



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



MARIA FERNANDA LINDQUIST CHICOTE

ESTUDO E APLICAÇÕES DO CÁLCULO
FRACIONÁRIO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Uberlândia, MG

2025

MARIA FERNANDA LINDQUIST CHICOTE

**ESTUDO E APLICAÇÕES DO CÁLCULO FRACIONÁRIO EM
ENGENHARIA QUÍMICA**

Projeto de Monografia de graduação apresentado à Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários para a aprovação na disciplina Trabalho de Conclusão de Curso, do curso de Engenharia Química.

Universidade Federal de Uberlândia
Faculdade de Engenharia Química
Curso de Graduação em Engenharia Química

Orientador: Fran Sérgio Lobato

Uberlândia, MG
2025

MARIA FERNANDA LINDQUIST CHICOTE

**ESTUDO E APLICAÇÕES DO CÁLCULO FRACIONÁRIO EM
ENGENHARIA QUÍMICA**

Projeto de Monografia de graduação apresentado à Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários para a aprovação na disciplina Trabalho de Conclusão de Curso, do curso de Engenharia Química.

Trabalho aprovado. Uberlândia, MG, 26 de Março de 2025:

Fran Sérgio Lobato
Orientador - FEQUI-UFU

Érika Ohta Watanabe
FEQUI-UFU

Rafael Bruno Vieira
FEQUI-UFU

Uberlândia, MG

2025

“Nada na vida deve ser temido, apenas compreendido. Agora é hora de compreender mais para temer menos”.

Marie Curie

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, aos meus pais, Valéria Lindquist e Cleverson Chicote, que, na arte do cuidado, sempre estiveram presentes para que nada me faltasse nos caminhos que pude trilhar até o momento. Agradeço ao meu irmão, Cauã Lindquist Chicote, por me desafiar a ser melhor a cada tentativa de ser um exemplo de irmã mais velha. Agradeço ao meu orientador, Fran Sérgio Lobato, pela paciência e sabedoria ao repassar o conhecimento de forma lúcida e respeitosa. Agradeço aos meus amigos da faculdade e da vida por todos os momentos em que fomos família em tempos de dificuldades e conquistas. Agradeço aos meus sogros, Cristina Montagnini Carrera e Celso da Silva Carrera, por todo o apoio durante a minha formação. Por fim, gostaria de agradecer ao meu companheiro e namorado, Bruno Montagnini Carrera, por me ensinar que o amor é essa força estranha que me leva a viver e me aventurar por caminhos desconhecidos e desafiadores.

RESUMO

Nas últimas décadas, o interesse pelo estudo de equações diferenciais fracionárias segue uma crescente. Isso se deve ao grande número de aplicações que podem ser desenvolvidas a partir desse conceito. Embora o número de contribuições tenha aumentado de forma significativa, vários aspectos relacionados à influência e ao significado físico de uma ordem fracionária ainda requerem um maior aprofundamento. Além disso, cabe destacar as dificuldades numéricas oriundas da substituição de uma derivada de ordem inteira por uma fracionária. Neste trabalho, os Métodos de Adams-Moulton Fracionário, de Euler Reverso Fracionário e de Euler Direto Fracionário são investigados em aplicações em engenharia química. Para essa finalidade, são avaliados problemas de simulação, inversos e também análise de plano de fases. Para garantir a consistência dimensional no modelo fracionário, é considerado um fator de correção. De maneira geral, foi possível concluir que todas as abordagens numéricas foram eficientes para a integração de modelos diferenciais fracionários com diferentes níveis de complexidade. Todavia, a melhor estratégia em termos do binômio custo computacional versus precisão foi o Método de Adams-Moulton Fracionário. Como esperado, os resultados obtidos demonstraram que a ordem fracionária influencia, de forma significativa, os perfis simulados em cada aplicação. Neste caso, é importante destacar que, dependendo da ordem fracionária considerada, perfis fisicamente inviáveis podem ser obtidos. Ao avaliar dois problemas inversos no contexto fracionário, foi possível concluir que o valor da função objetivo pode ser melhorado, já que a inclusão de um novo parâmetro (ordem fracionária) aumenta o número de graus de liberdade do problema de otimização. Finalmente, em relação à análise do plano de fases, os resultados demonstram que a variação da ordem fracionária modifica o tempo requerido para o processo entrar em regime permanente.

Palavras-chave: Equações Ordinárias Fracionárias, Métodos Numéricos Fracionários, Engenharia Química.

ABSTRACT

In recent decades, interest in the study of fractional differential equations has been growing. This is due to the large number of applications that can be developed from this concept. Although the number of contributions has increased significantly, several aspects related to the influence and physical meaning of a fractional order still require further investigation. Moreover, it is important to highlight the numerical difficulties arising from the substitution of an integer-order derivative by a fractional one. In this work, the Fractional Adams-Moulton Methods, Fractional Backward Euler Method, and Fractional Forward Euler Method are investigated in chemical engineering applications. For this purpose, simulation and inverse problems and phase plane analysis are evaluated. To ensure dimensional consistency in the fractional model, a correction factor is considered. In general, it was concluded that all numerical approaches were efficient for integrating fractional differential models with different levels of complexity. However, the best strategy in terms of the computational cost versus accuracy trade-off was the Fractional Adams-Moulton Method. As expected, the obtained results demonstrated that the fractional order significantly influences the simulated profiles in each application. In this case, it is important to note that depending on the considered fractional order, physically infeasible profiles may be obtained. When evaluating two inverse problems in the fractional context, it was concluded that the objective function value can be improved, as the inclusion of a new parameter (fractional order) increases the degrees of freedom of the optimization problem. Finally, regarding phase plane analysis, the results show that the variation of the fractional order modifies the time required for the process to reach a steady state.

Keywords: Fractional Ordinary Equations, Fractional Numerical Methods, Chemical Engineering.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Fluxograma do algoritmo de Evolução Diferencial	24
Figura 2 – Fluxograma para a formulação e resolução de problemas inversos	30
Figura 3 – Perfis de concentração obtidos para o problema do reator batelada considerando o MAMF e diferentes ordens fracionárias	37
Figura 4 – Perfis de concentração obtidos para o problema do reator bioquímico considerando o MAMF e diferentes ordens fracionárias	39
Figura 5 – Perfis de concentração obtidos para o problema do reator CSTR não isotérmico considerando o MAMF e diferentes ordens fracionárias	41
Figura 6 – Perfis de concentração da espécie <i>A</i> considerando os parâmetros estimados para o problema do reator batelada	43
Figura 7 – Perfis de concentração de açúcar, etanol, dióxido de carbono e dicetona vicinal em função do tempo considerando os parâmetros estimados para o problema de fermentação de cerveja	46
Figura 8 – Perfis de concentração das espécies <i>A</i> e <i>B</i> em função do tempo, estado estacionário e plano de fases para o problema do reator CSTR considerando α igual a 1	48
Figura 9 – Perfis de concentração das espécies <i>A</i> e <i>B</i> em função do tempo, estado estacionário e plano de fases para o problema do reator CSTR considerando diferentes valores para α	49

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Somatório do erro absoluto médio e tempo de processamento considerando o MAMF, MERF e MEDF para EDF_1 e EDF_2	34
Tabela 2 – Erro absoluto médio e tempo de processamento para as abordagens MAF, MERF e MEDF para o problema do reator batelada	36
Tabela 3 – Erro absoluto médio e tempo de processamento para as abordagens MAMF, MERF e MEDF para o problema do reator bioquímico	38
Tabela 4 – Erro absoluto médio e tempo de processamento para as abordagens MAMF, MERF e MEDF para o problema do reator CSTR não isotérmico	40
Tabela 5 – Pontos experimentais da reação entre metanol e trifenil	41
Tabela 6 – Parâmetros estimados considerando o MAMF e o algoritmo de ED para o problema do reator batelada	43
Tabela 7 – Pontos experimentais das concentrações de dióxido de carbono, etanol, açúcar e dicetona vicinal	45
Tabela 8 – Parâmetros estimados considerando o MAMF e o algoritmo de ED para o problema da fermentação da cerveja	46
Tabela 9 – Estado estacionário em função da ordem fracionária e do tempo de simulação para o problema de reator CSTR	49

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1	DERIVADAS FRACIONÁRIAS	6
2.1.1	INTEGRAL FRACIONÁRIA DE RIEMANN-LIOUVILLE	7
2.1.2	DERIVADA DE RIEMMAN-LIOUVILLE	7
2.1.3	DERIVADA DE CAPUTO	8
2.1.4	DERIVADA DE GRÜNWALD-LETNIKOV	8
2.1.5	FUNÇÃO DE MITTAG-LEFFLER	9
2.2	VALIDADE E CRITÉRIOS PARA AS DERIVADAS FRACIONÁRIAS .	10
2.3	EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA FRACIONÁRIA	11
2.4	MÉTODOS ANALÍTICOS E MÉTODOS NUMÉRICOS	11
2.4.1	MÉTODOS ANALÍTICOS PARA A RESOLUÇÃO DE EDOF	12
2.4.1.1	TRANSFORMADAS DE FOURIER E LAPLACE	12
2.4.2	MÉTODOS NUMÉRICOS PARA A RESOLUÇÃO DE EDOF	13
2.4.2.1	MÉTODO DE EULER REVERSO FRACIONÁRIO	14
2.4.2.2	MÉTODO DE EULER DIRETO FRACIONÁRIO	14
2.4.2.3	MÉTODO DE ADAMS-MOULTON FRACIONÁRIO	14
2.4.2.4	MÉTODO DA COLOCAÇÃO ORTOGONAL	15
2.5	ANÁLISE DIMENSIONAL DE UMA EDOF	15
2.5.1	CORREÇÃO DAS UNIDADES NOS PARÂMETROS DO MODELO .	16
2.5.2	FATOR DE CORREÇÃO DO OPERADOR DIFERENCIAL	17
2.6	APLICAÇÕES DO CÁLCULO FRACIONÁRIO EM ENGENHARIA E ÁREAS AFINS	18
2.7	PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO	20
2.7.1	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO .	20
2.7.2	CLASSIFICAÇÃO DOS MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO	21
2.7.2.1	CLASSIFICAÇÃO DE ACORDO COM A ESTRUTURA DA FUNÇÃO OBJETIVO E RESTRIÇÕES	22
2.7.2.2	CLASSIFICAÇÃO DE ACORDO COM A ESTRATÉGIA DE RESOLUÇÃO .	22
2.7.2.3	CLASSIFICAÇÃO PELA QUANTIDADE DE OBJETIVOS	22
2.7.3	ALGORITMO DE EVOLUÇÃO DIFERENCIAL	23
3	METODOLOGIA	27
3.1	MÉTODOS NUMÉRICOS PARA A INTEGRAÇÃO DE UMA EDOF .	27
3.2	CORREÇÃO DO OPERADOR DIFERENCIAL FRACIONÁRIO	28

3.3	ABORDAGEM PARA A RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS INVERSOS EM ENGENHARIA QUÍMICA	29
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	31
4.1	VALIDAÇÃO DAS TÉCNICAS PARA A RESOLUÇÃO DE EDOF	32
4.2	SIMULAÇÃO DE ESTUDOS DE CASO EM ENGENHARIA QUÍMICA	35
4.2.1	REATOR BATELADA	35
4.2.2	REATOR BIOQUÍMICO	36
4.2.3	REATOR CSTR NÃO ISOTÉRMICO	39
4.3	ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS CONSIDERANDO MODELOS FRACIONÁRIOS	40
4.3.1	REATOR BATELADA	41
4.3.2	FERMENTAÇÃO DA CERVEJA	43
4.4	PLANO DE FASES NO CONTEXTO FRACIONÁRIO	47
4.5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	50
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	51
5.1	CONCLUSÕES	51
5.2	CONTRIBUIÇÕES DO TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO	52
5.3	CONTRIBUIÇÕES NA FORMAÇÃO PROFISSIONAL	52
5.4	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	53
	REFERÊNCIAS	55

1 INTRODUÇÃO

O emprego de modelos matemáticos com a finalidade de representar fenômenos observados na natureza caracteriza-se como uma metodologia de grande importância, visto que sua aplicabilidade pode ser atribuída a simulações, análises, projetos, pesquisas, otimização e controle de sistemas na engenharia e em diversas áreas do conhecimento. Em sua amplitude, a modelagem matemática pode ser aplicada em diversos campos, como na física, na química, na biologia, na economia, entre outros. De modo particular, na engenharia química, a modelagem matemática, em conjunto com a simulação de processos, é vista como uma ferramenta importante, cujo papel é validar a integridade de um projeto e garantir sua viabilidade operacional, com base em uma descrição numérica fundamentada nas leis de conservação da física e da química (FRANCO, 2021). Com isso, modelar um sistema de engenharia é predizer o comportamento dos processos de interesse em uma determinada área de conhecimento. Isso é feito por meio do estudo do comportamento de um processo representado por um conjunto de equações matemáticas com diferentes níveis de complexidade. A modelagem abre a possibilidade de comparar diferentes entradas e suas respectivas saídas para sistemas onde pode ser inviável (fisicamente ou economicamente) a realização de uma série de experimentos. Cabe destacar que o uso desses modelos é essencial para a comparação de diferentes cenários, bem como na otimização dos processos, garantindo maior eficiência e segurança na implementação prática, já que os riscos e custos associados, por exemplo, às prováveis falhas, podem ser mensurados e, estrategicamente, minimizados de forma simplificada (OGUNNAIKE; RAY, 1994).

É importante ressaltar que a complexidade de um modelo matemático empregado para representar um dado sistema de engenharia é função das hipóteses consideradas para a sua elaboração, as quais são dadas pelo acréscimo de contribuições de balanços de massa, energia e quantidade de movimento (BEQUETTE, 1998). Tais hipóteses, por sua vez, são responsáveis por limitar a abrangência da aplicabilidade desses modelos, uma vez que os fenômenos encontrados na natureza possuem caráter não linear intrínseco e, como consequência disso, sua extração não pode ser realizada de maneira simples na maioria das aplicações práticas. Tradicionalmente, os modelos encontrados na literatura são representados por sistemas de equações algébricas (lineares e não lineares), equações diferenciais (ordinárias e parciais), equações integro-diferenciais, equações algébrico-diferenciais ou, mais frequentemente, uma combinação de todas essas classes. Dessa forma, é importante destacar que as equações diferenciais são comumente descritas por derivadas de ordem inteira, o que simplifica os modelos ao ignorar um operador diferencial com ordem não inteira (fracionária) na dinâmica de cada processo estudado.

Nesse sentido, as Equações Diferenciais Ordinárias Fracionárias (EDOF) e as Equações Diferenciais Parciais Fracionárias (EDPF) generalizam os modelos diferenciais convencionais de ordens inteiras para uma abordagem mais abrangente, capaz de incorporar o impacto das ordens

fracionárias na análise desses modelos (RODRIGUES; OLIVEIRA, 2015). Dessa maneira, é possível inferir que essa estrutura caracteriza uma representação mais fiel e precisa dos fenômenos naturais, pois oferece um potencial significativo para a modelagem de sistemas complexos ao capturar efeitos de memória, interações não locais e escalas de tempo múltiplas (MACHADO, 2018).

Sendo assim, o interesse pelo estudo de equações diferenciais com operadores de ordem fracionária se deve à capacidade que esses operadores possuem de incluir termos de forças externas, os quais podem variar com o tempo e com o espaço. Essa habilidade é avaliada pela natureza integro-diferencial das equações diferenciais fracionárias, que faz uso de informações contidas nos pontos anteriores da solução, e não apenas dos valores atuais e das taxas de variação instantâneas dos sistemas, como é usualmente considerado em equações diferenciais ordinárias de ordem inteira (PODLUBNY et al., 2009). Diante disso, tais equações combinam aspectos de integração e diferenciação ao longo do tempo ou espaço de forma contínua e acumulativa, o que as torna capazes de modelar fenômenos onde o denominado efeito de memória e o efeito do atraso no tempo são aspectos importantes para uma descrição mais compatível com a realidade do sistema físico em análise. Entre esses sistemas físicos, pode-se citar a reologia em materiais viscoelásticos, sistemas de controle ativo com feedback e a transferência de calor em materiais compostos, onde os fluxos de calor podem possuir características complexas e interdependentes que podem ser melhor representados de acordo com o cálculo fracionário (MACHADO et al., 2010; RODRIGUES; OLIVEIRA, 2015).

Na prática, diferentemente do operador de ordem inteira, o fracionário pode ser representado de várias formas (PODLUBNY et al., 2009). Neste caso, sob a perspectiva matemática, para a resolução de um modelo diferencial fracionário, seja de maneira analítica ou numérica, faz-se necessário, primeiramente, escolher o tipo de aproximação para a derivada fracionária que se pretende considerar. Além disso, é importante ressaltar a influência da ordem diferencial fracionária, a qual possui um papel crucial no comportamento do sistema modelado, no que tange à resposta dinâmica e à sua estabilidade. Por fim, a consistência dimensional deve ser rigorosamente analisada para que a derivada em questão preserve as unidades pertinentes à grandeza física envolvida; caso contrário, o modelo matemático não será fisicamente válido e, consequentemente, não poderá representar o sistema real de maneira adequada (GODOI, 2022).

No que diz respeito à resolução usando estratégias analíticas no contexto fracionário, as transformadas de Laplace e Fourier são tradicionalmente utilizadas. No entanto, é fundamental destacar que soluções analíticas para equações diferenciais fracionárias não podem ser obtidas para todo e qualquer sistema, devido às não linearidades presentes nestes modelos, ou seja, só existe solução analítica para modelos matemáticos bem específicos. Na maioria dos problemas, é necessário recorrer a métodos numéricos para obter tais soluções (LIMA; LOBATO; AROUCA, 2018). Neste caso, em linhas gerais, faz-se necessário aplicar técnicas de discretização específicas para os modelos fracionários, como é o caso do Método das Diferenças Finitas (MDF) (LIU;

HOU, 2017).

Portanto, o MDF (Explícito ou Implícito) é classificado como uma das técnicas mais usuais para a resolução desses modelos, pois, apesar de sua dependência com o número de pontos de discretização, ele possui simplicidade no que diz respeito aos seus conceitos e à sua implementação (SZEKERES; IZSÁK, 2015). Na literatura especializada, diferentes tipos de estratégias para resolver problemas no contexto fracionário podem ser encontrados. Dentre estas, Lobato et al. (2020) propuseram a extensão do Método da Colocação Ortogonal para a resolução de EDPF como alternativa para minimizar o efeito do número de pontos de discretização e, consequentemente, a dimensão do problema a ser analisado. Godoi (2022) propôs duas abordagens numéricas, a saber, o Método Pseudo-Espectral de Legendre e o Método das Diferenças Finitas Fracionário, para a integração de EDOF com aplicação em fenômenos de transporte anômalo.

Diante do que foi apresentado, este trabalho tem como foco principal resolver numericamente EDOF. Os principais objetivos são definidos como segue: *i*) implementar estratégias numéricas para a resolução de EDOF; *ii*) avaliar a influência da ordem fracionária durante a simulação de sistemas clássicos em engenharia química; *iii*) propor e resolver problemas de estimação de parâmetros em que a ordem fracionária é uma das incógnitas; *iv*) comparar os resultados obtidos com aqueles reportados considerando outras estratégias; e *v*) garantir a consistência dimensional dos modelos representados por EDOF.

Este trabalho está estruturado da seguinte forma: O Capítulo 2 apresenta uma revisão sobre equações diferenciais fracionárias (contexto histórico, tipos de derivadas fracionárias, métodos analíticos e numéricos), análise dimensional e a descrição do problema de otimização, bem como o algoritmo de Evolução Diferencial (ED) (STORN; PRICE, 1995). Já no Capítulo 3, serão destacadas as metodologias para a integração de uma EDOF e a correção do operador diferencial no que tange à sua dimensionalidade, além de demonstrar como essas diferentes abordagens podem ser aplicadas ao cenário de resolução de problemas inversos. Os resultados e discussões considerando estudos de caso em engenharia química com diferentes níveis de complexidade são apresentados no Capítulo 4. Por fim, o Capítulo 5 apresenta as conclusões e as sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A origem do cálculo fracionário está relacionada com uma troca de correspondências entre os matemáticos L'Hopital e Leibniz no ano de 1695, em que L'Hopital questionava Leibniz sobre a notação que ele havia utilizado para a n -ésima derivada da função linear $f(x) = x$ ($D^n x$) em uma de suas publicações. A indagação girava em torno da dúvida sobre a resolução caso n fosse igual a $1/2$, e a resposta de Leibniz foi entusiasta para novos estudos acerca do tema, tendo em vista as potenciais aplicações que tais investigações poderiam ter para problemas físicos e matemáticos (LOVERRO, 2004).

Após esse primeiro questionamento, pesquisadores como Leibniz, Euler, Fourier, Laplace, Lagrange, Lacroix, entre outros, começaram a avaliar o tema. Contudo, os estudos relacionados ao cálculo fracionário eram restritos a investigações teóricas matemáticas, ou seja, não havia uma aplicação característica bem definida e consistente do cálculo fracionário na matemática ou em outras áreas do conhecimento. Desse modo, foi apenas no ano de 1832 que foi desenvolvida a primeira aplicação do cálculo fracionário para a solução do problema da tautocronia via avaliação de integrais de ordem igual a $1/2$ (CAFAGNA, 2007).

Interessado por esse trabalho, Liouville foi o autor do primeiro estudo sistemático sobre o cálculo fracionário, seguido por Riemann, responsável por desenvolver a representação mais clássica de derivada fracionária, denominada Riemann-Liouville. Em contraste com a abordagem de Riemann-Liouville, a qual utiliza uma integral para representar a derivada, Grünwald e Letnikov desenvolveram uma abordagem para derivadas de ordem não inteira utilizando um somatório de uma série infinita onde a ordem inteira é substituída por uma ordem arbitrária α (LORENZO, 2007). Em seguida, Hadamard (1892) publicou um artigo onde apresentou uma metodologia capaz de calcular a derivada de ordem não inteira de uma função analítica em termos de sua série de Taylor. Esses estudos contribuíram para a ampliação das bases teóricas do cálculo fracionário e, consequentemente, estabeleceram fundamentos matemáticos rigorosos para posteriores aplicações práticas.

Nessas condições, pode-se dizer que a maioria dos estudos relevantes sobre o cálculo fracionário foi elaborada de maneira puramente matemática até o final do século XIX. A ascensão de análises que destacavam a análise de fenômenos naturais teve seu início após o ano de 1900, período no qual o tema ganha destaque e revela grandes avanços em aplicações de engenharia e ciência (MILLER; ROSS, 1993). Algumas derivadas que podem ser citadas são as de autores como Weyl, Riesz, Marchaud, Caputo e Kolwankar. Weyl desenvolveu uma definição de derivada para abordar problemas específicos associados a funções periódicas, oferecendo uma abordagem que se mostrou fundamental para o estudo de fenômenos oscilatórios e harmônicos (CAMARGO; OLIVEIRA, 2015). Já Riesz formulou o teorema do valor médio para integrais fracionárias

e introduziu uma nova abordagem relacionada à transformada de Fourier, fato que ampliou a aplicação de estudos de equações diferenciais fracionárias tanto na análise harmônica quanto em equações diferenciais parciais (DEBNATH; BHATTA, 2007). Enquanto Marchaud ofereceu uma nova definição para derivadas de ordem não inteira α ($0 < \alpha < 1$). Tal definição possibilitou que um maior número de problemas físicos pudessem ser analisados no contexto fracionário.

Caputo, revisitando a definição da derivada fracionária de Riemann-Liouville, realizou uma simples modificação que se fundamentava na troca da ordem dos operadores da derivada e da integral. Essa alteração simplificou a aplicação da derivada fracionária em problemas de valor inicial ao considerar derivadas inteiras em suas condições iniciais, fato que proporcionou avanços nas aplicações tanto da física quanto da engenharia. Kolwankar e Gangal (1996) propuseram uma reformulação da derivada fracionária de Riemann-Liouville para a inclusão de funções fractais que não são diferenciáveis em qualquer ponto no contexto tradicional. Tal metodologia aumentou o alcance do cálculo fracionário em relação a um maior conjunto de funções.

Além dessas, também se destacam as derivadas de Chen, Hadamard, Osler, Hilfer, Davidson-Essex, Coimbra, Canavati, Cossar, Jumarie, Caputo-Hadamard e Hilfer-Katugampola (OLIVEIRA; OLIVEIRA, 2018). Do ponto de vista numérico, cada uma destas derivadas pode ser empregada para aproximar termos fracionários, transformando o problema original em um equivalente puramente algébrico (PODLUBNY, 1998). De todas as definições de derivadas mencionadas, as mais usuais são as de Grünwald-Letnikov, Riemann-Liouville e Caputo, as quais serão aprofundadas neste estudo adiante.

2.1 DERIVADAS FRACIONÁRIAS

Nesta seção, é introduzido o conceito de Integral fracionária, conforme proposto por Riemann-Liouville, bem como as definições mais tradicionais empregadas para a representação de derivadas fracionárias, a saber, as derivadas de Riemann-Liouville, Caputo e Grünwald-Letnikov. Também são apresentadas algumas aplicações dessas derivadas na engenharia, além de destacar as suas limitações.

Entre as diversas formulações de derivada fracionária presentes na literatura, destacam-se as de Riemann-Liouville e Caputo, as quais são as duas configurações mais usuais para a apresentação de novas formas de modelar uma derivada fracionária. É importante destacar que a multiplicidade de definições de derivadas fracionárias advém da ausência de uma interpretação geométrica e/ou física clara, diferentemente do cálculo inteiro, onde a derivada está diretamente ligada à tangente de uma curva em um ponto específico. Apesar disso, as derivadas fracionárias são atribuídas à generalização do conceito de derivadas de ordem inteira e são capazes de fornecer uma descrição mais precisa dos fenômenos encontrados na natureza, que comumente são representados por modelos complexos e não-lineares (LORENZO, 2007).

Nesse sentido, destaca-se o papel crucial dessas derivadas fracionárias para a modelagem

de fenômenos complexos com dinâmicas não-lineares, como, por exemplo, o estudo da difusão anômala, onde a ordem arbitrária garante uma maior proximidade com a realidade a partir do momento em que considera os efeitos de memória e influências não-locais (TATEISHI; RIBEIRO; LENZI, 2017). Diante desse contexto, de modo divergente das equações diferenciais ordinárias de ordem inteira, que consideram apenas os valores atuais e as taxas de variação instantâneas dos sistemas, as derivadas fracionárias levam em conta a influência de todos os estados passados do sistema na solução atual. Isso é particularmente relevante para a difusão anômala, como citado acima, onde o comportamento das partículas desvia do padrão esperado pela Lei de Fick clássica devido às interações complexas que são mais bem descritas pela consideração da dependência temporal de maneira não-linear (PEDRON, 2003).

2.1.1 INTEGRAL FRACIONÁRIA DE RIEMANN-LIOUVILLE

Visto que a maioria das formulações de derivadas fracionárias, como a de Riemann-Liouville e Caputo, envolvem a aplicação de uma integral fracionária, é fundamental introduzir sua definição previamente (TEODORO; OLIVEIRA; C., 2018). Sendo assim, considere a integral fracionária de Riemann-Liouville de ordem α da função f definida como:

$$J^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{\alpha-1} F(\tau) d\tau \quad (2.1)$$

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

2.1.2 DERIVADA DE RIEMMAN-LIOUVILLE

A derivada de Riemann Liouville (${}_{RL}D_x^\alpha F(x)$) é definida como uma de ordem inteira, mas que está relacionada com uma integral de ordem arbitrária:

$${}_{RL}D_x^\alpha F(x) = \frac{1}{\Gamma(y-\alpha)} \frac{d^y}{dt^y} \int_0^t \frac{F(t)}{(\tau-t)^{\alpha+1-y}} dt, \quad (2.2)$$

onde y é o menor número inteiro maior que α e Γ é a função gama.

Ela é amplamente utilizada na obtenção de soluções analíticas para as equações diferenciais de ordem fracionária. Contudo, essa formulação apresenta limitações no que tange as suas condições iniciais (complexas), pois são expressas em termos de uma integral fracionária. Tais condições iniciais diminuem a aplicabilidade prática da abordagem, uma vez que dificultam a interpretação do problema (RODRIGUES; OLIVEIRA, 2015). Com isso, a derivada de Riemann-Liouville, apesar de ter sua utilidade para soluções analíticas, é menos conveniente para a análise de sistemas físicos e de engenharia.

2.1.3 DERIVADA DE CAPUTO

A Definição da derivada de Caputo (${}_C D_x^\alpha F(x)$) de uma função genérica $F(x)$ com relação à variável independente x é dada por:

$${}_C D_x^\alpha F(x) = \frac{1}{\Gamma(y - \alpha)} \int_0^x (x - t)^{y - \alpha - 1} \frac{d^y F(t)}{dt^y} dt \quad (2.3)$$

em que Γ é a Função Gamma e y é um número inteiro, definido conforme a derivada de Riemann-Liouville.

Diferentemente da definição de Riemann-Liouville, a derivada de Caputo trata de uma integral de ordem arbitrária de uma derivada de ordem inteira. Em outras palavras, a principal diferença em relação à definição anterior é a ordem da diferenciação, que, na formulação de Caputo, é aplicada à função $F(t)$ dentro da integral, e não com o seu resultado.

Sendo assim, a formulação proposta por Caputo é especialmente relevante devido à sua capacidade de incorporar condições iniciais com uma interpretação física clara, já que essas são dadas em termos de equações diferenciais de ordem inteira (CARVALHO; OTTONI, 2018), diferentemente da derivada de Riemann-Liouville. Essa característica torna a formulação de problemas mais intuitiva. No entanto, a complexidade matemática envolvida na resolução das equações resultantes geralmente torna necessário o uso de métodos numéricos. Esses métodos são escolhidos conforme a natureza do problema, condições de contorno, necessidade de precisão e eficiência computacional (PODLUBNY et al., 2009).

2.1.4 DERIVADA DE GRÜNWALD-LETNIKOV

A Derivada fracionária de Grünwald-Letnikov (${}_G L D_x^\alpha F(x)$) de uma função genérica $F(x)$ com relação à variável independente x é definida através do limite da seguinte série:

$${}_G L D_x^\alpha F(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \left(\frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\frac{\alpha!}{k!(\alpha - k)!} \right) F(x - kh) \right) \quad (2.4)$$

em que h é o tamanho do passo de integração e α é a ordem fracionária.

Tal formulação é empregada para a resolução de equações numéricas e pode ser entendida como uma generalização das formulações propostas por Riemann-Liouville e Caputo, pois ambas podem ser matematicamente obtidas a partir dela (RODRIGUES; OLIVEIRA, 2015). É importante destacar que a formulação acima está ligada a uma soma ponderada de valores de memória da função $F(x)$, em que os coeficientes binomiais representam a função de pesos, determinando a contribuição de cada valor passado descrito por $F(x - kh)$ na derivada fracionária. Através de uma análise matemática, é possível demonstrar que tais coeficientes dependem da ordem α e possuem a propriedade de decrescer conforme o aumento de k , o qual representa o número de passos discretos no passado a partir do tempo atual t . O valor de k varia de 0 até $\frac{t-a}{h}$ e corresponde ao número de passos necessários para ir de t até o ponto inicial a .

De acordo com o supracitado, a derivada de Grünwald-Letnikov tem sua dependência direta na discretização temporal, pois considera todos os valores passados da variável a ser diferenciada. Essa característica traz consigo uma limitação significativa, a saber, o elevado custo computacional associado a passos de integração com intervalos pequenos (COSTA, 2021). Portanto, encontrar um equilíbrio entre a precisão desejada e a viabilidade computacional é crucial ao utilizar essa abordagem.

2.1.5 FUNÇÃO DE MITTAG-LEFFLER

Entre os anos de 1902 e 1905, Mittag-Leffler introduziram a clássica função que recebe os nomes destes matemáticos. Está é denotada por $E_\alpha(z)$, e depende apenas de um parâmetro α (MITTAG-LEFFLER, 1903). Essa função foi definida a partir de uma série de potências que abrange a função Gama e pode ser considerada uma generalização da função exponencial para o cenário fracionário, fato que a torna importante para a resolução de equações diferenciais fracionárias.

Definição 1. Sejam $z \in \mathbb{C}$ e α um parâmetro complexo com $\mathbb{R}(\alpha) > 0$. A função de Mittag-Leffler de um parâmetro é definida como (PODLUBNY et al., 2009):

$$E_\alpha(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(\alpha n + 1)} \quad (2.5)$$

onde $\Gamma(\cdot)$ é a Função Gamma, também denominada de função de Euler de segunda espécie, e que generaliza o fatorial para números reais e complexos (OLIVEIRA, 2012).

Com o avanço dos estudos no campo do cálculo fracionário ao longo do século XX, a função de Mittag-Leffler de dois parâmetros foi introduzida por Humbert e Agarwal (1953). Posteriormente, Prabhakar (1971) apresentou a função de Mittag-Leffler de três parâmetros, ampliando significativamente suas aplicações e a compreensão teórica da função.

Definição 2. Sejam $z \in \mathbb{C}$ e μ e β dois parâmetros complexos com $\mathbb{R}(\alpha) > 0$. A função de Mittag-Leffler com dois parâmetros é definida como:

$$E_{\mu,\beta}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(\mu n + \beta)} \quad (2.6)$$

onde $\Gamma(\cdot)$ é a função gama.

Definição 3. Sejam $z \in \mathbb{C}$ e μ , β e γ três parâmetros complexos com $\mathbb{R}(\mu) > 0$. A função de Mittag-Leffler com três parâmetros é definida por meio de uma série de potências:

$$E_\gamma(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\gamma)_n z^k}{\Gamma(\mu n + \beta) n!} \quad (2.7)$$

onde γ_n é um parâmetro adicional denominado símbolo de Pochhammer.

2.2 VALIDADE E CRITÉRIOS PARA AS DERIVADAS FRACTIONÁRIAS

Diante da diversidade de formulações envolvendo derivadas fracionárias, foi estabelecido por [Ross \(1975\)](#) um conjunto de critérios, baseado em 5 propriedades, capaz de diferenciar se uma determinada derivada poderia ser considerada não-inteira. Este trabalho forneceu a primeira estrutura formal para entender como as derivadas de ordem fracionária poderiam ser definidas de maneira rigorosa e consistente. Essa abordagem visava garantir se tais derivadas fracionárias se caracterizavam como uma extensão suficientemente coerente para as derivadas inteiras via análise de linearidade, causalidade e redução à derivada clássica. Sendo assim, tal critério consistia em construir uma base matemática sólida e generalizada, sem a necessidade de considerar sua aplicabilidade em condições específicas e individuais de sistemas físicos e de engenharia.

Portanto, da mesma maneira que o trabalho de Ross estabeleceu bases teóricas necessárias, esse direcionou novas pesquisas. [Ortigueira e Machado \(2015\)](#) propuseram adaptações nos operadores fracionários para torná-los mais aplicáveis a sistemas físicos. Isto se baseava um alguns critérios, definidos como:

- A derivada fracionária deve ser linear para que a operação de diferenciação matemática seja consistente com as propriedades definidas pela álgebra linear.
- A operação de diferenciação fracionária, quando a ordem é um inteiro, deve coincidir com o resultado da diferenciação ordinária. Tal propriedade garante que a derivada fracionária possa ser considerada uma extensão das derivadas tradicionais.
- A aplicação sucessiva de duas derivadas fracionárias de ordem μ e β deve ser igual a derivada fracionária de ordem $\mu+\beta$ quando $\mu < 0$ e $\beta < 0$, $D^\alpha D^\beta = D^{(\mu+\beta)} f(x)$, de acordo com a lei dos expoentes.
- A derivada de ordem zero de uma função é a própria função, $D_0 f(x) = f(x)$.
- A regra de Leibniz generalizada estabelece como a derivada fracionária de um produto de funções deve ser calculada, isto é; $D^\mu(f(x)g(x)) = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\mu}{k} D^{\mu-k} f(x) D^k g(x)$, em que:

$$\binom{\mu}{k} = \frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\mu - k + 1)!} \quad (2.8)$$

As formulações de Riemann-Liouville, Caputo e Grünwald-Letnikov apresentadas nesse trabalho satisfazem tanto os critérios proposto por [Ross \(1975\)](#) quanto por [Ortigueira e Machado \(2015\)](#). Neste Trabalho não será apresentada as provas matemáticas para tais critérios, contudo elas estão presentes em detalhes em ([TEODORO, 2019](#)).

2.3 EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA FRACIONÁRIA

Nesta contribuição, considera-se uma Equação Diferencial Ordinária Fracionária (EDOF) definida como (CAFAGNA, 2007):

$$\begin{cases} D^\alpha y(t) = f(t, y(t)), & t \in (0, T], T > 0 \\ y^{(j)}(0) = y_0^{(j)}, & j = 0, 1, \dots, n-1 \end{cases} \quad (2.9)$$

onde t é a variável independente, y é o vetor de variáveis dependentes (y_0 é o vetor que contém a condição inicial associada a cada variável dependente). f é o vetor que contém o lado direito do modelo diferencial fracionário, α é a ordem fracionária ($\alpha > 0$), $n = [\alpha]$ é o primeiro inteiro não menor que α ($0 < \alpha \leq 1$) e T é o tempo final ($T > 0$).

2.4 MÉTODOS ANALÍTICOS E MÉTODOS NUMÉRICOS

Para a resolução da EDOF definida, é importante destacar a diferença entre os métodos analíticos e métodos numéricos de solução. Os métodos analíticos visam encontrar soluções exatas e explícitas através de algumas técnicas matemáticas bem estabelecidas e adaptadas para o contexto fracionário, como é o caso da Transformada de Laplace, Função de Mittag-Leffler, Transformada de Fourier e Expansão em Série de Potências. Contudo, apesar desses métodos analíticos não estarem sujeitos a erros de aproximação numérica, sua solução muitas vezes é difícil ou até mesmo inviável de se obter devido à natureza complexa e não-linear da EDOF. Essa limitação torna a utilização de métodos analíticos inadequada para a resolução de grande parte das equações fracionárias encontradas em problemas práticos (TEODORO, 2019).

Neste caso, para equações fracionárias complexas ou não-lineares o mais usual é a utilização de diferentes métodos numéricos para a resolução. Embora tais métodos forneçam soluções sujeitas a erros de truncamento e/ou arredondamento, eles são preferíveis quando a solução exata não é passível de ser encontrada. Este tipo de estratégia é uma abordagem flexível e generalizada, visto que pode ser aplicada em uma série de estudos com diferentes níveis de complexidade (PODLUBNY et al., 2009). Dentre a variedade de métodos numéricos existentes, há a classificação desses em métodos implícitos e explícitos. Nesse sentido, enquanto nos métodos explícitos a solução em um determinado ponto é calculada através de valores anteriores, fato que confere certa limitação do tamanho do passo no tempo. Os métodos implícitos requerem a resolução de sistemas algébricos, provavelmente não lineares, a cada passo de integração, pois não dependem apenas de valores anteriores, mas também de valores atuais. Com isso, os métodos implícitos se enquadram como uma metodologia mais robusta, porém com maior custo computacional (BATHE, 2007).

2.4.1 MÉTODOS ANALÍTICOS PARA A RESOLUÇÃO DE EDOF

As Transformadas de Fourier e de Laplace em conjunto com a Função de Mittag-Leffler, desempenham um papel fundamental na resolução de EDOF (PODLUBNY, 1998). Estas são capazes de simplificar, em casos específicos, a resolução de tais equações. Cada uma dessas ferramentas possui particularidades específicas no contexto fracionário, e seu emprego depende da natureza e restrições presentes nas diferentes aplicações práticas no contexto do cálculo fracionário.

Diante disso, enquanto as Transformadas de Laplace e de Fourier auxiliam na transformação de derivadas fracionárias em equações algébricas no domínio da frequência, com a finalidade de facilitar a manipulação durante a resolução de tais equações, a Função de Mittag-Leffler pode ser interpretada como uma generalização da função exponencial, pois desempenha um papel análogo para equações diferenciais fracionárias ao que a função exponencial desempenha para equações diferenciais ordinárias lineares (TEODORO, 2019).

2.4.1.1 TRANSFORMADAS DE FOURIER E LAPLACE

A abordagem matemática das transformadas de integrais, como as de Fourier e de Laplace, têm sua importância na determinação das soluções de EDOF com condições de contorno iniciais ou específicas. A transformada de Laplace, em particular, se destaca como uma abordagem direta e eficaz para a resolução de problemas com condições iniciais. Tal técnica envolve a transformação de equações diferenciais no domínio do tempo t em equações algébricas no domínio de s , simplificando a solução do problema. Após a manipulação da equação no domínio s , a transformada inversa é aplicada para o retorno da solução ao domínio de t (BOYCE; DIPRIMA, 2010). Já a transformada de Fourier fornece uma perspectiva particular e adequada para a análise de sinais e sistemas no domínio da frequência, a partir do momento no qual ela é responsável por decompor um sinal em seus componentes elementares seno e cosseno (LIMA, 2018).

Definição 1. Seja $f(t)$ uma função definida para $t > 0$. A transformada de $f(t)$, denotada por $\mathcal{L}[f(t)](s) = F(s)$, é definida como:

$$\mathcal{L}[f(t)](s) = F(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (2.10)$$

onde s é uma variável complexa, tal que $s = \sigma + i\tau$, com $\sigma \in \mathbb{R}$ representando a parte real e $i\tau$ sendo a parte imaginária.

Dessa maneira, a transformada de Laplace de uma dada função $f(t)$ envolve uma integral imprópria cujos limites inferior e superior são, respectivamente, 0 e $-\infty$. Tal fato ocorre, pois sua aplicação envolve problemas causais, ou seja, os valores de $f(t)$ são iguais a zero quando $t < 0$.

Definição 2. No caso particular em que $\sigma = 0$ e os limites são iguais a zero e $f(t)$, $s = i\tau$ e $F(\omega)$ correspondem à transformada de Fourier de $f(t)$. Neste cenário, a transformada $F(\omega)$ obtida a partir da Transformada de Laplace corresponde diretamente à Transformada de Fourier de $f(t)$, que é dada por:

$$\mathcal{F}[f(t)] = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \quad (2.11)$$

Sendo assim, é possível dizer que a função $F(f)(\omega)$, chamada de Transformada de Fourier de $f(t)$, captura todas as informações existentes na função original $f(t)$. Isso ocorre devido à existência da operação de transformada inversa, denotada por F^{-1} , que permite recuperar $f(t)$ a partir de $F(f)(\omega)$ (TITCHMARSH, 1962). Sua definição está dada a seguir como:

$$f(t) = F^{-1}(F(\omega)) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

2.4.2 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA A RESOLUÇÃO DE EDOF

Métodos numéricos como os de Euler e de Adams têm sua importância na resolução de EDOF, visto que oferecem aproximações para o perfil de interesse. Ao considerar o Método de Euler, é importante destacar que esse método trata-se de uma abordagem numérica linear de único passo, ou seja, para uma função $f(t_k, y_k)$ o cálculo do próximo passo y_{k+1} depende apenas de informações do ponto atual t_k , do valor da função em y_k e, possivelmente, de sua derivada em t_k , dada pela inclinação da curva ($f(t_k, y_k)$). Dessa forma, para cada iteração, o próximo valor da função pode ser calculado de maneira independente (MAIOLI, 2015). Diante disso, é possível distinguir a técnica numérica mencionada em Método de Euler Direto Fracionário e Método de Euler Reverso Fracionário. O primeiro é um método explícito, enquanto o segundo é um método implícito, que serão posteriormente explorados de maneira mais detalhada.

Por outro lado, os Métodos de Adams são definidos como abordagens numéricas lineares de múltiplos passos, o que significa que, ao considerar uma função $f(t_k, y_k)$, o cálculo de y_{k+1} é feito considerando valores anteriores (y_{k-1}, y_{k-2}, \dots), em vez de depender apenas do valor atual da função em t_k e y_k . Dentre essa classe de métodos, destacam-se os Métodos de Adams-Basforth e de Adams-Moulton, sendo tais métodos classificados como explícito e implícito, respectivamente (GARRAPPA, 2010).

Vale ressaltar que, no entanto, a escolha entre empregar métodos numéricos de único passo e de múltiplos passos deve ser feita baseando-se nas especificações do problema a ser estudado. Enquanto os métodos numéricos de único passo são preferíveis para análises simples, com curtos intervalos de tempo e poucas restrições quanto à precisão, os de múltiplos passos conferem a problemas complexos, ou que necessitam da avaliação do sistema em longos períodos de tempo, maior estabilidade e precisão (ATKINSON, 1991).

Cabe destacar que, para resolver um problema usando uma abordagem implícita, é preciso avaliar uma equação, provavelmente, não linear em relação à incógnita y_{k+1} . Na prática, isso significa que, para integrar um modelo diferencial fracionário usando uma estratégia implícita, é necessário resolver um sistema algébrico, provavelmente, não linear, a cada passo de integração. Essa particularidade proporciona maior estabilidade, mas garante maior complexidade e um maior custo computacional.

Nesta contribuição, serão detalhadas as abordagens numéricas MERF, o MEDF e MAMF.

2.4.2.1 MÉTODO DE EULER REVERSO FRACIONÁRIO

Do ponto de vista matemático, o Método de Euler Reverso Fracionário (MERF), também conhecido como Método de Euler Implícito Fracionário (MEIF), é dado como:

$$y_{k+1} = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{t_{k+1}^j}{j!} y_0^{(j)} + \frac{h^\mu}{\Gamma(\mu+1)} \sum_{j=0}^k b_{j,k+1} f(t_{j+1}, y_{j+1}) \quad (2.12)$$

e os coeficientes b são dados pela Eq. 2.14.

2.4.2.2 MÉTODO DE EULER DIRETO FRACIONÁRIO

O Método de Euler Direto Fracionário (MEDF), também conhecido como Método de Euler Explícito Fracionário (MEEF) é dado como:

$$y_{k+1} = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{t_{k+1}^j}{j!} y_0^{(j)} + \frac{h^\mu}{\Gamma(\mu+1)} \sum_{j=0}^k b_{j,k+1} f(t_j, y_j) \quad (2.13)$$

em que Γ é a função Gama e os coeficientes b são computados como:

$$b_{j,k+1} = (k-j+1)^\mu - (k-j)^\mu \quad (2.14)$$

2.4.2.3 MÉTODO DE ADAMS-MOULTON FRACIONÁRIO

Já o Método de Adams-Moulton é uma estratégia implícita. Neste caso, para atualizar y_{k+1} , faz-se necessário predizer o valor de y (y_{k+1}^p). Assim, o Método de Adams-Moulton Fracionário é descrito como segue:

$$y_{k+1}^p = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{t_{j+1}^j}{j!} y_0^{(j)} + \frac{h^\mu}{\Gamma(\mu+1)} \sum_{j=0}^k b_{j,k+1} f(t_j, y_j), \quad (2.15)$$

onde $b_{j,k+1}$ são os coeficientes definidos pela Eq. 2.14, e y_{k+1}^p é a solução preditiva. De posse do valor predito, o valor de y_{k+1} (etapa de correção) é computado como:

$$y_{k+1} = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{t_{j+1}^j}{j!} y_0^{(j)} + \frac{h^\mu}{\Gamma(\mu+2)} \left(\sum_{j=0}^k a_{j,k+1} f(t_j, y_j) + a_{k+1,k+1} f(t_{k+1}, y_{k+1}^p) \right) \quad (2.16)$$

onde $a_{j,k+1}$ são os coeficientes para o método de Adams-Moulton.

Os coeficientes a são dados pela Eq. 2.17.

$$a_{j,k+1} = \begin{cases} k^{\mu+1} - (k - \mu)(k + 1)^\mu, & j = 0 \\ (k - j + 2)^{\mu+2} - 2(k - j + 1)^{\mu+1} + (k - j)^{\mu+1}, & 1 \leq j \leq k \\ 1, & j = k + 1 \end{cases} \quad (2.17)$$

2.4.2.4 MÉTODO DA COLOCAÇÃO ORTOGONAL

No Método da Colocação Ortogonal, diferentemente dos já apresentados, a solução é aproximada conforme uma combinação linear de funções de base (geralmente polinomiais) em determinados pontos do domínio de interesse (pontos de colocação). Sendo assim, a equação original deve, obrigatoriamente, satisfazer a função de aproximação escolhida nos pontos considerados, assim como nas condições iniciais e de contorno. Tradicionalmente, a função de aproximação utilizada é o Polinômio de Lagrange (PL) e os pontos de colocação são definidos como as raízes do polinômio ortogonal. Quanto ao uso do PL, a escolha é baseada na redução do custo computacional quando comparado a outras aproximações (VILLADSEN; MICHELSEN, 1978). Já a utilização das raízes do polinômio ortogonal como pontos de colocação é justificada pela diminuição do número de pontos de discretização, e consequente redução do problema a ser resolvido (LARANJEIRA; PINTO, 2001). A metodologia é apresentada de forma detalhada em Lima (2022).

2.5 ANÁLISE DIMENSIONAL DE UMA EDOF

Tradicionalmente, os problemas em engenharia são modelados por equações diferenciais de ordem inteira. No contexto fracionário, ao adicionar um operador fracionário ao problema original, faz-se necessário avaliar a consistência dimensional. Isto é, as unidades em ambos os lados da equação em análise devem ser iguais para se obter consistência no modelo físico apresentado, evitando, assim, incoerências que possam comprometer a validade do problema.

Para ilustrar a importância da consistência dimensional, considere a aplicação da Lei de Resfriamento de Newton, modelada pela equação diferencial ordinária de primeira ordem:

$$\frac{dT(t)}{dt} = -k (T(t) - T_{\text{amb}}) \quad (2.18)$$

onde $T(t)$ é a temperatura do corpo no tempo t , T_{amb} é a temperatura do ambiente, k é a constante de proporcionalidade (com unidade de 1/tempo). Em termos das dimensões físicas, no Sistema Internacional de Unidades (SI), têm-se:

$$\left[\frac{\text{°C}}{\text{s}} \right] = \left[\frac{\text{°C}}{\text{s}} \right]$$

Neste caso, a equação acima é consistente dimensionalmente. Por outro lado, no contexto fracionário é preciso considerar a ordem fracionária α . Assim, o modelo diferencial é dado como:

$$\frac{d^\alpha T(t)}{dt^\alpha} = -k(T(t) - T_{\text{amb}}) \quad (2.19)$$

Dimensionalmente têm-se:

$$\left[\frac{^\circ\text{C}}{\text{s}^\alpha} \right] \neq \left[\frac{^\circ\text{C}}{\text{s}} \right]$$

Como observado nesta equação, o modelo é inconsistente dimensionalmente. Portanto, é preciso realizar uma correção para que o balanço de unidades seja coerente. A seguir, são apresentadas duas abordagens para a correção dessas unidades em modelos físicos.

2.5.1 CORREÇÃO DAS UNIDADES NOS PARÂMETROS DO MODELO

A primeira estratégia consiste na correção direta do parâmetro k (constante de proporcionalidade, que mede a taxa de transferência de calor) com base na ordem fracionária disposta. Tal técnica não é atribuída especificamente a nenhum estudioso, mas foi amplamente utilizada em trabalhos do século XX para a correção dimensional de modelos fracionários, como é o caso de [Caputo \(1967\)](#).

Na Equação. 2.19, a ordem α faz com que a dimensão do tempo seja alterada. Nesse sentido, essa metodologia, para o problema apresentado, se baseia na elevação da potência para o parâmetro k , que contém a dimensão tempo, cuja unidade precisa ser corrigida, a fim da garantia da consistência dimensional α , conforme segue:

$$\frac{d^\alpha T(t)}{dt^\alpha} = -k^\alpha (T(t) - T_{\text{amb}}) \quad (2.20)$$

Esse procedimento assegura que o produto $k(T(t) - T_{\text{amb}})$ tenha as mesmas unidades que o operador diferencial fracionário $d^\alpha T(t)/dt^\alpha$, garantindo a correção na dimensão, como demonstrado abaixo:

$$\left[\frac{^\circ\text{C}}{\text{s}^\alpha} \right] = \left[\frac{^\circ\text{C}}{\text{s}^\alpha} \right]$$

Além disso, é importante destacar que nessa técnica é preciso analisar as dimensões e unidades que deverão ser ajustadas especificamente em cada aplicação. Com isso, para esse caso da Lei de Resfriamento, embora o ajuste direto na unidade do parâmetro k seja matematicamente viável, essa abordagem não se mostra usual, pois pode comprometer a interpretação física do fenômeno natural.

2.5.2 FATOR DE CORREÇÃO DO OPERADOR DIFERENCIAL

Conforme mencionado anteriormente, a correção das unidades via modificação dos parâmetros do modelo não é uma estratégia interessante do ponto de vista físico, já que essa dificulta a interpretação física. Como alternativa a esta abordagem, pode-se definir um fator de correção para modificar o operador diferencial fracionário. Para esta finalidade, é empregada a definição de *tempo cósmico* proposta por [Podlubny \(2001\)](#) em conjunto com um fator de correção em modelos diferenciais fracionários aplicados a osciladores mecânicos, proposto por [Gómez-Aguilar et al. \(2012\)](#). Essa estratégia é eficaz para corrigir a inconsistência dimensional do modelo diferencial fracionário, uma vez que multiplica o tempo — a variável independente que contém o termo diferencial fracionário — por um fator de correção que possui a mesma unidade da variável independente, neste caso, o tempo em segundos. Com isso, o termo diferencial fracionário corrigido (no SI) é dado como [Podlubny \(2001\)](#):

$$\left[\frac{1}{\sigma^{(1-\alpha)}} \frac{d^\alpha T(t)}{dt^\alpha} \right] = \left[\frac{\text{°C}}{\text{s}} \right], \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (2.21)$$

onde $1/\sigma^{(1-\alpha)}$ é o fator de correção, sendo σ um parâmetro cuja unidade é igual à variável a ser corrigida dimensionalmente e que, segundo [Podlubny \(2001\)](#), pode ser interpretado como a *componente do tempo fracionário*.

Via análise dimensional da Eq. 2.21, é possível dizer que essa é consistente, já que ambos os lados possuem a mesma unidade. Ademais, o operador diferencial ordinário pode ser substituído pelo operador fracionário, de acordo com a Eq. 2.22, quando o operador α for igual à unidade.

$$\frac{d}{dt} \rightarrow \frac{1}{\sigma^{(1-\alpha)}} \frac{d^\alpha T(t)}{dt^\alpha}, \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (2.22)$$

Ao aplicar o fator de correção a lei de resfriamento de Newton dada pela Eq. 2.18, encontra-se:

$$\frac{1}{\sigma^{(1-\alpha)}} \frac{d^\alpha T(t)}{dt^\alpha} = -k (T(t) - T_{\text{amb}}) \quad (2.23)$$

Se σ tem unidade da dimensão tempo, tem-se que:

$$\left[\frac{1}{\text{s}^{(1-\alpha)}} \right] \left[\frac{\text{°C}}{\text{s}^\alpha} \right] = \left[\frac{\text{°C}}{\text{s}} \right]$$

Por conseguinte, a correção do operador diferencial fracionário proporciona consistência dimensional para o modelo. Além disso é importante destacar que σ deve ser igual a unidade para evitar interferência no valor dos perfis a serem simulados. Finalmente, é importante destacar que esse conceito têm sido amplamente aplicado em diversas áreas, como demonstrado em trabalhos de [Gómez-Aguilar et al. \(2012\)](#) e [Podlubny \(2001\)](#).

2.6 APLICAÇÕES DO CÁLCULO FRACIONÁRIO EM ENGENHARIA E ÁREAS AFINS

Conforme mencionado neste trabalho, a origem do cálculo fracionário é registrada em uma troca de correspondências entre L'Hopital e Leibniz no ano de 1695. Apesar disso, as aplicações práticas começaram a se consolidar apenas no século XX, especialmente nos campos da física e da engenharia, à medida que estudiosos vislumbravam no cálculo fracionário uma oportunidade de enfrentar os desafios exigidos pela modelagem de sistemas não lineares e com dinâmicas complexas. Nesse sentido, é importante destacar que, embora sua aplicabilidade seja recente e muitas vezes restrita, é possível dizer que a inserção do cálculo fracionário na rotina dos estudiosos já pode ser vista por meio de trabalhos acadêmicos publicados em diversas áreas do conhecimento, como é o caso da física, biologia, economia, engenharia, entre outras. Para essa finalidade, a seguir são apresentadas aplicações do cálculo fracionário em diferentes campos da ciência e engenharia.

- **Física:** nessa área da ciência podem ser encontrados trabalhos relacionados à difusão anômala(GONZALEZ et al., 2005), eletromagnetismo(BOHANNAN; KNAUBER, 2015), transporte de calor (SIEROCIUKE et al., 2013) e dinâmica de sistemas caóticos(CHEN et al., 2012).
- **Controle:** pode-se encontrar trabalhos envolvendo controladores PID (Proporcional-Integral-Derivativo) fracionários (TYTIUK et al., 2019) e otimização de sistemas dinâmicos (LIMA, 2022).
- **Biologia:** nesse campo são contemplados trabalhos relacionados com a difusão de fármacos em tecidos biológicos (MAGIN, 2010), e estudos sobre epidemiologia(ROSA; TORRES, 2018).
- **Economia:** os modelos fracionários nessa área são aplicados para análise de risco em finanças (DING; GRANGER; ENGLE, 1993) e em previsões de séries temporais (FLORES-MUÑOS; BAÉZ-GRACÍA; GUTIÉRREZ-BARROSO, 2018).
- **Ciência dos Materiais:** nessa área encontram-se trabalhos em temas como reologia de materiais viscoelásticos (MERAL; ROYSTON; MAGIN, 2010) e análise de materiais porosos (ZASLAVSKY, 2002).
- **Engenharia Mecânica:** podem ser encontrados contribuições sobre análise de vibrações em estruturas (NIU et al., 2019) e modelagem de sistemas vibratórios com amortecimento viscoelástico (ÁVILA et al., 2010).

Na Engenharia Química, o cálculo fracionário tem sido aplicado na modelagem e análise de processos dinâmicos complexos. Neste contexto, pode-se citar o trabalho de MOTTA et al.

(2017), que consiste na aplicação do cálculo fracionário à generalização matemática da secagem de bagaço de uva, levando em conta dados de umidade no domínio do tempo em diferentes temperaturas de secagem. Nesse estudo, a aplicação de modelos fracionários permitiu a obtenção de maior precisão no ajuste dos dados experimentais em comparação ao tradicional Modelo de Page.

Outra aplicação recorrente é a modelagem fracionária da cinética de reatores químicos, como exemplo, pode-se citar o estudo de Qureshi e Aziz (2019), onde foi modelado um reator batelada com a utilização do operador diferencial fracionário do tipo Caputo. O objetivo do estudo foi simular diferentes perfis de concentrações ao longo do tempo para diferentes ordens fracionárias, a fim de se obter a avaliação dos parâmetros em conjunto com a análise do comportamento dinâmico do sistema.

O cálculo fracionário também tem se mostrado promissor no campo de controle de processos, tanto no que diz respeito ao desenvolvimento de controladores Proporcional-Integral-Derivativo (PID) fracionários quanto na aplicação do controle ótimo. Para os controladores PID fracionários, a avaliação de seu desempenho em relação aos controladores PID clássicos pode ser encontrada no trabalho de Shen (2018). Já para o Problema de Controle Ótimo (PCO), pode-se dizer que esta é uma metodologia empregada para determinar um vetor de variáveis de controle com o objetivo de maximizar ou minimizar uma função objetivo, também chamada de função custo ou índice de desempenho. Essa função pode estar relacionada, por exemplo, à maximização da eficiência de um processo produtivo ou à minimização do consumo de recursos, como água e energia, em uma planta industrial, sempre respeitando restrições algébrico-diferenciais em termos de vetores de variáveis de estado (BRYSON; HO; SIOURIS, 1979) associadas ao sistema analisado. Essas restrições, no entanto, podem ser descritas por equações diferenciais fracionárias, que introduzem a ordem fracionária como um elemento importante na descrição dos perfis dinâmicos obtidos. Para a resolução desse problema Lobato (2008) propõe a extensão do Método da Colocação Ortogonal para o contexto fracionário como ferramenta eficiente para a integração dos modelos algébrico-diferenciais fracionários que constituem o PCO, facilitando a modelagem e otimização de sistemas dinâmicos complexos e aumentando a precisão desses modelos.

Além disso, o cálculo fracionário tem encontrado aplicações importantes na área da reologia. No trabalho de Ávila et al. (2010) é apresentada a simulação do comportamento dinâmico de sistemas estruturais equipados com amortecedores viscoelásticos, no domínio do tempo. Nesse estudo, são desenvolvidas metodologias para a incorporação de modelos viscoelásticos fracionários em modelos baseados no Método dos Elementos Finitos, a fim de obter uma modelagem mais precisa dos fenômenos de amortecimento em materiais viscoelásticos, onde a relação entre variáveis como tensão e deformação depende da memória da aplicação da força.

2.7 PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO

Do ponto de vista prático, em modelos diferenciais fenomenológicos, a ordem fracionária não é conhecida a priori. Neste caso, a mesma deve ser estimada de forma que os perfis simulados tenham aderência ao fenômeno analisado. Isto pode ser realizado através da formulação e resolução de um problema de estimação de parâmetros, também conhecido como problema inverso. Matematicamente, o problema inverso consiste em uma forma particular de otimização em que a função objetivo representa uma métrica que quantifica a diferença entre os pontos simulados pelo modelo proposto e os pontos experimentais. No caso particular do modelo diferencial fracionário, este modelo deve ter como restrição os balanços de massa, energia e quantidade de movimento, bem como as relações constitutivas ou empíricas.

Para resolver este tipo de problema será considerado como ferramenta de otimização o algoritmo de Evolução Diferencial (ED), proposto inicialmente por [Storn e Price \(1995\)](#), para problemas de otimização mono-objetivo e sem restrições. A seguir é apresentada uma breve revisão sobre a definição do problema de otimização, sua formulação matemática, bem como sua classificação e por fim a descrição do algoritmo de ED.

2.7.1 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO

A otimização é uma ferramenta matemática amplamente utilizada para determinar a melhor solução possível em uma aplicação particular. Em síntese, o problema geral de otimização tem sua metodologia baseada na identificação do melhor valor para uma ou n variáveis, classificadas como variáveis de decisão (ou de busca ou de projeto, no contexto da engenharia), a fim de minimizar ou maximizar uma função objetivo, podendo estas serem lineares ou não lineares em relação às variáveis do projeto, explícitas ou implícitas, e calculadas por métodos analíticos ou numéricos. Essas especificações são responsáveis por dar particularidade a cada fenômeno analisado. A principal vantagem da otimização está justamente na possibilidade de prever e ajustar o comportamento de um sistema sem a necessidade de realizar experimentos físicos ou testes práticos para cada cenário distinto. Contudo, o custo computacional deve ser levado em consideração, especialmente quando o problema envolve um grande número de variáveis, funções descontínuas ou funções com múltiplos mínimos locais, onde raramente se atinge o mínimo global ([SARAMAGO, 2003](#)).

De maneira geral, um problema de otimização apresenta as seguintes características [Vanderplaats \(2001\)](#):

- **Função objetivo:** é quem deve ser minimizado ou maximizado. Esta representa a característica a ser aprimorada no sistema. No contexto matemático, uma função objetivo $f(x)$ depende (de forma explícita ou implícita) das variáveis de projeto (x), podendo ser

unidimensional, quando depende de uma única variável, ou multidimensional, quando depende de múltiplas variáveis de projeto.

- **Variáveis de projeto:** são as incógnitas que, ao serem manipuladas, são capazes de modificar o valor da função objetivo.
- **Restrições:** são funções responsáveis por definir os limites dentro dos quais as variáveis de projeto serão determinadas. Estas podem ser classificadas como:
 1. Restrições de Igualdade: representadas como $h_j(\mathbf{x}) = 0$. Estas delimitam um espaço de busca onde as variáveis de projeto correspondem a um valor pré-determinado.
 2. Restrições de Desigualdade: representadas como $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ ou $g_i(\mathbf{x}) \geq 0$, limitam os valores que as variáveis de projeto devem assumir.
 3. Restrições Laterais: especificam os limites máximos e mínimos para as variáveis de projeto. Elas podem ser expressas da seguinte forma: $L_i \leq x_i \leq U_i$, onde L_i e U_i são os limites inferior e superior, respectivamente, para a variável x_i . Essas restrições são fundamentais para garantir que as soluções ótimas estejam dentro de intervalos praticáveis.

A formulação matemática de um problema de otimização mono-objetivo é dada com (DEB, 2001):

$$\min (\text{ou max}) \quad f(\mathbf{x}) \quad (2.24)$$

Sujeito à:

$$h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, K \quad (2.25)$$

$$g_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, H \quad (2.26)$$

$$L_i \leq x_i \leq U_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.27)$$

onde $f(\mathbf{x})$ é a função objetivo que se deseja otimizar, $h_j(\mathbf{x}) = 0$ representa as restrições de igualdade, $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ representa as restrições de desigualdade, $L_i \leq x_i \leq U_i$ especifica as restrições laterais para cada variável de decisão x_i , K é o número total de restrições de igualdade, H é o número total de restrições de desigualdade e n é o número total de variáveis de projeto.

Em termos matemáticos, quando o problema envolve a maximização de $f(x)$, a obtenção da solução é dada por meio da multiplicação da função objetivo por -1 . Em outras palavras, o problema de maximização torna-se igual à minimização de $-f(x)$. Essa equivalência demonstra que todas as soluções obtidas para um cenário podem ser transferidos de maneira simples para o outro sem grandes dificuldades (IZMAILOV; SOLODOV, 2014).

2.7.2 CLASSIFICAÇÃO DOS MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO

Nesta seção são apresentadas algumas classificações para auxiliar na escolha do método de otimização mais adequado para cada contexto.

2.7.2.1 CLASSIFICAÇÃO DE ACORDO COM A ESTRUTURA DA FUNÇÃO OBJETIVO E RESTRIÇÕES

- **Programa Linear (PL):** tanto a função objetivo quanto as restrições são lineares, tratando-se de problemas convexos que possuem soluções bem definidas (BREGALDA; OLIVEIRO; BORNSTEIN, 1988). A linearidade garante que, se uma solução ótima existe, ela pode ser encontrada nos vértices da região factível. Métodos como o Método Simplex e Método de Pontos Interiores são comuns em PL.
- **Programação Não-Linear:** neste tipo de problema, a função objetivo ou as restrições apresentam pelo menos uma relação não-linear, fazendo com que a análise da solução seja mais complexa se comparada à programação linear. Tais problemas podem ser convexos ou não-convexos e a convergência para a solução global pode ser dificultada com a presença de múltiplos ótimos locais. (BOYD; VANDENBERGHE, 2004).

2.7.2.2 CLASSIFICAÇÃO DE ACORDO COM A ESTRATÉGIA DE RESOLUÇÃO

- **Métodos Determinísticos:** um método de otimização é considerado determinístico quando há previsibilidade na solução, isto é, ao partir de condições iniciais idênticas, a solução do problema será sempre a mesma. A maioria desses métodos se baseiam no cálculo de derivadas ou em aproximações dessas. Para funções que são contínuas, convexas e unimodais, os resultados são satisfatórios (MARTÍNEZ; SANTOS, 1995).
- **Métodos Heurísticos (Não-determinístico):** são métodos que não se baseiam no uso de informações sobre o gradiente da função objetivo e das restrições para a determinação da solução ótima. Estes incorporam elementos de aleatoriedade nas relações empregadas para a geração de um candidato em potencial a solução ótima. Tal característica permite uma exploração mais ampla do espaço de busca ao aumentar as chances de encontrar soluções globais. Esses métodos são úteis considerando funções objetivo e restrições não-lineares com a presença de múltiplos ótimos locais. Esses métodos, também denominados em alguns estudos como estocásticos, possuem aplicação na otimização em engenharia quando aplicados à configuração de sistemas de controle de processos industriais, com o intuito de otimizar o rendimento e reduzir falhas (WU et al., 2017).

2.7.2.3 CLASSIFICAÇÃO PELA QUANTIDADE DE OBJETIVOS

- **Métodos Mono-objetivos:** envolvem problemas de otimização cujo foco é mantido na minimização ou maximização de apenas um critério.
- **Métodos Multiobjetivos:** são utilizados quando o intuito é otimizar mais de um critério ao mesmo tempo. Em um problema multiobjetivo, o resultado é um conjunto de pontos ótimos e que compõem a chamada fronteira de Pareto. Essa fronteira contém os pontos

mais eficientes, nas quais a avaliação da melhoria em um determinado critério leva à piora em pelo menos um dos outros critérios estudados.

2.7.3 ALGORITMO DE EVOLUÇÃO DIFERENCIAL

O algoritmo de Evolução Diferencial (ED), proposto por [Storn e Price \(1995\)](#), é um método de otimização baseada em população. Em linhas gerais, neste algoritmo a população é atualizada via emprego de operações vetoriais (soma e subtração) aos candidatos da geração corrente. Os passos do algoritmo são apresentados a seguir:

- i. **Entrada:** Os parâmetros do algoritmo (tamanho da população, número de gerações, probabilidade de cruzamento (P_C), fator ou taxa de perturbação F_P , estratégia para a geração de candidatos em potencial e o critério de parada) são definidos pelo usuário. Além disso, também é necessário definir as características do problema em análise (função objetivo, variáveis de projeto e restrições).
- ii. **Inicialização:** A população original pop_O é gerada (aleatoriamente) a partir dos limites laterais definidos pelo usuário. Dessa população são escolhidos indivíduos aleatórios $I_{ij,\alpha}$, $I_{ij,\beta}$ e $I_{ij,\gamma}$ para a atualização da população.
- iii. **Mutação:** O indivíduo $I_{ij,\alpha}$ sofre uma mutação do tipo:

$$I_{ij,M} = I_{ij,\alpha} + F_P(I_{ij,\beta} - I_{ij,\gamma}) \quad (2.28)$$

onde $\alpha \neq \beta \neq \gamma$, $(I_{ij,\beta} - I_{ij,\gamma})$ é o vetor diferença, $I_{ij,M}$ é o vetor mutado e F_P é responsável por controlar a amplitude do vetor diferença a partir da diferença ponderada. Também é importante ressaltar que a população deve ser igual ou superior a 3 indivíduos a fim de garantir a distinção entre os indivíduos selecionados aleatoriamente.

- iv. **Cruzamento:** A operação de cruzamento envolve a geração de um novo indivíduo a partir de pop_O e pop_M . Esse indivíduo gerado $I_{ij,C}$ será comparado com o indivíduo da população original $I_{ij,O}$, conhecido como vetor alvo, e com o da população mutada $I_{ij,M}$ da seguinte forma:

$$I_{ij}^C = \begin{cases} I_{ij,M} & \text{se } r_{and,j} \leq P_C \\ I_{ij,O} & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.29)$$

onde $r_{and,j}$ é um valor aleatório gerado de forma uniforme entre 0 e 1 e P_C representa a probabilidade do novo candidato herdar os valores das variáveis do vetor mutado ou doador $I_{ij,M}$. Se $r_{and,j}$ for menor ou igual à probabilidade de cruzamento P_C , então o componente j do vetor mutado $I_{ij,M}$ será utilizado. Caso contrário, o componente será tomado do vetor original $I_{ij,O}$.

- v. **Seleção:** É a etapa onde se escolhe o melhor indivíduo analisando o valor da função objetivo. O indivíduo resultante do cruzamento $I_{ij,C}$ será comparado ao indivíduo correspondente da população original $I_{ij,O}$. Se o valor da função objetivo de $I_{ij,C}$ for menor que o de $I_{ij,O}$, então $I_{ij,C}$ substituirá $I_{ij,O}$ na próxima geração; caso contrário, $I_{ij,O}$ será mantido.
- vi. **Critério de parada:** Para finalizar o processo de evolução dos candidatos, geralmente emprega-se como critério de parada o número máximo de gerações. Todavia, outros critérios podem ser empregados, como por exemplo, as tradicionais métricas de erro.

O fluxograma do algoritmo de ED é apresentado na Fig. 1.

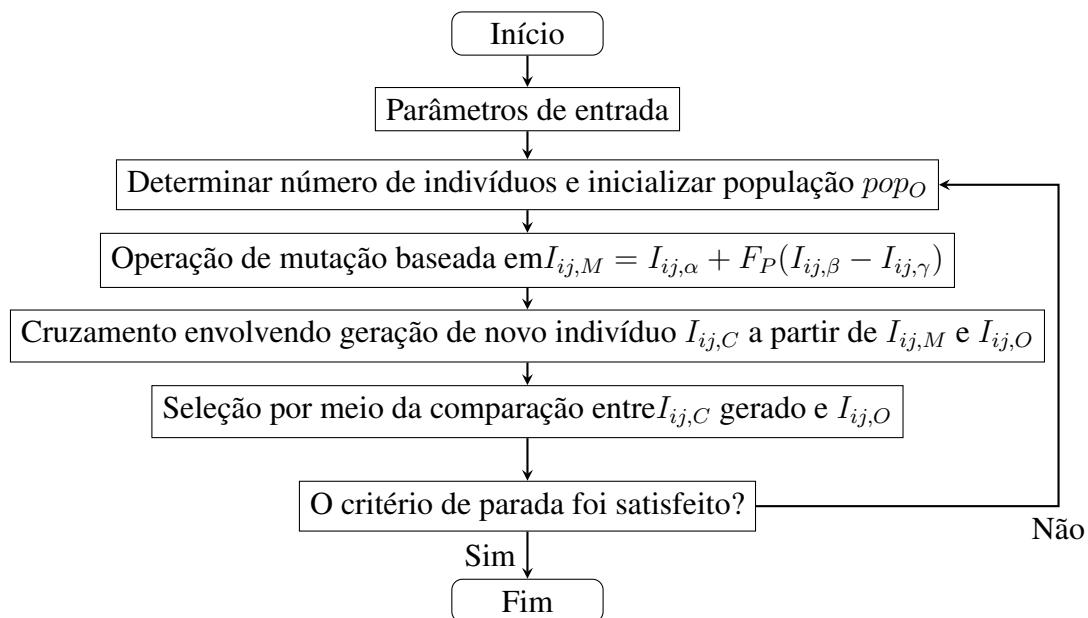


Figura 1 – Fluxograma do algoritmo de Evolução Diferencial.

É importante ressaltar que outras estratégias para a geração de candidatos em potencial podem ser empregadas, conforme apresentado por [Storn e Price \(1995\)](#). A convenção utilizada por estes autores é dada por DE/X/Y/Z, onde X representa o vetor base utilizado para a mutação, Y representa o número de pares de vetores que são considerados na mutação e Z diz respeito ao tipo de cruzamento usado para a geração do vetor candidato. "bin" representa binomial e "exp" exponencial. Nesse estudo, a estratégia utilizada será DE/rand/1/bin, em que 1 indica o número de pares de vetores de diferença que serão utilizados na mutação e o termo rand significa o vetor base é selecionado de forma aleatória para o processo de mutação, a qual é dada por:

$$I_{ij+1} = I_{ij,\alpha} + F_P(I_{ij,\beta} - I_{ij,\gamma}) \quad (2.30)$$

onde I_{ij+1} é o vetor candidato na próxima geração e $I_{ij,\alpha}$, $I_{ij,\beta}$ e $I_{ij,\gamma}$ são vetores individuais selecionados aleatoriamente a partir da população atual.

A utilização desse método de otimização é justificada por meio das vantagens definidas por [Cheng e Hwang \(2001\)](#), as quais são listadas abaixo:

- A metodologia possui a capacidade de explorar diferentes regiões do espaço de busca de maneira simultânea para aumentar a chance de encontrar a solução ótima global;
- Por ser um algoritmo de busca direta (não usa informações sobre o gradiente da função objetivo e das restrições), caracteriza-se como um método eficaz para a resolução de problemas de otimização em que a função objetivo é descontínua;
- Sua implementação é baseada na simplicidade, visto que candidatos em potencial são gerados via soma e subtração vetoriais;
- É um método amplamente usado em problemas de otimização contínua, combinatório e de multiobjetivo;
- É uma alternativa interessante para lidar com populações com um número reduzido de candidatos.

Tendo em vista as vantagens do algoritmo, sua aplicação abrange uma diversidade de casos em diferentes áreas. Pode-se dizer que uma das aplicações mais promissoras da ED reside na otimização de parâmetros em sistemas de controle, como é o caso do PID, pela sua característica de processamento eficaz para métodos multiobjetivos ([OSINSKI; LEANDRO; OLIVEIRA, 2019](#)). Sendo assim a ED desempenha um papel significativo no projeto de plantas industriais, considerando a eficiência operacional e a melhoria da produtividade. Um caso de destaque é o estudo de [Paiva \(2019\)](#), que aplica esse método de otimização nos ciclos de refrigeração multiestágios localizados em unidades de processamento de gás natural, com o objetivo de reduzir custos ao minimizar perdas energéticas e melhorar o desempenho operacional. Além disso, o estudo de ([GARCIA, 2018](#)) destaca a robustez do algoritmo no projeto de hidrociclones ao incluir dados experimentais, alcançando baixo consumo energético e alta eficiência de classificação sob influência de variações nas dimensões e condições operacionais.

No próximo capítulo é apresentada a metodologia proposta para a simulação de modelos fracionários, bem como a sua utilização no campo de problemas inversos.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo, serão apresentadas as metodologias consideradas para a integração de uma EDOF e a correção do operador diferencial no contexto dimensional, bem como as abordagens que podem ser empregadas para a resolução de problemas de estimativa de parâmetros (inversos) no campo da engenharia química.

3.1 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA A INTEGRAÇÃO DE UMA EDOF

Conforme mencionado anteriormente, pode não ser possível integrar uma EDOF analiticamente. Neste caso, para resolver a EDOF descrita pela Eq. (2.9), três métodos numéricos tradicionais são considerados, a saber: o Método de Adams-Moulton Fracionário (MAMF), o Método de Euler Reverso Fracionário (MERF) e o Método de Euler Direto Fracionário (MEDF) (LI; ZENG, 2013).

Para este propósito, seja $t_j = jh$, $j = 0, 1, \dots, N$ (N é o número de pontos de discretização), $h = T/N$ é o tamanho do passo de integração, e y_j a solução aproximada de $y(t_j)$ em $t = t_j$. Considerando a seguinte integral:

$$I_{k+1} = \int_0^{t_{k+1}} (t_{k+1} - s)^{\alpha-1} g(s) ds, \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (3.1)$$

A quadratura acima pode ser aproximada como:

$$I_{k+1} \approx \int_0^{t_{k+1}} (t_{k+1} - s)^{\alpha-1} G_{k+1}(s) ds, \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (3.2)$$

onde $G_{k+1}(s)$ é a aproximação de $g(s)$ no intervalo $[0, t^{k+1}]$. Assim, cada método numérico (MAMF, MERF e MEDF) pode ser obtido escolhendo uma expressão diferente para $G_{k+1}(s)$.

a) Se $G_{k+1}(s)$ for aproximado por:

$$G_{k+1}(s)|_{[t_j, t_{j+1}]} = g(t_j), \quad 0 \leq j \leq k \quad (3.3)$$

então o MEDF é derivado como:

$$y_{k+1} = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{t_{j+1}^j}{j!} y_0^{(j)} + \frac{h^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \sum_{j=0}^k b_{j,k+1} f(t_j, y_j) \quad (3.4)$$

onde:

$$b_{j,k+1} = (k-j+1)^\alpha - (k-j)^\alpha \quad (3.5)$$

b) Se $G_{k+1}(s)$ for aproximado por:

$$G_{k+1}(s)|_{[t_j, t_{j+1}]} = g(t_{j+1}), \quad 0 \leq j \leq k \quad (3.6)$$

então o MERF é dado por:

$$y_{k+1} = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{t_{j+1}^j}{j!} y_0^{(j)} + \frac{h^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \sum_{j=0}^k b_{j,k+1} f(t_{j+1}, y_{j+1}) \quad (3.7)$$

onde $b_{j,k+1}$ é definido pela Eq. (3.5).

c) O MAMF pode ser escrito como segue:

$$\begin{cases} y_{k+1}^P = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{t_{j+1}^j}{j!} y_0^{(j)} + \frac{h^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \sum_{j=0}^k b_{j,k+1} f(t_j, y_j) \\ y_{k+1} = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{t_{j+1}^j}{j!} y_0^{(j)} + \frac{h^\alpha}{\Gamma(\alpha+2)} \left(\sum_{j=0}^k a_{j,k+1} f(t_j, y_j) + a_{k+1,k+1} f(t_{k+1}, y_{k+1}^P) \right) \end{cases} \quad (3.8)$$

onde:

$$a_{j,k+1} = \begin{cases} (k^{\alpha+1} - (k-\alpha)(k+1)^\alpha), & j = 0 \\ (k-j+2)^{\alpha+2} - 2(k-j+1)^{\alpha+1} + (k-j)^{\alpha+1}, & 1 \leq j \leq k \\ 1, & j = k+1 \end{cases} \quad (3.9)$$

e $b_{j,k+1}$ é definido pela Eq. (3.5).

É importante mencionar que a Eq. (3.7) é implícita. Assim, para determinar y_{k+1} , é necessário conhecer o valor de f no ponto $k+1$. Neste caso, um *solver* não linear deve ser empregado para encontrar y_{k+1} . Similarmente, na Eq. (3.8), o método preditor-corretor é usado para determinar y_{k+1} , ou seja, y_{k+1}^P é o passo preditor e y_{k+1} é o passo corretor.

Finalmente, embora a abordagem apresentada tenha sido descrita para resolver uma única EDOF, a mesma pode ser facilmente estendida para um sistema de EDOFs.

3.2 CORREÇÃO DO OPERADOR DIFERENCIAL FRACIONÁRIO

Nesta contribuição, cada EDOF representa um sistema físico em engenharia química. Assim, cada modelo fenomenológico fracionário deve ser dimensionalmente consistente, ou seja, a inserção da ordem fracionária não pode violar o equilíbrio de unidades na equação. Do ponto de vista físico, o operador de derivada temporal d/dt tem dimensão de tempo inverso [tempo $^{-1}$], e o operador de derivada temporal fracionária d^α/dt^α tem uma dimensão que corresponde a [tempo $^{-\alpha}$]. Assim, para fins de consistência, é necessário corrigir as unidades do modelo

físico. Para este objetivo, conforme sugerido por [Gómez-Aguilar, Razo-Hernández e Granados-Lieberman \(2014\)](#) e considerado por [Lima, Lobato e Steffen Jr \(2021a\)](#) e [Lima, Lobato e Steffen Jr \(2021b\)](#), um parâmetro auxiliar σ é introduzido no operador temporal fracionário:

$$\frac{d}{dt} \rightarrow \frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{d^\alpha}{dt^\alpha}, \quad m-1 < \alpha \leq m, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (3.10)$$

onde o parâmetro auxiliar tem a dimensão de tempo e está associado aos componentes de tempo fracionário do sistema. Para α igual a 1, esse operador fracionário torna-se um operador com ordem inteira. Assim, substituindo esse operador fracionário na Eq. (2.9), o modelo resultante é dado por:

$$\begin{cases} \frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} D^\alpha y(t) = f(t, y(t)), & t \in (0, T], \quad T > 0 \\ y^{(j)}(0) = y_0^{(j)}, & j = 0, 1, \dots, n-1 \end{cases} \quad (3.11)$$

Para evitar a influência do parâmetro σ nos perfis físicos, ele é considerado igual à unidade, ou seja, a inserção do parâmetro auxiliar garante a consistência dimensional do modelo físico, mas não influencia quantitativamente os perfis obtidos.

3.3 ABORDAGEM PARA A RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS INVERSOS EM ENGENHARIA QUÍMICA

Conforme mencionado anteriormente, os fenômenos observados na natureza podem ser representados por um sistema de EDOFs. Neste caso, a ordem fracionária nesses modelos pode ser definida pelo usuário ou estimada através da formulação e resolução de um problema de estimação de parâmetros (também conhecido como problema inverso). Os passos requeridos para a formulação e resolução de um problema inverso, considerando um método numérico baseado em população, são apresentados a seguir e resumidos no fluxograma dado pela Fig. 2:

- Inicialmente, é necessário definir: o otimizador (configurações e parâmetros), as variáveis de projeto (e os respectivos domínios ou espaço de projeto), o modelo fenomenológico fracionário, a abordagem numérica considerada para a integração do modelo diferencial ordinário fracionário, e os pontos experimentais considerados na formulação da função objetivo;
- A partir destas informações, o otimizador inicializa o procedimento de obtenção da solução ótima gerando (aleatoriamente, a partir do domínio especificado pelo usuário) uma população de candidatos em potencial à solução do problema de otimização;
- Enquanto um determinado critério de parada (especificado pelo usuário) não for satisfeito, o processo iterativo continua. Geralmente, o critério de parada considerado é o número máximo de gerações;

- Atualizar os indivíduos da população a partir da aplicação dos operadores do otimizador considerado;
- Para cada candidato em potencial, integrar o sistema de EDOFs e, consequentemente, avaliar a respectiva função objetivo. Neste caso, o melhor candidato, em termos do valor da função objetivo, é tomado como sendo a melhor solução (na geração corrente);
- Se o critério de parada especificado pelo usuário for satisfeito, tem-se a solução ótima. Caso contrário, o processo iterativo continua.

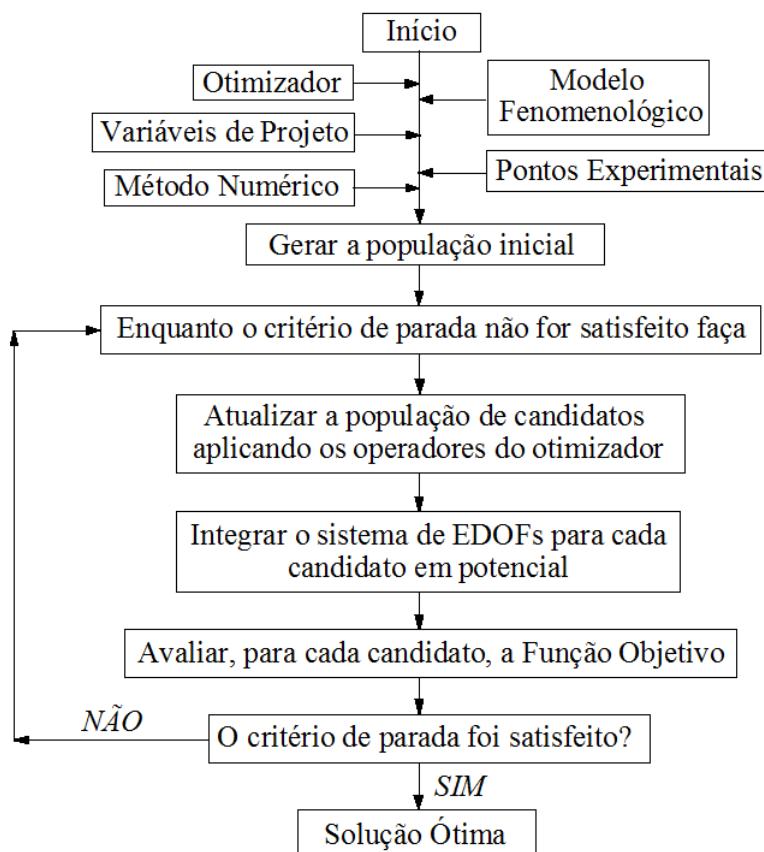


Figura 2 – Fluxograma para a formulação e resolução de problemas inversos.

No próximo capítulo, são apresentadas aplicações para validar a metodologia descrita. Neste caso, destacam-se estudos de caso fracionários nas áreas de simulação e de problemas inversos.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para aplicar a metodologia apresentada para a simulação de uma EDOF, é necessário seguir os seguintes passos: *i*) definir o estudo de caso (modelo fenomenológico e parâmetros); *ii*) definir o método numérico (Método de Adams-Moulton Fracionário (MAMF); Método de Euler Reverso Fracionário (MERF ou Método de Euler Direto Fracionário (MEDF)) e o número de pontos de discretização (N); *iii*) avaliar se os perfis obtidos são alterados quando N é modificado (análise de sensibilidade); *iv*) aplicar o fator de correção σ para garantir a consistência dimensional (para modelos fenomenológicos). Cabe ressaltar que este parâmetro sempre será definido como sendo igual à unidade (para que o mesmo não interfira nos perfis obtidos).

É importante mencionar que, para resolver uma EDOF usando o MERF (método implícito), foi considerado o Método de Newton (NM). Para isso, a matriz Jacobiana requerida por esta abordagem é avaliada numericamente. Para inicializar o NM, o vetor de variáveis dependentes é definido para cada estudo de caso. Finalmente, para interromper esse procedimento iterativo, o somatório do módulo do erro absoluto (com tolerância igual a 10^{-8}) é considerado.

Para avaliar a qualidade da solução obtida por MAMF, MERF e MEDF, o somatório do módulo do erro absoluto médio (Ξ) será computado. Esta métrica é definida como:

$$\Xi = \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - Y_i)^2}{N} \quad (4.1)$$

onde y_i representa a solução numérica obtida por MAMF, MERF e MEDF e Y_i representa a solução analítica (quando conhecida), ambas avaliadas no i -ésimo ponto e N é o número de pontos de discretização. Para os casos em que a solução analítica é desconhecida, o cômputo da referida métrica será realizado considerando o Método *Predictor-Corrector* (PCM) do tipo Adams-Bashforth-Moulton, o qual é definido como uma combinação dos métodos de Adams-Bashforth (explícito) e Adams-Moulton (implícito) (DIETHELM; FREED, 1999), onde o método explícito é utilizado para prever o valor y_k da solução enquanto o método implícito tem a função de corrigir tal previsão. Na estratégia PCM, N sempre foi escolhido igual a 500 (valor definido após execuções preliminares para garantir uma boa solução de referência). O tempo de processamento (PT) é calculado usando um computador Desktop AMD Ryzen 7 5800X com 16GB de memória RAM.

4.1 VALIDAÇÃO DAS TÉCNICAS PARA A RESOLUÇÃO DE EDOF

Para validar as metodologias propostas para a integração de equações diferenciais fracionárias, esta seção considera funções matemáticas que apresentam solução analítica conhecida. Estas são descritas como:

- *EDF₁* (DIETHELM; FORD; FREED, 2002):

- Se $0 < \alpha < 1$

$$D^\alpha y(t) = -y(t), \quad y(0) = 1, \quad 0 < t < 10 \quad (4.2)$$

- Se $1 < \alpha < 2$

$$D^\alpha y(t) = -y(t), \quad y(0) = 1 \quad \text{e} \quad y'(0) = 0, \quad 0 < t < 10 \quad (4.3)$$

cuja solução analítica, para $0 < \alpha < 2$, é dada como:

$$y(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-t^\alpha)^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \quad (4.4)$$

- *EDF₂* (DIETHELM; FORD; FREED, 2004):

- Se $0 < \alpha < 1$

$$D^\alpha y(t) = G, \quad y(0) = 0, \quad 0 < t < 1 \quad (4.5)$$

- Se $1 < \alpha < 2$

$$D^\alpha y(t) = G, \quad y(0) = 0 \quad \text{e} \quad y'(0) = 0, \quad 0 < t < 1 \quad (4.6)$$

onde a função G é dada como:

$$G = \frac{40320}{\Gamma(9-\alpha)} t^{8-\alpha} - 3 \frac{\Gamma(5+\alpha/2)}{\Gamma(5-\alpha/2)} t^{4-\alpha/2} + \frac{9}{4} \Gamma(\alpha+1) + \Gamma\left(\frac{3}{2} t^{\alpha/2} - t^4\right)^3 - y(t)^{3/2} \quad (4.7)$$

A solução analítica deste estudo de caso é dado como:

$$y(t) = t^8 - 3t^{4+\alpha/2} + \frac{9}{4}t^\alpha \quad (4.8)$$

É importante destacar que, por se tratar de problemas puramente matemáticos, não é necessário introduzir o fator de correção das unidades. Além disso, se α estiver no intervalo $]0 1]$, somente é necessária uma condição inicial. Por outro lado, se α estiver no intervalo $]1 2]$, uma condição adicional é requerida (neste caso, são definidas informações sobre a primeira derivada em t igual a zero para cada aplicação). Finalmente, ressalta-se que para a execução do

MERF, o qual é um método implícito, é necessário definir uma estratégia numérica para resolver o problema algébrico diferencial discretizado, bem como uma estimativa inicial para o perfil da variável dependente. Neste caso, foi utilizado o MN para a resolução do modelo não linear com o perfil inicial sendo igual a 0,5 para todo o domínio.

A Tabela 1 apresenta os resultados obtidos considerando as abordagens MAMF, MERF e MEDF para as equações diferenciais fracionárias EDF_1 e EDF_2 , respectivamente. Para essa finalidade, são avaliadas o número de pontos de discretização N e a ordem fracionária α . Com o objetivo de analisar a influência da ordem fracionária α e do número de pontos de discretização N sobre os resultados, foram avaliados o somatório do erro absoluto médio (Ξ) e o tempo de processamento (TP) (em segundos).

Como observado na Tabela 1 é possível constatar que o aumento do número de pontos de discretização N , independentemente do valor de α , resulta em uma maior precisão. Todavia, esse incremento no valor desse parâmetro implica no aumento do tempo de processamento. Este resultado já era esperado visto que, ao se incrementar o valor do parâmetro N , aumenta-se a dimensão do problema que deve ser integrado. O maior TP foi requerido pelo Método de Euler Reverso Fracionário, devido à aplicação do Método de Newton. A abordagem que resulta em um melhor custo benefício, no que tange o binômio custo computacional versus precisão, em todas as aplicações foi o Método de Adams-Moulton Fracionário. Apesar de ser um método implícito, sua natureza de passo múltiplo permite com que as informações de pontos anteriores sejam aproveitadas de forma a facilitar a convergência mais rápida para o encontro da próxima solução, principalmente quando comparada ao Método de Euler Reverso Fracionário. Ao se avaliar o valor de α , percebe-se que, mesmo sendo um problema puramente matemático, que este parâmetro afeta os perfis obtidos.

Tabela 1 – Somatório do erro absoluto médio e tempo de processamento considerando o MAMF, MERF e MEDF para EDF_1 e EDF_2 .

		$\alpha=0,5$		$\alpha=0,75$		$\alpha=1,0$		$\alpha=1,25$		$\alpha=1,5$		
		N	Ξ	TP (s)	Ξ	TP (s)	Ξ	TP (s)	Ξ	TP (s)	Ξ	TP (s)
EDF_1	MAMF	50	$1,85 \times 10^{-4}$	0,00*	$2,73 \times 10^{-5}$	0,00	$1,60 \times 10^{-6}$	0,00	$1,08 \times 10^{-5}$	0,00	$2,83 \times 10^{-5}$	0,00
		100	$3,93 \times 10^{-5}$	0,01	$3,83 \times 10^{-6}$	0,01	$8,35 \times 10^{-8}$	0,01	$1,00 \times 10^{-6}$	0,01	$2,10 \times 10^{-6}$	0,01
		250	$3,91 \times 10^{-6}$	0,01	$3,78 \times 10^{-7}$	0,01	$1,91 \times 10^{-9}$	0,01	$4,58 \times 10^{-8}$	0,01	$6,96 \times 10^{-8}$	0,01
		500	$9,31 \times 10^{-7}$	0,03	$6,97 \times 10^{-8}$	0,03	$1,15 \times 10^{-10}$	0,03	$4,34 \times 10^{-9}$	0,03	$5,14 \times 10^{-9}$	0,03
		1000	$2,34 \times 10^{-7}$	0,10	$2,89 \times 10^{-8}$	0,10	$7,07 \times 10^{-12}$	0,08	$4,06 \times 10^{-10}$	0,10	$3,73 \times 10^{-10}$	0,10
	MERF	50	$4,65 \times 10^{-5}$	0,02	$1,22 \times 10^{-4}$	0,03	$2,28 \times 10^{-4}$	0,02	$4,17 \times 10^{-4}$	0,02	$9,22 \times 10^{-4}$	0,02
		100	$1,52 \times 10^{-5}$	0,11	$3,39 \times 10^{-5}$	0,11	$5,96 \times 10^{-5}$	0,09	$1,07 \times 10^{-4}$	0,11	$2,43 \times 10^{-4}$	0,11
		250	$3,20 \times 10^{-6}$	0,97	$5,90 \times 10^{-6}$	0,95	$9,80 \times 10^{-6}$	0,68	$1,75 \times 10^{-5}$	0,93	$4,01 \times 10^{-5}$	0,95
		500	$9,00 \times 10^{-7}$	5,62	$1,50 \times 10^{-6}$	5,50	$2,50 \times 10^{-6}$	3,58	$4,40 \times 10^{-6}$	5,52	$1,01 \times 10^{-5}$	5,63
		1000	$3,00 \times 10^{-7}$	36,93	$4,00 \times 10^{-7}$	37,32	$6,00 \times 10^{-7}$	20,85	$1,10 \times 10^{-6}$	37,02	$2,50 \times 10^{-6}$	37,43
	MEDF	50	$5,25 \times 10^{-4}$	0,00	$2,48 \times 10^{-4}$	0,00	$2,90 \times 10^{-4}$	0,00	$4,95 \times 10^{-4}$	0,00	$1,21 \times 10^{-3}$	0,00
		100	$9,32 \times 10^{-5}$	0,00	$5,07 \times 10^{-5}$	0,00	$6,71 \times 10^{-5}$	0,00	$1,17 \times 10^{-4}$	0,00	$2,77 \times 10^{-4}$	0,00
		250	$1,07 \times 10^{-5}$	0,01	$7,10 \times 10^{-6}$	0,01	$1,03 \times 10^{-5}$	0,01	$1,81 \times 10^{-5}$	0,01	$4,23 \times 10^{-5}$	0,01
		500	$2,20 \times 10^{-6}$	0,02	$1,70 \times 10^{-6}$	0,02	$2,50 \times 10^{-6}$	0,01	$4,50 \times 10^{-6}$	0,02	$1,04 \times 10^{-5}$	0,02
		1000	$5,00 \times 10^{-7}$	0,05	$4,00 \times 10^{-7}$	0,05	$6,0 \times 10^{-7}$	0,03	$1,10 \times 10^{-6}$	0,05	$2,60 \times 10^{-6}$	0,05
EDF_2	MAMF	50	$4,99 \times 10^{-5}$	0,01	$4,20 \times 10^{-5}$	0,01	$2,00 \times 10^{-7}$	0,01	$3,00 \times 10^{-7}$	0,01	$4,00 \times 10^{-7}$	0,01
		100	$1,14 \times 10^{-5}$	0,02	$7,00 \times 10^{-7}$	0,01	$1,07 \times 10^{-8}$	0,01	$3,01 \times 10^{-8}$	0,01	$2,98 \times 10^{-8}$	0,01
		250	$1,80 \times 10^{-6}$	0,04	$6,41 \times 10^{-8}$	0,03	$2,65 \times 10^{-10}$	0,03	$1,22 \times 10^{-9}$	0,03	$9,16 \times 10^{-10}$	0,04
		500	$4,00 \times 10^{-7}$	0,10	$1,12 \times 10^{-8}$	0,10	$1,64 \times 10^{-11}$	0,10	$1,08 \times 10^{-10}$	0,10	$6,48 \times 10^{-11}$	0,10
		1000	$1,00 \times 10^{-7}$	0,33	$1,97 \times 10^{-9}$	0,33	$1,02 \times 10^{-12}$	0,32	$9,59 \times 10^{-12}$	0,33	$4,53 \times 10^{-12}$	0,34
	MERF	50	$2,03 \times 10^{-4}$	0,09	$3,26 \times 10^{-4}$	0,08	$4,62 \times 10^{-4}$	0,08	$6,05 \times 10^{-4}$	0,08	$7,41 \times 10^{-4}$	0,08
		100	$5,22 \times 10^{-5}$	0,39	$8,08 \times 10^{-5}$	0,37	$1,13 \times 10^{-4}$	0,37	$1,47 \times 10^{-4}$	0,38	$1,78 \times 10^{-4}$	0,37
		250	$8,60 \times 10^{-6}$	3,54	$1,29 \times 10^{-5}$	3,52	$1,78 \times 10^{-5}$	3,24	$2,31 \times 10^{-5}$	3,52	$2,79 \times 10^{-5}$	3,43
		500	$2,20 \times 10^{-6}$	22,23	$3,20 \times 10^{-6}$	22,16	$4,40 \times 10^{-6}$	22,05	$5,70 \times 10^{-6}$	22,01	$6,90 \times 10^{-6}$	22,00
		1000	$6,00 \times 10^{-7}$	157,02	$8,00 \times 10^{-7}$	156,59	$1,10 \times 10^{-6}$	149,36	$1,40 \times 10^{-6}$	163,09	$1,70 \times 10^{-6}$	158,03
	MEDF	50	$2,86 \times 10^{-4}$	0,00	$3,53 \times 10^{-4}$	0,00	$4,66 \times 10^{-4}$	0,00	$5,96 \times 10^{-4}$	0,00	$7,17 \times 10^{-4}$	0,00
		100	$6,67 \times 10^{-5}$	0,01	$8,48 \times 10^{-5}$	0,01	$1,14 \times 10^{-4}$	0,00	$1,46 \times 10^{-4}$	0,01	$1,76 \times 10^{-4}$	0,00
		250	$1,01 \times 10^{-5}$	0,02	$1,32 \times 10^{-5}$	0,02	$1,79 \times 10^{-5}$	0,02	$2,30 \times 10^{-5}$	0,02	$2,77 \times 10^{-5}$	0,02
		500	$2,50 \times 10^{-6}$	0,05	$3,30 \times 10^{-6}$	0,05	$4,40 \times 10^{-6}$	0,04	$5,70 \times 10^{-6}$	0,05	$6,90 \times 10^{-6}$	0,05
		1000	$6,00 \times 10^{-7}$	0,16	$8,00 \times 10^{-7}$	0,16	$1,10 \times 10^{-6}$	0,14	$1,40 \times 10^{-6}$	0,15	$1,70 \times 10^{-6}$	0,16

*O tempo de processamento é menor do que 0,01 s.

4.2 SIMULAÇÃO DE ESTUDOS DE CASO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Nesta seção são apresentados estudos de caso tradicionais da área de engenharia química, a saber, reatores químicos e bioquímicos. Para esta finalidade, estes são simulados para avaliar a influência da ordem fracionária α e do número de pontos de discretização N nos perfis obtidos, considerando a metodologia proposta (integração dos modelos diferenciais fracionários e a correção dimensional de cada modelo fenomenológico).

4.2.1 REATOR BATELADA

A primeira aplicação envolve a modelagem matemática de uma reação química em um reator batelada isotérmico (QURESHI; AZIZ, 2019). Neste estudo de caso, a espécie A é transformada na espécie C por meio de uma reação intermediária envolvendo a espécie B . Essa reação pode ser descrita pelo mecanismo sequencial abaixo:



Os parâmetros k_1 e k_2 são as constantes de taxa associadas à reação sequencial. O modelo matemático que descreve o balanço de massa desse sistema, tendo em vista o contexto fracionário e a correção de suas dimensões, é dado como segue:

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha C_A}{dt^\alpha} = -k_1 C_A, \quad C_A(0) = 1 \quad (4.9)$$

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha C_B}{dt^\alpha} = k_1 C_A - k_2 C_B, \quad C_B(0) = 0 \quad (4.10)$$

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha C_C}{dt^\alpha} = k_2 C_B, \quad C_C(0) = 0 \quad (4.11)$$

onde t é o tempo (h) e C_A , C_B e C_C são as concentrações das espécies (g/L).

Cabe ressaltar que para a aplicação do MERF foi empregado o MN considerando, para cada variável dependente, um perfil inicial igual a 0,5 para todo o domínio.

A Tabela 2 apresenta os resultados obtidos considerando $[k_1 \ k_2] = [0,3 \ 0,1]$ (1/h), tempo final igual a 50 s, e diferentes configurações para a ordem fracionária (α) e para o número de pontos de discretização (N) para o problema do reator em batelada.

Como observado para as funções matemáticas, o aumento no valor de N implica no aumento da precisão, bem como no tempo de processamento. Nesse sentido, é possível dizer que o método mais interessante do ponto de vista do binômio precisão versus tempo de processamento é o MAMF.

Na Figura 3 são apresentados os perfis de concentração obtidos para o problema do reator batelada considerando o MAMF ($N=100$) e diferentes ordens fracionárias ($\alpha=[0,5 \ 0,6 \ 0,7 \ 0,8 \ 0,9 \ 1]$).

Tabela 2 – Erro absoluto médio* e tempo de processamento** (s) para as abordagens MAMF, MERF e MEDF para o problema do reator batelada.

N	α	MEDF	MERF	MAMF
50	1	$1,3 \times 10^{-3} * (3,4 \times 10^{-3}) **$	$8,7 \times 10^{-4} (3,2 \times 10^{-1})$	$1,9 \times 10^{-5} (7,8 \times 10^{-3})$
		$2,8 \times 10^{-4} (5,5 \times 10^{-3})$	$2,3 \times 10^{-4} (1,4 \times 10^0)$	$8,2 \times 10^{-7} (1,2 \times 10^{-2})$
		$4,3 \times 10^{-5} (1,3 \times 10^{-2})$	$3,9 \times 10^{-5} (10,4 \times 10^0)$	$1,2 \times 10^{-8} (3,6 \times 10^{-2})$
250	0,9	$1,9 \times 10^{-4} (6,8 \times 10^{-3})$	$1,5 \times 10^{-4} (1,7 \times 10^0)$	$1,8 \times 10^{-6} (1,3 \times 10^{-2})$
	0,8	$1,4 \times 10^{-4} (7,2 \times 10^{-3})$	$9,7 \times 10^{-5} (1,7 \times 10^0)$	$5,1 \times 10^{-6} (1,3 \times 10^{-2})$
	0,7	$1,1 \times 10^{-4} (6,6 \times 10^{-3})$	$5,9 \times 10^{-5} (1,7 \times 10^0)$	$1,1 \times 10^{-5} (1,5 \times 10^{-2})$
100	0,6	$8,6 \times 10^{-5} (6,3 \times 10^{-3})$	$3,4 \times 10^{-5} (1,7 \times 10^0)$	$1,6 \times 10^{-5} (1,3 \times 10^{-2})$
	0,5	$7,9 \times 10^{-5} (6,4 \times 10^{-3})$	$1,8 \times 10^{-5} (1,7 \times 10^0)$	$1,6 \times 10^{-5} (1,4 \times 10^{-2})$

Na Figura 3a ($\alpha = 1$) é observado o comportamento físico característico do sistema, em que a concentração da espécie A (reagente) diminui ao longo do tempo enquanto a concentração da espécie C (produto) aumenta ao longo do tempo. Como B é um intermediário (é consumido e produzido), é possível observar que sua concentração inicialmente aumenta com a conversão do reagente A no produto B e diminui em segundo momento com o aumento da concentração de C .

Já nas Figuras 3b, 3c e 3d, é possível observar que quanto menor o valor de α , maiores serão as concentrações de A e menores serão as concentrações de C , fato que está ligado à formação e consumo do intermediário B . Como consequência, constata-se que, diferentemente dos perfis para α igual a unidade onde, praticamente, o estado estacionário foi alcançado para o tempo final especificado (50 h), para a ordem fracionária, no mesmo intervalo de tempo, o sistema ainda não entrou em regime permanente. Conforme pode ser observado na Fig.3e, para valores de $\alpha > 1$ maiores do que a unidade, percebe-se que um comportamento oscilatório para a concentração da espécie A . Tal comportamento não condiz com o esperado para o sistema reacional analisado. Assim, variar a ordem de forma arbitrária pode implicar na obtenção de resultados fisicamente incoerentes. Neste contexto, percebe-se que, embora na teoria a ordem fracionária possa variar livremente, na prática o seu valor não pode ser variado de qualquer forma para evitar resultados que não correspondem ao fenômeno em análise.

4.2.2 REATOR BIOQUÍMICO

Nesse segundo estudo de caso avalia-se um reator bioquímico isotérmico, representado pelas concentrações de biomassa (x_1 - g/L), substrato (x_2 - g/L) e produto (x_3 - g/L), onde são consideradas as inibições pelo substrato e pelo produto (BEQUETTE, 1998). O modelo dinâmico fracionário é descrito matematicamente pelos balanços de massa definidos como:

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha x_1}{dt^\alpha} = \left(\frac{0,48 (1 - x_3/50) x_2}{0,12 + x_2 + 0,04545 x_2^2} - 0,202 \right) x_1, \quad x_1(0) = 10 \quad (4.12)$$

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha x_2}{dt^\alpha} = 4,040 - 0,202 x_2 - \left(\frac{1,2 (1 - x_3/50) x_2 x_1}{0,12 + x_2 + 0,04545 x_2^2} \right), \quad x_2(0) = 10 \quad (4.13)$$

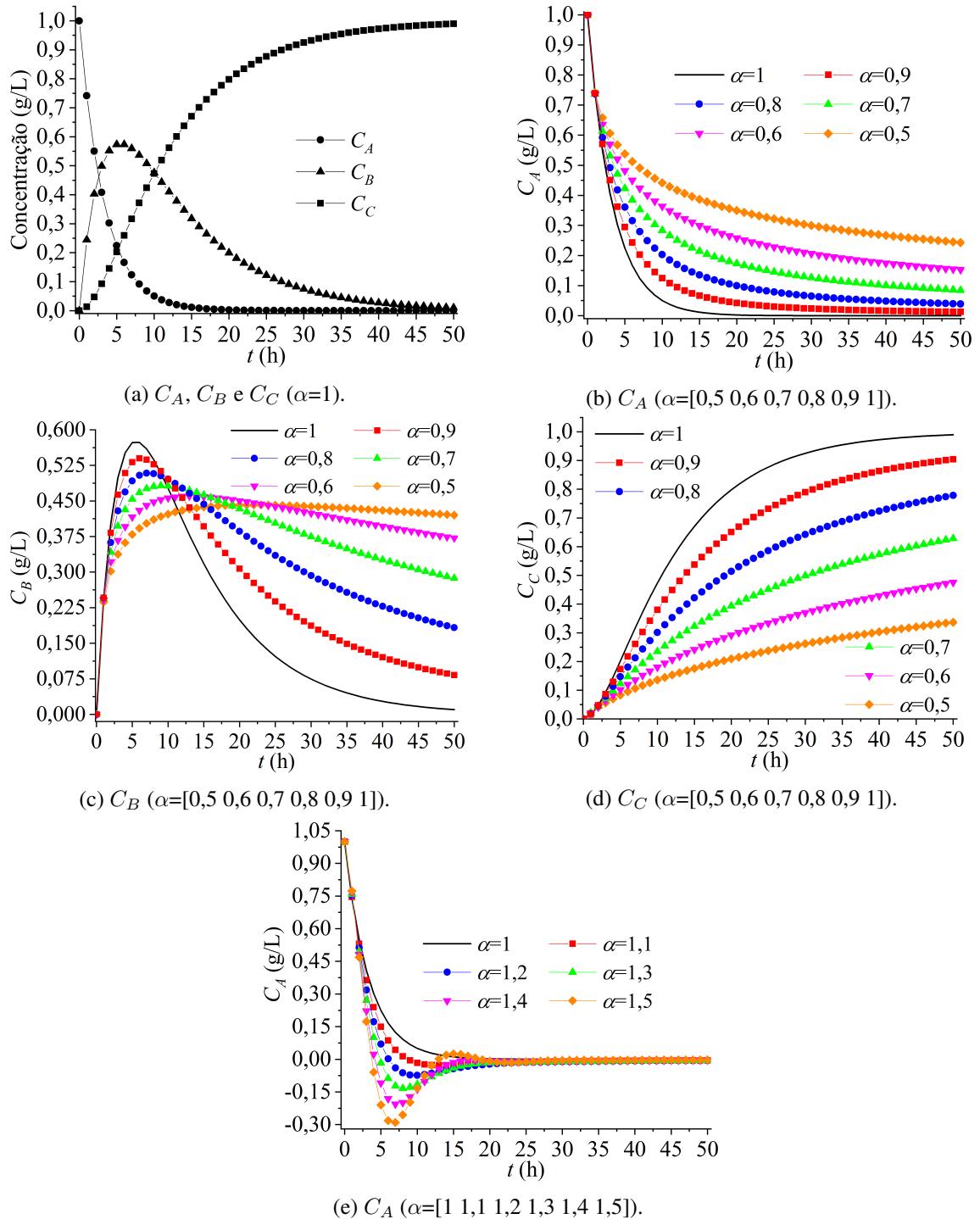


Figura 3 – Perfis de concentração obtidos para o problema do reator batelada considerando o MAMF e diferentes ordens fracionárias.

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha x_3}{dt^\alpha} = -0,202x_3 + \left(\frac{1,056 (1 - x_3/50) x_2}{0,12 + x_2 + 0,04545x_2^2} + 0,2 \right) x_1, \quad x_3(0) = 0 \quad (4.14)$$

A Tabela 3 apresenta os resultados obtidos considerando o tempo final igual a 50h e diferentes configurações para a ordem fracionária (α) e para o número de pontos de discretização (N) para o problema do reator bioquímico. É importante ressaltar que para a aplicação do MERF foi empregado o MN considerando, para cada variável dependente, um perfil inicial igual a 1

para todo o domínio.

Tabela 3 – Erro absoluto médio* e tempo de processamento** (s) para as abordagens MAMF, MERF e MEDF para o problema do reator bioquímico.

N	α	MEDF	MERF	MAMF
50	1	$5,9 \times 10^{-1} * (9,1 \times 10^{-3})^{**}$	$1,8 \times 10^{-1} (4,9 \times 10^{-1})$	Não Convergiu ¹
		$5,7 \times 10^{-2} (2,1 \times 10^{-2})$	$4,6 \times 10^{-2} (2,1 \times 10^0)$	Não Convergido ²
		$1,1 \times 10^{-2} (2,1 \times 10^{-1})$	$6,1 \times 10^{-3} (16,3 \times 10^0)$	$1,3 \times 10^{-4} (4,7 \times 10^{-2})$
250	0,9	$2,4 \times 10^{-3} (8,4 \times 10^{-2})$	$4,5 \times 10^{-3} (21,4 \times 10^0)$	$7,1 \times 10^{-5} (5,8 \times 10^{-2})$
	0,8	$2,2 \times 10^{-3} (8,5 \times 10^{-2})$	$3,3 \times 10^{-3} (21,4 \times 10^0)$	$6,1 \times 10^{-5} (5,4 \times 10^{-2})$
	0,7	$2,4 \times 10^{-3} (8,4 \times 10^{-2})$	$2,5 \times 10^{-3} (21,5 \times 10^0)$	$8,3 \times 10^{-5} (5,4 \times 10^{-2})$
250	0,6	$3,1 \times 10^{-3} (8,4 \times 10^{-2})$	$1,9 \times 10^{-3} (21,5 \times 10^0)$	$1,3 \times 10^{-4} (5,4 \times 10^{-2})$
	0,5	$4,5 \times 10^{-3} (8,4 \times 10^{-2})$	$1,5 \times 10^{-3} (21,5 \times 10^0)$	$2,1 \times 10^{-4} (5,4 \times 10^{-2})$

¹ $\Xi > 690$.

² $\Xi > 36$.

Os resultados apresentados na Tab. 3 demonstram que todas as abordagens, pelo menos para valores de N maiores do que 100 e para diferentes valores de α , convergiram para uma boa estimativa dos perfis quando comparado com a estratégia PCM. Como esperado, o aumento no valor do número de pontos de discretização resulta em uma redução do erro absoluto médio e, consequentemente, no aumento do tempo de processamento. Enquanto o método MERF requer o maior tempo de processamento, o MEDF apresenta o menor tempo, por ser um método explícito. Embora o MAMF não tenha收敛ido para N igual a 50 e 100, esta abordagem é a mais eficiente em termos de custo computacional versus precisão quando N é igual a 250.

A Figura 4 apresenta os perfis de concentração de células, substrato e produto considerando o MAMF para diferentes valores da ordem fracionária α e pontos de discretização $N = 250$ no problema de reator bioquímico.

Na Figura 4a é possível observar que, para ordem fracionária igual à unidade, tanto a concentração de biomassa (x_1) quanto a de produto (x_3) aumentam por conta do rápido consumo de substrato (x_2), utilizado como *alimento*. Após este momento, há a redução do substrato disponível e, como consequência, diminuição da produção de biomassa e produto até que o estado estacionário seja alcançado. Em contrapartida, como o consumo do substrato diminui em função da redução da atividade metabólica e equilíbrio das reações químicas, a sua concentração aumenta até estabilizar no estado estacionário.

Para $\alpha < 1$ (ver as Figs. 4b, 4c e 4d) é possível observar que a dinâmica do processo é alterada. Neste caso, é possível observar maiores concentrações de biomassa no tempo igual a 50h para menores valores de α quando comparado com a ordem inteira. Por outro lado, para o substrato, são observadas menores concentrações para menores valores de α . Já em relação ao produto, a redução no valor do parâmetro α implica no desaparecimento do pico observado para maiores valores da ordem fracionária. Por fim, a redução no valor da ordem fracionária

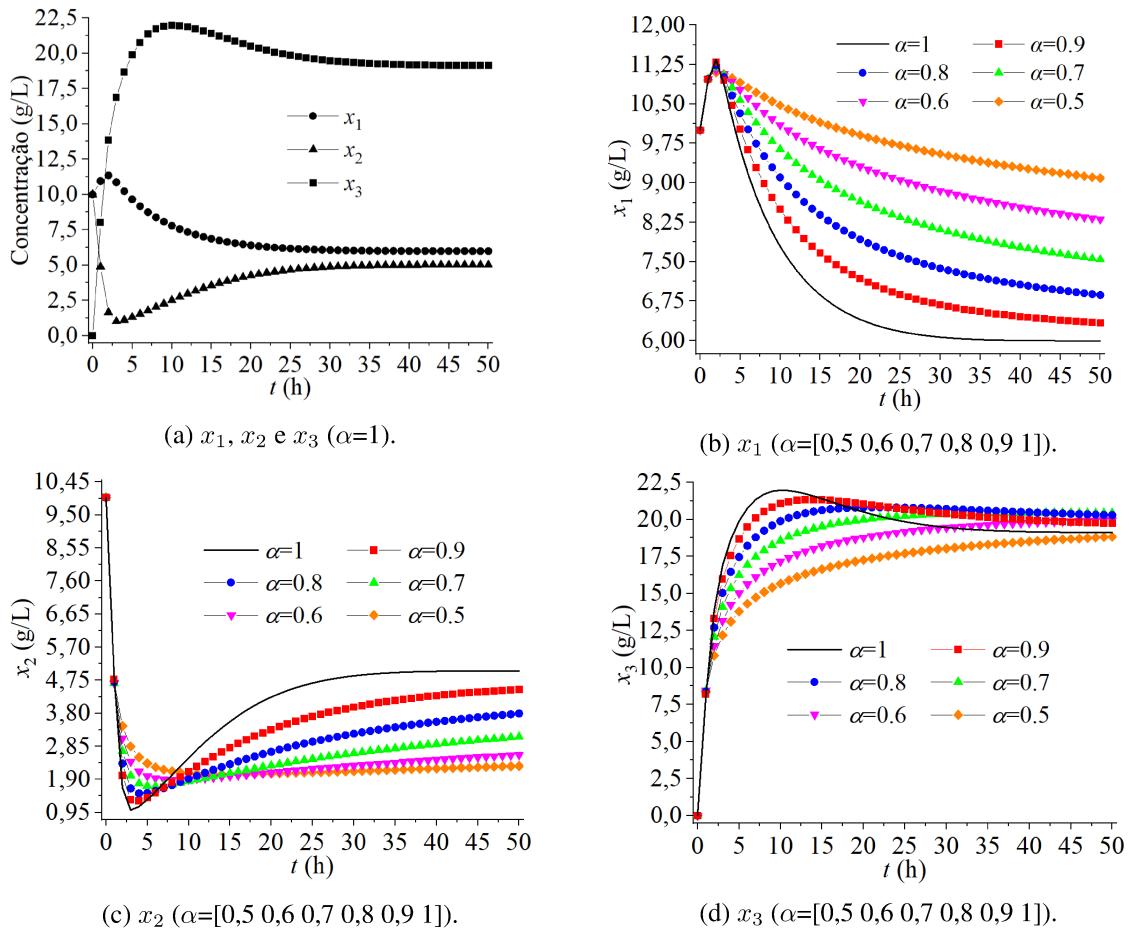


Figura 4 – Perfis de concentração obtidos para o problema do reator bioquímico considerando o MAMF e diferentes ordens fracionárias.

implica no aumento do tempo necessário para o processo entrar em regime estacionário. Por fim, cabe destacar que todos os perfis apresentados são viáveis do ponto de vista físico. Todavia, representam dinâmicas diferentes com relação ao perfil obtido com ordem inteira.

4.2.3 REATOR CSTR NÃO ISOTÉRMICO

O terceiro estudo de caso refere-se a simulação de um reator CSTR (*Continuous Stirred Tank Reactors*) não isotérmico onde acontece uma reação irreversível (A se transformando no produto B) de primeira ordem e exotérmica. Para representar este processo são consideradas as seguintes hipóteses (BEQUETTE, 1998): *i*) mistura perfeita; *ii*) volume constante; *iii*) propriedades físicas constantes e *iv*) a temperatura do sistema de resfriamento pode ser controlada diretamente (não é necessário escrever um balanço de energia). Matematicamente, o modelo diferencial fracionário que representa os balanços de massa (para a espécie A) e energia (para o reator) é dado como:

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha C_A}{dt^\alpha} = 10 - C_A - 34930800 \exp\left(-\frac{5960,2415}{T}\right) C_A, \quad C_A(0) = 9 \quad (4.15)$$

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha T}{dt^\alpha} = \frac{1937}{5} - \frac{13}{10}T + 416375136 \exp\left(-\frac{5960,2415}{T}\right) C_A, \quad T(0) = 300 \quad (4.16)$$

onde C_A (kgmol/m^3) é a concentração da espécie A e T (K) é a temperatura do reator.

A Tabela 4 apresenta os resultados obtidos considerando diferentes estratégias numéricas e valores para a ordem fracionária para o tempo final igual a 20 h. Para a aplicação do MERF foi considerado o MN com valores iniciais para a concentração e temperatura iguais a 1 (kgmol/m^3) e 100 K, respectivamente.

Tabela 4 – Erro absoluto médio* e tempo de processamento** (s) para as abordagens MAMF, MERF e MEDF para o problema do reator CSTR não isotérmico.

N	α	MEDF	MERF	MAMF
50	1	$5,6 \times 10^{-2} * (6,7 \times 10^{-3})^{**}$	$4,1 \times 10^{-2} (2,7 \times 10^{-1})$	$2,6 \times 10^{-5} (1,5 \times 10^{-2})$
100	1	$1,2 \times 10^{-2} (2,1 \times 10^{-2})$	$1,1 \times 10^{-2} (1,1 \times 10^0)$	$1,2 \times 10^{-6} (2,4 \times 10^{-2})$
250	1	$1,9 \times 10^{-3} (1,5 \times 10^{-2})$	$1,7 \times 10^{-3} (8,2 \times 10^0)$	$3,6 \times 10^{-9} (4,1 \times 10^{-2})$
250	0,9	$1,4 \times 10^{-3} (2,1 \times 10^{-2})$	$1,3 \times 10^{-3} (10,5 \times 10^0)$	$4,2 \times 10^{-7} (4,5 \times 10^{-2})$
	0,8	$1,1 \times 10^{-3} (2,1 \times 10^{-2})$	$9,6 \times 10^{-4} (10,4 \times 10^0)$	$1,9 \times 10^{-6} (4,6 \times 10^{-2})$
	0,7	$9,6 \times 10^{-4} (2,1 \times 10^{-2})$	$7,1 \times 10^{-4} (10,5 \times 10^0)$	$5,7 \times 10^{-6} (4,6 \times 10^{-2})$
	0,6	$1,1 \times 10^{-3} (1,9 \times 10^{-2})$	$5,1 \times 10^{-4} (10,4 \times 10^0)$	$1,3 \times 10^{-5} (4,6 \times 10^{-2})$
	0,5	$1,4 \times 10^{-3} (2,2 \times 10^{-2})$	$3,6 \times 10^{-4} (10,4 \times 10^0)$	$2,7 \times 10^{-5} (4,3 \times 10^{-2})$

Conforme observado nas aplicações anteriores, o aumento no valor de N implica em uma solução mais precisa, mas no incremento do tempo de processamento. A abordagem MERF apresenta o maior tempo de processamento, enquanto o MEDF a menor. Já o MAMF se destaca por apresentar o melhor custo benefício em termos da precisão versus custo computacional (ver a Tab. 4).

A Figura 5 apresenta os perfis de concentração e temperatura considerando o MAMF para diferentes valores de α e pontos de discretização $N = 250$ no problema de reator não isotérmico. Como observado nessas figuras, tanto o perfil de concentração quanto o de temperatura são influenciados pelo valor de α quando comparado ao perfil obtido com ordem inteira. Para um tempo final igual a 20 h, observa-se que a redução de α resulta no aumento da concentração C_A e na diminuição da temperatura T ao longo do tempo, de forma que o tempo final para que o processo entre em regime permanente aumente. Isto significa que, para os valores de ordem fracionária consideradas, a mudança no valor de α implica na mudança na dinâmica dos perfis de C_A e T , mas ainda são obtidos perfis fisicamente viáveis.

4.3 ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS CONSIDERANDO MODELOS FRACIONÁRIOS

Como destacado anteriormente, um dos objetivos do presente trabalho é determinar parâmetros em modelos diferenciais fracionários através da formulação e resolução de problemas de estimação de parâmetros (também conhecido como problemas inversos) considerando pontos

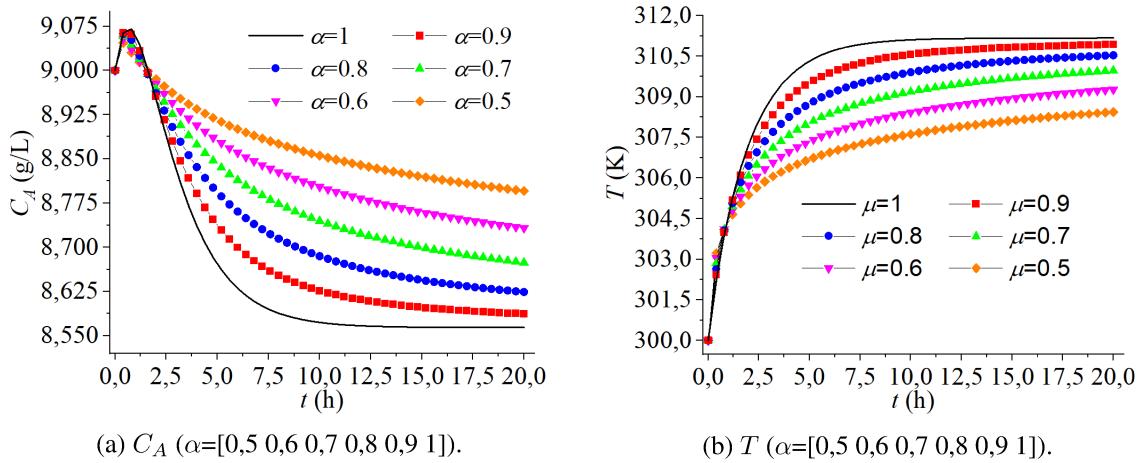
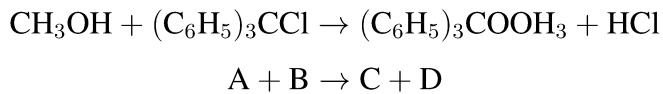


Figura 5 – Perfis de concentração obtidos para o problema do reator CSTR não isotérmico considerando o MAMF e diferentes ordens fracionárias.

experimentais reais. Neste caso, além dos parâmetros desconhecidos nos modelos considerados, a ordem fracionária também deve ser determinada. A seguir são apresentados dois estudos de caso. O primeiro considera um reator batelada em que deseja-se obter os parâmetros que caracterizam a taxa da reação e a ordem fracionária. Já o segundo consiste na determinação dos parâmetros cinéticos e da ordem fracionária. Em ambos os casos considera-se como ferramenta de otimização o algoritmo de Evolução Diferencial (STORN; PRICE, 1995). Para a integração do modelo diferencial fracionário será empregado o MAMF, por ter o melhor custo-benefício em termos de precisão e tempo de processamento (conforme evidenciado nas aplicações anteriores).

4.3.1 REATOR BATELADA

Considere a reação em fase líquida que ocorre em um reator batelada a 25°C entre metanol (CH_3OH) e trifénil ($(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{CCl}$) para formar trifenilmetiléter ($(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{COOH}_3$) e ácido clorídrico (HCl) (FOGLER, 2020).



Para uma alimentação equimolar, os pontos experimentais referentes a concentração do metanol (C_A) em função do tempo (t) são apresentados na Tab. 5:

Tabela 5 – Pontos experimentais da reação entre metanol e trifénil.

t (h)	0	0,278	1,389	2,78	8,33	16,66
C_A (mol/dm ³)	1	0,95	0,816	0,707	0,5	0,370

Os balanços de massa para as concentrações de metanol e trifénil (C_B) no contexto

fracionário são dados por:

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha C_A}{dt^\alpha} = -\beta_1 C_A^{\beta_2} C_B^{\beta_3}, \quad C_A(0) = 1 \text{ mol/dm}^3 \quad (4.17)$$

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha C_B}{dt^\alpha} = -\beta_1 C_A^{\beta_2} C_B^{\beta_3}, \quad C_B(0) = 1 \text{ mol/dm}^3 \quad (4.18)$$

em que β_i ($i=1, 2, 3$) são os parâmetros que caracterizam a expressão da taxa.

Matematicamente, o problema de estimação de parâmetros consiste em determinar os valores de α e de β_i ($i=1, 2, 3$) que minimizam o funcional FO :

$$FO = \sum_{k=1}^{n_{exp}} \frac{(C_{A,exp} - C_{A,sim})^2}{\max(C_{A,exp})^2} \quad (4.19)$$

em que n_{exp} é o número de pontos experimentais, e $C_{A,exp}$ e $C_{A,sim}$ representam as concentrações de metanol experimental e simulados.

Para resolver o problema de estimação de parâmetros proposto, os seguintes pontos devem ser destacados:

- Para a integração do modelo diferencial fracionário considera-se o MAMF usando N igual a 100 (valor definido após simulações preliminares), bem como o tempo total de operação igual a 20 h;
- No algoritmo de ED são empregados os seguintes parâmetros: tamanho da população (25), número de iterações/gerações (50), taxa de perturbação (0,8), probabilidade de cruzamento (0,8) e estratégia DE/rand/1/bin por [Storn e Price \(1995\)](#);
- Os limites para as variáveis de projeto são definidas como: $0,8 \leq \alpha \leq 1,2$; $0,1 \leq \beta_1 \leq 0,2$; $1,4 \leq \beta_2 \leq 2,4$ e $0,5 \leq \beta_3 \leq 1$. Cabe destacar que estas faixas foram definidas após execuções preliminares do algoritmo de ED.
- O algoritmo de ED foi executado 20 vezes para a obtenção do valor médio e do desvio-padrão;
- É importante destacar que os parâmetros do simulador e do otimizador foram escolhidos após algumas execuções preliminares para fins de ajuste.

A Tabela 6 apresenta os parâmetros estimados considerando o MAMF e o algoritmo de ED para o problema do reator batelada. Para fins de comparação, o problema de estimação foi resolvido considerando α igual a 1 e α livre (estimado pelo otimizador). Nesta tabela é possível observar que, para os dois casos considerados, o algoritmo de ED sempre convergiu para a mesma solução, visto os valores da média e do desvio padrão apresentados. Ao estimar α observa-se que o valor do funcional FO é menor do que o encontrado quando α é fixo. Este resultado já era esperado visto que, ao estimar a ordem fracionária, tem-se o aumento no número

de graus de liberdade do problema de otimização. Como consequência, pelo menos a priori, quanto maior o número de variáveis de projeto, menor tende a ser o valor do funcional FO . Por fim, os tempos de processamento requeridos para a resolução de cada estudo de caso são próximos, não sendo a diferença tão significativa.

Tabela 6 – Parâmetros estimados considerando o MAMF e o algoritmo de ED para o problema do reator batelada (VM=valor médio e DP=desvio-padrão).

	α	β_1 (dm ³ /(mol h))	β_2 (-)	β_3 (-)	FO (-)	TP (s)
VM	1*	0,1780	2,2240	0,7080	$3,49 \times 10^{-5}$	13,96
DP	-	$5,73 \times 10^{-5}$	$1,25 \times 10^{-1}$	$1,26 \times 10^{-1}$	$3,86 \times 10^{-9}$	$7,65 \times 10^{-2}$
VM	0,9213	0,1714	1,5908	0,7327	$7,81 \times 10^{-6}$	15,61
DP	$1,72 \times 10^{-2}$	$1,05 \times 10^{-3}$	$1,11 \times 10^{-1}$	$1,68 \times 10^{-2}$	$1,21 \times 10^{-8}$	$8,38 \times 10^{-1}$

*Ordem fracionária fixada para fins de comparação.

Na Figura. 6 são apresentados os perfis de concentração simulados e experimentais para a espécie A considerando os parâmetros estimados (ver a Tab. 6). Nesta figura, observa-se uma boa concordância entre os perfis simulados (α fixo e calculado pelo otimizador) e experimentais. Todavia, não é possível observar uma diferença significativa entre os perfis simulados. Apesar de, visualmente, não ser possível observar uma melhora quando se considera α computado pelo otimizador, o valor do funcional FO é influenciado, conforme observado na Tab. 6.

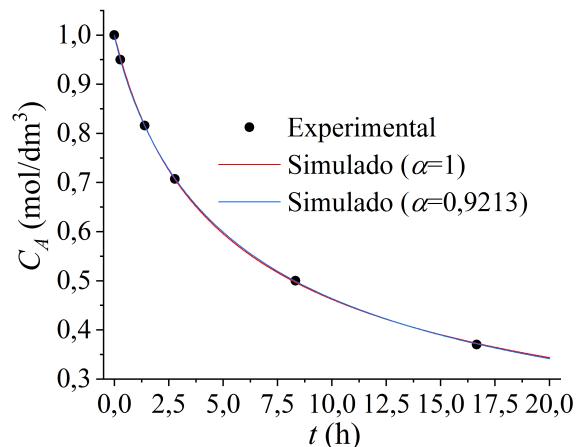


Figura 6 – Perfis de concentração da espécie A considerando os parâmetros estimados para o problema do reator batelada.

4.3.2 FERMENTAÇÃO DA CERVEJA

A segunda aplicação considera um modelo diferencial fracionário empregado para representar o processo de fermentação de um tipo particular de cerveja. Neste modelo, a biomassa, o açúcar, o etanol e a dicetona vicinal são aferidas, bem como a concentração de etanol e a taxa

de dióxido de carbono. O modelo diferencial fracionário é dado como (LARA et al., 2022):

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha CO_2}{dt^\alpha} = \mu_X CO_2, \quad CO_2(0) = CO_{20} \quad (4.20)$$

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha VD}{dt^\alpha} = k_V \mu_X CO_2 - r_{DV} VD, \quad VD(0) = VD_0 \quad (4.21)$$

$$\mu_X = \mu_{max} \frac{S}{K_S + S} \left(1 - \frac{CO_2}{C_P S_0} \right) \quad (4.22)$$

$$\mu_{max} = a \ln(T/T_p) + b \quad (4.23)$$

$$r_{DV} = cT^2 + dT + e \quad (4.24)$$

$$S = S_0 - k_S CO_2 \quad (4.25)$$

$$E = E_0 + k_E CO_2; \quad (4.26)$$

Neste equacionamento, t (h) é o tempo, CO_2 (L), VD (ppm), S (g/L) e E representam as quantidades de dióxido de carbono, dicetona vicinal e açúcar e etanol, respectivamente ($CO_{20} = 1$ L, $VD_0 = 0,006$ ppm, $S_0 = 72$ g/L e $E_0 = 2$ g/L são as quantidades iniciais destes componentes). k_V ($= 1,74 \times 10^{-2}$ ppm/LCO₂), k_S ($= 3,72 \times 10^{-1}$ g/L), $k_E = 1,62 \times 10^{-1}$ gE/L²CO₂, C_P ($= 2,18$ L/g), K_S ($= 12$ gS/L²CO₂), e T_p ($= 1$ °C) são parâmetros cinéticos e μ_X e r_{DV} são expressões cinéticas. Além disso, a (h⁻¹), b (h⁻¹), c (°C⁻² h⁻¹), d (°C⁻¹ h⁻¹) e e (h⁻¹) são parâmetros que caracterizam as expressões de μ_X e r_{DV} , e T ($= 19$ °C) é a temperatura.

Para determinar os parâmetros cinéticos a , b , c , d e e , bem como a ordem fracionária α será formulado um problema de estimação de parâmetros em que a função objetivo FO é dada como:

$$FO = \sum_{k=1}^{n_{exp}} \frac{(CO_{2,exp} - CO_{2,sim})^2}{\max(CO_{2,exp})^2} + \sum_{k=1}^{n_{exp}} \frac{(VD_{exp} - VD_{sim})^2}{\max(VD_{exp})^2} + \sum_{k=1}^{n_{exp}} \frac{(S_{exp} - S_{sim})^2}{\max(S_{exp})^2} + \sum_{k=1}^{n_{exp}} \frac{(E_{exp} - E_{sim})^2}{\max(E_{exp})^2} \quad (4.27)$$

em que n_{exp} é o número de pontos experimentais de cada espécie, $CO_{2,exp}$, VD_{exp} , S_{exp} e E_{exp} representam as concentrações de dióxido de carbono, dicetona vicinal, açúcar e etanol experimentais, e $CO_{2,sim}$, VD_{sim} , S_{sim} e E_{sim} representam as concentrações de dióxido de carbono, dicetona vicinal, açúcar e etanol simulados.

Os pontos experimentais considerados nesta aplicação são descritos na Tab. 7 (LARA et al., 2022).

Para resolver o problema de estimação de parâmetros proposto, os seguintes pontos devem ser destacados:

- Para a integração do modelo diferencial fracionário considera-se o MAMF usando N igual a 200 (valor definido após simulações preliminares);

Tabela 7 – Pontos experimentais das concentrações de dióxido de carbono, etanol, açúcar e dicetona vicinal.

CO ₂ (g/L)		E (g/L)		S (g/L)		VD (ppm)	
0,0000	0,0000	0,1307	0,0002	0,0001	71,7949	0,0000	0,0061
2,0915	0,0000	2,0866	1,1049	2,0869	74,9288	1,9650	0,0065
4,0522	0,0001	4,1778	1,1872	4,0434	73,7892	4,0611	0,0067
5,8823	0,5681	6,0042	2,0369	6,0002	70,9402	6,0262	0,0069
8,1045	1,1363	8,0921	2,8862	7,9565	69,8006	8,1222	0,0069
10,0654	5,11364	10,1817	3,3094	10,0435	67,8063	9,9563	0,0010
12,1569	10,7955	12,1406	3,7327	12,1304	66,9516	12,0524	0,0012
18,0392	44,3182	17,9929	10,6279	18,0002	54,7009	18,2096	0,34618
21,0458	68,7507	20,9876	13,3509	21,1304	50,7123	21,0917	0,8079
24,0523	94,8864	23,9778	17,0966	24,1304	45,584	24,1048	0,9847
29,0196	132,3862	29,0554	21,7769	29,0873	22,7924	28,9521	1,8450
35,0327	151,1367	35,0555	24,7513	35,0879	15,9544	35,1092	1,9899
42,0915	154,5457	41,9822	25,0824	42,0021	15,0997	42,0524	1,9829
45,2288	155,6823	45,1199	24,9927	45,0052	14,2457	45,0655	1,8939
48,1249	25,3294	48,2353	155,6828	48,0001	13,6752	48,0786	1,8050
53,2026	157,3866	53,0934	25,0666	52,9565	14,2457	53,1878	1,5450

- No algoritmo de ED são empregados os seguintes parâmetros: tamanho da população (50), número de iterações/gerações (250), taxa de perturbação (0,8), probabilidade de cruzamento (0,8) e estratégia DE/rand/1/bin por [Storn e Price \(1995\)](#).
- Os limites para as variáveis de projeto são definidas como: $0,05 \leq \alpha \leq 1,5$; $10^{-8} \leq a \leq 2$; $10^{-8} \leq b \leq 2$; $10^{-8} \leq c \leq 2$; $10^{-8} \leq d \leq 2$; e $10^{-8} \leq e \leq 2$. Cabe destacar que estas faixas foram definidas após execuções preliminares do algoritmo de ED.
- O algoritmo de ED foi executado 20 vezes para a obtenção do valor médio e do desvio-padrão.

A Tabela 8 apresenta os parâmetros estimados considerando o MAMF e o algoritmo de ED para o problema da fermentação da cerveja considerando α igual a 1 e α livre (estimado pelo otimizador). Nesta tabela é possível observar que o algoritmo de ED sempre convergiu para a mesma solução, visto os valores da média e do desvio padrão apresentados. O valor do funcional obtido quando se considera α livre ($1,67 \times 10^{-1}$) é pouco menor do que aquele obtido para α fixo ($1,70 \times 10^{-1}$), sendo os valores dos outros parâmetros próximos. O tempo de processamento requerido para a resolução do problema de otimização onde α é computado é superior ao requerido quando α é mantido fixo.

Na Figura. 7 são apresentados os perfis de concentração de açúcar (S), etanol (E), dióxido de carbono (CO₂) e dicetona vicinal (VD) em função do tempo, considerando os parâmetros estimados para o problema de fermentação de cerveja (ver a Tab. 8). Assim como constatado para a primeira aplicação, ambos os perfis simulados (com α fixo e α livre) são concordantes

Tabela 8 – Parâmetros estimados considerando o MAMF e o algoritmo de ED para o problema da fermentação da cerveja (VM=valor médio e DP=desvio-padrão).

	VM	DP	VM	DP
α	1*	-	1,0303	$1,18 \times 10^{-4}$
a (h ⁻¹)	$8,78 \times 10^{-2}$	$6,87 \times 10^{-9}$	$8,35 \times 10^{-2}$	$1,89 \times 10^{-5}$
b (h ⁻¹)	$3,90 \times 10^{-9}$	0,0000	$3,90 \times 10^{-9}$	0,0000
c (°C ⁻² h ⁻¹)	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
d (°C ⁻¹ h ⁻¹)	$9,08 \times 10^{-4}$	0,0000	$8,64 \times 10^{-4}$	$3,28 \times 10^{-7}$
e (h ⁻¹)	$2,00 \times 10^{-10}$	0,0000	$2,00 \times 10^{-10}$	0,0000
FO (-)	$1,70 \times 10^{-1}$	0,0000	$1,67 \times 10^{-1}$	$2,75 \times 10^{-7}$
TP (s)	191,53	6,2101	205,11	4,1422

*Ordem fracionária fixada para fins de comparação.

com os pontos experimentais. Todavia, não é possível observar mudanças significativas entre esses perfis.

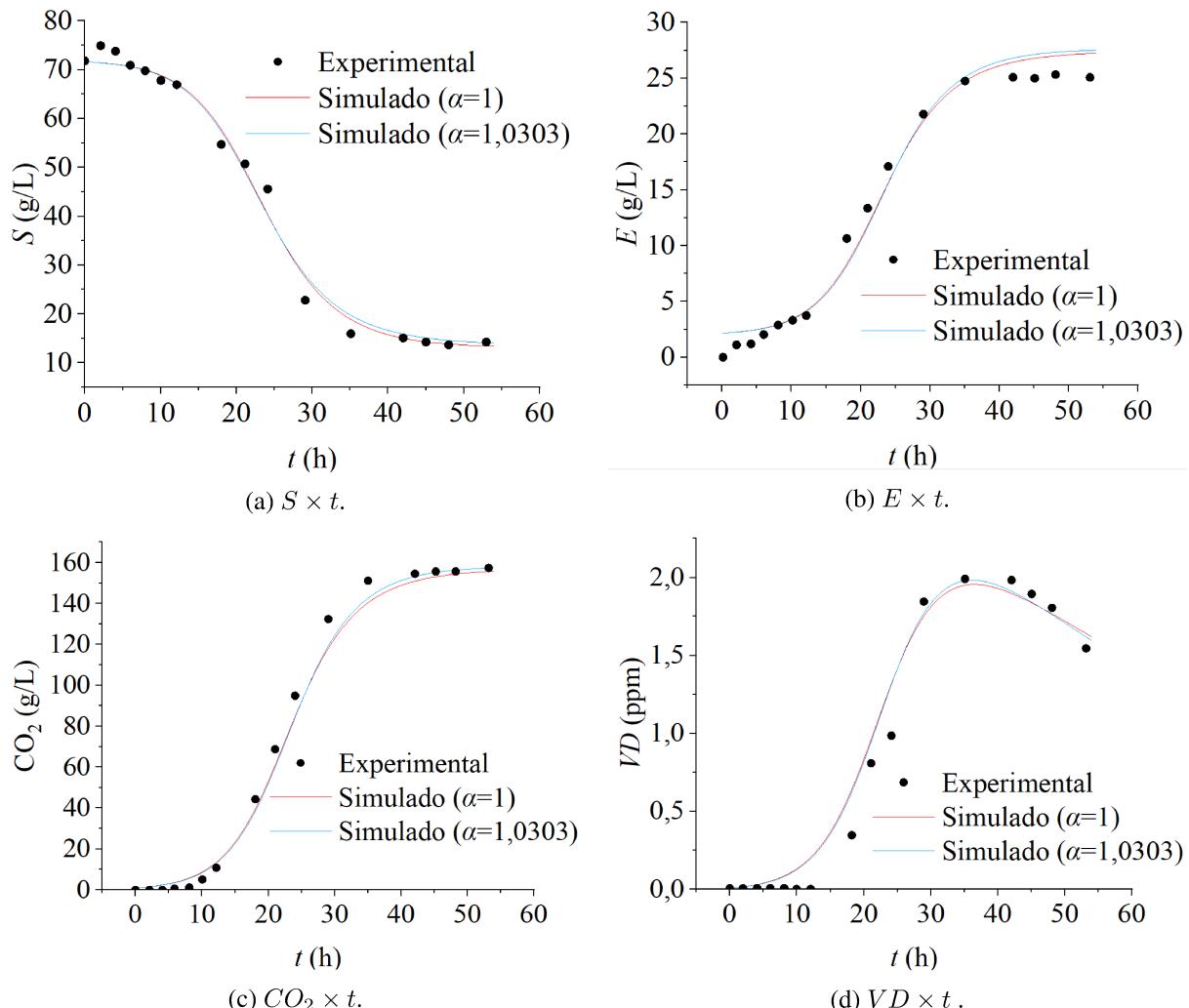


Figura 7 – Perfis de concentração de açúcar (S), etanol (E), dióxido de carbono (CO_2) e dicetona vicinal (VD) em função do tempo, considerando os parâmetros estimados para o problema de fermentação de cerveja.

4.4 PLANO DE FASES NO CONTEXTO FRACIONÁRIO

O plano de fases ou retrato de fases é uma exibição visual de certas características de alguns tipos de equações diferenciais, tais como a determinação gráfica de ciclos limites (BEQUETTE, 1998). Na prática, um retrato de fases é um caminho específico que representa a evolução, no tempo, das variáveis dependentes. Os planos de fase são úteis para visualizar o comportamento dos sistemas físicos, com interesse particular naqueles que apresentam comportamentos oscilatórios (BEQUETTE, 1998). Além disso, em alguns modelos, os caminhos de fase podem apresentar o comportamento do tipo espiral convergente para o zero ou infinito, bem como podem ser do tipo circular, elíptico ou ovóide (BEQUETTE, 1998).

Para avaliar a influência da ordem fracionária no plano de fases considere um reator de mistura perfeita onde as reações elementares $A \rightarrow B \rightarrow C$ e $2A \rightarrow D$ ocorrem. Sabendo que k_{AB} , k_{BC} e k_{AD} são as constantes de reação referentes à reação de A para B , de B para C e A para D , respectivamente, que A puro é alimentado a uma vazão (F) constante e que o volume (V) é considerado constante, o modelo matemático que descreve o comportamento das concentrações das espécies A (C_A) e B (C_B) em função do tempo t no contexto fracionário é dado por (BEQUETTE, 1998):

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha C_A}{dt^\alpha} = \frac{F}{V} (C_{Ae} - C_A) - k_{AB} C_A - k_{AD} C_A^2, \quad C_A(0) = C_{A_0} \quad (4.28)$$

$$\frac{1}{\sigma^{1-\alpha}} \frac{D^\alpha C_B}{dt^\alpha} = -\frac{F}{V} C_B + k_{AB} C_A - k_{BC} C_B, \quad C_B(0) = C_{B_0} \quad (4.29)$$

onde C_{Ae} é a concentração de alimentação da espécie A e C_{A_0} e C_{B_0} representam as condições iniciais das espécies A e B , respectivamente.

Para α igual a unidade, k_{AB} igual a $5/6 \text{ min}^{-1}$, k_{BC} igual a $5/3 \text{ min}^{-1}$, k_{AD} igual a $1/6 \text{ L}/(\text{mol min})$, C_{Ae} igual a 10 mol/L , e F/V igual a $4/7 \text{ min}^{-1}$, dois são os estados estacionários. O primeiro é dado pelo par coordenado ($C_A=3 \text{ mol/L}$; $C_B=105/94 \text{ mol/L}$), e o segundo por ($C_A=-80/7 \text{ mol/L}$; $C_B=-200/47 \text{ mol/L}$), sendo que este último par coordenado é inviável por não ter significado físico. Portanto, espera-se que quando o tempo tender a infinito, o sistema caminhe para o ponto estacionário com concentrações positivas, sendo este ponto coordenado naturalmente estável.

Na Figura. 8 são apresentados os perfis de concentração das espécies A e B em função do tempo, o estado estacionário (EE) e o plano de fases para o problema do reator CSTR considerando o MAMF com 500 pontos de discretização e α igual a 1. A condição inicial (C_{A_0} C_{B_0}) considerada em cada simulação foi definida a partir da combinação entre os pontos contidos no vetor $[0,001 \ 1,25075 \ 2,5005 \ 3,75025 \ 5]$ (5 pontos igualmente espaçados entre 0,001 e 5), isto é; foram utilizadas as seguintes condições iniciais: $(0,001 \ 0,001)$; $(0,001 \ 1,25075)$; $(0,001 \ 2,5005)$; ...; $(5 \ 5)$, totalizando 25 simulações para cada valor de α . Cabe destacar que, para todas as simulações, σ sempre é considerado igual a unidade para que o mesmo apenas corrija as unidades, mas não interfira no valor dos perfis obtidos.

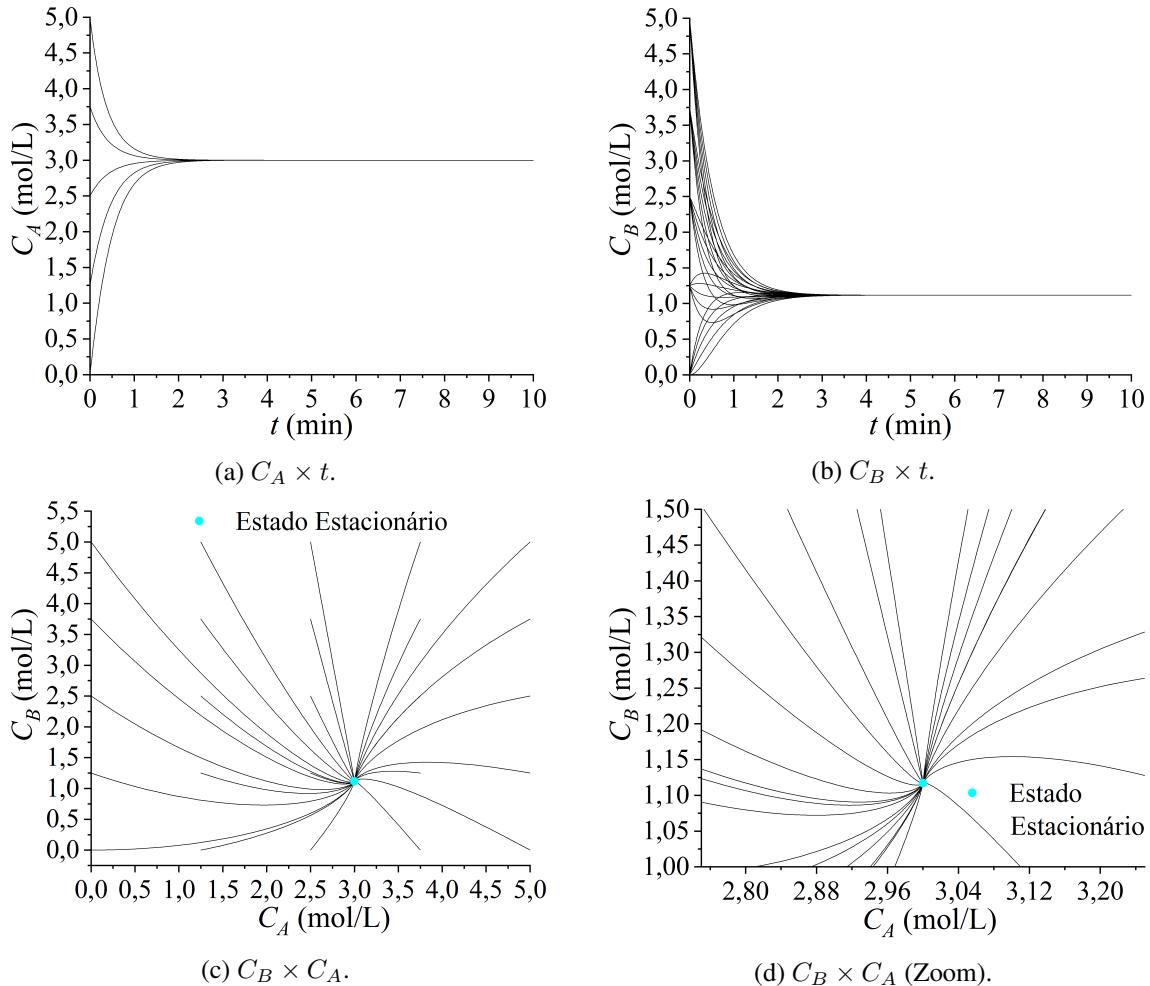


Figura 8 – Perfis de concentração em função do tempo, estado estacionário e plano de fases para o problema do reator CSTR considerando α igual a 1.

Já na Figura. 9 são apresentados os perfis de concentração das espécies A e B em função do tempo, o estado estacionário e o plano de fases para o problema do reator CSTR considerando diferentes valores para α ([0,8 0,9 1,0 1,1 1,2]), bem com o mesmo método numérico e condições iniciais.

Na Tabela 9 são apresentados os valores das concentrações das espécies A e B para diferentes ordens fracionárias e tempos de simulação. Para uma comparação justa, para cada tempo final de simulação (t_f), o valor de N foi determinado de forma que o incremento de tempo sempre fosse igual a 0,01 min.

Sendo assim, ao avaliar a Fig. 9 pode-se concluir que há influência direta da ordem fracionária no tempo necessário para que o sistema encontre o estado estacionário. No que diz respeito ao tempo necessário para que o processo alcance o estado estacionário, é possível observar que o aumento da ordem fracionária, como por exemplo em $\alpha = 1,2$, garante um comportamento oscilatório com a presença de um pico anterior à estabilização no ponto estacionário. Por outro lado, para valores de α menores, o sistema não apresenta picos e o estado estacionário é atingido em um maior tempo tanto para C_A quanto para C_B , como pode ser observado ao se

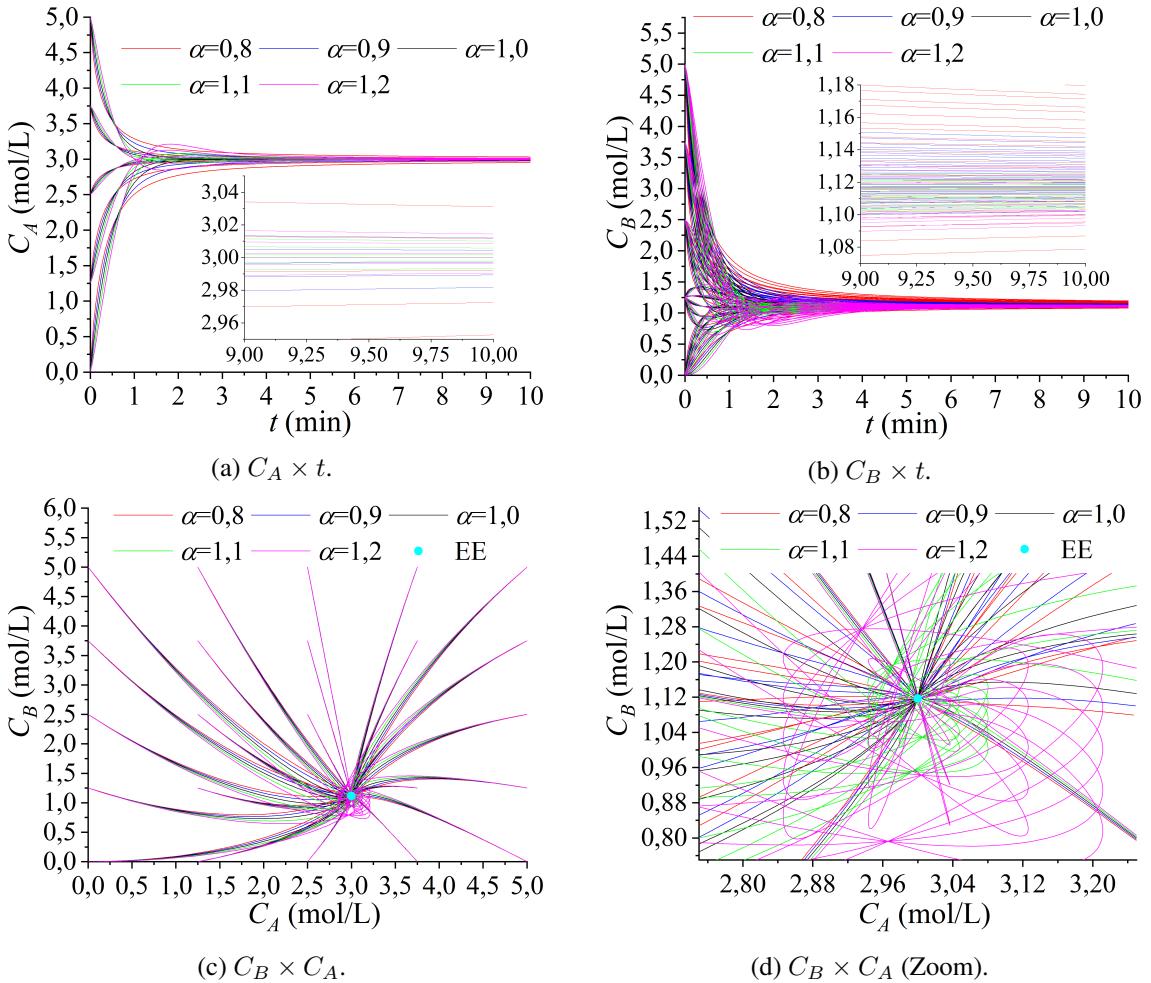


Figura 9 – Perfis de concentração em função do tempo, estado estacionário e plano de fases para o problema do reator CSTR considerando diferentes valores para α .

Tabela 9 – Estado estacionário em função da ordem fracionária e do tempo de simulação para o problema de reator CSTR.

α	$t_f=10$ min		$t_f=25$ min		$t_f=50$ min	
	C_A (mol/L)	C_B (mol/L)	C_A (mol/L)	C_B (mol/L)	C_A (mol/L)	C_B (mol/L)
0,8	3,0311	1,1954	3,0143	1,1526	3,0080	1,1370
0,9	3,0120	1,1474	3,0050	1,1294	3,0026	1,1235
1,0	3,0000	1,1170	3,0000	1,1170	3,0000	1,1170
1,1	2,9933	1,1002	2,9976	1,1112	2,9989	1,1143
1,2	2,9904	1,0931	2,9969	1,1094	2,9986	1,1137

comparar ordens fracionárias maiores. Com isso, pode-se concluir que o estado estacionário é encontrado de maneira mais lenta com valores menores de α , devido a um decaimento dos perfis, pois para $\alpha < 1$ o consumo do reagente A pelo modelo fracionário é mais lento, o que implica na formação dos produtos B e C na reação, quando no valor de D .

Em relação à análise do plano de fases, é possível constatar que quando $\alpha = 1$, o ponto de equilíbrio do estado estacionário é alcançado de maneira mais suave, em que o sistema decai geralmente sem oscilações como pode ser observado na Fig. 8. O aumento da ordem fracionária

α acarreta em um comportamento oscilatório em torno do estado estacionário, fato que ocorre devido a uma maior dependência do sistema ao seu histórico tendo em vista as concentrações em análise.

4.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este capítulo teve por objetivo apresentar aplicações envolvendo a metodologia proposta para problemas da área de engenharia química. Em primeiro momento foram empregados os Métodos de Adams-Moulton Fracionário (MAMF), Método de Euler Reverso Fracionário (MERF) e Método de Euler Direto Fracionário (MEDF) para a simulação de funções puramente matemáticas e que apresentavam solução analítica. Em seguida, foram considerados estudos de caso em engenharia química (reatores químicos e bioquímicos). Eses estudos possibilitaram a avaliação dos diferentes perfis a partir da mudança do número de pontos de discretização N e da ordem fracionária α . Para a aplicação do MAMF foram formulados problemas de estimação de parâmetros considerando modelos diferenciais fracionários e dados reais. Por fim, com o intuito de avaliar a influência da ordem fracionária nos perfis simulados ao longo do tempo, a análise de um plano de fases foi realizada.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

5.1 CONCLUSÕES

O presente trabalho teve como objetivo investigar a influência da ordem fracionária em modelos tradicionais de engenharia química, considerando três abordagens numéricas, a saber: o Método de Adams-Moulton Fracionário (MAMF), o Método de Euler Reverso Fracionário (MERF) e o Método de Euler Direto Fracionário (MEDF). A partir dos resultados apresentados no capítulo anterior, é possível destacar os seguintes pontos.

- Os resultados obtidos demonstram que as metodologias propostas (MAMF, MERF e MEDF) foram capazes de obter boas estimativas em comparação com as soluções numéricas reportadas usando o Método Preditivo-Corretivo do tipo Adams-Bashforth-Moulton, para todos os estudos de caso analisados.
- No que tange ao número de pontos de discretização (N), o seu aumento implica em um menor erro absoluto médio. Todavia, esse aumento implica no incremento do tempo de processamento. Neste caso, deve-se sempre analisar o binômio custo computacional versus precisão para a escolha do melhor valor de N .
- Cabe destacar que, em relação ao custo computacional versus precisão, o Método de Adams-Moulton Fracionário mostrou-se a estratégia numérica mais eficiente.
- A partir da análise da influência da ordem fracionária (α) nos perfis simulados, foi possível concluir que a variação deste parâmetro modifica o comportamento de cada modelo. Todavia, é importante ressaltar que, dependendo do valor considerado para esse parâmetro, o perfil pode não condizer com a realidade física do problema estudado. Neste caso, deve-se avaliar a faixa de valores do parâmetro α de forma que perfis incoerentes não sejam obtidos.
- Em relação à estimação de parâmetros (problema inverso), pode-se estimar o valor de α para sistemas físicos de interesse. Neste caso, em relação à ordem inteira, foi possível observar que estimar α resultou em uma melhor aderência dos perfis simulados aos pontos experimentais, conforme o valor da função objetivo. Cabe destacar que o algoritmo de Evolução Diferencial sempre convergiu para uma boa estimativa dos parâmetros, conforme os valores da média e do desvio padrão reportados para cada aplicação.
- Ao avaliar o plano de fases, foi possível constatar que, para valores de $\alpha < 1$, o estado estacionário é atingido de forma mais lenta se comparado a $\alpha = 1$. Para valores em que

$\alpha > 1$, é possível observar o comportamento oscilatório do sistema, com visíveis picos antes de alcançar o estado estacionário, sendo este efeito diretamente relacionado à maior influência atribuída aos valores anteriores do sistema (efeito de memória). Por fim, para $\alpha = 1$, há um decréscimo suave sem oscilações. Sendo assim, o tempo necessário para se alcançar o estado estacionário é influenciado pela ordem fracionária escolhida.

- Finalmente, ao utilizar uma derivada fracionária, pode-se destacar: *i*) o efeito de memória associado às derivadas fracionárias; *ii*) a generalização em relação à derivada de ordem inteira; e *iii*) o aumento no número de graus de liberdade para o sistema em análise, sem a mudança de outras características do mesmo.

5.2 CONTRIBUIÇÕES DO TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

O presente Trabalho de Conclusão de Curso contribuiu para:

- Revisar e organizar o estado da arte no que tange à aplicação de modelos fracionários em sistemas dinâmicos.
- Comparar diferentes métodos de integração de equações diferenciais fracionárias em termos de custo computacional e precisão.
- Investigar a influência do número de pontos de discretização na avaliação do tempo de processamento e, consequentemente, no custo computacional.
- Analisar sistemas não lineares constituídos por modelos diferenciais fracionários.

5.3 CONTRIBUIÇÕES NA FORMAÇÃO PROFISSIONAL

- Consolidação e aprimoramento de conhecimentos teóricos e práticos sobre modelagem matemática fracionária aplicada a sistemas físicos em engenharia química.
- Desenvolvimento da capacidade de análise crítica no que diz respeito ao tratamento e interpretação dos dados obtidos, por meio da metodologia aplicada, com base em fundamentos físicos e químicos de estudos de caso clássicos em engenharia química.
- Aprimoramento das habilidades no que tange a linguagens de programação, bem como o contato com ferramentas digitais úteis para a engenharia e análise de dados.
- Contato e experiência com a pesquisa científica e sua estruturação a partir da revisão bibliográfica, escrita técnica e organização de resultados e discussões pertinentes.

- Capacidade de aplicar, no futuro, os conhecimentos adquiridos em processos físico-químicos presentes na indústria, com a finalidade de promover tecnologias mais eficientes e sustentáveis desses processos e otimização de sistemas.

5.4 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como propostas para trabalhos futuros pretende-se:

- Propor e resolver modelos baseados em equações diferenciais parciais fracionárias (EDPFs) que representem processos industriais complexos.
- Formular e resolver problemas inversos envolvendo EDPFs, utilizando dados experimentais reais.
- Avaliar a aplicabilidade e o desempenho de controladores com ordem fracionária em sistemas da engenharia química com dinâmica complexa.

REFERÊNCIAS

- ATKINSON, K. *An Introduction to Numerical Analysis*. New York: John Wiley & Sons, 1991. Citado na página 13.
- 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 18 e 19.
- BATHE, K. J. Conserving energy and momentum in nonlinear dynamics: A simple implicit time integration scheme. *Computers and Structures*, 2007. Citado na página 11.
- BEQUETTE, B. W. *Process Dynamics Modeling, Analysis and Simulation*. [S.l.]: New Jersey: Practice Hall, 1998. Citado 4 vezes nas páginas 1, 36, 39 e 47.
- BOHANNAN, G.; KNAUBER, B. A physical experimental study of the fractional harmonic oscillator. p. 2341–2344, 2015. Citado na página 18.
- BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*. Rio de Janeiro: LTC, 2010. Citado na página 12.
- BOYD, S.; VANDENBERGHE, L. *Convex Optimization*. Cambridge: Cambridge University Press, 2004. Citado na página 22.
- BREGALDA, P. F.; OLIVEIRO, A. A. F.; BORNSTEIN, C. T. *Introdução à Programação Linear*. [S.l.]: Editora Campus, 1988. Citado na página 22.
- 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 na página 19.
- CAFAGNA, D. Fractional calculus: A mathematical tool from the past for present engineers. *IEEE Industrial Electronics Magazine*, p. 35–40, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 11.
- CAMARGO, R. F.; OLIVEIRA, E. C. Cálculo fracionário. *Livraria Editora da Física*, 2015. Citado na página 5.
- CAPUTO, M. Linear models of dissipation whose q is almost frequency independent—ii. *Geophysical Journal International*, v. 13, n. 5, p. 529–539, November 1967. Disponível em: <<https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.1967.tb02303.x>>. Citado na página 16.
- CARVALHO, M. D.; OTTONI, J. E. Introdução ao cálculo fracionário com aplicações. *Revista de Matemática de Ouro Preto*, 2018. Citado na página 8.
- CHEN, D.; LIU, C.; WU, C. et al. A new fractional-order chaotic system and its synchronization with circuit simulation. *Circuits, Systems, and Signal Processing*, Springer, v. 31, n. 6, p. 1599–1613, 2012. Citado na página 18.
- CHENG, S.-L.; HWANG, C. Optimal approximation of linear systems by a differential evolution algorithm. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics - Part A: Systems and Humans*, v. 31, n. 6, p. 698–707, nov. 2001. Citado na página 24.

COSTA, M. *Modelagem constitutiva de materiais viscoelásticos e viscoelásticos-viscoplásticos. Uma comparação entre abordagens baseadas em derivadas de ordem fracionária e inteira*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2021. Citado na página 9.

DEB, K. *Multi-objective Optimization using Evolutionary Algorithms*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2001. Citado na página 21.

DEBNATH, L.; BHATTA, D. Integral transforms and their applications. *Taylor Francis Group, LLC*, 2007. Citado na página 6.

DIETHELM, K.; FORD, N.; FREED, A. A predictor-corrector approach for the numerical solution of fractional differential equations. *Nonlinear Dynamics*, v. 29, n. 1, p. 3–22, 2002. Citado na página 32.

DIETHELM, K.; FORD, N.; FREED, A. Detailed error analysis for a fractional adams method. *Numerical Algorithms*, v. 36, n. 2, p. 31–52, 2004. Citado na página 32.

DIETHELM, K.; FREED, A. D. The FracPECE subroutine for the numerical solution of differential equations of fractional order. In: *Gessellschaft fur Wissenschaftliche Datenverarbeitung, Gottingen*. [S.l.]: In S. Heinzel, T. Plessner (Eds.), *Forschung und Wissenschaftliches Rechnen 1998, 1999*, 1999. p. 57–71. Citado na página 31.

DING, Z.; GRANGER, C. W. J.; ENGLE, R. F. A long memory property of stock market returns and a new model. *Journal of Empirical Finance*, v. 1, n. 1, p. 83–106, 1993. Citado na página 18.

FLORES-MUÑOS, F.; BAÉZ-GRACÍA, A. J.; GUTIÉRREZ-BARROSO, J. Fractional differencing in stock market price and online presence of global tourist corporations. *Journal of Economics, Finance and Administrative Science*, Emerald Publishing Limited, v. 23, n. 45, p. 305–320, 2018. ISSN 2218-0648. Citado na página 18.

FOGLER, H. *Elements of Chemical Reaction Engineering*. 6th ed. edição: Pearson, 2020. 1088 páginas p. Citado na página 41.

FRANCO, I. C. *Modelagem e Simulação: Processos Químicos*. [S.l.]: The Journal of Engineering and Exact Sciences, 2021. Citado na página 1.

GARCIA, V. A. *Projeto de hidrociclones usando otimização robusta e evolução diferencial*. Dissertação (Dissertação (Mestrado em Engenharia Química)) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2018. DOI: <<http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2018.1227>>. Citado na página 25.

GARRAPPA, R. On linear stability of predictor–corrector algorithms for fractional differential equations. *International Journal of Computer Mathematics*, v. 87, n. 10, p. 2281–2290, 2010. Citado na página 13.

GODOI, F. *Estudo de Modelos Fenomenológicos Anômalos nos Processos de Transferência de Calor e de Massa*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 3.

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 29.

- 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 na página 17.
- GONZALEZ, J. R. et al. Difusão anômala e equações generalizadas de difusão. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 27, n. 2, p. 251–257, 2005. Citado na página 18.
- HADAMARD, J. Essai sur l'étude des fonctions données par leur développement de taylor. *Journal de mathématiques pures et appliquées*, v. 8, p. 101–186, 1892. Citado na página 5.
- HUMBERT, P.; AGARWAL, R. P. Sur la fonction de mittag-leffler et quelques-unes de ses généralisations. *Bull. Sci.*, 1953. Citado na página 9.
- IZMAILOV, A. F.; SOLODOV, M. V. *Newton-Type Methods for Optimization and Variational Problems*. Switzerland: Springer International Publishing, 2014. 573 p. (Springer Series in Operations Research and Financial Engineering). Citado na página 21.
- KOLWANKAR, K.; GANGAL, A. Fractional differentiability of nowhere differentiable functions and dimensions. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, v. 6, n. 4, p. 505–513, 1996. Citado na página 6.
- LARA, J.; DEWASME, L.; HERNANDÉZ, H.; WOUWER, A. Parameter estimation of dynamic beer fermentation models. *Foods*, v. 11, p. 1–20, 2022. Citado na página 44.
- 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 15.
- LI, C.; ZENG, F. The finite difference methods for fractional ordinary differential equations. *Numerical Functional Analysis and Optimization*, p. 149–179, 2013. Citado na página 27.
- LIMA, D. P. d. O. Estudo e aplicação de quatérnios em processamento digital de imagens. *ScientiaTec: Revista de Educação, Ciência e Tecnologia do IFRS*, IFRS, Ceará, Brazil, v. 5, n. 1, p. 20–35, January/June 2018. Citado na página 12.
- 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 na página 29.
- 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 na página 29.
- LIMA, J. V. C. F. d. *Resolução de Problemas de Controle Ótimo Fracionários Aplicados à Engenharia*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 18.
- LIMA, W. J.; LOBATO, F. S.; AROUCA, F. O. Resolução numérica de equações diferenciais parciais fracionárias no espaço usando o método da colocação ortogonal. *Revista Mundia Engenharia, Tecnologia e Gestão*, 2018. Citado na página 2.
- LIU, T.; HOU, M. A fast implicit finite difference method for fractional advection-dispersion equations with fractional derivative boundary conditions. *Advances in Mathematical Physics*, p. 1–8., 2017. Citado na página 3.

LOBATO, F. *Otimização multi-objetivo para o projeto de sistemas de engenharia*, 2008. Tese (Doutorado) — Dissertação (Mestrado em Engenharia Química)-Programa de Pós-Graduação em ..., 2008. Citado na página 19.

LOBATO, F. S.; LIMA, W. J.; BORGES, R. A.; JR, A. A. C.; JR, V. S. The solution of direct and inverse fractional advection-dispersion problems by using orthogonal collocation and differential evolution. *Soft Computing*, p. 10389–10399, 2020. Citado na página 3.

LORENZO, C. a. H. T. T. Initialization, conceptualization, and application in the generalized fractional calculus,. *Critical Reviews in Biomedical Engineering*, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 6.

LOVERRO, A. Fractional calculus: History, definitions and applications for the engineer. *Department of Aerospace and Mechanical Engineering University of Notre Dame*, 2004. Citado na página 5.

MACHADO, J. A. T. Fractional calculus: Fundamentals and applications. In: *Acoustics and Vibration of Mechanical Structures—AVMS-2017*. [S.l.]: Springer, 2018. v. 198. ISBN 978-3-319-69822-9. Citado na página 2.

MACHADO, J. A. T.; SILVA, M. F.; BARBOSA, R. S.; JESUS, I. S.; REIS, C. M.; MARCOS, M. G.; GALHANO, A. F. Some applications of fractional calculus in engineering. *Hindawi Publishing Corporation*, 2010. Citado na página 2.

MAGIN, R. L. Fractional calculus models of complex dynamics in biological tissues. *Computers Mathematics with Applications*, v. 59, n. 5, p. 1586–1593, 2010. Citado na página 18.

MAIOLI, G. *Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Ordinárias*. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Universidade Estadual Paulista, 2015. Citado na página 13.

MARTÍNEZ, J. M.; SANTOS, S. A. *Métodos Computacionais de Otimização*. [S.l.], 1995. Citado na página 22.

MERAL, F.; ROYSTON, T.; MAGIN, R. Fractional calculus in viscoelasticity: An experimental study. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, v. 15, n. 4, p. 939–945, 2010. Citado na página 18.

MILLER, K. S.; ROSS, B. *An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations*. [S.l.]: Wiley, 1993. Citado na página 5.

MITTAG-LEFFLER, M. G. G. Sur la nouvelle fonction $e_\alpha(x)$. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 1903. Citado na página 9.

MOTTA, A. P.; NASCIMENTO, B. S.; SOUZA, F. B. d.; NICOLIN, D. J. Cálculo fracionário aplicado à generalização da modelagem matemática da secagem de bagaço de uva. In: . Maringá, Paraná: Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Engenharia Química, 2017. Citado na página 19.

NIU, J.; LIU, R.; SHEN, Y.; YANG, S. Stability and bifurcation analysis of single-degree-of-freedom linear vibro-impact system with fractional-order derivative. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 123, p. 14–23, 2019. Citado na página 18.

OGUNNAIKE, B. A.; RAY, W. H. *Process Dynamics, Modeling and Control*. [S.l.]: New York: Oxford University Press, 1994. Citado na página 1.

- OLIVEIRA, D. S.; OLIVEIRA, E. C. de. On the generalized pk, q-fractional derivative. *Progr. Fract. Diff. Appl.*, p. 133–145, 2018. Citado na página 6.
- OLIVEIRA, E. C. de. *Funções Especiais com Aplicações*. 2. ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2012. Citado na página 9.
- 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 10.
- OSINSKI, C.; LEANDRO, G. V.; OLIVEIRA, G. H. da C. Controlador pid fracionário aplicado ao problema de carga e frequência em usinas hidrelétricas. *Periódico Científico da Sociedade Brasileira de Automática (SBA)*, Sociedade Brasileira de Automática, v. 1, n. 1, 2019. Citado na página 25.
- PAIVA, A. L. de O. *Aplicação do Método de Evolução Diferencial à Otimização de um Ciclo de Refrigeração por Compressão de Vapor de Dois Estágios através da Análise Exergética*. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2019. Citado na página 25.
- PEDRON, I. T. *Estudos em Difusão Anômala*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Maringá, 2003. Citado na página 7.
- 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 6 e 12.
- PODLUBNY, I. Geometric and physical interpretation of fractional integration and fractional differentiation. *arXiv preprint math/0110241*, 2001. Citado na página 17.
- PODLUBNY, I.; CHECHKIN, A.; SKOVRANEK, T.; CHEN, Y.; JARA, B. M. V. Matrix approach to discrete fractional calculus ii: Partial fractional differential equations. *Journal of Computational Physics*, v. 228, p. 3137–3153, 2009. Citado 4 vezes nas páginas 2, 8, 9 e 11.
- PRABHAKAR, T. R. A singular integral equation with a generalized mittag-leffler function in the kernel. *Yokohama Math.*, v. 9, p. 7–15, 1971. Citado na página 9.
- QURESHI, S.; AZIZ, S. Fractional modeling for a chemical kinetic reaction in a batch reactor via nonlocal operator with power law kernel. *Physica A*, Elsevier, Jamshoro, Sindh, Pakistan, 2019. Disponível em: <<https://www.elsevier.com/locate/physa>>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 35.
- RODRIGUES, F. G.; OLIVEIRA, E. C. Introdução às técnicas do cálculo fracionário para estudar modelos de física matemática. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, p. 3305–3316, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 2, 7 e 8.
- ROSA, S.; TORRES, D. F. M. Optimal control of a fractional order epidemic model with application to human respiratory syncytial virus infection. *Chaos, Solitons Fractals*, v. 117, p. 142–149, 2018. Citado na página 18.
- 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 10.
- SARAMAGO, S. F. P. Métodos de otimização randômica: Algoritmos genéticos e simulated annealing. *SBMAC*, São Carlos, v. 6, p. 3, 2003. Citado na página 20.

SHEN, X. *Applications of Fractional Calculus In Chemical Engineering*. Dissertação (Mestrado) — University of Ottawa, Ottawa, Canada, 2018. Citado na página 19.

SIEROCIUK, D.; DZIELIŃSKI, A.; SARWAS, G.; PETRAS, I.; PODLUBNY, I.; SKOVRANEK, T. Modelling heat transfer in heterogeneous media using fractional calculus. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 371, n. 1994, p. 20120146, 2013. Citado na página 18.

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 3, 20, 23, 24, 41, 42 e 45.

SZEKERES, B. J.; IZSÁK, F. A finite difference method for fractional diffusion equations with neumann boundary conditions. *Open Mathematics*, p. 581–600, 2015. Citado na página 3.

TATEISHI, A. A.; RIBEIRO, H. V.; LENZI, E. K. The role of fractional time-derivative operators on anomalous diffusion. *Frontier en Physics*, 2017. Citado na página 7.

TEODORO, G. S. Derivadas fracionárias: tipos e critérios de validade. 2019. Citado 3 vezes nas páginas 10, 11 e 12.

TEODORO, G. S.; OLIVEIRA, D. S.; C., O. E. Sobre derivadas fracionárias. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 2018. Citado na página 7.

TITCHMARSH, E. C. *Introduction to Fourier Integrals*. Oxford: Clarendon Press, 1962. Citado na página 13.

TYTIUK, V.; CHORNYI, O.; BARANOVSKAYA, M.; SERHIIENKO, S.; ZACHEPA, I.; TSVIRKUN, L.; KUZNETSOV, V.; TRYPUTEN, N. Synthesis of a fractional-order pid-controller for a closed system of switched reluctance motor control. - , v. 2, n. 2, p. 35–42, 2019. Disponível em: <http://nbuv.gov.ua/UJRN/Vejpte_2019_2%282%29_4>. Citado na página 18.

VANDERPLAATS, G. N. *Numerical Optimization Techniques for Engineering Design*. 3rd. ed. Colorado Springs: Vanderplaats Research and Development, Inc, 2001. 449 p. ISBN 978-0944956014. Citado na página 20.

VILLADSEN, J.; MICHELSSEN, M. L. Solution of differential equation models by polynomial approximation(book). *Englewood Cliffs, N. J., Prentice-Hall, Inc.*, 1978. 460 p, 1978. Citado na página 15.

WU, X.; LEI, B.; ZHANG, K.; CHENG, M. Hybrid stochastic optimization method for optimal control problems of chemical processes. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 126, p. 297–310, 2017. Citado na página 22.

ZASLAVSKY, G. Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport. *Physics Reports*, v. 371, n. 6, p. 461–580, 2002. Citado na página 18.