



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



Controle Ótimo de Sistemas
Algébrico-Diferenciais com
Flutuação do Índice Diferencial

Adriene Artiaga Pfeifer

Uberlândia - MG

2007

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

Controle Ótimo de Sistemas
Algébrico-Diferenciais com
Flutuação do Índice Diferencial

Adriene Artiaga Pfeifer

Uberlândia - MG

2007

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

Controle Ótimo de Sistemas Algébrico-Diferenciais com Flutuação do Índice Diferencial

Adriene Artiaga Pfeifer

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química, área de concentração Desenvolvimento de Processos Químicos.

Uberlândia - MG
2007

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

P525c Pfeifer, Adriene Artiaga, 1982-

Controle ótimo de sistemas algébrico-diferenciais com flutuação do índice diferencial / Adriene Artiaga Pfeifer. - 2007.
125 f. : il.

Orientador: Valéria Viana Murata.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.
Inclui bibliografia.

1. Controle de processos químicos - Teses. I. Murata, Valéria Viana. II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. III. Título.

CDU: 66.012

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA COMO PARTE DOS REQUISITOS PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA EM 07/03/2007.

BANCA EXAMINADORA:



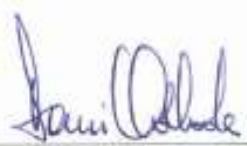
Prof. Dra. Valéria Viana Murata
(Orientadora - PPGEQ/UFU)



Prof. Dr. Luís Cláudio Oliveira Lopes
(PPGEQ/UFU)



Prof. Dr. Adilson José de Assis
(PPGEQ/UFU)



Prof. Dr. Darci Odloak
(PQI - USP)

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, Randolfo e Eleni, que sempre me incentivaram e aconselharam em todos os momentos da minha vida. As minhas irmãs, meus sobrinhos e à minha avó Orávia que sempre me apoiaram.

À minha orientadora Valéria Viana Murata pela amizade, orientação e pelos incentivos em todos os momentos.

Aos Professores Luís Cláudio Oliveira Lopes, Adilson José de Assis e Darci Odloak pela atenção dispensada e opiniões relevantes na conclusão deste trabalho.

Ao meu amigo Fran Sérgio por toda a ajuda e orientação dada para a realização deste trabalho.

Aos meus amigos e companheiros de curso Ricardo, Davi, Sandra, Marcos, Ricardo Pires, Andréia, Emília, Alaine, José Luiz, Fabiano, Janaína, Líbia, Gislaine, Juliana, Patrícia, Danylo pelos momentos de descontração, alegria e incentivo.

À todos o funcionários da Faculdade de Engenharia Química pelo apoio.

Aos professores da Faculdade de Engenharia Química.

Ao CNPq pela concessão de bolsa de estudo.

*“Ah... mas quem sou eu senão uma formiguinha das
menores, que anda pela terra cumprindo sua
obrigação.”*

Chico Xavier

SUMÁRIO

Lista de Figuras	iv
Lista de Tabelas	vi
Lista de Quadros	vii
Lista de Abreviaturas	viii
Resumo	x
Abstract	xii
1 Introdução	1
2 Problemas de Controle Ótimo Algébrico-Diferenciais (PCOADs)	5
2.1 Conceitos gerais	5
2.2 Condições necessárias de otimalidade para PCOADs	8
2.3 Métodos de Redução do Índice Diferencial	20
2.3.1 O Código ALGO (UNGER et al., 1995)	20
2.3.2 O Código PALGO (UNGER et al., 1995)	21

2.4	Consistência de inicialização	24
2.5	Função Identificadora de Fases (FIF)	25
2.6	Métodos Numéricos de solução de PCOADs	26
2.6.1	Métodos Diretos	26
2.6.2	Métodos Indiretos	27
2.6.3	Métodos Mistos ou Híbridos	29
2.7	Sistemas Híbridos	31
2.7.1	Definição	31
2.7.2	Sistemas Chaveados	33
2.7.3	Analogia entre PCOADs e Sistemas Chaveados	38
3	Desenvolvimento de uma interface de integração de ferramentas para o tratamento de PCOADs	39
3.1	Aspectos Gerais	39
3.2	Pacote Maplets	40
3.3	Descrição de ferramentas de tratamento de PCOADs	41
3.3.1	INDEX	42
3.3.2	ACIG	42
3.3.3	OTIMA	43
3.3.4	EVENTS: geração do sistema equivalente parametrizado pelos eventos	44
3.4	Aplicações da interface OpCol	44
3.4.1	Caso 1 - Sistema de Índice 1	45
3.4.2	Caso 2 - Reator CSTR com reação exotérmica de primeira ordem	48
3.4.3	Caso 3 - O Problema de Newton formulado como EDOs	51
3.4.4	Caso 4 - Sistema Chaveado	53
4	Solução numérica de PCOADs com flutuação do índice diferencial	58
4.1	Método de Solução	58

4.2	Estudo de Casos	59
4.2.1	Caso 1 - Sistema Chaveado	59
4.2.2	Caso 2 - Reator semi-batelada isotérmico com reações paralelas e restrição de seletividade	64
4.2.3	Caso 3 - Reator Semi-Batelada Isotérmico	69
5	Conclusões e Sugestões	77
5.1	Conclusões	77
5.2	Sugestões	78
	Referências Bibliográficas	80
A	Manual - OpCol	84
B	DIRCOL	91
B.1	Aspectos Gerais	91
B.1.1	Subrotinas de entrada do DIRCOL 2.1	92
B.1.2	Arquivos de saída padrões do DIRCOL 2.1	93
B.1.3	Arquivos de saída opcionais do DIRCOL 2.1	93
B.2	Arquivo de entrada DATLIM	93
B.3	Arquivo de entrada DATDIM	95
B.4	Subrotina USER.f	100

LISTA DE FIGURAS

2.1	Grafos do código PALGO para o problema do pêndulo.	23
2.2	Dinâmica do estado contínuo definido em n_{c+1} fases.	32
3.1	Fluxograma do código EVENTS.	44
3.2	Problema Isaac Newton.	52
4.1	Caso 1 - Variável de estado x_1	61
4.2	Caso 1 - Variável de estado x_2	61
4.3	Caso 1 - Variável de co-estado λ_1	62
4.4	Caso 1 - Variável de co-estado λ_2	62
4.5	Trajetória de estado.	63
4.6	Caso 1 - Variável de controle.	63
4.7	Caso 2 - Evolução das concentrações.	67
4.8	Caso 2 - Função Objetivo.	67
4.9	Perfil ótimo da taxa de alimentação.	68
4.10	Caso 2 - Perfil do Volume.	69
4.11	Perfis das Concentrações.	73
4.12	Perfil ótimo da taxa de alimentação.	74

4.13 Caso 3 - Perfil da Temperatura.	75
4.14 Caso 3 - Perfil do Volume.	75
A.1 Tela de Entrada.	84
A.2 Tela de Entrada do Código INDEX.	85
A.3 Tela de Entrada do Código OTIMA.	85
A.4 Tela de Entrada do Código ACIG.	86
A.5 Tela de Entrada do Código EVENTS.	86
A.6 Entrada via arquivo do usuário.	87
A.7 Tela de seleção - INDEX.	88
A.8 Tela de Opções.	88
A.9 Tela de seleção - OTIMA.	89
A.10 Tela de seleção - EVENTS.	89
A.11 Tela de geração de resultados.	90
B.1 Estrutura do DIRCOL 2.1.	92

LISTA DE TABELAS

4.1	Resultados do Caso 1.	60
4.2	Variações nas estimativas iniciais.	60
4.3	Parâmetros e condições Operacionais do Modelo (Caso 2).	65
4.4	Caso 2 - Função Identificadora de Fases.	66
4.5	Resultados do Caso 2.	66
4.6	Variações nas estimativas iniciais.	66
4.7	Parâmetros e condições Operacionais do Modelo (Caso 3).	71
4.8	Caso 3 - Função Identificadora de Fases.	71
4.9	Resultados do Caso 3.	72
4.10	Variações nas estimativas iniciais.	72
4.11	Variações nos parâmetros.	72

LISTA DE QUADROS

3.1	Comandos do Maple.	41
3.2	Saída do Código INDEX para o Caso 1.	45
3.3	Saída do Código ACIG para o Caso 1.	47
3.4	Saída do Código INDEX para o Caso 2.	48
3.5	Saída do Código ACIG para o Caso 2.	50
3.6	Conjunto de equações para a primeira fase.	54
3.7	Conjunto de equações para a segunda fase.	55
3.8	Conjunto de equações para a terceira fase.	56

LISTA DE ABREVIATURAS

CI - Condição Inicial

COLDAE - *Collocation Differential Algebraic Equation Method*

CSTR - *Continuous Stirred Tank Reactor*

DIRCOL - *Direct Collocation Method*

EADs - Equações Algébrico-Diferenciais

EDOs - Equações Diferenciais Ordinárias

EDPs - Equações Diferenciais Parciais

NLP - Programação Não Linear

PCOs - Problema de Controle Ótimo

PCOADs - Problemas de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial

PMP - Princípio Mínimo de Pontryagin

PVI - Problema de Valor Inicial

PVC - Problema de Valor no Contorno

QP - Programação Quadrática

SQP - Programação Quadrática Seqüencial

FIF - Função Identificadora de Fases (*Switching Structure*)

TPBV - *Two-Point Boundary Value*

Resumo

Os Problemas de Controle Ótimo, também chamados Problemas de Otimização Dinâmica, são formados por uma Função Objetivo a ser maximizada ou minimizada, associada a conjuntos de equações algébricas e diferenciais que incluem restrições de igualdade e de desigualdade nas variáveis de estado e de controle que caracterizam um sistema de Equações Algébrico-Diferenciais (EADs). A extensão do ponto de vista algébrico-diferencial de solução numérica aos PCOs, já amplamente utilizado na simulação de processos devido à garantia de atendimento às restrições algébricas originais e implícitas na formulação e à eliminação das manipulações necessárias para transformar o problema original num sistema de equações puramente diferenciais, caracteriza o chamado Problema de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial (PCOAD). Uma categoria de PCOAD de especial interesse é a dos que incluem restrições de desigualdade, devido à necessidade de conhecimento prévio da sequência de ativações e desativações destas restrições ao longo da trajetória e também dos instantes em que elas ocorrem, chamados Eventos. As ativações/desativações das restrições causam flutuações no índice diferencial e no número de graus de liberdade dinâmicos do PCOAD, exigindo técnicas especiais de redução deste índice até um e o emprego de métodos numéricos eficientes que garantam a convergência e estabilidade da solução.

Estes PCOADs com restrições de desigualdade são equivalentes a uma classe de problemas de otimização dinâmica híbridos, que associam comportamentos contínuos e discretos (FEEHERY, 1998). Um tipo particular de PCO híbrido é aquele cujo estado contínuo não apresenta saltos nos Eventos, chamado PCO Chaveado, para o qual Xu e Antsaklis (2004) propõem uma metodologia de solução baseada na parametrização dos Eventos com a especificação prévia da sequência de subsistemas ativos, resultando na solução de um problema de valor no contorno algébrico-diferencial em dois pontos, formado pelas equações de estado, co-estado e de estacionariedade, condições de contorno e de continuidade e suas diferenciações, chamadas equações de sensibilidade.

Neste trabalho, esta abordagem indireta empregada para PCO Chaveados foi estendida para PCOAD com restrições de desigualdade, com o objetivo de estimar também

os Eventos, além das variáveis de controle, de estado e adjuntas. A abordagem desenvolvida por Xu e Antsaklis (2004) para PCO Chaveados foi implementada num código específico utilizando o Maple 9.5, chamado EVENTS, com o objetivo de gerar simbolicamente as equações baseadas na parametrização dos Eventos. Este código foi incorporado a uma interface chamada OpCol, que reúne ferramentas de caracterização de sistemas de EAD e de geração das condições de otimalidade segundo o Princípio de Pontryagin estendidas para PCOAD de diferentes classes. As ferramentas de caracterização são o INDEX de Murata (1996) que identifica simbolicamente o índice, a resolubilidade e a consistência das condições iniciais e o ACIG de Cunha e Murata (1999) que implementa o algoritmo de Gear para a redução do índice e geração do sistema equivalente de índice 1. O OTIMA (GOMES, 2000; LOBATO, 2004) gera as equações de Euler-Lagrange para PCOAD. Estas ferramentas foram inicialmente implementadas em diferentes versões do Maple e todas foram atualizadas para a versão 9.5 utilizando o pacote Maplets que permite a entrada de dados através de janelas interativas com o usuário, exigindo dele pouco conhecimento da sintaxe Maple. A interface OpCol foi testada para quatro casos e para cada ferramenta foi criado um banco de exemplos com problemas típicos da literatura que auxiliam o usuário na sua utilização. Além disto, o método direto implementado no código DIRCOL estendido para formulações multifásicas com estimativa dos Eventos e o método indireto com Parametrização dos Eventos e abordagem algébrico-diferencial implementado num código MATLAB foram utilizados na solução numérica de três estudos de casos: um PCO chaveado e 2 PCOAD de reatores batelada onde a variável de controle é a taxa de alimentação do componente B: o primeiro tem reações paralelas e restrições de seletividade com 3 fases de índices 1, 3 e 1 e o segundo restrições de segurança com 2 fases de índices 2 e 1 e respectivamente e foram descritos por Srinivasan et al. (2003). A mesma metodologia utilizada por estes autores foi empregada na obtenção de expressões analíticas para a variável de controle em cada fase necessárias no método indireto, compondo as chamadas Funções Identificadoras de Fase (FIF), a partir das condições de otimalidade baseadas no Princípio de Pontryagin - especificamente a partir da condição de estacionariedade e da identificação da restrição ativa que permitirá a determinação da variável de controle - e da análise física do problema de modo a descartar seqüências de ativação/desativação não apropriadas.

Os resultados obtidos pelo método indireto e pelo método direto são comparados entre si para os 3 problemas citados, mostrando a viabilidade tanto da formulação multifásica empregando o DIRCOL quanto o desempenho satisfatório do método indireto com estimativa de Eventos, além da utilidade das ferramentas de caracterização de EADs, de obtenção das condições de otimalidade e de parametrização dos eventos disponibilizadas na interface Opcol.

Palavras-chave: Problemas de Controle Ótimo, Sistemas Híbridos, Sistemas Chaveados, Equações Algébrico-Diferenciais, DIRCOL.

Abstract

Optimal Control Problems (OCP), also known as Dynamic Optimization Problems, consist of an Objective Function to be maximized or minimized, associated with a set of differential and algebraic equations which include equality and inequality constraints in the state or control variables and characterize a system of Differential-Algebraic Equations (DAE). The differential-algebraic approach of numerical solution widely used in process simulation due the guarantee of attendance of the implicit algebraic constraints in the original formulation and the elimination of the necessary manipulations to transform the original problem into a purely differential system, was extended to OCP characterizing the called Differential-Algebraic Optimal Control Problem (DAOCP). A category of DAOCP of special interest includes inequality constraints, due the necessity of previous knowledge of the activations and deactivations sequence of these constraints along the trajectory and also of the instants where they occur, named Events.

This DAOCPs with inequality constraints is equivalent to a class of hybrid dynamic optimization problems, where continuous and discrete behaviors are associated (FEHERY, 1998). A particular type of hybrid OCP is that one where continuous state does not present jumps in the Events, called Switched OCP, for which Xu e Antsaklis (2004) considers a solution methodology based on the parameterization of Events with a previous specification of active subsystems sequence, resulting in the solution of a two-point boundary value differential-algebraic problem, formed by the state, co-state and stationarity equations, boundary and continuity conditions and its differentiations, called sensitivity equations.

In this work, this indirect approach for Switched OCP was extended for DAOCP with inequality constraints, with the objective to estimate the Events, along the control, state and adjoint variables. The developed approach for Switched OCP described by Xu e Antsaklis (2004) was implemented in a specific code using Maple 9.5, called EVENTS, with the objective to symbolically generate the equations based on the parameterization of Events. This code was incorporated in a interface named OpCol,

that collect characterization tools of DAE systems and generation of the optimality conditions extended Pontryagin's Principle for PCOAD of different types. The characterization tools are the INDEX of Murata (1996) that symbolically identifies the index, the resolubility and the consistency of initial conditions and the ACIG of Cunha e Murata (1999) that implements the Gear's algorithm for the index reduction and the index 1 equivalent system generation. The OTIMA (GOMES, 2000; LOBATO, 2004) generates the Euler-Lagrange equations for DAOCP. These tools had been implemented initially in different versions of Maple and all had been update to 9.5 version using the Maplets package that allows the data entry through interactive windows with the user, demanding a little knowledge of the Maple syntax. The OpCol interface was tested for four cases and for each tool a example data bank with typical problems of literature was created to assist the user in its use. Moreover, the direct method implemented in DIRCOL code was extended for multi-phases formulation with estimates of Events and the indirect method with Events Parameterization and differential-algebraic approach implemented in a Matlab code had been used for the numerical solution of three cases: a switched OCP and 2 DAOCP of batch reactors where the control variable is the feed rate of the component B - the first one has parallel reactions and selectivity constraints with 3 phases of index 1, 3 and 1 and the second a safety constraint with 2 phases of index 2 and 1 respectively and had been described by Srinivasan et al. (2003). The methodology used by this authors was applied to attained analytical expressions for the control variable in each phase necessary in indirect method, composing the called Switching Functions, from the optimality conditions based in the Pontryagin's Principle - specifically from the stationarity condition and the active constraint identification that will allow the control variable determination - and of the physical analysis of the problem in order to discard not appropriate activations/deactivations sequences. The results obtained by indirect and direct methods are compared for the 3 cited problems, showing the viability as much of the multiphase formulation using the DIRCOL and also the satisfactory performance of the indirect method with estimates of Events, beyond the utility of the tools of characterization of EADs, of attainment of optimality conditions and parameterization of Events available in Opcol interface.

Keywords: Optimal Control Problems, Differential-Algebraic Equations, Hybrid Systems, Switched Systems, DIRCOL.

CAPÍTULO 1

Introdução

Os Problemas de Controle Ótimo (PCOs), também chamados Problemas de Otimização Dinâmica, são formados por uma Função Objetivo a ser maximizada ou minimizada, associada a conjuntos de equações algébricas e diferenciais que incluem restrições de igualdade e de desigualdade nas variáveis de estado e de controle que caracterizam um sistema de Equações Algébrico-Diferenciais (EADs). A extensão do ponto de vista algébrico-diferencial de solução numérica aos PCOs, já amplamente utilizado na simulação de processos devido à garantia de atendimento às restrições algébricas originais e implícitas na formulação e à eliminação das manipulações necessárias para transformar o problema original num sistema de equações puramente diferenciais, caracteriza o chamado Problema de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial (PCOAD).

Uma categoria de PCOAD de especial interesse é a dos que incluem restrições de desigualdade, devido à necessidade de conhecimento prévio da sequência de ativações e desativações destas restrições ao longo da trajetória e também dos instantes em que elas ocorrem, chamados Eventos. As ativações/desativações das restrições causam flutuações no índice diferencial e no número de graus de liberdade dinâmicos do PCOAD, exigindo técnicas especiais de redução deste índice até um e o emprego de métodos numéricos eficientes que garantam a convergência e estabilidade da solução.

Estes métodos podem ser diretos, indiretos ou mistos. Os métodos diretos utilizam a parametrização na variável de controle ou a parametrização nas variáveis de controle e de estado seguida da solução do problema de Programação Não Linear (NLP) resultante. A discretização nas variáveis de estado e de controle usando funções polinomiais lineares para o controle e cúbicas para o estado e definidas por partes, seguida da solução de uma sequência de NLP de dimensões crescentes por métodos do tipo Programação Quadrática Sequencial (SQP) para sistemas esparsos e densos

é utilizada no código DIRCOL de Stryk (1999), que calcula estimativas das variáveis adjuntas e das funções multiplicadoras das restrições de igualdade e de desigualdade e também dos Eventos. Os métodos indiretos aplicam o Princípio do Mínimo de Pontryagin para gerar sistemas de EADs de valor no contorno definidas para cada fase identificada pelos Eventos. Os métodos mistos combinam as vantagens dos métodos diretos e dos métodos indiretos.

O estudo da abordagem algébrico-diferencial em PCOs na Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia iniciou-se com o trabalho de Gomes (2000) através da aplicação do método indireto na solução de PCOs e a criação de um código que gera as equações adjuntas e a condição de mínimo através da aplicação do Princípio de Pontryagin (OTIMA). Lobato (2004) apresentou uma abordagem mista para a solução de problemas de otimização dinâmica, unindo as vantagens do método direto e indireto de solução aplicados a problemas com restrições de desigualdade. Vale ressaltar o trabalho de iniciação científica de Cunha e Murata (1999) com a criação de um código de redução do índice diferencial de sistemas de equações algébrico-diferenciais (ACIG). Com os estudos pode ser verificado que a solução numérica de PCOs sujeitos a restrições de desigualdade apresenta desafios especiais porque possui as seguintes características (FEEHERY, 1998):

- Exigência do conhecimento da seqüência e do número de ativações e desativações das restrições ao longo da trajetória;
- Natureza combinatória para problemas com grande dimensão;
- A presença de restrições nas variáveis de estado, resultantes de limitações físicas, econômicas, de segurança, geram EADs de Índice Diferencial Superior (> 1).

Nos trabalhos realizados nesta Faculdade, nota-se a necessidade de determinar os momentos da ativação e desativação das restrições (Eventos). Com esse propósito, a busca para métodos que estime esses valores para um melhor entendimento da solução de PCO sujeitos a restrições de desigualdade, se faz necessária. Segundo Feehery (1998) existe uma equivalência entre PCOs com restrições de desigualdade nas variáveis de estado e os PCOs com comportamento contínuo e discreto acoplados, chamados Sistemas Híbridos. De acordo com Barton et al. (1998), um fenômeno híbrido pode ser classificado em chaveamentos (*switches*) ou saltos (*jumps*). Um chaveamento refere-se a mudanças discretas na forma funcional de $f(\dot{z}, z, u, t) = 0$ como consequência de eventos que ocorrem instantaneamente em um determinado ponto no tempo. Estas diferentes formas possíveis do funcional são conhecidas como “modos” de um sistema híbrido. O momento da ocorrência dos eventos pode ser definido *a priori* ou definido implicitamente pelo estado do sistema satisfazendo alguma condição. Um salto refere-se a descontinuidades no estado da dinâmica do sistema como consequência dos eventos. Em geral, saltos e chaveamentos podem ocorrer simultaneamente em um evento. As equações (1.1) e (1.2) representam chaveamentos e saltos, respectivamente. A primeira refere-se a um modelo que representa a influência de um vertedouro na

dinâmica de um tanque pulmão, onde h é o nível do tanque e h_{weir} é a altura do vertedouro e indica que enquanto o nível do líquido está acima do vertedouro, ele escoar para fora do tanque e enquanto estiver abaixo, não ocorrerá a saída deste líquido. Na segunda equação, x^- denota $\lim_{t \rightarrow t^*-} x(t)$ e x^+ denota $\lim_{t \rightarrow t^{*+}} x(t)$, etc., e j juntamente com $f(\dot{z}, z, u, t) = 0$ define o salto e pode representar, por exemplo, uma certa quantidade de reagente alimentado num reator batelada num espaço de tempo muito curto, que pode ser visto como um salto instantâneo na variável que representa o número de moles do reagente no reator.

$$\begin{cases} F_{out} = k_{weir}(h - h_{weir})^{1.5} & \forall t \in [0, t_f] : h(t) > h_{weir} \\ F_{out} = 0 & \forall t \in [0, t_f] : h(t) \leq h_{weir} \end{cases} \quad (1.1)$$

$$j(\dot{x}^-, x^-, u^-, \dot{x}^+, x^+, u^+, t^*) = 0 \quad \forall t^* \in [0, t_f] : s(\dot{x}^-, x^-, u^-, t^*) = 0 \quad (1.2)$$

Na definição apresentada por Xu e Antsaklis (2004), um sistema chaveado é um tipo particular de sistema híbrido, mas cujo estado contínuo não apresenta saltos nos eventos. Os autores propõem uma metodologia de transcrição de um sistema chaveado geral em um PCO equivalente parametrizado pelos eventos, no qual uma lei de mudança entre um sistema e outro é especificada. O problema equivalente tem a propriedade de que os eventos são fixos em relação à nova variável independente do tempo.

Considerando agora o PCO com flutuações de índice decorrente das ativações e desativações de restrições ao longo da trajetória que provocam alterações na forma funcional das equações do problema e admitindo como seqüência de mudanças entre as fases, definidas pelos eventos, a Função Identificadora de Fases baseada na interpretação física do problema, o objetivo desta dissertação é utilizar um algoritmo de parametrização com relação aos eventos desenvolvido por Xu e Antsaklis (2004) para sistemas chaveados, para resolver PCOs algébrico-diferenciais (PCOADs), utilizando métodos de solução apropriados para problemas de índice 1. Desta forma, torna-se possível a determinação dos eventos e a verificação do atendimento das condições de ótimo. Para viabilizar o tratamento destes problemas conforme proposto, foram aperfeiçoadas e integradas ferramentas automáticas de identificação e de redução do índice diferencial, de obtenção das condições de otimalidade e de geração do sistema parametrizado que utilizam a computação algébrica. Além disto, os resultados obtidos pelo procedimento de parametrização são comparados aos obtidos através do método direto implementado no código DIRCOL, utilizando a opção de implementação multifásica do problema.

Esta dissertação possui a estrutura conforme segue. O Capítulo 2 apresenta conceitos fundamentais sobre otimização dinâmica, a abordagem algébrico-diferencial e métodos de solução numérica, divididos em métodos diretos, indiretos, mistos e abordagem híbrida. O Capítulo 3 trata da caracterização de sistemas de EADs, redução

do índice, geração das condições necessárias para o ótimo e a metodologia de solução adotada aplicando a interface criada que une códigos que facilitam o estudo da abordagem algébrico-diferencial em problemas de controle ótimo. O Capítulo 4 apresenta os resultados obtidos pela abordagem adotada para problemas típicos. As conclusões e sugestões para trabalhos futuros são apresentadas no Capítulo 5.

CAPÍTULO 2

Problemas de Controle Ótimo Algébrico-Diferenciais (PCOADs)

2.1 Conceitos gerais

Um Problema de Controle Ótimo (PCO) consiste na determinação dos perfis das variáveis de controle que maximizem ou minimizem uma medida de desempenho. O aumento significativo de sua aplicação na indústria ocorreu na década passada devido a popularidade de ferramentas de simulação dinâmica, associado a mercados competitivos que demandam melhor desempenho da operação do processo sujeito a mais restrições. Algumas aplicações de PCO em diversas áreas são apresentadas a seguir:

- Determinação de condições de operação ótimas para plantas químicas sujeitas a restrições de segurança, de condições operacionais e ambientais (FEEHERY, 1998; MODAK et al., 1986);
 - Obtenção do perfil de temperatura que maximiza a seletividade de um determinado produto;
 - Maximização da quantidade de produto formado sujeito a restrições de pressão etc;

- Determinação da trajetória de robôs mecânicos (STRYK, 2000).

Para reunir conceitos fundamentais necessários para a melhor compreensão desta dissertação, é apresentado a seguir um pequeno glossário de termos e definições.

Sistema de Equações Algébrico-Diferenciais (EADs) - Uma EAD é um sistema de equações que pode ser escrito como

$$\mathbf{f}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.1)$$

Nas EADs existem restrições algébricas na variável de estado $\mathbf{z}$, que podem aparecer explicitamente como em

$$g(\dot{x}, x, y, t) = 0 \quad (2.2)$$

$$h(x, y, t) = 0 \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{z}=(x,y)$, ou podem aparecer implicitamente devido à singularidade de $\frac{df}{dz}$ quando existem linhas não nulas.

Índice Diferencial de EADs - É o número mínimo de vezes que o sistema de EADs ou parte dele deve ser diferenciado em relação a t para se determinar $\dot{\mathbf{z}}$ como uma função contínua de $\mathbf{z}$ (PANTELIDES, 1988).

EADs de Índice Superior e Redução de Índice - EADs de índice superior são as equações com índice maior do que 1. Do ponto de vista da solução numérica é desejável que o índice das EADs seja o menor possível devido à dificuldade associada na solução dessas EADs, que pode ser comparada à solução de EDOs com rigidez numérica. Entretanto, esta redução obtida através da simples diferenciação das restrições pode não satisfazer as restrições originais de maneira exata, com sérias implicações quando elas envolvem propriedades físicas importantes. Portanto, devem ser consideradas formas de reintroduzir restrições perdidas no sistema, chamadas invariantes.

Princípio do Mínimo de Pontryagin (PMP) - É decorrente da imposição de que o *Hamiltoniano* de um sistema contínuo sujeito a restrições de desigualdade nas variáveis de controle deve ser minimizado para qualquer conjunto possível destas variáveis de controle. É aplicável a problemas com variações fortes e restrições de fim e foi estabelecido por Pontryagin em 1962 (BRYSON; HO, 1975).

Sistema Aumentado Correspondente - Conjunto de equações formado pelo sistema original de EADs acoplado às equações decorrentes da aplicação do PMP.

Sistema Estendido Correspondente - Conjunto de equações formado pelo sistema original de EADs acoplado às equações escondidas decorrentes da redução do índice.

Restrições terminais - Condições que os estados iniciais e finais devem satisfazer.

Restrições de trajetória - Condições que devem ser satisfeitas em todos os pontos da trajetória.

Restrições interiores - Condições em pontos particulares ao longo da trajetória.

Arcos Singulares - Arcos onde a matriz de derivadas segundas do *Hamiltoniano* com relação as variáveis de controle é singular. Os problemas de otimização lineares podem apresentar impulsos nas variáveis de controle se elas não forem submetidas a limites. Quando estes limites são impostos, a solução apresentará períodos com a variável de controle nos limites de restrição e arcos singulares. As variáveis de controle freqüentemente apresentam descontinuidades (*cantos*) quando passam do arco restrito para o arco singular ou vice-versa (BRYSON; HO, 1975). Devido a estes arcos singulares, o perfil de controle não tem influência direta sobre as condições de otimalidade do *Hamiltoniano* e portanto a determinação da variável de controle exige condições adicionais que podem ser de difícil manuseio (CUTHREL; BIEGLER, 1989). Os problemas de reatores batelada alimentada, a manipulação de vazões em reatores químicos, colunas de destilação, extratores e trocadores de calor são casos típicos de problemas com controle singular (MODAK et al., 1986).

Eventos - Pontos isolados no tempo onde os comportamentos contínuos e discretos interagem entre si. Nesses pontos podem ocorrer mudanças na forma funcional das EADs e/ou nas trajetórias das variáveis de controle em cada fase (*jumps* e/ou *switches*) decorrentes de descontinuidades nas trajetórias de estado e das variáveis adjuntas. Do ponto de vista algébrico-diferencial, estas mudanças causam a flutuação do Índice Diferencial ao longo das fases.

Com o desenvolvimento da abordagem algébrico-diferencial na simulação de processos químicos, uma nova perspectiva de solução pode ser adotada para os PCOs. Adotando a perspectiva algébrico-diferencial, um Problema de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial (PCOAD) pode ser definido como (LOGSDON; BIEGLER, 1989):

$$\min_{\mathbf{u}(t), t_f} J = \Psi(\mathbf{z}(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} \Phi(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) dt \quad (2.4)$$

sujeito a:

$$\mathbf{g}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.5)$$

$$\mathbf{h}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) \leq 0 \quad (2.6)$$

$$\mathbf{z}^{\text{mín}} \leq \mathbf{z}(t) \leq \mathbf{z}^{\text{máx}} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{u}^{\text{mín}} \leq \mathbf{u}(t) \leq \mathbf{u}^{\text{máx}} \quad (2.8)$$

$$\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{n_z} \quad (2.9)$$

$$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_u} \quad (2.10)$$

$$t \in \mathbb{R}^1 \quad (2.11)$$

$$\Psi : \mathbb{R}^{n_z} \rightarrow \mathbb{R}^1 \quad (2.12)$$

$$\Phi : \mathbb{R}^{n_z+n_u+1} \rightarrow \mathbb{R}^1 \quad (2.13)$$

$$\mathbf{g} : \mathbb{R}^{n_z+n_u+1} \rightarrow \mathbb{R}^{n_g} \quad (2.14)$$

$$\mathbf{h} : \mathbb{R}^{n_z+n_u+1} \rightarrow \mathbb{R}^{n_h} \quad (2.15)$$

onde $\mathbf{z}(\mathbf{t})$ é o vetor das variáveis de estado, $\mathbf{u}(\mathbf{t})$ é o vetor das variáveis de controle, o primeiro termo da função objetivo (J) é a condição de fim e o segundo termo é a integral de um funcional dos vetores de controle e estado, $\mathbf{h}$ é o vetor de restrições de desigualdade e $\mathbf{g}$ é o vetor de restrições de igualdade. Os superscritos mín e máx identificam, respectivamente, os limites inferior e superior das variáveis.

2.2 Condições necessárias de otimalidade para PCOADs

As condições necessárias para o ótimo para problemas nos quais o sistema dinâmico é descrito somente através de equações diferenciais ordinárias são bem estabelecidas na literatura (BRYSON; HO, 1975). Nesta seção, estas condições serão generalizadas para sistemas descritos por EADs, conforme demonstrado por Renfro (1986) e Feehery (1998).

Para o PCO considerado nesta seção, o vetor inicial das variáveis de estado é conhecido (isto é, o vetor inicial não é determinado pela otimização), as trajetórias de controle não estão sujeitas a restrição e as trajetórias de estado são restritas por EADs. Este problema pode ser matematicamente expresso como (LOBATO, 2004; GOMES, 2000):

$$\min_{\mathbf{u}(t), t_f} J = \Psi(\mathbf{z}(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} L(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) dt \quad (2.16)$$

sujeito ao sistema de EADs

$$\mathbf{f}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.17)$$

com condições iniciais dadas por

$$\varphi(\dot{\mathbf{z}}(t_0), \mathbf{z}(t_0), t_0) = 0 \quad (2.18)$$

onde $J(\cdot), L(\cdot), \Psi(\cdot) \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathbf{f}(\cdot), \varphi(\cdot) \rightarrow \mathbb{R}^{m_x}$, $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{m_x}$ e $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{m_u}$.

As variáveis de estado $\mathbf{z}$ nesta formulação incluem as variáveis de estado diferenciais e algébricas.

A função Ψ na Eq.(2.16) pode ser expressa como:

$$\Psi(\mathbf{z}(t_f), t_f) = \Psi(\mathbf{z}(t_0), t_0) + \int_{t_0}^{t_f} \frac{d\Psi}{dt} dt \quad (2.19)$$

Desde que seja admitido que o tempo inicial t_0 e as condições de estado $\mathbf{z}(t_0)$ são fixos, a função objetivo pode ser expressa como

$$J = \int_{t_0}^{t_f} \bar{L}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) dt \quad (2.20)$$

onde:

$$\bar{L}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = \frac{d\Psi}{dt} + L = \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \left[\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right]^T \dot{\mathbf{z}} + L \quad (2.21)$$

Uma função objetivo aumentada é formada adicionando as restrições à função objetivo através do uso das variáveis adjuntas $\lambda(t)$:

$$\bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} [\bar{L}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) + \lambda^T(t) \mathbf{f}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t)] dt \quad (2.22)$$

É conveniente definir o *Hamiltoniano* como:

$$H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) = \bar{L}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) + \lambda^T(t) \mathbf{f}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) \quad (2.23)$$

Para obter as condições necessárias para a otimalidade, é necessário definir a variação do funcional. Para o funcional:

$$\bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) dt \quad (2.24)$$

o incremento do funcional é:

$$\Delta \bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} [H(\dot{\mathbf{z}} + \delta \dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z} + \delta \mathbf{z}, \mathbf{u} + \delta \mathbf{u}, \lambda + \delta \lambda, t) - H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t)] dt + \int_{t_f}^{t_f + \delta t_f} H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) dt \quad (2.25)$$

Expandindo o incremento em Séries de Taylor ao redor do ponto $(\dot{\mathbf{z}}(\mathbf{t}), \mathbf{z}(\mathbf{t}), \mathbf{u}(\mathbf{t}))$ e extraindo os termos que são lineares tem-se a variação de $\bar{J}$:

$$\delta \bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \delta \dot{\mathbf{z}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}} \delta \mathbf{z} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{u} + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right] dt + H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) \delta t_f \quad (2.26)$$

a qual pode ser simplificada integrando o primeiro termo por partes para se obter:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J} = & \int_{t_0}^{t_f} \left[\left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right] \right] \delta \mathbf{z} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{u} + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right] dt + \\ & + \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right]_{t=t_f} \delta \mathbf{z}(t_f) + H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) \delta t_f \end{aligned} \quad (2.27)$$

Usando a relação definida a seguir:

$$\delta \mathbf{z}(t_f) = \delta \mathbf{z}_f - \dot{\mathbf{z}} \delta t_f \quad (2.28)$$

e substituindo a Eq.(2.28) na Eq.(2.27) fornece:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J} = & \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right]_{t=t_f} \delta \mathbf{z}_f + \left[H - \frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \dot{\mathbf{z}} \right]_{t=t_f} \delta t_f + \\ & + \int_{t_0}^{t_f} \left[\left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right] \right] \delta \mathbf{z} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{u} + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right] dt \end{aligned} \quad (2.29)$$

As condições necessárias de primeira ordem para o ótimo podem ser encontradas

fazendo a variação de $\bar{J}$ igual a zero. As condições são:

$$\left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}} \right] - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right] = 0 \quad (2.30)$$

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

$$\frac{\partial H}{\partial \lambda} = 0 \quad (2.32)$$

$$\left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \delta \mathbf{z} \right]_{t=t_f} + \left[H - \frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \dot{\mathbf{z}} \right]_{t=t_f} \delta t_f = 0 \quad (2.33)$$

As condições (2.30-2.33) definem um sistema de EADs de valor no contorno. Estas condições podem ser simplificadas, expandindo os termos que incluem Ψ na Eq.(2.30).

$$\delta \bar{J} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right] - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} \right] \right] = \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{z} \partial t} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{z}^2} \dot{\mathbf{z}} \right] + \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t \partial \mathbf{z}} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{z}^2} \dot{\mathbf{z}} \right] = 0 \quad (2.34)$$

Admitindo que as derivadas parciais de segunda ordem são contínuas, a ordem de diferenciação pode ser mudada e a expressão inteira igualada a zero. Substituindo as Eq.(2.23) e Eq.(2.34) e as Eq.(2.30)-Eq.(2.33) podem ser simplificadas:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{z}} + \lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{z}} - \dot{\lambda}^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} - \lambda^T \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right] = 0 \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} + \lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} = 0 \quad (2.36)$$

$$\mathbf{f}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.37)$$

$$\left[\lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \right]_{t=t_f} \delta \mathbf{z}_f + \left[\frac{\partial \Psi}{\partial t} + L + \lambda^T \mathbf{f} - \lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \dot{\mathbf{z}} \right]_{t=t_f} \delta t_f = 0 \quad (2.38)$$

Estas condições são uma generalização das condições necessárias, também chamadas de equações de Euler-Lagrange, para a otimização dinâmica de sistemas de EADs. A seguir estas equações serão mostradas para casos particulares que envolvem problemas com tempos finais fixos ou livres e problemas com variáveis de estado especificadas no tempo final.

a) Problemas com o Tempo Final Fixo

Se t_f é fixo então δt_f é igual a zero na Eq.(2.38). Se a variável de estado não for

especificada no tempo final, as condições no ponto final têm que satisfazer a:

$$\left[\lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \right]_{t=t_f} \delta \mathbf{z}_f = 0 \quad (2.39)$$

como δz_f é arbitrário, $\delta z_f \neq 0$ e para satisfazer a Eq.(2.38):

$$\left[\lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \right]_{t=t_f} = 0 \quad (2.40)$$

b) Problemas com o Tempo Final Livre

Como t_f é livre, a suposição de que $\delta t_f = 0$ não pode ser feita. Neste caso além das condições dadas pelas equações Eq.(2.35) - Eq.(2.37), para o caso em que se tem as variáveis de estado fixas no tempo final ou variáveis de estado livre, o sistema deverá atender a seguinte condição:

$$\left[\frac{\partial \Psi}{\partial t} + L + \lambda^T \mathbf{f} - \lambda^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \dot{\mathbf{z}} \right]_{t=t_f} = 0 \quad (2.41)$$

c) Algumas variáveis de estado especificadas no tempo final fixo

Seja o problema de otimização definido pelas Eq.(2.16) - Eq.(2.18), com algumas variáveis de estado especificadas em $t = t_f$. Se z_i , o i -ésimo componente do vetor de estado $\mathbf{z}$, é definido em $t = t_f$, então como a variação $\delta z_i(t_f)$ na Eq.(2.38) não pode ser nula, é necessário que a Eq.(2.39) seja satisfeita. A Eq.(2.36), $\partial H / \partial \mathbf{u} = 0$ necessita de uma condição adicional para o problema com restrição final. No presente caso, $\delta u(t)$ não é completamente arbitrário, o conjunto admissível de $\delta u(t)$ é sujeito às restrições:

$$\delta z_i(t_f) = 0 \quad i = 1, \dots, q \quad (2.42)$$

Um conjunto admissível de $\delta u(t)$ pode ser definido como os valores de $\delta u(t)$ que satisfazem todas as restrições do problema, como por exemplo a Eq.(2.42).

Desde que $z_i(t_f)$ especificado para $i = 1, \dots, q$, é consistente considerar que:

$$\varphi = \varphi(z_{q+1}, \dots, z_n)_{t=t_f} \quad (2.43)$$

As Eq.(2.35)-Eq.(2.38) permanecem inalteradas para este caso, apenas a condição

de contorno em $t = t_f$ passa a ser dada por:

$$\lambda_i(t_f) = \begin{cases} 0 & j=1, \dots, q \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial z_j} \right)_{t=t_f} & j=q+1, \dots, n \end{cases} \quad (2.44)$$

d) Sistemas com funções de variáveis de estado especificadas no tempo final fixo

Seja o problema de otimização definido pelas Eq.(2.16) - Eq.(2.18) sujeito a restrição definida pela Eq.(2.45), de dimensão q , função das variáveis de estado e com o valor definido no tempo final.

$$\varphi(z(t_f), t_f) = 0 \quad (2.45)$$

A Eq.(2.45) pode ser adicionada à função objetivo através de multiplicadores de Lagrange ν , um vetor de dimensão q .

$$J = \psi(z(t_f), t_f) + \nu^T \varphi(z(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} L(z, u, t) dt \quad (2.46)$$

Definindo:

$$\Psi = \psi(z(t_f), t_f) + \nu^T \varphi(z(t_f), t_f) \quad (2.47)$$

O conjunto de parâmetros ν devem ser escolhidos para satisfazer a Eq.(2.45). Portanto as condições necessárias são dadas pelas Eq.(2.35-2.38) e por:

$$\lambda^T(t_f) = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} + \nu^T \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)_{t=t_f} \quad (2.48)$$

A Eq.(2.36) determina o vetor $\mathbf{u}(t)$, as Eq.(2.35) - Eq.(2.40) formam um sistema de EADs de valor no contorno com q parâmetros ν para serem determinados na Eq.(2.48) tal que a Eq.(2.45) seja satisfeita.

e) Problemas com Restrição de Trajetória

Nesta seção são considerados os problemas de otimização com restrições de traje-

tória, que se aplicam a pontos intermediários ou sobre toda a trajetória.

i) Restrições de Igualdade na Variável de Controle

O problema é definido como:

$$\min_{\mathbf{u}(t), t_f} J = \Psi(\mathbf{z}(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} L(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) dt \quad (2.49)$$

$$\varphi(\mathbf{z}(t_f), t_f) = 0 \quad (2.50)$$

$$f(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.51)$$

$$C(\mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.52)$$

onde $C(\mathbf{u}, t)$ é o vetor de restrições de igualdade na variável de controle. Neste caso $\mathbf{u}(t)$ é um vetor de variáveis de controle de dimensão $m \geq 2$ e C é uma função escalar. O *Hamiltoniano* (Eq.(2.23)) será redefinido como:

$$H(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \lambda, t) = \bar{L}(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) + \lambda^T(t) f(\dot{\mathbf{z}}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, t) + \mu C \quad (2.53)$$

As condições necessárias Eq.(2.35, 2.37 e 2.38) permanecem inalteradas, sendo que Eq.(2.36) será redefinida como:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}} + \mu \frac{\partial C}{\partial \mathbf{u}} = 0 \quad (2.54)$$

O sistema formado pelas condições necessárias e pela Eq.(2.52) representa as $m+1$ condições para determinar o m -ésimo componente do vetor de controle $\mathbf{u}(t)$ e a função escalar $\mu(t)$.

ii) Restrições de igualdade nas variáveis de controle e estado

Neste caso a Eq.(2.52) será substituída por:

$$C(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.55)$$

Aqui as condições obtidas para a seção anterior podem ser aplicadas, só que um novo termo será acrescentado a Eq.(2.35), sendo reescrita como:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{z}} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{z}} + \mu^T \frac{\partial C}{\partial \mathbf{z}} - \dot{\lambda}^T \frac{\partial f}{\partial \dot{\mathbf{z}}} - \lambda^T \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial f}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right] = 0 \quad (2.56)$$

iii) Restrições de Igualdade na Variável de Estado

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

$$S(\mathbf{z}, t) = 0 \quad (2.57)$$

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

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial \mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{z}} f(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.58)$$

A Eq.(2.58) pode ou não revelar a dependência da variável de controle $\mathbf{u}$. Se a Eq.(2.58) revelar a dependência de $\mathbf{u}$, então pode ser tratada como uma restrição do tipo da Eq.(2.55). Para isto, deve-se eliminar um componente de $\mathbf{z}$ como função dos $n-1$ componentes remanescentes usando a Eq.(2.57) como uma condição de contorno em $t = t_0$ ou $t = t_f$. Se a Eq.(2.58) não revelar a variável de controle explicitamente, deve-se repetir o processo de diferenciar a equação até que a variável de controle $\mathbf{u}$ seja revelada explicitamente. Surge então o conceito de ordem da restrição de igualdade na variável de controle, que é definida como o número de vezes que a restrição deve ser diferenciada para que se obtenha a dependência da variável de controle $\mathbf{u}$. A q -ésima derivada temporal da restrição da Eq.(2.57), é representada por:

$$S^q(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad \text{onde} \quad S^q(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) = \frac{d^q S}{dt^q} \quad (2.59)$$

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

$$\begin{bmatrix} S(z, t) \\ S^1(z, t) \\ \vdots \\ S^{q-1}(z, t) \end{bmatrix} = 0 \quad (2.60)$$

ou adicionando a Eq.(2.60) como um conjunto de condições de contorno em $t = t_0$ ou $t = t_f$.

A existência de restrições de igualdade nas variáveis de estado num PCOAD pode aumentar o índice diferencial. É interessante observar que uma restrição de igualdade

pode surgir quando um PCO formado por Equações Diferenciais Implícitas do tipo:

$$F(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, p, t) = 0 \quad (2.61)$$

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

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v} \quad (2.62)$$

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{u}, p, v, t) = 0 \quad (2.63)$$

torna-se um sistema de EADs onde a equação Eq.(2.63) passa a ser a nova restrição algébrica.

iv) Restrições de desigualdade na variável de controle

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

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

Se o *Hamiltoniano* for definido por: $H^0 = \lambda f + L$ (Eq.(2.2)), considerando que $\delta z_i = 0$, $\partial H / \partial \lambda = 0$ e para simplificações em que os coeficientes de $\delta \mathbf{z}$ são iguais a zero, pode ser reescrita como:

$$\delta J = \int_{t_0}^{t_f} H_u^0 \delta u dt \triangleq \int_{t_0}^{t_f} H_u^0(z, \lambda, u, t) dt \quad (2.65)$$

As condições necessárias para este problema são as Eq.(2.35) - Eq.(2.38). Para $\mathbf{u}(t)$ ser minimizado, $\delta J \geq 0$ para todo o conjunto admissível de $\mathbf{u}(t)$. Isto implica que $\delta H^0 \geq 0$ para todo t e todo conjunto admissível $\mathbf{u}(t)$. Os pontos onde ocorrem os valores ótimos de $\mathbf{u}(t)$ tem a seguinte propriedade:

$$\begin{aligned} \delta H^0 &= H_u^0 \delta u \geq 0 \\ \delta C &= C_u \delta \mathbf{u} \leq 0 \end{aligned} \quad (2.66)$$

v) Se o Hamiltoniano for definido por:

$$H = \lambda^T f + L + \mu^T C \quad (2.67)$$

Aqui as condições necessárias são dadas pelas equações Eq.(2.35) - Eq.(2.38), com uma condição adicional:

$$\mu = \begin{cases} \geq 0 & \text{se } C = 0 \\ = 0 & \text{se } C < 0 \end{cases} \quad (2.68)$$

A exigência do multiplicador ser positivo quando $C = 0$, pode ser interpretada como uma condição para que o gradiente $H_u \equiv \lambda^T f_u + L_u$ seja obtido somente violando as restrições.

Quando a restrição de desigualdade torna-se ativa em algumas porções da trajetória, o problema de otimização apresenta arcos com restrição e sem restrição. Nos pontos de junção, entre os arcos restritos e não restritos, a variável de controle, pode ou não ser contínua. Se $\mathbf{u}(t)$ for descontínuo, o ponto é chamado de canto (*corner*). Os *Corners* podem ocorrer em qualquer ponto da trajetória, mas não são mais prováveis de ocorrer nos pontos de junção que no meio do arco sem restrição. *A priori* não existe método para determinar a existência dos cantos. Se $\mathbf{u}(t)$ for contínuo nos pontos de junção, seguido da continuidade de λ , $\partial H / \partial u$, H então $\mu(t)$ também é contínuo.

vi) Restrições de Desigualdade nas Variáveis de Controle e de Estado

Neste caso a restrição de desigualdade é dada por:

$$C(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t) \leq 0 \quad (2.69)$$

O problema é manuseado da mesma forma que o problema de funções de variáveis de estado especificadas no tempo final fixo. O *Hamiltoniano* é definido como Eq.(2.67):

$$H = \lambda^T f + L + \mu^T C \quad (2.70)$$

Aqui

$$\mu = \begin{cases} > 0 & \text{se } C = 0 \\ = 0 & \text{se } C < 0 \end{cases} \quad (2.71)$$

e as equações de *Euler-Lagrange* são assim definidas:

$$\dot{\lambda}^T = -\frac{\partial H}{\partial z} \begin{cases} -L_z - \lambda^T f_z - \mu C_z & \text{se } C = 0 \\ -L_z - \lambda^T f_z & \text{se } C < 0 \end{cases} \quad (2.72)$$

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

$$H_u \equiv L_u + \lambda^T f_u + \mu C_u \quad (2.73)$$

Quando $C < 0$, $\mu = 0$ a Eq.(2.74) determina $\mathbf{u}(t)$. Para $C = 0$, a Eq.(2.71) e Eq.(2.73) determinam $\mathbf{u}(t)$ e $\mu(t)$ simultaneamente.

vii) Restrições de Desigualdade nas Variáveis de Estado

Seja a restrição de desigualdade dada por:

$$S(z, t) \leq 0 \quad (2.74)$$

Considere que S e u são escalares. A derivada temporal da Eq.(2.74) e a substituição de $\dot{\mathbf{z}}$ devem ser realizadas até que seja revelada a dependência explícita de u . Se forem necessárias q derivadas temporais, a Eq.(2.74) é denominada restrição de desigualdade na variável de estado de q -ésima ordem. Aqui $S^q(\mathbf{z}, \mathbf{u}, t)$ representa a q -ésima derivada temporal total de S . O *Hamiltoniano* é definido como:

$$H = L + \lambda^T f + \mu S^q \quad (2.75)$$

onde a restrição está ativa se:

$$S^q = 0 \Rightarrow S = 0 \quad (2.76)$$

A restrição não está ativa se:

$$\mu = 0 \Rightarrow S < 0 \quad (2.77)$$

As condições necessárias são dadas pelas equações Eq.(2.35) - Eq.(2.38), substituindo C por S^q . A condição necessária para $\mu(t)$ se a restrição está ativa é

$$\mu(t) \geq 0 \Rightarrow S = 0 \quad (2.78)$$

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

$$N(\mathbf{z}, t) \triangleq \begin{bmatrix} S(\mathbf{z}, t) \\ S^1(\mathbf{z}, t) \\ \vdots \\ S^{q-1}(\mathbf{z}, t) \end{bmatrix} = 0 \quad (2.79)$$

Pode-se escolher o ponto de entrada em vez do ponto de saída para satisfazer estas restrições interiores. Então os λ e o H serão descontínuos no ponto de entrada $t = t_1$ e contínuos no ponto de saída. O vetor $N(\mathbf{z}, t)$ (Eq.(2.79)) representa as condições de salto. Bryson e Ho (1975), através de manipulações semelhantes, mostraram que as condições de salto no ponto de entrada podem ser obtidas por:

$$\lambda^T(t_1^-) = \lambda^T(t_1^+) + \pi^T \frac{\partial N}{\partial \mathbf{z}(t_1)} \quad (2.80)$$

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

onde t_1^- significa o tempo anterior a t_1 e t_1^+ o tempo logo após o t_1 , π é um vetor de multiplicadores de *Lagrange* de dimensão q usados para adicionar as condições de junção Eq.(2.81) à função objetivo, que são determinados de tal forma que atendam a estas condições.

A solução de PCOs com Restrições de Desigualdade apresenta desafios especiais, porque exige o conhecimento da seqüência e do número de ativações e desativações ao longo da trajetória. Quando a quantidade de restrições é reduzida, geralmente é possível determinar esta seqüência examinando a solução do problema sem restrições. Entretanto, a presença de um número maior de restrições torna o problema de natureza combinatória (FEEHERY, 1998).

Uma fonte de flutuação do índice ocorre quando a variável de controle não pode ser explicitada em termos das variáveis de estado e das variáveis adjuntas a partir da condição estacionária, provocando arcos singulares durante a solução (LOGSDON; BIEGLER, 1989). É importante ressaltar que, se o número de restrições de desigualdade for maior que o número de variáveis de controle, resulta em EADs de índice superior independente da restrição de desigualdade estar ativa ou não (FEEHERY, 1998).

2.3 Métodos de Redução do Índice Diferencial

A redução do índice diferencial é necessária para a solução numérica de EADs gerais de índice superior. Segundo Gear e Petzold (1984) apenas os sistemas de índice menor ou igual a 1 e as EADs lineares com coeficiente constantes de índice qualquer podem ser resolvidos por métodos para EDOs. Para as EADs lineares em geral e EADs não lineares de índice superior não existem métodos numéricos que as resolvam incondicionalmente. Isto ocorre porque o conjunto de soluções das EDOs subordinadas obtidas pela redução é maior do que o conjunto de soluções das EADs originais. Como as equações algébricas das EADs se tornam apenas implícitas nas EDOs subordinadas, a solução numérica freqüentemente causa flutuações nestas restrições algébricas (que não se preservam com a discretização exceto se são lineares), e levam a instabilidades. Por isto, vários algoritmos de redução do índice usam as chamadas técnicas de estabilização de restrições.

De modo geral, os algoritmos de redução podem ter ou não etapas de diferenciação, e fornecerem ou não sistemas de maior dimensão. Os algoritmos de Gear e Petzold (1984), Gear (1988) e Bachmann et al. (1990) utilizam a diferenciação das restrições algébricas com relação ao tempo e a linearidade das novas equações introduzidas pela diferenciação com relação às derivadas de ordem superior, para eliminar os termos onde estas derivadas de ordem superior aparecem. Assim, são obtidas novas equações que são funções das variáveis de estado e das variáveis algébricas. As novas equações algébricas obtidas durante a redução são incorporadas ao sistema nos algoritmos de Gear (1988) e Bachmann et al. (1990).

Faz-se necessária uma análise prévia do problema original que inclua a determinação do índice diferencial e a consistência da inicialização. Para isso, dois algoritmos de redução do índice que utilizam propriedades estruturais para caracterizar EADs são brevemente apresentados na seqüência.

2.3.1 O Código ALGO (UNGER et al., 1995)

O Código ALGO é uma ferramenta estrutural, implementada na linguagem FORTRAN, e é baseada na representação estrutural do algoritmo de Gear (GEAR, 1988) proposto para a redução do índice diferencial. Este algoritmo aplica-se a EADs gerais $\mathbf{F}(\mathbf{z}(t), \mathbf{z}'(t), t) = 0$ de dimensão n tendo como critério de resolubilidade o $\det(\lambda(\mathbf{F}_{z'}) + \mathbf{F}_z)$ ser não identicamente nulo para todo λ . O índice diferencial do sistema é igual ao número de iterações deste algoritmo para transformar as EADs num sistema de EDOs.

O ALGO é composto pelas seguintes subrotinas:

INPUT Lê a dimensão das EADs. Lê os padrões das matrizes de derivadas $pad(F_{z'})$

e de algébricas $pad(F_z)$. Estes dados podem ser fornecidos pelo usuário por entrada manual, via arquivo e pode ser gravado em um arquivo especificado pelo usuário.

SOLVAB Determina o posto estrutural do $pad(F_{z'}) + pad(F_z)$ utilizando RANKDET e MC21A. A sub-rotina MC21A coloca o máximo número de elementos não nulos na diagonal principal e retorna à RANKDET que determina a soma destes elementos. Se esta soma for igual a dimensão do sistema, a matriz estrutural será não singular e o sistema poderá ser resolvido.

PARTITION Executa a partição do sistema.

INVERSION Realiza a Eliminação Gaussiana Estrutural.

SUBK1X1 Executa a substituição.

IND2CAUS Nomeia as variáveis e as equações que poderiam ser a causa do índice superior.

ALLONIN Cria um relatório para EADs de índice maior que um.

SUBK1CDG Executa a substituição.

DIFFSUBX Faz a diferenciação parcial conforme a especificação da linearidade fornecida pelo usuário.

FAIC Determina se um conjunto de variáveis especificadas para ter seus valores iniciais arbitrariamente escolhidos permite a inicialização consistente do sistema. Utiliza as subrotinas FEASRANK e MC21A.

2.3.2 O Código PALGO (UNGER et al., 1995)

A ferramenta estrutural PALGO é baseada no algoritmo estrutural de Pantelides (1988). Segundo Pantelides, um sistema semi-explícito geral não apresenta problemas de inicialização consistente se a matriz Jacobiana do sistema de equações for não singular. As restrições adicionais ao sistema de equações seguem o princípio de que um sub-conjunto de equações deve ser diferenciado se e somente se o grupo de linhas da matriz correspondentes a estas equações forem linearmente dependentes e se existirem linhas linearmente independentes dentro de sub-conjuntos deste grupo. Para o estudo do algoritmo algumas definições são importantes:

- Nós: São as formas de representação das variáveis e equações no gráfico "bipartite".
- E-nós: Conjunto de nós referentes às EADs.

- V-nós: Conjunto de nós referentes às variáveis x' , y .
- Nó exposto: Nó que não aparece em nenhuma linha combinada.
- Associação: Conjunto de linhas (i-j), chamadas linhas combinadas, cujos nós i e j aparecem em apenas uma das linhas.
- Associação completa: Associação que não deixa nenhum E-nós exposto.
- Associação parcial: Associação que deixa E-nós expostos.
- Caminho estendido: Caminho com nós expostos nas duas extremidades.
- Sub-conjunto estrutural e minimamente singular (ems): Subconjunto de equações singular que não tem nenhum de seus próprios subconjuntos estruturalmente singular.

O algoritmo de Pantelides detecta o número mínimo de equações que devem ser diferenciadas para que se obtenha resolução estruturalmente consistente do sistema. Para tanto, este algoritmo utiliza algumas das seguintes listas de associação:

- **A(.)** - expressa a relação entre as variáveis e suas derivadas. $A[1] = 5$ indica que a quinta variável é a derivada da primeira.
- **B(.)** - relaciona as equações criadas por diferenciação com as suas criadoras. $B[5] = 6$ indica que a sexta equação foi criada pela diferenciação da quinta equação.
- **ASSIGN(.)** - contém a equação a qual cada variável está associada. $ASSIGN(5) = 1$ indica que a variável 5 está ligada pelas linhas do grafo à primeira equação.

As linhas do grafo proposto por Pantelides representam a existência das variáveis em cada uma das equações. Os números apresentados em E-nós e V-nós representam a posição dos vetores de equações e variáveis, respectivamente (Fig. 2.1).

Exemplo: Pêndulo de Pantelides.

$$F_1 = x'_1 - x_3 = 0$$

$$F_2 = x'_2 - x_4 = 0$$

$$F_3 = x'_3 - x_1 x_5 = 0$$

$$F_4 = x'_4 - x_2 x_5 + G = 0$$

$$F_5 = x_1^2 + x_2^2 - L^2 = 0$$

onde os termos L e G são constantes no tempo.

$$\text{Equações} = [F_1, F_2, F_3, F_4, F_5]$$

$$\text{Variáveis} = [x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x'_1, x'_2, x'_3, x'_4]$$

O PALGO é composto pelas seguintes subrotinas:

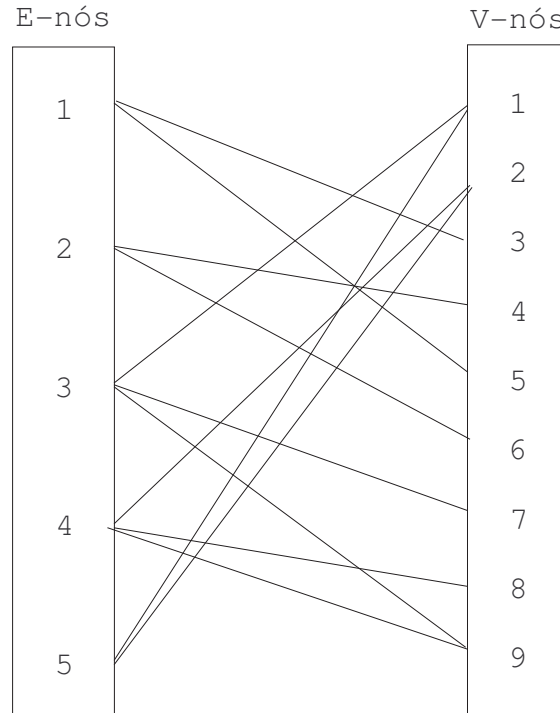


Figura 2.1: Grafos do código PALGO para o problema do pêndulo.

NEWMO - Examina as equações e estabelece os eixos entre os respectivos nós; os eixos são criados somente com as variáveis de maior derivada; desta forma esta subrotina consegue eliminar os $\mathbf{A}(\cdot)=0$ do algoritmo de Pantelides.

AUGMP - Através de uma modificação da subrotina MC21A, chamada AUGAD que retorna o PATHFOUND como falso ou verdadeiro, determina qual das equações devem ser diferenciadas. A AUGAD é responsável por criar as associações entre variáveis e equações (**ASSIGN(.)**) e indicar (colorir), através destas associações, quais são as variáveis e equações que devem ser diferenciadas. Usando o mesmo critério de MC21A para o cálculo do posto estrutural, a AUGAD determina as permutações necessárias para que o PATHFOUND seja verdadeiro.

DICOLSUB - Se o PATHFOUND retornado por AUGMP é falso, então existe um nó exposto indicando que existe uma equação a ser diferenciada. Esta subrotina insere a equação resultante da diferenciação estrutural do grafo e retorna o sistema alterado à AUGMP. Isto é feito até que o sistema não tenha nenhum nó exposto, ou seja, até que PATHFOUND seja verdadeiro.

As subrotinas INPUT e SOLVAB, descritas para ALGO com base no algoritmo de Gear, também são utilizadas pelo PALGO.

2.4 Consistência de inicialização

As condições iniciais de um sistema de EADs na sua forma geral:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \mathbf{y}, t) = 0 \quad (2.82)$$

são definidas pelo vetor $(\mathbf{x}_0, \dot{\mathbf{x}}_0, \mathbf{y}_0)$ em t_0 , e não por $(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0)$.

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

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_0, \dot{\mathbf{x}}_0, \mathbf{y}_0, t_0) = 0 \quad (2.83)$$

Por exemplo, é necessário que as condições iniciais $(x_{1_0}, x_{2_0}, \dot{x}_{1_0}, \dot{x}_{2_0})$ satisfaçam as seguintes EADs de índice 1 (PANTELIDES, 1988):

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 + \dot{x}_2 &= a(t) \\ x_1 + x_2^2 &= b(t) \end{aligned} \quad (2.84)$$

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

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

$$\dot{x}_1 + 2x_2\dot{x}_2 = \dot{b}(t) \quad (2.85)$$

Portanto, mesmo os sistemas de índice 1, podem apresentar problemas de inicialização, que são inerentes a todos os sistemas de índice superior. Em outras palavras, enquanto a inicialização da maioria dos sistemas de índice 1 é similar à das EDOs, todos os sistemas de índice superior e alguns sistemas de índice 1 apresentam dificuldades, como as mostradas. Além disto, é preciso localizar e evitar as diferenciações de equações que não trazem informações adicionais. O que se busca, portanto, são formas de extrair dos sistemas informações fundamentais que estão nele contidas, mas que não são aparentes. Os atuais códigos numéricos de solução de EADs freqüentemente falham ou se tornam extremamente ineficientes se os valores iniciais são inconsistentes.

2.5 Função Identificadora de Fases (FIF)

Funções Identificadoras de Fases (*Switching Functions*) são funções que indicam quando uma restrição que está ativa, torna-se inativa e vice-versa.

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

Seja o seguinte sistema de equações

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) + \mathbf{g}(\mathbf{x})u \quad (2.86)$$

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_o \quad (2.87)$$

com variável de controle escalar dado por

$$u_{min} \leq u \leq u_{max} \quad (2.88)$$

A função *Hamiltoniano* é definida como

$$H = \lambda^T (F(\mathbf{x}) + g(x)u) \quad (2.89)$$

Para essa classe de controle tem-se

$$u(t) = \begin{cases} u_{máx} & \text{se } \lambda^T g < 0 \\ \text{Função Identificadora de Fase} & \text{se } \lambda^T g = 0 \\ u_{mín} & \text{se } \lambda^T g > 0 \end{cases} \quad (2.90)$$

Seywald et al. (1994) obtiveram trajetórias ótimas de um foguete em um plano vertical aplicando o PMP. Para obtenção destes resultados eles formularam FIFs associadas a doze possíveis lógicas de controle baseadas na ativação/desativação de restrições e nos sinais das variáveis adjuntas e que necessariamente tivessem significado do ponto de vista da engenharia e não somente significado matemático.

Santos et al. (2005) analisaram a FIF para um PCO da fermentação alcoólica em reator batelada alimentada para maximização do produto com restrições na produtividade, na variável de controle e no volume do fermentador e operação com tempo livre e que apresenta arcos singulares. A estratégia de controle é definida em 5 fases, sendo 2 com controle singular e 3 com controle *bang-bang*, baseada em aspectos físicos

do problema. O índice diferencial flutua entre 1 e 3 ao longo destas fases e o PCO é resolvido por fase como um sistema de EDOs de valor inicial.

2.6 Métodos Numéricos de solução de PCOADs

2.6.1 Métodos Diretos

Com o desenvolvimento dos algoritmos para a solução dos problemas de Programação Não Linear (NLP) (BIEGLER, 1984; RENFRO et al., 1987; CERVANTES; BIEGLER, 1998; BIEGLER et al., 2002), a abordagem direta para a solução dos PCOs é a mais utilizada atualmente e a que tem recebido maior atenção dos pesquisadores. Estes métodos transformam o PCO num NLP através de parametrização das variáveis de controle e/ou de estado. Eles são divididos em seqüencial e simultâneo. A estratégia seqüencial consiste na parametrização da variável de controle. Neste caso as condições iniciais e o conjunto de parâmetros de controle são conhecidos e o sistema de EADs é discretizado utilizando-se uma aproximação polinomial e em seguida é resolvido por um NLP. Esse procedimento determina o valor da função objetivo e das restrições encontrando valores ótimos de coeficientes na parametrização do controle. A estratégia simultânea consiste na parametrização tanto da variável de controle quanto da variável de estado. Como resultado dessa parametrização as EADs são resolvidas somente uma vez, no ponto ótimo, o que evita soluções intermediárias que não existem ou esforço computacional excessivo.

Na literatura podem ser encontradas várias formas de discretização baseadas em aproximações por colocação ortogonal (OH; LUUS, 1977; BIEGLER, 1984), por expansões em séries (ÇELIK et al., 2003) e por colocação ortogonal em elementos finitos (RENFRO, 1986; RENFRO et al., 1987; CUTHREL; BIEGLER, 1987b, 1987a; LOGSDON; BIEGLER, 1989, 1992). Em particular, no uso de aproximações em elementos finitos, o tamanho e número de elementos pode ser determinado automaticamente, permitindo um melhor controle do erro de discretização (LOGSDON; BIEGLER, 1989; VASANTHARAJAN; BIEGLER, 1990). As técnicas de discretização têm natureza *local* (métodos das diferenças finitas e volumes finitos) ou *global* (colocação ortogonal padrão e em elementos finitos). As técnicas de natureza local usualmente requerem um grande número de pontos de discretização para que a solução final obtida aproxime bem a solução real procurada. Isto, em geral, significa que sistemas de dezenas ou centenas de equações têm que ser resolvidos simultaneamente. O processo de geração das equações, no entanto, é simples e pode ser automatizado com certa facilidade. Por sua vez, as técnicas de natureza global podem permitir considerável redução do tamanho da malha de discretização, embora o processo de geração das equações discretizadas seja significativamente mais complexo do que o caso anterior. Os Métodos Diretos podem fornecer soluções sub-ótimas e resultados menos precisos quando comparados

aos Métodos Indiretos. Possui como vantagem a solução rápida e como desvantagem a dificuldade na determinação da otimalidade.

Um código que resolve PCO através da abordagem do método direto é o código DIRCOL, que é um conjunto de subrotinas desenvolvido por Stryk (1999) e implementado utilizando o FORTRAN com o objetivo de resolver PCO descrito por equações diferenciais de primeira ordem sujeito a restrições de igualdade e/ou desigualdade nas variáveis de controle e/ou variáveis de estado. A DIRCOL utiliza um método de colocação direto que discretiza as variáveis de estado e de controle por aproximações polinomiais por partes transformando o PCO num NLP, que é resolvido através de Programação Quadrática Seqüencial densa (SQP) pelo código NPSOL ou pelo código SNOPT apropriado para sistemas esparsos (GILL et al., 1997, 1986). O código informa estimativas das variáveis adjuntas e dos eventos, resolve problemas com multi-fases, através do particionamento do sistema com estimativa dos eventos em cada fase e possui estratégia de refinamento da malha.

Cuthrel e Biegler (1987b) resolveram PCOs sujeito a restrições de desigualdade nos perfis de estado e de controle e com dependência linear no controle, que causa arcos singulares ou perfis liga-desliga. Nestes arcos, o perfil de controle não influencia diretamente as condições de otimalidade do *Hamiltoniano* e a determinação do controle requer condições adicionais, que podem ser de difícil manuseio. Os autores incorporaram as equações algébricas com coeficientes desconhecidos, referentes aos resíduos oriundos da aplicação da colocação ortogonal em elementos finitos utilizando os polinômios de Lagrange como base, como restrições de igualdade ao NLP e os coeficientes como variáveis de decisão. Foram utilizadas estratégias de minimização do erro de aproximação além dos chamados superelementos, que são um nível extra de elementos utilizados na alocação adaptativa dos elementos.

Feehery e Barton (1998) utilizaram a parametrização no controle em PCOs sujeitos a restrições nas variáveis de estado. Os autores mostram que as EADs se tornam de índice superior durante as partes restritas pelas variáveis de estado (flutuação de índice durante a trajetória) e estabelecem a equivalência entre o PCO com restrição de desigualdade e um problema de otimização híbrido (discreto/contínuo) que contém o fenômeno de mudança de fase. O algoritmo desenvolvido detecta a ativação e a desativação das restrições durante a solução do Problema de Valor Inicial (PVI) e resolve as EADs de índice superior resultante e as equações de sensibilidade usando o método das Derivadas Mudadas.

2.6.2 Métodos Indiretos

Os métodos indiretos surgiram com o desenvolvimento do Cálculo Variacional, permitindo a dedução das condições necessárias e suficientes para a solução de problemas de otimização dinâmica (BRYSON; HO, 1975). Os trabalhos de Bryson e Ho (1975), Lynn et al. (1970), Lynn e Zahradnik (1987), aplicaram o princípio de Pontryagin com a ge-

ração das equações diferenciais adjuntas e a condição necessária para a minimização da função *Hamiltoniano*, transformando o problema original em um problema de valor no contorno em dois pontos (TPBV). Estes TPBV podem ser resolvidos por métodos de discretização como colocação em elementos finitos e diferenças finitas, “*chute*” simples e múltiplo.

Atualmente, os métodos indiretos podem ser utilizados de modo eficiente devido ao desenvolvimento dos programas de álgebra computacional, que permite a obtenção automática das equações diferenciais adjuntas e demais condições de otimalidade. Desta forma, podem ser obtidas soluções altamente precisas e testes feitos *a posteriori* podem excluir as soluções subótimas (CHUDEJ; GÜNTHER, 1999).

As condições necessárias para o ótimo para problemas nos quais o sistema dinâmico é descrito somente através de equações diferenciais ordinárias são bem estabelecidas na literatura (BRYSON; HO, 1975). As condições generalizadas para sistemas descritos por EADs, conforme demonstrado por Renfro (1986) e Feehery (1998) foram apresentadas na Seção 2.2. Os Métodos Indiretos têm uma faixa de convergência restrita e apresentam dificuldades de convergência, apesar de garantir o atendimento às restrições do problema. Um código que aborda o Método Indireto é o COLDAE (ASCHER; SPITERI, 1994) que é aplicado a EADs de valor no contorno não lineares semi-explícitas de índice no máximo dois e totalmente implícitos de índice um. A COLDAE é uma subrotina geral para a solução de EDOs de valor no contorno. O método implementado é a colocação polinomial por partes em pontos gaussianos, acoplado a um método de projeção de Ascher-Petzold.

Lynn et al. (1970) e Lynn e Zahradnik (1987) aplicaram o PMP com a geração das equações adjuntas e da condição necessária para a minimização da função *Hamiltoniano*. No primeiro trabalho, o problema de valor no contorno puramente diferencial, resultante da otimização da conversão de reações consecutivas em um reator tubular com dispersão axial, foi resolvido por um método de resíduos ponderados. Esta técnica, batizada como aproximação da trajetória para controle quase ótimo, foi estendida para sistemas distribuídos representados por equações diferenciais parciais hiperbólicas de primeira ordem no segundo trabalho.

San e Stephanopoulos (1984) estudaram a cinética de crescimento da biomassa e a estratégia de alimentação para a otimização da biomassa final produzida em um reator batelada. Para esse caso particular a ativação dos arcos singulares foi detectada, determinando assim as condições ao longo e na trajetória final do arco singular. Os mesmos autores San e Stephanopoulos (1989) mostraram que a escolha da variável de controle é de fundamental importância para garantir a otimalidade e a viabilidade da implementação. Eles encontraram soluções sub-ótimas para a operação do reator com taxa de alimentação e concentração de substrato fixa como uma variável de controle devido à inabilidade do controlador manter baixa concentração de substrato no fim da fase de produção. Por outro lado, o uso da concentração de substrato como uma variável de controle pela manipulação da concentração mostrou ser uma alternativa efetiva. Eles propuseram uma solução em dois passos, que determina primeiro a con-

centração ótima de substrato no fermentador e depois calcula o perfil de concentração de substrato na alimentação que resulta no perfil ótimo do fermentador.

Modak et al. (1986) apresentaram a formulação do problema de otimização do processo de fermentação batelada alimentada e a obtenção e aplicação das condições de ótimo, considerando que o controle singular é factível conforme as características das funções taxas específicas de crescimento celular e de formação de produto. Foram consideradas três combinações diferentes de taxas representadas por funções não monotônicas que exibem máximos. No tipo mais comum, o crescimento celular não sofre inibição ou repressão e tem o comportamento expresso pela Equação de Monod enquanto a formação de produto sofre inibição. Em todos os casos, considerou-se que a vazão da corrente alimentada pode alcançar o seu valor máximo, mínimo ou singular de modo a permitir inicialmente o crescimento celular e na sequência fazer com que as células produzam o produto desejado de forma ótima. Além da dependência das funções das taxas, as seqüências ótimas são influenciadas pelas condições iniciais associadas. Uma vez identificadas as seqüências, o problema de otimização é reduzido a um problema de determinações dos eventos, do tempo final e da taxa de alimentação singular.

Gomes (2000) estudou a abordagem algébrico-diferencial na solução de PCOs através do método indireto, utilizando o código COLDAE, e propôs um código que gera as equações necessárias para o ótimo a partir da aplicação o Princípio do Mínimo de Pontryagin. Este código é chamado OTIMA que será abordado no Capítulo 3.

2.6.3 Métodos Mistos ou Híbridos

Os Métodos Mistos ou Híbridos são uma combinação de métodos diretos e métodos indiretos. Nesse método, os Métodos Diretos são aplicados a problemas mais simplificados e os resultados servem de estimativas para os Métodos Indiretos, com refinamento da solução.

Stryk e Schlemmer (1994) resolveram um problema de minimização de energia e tempo de um robô industrial utilizando uma combinação entre o método direto e o indireto. O método direto é aplicado com estimativas iniciais sub-ótimas da solução $\mathbf{x}(t)$, $\mathbf{u}(t)$. A solução sub-ótima fornece estimativas confiáveis das variáveis de estado e variáveis adjuntas e da função identificadora de fases das restrições no estado e no controle. Com essas estimativas, o método dos chutes múltiplos é aplicado para um problema de valor no contorno em múltiplos pontos resultante das condições necessárias para a otimalidade.

Chudej e Günther (1999) desenvolveram uma abordagem baseada no espaço de estados, que transforma o PCO com restrições no estado num PCO com restrições no controle, aplicando-a na solução de um problema de otimização da trajetória de um avião supersônico num plano vertical sujeito a restrições, que possui quatro variáveis de

estado e 2 variáveis de controle. Desta forma, o sistema de EADs de valor no contorno de índice superior é transformado num sistema de EDOs de valor no contorno com atendimento automático das restrições no estado através da eliminação de um dos componentes do vetor estado no arco do contorno através da utilização da restrição no estado, levando a uma manipulação analítica considerável das equações. A partir de uma FIF pré-definida, os autores formulam um PCO substituto sujeito a condições definidas em pontos interiores e nos contornos, para cada uma das fases identificadas pelo sinal da restrição de estado. O PCO substituto é resolvido através de um método híbrido onde estimativas iniciais dos estados e das variáveis adjuntas obtidas através do código DIRCOL são utilizadas no algoritmo de chute múltiplo Mumus.

Oberle e Sothmann (1999) resolveram um PCO de tempo final livre, relativo a um processo de fermentação batelada alimentada que representa a biossíntese de penicilina, utilizando parametrização na variável de controle e solução do NLP por um método SQP padrão, no qual admite-se a continuidade do controle. Aplicando a teoria de controle ótimo e resolvendo o PVC resultante associado à função identificadora de fase (*switching function*) por técnicas de chute múltiplo associadas a relaxação dos parâmetros característicos das equações de taxa e métodos de continuação, os autores verificaram que o problema resolvido pelo método indireto satisfaz a todas as condições necessárias de primeira e segunda ordens estabelecidas pela teoria, apresentando uma solução similar à obtida pela abordagem direta mas com pequenos sub-arcos *bang-bang* no controle.

Lobato (2004) resolveu PCOs inicialmente pelo DIRCOL, buscando a melhor solução possível fornecida pelo código, que fornece também a estimativa dos Eventos e do perfil das variáveis adjuntas. Com a estimativa dos Eventos e análise dos resultados obtidos, são construídas as Funções Identificadoras de Fases. Os Sistemas Aumentados obtidos simbolicamente, relativos a cada fase e aos quais foi aplicado o Método da Variável de Folga, no caso da presença de restrições de desigualdade, são então caracterizados pelos códigos estruturais e as reduções de índices por eles indicadas são executadas simbolicamente. Os problemas de valor no contorno de índice 1, referentes a cada fase, são resolvidos sequencialmente pelo código COLDAE. Neste trabalho, não é utilizada a formulação multifásica como entrada do código DIRCOL, ou seja, o problema é resolvido com apenas uma fase. O autor demonstra que este método possui aplicabilidade a problemas com restrições nas variáveis de estado e com controle linear nas restrições, que provocam flutuações no índice do PCOADs.

2.7 Sistemas Híbridos

2.7.1 Definição

Os Sistemas Híbridos consistem em sistemas dinâmicos onde os comportamentos contínuos e discretos interagem entre si. A investigação de sistemas híbridos está criando uma interface nova e fascinante entre a engenharia de controle, a matemática e a informática. Eles estão presentes na análise e no projeto de sistemas de controle inteligentes e tem se disseminado com o uso difundido de máquinas digitais (XU, 2001).

Um exemplo comum é um sistema de aquecimento de um quarto. Este sistema possui dois modos de operação: aquecimento ligado (ON) ou desligado (OFF). As dinâmicas contínuas associadas a esses dois modos são diferentes. Se é detectado que a temperatura do quarto está abaixo de um determinado nível, o aquecedor é ligado e a dinâmica de aquecimento fica ativa. Por outro lado, se a temperatura do quarto está em um nível acima do desejado, o aquecedor é desligado e outra dinâmica contínua fica ativa (XU, 2001).

Outro exemplo interessante é o de uma máquina do Lehrstuhl B für Mechanik da Technische Universität München provida de 6 “pernas”, para a qual o problema consiste em determinar simultaneamente os controles contínuos ótimos para as “pernas” e o modo ótimo de caminhar, definido por um número e seqüência discretos de passos, de posições e tipos de contatos com o solo para cada perna, para minimizar o consumo total de energia da máquina ou o tempo necessário para a caminhada. A estrutura das equações do movimento para esta máquina depende da situação de contato da perna com o solo (variáveis discretas), que pode ser de 3 tipos: nenhum contato, contato fixo e contato deslizante. As mudanças na estrutura das equações, relacionadas às mudanças na situação de contato, resultam em descontinuidades nas equações de movimento nos tempos intermediários (eventos), que separam o problema em fases com dinâmicas específicas (STRYK, 2000).

Segundo Stryk (2000), um Problema de Controle Ótimo Híbrido é definido como a minimização de um índice de desempenho híbrido dado por:

$$\begin{aligned}
 J[\mathbf{u}, \mathbf{v}] = & \sum_{i=1}^{n_{c+1}} \varphi_{(i)}(\mathbf{x}(t_i^c - 0), \mathbf{x}(t_i^c + 0), \mathbf{q}(t_i^c - 0), \mathbf{q}(t_i^c + 0), t_i^c) + \\
 & + \sum_{i=1}^{n_{c+1}} \int_{t_{i-1}^c}^{t_i^c} L_{(i)}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t), t) dt
 \end{aligned} \tag{2.91}$$

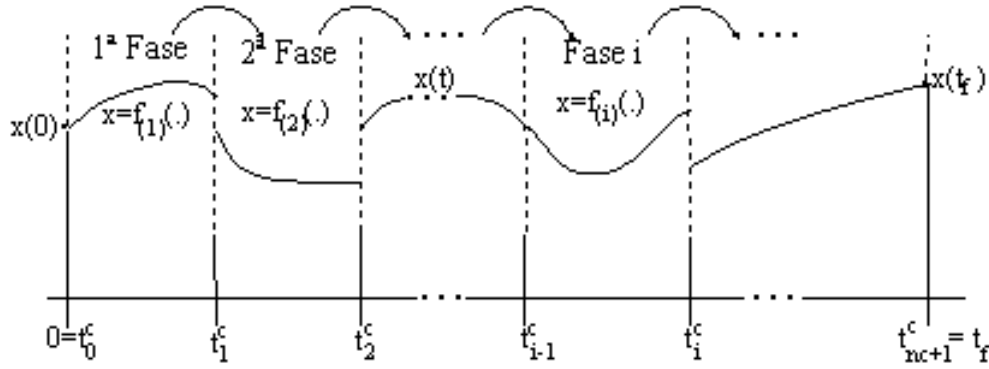


Figura 2.2: Dinâmica do estado contínuo definido em n_{c+1} fases.

sujeito a um sistema dinâmico não-linear

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}_{(i)}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t), t), \quad t_{i-1}^c < t < t_i^c, \quad i = 1, \dots, n_{c+1}, \quad (2.92)$$

que descreve o estado dinâmico contínuo em $n_c + 1$ fases t_i^c, t_{i+1}^c , $i = 0, \dots, n_c$ (Fig.2.2). As variáveis especificadas denotam:

$\mathbf{x} : [0, t_f] \rightarrow \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^{n_x}$ estado contínuo, $\mathbf{q} : [0, t_f] \rightarrow \mathcal{Q} \subset \mathbb{Z}^{n_q}$ estado discreto,
 $\mathbf{u} : [0, t_f] \rightarrow \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^{n_u}$ controle contínuo, $\mathbf{v} : [0, t_f] \rightarrow \mathcal{V} \subset \mathbb{Z}^{n_v}$ controle discreto.

A transição de uma fase i para uma fase $i+1$ ocorre em um momento desconhecido t_i^c , $i = 0, \dots, n_c$, isto é, nos Eventos.

$$0 = t_0^c < t_1^c < \dots < t_{n_c}^c < t_{n_{c+1}}^c = t_f \quad (2.93)$$

Aqui, $\mathbf{x}$ é continuamente diferenciável por partes e $\mathbf{u}$ é uma função contínua por partes do tempo. Frequentemente o número total de eventos n_c é desconhecido inicialmente e deve ser determinado.

As trajetórias de estado e controle são comumente sujeitas a restrições de igualdade e desigualdade

$$0 \leq g_{(i),j}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t), t), j = 1, \dots, n_{g(i)}, \quad (2.94)$$

$$0 = h_{(i),j}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t), t), j = 1, \dots, n_{h(i)}. \quad (2.95)$$

O número e o tipo de restrições podem diferir de uma fase para outra e depender

dos valores atuais de $\mathbf{q}$ e $\mathbf{v}$.

As condições implícitas devem satisfazer nos tempos iniciais, finais e nos eventos

$$0 = r_{(0),j}(\mathbf{x}(0), \mathbf{q}(0), \mathbf{x}(t_f), \mathbf{q}(t_f), t_f), j = 1, \dots, n_{r(0)}, \quad (2.96)$$

$$0 = r_{(i),j}(\mathbf{x}(t_i^c - 0), \mathbf{q}(t_i^c - 0), \mathbf{x}(t_i^c + 0), \mathbf{q}(t_i^c + 0), t_i^c), j = 1, \dots, n_{r(i)}, i = 1, \dots, n_c. \quad (2.97)$$

Os eventos devem ser definidos nos zeros das funções identificadoras de fases $r_{(i),j}$. Condições explícitas no tempo inicial e final são adicionadas

$$\begin{aligned} x_{j_1}(0) &= x_{0,j_1}, q_{j_2}(0) = q_{0,j_2}, \\ x_{k_1}(t_f) &= x_{f,k_1}, q_{k_2}(t_f) = q_{f,k_2}, \end{aligned} \quad (2.98)$$

assim como condições de transição de fases explícitas

$$\begin{aligned} x_{l_1}(t_i^c + 0) &= R_{(i),l_1}^q(\mathbf{x}(t_i^c - 0), \mathbf{q}(t_i^c - 0), t_i^c), \\ q_{l_2}(t_i^c + 0) &= R_{(i),l_2}^q(\mathbf{x}(t_i^c - 0), \mathbf{q}(t_i^c - 0), t_i^c), \end{aligned} \quad (2.99)$$

podem ser adotadas. Aqui, j_1, k_1, l_1 são elementos dos sub-conjuntos de $1, 2, \dots, n_x$ e j_2, k_2, l_2 são elementos dos sub-conjuntos de $1, 2, \dots, n_q$. As constantes reais x_{0,j_1}, x_{f,k_1} e as constantes inteiras q_{0,j_2}, q_{f,k_2} são dadas. As funções que aparecem na definição do problema de controle ótimo híbrido são, ao menos localmente, contínuos e continuamente diferenciável em relação aos argumentos contínuos $\mathbf{x}$, $\mathbf{u}$ e t .

2.7.2 Sistemas Chaveados

Um Sistema Chaveado é um tipo particular de Sistema Híbrido, mas cujo estado contínuo não apresenta saltos nos eventos. Se uma lei de mudança for especificada, então o Sistema Chaveado pode ser descrito como (XU, 2001):

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}_{i(t)}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t) \quad (2.100)$$

$$\mathbf{i}(t) = \mathbf{j}(\mathbf{x}(t), \mathbf{i}(t^-), t) \quad (2.101)$$

onde $i : \mathbb{R} \rightarrow I$ é uma função constante por partes que determina o subsistema ativo em cada instante t .

Para um sistema chaveado S , a seqüência de mudança σ em $[t_0, t_f]$ é definida como $\sigma = ((t_0, i_0), (t_1, e_1), (t_2, e_2) \dots (t_K, e_K))$, com $0 \leq K < \infty$, $t_0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_K \leq t_f$, e $i_0 \in I$, $e_k = (i_{k-1}, i_k) \in E$ para $k = 1, 2, \dots, K$.

A sequência de mudança σ definida anteriormente indica que o subsistema i_k está ativo em $[t_k, t_{k+1}]$ se $t_k < t_{k+1}$ ($[t_K, t_f]$ se $k = K$), e i_k passa para o instante t_k se $t_k = t_{k+1}$, ou seja, o sistema passa do subsistema i_{k-1} para o subsistema i_k e então do subsistema i_{k+1} no instante t_k .

Bemporad et al. (2002) resolveram problemas de controle ótimo para sistemas chaveados onde os eventos e a sequência de mudança são variáveis de decisão. A solução destes problemas é feita através de dois algoritmos que alternam entre si. O algoritmo Master que encontra a sequência ótima de mudança e o algoritmo Slave que encontra os eventos ótimos. De acordo com os autores, para melhorar o desempenho do algoritmo uma abordagem heurística pode ser adotada. Egerstedt et al. (2003) propõem uma nova forma do gradiente do custo funcional descrita por Xu (2001) para facilitar o uso de algoritmos baseados no método do gradiente descendente (*gradient descent*). Esta nova estrutura do gradiente permite que o número de eventos torne-se parte do controle em vez de ser uma constante dada. Xu e Antsaklis (2004) transcreveram um sistema chaveado em um PCO equivalente onde os eventos desconhecidos no problema original fazem parte do estado contínuo. O problema equivalente tem a propriedade de que os eventos são fixos em relação a nova variável independente do tempo.

A metodologia descrita por Xu e Antsaklis (2004) para sistemas chaveados definidos pelas Eqs.(2.102 e 2.103) e aplicada a um sistema com apenas um evento para simplicidade de notação é descrita em detalhes na sequência. Considere um sistema chaveado dado por:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}_1(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t), \quad t_0 \leq t < t_1 \quad (2.102)$$

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}_2(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t), \quad t_1 \leq t \leq t_f \quad (2.103)$$

O objetivo é encontrar um evento t_1 e uma entrada continua ótima $\mathbf{u}(t)$, $t \in [t_0, t_f]$ tal que o custo funcional dado pela Eq.(2.104) seja minimizado, dados t_0 , t_f e $x(t_0) = x_0$.

$$J = \Psi(\mathbf{x}(t_f)) + \int_{t_0}^{t_f} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) dt \quad (2.104)$$

É introduzida uma nova variável de estado t_{s1} correspondente ao evento t_1 , tal que:

$$\frac{\partial t_{s1}}{\partial t} = 0 \quad (2.105)$$

$$t_{s1}(0) = t_1 \quad (2.106)$$

Uma variável independente do tempo τ é também introduzida e uma relação linear

por partes entre t e τ é estabelecida como se segue:

$$t = \begin{cases} t_0 + (t_{s1} - t_0)\tau, & 0 \leq \tau < 1 \\ t_{s1} + (t_f - t_{s1})(\tau - 1), & 1 \leq \tau \leq 2 \end{cases} \quad (2.107)$$

Claramente, pode-se perceber que $\tau = 0$ corresponde a $t = t_0$, $\tau = 1$ a $t = t_1$ e $\tau = 2$ a $t = t_f$. Introduzindo t_{s1} e τ , o problema original dado pelas Eqs.(2.102) e (2.103) pode ser transcrito no seguinte problema equivalente definido por fases:

$$\frac{dx(\tau)}{d\tau} = (t_{s1} - t_0)f_1(x, u) \quad (2.108)$$

$$\frac{dt_{s1}}{d\tau} = 0 \quad (2.109)$$

no intervalo $\tau \in [0, 1)$ e

$$\frac{dx(\tau)}{d\tau} = (t_f - t_{s1})f_2(x, u) \quad (2.110)$$

$$\frac{dt_{s1}}{d\tau} = 0 \quad (2.111)$$

no intervalo $\tau \in [1, 2]$. O problema é achar t_{s1} e $u(\tau)$ ótimos, $\tau \in [0, 2]$ tal que o custo funcional:

$$J = \Psi(x(2)) + \int_0^1 (t_{s1} - t_0)L(x, u)d\tau + \int_1^2 (t_f - t_{s1})L(x, u)d\tau \quad (2.112)$$

seja minimizado. São dados t_0 , t_f e $x(0) = x_0$.

Definindo:

$$\tilde{f}_1(x, u, t_{s1}) \triangleq (t_{s1} - t_0)f_1(x, u) \quad (2.113)$$

$$\tilde{f}_2(x, u, t_{s1}) \triangleq (t_f - t_{s1})f_2(x, u) \quad (2.114)$$

$$\tilde{L}_1(x, u, t_{s1}) \triangleq (t_{s1} - t_0)L(x, u) \quad (2.115)$$

$$\tilde{L}_2(x, u, t_{s1}) \triangleq (t_f - t_{s1})L(x, u) \quad (2.116)$$

e definindo a função *Hamiltoniana* parametrizada como:

$$H(x, p, u, t_{s1}) \triangleq \begin{cases} \tilde{L}_1(x, u, t_{s1}) + p^T \tilde{f}_1(x, u, t_{s1}), & \tau \in [0, 1) \\ \tilde{L}_2(x, u, t_{s1}) + p^T \tilde{f}_2(x, u, t_{s1}), & \tau \in [1, 2] \end{cases} \quad (2.117)$$

Aplicando as condições necessárias, as equações de estado, co-estado e de estacionariedade e as condições de contorno e continuidade, são fornecidas:

$$\frac{\partial x}{\partial \tau} = \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)^T = \tilde{f}_k(x, u, t_{s1}) \quad (2.118)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \tau} = - \left(\frac{\partial H}{\partial x} \right)^T = - \left(\frac{\partial \tilde{f}_k}{\partial x} \right)^T p - \left(\frac{\partial \tilde{L}_k}{\partial x} \right)^T \quad (2.119)$$

$$0 = \left(\frac{\partial H}{\partial u} \right)^T = \left(\frac{\partial \tilde{f}_k}{\partial u} \right)^T p - \left(\frac{\partial \tilde{L}_k}{\partial u} \right)^T \quad (2.120)$$

$$x(0, t_{s1}) = x_0 \quad (2.121)$$

$$p(2, t_{s1}) = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}(x(2, t_{s1})) \right)^T \quad (2.122)$$

$$p(1-, t_{s1}) = p(1+, t_{s1}) \quad (2.123)$$

As Eqs.(2.118) - (2.123) formam um sistema de EADs de valor no contorno parametrizado pelo evento. Assim, o valor ótimo de J_1 como uma função dos parâmetros t_{s1} é dado pela Eq.(2.124).

$$J_1(t_{s1}) = \psi(x(2, t_{s1})) + \int_0^1 \tilde{L}_1(x, u, t_{s1}) d\tau + \int_0^1 \tilde{L}_2(x, u, t_{s1}) d\tau \quad (2.124)$$

Diferenciando J_1 em relação à t_{s1} fornece a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_1}{\partial t_{s1}} &= \frac{\partial \psi(x(2, t_{s1}))}{\partial x} \frac{\partial x(2, t_{s1})}{\partial t_{s1}} + \int_0^1 \left(L(x, u) + (t_{s1} - t_0) \left(\frac{\partial L}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} + \frac{\partial L}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right) \right) d\tau + \\ &+ \int_1^2 \left(-L(x, u) + (t_f - t_{s1}) \left(\frac{\partial L}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} + \frac{\partial L}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right) \right) d\tau \end{aligned} \quad (2.125)$$

É necessário obter as funções $\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial x}{\partial t_{s1}} \right)$ e $\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right)$ para se obter o valor $\frac{dJ_1}{dt_{s1}}$. Diferenciando as equações de estado, co-estado e estacionariedade em relação a t_{s1} , obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial x}{\partial t_{s1}} \right) = \frac{\partial}{\partial t_{s1}} \left(\frac{\partial x}{\partial \tau} \right) = f_1 + (t_{s1} - t_0) \left(\frac{\partial f_1}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} + \frac{\partial f_1}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right) \quad (2.126)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial p}{\partial t_{s1}} \right) &= -\frac{\partial}{\partial t_{s1}} \left(\frac{\partial p}{\partial \tau} \right) = -\left(\frac{\partial f_1}{\partial x} \right)^T p - \left(\frac{\partial L}{\partial x} \right)^T - (t_{s1} - t_0) \\ &\times \left(\left(\frac{\partial f_1}{\partial x} \right)^T \frac{\partial p}{\partial t_{s1}} + \left(p^T \frac{\partial^2 f_1}{\partial x^2} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} \right)^T + \left(p^T \frac{\partial^2 f_1}{\partial x \partial u} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right)^T + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial u} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right) \end{aligned} \quad (2.127)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{\partial f_1}{\partial u} \right)^T p - \left(\frac{\partial L}{\partial u} \right)^T - (t_{s1} - t_0) \\ &\times \left(\left(\frac{\partial f_1}{\partial u} \right)^T \frac{\partial p}{\partial t_{s1}} + \left(p^T \frac{\partial^2 f_1}{\partial u \partial x} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} \right)^T + \left(p^T \frac{\partial^2 f_1}{\partial u^2} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right)^T + \frac{\partial^2 L}{\partial u \partial x} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} + \frac{\partial^2 L}{\partial u^2} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right) \end{aligned} \quad (2.128)$$

para $\tau \in [0, 1)$ e

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial x}{\partial t_{s1}} \right) = \frac{\partial}{\partial t_{s1}} \left(\frac{\partial x}{\partial \tau} \right) = -f_2 + (t_f - t_{s1}) \left(\frac{\partial f_2}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} + \frac{\partial f_2}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right) \quad (2.129)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial p}{\partial t_{s1}} \right) &= -\frac{\partial}{\partial t_{s1}} \left(\frac{\partial p}{\partial \tau} \right) = \left(\frac{\partial f_2}{\partial x} \right)^T p + \left(\frac{\partial L}{\partial x} \right)^T - (t_f - t_{s1}) \\ &\times \left(\left(\frac{\partial f_2}{\partial x} \right)^T \frac{\partial p}{\partial t_{s1}} + \left(p^T \frac{\partial^2 f_2}{\partial x^2} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} \right)^T + \left(p^T \frac{\partial^2 f_2}{\partial x \partial u} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right)^T + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial u} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right) \end{aligned} \quad (2.130)$$

$$\begin{aligned} 0 &= -\left(\frac{\partial f_2}{\partial u} \right)^T p - \left(\frac{\partial L}{\partial u} \right)^T + (t_f - t_{s1}) \\ &\times \left(\left(\frac{\partial f_2}{\partial u} \right)^T \frac{\partial p}{\partial t_{s1}} + \left(p^T \frac{\partial^2 f_2}{\partial u \partial x} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} \right)^T + \left(p^T \frac{\partial^2 f_2}{\partial u^2} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right)^T + \frac{\partial^2 L}{\partial u \partial x} \frac{\partial x}{\partial t_{s1}} + \frac{\partial^2 L}{\partial u^2} \frac{\partial u}{\partial t_{s1}} \right) \end{aligned} \quad (2.131)$$

para $\tau \in [1, 2]$.

Diferenciando as condições de contorno e de continuidade em relação à t_{s1} :

$$\frac{dx(0, t_{s1})}{dt_{s1}} = 0 \quad (2.132)$$

$$\frac{dp(2, t_{s1})}{dt_{s1}} = \frac{\partial^2 \Psi(x(2, t_{s1}))}{\partial x^2} \frac{\partial x(2, t_{s1})}{\partial t_{s1}} \quad (2.133)$$

$$\frac{dp(1-, t_{s1})}{dt_{s1}} = \frac{dp(1+, t_{s1})}{dt_{s1}} \quad (2.134)$$

O sistema de equações formado pelas Eqs.(2.118) - (2.123) e pelas Eqs.(2.126) - (2.131) e as condições dadas pelas Eqs.(2.132) - (2.134), forma um problema algébrico-diferencial de valor no contorno em dois pontos (BVPDAE) parametrizado pelo evento t_{s1} . Resolvendo-as e substituindo o valor na função objetivo J_1 , pode-se obter $\frac{dJ_1}{dt_{s1}}$. Para cada evento, a EAD pode ser resolvida através de métodos numéricos.

2.7.3 Analogia entre PCOADs e Sistemas Chaveados

Segundo Feehery (1998), a solução de PCO com restrição de desigualdade apresenta desafios especiais, porque demanda o conhecimento da seqüência e do número de ativações e desativações ao longo da trajetória. Segundo o autor existe uma equivalência entre PCOAD com restrições de desigualdade nas variáveis de estado e os PCOs com comportamento contínuo e discreto acoplados, chamados Sistemas Híbridos.

Os comportamentos contínuos e discretos interagem em pontos isolados no tempo, conhecidos como Eventos. Nesses pontos, devido à descontinuidade no estado e/ou nas variáveis adjuntas (saltos), podem ocorrer mudanças na forma funcional das EADs e/ou nas trajetórias da variável de controle em cada fase. Como consequência, nesses problemas, o índice diferencial do sistema pode flutuar ao longo da trajetória de solução, exigindo estratégias numéricas específicas aplicadas em cada fase. Por isso, é necessário o conhecimento prévio da história da ativação e desativação das restrições, feito através das chamadas Funções Identificadoras de Fases (FIF), para resolver os problemas adequadamente. Para formular a FIF, Srinivasan et al. (2003), Lobato (2004) e Stryk (2000) propõem a solução de um PCO sem restrições inicialmente, depois a obtenção da solução por um método direto que estime as mudanças de fases e os eventos.

Nesta dissertação, as variações discretas na forma funcional das EADs como uma consequência dos Eventos que ocorrem instantaneamente num determinado tempo são pré-definidas através da formulação prévia das FIF enquanto o tempo de ocorrência dos Eventos é definido implicitamente pelo estado do sistema, utilizando o algoritmo proposto por Xu e Antsaklis (2004) descrito anteriormente. Desta forma, enquanto em Lobato (2004) a identificação dos Eventos era feita através do acompanhamento da ativação das restrições ao longo da solução e a solução pelo método direto era feita fase a fase seqüencialmente, neste trabalho a identificação de eventos é feita numericamente, utilizando a abordagem algébrico-diferencial. A formulação do problema com inclusão das equações de sensibilidade é feita simbolicamente, através de algoritmo especialmente desenvolvido. A solução pelo método direto usando o código DIRCOL através da formulação multifásica foi realizada, com estimativa dos Eventos.

CAPÍTULO 3

Desenvolvimento de uma interface de integração de ferramentas para o tratamento de PCOADs

3.1 Aspectos Gerais

A necessidade de se caracterizar sistemas de EADs e reduzir o índice de sistemas de índice superior, ou analisar a consistência de condições iniciais, motivaram a atualização dos códigos INDEX e ACIG, além da atualização do código que gera as equações adjuntas e condição de ótimo através do Princípio de Pontryagin (OTIMA) que facilita a utilização de métodos indiretos de solução de PCOADs. Para ampliar a utilização destes códigos à outros usuários do núcleo, não os tornando obsoletos e esquecidos e melhorar o estudo de PCOADs, foi desenvolvida uma interface amigável para o usuário que exija pouco conhecimento da sintaxe Maple. Esta união de códigos em uma interface foi denominada *OpCol*. Uniu-se a esta interface o código EVENTS que através do algoritmo desenvolvido por Xu e Antsaklis (2004) faz a parametrização de sistemas chaveados em relação aos eventos.

Neste capítulo são descritas as características da interface criada, para a atualização, extensão e agrupamento de ferramentas de manipulação, tratamento e geração de condições de otimalidade para PCOADs usando o Maple® 9.5 (MAPLESOFT, 2003). Neste desenvolvimento, foi necessário fazer a atualização de funções e comandos para o Maple 9.5, já que foram envolvidas neste novo código ferramentas que utilizavam o Maple V3, o Maple 4.0 e o Maple 8.0. Além disto, foram utilizados comandos do pacote *Maplets* para a criação de janelas, diálogos e outras interfaces visuais que interagem com o usuário. Algumas características do pacote *Maplets* serão descritas na próxima seção.

3.2 Pacote Maplets

O pacote *Maplets* do Maple é uma interface gráfica que permite que o usuário combine pacotes e procedimentos com janelas e caixas de diálogo interativas. Este pacote pode ser utilizado para criar aplicações customizadas que exija o mínimo de conhecimento da sintaxe do Maple.

É composto por três sub-pacotes: Elementos (que podem ser janelas, botões, etc), Exemplos (contendo diversos exemplos de aplicações do *Maplets*) e Ferramentas (que contém rotinas para manipulação e interação com os elementos do Maplets), além de uma função para execução do *Maplet*, *Display*.

Para a atualização dos códigos INDEX, ACIG e OTIMA e a criação do código EVENTS foram necessárias algumas mudanças de sintaxes e comandos do Maple para se utilizar o pacote *Maplets*. Alguns deles estão descritos abaixo.

O comando para impressão no *Worksheet* do Maplet, *print*, *lprint*, *printf* entre outros, não podem ser utilizados na interface *Maplets*. Para a impressão em uma tela de resultados composto por um *TextBox*, é necessário o comando

```
Maplets:-Tools:-Set('xB2'('appendline')="Exemplo");
```

onde *xB2* é a referência do elemento *TextBox* na interface. O comando *appendline* é utilizado para adicionar uma nova linha de saída. Também pode ser utilizado o comando *append* onde a saída será escrita na mesma linha anterior. Um outro comando é o *Get* que deve ser utilizado somente em procedimentos, ou seja, não pode ser utilizado na criação da interface. Este comando recupera o valor de um elemento de uma aplicação ativa. Por exemplo, o comando

```
opta:=Maplets:-Tools:-Get('teste');
```

atribui o valor de *teste* à nova variável *opta*, onde *teste* é a referência de um elemento na interface. O comando *SetOption*, permite que valores de certas opções mudem enquanto uma aplicação do *Maplet* está em funcionamento. Por exemplo, a linha abaixo, muda o valor do elemento *iC3* de verdadeiro para falso.

```
SetOption('iC3'('value')=false)
```

Na atualização dos códigos alguns comandos utilizados na versão original tornaram-se obsoletos ou tiveram sua entrada modificada, devendo ser alterados para o funcionamento. Dentre eles, podem-se destacar (Quadro 3.1):

Quadro 3.1: Comandos do Maple.

Anterior	Atual
traperror/lasterror	try/catch
submatrix	matadd
RETURN	return
codegen	CodeGeneration
'type/ratpoly'()	type(X,ratpoly)

Uma dificuldade encontrada foi a impressão de matrizes dentro de um TextBox e a utilização do comando *CodeGeneration*, que deve ser melhorada.

3.3 Descrição de ferramentas de tratamento de PCOADs

As ferramentas integradas foram o INDEX (MURATA, 1996) desenvolvido para a caracterização de EADs, o ACIG (CUNHA; MURATA, 1999) que executa a redução simbólica do índice diferencial baseado no Algoritmo de Gear e o OTIMA, desenvolvido inicialmente por Gomes (2000) e generalizado e aperfeiçoado por Lobato (2004), que gera o Sistema Equivalente utilizado na solução de PCOADs pelo Método Indireto. A nova ferramenta associada a esta nova interface, chamada EVENTS, é o algoritmo de Xu e Antsaklis (2004) que gera o Sistema Equivalente parametrizado pelos eventos. Na sequência, são apresentadas as principais características de cada uma destas ferramentas.

3.3.1 INDEX

O código simbólico INDEX foi desenvolvido por Murata (1996) usando o Maple V3 como linguagem de programação. O usuário deve fornecer como dados de entrada um arquivo do tipo texto com a dimensão do sistema e as equações a analisar, usando nomes exclusivos para as variáveis e suas derivadas, para as equações e para a dimensão do sistema. A partir destas informações, o código faz a partição do sistema, verifica se ele é semi-explícito, linear, linearmente implícito ou não-linear, identifica sistemas implícitos de índice 1 ou superior ou sistema semi-explícitos de Hessenberg de índices 2 e 3, verifica a resolubilidade de sistemas lineares com coeficientes constantes e alerta quanto à existência de problemas de inicialização em sistemas de índice 1.

O algoritmo é baseado na determinação da estrutura das equações e na dependência das variáveis. O algoritmo simbólico pode ser usado para comprovar a caracterização obtida através dos códigos estruturais, que fornecem apenas um valor inferior para o índice e um valor superior de graus de liberdade.

3.3.2 ACIG

Os códigos de caracterização de equações algébrico-diferenciais, ALGO e PALGO, possuem limitações que podem ser quanto ao índice estrutural obtido através destes códigos, que é apenas um limite inferior do índice diferencial e o número estrutural de graus de liberdade dinamicamente definidos que é um limite superior do número de graus de liberdade dinamicamente definidos. Por causa destas limitações, foi desenvolvido por Cunha e Murata (1999) uma ferramenta denominada ACIG (Algoritmo de Análise de Consistência e Redução do Índice Diferencial baseado no Algoritmo de Gear) para ser acoplada ao código INDEX (MURATA, 1996), já que o INDEX apenas identifica sistemas de EADs com problemas de inicialização, mas não fornece informações ao usuário quanto ao número de graus de liberdade das equações ou quanto ao sistema estendido correspondente. O ACIG é composto por três blocos principais: Entrada de dados, Corpo do Programa e Saída de dados.

- Entrada de Dados

A entrada de dados pode ser feita através de banco de dados próprio da interface desenvolvida e através de arquivo de dados do próprio usuário.

- Corpo do Programa

A princípio é analisada a resolubilidade do sistema de EADs, calculando-se a soma da matriz de derivadas parciais das equações em relação as variáveis diferenciais e em relação às algébricas. Para que o sistema possa ser resolvido o determinante desta matriz não deve ser nulo.

O programa é baseado principalmente no cálculo do posto simbólico da matriz de derivadas do sistema de EADs. O posto de uma matriz é o número máximo

de linhas ou colunas de uma matriz que definem um sistema linearmente independente. Definida a matriz de derivadas, o posto pode avaliar a existência de variáveis diferenciais no sistema, fazendo assim a partição em blocos de variáveis diferenciais e de variáveis algébricas. O mesmo acontece com as equações do sistema. Esse procedimento é iterativo e tem como critério de parada a igualdade entre o posto e o número de equações avaliadas. Resolve-se então o sistema diferencial para as variáveis diferenciais e diferenciam-se o restante das equações. Efetua-se então a substituição das variáveis diferenciais no sistema de equações diferenciado anteriormente. O posto é novamente analisado. Quando a igualdade acontece, garante-se que o sistema foi reduzido a um sistema de EDOs. Enquanto a diferença entre o posto e o número de equações avaliadas no laço persistir, as diferenciações e manipulações algébricas deverão ocorrer.

- Saída de dados

Ao final da execução, o programa apresenta o número de graus de liberdade dinamicamente definidos, o índice do sistema original e os sistemas de índice zero e um são gerados. O programa também gera uma análise de consistência dos graus de liberdade definidos durante a execução apresentando as condições iniciais consistentes. O tempo de execução também é mostrado ao final da execução.

O ACIG apresenta grande versatilidade e bons resultados na caracterização de EADs, embora não seja aplicável a alguns tipos de dados, tais como: Equações diferenciais parciais (EDPs) em sua forma original, EADs de grande dimensão e altamente não linear.

3.3.3 OTIMA

A solução numérica de PCOs através de métodos indiretos normalmente exige um tratamento analítico considerável na obtenção das equações adjuntas, que pode se tornar trabalhoso e conduzir a expressões complexas, tornando-os desvantajosos com relação a outros métodos.

Para eliminar esta desvantagem, foi desenvolvido por Gomes (2000) e estendido por Lobato (2004) o código OTIMA, implementado inicialmente em Maple V R4 e atualizado para V8, que através da aplicação do Princípio de Pontryagin, faz o cálculo simbólico das condições de ótimo, através da geração das equações adjuntas e a condição de mínimo. O OTIMA é capaz de lidar com problemas de controle ótimo com restrições de ponto final, restrições de desigualdade e igualdade e com condições laterais.

3.3.4 EVENTS: geração do sistema equivalente parametrizado pelos eventos

A obtenção das equações de sensibilidade a partir da diferenciação das variáveis em relação a cada evento conforme algoritmo proposto por Xu e Antsaklis (2004), descrito em detalhes no Capítulo 2, é feita automaticamente em ambiente Maple 9.5 e incorporada à ferramenta OpCol, juntamente com as equações de estado, co-estado e estacionariedade, para sistemas chaveados. O sistema resultante é resolvido usando o *software* MATLAB.

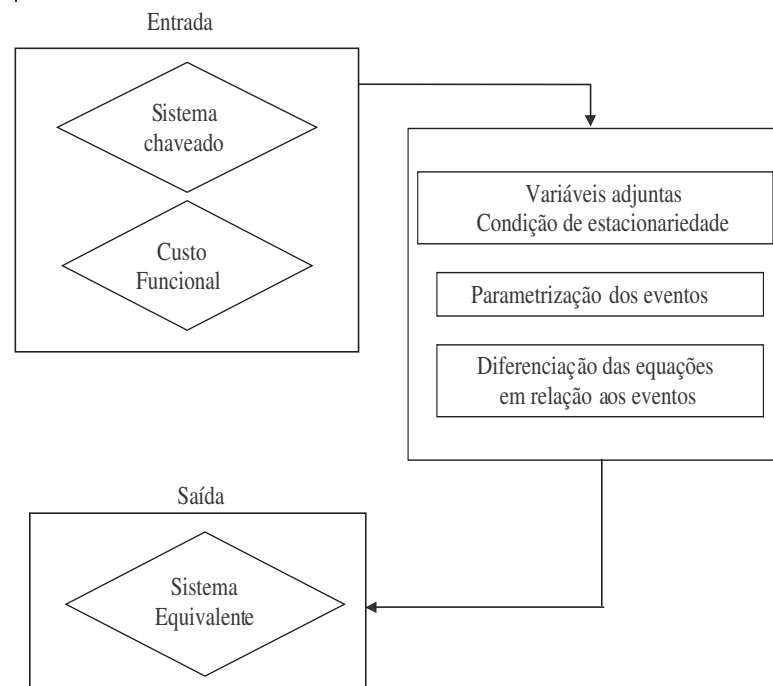


Figura 3.1: Fluxograma do código EVENTS.

3.4 Aplicações da interface OpCol

Na seqüência, a interface desenvolvida é aplicada a quatro estudo de casos, que permitem identificar suas principais características. Os dois primeiros exemplos, retirados de Pantelides (1988) e de Murata (1996), mostram as ações de identificação de índice superior, redução deste índice executadas pelo INDEX e pela ACIG. Os dois últimos exemplos, retirados de Lobato (2004) e de Xu (2001) mostram respectivamente, as gerações do Sistema Estendido Correspondente através da aplicação do PMP, e do Sistema Parametrizado pelos Eventos, executadas pelo OTIMA e pelo EVENTS.

3.4.1 Caso 1 - Sistema de Índice 1

Este exemplo é descrito por Pantelides (1988), que apresenta um sistema linear de EADs de índice 1.

$$\dot{z}_1 + z_1 + 2y_1 = 0 \quad (3.1)$$

$$z_1 + 2z_2 = u_1 \quad (3.2)$$

Para ser feita a caracterização do problema foi utilizado o código INDEX e sua saída é apresentada no Quadro (3.2).

Quadro 3.2: Saída do Código INDEX para o Caso 1.

```

+++++
+
+  SYMBOLIC ANALYSIS OF DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC SYSTEMS  +
+
+  INDEX 1.0                                           gmscp-PEQ/COPPE  +
+  Revision                                           FEQUI/UFU/2006    +
+
+++++
From Pantelides
=====
SYSTEM OF DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC EQUATIONS
OF SEMI-EXPLICIT TYPE WITH DIMENSION      2
dx1+x1+2*y1 = 0
x1+2*y1 = u1
dim(f)=1
dim(g)=1
dim(x)=1
dim(y)=1
=====
Analysing the system's linearity - Wait...
```

```

LINEAR SYSTEM.

Cpu time for linearity's analysis:0.sec.

=====

Generating the pattern of matrizes Fz'and Fz  - Wait...

FdzS = [[1, 0], [0, 0]]
FzS = [[1, 1], [1, 1]]

=====

Analysing the system's index  - Wait...

Cpu time for index analysis:0.sec.

INDEX ONE SYSTEM.

=====

Generating the Subroutines with Functions to DASSL and RADAU5  - Wait...

Cpu time for functions subroutine =0.sec.

RES

[YPRIME[1]+Y[1]+2*Y[2]]

[Y[1]+2*Y[2]-u1]

##### The End #####

```

Nesta saída do INDEX, pode-se obter os padrões utilizados nos códigos ALGO e PALGO (FdzS e FzS), além disso mostra se o sistema é de índice 1 ou superior. Utilizando o código ACIG, pode-se gerar o sistema de índice 1 ou 0. Com esse código, os sistemas de índice superior podem ter o sistema estendido correspondente gerado facilitando a tarefa de diferenciação do sistema. A saída do ACIG é apresentado no Quadro (3.3).

Quadro 3.3: Saída do Código ACIG para o Caso 1.

```

+++++
+                                     +
+  SYMBOLIC ANALYSIS OF DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC SYSTEMS  +
+                                     +
+                               ACIG 1.0                    +
+                                     +
+++++

From Pantelides

=====

Original DAE system
Differential
diff(x1(t),t)+x1(t)+2*x2(t)
Algebraic
x1(t)+2*x2(t)-u1
=====

Degrees of Freedom
1
=====

ODE System
{diff(x2(t),t) = 1/2*x1(t)+x2(t), diff(x1(t),t) = -x1(t)-2*x2(t)}
=====

Index One DAE system
{diff(x1(t),t) = -x1(t)-2*x2(t)}
[x1(t)+2*x2(t)-u1]
=====

Cpu time: .155sec

##### The End #####

```

3.4.2 Caso 2 - Reator CSTR com reação exotérmica de primeira ordem

Considere o modelo de operação transiente de um reator do tipo CSTR onde ocorre uma reação exotérmica de primeira ordem $A \rightarrow B$, e o calor de reação é removido por uma camisa de refrigeração. Este sistema não-linear apresenta índice superior e é dado por (MURATA, 1996):

$$\dot{x}_1 = \frac{F}{Q}(Co - x_1) - \frac{ko}{\rho} \exp\left(\frac{-E}{Rx_2}\right) x_1 \quad (3.3)$$

$$\dot{x}_2 = \frac{F}{Q}(To - x_2) + \frac{-\Delta H ko}{\rho Cp} \exp\left(\frac{-E}{Rx_2}\right) x_1 - \frac{U}{\rho Cp V}(x_2 - y_1) \quad (3.4)$$

$$x_2 - u_1 = 0 \quad (3.5)$$

A saída do código INDEX, que é apresentada no Quadro (3.4), mostra que o sistema apresenta índice superior (2) e através do código ACIG pode ser feita a redução para índice 1 e índice 0. A saída do ACIG é apresentada no Quadro (3.5).

Quadro 3.4: Saída do Código INDEX para o Caso 2.

```

+++++
+
+  SYMBOLIC ANALYSIS OF DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC SYSTEMS  +
+
+  INDEX 1.0                                           gmscp-PEQ/COPPE  +
+  Revision                                           FEQUI/UFU/2006      +
+
+++++

      CSTR with control of the temperature

=====

SYSTEM OF DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC EQUATIONS
OF SEMI-EXPLICIT TYPE WITH DIMENSION      3
dx1-FF/Q*(Co-x1)+exp(ln(K)-E1/R1/x2)*x1 = 0

```

```

dx2-FF/Q*(To-x2)+HH*exp(ln(K)-E1/R1/x2)*x1/Rho/Cp+U*(x2-y1)/Q/Rho/Cp = 0

        x2-u1 = 0

        dim(f)=2

        dim(g)=1

        dim(x)=2

        dim(y)=1

=====

    Analysing the system's linearity - Wait...

        NONLINEAR SYSTEM.

    Cpu time for linearity's analysis:.62e-1sec.

=====

Generating the pattern of matrizes Fz'and Fz - Wait...

        FdzS = [[1, 0, 0], [0, 1, 0], [0, 0, 0]]

        FzS = [[1, 1, 0], [1, 1, 1], [0, 1, 0]]

=====

        Analysing the system's index - Wait...

        HIGHER INDEX SYSTEM.

    Looking for a special structural form...

        Cpu time for index analysis:.31e-1sec.

    INDEX TWO HESSENBERG FORM SYSTEM:

        X'=F1(X,Y)O=F2(x)

            dim(f)= 2

            dim(g)=1

=====

Generating the Subroutines with Functions to DASSL - Wait...

    Cpu time for functions subroutine =0.sec.

        RES

        [YPRIME[1]-FF/Q*(Co-Y[1])+exp(ln(K)-E1/R1/Y[2]))*Y[1]]
[YPRIME[2]-FF/Q*(To-Y[2])+HH*exp(ln(K)-E1/R1/Y[2]))*Y[1]/Rho/Cp+
        U*(Y[2]-Y[3])/Q/Rho/Cp]

        [Y[2]-u1]

##### The End #####

```

Quadro 3.5: Saída do Código ACIG para o Caso 2.

```

+++++
+                                     +
+  SYMBOLIC ANALYSIS OF DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC SYSTEMS  +
+                                     +
+                               ACIG 1.0                    +
+                                     +
+++++

CSTR with control of the temperature

=====

Original DAE system
Differential
diff(x1(t),t)-(FF*Co-FF*x1(t)-exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)/R1/x2(t))*
x1(t)*Q)/Q
diff(x2(t),t)-(-U*x2(t)+FF*Rho*Cp*To-FF*Rho*Cp*x2(t)-HH*exp(-(-ln(K)*
R1*x2(t)+E1)/R1/x2(t))*x1(t)*Q+U*x3(t))/Q/Rho/Cp
Algebraic
x2(t)-u1
(-U*x2(t)+FF*Rho*Cp*To-FF*Rho*Cp*x2(t)-HH*exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+
E1)/R1/x2(t))*x1(t)*Q+U*x3(t))/Q/Rho/Cp
=====

Degrees of Freedom
1
=====

ODE System
{diff(x1(t),t)=(FF*Co-FF*x1(t)-exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)/R1/x2(t))*
*x1(t)*Q)/Q,
diff(x2(t),t)=(-U*x2(t)+FF*Rho*Cp*To-FF*Rho*Cp*x2(t)-HH*exp(-(-ln(K)*
R1*x2(t)+E1)/R1/x2(t))*x1(t)*Q+U*x3(t))/Q/Rho/Cp,

```

```

diff(x3(t),t)=-(U^2*R1*x2(t)^3-U*R1*x2(t)^2*FF*Rho*Cp*To+2*U*R1*
x2(t)^3*FF*Rho*Cp+U*R1*x2(t)^2*HH*exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)/R1/x2(t))
*x1(t)*Q-U^2*R1*x2(t)^2*x3(t)-FF^2*R1*x2(t)^2*Rho^2*Cp^2*To+FF^2*R1*
x2(t)^3*Rho^2*Cp^2+2*FF*R1*x2(t)^2*Rho*Cp*HH*exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)
/R1/x2(t))*x1(t)*Q-FF*R1*x2(t)^2*Rho*Cp*U*x3(t)+HH*E1*exp(-(-ln(K)*R1
*x2(t)+E1)/R1/x2(t))*x1(t)*Q*U*x2(t)-HH*E1*exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)/
R1/x2(t))*x1(t)*Q*FF*Rho*Cp*To+HH*E1*exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)/R1/
x2(t))*x1(t)*Q*FF*Rho*Cp*x2(t)+HH^2*E1*exp(-2*(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)/
R1/x2(t))*x1(t)^2*Q^2-HH*E1*exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)/R1/x2(t))*x1(t)
*Q*U*x3(t)-HH*exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)/R1/x2(t))*R1*x2(t)^2*Q*Rho*Cp
*FF*Co+HH*exp(-2*(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)/R1/x2(t))*R1*x2(t)^2*Q^2*Rho*Cp
*x1(t))/U/R1/x2(t)^2/Q/Rho/Cp}

=====

Index One DAE system
{diff(x1(t),t)=(FF*Co-FF*x1(t)-exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)/R1/x2(t))*
x1(t)*Q)/Q,
diff(x2(t),t)=(-U*x2(t)+FF*Rho*Cp*To-FF*Rho*Cp*x2(t)-HH*exp(-(-ln(K)*
R1*x2(t)+E1)/R1/x2(t))*x1(t)*Q+U*x3(t))/Q/Rho/Cp}
[(-U*x2(t)+FF*Rho*Cp*To-FF*Rho*Cp*x2(t)-HH*exp(-(-ln(K)*R1*x2(t)+E1)
/R1/x2(t))*x1(t)*Q+U*x3(t))/Q/Rho/Cp]

=====

CPU Time: .283sec

##### The End #####

```

A tarefa de diferenciação do sistema original para a obtenção do sistema de índice 1 ou zero é realizado pelo código ACIG com sucesso, ajudando o usuário na caracterização de um sistema de EADs.

3.4.3 Caso 3 - O Problema de Newton formulado como EDOs

Este problema foi um dos primeiros resolvidos pelo Cálculo das Variações, por volta de 1686, por Isaac Newton. O objetivo é a minimização do arraste na extremidade de

um cone de raio da base $r(t)$ e comprimento l , axialmente simétrico, num escoamento hipersônico (BRYSON; HO, 1975; FEEHERRY, 1998; LOBATO, 2004). O problema pode ser escrito matematicamente como:

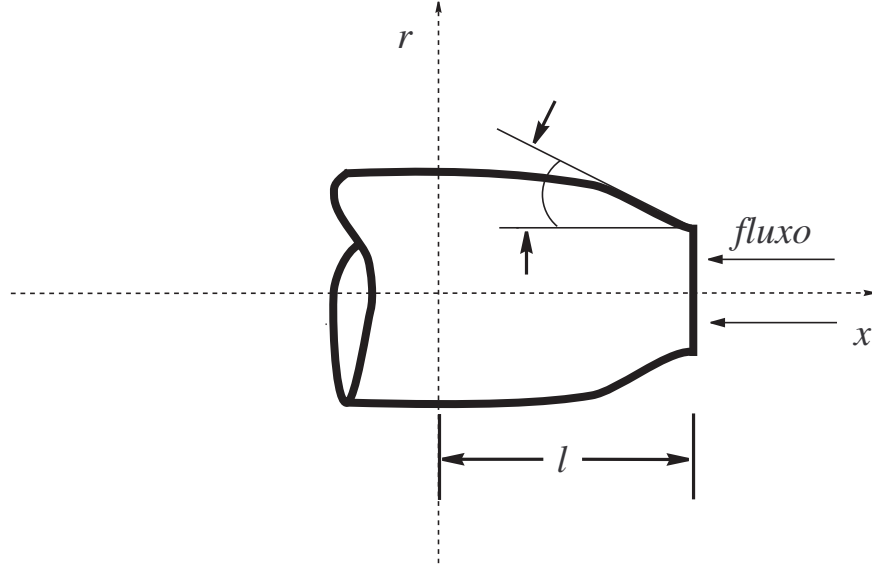


Figura 3.2: Problema Isaac Newton.

$$\min_{u(x)} \frac{1}{2}(r(l))^2 + \int_0^l \frac{ru^3}{1+u^2} dx \quad (3.6)$$

$$\frac{dr}{dx} + u = 0 \quad (3.7)$$

$$r(0) = r_0 \quad (3.8)$$

onde x é a distância axial, r é o raio do cone e a variável de controle é a tangente do ângulo entre a direção da velocidade e a tangente local à parede do cone em função de x . Aplicando o PMP, através do código OTIMA, obtemos:

$$\frac{dr}{dx} + u = 0 \quad (3.9)$$

$$\frac{d\lambda}{dx} - \frac{u^3}{1+u^2} = 0 \quad (3.10)$$

$$\lambda - \frac{ru^2(3+u^2)}{(1+u^2)^2} = 0 \quad (3.11)$$

com as seguintes condições de contorno

$$r(0) = r_0 \quad (3.12)$$

$$\lambda_l = -r(l) \quad (3.13)$$

Este problema que foi apresentado por Lobato (2004), possui as mesmas condições de ótimo encontradas em Bryson e Ho (1975), exceto pelo sinal de λ e por um fator igual a 4, que nesta referência multiplica o termo integral da função objetivo.

3.4.4 Caso 4 - Sistema Chaveado

O problema a seguir é descrito em Xu (2001) e através da interface criada, gera-se o sistema parametrizado que é apresentado nos Quadros (3.6-3.8). Este problema é resolvido no Capítulo 4.

$$J = \frac{1}{2}(x_1(3) - e^2)^2 + \frac{1}{2}(x_2(3) - e^2)^2 + \frac{1}{2} \int_0^3 u^2(t) dt \quad (3.14)$$

$$\text{Sub - sistema 1} \begin{cases} \dot{x}_1 = -x_1 + 2x_1 \\ \dot{x}_2 = x_2 + x_2 u \end{cases} \quad (3.15)$$

$$\text{Sub - sistema 2} \begin{cases} \dot{x}_1 = x_1 - 3x_1 u \\ \dot{x}_2 = 2x_2 - 2x_2 u \end{cases} \quad (3.16)$$

$$\text{Sub - sistema 3} \begin{cases} \dot{x}_1 = 2x_1 + x_1 u \\ \dot{x}_2 = -x_2 + 3x_2 u \end{cases} \quad (3.17)$$

com condições iniciais $x_1(0) = 1$ e $x_2(0) = 1$.

Quadro 3.6: Conjunto de equações para a primeira fase.

Primeira Fase $0 \leq \tau < 1$ $u_1 = -2y(1)y(3) - y(2)y(4)$
$\mathbf{dx1dtau} = \mathbf{ts1} * (-y(1) + 2 * u_1 * y(1))$ $\mathbf{dx2dtau} = \mathbf{ts1} * (y(2) + u_1 * y(2))$ $\mathbf{dl1dtau} = -\mathbf{ts1} * (-y(3) + 2 * y(3) * u_1)$ $\mathbf{dl2dtau} = -\mathbf{ts1} * (y(4) + u_1 * y(4))$ $\mathbf{dx1dts1} = -y(1) + 2 * y(1) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) + \mathbf{ts1} * (-y(5) + 2 * y(5) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) + 2 * y(1) * (-2 * y(5) * y(3) - 2 * y(1) * y(7) - y(6) * y(4) - y(2) * y(8)))$ $\mathbf{dx2dts1} = y(2) + y(2) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) + \mathbf{ts1} * (y(6) + y(6) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) + y(2) * (-2 * y(5) * y(3) - 2 * y(1) * y(7) - y(6) * y(4) - y(2) * y(8)))$ $\mathbf{dl1dts1} = y(3) - 2 * y(3) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) - \mathbf{ts1} * (-y(7) + 2 * y(7) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) + 2 * y(3) * (-2 * y(5) * y(3) - 2 * y(1) * y(7) - y(6) * y(4) - y(2) * y(8)))$ $\mathbf{dl2dts1} = -y(4) - y(4) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) - \mathbf{ts1} * (y(8) + y(8) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) + y(4) * (-2 * y(5) * y(3) - 2 * y(1) * y(7) - y(6) * y(4) - y(2) * y(8)))$ $\mathbf{dx1dts2} = \mathbf{ts1} * (-y(9) + 2 * y(9) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) + 2 * y(1) * (-2 * y(9) * y(3) - 2 * y(1) * y(11) - y(10) * y(4) - y(2) * y(12)))$ $\mathbf{dx2dts2} = \mathbf{ts1} * (y(10) + y(10) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) + y(2) * (-2 * y(9) * y(3) - 2 * y(1) * y(11) - y(10) * y(4) - y(2) * y(12)))$ $\mathbf{dl1dts2} = -\mathbf{ts1} * (-y(11) + 2 * y(11) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) + 2 * y(3) * (-2 * y(9) * y(3) - 2 * y(1) * y(11) - y(10) * y(4) - y(2) * y(12)))$ $\mathbf{dl2dts2} = -\mathbf{ts1} * (y(12) + y(12) * (-2 * y(1) * y(3) - y(2) * y(4)) + y(4) * (-2 * y(9) * y(3) - 2 * y(1) * y(11) - y(10) * y(4) - y(2) * y(12)))$

Quadro 3.7: Conjunto de equações para a segunda fase.

Segunda Fase $1 \leq \tau < 2$ $u_2 = 3y(1)y(3) + 2y(2)y(4)$
$\mathbf{dx1dtau} = (\mathbf{ts2-ts1}) * (\mathbf{y(1)-3*u2*y(1)})$ $\mathbf{dx2dtau} = (\mathbf{ts2-ts1}) * (\mathbf{2*y(2)-2*u2*y(2)})$ $\mathbf{dl1dtau} = -(\mathbf{ts2-ts1}) * (\mathbf{y(3)-3*u2*y(3)})$ $\mathbf{dl2dtau} = -(\mathbf{ts2-ts1}) * (\mathbf{2*y(4)-2*u2*y(4)})$ $\mathbf{dx1dts1} = -\mathbf{y(1)+3*y(1)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))+(ts2-ts1)*(y(5)-3*y(5)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-3*y(1)*(3*y(5)*y(3)+3*y(1)*y(7)+2*y(6)*y(4)+2*y(2)*y(8)))}$ $\mathbf{dx2dts1} = -\mathbf{2*y(2)+2*y(2)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))+(ts2-ts1)*(2*y(6)-2*y(6)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-2*y(2)*(3*y(5)*y(3)+3*y(1)*y(7)+2*y(6)*y(4)+2*y(2)*y(8)))}$ $\mathbf{dl1dts1} = \mathbf{y(3)-3*y(3)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-(ts2-ts1)*(y(7)-3*y(7)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-3*y(3)*(3*y(5)*y(3)+3*y(1)*y(7)+2*y(6)*y(4)+2*y(2)*y(8)))}$ $\mathbf{dl2dts1} = \mathbf{2*y(4)-2*y(4)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-(ts2-ts1)*(2*y(8)-2*y(8)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-2*y(4)*(3*y(5)*y(3)+3*y(1)*y(7)+2*y(6)*y(4)+2*y(2)*y(8)))}$ $\mathbf{dx1dts2} = \mathbf{y(1)-3*y(1)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))+(ts2-ts1)*(y(9)-3*y(9)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-3*y(1)*(3*y(9)*y(3)+3*y(1)*y(11)+2*y(10)*y(4)+2*y(2)*y(12)))}$ $\mathbf{dx2dts2} = \mathbf{2*y(2)-2*y(2)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))+(ts2-ts1)*(2*y(10)-2*y(10)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-2*y(2)*(3*y(9)*y(3)+3*y(1)*y(11)+2*y(10)*y(4)+2*y(2)*y(12)))}$ $\mathbf{dl1dts2} = -\mathbf{y(3)+3*y(3)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-(ts2-ts1)*(y(11)-3*y(11)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-3*y(3)*(3*y(9)*y(3)+3*y(1)*y(11)+2*y(10)*y(4)+2*y(2)*y(12)))}$ $\mathbf{dl2dts2} = -\mathbf{2*y(4)+2*y(4)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-(ts2-ts1)*(2*y(12)-2*y(12)*(3*y(1)*y(3)+2*y(2)*y(4))-2*y(4)*(3*y(9)*y(3)+3*y(1)*y(11)+2*y(10)*y(4)+2*y(2)*y(12)))}$

Quadro 3.8: Conjunto de equações para a terceira fase.

Terceira Fase $2 \leq \tau < 3$ $u_3 = -y(1)y(3) - 3y(2)y(4)$
$\begin{aligned} \mathbf{dx1dtau} &= (\mathbf{tf-ts2}) * (2*y(1) + u3*y(1)) \\ \mathbf{dx2dtau} &= (\mathbf{tf-ts2}) * (-y(2) + 3*u3*y(2)) \\ \mathbf{dl1dtau} &= -(\mathbf{tf-ts2}) * (2*y(3) + u3*y(3)) \\ \mathbf{dl2dtau} &= -(\mathbf{tf-ts2}) * (-y(4) + 3*u3*y(4)) \\ \mathbf{dx1dts1} &= (\mathbf{tf-ts2}) * (2*y(5) + y(5) * (-y(1)*y(3) - 3*y(2)*y(4)) + y(1) * (-y(5)*y(3) - y(1)* \\ &\quad y(7) - 3*y(6)*y(4) - 3*y(2)*y(8))) \\ \mathbf{dx2dts1} &= (\mathbf{tf-ts2}) * (-y(6) + 3*y(6) * (-y(1)*y(3) - 3*y(2)*y(4)) + 3*y(2) * (-y(5)*y(3) - \\ &\quad y(1)*y(7) - 3*y(6)*y(4) - 3*y(2)*y(8))) \\ \mathbf{dl1dts1} &= -(\mathbf{tf-ts2}) * (2*y(7) + y(7) * (-y(1)*y(3) - 3*y(2)*y(4)) + y(3) * (-y(5)*y(3) - y(1)* \\ &\quad y(7) - 3*y(6)*y(4) - 3*y(2)*y(8))) \\ \mathbf{dl2dts1} &= -(\mathbf{tf-ts2}) * (-y(8) + 3*y(8) * (-y(1)*y(3) - 3*y(2)*y(4)) + 3*y(4) * (-y(5)*y(3) - \\ &\quad y(1)*y(7) - 3*y(6)*y(4) - 3*y(2)*y(8))) \\ \mathbf{dx1dts2} &= -2*y(1) - y(1) * (-y(1)*y(3) - 3*y(2)*y(4)) + (\mathbf{tf-ts2}) * (2*y(9) + y(9) * (-y(1)* \\ &\quad y(3) - 3*y(2)*y(4)) + y(1) * (-y(9)*y(3) - y(1)*y(11) - 3*y(10)*y(4) - 3*y(2)*y(12))) \\ \mathbf{dx2dts2} &= y(2) - 3*y(2) * (-y(1)*y(3) - 3*y(2)*y(4)) + (\mathbf{tf-ts2}) * (-y(10) + 3*y(10) * (-y(1) \\ &\quad *y(3) - 3*y(2)*y(4)) + 3*y(2) * (-y(9)*y(3) - y(1)*y(11) - 3*y(10)*y(4) - 3*y(2)*y(12))) \\ \mathbf{dl1dts2} &= 2*y(3) + y(3) * (-y(1)*y(3) - 3*y(2)*y(4)) - (\mathbf{tf-ts2}) * (2*y(11) + y(11) * (-y(1)* \\ &\quad y(3) - 3*y(2)*y(4)) + y(3) * (-y(9)*y(3) - y(1)*y(11) - 3*y(10)*y(4) - 3*y(2)*y(12))) \\ \mathbf{dl2dts2} &= -y(4) + 3*y(4) * (-y(1)*y(3) - 3*y(2)*y(4)) - (\mathbf{tf-ts2}) * (-y(12) + 3*y(12) * (-y(1) \\ &\quad *y(3) - 3*y(2)*y(4)) + 3*y(4) * (-y(9)*y(3) - y(1)*y(11) - 3*y(10)*y(4) - 3*y(2)*y(12))) \end{aligned}$

Onde: $dx_1/d\tau = y(1)$, $dx_2/d\tau = y(2)$, $d\lambda_1/d\tau = y(3)$, $d\lambda_2/d\tau = y(4)$, $dx_1/dt_{s1} = y(5)$, $dx_2/dt_{s1} = y(6)$, $d\lambda_1/dt_{s1} = y(7)$, $d\lambda_2/dt_{s1} = y(8)$, $dx_1/dt_{s2} = y(9)$, $dx_2/dt_{s2} =$

$y(10)$, $d\lambda_1/dt_{s2} = y(11)$ e $d\lambda_2/dt_{s2} = y(12)$.

Neste Capítulo, o intuito foi mostrar a interface criada para várias problemas dentro da abordagem algébrico-diferencial e esta apresentou-se bastante favorável para a caracterização de sistemas, pois apresenta um conjunto de códigos que auxiliam na pré-solução numérica de PCOADs, com o interesse de exigir do usuário pouco conhecimento da sintaxe utilizada no *software* MAPLE. Um Manual do Usuário simplificado para a ferramenta Opcol é apresentado no Apêndice A.

A interface criada auxilia no estudo de PCOADs, desde a caracterização do sistema de EADs até a geração das equações adjuntas e condição de mínimo, exigidos na solução por métodos indiretos. Para a solução de um PCOAD recomenda-se as seguintes etapas: a caracterização do sistema através do código INDEX para a verificar se o sistema possui índice superior e problemas de inicialização. Caso o problema seja de índice superior, através do código ACIG se faz a redução do índice diferencial, gerando o sistema estendido correspondente. A partir do sistema de índice 1 pode ser utilizado o código OTIMA para geração das equações adjuntas e condição de mínimo. Com este prévio estudo, há a possibilidade de se evitar erros desnecessários. O código EVENTS, nesta interface, só pode ser aplicado a sistemas chaveados.

CAPÍTULO 4

Solução numérica de PCOADs com flutuação do índice diferencial

4.1 Método de Solução

As soluções dos problemas investigados foram obtidas através de uma rotina implementada no ambiente MATLAB®, utilizando a função *bvp4c* e comparadas com a solução de problemas sujeitos a restrições de desigualdade através do código DIRCOL, implementado por fases, com estimativa dos eventos.

- Solução através do MATLAB
 1. Inicia-se com estimativas para os eventos;
 2. Calcula-se a variável de controle;
 3. Calcula-se a função objetivo modificada e suas respectivas diferenciações em relação a cada evento;
 4. Atualiza os eventos usando o Método de Newton até atingir o critério de parada.
- Solução através do código DIRCOL

O segundo método de solução utilizado é baseado no método de colocação direta implementada pelo código DIRCOL (STRYK, 1999), que resolve um PCO sujeito a restrições gerais de igualdade ou desigualdade nas variáveis de controle e/ou de estado. Descontinuidades nas equações diferenciais podem ser tratadas como problema de fases múltiplas. Pela discretização da variável de estado e controle, o PCO é transcrito em uma seqüência de problemas não-lineares de otimização com restrições (NLP). O código DIRCOL também fornece estimativas confiáveis das variáveis adjuntas, das funções multiplicadoras das restrições de estado e da função identificadora de fases.

4.2 Estudo de Casos

A metodologia apresentada foi aplicada a 3 estudo de casos que serão descritos a seguir.

4.2.1 Caso 1 - Sistema Chaveado

Este problema foi apresentado por Xu (2001), onde o objetivo é minimizar um custo funcional J sujeito as restrições dadas pelos subsistemas.

$$J = \frac{1}{2}(x_1(3) - e^2)^2 + \frac{1}{2}(x_2(3) - e^2)^2 + \frac{1}{2} \int_0^3 u^2(t) dt \quad (4.1)$$

$$\text{Sub - sistema 1} \begin{cases} \dot{x}_1 = -x_1 + 2x_1 u \\ \dot{x}_2 = x_2 + x_2 u \end{cases} \quad (4.2)$$

$$\text{Sub - sistema 2} \begin{cases} \dot{x}_1 = x_1 - 3x_1 u \\ \dot{x}_2 = 2x_2 - 2x_2 u \end{cases} \quad (4.3)$$

$$\text{Sub - sistema 3} \begin{cases} \dot{x}_1 = 2x_1 + x_1 u \\ \dot{x}_2 = -x_2 + 3x_2 u \end{cases} \quad (4.4)$$

São dadas as condições iniciais do problema: $x_1(0) = 1$ e $x_2(0) = 1$.

Através da interface desenvolvida, foram obtidas as equações que compõem este sistema, descritas no Capítulo 3. Este problema foi resolvido utilizando tolerâncias relativa e absoluta iguais a 10^{-6} e escolhidos valores iniciais para $t_{s1} = 1, 2$ e $t_{s2} = 2, 2$. A Tabela (4.1) apresenta os resultados do Caso 1.

Neste caso, não foi utilizado o código DIRCOL para comparação, mas sim sua solução analítica. Pode-se perceber que os resultados obtidos neste trabalho apresenta-

Tabela 4.1: Resultados do Caso 1.

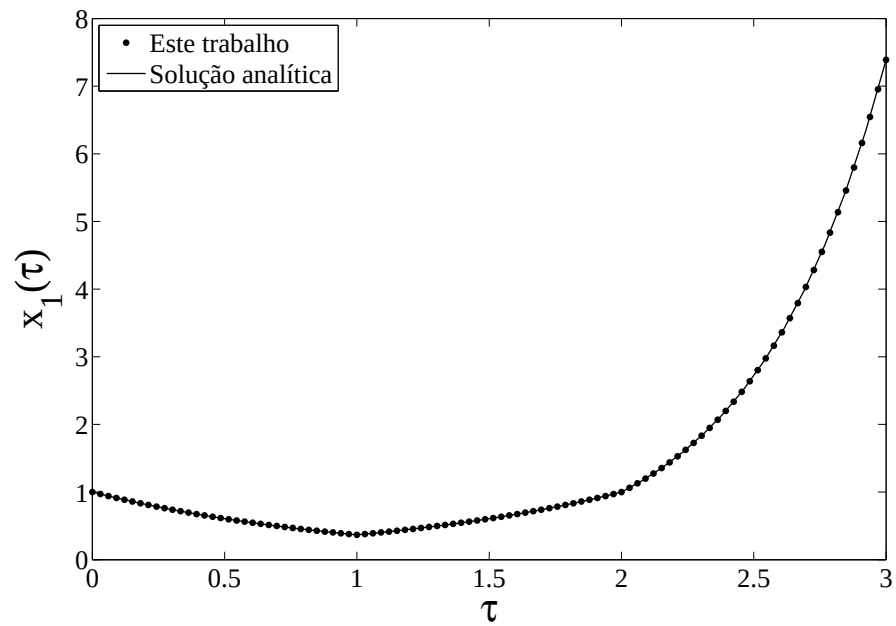
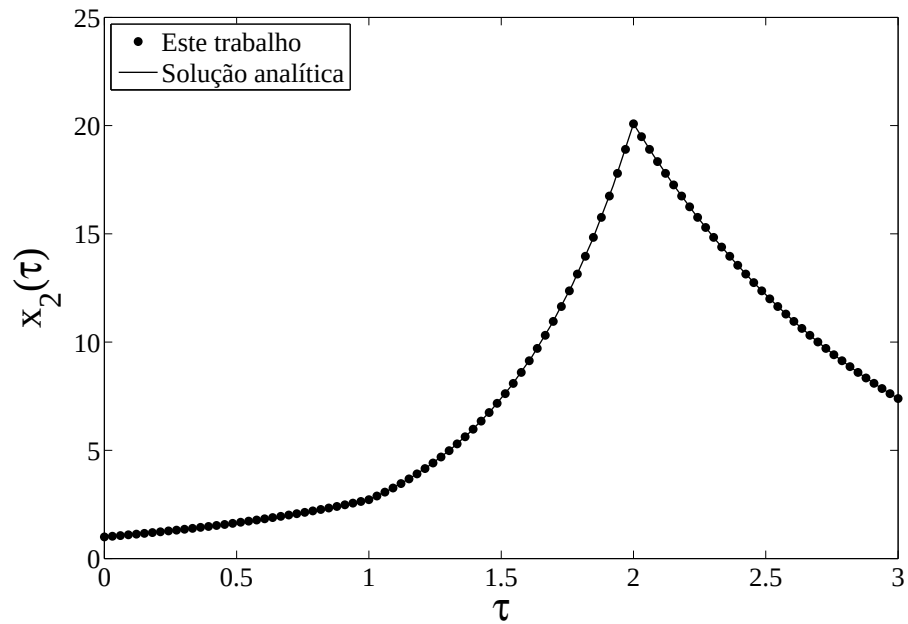
	t_{S1}	t_{S2}	Função Objetivo	Nº de Iterações
Xu (2001)	1,0050	1,9993	0,0000027599	18
Solução Analítica	1,0	2,0	0	
Este Trabalho	0,999991	2,000005	0,0000000000	18

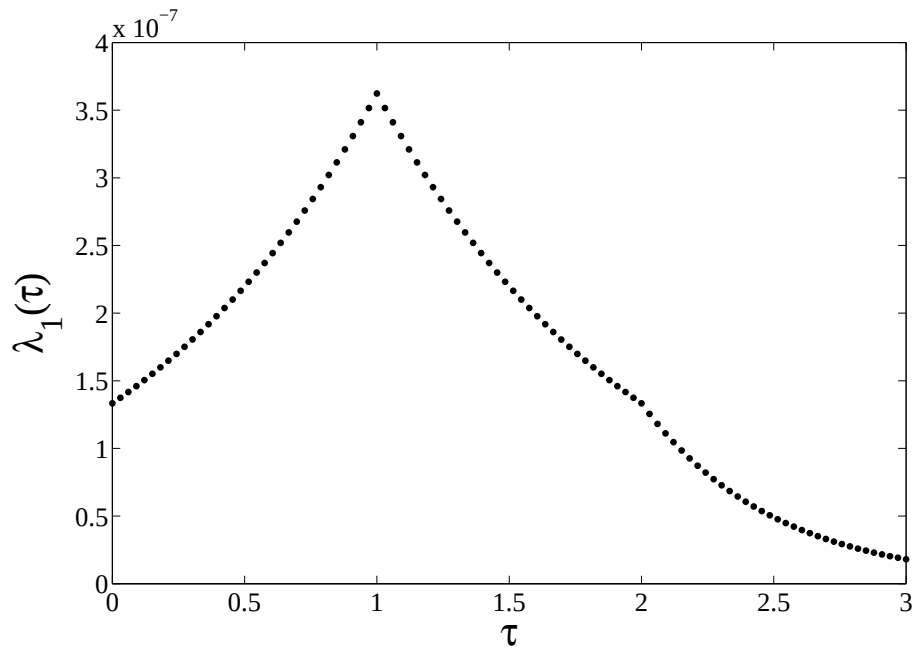
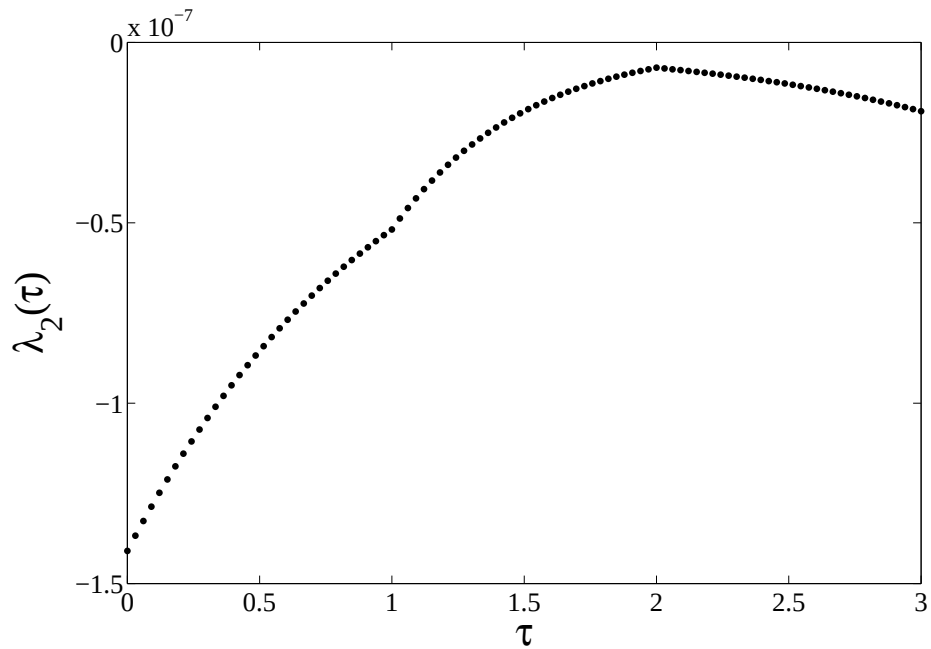
ram valores semelhantes à solução analítica e à solução numérica obtida na literatura. Os valores iniciais para os eventos foram os mesmos utilizados por Xu (2001). Foram feitas variações nas condições iniciais dos eventos para verificar a dificuldade de convergência do método. Os resultados destes testes são apresentados na Tabela (4.2).

Tabela 4.2: Variações nas estimativas iniciais.

Tol. 10^{-6}	t_{S1}	t_{S2}	Nº de Iterações	t_{S1}	t_{S2}	J
1	1,2	2,2	18	0,999991	2,000005	0,0000000000
2	0,5	1,5	33	0,999991	2,000005	0,0000000000
3	1,0	2,0	13	0,999991	2,000005	0,0000000000
Tol. 10^{-5}	t_{S1}	t_{S2}	Nº de Iterações	t_{S1}	t_{S2}	J
1	1,2	2,2	12	0,999987	2,000006	0,0000000001
2	0,5	1,5	28	0,999990	2,000008	0,0000000003
3	1,0	2,0	8	0,999990	2,000008	0,0000000002

Os valores iniciais para os eventos influenciaram na convergência do método de solução, aumentando o número de iterações necessárias para a obtenção da solução numérica, admitindo uma tolerância de 10^{-6} . Reduzindo a tolerância para 10^{-5} , houve a redução no número de iterações necessárias, mas a função objetivo e os valores dos eventos não sofreram alterações significativas. As trajetórias de estado e controle são mostradas nas Figuras (4.1) - (4.6).

Figura 4.1: Caso 1 - Variável de estado x_1 .Figura 4.2: Caso 1 - Variável de estado x_2 .

Figura 4.3: Caso 1 - Variável de co-estado λ_1 .Figura 4.4: Caso 1 - Variável de co-estado λ_2 .

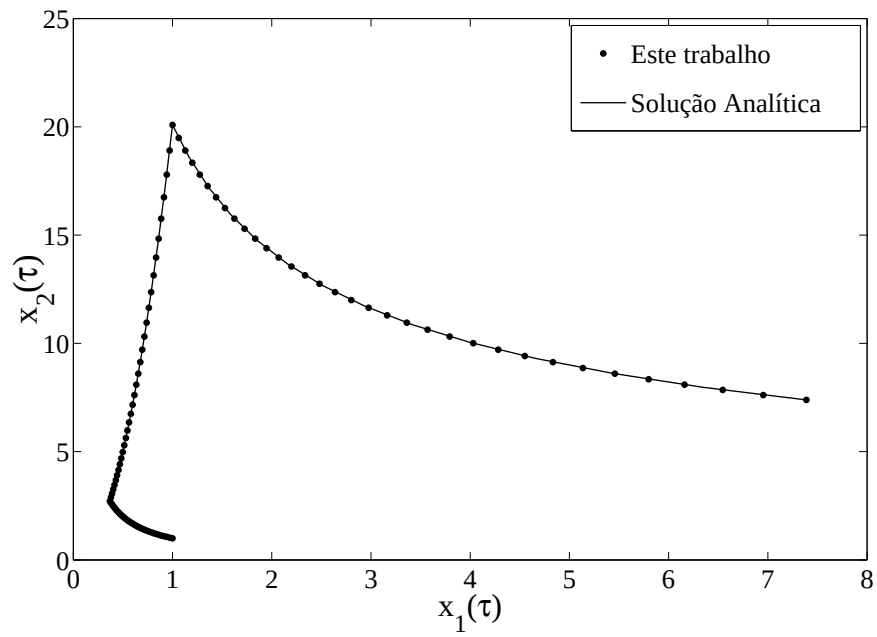


Figura 4.5: Trajetória de estado.

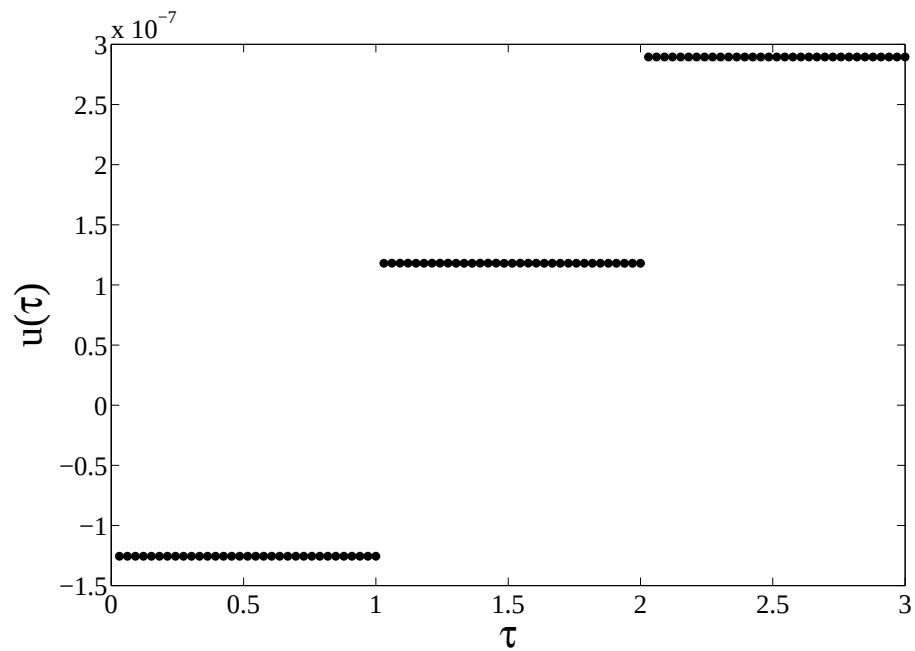


Figura 4.6: Caso 1 - Variável de controle.

4.2.2 Caso 2 - Reator semi-batelada isotérmico com reações paralelas e restrição de seletividade

O caso proposto é descrito em Srinivasan et al. (2003). A descrição do problema é:

1. Características:

- Reação $A + B \rightarrow C$
 $2B \rightarrow D$
- Condições: Semi-batelada, reação exotérmica;
- Objetivo: Maximizar a produção de C (tempo conhecido);
- Variável Manipulada: Taxa de alimentação de B ;
- Restrições: Limites na variável de controle, nas concentrações dos componentes B e D no tempo final;

2. Formulação do Problema:

O problema pode ser descrito como:

$$\min_{u(t)} J = V(t_f)c_C(t_f) \quad (4.5)$$

sujeito a:

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_1c_Ac_B - \frac{u}{V}c_A \quad (4.6)$$

$$\frac{dc_B}{dt} = -k_1c_Ac_B - 2k_2c_B^2 + \frac{u}{V}(c_{Bin} - c_B) \quad (4.7)$$

$$\frac{dV}{dt} = u \quad (4.8)$$

$$c_C = \frac{c_{A0}V_0 - c_AV}{V} \quad (4.9)$$

$$c_D = \frac{(c_A + c_{Bin} - c_B)V - (c_{A0} + c_{Bin} - c_{B0})V_0}{2V} \quad (4.10)$$

$$c_{B(t_f)} \leq c_{Bf\max} \quad (4.11)$$

$$c_{D(t_f)} \leq c_{Df\max} \quad (4.12)$$

$$u_{\min} \leq u \leq u_{\max} \quad (4.13)$$

$$c_A(0) = c_{A0} \quad (4.14)$$

$$c_B(0) = c_{B0} \quad (4.15)$$

$$V(0) = V_0 \quad (4.16)$$

$$c_C(0) = c_{C0} \quad (4.17)$$

$$c_D(0) = c_{D0} \quad (4.18)$$

onde c_X são as concentrações das espécies A , B , C e D , respectivamente, u é taxa de alimentação do componente B , V é o volume do reator, k_1 e k_2 são parâmetros cinéticos.

3. Parâmetros e Condições Operacionais do Modelo: Os parâmetros e condições operacionais do modelo são mostrados na Tabela (4.3)

Tabela 4.3: Parâmetros e condições Operacionais do Modelo (Caso 2).

k_1	0,053	L/(mol min)
k_2	0,128	L/(mol min)
c_{Ao}	0,72	mol/L
c_{Bo}	0,05	mol/L
c_{Co}	0	mol/L
c_{Do}	0	mol/L
c_{Bin}	5	mol/L
c_{Bfmax}	0,025	mol/L
c_{Dfmax}	0,15	mol/L
u_{min}	0	L/min
u_{max}	0,001	L/min
V_0	1	L

De acordo com Srinivasan et al. (2003), o problema pode ser descrito em 3 fases, devido às restrições de desigualdade nas variáveis de estado e controle. Estas fases são obtidas através da análise física do problema e podem ser descritas conforme abaixo:

4. Solução Ótima:

- Primeira Fase: devemos ter $u = u_{max}$, para aumentarmos B o mais rápido quanto possível.
- Segunda Fase: limitar a quantidade de D produzida.

$$u = \left(\frac{c_B V (k_1 c_A (2c_{Bin} - c_B) + 4k_2 c_B c_{Bin})}{2c_{Bin} (c_{Bin} - c_B)} \right)$$

- Terceira Fase: devemos ter $u = u_{min}$ para alcançarmos c_B em t_f .

Com essa descrição das fases do problema, nota-se que o problema original possui índice um, mas com a ativação da restrição na segunda fase o problema muda de índice, passando para índice 3, descrita na Tabela (4.4). A função identificadora de fases foi obtida conforme descrita em Srinivasan et al. (2003) que obtém a

expressão analítica para a variável de controle, determinada na segunda fase. Com a determinação desta expressão o sistema possui índice 1.

Tabela 4.4: Caso 2 - Função Identificadora de Fases.

	Função Identificadora de Fases	Índice
Primeira Fase	$u = u_{max}$	1
Segunda Fase	$u = \left(\frac{c_B V (k_1 c_A (2c_{Bin} - c_B) + 4k_2 c_B c_{Bin})}{2c_{Bin} (c_{Bin} - c_B)} \right)$	3
Terceira Fase	$u = u_{min}$	1

5. Resultados:

O problema foi resolvido utilizando-se tolerância relativa e absoluta iguais à 10^{-7} , após 16 iterações partindo-se de $[t_{s1}, t_{s2}] = [19, 202]$.

Tabela 4.5: Resultados do Caso 2.

	$t_{s1}(min)$	$t_{s2}(min)$	$n_c(t_f)$
Srinivasan et al. (2003)	20,25	205	0,43
DIRCOL	20,249041	205,00547	0,43058
Este trabalho	20,2495	205,0013	0,43059

Pode-se perceber que os resultados obtidos neste trabalho apresentaram valores semelhantes à solução pelo código DIRCOL e a solução obtida na literatura. Alterando os valores iniciais para os eventos, para verificar a convergência do método, obtém-se como resultados, os valores da Tabela (4.6).

Tabela 4.6: Variações nas estimativas iniciais.

	$t_{s1}(min)$	$t_{s2}(min)$	$t_{s1}(min)$	$t_{s2}(min)$	$n_c(t_f)$
1	19	202	20,2495	205,0013	0,43059
2	12	180	20,2495	205,0013	0,43059
3	25	220	20,2505	204,9987	0,43059

As variações nos valores iniciais dos eventos influenciaram na convergência do método de solução, aumentando o número de iterações necessárias para a obtenção da solução numérica, mas a função objetivo e os valores dos eventos não sofreram alterações significativas. As trajetórias de estado e controle são mostradas nas Figuras (4.7) - (4.10).

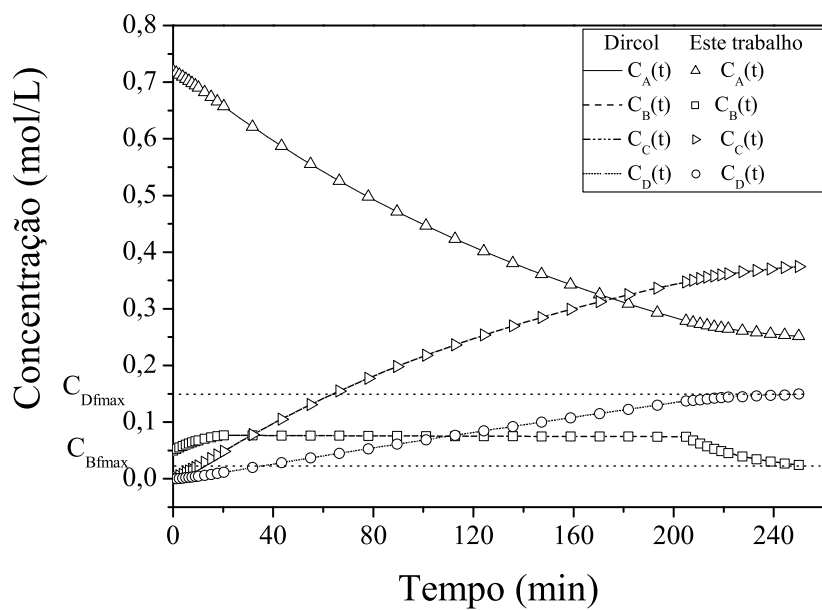


Figura 4.7: Caso 2 - Evolução das concentrações.

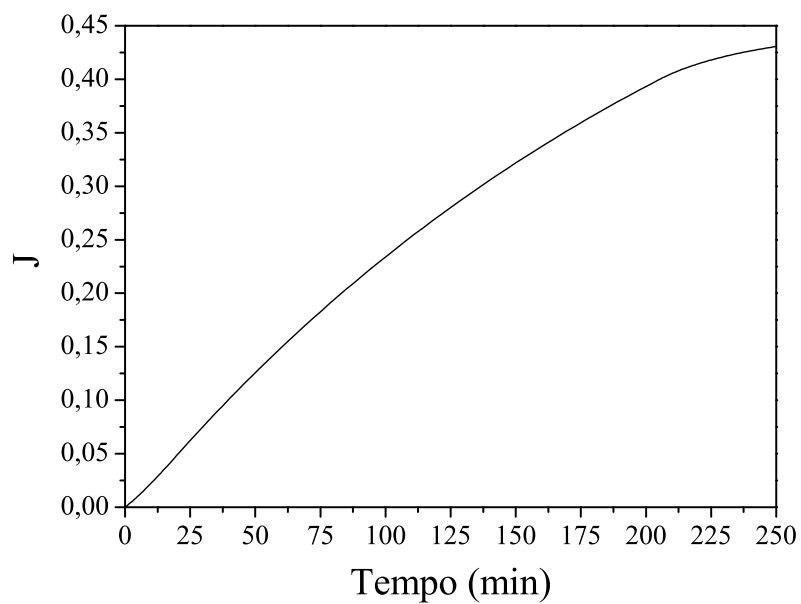


Figura 4.8: Caso 2 - Função Objetivo.

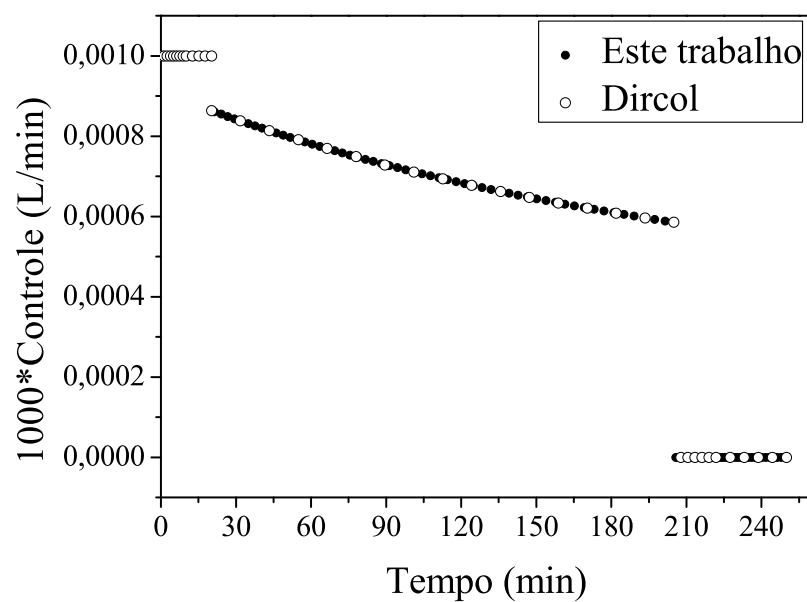
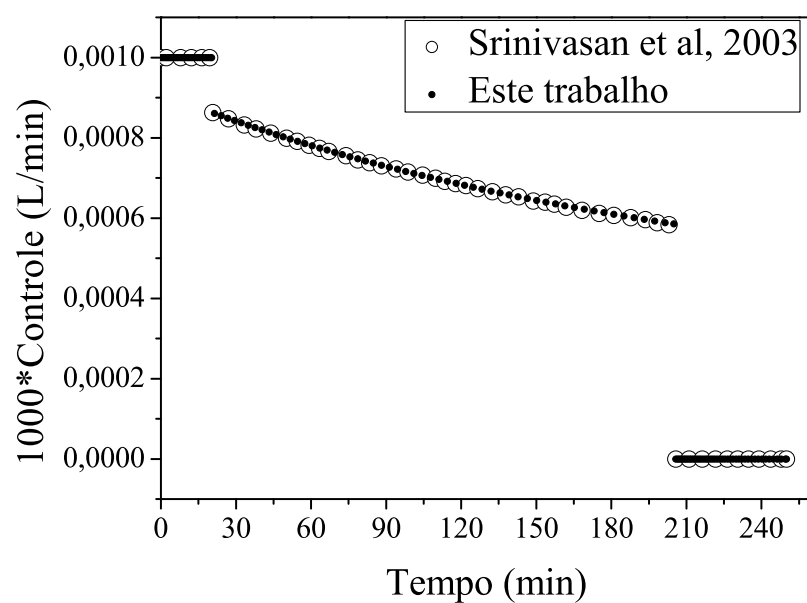


Figura 4.9: Perfil ótimo da taxa de alimentação.

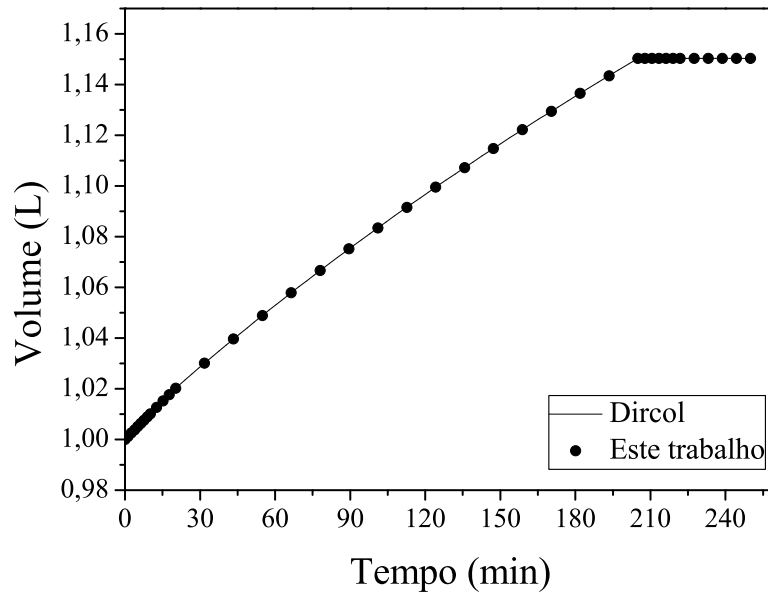


Figura 4.10: Caso 2 - Perfil do Volume.

4.2.3 Caso 3 - Reator Semi-Batelada Isotérmico

O caso proposto também é apresentado em Srinivasan et al. (2003). A descrição do problema é:

1. Características:

- Reação $A + B \rightarrow C$
- Condições: Semi-batelada, reação exotérmica;
- Objetivo: Minimizar o tempo necessário para a produção de C (valor conhecido);
- Variável Manipulada: Taxa de alimentação de B;
- Restrições: Limites na variável de controle, de temperatura da camisa e de volume;

2. Formulação do Problema:

O problema pode ser descrito como:

$$\min_{t_f, u(t)} J = t_f \quad (4.19)$$

sujeito a:

$$\frac{dc_A}{dt} = -kc_Ac_B - \frac{u}{V}c_A \quad (4.20)$$

$$\frac{dc_B}{dt} = -kc_Ac_B - \frac{u}{V}(c_{Bin} - c_B) \quad (4.21)$$

$$\frac{dV}{dt} = u \quad (4.22)$$

$$c_C = \frac{c_{A0}V_0 + c_{C0}V_0 - c_AV}{V} \quad (4.23)$$

$$T_{cf} = T(t) + \min(c_A, c_B) \frac{(-\Delta H)}{\rho c_p} \quad (4.24)$$

$$T_{cf}(t) \leq T_{max} \quad (4.25)$$

$$V(t_f) \leq V_{max} \quad (4.26)$$

$$n_C(t_f) \geq n_{Cdes} \quad (4.27)$$

$$u_{min} \leq u \leq u_{max} \quad (4.28)$$

$$c_A(0) = c_{A0} \quad (4.29)$$

$$c_B(0) = c_{B0} \quad (4.30)$$

$$V(0) = V_0 \quad (4.31)$$

$$c_C(0) = c_{C0} \quad (4.32)$$

onde c_X são as concentrações das espécies A , B e C , respectivamente, u é taxa de alimentação do componente B , V é o volume do reator, k é um parâmetro cinético, T , a temperatura do reator, T_{cf} é a temperatura do resfriador, ΔH a entalpia da reação, ρ a densidade e cp a capacidade calorífica.

3. Parâmetros e Condições Operacionais do Modelo:

Os parâmetros e condições operacionais do modelo são mostrados na Tabela (4.7)

4. Condições Operacionais:

Inicialmente sabemos que o número de mols de B é sempre menor que o de A , então implica que $c_B(t) \leq c_A(t)$. Com $T_{cf} \leq T_{max}$, implica que $c_B \leq c_{Bmax}$, com $c_{Bmax} = \rho cp(T_{max} - T)/(-\Delta H)$. Portanto, inicialmente temos que ter a maior quantidade de B possível.

5. Solução Ótima:

- Primeira Fase: devemos ter $c_B = c_{Bmax}$, para mantermos a restrição na temperatura ativa, o que nos revela a expressão para a variável de controle ($T_{cf} = T_{max}$).

$$u = \left(\frac{kc_Ac_BV}{c_{Bin} - c_B} \right)_{c_B=c_{Bmax}}$$

Tabela 4.7: Parâmetros e condições Operacionais do Modelo (Caso 3).

k	0,0482	L/(mol h)
u_{min}	0	L/h
u_{max}	0,1	L/h
c_{A0}	2	mol/L
c_{B0}	0,63	mol/L
c_{C0}	0	mol/L
n_{Cdes}	0,6	mol
c_{Bin}	2	mol/L
ΔH	-60000	J/mol
ρ	900	g/L
T	70	$^{\circ}C$
T_{max}	80	$^{\circ}C$
cp	4,2	J/gK
V_{max}	1	L
V_0	0,7	L

- Segunda Fase: Quando a restrição do volume fica ativa, implica que $u = u_{min}$.
O tempo final é obtido quando a composição desejada para o componente C é alcançada ($n_C = n_{Cdes}$).

Com essa descrição das fases do problema, nota-se que na segunda fase o sistema passa de índice um para índice 2, descrita na Tabela (4.8).

Tabela 4.8: Caso 3 - Função Identificadora de Fases.

	Função Identificadora de Fases	Índice
Primeira Fase	$u = \left(\frac{kc_{AC}c_B V}{c_{Bin} - c_B} \right)_{c_B = c_{B\max}}$	2
Segunda Fase	$u = u_{min}$ $n_c = n_{Cdes}$	1

6. Resultados:

Para se resolver este problema, foi feita uma mudança na função objetivo deste problema, que é de tempo final livre. Em vez de minimizar o tempo necessário para a produção do componente C , o tempo final da reação foi obtido ao alcançar o número de mols do desejado para o componente C ($n_{Cdes} = 0,6$). Esta mudança foi necessária pois o algoritmo proposto por Xu e Antsaklis (2004) necessita do tempo inicial(t_0) e do tempo final(t_f). Com essa mudança, o problema foi resolvido utilizando-se tolerância relativa e absoluta iguais à 10^{-6} , após 13 iterações partindo-se de t_{s1} igual a $10h$. Os resultados são apresentados na Tabela (4.9).

Tabela 4.9: Resultados do Caso 3.

	$t_{S1}(h)$	$t_f(h)$
Srinivasan et al. (2003)	11,44	19,80
DIRCOL	11,44481	19,800916
Este Trabalho	11,44478	19,801017

Pode-se perceber que os resultados obtidos neste trabalho apresentaram valores semelhantes à solução pelo código DIRCOL e a solução obtida na literatura. Foram feitos testes variando as estimativas iniciais para os eventos, e os resultados obtidos são apresentados na Tabela (4.10). Testes variando os parâmetros do modelo (k e c_{Bin}) utilizando o código DIRCOL foram realizados e os resultados obtidos são apresentados na Tabela (4.11).

Tabela 4.10: Variações nas estimativas iniciais.

	$t_{S1}(h)$	$t_f(h)$	$t_{S1}(h)$	$t_f(h)$
1	10	25	11,44478137	19,80101779
2	5	20	11,44478077	19,80101806
3	12	20	11,44485676	19,80095945

Tabela 4.11: Variações nos parâmetros.

	k	c_{bin}	J	IFAIL
1	0,0482	2,0	19,800916	0
2	0,00482	2,0	21,000000	3
3	0,482	2,0	20,997092	3
4	0,0482	1,0	21,000000	3

As variações nos valores iniciais dos eventos influenciaram na convergência do método de solução, aumentando o número de iterações necessárias para a obtenção da solução numérica, mas a função objetivo e os valores dos eventos não sofreram alterações significativas. As variações nos parâmetros, retornaram o valor de IFAIL = 3 o que significa, de acordo com o código DIRCOL, que a solução não convergiu pois não foi possível achar uma solução ótima que atendesse as restrições. As trajetórias de estado e controle são apresentadas nas Figuras (4.11) - (4.12).

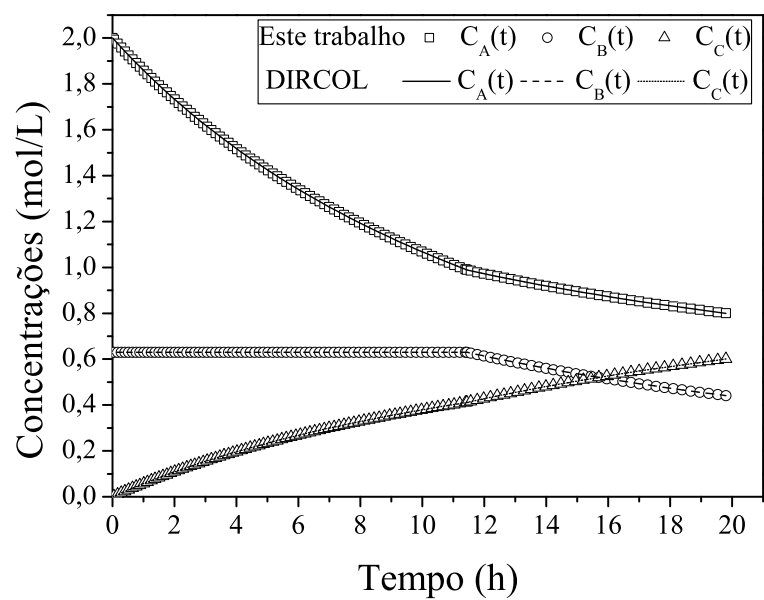
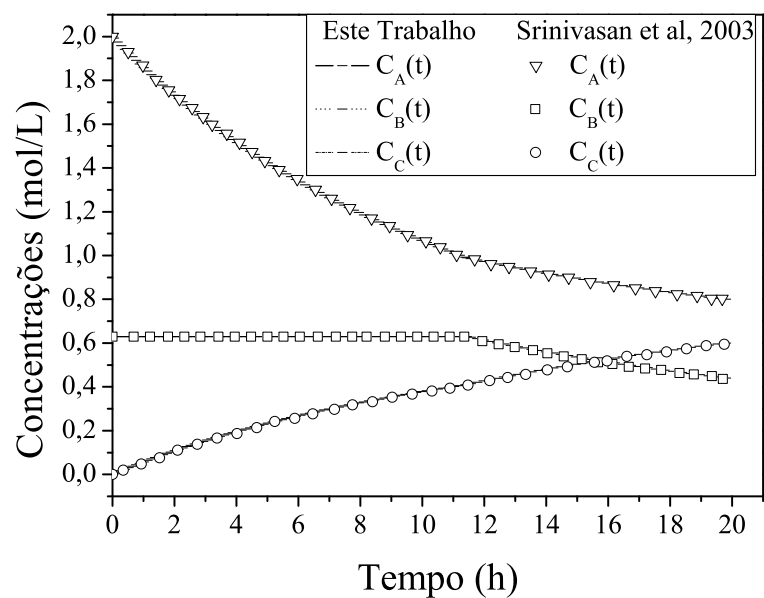


Figura 4.11: Perfis das Concentrações.

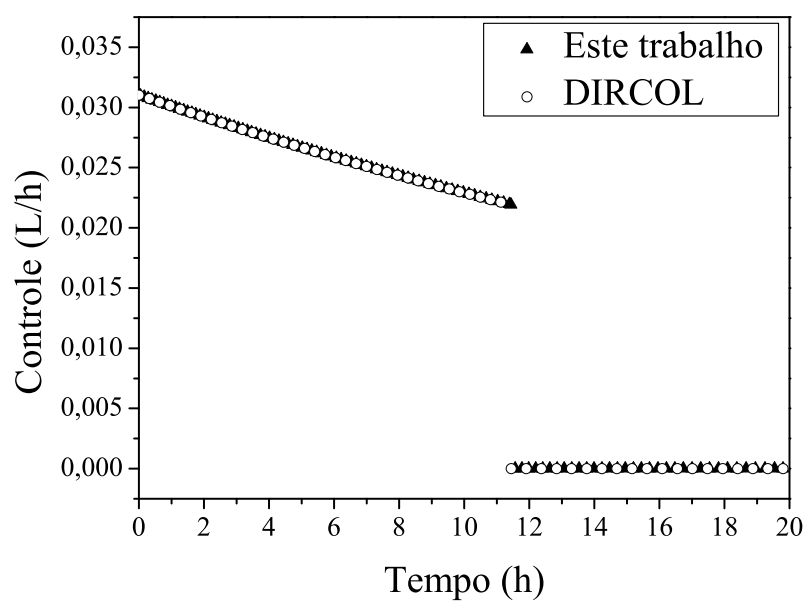
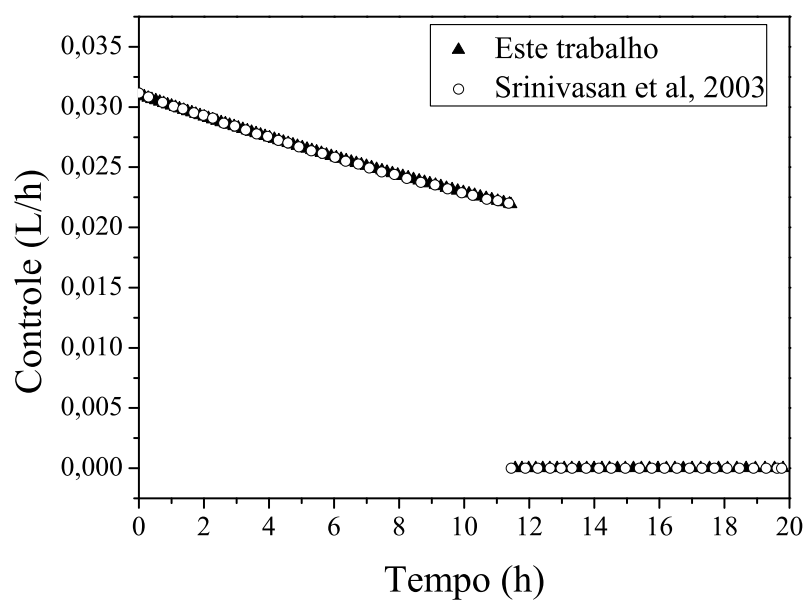


Figura 4.12: Perfil ótimo da taxa de alimentação.

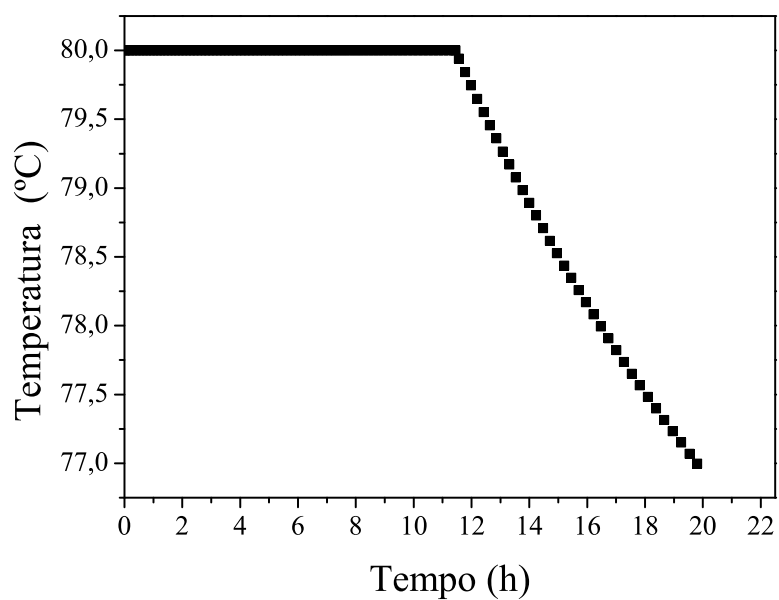


Figura 4.13: Caso 3 - Perfil da Temperatura.

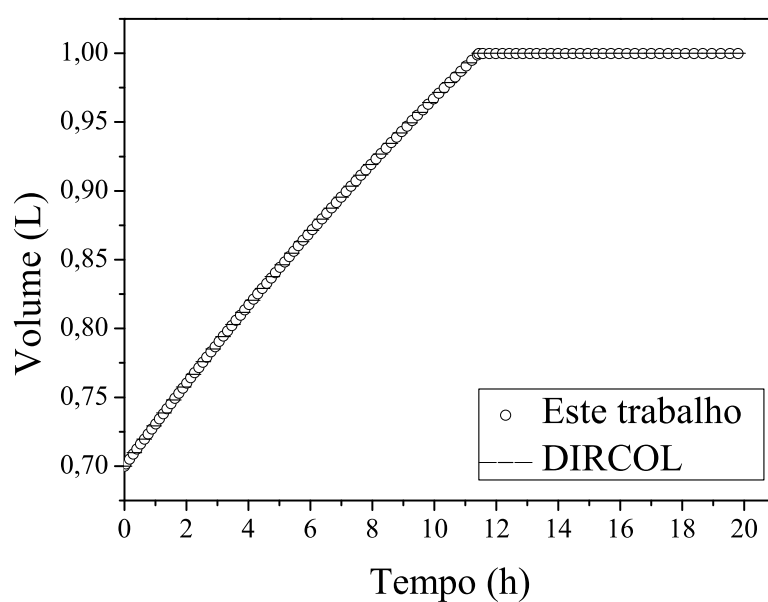


Figura 4.14: Caso 3 - Perfil do Volume.

Neste capítulo foram realizados três estudo de casos que apresentaram resultados satisfatórios em relação aos encontrados na literatura. Foram considerados para os casos resolvidos valores iniciais para os eventos de acordo com a literatura. Testes para a análise da convergência do método foram realizados e para os casos considerados, os valores iniciais para os eventos podem aumentar o número de iterações necessárias para a solução numérica do problema. Um teste alterando os valores dos parâmetros do último caso foi feito para avaliar se possui sensibilidade paramétrica na solução dos problema.

A solução numérica através do código DIRCOL para os casos descritos por Srinivasan et al. (2003) foi realizada utilizando a formulação multi-fásica com estimativas iniciais para os eventos, e mostrou-se bastante eficaz para a solução dos problemas através do método direto. No apêndice B, é apresentada a formulação no código DIRCOL para o caso 3.

A solução de PCO utilizando a parametrização dos eventos requer a sequência de mudanças entre as fases, fazendo com que este método torne-se de uso restrito. Neste estudo de casos considerou-se problemas com apenas uma variável manipulada, devido a dificuldade de estender esta abordagem para sistemas com múltiplas entradas, apenas analisando fisicamente o problema e considerando as ativações e desativações das restrições ao longo da trajetória.

CAPÍTULO 5

Conclusões e Sugestões

5.1 Conclusões

Nesta dissertação a abordagem algébrico-diferencial da solução de Problemas de Controle Ótimo sujeitos a restrições de desigualdade foi associada com a técnica de parametrização de Eventos desenvolvida originalmente para Problemas Chaveados, com o objetivo de estimar os Eventos utilizando o Método Indireto de solução. Para isto, foi utilizada a determinação de Funções Identificadoras de Fase que expressam a variável de controle analiticamente em cada fase, baseada na condição de otimalidade e na análise física do problema para distinguir seqüências apropriadas de ativação/desativação das restrições, que causam flutuações no índice diferencial das equações.

A geração do sistema equivalente parametrizado composto pelas equações de estado, co-estado e estacionariedade, condições de contorno e continuidade além das diferenciações das variáveis de estado e controle em relação a cada evento, feita através das equações de sensibilidade foram geradas simbolicamente a partir de uma interface específica desenvolvida em Maple® 9.5 para sistemas chaveados. Para um sistema chaveado de pequena dimensão, composto de 3 sub-sistemas com 2 equações em cada um, gera-se um sistema parametrizado correspondente composto de 36 equações. Esta tarefa trabalhosa de geração deste sistema foi eliminada com a implementação do código EVENTS, viabilizando a aplicabilidade desta metodologia para sistemas de maior dimensão.

A atualização de ferramentas automáticas para o estudo de PCOADs foi realizada, unindo códigos que fazem a caracterização das EADs em relação ao índice, resolubilidade e condições iniciais consistentes (INDEX), a implementação simbólica do algoritmo de Gear que reduz o índice e gera o sistema de índice 1 correspondente, feito pelo código ACIG e a geração das condições de otimalidade estendidas, através das equações de Euler-Lagrange, obtidas pela aplicação do Princípio do Mínimo de Pontryagin através do código OTIMA. Estas ferramentas, juntamente com o código EVENTS foram associadas numa interface amigável com o usuário, denominada OpCol.

A solução numérica dos PCOADs foi feita através de um método direto com parametrização nas variáveis de controle e nas variáveis de estado implementados no código DIRCOL utilizando uma formulação multifásica, com estimativa das variáveis adjuntas e dos Eventos. A solução obtida foi comparada com a obtida com um algoritmo implementado em MATLAB® 6.0, que resolve um problema de valor no contorno que corresponde ao sistema parametrizado pelos eventos.

Os PCOADs que compuseram os estudos de casos desta dissertação foram escolhidos para representar casos típicos com flutuação de Índice que pudessem ser associados à metodologia de parametrização utilizada originalmente para os PCO chaveados. A comparação entre os resultados obtidos pelo método direto e pelo método indireto associado à parametrização mostra que nos casos estudados os dois métodos apresentam desempenho satisfatório, ressaltando que questões ligadas ao refinamento da discretização, estimativa das variáveis adjuntas, dos Eventos, do estado e do controle em cada fase no caso da DIRCOL e sensibilidade do método indireto às estimativas iniciais dos Eventos e a dificuldade de obtenção de Funções Identificadoras de Fase analiticamente para sistemas de maior dimensão devem ser cuidadosamente consideradas na solução de novos PCOADs.

Uma contribuição significativa desta Dissertação foi demonstrar através da implementação prática a equivalência entre sistemas híbridos com comportamento contínuo/discreto acoplados e os PCOAD com restrições de desigualdade que causam flutuação no índice diferencial, identificada pioneiramente por Feehery (1998).

5.2 Sugestões

- Avaliar o desempenho dos métodos direto e indireto para sistemas de grande dimensão;
- Estudar algoritmos de aceleração da convergência do método numérico de solução do sistema parametrizado;
- Avaliar o efeito da sequência de ativação e desativação das restrições pré-definida sobre os resultados obtidos;

-
- Aprimorar a interface Opcol desenvolvida, criando alternativas de entrada de dados e de impressão de resultados e promovendo o acoplamento entre as ferramentas que a compõem;
 - Estender o método indireto com parametrização de Eventos para problemas com múltiplas entradas e restrições.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ASCHER, U.; SPITERI, R. Collocation software for boundary-value differential-algebraic equations. *SIAM J. Scient. Comput.*, v. 15, p. 938–952, 1994.
- BACHMANN, R. et al. On methods for reducing the index of differential algebraic equations. *Computers and Chemical Engineering*, v. 14, p. 1271–1273, 1990.
- BARTON, P. I. et al. Dynamic optimization in a discontinuous world. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 37, p. 966–981, 1998.
- BEMPORAD, A.; GIUA, A.; SEATZU, C. An iterative algorithm for the optimal control of continuous-time switched linear systems. *IEEE Computer Society*, 2002.
- BIEGLER, L. T. Solution of dynamic optimization problems by successive quadratic programming and orthogonal collocation. *Computers and Chemical Engineering*, v. 8, p. 243–248, 1984.
- BIEGLER, L. T.; CERVANTES, A. M.; WACHTER, A. Advances in simultaneous strategies for dynamic process optimization. *Computers and Chemical Engineering*, v. 57, p. 575–593, 2002.
- BRYSON, A. E.; HO, Y. C. *Applied optimal control*. [S.l.]: Hemisphere Publishing Washington, 1975.
- CERVANTES, A.; BIEGLER, L. Large scale DAE optimization using a simultaneous NLP formulation. *AIChE Journal*, v. 44, n. 5, p. 1038–1050, 1998.
- CHUDEJ, K.; GÜNTHER, M. Global state space approach for the efficient numerical solution of state-constrained trajectory optimization problems. *Journal of Optimization, Theory and Applications*, v. 103, p. 75–93, 1999.

- CUNHA, J.; MURATA, V. V. *Desenvolvimento de uma ferramenta de caracterização automática e de redução do índice diferencial de modelos matemáticos de processos de engenharia química do tipo algébrico diferencial de valor inicial*. 1999. Relatório de Iniciação Científica, Uberlândia, UFU.
- CUTHREL, J.; BIEGLER, L. T. On the optimization of differential-algebraic process systems. *AIChE Journal*, v. 33, n. 8, p. 1257–1270, 1987.
- CUTHREL, J.; BIEGLER, L. T. Simultaneous solution and optimization of process flowsheets with differential equation models. *Chem. Eng. Res. Des.*, v. 64, p. 341–346, 1987.
- CUTHREL, J.; BIEGLER, L. T. Simultaneous optimization and solution methods for batch reactor control profiles. *Computers Chem. Engng.*, v. 13, p. 49–62, 1989.
- EGERSTEDT, M.; WARDI, Y.; DELMOTTE, F. Optimal control of switching times in switched dynamical systems. 2003.
- ÇELİK, E.; KARADUMAN, E.; BAYRAM, M. Numerical solution of chemical differential-algebraic equations. *Applied Mathematics and Computation*, v. 139, p. 259–264, 2003.
- FEEHERY, W. F. *Dynamic optimization with path constraints*. Tese (Doutorado) — Massachusetts Institute of Technology, 1998.
- FEEHERY, W. F.; BARTON, P. I. Dynamic optimization with state variable path constraints. *Computers Chem. Eng.*, v. 22, n. 9, p. 1241–1256, 1998.
- GEAR, C. W. Differential algebraic equation index transformations. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, v. 9, p. 39–47, 1988.
- GEAR, C. W.; PETZOLD, L. R. Ode method for the solution of differential/algebraic systems. *SIAM J. Numer. Anal.*, v. 21, p. 716–728, 1984.
- GILL, P. E.; MURRAY, W.; SAUNDERS, M. A. *User's Guide for SNOPT 5.3: a Fortran Package for Large-Scale Nonlinear Programming*. 1997. Department of Mathematics, University of California, San Diego.
- GILL, P. E. et al. *User's Guide for NPSOL: a Fortran package for nonlinear programming*. 1986. Department of Mathematics, University of California, San Diego.
- GOMES, E. O. *Abordagem algébrico diferencial na solução de problemas de controle ótimo*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2000.
- LOBATO, F. S. *Abordagem mista para problemas de otimização dinâmica*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2004.
- LOGSDON, J. S.; BIEGLER, L. T. Accurate solution of differential-algebraic optimization problems. *Ind Eng. Chem. Res.*, v. 28, p. 1628–1639, 1989.

- LOGSDON, J. S.; BIEGLER, L. T. Decomposition strategies for large-scale dynamic optimization problems. *Chemical Engineering Science*, v. 47, n. 4, p. 851–864, 1992.
- LYNN, L. L.; PARKIN, E. S.; ZAHRADNIK, R. L. Near-optimal control by trajectory approximation. *IEEC Fundamentals*, v. 9, n. 1, p. 58–63, 1970.
- LYNN, L. L.; ZAHRADNIK, R. L. The use of orthogonal polynomials in the near-optimal control of distributed systems by trajectory approximation. *Int. J. Control*, v. 12, n. 6, p. 1079–1087, 1987.
- MAPLESOFT. *Maple 9.5 - Introductory Programming Guide*. 2003. MapleSoft.
- MODAK, J. L.; LIM, H. C.; TAYLEB, Y. J. General characteristics of optimal feed rate profiles for various fed-batch fermentation process. *Biotechnology and Bioengineering*, XXVIII, p. 1396–1407, 1986.
- MURATA, V. V. *Caracterização simbólica de equações algébrico diferenciais por um sistema de álgebra computacional com aplicações na engenharia química*. Tese (Doutorado) — COPPE/UFRJ, 1996. Rio de Janeiro.
- OBERLE, H. J.; SOTHMANN, B. Numerical computation of optimal feed rates for a fed-batch fermentation model. *Journal of Optimization Theory and Applications*, v. 100, p. 1–13, 1999.
- OH, S. H.; LUUS, R. Use of orthogonal collocation method in optimal control problems. *Int. J. Control*, v. 26, p. 657–673, 1977.
- PANTELIDES, C. The consistent initialization of differential algebraic systems. *SIAM J. SCI. STAT. Compt.*, v. 9, p. 213–231, 1988.
- RENFRO, J. G. *Computational studies in the optimization of systems described by differential-algebraic equations*. Tese (Doutorado) — University of Houston, 1986.
- RENFRO, J. G.; MORDSHEDI, A. M.; ASBJORNSSEN, O. A. Simultaneous optimization solution of systems described by differential-algebraic equations. *Comput. and Chem. Engng.*, v. 11, p. 503–517, 1987.
- SAN, K. Y.; STEPHANOPOULOS, G. A note on the optimality criteria for maximum biomass production in a fed-batch fermenter. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 26, p. 1261–1264, 1984.
- SAN, K. Y.; STEPHANOPOULOS, G. Optimization of fed-batch penicillin fermentation: a case of singular optimal control with state constraints. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 34, p. 72–78, 1989.
- SANTOS, K. G. et al. *Controle ótimo da fermentação alcoólica em reator batelada alimentada*. 2005. Congresso Brasileiro de Engenharia Química - Iniciação Científica.

- SEYWALD, H.; CLIFF, E. M.; WELL, K. H. Range optimal trajectories for an aircraft flying in the vertical plane. *Journal of Guidance, Control and Dynamics*, v. 17, p. 389–398, 1994.
- SRINIVASAN, B.; PALANKI, S.; BONVIN, D. Dynamic optimization of batch processes: I. characterization of the nominal solution. *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, p. 1–26, 2003.
- STRYK, O. v.; SCHLEMMER, M. Optimal control of the industrial robot manutec r3. *International Series of Numerical Mathematics*, v. 1, p. 367–382, 1994.
- STRYK, O. von. *User's Guide for DIRCOL - a Direct Collocation method for the numerical solution of optimal control problems*. 1999. Fachgebiet Simulation und Systemoptimierung (SIM). Technische Universität Darmstadt.
- STRYK, O. von. *Numerical hybrid optimal control and related topics*. 2000. Technische Universität München.
- UNGER, J.; KRONER, A.; MARQUARDT, W. Structural analysis of differential algebraic equations systems: theory and applications. *Computers Chem. Engng*, v. 19, p. 867–882, 1995.
- VASANTHARAJAN, S.; BIEGLER, L. T. Simultaneous strategies for optimization of differential-algebraic systems with enforcement error criteria. *Comput. Chem. Engng.*, v. 14, n. 10, p. 1083–1100, 1990.
- XU, X. *Analysis and design of switched systems*. Tese (Doutorado) — Department of Electric Engineering, University of Notre Dame, 2001.
- XU, X.; ANTSAKLIS, P. J. Optimal control of switched systems based on parameterization of the switching instants. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 49, p. 1–16, 2004.

APÊNDICE A

Manual - OpCol

Neste apêndice é apresentado um manual para o usuário conhecer a interface, a entrada de dados e geração de resultados do *OpCol*. A tela principal do programa é mostrada na Figura A.1. Nesta tela é possível selecionar qual código o usuário deseja utilizar. A seleção é feita clicando no botão de cada código. As Figuras A.2 - A.5 apresentam a tela de entrada do código INDEX, OTIMA, ACIG e EVENTS, respectivamente.



Figura A.1: Tela de Entrada.



Figura A.2: Tela de Entrada do Código INDEX.



Figura A.3: Tela de Entrada do Código OTIMA.

Cada tela possui as seguintes opções:

- *Examples* - Apresenta um banco de dados para cada código.
- *Via own data files* - O usuário pode entrar com um arquivo próprio através desta opção, de acordo com a sintaxe utilizada em cada código (Figura A.6).

Para o código INDEX, a opção *Examples* possui o seguinte banco de dados, descrito em (MURATA, 1996):



Figura A.4: Tela de Entrada do Código ACIG.

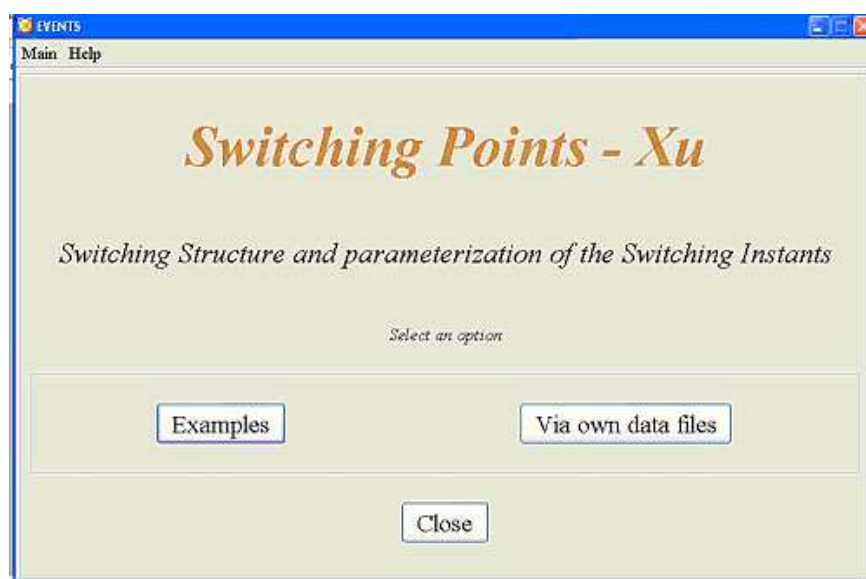


Figura A.5: Tela de Entrada do Código EVENTS.

- Index 0

- 1.Van der Pol - Hairer e Wanner (1993)

- Index 1

- 1.Adsorption column - Von Meien e Biscaia (1994)
- 2.From Pantelides - Pantelides (1988)
- 3.Finite Bath - Mendonça e Biscaia (1995)

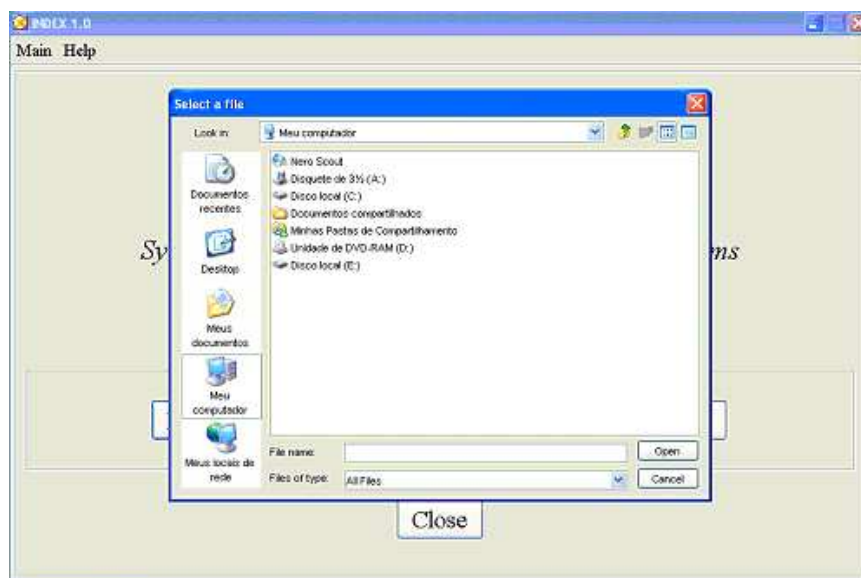


Figura A.6: Entrada via arquivo do usuário.

•Index 2

- 1.From Pantelides - Pantelides (1988)
- 2.Trajectory prescribed path control - Brenan et al (1989)
- 3.CSTR with temperature control - McLellan (1994)
- 4.Condenser with fixed volume - Unger et al (1995)

•Index 3

- 1.CSTR with temperature control - McLellan (1994)
- 2.The pendulum model - Brenan et al (1989)

que pode ser selecionado como mostra a Figura A.7. Ao selecionar um exemplo, ativa-se a tela de opções (Figura A.8).

O código ACIG possui o mesmo banco de dados do código INDEX, mas não apresenta a tela de opções. A tela de seleção de exemplos do código OTIMA é mostrada na Figura A.9.

O código EVENTS apresenta como banco de dados os exemplos descritos em (XU, 2001) e podem ser selecionados como mostra a Figura A.10. Ao selecionar um exemplo, dos códigos ACIG, OTIMA e EVENTS, ativa-se a tela de resultados (Figura A.11).

Para se fazer a geração de resultados, basta clicar no botão *Run*. Para selecionar outro exemplo, basta selecionar a opção *Restart* e para finalizar a interface, seleciona-se o botão *Exit*.

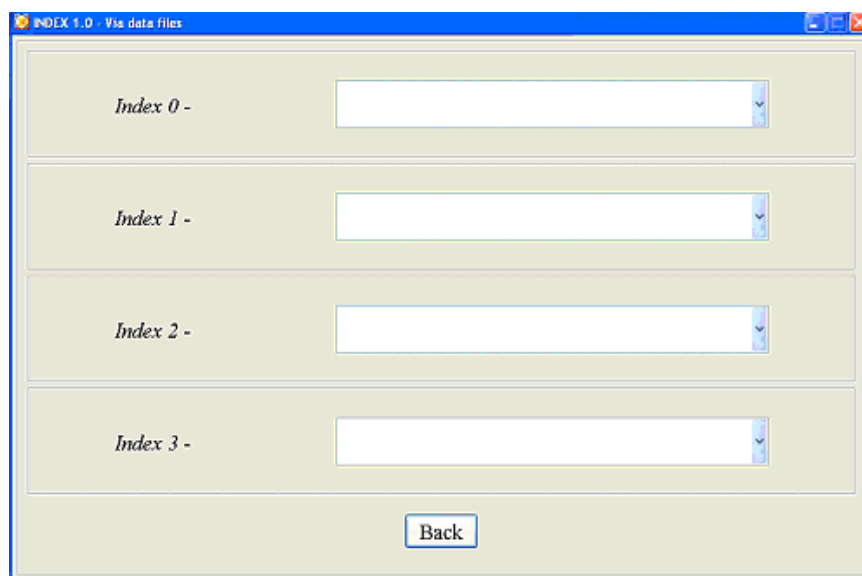


Figura A.7: Tela de seleção - INDEX.

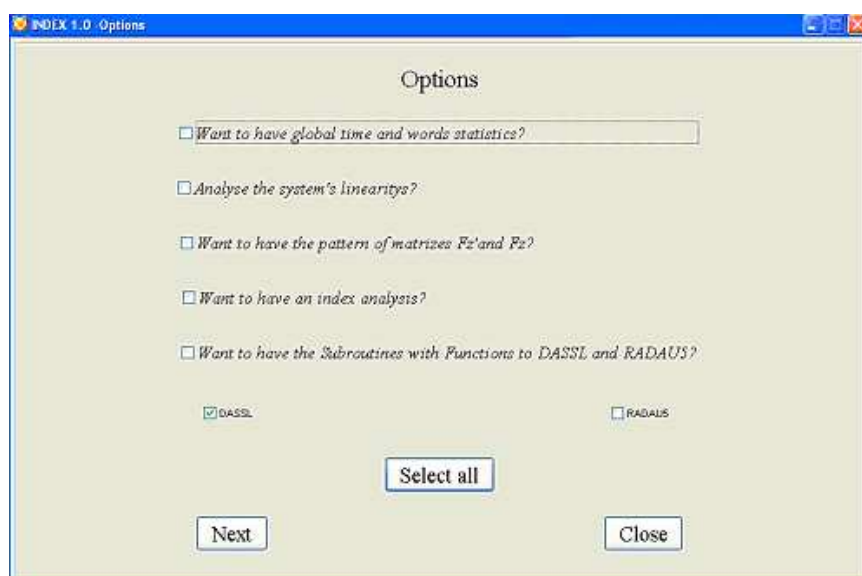


Figura A.8: Tela de Opções.

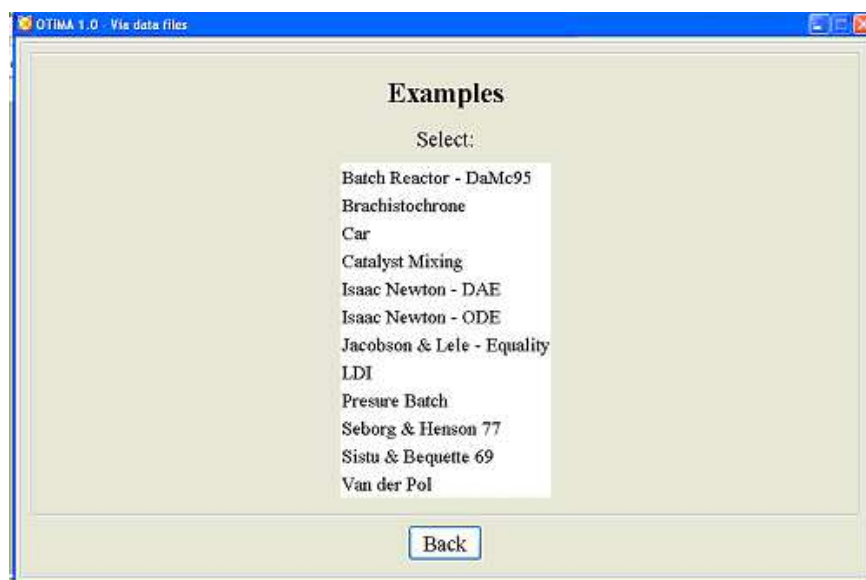


Figura A.9: Tela de seleção - OTIMA.

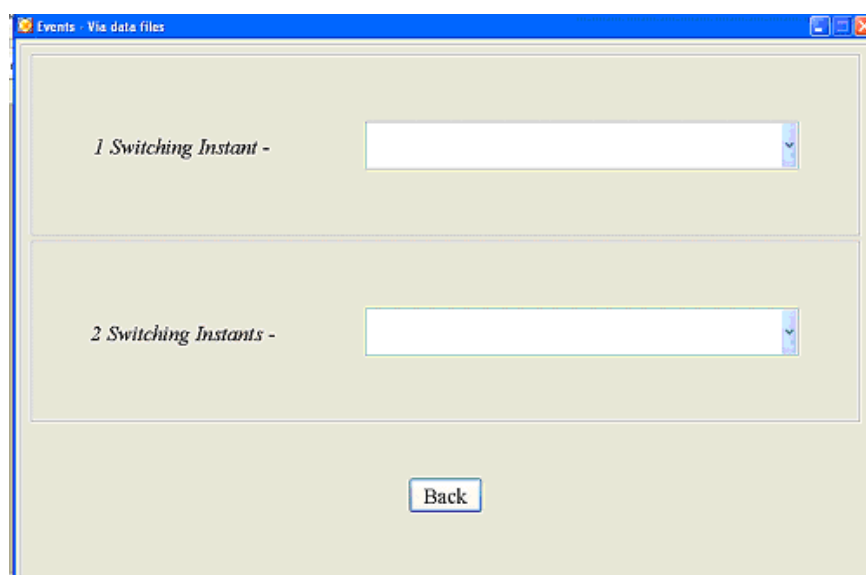


Figura A.10: Tela de seleção - EVENTS.

```

Results

+-----+
+ SWITCHING INSTANTS OF DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC SYSTEMS +
+-----+

Example 2

Subsystems

S[1] = {dx1 = -x1+2*u*x1, dx2 = x2+u*x2}
S[2] = {dx1 = x1-3*u*x1, dx2 = 2*x2-2*u*x2}
S[3] = {dx1 = 2*x1+u*x1, dx2 = -x2+3*u*x2}

Jacobian

1/2*(x1(3)-e^2)^2+1/2*(x2(3)-e^2)^2+Int(1/2*u^2,t = 0 .. 3)

Hamiltonian

H[1] = 1/2*u^2+p1*(-x1+2*u*x1)+p2*(x2+u*x2)

```

Run Close

Figura A.11: Tela de geração de resultados.

APÊNDICE B

DIRCOL

B.1 Aspectos Gerais

O código DIRCOL 2.1 foi desenvolvido por Stryk (1999) e utiliza um método direto de colocação para a discretização das variáveis de controle e de estado do problema de controle ótimo de dimensão infinita, que é transformado numa seqüência de problemas de otimização sujeito a restrições não lineares de dimensão finita (Problema de Programação Não Linear). Este código não exige a aplicação da teoria de Controle Ótimo ou o desenvolvimento das equações diferenciais adjuntas para a sua aplicação. O problema de Programação Não Linear (NLP) resultante pode ser resolvido pelo método de Programação Quadrática Seqüencial implementado no código NPSOL, aplicável a sistemas densos, ou pelo código SNOPT aplicado a sistemas esparsos. O DIRCOL 2.1 pode tratar sistemas multifásicos e problemas com descontinuidades no lado direito das equações diferenciais, além de fornecer estimativas confiáveis das variáveis adjuntas e das funções multiplicadoras das restrições de estado (STRYK, 1999).

A Figura (B.1) mostra esquematicamente a estrutura do código DIRCOL 2.1 . A subrotina USER.F é a subrotina que deve ser fornecida pelo usuário, específica para o problema tratado.

A seguir são descritas as subrotinas que compõem o código DIRCOL e os arquivos de entrada e saída de dados.

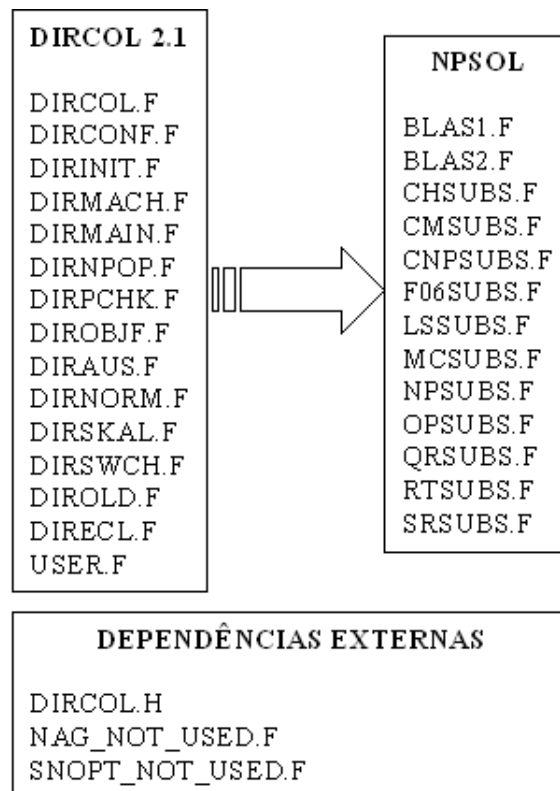


Figura B.1: Estrutura do DIRCOL 2.1.

B.1.1 Subrotinas de entrada do DIRCOL 2.1

DIRCOM Esta subrotina é chamada primeiro pelo programa principal.

USROBJ Esta subrotina informa a função objetivo do problema de controle ótimo reescrita, se necessário, na forma de Mayer.

USRDEQ Esta subrotina calcula o lado direito das equações diferenciais.

USRNBC Calcula as condições no tempo inicial, os pontos de mudança caso existentes e o tempo final.

USRNIC Calcula as funções das restrições de desigualdade não lineares no tempo.

USRNEC Calcula as funções das restrições de igualdade não lineares no tempo.

USRSTV Informa os valores iniciais para o estado, controle e eventos.

USRREV Informa a existência de um sistema de referência para as variáveis de controle e estado.

USRREA Informa a existência de um sistema de referência para as variáveis adjuntas.

B.1.2 Arquivos de saída padrões do DIRCOL 2.1

- DATRES: dados gerais da otimização.
- DATSKA: constantes das transformações lineares usadas para o escalonamento interno de todas as variáveis e funções.
- DATGIT (final): posições normalizadas dos pontos interiores da malha de discretização utilizados, definidos para cada fase no final da otimização.
- GDATX: variáveis de estado discretizadas calculadas (funções cúbicas definidas por partes).
- GDATU: variáveis de controle discretizadas calculadas (funções lineares definidas por partes).
- GDATD: erros locais calculados para verificação de precisão.

B.1.3 Arquivos de saída opcionais do DIRCOL 2.1

- GDATL: valores estimados das variáveis adjuntas (funções lineares definidas por partes).
- GDATM: estimativas das funções multiplicadoras das restrições (funções lineares definidas por partes).
- GDATS: estimativas dos novos pontos de mudanças ou eventos.

B.2 Arquivo de entrada DATLIM

Nesta seção é apresentado o arquivo de entrada DATLIM para o Caso 3 (Reator semi-batelada isotérmico) descrito no Capítulo 4

```

*****
*                               file  DATLIM                               *
* (prescribed values at initial time, final time and switching points, *
*       lower and upper bounds for all variables X, U, P, E)           *
*****
*
* the NX values of X(1) through X(NX) at E(1)=T0, E(M)=TF are
1 , 0, 2.D0
1 , 0, 0.63D0
1 , 0, 0.7D0
*
* the LU values of U(1) through U(LU) at E(1)=T0, E(M)=TF are
0 , 0
0 , 1
*
* 1. switching point E(2):
* -----
* the NX values of X(1) through X(NX) at the switching point are
0 , 1
0 , 1
0 , 1
* the LU values of U(1) through U(LU) at the switching point are
0 , 0
0 , 0
* the lower and upper bounds of the events E(2),...,E(M)=TF are
* -----
*      MIN      ,      MAX
      10.E+0    ,    15.E+0
      18E+0     ,    21.E+0
*
* 1. phase:
* -----

```

```

* the NX lower and upper bounds of the state variables X are
* X(I)MIN      ,      X(I)MAX
  0.0E+0        ,      +2.0E+0
  0.63E+0        ,      +0.63E+0
  0.0E+0        ,      +2.0E+0
*
* the LU lower and upper bounds of the control variables U are
* U(K)MIN      ,      U(K)MAX
  +0.E+0        ,      +0.035E+0
  0.0E+0        ,      +1.0E+0
*
* 2. Phase:
* -----
* the NX lower and upper bounds of the state variables X are
* X(I)MIN      ,      X(I)MAX
  0.0E+0        ,      +2.0E+0
  0.0E+0        ,      +2.0E+0
  1.0E+0        ,      +1.0E+0
*
* the LU lower and upper bounds of the control variables U are
* U(K)MIN      ,      U(K)MAX
  +0.0E+0        ,      +0.0E+0
  0.0E+0        ,      +2.0E+0
*
*2345678901234567890123456789012345678901234567890123456789012

```

B.3 Arquivo de entrada DATDIM

Nesta seção é apresentado o arquivo de entrada DATDIM para o Caso 3 (Reator semi-batelada isotérmico) descrito no Capítulo 4

```

*****
*                                     file  DATDIM                               *
*                                     (dimensions of the parameterized optimal control problem) *
*****
* NAME of the OPTIMAL CONTROL PROBLEM
* -----
*2345678901234567890123456789* (<-- max. length of name)
Concentration
*
* iAction:
* -----
* - OPTIMIZATION using NPSOL ..... (0)
* - a check of all dimensions of feasibility ..... (1)
* - a check of subroutines & computation of starting trajectory . (2)
* or computation of a FEASIBLE TRAJECTORY by
* - objective min-max1 / use NPOPT ..... (3)
* - objective min-max1 / use NPSOL ..... (4)
* - objective min-max2 / use NPSOL ..... (5)
* or actions involving SNOPT:
* - OPTIMIZATION          using NPOPT ..... (6)
* - OPTIMIZATION          using SNOPT (dense Jacobian)..... (7)
* - OPTIMIZATION          using SNOPT (sparse Jacobian)..... (8)
* - FEASIBLE TRAJECTORY using SNOPT (sparse Jacobian)..... (9)
*
* iAction, MajItL = ?,?
*
0, -10
* Optional SQP-Parameters:
* -----
* Optimality Tolerance          EPSOPT = ?

```

```

1.0E-6
*
*   Nonlinear Feasibility Tolerance   EPSNFT = ?
1.0E-6
*
*   Major Print Level (0, 5 or 10)           = ?
5
*
* which SCALINGS and DIFFERENCE APPROXIMATIONS are to be used:
* -----
* iScale:
* -----
* - automatic scaling (but for X, U, E in each phase the same)      (0)
* - read scalings from file 'DATSKA'                                (1)
* - use no scaling                                                    (2)
* - automatic scaling (X, U, E in each phase different)              (3)
* - automatic scaling (X, U in each phase the same, but E different)(4)
*
* iDiff:
* -----
* - forward difference approximations of DIRCOL (default)  (0)
* - internal difference approximation of NPSOL or SNOPT   (-1)
*
* iScale, iDiff = ?,?
0, 0
*
* NUMBER of STATE VARIABLES      ( NX ),
* ----- of CONTROL VARIABLES   ( LU ),
*           of CONTROL PARAMETERS ( LP ),

```

```

* NX, LU, LP = ?
3, 2, 0
*
* NUMBER of PHASES M1 = ?
* -----
2
*
* NUMBERS of NONLINEAR IMPLICIT BOUNDARY CONSTRAINTS
* -----
* NRNLN(1)
* ...
* NRNLN(M1)
0
0
* NUMBERS of NONLINEAR INEQUALITY and EQUALITY CONSTRAINTS
* -----
* in phases 1 through M1:
* NGNLN(1) , NHNLN(1)
* ...
* NGNLN(M1), NHNLN(M1)
0, 1
0, 1
*
* NUMBER of GRID POINTS in phases 1 through M1 ( NG(K) >= 3 ):
* -----
* NG(1)
* ...
* NG(M1)
10
10
*
```

```

* GRID POINTs parameters:
* iStartGrid          | iOptGrid (during optimization):
* -----            | -----
* (starting positions): | - fixed grid points          (0)
* - equidistant        (0) | - movable (collocation error) (1)
* - as in file DATGIT  (1) | - movable (variation)        (2)
* - as Cebysev points  (2) | - movable (no add. eq. cons.) (3)
*
* iStartGrid, iOptGrid = ?,?
0, 0
*
* STARTING VALUES of X(t), U(t), P, and E:
* -----
* - as specified in subroutine USRSTV          (0)
* - as in files GDATX, GDATU (unchanged number of phases) (1)
* - X, U, P as in files GDATX, GDATU and
*   E as specified in USRSTV (changed number of phases) (2)
0
*
* ESTIMATES of the ADJOINT VARIABLES and of
* -----
* the SWITCHING STRUCTURES of state and control constraints
* - are NOT required      (0)
* - are required          (1)
1
* NAMES of the NX state variables:
* -----
* X(1)_Name
* ...
* X(NX)_Name
*2345678901234* (<-- max. length of name)

```

```

Ca(t)
Cb(t)
V(t)
*
* NAMES of the LU control variables:
* -----
* U(1)_Name
* ...
* U(LU)_Name
*2345678901234* (<-- max. length of name)
U(t)
Cc(t)
* the I-th STATE VARIABLE (I = 1,..., NX) is an UNCONSTRAINED ANGLE
* and varies only in [ -PI, PI [ : 1 (if yes) or 0 (if not)
*
0
0
0
* the K-th control variable (K = 1,..., LU) is an UNCONSTRAINED ANGLE
* and varies only in [ -PI, PI [ : 1 (if yes) or 0 (if not)
*
0
0

```

B.4 Subrotina USER.f

Nesta seção é apresentada a subrotina USER.f para o Caso 3 (Reator semi-batelada isotérmico) descrito no Capítulo 4. Esta subrotina fornece informações do problema que será resolvido. Algumas subrotinas não aparecem nesta descrição pois não foram necessárias para este estudo, devendo mantê-las em sua forma original.

```

C - file user.f of problem: SrPB03
SUBROUTINE DIRCOM()
C*****
C Entrada dos parâmetros do modelo
C*****
      IMPLICIT NONE
C-----BEGIN---PROBLEM-----
C**** REAL
      DOUBLE PRECISION
      +      k,Delta,rho,cp,cbin,Tmax,Vmax,ncdes,cbmax
      COMMON /USRCOM/ k,Delta,rho,cp,cbin,Tmax,Vmax,ncdes,cbmax
      k = 0.0482D0
      Delta = -60000.D0
      rho = 900.D0
      cp = 4.2D0
      cbin = 2.D0
      Tmax = 80.D0
      Vmax = 1.D0
      ncdes = 0.6D0
      cbmax = 0.63D0
C-----END---PROBLEM-----
      RETURN
      END

      SUBROUTINE USRSTV( IPHASE, NX, LU, TAU, X, U, IFAIL)
C*****
C Estimativas iniciais para as variáveis de controle e estado, para os
C eventos, tempo inicial e tempo final. Os valores utilizados para o
C tempo inicial, evento e tempo final foram 0, 12, 20, respectivamente.
C*****
      IMPLICIT NONE
C
      INTEGER IPHASE, NX, LU, IFAIL

```

```

C**** REAL
      DOUBLE PRECISION
      +      T,TAU, X(NX), U(LU)
      DOUBLE PRECISION
      +      k,Delta,rho,cp,cbin,Tmax,Vmax,ncdes,cbmax
C
      COMMON /USRCOM/ k,Delta,rho,cp,cbin,Tmax,Vmax,ncdes,cbmax
C
C-----BEGIN---PROBLEM-----
C
      IF (IPHASE .GT. 0) THEN
C
C ----- Initial estimates of X and U at TAU
C
      T =TAU
      X(1) = 1.2D0
      X(2) = 0.5D0
      X(3) = 1.D0
      U(1) = 0.015D0
      U(2) = 0.5D0
C
      ELSE IF (IPHASE .EQ. 0) THEN
C
C ----- Initial estimates of the events E
C
      U(1) = 0.D0
      U(2) = 12.D0
      U(3) = 20.D0
      ELSE IF (IPHASE .LT. 0) THEN
C
C-----END---PROBLEM-----
      RETURN
C --- End of subroutine USRSTV
      END

```

```

      SUBROUTINE USROBJ( NR, NX, LU, LP, XL, UL, P, ENR, FOBJ,
&                      XR, UR, TF, IFAIL)
C*****
C* Função Objetivo do Problema. Neste caso o objetivo é minimizar o tempo
C final (problema de tempo final livre)
C*****
C
      IMPLICIT NONE
C
      INTEGER NX, LU, LP, NR, IFAIL
      DOUBLE PRECISION
C**** REAL
      + ENR, XL(NX), UL(LU), P(LP), FOBJ, XR(NX), UR(LU), TF
C
C-----BEGIN---PROBLEM-----
C
      IF (NR .EQ. 2) THEN
          FOBJ = TF
      END IF
      IF (NR .EQ. 1) THEN
          FOBJ = 0.
      END IF
C-----END---PROBLEM-----
      RETURN
C --- End of subroutine USROBJ
      END

```

```

      SUBROUTINE USRDEQ( IPHASE, NX, LU, LP, X, U, P, T, F, IFAIL)
C*****
C* Lado direito das equações diferenciais
C*****
C
      IMPLICIT NONE
C
      INTEGER IPHASE, NX, LU, LP, IFAIL
C**** REAL
      DOUBLE PRECISION
      +      X(NX), U(LU), P(LP), T, F(NX)
C
      DOUBLE PRECISION
      +      k,Delta,rho,cp,cbin,Tmax,Vmax,ncdes,cbmax
C
      COMMON /USRCOM/ k,Delta,rho,cp,cbin,Tmax,Vmax,ncdes,cbmax
C
C-----BEGIN---PROBLEM-----
C
      F(1) = -k*X(1)*X(2)-U(1)/X(3)*X(1)
      F(2) = -k*X(1)*X(2)+U(1)/X(3)*(cbin-X(2))
      F(3) = U(1)
C
C-----END---PROBLEM-----
C
      RETURN
C --- End of subroutine USRDEQ
      END

```

```

      SUBROUTINE USRNBC( IKIND, NRNLN, NX, LU, LP, XL, UL, P, EL, RB,
1          XR, UR, ER, IFAIL)
C*****
C* Condições de continuidade
C*****
C
      IMPLICIT NONE
C
      INTEGER IKIND, NRNLN, NX, LU, LP, IFAIL
C**** REAL
      DOUBLE PRECISION
+      XL(NX), XR(NX), UL(LU), UR(LU), P(LP), EL, ER, RB(NRNLN)
C
      DOUBLE PRECISION
+      k,Delta,rho,cp,cbin,Tmax,Vmax,ncdes,cbmax
C
      COMMON /USRCOM/ k,Delta,rho,cp,cbin,Tmax,Vmax,ncdes,cbmax
C
C-----BEGIN---PROBLEM-----
C
      IF (IKIND .EQ. -2) THEN
        XR(1) = XL(1)
        XR(2) = XL(2)
        XR(3) = XL(3)
      END IF
      IF (IKIND .EQ. -1) THEN
        UR(2) = 0.6D0
      END IF
C
C-----END---PROBLEM-----
      RETURN
C --- End of subroutine USRNBC
      END

```

```

      SUBROUTINE USRNEC(IPHASE, NHNLN, NEEDH, NX, LU, LP, X, U, P, T, H,
&                      IFAIL)
C*****
C* Restrições de igualdade não lineares
C*****
      IMPLICIT NONE
C
      INTEGER  NHNLN, NX, LU, LP, IPHASE, NEEDH(NHNLN), IFAIL
C**** REAL
      DOUBLE PRECISION
+      T, X(NX), U(LU), P(LP), H(NHNLN)
C
      DOUBLE PRECISION
+      k,Delta,rho,cp,cbin,Tmax,Vmax,ncdes,cbmax
c
      COMMON /USRCOM/ k,Delta,rho,cp,cbin,Tmax,Vmax,ncdes,cbmax
C
C-----BEGIN---PROBLEM-----
      H(1) = U(2)-1/X(3)*(1.4D0-X(1)*X(3))
C-----END---PROBLEM-----
      RETURN
C --- End of subroutine USRNEC
      END

```