à variável independente, até ser transformado em um sistema de EDOs, cujo índice diferencial passa a ser zero Gear e Petzold (1984), Gear (1988). Desta forma, pode-se considerar que os sistemas que apresentam ID menor e igual a 1 comportam-se de maneira semelhante a sistemas de EDOs e podem ser integrados diretamente. Entretanto, se o sistema apresentar ID superior, maior que 1, é recomendada que uma redução do seu índice diferencial seja feita para que este possa ser introduzido a um código de integração (PETZOLD, 1982).

Os algoritmos que fazem a redução do índice podem ter ou não etapas de diferenciação, e fornecerem ou não sistemas de maior dimensão. Por exemplo, os algoritmos de Gear e Petzold (1984), Gear (1988), Bachmann et al. (1990) utilizam a diferenciação das restrições algébricas

com relação ao tempo e a linearidade das novas equações introduzidas pela diferenciação com relação às derivadas de ordem superior para eliminar os termos onde estas derivadas de ordem superior aparecem. As novas equações obtidas passam a ser funções das variáveis de estado e das variáveis algébricas. Assim, as novas equações algébricas obtidas através da redução são incorporadas ao sistema nos algoritmos de Gear (1988), Bachmann et al. (1990). Por isso, é importante uma análise cuidadosa e antecipada do problema original no que tange a determinação do ID e a consistência da inicialização. Na sequência, serão apresentados, brevemente, dois algoritmos de redução do índice, ALGO e PALGO, que utilizam propriedades estruturais para caracterizar EADs.

### 3.2.1 CÓDIGO ALGO

O Código ALGO é uma ferramenta estrutural implementada na linguagem FORTRAN e que é baseada na representação estrutural do algoritmo de Gear (GEAR, 1988), proposto para a redução do ID. Este algoritmo aplica-se a EADs gerais  $F(x(t), \dot{x}(t), t) = 0$  de dimensão  $n$  tendo como critério de resolubilidade o  $\det(\lambda(F_{\dot{x}}) + F_x)$  ser não identicamente nulo para todo  $\lambda$  pertence ao campo dos reais. Neste caso, o ID do sistema é igual ao número de iterações deste algoritmo para transformar as EADs num sistema de EDOs (UNGER; KRÖNER; MARQUARDT, 1995).

### 3.2.2 CÓDIGO PALGO

Baseado no algoritmo de Pantelides (1988), o PALGO é uma ferramenta estrutural usada na resolução de sistemas EADs. De acordo com o autor, um sistema que apresenta característica semi-implícita quando sua matriz Jacobiana (em relação ao sistema de equações original) for singular, este não apresenta problemas de inicialização consistente. As restrições acrescentadas ao sistema de equações são consideradas como um subconjunto de equações que deve ser diferenciado se, e somente se, o grupo de linhas da matriz equivalentes a estas equações forem linearmente dependentes e se existirem linhas independentes dentro de sub-conjuntos deste grupo (UNGER; KRÖNER; MARQUARDT, 1995).

O algoritmo de Pantelides tem como atribuição detectar o número mínimo de equações que devem ser diferenciadas para poder obter a resolução que seja estruturalmente consistente do sistema.

Ao analisar os resultados fornecidos pelos algoritmos estruturais, é preciso ter em mente que estes apresentam algumas limitações como (CUNHA; MURATA, 1999; LOBATO, 2004):

- o critério utilizado para verificar a resolubilidade do sistema é eminentemente prático e sujeito a falhas, i.e., um sistema solucionável pode ser identificado como não solucionável;
- o índice fornecido pode ser inferior ao ID, visto que o ALGO e o PALGO não requerem um nível de detalhamento sobre o modelo (forma como as variáveis algébrico-diferenciais



estão relacionadas não é exigido, mas apenas se as mesmas existem ou não no modelo. Por exemplo, se uma variável está presente em uma equação ela assume o valor 1, caso contrário 0. Assim, não se identifica se, por exemplo, o modelo é linear ou não linear;

- o número de graus de liberdade dinamicamente definidos pode ser superior ao que seria obtido através de operações simbólicas;
- o padrão da matriz Jacobiana do sistema gerada estruturalmente pode não coincidir com o padrão gerado simbolicamente.

Pelos motivos acima mencionados, o ALGO e o PALGO devem ser empregados em conjunto com outras ferramentas para a caracterização de EADs (LOBATO, 2004).

### 3.3 FERRAMENTAS PARA A CARACTERIZAÇÃO DE PCOs

As limitações observadas para o ALGO e o PALGO motivaram o desenvolvimento de algoritmos simbólicos com o intuito de sobrepor essas dificuldades. Era necessário caracterizar os sistemas de EADs e reduzir o ID em sistemas em que o índice fosse superior e ainda analisar a consistência das condições iniciais. A seguir são apresentados alguns códigos empregados para estas finalidades.

#### 3.3.1 INDEX

O código INDEX (MURATA, 1996) tem como objetivo verificar a resolubilidade de sistemas lineares que possuam coeficientes constantes e identificar problemas de inicialização em sistemas de índice 1. O algoritmo baseia-se na determinação da estrutura das equações e na dependência das variáveis. Ele também pode ser usado para comprovar a caracterização obtida através dos códigos estruturais, que fornecem apenas um valor inferior para o índice e um valor superior para os graus de liberdade.

#### 3.3.2 ACIG

Desenvolvido por CUNHA e Murata (1999), o algoritmo ACIG (Análise de Consistência e Redução do Índice Diferencial baseado no Algoritmo de Gear) é uma ferramenta complementar que foi acoplada ao código INDEX (MURATA, 1996). O ACIG é uma ferramenta iterativa implementada em ambiente Maple<sup>®</sup> com entrada de dados via leitura de arquivo *txt*. Neste caso o usuário fornece neste arquivo a dimensão do sistema e o modelo em análise, sendo fundamental utilizar a nomenclatura padrão do Maple<sup>®</sup> para as variáveis e suas derivadas. Após essa etapa, o algoritmo faz a partição do sistema, verifica se ele é semi-explícito, linear, linearmente implícito ou não linear, identifica sistemas implícitos de índice 1 ou superior ou sistemas semi-implícitos de Hessenberg de índices 2 e 3. O usuário pode optar por três saídas, a saber, a geração do

sistema de EADs de índice 1, a geração do sistema de EDOs ou a geração dos dois sistemas (EADs e EDOs).

### 3.3.3 OTIMA

Resolver um PCO usando o MI exige a obtenção das condições de otimalidade. Assim, a depender do estudo de caso, expressões complexas ou de grande dimensão podem ser obtidas com a aplicação do PP. Neste contexto, [Gomes \(2000\)](#) desenvolveu o código OTIMA, implementado em ambiente Maple<sup>®</sup>, com o intuito de gerar automaticamente estas equações. A versão desenvolvida por [Gomes \(2000\)](#) era mais restrita, isto é, não era capaz de lidar com problemas com restrições de desigualdade e com condições de fim. Por esse motivo, [Lobato \(2004\)](#) desenvolveu uma segunda versão do OTIMA para PCO com restrições de igualdade e desigualdade. Neste mesmo contexto, [Pfeifer \(2007\)](#) desenvolveu a ferramenta OpCol, também em ambiente Maple<sup>®</sup>, a qual consiste em um conjunto de estratégias para a caracterização do PCO no contexto algébrico-diferencial em relação ao índice diferencial, resolubilidade e condições iniciais consistentes, a implementação simbólica do algoritmo de Gear e as gerações de otimalidade pelo OTIMA.

## 3.4 MODELOS DIFERENCIAIS FRACIONÁRIOS

Antes de tratar PCOs no contexto fracionário é preciso entender os conceitos particulares relacionados à modelos matemáticos representados por equações diferenciais fracionárias. Dessa maneira, os próximos tópicos apresentam o conceito de derivada fracionária, de operador fracionário, bem como a formulação matemática de alguns tipos de derivadas fracionárias, respectivamente.

### 3.4.1 FERRAMENTAS DERIVATIVAS

Segundo [Ávila et al. \(2010\)](#), o cálculo fracionário possibilita a obtenção de uma modelagem mais precisa de alguns fenômenos físicos, ao custo de uma maior complexidade numérica e analítica quando comparadas as ferramentas de cálculo tradicional. De acordo com [Podlubny \(1998\)](#), durante três séculos a teoria das derivadas fracionárias se desenvolveu em um campo teórico puramente matemático sendo útil apenas para matemáticos. Apenas nas últimas décadas que finalmente as derivadas e integrais de ordem não inteiras se estenderam para problemas práticos.

[Teodoro \(2019\)](#) relata a existência de uma grande quantidade de definições envolvendo o conceito de derivada fracionária onde as mesmas são classificadas em três classes, a saber, as fracionárias clássicas, as fracionárias locais e as fracionárias com núcleo não singular. A primeira classe teve início com a formulação proposta por [Sonin \(1869\)](#), a partir da integral de Riemann-Liouville, uma generalização da integral de Cauchy. Já a segunda classe teve início no

final da década de noventa e é composta pelas chamadas derivadas fracionárias locais. Após 2012, novas formulações têm sido propostas, como por exemplo a derivada compatível, introduzida por [Khalil et al. \(2014\)](#), bem como o chamado cálculo compatível ([ABDELJAWAD, 2015](#)); a derivada fracionária alternativa, introduzida por [Katugampola \(2014\)](#) e, mais recente, várias outras têm sido introduzidas, das quais pode-se mencionar: a derivada  $M$  e a derivada  $V$  ([SOUSA et al., 2018](#)). Por fim, à terceira classe surge na literatura a partir do trabalho de [Caputo e Fabrizio \(2015\)](#), onde os autores propuseram um núcleo não singular para a integral fracionária. Como exemplos pode-se citar os trabalhos desenvolvidos por [Yang, Srivastava e Machado \(2015\)](#), em que propuseram um novo tipo de derivada para estudar o problema de difusão anômala; [Atangana \(2016\)](#), em que foi proposto um novo modelo para a equação do tipo reação-difusão e [Atangana e Baleanu \(2016\)](#) introduziram uma derivada com núcleo não singular.

Apesar das três classes apresentadas, nesta seção serão apresentados apenas estudos das chamadas derivadas fracionárias clássicas. Dentro dessa classe, podem ser encontradas várias formulações como as de Liouville, Riemann-Liouville, Caputo, Grünwald-Letnikov, Marchaud, Chen, Hadamard, Riesz, Weyl, Osler, Hilfer, Davidson-Essex, Coimbra, Canavati, Cossar, Jumarie, Caputo-Hadamard, Hilfer-Katugampola, derivada fracionária tipo Caputo ([OLIVEIRA; OLIVEIRA, 2019](#)), derivada  $p_k, \rho_q$ -fracionária ([OLIVEIRA; OLIVEIRA, 2018](#)) e  $\Psi$ -Hilfer, sendo essa última uma generalização de vinte e duas outras derivadas.

### 3.4.2 CRITÉRIOS DE UM OPERADOR FRACIONÁRIO

No tópico anterior foi visto que existe mais de uma formulação para a derivada fracionária ([OLIVEIRA; MACHADO, 2014](#)) e que o número de definições vem aumentando com o passar do tempo, sendo cada uma delas mais adequada a um determinado contexto físico ([RODRIGUES; OLIVEIRA, 2015](#); [TEODORO; OLIVEIRA; OLIVEIRA, 2018](#)). Assim, surge o seguinte questionamento: Quais devem ser os critérios que um operador deve satisfazer para que este possa ser considerado uma derivada fracionária? ([TEODORO, 2019](#)).

Por isso, antes de apresentar a formulação matemática das derivadas fracionárias, nesta seção serão apresentados dois critérios que auxiliarão no uso ou não de um dado operador fracionário. Esses critérios foram propostos por [Ross \(1975\)](#) e por [Ortigueira e Machado \(2015\)](#). Para a apresentação desses é usada a notação  $D^\alpha$  para representar uma derivada fracionária de ordem  $\alpha$ .

#### *Critérios de Ross*

1. A derivada fracionária de uma função que pode ser localmente expandida em série de Taylor pode ser obtida facilmente;
2. A derivação fracionária, quando a ordem é um inteiro positivo  $n, n \in \mathbb{N}$ , deve produzir o

mesmo resultado da derivação ordinária, i.e.:

$$D^n f(x) = \frac{d^n f(x)}{dx^n} \quad (3.22)$$

e quando a ordem é um inteiro negativo  $n$ ,  $n \in \mathbb{N}$  deve produzir o mesmo resultado da  $n$ -ésima integração ordinária, i.e.:

$$D^{-n} f(x) = \int_0^x \int_0^{\tau_{n-1}} \dots \int_0^{\tau_1} f(\tau) d\tau d\tau_1 \dots d\tau_{n-1} \quad (3.23)$$

3. A derivada de ordem zero de uma função é a própria função,  $D^0 f(x) = f(x)$ ;
4. A derivada fracionária é um operador linear;
5. A lei dos expoentes,  $D^\alpha D^\beta f(x) = D^{\alpha+\beta} f(x)$ ,  $\alpha < 0$  e  $\beta < 0$

### ***Crítérios de Ortigueira e Machado***

1. A derivada fracionária é um operador linear;
2. A derivada fracionária de ordem zero de uma função  $f$  com relação à  $x$  é a própria função, i.e.,  $D^0 f(x) = f(x)$ ;
3. A derivação fracionária, quando a ordem é um inteiro deve produzir o mesmo resultado da derivação ordinária;
4. A lei dos expoentes,  $D^\alpha D^\beta f(x) = D^{\alpha+\beta} f(x)$  é satisfeita para  $\alpha < 0$  e  $\beta < 0$ .
5. Vale a generalização da regra de Leibniz,

$$D^\alpha (f(x)g(x)) = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\alpha}{k} D^k f(x) D^{\alpha-k} g(x), \quad (3.24)$$

sendo

$$\binom{\alpha}{k} = \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(\alpha - k + 1)k!} \quad (3.25)$$

Tendo em vista esses dois critérios, é possível afirmar que todas as derivadas fracionárias que serão apresentadas na sequência obedecem às cinco propriedades apresentadas pelos autores, i.e., elas atendem aos critérios de linearidade, derivada de ordem zero, derivada de ordem inteira, lei dos expoentes, a regra de Leibniz (generalização), e, portanto, podem ser consideradas um operador de derivadas fracionária. Aqui não serão apresentadas as provas matemáticas para esses critérios, no entanto, elas podem ser analisadas com detalhes em [Teodoro \(2019\)](#).

### 3.4.3 TIPOS DE DERIVADAS FRACIONÁRIAS

Como citado anteriormente, existe uma grande quantidade de definições envolvendo o conceito de derivada fracionária e essa seção será dedicada ao estudo de algumas formulações de derivadas fracionárias que são comumente aplicadas na resolução de PCOF. Foram escolhidas, portanto, as formulações conforme os autores a seguir: Grünwald-Letnikov, Riemann-Liouville, Caputo, Hilfer, Weyl, Riesz e Marchaud.

#### 1) Grünwald-Letnikov

A derivada fracionária de Grünwald-Letnikov foi introduzida por [Grunwald \(1867\)](#) e por [Letnikov \(1868\)](#). Essa formulação tem grande importância em problemas numéricos e está baseada na generalização da diferenciação ordinária de ordem  $n \in \mathbb{N}$ .

**Definição 1.** A derivada fracionária de Grünwald-Letnikov de ordem  $\alpha$ , sendo  $\alpha \in \mathbb{R}$  de uma função  $f$  é definida através do limite de uma série:

$${}_{GD}D^\alpha f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(x - kh). \quad (3.26)$$

#### 2) Riemann-Liouville

O primeiro trabalho que apresentou a derivada de Riemann-Liouville foi proposto por ([SONIN, 1869](#)). Essa é definida em termos da integral fracionária e, por isso, é importante mostrar primeiramente a definição dessa integral.

A fórmula de Cauchy para integrais repetidas é a base para o desenvolvimento do cálculo fracionário de Riemann-Liouville. As continuações analíticas da fórmula de Cauchy expandidas para ordem arbitrária geram as integrais à direita e à esquerda de Riemann-Liouville.

**Definição 2.** A integral fracionária de Riemann-Liouville de ordem  $\alpha$  de uma função  $f$  causal é dada por:

$$J^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t f(\tau) (t - \tau)^{\alpha-1} d\tau, \quad (3.27)$$

sendo  $\alpha > 0$ ,  $t > 0$  e  $J^0 = I$ , sendo  $I$  o operador identidade.

Podemos escrever a integral fracionária, Eq. (3.27), como um produto de convolução das funções  $f$  e  $\phi_\alpha$ , sendo a função  $\phi_\alpha$  conhecida como função de Gel'fand-Shilov e dada por:

$$\phi_\alpha = \begin{cases} \frac{t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} & \text{se } t > 0 \\ 0, & \text{se } t < 0 \end{cases} \quad (3.28)$$

Portanto, podemos escrever

$$J^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t f(\tau)(t - \tau)^{\alpha-1} d\tau = \phi_\alpha(t) * f(t) \quad (3.29)$$

onde  $*$  denota o produto de convolução.

Na sequência são apresentadas as definições de integrais fracionárias de Riemann-Liouville à direita e à esquerda, no entanto, nessa seção é utilizada a **Definição 2**.

**Definição 3.** *Seja  $[a, b]$  um intervalo finito no eixo dos números reais. As integrais fracionárias de Riemann-Liouville à esquerda e à direita de ordem  $\alpha$  de uma função  $f$ ,  $I_{a+}^\alpha f(t)$  e  $I_{a-}^\alpha f(t)$ , são dadas respectivamente por:*

$$I_{a+}^\alpha f(t) = \int_a^t f(\tau)(t - \tau)^{\alpha-1} d\tau, \quad t \geq a \quad (3.30)$$

$$I_{b-}^\alpha f(t) = \int_t^b f(\tau)(t - \tau)^{\alpha-1} d\tau, \quad t \leq b \quad (3.31)$$

Será utilizada a notação  $J^\alpha$  o invés de  $I_{0+}^\alpha$  quando for utilizada a Eq. (3.30) com  $a = 0$ .

Segundo Santos (2018), para  $\alpha$  inteiro as integrais de Riemann-Liouville (Eqs. (3.30) e (3.31)) coincidem com integrais repetidas usuais da fórmula de Chauchy. Além disso, pelas definições das Eqs. (3.30) e (3.31) são notórias que as integrais fracionárias de Riemann-Liouville convergem para quaisquer funções integráveis  $f$  se  $\alpha > 1$ . Também é possível provar a convergência das Eqs. (3.30) e (3.31) para as funções  $f \in L_1[a, b]$  mesmo quando  $0 < \alpha < 1$ .

Os operadores de integração  ${}_a J_x^\alpha {}_x J_b^\alpha$ , definidos nas Eqs. (3.30) e (3.31), desempenham papel central no cálculo fracionário de Riemann-Liouville. Antes de definir as derivadas fracionárias de Riemann-Liouville, é importante lembrar que para inteiros positivos  $n > m$  vale a identidade  $D_x^m f(x) = D_x^n {}_a J_x^{m-n} f(x)$ , onde  $D_x^m f(x)$  é uma derivada usual de ordem inteira  $m$ .

Tendo em vista a definição da integral fracionária, **Definição 2**, é apresentado agora a derivada fracionária segundo Riemann-Liouville.

**Definição 4.** *Seja  $\alpha$  um número complexo tal que  $Re(\alpha) > 0$  e  $m$  o menor inteiro maior que  $Re(\alpha)$ , assim  $m - 1 < Re(\alpha) \leq m$ . A derivada fracionária segundo Riemann-Liouville de uma função causal  $f$  é dada por:*

$$D^\alpha f(t) = \frac{d^m}{dt^m} J^{m-\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(m - \alpha)} \frac{d^m}{dt^m} \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t - \tau)^{\alpha-m+1}} d\tau \quad (3.32)$$

Santos (2018) afirma que uma consequência importante dessa definição é que as derivadas de Riemann-Liouville são operadores não locais. O operador à esquerda (à direita) definido pela expressão integro-diferencial (Eq. (3.32)) depende de valores da função à esquerda (à direita) de  $t$ .

### 3) Caputo

Caputo em 1967 apresentou uma nova definição de derivada fracionária baseando-se na definição de derivada fracionária segundo Riemann-Liouville. Essa derivada fracionária passa a ser mais restritiva que a de Riemann-Liouville e com esta formulação a derivada de uma constante é definida como zero (CAMARGO; OLIVEIRA, 2015), ao contrário do que ocorria na derivada de Riemann-Liouville. As duas formulações são similares onde a diferença encontra-se na ordem dos operadores de derivação ordinária e de integração fracionária, i.e., Caputo propõe uma derivada de ordem não inteira utilizando o operador integral de Riemann-Liouville de uma forma diferente à da definição da derivada de Riemann-Liouville.

Para Salgado (2015), embora tardiamente proposta tal definição, sua aplicação se tornou bastante útil em modelagem de sistemas físicos devido à forma das condições iniciais em problemas de valores iniciais de equações diferenciais que, diferentemente da abordagem que utiliza a derivada de Riemann-Liouville, são dadas em termos de derivadas de ordem inteira.

**Definição 5.** *Sejam  $\alpha$  um número complexo tal que a parte real é maior do que zero e  $m$  é o menor inteiro maior que a parte real de  $\alpha$ , i.e., maior do que  $m - 1$  e menor do que  $m$ . A derivada fracionária segundo Caputo de uma função suficientemente bem-comportada  $f$  é dada por:*

$${}_*\!D^\alpha f(t) = J^{m-\alpha} D^m f(t), \quad (3.33)$$

sendo  $J_\alpha$  a integral fracionária conforme **Definição 2**.

Segundo Santos (2018), uma consequência importante desta definição é que as derivadas de Caputo são considerados operadores não locais. A derivada à esquerda (à direita) definida pela expressão integro-diferencial da Eq. (3.33) depende de valores da função à esquerda (à direita) de  $t$ . No caso particular em que a derivada de Caputo for no tempo  $t$ , o valor da derivada à esquerda depende dos valores da função desde o instante inicial até  $t$ . Dessa maneira, a derivada de Caputo à esquerda introduz naturalmente efeitos de memória. Além do mais, a vantagem de se utilizar as derivadas de Caputo ao invés das derivadas de Riemann-Liouville na modelagem de problemas reais está no fato de que o valor das derivadas de Caputo de uma função constante são zero para todos  $\alpha > 0$ , i.e.:

$${}_a^C D_t^\alpha 1 = 0, \quad {}_t^C D_b^\alpha 1 = 0. \quad (3.34)$$

Como consequência deste fato, equações diferenciais envolvendo derivadas de Caputo requerem condições iniciais usuais. Diferente do que ocorre com equações diferenciais envolvendo derivadas Riemann-Liouville onde a solução costuma ser singular no tempo inicial, requerendo condições iniciais não usuais e de interpretação não clara. Essa análise também é realizada por Podlubny (1998), em que é confirmada que a principal vantagem da aproximação de Caputo é que as condições iniciais para soluções de equações diferenciais fracionárias assumem a mesma

forma que as equações diferenciais de ordem inteira, contendo, portanto, os valores limites das derivadas de ordem inteira de funções desconhecidas com o terminal inferior de  $t = a$ .

A versão expandida da derivada direita e esquerda de Caputo conforme [Agrawal \(2006\)](#) é dada como segue.

*A Derivada Fracionária Esquerda de Caputo (DFEC)*

$${}^C D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \int_a^t (t - \tau)^{n-\alpha-1} \left( \frac{d}{d\tau} \right)^n f(\tau) d\tau \quad (3.35)$$

*A Derivada Fracionária Direita de Caputo (DFDC)*

$${}^C D_b^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \int_t^b (\tau - t)^{n-\alpha-1} \left( -\frac{d}{d\tau} \right)^n f(\tau) d\tau \quad (3.36)$$

onde  $f(t)$  é a função dependente do tempo,  $\alpha$  é a ordem da derivada e  $(n - 1 \leq \alpha < 1)$ .

Assim, observa-se que a derivada de Caputo é uma integral fracionária de uma derivada de ordem inteira e a derivada de Riemann-Liouville é a derivada de ordem inteira de uma integral fracionária. No entanto, a derivada fracionária de Caputo é mais restritiva que a derivada fracionária de Riemann-Liouville, uma vez que para a derivada fracionária de Caputo de ordem  $\alpha$  de uma função  $f$  exista é necessário a integrabilidade da derivada de ordem  $m$  de  $f$ , sendo  $m - 1 < \mathbb{R}(\alpha) \leq m$  ([CAMARGO, 2009](#)).

### Um Breve Comparativo entre Riemann-Louville e Caputo

Como visto anteriormente, as derivadas fracionárias de Caputo e Riemann-Liouville são operadores não locais, diferindo bastante da definição usual de derivada. De acordo com [Santos \(2018\)](#), o êxito da utilização do cálculo fracionário está relacionado com escolha do operador derivada segundo a conveniência de cada questão. O autor também realiza uma breve discussão sobre as definições segundo Caputo e Riemann-Liouville, uma vez que elas diferem entre si na ordem dos operadores integral e derivada, o que significa que ao permutar a ordem da integral e a derivada fracionária, o resultado final sofre alterações.

Assim, seja uma função  $f(t)$  a qual possa ser aplicada a integral e a derivada de ordem não-inteira, então:

$$D^\beta f(t) = D^m [I^{m-\beta} f(t)] \neq I^{m-\beta} [D^m f(t)] = D_*^\beta f(t). \quad (3.37)$$

[Santos \(2018\)](#) afirma que a comutação entre os operadores integral e derivada é possível quando em  $t = 0^+$  pois  $f(t)$  e suas derivadas de ordem inteira menores que  $m$  se anulam. Neste caso, para salientar que as versões de Riemann-Liouville e Caputo são correspondentes em alguns casos, [Santos \(2018\)](#) ilustra o fato chamando a atenção para a derivada fracionária da função  $f(x) = x^\mu$  de ordem  $\beta \in \mathbb{R}$  com  $\mu \neq 0$  e  $\mu > -1$ , e afirma que nestas condições ambas as derivadas coincidem, pois para todo  $n \leq m - 1$ , tem-se  $f^{(n)}(0^+) = 0$ . Isso pode ser



evidenciado quando integrando por partes  $m - 1 < \beta < m$  e  $t > 0$ , obtendo a seguinte resultado:

$$D^\beta f(t) = D_*^\beta f(t) + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^{k-\beta}}{\Gamma(k-\beta+1)} f^{(k)}(0^+). \quad (3.38)$$

A equação acima pode ser reescrita como:

$$D_*^\beta f(t) = D^\beta \left[ f(t) - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k}{k!} f^{(k)}(0^+) \right]. \quad (3.39)$$

Como conclusão desse comparativo, o Santos (2018) demonstra que a derivada fracionária segundo Caputo é mais abrangente pois engloba tanto os valores iniciais da função  $f(t)$  tanto quanto suas respectivas derivadas de ordem inteira menores que  $m - 1$ . Por possuir essa característica, muitos autores consideram a derivada segundo Caputo mais precisa do que a de Riemann-Liouville, uma vez que é possível fazer a interpretação física desta definição. Como já evidenciado, as derivadas fracionárias segundo Riemann-Liouville e Caputo coincidem para polinômios não-constantes, mas diferem para constantes (VARALTA, 2014).

#### 4) Hilfer

É importante ressaltar que a derivada fracionária de Hilfer recupera, para valores particulares de parâmetros, as derivadas de Riemann-Liouville e de Caputo (no sentido estrito) e também a derivada de Weyl, i.e., as derivadas de Weyl são obtidas para um valor particular extremo da integral e as derivadas de Riemann-Liouville e de Caputo são obtidas para valores particulares da ordem da derivada através de valores apropriados para  $a$  e  $\mu$  na derivada de Hilfer.

**Definição 6.** A derivada de Hilfer de ordem  $\alpha$  e tipo  $\mu$  com  $0 < \alpha < 1$  e  $0 \leq \mu \leq 1$  de uma função  $f$  é dada por:

$$D_{a\pm}^{\alpha,\mu} f(t) = \pm I_{a\pm}^{\mu(1-\alpha)} DI_{a\pm}^{(1-\mu)(1-\alpha)} f(t) \quad (3.40)$$

sendo, as integrais  $I_{a\pm}^\alpha$  conforme Eqs. (3.30) e (3.31).

Caso  $a = \pm\infty$ , a derivada de Hilfer recupera a derivada de Weyl. Se  $\mu = 0$  e  $a = 0$ , a derivada segundo Hilfer à esquerda recupera-se a derivada de Riemann-Liouville, conforme a Definição 4, e se  $\mu = 1$  e  $a = 0$ , a derivada segundo Hilfer à esquerda obtém a derivada de Caputo, conforme Definição 5. De fato, para  $0 < \alpha < 1$  temos,

$$D_{0+}^{\alpha,0} f(t) = I_{0+}^0 DI_{0+}^{1-\alpha} f(t) = DJ^{1-\alpha} f(t) = D^\alpha f(t), \quad (3.41)$$

e

$$D_{0+}^{\alpha,1} f(t) = I_{0+}^{1-\alpha} DI_{0+}^0 f(t) = J^{1-\alpha} Df(t) = {}_*D^\alpha f(t). \quad (3.42)$$

Para um caso mais geral, onde são definidas as derivadas de Riemann-Liouville e Caputo à direita e à esquerda, tem-se:  $0 < \alpha < 1$ ,

$$D_{a+}^{\alpha,0} f(t) = I_{a+}^0 DI_{a\pm}^{1-\alpha} f(t) = DI_{a+}^{1-\alpha} f(t) = D_{a+}^\alpha f(t), \quad (3.43)$$

e

$$D_{a+}^{\alpha,1} f(t) = I_{a+}^{1-\alpha} DI_{a+}^0 f(t) = I_{a\pm}^{1-\alpha} Df(t) = {}_* D_{a+}^{\alpha} f(t). \quad (3.44)$$

É observado que para  $\gamma = \mu + \alpha - \alpha\mu$  com  $0 < \gamma < 1$  pode-se escrever a derivada de Hilfer em termos da derivada de Riemann-Liouville.

$$D_{a\pm}^{\alpha,\mu} f(t) = I_{a+}^{\gamma-\alpha} D_{a+}^{\gamma} f(t). \quad (3.45)$$

### 5) Weyl

Weyl (1917) definiu uma nova derivada fracionária e de mesmo nome. A derivada fracionária de Weyl, também pode ser vista como um caso particular da derivada de Hilfer. Adicionalmente, o autor propôs uma definição apropriada para funções periódicas (SAMKO; KILBAS; MARICHEV, 1993).

**Definição 7.** A derivada de Weyl de ordem  $\alpha$  com  $0 < \alpha < 1$  uma função  $f$  é dada por:

$$W_{\pm}^{\alpha} f(t) = \pm \frac{d}{dt} I_{\pm}^{1-\alpha} f(t), \quad (3.46)$$

sendo,  $I_{\pm}^{1-\alpha}$  as integrais fracionárias de Weyl, à esquerda e à direita, dadas por:

$$I_{+}^{\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{-\infty}^t f(\tau) (t - \tau)^{\alpha-1} d\tau, \quad (3.47)$$

$$I_{-}^{\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_t^{\infty} f(\tau) (\tau - t)^{\alpha-1} d\tau. \quad (3.48)$$

É observado que se  $\alpha = \pm\infty$  e  $\mu = 0$  na derivada fracionária de Hilfer, é obtido a derivada fracionária de Weyl.

### 6) Riesz

Riesz desenvolveu uma teoria voltada para funções de várias variáveis com a finalidade de obter solução de problemas em equações diferenciais parciais (OLDHAM; SPANIER, 1974). Sua formulação de derivada fracionária merece destaque devido à importância nas aplicações, em particular, quando a ordem fracionária se encontra na variável espacial. A derivada fracionária de Riesz desempenha papel fundamental na resolução da equação de Schödinger fracionária além de outras aplicações (OLIVEIRA; COSTA; JR, 2010; BAYIN, 2016).

Uma das formas de se definir a derivada fracionária de Riesz é utilizar as derivadas fracionárias no mesmo contexto que Weyl. A derivada de Riesz é definida como (CAMARGO; OLIVEIRA, 2015; OLIVEIRA; MACHADO, 2014):

$$-(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} f(x) = -\frac{D_{+}^{\alpha} f(x) + D_{-}^{\alpha} f(x)}{2 \cos(\pi\alpha/2)}, \quad (3.49)$$

para  $\alpha \neq 1$ , onde  $D_+^\alpha$  e  $D_-^\alpha$  são as derivadas fracionárias de Weyl (HILFER, 2000) à direita e à esquerda, respectivamente, de ordem  $\alpha$ , dadas por:

$$D_+^\alpha f(x) = \left(\frac{d}{dx}\right)^n I_+^{n-\alpha} f(x), \quad D_-^\alpha f(x) = \left(-\frac{d}{dx}\right)^n I_-^{n-\alpha} f(x), \quad (3.50)$$

e  $n \in \mathbb{N}$ , tal que  $n - 1 < \alpha < n$ , e  $I_+^\alpha$  e  $I_-^\alpha$  são, respectivamente, as integrais fracionárias à direita e à esquerda de Weyl de ordem  $\alpha > 0$ , dada por:

$$I_+^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{-\infty}^x (x - \xi)^{(\alpha-1)} f(\xi) d\xi, \quad I_-^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^\infty (\xi - x)^{(\alpha-1)} f(\xi) d\xi.$$

### 7) Marchaud

Marchaud em 1927 (MILLER; ROSS, 1993; MACHADO; KIRYAKOVA; MAINARDI, 2011) introduziu uma nova definição para ordem não inteira de derivadas. Para isso, ele considerou uma derivada fracionária de ordem arbitrária  $\alpha$  com  $0 < \alpha < 1$ . Esta definição coincide com a versão de Liouville para determinados tipos de funções (MILLER; ROSS, 1993).

**Definição 8.** Considerando  $-\infty < a < b < \infty$  e  $0 < \alpha < 1$ .

Derivada de Marchaud:

$$D_+^\alpha f(t) = \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \int_{-\infty}^x \frac{f(x) - f(\xi)}{(x - \xi)^{1+\alpha}} d\xi \quad (3.51)$$

Derivada do lado esquerdo de Marchaud:

$$D_+^\alpha f(t) = \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^\infty \frac{f(x) - f(x - \xi)}{\xi^{1+\alpha}} d\xi \quad (3.52)$$

Derivada do lado direito de Marchaud:

$$D_-^\alpha f(t) = \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^\infty \frac{f(x) - f(x - \xi)}{\xi^{1+\alpha}} d\xi \quad (3.53)$$

### 3.4.4 INTERPRETAÇÃO GEOMÉTRICA E FÍSICA DAS DERIVADAS FRACIONÁRIAS

Segundo Teodoro, Oliveira e Oliveira (2018), a grande quantidade de definições envolvendo derivadas fracionárias que podem ser encontradas na literatura especializada advém do fato de não haver uma interpretação geométrica e/ou física universalmente aceita em comparação ao cálculo de ordem inteira (em que a derivada é interpretada como um taxa ou está associada à tangente de uma curva). Todavia, Podlubny (2001) propõe uma interpretação física e geométrica de Integração Fracionária e de Diferenciação Fracionária. Dessa maneira, o autor apresenta uma simples interpretação geométrica baseada na definição de Riemann-Louville utilizando o

conceito matemático desenvolvido por [Bullock \(1988\)](#). Assim, esta definição pode ser escrita como:

$$I_0^\alpha = \int_0^t f(\tau) dg(\tau) \quad (3.54)$$

com

$$g(\tau) = \frac{1}{\Gamma(\alpha + 1)} [t^\alpha (t - \tau)^\alpha] \quad (3.55)$$

A partir desta informação plota-se um gráfico tridimensional com os eixos  $g(\tau)$ ,  $f(\tau)$  e  $\tau$ , como apresentado na Figura 2. Tendo o fato que  $f(\tau)$  é independente de  $g(\tau)$ , a projeção da área abaixo de  $f(\tau)$ , sobre o plano  $(\tau, f(\tau))$ , é  $\int_0^t f(\tau) d\tau$ , é semelhante a definição da integral com ordem inteira. Já a projeção da área abaixo da curva, sobre o plano  $f(\tau), g(\tau)$ , é  $\int_0^t f(\tau) dg(\tau)$  (Eq.3.54), i.e.; a integral da função com uma escala de tempo não homogênea que depende do parâmetro  $\alpha$ .

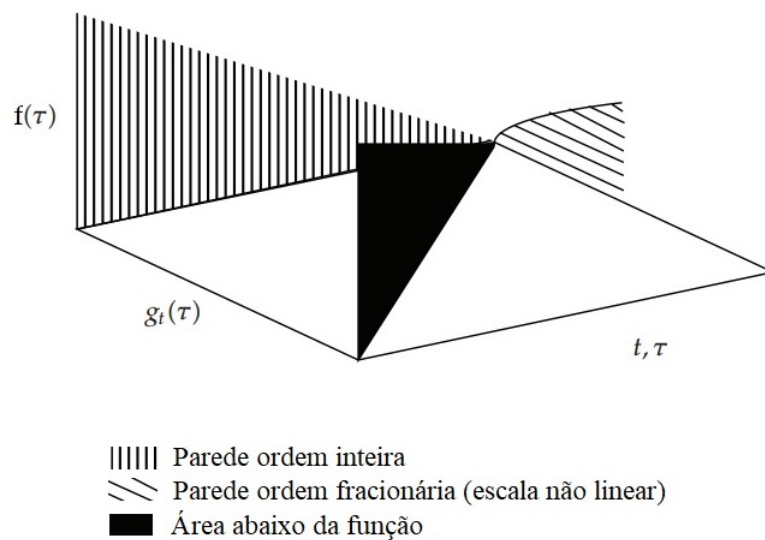


Figura 2 – Interpretação de Podlubny. A derivada fracionária é considerada a projeção da área abaixo das funções em uma escala de tempo não linear  $g(\tau)$ , com um parâmetro de deformação  $\alpha$  (ordem da derivada).

Uma segunda interpretação geométrica se baseia no que foi proposto por [Machado \(2003\)](#). Nesta o autor analisou o cálculo com ordem fracionária sob o ponto de vista probabilístico considerando a definição de Grünwald-Letnikov. Com base nisso, [Gutierrez, Rosario e Machado \(2010\)](#) concluíram que a derivada fracionária é uma soma ponderada do valor da função  $f(x)$  e equivale ao declive da reta ( $\theta$ ) que une o valor presente de  $f(x)$  ao outro valor simbolizado por  $E(x)$ , conforme ilustrado na Figura 2.

Em relação à interpretação física, [Podlubny \(2001\)](#) diz que a integração fracionária de Riemann-Louville é definida em termos de escala de tempo homogênea e não homogênea. Este mesmo raciocínio, segundo este autor, pode ser estendido para a análise da derivada fracionária

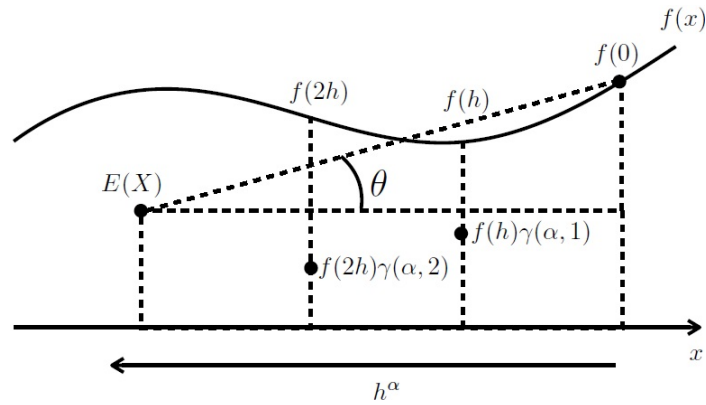


Figura 3 – Interpretação de Tenreiro. Os valores próximos ao ponto de avaliação têm uma efeito mais significativo sobre “o presente” do que outros.

de Riemann-Louville e de Caputo. Além disso, Podlubny (2001) também destaca dois conceitos a saber, o *tempo cósmico* e o *tempo individual*. O primeiro representa um tempo dividido em uma escala não homogênea, i.e.; o universo está em permanente expansão. Neste caso, ambas as escala espacial e temporal são dinâmicas. Já o segundo conceito é uma representação de escala de tempo ideal e, por isso, é dividida de forma homogênea com frações do tempo igualmente espaçadas. Dessa forma, a escala de tempo homogênea pode ser considerada como uma aproximação do tempo ideal.

Conforme destacado por Li, Qian e Chen (2011), as derivadas de Caputo e de Riemann-Liouville são as mais usadas em diferentes campos da ciência. A primeira é bem mais recebida justamente porque o valor inicial da equação diferencial fracionária é o mesmo que dá uma equação diferencial de ordem inteira, i.e.;  $x(0) = x_0$  para ambos os modelos com ordem inteira e fracionária. Entretanto, para as equações diferenciais fracionárias de Riemann-Liouville seus valores iniciais envolvem derivada e/ou integral fracionárias. Neste caso, analisar fisicamente o significado destas condições não é uma tarefa trivial, visto que isso significa interpretar tais derivadas e/ou integrais.

### 3.4.5 ÍNDICE DIFERENCIAL PARA ORDEM FRACIONÁRIA

Na seção 2.4 foi apresentado o conceito de ID no contexto inteiro. Intuitivamente, pode-se estender este conceito para um sistema de EADs com ordem fracionária. Para esta finalidade será revisitado o problema do pêndulo (ver a descrição na seção 2.4), todavia, escrito no contexto

fracionário:

$$\frac{d^\alpha x}{dt^\alpha} = u \quad (3.56)$$

$$\frac{d^\alpha y}{dt^\alpha} = v \quad (3.57)$$

$$\frac{d^\alpha u}{dt^\alpha} = -\frac{x\lambda}{m} \quad (3.58)$$

$$\frac{d^\alpha v}{dt^\alpha} = -g - \frac{y\lambda}{m} \quad (3.59)$$

$$x^2 + y^2 = L^2 \quad (3.60)$$

onde  $\alpha$  é a ordem fracionária ( $0 < \alpha \leq 1$ ).

Analogamente para o que foi apresentado para a ordem inteira, deriva-se a Eq. (3.60) com relação ao tempo. Em seguida as derivadas fracionárias com relação à  $x$  e  $y$  são substituídas considerando Eq. (3.56) e Eq. (3.57). Dessa forma obtêm-se:

$$2x \frac{d^\alpha x}{dt^\alpha} + 2y \frac{d^\alpha y}{dt^\alpha} = 0 \quad (3.61)$$

$$xu + yv = 0 \quad (3.62)$$

Diferenciando a Eq. (3.62) e fazendo as substituições necessárias obtêm-se Eq. (3.63) e Eq. (3.64), respectivamente:

$$x \frac{d^\alpha u}{dt^\alpha} + y \frac{d^\alpha v}{dt^\alpha} + u \frac{d^\alpha x}{dt^\alpha} + v \frac{d^\alpha y}{dt^\alpha} = 0 \quad (3.63)$$

$$-x^2 T - yg - y^2 T + u^2 + v^2 = 0 \quad (3.64)$$

Novamente, diferenciando a Eq. (3.64) e substituindo as respectivas derivadas, obtem-se a equação diferencial fracionária com relação à variável  $T$ :

$$\frac{d^\alpha T}{dt^\alpha} = \frac{-3vg - 2T(ux + yv)}{L^2} \quad (3.65)$$

Assim, observa-se que mesmo adotando uma equação diferencial ordinária fracionária para compor o sistema puramente diferencial (Eq. (3.56-3.59) e Eq. (3.65)), a quantidade de diferenciações permaneceu da mesma que a encontrada para o caso com ID inteiro ( $\alpha = 1$ ), i.e., foram necessárias três diferenciações para obter, de forma explícita, a equação diferencial fracionária em relação à variável  $T$ . Assim, para este caso particular, o valor do ID não foi alterado pela ordem fracionária ( $\alpha$ ).

### 3.4.6 CONSISTÊNCIA DIMENSIONAL DE MODELOS FRACIONÁRIOS

Como observado até o presente momento, os problemas dinâmicos podem ser modelados por equações diferenciais de ordem inteira ou com ordem fracionária. Ao empregar o cálculo fracionário para esta tarefa deve-se observar dois pontos, a saber, a interpretação física e geométrica

das integrais e derivadas fracionárias e a consistência dimensional do modelo fracionário. No que tange a consistência dimensional, ao se trabalhar com uma equação diferencial fracionária tem-se que observar o balanço de unidades. Para fins de aplicação, considere a função horária da velocidade em função do tempo:

$$\frac{ds}{dt} = v \quad (3.66)$$

em que  $s$  é o espaço,  $v$  é a velocidade e  $t$  é o tempo. Do ponto de vista dimensional, para o sistema MKS (metro-kilograma-segundo) de unidades tem-se:

$$\left[ \frac{m}{s} \right] = \left[ \frac{m}{s} \right] \quad (3.67)$$

Assim, para uma equação diferencial com ordem inteira, o lado esquerdo é igual ao lado direito, i.e.; o modelo apresentado é dimensionalmente coerente. Agora vamos considerar o mesmo modelo no contexto fracionário:

$$\frac{d^\alpha s}{dt^\alpha} = v \quad (3.68)$$

em que  $\alpha$  é a ordem fracionária. Neste caso, dimensionalmente tem-se:

$$\left[ \frac{m}{s^\alpha} \right] \neq \left[ \frac{m}{s} \right] \quad (3.69)$$

Como pode ser observado para esta aplicação o lado esquerdo não é igual ao lado direito no que tange o balanço de unidades. Assim, ao se trabalhar com um modelo diferencial fracionário que representa um fenômeno físico, deve-se realizar a análise dimensional do mesmo e a sua correção.

Para esta finalidade, pode-se empregar a definição de *tempo cósmico* (PODLUBNY, 2001) como forma de corrigir a dimensão de um modelo diferencial fracionário. Neste contexto, Gómez-Aguilar et al. (2012) propuseram, baseado neste conceito, um fator de correção em modelos diferenciais fracionários aplicados a osciladores mecânicos. Assim, para corrigir dimensionalmente um termo diferencial fracionário em que o tempo é a variável independente deve-se multiplicar o mesmo por um fator de correção. Neste caso, como a variável independente é o tempo, este fator, que depende da ordem fracionária, tem, obrigatoriamente, a unidade de tempo. Neste caso, considerando o sistema MKS, o termo diferencial fracionário corrigido é definido como (PODLUBNY, 2001):

$$\left[ \frac{1}{\sigma^{(1-\alpha)}} \frac{d^\alpha}{dt^\alpha} \right] = \left[ \frac{1}{s} \right], \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.70)$$

em que  $1/(\sigma^{(1-\alpha)})$  é o fator de correção (sendo  $\sigma$  um parâmetro que tem unidade, neste caso, do tempo).

Ao realizar a análise dimensional para esta equação observa-se que ambos os lados têm a mesma unidade, i.e.; são consistentes dimensionalmente. Para o caso em que  $\alpha$  é igual a unidade,

a Eq. (3.70) se torna um operador derivativo ordinário com ordem inteira. De forma geral, um operador diferencial ordinário pode ser substituído pelo operador fracionário derivativo conforme representado abaixo:

$$\frac{d}{dt} \rightarrow \frac{1}{\sigma^{(1-\alpha)}} \frac{d^\alpha}{dt^\alpha}, \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.71)$$

Segundo Podlubny (2001) o parâmetro  $\sigma$  pode ser interpretado como a *componente do tempo fracionário* no sistema em análise. É importante ressaltar que este mesmo procedimento pode ser adotado para derivadas de ordem superior.

Para fins de aplicação considere o modelo diferencial fracionário dado pela Eq. (3.68). Neste caso, aplicando este conceito a este estudo de caso obtêm-se:

$$\frac{1}{\sigma^{(1-\alpha)}} \frac{d^\alpha s}{dt^\alpha} = v \quad (3.72)$$

Se  $\sigma$  tem unidade de tempo, dimensionalmente tem-se:

$$\left[ \frac{1}{s^{(1-\alpha)}} \right] \left[ \frac{m}{s^\alpha} \right] = \left[ \frac{m}{s} \right] \quad (3.73)$$

Assim, verifica-se que ao se corrigir o operador diferencial fracionário, o modelo se torna dimensionalmente coerente. Cabe destacar que este conceito têm sido empregado em diferentes aplicações (GÓMEZ-AGUILAR; RAZO-HERNÁNDEZ; GRANADOS-LIEBERMAN, 2014; ROSALES et al., 2011; NASROLAHOUP, 2012; AGUILAR; HERNÁNDEZ, 2014; LIMA; LOBATO; STEFFEN JR, 2021b). Finalmente, enfatiza-se que, para que o valor de  $\sigma$  não interfira no valor dos perfis simulados, este pode ser definido como sendo igual a unidade. Assim, este parâmetro corrige a unidade sem interferir no valor dos perfis simulados.

### 3.4.7 APLICAÇÕES DO CÁLCULO FRACIONÁRIO

Apesar de o Cálculo Fracionário datar de quase 300 anos atrás, as suas aplicações ainda são recentes e restritas dentro do campo da ciência e da engenharia. No meio acadêmico já é possível vislumbrar bons trabalhos nos campos da Física, Biologia, Economia, Engenharia de Materiais, Engenharia Mecânica entre outros. Na sequência serão apresentados, em categorias, alguns desses trabalhos.

- **Física:** nesse campo é possível encontrar trabalhos sobre difusão anômala (METZLER et al., 2014), viscoelasticidade fracionária (PANDEY; HOLM, 2016), fluidos complexos (LENZI et al., 2017), eletromagnetismo (BOHANNAN; KNAUBER, 2015), acústica (CHEN; HU; CAI, 2016), física estatística (VOT; ABAD; YUSTE, 2017) e termo elasticidade (POVSTENKO, 2016).
- **Controle:** é possível encontrar trabalhos sobre teoria de controle com ordem fracionária (MANDIĆ et al., 2017; KRIJNEN; OSTAYEN; HOSSEINIA, 2018; AZAR; SERRANO;



KAMAL, 2021), controle de vibração ativa (FELIU-TALEGON; SAN-MILLAN; FELIU-BATLLE, 2016), modelagem de sistema (YANG; SRIVASTAVA; MACHADO, 2015) e implementação numérica (XUE, 2017).

- **Processamento de sinal e imagem:** podem ser encontrados trabalhos sobre processamento de imagem (YI-FEI, 2007; PU; ZHOU; YUAN, 2009) e processamento de sinal (NIGMATULLIN; GINIATULLIN; SKORINKIN, 2014; NIGMATULLIN et al., 2015).
- **Sistemas mecânicos e dinâmicos:** as trabalhos mais recentes tratam sobre sistemas dinâmicos (BALEANU et al., 2017; WU; BALEANU; LUO, 2017), mecânica de estruturas (CAJIĆ; KARLIČIĆ; LAZAREVIĆ, 2017), mecânica de fluidos não Newtonianos e microfluxos (WANG et al., 2017; JIANG et al., 2017), dinâmica de fluidos (MEHDINEJADIANI; JAFARI; BALEANU, 2013), mecânica de fluidos (SUN et al., 2018), geomecânica (CAI; CHEN; XU, 2017) e mecânica de materiais (MENG et al., 2016).
- **Biologia:** os trabalhos encontrados nesse campo são sobre os temas da bioengenharia (INGO et al., 2014; KARAMAN et al., 2016), dinâmica não linear (SHI; WANG, 2014), epidemiologia (PINTO; CARVALHO, 2017b; PINTO; CARVALHO, 2017a), biotecnologia (VALÉRIO; NETO; VINGA, 2019) e mais recentemente, modelagem da transmissão do COVID-19 e análise das estratégias de disseminação (KHAJJI et al., 2021).
- **Medicina:** nesse campo, já existem estudos sobre modelo matemático composto por equações diferenciais fracionárias com objetivo de analisar a relação entre o consumo de peixes e a mortalidade por doenças cardíacas crônicas no Egito (AMEEN et al., 2020), assim como sobre modelo de epidemia de ordem fracionária não linear para a transmissão do HIV (NAIK; ZU; OWOLABI, 2020a).
- **Ciência ambiental:** é possível encontrar trabalhos sobre corrosão em concreto (WEI; CHEN; ZHANG, 2017), hidrologia (ZHANG et al., 2016), transporte de sedimentos (SUN et al., 2015), transporte de soluto (SUN et al., 2014) e química ambiental (BOLSTER; BENSON; SINGHA, 2017).
- **Materiais:** existem trabalhos interessantes sobre o tema de polímero com memória de forma (LI et al., 2017) e materiais plásticos viscoelásticos (XIAO; SUN; CHEN, 2016).
- **Economia:** nessa área podem ser encontrados trabalhos sobre economia matemática (TARASOV; TARASOVA, 2016; TARASOVA; TARASOV, 2017) como também novas análises sobre modelos numéricos que retratam o desenvolvimento monetário mundial (MAHDY; EL-BARY et al., 2021).
- **Campo da engenharia multidisciplinar:** nesse outro campo é encontrado aplicações em materiais dielétricos anômalos (GARRA; GARRAPPA, 2018), materiais eletroquímicos (ALLAGUI et al., 2016) e energia (ZHOKH; STRIZHAK, 2017).

Especificamente no campo da Engenharia Mecânica é possível encontrar trabalhos que associam o estudo do cálculo fracionário a modelagem de sistemas mecânicos. Entretanto, a maioria dos estudos lidam com o tradicional Controle Clássico. No que se refere aos Problemas de Controle Ótimo Fracionários (PFOFs) ainda não são muitas as aplicações, o que por um lado é bastante interessante e se torna um estímulo para o desenvolvimento de trabalhos nessa linha. É o caso, por exemplo, do estudo realizado por [Ávila et al. \(2010\)](#) em que o cálculo fracionário é aplicado na modelagem de sistemas vibratórios com amortecimento viscoelástico no âmbito da Dinâmica Estrutural utilizando Controle Clássico. Nesse estudo, ele foca na simulação do comportamento dinâmico de sistemas estruturais dotados de amortecedores viscoelásticos no domínio do tempo. [Gómez-Aguilar et al. \(2015\)](#) realizaram um estudo sobre um sistema massa-mola-amortecedor utilizando as derivadas de Caputo e de Caputo-Fabrizio. Para preservar o sistema de unidades físicas é introduzido um parâmetro  $\sigma$ . Os resultados obtidos mostraram o comportamento viscoelástico produzindo uma fractalidade temporal, bem como a existência de heterogeneidades do material. [Yuan e Agrawal \(2002\)](#) propuseram um esquema numérico para resolver sistemas dinâmicos envolvendo derivadas fracionárias. Os autores aplicaram esse esquema em um sistema massa-mola-amortecedor de um grau de liberdade composto por um único amortecedor fracionário. [Demir, Bildik e Sinir \(2012\)](#) estudaram a viscoelasticidade de uma viga no contexto fracionário via análise das vibrações longitudinais oriundas da aplicação de uma força harmônica externa. Para essa finalidade foi utilizada a derivada de Riemann-Liouville. [Büchner \(2017\)](#) estudou um neutralizador dinâmico de vibrações torcionais viscoelásticos aplicado em um sistema rotodinâmico. Para a modelagem do sistema, o autor usa um modelo fracionário da viscoelasticidade linear e afirma que a opção por esse método de modelagem se deve a habilidade do modelo fracionário em descrever, de forma mais realística, o comportamento dinâmico de materiais poliméricos. [Freundlich e Sado \(2020\)](#) apresentaram um estudo sobre um sistema dinâmico não linear com três graus de liberdade composto por um pêndulo esférico e um amortecedor do tipo fracionário. Nesse trabalho, as propriedades viscoelásticas do amortecedor são descritas através da derivada de Caputo e o impacto da ordem fracionária não sistema é estudado. Os autores também enfatizam que na engenharia prática, sistemas que contêm um pêndulo esférico são úteis para modelar a dinâmica de certos tipos de estruturas. [Meng \(2021\)](#) apresenta uma abordagem de cálculo fracionário usada para descrever o comportamento não linear de compósitos poliméricos ferroelétricos de ambas as perspectivas viscoelástica e dielétrica. Os elementos fracionários para viscoelasticidade e dieletricidade são o “*spring-pot*” e o “*cap-resistor*”, que podem capturar as propriedades intermediárias entre a mola e o painel de instrumentos ou capacitor e resistor, respectivamente. Para modelar a deformação viscoelástica, a equação “*spring-pot*” é usada diretamente como o modelo mecânico fracionário. As comparações com resultados experimentais sugerem que os modelos propostos podem descrever bem a deformação viscoelástica, bem como a dependência da frequência da constante dielétrica e perda dielétrica do ferroelétrico compósitos poliméricos.

## 3.5 PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO FRACIONÁRIO

Conforme apresentado anteriormente, o uso do cálculo fracionário na representação de sistemas nas diferentes áreas da ciência tem contribuído para uma melhor descrição dos mesmos. Isto não é diferente quando se trata do Problema de Controle Ótimo Fracionário (PCOF). Este se diferencia do PCO (com ordem inteira) pela presença de um vetor de restrições diferenciais fracionárias. Em outras palavras, o PCOF pode ser considerado como uma generalização do PCO. Assim sendo, do ponto de vista matemático este problema pode ser definido como:

$$\min_{u(t)} J = \Psi(x(t_f), t_f) + \int_0^{t_f} L(x, u, t) dt \quad (3.74)$$

sujeito às seguintes restrições algébrico-diferenciais fracionárias:

$$h(dx^\alpha/dt^\alpha, x, u, t) = 0 \quad (3.75a)$$

$$g(x, u, t) \leq 0 \quad (3.75b)$$

$$x^{\min} \leq x(t) \leq x^{\max} \quad (3.75c)$$

$$u^{\min} \leq u(t) \leq u^{\max} \quad (3.75d)$$

onde  $t$  é o tempo,  $x(t)$  é o vetor das variáveis de estado,  $\alpha$  é a ordem fracionária,  $u(t)$  é o vetor das variáveis de controle,  $\Psi$  e  $L$  representam o primeiro e o segundo termos da função objetivo  $J$ , sendo  $\Psi$  definida no tempo final  $t_f$ ,  $h$  e  $g$  representam os vetores de restrições de igualdade (algébricas e diferenciais) e desigualdade, respectivamente. Os superscritos min e max identificam, respectivamente, os limites inferior e superior do vetor de variáveis de estado e de controle.

A extensão da teoria de controle ótimo para o contexto fracionário é área relativamente recente da matemática e tem sido desenvolvida a partir da incorporação das definições existentes no cálculo fracionário.

### 3.5.1 CONDIÇÕES DE OTIMALIDADE PARA PCOS COM ORDEM FRACIONÁRIA

Considere o PCOF definido como:

$$J(u) = \int_0^{t_f} F(x, u, t) dt \quad (3.76)$$

sujeito ao seguinte modelo diferencial fracionário:

$${}^C D_t^\alpha x = G(x, u, t), \quad x(0) = x_0 \quad (3.77)$$

em que  $J$  é a função objetivo,  $t$  é o tempo,  $x$  é a variável de estado ( $x_0$  é a condição inicial associada a essa variável),  $u$  é a variável de controle,  $F$  e  $G$  são duas funções que dependem de

informações do estado e do controle e  $\alpha$  é a ordem fracionária do modelo, sendo  $0 < \alpha < 1$ . Se  $\alpha = 1$  tem-se o PCO com ordem inteira.

Para encontrar a estratégia de controle ótima, é definido um índice de desempenho modificado através da abordagem tradicional, conforme apresentado no capítulo anterior, i.e.:

$$\bar{J}(u) = \int_0^{t_f} [F(x,u,t) + \lambda(G(x,u,t) - {}_0D_t^\alpha x)] dt \quad (3.78)$$

onde  $\lambda$  é a variável adjunta (co-estado).

Tomando a variação da Eq. (3.78) obtém-se:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J}(u) = & \int_0^{t_f} \left[ \frac{\partial F}{\partial x} \delta x + \frac{\partial F}{\partial u} \delta u + \delta \lambda (G(x,u,t) - {}_0D_t^\alpha x) \right] dt + \\ & + \int_0^{t_f} \left[ \lambda \left( \frac{\partial G}{\partial x} \delta x + \frac{\partial G}{\partial u} \delta u - \delta({}_0D_t^\alpha x) \right) \right] dt \end{aligned} \quad (3.79)$$

onde  $\delta x$ ,  $\delta u$  e  $\delta \lambda$ , são as variações de  $x$ ,  $u$  e  $\lambda$  consistentes com a condição terminal especificada, respectivamente.

Se integrarmos essa equação por partes pode-se obter seguinte o índice de desempenho:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J}(u) = & \int_0^{t_f} \left[ \delta \lambda (G(x,u,t) - {}_0D_t^\alpha x) + \delta x \left( \frac{\partial F}{\partial x} + \lambda \frac{\partial G}{\partial x} + {}_tD_1^\alpha \lambda \right) \right] dt + \\ & \int_0^{t_f} \left[ \delta u \left( \frac{\partial F}{\partial u} + \lambda \frac{\partial G}{\partial u} \right) \right] dt \end{aligned} \quad (3.80)$$

Para obter a condição necessária, combina-se as Eqs. (3.76) e (3.77). A partir disso, obtém-se as variações referentes a essa equação. Em seguida, assim como apresentado para o PCO de ordem inteira, integra-se este modelo por partes, fazendo com que as variações sejam iguais a zero, o que implica no seguinte sistema de equações:

$${}_0^C D_t^\alpha x = G(x,u,t), \quad x(0) = x_0 \quad (3.81a)$$

$${}_t^C D_t^\alpha \lambda = \frac{\partial F}{\partial x} + \lambda \frac{\partial G}{\partial x}, \quad \lambda(t_f) = 0 \quad (3.81b)$$

$$\frac{\partial F}{\partial u} + \lambda \frac{\partial G}{\partial u} = 0 \quad (3.81c)$$

As Equações (3.81a) a (3.81c) representam as condições de otimalidade (ou equações de *Euler-Lagrange*) para o PCOF. Estas são semelhantes às desenvolvidas para PCO com ordem inteira apresentadas por Agrawal (2006). Conforme descrito por Agrawal (2004) e Agrawal (2008b) a avaliação das condições gerais necessárias para um PCOF depende do tipo de derivada fracionária considerada. Nesse trabalho, optou-se por trabalhar com Derivada Fracionária de Caputo devido ao fato desta incorporar de maneira direta as condições iniciais tradicionais Agrawal (2008a), bem como pelo efeito de memória (GÓMEZ-AGUILAR et al., 2015).

Neste caso, pode-se generalizar o modelo acima de forma a contemplar contribuições considerando equações diferenciais com ordem inteira e fracionária, conforme sugerido por [Pooseh, Almeida e Torres \(2013\)](#) e por [Toledo-Hernandez et al. \(2014\)](#). Para essa finalidade considere o seguinte modelo diferencial:

$$M\dot{x}(t) + N {}^C D_t^\alpha x(t) = G(t, x(t), u(t)) \quad (3.82)$$

com as seguintes condições de contorno:

$$x(a) = x_a \quad (3.83)$$

Neste modelo,  $M$  e  $N$  ( $\neq 0$ ) são matrizes que definem a característica do modelo (inteiro, fracionário ou uma combinação de ambos),  $x_a$  o vetor que representa a condição inicial para o vetor de variáveis de estado, e  $\alpha$  é a ordem fracionária. Neste caso, se  $(x, u, \lambda)$  é um minimizador para o modelo diferencial acima, existe um estado adjacente  $\lambda$  que satisfaz a seguinte condição de otimalidade ([POOSEH; ALMEIDA; TORRES, 2013](#)):

$$M\dot{x}(t) + N {}^C D_t^\alpha x(t) = \frac{\partial H(t, x(t), u(t), \lambda(t))}{\partial \lambda}, \quad x(0) = x_a \quad (3.84a)$$

$$M\dot{\lambda}(t) + N {}_t D_{t_f}^\alpha \lambda(t) = \frac{\partial H(t, x(t), u(t), \lambda(t))}{\partial x}, \quad \lambda(t_f) = 0 \quad (3.84b)$$

$$\frac{\partial H(t, x(t), u(t), \lambda(t))}{\partial u} = 0 \quad (3.84c)$$

para todos os  $t$  pertencentes a  $[a, t_f]$ , sendo  $t_f$  o tempo ótimo então a função *Hamiltoniano*  $H$  é definida como:

$$H(t, x(t), u(t), \lambda(t)) = F(t, x(t), u(t)) + \lambda(t)G(t, x(t), u(t)) \quad (3.85)$$

Sob condições especiais (convexidade e linearidade) do funcional  $F$  e do lado direito de  $G$ , as condições de otimalidade dadas pela Eqs. (3.84a) a (3.84c) também são suficientes ([POOSEH; ALMEIDA; TORRES, 2013](#)). Além disso, se a ordem das derivadas fracionárias,  $\alpha$  for igual a 1, o sistema de equações se reduz às equações clássicas.

### 3.5.2 ESTRATÉGIAS NUMÉRIAS APLICADAS À PCOFs

Numericamente, resolver um PCOF consiste em utilizar estratégias específicas para o tratamento de equações diferenciais fracionárias, o que implica, naturalmente, no aumento da complexidade em relação as abordagens existentes para o PCO. Neste contexto, na literatura especializada diferentes tipos de abordagens para caracterizar e resolver o PCOF, dentre as quais pode-se citar: o uso de polinômios ortonormais de Jacobi ([DOHA et al., 2015](#)), o desenvolvimento das equações de Hamilton-Jacobi-Bellman via método da colocação de Legendre Gauss ([RAKHSHAN; EFFATI; KAMYAD, 2018](#)), o emprego do método da colocação de Haar ([HOSSEINPOUR; NAZEMI, 2016](#)), o desenvolvimento de métodos pseudoespectrais fracionários ([TANG; SHI; WANG, 2017](#)), o uso de polinômios ortonormais de Chebyshev associados à fórmula de quadratura de Legendre-Gauss ([BHRAWY et al., 2017](#)).

### 3.5.3 APLICAÇÕES NO CAMPO DO CONTROLE ÓTIMO FRACIONÁRIO

Toledo-Hernandez et al. (2014) aplicaram ferramentas do cálculo fracionário para estudar o comportamento da fermentação e de um sistema reativo para hidrólise térmica. São apresentadas as condições de otimalidade para esse problema, que foi resolvido usando abordagem direta considerado um integrador preditor-corretor fracionário para a obtenção dos perfis referentes a taxa de diluição ótima.

Rosa e Torres (2018) propuseram um PCOF aplicado a um modelo epidemiológico empregado para casos de infecção por vírus sincicial respiratório humano. Para esse estudo, estes autores optaram por usar o modelo SEIRS (*Susceptible Exposed Infectious Recovered Susceptible*) no contexto fracionário. O objetivo foi a minimização do número de indivíduos infectados bem como o custo associado ao controle da doença com o tratamento dos pacientes. Já a variável de controle está relacionada com o tratamento, i.e., o medicamento adotado. O problema é tratado com derivadas fracionárias do tipo Riemann–Liouville em que as condições de otimalidade são obtidas. O problema foi resolvido numericamente com a resolução de um problema de valor no contorno usando o Método do Chute. A partir dos resultados obtidos os autores concluíram que o uso de modelos diferenciais fracionários permitiu um melhor ajuste dos dados reais quando comparado ao modelo com ordem inteira.

Naik, Zu e Owolabi (2020b) desenvolveram um modelo epidemiológico com ordem fracionária para a transmissão do HIV (*Human Immunodeficiency Virus*) usando como fundamento o modelo baseado em compartimentos SIR (*Susceptible Infectious Recovered*). O foco do trabalho foi estudar a propagação do HIV via transmissão sexual. A classe exposta contém aqueles homens suscetíveis na população que mantém contato sexual com as trabalhadoras do sexo feminino e que estão expostos à infecção diretamente ou indiretamente.

Tsay et al. (2020) apresentaram um estudo para modelar a dinâmica das populações afetadas da COVID-19 no contexto fracionário, bem como estimar os parâmetros do modelo e avaliar a estratégia de controle ideal para o distanciamento social. Os resultados demonstraram que o distanciamento social e a quarentena são mais eficazes quando implementados precocemente.

Nguyen, Johnson e Melkote (2020) propuseram um PCOF aplicado a robôs industriais com seis graus de liberdade. O objetivo do estudo foi encontrar uma alternativa para o sistema implementado na indústria para a atividade de fresamento de peças, proporcionar uma maior versatilidade e um maior volume de trabalho.

Neste mesmo cenário, Lounis, Louadj e Aidene (2021) também estudaram um PCOF aplicado a um robô para encontrar uma estratégia de controle que permita chegar a um destino a partir de um determinado ponto inicial minimizando o tempo de operação.

## 3.6 PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO

### 3.6.1 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Matematicamente, o Problema de Otimização Multi-Objetivo (POMO) é definido como (DEB, 2001):

$$\min f_m(x), \quad m = 1, 2, \dots, M \quad (3.86)$$

$$\begin{cases} g_j(x) \leq 0 & j = 1, 2, \dots, J \\ h_k(x) = 0 & k = 1, 2, \dots, K \\ x_i^L \leq x_i \leq x_i^U & i = 1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (3.87)$$

onde  $x$  é o vetor de  $n$  variáveis de projeto  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ . Os valores de  $x_i^L$  e  $x_i^U$ , representam os valores mínimo e máximo para a variável  $x_i$ , respectivamente. As  $j$  desigualdades ( $g_j$ ) e as  $k$  igualdades ( $h_k$ ) são chamadas de funções de restrição.

Cada uma das  $M$  funções objetivo  $f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)$  pode ser maximizada ou minimizada. O vetor de funções objetivo  $f(x)$  forma um espaço multi-dimensional denominado espaço de objetivos  $Z$ .

#### 3.6.1.1 ÓTIMO DE PARETO

Obter a solução de um problema de otimização multi-objetivo é utilizado o conceito de dominância de Pareto (MARLER; ARORA, 2004). A ideia de “ótimo” foi proposta por Francis Ysidro Edgeworth em 1881 (EDGEWORTH, 1881) e depois aperfeiçoada pelo economista e socialista Vilfredo Pareto (PARETO, 1896).

A definição de ótimo segundo Edgeworth-Pareto é baseada na convicção intuitiva de que um ponto  $x^*$  é tomado como ótimo se “*nenhum critério utilizado pode melhorar a solução, sem piorar pelo menos um outro critério*”. No entanto, o ótimo de Edgeworth-Pareto quase sempre não nos fornece uma solução única, mas sim um conjunto de soluções denominadas não inferiores ou soluções não-dominadas.

Para resolver um problema de otimização multi-objetivo pode-se fazer uso de abordagens já existentes, como por exemplo, de métodos clássicos (determinístico) ou de métodos heurísticos (não determinísticos). Nos métodos clássicos consideram-se estratégias para reescrever o problema multi-objetivo em um equivalente mono-objetivo. Já nos métodos heurísticos, tradicionalmente, o conceito de dominância de Pareto é incorporado a estas abordagens de forma que o problema multi-objetivo seja resolvido na sua forma original, i.e.; sem qualquer tipo de transformação. Esta última classe de métodos têm recebido interesse crescente nas últimas décadas, devido a sua simplicidade conceitual, facilidade de incorporação de operadores (dentre os quais de dominância de Pareto) e versatilidade na resolução de problemas realísticos (FONSECA; FLEMING et al., 1993; DEB, 2001; COELHO, 2004).

### 3.6.2 MÉTODOS HEURÍSTICOS

Os Métodos Heurísticos são baseados nos princípios e modelos de evolução biológica, na genética das populações ou em estratégias puramente estruturais (LOBATO, 2008). Estes têm como principal característica o fato de não fazerem uso de informações sobre o gradiente da função objetivo e das restrições para atualizar um candidato em potencial à solução do problema de otimização. Além disso, também pode-se citar a sua simplicidade conceitual e versatilidade na resolução de problemas realísticos (FONSECA; FLEMING et al., 1993; GRIFFEL, 2003; COELHO, 2004). Na literatura especializada inúmeros representantes desta classe de abordagens podem ser encontradas, dentre as quais pode-se citar os tradicionais Algoritmos Genéticos, Enxame de Partículas, Colônia de Formigas, entre os outros. A seguir são apresentados dois algoritmos, um tradicional com grande histórico de aplicações em diferentes campos da ciência (Evolução Diferencial) e um outro proposto recentemente e que tem sido empregado com sucesso em problemas com diferentes níveis de complexidade (Busca Fractal Estocástica).

#### 3.6.2.1 EVOLUÇÃO DIFERENCIAL

A Evolução Diferencial (ED) é um algoritmo baseado em população proposto por Storn e Price (1997) para a resolução de problemas de otimização. A ideia principal por trás deste algoritmo é o esquema proposto para gerar candidatos em potencial a solução do problema de otimização. Em linhas gerais, este método consiste na realização de operações vetoriais (soma e subtração) com candidatos escolhidos da população corrente. Os principais parâmetros de controle na ED são:  $NP$  é o tamanho da população,  $CR$  é a probabilidade de cruzamento e  $F$  é a taxa de redução, também chamado de fator de escala. Storn e Price (1997) forneceram algumas regras simples para a escolha de parâmetros-chave de ED para uma nova aplicação. Normalmente,  $NP$  deve ser cerca de 5 a 10 vezes a dimensão (número de parâmetros em um vetor) do problema. Já  $F$  encontra-se na faixa de 0,4 a 1,0. Inicialmente,  $F = 0,5$  pode ser tentado, a partir daí  $F$  e/ou  $NP$  é aumentado se a população convergir prematuramente.

O procedimento geral deste algoritmo é dado pelos seguintes passos (STORN; PRICE, 1997):

- Inicialmente, uma população é gerada (aleatoriamente) com  $NP$  soluções viáveis (definidas de acordo com os limites estabelecidos pelo usuário para cada variável de projeto).
- Em geral, um indivíduo ( $X_1$ ) é selecionado (aleatoriamente) na população para ser substituído. Dois outros indivíduos ( $X_2$  e  $X_3$ ) são selecionados (aleatoriamente) na população para realizar a subtração vetorial.
- O resultado da operação de subtração entre  $X_2$  e  $X_3$  é ponderado pelo fator  $F$ . Este resultado ( $F \times (X_2 - X_3)$ ) é adicionado ao indivíduo ( $X_1$ ). Portanto, o novo candidato em potencial ( $X$ ) é dado por:  $X = X_1 + F \times (X_2 - X_3)$ . É importante enfatizar que outros esquemas para gerar candidatos potenciais podem ser usados (STORN; PRICE, 1997).



- Se o vetor resultante ( $X$ ) tiver um melhor valor (em termos da função objetivo), ele pode substituir o candidato alvo ( $X_1$ ). Esta operação ocorre se um número aleatório gerado for menor que a probabilidade de cruzamento ( $CR$ ). Caso contrário, o candidato  $X_1$  sobreviverá, pelo menos para a próxima geração. Este procedimento é repetido até que uma nova população com  $NP$  candidatos seja gerada (esta população irá conter indivíduos da população corrente e gerados pelo procedimento apresentado).
- Para finalizar o algoritmo é necessário definir um critério de parada. Geralmente utiliza-se o número máximo de gerações como forma de finalizar o procedimento iterativo.

Dentre as vantagens observadas para o ED pode-se citar: *i*) estrutura simples (fácil concepção conceitual); *ii*) facilidade de implementação e utilização; *iii*) rapidez e robustez; *iv*) facilidade para lidar com problemas restritos; *v*) capacidade de escapar de ótimos locais; e *vi*) habilidade em trabalhar com variáveis mistas (reais, inteiras, discretas e binárias) (BABU; GAURAV, 2000; BABU; ANGIRA, 2001; BABU; CHAKOLE; MUBEEN, 2005; PRICE; STORN; LAMPINEN, 2006).

### 3.6.2.2 BUSCA FRACTAL ESTOCÁSTICA

A Busca Fractal (BF) é uma abordagem base que serviu de inspiração para o desenvolvimento do algoritmo de Busca Fractal Estocástica (BFE). De forma geral, o algoritmo de BF utiliza as seguintes premissas (SALIMI, 2015):

- Cada partícula da população possui uma energia potencial elétrica;
- Cada partícula se difunde, criando outras partículas aleatórias e a energia potencial da partícula mãe é dividida entre as partículas geradas;
- Apenas as melhores partículas são mantidas em cada geração, sendo o restante eliminado da análise.

O algoritmo de BF consiste na geração de uma população inicial, que possui  $N_p$  partículas. Cada partícula  $P_i$  possui uma energia potencial  $E_i$  definida conforme a Eq. (3.88):

$$E_i = \frac{E}{N_p} \quad (3.88)$$

onde  $E$  é a energia potencial elétrica máxima considerada para a solução do problema e  $P$  é o número de partículas que compõem a população inicial.

Em cada geração, cada partícula é difundida criando outras partículas baseando-se no voo de Lévy (VISWANATHAN; RAPOSO; LUZ, 2008). Este pode ser entendido como um tipo de movimento Browniano que envolve etapas aleatórias em que, de vez em quando, o objeto,

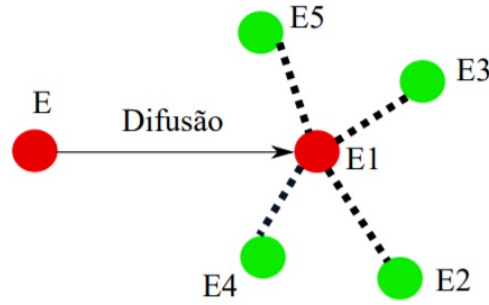


Figura 4 – Representação esquemática da difusão de uma partícula. Adaptado de Salimi (2015).

aleatoriamente, dá um salto para outra região do espaço. A distribuição de Lévy é apresentada na Eq. (3.89):

$$L(\lambda) = \frac{\mathcal{N}(0, \sigma_u^2)}{|\mathcal{N}(0, \sigma_v^2)|^{1/\lambda}} \quad (3.89)$$

onde  $\mathcal{N}()$  representa a distribuição do tipo normal,  $\lambda$  é o índice de distribuição, compreendido no intervalo de  $[0, 2]$  (sendo geralmente arbitrado como sendo igual a 1,5),  $\sigma_v$  é um parâmetro definido como sendo igual a unidade e  $\sigma_u$  é uma função definida como (YANG, 2010):

$$\sigma_u = \left( \frac{\Gamma(1 + \lambda) \sin(\pi\lambda/2)}{\lambda\Gamma((1 + \lambda)/2)2^{(\lambda-1)/2}} \right)^{1/\lambda} \quad (3.90)$$

em que  $\Gamma()$  é a função gamma.

O processo de difusão cria partículas que são distribuídas aleatoriamente em torno da partícula original, conforme pode ser observado na Figura 4.

Para esse processo são utilizados, além da estratégia proposta por Lévy, o método de distribuição Gaussiano, conforme as Eqs. (3.91) e (3.93).

$$x_i^{i_{dif}} = x_i + \alpha_i^{i_{dif}} L(\lambda) \quad (3.91)$$

onde  $i_{dif}$  é um índice compreendido entre  $[0, \text{número máximo de difusões}]$ .

Para melhor aproveitar as vantagens das duas abordagens, o algoritmo de BF aplica ambas as estratégias, todavia de forma aleatória. Para aumentar a velocidade de convergência do processo de otimização, o parâmetro  $\alpha$  pode avaliar duas estratégias para a sua atualização, a saber, as Eqs. (3.92a) e (3.92b):

$$\alpha_i = \frac{\log(\min(\hat{E}))(U - D)}{N_{ger} \log(E_i)} \quad (3.92a)$$

$$\alpha_i = \frac{(U - D)}{(N_{ger} \log(E_i))^{pot}} \quad (3.92b)$$

onde  $\min(\hat{E})$  é a energia mínima que cada partícula apresenta.  $U$  e  $D$  são os limites superior e inferior do espaço de projeto,  $N_{ger}$  é o número de gerações,  $E_i$  é a energia da partícula  $P_i$  e  $pot$  é considerada a potência. Conforme destacado por Salimi (2015), a primeira garante uma

convergência mais rápida, enquanto a segunda consegue melhor estimar, com maior precisão, o resultado final.

Para a geração de um candidato em potencial, o método de distribuição Gaussiano é empregado. Este pode ser representado como:

$$x_i^{q_{dif}} = x_i + \beta \text{Gaussiana}(P_i | BP|) - (\gamma BP - \gamma' P_i) \quad (3.93)$$

onde  $q_{dif}$  é o número de partículas adquiridas no processo de difusão,  $\gamma$  e  $\gamma'$  são números aleatórios compreendidos entre 0 e 1,  $\text{Gaussiana}(P_i | BP|)$ ,  $P_i$  e  $|BP|$  representam a média e o desvio padrão da distribuição Gaussiana, respectivamente, e  $\beta$  é um parâmetro definido como sendo:

$$\beta = \frac{\log(N_{ger})}{N_{ger}} \quad (3.94)$$

em que  $N_{ger}$  é o número de iterações (gerações) corrente.

Após a difusão, a energia da partícula original é dividida entre as partículas geradas, considerando o melhor valor da função objetivo. Essa distribuição ocorre conforme a Eq. (3.95):

$$E_i^j = \left( \frac{f_j}{f_i + \sum_{k=1}^{N_{ger}} f_k} \right) E_i \quad (3.95)$$

onde  $i$  é o índice da partícula original,  $j$  é o índice da partícula gerada,  $N_{ger}$  é a quantidade de gerações corrente,  $f_i$  é o valor da função objetivo para a partícula original e  $f_j$  o valor da função objetivo para a partícula gerada.

Para diminuir o custo de execução do algoritmo, apenas as melhores partículas geradas sobrevivem até a geração seguinte, sendo a maioria descartada. A energia das partículas descartadas é redistribuída às partículas sobreviventes e utilizada na criação de novas partículas. A equação de distribuição de energia é tal que:

$$E_{nova}^t = E_{antiga}^t + \left[ \left( \frac{f_t}{\sum_{k=1}^{\zeta} f_k} \right) \phi \right] \mu \quad (3.96)$$

em que  $\phi$  é a quantidade de energia das partículas descartadas,  $\mu$  é a taxa de distribuição de energia entre as partículas sobreviventes e as novas partículas,  $E_{antiga}^t$  e  $E_{nova}^t$  representam as energias da  $t$ -ésima partícula antes e depois da distribuição de energia e  $\zeta$  é o número de partículas na iteração corrente.

O número de partículas criadas e alocadas no espaço de busca é definido conforme a Eq. (3.97):

$$\vartheta = \frac{\log(\text{número de partículas descartadas})}{\log(\text{número máximo de difusão})} \quad (3.97)$$

A energia distribuída para cada nova partícula criada é igual para todas e dada conforme a Eq. (3.98):

$$E'_c = \frac{\phi(1 - \mu)}{\vartheta} \quad c = 1, 2, \dots, \vartheta \quad (3.98)$$

O algoritmo de BFE tem sido empregado com sucesso em vários campos da ciência, dentre os quais pode-se citar: funções matemáticas (ZUO et al., 2017), estimação da estrutura de proteínas 3D (ZHOU et al., 2018), sistemas de distribuição (NGUYEN; TRAN; VO, 2018), problema do despacho econômico (ALOMOUSH, 2019), despacho de carga econômica (PHAM et al., 2019), estimativa de parâmetros em um sistema solar fotovoltaico (CHEN; YUE; YU, 2020), e resolução de problemas de controle ótimo fracionários (LIMA; LOBATO; STEFFEN JR, 2021a).

### 3.7 MÉTODO DA COLOCAÇÃO ORTOGONAL

O Método da Colocação Ortogonal (MCO) é baseado na definição de uma função de aproximação (geralmente uma função polinomial), na qual sua solução numérica é avaliada considerando um determinado número de pontos dentro do domínio de interesse, i.e., o Número de Pontos de Colocação - NPC (VILLADSEN; MICHELSEN, 1978). A equação original deve satisfazer a função de aproximação nos pontos considerados, bem como nas condições inicial e de contorno (caso o problema em questão seja de valor no contorno). Uma função ortogonal é usada para determinar a posição ótima desses pontos no domínio  $X$ . Para esse objetivo, considere a seguinte relação recursiva (VILLADSEN; MICHELSEN, 1978):

$$\Pi_i^{(\psi, \eta)}(X) = (X + \psi_i)\Pi_{i-1}(X) + \eta_i\Pi_{i-2}(X) \quad (3.99)$$

em que  $\Pi$  é uma função polinomial e  $\psi$  e  $\eta$  são coeficientes definidos a partir da aproximação considerada.

As raízes desta equação são obtidas considerando um polinômio ortogonal de grau NPC, o peso  $W(X)$  e a seguinte condição de Galerkin (VILLADSEN; MICHELSEN, 1978):

$$\int_0^1 W(X)(\psi X + \eta)\Pi_i^{(\psi, \eta)}(X) dX = 0, \quad i = 0, \dots, \text{NPC}-2 \quad (3.100)$$

Multiplicando a Eq. (3.99) por  $\Pi_{i-2}$  e integrando, a seguinte relação é obtida:

$$\eta_i = -\frac{\int_0^1 XW(X)\Pi_{i-1}(X)\Pi_{i-2}(X) dX}{\int_0^1 W(X)\Pi_{i-2}^2(X) dX} \quad (3.101)$$

Analogamente, multiplicando a Eq. (3.99) por  $\Pi_{i-1}$  e integrando, o parâmetro  $\psi$  pode ser obtido, i.e.:

$$\psi_i = -\frac{\int_0^1 XW(X)\Pi_{i-1}^2(X) dX}{\int_0^1 W(X)\Pi_{i-1}^2(X) dX} \quad (3.102)$$

Considerando, por exemplo,  $\Pi_{i-2} = 0$ ,  $\Pi_{i-1} = 1$ ,  $W(X) = 1$  e  $\eta_1 = 0$ , o procedimento acima pode ser usado para calcular  $\psi$  e  $\eta$  e, conseqüentemente, determinar o polinômio ortogonal em NPC, i.e.,  $\Pi_{\text{NPC}}^{(\psi, \eta)}(X)$  (LARANJEIRA; PINTO, 2001). As raízes deste polinômio são tomadas como sendo os pontos de colocação.

Sabe-se que a função de aproximação e os pontos de colocação podem ser escolhidos usando abordagens diferentes. A metodologia do polinômio de Lagrange (PL) tem sido tradicionalmente usada como uma função de aproximação. Essa escolha se deve à redução do custo computacional associado à aproximação numérica dos derivativos em comparação com outras aproximações (LARANJEIRA; PINTO, 2001).

Considerando o conjunto de pontos de dados  $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots, (X_{\text{NPC}+1}, Y_{\text{NPC}+1})$ , uma fórmula de interpolação que passa por esses pontos (um polinômio de interpolação de NPC-ésimo grau) é dada por:

$$Y_{\text{NPC}}(X) = \sum_{i=1}^{\text{NPC}+1} Y_i l_i(X) \quad (3.103)$$

em que  $l_i(X)$  é o polinômio de interpolação de Lagrange definido como:

$$l_i(X) = \prod_{j=1, j \neq i}^{\text{NPC}+1} \frac{X - X_j}{X_i - X_j} \quad (3.104)$$

Se o subscrito  $i$  for igual a  $j$ ,  $l_i(X)$  é igual a 1. Caso contrário,  $l_i(X)$  é igual a 0. Como essa aproximação é uma função contínua, ela pode ser diferenciada e integrada. Assim, a primeira derivada para uma raiz específica  $X_j$  pode ser expressa como:

$$\frac{dY_{\text{NPC}}(X_j)}{dX} = \sum_{i=1}^{\text{NPC}+1} Y_i \frac{dl_i(X_j)}{dX}, \quad j = 1, 2, \dots, \text{NPC}+1 \quad (3.105)$$

Substituindo essas aproximações no modelo original, é possível obter expressões (residuais) para cada ponto de colocação. Estes resíduos devem ser minimizados para cada raiz do polinômio ortogonal, i.e., devem ser zerados em cada ponto de colocação, bem como devem satisfazer as condições iniciais e de contorno (caso o problema seja de valor no contorno). O sistema algébrico resultante, geralmente não linear, deve ser resolvido considerando uma técnica numérica apropriada, como por exemplo, o Método de Newton.

A seguir é apresentado um consolidado dos passos necessários para a aplicação do MCO para a resolução de equações diferenciais ordinárias com ordem inteira:

1. Definir os parâmetros de entrada: domínio do problema, função peso para a determinação do polinômio ortogonal, grau NPC da aproximação (o polinômio tem NPC+1 coeficientes);
2. Calcular o polinômio ortogonal de grau NPC+1-NC, onde NC é o número de condições que precisam ser satisfeitas;

3. Calcular as NPC raízes (pontos de colocação) do polinômio ortogonal;
4. Determinar as equações (resíduo nos pontos de colocação);
5. Resolver o sistema de equações resultantes;
6. Verificar se a solução obtida não é modificada com o aumento do grau da aproximação.

É importante ressaltar que, como o MCO apresentado é fundamentado no uso de um polinômio ortogonal, a variável independente no modelo diferencial ordinário deve estar definida no intervalo  $[0, 1]$  para que o MCO possa ser empregado. Caso isso não aconteça, inicialmente deve-se realizar uma mudança de variável de modo que o modelo seja sempre integrado no intervalo  $[0, 1]$ .

Finalmente, cabe ressaltar que a qualidade do resultado obtido é função da aproximação considerada, sendo que um aumento excessivo do grau da mesma não, necessariamente, implica na melhora da qualidade da solução obtida. Além disso, esse aumento pode ocasionar um comportamento oscilatório nas proximidades de regiões onde a solução não experimenta variações pronunciadas (VILLADSEN; MICHELSEN, 1978).

No próximo capítulo é apresentada a metodologia proposta para a integração de equações diferenciais ordinárias fracionárias via extensão do Método da Colocação Ortogonal, bem como as abordagens para o tratamento do problema de controle ótimo fracionário considerando o contexto mono e multi-objetivo.

## 4 METODOLOGIA

Nesta sessão são apresentadas as metodologias propostas para: *i*) a extensão do Método da Colocação Ortogonal (MCO) para o contexto fracionário; *ii*) a extensão do Código OTIMA para o contexto fracionário; e *iii*) o desenvolvimento de um algoritmo de otimização multi-objetivo baseado no algoritmo de Busca Fractal Estocástico (BFE).

### 4.1 EXTENSÃO DO MCO PARA O CONTEXTO FRACIONÁRIO

Conforme descrito anteriormente, objetiva-se nesta tese resolver PCOF. Neste caso, faz-se necessário integrar um modelo diferencial fracionário presente nas restrições do PCOF. Para esta finalidade, o MCO, proposto originalmente para a resolução de problemas diferenciais de ordem inteira (ver a seção 3.7), é estendido para o contexto fracionário. Neste cenário, a partir da definição da derivada fracionária, a mesma é utilizada na etapa de avaliação do modelo diferencial fracionário analisado. Como utiliza-se o Polinômio de Lagrange durante a formulação do MCO, as derivadas fracionárias devem ser avaliadas para uma função polinomial.

Com esta modificação no MCO original, os passos para a integração de um modelo diferencial fracionário são apresentados a seguir:

1. Definir os parâmetros de entrada: domínio do problema, condição inicial, função peso (depende do tipo de polinômio), número de pontos de colocação (NPC), tipo de aproximação para a derivada fracionária;
2. Obter o polinômio ortogonal;
3. Calcular as raízes do polinômio ortogonal (NPC);
4. Definir a aproximação via polinômio de Lagrange;
5. Substituir, no polinômio de Lagrange, as derivadas fracionárias e, conseqüentemente, no modelo a ser resolvido;
6. Determinar as equações resíduo (estas são atendidas nos pontos de colocação);
7. Resolver o sistema de equações resultantes (o tipo de sistema - linear ou não linear - depende das características do modelo original);
8. Verificar se a solução obtida não é modificada com o aumento do grau da aproximação.

Conforme destacado anteriormente, nesta tese será utilizada a Derivada Fracionária de Caputo devido para a extensão do MCO.

## 4.2 EXTENSÃO DO CÓDIGO OTIMA PARA O CONTEXTO FRACIONÁRIO

Conforme já descrito na Seção 3.5.1, as condições de otimalidade para o contexto fracionário foram apresentadas. Em resumo, estas são descritas pelas seguintes equações:

$$M\dot{x}(t) + N {}_a^C D_t^\alpha x(t) = \frac{\partial H(t, x(t), u(t), \lambda(t))}{\partial \lambda}, \quad x(0) = x_a \quad (4.1a)$$

$$M\dot{\lambda}(t) + N {}_t D_T^\alpha \lambda(t) = \frac{\partial H(t, x(t), u(t), \lambda(t))}{\partial x}, \quad \lambda(T) = 0 \quad (4.1b)$$

$$\frac{\partial H(t, x(t), u(t), \lambda(t))}{\partial u} = 0 \quad (4.1c)$$

Dessa forma, pode-se observar no equacionamento acima, a obtenção do modelo algébrico-diferencial fracionário de valor no contorno pode-se tornar uma tarefa chata e tediosa, visto que o PCOF pode ser completo e/ou com grande dimensão. Para o contexto inteiro já existe o código OTIMA e suas variantes para a geração das equações de otimalidade (GOMES, 2000; LOBATO, 2004; PFEIFER, 2007). Nesta tese é proposta a extensão do referido código para o contexto fracionário também considerando a linguagem de programação Maple<sup>®</sup>, escolhido por sua grande habilidade de lidar com computação simbólica.

Para a geração das equações de otimalidade no contexto fracionário faz-se necessário a entrada das matrizes  $M$  e  $N$ , da ordem fracionária  $\alpha$ , do vetor  $G$  (lado direito do modelo diferencial original), das suas respectivas condições iniciais e do escalar  $F$ . Com a entrada destas informações, o código OTIMA atualizado para o contexto fracionário gera as condições de otimalidade. Assim, o modelo algébrico-diferencial fracionário de valor no contorno pode ser resolvido pela metodologia proposta, a saber, a extensão do MCO para o contexto fracionário.

Finalmente, cabe ressaltar que, se a matriz  $N$  for composta por elementos nulos, o resultado obtido por esta nova versão do OTIMA se reduz ao resultado obtido pela versão desenvolvida por Gomes (2000), Lobato (2004) e Pfeifer (2007).

## 4.3 ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO MULTI-OBJETIVO BASEADO NA BUSCA FRACTAL ESTOCÁSTICA

Devido aos bons resultados obtidos pelo algoritmo de BFE para o contexto mono-objetivo, a presente seção tem por objetivo apresentar a extensão do mesmo para o contexto multi-objetivo. A estratégia proposta é denominada de Algoritmo de Otimização Multi-objetivo Baseado na



Busca Fractal Estocástica, no inglês *Multi-Objective Optimization Stochastic Fractal Search* (MOSFS), e apresenta como base fundamental o algoritmo de BFE associado aos operadores de ordenamento por *rank* que faz uso do critério de dominância de Pareto (PARETO, 1896) e de truncamento das soluções não dominadas denominado de distância da multidão (do inglês *crowding distace*) (DEB, 2011).

O fluxograma do algoritmo MOSFS é apresentado na Figura 5 e suas etapas básicas são descritas a seguir:

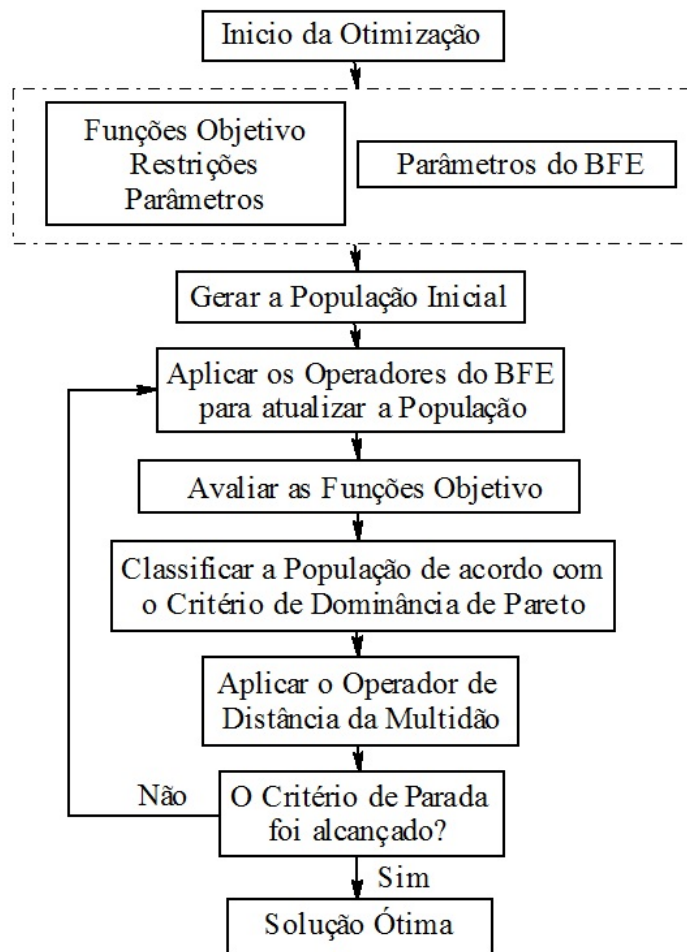


Figura 5 – Fluxograma do algoritmo *Multi-Objective Optimization Stochastic Fractal Search*.

- Inicialmente, uma população com  $NP$  indivíduos é gerada (aleatoriamente considerando o espaço de projeto definido pelo usuário).
- Em seguida aplicam-se os operadores do algoritmo de BFE descritos na seção 3.6.2.2.
- Após ter sido gerada uma população com candidatos em potencial, esta é agrupada com a população corrente formando assim a população  $P_1$  de tamanho  $2NP$ .
- $P_1$  é então classificada segundo o critério de dominância. Este consiste na organização dos indivíduos da população em fronteiras que refletem sua importância no processo evolutivo

da seguinte maneira: inicialmente, via aplicação do critério de dominância, a população é classificada e tomada como Rank 1. Esses indivíduos de Rank 1 são retirados da população. A população restante é novamente classificada segundo esse critério de dominância, sendo que essa população assume Rank 2. Esses indivíduos são retirados da população atual e novamente é realizada a classificação dos indivíduos que restaram. Tal procedimento é repetido até que todos os indivíduos da população sejam classificados.

- Classificada a população, apenas  $NP$  indivíduos farão parte da população ao final da geração corrente. Para reduzir o tamanho da população é empregado o operador de distância da multidão. Este é responsável pela eliminação das soluções que estão muito próximas via cálculo da distância Euclidiana referente ao vetor de objetivos. Cabe ressaltar que esta redução é fundamental para evitar que o número de pontos pertencentes à solução do problema aumente muito, o que na prática implica no incremento do tempo de processamento requerido para resolver os problemas. Além disso, também se ressalta que ao eliminar pontos da curva que são muito próximos, prioriza-se obter uma solução com pontos bem distribuídos no domínio dos objetivos.
- O processo continua até que um determinado critério de parada seja satisfeito. Para esta finalidade considera-se como critério de parada o número máximo de gerações.

No próximo capítulo são apresentadas aplicações para validar a metodologia descrita. Neste caso destacam-se estudos de caso fracionários nas áreas de simulação, problemas inversos, problemas algébrico-diferenciais de valor no contorno e PCOF nos contextos mono e multi-objetivos.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Como destacado anteriormente, o principal objetivo desta tese é resolver PCOFs via extensão do Método da Colocação Ortogonal para o contexto fracionário, verificar a influência da ordem fracionária nos perfis obtidos, bem como avaliar outros tipos de aplicações que exigem a integração de um modelo fracionário. Para esta finalidade também são analisados problemas de simulação, um problema inverso e problemas de controle ótimo via aplicação da abordagem indireta. A Figura 6 apresenta os tipos de problemas avaliados nesta tese, com destaque para os PCOFs aplicando a abordagem direta.

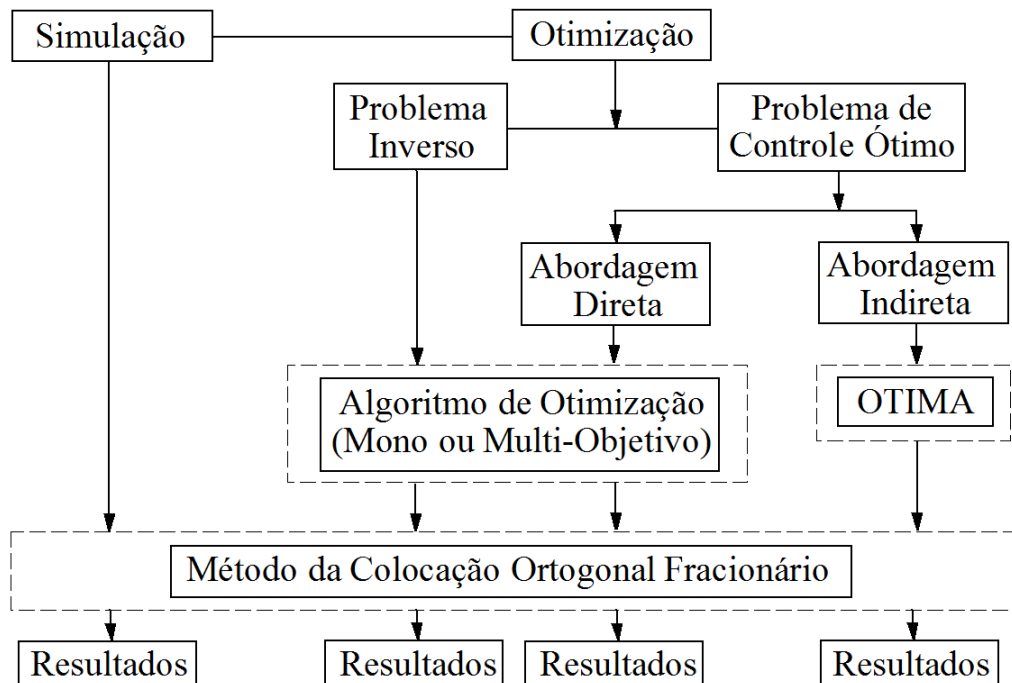


Figura 6 – Consolidado dos problemas avaliados nesta tese.

Nesta figura observa-se que em comum a todos os tipos de aplicações tem-se o Método da Colocação Ortogonal no contexto fracionário, metodologia empregada para a simulação do modelo fracionário em todos os tipos de estudos de caso.

Para o bom entendimento de cada uma das aplicações que serão apresentadas, a seguir são destacados alguns pontos:

- Para os problemas de simulação considerando o MCOF foram avaliados o número de pontos de colocação (NPC) e a ordem fracionária ( $\alpha$ ). Para a resolução do modelo final (linear ou não linear) consideram-se os métodos de Gauss-Siedel e Newton. Em cada um destes foram utilizadas estimativas iniciais iguais a unidade e como critério de parada o

somatório dos módulos referentes ao erro absoluto de cada vetor de variáveis, em duas iterações consecutivas, menor do que  $10^{-8}$ .

- Para avaliar a influência da ordem fracionária nos perfis obtidos foi considerada a simulação do processo de fermentação da lacase, bem como a formulação de um problema inverso para a obtenção do valor ótimo para a ordem fracionária considerando pontos experimentais reais.
- Para aplicar a abordagem indireta, o PCOF original é convertido em um diferencial de valor no contorno fracionário, conforme apresentado no capítulo 4. Neste caso, o modelo de valor no contorno é resolvido usando o MCO no contexto fracionário via aplicação do Método de Newton (abordagem empregada para a integração do sistema de equações não lineares resultante da aplicação da metodologia proposta). Para a aplicação deste algoritmo iterativo foi considerado que todas as estimativas iniciais são iguais a unidade para ambas as variáveis de estado e controle, e como critério de parada o somatório dos módulos referentes ao erro absoluto de cada vetor de variáveis, em duas iterações consecutivas, menor do que  $10^{-8}$ .
- Para resolver estudos de caso usando a abordagem direta no contexto mono-objetivo foi considerada a associação entre o MCO no contexto fracionário e o algoritmo de Evolução Diferencial (ED) (STORN; PRICE, 1995). Já para a avaliação de estudos de caso no contexto multi-objetivo foi considerada a associação entre o MCO no contexto fracionário e o algoritmo *Multi-objective Optimization Stochastic Fractal Search* (MOSFS), proposto nesta tese (ver o capítulo 4).
- Para modelos diferenciais com ordem fracionária superior a uma unidade, uma nova condição inicial é necessária para a integração dos mesmos. Para essa finalidade, em todas as aplicações em que  $1 < \alpha \leq 2$  a seguinte condição (adicional) foi empregada:

$$\left. \frac{dX}{dy} \right|_{y=0} = 0 \quad (5.1)$$

onde  $X$  e  $y$  representam as variáveis dependentes e independentes, respectivamente. Cabe ressaltar que esta nova condição pode ser definida visto que as condições iniciais adotadas nos problemas são valores constantes.

- Para corrigir a dimensão do operador diferencial em cada modelo (dimensional) estudado será utilizada a estratégia proposta por Gómez-Aguilar et al. (2012), em que um fator de correção é utilizado para garantir a homogeneidade dimensional, conforme apresentado na seção 3.4.6 e descrito a seguir:

$$\frac{d}{dy} \rightarrow \frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{d^\alpha}{dy^\alpha} \quad (5.2a)$$

$$\frac{d^2}{dy^2} \rightarrow \frac{1}{\sigma^{2(1-\alpha)}} \frac{d^{2\alpha}}{dy^{2\alpha}} \quad (5.2b)$$

onde  $y$  é a variável independente e  $\sigma$  é o parâmetro auxiliar, que tem a mesma dimensão da variável independente. Cabe ressaltar que para  $\alpha$  igual a 1, esses operadores fracionários se tornam operadores com ordem inteira. Enfatiza-se que esta correção deve ser realizada em modelos físicos, i.e.; em problemas cujas equações representam balanços de massa, energia e quantidade de movimento. A única exceção é o problema da fermentação da lacase em que, para garantir a consistência dimensional do modelo fracionário, alguns parâmetros foram corrigidos em função de  $\alpha$ .

- Para avaliar a sensibilidade dos perfis obtidos em cada uma das aplicações em relação à ordem fracionária, definiu-se uma faixa para este parâmetro de forma que este represente uma perturbação em relação ao modelo com ordem inteira. Na prática, a faixa de  $\alpha$  foi definida de forma que, por exemplo, um modelo que é naturalmente modelado por uma derivada primeira, não seja representado por uma derivada segunda, e vice versa.
- Nas aplicações considerando a abordagem direta faz-se necessário definir o número de elementos de controle, bem como o tipo de estratégia que será empregada (constante, linear, cúbica, entre outras). Como os problemas fracionários abordados nesta tese não, necessariamente, apresentam solução (analítica ou numérica) conhecida, foi adotada a seguinte estratégia: para o problema com ordem fracionária igual a uma unidade a solução ótima é conhecida. Assim, inicialmente, foram testados diferentes números de elementos de controle para  $\alpha$  igual a 1 até que fosse encontrada uma boa concordância entre o valor obtido pela metodologia proposta e a reportada pela literatura. Após esta análise, fixou-se o número de elementos de controle e variou-se apenas a ordem fracionária para fins da avaliação deste parâmetro nos perfis obtidos. Neste caso, a partir das características dos estudos de caso abordados nesta tese, foram adotadas estratégias de controle constantes por partes (cada elemento de controle é constante), apesar de outras estratégias poderem ser empregadas, como por exemplo, as lineares e as cúbicas.
- Para mensurar o Tempo de Processamento (TP) em cada uma das aplicações foi considerado um microcomputador Desktop Intel Core i7-4770 com 8GB de memória, Ssd 240gb e sistema operacional Windows.
- Para avaliar aplicações em que a variável independente é maior do que a unidade, realiza-se uma mudança de variável de forma que o domínio de interesse seja igual a unidade.

## 5.1 INFLUÊNCIA DO TIPO DE DERIVADA FRACIONÁRIA

A primeira análise deste capítulo consiste em verificar a influência do tipo de derivada fracionária. Como o MCO faz uso de um polinômio ortogonal para aproximar os perfis de

controle e estado, a influência do tipo de derivada fracionária será realizada considerando a seguinte equação:

$$\frac{d^\alpha x^2}{dx^\alpha} \quad (5.3)$$

em que  $\alpha$  é a ordem da derivada fracionária e  $x$  é a variável independente.

Conforme a definição proposta por S. F. Lacroix (OLDHAM; SPANIER, 1974), a derivada de uma função polinomial genérica  $x^m$  (onde  $m$  é o grau do polinômio) é dada como:

$$\frac{d^\alpha x^m}{dx^\alpha} = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m-\alpha+1)} x^{m-\alpha} \quad (5.4)$$

em que  $\Gamma$  é a função Gamma.

Para fins de aplicação serão considerados diferentes valores para  $\alpha$  [1/4 1/2 3/4] e um polinômio de segundo grau ( $m$  igual a 2). Neste caso, aplicando a definição acima, as derivadas fracionárias para cada um dos valores de  $\alpha$  considerados no domínio [0 1] são iguais, respectivamente, à:

$$\frac{d^{1/4}(x^2)}{dx^{1/4}} = 1,243503x^{7/4} \quad (5.5a)$$

$$\frac{d^{1/2}(x^2)}{dx^{1/2}} = 1,504505x^{3/2} \quad (5.5b)$$

$$\frac{d^{3/4}(x^2)}{dx^{3/4}} = 1,765220x^{5/4} \quad (5.5c)$$

A Figura 7 apresenta os perfis obtidos considerando as derivadas definidas por Lacroix, Caputo, Riemann-Liouville, Grünwald-Letnikov e Chen, respectivamente. De forma geral, nota-se nesta figura que, para a função polinomial considerada, não foram observadas diferenças significativas no que tange o tipo de aproximação de derivada fracionária considerada. Este resultado será utilizado como guia para a definição do tipo de derivada empregada para a resolução de uma EDOF e, conseqüentemente, para a resolução de PCOFs.

Neste caso, para todas as aplicações que seguem será utilizada a derivada de Caputo. A escolha por este operador se deve ao fato desta derivada permitir o uso de condições iniciais usuais, i.e.; não é necessário nenhum tipo de tratamento para problemas com condições iniciais definidas em termos de derivadas, diferentemente do que acontece para outras derivadas, como por exemplo para a definição de derivada fracionária de Riemann-Liouville (CAMARGO; OLIVEIRA, 2015; SANTOS, 2018).

## 5.2 SIMULAÇÃO DE EDOFs MATEMÁTICAS

Para avaliar a metodologia proposta em Equações Diferenciais Ordinárias Fracionárias (EDOFs) de valor inicial, considere a seguinte equação fracionária:

$$\frac{d^\alpha y}{dt^\alpha} = f(t,y), \quad y(0) = y_0 \quad (5.6)$$

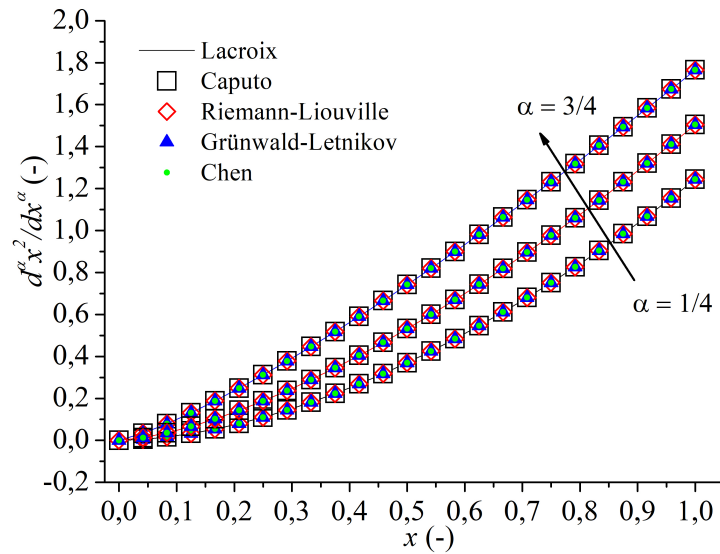


Figura 7 – Influência do tipo de derivada fracionária na diferenciação de uma função polinomial do segundo grau.

em que  $t$  e  $y$  representam os termos independentes e dependentes, respectivamente,  $\alpha$  é a ordem fracionária,  $f$  é uma função genérica que depende de ambas as variáveis e  $y_0$  é a condição inicial.

Neste caso, são considerados os seguintes estudos de caso (EC):

- EC1:  $\alpha = 0,98$  e  $y_0 = 0,4836488$  (JAFARI; TAJADODI; BALEANU, 2013):

$$f(t,y) = 2y(t) - y(t)^2 + 1 \quad (5.7)$$

cuja solução (aproximada) apresentada pelo autor é:

$$y(t) = 0,785674t^4 - 2,356597t^3 + 1,548207t^2 + 1,616525t + 0,483648 \quad (5.8)$$

- EC2:  $\alpha = 0,5$  e  $y_0 = 0$  (GHOMANJANI, 2016):

$$f(t,y) = \frac{2t^{1,5}}{\Gamma(2,5)} - y(t) + t^2 \quad (5.9)$$

cuja solução (analítica) é:

$$y(t) = t^2 \quad (5.10)$$

- EC3:  $\alpha = 0,9999$  e  $y_0 = 1$  (JAFARI; TAJADODI; BALEANU, 2013):

$$T_a = -0,98 \quad (5.11a)$$

$$f(t,y) = -y(t) + (1 + \sqrt{2}T_a) \cosh(\sqrt{2}t) + (\sqrt{2} + T_a)(\sinh(\sqrt{2}t)) \quad (5.11b)$$

cuja solução (analítica) é:

$$y(t) = \cosh(\sqrt{2}t) - T_a \sinh(\sqrt{2}t) \quad (5.12)$$

Como descrito anteriormente, para resolver cada estudo de caso considera-se a aproximação de derivada fracionária do tipo Caputo no MCO. Com a aplicação desta abordagem obtêm-se, para cada um dos estudos de caso, um sistema de equações algébricas (sendo linear para o EC2 e não lineares para EC1 e EC3) cuja dimensão é função do número de pontos de colocação (NPC) considerados.

A Tabela 1 apresenta a influência do NPC no valor do somatório do módulo do erro absoluto ( $\Theta$ ) e o tempo de processamento requerido para esta finalidade. Para calcular os erros consideram-se 100 pontos igualmente espaçados no domínio de interesse. Nesta tabela percebe-se que a metodologia proposta foi capaz de encontrar boas estimativas para os perfis em cada um dos estudos de caso avaliados. Além disso, conforme esperado, quanto maior o valor do NPC, maior é a ordem do polinômio considerado e, conseqüentemente, menor é o erro cometido. Também se destaca que o tempo de processamento aumenta com o aumento do NPC, visto que quanto maior a dimensão do sistema resultante da aplicação do MCO, maior é o tempo de processamento necessário para a resolução do mesmo.

Tabela 1 – Influência do NPC na qualidade e no tempo de processamento da solução obtida considerando a metodologia proposta em EDOFs.

| NPC | EC1                    |        | EC2                    |        | EC3                    |        |
|-----|------------------------|--------|------------------------|--------|------------------------|--------|
|     | $\Theta$               | TP (s) | $\Theta$               | TP (s) | $\Theta$               | TP (s) |
| 2   | $6,30 \times 10^{-3}$  | 1,4    | $2,43 \times 10^{-13}$ | 1,3    | $4,13 \times 10^{-5}$  | 1,3    |
| 3   | $4,35 \times 10^{-13}$ | 1,6    | $8,57 \times 10^{-14}$ | 1,7    | $1,34 \times 10^{-14}$ | 1,5    |
| 4   | $9,58 \times 10^{-16}$ | 1,8    | $3,59 \times 10^{-17}$ | 2,1    | $7,52 \times 10^{-16}$ | 1,9    |
| 5   | $2,55 \times 10^{-18}$ | 2,2    | $6,77 \times 10^{-18}$ | 2,5    | $8,98 \times 10^{-19}$ | 2,3    |

### 5.3 SIMULAÇÃO DO SISTEMA MASSA-MOLA-AMORTECEDOR

Considere o sistema mola-massa-amortecedor com um grau de liberdade, conforme a Figura 8.

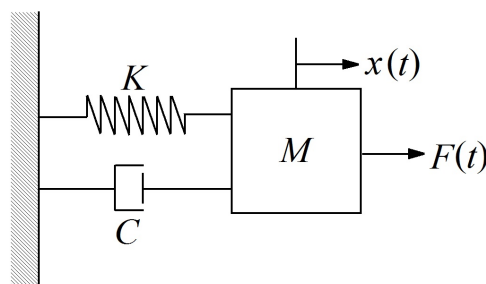


Figura 8 – Representação esquemática de um sistema massa-mola-amortecedor (GÓMEZ-AGUILAR et al., 2015).



Do ponto de vista físico, este sistema pode ser usado para representar o modelo de amortecimento viscoelástico dependente da frequência de um determinado material (SHOKOOH; SUÁREZ, 1999). Matematicamente, este sistema mecânico pode ser representado no contexto fracionário pela seguinte equação diferencial:

$$MD^{2\alpha}x(t) + CD^{\alpha}x(t) + Kx(t) = F(t), \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (5.13)$$

onde  $t$  é o tempo (s),  $M$ ,  $C$  e  $K$  representam a massa (Kg), o coeficiente de amortecimento (Ns/m) e a rigidez (N/m), respectivamente.  $F(t)$  é a força externa aplicada (N) e  $D^{\alpha}x(t)$  ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ) é o operador fracionário em relação ao deslocamento  $x(t)$ .

Para que o modelo fracionário massa-mola-amortecedor seja dimensionalmente consistente, os operadores diferenciais ( $D/Dt$  e  $D/Dt^{\alpha}$ ) e ( $D/Dt^2$  e  $D/Dt^{2\alpha}$ ) devem possuir as mesmas unidades. Neste caso, para corrigir as unidades do modelo físico será considerado o fator de correção descrito na seção 3.4.6. A aplicação deste fator resulta no seguinte modelo fracionário:

$$\frac{M}{\sigma^{2(1-\alpha)}}D^{2\alpha}x(t) + \frac{C}{\sigma^{(1-\alpha)}}D^{\alpha}x(t) + Kx(t) = F(t), \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (5.14)$$

em que  $\sigma$  é o parâmetro responsável por corrigir a unidade.

A inserção deste parâmetro garante a consistência dimensional do modelo físico. É importante ressaltar que, para que este parâmetro não interfira nos perfis simulados, o mesmo pode ser considerado como sendo igual a unidade. Em resumo, este fator corrige o modelo em termos de dimensão sem interferir no valor dos perfis simulados.

Para avaliar a qualidade da solução obtida pelo Método da Colocação Ortogonal (MCO) no contexto fracionário, soluções analíticas e numéricas para casos particulares são estudadas. É importante enfatizar que a solução analítica foi obtida considerando a definição da função de Mittag-Leffler, conforme demonstrado por Gómez-Aguilar et al. (2015). Já para a solução numérica é usado o Método Preditor-Corretor (MPC) do tipo Adams-Bashforth-Moulton (DIETHELM; FREED, 1998). Neste caso, para cada configuração de simulações numéricas, os erros absolutos com relação as soluções analíticas foram determinados considerando 100 pontos igualmente espaçados.

### 5.3.1 PRIMEIRO CASO

Este primeiro caso considera um sistema massa-mola (o coeficiente de amortecimento é igual a zero) com uma fonte constante  $F(t) = f_0$  e duas condições iniciais:  $x(0) = x_0$  ( $x_0 > 0$ ) e  $dx/dt(0) = 0$ . Neste caso, o modelo original (ver Eq. (5.14)) é dado como:

$$D^{2\alpha}x(t) = \frac{\eta^2}{K}f_0 - \eta^2x(t) \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (5.15)$$

onde  $\eta^2$  é a frequência angular fracionária definida como:

$$\eta^2 = \frac{K\sigma^{2(1-\alpha)}}{M} \quad (5.16)$$

Conforme apresentado por [Gómez-Aguilar et al. \(2015\)](#), a solução analítica para este modelo é dado por:

$$x(t) = (x_o - f_o/K)E_{2\alpha}(-\eta^2 t^{2\alpha}) + f_o/K \quad (5.17)$$

em que  $E_{2\alpha}$  é a função de Mittag–Leffler.

A Tabela 2 apresenta os erros absolutos e o tempo de processamento (valor médio em relação as ordens fracionárias consideradas) para o MCO e o Método Preditor-Corretor (MPC) considerando o sistema massa-mola com uma fonte constante. Para este propósito, os seguintes parâmetros são usados:  $x_o = 1$  m,  $\eta^2 = 1$  (Nms<sup>2(1- $\alpha$ )</sup>)/Kg,  $f_o = 0,5$  N,  $K = 1$  Nm e tempo final igual a 15 s.

Tabela 2 – Erros absolutos e tempo de processamento considerando o MCO e o MPC para o sistema massa-mola com fonte constante.

|                       | $\alpha = 1$ | $\alpha = 0,95$ | $\alpha = 0,90$ | $\alpha = 0,85$ | TP (s) |
|-----------------------|--------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------|
| MCO (NPC = 5)         | 1,23E-05     | 1,45E-05        | 1,24E-06        | 2,88E-06        | 2,2    |
| MCO (NPC = 6)         | 2,13E-06     | 7,35E-06        | 6,78E-07        | 1,78E-07        | 3,8    |
| MCO (NPC = 7)         | 4,39E-08     | 2,89E-08        | 6,35E-08        | 6,79E-08        | 5,1    |
| MCO (NPC = 8)         | 6,43E-10     | 4,55E-10        | 2,33E-10        | 4,56E-10        | 6,9    |
| MCO (NPC = 9)         | 8,66E-11     | 8,89E-11        | 2,66E-11        | 6,66E-11        | 8,6    |
| MCO (NPC = 10)        | 6,34E-12     | 2,45E-12        | 3,45E-12        | 7,65E-12        | 10,5   |
| MPC ( $h = 10^{-4}$ ) | 1,46E-10     | 2,61E-10        | 1,11E-10        | 2,56E-10        | 10,7   |

$h$  é o tamanho do passo de integração.

Na Tabela 2 observa-se que a metodologia proposta, independentemente da ordem fracionária, foi capaz de obter bons resultados em comparação com a solução analítica, onde foram observados erros inferiores a  $10^{-5}$ . Em relação ao MPC observa-se que o MCO obteve um resultado equivalente para NPC maior do que 7. Em termos do tempo de processamento verifica-se que a metodologia proposta sempre requereu um menor custo computacional. Este menor TP se deve à dimensão do sistema final resolvido pelo MCO no contexto fracionário. Na prática, o NPC significa a dimensão do sistema algébrico a ser resolvido. Assim, NPC igual a 5, por exemplo, implica num sistema com 5 equações algébricas, o que representa um sistema com uma dimensão muito menor em comparação com o MPC.

A Figura 9 apresenta o deslocamento considerando o MCO para diferentes ordens fracionárias e NPC igual a 10 para o sistema massa-mola com uma fonte constante. Nesta figura observa-se a qualidade da metodologia proposta em comparação com a solução analítica. Fisicamente, para  $\alpha$  igual a 1, a resposta é oscilatória com amplitude constante, o que está de acordo com o esperado para este tipo de aplicação. Com a redução do valor da ordem fracionária observa-se um comportamento oscilatório com redução da amplitude ao longo do tempo. Matematicamente, a redução de  $\alpha$  implica na transformação de uma equação diferencial de ordem dois para uma ordem menor do que dois, causando a redução da amplitude com o tempo.

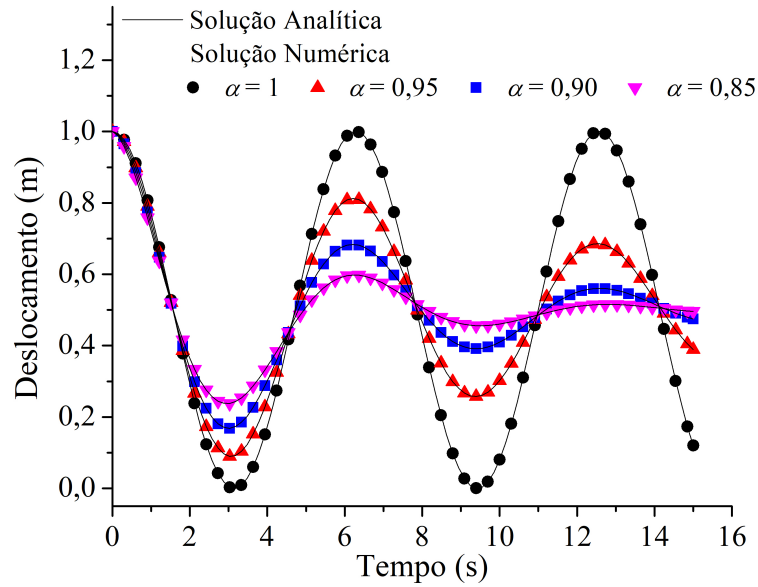


Figura 9 – Sistema massa-mola com uma fonte constante.

É importante ressaltar que, a redução ou aumento da ordem fracionária deve ser avaliada de forma que um comportamento fisicamente inviável (para as características do estudo em questão) não seja obtido, i.e.; para uma dada aplicação o valor da ordem não pode resultar em um perfil incoerente, o que desconfiguraria o estudo de caso. Assim, os valores da ordem considerados nesta aplicação permitem avaliar um comportamento oscilatório com amplitude constante e com redução de amplitude.

### 5.3.2 SEGUNDO CASO

O segundo caso também considera um sistema massa-mola, todavia com uma fonte periódica  $F(t) = f_o \cos(wt)$ , onde  $w$  é a frequência e as seguintes condições iniciais:  $x(0) = x_o$  ( $x_o > 0$ ) e  $dx/dt(0) = 0$ . Neste caso, matematicamente tem-se:

$$D^{2\alpha}x(t) = \frac{\eta^2}{K}f_o \cos(wt) - \eta^2x(t), \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (5.18)$$

onde  $\eta^2$  é dado pela Eq. (5.16). A solução analítica desta equação é dada como segue (GÓMEZ-AGUILAR et al., 2015):

$$x(t) = x_o E_{2\alpha}(-\eta^2 t^{2\alpha}) - \frac{f_o}{K} \int_0^t \cos(w(t-u)) E_{2\alpha}(-\eta^2 u^{2\alpha}) du \quad (5.19)$$

onde  $E_{2\alpha}$  é a função de Mittag-Leffler.

A Tabela 3 apresenta os resultados obtidos (erro absoluto e o tempo de processamento (valor médio em relação aos valores de ordem fracionária empregados)) para o MCO e o MPC

considerando:  $x_o = 1$  m,  $\eta^2 = 1$  (Nms<sup>2(1- $\alpha$ )</sup>) / Kg,  $f_o = 0,05 \cos(t)$  N,  $K = 1$  Nm, e tempo final igual a 15 s.

Tabela 3 – Erros absolutos e tempo de processamento considerando o MCO e o MPC para o sistema massa-mola com uma fonte periódica.

|                       | $\alpha = 1$ | $\alpha = 0,95$ | $\alpha = 0,90$ | $\alpha = 0,85$ | TP (s) |
|-----------------------|--------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------|
| MCO (NPC = 5)         | 4,34E-04     | 6,76E-04        | 7,77E-04        | 7,55E-04        | 2,5    |
| MCO (NPC = 6)         | 1,21E-06     | 4,57E-06        | 1,82E-06        | 3,08E-06        | 4,2    |
| MCO (NPC = 7)         | 2,22E-08     | 2,91E-07        | 2,78E-07        | 8,77E-07        | 5,8    |
| MCO (NPC = 8)         | 3,34E-09     | 3,34E-09        | 3,54E-09        | 6,77E-09        | 7,3    |
| MCO (NPC = 9)         | 4,55E-10     | 5,55E-11        | 3,43E-10        | 3,43E-10        | 8,7    |
| MCO (NPC = 10)        | 2,11E-13     | 1,51E-13        | 3,11E-13        | 4,44E-13        | 11,9   |
| MPC ( $h = 10^{-4}$ ) | 1,46E-10     | 2,34E-10        | 5,63E-10        | 1,33E-10        | 12,8   |

$h$  é o tamanho do passo de integração.

Conforme observado para o primeiro caso, neste também foram obtidas boas estimativas considerando a metodologia proposta, independentemente do valor da ordem fracionária, visto os valores dos erros absolutos. Além disso, se o NPC aumenta o erro absoluto diminui, como esperado. Em relação ao MPC é possível observar que, para NPC maior do que 8 os erros têm, no mínimo, a mesma ordem de grandeza das observadas para o MCO. Em relação ao tempo de processamento, o aumento do NPC implica em um incremento no valor do TP, oriundo do aumento do número de equações algébricas que devem ser resolvidas. Além disso, para todos os NPC considerados, o MCO sempre resultou em um menor valor em relação ao MPC.

A Figura 10 apresenta os perfis de deslocamento considerando o MCO para diferentes ordens fracionárias e NPC igual a 10 para o sistema massa-mola com uma fonte periódica. Nesta figura observa-se a qualidade da solução obtida pelo MCO em relação à solução analítica. Fisicamente, para  $\alpha$  igual a 1 a resposta é oscilatória com amplitude constante, como esperado para este tipo de sistema. Como a redução do valor da ordem fracionária observa-se um comportamento oscilatório com redução da amplitude ao longo do tempo, conforme o constatado para a primeira aplicação. Todavia, esta redução é mais suave do que o primeiro estudo de caso.

### 5.3.3 TERCEIRO CASO

Este caso considera um sistema com amortecimento em que a massa é negligenciada, uma fonte constante  $F(t) = f_o$  é aplicada e com condição inicial  $x(0) = x_o$  ( $x_o > 0$ ). Neste caso, o modelo original (ver Eq. (5.14)) é reduzido a uma equação diferencial fracionária com apenas um operador diferencial:

$$D^\alpha x(t) = \frac{\tau}{K} f_o - \tau x(t), \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (5.20)$$

onde o parâmetro  $\tau$  é definido como:

$$\tau = \frac{K \sigma^{1-\alpha}}{C} \quad (5.21)$$

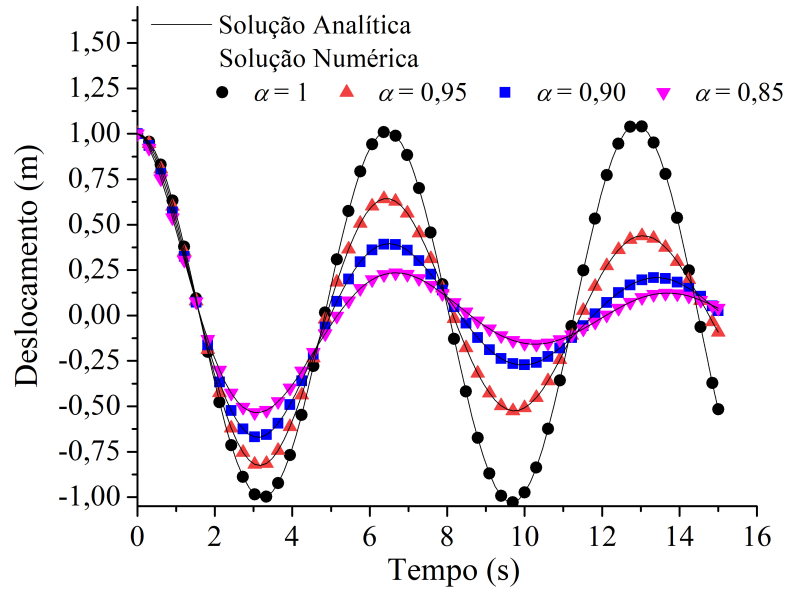


Figura 10 – Sistema massa-mola com uma fonte periódica.

Conforme destacado por [Gómez-Aguilar et al. \(2015\)](#), a solução analítica para esta aplicação é dada por:

$$x(t) = (x_o - f_o/K)E_\alpha(-\tau t^\alpha) + f_o/K \quad (5.22)$$

onde  $E_\alpha$  é a função Mittag-Leffler.

A Tabela 4 apresenta os erros absolutos e o tempo de processamento (valor médio) considerando o MCO com diferentes valores de NPC e de ordem fracionária, bem como os resultados obtidos pelo MPC para a terceira aplicação. Para esta finalidade os seguintes parâmetros são considerados:  $x_o = 1$  m,  $\tau = 1$  ( $\text{m}^2\text{s}^{-\alpha}$ ) / Kg,  $f_o = 0,5$  N,  $K = 1$  Nm e tempo final igual a 15 s.

Tabela 4 – Erros absolutos e tempo de processamento considerando o MCO e o MPC para o sistema mola-amortecedor com fonte constante.

|                       | $\alpha = 1$ | $\alpha = 0,95$ | $\alpha = 0,90$ | $\alpha = 0,85$ | TP (s) |
|-----------------------|--------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------|
| MCO (NPC = 5)         | 1,24E-08     | 3,44E-08        | 3,94E-08        | 9,76E-08        | 1,3    |
| MCO (NPC = 6)         | 3,21E-09     | 4,33E-09        | 6,24E-09        | 8,78E-09        | 2,6    |
| MCO (NPC = 7)         | 2,33E-09     | 1,23E-09        | 4,55E-09        | 2,54E-09        | 4,1    |
| MCO (NPC = 8)         | 2,22E-11     | 2,23E-11        | 1,44E-11        | 8,67E-11        | 6,2    |
| MCO (NPC = 9)         | 3,44E-12     | 5,66E-12        | 7,88E-12        | 8,99E-12        | 7,9    |
| MCO (NPC = 10)        | 8,67E-14     | 5,44E-14        | 2,13E-14        | 3,49E-14        | 9,1    |
| MPC ( $h = 10^{-4}$ ) | 5,56E-10     | 6,43E-10        | 7,58E-10        | 6,76E-10        | 11,4   |

$h$  é o tamanho do passo de integração.

Nesta tabela é possível observar boas estimativas para os perfis de deslocamento obtidos pelo MCO em relação às respectivas soluções analíticas, independentemente do valor da ordem

fracionária considerada. O erro absoluto para cada condição avaliada também diminui com o incremento do valor do NPC. Em comparação com os resultados apresentados considerando o MPC pode-se concluir que, para NPC maior do que 7, os erros computados pelo MCO são menores, devido à dimensão do sistema algébrico resolvido. Finalmente, em termos do tempo de processamento, a metodologia proposta sempre requereu menores valores do que o MPC. Já na Figura 11 são apresentados os perfis de deslocamento considerando o MCO para diferentes ordens fracionárias e NPC igual a 10 para um sistema com amortecimento com fonte constante.

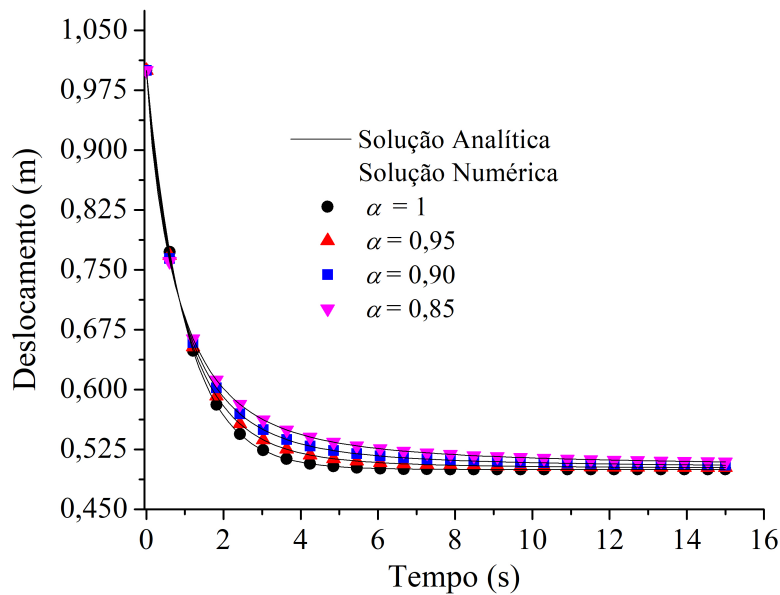


Figura 11 – Sistema amortecedor-mola com uma fonte constante.

Assim como nas aplicações anteriores, na Figura 11 observa-se uma boa concordância entre os resultados obtidos pelo MCO em relação às respectivas soluções analíticas. Além disso, para o sistema físico em análise observa-se um decréscimo da resposta ao longo do tempo devido à natureza do sistema mola-amortecedor composto por uma fonte constante. Com a redução da ordem fracionária observa-se valores mais elevados para o deslocamento e, conseqüentemente, um maior tempo para que o sistema se estabilize. Assim, para esta aplicação o valor da ordem não muda as características do perfil mas exige um maior tempo para que o estado estacionário seja encontrado.

#### 5.3.4 QUARTO CASO

Este caso considera um sistema com amortecimento com a presença de uma fonte periódica  $F(t) = f_o \cos(wt)$ , onde  $w$  é a frequência e a seguinte condição inicial:  $x(0) = x_o$  ( $x_o > 0$ ). Matematicamente, o modelo original dado pela Eq. (5.14) é reduzido a:

$$D^\alpha x(t) = \frac{\tau}{K} f_o \cos(wt) - \tau x(t), \quad 0 < \leq 1 \quad (5.23)$$

onde o parâmetro  $\tau$  é dado pela Eq. (5.21). Conforme apresentado por Gómez-Aguilar et al. (2015), a solução analítica para esta aplicação é dada como:

$$x(t) = x_0 E_\alpha(-\tau t^\alpha) - \frac{f_0}{K} \int_0^t \cos(w(t-u)) E_\alpha(-\tau u^\alpha) du \quad (5.24)$$

onde  $E_\alpha$  é a função de Mittag-Leffler.

A Tabela 5 apresenta os erros absolutos e o tempo de processamento (valor médio) considerando o MCO e o MPC para o sistema amortecedor com fonte periódica. Para esta finalidade são considerados os seguintes parâmetros:  $x_0 = 1$  m,  $\tau = 1$  ( $\text{m}^2\text{s}^{-\alpha}$ )/Kg,  $f_0 = 0,05 \cos(t)$  N,  $K = 1$  Nm e tempo final igual a 15 s.

Tabela 5 – Erros absolutos e tempo de processamento considerando o MCO e o MPC para o sistema mola-amortecedor com fonte periódica.

|                       | $\alpha = 1$ | $\alpha = 0,95$ | $\alpha = 0,90$ | $\alpha = 0,85$ | TP (s) |
|-----------------------|--------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------|
| MCO (NPC = 5)         | 8,99E-06     | 5,66E-06        | 5,87E-07        | 9,22E-07        | 1,9    |
| MCO (NPC = 6)         | 1,15E-08     | 3,32E-08        | 2,43E-08        | 4,45E-08        | 2,7    |
| MCO (NPC = 7)         | 1,11E-08     | 2,12E-09        | 1,31E-09        | 2,33E-09        | 4,3    |
| MCO (NPC = 8)         | 7,72E-10     | 7,32E-10        | 1,43E-10        | 2,44E-10        | 7,1    |
| MCO (NPC = 9)         | 8,89E-11     | 4,45E-11        | 3,44E-11        | 5,43E-11        | 8,1    |
| MCO (NPC = 10)        | 3,88E-11     | 8,22E-13        | 1,32E-13        | 2,34E-12        | 10,9   |
| MPC ( $h = 10^{-4}$ ) | 2,33E-11     | 1,38E-11        | 9,01E-11        | 7,68E-11        | 13,3   |

$h$  é o tamanho do passo de integração.

Na Tabela 5 é possível observar boas estimativas encontradas pelo MCO considerando diferentes valores de NPC e de ordens fracionárias em relação às respectivas soluções analíticas, haja visto os valores dos erros computados. Como destacado para as aplicações anteriores, quanto maior o valor do NPC menor é o erro e maior é o tempo de processamento. Para NPC maior do que 8 observa-se que os erros computados têm a mesma ordem de grandeza dos obtidos pelo MPC. Em termos de tempo de processamento, a metodologia proposta sempre foi mais eficiente do que o MPC.

A Figura 12 apresenta os perfis de deslocamento obtidos pelo MCO considerando diferentes valores para a ordem fracionária e NPC igual a 10 para o sistema mola-amortecedor com uma fonte periódica. Conforme observado nesta figura, os resultados obtidos pela metodologia proposta apresentam uma boa concordância em relação às respectivas soluções analíticas. Do ponto de vista físico, devido à existência de uma fonte periódica, observa-se um comportamento oscilatório ao longo do tempo, diferentemente do estudo de caso anterior onde era considerada uma fonte constante. Além disso, é importante observar, em relação a  $\alpha$  igual a unidade, um aumento no valor dos deslocamentos para menores valores da ordem fracionária.

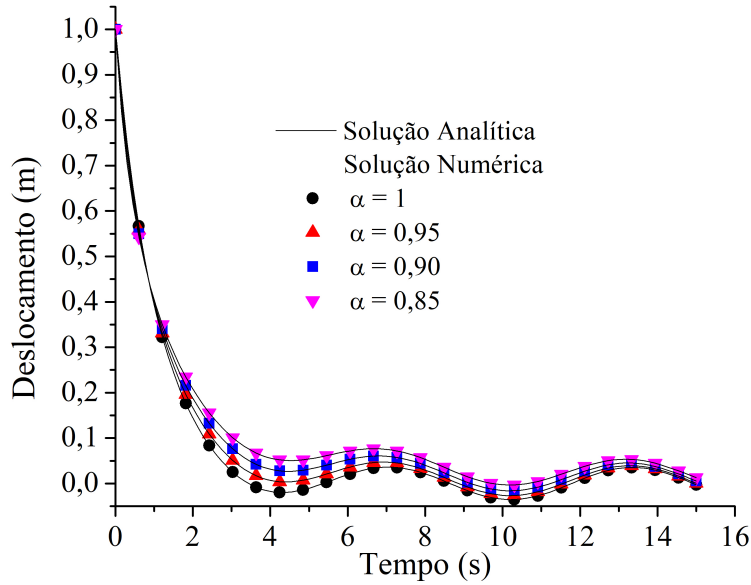


Figura 12 – Sistema amortecedor-mola com uma fonte periódica.

### 5.3.5 QUINTO CASO

Este último estudo de caso considera um sistema massa-mola-amortecedor sem aplicação de força, i.e.;  $F(t) = 0$ , bem como as seguintes condições iniciais:  $x(0) = x_0$  ( $x_0 > 0$ ) e  $dx/dt(0) = 0$ . Neste caso, o modelo original (ver Eq. (5.14)) é reduzido para:

$$D^{2\alpha}x(t) + \tau D^\alpha x(t) = -\eta^2 x(t) \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (5.25)$$

onde os parâmetros  $\eta$  e  $\tau$  são dados pelas Eqs. (5.16) e (5.21), respectivamente.

Como apresentado por [Gómez-Aguilar et al. \(2015\)](#), a solução analítica para este modelo é dada como segue:

$$x(t) = x_0 E_\alpha \left( -\frac{C}{2M} \sigma^{(1-\alpha)} t^\alpha \right) E_{2\alpha} \left( -\left[ \frac{K}{M} - \frac{C^2}{4M^2} \right] \sigma^{2(1-\alpha)} t^{2\alpha} \right) \quad (5.26)$$

onde  $E_\alpha$  é a função de Mittag-Leffler.

A Tabela 6 apresenta os erros absolutos e o tempo de processamento (valor médio) considerando diferentes valores de ordens fracionárias para o MCO e o MPC. Para esta finalidade os seguintes parâmetros são considerados:  $x_0 = 1$  m,  $M = 1$  Kg,  $K = 1$  Nm,  $C = 0,5$  Ns/m, e tempo final igual a 15 s. Os parâmetros  $\eta$  e  $\tau$  são calculados a partir das Eqs. (5.16) e (5.21), respectivamente. A partir dos resultados apresentados nesta tabela é possível concluir que o MCO foi capaz de obter boas estimativas, independentemente do valor da ordem fracionária, visto que os valores dos erros absolutos apresentados têm a mesma ordem de grandeza dos obtidos pelo MPC. Como observado para as aplicações anteriores, o aumento no valor do NPC



implica na redução dos erros e no incremento do tempo de processamento. Para valores de NPC maiores do que 7 observam-se erros com, no mínimo, a mesma magnitude daqueles reportados considerando o MPC.

Tabela 6 – Erros absolutos e tempo de processamento considerando o MCO e o MCP para o sistema massa-mola-amortecedor sem força externa.

|                       | $\alpha = 1$ | $\alpha = 0,95$ | $\alpha = 0,90$ | $\alpha = 0,85$ | TP (s) |
|-----------------------|--------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------|
| MCO (NPC = 5)         | 2,78E-07     | 2,11E-07        | 2,76E-07        | 3,43E-07        | 3,2    |
| MCO (NPC = 6)         | 3,45E-08     | 1,43E-08        | 9,30E-09        | 1,23E-09        | 5,6    |
| MCO (NPC = 7)         | 1,65E-08     | 5,24E-09        | 2,19E-09        | 1,03E-09        | 7,9    |
| MCO (NPC = 8)         | 3,45E-10     | 6,76E-10        | 6,76E-10        | 5,10E-10        | 8,7    |
| MCO (NPC = 9)         | 3,98E-11     | 3,58E-11        | 3,77E-11        | 5,10E-10        | 10,1   |
| MCO (NPC = 10)        | 2,91E-12     | 6,77E-13        | 5,67E-13        | 3,21E-12        | 11,2   |
| MPC ( $h = 10^{-4}$ ) | 8,47E-10     | 3,88E-10        | 1,67E-10        | 2,34E-10        | 15,5   |

$h$  é o tamanho do passo de integração.

A Figura 13 apresenta os perfis de deslocamento obtidos pelo MCO considerando diferentes valores para a ordem fracionária e NPC igual a 10. Nesta figura pode-se observar uma boa concordância entre os valores analíticos e computados usando a metodologia proposta. Além disso, como esperado, a resposta apresenta um comportamento oscilatório com amplitude decrescente ao longo do tempo devido à natureza do sistema massa-mola-amortecedor. Este comportamento decrescente é mais evidente à medida que o a ordem fracionária é reduzida.

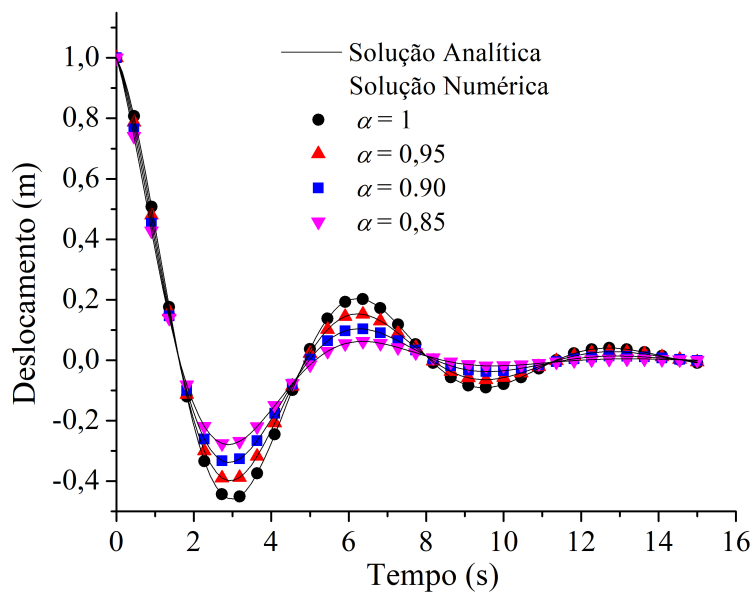


Figura 13 – Sistema massa-mola-amortecedor sem força externa.

Até o presente momento foram apresentados resultados que demonstraram a qualidade do MCO no contexto fracionário em relação às soluções analíticas e numéricas. Nas aplicações

de engenharia foi possível constatar que, a depender do valor da ordem fracionária, os perfis podem apresentar características distintas daqueles observados para o sistema tradicional com ordem inteira. Isto implica que a ordem fracionária é um parâmetro de grande importância, visto que uma mudança no seu valor pode ressaltar uma característica particular ou até mesmo desconfigurar completamente o sistema em análise.

## 5.4 PROCESSO DE FERMENTAÇÃO DA LACASE

Para avaliar a qualidade da solução obtida pela metodologia proposta em um problema inverso considere a determinação de parâmetros cinéticos no processo de fermentação da enzima lacase. Esta enzima apresenta diversas aplicações industriais, sendo a mais frequente em alimentos industriais e no tratamento de efluentes industriais. Especificamente na indústria alimentícia, a lacase é adicionada para aumentar a transparência e aparência das cores, aroma, sabor, estabilidade de sucos de frutas e bebidas alcoólicas fermentadas bebidas (ALVES, 2010). Matematicamente, o processo de fermentação da lacase pode ser representado pelas seguintes equações que representam o balanço de massa do sistema (ALVES, 2010):

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\mu_{\max}SX}{(K_s + S)}, \quad X(0) = X_o \quad (5.27a)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y_{XS}} \frac{dX}{dt}, \quad S(0) = S_o \quad (5.27b)$$

$$\frac{dP}{dt} = \begin{cases} K_1(1 - \exp(-(t - 0,01)/0,1))S - K_pP & \text{se } t \leq t_s \\ (K_1 - K_2)(1 - \exp(-(t - 0,01)/0,1))S & \text{se } t > t_s \end{cases}, \quad P(0) = P_o \quad (5.27c)$$

onde  $t$  é o tempo (dia),  $X$  é a concentração de biomassa (g/L),  $P$  é a atividade da enzima lacase (U/L),  $S$  é a concentração do substrato (g/L),  $\mu_{\max}$  e  $K_s$  são as constantes relacionadas ao modelo de inibição considerado,  $Y_{XS}$  é o rendimento de biomassa em relação ao substrato,  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_p$  são parâmetros que ponderam os modelos no que tange o produto e  $t_s$  é o tempo de atuação de cada um destes modelos. Assim,  $\mu_{\max}$ ,  $K_s$ ,  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_p$  e  $t_s$  são parâmetros desconhecidos que deve ser estimado através da formulação e solução de um problema inverso.

Para esta finalidade, o problema inverso proposto consiste na determinação dos parâmetros cinéticos que minimizam a diferença entre o somatório dos pontos experimentais e previstos pelo modelo, conforme o funcional FO definido como:

$$FO = \sum_{i=1}^{n_1} \frac{(X_i^e - X_i^c)^2}{\max(X^e)^2} + \sum_{i=1}^{n_2} \frac{(S_i^e - S_i^c)^2}{\max(S^e)^2} + \sum_{i=1}^{n_3} \frac{(P_i^e - P_i^c)^2}{\max(P^e)^2} \quad (5.28)$$

em que  $\Upsilon^e$  e  $\Upsilon^c$  representam os valores experimentais e calculados pelo modelo ( $\Upsilon = [X \ S \ P]$ ),  $\max(\Upsilon^e)$  é o maior valor experimental observado e  $n_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) é o número de pontos experimentais considerados em cada somatório.

A Tabela 7 apresenta os pontos experimentais considerados (ALVES, 2010).

Tabela 7 – Pontos experimentais (células, substrato e produto) no processo de fermentação da enzima lacase.

| Tempo (dia) | 1   | 2   | 3    | 4    | 5    | 6    | 7    | 8    | 9   | 10  | 11  | 12  |
|-------------|-----|-----|------|------|------|------|------|------|-----|-----|-----|-----|
| $X$ (g/L)   | 0,1 | 0,1 | 0,3  | 0,4  | 0,7  | 0,8  | 1,1  | 1,1  | 1,2 | 1,2 | 1,2 | 1,1 |
| $S$ (g/L)   | 2,0 | 2,0 | 1,9  | 1,6  | 1,3  | 1,0  | 0,8  | 0,5  | 0,4 | 0,2 | 0,1 | 1,1 |
| $P$ (U/L)   | 0   | 125 | 1634 | 3899 | 5657 | 7089 | 5985 | 1898 | 175 | 112 | 2   | 0   |

Para avaliar a influência da ordem fracionária, os termos diferenciais apresentados no modelo acima foram substituídos por  $d^\alpha X/dt^\alpha$ ,  $d^\alpha S/dt^\alpha$  e  $d^\alpha P/dt^\alpha$ , respectivamente. Neste caso, considera-se NPC igual a 5, derivada do tipo Caputo e o Método de Newton para resolver o sistema não linear resultante. Além disso, consideram-se os seguintes parâmetros (ALVES, 2010):  $\mu_{max} = 0,832 \text{ dia}^{-\alpha}$ ;  $K_s = 1,95 \text{ g/L}$ ;  $Y_{XS} = 0,609 \text{ g/g}$ ;  $K_1 = 3,91^3 \text{ U(g}^{-1}\text{dia}^\alpha)$ ;  $K_2 = 7,59^3 \text{ dia}^{-\alpha}$ ;  $t_s = 7,07 \text{ dia}$  e  $\alpha = [0,4 \ 0,5 \dots 0,9 \ 1 \ 1,1 \dots 1,9 \ 2]$ . Cabe enfatizar que, para garantir a consistência dimensional do modelo fracionário, alguns dos parâmetros devem ser corrigidos em função de  $\alpha$ .

Na Figura 14 são apresentados os perfis de substrato, células e produto considerando diferentes valores de  $\alpha$ .

Ao se analisar a influência de  $\alpha$  percebe-se que, para valores de  $\alpha$  próximos a unidade, os perfis de substrato tendem a diminuir ao longo do tempo, visto que células se alimentam do substrato para secretar o produto de interesse. Já o perfil de produto aumenta e, após o tempo limitante  $t_s$  o mesmo começa a diminuir por conta da inibição por produto. Neste cenário, do ponto de vista físico, os perfis para  $\alpha$  próximos a unidade são coerentes e esperados com o processo em análise. Todavia, ao se considerar valores de  $\alpha$  diferentes da unidade, observa-se que os perfis começam a assumir formas não coerentes com o que é esperado para este tipo de fenômeno, i.e.; para valores de  $\alpha$  próximos de zero tem-se que o processo assume valores negativos, o que não tem sentido físico algum. Por outro lado, ao se aproximar  $\alpha$  de 2 tem-se um processo com comportamento oscilatório, o que também não é condizente para o processo em análise, mas sim para problemas que modelam fenômenos com comportamento oscilatório. Em resumo, ao se utilizar uma derivada fracionária para representar um processo real, deve-se avaliar a faixa para a ordem fracionária de modo que perfis fisicamente incoerentes sejam evitados. Finalmente, cabe enfatizar que as descontinuidades nas derivadas se devem ao tipo de modelo proposto para o balanço de massa de produto.

Conforme observado, a ordem fracionária em um processo real não pode assumir qualquer valor, pois resultados fisicamente incoerentes podem ser obtidos. Neste caso, parece ser interessante considerar a ordem fracionária como uma variável de projeto no problema de otimização. Neste contexto, foram propostos dois problemas inversos. O primeiro considera que  $\alpha$  é igual a uma unidade e no segundo que  $\alpha$  é uma variável de projeto. Para resolver estes problemas inversos considera-se o algoritmo de Evolução Diferencial (ED) (STORN; PRICE, 1995). Para estimar os parâmetros cinéticos e a ordem fracionária (no caso do segundo problema inverso),

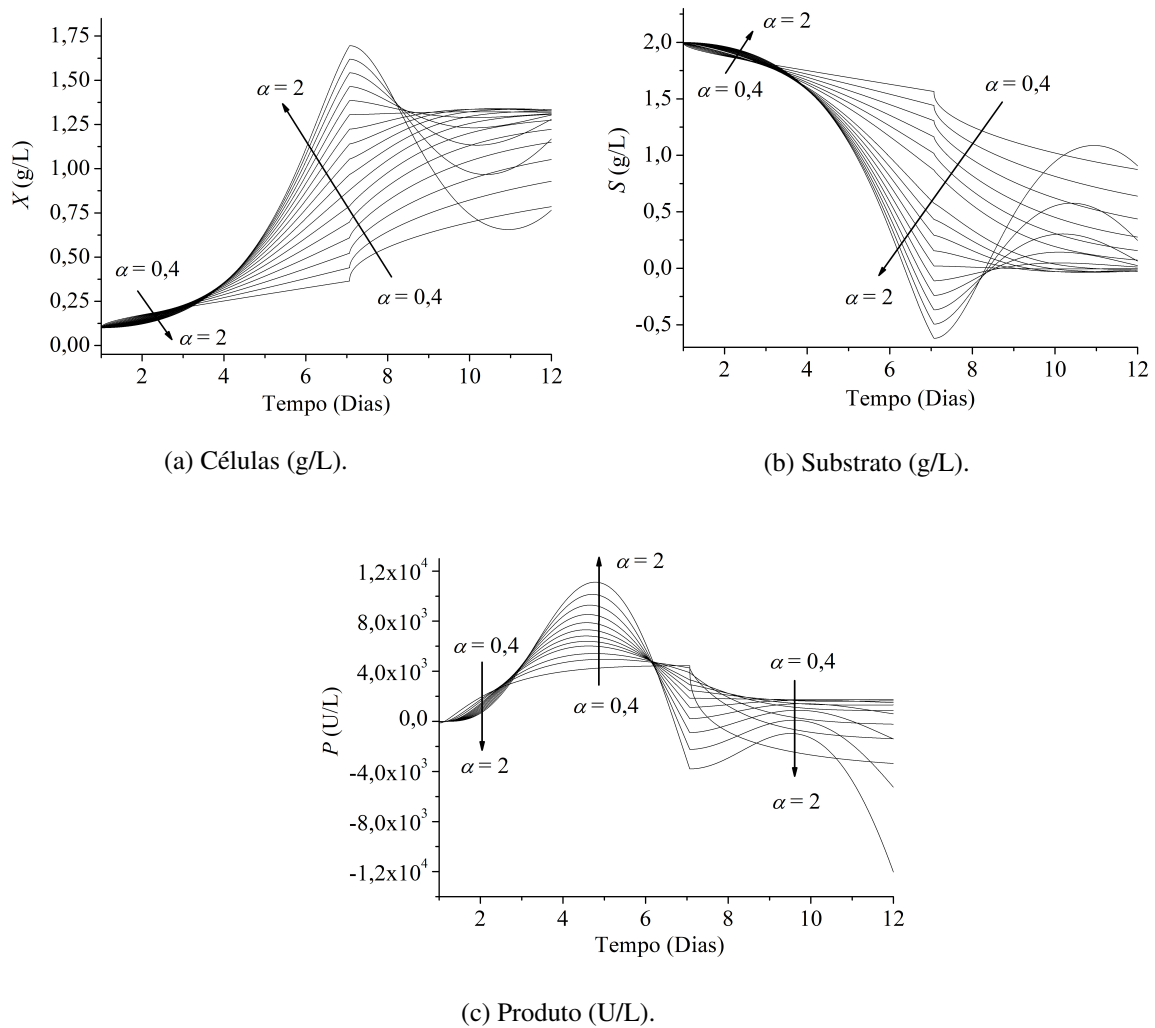


Figura 14 – Concentrações de células, substrato e produto considerando diferentes valores de ordem fracionária no processo de fermentação da enzima lacase.

foram considerados os parâmetros no algoritmo ED: tamanho da população (50), número de gerações (500), taxa de perturbação (0,8), taxa de cruzamento (0,8) e estratégia número 7. Para esta configuração de parâmetros, são necessárias  $50 + 50 \times 500$  avaliações da função objetivo. Foram considerados o seguinte domínio para as variáveis de projeto:  $0,001 \leq \mu_{max} \leq 2 \text{ dia}^{-\alpha}$ ;  $0,001 \leq K_s \leq 2 \text{ g/L}$ ;  $0,002 \leq Y_{X/S} \leq 3 \text{ g/g}$ ;  $30 \leq K_1 \leq 30000 \text{ U(g}^{-1} \text{ dia}^{-\alpha})$ ;  $50 \leq K_2 \leq 50000 \text{ dia}^{-\alpha}$ ;  $0,5 \leq K_p \leq 1 \text{ dia}^{-\alpha}$ ;  $6 \leq t_s \leq 11 \text{ dia}$  e  $0,9 \leq \alpha \leq 1$  (para o segundo problema inverso).

A Tabela 8 apresenta os melhores resultados obtidos para cada problema inverso considerando 20 execuções independentes do algoritmo de ED. Nesta tabela percebe-se que os resultados obtidos considerando a ordem como parâmetro são muito próximos daqueles considerando a ordem fixa e igual a unidade. Assim, para esta aplicação, conclui-se que não fez diferença utilizar a abordagem fracionária. Todavia, apesar desse resultado, não se pode garantir que o uso da abordagem fracionária não produza ganhos significativos em outras aplicações. Do ponto de

vista matemático, inserir a ordem como variável de projeto significa aumentar o número de graus de liberdade do problema, o que na prática pode resultar em uma melhor adequação do modelo aos pontos experimentais.

Tabela 8 – Parâmetros estimados pelo algoritmo de ED no processo de fermentação da enzima lacase considerando modelos com ordem inteira e fracionária.

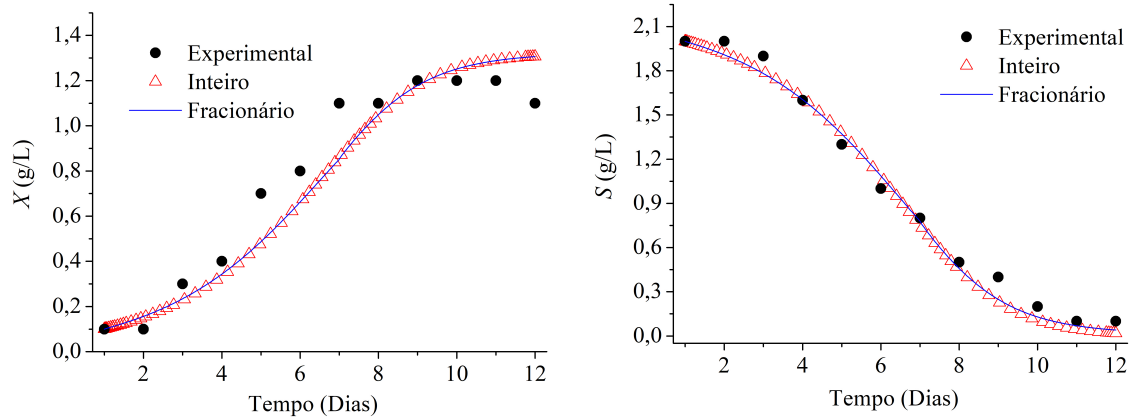
|   |                     |                     |
|---|---------------------|---------------------|
| $\mu_{max}$ (dia <sup>-α</sup> )            | 0,832               | 0,861               |
| $K_s$ (g/L)                                 | 1,952               | 1,951               |
| $Y_{XS}$ (g/g)                              | 0,609               | 0,615               |
| $K_1$ (Ug <sup>-1</sup> dia <sup>-α</sup> ) | $3,914 \times 10^3$ | $4,006 \times 10^3$ |
| $K_2$ (dia <sup>-α</sup> )                  | $7,598 \times 10^3$ | $7,800 \times 10^3$ |
| $K_p$ (dia <sup>-α</sup> )                  | 0,999               | 1,001               |
| $t_s$ (dia)                                 | 7,079               | 6,995               |
| $\alpha$ (-)                                | 1                   | 0,938               |
| $FO$ (-)                                    | 0,5272              | 0,5250              |

A Figura 15 apresenta os perfis experimentais e os simulados considerando os conjuntos de parâmetros obtidos para cada problema inverso. Nestas figuras, observa-se uma boa concordância entre os perfis experimentais e os simulados considerando a resolução dos problemas inversos propostos. Como destacado anteriormente, a concentração de células aumenta visto que estas se alimentam do substrato (que diminuem por este motivo). Já o produto aumenta até atingir o seu máximo e, em seguida por conta da inibição, a sua quantidade reduz. Finalmente, é importante ressaltar que a qualidade dos resultados é função dos pontos experimentais disponíveis, bem como do modelo proposto para representar este fenômeno.

Nesta aplicação o MCO no contexto fracionário foi empregado como ferramenta de simulação durante a resolução de um problema inverso real. Os resultados obtidos demonstram a qualidade da metodologia proposta, visto que boas estimativas para os parâmetros cinéticos e para a ordem fracionária foram encontradas. Nas próximas seções são apresentados os resultados considerando PCOFs usando duas abordagens, a saber, a indireta e a direta.

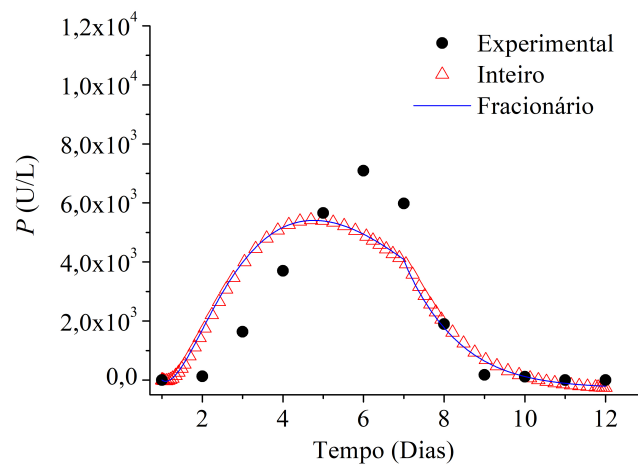
## 5.5 RESOLUÇÃO DE PCOFs USANDO O MÉTODO INDIRETO

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos com a aplicação da abordagem indireta a PCOFs. Como mencionado anteriormente, o modelo algébrico-diferencial de valor no contorno resultante da aplicação da abordagem indireta é obtido a partir da execução do código OTIMA, estendido para o contexto fracionário, de forma a facilitar a geração do modelo em sua forma final, i.e.; um sistema algébrico-diferencial de valor no contorno.



(a) Células (experimento x simulado).

(b) Substrato (experimento x simulado).



(c) Produto (experimento x simulado).

Figura 15 – Concentrações de células, substrato e produto experimentais e simuladas no processo de fermentação da enzima lacase.

### 5.5.1 PRIMEIRO CASO

Esta aplicação tem por objetivo resolver um PCOF via aplicação das condições de otimalidade apresentadas anteriormente. Para essa finalidade considere o seguinte PCOF (SAYEVAND; ROSTAMI, 2018):

$$\min J(x,u,\alpha) = \int_0^1 (tu(t) - (\alpha + 2))x(t))^2 dt \quad (5.29)$$

sujeito às seguintes restrições:

$$\dot{x}(t) + D^\alpha x(t) = u(t) + t^2, \quad (5.30a)$$

$$x(0) = 0, \quad x(1) = \frac{2}{\Gamma(\alpha + 3)} \quad (5.30b)$$

em que  $t$  e  $x$  representam as variáveis independente e dependente, respectivamente,  $u$  é a variável de controle,  $J$  é a função objetivo e  $\alpha$  é a ordem fracionária. Este apresenta solução analítica,

dada como (SAYEVAND; ROSTAMI, 2018):

$$x(t) = \frac{2t^{\alpha+2}}{\Gamma(\alpha+3)} \quad (5.31a)$$

$$u(t) = \frac{2t^{\alpha+1}}{\Gamma(\alpha+2)} \quad (5.31b)$$

$$\lambda(t) = 0 \quad (5.31c)$$

$$J(x,u,\alpha) = 0 \quad (5.31d)$$

Para resolver este problema usando o MI faz-se necessário a determinação das condições de otimalidade. Neste cenário, a partir da aplicação do código OTIMA tem-se o seguinte equacionamento:

$$H(x(t),u(t),\lambda(t),t,\alpha) = (tu(t) - (\alpha+2)x(t))^2 + \lambda(u(t) + t^2) \quad (5.32a)$$

$$\dot{x}(t) + D^\alpha x(t) = u(t) + t^2, \quad x(0) = 0 \quad (5.32b)$$

$$x(1) = \frac{2}{\Gamma(\alpha+3)} \quad (5.32c)$$

$$\dot{\lambda}(t) - D^\alpha \lambda(t) - 2(\alpha+2)(tu(t) - (\alpha+2)x(t)) = 0, \quad \lambda(1) = 0 \quad (5.32d)$$

$$2t(tu(t)) - (\alpha+2)x(t) + \lambda(t) = 0 \quad (5.32e)$$

O problema acima corresponde a um sistema de equações algébrico-diferenciais fracionárias de valor no contorno, visto que a variável  $x$  é definida para  $t$  igual a zero e a variável  $\lambda$  é definida para  $t$  igual a unidade. Para resolver este modelo utiliza-se a metodologia proposta, resultando em um sistema com NPC equações não lineares, sendo este resolvido pelo Método de Newton.

A Tabela 9 apresenta os resultados obtidos considerando a influência do NPC para  $\alpha$  igual a 0,9. Nesta tabela, percebe-se que foram obtidas boas estimativas para o valor de  $J$  e para os erros absolutos médios para a variável de estado ( $\Xi_x$ ) e para a variável adjunta  $\lambda$  ( $\Xi_\lambda$ ). Também é possível observar que o aumento no valor do parâmetro NPC implica na redução dos respectivos erros absolutos médios, bem como o valor da função objetivo  $J$ . Em termos do tempo de processamento, como esperado, quanto maior o NPC maior é o valor deste parâmetro devido ao aumento da dimensão do problema a ser resolvido.

Tabela 9 – Influência do NPC no valor de  $J$  e dos erros absolutos médios para o primeiro PCOF matemático ( $\alpha = 0,9$ ).

|               | NPC = 2                 | NPC = 3                 | NPC = 4                 | NPC = 5                  |
|---------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|--------------------------|
| $J$           | $2,699 \times 10^{-6}$  | $2,2455 \times 10^{-8}$ | $8,5868 \times 10^{-9}$ | $6,6769 \times 10^{-11}$ |
| $\Xi_x$       | $3,1783 \times 10^{-7}$ | $2,6447 \times 10^{-9}$ | $1,0112 \times 10^{-9}$ | $7,8638 \times 10^{-12}$ |
| $\Xi_\lambda$ | $2,2701 \times 10^{-4}$ | $1,566 \times 10^{-7}$  | $8,5698 \times 10^{-8}$ | $1,2442 \times 10^{-9}$  |
| TP (s)        | 6,45                    | 6,98                    | 8,09                    | 9,85                     |

A Figura 16 apresenta os perfis das variáveis de estado, co-estado e controle considerando diferentes NPC e  $\alpha$  igual a 0,9. Para os perfis das variáveis de estado e de controle percebe-se uma boa qualidade de aproximação já para NPC igual a 2. Já para o perfil da variável adjunta, pode-se perceber que é necessário um maior valor no que tange esse parâmetro para obter uma solução mais precisa em relação a essa variável.

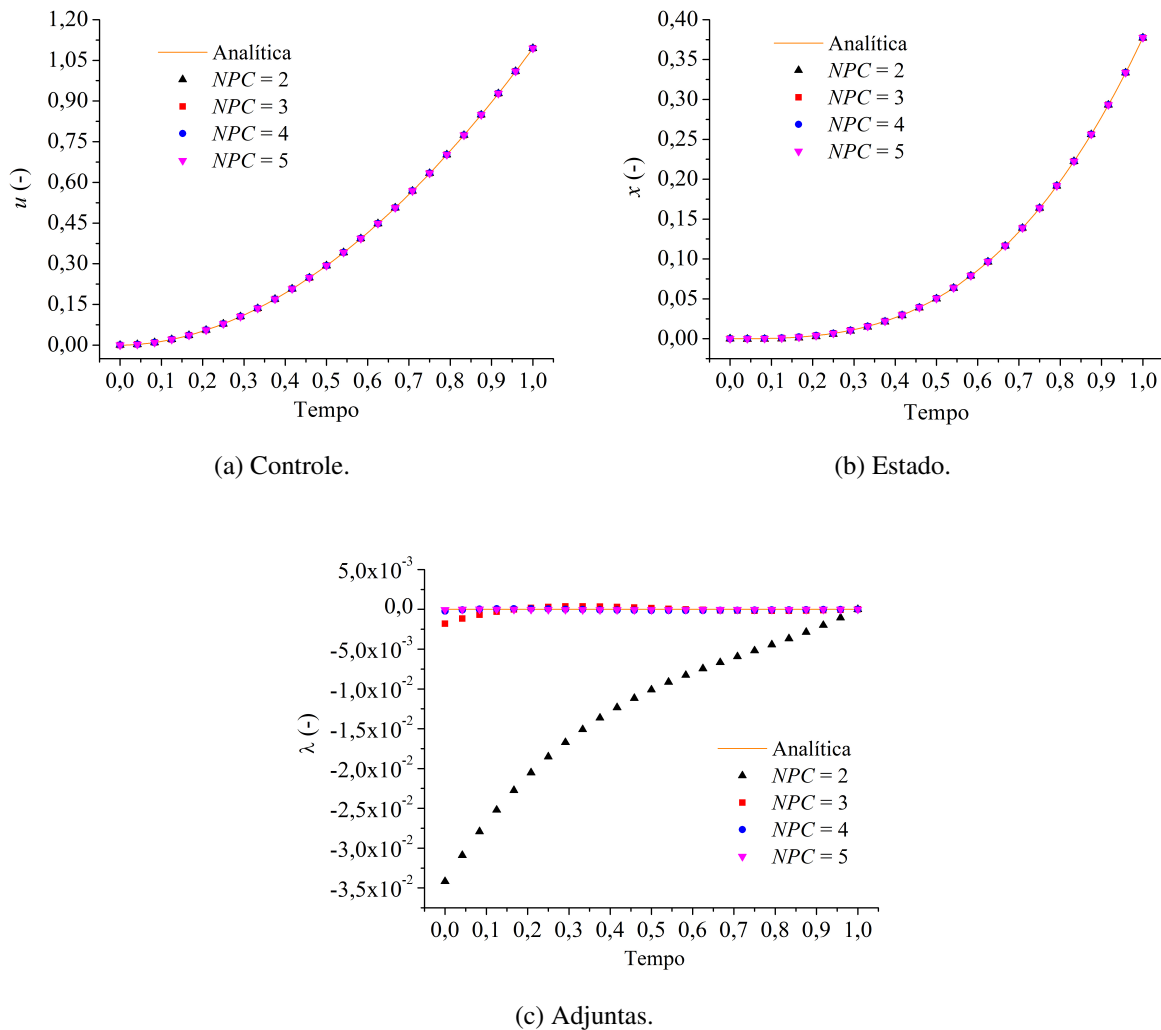


Figura 16 – Influência do NPC nos perfis das variáveis de controle, estado e adjuntas no PCOF matemático ( $\alpha = 0,9$ ).

A Tabela 10 apresenta a influência no valor da ordem fracionária em  $J$ ,  $\Xi_x$  e  $\Xi_\lambda$  para NPC igual a 5. Nesta tabela, percebe-se que, para o NPC utilizado, a abordagem proposta foi capaz de obter boas estimativas para os perfis de variáveis de estado, controle e adjuntas, como pode ser observado nos valores obtidos para  $J$ ,  $\Xi_x$  e  $\Xi_\lambda$ .

A Figura 17 apresenta os perfis das variáveis de estado, co-estado e controle considerando diferentes valores para  $\alpha$  e NPC de valor igual a 5. Nesta figura, percebe-se claramente a influência da ordem fracionária em cada um destes perfis, sendo que o aumento no valor deste parâmetro implica na redução da magnitude dos perfis de estado e de controle. Em termos



Tabela 10 – Influência da ordem fracionária no valor de  $J$  e dos erros absolutos médios para o PCOF matemático (NPC = 5).

|               | $\alpha = 0,6$           | $\alpha = 0,7$          | $\alpha = 0,8$           | $\alpha = 0,9$           | $\alpha = 1,0$           |
|---------------|--------------------------|-------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| $J$           | $2,1416 \times 10^{-9}$  | $9,7667 \times 10^{-9}$ | $3,3801 \times 10^{-9}$  | $6,6769 \times 10^{-11}$ | $6,0208 \times 10^{-15}$ |
| $\Xi_x$       | $3,1373 \times 10^{-10}$ | $1,3266 \times 10^{-9}$ | $4,2689 \times 10^{-10}$ | $7,8638 \times 10^{-12}$ | $6,6809 \times 10^{-16}$ |
| $\Xi_\lambda$ | $2,7090 \times 10^{-9}$  | $1,6247 \times 10^{-8}$ | $1,1191 \times 10^{-9}$  | $1,2124 \times 10^{-9}$  | $9,4868 \times 10^{-10}$ |

da qualidade da solução encontrada constata-se que foram obtidas boas aproximações para as variáveis de estado e de controle considerando todos os valores de  $\alpha$ . Todavia, para os perfis da variável adjunta, observa-se uma diferença significativa entre estes. Provavelmente, esta diferença possa ser justificada pelo fato da solução ótima para  $\lambda$  ser igual a zero. Neste caso, os resultados numéricos obtidos têm magnitudes da ordem (máxima) de, aproximadamente,  $10^{-4}$ . Assim, apesar desta discrepância, considera-se que a metodologia proposta foi capaz de resolver o problema em questão.

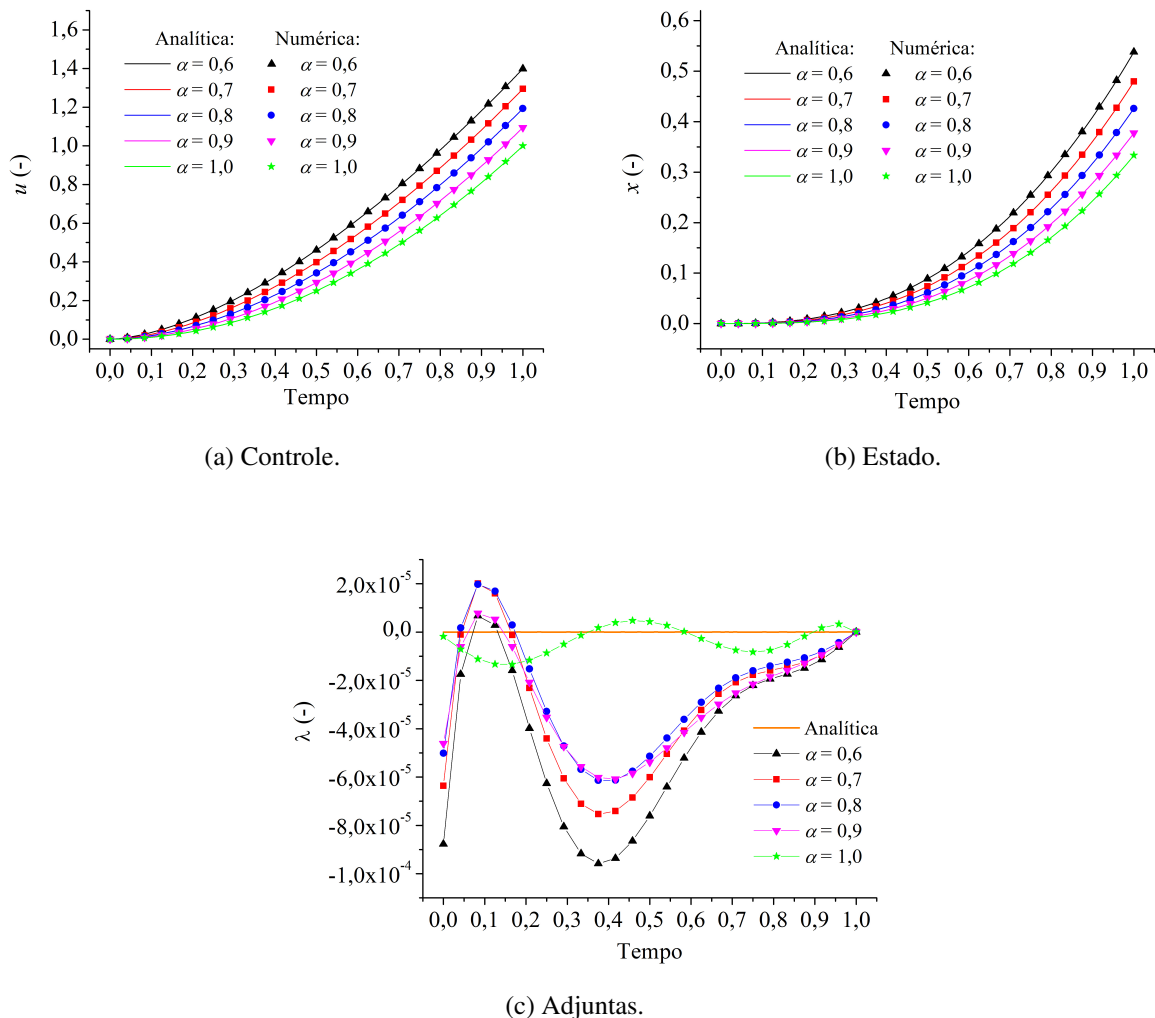


Figura 17 – Influência da ordem fracionária nos perfis das variáveis de estado, co-estado e controle para o primeiro PCOF matemático (NPC = 5).

### 5.5.2 SEGUNDO CASO

Nesta segunda aplicação é considerado o seguinte problema de controle ótimo linear-quadrático (SWEILAM; AL-AJAMI; HOPPE, 2013):

$$\min J(x,u) = \int_0^1 (u(t) - x(t))^2 dt, \quad (5.33)$$

sujeito ao sistema dinâmico:

$$\dot{x}(t) + {}_0^C D_t^\alpha x(t) = u(t) - x(t) + \frac{6t^{\alpha+2}}{\Gamma(\alpha+3)} + t^3 \quad (5.34)$$

e as seguintes condições:

$$x(0) = 0, \quad x(1) = \frac{6}{\Gamma(\alpha+4)} \quad (5.35)$$

A solução analítica é dada por (SAYEVAND; ROSTAMI, 2018):

$$(\bar{x}(t), \bar{u}(t)) = \left( \frac{6t^{\alpha+3}}{\Gamma(\alpha+4)}, \frac{6t^{\alpha+3}}{\Gamma(\alpha+4)} \right) \quad (5.36)$$

Para resolver o PCOF usando a abordagem indireta aplica-se o código OTIMA, cuja saída é o seguinte sistema de equações algébrico-diferenciais de valor no contorno:

$$H(x(t), u(t), \lambda(t), t, \alpha) = (u(t) - x(t))^2 + \lambda \left( u(t) - x(t) + \frac{6t^{\alpha+2}}{\Gamma(\alpha+3)} + t^3 \right) \quad (5.37a)$$

$$\dot{x}(t) + {}_0^C D_t^\alpha x(t) = u(t) - x(t) + \frac{6t^{\alpha+2}}{\Gamma(\alpha+3)} + t^3 \quad (5.37b)$$

$$x(0) = 0, \quad x(1) = \frac{6}{\Gamma(\alpha+4)} \quad (5.37c)$$

$$\dot{\lambda}(t) - {}_t D_1^\alpha \lambda(t) + 2u(t) - 2x(t) + 1 = 0 \quad (5.37d)$$

$$2u(t) - 2x(t) + \lambda(t) = 0 \quad (5.37e)$$

A Tabela 11 apresenta os resultados obtidos considerando a influência do NPC para  $\alpha$  igual a 0,9 bem como a aplicação do Método de Newton. Nesta tabela, percebe-se boas estimativas para o valor de  $J$  e dos erros absolutos médios para ambas as variáveis (estado ( $\Xi_x$ ) e adjunta ( $\Xi_\lambda$ )). Também é possível observar que o aumento no valor do parâmetro NPC implica na redução dos respectivos erros absolutos médios, bem como o valor da função objetivo  $J$ . Em termos do tempo de processamento, como esperado, quanto maior o NPC maior é o valor deste parâmetro devido ao aumento da dimensão do problema a ser resolvido.

Já a Tabela 12 apresenta a influência da ordem fracionária nos valores de  $J$ ,  $\Xi_x$  e  $\Xi_\lambda$  para NPC igual a 5. Nesta tabela, percebe-se que a abordagem proposta foi capaz de obter boas

Tabela 11 – Influência do NPC no valor de  $J$  e dos erros absolutos médios para o segundo PCOF matemático ( $\alpha = 0,9$ ).

|               | NPC = 2                 | NPC = 3                  | NPC = 4                  | NPC = 5                  |
|---------------|-------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| $J$           | $1,7874 \times 10^{-6}$ | $1,5455 \times 10^{-8}$  | $2,8787 \times 10^{-9}$  | $5,5443 \times 10^{-12}$ |
| $\Xi_x$       | $2,3434 \times 10^{-8}$ | $2,7444 \times 10^{-10}$ | $1,2434 \times 10^{-11}$ | $2,3332 \times 10^{-13}$ |
| $\Xi_\lambda$ | $1,1432 \times 10^{-6}$ | $1,6656 \times 10^{-8}$  | $2,6768 \times 10^{-9}$  | $5,6589 \times 10^{-10}$ |
| TP (s)        | 5,57                    | 6,44                     | 9,59                     | 10,54                    |

Tabela 12 – Influência da ordem fracionária no valor de  $J$  e dos erros absolutos médios para o segundo PCOF matemático (NPC = 5).

|               | $\alpha = 0,6$           | $\alpha = 0,7$           | $\alpha = 0,8$           | $\alpha = 0,9$           | $\alpha = 1,0$           |
|---------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| $J$           | $2,4332 \times 10^{-10}$ | $7,8781 \times 10^{-10}$ | $5,6561 \times 10^{-11}$ | $2,9888 \times 10^{-12}$ | $2,8434 \times 10^{-14}$ |
| $\Xi_x$       | $2,3233 \times 10^{-10}$ | $1,6434 \times 10^{-10}$ | $2,9545 \times 10^{-11}$ | $3,8656 \times 10^{-13}$ | $2,6755 \times 10^{-15}$ |
| $\Xi_\lambda$ | $2,0434 \times 10^{-10}$ | $1,644 \times 10^{-10}$  | $4,9489 \times 10^{-11}$ | $5,6746 \times 10^{-12}$ | $6,8776 \times 10^{-14}$ |

estimativas para a função objetivo e para as variáveis de estado e co-estado, haja visto os valores obtidos para  $J$ ,  $\Xi_x$  e  $\Xi_\lambda$ .

Nas Figuras 18 e 19 são apresentados os perfis das variáveis de estado, co-estado e controle considerando diferentes NPC ( $\alpha = 0,9$ ) e diferentes valores de  $\alpha$  (NPC = 5), respectivamente. Em ambas as figuras percebe-se a qualidade da metodologia proposta, visto a concordância entre as soluções obtidas e analíticas. Já na Figura 18 observa-se que uma boa aproximação para todos os perfis é observada para o menor valor de NPC considerado, i.e.; igual a 2. Na Figura 19 observa-se, claramente, a influência da ordem fracionária em cada um destes perfis, sendo que o aumento no valor deste parâmetro implica na redução da magnitude dos perfis de estado e controle.

De forma geral, observa-se com as aplicações realizadas que o MCO estendido para o contexto fracionário foi capaz de obter boas estimativas para os perfis de estado, co-estado e controle. Além disso, a execução do código OTIMA eliminou a etapa (tediosa e sujeita a erros) de geração das condições de otimalidade no contexto fracionário (sistema de equações algébrico-diferenciais de valor no contorno). Nas próximas seções são apresentados os resultados considerando a resolução de PCOFs usando a abordagem direta nos contextos mono e multi-objetivo.

## 5.6 RESOLUÇÃO DE PCOFs MATEMÁTICOS SINGULARES USANDO O MÉTODO DIRETO

Os PCOs denominados de singulares são muito difíceis de serem resolvidos, uma vez que o gradiente da função Hamiltoniano com relação à variável de controle não fornece nenhuma informação sobre o controle. Além disso, destaca-se nestes problemas que a sensibilidade da

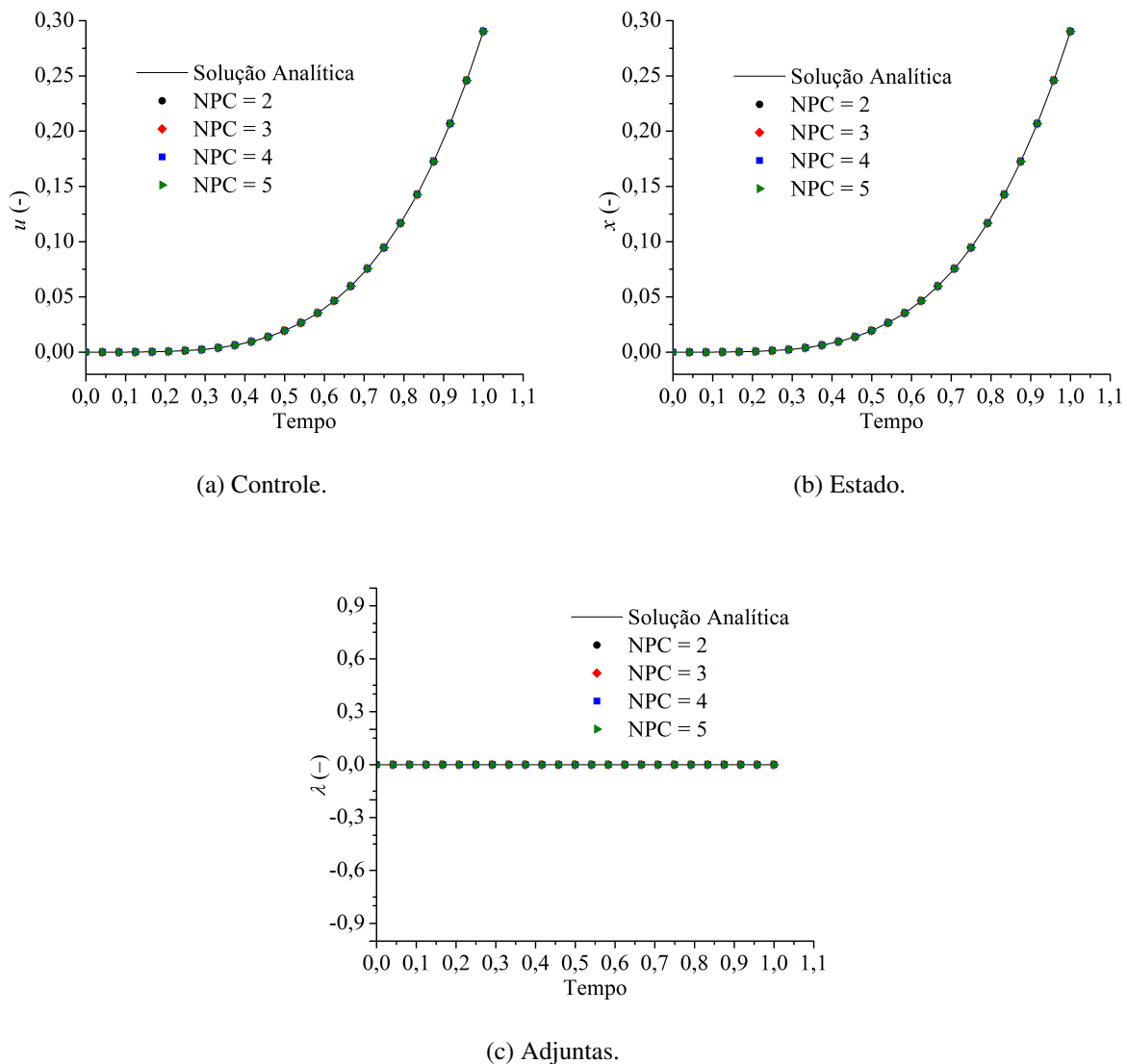


Figura 18 – Influência do NPC nos perfis das variáveis de controle, estado e adjuntas para o segundo PCOF matemático ( $\alpha = 0,9$ ).

função objetivo com relação à mudanças no controle é muito baixa, o que dificulta a resolução dos mesmos (KOKOSKA; ZWILLINGER, 2000).

Para fins de aplicação, a seguir são apresentados dois estudos de caso singulares no contexto fracionário (a ordem fracionária  $\alpha$  é definida no intervalo compreendido entre 0,8 a 1,2). Cabe destacar que esta faixa foi escolhida de forma que a mesma representasse uma perturbação no valor da ordem inteira, tradicionalmente empregada nestes estudos de caso.

### 5.6.1 PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO SINGULAR 1

Considere o PCO singular estudado por Jacobson, Gershwin e Lele (1970), Flaherty e O'Malley (1977), Dadebo e McAuley (1995) e Luus (1998). Este é composto por três variáveis

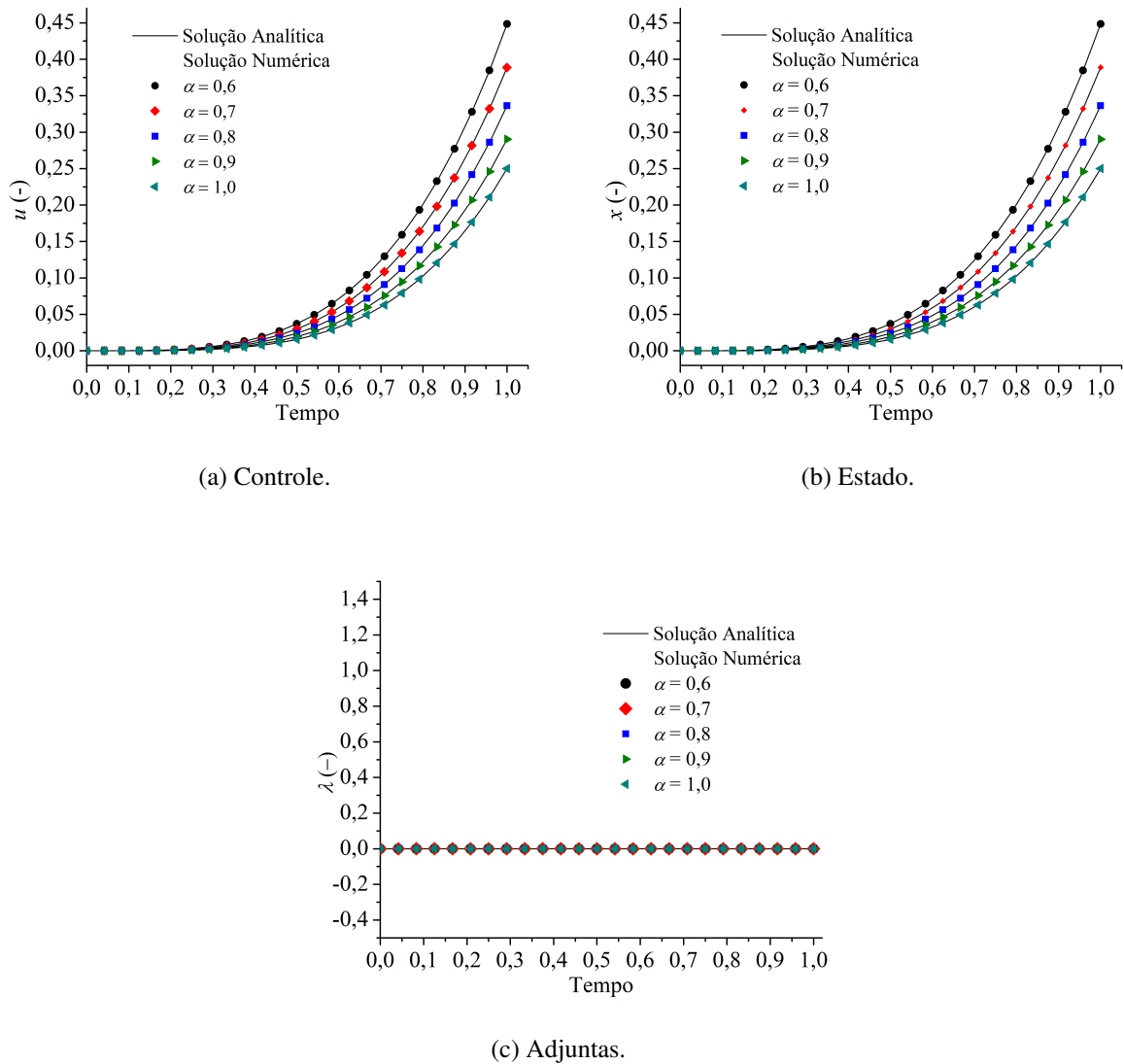


Figura 19 – Influência da ordem fracionária nos perfis das variáveis de controle, estado e adjuntas para o segundo PCOF matemático (NPC = 5).

de estado e uma de controle. No contexto fracionário, este modelo é dado como:

$$\frac{d^\alpha x_1}{dt^\alpha} = x_2 \quad (5.38)$$

$$\frac{d^\alpha x_2}{dt^\alpha} = u \quad (5.39)$$

$$\frac{d^\alpha x_3}{dt^\alpha} = x_1^2 \quad (5.40)$$

em que  $t$  é a variável independente,  $x_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) representa a  $i$ -ésima variável dependente (estado) e  $u$  é a variável de controle. Para integrar este modelo considera-se  $x(0) = [0 \ 1 \ 0]^T$  e  $t_f = 5$ . As restrições impostas para a variável de controle são:

$$-1 \leq u \leq 1 \quad (5.41)$$

Neste caso, deseja-se obter a lei de controle que minimize a seguinte função objetivo ( $FO$ ):

$$FO = x_3(t_f) \quad (5.42)$$

Para resolver este estudo de caso será considerado o algoritmo ED (STORN; PRICE, 1995) considerando os seguintes parâmetros: tamanho da população (25), número de gerações (500), taxa de perturbação (0,8), taxa de cruzamento (0,8) e estratégia número 7. Para esta configuração de parâmetros são necessárias  $25 + 25 \times 500$  avaliações da função objetivo. A estratégia de controle empregada nesta aplicação considera cinco elementos de controle [ $u_1 u_2 u_3 u_4 u_5$ ] definidos em cinco intervalos de tempo ( $[0 t_{s1} t_{s2} t_{s3} t_{s4} 1]$ ) de forma que  $-1 \leq u_i \leq 1$  ( $i = 1, 2, \dots, 5$ ); e  $0 \leq t_{sj} \leq 5$  ( $j = 1, 2, \dots, 4$ ).

A Tabela 13 apresenta os melhores resultados obtidos para esta aplicação considerando  $\alpha = [0,8 \ 1 \ 1,2]$  e NPC = 5. Para  $\alpha$  igual a uma unidade (valor de referência), a função objetivo é, aproximadamente, igual a 0,2683 (JACOBSON; GERSHWIN; LELE, 1970; FLAHERTY; O'MALLEY, 1977; DADEBO; MCAULEY, 1995; LUUS, 1998). Neste caso, observa-se que o resultado obtido pela metodologia proposta para  $\alpha$  igual a uma unidade está em concordância com este valor. Para esta aplicação, o valor da função objetivo cresce na medida em que o valor de  $\alpha$  aumenta, conforme a Figura 20 (a). Também é observado na Figura 20 (b) que os perfis de controle são oscilatórios, sendo estes coerentes com os reportados por Dadebo e McAuley (1995). Já os comportamentos das variáveis de estado  $x_1$  e  $x_2$  são oscilatórios com suavização ao longo do tempo, como observado nas Figuras 20 (c, d). Já para a terceira variável de projeto observa-se, aproximadamente, um comportamento crescente, a depender da ordem considerada, como visto na Figura 20 (e). Em relação ao algoritmo de ED, os desvios padrão observados para a função objetivo são, no mínimo, da ordem de  $10^{-3}$ , o que demonstra que a estratégia de otimização sempre convergiu para a solução ótima reportada. Finalmente, ressalta-se que, em média, cada execução do algoritmo de ED requereu um tempo de processamento igual a 21,96 s.

Tabela 13 – Resultados obtidos para o problema singular 1 considerando diferentes valores para  $\alpha$ .

|              | $\alpha = 0,8$ | $\alpha = 1$ | $\alpha = 1,2$ |
|--------------|----------------|--------------|----------------|
| $t_{s1}$ (-) | 1,5558         | 1,7589       | 1,6461         |
| $t_{s2}$ (-) | 1,5624         | 2,7519       | 1,7784         |
| $t_{s3}$ (-) | 2,2249         | 2,8394       | 3,2976         |
| $t_{s4}$ (-) | 4,7215         | 3,2130       | 4,0981         |
| $u_1$ (-)    | -1,0000        | -1,0000      | -1,0000        |
| $u_2$ (-)    | -0,9701        | 1,0000       | -0,3250        |
| $u_3$ (-)    | 0,2792         | -1,0000      | 1,0000         |
| $u_4$ (-)    | -0,0583        | -0,4385      | -0,7667        |
| $u_5$ (-)    | -0,5479        | 0,0181       | 0,3219         |
| $FO$ (-)     | 0,1040         | 0,2692       | 0,6460         |

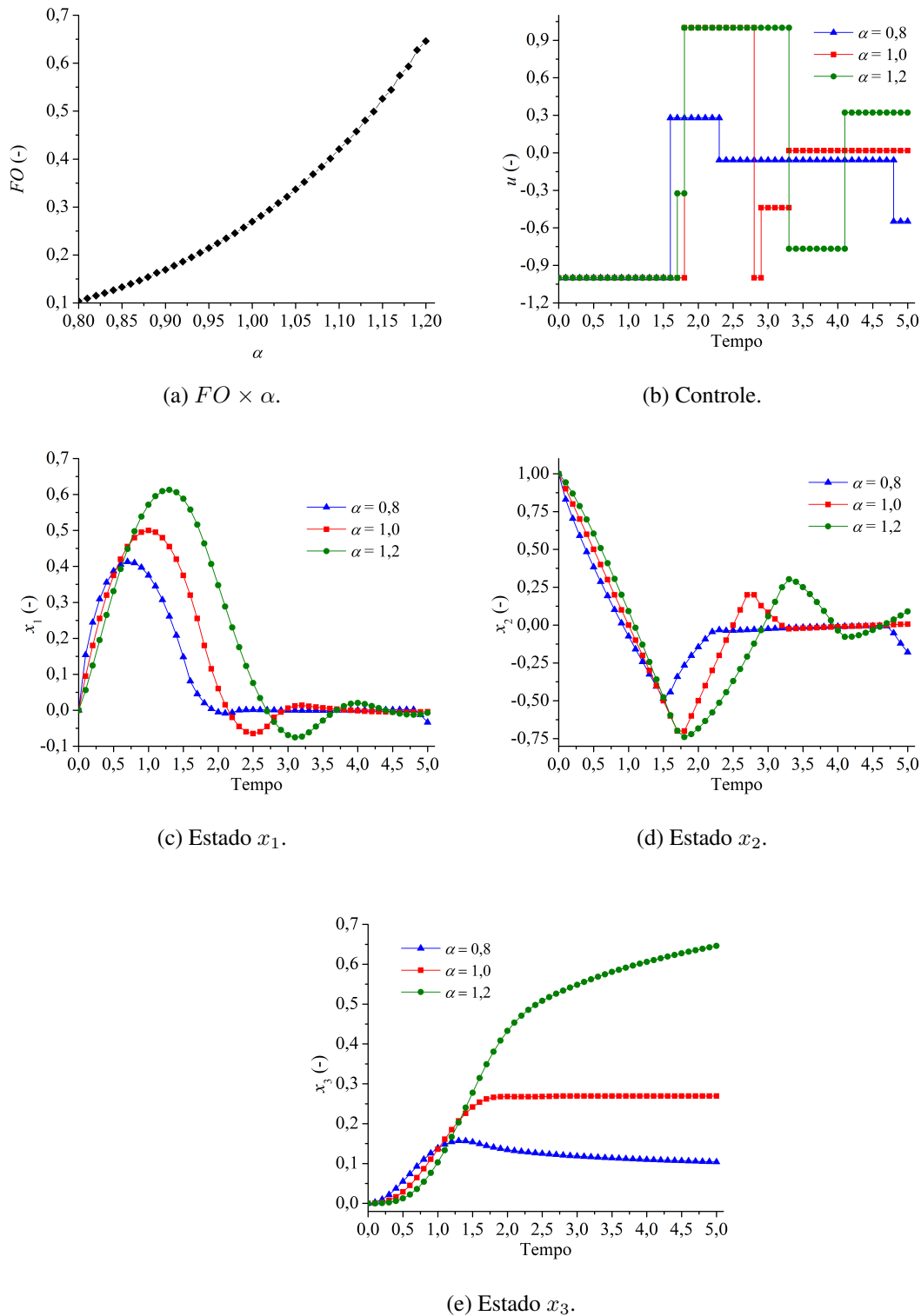


Figura 20 – Influência da ordem fracionária na função objetivo e nas variáveis de controle e estado para o PCO singular 1.

### 5.6.2 PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO SINGULAR 2

Nesta aplicação o termo quadrático  $x_2^2$  é adicionado ao integrando da função objetivo do primeiro estudo de caso singular. Matematicamente este sistema é dado por (JACOBSON;

GERSHWIN; LELE, 1970):

$$\frac{d^\alpha x_1}{dt^\alpha} = x_2 \quad (5.43)$$

$$\frac{d^\alpha x_2}{dt^\alpha} = u \quad (5.44)$$

$$\frac{d^\alpha x_3}{dt^\alpha} = x_1^2 + x_2^2 \quad (5.45)$$

em que  $t$  é a variável independente,  $x_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) representa a  $i$ -ésima variável dependente (estado) e  $u$  é a variável de controle. Também considera-se  $x(0) = [0 \ 1 \ 0]^T$ , e  $t_f = 5$ . As restrições no controle são definidas como segue:

$$-1 \leq u \leq 1 \quad (5.46)$$

Nesta aplicação também deseja-se minimizar a seguinte função objetivo ( $FO$ ):

$$FO = x_3(t_f) \quad (5.47)$$

Para resolver este estudo de caso também foi considerado o algoritmo ED (STORN; PRICE, 1995) com os seguintes parâmetros: tamanho da população (25), número de gerações (500), taxa de perturbação (0,8), taxa de cruzamento (0,8) e estratégia número 7. Para esta combinação de parâmetros são necessárias  $25 + 25 \times 500$  avaliações da função objetivo. Da mesma forma que a aplicação anterior, aqui também são considerados cinco elementos de controle  $[u_1 \ u_2 \ u_3 \ u_4 \ u_5]$  definidos em cinco intervalos de tempo ( $[0 \ t_{s1} \ t_{s2} \ t_{s3} \ t_{s4} \ 1]$ ) de forma que  $-1 \leq u_i \leq 1$  ( $i = 1, 2, \dots, 5$ ); e  $0 \leq t_{sj} \leq 5$  ( $j = 1, 2, \dots, 4$ ).

A Tabela 14 apresenta os melhores resultados obtidos para este PCO singular considerando  $\alpha = [0,8 \ 1 \ 1,2]$  e NPC = 5. Da mesma forma que apresentado no caso anterior, estes resultados são coerentes, visto que o valor referência ( $\alpha$  igual a 1 unidade) encontrado é bem próximo ao reportado pela literatura, i.e.; 0,7539. Em relação aos desvios padrão encontrados durante a execução do algoritmo de ED observa-se que, em relação à função objetivo, estes são, no mínimo, da ordem de  $10^{-3}$ , i.e.; o referido algoritmo sempre convergiu para a mesma solução. Finalmente, em média, cada execução do algoritmo de ED requereu um tempo de processamento igual a 23,45 s.

A Figura 21 apresenta os perfis referentes a função objetivo, variáveis de controle e de estado. Assim como no primeiro estudo de caso singular, nota-se que o valor da FO cresce na medida em que o valor de  $\alpha$  aumenta, conforme a Figura 21 (a). Já na Figura 21 (b) observa-se um comportamento oscilante, mas com tendência a um amortecimento para maiores valores da ordem fracionária. Em se tratando dos perfis obtidos para as variáveis de estado  $x_1$  e  $x_2$  observa-se um comportamento, aproximadamente parabólico, para ambas as variáveis, como observado nas Figuras 21 (c, d). Já para a terceira variável de projeto, assim como constatado na primeira aplicação, observa-se, aproximadamente, um comportamento crescente, a depender da ordem considerada, como visto na Figura 21 (e).



Tabela 14 – Resultados obtidos para o problema singular 2 considerando diferentes valores para  $\alpha$ .

|              | $\alpha = 0,8$ | $\alpha = 1$ | $\alpha = 1,2$ |
|--------------|----------------|--------------|----------------|
| $t_{s1}$ (-) | 1,2407         | 1,3645       | 1,5476         |
| $t_{s2}$ (-) | 1,5479         | 1,4527       | 2,1607         |
| $t_{s3}$ (-) | 2,8481         | 2,6210       | 3,3601         |
| $t_{s4}$ (-) | 4,1501         | 4,9628       | 4,8786         |
| $u_1$ (-)    | -1,0000        | -1,0000      | -1,0000        |
| $u_2$ (-)    | -0,2532        | -0,2373      | 0,9994         |
| $u_3$ (-)    | -0,0670        | 0,2316       | 0,2351         |
| $u_4$ (-)    | -0,0534        | 0,0468       | 0,0433         |
| $u_5$ (-)    | -0,0334        | -0,0298      | 0,3767         |
| $FO$ (-)     | 0,3093         | 0,7549       | 1,6563         |

## 5.7 RESOLUÇÃO DE PCOFs MONO-OBJETIVOS USANDO O MÉTODO DIRETO

Com o intuito de avaliar a metodologia proposta para a resolução de PCOFs, a seguir são apresentados estudos de caso de engenharia para essa finalidade.

### 5.7.1 MISTURA DE CATALISADORES

A primeira aplicação considera a resolução de um tradicional PCO singular em que o índice diferencial é igual a 3, a saber, o problema da mistura de catalisadores (LOGSDON; BIEGLER, 1989). Este problema, adaptado aqui para o contexto fracionário, consiste em determinar a mistura ótima de dois catalisadores (variável de controle  $u$ ) ao longo do comprimento fixo de um reator PFR (*Plug-Flow Reactor*) onde ocorre uma reação  $S_1 \leftrightarrow S_2 \rightarrow S_3$ . Neste caso, deseja-se maximizar a produção da espécie  $S_3$ .

Matematicamente, o problema (no contexto adimensional) é descrito de forma a minimizar a seguinte função objetivo:

$$\min FO(u) = -(1 - x_1(l_f) - x_2(l_f)) \quad (5.48)$$

sujeito ao seguinte sistema diferencial fracionário:

$$\frac{d^\alpha x_1}{dl^\alpha} = u(10x_2 - x_1), \quad x_1(0) = 1 \quad (5.49a)$$

$$\frac{d^\alpha x_2}{dl^\alpha} = u(x_1 - 10x_2) - (1 - u)x_2, \quad x_2(0) = 0 \quad (5.49b)$$

em que  $l$  é o comprimento do reator ( $L_f = 1$ ), e  $x_1$  e  $x_2$  representam as frações molares das espécies  $S_1$  e  $S_2$ , respectivamente. Este problema apresenta uma restrição na variável de controle, dada como  $0 \leq u \leq 1$ .

Como o objetivo desta aplicação é associar a metodologia proposta para integrar o modelo diferencial fracionário usando a extensão do MCO à abordagem direta, a variável de

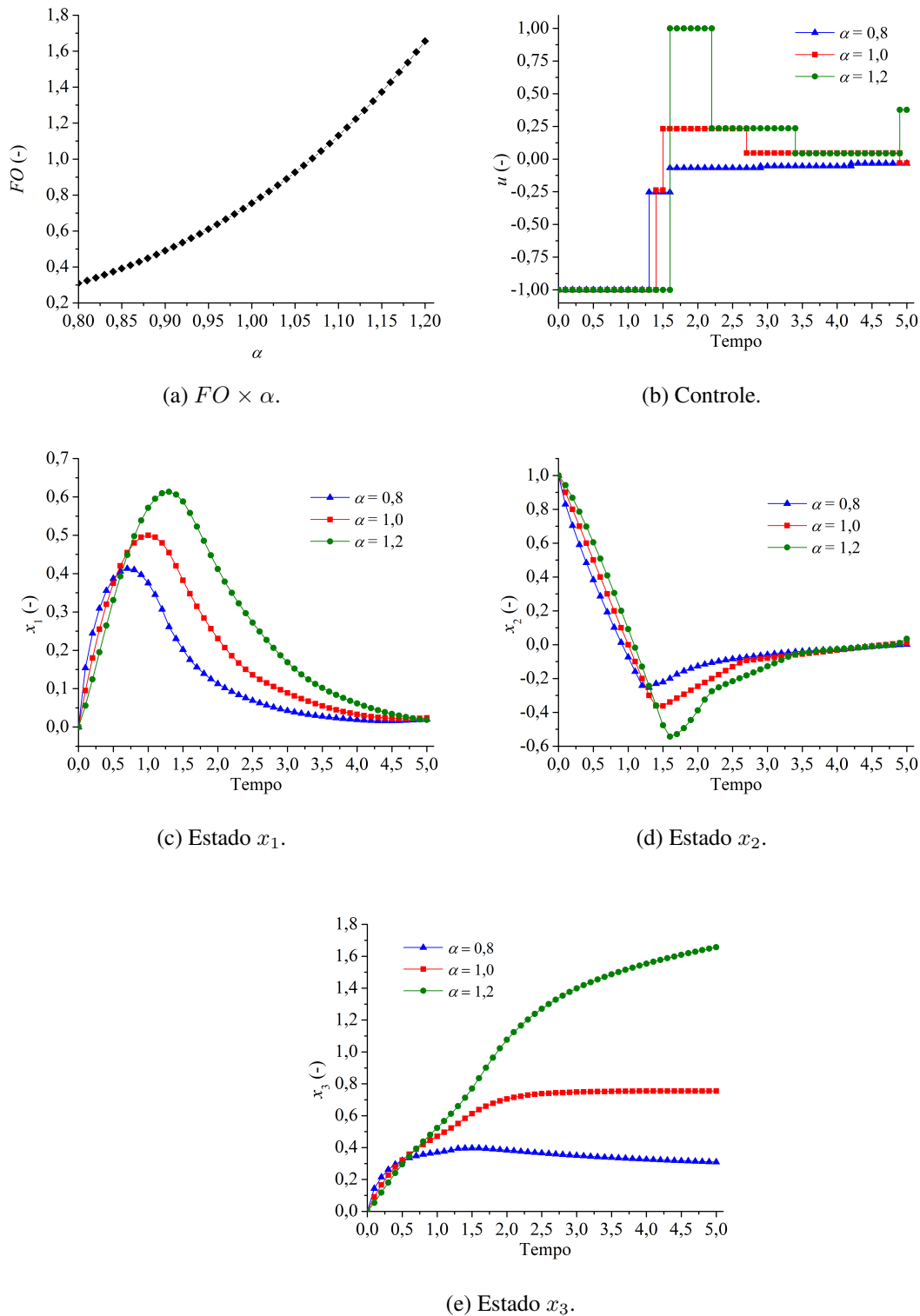


Figura 21 – Influência da ordem fracionária na função objetivo e nas variáveis de controle e estado para o PCO singular 2.

controle será discretizada por fases ( $l_s$ ), conforme discutido por [Logsdon e Biegler \(1989\)](#). Neste caso, o perfil de controle para este problema é obtido considerando três fases, sendo que em cada uma o controle é constante. Assim, considerando três fases, a restrição original (contínua)

para a variável de controle pode ser definida como:  $u = u_1$  para  $0 \leq l \leq l_{s1}$  (primeira fase),  $u = u_2$  para  $l_{s1} < l \leq l_{s2}$  (segunda fase) e  $u = u_3$  para  $l_{s2} < l \leq 1$  (terceira fase). Em resumo, o problema original é reescrito como um equivalente em que deseja-se determinar os valores de  $u_1, u_2, u_3$  (magnitudes das estratégias de controle em cada fase) e os parâmetros  $l_{s1}$  e  $l_{s2}$  (comprimentos onde acontece a troca da estratégia de controle).

Para resolver este estudo de caso considera-se o algoritmo de ED (STORN; PRICE, 1995) com os seguintes parâmetros: tamanho da população (50), número de gerações (250), taxa de perturbação (0,8), taxa de cruzamento (0,8) e estratégia número 7 (ED/best/1/exp). Neste caso, são necessárias  $50 + 50 \times 250$  avaliações da função objetivo em cada execução do algoritmo. Além disso, foram considerados os seguintes domínios para as variáveis de projeto:  $0 \leq u_1 \leq 1$ ;  $0 \leq u_2 \leq 1$ ;  $0 \leq u_3 \leq 1$ ;  $0 \leq l_{s1} \leq 0,5$  e  $0,5 \leq l_{s2} \leq 1$ .

A Tabela 15 apresenta os melhores resultados obtidos para o problema de mistura de catalisadores considerando  $\alpha = [0,8 \ 1 \ 1,2]$ , NPC = 5 e 20 execuções independentes. De forma geral, os resultados obtidos estão coerentes, visto que para  $\alpha$  igual a uma unidade, o melhor valor encontrado é, aproximadamente, igual -0,0480 e este está em concordância com o reportado por Logsdon e Biegler (1989). Cabe destacar que um valor da magnitude de  $10^{-4}$ , em relação ao valor da função objetivo, foi observado para os desvios padrão para cada ordem fracionária, o que significa que a estratégia de otimização sempre convergiu para a mesma solução. Em termos do tempo de processamento, cada execução do algoritmo de ED requereu, em média, 27,54 segundos.

Tabela 15 – Resultados obtidos para o problema de mistura de catalisadores considerando diferentes valores para  $\alpha$ .

| $\alpha$ | $l_{s1}$ | $l_{s2}$ | $u_1$  | $u_2$  | $u_3$  | FO      |
|----------|----------|----------|--------|--------|--------|---------|
| 0,8      | 0,0738   | 0,8674   | 1,0000 | 0,2938 | 0,0000 | -0,0476 |
| 1,0      | 0,1361   | 0,7252   | 1,0000 | 0,2272 | 0,0000 | -0,0480 |
| 1,2      | 0,0000   | 0,2256   | 0,0000 | 1,0000 | 0,0000 | -0,0538 |

A Figura 22 apresenta a influência da ordem fracionária no valor da função objetivo ( $0,8 \leq \alpha \leq 1,2$ ) e os perfis de estado e controle. Na Figura 22 (a) percebe-se que, para  $\alpha$  menor do que, aproximadamente, 0,85; a função objetivo permanece, praticamente constante. Já para valores da ordem superiores a 0,85 percebe-se que o valor da função objetivo decai, demonstrando que a ordem influencia sim o valor da função objetivo. Fisicamente, por se tratar de um problema de maximização, o aumento do valor da ordem fracionária implica no aumento do valor da concentração da espécie  $S_3$  no comprimento final. Na prática, valores de ordem maiores do que 0,85 implicam no aumento da concentração do produto. Já nas Figuras 22 (b, c, d) são apresentados os perfis para alguns valores de  $\alpha$  ([0,8 1 1,2]). Para cada ordem analisada é associada a uma estratégia de controle, tornando-se um problema de otimização particular, i.e.; uma estratégia de controle para uma dada ordem fracionária. Neste caso, apesar de curvas distintas para cada valor de ordem, todos estes perfis são fisicamente viáveis. Além disso, a

dependem da ordem tem-se estratégias de controle diferentes de forma que, pode até ser possível reduzir o número de elementos de controle.

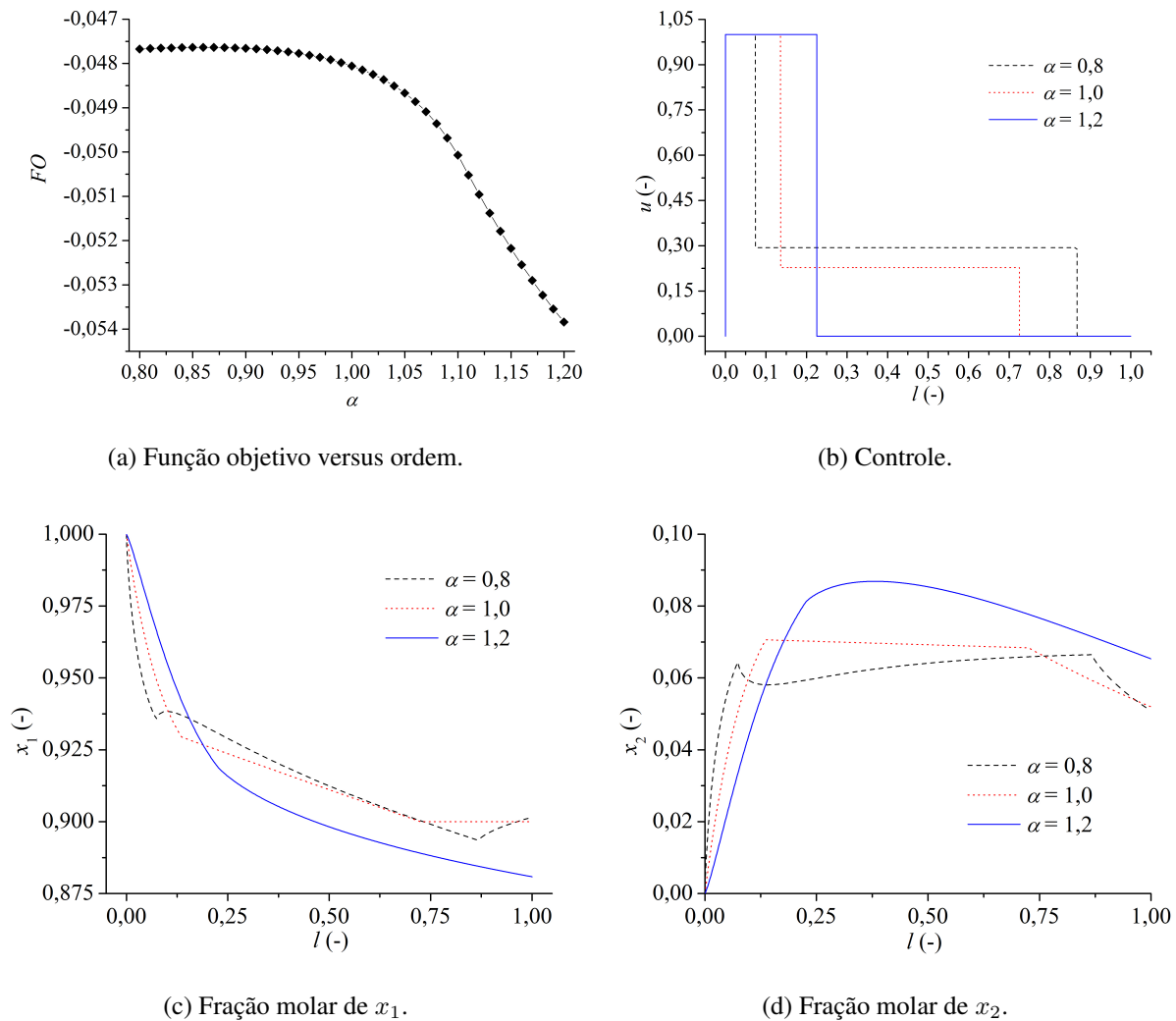


Figura 22 – Influência da ordem fracionária no valor da função objetivo e dos perfis de estado e controle para o problema da mistura de catalisadores.

### 5.7.2 REATOR BATELADA

Considere um reator batelada em que acontecem as reações paralelas  $A \xrightarrow{k_1} B$ ,  $A \xrightarrow{k_2} C$ . Ambas as reações são de primeira ordem e irreversíveis. O objetivo deste estudo é encontrar o perfil de temperatura ( $T$ ) em função do tempo ( $t$ ) que maximiza o rendimento da espécie  $B$  no tempo final  $t_f$ . Os balanços de massa para as espécies  $A$  e  $B$  são dadas como (ENGLAND; GÓMEZ; LAMOUR, 2005):

$$\dot{x}_1(t) = -(k_1(t) + k_2(t))x_1(t) \quad (5.50)$$

$$\dot{x}_2(t) = k_1(t)x_1(t) \quad (5.51)$$

em que  $x_1$  e  $x_2$  representam as concentrações das espécies  $A$  e  $B$ , respectivamente,  $k_i$  representa a  $i$ -ésima constante de reação, em que  $k_i = k_{i0}e^{-E_i/RT(t)}$  ( $i = 1, 2$ ),  $k_{10} = 10^6 \text{ s}^{-1}$ ,  $k_{20} = 5,1011 \text{ s}^{-1}$ ,  $E_1 = 10^4 \text{ cal/gmol}$  e  $E_2 = 2,104 \text{ cal/gmol}$  (ENGLAND; GÓMEZ; LAMOUR, 2005).

Este problema de controle ótimo foi estudado por Biegler (1984), Logsdon e Biegler (1989) e England, Gómez e Lamour (2005). Nestes trabalhos foi considerado que  $k_1(t) \approx u(t)$  e que  $k_2(t) \approx 0,5u^2(t)$ . Assim, o problema de controle ótimo é formulado como segue (em que  $t_f$  é igual a 1 s):

$$\min_{u(t)} FO = -x_2(t_f) \quad (5.52)$$

sujeito as seguintes restrições:

$$\dot{x}_1(t) = -(u(t) + 0,5u^2(t))x_1(t) \quad (5.53)$$

$$\dot{x}_2(t) = u(t)x_1(t) \quad (5.54)$$

$$x(0) = [1 \ 0]^T \quad (5.55)$$

Para resolver este estudo de caso foi considerado o algoritmo ED (STORN; PRICE, 1995) com os seguintes parâmetros: tamanho da população (25), número de gerações (250), taxa de perturbação (0,8), taxa de cruzamento (0,8), estratégia número 7 e 20 execuções independentes. Para esta configuração são necessárias  $25 + 25 \times 250$  avaliações da função objetivo. Nesta aplicação considera-se cinco elementos de controle ( $[u_1 \ u_2 \ u_3 \ u_4 \ u_5]$ ) definidos em cinco intervalos de tempo ( $[0 \ t_{s1} \ t_{s2} \ t_{s3} \ t_{s4} \ 1]$ ) de forma que  $0 \leq u_i \leq 5$  ( $i = 1, 2, \dots, 5$ ); e  $0 \leq t_{sj} \leq 1$  ( $j = 1, 2, \dots, 4$ ). É interessante ressaltar que o número de elementos de controle bem como os parâmetros usados no ED algoritmo foram definidos após terem sido feitas algumas avaliações preliminares.

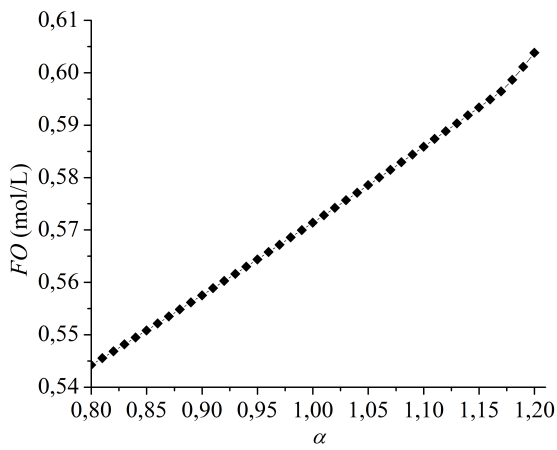
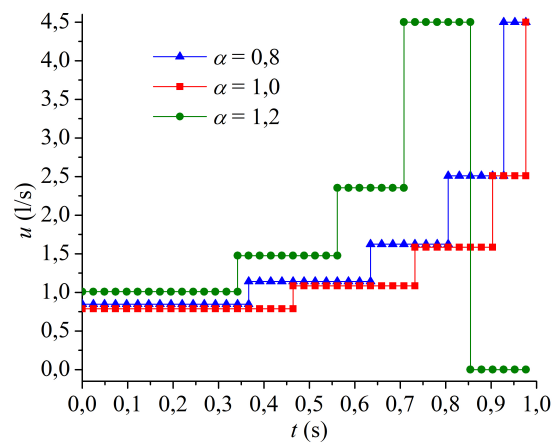
A Tabela 16 apresenta os melhores resultados obtidos para o problema do reator batelada considerando  $\alpha = [0,8 \ 1 \ 1,2]$  e NPC = 5. De forma geral, os resultados obtidos pela metodologia proposta (para  $\alpha$  igual a uma unidade) estão em concordância com os reportados por Biegler (1984), i.e.; o valor da função objetivo é próximo a 0,57. Também pode-se observar que o aumento do valor da ordem fracionária implica no incremento do valor da função objetivo, isto é; da concentração da espécie  $B$  no tempo final.

Em relação aos desvios padrão para cada ordem fracionária, observa-se um valor da magnitude de  $10^{-3}$  em relação a todas as execuções do algoritmo de ED. Isto demonstra que o algoritmo sempre convergiu para a solução do problema. Por fim, enfatiza-se que o tempo de processamento médio, em cada execução da estratégia de otimização, foi igual a, aproximadamente, 23,88 segundos.

A Figura 23 apresenta a variação da função objetivo com relação a ordem fracionária e os perfis de estado e controle. Na Figura 23 (a) observa-se que o aumento no valor do parâmetro implica no aumento do valor da  $FO$ . Fisicamente, isto significa que quanto maior o valor da ordem fracionária (associada ao valor da respectiva estratégia de controle) maior é o rendimento

Tabela 16 – Resultados obtidos para o problema do reator batelada considerando diferentes valores de  $\alpha$ .

|              | $\alpha = 0,8$ | $\alpha = 1$ | $\alpha = 1,2$ |
|--------------|----------------|--------------|----------------|
| $t_{s1}$ (s) | 0,4452         | 0,3551       | 0,3209         |
| $t_{s2}$ (s) | 0,7305         | 0,6181       | 0,5484         |
| $t_{s3}$ (s) | 0,8881         | 0,8007       | 0,6985         |
| $t_{s4}$ (s) | 0,9625         | 0,9129       | 0,8382         |
| $u_1$ (1/s)  | 0,7880         | 0,8472       | 1,0096         |
| $u_2$ (1/s)  | 1,0852         | 1,1418       | 1,4756         |
| $u_3$ (1/s)  | 1,5854         | 1,6236       | 2,3543         |
| $u_4$ (1/s)  | 2,5099         | 2,5092       | 4,5000         |
| $u_5$ (1/s)  | 4,4999         | 4,5000       | 0,0000         |
| $FO$ (mol/L) | 0,5442         | 0,5714       | 0,6038         |

(a)  $FO \times \alpha$ .

(b) Controle.

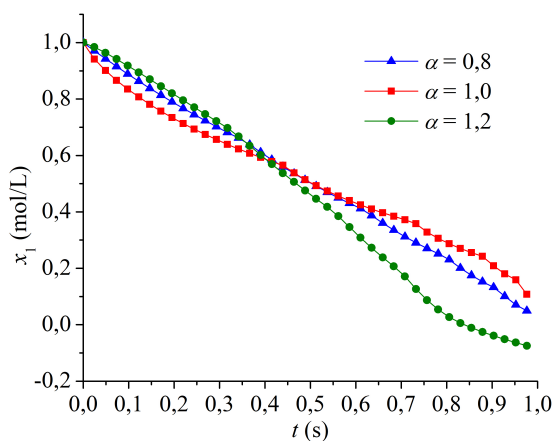
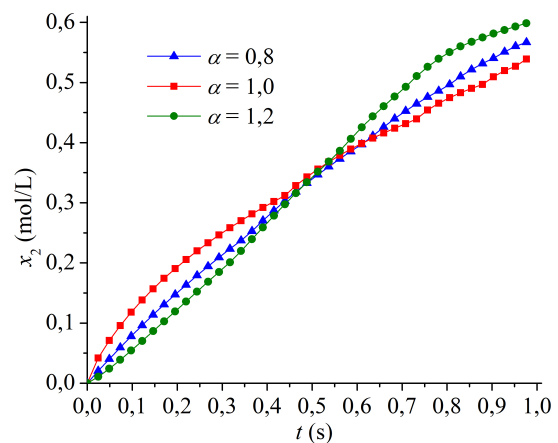
(c) Concentração  $x_1$ .(d) Concentração  $x_2$ .

Figura 23 – Influência da ordem fracionária no valor da função objetivo e perfis de estado e controle para o problema reator de batela.

do sistema reacional analisado. Já na Figura 23 (b) observa-se que, praticamente para todas as

ordens analisadas, que o perfil do controle é crescente. Este resultado está em concordância com aquele reportado por Biegler (1984). Finalmente para as Figuras 23 (c, d) observa-se um comportamento de redução para a espécie  $A$  e de aumento para a espécie  $B$ . Estes estão de acordo com o esperado fisicamente. Todavia, ressalta-se que para  $\alpha$  igual a 1,2; o perfil de  $x_1$  para tempos maiores do que, aproximadamente, 0,8 são fisicamente inviáveis, visto que a concentração tem sinal negativo. Neste caso, pode-se resolver novamente o PCOF com uma nova restrição de desigualdade, a saber,  $x_1 > 0$ . Assim, para este novo problema pode-se verificar se para a referida ordem, o valor dessa concentração ainda é fisicamente inviável.

Em resumo, a depender do valor da ordem e da estratégia de controle, é possível que se obtenha um perfil fisicamente inviável. Neste caso, pode-se restringir mais o problema de forma a verificar se com a adição de novas restrições este comportamento inviável do ponto de vista físico ainda continua.

### 5.7.3 SISTEMA MASSA-MOLA-AMORTECEDOR

Considere um sistema mecânico com dois graus de liberdade (ver a Figura 24) e que consiste de corpos com massas  $m_1$  e  $m_2$  conectados com molas com rigidez  $k_1$  e  $k_2$  e amortecedores com coeficientes lineares  $c_1$  e  $c_2$  conectados a uma estrutura rígida (VEERAKLAEW; MALISUWAN, 2006). Nesta figura,  $x_1$  e  $x_2$  representam os deslocamentos (m) e  $u_1$  e  $u_2$  as forças aplicadas (N) (variáveis de controle do problema em questão).

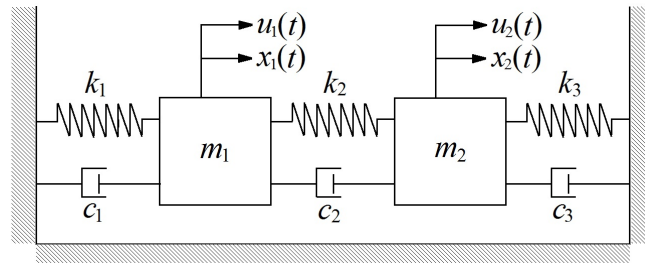


Figura 24 – Sistema massa-mola-amortecedor com dois graus de liberdade.

O modelo matemático que representa o fenômeno em análise é descrito por um sistema com duas equações diferenciais ordinárias de segunda ordem definidos em termos das acelerações dos corpos ( $\ddot{x}_1$  e  $\ddot{x}_2$ ). Neste caso, para resolver este modelo faz-se a redução de ordem, i.e., sejam as variáveis auxiliares definidas como:  $X_1 \equiv x_1$ ,  $X_2 \equiv \dot{x}_1$ ,  $X_3 \equiv x_2$  e  $X_4 \equiv \dot{x}_2$ . Assim, o sistema com dois graus de liberdade pode ser representado pela seguinte equação (VEERAKLAEW; MALISUWAN, 2006):

$$\dot{X} = AX + Bu \quad (5.56)$$

em que  $A$  e  $B$  são matrizes definidas como:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -(k_1 + k_2)/m_1 & -(c_1 + c_2)/m_1 & k_2/m_1 & c_2/m_1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ k_2/m_2 & c_2/m_2 & -(k_2 + k_3)/m_2 & -(c_2 + c_3)/m_2 \end{bmatrix} \quad (5.57)$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1/m_1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1/m_2 \end{bmatrix} \quad (5.58)$$

Para esta aplicação deseja-se obter os valores dos controles  $u_1$  e  $u_2$  de forma a minimizar o funcional  $J$ , definido como sendo a integral do somatório dos controles no intervalo  $0 \leq t \leq t_f$ . Além do modelo descrito anteriormente, neste caso também são consideradas as seguintes condições de contorno  $X(t_0) = (5 \ 0 \ 10 \ 0)^T$  e  $X(t_f) = (0 \ 0 \ 0 \ 0)^T$ , onde  $t_0 = 0$  s e  $t_f = 2$  s. Para a simulação dos modelos os seguintes parâmetros são considerados (VEERAKLAEW; MALISUWAN, 2006):  $m_1 = m_2 = 1$  kg,  $c_1 = c_3 = 1,0$  N.s/m,  $c_2 = 2$  N.s/m,  $k_1 = k_2 = k_3 = 3,0$  N/m.

Para resolver este PCOF considera-se o algoritmo ED (STORN; PRICE, 1995) com os seguintes parâmetros: tamanho da população (25), número de gerações (250), taxa de perturbação (0,8), taxa de cruzamento (0,8) e estratégia número 7 (o que implica em  $25 + 25 \times 250$  avaliações da função objetivo). De acordo com Rutquist e Edvall (2010), a solução ótima deste estudo de caso segue uma estratégia do tipo *on-off* com três fases (elementos de controle) para cada variável de controle. Assim, cada estratégia de controle pode ser definida como sendo igual ao vetor  $[0 \ 9 \ 0]$ , i.e.; são empregados três elementos de controle em que são conhecidos os valores do controle em cada fase, mas são desconhecidos os instantes de tempo em que tais estratégias são aplicadas. Neste caso, para a primeira estratégia de controle tem-se o seguinte domínio:  $0,2 \leq t_{s1} \leq 1,2$  e  $1,201 \leq t_{s2} \leq 1,915$ . Já para a segunda estratégia de controle tem-se o seguinte domínio:  $0,2 \leq t_{s3} \leq 1,2$  e  $1,201 \leq t_{s4} \leq 1,915$ .

Na Tabela 17 são apresentados os resultados obtidos para o problema massa-mola-amortecedor com restrição de fim para diferentes valores de  $\alpha$  ( $[0,8 \ 0,94 \ 1 \ 1,02 \ 1,2]$ ).

Nesta tabela, para  $\alpha$  igual a unidade, o resultado obtido pela metodologia proposta (16,4707 N.s) é muito próximo à aquele obtido por Rutquist e Edvall (2010), bem como o atendimento de todas as restrições de fim são garantidas. Isto demonstra a qualidade da associação entre o MCO o algoritmo de ED nesta aplicação. Quando o valor da ordem se afasta da unidade percebe-se que as restrições de fim não são, completamente, atendidas, i.e.; a solução ótima não foi encontrada. Este não atendimento das restrições é mais evidente para  $\alpha$  iguais a 0,8 e 1,2. Na prática isto evidencia que ao se considerar o sistema com derivadas fracionárias, não implica que



Tabela 17 – Resultados obtidos para o problema massa-mola-amortecedor considerando diferentes valores para  $\alpha$ .

|                  | $\alpha = 0,8$ | $\alpha = 0,94$ | $\alpha = 1$ | $\alpha = 1,02$ | $\alpha = 1,2$ |
|------------------|----------------|-----------------|--------------|-----------------|----------------|
| $t_{s1}$ (s)     | 1,2000         | 0,7244          | 0,6319       | 0,6866          | 0,2000         |
| $t_{s2}$ (s)     | 1,9459         | 1,5613          | 1,5280       | 1,5511          | 1,9131         |
| $t_{s3}$ (s)     | 1,2000         | 1,1331          | 0,6270       | 0,3695          | 0,2000         |
| $t_{s4}$ (s)     | 1,2010         | 1,5657          | 1,5622       | 1,6092          | 1,5883         |
| $X_1(t_f)$ (m)   | 0,7438         | 0,0002          | -0,0004      | 0,0000          | -1,0284        |
| $X_2(t_f)$ (m/s) | 0,0807         | -0,0008         | 0,0001       | -0,0002         | -0,0402        |
| $X_3(t_f)$ (m)   | 0,5153         | -0,0003         | -0,0010      | 0,0000          | -2,0809        |
| $X_4(t_f)$ (m/s) | -0,7782        | -0,0001         | -0,0004      | 0,0000          | 1,0395         |
| $FO$ (N.s)       | 7,1552         | 11,1932         | 16,4707      | 19,1052         | 29,8331        |

existirá uma ordem associada a uma estratégia de controle de forma que uma solução ótima seja encontrada (melhor valor em termos da função objetivo associada ao atendimento de todas as restrições de fim). Também pode-se observar que o valor da função objetivo aumentou com o incremento do valor da ordem fracionária. No que tange aos desvios padrão para cada ordem fracionária analisada considerando o algoritmo de ED, valores da magnitude de  $10^{-4}$ , em relação a função objetivo, foram observados para este parâmetro. O tempo de processamento médio requerido, em cada execução do algoritmo de ED, foi igual a, aproximadamente, 368 segundos.

A Figura 25 apresenta a variação do valor da função objetivo  $J$  em relação a ordem fracionária, bem como o atendimento das restrições de fim para cada variável de projeto.

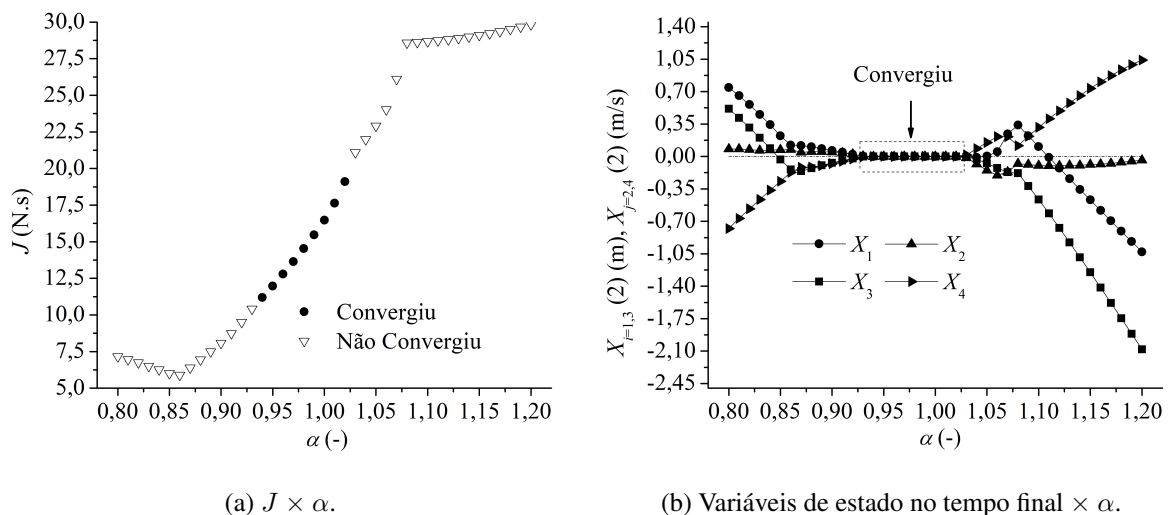


Figura 25 – Influência da ordem fracionária no valor da função objetivo e atendimento das condições de fim.

Nas Figuras 25 (a, b) é possível observar que para ordens mais distantes da unidade não foi possível atender uma ou mais condições de fim, i.e.; na prática o problema não convergiu (ver a Tabela 17 para as ordens fracionárias iguais a 0,8 e 1,2). Isto significa que, ao se variar a

ordem fracionária e ainda exigir o atendimento das restrições de fim, não foi possível obter uma estratégia de controle com as características apresentadas para esta aplicação. Este resultado é bem interessante, já que o mesmo permite concluir que a variação da ordem fracionária para valores distantes do valor de referência (neste caso da unidade) podem levar ao não atendimento de uma dada condição do problema de otimização. Finalmente, para os valores que convergiram, observa-se que a função objetivo cresce com o aumento do valor da ordem fracionária.

Já na Figura 26 são apresentados os perfis das variáveis de estado e controle considerando alguns valores para  $\alpha = [0,94 \ 1 \ 1,02]$  e NPC = 5. Neste caso, em se tratando das variáveis de controle, para cada ordem fracionária observa-se uma combinação diferente entre os dois controles, o que corresponde a diferentes perfis de deslocamento e de velocidade. É importante destacar que para estes valores de  $\alpha$ , todas as condições de fim foram satisfeitas, conforme pode ser observado em cada uma destas figuras e que estes estão em concordância com aqueles reportados por Rutquist e Edvall (2010) para  $\alpha$  igual a unidade. Nas figuras referentes as variáveis de estado também é possível observar que, o fato de  $\alpha$  variar considerando valores próximos a unidade e isso ocasionar a variação da função objetivo (ver a Tabela 17) para uma estratégia de controle *on-off*, demonstra a sensibilidade deste problema em relação a ordem fracionária considerada e a estratégia de controle computada pelo algoritmo de otimização.

## 5.8 RESOLUÇÃO DE PCOFs MULTI-OBJETIVOS USANDO O MÉTODO DIRETO

Nesta seção serão avaliados estudos de caso no contexto multi-objetivo de forma a avaliar a aplicabilidade da metodologia proposta para a simulação de EDOFs. Para essa finalidade, conforme apresentado no capítulo anterior, foi proposto o algoritmo *Multi-objective Optimization Stochastic Fractal Search* (MOSFS). Este é baseado na associação entre o algoritmo de Busca Fractal Estocástica com os operadores de ordenamento por *rank* e truncamento das soluções não dominadas.

### 5.8.1 MISTURA DE CATALISADORES

Esta aplicação considera um reator de fluxo pistonado em regime permanente onde acontecem reações reversíveis e irreversíveis ( $S_1 \leftrightarrow S_2 \rightarrow S_3$ ) (GUNN; THOMAS, 1965). Matematicamente, este problema, em sua forma adimensional, pode ser formulado como (GUNN; THOMAS, 1965):

$$\frac{d^\alpha x_1(t)}{dl^\alpha} = -u(x_1 - 10x_2), \quad x_1(0) = 1 \quad (5.59)$$

$$\frac{d^\alpha x_2(t)}{dl^\alpha} = u(x_1 - 10x_2) - (1 - u)x_2, \quad x_2(0) = 0 \quad (5.60)$$

onde  $l$  representa o comprimento do reator,  $x_1$  e  $x_2$  são as frações molares das espécies  $S_1$  e  $S_2$ , respectivamente,  $u$  ( $0 \leq u \leq 1$ ) é a proporção de mistura entre os dois catalisadores considerados

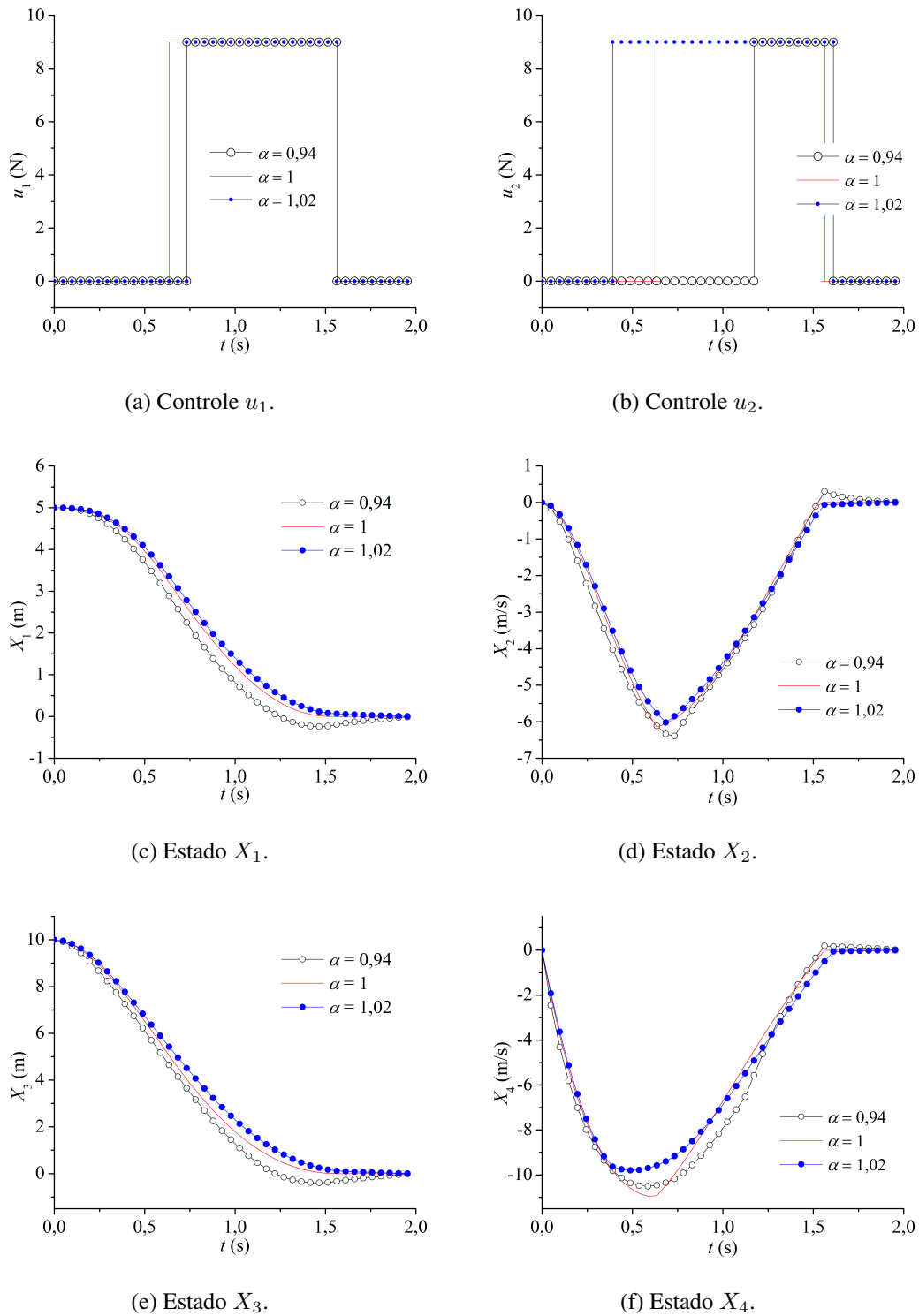


Figura 26 – Influência da ordem fracionária no valor dos perfis de estado e controle para o problema da massa-mola-amortecedor com restrição de fim.

neste processo, sendo a mesma considerada como variável de controle. A função objetivo consiste em determinar a forma como os dois catalisadores devem ser misturados de forma a maximizar a produção da espécie  $S_3$ . No contexto mono-objetivo e com ordem inteira, este problema foi resolvido considerando diferentes abordagens. [Logsdon \(1990\)](#) resolveu este problema usando a

colocação ortogonal em elementos finitos. [Vassiliadis \(1993\)](#) também resolveu esse problema usando a técnica de parametrização de controle. [Lobato \(2004\)](#) propôs uma abordagem híbrida (associação entre as abordagens direta e indireta) para obter o perfil ótimo da variável de controle. [Lobato e Steffen \(2010\)](#) propuseram uma metodologia que associa a parametrização de controle ao algoritmo de Colisão Multipartículas. Já no contexto multi-objetivo e com ordem inteira, [Souza, Lobato e Gedraite \(2015\)](#) utilizaram a técnica de parametrização de controle associada ao algoritmo de ED a uma abordagem para o tratamento de robustez para resolver este problema.

Na presente contribuição, o problema multi-objetivo definido por [Souza, Lobato e Gedraite \(2015\)](#) é considerado. Este é formulado considerando a maximização da produção da espécie  $S_3$  ( $f_1$ ) no comprimento final (igual a uma unidade) e a minimização da quantidade de catalisadores utilizado durante o processo ( $f_2$ ). Matematicamente, estes objetivos (ambos escritos na forma de minimização) são descritos como:

$$\min f_1 = -(1 - x_1 - x_2) \quad (5.61)$$

$$\min f_2 = \int_0^1 u dl \quad (5.62)$$

Para avaliar os resultados obtidos pela metodologia proposta, considera-se o tradicional algoritmo NSGA-II (*Non-dominated Sorting Genetic Algorithm*) ([DEB, 2011](#)). Os parâmetros considerados pelo NSGA-II são: tamanho da população (50), número de gerações (200), probabilidade de cruzamento (0,9), probabilidade de mutação (0,02) e torneio binário como estratégia de seleção. Já os parâmetros considerados pelo MOSFS são: tamanho da população (50), número de gerações (200) e número de difusões (2). Como estratégia de controle,  $u$  é discretizada usando três elementos de controle constantes por partes. Neste caso, este problema têm cinco variáveis de projeto: três controles ( $u_1$ ,  $u_2$  e  $u_3$ ) (constantes por partes) e dois comprimentos discretizados ( $l_{s1}$  e  $l_{s2}$ ). Na prática isto significa que:  $0 \leq u_1 \leq l_{s1}$ ,  $l_{s1} < u_2 \leq l_{s2}$  e  $l_{s2} < u_3 \leq 1$ . Para resolver este problema considerando o MCO foram utilizados 5 pontos de colocação para cada variável de estado. O critério de parada considerado em cada algoritmo multi-objetivo foi o número (máximo) de gerações. Considerando os parâmetros apresentados, tanto o MOSFS quanto o NSGA II requereram  $50 + 50 \times 200$  avaliações da função objetivo.

A Figura 27 apresenta as Curvas de Pareto obtidas pelo NSGA-II e MOSFS para  $\alpha = 1$ , bem como a influência da ordem ([0,8 0,9 1,0 1,1 1,2]) nos resultados obtidos pelo MOSFS. Na Figura 27 (a) observa-se que as soluções obtidas pelo MOSFS e pelo NSGA-II considerando a ordem inteira ( $\alpha = 1$ ) são equivalentes, i.e.; o algoritmo multi-objetivo proposto foi capaz de encontrar a mesma curva de Pareto que o NSGA-II. Este resultado está de acordo com o reportado por [Souza, Lobato e Gedraite \(2015\)](#). Já na Figura 27 (b) pode-se observar a influência da ordem fracionária na curva de Pareto. Para valores de  $f_1$  maiores que, aproximadamente, -0,02, o formato da curva de Pareto não muda em relação a  $\alpha$ . Este resultado implica valores menores de quantidade de catalisador e, conseqüentemente, valores menores para o produto  $S_3$  (ver a Figura 28 (c)). Por outro lado, para valores de  $f_1$  menores que, aproximadamente, -0,02, a curva

de Pareto é influenciada pelo parâmetro  $\alpha$ , i.e.; o aumento deste parâmetro aproxima a curva de Pareto do eixo  $f_1$ . Isso implica em maiores quantidades de catalisador e, conseqüentemente, mais produto  $S_3$ . Neste caso, pode-se avaliar o compromisso entre os dois objetivos de forma que o binômio maximização de  $S_3$  versus minimização da quantidade de catalisadores seja obtida para cada ordem fracionária analisada.

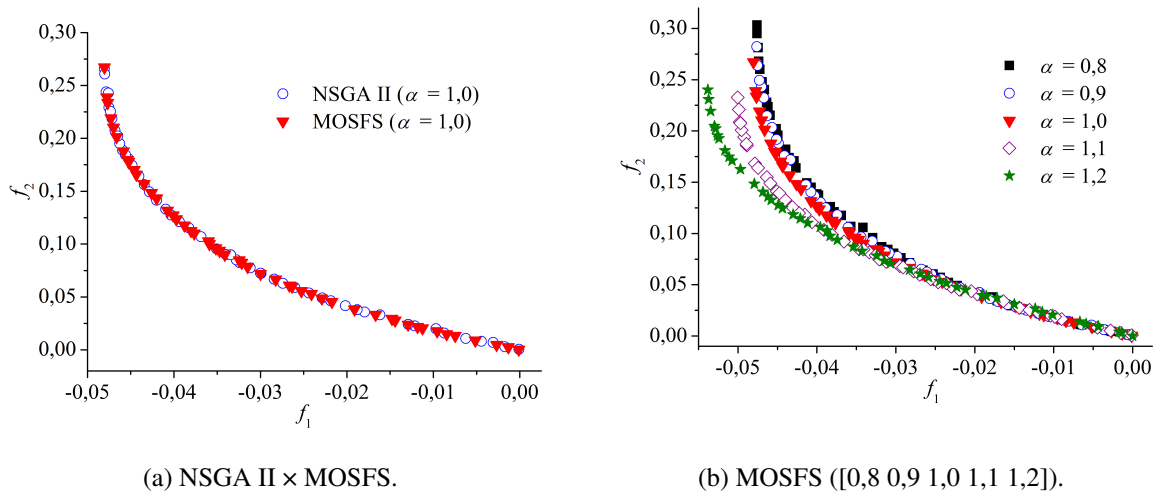


Figura 27 – Curvas de Pareto para o problema da mistura de catalisadores.

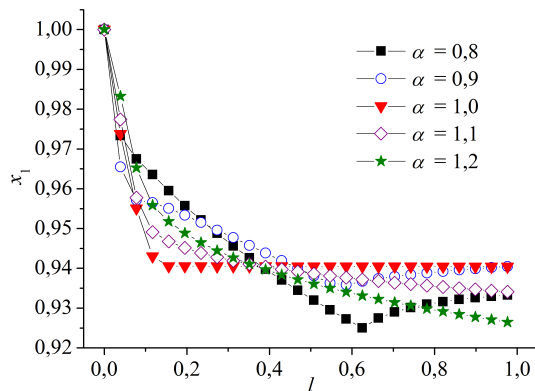
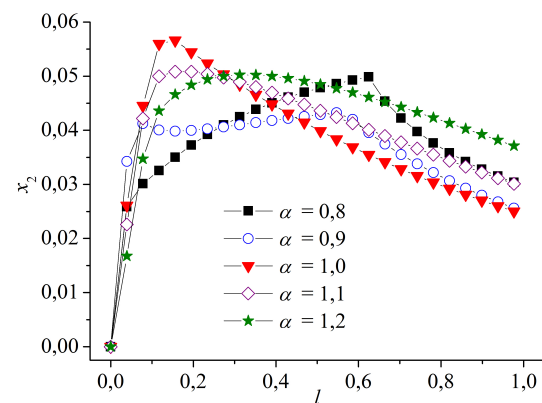
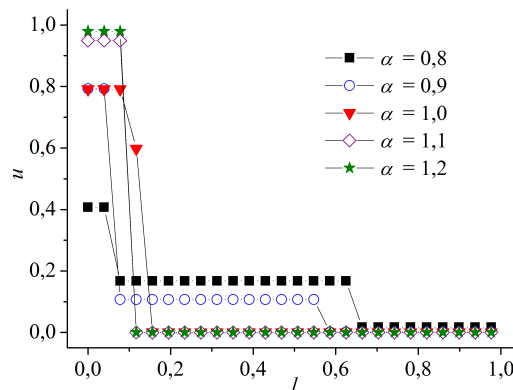
A Tabela 18 apresenta alguns pontos selecionados da Curva de Pareto usando o algoritmo MOSFS considerando diferentes valores para o parâmetro  $\alpha$ . É importante mencionar que esses pontos foram determinados considerando a menor distância entre cada ponto pertencente a esta curva e o ponto de referência, definido como os valores médios dos eixos  $f_1$  e  $f_2$ , respectivamente. De forma geral, estes representam um bom compromisso entre os dois objetivos considerados, i.e.; para cada ordem fracionária, cada um destes pontos pode ser utilizado na prática.

Tabela 18 – Pontos da curva de Pareto para o problema de mistura do catalisadores.

|           | $\alpha = 0,8$ | $\alpha = 0,9$ | $\alpha = 1$ | $\alpha = 1,1$ | $\alpha = 1,2$ |
|-----------|----------------|----------------|--------------|----------------|----------------|
| $l_{S_1}$ | 0,0508         | 0,0572         | 0,0982       | 0,0925         | 0,0881         |
| $l_{S_2}$ | 0,6282         | 0,5692         | 0,1282       | 0,05886        | 0,0882         |
| $u_1$     | 0,4072         | 0,7926         | 0,7912       | 0,9492         | 0,9796         |
| $u_2$     | 0,1676         | 0,1074         | 0,5977       | 0,0003         | 0,0206         |
| $u_3$     | 0,0173         | 0,0013         | 0,0003       | 0,0005         | 0,0003         |
| $f_1$     | -0,0369        | -0,0344        | -0,0352      | -0,0366        | -0,0374        |
| $f_2$     | 0,1175         | 0,0967         | 0,0960       | 0,0920         | 0,0937         |

A Figura 28 apresenta os perfis referentes as frações molares das espécies  $S_1$  e  $S_2$ , bem como as estratégias de controle considerando os pontos listados na Tabela 18. Na Figura 28 (c) observa-se, para a primeira fase, maiores valores para o controle em função da ordem fracionária. Já para a segunda e terceira fases observa-se a estrutura singular-min, respectivamente. Este está de acordo com o esperado para o problema da mistura de catalisadores, conforme observado

por Souza, Lobato e Gedraite (2015). A partir da variação da ordem fracionária e da respectiva estratégia de controle computada, obtêm-se os perfis para as variáveis de estado, conforme observado nas Figuras 28 (a) - 28 (b). Fisicamente estas estão em concordância com o esperado, i.e.; a redução da fração molar referente a espécie  $S_1$  e o aumento e posterior redução da fração molar da espécie  $S_2$ , visto que esta é consumida para produzir  $S_3$ .

(a) Fração molar da espécie  $S_1$ .(b) Fração molar da espécie  $S_2$ .

(c) Variável de controle.

Figura 28 – Perfis de variáveis de estado e de controle considerando diferentes ordens fracionárias para o problema mistura do catalisador.

## 5.8.2 REATOR BATELADA

Este último estudo de caso considera um reator do tipo batelada onde acontecem as reações químicas  $A \rightarrow B \rightarrow C$ . Este sistema reacional foi estudado por Bilous e Amundson (1956), sendo o mesmo utilizado como estudo de caso na área de controle por Marroquin e Luyben (1973), Luus e Okongwu (1999) e Lobato e Steffen (2010). Em se tratando de reações consecutivas, é necessário maximizar a produção do componente desejado (neste caso  $B$ ). A reação em cada etapa é assumida como sendo de primeira ordem, sendo os balanços de massa no

contexto fracionário:

$$\frac{d^\alpha x_1(t)}{dt^\alpha} = -x_1 \left( 5,35 \times 10^{10} \exp \left( -\frac{900}{u} \right) \right) \quad (5.63)$$

$$\frac{d^\alpha x_2(t)}{dt^\alpha} = x_1 \left( 5,35 \times 10^{10} \exp \left( -\frac{900}{u} \right) \right) - x_2 \left( 4,61 \times 10^{17} \exp \left( -\frac{15000}{u} \right) \right) \quad (5.64)$$

em que  $t$  é o tempo (h),  $x_1$  e  $x_2$  representam as concentrações (mol/L) das espécies  $A$  e  $B$ , respectivamente.  $u$  é a variável de controle que, para nesta aplicação é a temperatura de operação do processo ( $300 \text{ K} \leq u \leq 400 \text{ K}$ ). As condições iniciais são definidas como  $[x_1(0) \ x_2(0)] = [0,95 \ 0,05]$ .

O problema de controle ótimo multi-objetivo consiste em maximizar a concentração do componente  $B$  e minimizar o tempo total de operação ( $t_f$ ). Matematicamente, estes são definidos como:

$$\min f_1 = t_f \quad (5.65)$$

$$\max f_2 = x_2(t_f) \quad (5.66)$$

Assim, como no estudo de caso anterior, também se considera o algoritmo NSGA-II para fins de comparação com o MOSFS. Neste caso, os parâmetros considerados no NSGA-II: tamanho da população (50), número de gerações (200), probabilidade de cruzamento (0,9), probabilidade de mutação (0,02) e torneio binário como estratégia de seleção. Já os parâmetros do MOSFS são: tamanho da população (50), número de gerações (200) e número de difusões (2). Para resolver este estudo de caso foram consideradas 10 variáveis de controle (constantes por partes) em 10 posições ao longo do tempo de operação, totalizando 20 variáveis de projeto ( $u_1, u_2, \dots, u_{10}, ts_1, ts_2, \dots, ts_{10} = t_f$ ). Nesse caso, 10 pontos de colocação para cada variável de estado foram usados no MCO. O critério de parada usado foi o número (máximo) de gerações. Considerando os parâmetros apresentados, tanto o MOSFS quanto o NSGA-II exigiram  $50 + 50 \times 200$  avaliações de função objetivo.

A Figura 29 apresenta as curvas de Pareto obtidas considerando o NSGA-II e o MOSFS para  $\alpha = 1$ , bem como a curva de Pareto para diferentes valores de  $\alpha$  ( $[0,9 \ 0,95 \ 1,0 \ 1,05 \ 1,1]$ ). Na Figura 29 (a) observa-se que a curva de Pareto obtida pelo MOSFS está em concordância com aquela obtida pelo NSGA-II para  $\alpha = 1$ . Isto demonstra que o algoritmo proposto foi capaz de obter uma boa estimativa para a curva de Pareto em comparação com a tradicional técnica de otimização multi-objetivo baseada nos algoritmos genéticos. Fisicamente, como esperado, o aumento do tempo total de operação ( $t_f$ ) implica na maximização do componente  $B$  ( $x_2$ ). Já na Figura 29 (b) é possível observar a influência da ordem fracionária na curva de Pareto obtida pelo MOSFS. Para este caso, o aumento no valor deste parâmetro implica em aumento na quantidade de produto desejada. Além disso, observa-se o deslocamento da curva, mas não a mudança no seu formato.

A Tabela 19 apresenta alguns pontos selecionados da curva de Pareto obtidos pelo algoritmo MOSFS considerando diferentes valores de  $\alpha$ . Conforme comentado anteriormente,

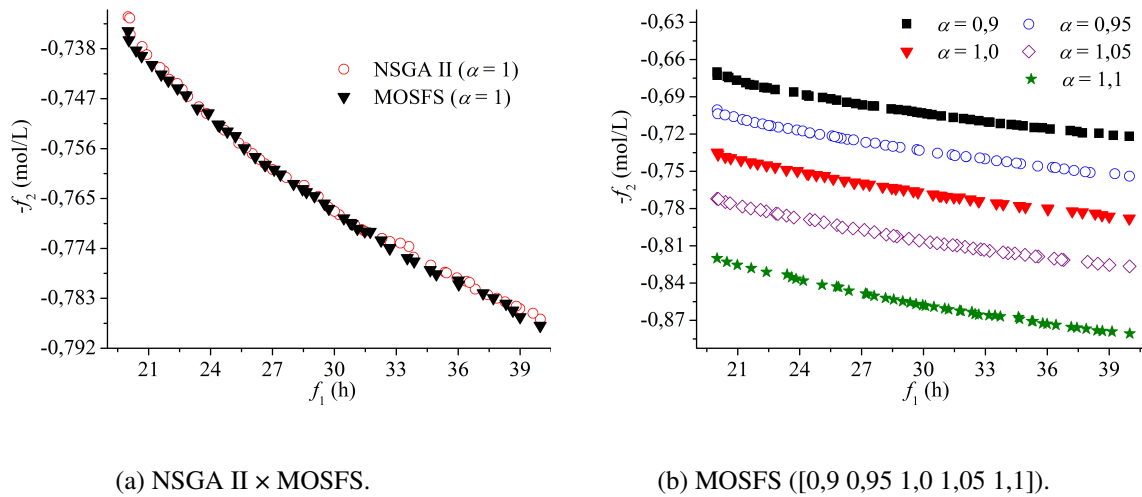


Figura 29 – Curvas de Pareto para o problema do reator batela considerando diferentes valores do parâmetro  $\alpha$ .

estes pontos foram calculados considerando a menor distância entre cada ponto pertencente à curva e o ponto de referência (definido como os valores médios para os eixos  $f_1$  e  $f_2$ ). Nesta tabela pode-se observar a variação do tempo de operação em relação a máxima concentração de  $B$  para cada ordem fracionária. Como destacado anteriormente (ver a Figura 29 (b)), maiores valores de  $\alpha$  implicam em maiores concentrações de produto.

A Figura 30 apresenta os perfis de concentração e de controle para os pontos apresentados na Tabela 19. Em relação ao controle observa-se uma tendência, independentemente do valor da ordem, de redução do valor desta variável, conforme apresentado na Figura 30 (c). Para estes perfis de controle e para cada ordem fracionária considerada, observa-se que os perfis de estado apresentam variações significativas em relação a  $\alpha$  igual a unidade. Todavia, estes apresentam coerência física, visto que a concentração da espécie  $A$  sempre decaia (já que este é reagente) e a concentração da espécie  $B$  sempre aumenta (apesar deste estar sendo consumido para virar  $C$ ). Isto está relacionado com os parâmetros (fator pré-exponencial e energia de ativação) dos balanços de massa (Eq.(5.63) e Eq.(5.64)). Na prática, a variação destes perfis faz com que exista, para cada ordem fracionária, curvas de Pareto distantes entre si, conforme observado na Figura 29 (b).

## 5.9 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este capítulo apresentou aplicações envolvendo a metodologia proposta. A grande maioria das aplicações trata da resolução de PCOFs usando a abordagem direta nos contextos mono e multi-objetivo. Todavia, outros tipos de aplicações também foram estudados, a saber, o problema de simulação, o problema inverso e o problema de controle ótimo usando a abordagem indireta. De forma geral, os resultados obtidos demonstram que a metodologia proposta foi capaz de obter boas estimativas para os perfis considerando as ordens inteira e fracionária.



Tabela 19 – Pontos da curva de Pareto para o problema do reator batelada.

|                | $\alpha = 0,9$ | $\alpha = 0,95$ | $\alpha = 1$ | $\alpha = 1,05$ | $\alpha = 1,1$ |
|----------------|----------------|-----------------|--------------|-----------------|----------------|
| $ts_1$ (h)     | 4,7068         | 5,0577          | 1,5507       | 1,7453          | 1,3067         |
| $ts_2$ (h)     | 5,0099         | 5,3516          | 4,2127       | 4,3211          | 3,8497         |
| $ts_3$ (h)     | 8,2123         | 5,6795          | 9,2460       | 8,5656          | 8,2515         |
| $ts_4$ (h)     | 12,5058        | 9,0974          | 12,2914      | 12,8949         | 12,0713        |
| $ts_5$ (h)     | 12,5687        | 9,4231          | 14,7734      | 15,6804         | 15,9089        |
| $ts_6$ (h)     | 14,8757        | 15,1439         | 16,7935      | 17,5783         | 17,6034        |
| $ts_7$ (h)     | 18,8755        | 20,2971         | 17,1344      | 19,3804         | 21,3239        |
| $ts_8$ (h)     | 20,2662        | 22,6687         | 20,8722      | 19,8627         | 23,2326        |
| $ts_9$ (h)     | 24,4475        | 23,1565         | 23,0431      | 23,4651         | 24,5849        |
| $ts_{10}$ (h)  | 29,1873        | 28,8674         | 29,0342      | 28,7125         | 29,9656        |
| $u_1$ (K)      | 334,6116       | 334,5286        | 339,1207     | 340,5359        | 341,1192       |
| $u_2$ (K)      | 326,2002       | 326,9405        | 333,2090     | 332,7365        | 337,1465       |
| $u_3$ (K)      | 331,1688       | 324,1365        | 329,7018     | 330,2817        | 331,8534       |
| $u_4$ (K)      | 330,4949       | 332,5975        | 326,5322     | 327,0254        | 326,5687       |
| $u_5$ (K)      | 313,2508       | 328,6661        | 328,8431     | 327,3400        | 320,9891       |
| $u_6$ (K)      | 328,3307       | 330,0792        | 328,6064     | 323,7539        | 317,1096       |
| $u_7$ (K)      | 327,1645       | 327,9285        | 325,9316     | 324,0437        | 315,1164       |
| $u_8$ (K)      | 328,3302       | 329,0283        | 327,1435     | 318,9952        | 308,6127       |
| $u_9$ (K)      | 331,5307       | 333,4724        | 325,7436     | 320,4324        | 307,8603       |
| $u_{10}$ (K)   | 333,7627       | 330,0574        | 324,7310     | 322,7090        | 307,3735       |
| $f_1$ (h)      | 29,1873        | 28,8674         | 29,0342      | 28,7125         | 29,9656        |
| $-f_2$ (mol/K) | -0,7011        | -0,7307         | -0,7646      | -0,8025         | -0,8578        |

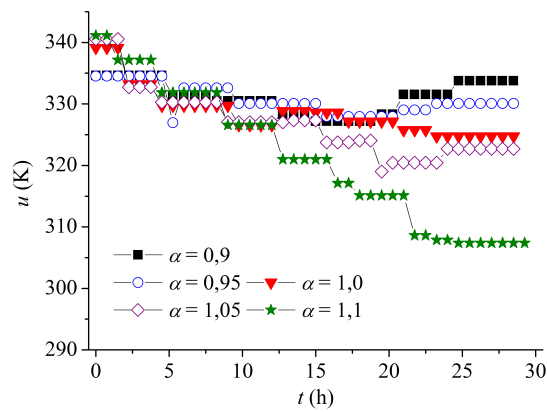
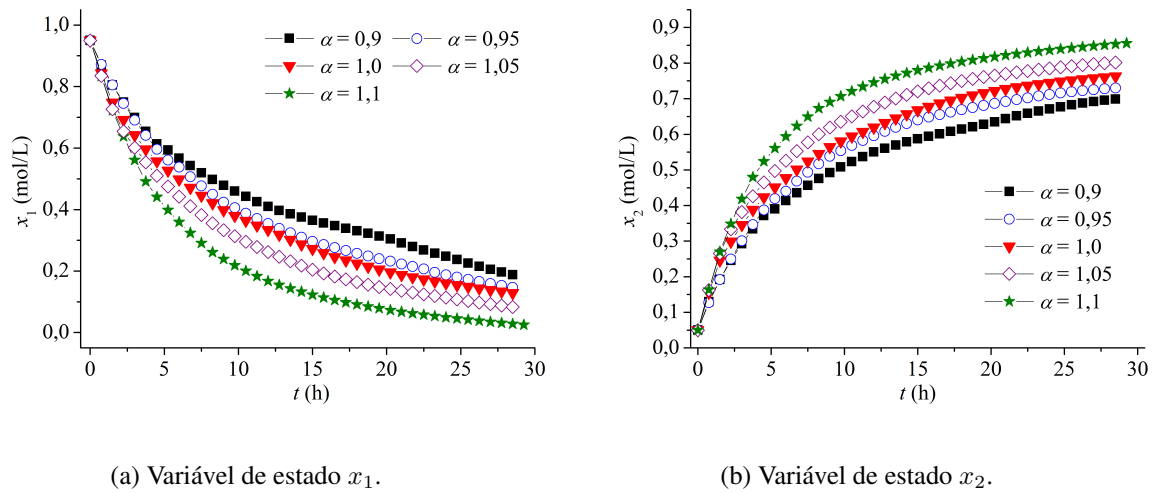


Figura 30 – Perfis de variáveis de estado e de controle considerando diferentes ordens fracionárias para o problema reator batelada.

# 6 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

## 6.1 CONCLUSÕES

A partir dos resultados apresentados no capítulo anterior é possível destacar os seguintes pontos.

- Para uma função polinomial, expressão considerada no desenvolvimento do MCO, os tipos de derivadas analisadas apresentaram resultados similares em relação à definição proposta por S. F. Lacroix (derivada fracionária de uma função polinomial genérica). Neste caso, para os estudos de caso desenvolvidos nesta tese considerou-se a derivada do tipo Caputo devido à facilidade de interpretação física dos valores iniciais (por definição, a sua derivada fracionária é equivalente à derivada de ordem inteira de uma integral de ordem arbitrária).
- Em relação à simulação de problemas diferenciais fracionários, foram resolvidos estudos de casos matemáticos e um sistema massa-mola-amortecedor com diferentes configurações. De forma geral, os resultados obtidos demonstraram que a estratégia proposta foi capaz de obter boas estimativas para os perfis simulados quando comparados com outras estratégias (solução analítica ou o método preditor-corretor do tipo Adams-Bashforth-Moulton). Como esperado, o aumento do número de pontos de colocação implicou na redução do erro computado. Em contrapartida, o tempo de processamento requerido aumenta com o incremento deste parâmetro. Isto se deve ao aumento do número de equações que devem ser resolvidas no MCO. Com a variação da ordem fracionária foi possível observar a influência que este parâmetro tem nos perfis simulados. Por fim, pode-se avaliar o binômio convergência versus custo computacional de forma que o número de pontos de colocação ótimo possa ser obtido para cada aplicação. Ressalta-se que a obtenção do número de pontos de colocação ótimo não foi objeto de estudo neste trabalho.
- Foi formulado e resolvido um problema inverso para fins da determinação dos parâmetros cinéticos e da ordem fracionária usando dados experimentais reais. Os resultados obtidos considerando o processo de fermentação da enzima lacase demonstraram que, para esta aplicação, a inserção da ordem como variável de projeto não fez com que o valor da função objetivo fosse reduzida significativamente. Todavia, não se pode generalizar esta conclusão para toda e qualquer aplicação, já que aumentar o número de graus de liberdade do problema inverso significa aumentar a chance de melhora do valor da função objetivo.

- É importante ressaltar que a variação indiscriminada no valor da ordem fracionária pode resultar em perfis fisicamente inviáveis. Além disso, representar um problema físico que, tradicionalmente é modelado por uma derivada primeira, por uma derivada segunda não é uma estratégia interessante, visto que isso causaria uma descaracterização do processo em análise. Em resumo, quanto se propõe utilizar uma derivada fracionária tem-se como meta, a priori, a flutuação da ordem em torno da derivada inteira. Esta estratégia foi utilizada na grande maioria das aplicações realizadas neste trabalho.
- O MCO estendido para o contexto fracionário foi aplicado em PCOFs via abordagem indireta. Neste caso, o problema original (controle ótimo fracionário) é transformado em um equivalente algébrico-diferencial fracionário de valor no contorno via aplicação das condições de otimalidade no contexto fracionário. Para esta finalidade o código OTIMA, idealizado para o contexto inteiro, foi atualizado para o contexto fracionário. Neste código as equações de otimalidade para o PCOF são geradas automaticamente usando uma ferramenta de cálculo simbólico, cujo objetivo é reduzir erros referentes a manipulação destas equações. Para as aplicações avaliadas considerando a abordagem indireta foi possível perceber que a metodologia proposta obteve boas estimativas em comparação com a literatura especializada.
- No que tange a aplicação do método direto no contexto mono-objetivo, estudos de caso puramente matemáticos e que apresentam singularidades foram avaliados. Os resultados obtidos permitiram avaliar como a ordem fracionária influencia no valor da função objetivo. Além disso, também foi possível observar que a metodologia proposta foi capaz de obter boas estimativas em relação a literatura especializada. Em relação as aplicações de engenharia, foram analisados estudos de caso com diferentes níveis de complexidade, a saber, o problema da mistura de catalisadores, o problema do reator de batelada e o sistema massa-mola-amortecedor. Em cada uma destas aplicações foi possível observar a influência da ordem fracionária nos perfis físicos e no valor da função objetivo. No caso do problema da mistura de catalisadores, valores da ordem menores do que, aproximadamente 0,9 resultavam em um valor de função objetivo praticamente constante. Já para valores acima de 0,9 esta função FO decrescia (lembrando que o problema é de maximização). Já para o problema do reator batelada foi observado que o aumento da ordem fracionária implica no aumento do valor da função objetivo. Finalmente, para o sistema massa-moal-amortecedor foi observado que nem toda ordem fracionária associada ao perfil de controle obtido pelo algoritmo de otimização implica no atendimento de restrições de fim. Isto implica que, ao variar a ordem fracionária associada a um dado perfil de controle, a integração deste sistema resulta em um perfil que, não necessariamente, vai atender uma ou mais restrições de fim. Em resumo, a ordem fracionária influencia diretamente os perfis simulados e a sua associação com os perfis de controle implicam, como esperado, em soluções particulares, i.e., para cada valor de ordem fracionária, tem-se uma solução particular para o PCOF

analisado.

- Aplicações considerando o método direto no contexto multi-objetivo também foram estudadas. Para essa finalidade o algoritmo de Busca Fractal Estocástica foi estendido para o contexto multi-objetivo. Nesta abordagem os candidatos em potencial eram gerados pela referida técnica de otimização heurística. Já o critério de dominância de Pareto era verificado via aplicação do operador para ordenamento por ranking. Para eliminar soluções próximas umas das outras e evitar o aumento do tempo de processamento devido ao incremento do número de soluções não-dominadas durante o processo evolutivo, foi empregado o operador de distância da multidão. Esta nova estratégia de otimização multi-objetivo, denominada de *Multi-objective Optimization Stochastic Fractal Search* (MOSFS), foi aplicada em dois estudos de caso, a saber, os problemas da mistura de catalisadores e do reator batelada. Em cada estudo de caso foi avaliada a influência da ordem fracionária e as respectivas curvas de Pareto foram estimadas. De forma geral foram obtidas boas estimativas para cada curva de Pareto, visto que estas estão em concordância com as obtidas usando o *Non-dominated Sorting Genetic Algorithm* (NSGA-II) para ordem fracionária igual a unidade. Em relação ao problema da mistura de catalisadores observa-se um descolamento de parte da curva de Pareto, i.e., apenas em uma determinada parte do perfil observa-se uma influência da ordem fracionária. Já para o problema do reator batelada verifica-se que, para cada valor de ordem fracionária, curvas de Pareto totalmente descoladas umas das outras foram obtidas. Isso significa que, a depender da aplicação, a ordem fracionária pode influenciar de formas diferentes.
- Cabe enfatizar que o uso do cálculo fracionário em problemas de engenharia configura-se como uma abordagem interessante, visto que essa generaliza a ordem em problemas diferenciais. Neste caso, a variação da ordem neste tipo de problema implica na mudança dos perfis físicos simulados, o que na prática, pode implicar em um melhor ajuste dos modelos matemáticos aos fenômenos físicos observados na natureza.
- É importante destacar que, ao se formular um problema (simulação ou otimização) com ordem fracionária, implica em um estudo de caso particular, i.e.; mudando-se o valor da ordem fracionária tem-se um problema distinto e, a priori, este apresenta uma solução particular. Por este motivo, nesta tese, na grande maioria das aplicações, foi realizada uma análise de sensibilidade no que tange a ordem fracionária. Neste caso procurou-se avaliar a influência deste parâmetro nos perfis obtidos e não obter o valor ótimo (ordem fracionária) para uma determinada aplicação. Todavia, ressalta-se que a ordem fracionária poderia ter sido considerada como uma nova variável de projeto, i.e.; o valor ótimo para este parâmetro poderia ser obtido para cada aplicação. Todavia, para este último caso, a influência deste parâmetro nos perfis não poderia ser realizada. Por esta razão optou-se, nesta contribuição, por realizar a análise de sensibilidade da ordem fracionária.

- Ao se analisar a consistência dimensional de modelos diferenciais ordinários fracionários observa-se que estes devem ser, de alguma forma, corrigidos, visto que estes não são coerentes dimensionalmente. Para esta finalidade, duas abordagens foram utilizadas nesta contribuição, a saber, uma em que se utiliza um fator de correção (em quase todas as aplicações) e a outra que consiste em reescrever as unidades dos parâmetros do modelo em função da ordem fracionária (somente considerado no problema da fermentação da lacase). Com relação a primeira, o uso do fator de correção tem como principal vantagem o fato deste não alterar as unidades dos parâmetros, como acontece com a segunda abordagem, bem como não alterar os perfis simulados. Incluir na unidade de um parâmetro a informação referente a ordem fracionária acaba descaracterizando o parâmetro, i.e.; fisicamente o que este parâmetro com ordem fracionária representa?. Assim, considera-se que a inserção do fator de correção no operador diferencial fracionário é a melhor opção para garantir a consistência dimensional de modelos diferenciais ordinários fracionários.

## 6.2 CONTRIBUIÇÕES DA TESE

O estudo de Problemas de Controle Ótimo Fracionários (PCOFs) consiste da associação entre duas teorias bem consolidadas, a saber, a de controle ótimo e do cálculo fracionário. Este tema configura uma linha de pesquisa de grande interesse nos dias atuais devido ao grande número de aplicações que podem ser desenvolvidas a partir dos conceitos envolvidos. Apesar disso, pode-se dizer que a quantidade de aplicações na área de engenharia envolvendo PCOFs ainda é bem tímida. Neste cenário, esta tese lista as seguintes contribuições:

- Revisão e organização do estado da arte no que tange o PCOF;
- Extensão do Método da Colocação Ortogonal (MCO), desenvolvido originalmente para a resolução de modelos diferenciais com ordem inteira, para o contexto fracionário;
- Simulação de problemas diferenciais fracionários usando o MCO no contexto fracionário;
- Análise da ordem fracionária nos perfis obtidos em diferentes estudos de caso;
- Resolução de PCOFs usando o MCO via aplicação das abordagens direta e indireta;
- Atualização do código OTIMA para o contexto fracionário para aplicações envolvendo o método indireto;
- Extensão do algoritmo de Busca Fractal Estocástica, proposto originalmente para o contexto mono-objetivo, para o contexto multi-objetivo.
- Geração e análise de uma gama de resultados mono e multi-objetivos fracionários de forma que estes possam ser utilizados por outros pesquisadores para fins de comparação com outras metodologias.

- Análise da consistência dimensional de modelos diferenciais ordinários fracionários considerando duas abordagens, a saber, uma em que se utiliza um fator de correção e a outra que consiste em reescrever as unidades dos parâmetros do modelo em função da ordem fracionária.

É importante destacar que, devido ao ineditismo dos problemas propostos nesta tese, nem sempre se tem à disposição resultados publicados por outros pesquisadores para fins de comparação. Neste caso sempre procurou-se usar o resultado conhecido (com ordem inteira) ou resolver o problema considerando uma abordagem consolidada na literatura especializada para fins de comparação. Enfatiza-se também que análises estatísticas poderiam ser realizadas para verificar a diferença entre os resultados obtidos considerando, por exemplo, a variação do número de pontos de colocação, os resultados apresentados na literatura especializada, entre outras comparações possíveis. Ressalta-se que este tipo de análise não foi objeto de estudo desta tese.

### 6.3 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como propostas de trabalhos futuros pretende-se:

- Estender o Método da Colocação Ortogonal para a resolução de problemas formulados por equações diferenciais parciais fracionárias;
- Avaliar a influência de outros tipos de aproximações para as derivadas fracionárias, bem como de outros tipos de polinômios no MCO no que tange a resolução de problemas matemáticos e de engenharia no contexto fracionário;
- Formular e resolver problemas em que a ordem fracionária é considerada como uma variável de projeto;
- Estudar outros tipos de problemas considerando o cálculo fracionário. Como exemplo avaliar a sua aplicabilidade no campo da difusão anômala, em problemas de robótica e de fermentação alcoólica, entre outros estudos de caso;
- Desenvolver uma interface gráfica e amigável para o OTIMA no contexto fracionário;
- Utilizar ferramentas estatísticas para verificar se os resultados obtidos são distintos ou não daqueles reportados pela literatura especializada.





## REFERÊNCIAS

- ABDELJAWAD, T. On conformable fractional calculus. *Journal of computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 279, p. 57–66, 2015. Citado na página 31.
- AGRAWAL, O. P. A general formulation and solution scheme for fractional optimal control problems. *Nonlinear Dynamics*, Springer, v. 38, n. 1, p. 323–337, 2004. Citado na página 48.
- AGRAWAL, O. P. Fractional variational calculus and the transversality conditions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 39, n. 33, p. 10375, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 48.
- AGRAWAL, O. P. A formulation and numerical scheme for fractional optimal control problems. *Journal of Vibration and Control*, SAGE Publications Sage UK:, Londres, Inglaterra, v. 14, n. 9-10, p. 1291–1299, 2008. Citado na página 48.
- AGRAWAL, O. P. A general finite element formulation for fractional variational problems. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Elsevier, v. 337, n. 1, p. 1–12, 2008. Citado na página 48.
- AGUILAR, J. F. G.; HERNÁNDEZ, M. M. Space-time fractional diffusion-advection equation with caputo derivative. v. 2014, 2014. Citado na página 44.
- ALLAGUI, A.; ELWAKIL, A. S.; MAUNDY, B. J.; FREEBORN, T. J. Spectral capacitance of series and parallel combinations of supercapacitors. *ChemElectroChem*, Wiley Online Library, v. 3, n. 9, p. 1429–1436, 2016. Citado na página 45.
- ALOMOUSH, M. I. Application of the stochastic fractal search algorithm and compromise programming to combined heat and power economic–emission dispatch. *Engineering Optimization*, v. 2, p. 1–23, 2019. Citado na página 56.
- ALVES, F. *Modelagem e simulação de biorreator operando com fungos *Trametes Versicolor* para produção de enzima lacase*. Dissertação (Mestrado) — Escola de Engenharia de Mauá, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 78 e 79.
- AMEEN, I.; HIDAN, M.; MOSTEFAOUI, Z.; ALI, H. Fractional optimal control with fish consumption to prevent the risk of coronary heart disease. *Complexity*, Hindawi, v. 2020, 2020. Citado na página 45.
- ASCHER, U. M.; SPITERI, R. J. Collocation software for boundary value differential-algebraic equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, SIAM, v. 15, n. 4, p. 938–952, 1994. Citado na página 20.
- ATANGANA, A. On the new fractional derivative and application to nonlinear fisher’s reaction–diffusion equation. *Applied Mathematics and Computation*, Elsevier, v. 273, p. 948–956, 2016. Citado na página 31.
- ATANGANA, A.; BALEANU, D. New fractional derivatives with nonlocal and non-singular kernel: theory and application to heat transfer model. *arXiv preprint arXiv:1602.03408*, 2016. Citado na página 31.

- ÁVILA, E. B. d. et al. Estudo do cálculo fracionário aplicado à modelagem de sistemas vibratórios com amortecimento viscoelástico. Universidade Federal de Uberlândia, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 46.
- AZAR, A. T.; SERRANO, F. E.; KAMAL, N. A. Optimal fractional order control for nonlinear systems represented by the euler-lagrange formulation. *International Journal of Modelling, Identification and Control*, Inderscience Publishers (IEL), v. 37, n. 1, p. 1–9, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 45.
- BABU, B.; ANGIRA, R. Optimization of thermal cracking operation using differential evolution. In: *Proceeding of International Symposium and 54th Annual Session of IChE (CHEMCON-2001)*. [S.l.: s.n.], 2001. Citado na página 53.
- BABU, B.; CHAKOLE, P. G.; MUBEEN, J. S. Multiobjective differential evolution (mode) for optimization of adiabatic styrene reactor. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 60, n. 17, p. 4822–4837, 2005. Citado na página 53.
- BABU, B.; GAURAV, C. Evolutionary computation strategy for optimization of an alkylation reaction. In: CITESEER. *Proceedings of International Symposium and 53rd Annual Session of IChE (CHEMCON-2000)*. [S.l.], 2000. Citado na página 53.
- BACHMANN, R.; BRÜLL, L.; MRZIGLOD, T.; PALLASKE, U. On methods for reducing the index of differential algebraic equations. *Computers & chemical engineering*, Elsevier, v. 14, n. 11, p. 1271–1273, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- BALEANU, D.; WU, G.-C.; BAI, Y.-R.; CHEN, F.-L. Stability analysis of caputo-like discrete fractional systems. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 48, p. 520–530, 2017. Citado na página 45.
- BAYIN, S. Ş. Definition of the riesz derivative and its application to space fractional quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, AIP Publishing LLC, v. 57, n. 12, p. 123501, 2016. Citado na página 38.
- BHRAWY, A. H.; EZZ-ELDIEN, S. S.; DOHA, E. H.; ABDELKAWY, M. A.; BALEANU, D. Solving fractional optimal control problems within a Chebyshev–Legendre operational technique. *International Journal of Control*, Taylor & Francis, v. 90, n. 6, p. 1230–1244, 2017. ISSN 13665820. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/00207179.2016.1278267>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 49.
- BIEGLER, L. T. Solution of dynamic optimization problems by successive quadratic programming and orthogonal collocation. *Computers & chemical engineering*, Elsevier, v. 8, n. 3-4, p. 243–247, 1984. Citado 4 vezes nas páginas 2, 21, 97 e 99.
- BIEGLER, L. T.; CERVANTES, A. M.; WÄCHTER, A. Advances in simultaneous strategies for dynamic process optimization. *Chemical engineering science*, Elsevier, v. 57, n. 4, p. 575–593, 2002. Citado 3 vezes nas páginas 21, 22 e 23.
- BIEGLER, L. T.; GROSSMANN, I. E. Retrospective on optimization. *Computers & Chemical Engineering*, Elsevier, v. 28, n. 8, p. 1169–1192, 2004. Citado na página 2.
- BILOUS, O.; AMUNDSON, N. R. Optimum temperature gradients in tubular reactors—ii: Numerical study. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 5, n. 3, p. 115–126, 1956. Citado na página 106.

BISWAS, R. K.; SEN, S. Fractional optimal control problems with specified final time. *Advances in Computational Intelligence*, v. 6, p. 1–6, 2011. Citado na página 3.

BOHANNAN, G.; KNAUBER, B. A physical experimental study of the fractional harmonic oscillator. p. 2341–2344, 2015. Citado na página 44.

BOLSTER, D.; BENSON, D. A.; SINGHA, K. Upscaling chemical reactions in multicontinuum systems: When might time fractional equations work? *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 102, p. 414–425, 2017. Citado na página 45.

BRYSON, A.; HO, Y.-C.; SIOURIS, G. M. Applied optimal control: Optimization, estimation, and control. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, v. 9, p. 366–367, 07 1979. Citado 7 vezes nas páginas 1, 2, 3, 5, 6, 18 e 19.

BÜCHNER, P. C. Neutralizador dinâmico de vibrações torcionais viscoelásticos aplicado em sistemas rotodinâmicos. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2017. Citado na página 46.

BULIRSCH, R.; MONTRONE, F.; PESCH, H. J. Abort landing in the presence of a windshear as a minimax optimal control problem, part ii: Multiple shooting and homotopy. *Journal of Optimization Theory and Applications*, v. 70, p. 223–254, 1991. Citado na página 2.

BULIRSCH, R.; MONTRONE, F.; PESCH, H. J. Abort landing in the presence of windshear as a minimax optimal control problem, part 1: Necessary conditions. *Journal of Optimization Theory and Applications*, Springer, v. 70, n. 1, p. 1–23, 1991. Citado na página 2.

BULIRSCH, R.; NERZ, E.; PESCH, H. J. Combining direct and indirect methods in optimal control: Range maximization of a hang glider. *International Series of Numerical Mathematics*, v. 111, p. 273–288, 1993. Citado na página 2.

BULLOCK, G. L. A geometric interpretation of the riemann-stieltjes integral. *The American Mathematical Monthly*, Taylor & Francis, v. 95, n. 5, p. 448–455, 1988. Citado na página 40.

CAI, W.; CHEN, W.; XU, W. Fractional modeling of pasternak-type viscoelastic foundation. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, Springer, v. 21, n. 1, p. 119–131, 2017. Citado na página 45.

CAJIĆ, M.; KARLIČIĆ, D.; LAZAREVIĆ, M. Damped vibration of a nonlocal nanobeam resting on viscoelastic foundation: fractional derivative model with two retardation times and fractional parameters. *Meccanica*, Springer, v. 52, n. 1, p. 363–382, 2017. Citado na página 45.

CAMARGO, R.; OLIVEIRA, E. C. d. *Cálculo Fracionário*. São Paulo, SP: Livraria da Física, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 35, 38 e 66.

CAMARGO, R. d. F. *Cálculo fracionário e aplicações*. 2009. Citado na página 36.

CAPUTO, M.; FABRIZIO, M. A new definition of fractional derivative without singular kernel. *Progr. Fract. Differ. Appl*, v. 1, n. 2, p. 1–13, 2015. Citado na página 31.

ÇELIK, E.; KARADUMAN, E.; BAYRAM, M. Numerical solutions of chemical differential-algebraic equations. *Applied mathematics and computation*, Elsevier, v. 139, n. 2-3, p. 259–264, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 21.

CERVANTES, A.; BIEGLER, L. T. Large-scale dae optimization using a simultaneous nlp formulation. *AIChE Journal*, Wiley Online Library, v. 44, n. 5, p. 1038–1050, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 22.

- CHEN-CHARPENTIER, B.; JACKSON, M. Optimal control of plant virus propagation. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, Wiley Online Library, v. 43, n. 14, p. 8147–8157, 2020. Citado na página 26.
- CHEN, W.; HU, S.; CAI, W. A causal fractional derivative model for acoustic wave propagation in lossy media. *Archive of Applied Mechanics*, Springer, v. 86, n. 3, p. 529–539, 2016. Citado na página 44.
- CHEN, X.; YUE, H.; YU, K. Perturbed stochastic fractal search for solar pv parameter estimation. *Energy*, v. 3, p. 1–20, 2020. Citado na página 56.
- CHUDEJ, K.; GÜNTHER, M. Global state space approach for the efficient numerical solution of state-constrained trajectory optimization problems. *Journal of optimization theory and applications*, Springer, v. 103, n. 1, p. 75–93, 1999. Citado na página 19.
- COELHO, R. F. *Multicriteria optimization with expert rules for mechanical design*. Tese (Doutorado) — PhD Thesis, Université Libre de Bruxelles, Faculty of Applied Sciences, Belgium, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 51 e 52.
- COTS, O.; GERGAUD, J.; GOUBINAT, D. Direct and indirect methods in optimal control with state constraints and the climbing trajectory of an aircraft. *Optimal Control Applications and Methods*, Wiley Online Library, v. 39, n. 1, p. 281–301, 2018. Citado na página 27.
- CUNHA, J.; MURATA, V. Desenvolvimento de uma ferramenta de caracterização automática e de redução do índice diferencial de modelos matemáticos de processos de engenharia química do tipo algébrico diferencial de valor inicial. 1999. *Relatório de Iniciação Científica, Uberlândia, UFU*, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.
- CUTHRELL, J. E.; BIEGLER, L. T. On the optimization of differential-algebraic process systems. *AIChE Journal*, Wiley Online Library, v. 33, n. 8, p. 1257–1270, 1987. Citado 4 vezes nas páginas 2, 21, 22 e 26.
- DADEBO, S.; MCAULEY, K. Dynamic optimization of constrained chemical engineering problems using dynamic programming. *Computers & chemical engineering*, Elsevier, v. 19, n. 5, p. 513–525, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 88 e 90.
- DEB, K. *Multi-objective Optimization using Evolutionary Algorithms*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 51.
- DEB, K. Multi-objective optimisation using evolutionary algorithms: an introduction. In: *Multi-objective evolutionary optimisation for product design and manufacturing*. [S.l.]: Springer, 2011. p. 3–34. Citado 2 vezes nas páginas 61 e 104.
- DEMIR, D. D.; BILDIK, N.; SINIR, B. Application of fractional calculus in the dynamics of beams. *Boundary Value Problems*, SpringerOpen, v. 2012, n. 1, p. 1–13, 2012. Citado na página 46.
- DIEHL, M.; BOCK, H. G.; SCHLÖDER, J. P.; FINDEISEN, R.; NAGY, Z.; ALLGÖWER, F. Real-time optimization and nonlinear model predictive control of processes governed by differential-algebraic equations. *Journal of Process Control*, Elsevier, v. 12, n. 4, p. 577–585, 2002. Citado na página 26.

- DIETHELM, K.; FREED, A. D. The fracpece subroutine for the numerical solution of differential equations of fractional order. *Forschung und wissenschaftliches Rechnen*, Gesellschaft für Wissenschaftliche Datenverarbeitung Gottingen, Alemanha, v. 1999, p. 57–71, 1998. Citado na página 69.
- DIN, A.; LI, Y.; SHAH, M. A. The complex dynamics of hepatitis b infected individuals with optimal control. *Journal of Systems Science and Complexity*, Springer, p. 1–23, 2021. Citado na página 21.
- DOHA, E. H.; BHRAWY, A. H.; BALEANU, D.; EZZ-ELDIEN, S. S.; HAFEZ, R. M. An efficient numerical scheme based on the shifted orthonormal Jacobi polynomials for solving fractional optimal control problems. *Advances in Difference Equations*, 2015. ISSN 16871847. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 49.
- EDGAR, T. F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L. S. et al. *Optimization of chemical processes*. Nova York, EUA: McGraw-Hill Education-Europa, 2001. Citado na página 23.
- EDGEWORTH, F. Y. *Mathematical psychics: An essay on the application of mathematics to the moral sciences*. [S.l.]: CK Paul, 1881. Citado na página 51.
- ENGLAND, R.; GÓMEZ, S.; LAMOUR, R. Expressing optimal control problems as differential algebraic equations. *Computers & chemical engineering*, Elsevier, v. 29, n. 8, p. 1720–1730, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 96 e 97.
- FEEHERY, W. F. *Dynamic optimization with path constraints*. Tese (Doutorado) — Instituto Tecnológico de Massachusetts, 1998. Citado 4 vezes nas páginas 1, 9, 15 e 26.
- FELIU-TALEGON, D.; SAN-MILLAN, A.; FELIU-BATLLE, V. Fractional-order integral resonant control of collocated smart structures. *Control Engineering Practice*, Elsevier, v. 56, p. 210–223, 2016. Citado na página 45.
- FLAHERTY, J.; O'MALLEY, R. On the computation of singular controls. *IEEE Transactions on Automatic Control*, IEEE, v. 22, n. 4, p. 640–648, 1977. Citado 2 vezes nas páginas 88 e 90.
- FONSECA, C. M.; FLEMING, P. J. et al. Genetic algorithms for multiobjective optimization: Formulation discussion and generalization. In: CITESSEER. *Icga*. [S.l.], 1993. v. 93, n. July, p. 416–423. Citado 2 vezes nas páginas 51 e 52.
- FREUNDLICH, J.; SADO, D. Dynamics of a coupled mechanical system containing a spherical pendulum and a fractional damper. *Meccanica*, Springer, v. 55, n. 12, p. 2541–2553, 2020. Citado na página 46.
- GARRA, R.; GARRAPPA, R. The prabhakar or three parameter mittag-leffler function: Theory and application. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 56, p. 314–329, 2018. Citado na página 45.
- GEAR, C. W. Differential-algebraic equation index transformations. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, SIAM, v. 9, n. 1, p. 39–47, 1988. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- GEAR, C. W.; PETZOLD, L. R. Ode methods for the solution of differential/algebraic systems. *SIAM Journal on Numerical analysis*, SIAM, v. 21, n. 4, p. 716–728, 1984. Citado na página 27.

- GHOMANJANI, F. A numerical technique for solving fractional optimal control problems and fractional riccati differential equations. *Journal of the Egyptian Mathematical Society*, Elsevier, v. 24, n. 4, p. 638–643, 2016. Citado na página 67.
- GILL, P. E.; MURRAY, W.; SAUNDERS, M. A.; WRIGHT, M. H. *User's guide for NPSOL (version 4.0): A Fortran package for nonlinear programming*. [S.l.], 1986. Citado na página 25.
- GOH, C.; TEO, K. L. Control parametrization: a unified approach to optimal control problems with general constraints. *Automatica*, Elsevier, v. 24, n. 1, p. 3–18, 1988. Citado na página 22.
- GOMES, E. *Abordagem Algébrico-Diferencial na Solução de Problemas de Controle Ótimo*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2000. Citado 5 vezes nas páginas 2, 4, 20, 30 e 60.
- GÓMEZ-AGUILAR, J.; RAZO-HERNÁNDEZ, R.; GRANADOS-LIEBERMAN, D. A physical interpretation of fractional calculus in observables terms: analysis of the fractional time constant and the transitory response. *Revista mexicana de física*, Sociedad Mexicana de Física, v. 60, n. 1, p. 32–38, 2014. Citado na página 44.
- GÓMEZ-AGUILAR, J.; ROSALES-GARCÍA, J.; BERNAL-ALVARADO, J.; CÓRDOVA-FRAGA, T.; GUZMÁN-CABRERA, R. Fractional mechanical oscillators. *Revista mexicana de física*, Sociedad Mexicana de Física, v. 58, n. 4, p. 348–352, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 64.
- GÓMEZ-AGUILAR, J. F.; YÉPEZ-MARTÍNEZ, H.; CALDERÓN-RAMÓN, C.; CRUZ-ORDUÑA, I.; ESCOBAR-JIMÉNEZ, R. F.; OLIVARES-PEREGRINO, V. H. Modeling of a mass-spring-damper system by fractional derivatives with and without a singular kernel. *Entropy*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 17, n. 9, p. 6289–6303, 2015. Citado 9 vezes nas páginas 46, 48, 68, 69, 70, 71, 73, 75 e 76.
- GRIFFEL, D. Multi-objective optimization using evolutionary algorithms, by kalyanmoy deb, pp. 487.£ 60. 2001. isbn 0 471 87339 x (wiley). *The Mathematical Gazette*, Cambridge University Press, v. 87, n. 509, p. 409–410, 2003. Citado na página 52.
- GRUNWALD, A. K. Über"begrente"derivationen und deren anwedung. *Zangew Math und Phys*, v. 12, p. 441–480, 1867. Citado na página 33.
- GUNN, D.; THOMAS, W. Mass transport and chemical reaction in multifunctional catalyst systems. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 20, n. 2, p. 89–100, 1965. Citado na página 102.
- GUTIERREZ, R. E.; ROSARIO, J. M.; MACHADO, J. T. Fractional order calculus: basic concepts and engineering applications. *Mathematical problems in engineering*, Hindawi, v. 2010, 2010. Citado na página 40.
- HILFER, R. *Applications of fractional calculus in physics*. Alemanha: World scientific, 2000. Citado na página 39.
- HOSSEINPOUR, S.; NAZEMI, A. Solving fractional optimal control problems with fixed or free final states by haar wavelet collocation method. *IMA Journal of Mathematical control and information*, Oxford University Press, v. 33, n. 2, p. 543–561, 2016. Citado na página 49.

- HUANG, Y. J.; REKLAITIS, G.; VENKATASUBRAMANIAN, V. Model decomposition based method for solving general dynamic optimization problems. *Computers & chemical engineering*, Elsevier, v. 26, n. 6, p. 863–873, 2002. Citado na página 22.
- INGO, C.; MAGIN, R. L.; COLON-PEREZ, L.; TRIPLETT, W.; MARECI, T. H. On random walks and entropy in diffusion-weighted magnetic resonance imaging studies of neural tissue. *Magnetic resonance in medicine*, Wiley Online Library, v. 71, n. 2, p. 617–627, 2014. Citado na página 45.
- JACOBSON, D.; GERSHWIN, S.; LELE, M. Computation of optimal singular controls. *IEEE Transactions on Automatic Control*, IEEE, v. 15, n. 1, p. 67–73, 1970. Citado 3 vezes nas páginas 88, 90 e 92.
- JAFARI, H.; TAJADODI, H.; BALEANU, D. A modified variational iteration method for solving fractional riccati differential equation by adomian polynomials. *Fractional Calculus and Applied Analysis*, Versita, v. 16, n. 1, p. 109–122, 2013. Citado na página 67.
- JARVIS, R.; PANTELIDES, C. Dasolv: a differential-algebraic equation solver. *Center for Process Systems Engineering, Imperial College of Science, Technology, and Medicine, London, Version*, v. 1, n. 2, 1992. Citado na página 25.
- JIANG, Y.; QI, H.; XU, H.; JIANG, X. Transient electroosmotic slip flow of fractional oldroyd-b fluids. *Microfluidics and Nanofluidics*, Springer, v. 21, n. 1, p. 7, 2017. Citado na página 45.
- KARAMAN, M. M.; SUI, Y.; WANG, H.; MAGIN, R. L.; LI, Y.; ZHOU, X. J. Differentiating low-and high-grade pediatric brain tumors using a continuous-time random-walk diffusion model at high b-values. *Magnetic resonance in medicine*, Wiley Online Library, v. 76, n. 4, p. 1149–1157, 2016. Citado na página 45.
- KATUGAMPOLA, U. N. A new fractional derivative with classical properties. *arXiv preprint arXiv:1410.6535*, 2014. Citado na página 31.
- KHAJJI, B.; KOUIDERE, A.; ELHIA, M.; BALATIF, O.; RACHIK, M. Fractional optimal control problem for an age-structured model of covid-19 transmission. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 143, p. 110625, 2021. Citado na página 45.
- KHALIL, R.; HORANI, M. A.; YOUSEF, A.; SABABHEH, M. A new definition of fractional derivative. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 264, p. 65–70, 2014. Citado na página 31.
- KOKOSKA, S.; ZWILLINGER, D. *CRC standard probability and statistics tables and formulae*. [S.l.]: Crc Press, 2000. Citado na página 88.
- KRIJNEN, M. E.; OSTAYEN, R. A. van; HOSSEINNIA, H. The application of fractional order control for an air-based contactless actuation system. *ISA transactions*, Elsevier, v. 82, p. 172–183, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 45.
- KÜHL, P.; FERREAU, J.; ALBERSMEYER, J.; KIRCHES, C.; WIRSCHING, L.; SAGER, S.; POTSCHKA, A.; SCHULZ, G.; DIEHL, M.; LEINWEBER, D. B. et al. Muscod-ii users manual. *University of Heidelberg*, 2007. Citado na página 25.
- LARANJEIRA, P. L. C.; PINTO, J. C. *Métodos numéricos em problemas de engenharia química*. Rio de Janeiro, RJ: Editora E-papers, 2001. Citado na página 57.

- LENZI, E.; ZOLA, R.; ROSSATO, R.; RIBEIRO, H.; VIEIRA, D.; EVANGELISTA, L. Asymptotic behaviors of the poisson-nernst-planck model, generalizations and best adjust of experimental data. *Electrochimica Acta*, Elsevier, v. 226, p. 40–45, 2017. Citado na página 44.
- LETNIKOV, A. Theory of differentiation with an arbitrary indicator. *Matem Sbornik*, v. 3, p. 1–68, 1868. Citado na página 33.
- LI, C.; QIAN, D.; CHEN, Y. On riemann-liouville and caputo derivatives. *Discrete Dynamics in Nature and Society*, Hindawi, v. 2011, 2011. Citado na página 41.
- LI, Z.; WANG, H.; XIAO, R.; YANG, S. A variable-order fractional differential equation model of shape memory polymers. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 102, p. 473–485, 2017. Citado na página 45.
- LIMA, J. V. C. F.; LOBATO, F. S.; STEFFEN JR. Solution of fractional optimal control problems by using orthogonal collocation and multi-objective optimization stochastic fractal search. *Advances in Computational Intelligence*, v. 1, p. 1–30, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 56.
- LIMA, J. V. C. F.; LOBATO, F. S.; STEFFEN JR. Solution of mass-spring-damper fractional systems using caputo derivative and orthogonal collocation. *Engineering Computations*, v. 10, p. 1–27, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 44.
- LOBATO, F. Hybrid approach for dynamic optimization problems. *Federal University of Uberlândia, Uberlândia*, 2004. Citado na página 104.
- LOBATO, F. *Otimização multi-objetivo para o projeto de sistemas de engenharia*, 2008. Tese (Doutorado) — Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Programa de Pós-Graduação, 2008. Citado na página 52.
- LOBATO, F. S. *Abordagem mista para problemas de otimização dinâmica*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, set. 2004. Citado 10 vezes nas páginas 1, 2, 4, 6, 20, 26, 28, 29, 30 e 60.
- LOBATO, F. S.; OLIVEIRA-LOPES, L. C.; MURATA, V. V. A novel hybrid optimization algorithm for differential-algebraic control problems. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 24, p. 445–452, 2007. Citado na página 2.
- LOBATO, F. S.; STEFFEN, V. Solution of optimal control problems using multi-particle collision algorithm. In: *9th conference on dynamics, control and their applications*. [S.l.: s.n.], 2010. Citado 2 vezes nas páginas 104 e 106.
- LOGSDON, J.; BIEGLER, L. Decomposition strategies for large-scale dynamic optimization problems. *Chemical engineering science*, Elsevier, v. 47, n. 4, p. 851–864, 1992. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 21.
- LOGSDON, J. S. *Efficient determination of optimal control profiles for differential algebraic systems*. Tese (Doutorado) — Carnegie Mellon University, 1990. Citado na página 103.
- LOGSDON, J. S.; BIEGLER, L. T. Accurate Solution of Differential-Algebraic Optimization Problems. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 28, n. 11, p. 1628–1639, 1989. ISSN 15205045. Citado 9 vezes nas páginas 1, 2, 6, 21, 22, 93, 94, 95 e 97.



LOUNIS, A.; LOUADJ, K.; AIDENE, M. Solving an optimal control problem of the robot using the picard's method. In: IOP PUBLISHING. *Journal of Physics: Conference Series*. [S.l.], 2021. v. 1730, n. 1, p. 012015. Citado na página 50.

LUUS, R. Use of iterative dynamic programming for optimal singular control problems. In: *Proceedings of the Interational Conference on Optimization Techniques and Applications (ICOTA'98)*. [S.l.: s.n.], 1998. p. 286–289. Citado 2 vezes nas páginas 88 e 90.

LUUS, R.; OKONGWU, O. N. Towards practical optimal control of batch reactors. *Chemical Engineering Journal*, Elsevier, v. 75, n. 1, p. 1–9, 1999. Citado na página 106.

LYNN, L.; PARKIN, E. S.; ZAHRADNIK, R. L. Near-optimal control by trajectory approximation. tubular reactors with axial dispersion. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, ACS Publications, v. 9, n. 1, p. 58–63, 1970a. Citado 3 vezes nas páginas 2, 19 e 20.

LYNN, L.; ZAHRADNIK, R. The use of orthogonal polynomials in the near-optimal control of distributed systems by trajectory approximation. *International Journal of Control*, Taylor & Francis, v. 12, n. 6, p. 1079–1087, 1970b. Citado 3 vezes nas páginas 2, 19 e 20.

MACHADO, J. T. A probabilistic interpretation of the fractional-order differentiation. *Fractional Calculus and Applied Analysis*, v. 6, p. 73–79, 2003. Citado na página 40.

MACHADO, J. T.; KIRYAKOVA, V.; MAINARDI, F. Recent history of fractional calculus. *Communications in nonlinear science and numerical simulation*, Elsevier, v. 16, n. 3, p. 1140–1153, 2011. Citado na página 39.

MAHDY, A.; EL-BARY, A. et al. Use of optimal control in studying the dynamical behaviors of fractional financial awareness model. 2021. Citado na página 45.

MANDIĆ, P. D.; ŠEKARA, T. B.; LAZAREVIĆ, M. P.; BOŠKOVIĆ, M. Dominant pole placement with fractional order pid controllers: D-decomposition approach. *ISA transactions*, Elsevier, v. 67, p. 76–86, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 45.

MARLER, R. T.; ARORA, J. S. Survey of multi-objective optimization methods for engineering. *Structural and multidisciplinary optimization*, Springer, v. 26, n. 6, p. 369–395, 2004. Citado na página 51.

MARROQUIN, G.; LUYBEN, W. Practical control studies of batch reactors using realistic mathematical models. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 28, n. 4, p. 993–1003, 1973. Citado na página 106.

MAURER, H.; PESCH, H. J. Direct optimization methods for solving a complex state-constrained optimal control problem in microeconomics. *Applied Mathematics and Computation*, Elsevier, v. 204, n. 2, p. 568–579, 2008. Citado na página 27.

MEHDINEJADIANI, B.; JAFARI, H.; BALEANU, D. Derivation of a fractional boussinesq equation for modelling unconfined groundwater. *The European Physical Journal Special Topics*, Springer, v. 222, n. 8, p. 1805–1812, 2013. Citado na página 45.

MENG, R. Application of fractional calculus to modeling the non-linear behaviors of ferroelectric polymer composites: Viscoelasticity and dielectricity. *Membranes*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 11, n. 6, p. 409, 2021. Citado na página 46.

- MENG, R.; YIN, D.; ZHOU, C.; WU, H. Fractional description of time-dependent mechanical property evolution in materials with strain softening behavior. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 40, n. 1, p. 398–406, 2016. Citado na página 45.
- METZLER, R.; JEON, J.-H.; CHERSTVY, A. G.; BARKAI, E. Anomalous diffusion models and their properties: non-stationarity, non-ergodicity, and ageing at the centenary of single particle tracking. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Royal Society of Chemistry, v. 16, n. 44, p. 24128–24164, 2014. Citado na página 44.
- MILLER, K. S.; ROSS, B. *An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations*. [S.l.]: Wiley, 1993. Citado na página 39.
- MODAK, J.; LIM, H.; TAYEB, Y. General characteristics of optimal feed rate profiles for various fed-batch fermentation processes. *Biotechnology and bioengineering*, Wiley Online Library, v. 28, n. 9, p. 1396–1407, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 20.
- MOUSSOUNI, N.; ALIANE, M. Optimal control of covid-19. *An International Journal of Optimization and Control: Theories & Applications (IJOCTA)*, v. 11, n. 1, p. 114–122, 2021. Citado na página 21.
- MURATA, V. *Caracterização simbólica de equações algébrico diferenciais por um sistema de álgebra computacional com aplicações na engenharia química*. Tese (Doutorado) — COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1996. Citado na página 29.
- NAIK, P. A.; ZU, J.; OWOLABI, K. M. Global dynamics of a fractional order model for the transmission of hiv epidemic with optimal control. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 138, p. 109826, 2020. Citado na página 45.
- NAIK, P. A.; ZU, J.; OWOLABI, K. M. Global dynamics of a fractional order model for the transmission of hiv epidemic with optimal control. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 138, p. 109826, 2020. Citado na página 50.
- NASROLAHPOUR, H. Time fractional formalism: classical and quantum phenomena. *arXiv preprint arXiv:1203.4515*, 2012. Citado na página 44.
- NGUYEN, T. P.; TRAN, T. T.; VO, D. N. Improved stochastic fractal search algorithm with chaos for optimal determination of location, size, and quantity of distributed generators in distribution systems. *Neural Computing and Applications*, v. 11, p. 1–12, 2018. Citado na página 56.
- NGUYEN, V.; JOHNSON, J.; MELKOTE, S. Active vibration suppression in robotic milling using optimal control. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, Elsevier, v. 152, p. 103541, 2020. Citado na página 50.
- NIGMATULLIN, R. R.; CEGLIE, C.; MAIONE, G.; STRICCOLI, D. Reduced fractional modeling of 3d video streams: the ferma approach. *Nonlinear Dynamics*, Springer, v. 80, n. 4, p. 1869–1882, 2015. Citado na página 45.
- NIGMATULLIN, R. R.; GINIATULLIN, R. A.; SKORINKIN, A. I. Membrane current series monitoring: essential reduction of data points to finite number of stable parameters. *Frontiers in computational neuroscience*, Frontiers, v. 8, p. 120, 2014. Citado na página 45.

- OBERLE, H. J.; SOTHMANN, B. Numerical computation of optimal feed rates for a fed-batch fermentation model. *Journal of Optimization Theory and Applications*, Springer, v. 100, n. 1, p. 1–13, 1999. Citado na página 26.
- OGATA, K. *Engenharia de Controle Moderno*. 5ª edição. ed. São Paulo, SP: Pearson Universidades, 2010. 912 p. ISBN 9788576058106. Citado na página 1.
- OH, S.; LUUS, R. Use of orthogonal collocation method in optimal control problems. *International Journal of Control*, Taylor & Francis, v. 26, n. 5, p. 657–673, 1977. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 21.
- OLDHAM, K.; SPANIER, J. *The fractional calculus theory and applications of differentiation and integration to arbitrary order*. Nova York, NY: Academic Press, 1974. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 66.
- OLIVEIRA, D. S.; OLIVEIRA, E. C. de. On the generalized  $p_k$ ,  $q$ -fractional derivative. *Progr. Fract. Diff. Appl.*, p. 133–145, 2018. Citado na página 31.
- OLIVEIRA, D. S.; OLIVEIRA, E. C. de. On a caputo-type fractional derivative. *Advances in Pure and Applied Mathematics*, De Gruyter, v. 10, n. 2, p. 81–91, 2019. Citado na página 31.
- OLIVEIRA, E. C. D.; MACHADO, J. A. T. A review of definitions for fractional derivatives and integral. *Mathematical Problems in Engineering*, Hindawi, v. 2014, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 38.
- OLIVEIRA, E. C. de; COSTA, F. S.; JR, J. V. The fractional schrödinger equation for delta potentials. *Journal of Mathematical Physics*, American Institute of Physics, v. 51, n. 12, p. 123517, 2010. Citado na página 38.
- ORTIGUEIRA, M. D.; MACHADO, J. T. What is a fractional derivative? *Journal of computational Physics*, Elsevier, v. 293, p. 4–13, 2015. Citado na página 31.
- OUELLET, R.; BUI, R. A new tool for solving industrial continuous optimization problems. *Applied mathematical modelling*, Elsevier, v. 17, n. 6, p. 298–310, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- PANDEY, V.; HOLM, S. Linking the fractional derivative and the lomnitz creep law to non-newtonian time-varying viscosity. *Physical Review E*, APS, v. 94, n. 3, p. 032606, 2016. Citado na página 44.
- PANTELIDES, C. C. The consistent initialization of differential-algebraic systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, SIAM, v. 9, n. 2, p. 213–231, 1988. Citado 3 vezes nas páginas 5, 7 e 28.
- PARETO, V. *Cours D Economie Politique, volume I and II[M]*. [S.l.]: F. Rouge, Lausanne, 1896. Citado 3 vezes nas páginas 4, 51 e 61.
- PEREIRA, F. L. Optimal control problems in drone operations for disaster search and rescue. *Procedia Computer Science*, Elsevier, v. 186, p. 78–86, 2021. Citado na página 20.
- PETZOLD, L. Differential/algebraic equations are not ode's. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, SIAM, v. 3, n. 3, p. 367–384, 1982. Citado 4 vezes nas páginas 3, 5, 7 e 27.

- PFEIFER, A. A. Controle ótimo de sistemas algébrico-diferenciais com flutuação do índice diferencial. Universidade Federal de Uberlândia, 2007. Citado 5 vezes nas páginas 2, 4, 26, 30 e 60.
- PHAM, L. H.; NGUYEN, T. T.; PHAM, L. D.; NGUYEN, N. H. Stochastic fractal search based method for economic load dispatch. *TELKOMNIKA*, v. 17, p. 2535–2546, 2019. Citado na página 56.
- PINTO, C. M.; CARVALHO, A. R. The hiv/tb coinfection severity in the presence of tb multi-drug resistant strains. *Ecological complexity*, Elsevier, v. 32, p. 1–20, 2017. Citado na página 45.
- PINTO, C. M.; CARVALHO, A. R. A latency fractional order model for hiv dynamics. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 312, p. 240–256, 2017. Citado na página 45.
- PODLUBNY, I. *Fractional differential equations: an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications*. Cambridge, MA: Elsevier, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 35.
- PODLUBNY, I. Geometric and physical interpretation of fractional integration and fractional differentiation. *arXiv preprint math/0110241*, 2001. Citado 5 vezes nas páginas 39, 40, 41, 43 e 44.
- POOSEH, S.; ALMEIDA, R.; TORRES, D. F. A numerical scheme to solve fractional optimal control problems. v. 2013, 2013. Citado na página 49.
- POVSTENKO, Y. Fractional heat conduction in a space with a source varying harmonically in time and associated thermal stresses. *Journal of Thermal Stresses*, Taylor & Francis, v. 39, n. 11, p. 1442–1450, 2016. Citado na página 44.
- PRICE, K.; STORN, R. M.; LAMPINEN, J. A. *Differential evolution: a practical approach to global optimization*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006. Citado na página 53.
- PU, Y.-F.; ZHOU, J.-L.; YUAN, X. Fractional differential mask: a fractional differential-based approach for multiscale texture enhancement. *IEEE transactions on image processing*, IEEE, v. 19, n. 2, p. 491–511, 2009. Citado na página 45.
- RAKSHAN, S. A.; EFFATI, S.; KAMYAD, A. V. Solving a class of fractional optimal control problems by the hamilton–jacobi–bellman equation. *Journal of Vibration and Control*, SAGE Publications Sage UK: Londres, Inglaterra, v. 24, n. 9, p. 1741–1756, 2018. Citado na página 49.
- RENFRO, J.; MORSHEDI, A.; ASBJORNSEN, O. Simultaneous optimization and solution of systems described by differential/algebraic equations. *Computers & chemical engineering*, Elsevier, v. 11, n. 5, p. 503–517, 1987. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 21.
- RENFRO, J. G. *Computational studies in the optimization of systems described by differential/algebraic equations*. Tese (Doutorado) — Universidade de Houston-Universidade de Park, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 21.
- RIOS NETO, A. Controle ótimo de sistemas dinâmicos: Notas de aulas e exemplos de aplicação. *Sao José dos Campos*, 2012. Citado na página 1.

- RODRIGUES, F. G.; OLIVEIRA, E. C. de. Introdução às técnicas do cálculo fracionário para estudar modelos da física matemática. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 37, n. 3, p. 3305–1, 2015. Citado na página 31.
- ROSA, S.; TORRES, D. F. Optimal control of a fractional order epidemic model with application to human respiratory syncytial virus infection. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 117, p. 142–149, 2018. Citado na página 50.
- ROSALES, J.; GÓMEZ, J.; GUÍA, M.; TKACH, V. Fractional electromagnetic waves. p. 1–3, 2011. Citado na página 44.
- ROSS, B. *A brief history and exposition of the fundamental theory of fractional calculus*. Berlin/Heidelberg, Alemanha: Springer, 1975. 1–36 p. Citado na página 31.
- RUTQUIST, P. E.; EDVALL, M. M. Propt-matlab optimal control software. *Tomlab Optimization Inc*, v. 260, n. 1, p. 12, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 100 e 102.
- SALGADO, G. H. O. Métodos numéricos para solução de equações diferenciais segundo a derivada de caputo. Universidade Federal de Minas Gerais, 2015. Citado na página 35.
- SALIMI, H. Stochastic fractal search: a powerful metaheuristic algorithm. *Knowledge-Based Systems*, Elsevier, v. 75, p. 1–18, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 4, 53 e 54.
- SAMKO, S.; KILBAS, A. A.; MARICHEV, O. I. Fractional integrals and derivatives: Theory and applications. 1993. Citado na página 38.
- SAN, K. Y.; STEPHANOPOULOS, G. A note on the optimality criteria for maximum biomass production in a fed-batch fermentor. *Biotechnol. Bioeng.*, Department of Chemical Engineering, California Institute of Technology, v. 26, n. 10, 1984. Citado na página 20.
- SANTOS, J. Aplicação do cálculo fracionário na modelagem da memória e da aprendizagem. 2018. Citado 5 vezes nas páginas 34, 35, 36, 37 e 66.
- SAYEVAND, K.; ROSTAMI, M. Fractional optimal control problems: optimality conditions and numerical solution. *IMA Journal of Mathematical Control and Information*, Oxford University Press, v. 35, n. 1, p. 123–148, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 82, 83 e 86.
- SCHULZ, V. *Reduced SQP methods for large scale optimal control problems in DAE with application to path planning problems for satellite mounted robots*. Tese (Doutorado) — Citeseer, 1996. Citado na página 20.
- SERBAN, R.; PETZOLD, L. R. Coopt—a software package for optimal control of large-scale differential–algebraic equation systems. *Mathematics and computers in simulation*, Elsevier, v. 56, n. 2, p. 187–203, 2001. Citado na página 25.
- SHI, M.; WANG, Z. Abundant bursting patterns of a fractional-order morris–lecar neuron model. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 19, n. 6, p. 1956–1969, 2014. Citado na página 45.
- SHOKOOH, A.; SUÁREZ, L. A comparison of numerical methods applied to a fractional model of damping materials. *Journal of Vibration and Control*, Sage Publications Sage CA: Thousand Oaks, CA, v. 5, n. 3, p. 331–354, 1999. Citado na página 69.

- SIMEONI, F.; CASALINO, L.; ZAVOLI, A.; COLASURDO, G. Indirect optimization of satellite deployment into a highly elliptic orbit. *International Journal of Aerospace Engineering*, Hindawi, v. 2012, 2012. Citado na página 20.
- SONIN, N. Y. On differentiation with arbitrary index. *Moscow Matem. Sbornik*, v. 6, n. 1, p. 1–38, 1869. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 33.
- SOUSA, J. V. d. C. et al. Equação de difusão tempo-fracionária:(taxa de sedimentação de eritrócitos. [sn], 2018. Citado na página 31.
- SOUZA, D. L.; LOBATO, F. S.; GEDRAITE, R. Robust multiobjective optimization applied to optimal control problems using differential evolution. *Chemical Engineering & Technology*, Wiley Online Library, v. 38, n. 4, p. 721–726, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 104 e 106.
- STORN, R.; PRICE, K. Differential evolution: A simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces. *Journal of Global Optimization*, v. 23, 01 1995. Citado 7 vezes nas páginas 64, 79, 90, 92, 95, 97 e 100.
- STORN, R.; PRICE, K. Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of global optimization*, Springer, v. 11, n. 4, p. 341–359, 1997. Citado na página 52.
- STRYK, O. V. User’s guide for dircol—a direct collocation method for the numerical solution of optimal control problems. Citeseer, 1999. Citado na página 25.
- STRYK, O. V.; BULIRSCH, R. Direct and indirect methods for trajectory optimization. *Annals of Operations Research*, v. 37, p. 357–373, 12 1992. Citado 3 vezes nas páginas 1, 2 e 26.
- STRYK, O. V.; HEIM, A. Trajectory optimization of industrial robots with application to computer-aided robotics and robot controllers. *Optimization*, Taylor & Francis, v. 47, n. 3-4, p. 407–420, 2000. Citado na página 1.
- STRYK, O. von; SCHLEMMER, M. Optimal control of the industrial robot manutec r3. In: *Computational optimal control*. Suíça: Springer, 1994. p. 367–382. Citado na página 26.
- SUN, H.; CHEN, D.; ZHANG, Y.; CHEN, L. Understanding partial bed-load transport: Experiments and stochastic model analysis. *Journal of Hydrology*, Elsevier, v. 521, p. 196–204, 2015. Citado na página 45.
- SUN, H.; ZHANG, Y.; CHEN, W.; REEVES, D. M. Use of a variable-index fractional-derivative model to capture transient dispersion in heterogeneous media. *Journal of contaminant hydrology*, Elsevier, v. 157, p. 47–58, 2014. Citado na página 45.
- SUN, H.; ZHANG, Y.; WEI, S.; ZHU, J.; CHEN, W. A space fractional constitutive equation model for non-newtonian fluid flow. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 62, p. 409–417, 2018. Citado na página 45.
- SWEILAM, N. H.; AL-AJAMI, T.; HOPPE, R. H. Numerical solution of some types of fractional optimal control problems. *The Scientific World Journal*, v. 2013, p. 1–9, 2013. Citado na página 86.
- TANG, X.; SHI, Y.; WANG, L. L. A new framework for solving fractional optimal control problems using fractional pseudospectral methods. *Automatica*, Elsevier Ltd, v. 78, p. 333–340, 2017. ISSN 00051098. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.automatica.2016.12.022>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 49.

TARASOV, V. E.; TARASOVA, V. V. Long and short memory in economics: fractional-order difference and differentiation. *arXiv preprint arXiv:1612.07903*, 2016. Citado na página 45.

TARASOVA, V. V.; TARASOV, V. E. Logistic map with memory from economic model. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 95, p. 84–91, 2017. Citado na página 45.

TEODORO, G.; OLIVEIRA, D.; OLIVEIRA, E. Sobre derivadas fracionárias. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 40, n. 2, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 39.

TEODORO, G. S. Derivadas fracionárias: tipos e critérios de validade. 2019. Citado 3 vezes nas páginas 30, 31 e 32.

TOLEDO-HERNANDEZ, R.; RICO-RAMIREZ, V.; IGLESIAS-SILVA, G. A.; DIWEKAR, U. M. A fractional calculus approach to the dynamic optimization of biological reactive systems. part i: Fractional models for biological reactions. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 117, p. 217–228, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 50.

TSAY, C.; LEJARZA, F.; STADTHERR, M. A.; BALDEA, M. Modeling, state estimation, and optimal control for the us covid-19 outbreak. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 10, n. 1, p. 1–12, 2020. Citado na página 50.

UNGER, J.; KRÖNER, A.; MARQUARDT, W. Structural analysis of differential-algebraic equation systems—theory and applications. *Computers & Chemical Engineering*, Elsevier, v. 19, n. 8, p. 867–882, 1995. Citado na página 28.

VALÉRIO, D.; NETO, J.; VINGA, S. Variable order 3d models of bone remodelling. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences. Technical Sciences*, v. 67, n. 3, 2019. Citado na página 45.

VARALTA, N. Das transformadas integrais ao cálculo fracionário aplicado à equação logística. Universidade Estadual Paulista (UNESP), 2014. Citado na página 37.

VASANTHARAJAN, S.; BIEGLER, L. Simultaneous strategies for optimization of differential-algebraic systems with enforcement of error criteria. *Computers & chemical engineering*, Elsevier, v. 14, n. 10, p. 1083–1100, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 22.

VASSILIADIS, V. Computational solution of dynamic optimization problems with general differential-algebraic constraints. Imperial College London (University of London), 1993. Citado na página 104.

VASSILIADIS, V. S.; SARGENT, R. W.; PANTELIDES, C. C. Solution of a class of multistage dynamic optimization problems. 1. problems without path constraints. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, ACS Publications, v. 33, n. 9, p. 2111–2122, 1994. Citado na página 25.

VEERAKLAEW, T.; MALISUWAN, S. The direct approach of general dynamic optimal control: Application on general software. *International journal of the computer, the internet and management*, v. 14, n. 2, p. 82–87, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 99 e 100.

VILLADSEN, J.; MICHELSEN, M. L. Solution of differential equation models by polynomial approximation(book). *Englewood Cliffs, N. J., Prentice-Hall, Inc., 1978. 460 p*, 1978. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 58.

VISWANATHAN, G. M.; RAPOSO, E.; LUZ, M. D. Lévy flights and superdiffusion in the context of biological encounters and random searches. *Physics of Life Reviews*, Elsevier, v. 5, n. 3, p. 133–150, 2008. Citado na página 53.

- VOT, F. L.; ABAD, E.; YUSTE, S. Continuous-time random-walk model for anomalous diffusion in expanding media. *Physical Review E*, APS, v. 96, n. 3, p. 032117, 2017. Citado na página 44.
- WANG, X.; QI, H.; YU, B.; XIONG, Z.; XU, H. Analytical and numerical study of electroosmotic slip flows of fractional second grade fluids. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 50, p. 77–87, 2017. Citado na página 45.
- WEI, S.; CHEN, W.; ZHANG, J. Time-fractional derivative model for chloride ions sub-diffusion in reinforced concrete. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, Taylor & Francis, v. 21, n. 3, p. 319–331, 2017. Citado na página 45.
- WEYL, H. Bemerkungen zum begriff des differentialquotienten gebrochener ordnung. *Vierteljschr. Naturforsch. Gesellsch. Zurich*, v. 62, n. 1–2, p. 296–302, 1917. Citado na página 38.
- WONG, K. T.; LUUS, R. Time suboptimal feedback control of systems described by linear parabolic partial differential equations. *Optimal Control Applications and Methods*, Wiley Online Library, v. 3, n. 2, p. 177–185, 1982. Citado na página 22.
- WU, G.-C.; BALEANU, D.; LUO, W.-H. Lyapunov functions for riemann–liouville-like fractional difference equations. *Applied Mathematics and Computation*, Elsevier, v. 314, p. 228–236, 2017. Citado na página 45.
- XIAO, R.; SUN, H.; CHEN, W. An equivalence between generalized maxwell model and fractional zener model. *Mechanics of Materials*, Elsevier, v. 100, p. 148–153, 2016. Citado na página 45.
- XUE, D. *Fractional-order control systems: fundamentals and numerical implementations*. Berlin, Boston: Walter de Gruyter GmbH & Co KG, 2017. v. 1. Citado na página 45.
- YANG, X.-J.; SRIVASTAVA, H. M.; MACHADO, J. A new fractional derivative without singular kernel: application to the modelling of the steady heat flow. *arXiv preprint arXiv:1601.01623*, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 45.
- YANG, X.-S. *Engineering optimization: an introduction with metaheuristic applications*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2010. Citado na página 54.
- YI-FEI, P. Fractional differential analysis for texture of digital image. *Journal of Algorithms & Computational Technology*, SAGE Publications Sage UK: Londres, Inglaterra, v. 1, n. 3, p. 357–380, 2007. Citado na página 45.
- YUAN, L.; AGRAWAL, O. P. A numerical scheme for dynamic systems containing fractional derivatives. *J. Vib. Acoust.*, v. 124, n. 2, p. 321–324, 2002. Citado na página 46.
- ZHANG, Y.; CHEN, L.; REEVES, D. M.; SUN, H. A fractional-order tempered-stable continuity model to capture surface water runoff. *Journal of Vibration and Control*, Sage Publications Sage UK: Londres, Inglaterra, v. 22, n. 8, p. 1993–2003, 2016. Citado na página 45.
- ZHOKH, A.; STRIZHAK, P. Non-fickian diffusion of methanol in mesoporous media: geometrical restrictions or adsorption-induced? *The Journal of chemical physics*, AIP Publishing LLC, v. 146, n. 12, p. 124704, 2017. Citado na página 45.



ZHOU, C.; SUN, C.; WANG, B.; WANG, X. An improved stochastic fractal search algorithm for 3d protein structure prediction. *Journal of Molecular Modeling*, v. 124-135, p. 1, 2018. Citado na página [56](#).

ZUO, C.; WU, L.; ZENG, Z.-F.; WEI, H.-L. Stochastic fractal based multiobjective fruit fly optimization. *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, v. 27, p. 417–433, 2017. Citado na página [56](#).