

Universidade Federal de Minas Gerais
Escola de Engenharia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica (PPGEE-UFMG)

Lucas Almeida Portela

**O método do *Gradient Sampling* com Comprimento de
Passo Limitado aplicado ao Problema de Determinação das
Condições de Equilíbrio Operacionais de Sistemas
Dinâmicos**

Belo Horizonte
2018

Universidade Federal de Minas Gerais

Escola de Engenharia

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica

**O MÉTODO DO GRADIENT SAMPLING COM COMPRIMENTO
DE PASSO LIMITADO APLICADO AO PROBLEMA DE
DETERMINAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE EQUILÍBRIO
OPERACIONAIS DE SISTEMAS DINÂMICOS**

Lucas Almeida Portela

Dissertação de Mestrado submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Orientador: Prof. Ricardo Hiroshi Caldeira Takahashi

Belo Horizonte - MG

Dezembro de 2018

P843m	<p>Portela, Lucas Almeida. O método do Gradient Sampling com comprimento de passo limitado aplicado ao problema de determinações das condições de equilíbrio operacionais dinâmicos [recurso eletrônico] / Lucas Almeida Portela. - 2018. 1 recurso online (91 f. : il., color.) : pdf. Orientador: Ricardo Hiroshi Caldeira Takahashi.</p> <p>Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Minas Gerais, Escola de Engenharia.</p> <p>Apêndices: f. 47-91. Bibliografia: f. 45-46.</p> <p>Exigências do sistema: Adobe Acrobat Reader.</p> <p>1. Engenharia elétrica - Teses. 2. Otimização combinatória - Teses. 3. Sistemas dinâmicos - Teses. I. Takahashi, Ricardo Hiroshi Caldeira. II. Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia. III. Título.</p>
CDU: 621.3(043)	

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO Nº 1101

**O MÉTODO DO GRADIENT SAMPLING COM COMPRIMENTO DE PASSO
LIMITADO APLICADO AO PROBLEMA DE DETERMINAÇÃO DAS CONDIÇÕES
DE EQUILÍBRIO OPERACIONAIS DE SISTEMAS DINÂMICOS**

Lucas Almeida Portela

DATA DA DEFESA: 19/12/2018

"O Método do Gradient Sampling com Comprimento de Passo Limitado Aplicado ao Problema de Determinação das Condições de Equilíbrio Operacionais de Sistemas Dinâmicos"

Lucas Almeida Portela

Dissertação de Mestrado submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Elétrica.

Aprovada em 19 de dezembro de 2018.

Por:



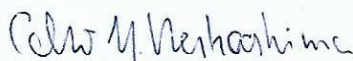
Prof. Dr. Ricardo Hiroshi Caldeira Takahashi
DMAT (UFMG) - Orientador



Prof. Dr. Leonardo Antônio Borges Tôres
DELT (UFMG)



Prof. Dr. Denise Burgarelli Duczmal
Departamento de Matemática (UFMG)



Dr. Celso Yukio Nakashima
(EMBRAER)

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer a Deus, pois é Ele quem sempre me dá forças, saúde e proteção para superar os desafios da vida. É Ele que me rege, me governa e me presenteia com grandes conquistas e, principalmente, pessoas. Entre elas minha família (Sandra, Valdir (*In Memoriam*) e Sarah), meu orientador prof. Dr. Ricardo Hiroshi Caldeira Takahashi, meus mestres (em especial, prof. Dr. Leonardo Torres, prof. Dr. Rodney Saldanha, prof. Dr. Eduardo Mazoni e prof. Luis Aguirre) e minha namorada (Jordana).

Agradeço a Embraer e aos meus colegas de serviço pela confiança, proporcionando desafios técnicos que me realizam profissionalmente, e pelo tempo concedido para a realização desse trabalho.

Posteriormente, com muito carinho, gostaria de agradecer a duas pessoas especiais: minha avó Laura (*In Memoriam*) e meu avô Wilson. Como não me lembrar de tanto carinho, dedicação e, principalmente, amor. Este trabalho, assim como inúmeros outros, carregarão um pouco de vocês dois, devido ao grande aprendizado. Muito Obrigado.

Resumo

Propõe-se, nesse trabalho, restringir (limitar) a direção de busca do método do *Gradient Sampling*, que significa adicionar uma restrição em caixa (*Box Constraints*) a cada problema quadrático desse método. Chama-se de *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado o algoritmo proposto com essa alteração. Demonstra-se matematicamente que tal acréscimo não altera a análise de convergência para um ponto ϵ -estacionário, ou, estacionário, do problema de otimização.

Ao final, testa-se o método proposto (*Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado) ao problema de se determinar as condições de equilíbrio operacionais de sistemas dinâmicos de baixa complexidade, até 40 variáveis de estado. Escolheu-se, como exemplo de sistemas dinâmicos, os sistemas termo-pneumáticos para tal tarefa.

Abstract

In this Master Dissertation, it is proposed to restrict (limit) the search direction of the Gradient Sampling method, which means to add a box constraint to each quadratic optimization sub-problem. It is called Gradient Sampling with Limited Step Length the algorithm proposed with this change and mathematically demonstrated that this modification doesn't change the convergence analysis to an ϵ -stationary, or, stationary, point of the optimization's problem.

Finally, this proposed method, Gradient Sampling with Limited Step Length, is tested for a problem of finding the operational equilibrium condition of low complexity dynamic systems, with up to 40 states' variables. As an example of dynamic systems, therm-pneumatic systems have been chosen for this task.

Lista de Figuras

1.1	Diagrama de Fase do Sistema Dinâmico de Estrutura Variável (1.1)	3
4.1	Curva de Nível do Problema Teste (4.2), destacando os pontos de mínimo locais e o ponto inicial $(1, 00, 0, 36)$ de asterisco (*) vermelho.	28
4.2	Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com os pontos iniciais que convergem para o ponto de mínimo local $(0, 0)$ em vermelho e, em azul, os pontos que convergem para o ponto de mínimo $(1, 2)$ para o método do <i>Gradient Sampling</i> , $KNN_{GS} = 0, 460$	30
4.3	Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com os pontos iniciais que convergem para o ponto de mínimo local $(0, 0)$ em vermelho e, em azul, os pontos que convergem para o ponto de mínimo $(1, 2)$ para o método do <i>Gradient Sampling</i> com Comprimento de Passo Limitado, $KNN_{GSCPL} = 0, 915$	31
4.4	Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com os passos de iterações para o método GS.	32
4.5	Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com os primeiros passos de iterações para o método GS com Comprimento de Passo Limitado.	33
4.6	Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com todos os passos de iterações para o método GS com Comprimento de Passo Limitado.	34
4.7	Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com os pontos iniciais que convergem para o ponto de mínimo local $(0, 0)$ em vermelho e, em azul, os pontos que convergem para o ponto de mínimo $(1, 2)$ para os métodos de <i>Interior-Point</i> ($KNN_{IP} = 0, 675$), <i>Trust Region-Reflective</i> ($KNN_{TRR} = 0, 710$), <i>SQP (Sequential Quadratic Programming)</i> ($KNN_{SQP} = 0, 740$) e <i>Active-Set</i> ($KNN_{AS} = 0, 710$).	35
4.8	Sistema Termo-Pneumático 1 - Constituído de 8 Volumes Adiabáticos, portando 16 variáveis de estado, e 10 orifícios Isentrópicos	37
4.9	Sistema Termo-Pneumático 2 - Constituído de 19 Volumes Adiabáticos, portando 38 variáveis de estado, e 23 orifícios Isentrópicos	40
A.1	Diagrama de Fluxo de um sistema de Termo-Pneumático simples	48
A.2	Representação do Física do Diagrama de Fluxo da figura A.1	48

Lista de Tabelas

4.1	Valores Iniciais dos Parâmetros do Algoritmo 1.	26
4.2	Valores Iniciais dos Parâmetros do Algoritmo 1 - Problema <i>Benchmark</i> . . .	27
4.3	Método <i>Gradient Sampling</i> -Problema <i>BenchMark</i> (4.2)	27
4.4	Método <i>Gradient Sampling</i> com Comprimento de Passo Limitado - Problema <i>BenchMark</i> (4.2)	29
4.5	Valores Iniciais dos Parâmetros do Algoritmo 1 - Sistema 1	38
4.6	Experimento Numérico - Sistema 1	38
4.7	Valor das Variáveis de Estado em Regime Estacionário - Sistema 1	39
4.8	Valores Iniciais dos Parâmetros do Algoritmo 1 - Sistema 2	39
4.9	Experimento Numérico - Sistema 2	41
4.10	Valor das Variáveis de Estado em Regime Estacionário - Sistema 2	42
C.1	Mapeamento de Convergência utilizando a Função Objetivo (4.8)-Sistema Dinâmico 1. Número 1 - Convergência para o ponto de equilíbrio operacional. Número 0 - Não convergência.	64
C.2	Mapeamento de Convergência utilizando o Software Trim (MatLab) - Sistema Dinâmico 1. Número 1 - Convergência para o ponto de equilíbrio operacional. Número 0 - Não convergência.	65
C.3	Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 1	66
C.4	Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 1	67
C.5	Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 1	68
C.6	Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 1	69
C.7	Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 1	70
C.8	Significado dos números na Coluna de Causa de Término do Algoritmo-sistema dinâmico 1	71
C.9	Sistema Dinâmico 1 - Método Interior Point (Pontos Interiores) - Sistema Dinâmico 1	72
C.10	Sistema Dinâmico 1 - Método Trust Region Reflective - Sistema Dinâmico 1	73
C.11	Sistema Dinâmico 1 - SQP (Sequential Quadratic Programming) - Sistema Dinâmico 1	74
C.12	Sistema Dinâmico 1 - Active - Set - Sistema Dinâmico 1	75

C.13 Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Interior-Point) - Sistema Dinâmico 1	76
C.14 Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Interior-Point) - Sistema Dinâmico 1	77
C.15 Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Trust-Region-Reflective) - Sistema Dinâmico 1	78
C.16 Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Trust-Region-Reflective) - Sistema Dinâmico 1	79
C.17 Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Active-Set) - Sistema Dinâmico 1	80
C.18 Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Active-Set) - Sistema Dinâmico 1	81
C.19 Resultado Gradient Sampling com Comprimento de Passo Limitado - Sistema Dinâmico 1	82
C.20 Resultado Gradient Sampling com Comprimento de Passo Limitado - Sistema Dinâmico 1	83
C.21 Mapeamento de Convergência utilizando a Função Objetivo (4.8) - Sistema Dinâmico 2. Número 1 - Convergência para o ponto de equilíbrio operacional. Número 0 - Não convergência.	84
C.22 Mapeamento de Convergência utilizando o Software Trim (MatLab) - Sistema Dinâmico 2. Número 1 - Convergência para o ponto de equilíbrio operacional. Número 0 - Não convergência.	84
C.23 Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 2	85
C.24 Significado dos números na Coluna de Causa de Término do Algoritmo-sistema dinâmico 2	86
C.25 Método Interior Point (Pontos Interiores) - Sistema Dinâmico 2	86
C.26 Sistema Dinâmico 2 - Método Trust Region Reflective - Sistema Dinâmico 2	86
C.27 SQP (Sequential Quadratic Programming) - Sistema Dinâmico 2	87
C.28 Active - Set - Sistema Dinâmico 2	87
C.29 Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Interior-Point) - Sistema Dinâmico 2	88
C.30 Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Trust Region Reflective) - Sistema Dinâmico 2	89
C.31 Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Active Set) - Sistema Dinâmico 2	90
C.32 Resultado Utilizando o Algoritmo GS com Comprimento de Passo Limitado - Sistema Dinâmico 2	91

Lista de Símbolos

Capítulo 2

\mathbb{R}^n	Espaço Euclidiano de dimensão finita n
$\ \cdot\ $	Norma Euclidiana ($\ \cdot\ _2$)
\mathbb{N}	Conjunto dos Números Naturais
C^∞	Classe de funções em que a n -ésima derivada é contínua para todo $n \in \mathbb{N}$
$A \cap B$	Conjunto A interseção com B
$A \cup B$	Conjunto A união com B
$[\alpha, \beta]$	Segmento de reta que inclui os pontos extremos α e β
$B(x; \epsilon)$	Bola fechada de centro x e raio ϵ
$\text{conv } D$	Fecho convexo do conjunto D
$\text{Proj}(x, D)$	Projeção ortogonal do ponto $x \in \mathbb{R}^n$ no conjunto D
$\mathcal{N}_D(x)$	Cone Normal no ponto x em relação ao conjunto D
$\langle x, y \rangle$	Produto interno de $x, y \in \mathbb{R}^n$
$\nabla f(x)$	Gradiente da função f no ponto $x \in \mathbb{R}^n$
$f'(x; d)$	Derivada direcional de f na direção $d \in \mathbb{R}^n$ avaliado no ponto x
C^p	Classe de funções em que a p -ésima derivada é contínua
$f^\circ(x; d)$	Derivada direcional generalizada de f em x na direção $d \in \mathbb{R}^n$
$\partial f(x)$	Subdiferencial de f em x
ξ	Subgradient de f em x
\mathcal{K}	Conjunto compacto

K	Constante de Lipschitz
Ω_f	Conjunto de medida zero dos pontos em \mathbb{R}^n não continuamente diferenciável
$cl D$	Conjunto Fechado D - União entre o conjunto D e os pontos aderentes de D
$\partial_\epsilon^G f(x)$	ϵ -subdiferencial de Goldstein
$\{y_n\}$	Sequência matemática

Capítulos 3 e 4

$\partial_\epsilon^G f(x)$	ϵ -subdiferencial de Goldstein
f	Função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ localmente Lipschitz contínua
D	Conjunto aberto e denso no \mathbb{R}^n onde f é continuamente diferenciável
$\Gamma_\epsilon^{f,m}(x)$	Conjunto de m amostras no conjunto $B(x; \epsilon) \cap D$
$\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x)$	Fecho convexo dos gradientes de f no conjunto $\Gamma_\epsilon^{f,m}(x)$
$dist(x; \mathcal{D})$	Distância do ponto $x \in \mathbb{R}^n$ ao conjunto \mathcal{D}
$\nabla f(x)$	Gradiente de f no ponto $x \in \mathbb{R}^n$
H	Matriz simétrica, definida positiva e limitada
$I_{n \times n}$	Matriz Identidade
η	Coefficiente de Armijo
x^k	Iterando corrente
x^{k+1}	Próximo iterando
ν	Restrição de caixa
λ	Multiplicador de Lagrange
g_k	Vetor de menor norma de $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x)$
$\{y_n\}$	Sequência matemática
$\lim_k \inf y_n$	Limite do ínfimo da sequência y_n

- γ Constante de *Line Search*
- $\#Q$ Cardinalidade do Conjunto Q

Sumário

Agradecimentos	i
Resumo	iii
Abstract	iv
Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	viii
Lista de Símbolos	ix
1 Introdução	1
1.1 Determinação de Condições Operacionais de Sistemas Dinâmicos	1
1.2 O método do <i>Gradient Sampling</i>	2
1.3 Objetivos do Trabalho	3
1.4 Estrutura da Dissertação de Mestrado	3
2 Fundamentos Teóricos de Otimização	5
2.1 Otimização Convexa	6
2.1.1 Conjuntos Convexos	6
2.1.2 Funções Convexas	9
2.2 Otimização Não Convexa	10
2.3 Resumo do Capítulo	13
3 O método do <i>Gradient Sampling</i> (GS) com Comprimento de Passo Limitado	15
3.1 Descrição do Algoritmo GS	15
3.1.1 Construção dos Conjuntos do Método GS	16
3.1.2 Direção de Descida do Método GS	16
3.1.3 Cálculo do passo de busca (<i>Line Search</i>)	17
3.1.4 O Próximo Iterando (x^{k+1})	18
3.2 Direção de Busca Restrita a uma Caixa (<i>Box Constraint</i>)	18
3.3 Método GS com Comprimento de Passo Limitado	19
3.3.1 Algoritmo GS com Comprimento de Passo Limitado	20
3.4 Análise de Convergência	21
3.5 Resumo do Capítulo	24

4	Resultados Numéricos	25
4.1	Problema <i>Benchmark</i>	26
4.2	Determinação de Condições Operacionais de Sistemas Termo - Pneumáticos	30
4.2.1	Variáveis de Otimização x	32
4.2.2	Função Objetivo (Custo) f	35
4.2.3	Definição da Restrição de Caixa ν	36
4.2.4	Sistema Termo - Pneumático 1	37
4.2.5	Sistema Termo-Pneumático 2	38
4.3	Resumo do Capítulo	41
5	Conclusões	43
5.1	Propostas de Continuidade	44
	Referências Bibliográficas	45
A	Fundamentos Teóricos em Física e Matemática de Sistemas Dinâmicos Termo-Pneumáticos	47
A.1	Sistemas Termo-Pneumáticos	47
A.1.1	Orifícios Isentrópicos	47
A.1.2	Reservatório Adiabático	51
A.2	Entradas e Saídas dos Blocos	52
A.2.1	Bloco Orifício	52
A.2.2	Bloco Reservatório	53
A.3	Condições de Equilíbrio de Sistemas Dinâmicos	54
B	Demonstrações do Capítulo 3	57
B.1	Demonstração 1	57
B.2	Demonstração 2	58
B.3	Demonstração 3	59
C	Tabelas de Resultados	63

Capítulo 1

Introdução

1.1 Determinação de Condições Operacionais de Sistemas Dinâmicos

Com o avanço dos métodos numéricos, *hardwares* computacionais e da modelagem matemática de sistemas dinâmicos, tem-se tornado possível a construção de sistemas complexos (no sentido de serem formados por um número substancial de subsistemas, envolvendo centenas ou milhares de variáveis) em ambiente completamente virtual.

Um exemplo, contextualizando o que foi exposto, é a possibilidade de se representar uma aeronave completa por meio de equações algébricas e diferenciais associadas aos seus subsistemas, em um ambiente de simulação apropriado; e.g. *MATLAB/Simulink*; a fim de se determinar automaticamente possíveis condições de falha, por meio de algoritmos desenvolvidos para esse fim.

Entretanto, uma vez que os vários subsistemas são representados por um conjunto expressivo de equações algébrico-diferenciais, contendo um conjunto também expressivo de variáveis, o que ocorre na prática é uma grande dificuldade em simular tais subsistemas a partir de condições iniciais correspondentes às condições operacionais de interesse. Isso se deve à complexidade da tarefa de se encontrar, dentre as muitas variáveis presentes na representação do comportamento do subsistema, um conjunto válido que corresponda a uma condição operacional de equilíbrio. A título de exemplo, se em um subsistema de uma aeronave contendo 100 variáveis de estado, 10 entradas e 20 saídas, arbitra-se os valores de todas as saídas, e de alguns estados, como sendo a especificação de uma condição operacional de interesse, é preciso ainda determinar todas as demais variáveis de forma que as derivadas temporais de todas as variáveis de estado em tempo contínuo sejam nulas, configurando assim uma condição de equilíbrio dinâmico.

Nesse contexto, o problema abordado nesta dissertação de mestrado é o de aplicação de um método de otimização irrestrito (*Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado) que pode ser usado para se determinar automaticamente condições de equilíbrio válidas (todos os valores das variáveis de estado, entradas e saídas), correspondentes a condições operacionais de interesse, para sistemas dinâmicos de ordem relativamente baixa (menos de 40 variáveis de estado), e que representem, em alguma medida, casos tipicamente encontrados em sistemas/subsistemas da aeronave.

Salienta-se que, embora em programas de cálculo numérico bem conhecidos, como *MATLAB/Simulink*, já existam ferramentas para se tentar encontrar condições de equilíbrio

para sistemas representados em diagramas de simulação, tais ferramentas têm se mostrado ineficazes na prática para subsistemas que apresentam certas características matemáticas, e.g. sistemas dinâmicos de estrutura variável (Utkin, 1977), comumente usados na indústria aeronáutica e que são caracterizados por possuírem descontinuidades, em relação as variáveis de estado, nas funções que descrevem o comportamento dinâmico do sistema, resultando na não diferenciabilidade dessas funções em relação a essas variáveis de estado. Provavelmente, isso se deve ao fato de não serem essas ferramentas especializadas, i.e. de terem sido concebidas para tais casos.

1.2 O método do *Gradient Sampling*

Ao definir o problema de se encontrar as condições operacionais de sistemas dinâmicos como um problema de otimização, cujo objetivo é zerar as derivadas temporais de todas as variáveis de estado, é analisada a estrutura de projeto dos modelos matemáticos que representam os subsistemas/sistemas da aeronave. Estes são concebidos via método de modelagem caixa branca, utilizando as leis físico/químicas do processo (processo fenomenológico), para obter as equações algébrico/diferenciais que descrevem o seu comportamento dinâmico. Assim sendo, deve-se levantar as características matemáticas dessas equações, como: continuidade, linearidade/não-linearidade, diferenciabilidade de primeira, segunda ordem, etc. Tais informações são importantes para a escolha do método de otimização.

Ao fim desse processo de análise dos modelos, verifica-se que grande parte dos modelos construídos são classificados como modelos de estrutura variável (Utkin, 1977), portanto não-lineares, com presença de funções não-diferenciáveis e não-convexas. Isso determina que o método de otimização escolhido deve ser capaz de lidar com uma função objetivo:

- não linear;
- não diferenciável;
- não convexa.

Através dessas características, escolheu-se o método do *Gradient Sampling* (Burke et al., 2005) como base para a proposta de um novo método, *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado, para solucionar o problema descrito na Seção 1.1.

A título de exemplo, considera-se o sistema dinâmico descrito através da representação em espaço de estados (apêndice A.3):

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= 3x_2 - x_1 \text{sign}(x_1^2 + x_1x_2), \\ \dot{x}_2 &= -0,7x_1 - 4x_1 \text{sign}(x_1^2 + x_1x_2),\end{aligned}\tag{1.1}$$

onde, $\text{sign}(y)$ é a função que retorna 1 se $y > 0$, -1 se $y < 0$ e 0 se $y = 0$. Logo, um sistema dinâmico de estrutura variável, onde a fronteira que separa as regiões com diferentes dinâmicas tornam-se atratoras, como pode ser visto no diagrama de fase da figura 1.1, fazendo com que os estados dinâmicos ao atingirem essa superfície fiquem presos a ela, comportamento conhecido como *sliding modes*, e não alcancem a condição de equilíbrio do sistema dinâmico.

Métodos de otimização suave podem não convergir para as condições de equilíbrio operacionais dos sistemas de estrutura variável, sendo necessário o estudo de outros métodos

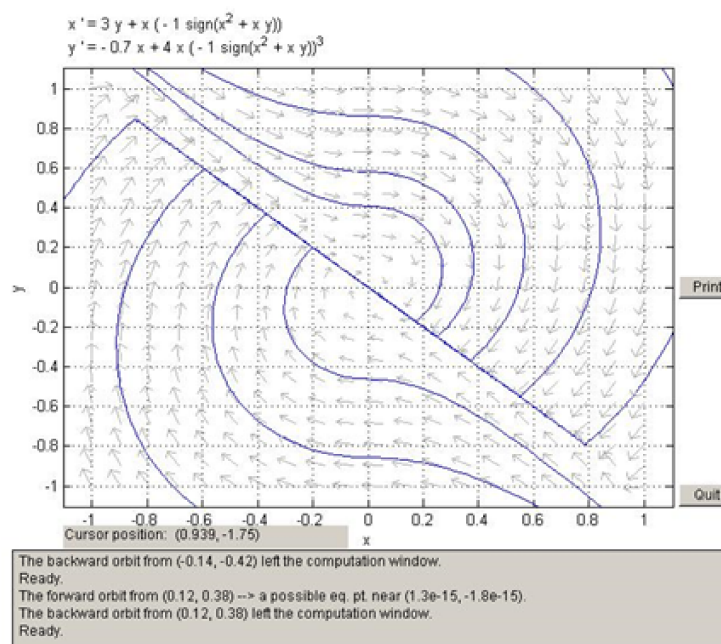


Figura 1.1: Diagrama de Fase do Sistema Dinâmico de Estrutura Variável (1.1)

de otimização, como os métodos que utilizam o subdiferencial ao invés do gradiente, e.g. *Gradient Sampling*.

1.3 Objetivos do Trabalho

Este trabalho tem como objetivos:

- empregar o método de otimização proposto, o *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado, a fim de encontrar os pontos de equilíbrio operacionais de sistemas dinâmicos de ordem relativamente baixa (até 40 variáveis de estado), como exemplo: utilizou-se o sistema Termo-Pneumático descrito no apêndice A;
- desenvolver conhecimentos sólidos em Análise Real, Análise no espaço \mathbb{R}^n , Análise Convexa, Análise Não-Diferenciável, Medida e Integração para realizar as adaptações e modificações necessárias para a análise de convergência e a correta configuração dos parâmetros do Algoritmo 1, fundamentais para o sucesso do primeiro objetivo.

1.4 Estrutura da Dissertação de Mestrado

O trabalho é organizado em cinco capítulos, sendo este uma introdução ao tema da dissertação de mestrado. O Capítulo 2 apresenta uma revisão teórica sobre os fundamentos de otimização convexa e não-convexa para o caso de função objetivo diferenciável e não-diferenciável. Retrata as principais definições, lemas, proposições e teoremas que são alicerces teóricos para o método do *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado.

O Capítulo 3 descreve o método proposto, enfatizando todas as etapas principais do seu desenvolvimento, que culmina no Algoritmo 1, produto final desse trabalho. Ao final do capítulo, realiza-se a demonstração de convergência do método desenvolvido na Seção 3.4.

O Capítulo 4 inicia-se apresentando a comparação do método base, *Gradient Sampling*, com o método pretendido, *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado, em um problema *benchmark* a fim de evidenciar as vantagens deste método sobre aquele. Na seção 4.2 é formulado e resolvido o problema de se determinar as condições de equilíbrio operacionais de sistemas dinâmicos, em particular, de dois sistemas termo-pneumáticos (descritos no apêndice A) de complexidades diferentes: o primeiro sistema com 18 variáveis de estado e o segundo sistema termo-pneumático com 38. Em todas as seções, confronta-se os resultados do método sugerido com os métodos: Pontos Interiores (*Interior Point*); Região de Confiança (*Trust Region*) e Programação Sequencial Quadrática (*SQP-Sequential Quadratic Programming*); já consolidados na literatura de programação não-linear.

Por último, no Capítulo 5, são apresentadas as conclusões do trabalho e as propostas de continuidade. Tais propostas tem por objetivo sanar algumas desvantagens do método base, o *Gradient Sampling*.

Capítulo 2

Fundamentos Teóricos de Otimização

Esse capítulo tem como objetivo abordar as principais definições, lemas, proposições e teoremas matemáticos que são a base teórica do método do *Gradient Sampling* (Burke et al., 2005). A partir dessa parte do texto, será utilizado o acrônimo GS para fazer referência ao método do *Gradient Samplig*.

Inicia-se o capítulo recordando alguns fundamentos elementares da teoria de otimização, que serão utilizados nas duas seções seguintes. Na primeira seção, são abordados os fundamentos da análise convexa e, na Seção 2.2, a análise não-convexa.

O problema de otimização consiste basicamente em identificar num conjunto $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n$ o(s) ponto(s) que faz(em) uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ atingir o seu máximo, ou, mínimo. Atenta-se que nada foi dito sobre a estrutura (topologia) do conjunto viável \mathcal{D} tão pouco quanto a função f . Entretanto, é sabido que o mapeamento f ocorre entre espaços Euclidianos (espaço vetorial real de dimensão finita, onde está definido um produto interno), \mathbb{R}^n e \mathbb{R} , caracterizando um problema mono-objetivo (dimensão do contradomínio igual a um). Portanto, um problema de otimização, para o caso de minimização, pode ser escrito como:

$$\min f(x) \quad \text{sujeito a (s.t.) } x \in \mathcal{D}, \quad (2.1)$$

abrangendo, conforme a estrutura dos termos que compõem o problema, os seguintes ramos:

- otimização discreta, se o conjunto \mathcal{D} é discreto;
- otimização irrestrita, se o conjunto $\mathcal{D} = \mathbb{R}^n$;
- otimização restrita, se o conjunto $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ está contido estritamente em \mathbb{R}^n ;
- otimização suave (*Smooth Optimization*), se $f \in C^\infty$, ou seja, $f \in C^p$ para todo $p \in \mathbb{N}$, em que C^p é o conjunto das funções f no qual as derivadas de ordem p existem e são contínuas em todos os pontos do domínio \mathcal{D} ;
- otimização não-suave (*Nonsmooth Optimization*), onde exige apenas que f seja contínua.

Outras áreas de pesquisa da teoria de otimização surgem do problema (2.1), contudo, este trabalho adentra o campo da Otimização Não-Suave (*NonSmooth Optimization*), apresentando os principais conceitos e teoremas que regem um dos métodos para solução desse tipo de problema, o *Gradient Sampling*. (Burke et al., 2005)

Definição 2.0.1 (Minimizador). *Um ponto $\bar{x} \in \mathcal{D}$ é*

1. *minimizador global de (2.1), se*

$$f(\bar{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in \mathcal{D}; \quad (2.2)$$

2. *minimizador local de (2.1), se existe uma vizinhança U de \bar{x} tal que*

$$f(\bar{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in \mathcal{D} \cap U; \quad (2.3)$$

Realizada uma breve introdução sobre esse capítulo, são aprofundados os conhecimentos sobre otimização convexa e não-convexa.

2.1 Otimização Convexa

A hipótese de convexidade desempenha um papel fundamental na teoria de Otimização, uma vez que as condições necessárias de otimalidade (Izmailov and Solodov, 2014) passam a ser suficientes, i.e. todo ponto estacionário (Izmailov and Solodov, 2014) é solução global do problema (2.1). Portanto, define-se a otimização convexa como:

Definição 2.1.1 (Otimização Convexa). *O problema de otimização (2.1) é convexo, quando o conjunto viável $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ é convexo e a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa no conjunto \mathcal{D} .*

Uma consequência direta dessa definição de otimização convexa é que f é contínua nos pontos interiores (Lima, 2004b) de \mathcal{D} , especificamente, se $\mathcal{D} = \mathbb{R}^n$ então f é contínua. Contudo, há duas nomenclaturas que são alicerces para a definição acima: Conjuntos Convexos e Funções Convexas; sendo tratadas separadamente em subseções.

2.1.1 Conjuntos Convexos

Um conjunto convexo é caracterizado por conter todo o segmento de reta que conecta quaisquer dois pontos desse conjunto. Portanto:

Definição 2.1.2 (Conjunto Convexo). *Um conjunto $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ é dito ser um conjunto convexo se para quaisquer $x \in \mathcal{D}$, $y \in \mathcal{D}$ e $\alpha \in [0, 1]$, tem-se que $\alpha x + (1 - \alpha)y \in \mathcal{D}$. O ponto $\alpha x + (1 - \alpha)y$, onde $\alpha \in [0, 1]$, se chama a combinação convexa de x e y (com parâmetro α).*

Exemplos de conjunto convexos são: o espaço \mathbb{R}^n ; o conjunto vazio, uma bola $B(\cdot; \epsilon) \subset \mathbb{R}^n$ centrada em qualquer ponto do espaço \mathbb{R}^n com raio $\epsilon > 0$.

O termo combinação convexa, apesar de estar relacionado a apenas dois pontos do conjunto \mathcal{D} na definição anterior, pode ser estendido a mais pontos desse conjunto. Dessa forma, define-se:

Definição 2.1.3 (Combinação Convexa de Pontos). *Dados $x^i \in \mathbb{R}^n$, $\alpha_i \in [0, 1]$, $i = 1, \dots, m$, tais que $\sum_{i=1}^m \alpha_i = 1$. O ponto $\sum_{i=1}^m \alpha_i x^i$ chama-se a combinação convexa de pontos x^i com parâmetros α_i , $i = 1, \dots, m$.*

E relaciona-se às duas definições 2.1.2 e 2.1.3 por meio do seguinte teorema:

Teorema 2.1.4. *Um conjunto $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ é convexo se, e somente se, para quaisquer $m \in \mathbb{N}$, $x^i \in \mathcal{D}$ e $\alpha_i \in [0, 1]$, $i = 1, \dots, m$, tais que $\sum_{i=1}^m \alpha_i = 1$, a combinação convexa $\sum_{i=1}^m \alpha_i x^i \in \mathcal{D}$.*

Demonstração. Em (Izmailov and Solodov, 2014), páginas 85 e 86. \square

Entretanto, uma dúvida para fins práticos surge nesse momento: quantos pontos (m) são necessários para descrever qualquer ponto do conjunto convexo \mathcal{D} . E para fins computacionais, podendo citar ganho de performance, qual o menor valor de m que permite realizar tal tarefa com sucesso. À vista disso, é enunciado o teorema de Carathéodory, que diz serem necessários $n + 1$ pontos de \mathcal{D} , onde n é a dimensão do domínio do problema (2.1), para descrever quaisquer de seus pontos.

Teorema 2.1.5 (Teorema de Carathéodory). *Seja $x \in \mathbb{R}^n$ uma combinação convexa de pontos do conjunto $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$. Então, existem $x^i \in \mathcal{D}$ e $\alpha_i \in \mathbb{R}_+$, $i = 1, \dots, n + 1$, tais que $x = \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i x^i$, $\sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i = 1$. Se \mathcal{D} é convexo então $x \in \mathcal{D}$.*

Demonstração. Em (Izmailov and Solodov, 2014), páginas 87 a 90. Já se \mathcal{D} é convexo aplica-se o teorema anterior 2.1.4. \square

Como essa seção destina-se a enunciar as principais definições e teoremas que sustentam teoricamente o método do *Gradient Sampling*, há necessidade na Seção 3.1.1 de contruir conjuntos convexos a partir de um número finito de pontos. A ideia é basicamente oposta ao teorema de Carathéodory, pois sabe-se quais são os pontos geradores e necessita-se saber quais são os pontos gerados a partir da combinação convexa desses pontos. Sendo mais formal, estender-se-á essa ideia para qualquer conjunto $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^n$, não necessitando que ele seja finito, por meio da seguinte definição.

Definição 2.1.6 (Fecho Convexo). *Seja $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto qualquer. O fecho convexo de \mathcal{G} , denotado $\text{conv } \mathcal{G}$, é o menor conjunto convexo em \mathbb{R}^n que contém \mathcal{G} (ou, equivalentemente, a interseção de todos os conjuntos convexos em \mathbb{R}^n que contêm \mathcal{G}).*

Nota-se que o fecho convexo de \mathcal{G} é o conjunto de todas as combinações convexas de pontos de \mathcal{G} ((Izmailov and Solodov, 2014), página 90).

Da seguinte proposição:

Proposição 2.1.7 (Conjunto Limitado e Fechado). *Se $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto compacto, então $\text{conv } \mathcal{G}$ é compacto;*

tem-se que, sendo \mathcal{G} um conjunto finito de pontos, portanto compacto (Lima, 2004a), implica no $\text{conv } \mathcal{G}$ ser compacto.

Essa proposição 2.1.7, atribui ao conjunto $\text{conv } \mathcal{G}$ propriedades importantes, como: convexidade e compacidade; indispensáveis para a descrição do método proposto no Capítulo 3 (*Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado). Por exemplo, definindo o operador projeção ortogonal ($\text{Proj}(x, \mathcal{K})$) como o(s) elemento(s) de \mathcal{K} mais próximos de $x \in \mathbb{R}^n$, ou seja:

$$k^0 \in \text{Proj}(x, \mathcal{K}) \Rightarrow \|k^0 - x\| \leq \|k - x\|, \forall k \in \mathcal{K}; \quad (2.4)$$

quando \mathcal{K} é compacto e convexo o operador projeção está bem definido (existe uma projeção para qualquer ponto $x \in \mathbb{R}^n$ ao conjunto \mathcal{K}) e, pela convexidade, esta projeção é única. É o que diz o seguinte teorema:

Teorema 2.1.8 (Teorema da Projeção). *Seja $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e fechado. Então, $\forall x \in \mathbb{R}^n$, a projeção de x sobre \mathcal{K} , denotada por $Proj(x, \mathcal{K})$, existe e é única. Além disso, $k^0 = Proj(x, \mathcal{K})$ se, e somente se,*

$$k^0 \in \mathcal{K}, \quad \langle x - k^0, k - k^0 \rangle \leq 0 \quad \forall k \in \mathcal{K}. \quad (2.5)$$

Demonstração. Em (Izmailov and Solodov, 2014), páginas 105 e 106. \square

O Teorema da projeção é utilizado diretamente para a demonstração do lema técnico 3.4.1, utilizado para a prova de convergência do método GS e GS com Comprimento de Passo Limitado.

A seguir são enunciados dois teoremas importantes sobre conjuntos convexos, que dizem existir um hiperplano separando os conjuntos convexos \mathcal{D}_1 e $\mathcal{D}_2 \in \mathbb{R}^n$, caso sejam disjuntos.

Teorema 2.1.9 (Teorema de Separação). *Sejam $\mathcal{D}_1 \subset \mathbb{R}^n$ e $\mathcal{D}_2 \subset \mathbb{R}^n$ conjuntos convexos não-vazios tais que $\mathcal{D}_1 \cap \mathcal{D}_2 = \emptyset$. Então existem $a \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ e $c \in \mathbb{R}$ tais que*

$$\langle a, x^1 \rangle \leq c \leq \langle a, x^2 \rangle \quad \forall x^1 \in \mathcal{D}_1, \quad \forall x^2 \in \mathcal{D}_2. \quad (2.6)$$

Demonstração. Em (Izmailov and Solodov, 2014), páginas 115 e 116. \square

Teorema 2.1.10 (Teorema de Separação Estrita). *Sejam $\mathcal{D}_1 \subset \mathbb{R}^n$ e $\mathcal{D}_2 \subset \mathbb{R}^n$ conjuntos convexos, fechados e não-vazios. Suponhamos que um deles também seja limitado (logo, compacto). Então $\mathcal{D}_1 \cap \mathcal{D}_2 = \emptyset$ se, e somente se, existem $a \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ e $c \in \mathbb{R}$ tais que*

$$\langle a, x^1 \rangle < c < \langle a, x^2 \rangle \quad \forall x^1 \in \mathcal{D}_1, \quad \forall x^2 \in \mathcal{D}_2. \quad (2.7)$$

Demonstração. Em (Izmailov and Solodov, 2014), páginas 116 a 118. \square

Apresentados os principais tópicos de conjuntos convexos, já é possível apresentar alguns teoremas para o problema (2.1), fazendo algumas considerações sobre a estrutura da função f e mantendo o conjunto \mathcal{D} convexo. Antes disso, é apresentada a definição para Cone Normal:

Definição 2.1.11 (Cone Normal). *Sejam $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e $\bar{g} \in \mathcal{G}$. O cone normal (cone de direções normais) no ponto \bar{g} em relação ao conjunto \mathcal{G} é dado por*

$$\mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\bar{g}) = \{w \in \mathbb{R}^n \mid \langle w, g - \bar{g} \rangle \leq 0 \quad \forall g \in \mathcal{G}\}. \quad (2.8)$$

Teorema 2.1.12 (Condição Necessária de Primeira Ordem). *Sejam $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e compacto e $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável (Lima, 2004a) no ponto $\bar{g} \in \mathcal{G}$, minimizador local de f no conjunto \mathcal{G} , então*

$$\langle \nabla f(\bar{g}), g - \bar{g} \rangle \geq 0 \quad \forall g \in \mathcal{G}, \quad (2.9)$$

ou, equivalentemente,

$$-\nabla f(\bar{g}) \in \mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\bar{g}). \quad (2.10)$$

Demonstração. Em (Izmailov and Solodov, 2014), páginas 76 e 77. \square

O teorema 2.1.12 é utilizado para provar que a estratégia de busca em linha (*Line Search* 3.1.3), utilizada no método do *Gradient Sampling*, atende a condição de Armijo (Nocedal and Wright, 2006).

2.1.2 Funções Convexas

Para finalizar a breve exposição sobre a teoria de otimização convexa, é necessário falar sobre as funções convexas.

Definição 2.1.13 (Função Convexa). *Uma função $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$, onde $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo, é dita ser convexa em \mathcal{D} quando dados dois pontos quaisquer, $x \in \mathcal{D}$ e $y \in \mathcal{D}$, e $\alpha \in [0, 1]$, tem-se:*

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y). \quad (2.11)$$

Ou, equivalentemente, o epígrado dessa função E_f (Izmailov and Solodov, 2014) é um conjunto convexo em $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \cong \mathbb{R}^{n+1}$.

Por consequência, define-se a função côncava no conjunto convexo \mathcal{D} , como:

Definição 2.1.14 (Função Côncava). *Se $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo, dizemos que $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função côncava em \mathcal{D} , quando a função $(-f)$ é convexa em \mathcal{D} .*

A seguir é apresentado um teorema que diz que todo problema de otimização (2.1) convexo, em que o conjunto viável \mathcal{D} é convexo e aberto, tem a função objetivo f contínua.

Teorema 2.1.15 (Continuidade de Funções Convexas). *Sejam $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e aberto e $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função convexa. Então f é localmente Lipschitz-contínua em \mathcal{D} . Em particular, f é contínua em \mathcal{D} .*

Demonstração. Em (Izmailov and Solodov, 2014), páginas 148 a 151. \square

O teorema 2.1.15 é base importante para a Otimização Convexa Não Diferenciável (Clarke, 1983), (Ruszczynski, 2006), onde o gradiente de f não está definido em todos os pontos do domínio \mathcal{D} (convexo). Entretanto, a derivada direcional de f na direção $d \in \mathbb{R}^n$ avaliada no ponto $x \in \mathcal{D}$, $f'(x; d)$, está definida como:

$$f'(x; d) = \lim_{t \downarrow 0} \frac{f(x + td) - f(x)}{t} \quad (2.12)$$

Por fim, é descrito o teorema da minimização convexa, onde a condição no teorema 2.1.12 passa a ser uma condição suficiente, ou seja, se atendida, o ponto é um minimizador global de f em \mathcal{D} .

Teorema 2.1.16 (Teorema de Minimização Convexa). *Sejam $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função convexa em \mathcal{D} (2.1.13). Então, todo minimizador local em um problema de minimização convexo é global. Além disso, o conjunto de minimizadores é convexo.*

Se f é estritamente convexa (considera-se apenas a desigualdade estrita na equação (2.11)), o minimizador é único.

Demonstração. Em (Izmailov and Solodov, 2014), páginas 79 e 80. \square

2.2 Otimização Não Convexa

Inicia-se essa seção com as seguintes definições:

Definição 2.2.1 (Função Lipschitz Contínua). *Seja $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função definida em $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^m$. A função f é Lipschitz contínua em \mathcal{X} se existir uma constante $K > 0$ tal que:*

$$\|f(y) - f(x)\| \leq K\|y - x\|, \quad \forall x, y \in \mathcal{X}. \quad (2.13)$$

A constante K é chamada de constante de Lipschitz.

Definição 2.2.2 (Função Localmente Lipschitz Contínua). *Seja $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função definida em $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^m$. f é localmente Lipschitz contínua em \mathcal{X} se $\forall x \in \mathcal{X}$, existir uma vizinhança U_x de x , tal que $f|_{U_x}$ (f restrita a U_x) é uma função Lipschitz contínua em U_x .*

2.2.1. Ou seja,

$$\exists K_x > 0 \text{ tal que } \|f(y) - f(z)\| \leq K_x\|y - z\|, \quad \forall y, z \in U_x. \quad (2.14)$$

A otimização tratada nessa seção para o problema (2.1) impõe que:

- $\mathcal{D} = \mathbb{R}^n$ (conjunto convexo);
- $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ um função localmente Lipschitz contínua 2.2.2.

Não se admite, ou, não se pode inferir, a partir das considerações acima que a função f do problema (2.1) seja:

- convexa;
- diferenciável;
- de classe \mathcal{C}^p para $p \geq 1$, inclusive com $p = \infty$;

apesar da teoria mostrada nessa seção ser aplicável a esses tipos de estruturas para f .

Por esse motivo, a forma geral do problema (2.1) abrange problemas de otimização não-convexos e não-diferenciáveis, os quais requerem novos conceitos para a sua análise. Por exemplo, no problema em que f é diferenciável, para o decréscimo dessa função a partir de um ponto $x \in \mathbb{R}^n$, basta tomar a direção de descida (Izmailov and Solodov, 2012) igual ao sentido oposto do gradiente de $f(x)$, ou seja, $-\nabla f(x)$, e procurar o ponto em que $f(x - \alpha \nabla f(x)) < f(x)$. Para o caso não-diferenciável, $\nabla f(x)$ não está definido, sendo necessário aplicar o conceito de derivada direcional generalizada e subdiferencial.

Definição 2.2.3 (Clarke - Derivada Direcional Generalizada). *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função localmente Lipschitz contínua no ponto $x \in \mathbb{R}^n$. A derivada direcional generalizada de f em x na direção $d \in \mathbb{R}^n$ é definida por*

$$f^\circ(x; d) = \limsup_{y \rightarrow x, t \downarrow 0} \frac{f(y + td) - f(y)}{t} \quad (2.15)$$

Definição 2.2.4 (Clarke-Subdiferencial). *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função localmente Lipschitz contínua no ponto $x \in \mathbb{R}^n$. Então o subdiferencial de f em x é o conjunto $\partial f(x)$ de vetores $\xi \in \mathbb{R}^n$ de modo que*

$$\partial f(x) = \{\xi \in \mathbb{R}^n \mid f^\circ(x; d) \geq \xi^\top d \quad \forall d \in \mathbb{R}^n\}. \quad (2.16)$$

Cada vetor $\xi \in \partial f(x)$ é chamado subgradiente de f em x .

A seguir são apresentados os principais teoremas da análise não-convexa e não-diferenciável que são utilizados para prova de convergência do método do *Gradient Sampling* (Burke et al., 2002) e do método proposto *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado. O teorema 2.2.5 diz que $|f^\circ(x; d)|$ é limitado pela constante de Lipschitz K e $\|d\|$. Consequentemente, o conjunto $\partial f(x)$ também será limitado. A importância de se ter o subdiferencial limitado é ser possível obter os subgradientes ($\xi \in \partial f(x)$) numericamente, além de $|f(x + \xi)| < \infty$, ou seja, limitado.

Teorema 2.2.5. *Seja f localmente Lipschitz contínua no ponto x com a constante K (constante de Lipschitz). Então a função $d \mapsto f^\circ(x; d)$ é positivamente homogênea e subaditiva em \mathbb{R}^n , com*

$$|f^\circ(x; d)| \leq K \|d\|. \quad (2.17)$$

Demonstração. Em (Bagirov et al., 2014), páginas 62 e 63. □

Teorema 2.2.6. *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função localmente Lipschitz contínua no ponto $x \in \mathbb{R}^n$ com a constante de Lipschitz K . Então o subdiferencial $\partial f(x)$ é um conjunto não-vazio, convexo e compacto de modo que*

$$\partial f(x) \subset B(0; K), \quad (2.18)$$

onde $B(0; K)$ é uma bola com centro na origem $0 \in \mathbb{R}^n$, do espaço Euclidiano, e raio K , ou seja:

$$B(0; K) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - 0\| < K\}. \quad (2.19)$$

Demonstração. Em (Bagirov et al., 2014), páginas 64 e 66. □

O teorema 2.2.7 trata a derivada direcional generalizada por uma função suporte (Clarke, 1983) do conjunto $\partial f(x)$, já que este é, pelo teorema anterior (2.2.6), um conjunto compacto e convexo.

Teorema 2.2.7. *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função localmente Lipschitz contínua no ponto $x \in \mathbb{R}^n$, então*

$$f^\circ(x; d) = \max\{\xi^\top d \mid \xi \in \partial f(x)\}, \quad \forall d \in \mathbb{R}^n. \quad (2.20)$$

Demonstração. Em (Bagirov et al., 2014), página 66. □

Como abordado anteriormente, a teoria desenvolvida pela análise não-diferenciável não pode invalidar a análise diferenciável. Pelo contrário, esta deve ser um caso específico daquela, como tratado no seguinte teorema.

Teorema 2.2.8. *Se f é continuamente diferenciável no ponto x , então:*

$$\partial f(x) = \{\nabla f(x)\}. \quad (2.21)$$

Demonstração. Em (Bagirov et al., 2014), páginas 67 e 68. \square

Teorema 2.2.9. *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função localmente Lipschitz contínua no ponto $x \in \mathbb{R}^n$, então*

$$\partial f(x) = \text{conv}\{\xi \in \mathbb{R}^n \mid \exists \{x_i\} \subset \mathbb{R}^n \setminus \Omega_f \text{ tal que } \{x_i\} \rightarrow x \text{ e } \nabla f(x_i) \rightarrow \xi\}, \quad (2.22)$$

onde Ω_f é um conjunto de medida zero (Isnard, 2013) dos pontos em \mathbb{R}^n não diferenciáveis.

Demonstração. Em (Bagirov et al., 2014), páginas 71 e 72. \square

O teorema 2.2.9 retrata o subdiferencial de f no ponto x como o fecho convexo dos subgradientes, que são obtidos como limites das $(\nabla f(x_i))$ quando $x_i \rightarrow x$.

A próxima definição (2.2.10) é importante do ponto de vista computacional, pois permite obter uma aproximação do conjunto $\partial f(x)$ a partir da vizinhança de x . Utiliza-se essa definição, juntamente com as propriedades do teorema 2.2.11 para provar a convergência do método do *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado, a fim de atender ao teorema 2.2.15.

Definição 2.2.10 (Diferencial de Goldstein). *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função localmente Lipschitz contínua no ponto $x \in \mathbb{R}^n$ e $\epsilon > 0$. Então o ϵ -subdiferencial de Goldstein é o conjunto:*

$$\partial_\epsilon^G f(x) = \text{cl conv} \{\partial f(y) \mid y \in B(x; \epsilon)\}; \quad (2.23)$$

onde $\text{cl } \mathcal{D}$ é o conjunto dos pontos aderentes (Lima, 2004a) ao conjunto \mathcal{D} .

Teorema 2.2.11. *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função localmente Lipschitz contínua no ponto $x \in \mathbb{R}^n$ com a constante de Lipschitz K . Então*

1. $\partial_0^G f(x) = \partial f(x)$
2. Se $\epsilon_1 \leq \epsilon_2$, então $\partial_{\epsilon_1}^G f(x) \subset \partial_{\epsilon_2}^G f(x)$
3. $\partial_\epsilon^G f(x)$ é um conjunto não-vazio, convexo e compacto de modo que $\partial_\epsilon^G f(x) \subset B(0; K)$.

Demonstração. Em (Bagirov et al., 2014), página 74. \square

Como no teorema 2.2.9, pode-se obter o conjunto $\partial_\epsilon^G f(x)$, como:

Teorema 2.2.12. *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função localmente Lipschitz contínua no ponto $x \in \mathbb{R}^n$. Então,*

$$\partial_\epsilon^G f(x) = \text{cl conv}\{\xi \in \mathbb{R}^n \mid \exists \{y_i\} \subset \mathbb{R}^n \setminus \Omega_f \text{ tal que } y_i \rightarrow y, \nabla f(y_i) \rightarrow \xi \text{ e } y \in B(x; \epsilon)\}. \quad (2.24)$$

Demonstração. Em (Bagirov et al., 2014), página 74. \square

Uma consequência direta da definição 2.2.10 é o seguinte resultado.

Teorema 2.2.13. *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função localmente Lipschitz contínua no ponto $x \in \mathbb{R}^n$. Então, para qualquer $\varepsilon \geq 0$, tem-se*

$$\partial f(y) \subset \partial_\varepsilon^G f(x) \quad \forall y \in B(x; \varepsilon). \quad (2.25)$$

Demonstração. Em (Bagirov et al., 2014), página 75. □

O teorema do valor médio para o caso não diferenciável é:

Teorema 2.2.14 (Teorema do Valor Médio). *Seja $x, y \in \mathbb{R}^n$ de modo que $x \neq y$, dada a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ localmente Lipschitz contínua em um conjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^n$, tal que o segmento de linha $[x, y] \subset U$. Então, existe um ponto $z \in (x, y)$ em que*

$$f(y) - f(x) \in \partial f(z)^\top (y - x). \quad (2.26)$$

Demonstração. Em (Bagirov et al., 2014), páginas 81 a 83. □

Destaca-se que o teorema 2.2.14 é uma generalização para o caso diferenciável, consequência direta do teorema 2.2.8.

Para concluir a seção, define-se a condição necessária de primeira ordem para o problema (2.1).

Teorema 2.2.15 (Condição Necessária de Primeira Ordem). *Seja a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ localmente Lipschitz contínua com mínimo em x , então*

$$0 \in \partial f(x). \quad (2.27)$$

O ponto $x \in \mathbb{R}^n$ é chamado de ponto estacionário.

Demonstração. Em (Bagirov et al., 2014), página 81. □

2.3 Resumo do Capítulo

Apresenta-se nesse capítulo as principais definições, lemas, proposições e teoremas que fundamentam o método do *Gradient Sampling*, os quais serão citados no capítulo 3 com o intuito de justificar as estratégias adotadas para construção do algoritmo 1.

Capítulo 3

O método do *Gradient Sampling* (GS) com Comprimento de Passo Limitado

A seção atual detalha o algoritmo utilizado para determinar as condições de equilíbrio operacionais de sistemas dinâmicos, seção 1.1, estabelecendo a relação com os fundamentos teóricos abordados no capítulo 2.

3.1 Descrição do Algoritmo GS

O método *Gradient Sampling*, proposto em (Burke et al., 2002), constitui o núcleo do algoritmo desenvolvido e é indicado para problemas de otimização irrestritos, não-convexos e não continuamente diferenciáveis. Entretanto, é necessário que a função objetivo $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ do problema:

$$\min f(x) \quad \text{s.t. } x \in \mathbb{R}^n; \quad (3.1)$$

seja localmente Lipschitz contínua e continuamente diferenciável (Lima, 2004a) em um subconjunto $D \subset \mathbb{R}^n$, aberto e denso, para fins da análise na teoria de otimização. (Burke et al., 2005) afirma que o método pode ser utilizado para qualquer função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ contínua em que o conjunto dos pontos não diferenciáveis D_0 possui medida zero (Isnard, 2013); e.g. o conjunto finito de pontos discretos na reta (\mathbb{R}) possui medida zero. Esse tipo de função está presente em várias aplicações práticas, como, por exemplo, o projeto do controlador de baixa ordem desenvolvido em (Burke et al., 2005), em que f não é diferenciável nos pontos dos minimizadores locais do problema (3.1). Outro exemplo é a função $f = |x|$ com $x \in \mathbb{R}$, que, apesar de Lipschitziana ($||x| - |y|| \leq |x - y|$ - consequência direta da Desigualdade triangular), não é diferenciável no ponto $x^* = 0$, minimizador do problema (3.1). Além disso, aplicando o método GS há garantia de que, sob a hipótese de que f seja limitada, haverá convergência para o ponto estacionário do problema (Kiwiel, 2007).

A premissa de $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ser localmente Lipschitz contínua permite usar a definição de ϵ -subdiferencial de Goldstein, conforme definição 2.2.10, para definir o conjunto:

$$G_\epsilon^f(x) = \text{cl conv } \{\nabla f(y) | y \in B(x; \epsilon) \cap D\}. \quad (3.2)$$

Nota-se facilmente que $G_\epsilon^f(x) \subseteq \partial_\epsilon^G f(x)$ (teoremas 2.2.8 e 2.2.12) possibilitando a

aproximação do subdiferencial de Clark ($\partial f(x)$) no ponto $x \in \mathbb{R}^n$ como sendo:

$$\partial f(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} G_\epsilon^f(x). \quad (3.3)$$

Lembrando que um ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ é um ponto ϵ -estacionário da função f se $0 \in \partial_\epsilon^G f(x^*)$ e estacionário se $0 \in \partial f(x)$ (Teorema 2.2.15).

De maneira geral, para encontrar os pontos estacionários da função f , o método *Gradient Sampling* consiste em primeiramente se arbitrar $\epsilon > 0$ e buscar iterativamente o ponto x_ϵ^* em que $0 \in G_\epsilon^f(x_\epsilon^*)$ e, conseqüentemente, $0 \in \partial_\epsilon^G f(x_\epsilon^*)$. Reduz-se o valor de ϵ para a próxima iteração, i.e. $\epsilon_{k+1} = \mu\epsilon$ para $\mu \in (0, 1)$, e repete-se o processo até $\epsilon \leq \eta$ para $\eta \geq 0$, ou, o número de iterações atingir o valor máximo estipulado pelo usuário. Apesar de tal ideia ser abrangente, ela estimula alguns tópicos que são abordados em subseções seguintes.

3.1.1 Construção dos Conjuntos do Método GS

A principal questão, nesse momento, é como construir um subconjunto de $G_\epsilon^f(x^k)$ que o represente no ponto corrente x^k , uma vez que é impossível avaliar todos os gradientes f nos pontos do conjunto $B(x^k; \epsilon) \cap D$. Por esse motivo, escolhe-se independentemente e uniformemente m pontos do conjunto aberto $B(x^k; \epsilon) \cap D$, chamando-os de:

$$\Gamma_\epsilon^{f,m}(x^k) = \{x^{k,0}, x^{k,1}, x^{k,2}, \dots, x^{k,m}\}, \quad x^{k,0} = x^k; \quad (\text{ponto corrente}) \quad (3.4)$$

e avalia-se os gradientes da função f nesses pontos. Então, define-se o conjunto:

$$\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k) = \text{conv} \{\nabla f(x^{k,0}), \nabla f(x^{k,1}), \nabla f(x^{k,2}), \dots, \nabla f(x^{k,m})\}, \quad (3.5)$$

onde *conv* é o fecho convexo, definido em 2.1.6. Deve-se lembrar que todo fecho convexo de um conjunto finito de pontos é compacto (Proposição 2.1.7). Pode-se inferir que $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x) \subset G_\epsilon^f(x) \forall x \in \mathbb{R}^n$, bastando garantir que $0 \in \mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x)$.

O valor de m deve ser $m \geq n + 1$, onde n é o número de variáveis de otimização do problema (3.1) (Teorema de Caratheodory 2.1.5), para análise de convergência do método para um ponto ϵ -estacionário, ou, estacionário.

Definida a estratégia para gerar o conjunto $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k)$, o próximo passo é o cálculo da direção de descida d (Izmailov and Solodov, 2014).

3.1.2 Direção de Descida do Método GS

Define-se a distância do conjunto $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k)$ ao ponto $0 \in \mathbb{R}^n$ como sendo uma estimativa da medida de proximidade do conjunto $G_\epsilon^f(x^k)$ a esse ponto. Ou seja,

$$\rho_\epsilon(x^k) = \text{dist}(0; \mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k)). \quad (3.6)$$

Uma vez que $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k)$ é um conjunto compacto e convexo, existe um único g_ϵ^* (Teorema 2.1.8) que minimiza $\rho_\epsilon(x^k)$ tal que:

$$g_\epsilon^* = \arg \min \{\|g - 0\|_2 \mid g \in \mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k)\}; \quad (3.7)$$

que pode ser escrito, de acordo com o Teorema 2.1.4, como:

$$g_\epsilon^* = \sum_{j=0}^m \alpha_j \nabla f(x^{k;j}), \quad \alpha_j \in \mathbb{R}_+, \quad \sum_{j=0}^m \alpha_j = 1 \quad \text{e} \quad \nabla f(x^{k;j}) \in \mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k); \quad j = 0, \dots, m. \quad (3.8)$$

Calcula-se g_ϵ^* , nas equações (3.7) e (3.8), por meio de um problema de otimização quadrático (convexo), dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_g \quad \frac{1}{2} \|g\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad g \in \mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k) \end{array} \right\}; \quad (3.9)$$

equivalente ao problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{g,z} \quad z + \frac{1}{2} \|g\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad \nabla f(x)^\top (-g) \leq z \quad \forall x \in \Gamma_\epsilon^{f,m}(x^k) \end{array} \right\}; \quad (3.10)$$

conforme mostrado no apêndice B.1, e que sempre possui solução (Nocedal and Wright, 2006).

Não havendo a necessidade da direção de descida ser normalizada, como apresentado em (Kiwiel, 2007), d^* pode ser calculado como parte da solução do problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{d,z} \quad z + \frac{1}{2} d^\top H d \\ \text{s.t.} \quad f(x^k) + \nabla f(x)^\top d \leq z \quad \forall x \in \Gamma_\epsilon^{f,m}(x^k) \end{array} \right\}, \quad (3.11)$$

onde H é uma matriz simétrica, definida positiva e limitada, a fim de garantir uma solução d^* para o problema (3.11) e um decréscimo da função f no ponto x^k . Nota-se que foi adicionado o termo $f(x^k)$ às restrições, entretanto, este termo nada afeta o cálculo de d^* , apenas o valor ótimo de z e facilita a construção do problema quadrático, de maneira semelhante ao método SQP (*Sequencial Quadratic Programming*).

Após encontrar essa direção de descida d^* , uma pergunta surge naturalmente: qual o tamanho do passo nesta direção (d^*) que minimiza a função f do problema (3.1) a partir do ponto x^k ?

3.1.3 Cálculo do passo de busca (*Line Search*)

O passo de busca será realizado via *backtracking* (Nocedal and Wright, 2006) ao longo da direção d , calculada na seção anterior 3.1.2, com o objetivo de garantir a redução da função objetivo f no ponto x^k .

Como provado no apêndice B.2, tem-se que a derivada direcional de f na direção d é negativa, sempre que $d \neq 0$, sendo $f'(x^k; d) = \nabla f(x^k)^\top d \leq -d^\top H d$. A igualdade segue pelo fato de f ser continuamente diferenciável no ponto x^k , já que $x^k \in D$.

Assim sendo, para um dado $\eta \in (0, 1)$ existe um $T > 0$ tal que:

$$f(x + td) \leq f(x) + t\eta f'(x; d) \leq f(x) - t\eta d^\top H d, \quad \forall t \in (0, T), \quad (3.12)$$

assegurando uma maior abrangência de busca que a condição de Armijo (Nocedal and Wright, 2006).

Então, formula-se esse problema de minimização unidimensional como:

$$t = \max\{\theta \mid f(x^k + \theta d) < f(x^k) - \eta\theta d^\top H d, \theta \in \{1, \gamma, \gamma^2, \gamma^3, \dots\}\}. \quad (3.13)$$

onde $\gamma \in (0, 1)$.

Calculada a direção de busca d e o tamanho do passo t , deve-se calcular o próximo iterando x^{k+1} , já que o método GS é um método iterativo.

3.1.4 O Próximo Iterando (x^{k+1})

Para o cálculo do próximo iterando, que será denotado por x^{k+1} , são adotados os procedimentos utilizados em (Kiwiel, 2007). Se $x^k + td \in D$, então $x^{k+1} = x^k + td$. Caso contrário, algumas medidas devem ser adotadas para prosseguimento do método e análise de convergência. Admita qualquer outro ponto (x^{k+1}) satisfazendo:

$$f(x^{k+1}) < f(x^k) - t\eta d^\top H d, \quad (3.14)$$

$$\|x^k + td - x^{k+1}\| \leq \min\{t, \epsilon\} \|d\|. \quad (3.15)$$

Alguns pontos devem ser enfatizados. São eles:

- sempre o próximo iterando (x^{k+1}) pertencerá ao conjunto D ;
- caso $x^k + td \notin D$, escolhe-se x^{k+1} , um ponto amostrado aleatoriamente e uniformemente no conjunto:

$$\{y \mid \|y - (x^k + td)\| \leq \min\{t, \epsilon\} \|d\| / i\}, \quad (3.16)$$

onde i deve ser incrementado até que $x^{k+1} \in D$ e a equação (3.14) seja satisfeita. Esse processo finalizará em um número finito de iterações, já que t é escolhido de modo a satisfazer (3.14) e f é contínua, por hipótese.

3.2 Direção de Busca Restrita a uma Caixa (*Box Constraint*)

Com o objetivo de evitar grandes deslocamentos entre os iterandos x^{k+1} (próximo iterando) e x^k (iterando corrente), decide-se empregar uma estratégia para limitar o tamanho do vetor d a cada busca dessa direção de descida, subseção 3.1.2, adicionando ao problema (3.11) as restrições de caixa (Fletcher, 1981) $\nu \in \mathbb{R}_+^n \setminus \{0\}$. Essa estratégia busca atenuar os efeitos de um problema de otimização mal escalonado, i.e. onde há relação de ordem grandeza entre as variáveis de otimização é da ordem de $10e^5$. Desse modo, formula-se o novo problema quadrático:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{d,z} & z + \frac{1}{2}d^\top H d \\ \text{s.t.} & f(x^k) + \nabla f(x)^\top d \leq z \quad \forall x \in \Gamma_\epsilon^{f,m}(x^k) \\ & |d_i| \leq \nu_i \quad i = 1, 2, \dots, n \end{array} \right\}; \quad (3.17)$$

onde d_i e ν_i são os elementos dos vetores d e ν , respectivamente.

Como a função f é uma função não-diferenciável, não-convexa e ν pode ser definido empiricamente, não há garantia que aplicar integralmente a direção de descida d^* , solução do problema (3.17), irá reduzir a função objetivo do problema de otimização (3.1), ou seja, $f(x^k + d^*) < f(x^k)$. Então, aplica-se a técnica de busca em linha (*line search*) tratada na subseção 3.1.3, destacando que não é invalidada a análise realizada naquela subseção com o acréscimo da restrição de caixa, como demonstrado no apêndice B.3.

Para solução do problema quadrático (3.17), utiliza-se o método de pontos interiores para problemas convexos, proposto em (Byrd et al., 2000), e implementado no pacote *Optimization Toolbox* (MathWorks, 2014) do *software MatLab*.

3.3 Método GS com Comprimento de Passo Limitado

Nessa seção é abordada com maiores detalhes a implementação do método do *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado.

Para aproximação dos gradientes, utilizados para gerar o conjunto $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k)$, empregou-se o método das diferenças finitas (Nocedal and Wright, 2006). Já H , presente no problema quadrático (3.17), é uma estimativa local da matriz Hessiana para a função $f(x^k)$, do problema original (3.1), no ponto corrente x^k . Para tanto, define-se, para cada iterando k :

$$g_k = \sum_{j=0}^m \lambda_j^k \nabla f(x^{k,j}) \quad (3.18)$$

onde:

- λ_j^k são os multiplicadores de Lagrange do problema quadrático (3.17), portanto $\sum_{j=0}^m \lambda_j^k = 1$;
- $\nabla f(x_k^j)$ são os gradientes avaliados nos pontos do conjunto $\Gamma_\epsilon^{f,m}(x^k)$;
- g_k é o vetor de menor norma do conjunto $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k)$ e uma **aproximação** do vetor de menor norma do conjunto $\partial_\epsilon^G f(x^k)$, ambos avaliados no ponto x^k .

Definido g_k , aplica-se o método do L-BFGS (Nocedal and Wright, 2006), inicializando $H \leftarrow I$ e recursivamente calculando:

$$H \leftarrow H - \frac{(H s_l)(H s_l)^\top}{s_l^\top H s_l} + \frac{y_l y_l^\top}{s_l^\top y_l}, \quad l = i, i-1, \dots, i-i_H+1, \quad (3.19)$$

onde:

- i_H é o número de iterandos para o método do L-BFGS;
- $y_l = g_l - g_{l-1}$;
- s_l é o deslocamento no espaço das variáveis de otimização, ou seja, $s_l = x^l - x^{l-1}$.

Ao final do processo iterativo $H_{k+1} = H$, destacando que, em relação ao método tradicional L-BFGS, esse procedimento sempre estará atrasado um iterando, já que é necessária

a solução do problema (3.17) para obtenção dos multiplicadores de Lagrange λ_j^k e, consequentemente, cálculo de g_k .

Além disso, com o objetivo de garantir, conforme (Curtis and Que, 2013), que H seja limitada (existe $\xi_{max} \geq \xi_{min} > 0$ tal que $\xi_{min} \|d\|^2 \leq d^\top H d \leq \xi_{max} \|d\|^2$) para fins de análise de convergência na seção 3.4, H só é atualizada em (3.19) se:

$$\|s_l\| \leq \Upsilon_s \epsilon, \quad \|y_l\| \leq \Upsilon_y \epsilon \quad e \quad s_l^\top y_l \geq \Upsilon_{sy} \epsilon^2, \quad (3.20)$$

sendo a última condição chamada de condição de curvatura. Os parâmetros Υ_s , Υ_y e $\Upsilon_{sy} \in \mathbb{R}_+ \setminus \{0\}$.

Desse modo, é realizada a aproximação local para a matriz Hessiana H de f no ponto x^k . Outra finalidade de g_k , é ser utilizado como critério de parada, como no algoritmo GS tradicional (Burke et al., 2005).

3.3.1 Algoritmo GS com Comprimento de Passo Limitado

Descritos os detalhes, é apresentado o algoritmo GS com Comprimento de Passo Limitado.

Algoritmo 1: GRADIENT SAMPLING COM COMPRIMENTO DE PASSO LIMITADO

1. (*Inicialização*): Escolha $x^1 \in D$, as tolerâncias para o critério de otimalidade $v_{opt}, \epsilon_{opt} \geq 0$, os parâmetros para a busca em linha (*Line Search*) $\eta, \gamma \in (0, 1)$, os fatores de redução $\mu, \varrho \in (0, 1]$, o raio de amostragem inicial $\epsilon_1 > 0$, o primeiro critério de otimalidade $v_1 \geq 0$, número de amostras por iteração $m \geq n + 1$, $H_1 = I$ (Matriz Identidade), $\Upsilon_s, \Upsilon_y, \Upsilon_{xy} > 0$ (garantir que H é definida Positiva e Limitada) e a Restrição de Caixa $\nu \in \mathbb{R}_+^n \setminus \{0\}$.
Faça $k = 1$.
2. (*Gradient Sampling*): Obtenha os conjuntos $\Gamma_\epsilon^{f,m}(x^k) \subset (B(x; \epsilon) \cap D)$ e $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k) \subset G_\epsilon^f(x^k)$, como apresentado em (3.4) e (3.5), respectivamente. Caso o primeiro conjunto $\Gamma_\epsilon^{f,m}(x^k)$ não esteja contido em D , o algoritmo é finalizado.
3. (*Direção de Descida*): Faça $H = H_k$ e calcule a direção d^k , solucionando o problema quadrático (3.17). Obtenha g_k conforme equação (3.18).
4. (*Critério de Parada*): Se $\|g_k\| \leq v_{opt}$ e $\epsilon_k \leq \epsilon_{opt}$, o algoritmo é finalizado.
5. (*Atualização dos Parâmetros*): Se $\|g_k\| \leq v_k$, faça $v_{k+1} = \varrho v_k$ e $\epsilon_{k+1} = \mu \epsilon_k$, $t_k = 0$, $x^{k+1} = x^k$ e passe para o passo 8. Caso Contrário, $v_{k+1} = v_k$ e $\epsilon_{k+1} = \epsilon_k$.
6. (*Backtracking*): Calcule t_k conforme (3.13).
7. (*Novo Iterando*): Se $x^k + t_k d^k \in D$, faça $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$. Caso contrário, escolha $x^{k+1} \in D$ satisfazendo (3.14) e (3.15). Atualize H_{k+1} conforme (3.19), respeitando as restrições (3.20).
8. Incrementar $k = k + 1$ e retorne ao passo 2.

Destaca-se no algoritmo 1 que:

- os parâmetros do item 1 (Inicialização) são apresentados nas tabelas 4.1, 4.2 e 4.5 do

capítulo 4;

- para a construção do conjunto $\Gamma_\epsilon^{f,m}(x^k)$, item 2 (*Gradient Sampling*), no iterando corrente x^k , utiliza-se o comando *rand* (MathWorks, 2014) para amostrar independentemente e uniformemente m pontos no conjunto aberto $B(x^k; \epsilon_k)$;
- não se deve confundir o raio de amostragem corrente ϵ_k com a restrição de caixa ν , esta restringe o comprimento do vetor de direção de descida d^k , já aquele restringe as amostras de ponto para a construção do conjunto $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k)$, utilizado, juntamente com a restrição de caixa ν , para determinar a direção de descida d^k no item 3 (Direção de Descida);
- não é apresentado explicitamente no item 8 o número de iterações máximo, como critério de parada, para efeito de análise de convergência na seção 3.4.

3.4 Análise de Convergência

A análise de convergência apresentada é uma modificação dos lemas (3.1) e (3.2) apresentados em (Kiwiel, 2007), para que possam ser aplicados os teoremas (3.3), (3.4), (3.5) e (3.6) dessa mesma referência (Kiwiel, 2007), a fim de garantir que, sob certas hipóteses e configurações do algoritmo 1, o algoritmo *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado convergirá para um ponto estacionário, ou, ϵ -estacionário do problema (3.1).

Antes de se apresentarem as adaptações dos lemas e os teoremas, serão lembradas as duas hipóteses para o problema (3.1).

Hipótese 3.4.1. *A função f do problema (3.1) é localmente Lipschitz contínua e continuamente diferenciável no subconjunto denso e aberto $D \subset \mathbb{R}^n$.*

Hipótese 3.4.2. *Todos os pontos gerados pelo algoritmo 1 (passo 2) num determinado iterando estão contidos em um conjunto convexo, onde f e ∇f avaliados nesses pontos são limitados. Além disso, H , do problema quadrático (3.17), é limitado, conforme tratado na seção 3.3. Essas condições são válidas para todos os iterandos k .*

O método do GS com Comprimento de Passo Limitado, para fins de análise de convergência, é analisado sob uma perspectiva equivalente ao item 3 do algoritmo 1 (problema quadrático (3.17)) como sendo:

- defina os conjuntos:

$$\Lambda_\epsilon^{f,m}(x) = \mathcal{A}\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x), \quad (3.21)$$

onde \mathcal{A} é a decomposição de Cholesky de H^{-1} ($H^{-1} = \mathcal{A}^\top \mathcal{A}$), e

$$\Omega_\epsilon^{f,m}(x) = \mathcal{A}\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x) \quad (3.22)$$

Evidentemente, $\Lambda_\epsilon^{f,m}(\cdot) \subset \Omega_\epsilon^{f,m}(\cdot)$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$;

- Calcule:

$$g = Proj(0, \Lambda_\epsilon^{f,m}(x)), \quad (3.23)$$

onde *Proj* é o operador projeção ortogonal;

- Obtenha o vetor d como sendo a projeção do vetor $-\mathcal{A}^\top g$, onde g foi definido no item anterior, na restrição de caixa \mathcal{C} (última desigualdade do problema (3.17)), ou seja;

$$d = Proj(-\mathcal{A}^\top g, \mathcal{C}). \quad (3.24)$$

- Prossiga com o passo 4 do algoritmo 1.

Como em (Kiwiel, 2007), defina a medida de proximidade ϵ -estacionária como:

$$\rho_\epsilon(\bar{x}) = \text{dist}(0, \Omega_\epsilon^{f,m}(\bar{x})). \quad (3.25)$$

Os conjuntos

$$D_\epsilon^m(x) = \prod_1^m (B(x; \epsilon) \cap D) \subset \prod_1^m \mathbb{R}^n \quad (3.26)$$

e

$$V_\epsilon(\bar{x}, x, \delta) = \{(y^1, \dots, y^m) \in D_\epsilon^m(x) \mid \text{dist}(0; \Lambda_\epsilon^{f,m}(x)) \leq \rho_\epsilon(\bar{x}) + \delta\}. \quad (3.27)$$

Após as considerações, são expostos dois lemas técnicos utilizados nos teoremas 3.4.1, 3.4.2, 3.4.3, 3.4.4.

Lema 3.4.1. *Seja $\emptyset \neq C \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto compacto convexo e $\beta \in (0, 1)$. Se $0 \notin C$, então existe $\delta > 0$ tal que $\mu, \nu \in C$ e $\|\mu\| \leq \text{dist}(0; C) + \delta$ implica $\langle \mu, \nu \rangle > \beta \|\mu\|^2$.*

Lema 3.4.2. *Tome $\epsilon > 0$ e $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Então:*

- Para qualquer $\delta > 0$, existe $\tau > 0$ e um conjunto aberto, não-vazio, \bar{V} , satisfazendo $\bar{V} \subset V_\epsilon(\bar{x}, x, \delta)$ para todo $x \in B(\bar{x}, \tau)$, e $\text{dist}(0; \Lambda_\epsilon^f(x)) \leq \rho_\epsilon(\bar{x}) + \delta, \forall (y^1, \dots, y^m) \in \bar{V}$.*
- Assumindo que $0 \notin \Omega_\epsilon^f(\bar{x})$, escolha $\delta > 0$, como no Lema 3.4.1, para $C = \Omega_\epsilon^f(\bar{x})$, τ e \bar{V} como no item i. Suponha que na interação k do algoritmo 1 o passo 5 seja alcançado com $x^k \in B(\bar{x}, \min\{\tau, \frac{\epsilon}{3}\})$, $\epsilon_k = \epsilon$, e $(x^{k1}, \dots, x^{km}) \in \bar{V}$. Então, $t \geq \min\{1, \frac{\delta\epsilon}{3\sqrt{\lambda_{max}K}}\}$, onde K é a constante de Lipschitz de f na $B(\bar{x}, 1, 5\epsilon)$, e λ_{max} é o maior autovalor de H^{-1} .*
- Se $\lim_k \inf \max\{\|x^k - \bar{x}\|, \|g^k\|, \epsilon_k\} = 0$ com $g^k \in \mathcal{A}\partial_\epsilon^G f(x)$ para todo k , então $0 \in \partial f(\bar{x})$.*

Ressalva-se que as demonstrações dos lemas expostos são realizadas de maneira equivalente ao apresentado em (Kiwiel, 2007). Por esse motivo, omite-se as suas demonstrações.

Apresentados os lemas técnicos, esses são utilizados para as demonstrações dos teoremas de análise de convergência do algoritmo GS com Comprimento de Passo Limitado (1). Esse tipo de análise, para algoritmos iterativos, é realizada por meio de sequências matemáticas em que se espera que estas converjam para pontos de acumulação (Lima, 2004a). Por fim, são apresentados os teoremas (Kiwiel, 2007).

Teorema 3.4.1. *Seja $\{x^k\}$ a sequência gerada pelo o algoritmo 1 com $v_1 > v_{opt} = \epsilon_{opt} = 0$ e $\mu, \varrho \in (0, 1)$. Então, $\{x^k\}$ é uma sequência infinita com:*

- $f(x_k) \downarrow -\infty$, ou,*

- ii. $v_{\epsilon_k} \downarrow 0$, $\epsilon_k \downarrow 0$ e todo ponto de acumulação (\bar{x}) (Lima, 2004a) é ponto estacionário de f , ou seja, $0 \in \partial f(\bar{x})$.

Demonstração. A demonstração desse teorema é semelhante ao apresentado em (Kiwiel, 2007), páginas 383 e 384, com as seguintes modificações:

- Assumindo que $\eta t_k \|d^k\| \leq f(x^k) - f(x^{k+1})$, tem-se:

$$\sum_{k=0}^{\infty} t_k \|g^k\|^2 < \infty \quad (3.28)$$

- e das condições (3.14) e (3.15) implica:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|x^{k+1} - x^k\| \|g^k\| < \infty \quad (3.29)$$

com $g^k \in \mathcal{AG}_\epsilon^{f,m}(x^k)$. □

O teorema 3.4.1 prova matematicamente que fazendo os critérios de otimalidade v_{opt} e ϵ_{opt} iguais a zero, o algoritmo 3.3 não termina no item 2, gerando uma sequência $\{x^k\}$ infinita. A análise fica mais interessante quando $f(x^k) > -\infty$, pois nesse caso, o algoritmo convergirá para um ponto de acumulação (\bar{x}) estacionário, ou seja, $0 \in \partial f(\bar{x})$.

Teorema 3.4.2. *Seja $\{x^k\}$ a sequência gerada pelo o algoritmo 1 com $v_1 > v_{opt} = \epsilon_{opt} = 0$ e $\mu, \varrho \in (0, 1)$. Suponha que o conjunto de nível $\{x; f(x) \leq f(x^1)\}$ é limitado. Então, $\{x^k\}$ é uma sequência infinita, $v_{\epsilon_k} \downarrow 0$, $\epsilon_k \downarrow 0$, $g^{k'} \rightarrow 0$ com $k' \in K \subset \mathbb{N}$ e todo ponto de acumulação de $\{x^{k'}\}$ é ponto estacionário de f .*

Demonstração. Em (Kiwiel, 2007), página 384. □

Já o teorema 3.4.2 mantém $\{x^k\}$ infinita, impondo que $\{f(x^k)\}$ seja limitada e não-crescente. Como toda sequência limitada, possui uma subsequência convergente, existirá $\{f(x^{k'})\} \rightarrow a$, com $k' \in K \subset \mathbb{N}$ e $a \in \mathbb{R}$. Como f é contínua, isso implica a existência de $\{x^{k'}\} \rightarrow \bar{x}$, tal que $f(\bar{x}) = a$. Ou seja, \bar{x} é ponto de acumulação de $\{x^{k'}\}$. Prova-se que $\{g^{k'}\} \rightarrow 0$ por contradição, o que violaria o lema 3.4.2.

Teorema 3.4.3. *Seja $\{x^k\}$ a sequência gerada pelo o algoritmo 1 com $v_1 = v_{opt} = 0$, $\epsilon_1 = \epsilon_{opt} = \bar{\epsilon} > 0$ e $\mu = 1$. Então:*

- $\{x^k\}$ é finita com $0 \in G_\epsilon^f(x^*)$, onde x^* é o último elemento dessa sequência, ou,
- $\{x^k\}$ é infinita com $f(x^k) \downarrow -\infty$, ou,
- $g^{k'} \rightarrow 0$, com $k' \in K \subset \mathbb{N}$, e todo ponto de acumulação (\bar{x}) de $\{x^{k'}\}$ é ponto ϵ -estacionário de f , ou seja, $0 \in \partial_\epsilon^G f(\bar{x})$.

Demonstração. Em (Kiwiel, 2007), página 384. □

O teorema 3.4.3 mostra que, mantendo o raio de amostra $\epsilon_k = \bar{\epsilon} > 0$ e o critério de otimalidade $v_1 = v_{opt} = 0$, o algoritmo 1 poderá terminar se $0 \in \Lambda_{\bar{\epsilon}}^{f,m}(x^*)$ com $g^k = 0$. Como \mathcal{A} é uma transformação linear isomórfica, tem-se $0 \in G_{\bar{\epsilon}}^f(x^*)$. Entretanto, o caso mais interessante, quando $f(x^k) > -\infty$, garante que todo ponto de acumulação será um ponto ϵ -estacionário, ou seja, $0 \in \partial_{\bar{\epsilon}}^G f(\bar{x})$.

Teorema 3.4.4. *Seja $\{x^k\}$ a sequência gerada pelo o algoritmo 1 com $v_1 = v_{opt} = 0$, $\epsilon_1 = \epsilon_{opt} = \bar{\epsilon} > 0$ e $\mu = 1$. Suponha que o conjunto $\{x; f(x) \leq f(x^1)\}$ é limitado, então:*

- i. $\{x^k\}$ é finita com $0 \in G_{\bar{\epsilon}}^f(x^*)$, onde x^* é o último elemento dessa sequência, ou,
- ii. $g^k \rightarrow 0$ e todo ponto de acumulação (\bar{x}) de $\{x^k\}$ é ϵ -estacionário, ou seja, $0 \in \partial_{\bar{\epsilon}}^G f(\bar{x})$.

Demonstração. Em (Kiwiel, 2007), página 385. □

O último teorema 3.4.4 supõe que todos os iterandos pertencem ao conjunto de nível $\{x \mid f(x) \leq f(x^1)\}$, excluindo a possibilidade de $f(x^k) \downarrow -\infty$, garantindo que $0 \in \partial_{\bar{\epsilon}}^G f(\bar{x})$.

No próximo capítulo são apresentados os resultados experimentais.

3.5 Resumo do Capítulo

O presente capítulo apresenta uma revisão ao método *Gradient Sampling* com as devidas modificações realizadas, a fim de solucionar o problema de determinar as condições de equilíbrio operacionais de sistemas dinâmicos, que é detalhado no capítulo seguinte. Destaca-se a limitação da direção de descida (d - problema quadrático (3.17)), proposta por meio da restrição de caixa, necessária para limitar as distâncias entre os iterandos (x_k e x_{k+1}), uma vez que o problema de otimização é mal escalonado - a relação de ordem de grandeza entre as variáveis de otimização do problema abordado é da ordem de $10e^5$. Lembra-se que essa restrição não altera a busca em linha (*Line Search*). Assim, o algoritmo é apresentado na seção 3.3, juntamente com os detalhes de sua implementação, i.e como obter a matriz H (3.17) que seja: simétrica, definida positiva e limitada.

A seção 3.4 é o ápice desse capítulo pois, apesar de fundamentada integralmente nos artigos (Burke et al., 2005) e (Kiwiel, 2007), prova matematicamente, sob certas hipóteses, que o algoritmo proposto 1 convergirá para uma ponto estacionário, ou, ϵ -estacionário de f .

A próximo capítulo apresenta os resultados obtidos a um problema *benchmark* e ao problema central dessa dissertação de mestrado: determinar as condições operacionais de sistemas dinâmicos.

Capítulo 4

Resultados Numéricos

Apresenta-se os resultados numéricos para três problemas:

- Problema *benchmark*: busca-se evidenciar por meio de um problema de otimização de baixa dimensão (2 variáveis de otimização) a funcionalidade e as características do método proposto (*Gradient Sampling* (GS) com Comprimento de Passo Limitado), comparando-o com outros métodos de otimização não-lineares e enfatizando suas propriedades em solucionar problemas de otimização não-diferenciáveis.
- Sistema Termo - Pneumático 1: testa-se o método GS com Comprimento Passo Limitado em um sistema dinâmico de baixa complexidade (18 variáveis de estado) a fim de encontrar os seus pontos de equilíbrio operacionais. Escolhe-se sistemas Termo-Pneumáticos (apêndice A) como representação de um sistema dinâmico de estrutura variável (Utkin, 1977).
- Sistema Termo - Pneumático 2: aumenta-se a ordem de complexidade do modelo (38 variáveis de estado). O objetivo da realização desse experimento é testar a performance computacional do método proposto em um sistema dinâmico com mais variáveis de estado.

Para realizar a comparação entre o método GS com Comprimento de Passo Limitado e outros métodos de otimização não-lineares, e.g. Pontos Interiores (*Interior Point*), Programação Sequencial Quadrática (SQP - *Sequential Quadratic Programming*), Região de Confiança (*Trust Region Reflective*) e Conjunto Ativo (*Active Set*), implementados na biblioteca *Optimization Toolbox* do software *MatLab/Simulink* (MathWorks, 2014), é necessário estabelecer uma métrica para compará-los.

Diante disso, define-se como critério de comparação entre os algoritmos a capacidade destes de mapear (identificar) e delinear regiões de convergência para um mínimo local a partir das condições iniciais geradas aleatoriamente por meio de uma distribuição uniforme na região do espaço das variáveis de otimização. É empregada a técnica KNN (*K-Nearest Neighbor* - K vizinhos mais próximos) (Fukunaga and Narendra, 1975) como meio de mensurar as condições iniciais que podem ser agrupadas e, assim, definir regiões de convergência para um ponto de mínimo local específico. Para isso:

- para cada condição inicial, as distâncias as demais condições iniciais devem ser ordenadas crescentemente;

Tabela 4.1: Valores Iniciais dos Parâmetros do Algoritmo 1.

Parâmetros	Valores
ν_{opt} (Tolerância Otimalidade)	5,0E-04
ϵ_{otp} (Tolerância Raio de Amostragem)	5,0E-03
η (Constante de Armijo)	1,0E-07
γ (<i>Line Search</i>)	5,0E-01
m (número de Amostras)	$n + 1$
Υ_s (L-BFGS)	1,0E+06
Υ_y (L-BFGS)	1,0E+06
Υ_{sy} (L-BFGS)	1,0E-06
$L - BFGS_{iter}$ (Iterações do L-BFGS)	20
k_{max} (máximo Número de Iterações)	1,0E+03

- a convergência das três condições iniciais mais próximas à condição inicial corrente é analisada;
- caso as três condições iniciais mais próximas converjam para o mesmo ponto de mínimo da condição inicial corrente, esta é classificada como elemento do conjunto \mathcal{R} . O conjunto \mathcal{R} é caracterizado por possuir os elementos (condições iniciais) que determinam as regiões de convergência para os pontos de mínimos locais do problema de otimização. Ou seja, dado x_0 , condição inicial do problema de otimização, escolhido arbitrariamente. Se o ponto mais próximo a x_0 for $x_0^* \in \mathcal{R}$, então, espera-se que x_0 tende a convergir ao mesmo ponto de mínimo local da condição inicial x_0^* .
- calcula-se a relação entre o número de elementos do conjunto \mathcal{R} ($\#\mathcal{R}$) e o número de pontos iniciais gerados (ς), obtendo a métrica:

$$KNN_{alg} = \frac{\#\mathcal{R}}{\varsigma}, \quad (4.1)$$

em que o subscrito "alg" é o algoritmo utilizado.

Não é desejado, de um método de otimização, que pontos iniciais próximos converjam para mínimos locais distintos.

Para realização dos experimentos numéricos, utilizou-se um computador com sistema operacional 64 bits, com processador Intel Xeon de 3,50 GHz e 16,0 *GBytes* de memória RAM. Já o algoritmo 1 foi implementado no *software* MATLAB 2012b 64-bits, fazendo o uso do pacote *Optimization Toolbox* (MathWorks, 2014).

As configurações iniciais do algoritmo 1, comuns aos três problemas numéricos, são apresentadas na tabela 4.1, sendo os valores definidos com base em (Burke et al., 2005) e experimentos numéricos para o sistemas dinâmicos abordados nas seções 4.2.4 e 4.2.5. Nesta, n representa a dimensão do problema de otimização (número de variáveis de otimização).

4.1 Problema *Benchmark*

Criou-se a função teste $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, definida por:

Tabela 4.2: Valores Iniciais dos Parâmetros do Algoritmo 1 - Problema *Benchmark*

Parâmetros	Valores
ϵ_1 (Raio de Amostragem)	5,00E-02
μ (Atualização ϵ_k)	1,00E-01
ν_1 (Tolerância Otimalidade)	1,00E-01
ρ (Atualização ν_k)	8,00E-01
$f(x^1)$ (Função Objetivo Inicial)	1,64E+01
x^0 (Condição Inicial)	$(1, 00\ 0, 36)^\top$

Tabela 4.3: Método *Gradient Sampling*-Problema *BenchMark* (4.2)

Número do Experimento	Função Objetivo Final ($f(x^k)$)	Raio de Amostragem Final (ϵ_k)	Número de Iterações (k)	Tempo (s)	Ponto Final (x^k)
1	6,70E-07	7,63E-07	45	0,77	(0,01, 0,52)E-06
2	4,18E-07	7,63E-07	39	0,19	(-0,11, 0,86)E-06
3	1,59E-07	7,63E-07	47	0,34	(0,17, 0,37)E-06
4	5,12E-07	7,63E-07	48	0,46	(0,04, 0,45)E-06
5	3,95E-08	7,63E-07	41	0,27	(-0,10, -0,05)E-06
6	2,98E-07	7,63E-07	45	0,22	(0,08, 0,14)E-06
7	6,22E-07	7,63E-07	38	0,37	(0,00, 0,01)E-06
8	6,43E-07	7,63E-07	35	0,34	(0,70, -0,06)E-06
9	7,01E-07	7,63E-07	41	0,37	(-0,02, 0,05)E-06
10	6,01E-07	7,63E-07	46	0,47	(-0,07, 0,06)E-06

$$f((x_1, x_2)) = |x_1^2 - x_1| + |2x_1^2 - x_2|, \quad (4.2)$$

a fim de se evidenciar as características do método *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado proposto nesse trabalho. O gráfico com a curva de nível dessa equação (4.2) é mostrado na figura 4.1, notando que se trata de uma função multimodal (dois pontos de mínimo locais: $(0, 0)$ e $(1, 2)$), não continuamente diferenciável, não convexo, mas localmente Lipschitz contínua e atendendo as exigências necessárias para aplicação dos métodos que utilizam o *Gradient Sampling* (capítulo 3) como base.

Sabe-se de (Nocedal and Wright, 2006) que a condição inicial (x_1^0, x_2^0) exerce um papel importante para a convergência dos métodos de otimização ao ponto de mínimo desejado, e.g. se o ponto inicial (x_1^0, x_2^0) estiver próximo a $(1, 2)$, o método convergirá para este ponto de mínimo. Entretanto, questiona-se como será o comportamento do algoritmo 1 quando os pontos estiverem relativamente afastados dos pontos de mínimos locais.

Nesta subseção, primeiramente, compara-se o método do *Gradient Sampling*, calculando a direção de descida de acordo com o problema quadrático (3.11), e o método do *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado, obtendo a direção de descida por meio do problema quadrático (3.17). Para tanto, inicia-se configurando os parâmetros iniciais do algoritmo 1 (Passo 1) de acordo com as tabelas 4.1 e 4.2. Para o método GS com Comprimento de Passo Limitado, definiu-se a restrição de caixa (ν) empiricamente como sendo igual a $[0, 20, 0, 20]^\top$.

Devido às características estocásticas dos métodos (*Gradient Sampling* e *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado) comparados, realizou-se o experimento

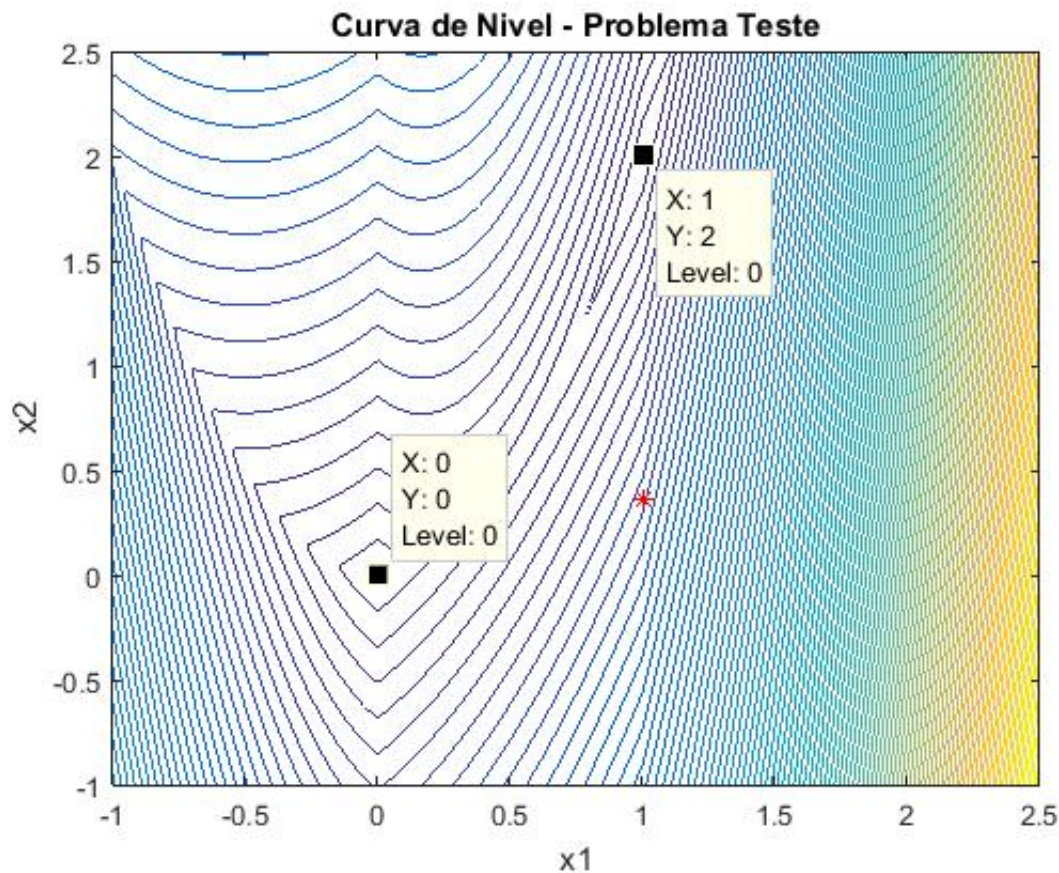


Figura 4.1: Curva de Nível do Problema Teste (4.2), destacando os pontos de mínimo locais e o ponto inicial (1, 00, 0, 36) de asterisco (*) vermelho.

dez vezes partindo do mesmo ponto inicial (1, 00, 0, 36), sendo os resultados apresentados nas tabelas 4.3 e 4.4.

É possível ver que o método do *Gradient Sampling* (tabela 4.3) converge para o ponto de mínimo mais próximo (0, 0), enquanto o método do *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado, proposto nesse trabalho, converge para o ponto de mínimo mais distante (1, 00, 2, 00).

Destaca-se que o método GS com Comprimento de Passo Limitado converge para o ponto de mínimo mais distante sem onerar o cálculo com um aumento significativo do número de iterações em relação ao *Gradient Sampling*. Outra vantagem é que mesmo executando em média mais iterações, o método proposto apresenta o tempo de execução médio (0,286 s) inferior ao método GS original (0,291 s) e com desvio padrão duas vezes menor, 0,067 s, para este método e 0,033 s para o método do GS com Comprimento de Passo Limitado.

No teste anterior foi analisado um ponto específico do espaço \mathbb{R}^2 como condição inicial. Contudo, com o intuito de testar o comportamento numérico dos métodos *Gradient Sampling* e *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado para outros pontos iniciais do \mathbb{R}^2 , as condições iniciais de teste foram ampliadas.

Para tanto, foram gerados os gráficos das figuras 4.2 e 4.3, para condições iniciais

Tabela 4.4: Método *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado - Problema *BenchMark* (4.2)

Número do Experimento	Função Objetivo Final ($f(x^k)$)	Raio de Amostragem Final (ϵ_k)	Número de Iterações (k)	Tempo (s)	Ponto Final (x^k)
1	2,71E-07	7,63E-07	48	0,30	(1,00, 2,00)
2	4,49E-07	7,63E-07	48	0,25	(1,00, 2,00)
3	4,26E-07	7,63E-07	42	0,26	(1,00, 2,00)
4	5,63E-07	7,63E-07	59	0,33	(1,00, 2,00)
5	9,15E-07	7,63E-07	49	0,25	(1,00, 2,00)
6	2,08E-07	7,63E-07	46	0,24	(1,00, 2,00)
7	5,71E-07	7,63E-07	49	0,26	(1,00, 2,00)
8	9,83E-07	7,63E-07	45	0,23	(1,00, 2,00)
9	4,41E-07	7,63E-07	54	0,30	(1,00, 2,00)
10	2,71E-07	7,63E-07	48	0,26	(1,00, 2,00)

amostradas aleatoriamente e uniformemente na região de análise $[-1, 2, 5] \times [-1, 2, 5]$ para os métodos do *Gradiente Sampling* (GS) e *Gradiente Sampling* com Comprimento de Passo Limitado (GSCPL), respectivamente. É possível notar que este método é mais bem comportado numericamente que aquele, com base na métrica de comparação definida na equação (4.1) no início do capítulo 4 ($KNN_{GS} = 0,460$ e $KNN_{GSCPL} = 0,915$). Ou seja, ele (GSCPL) permite identificar e delinear uma maior região de convergência para o mínimo local, como espera-se de um bom método de otimização. Essa característica é justificada pelo comprimento (norma) do vetor de descida para os primeiros iterandos.

Para esclarecer o que foi dito, volta-se ao caso específico da condição inicial $(1, 00, 0, 36)$, onde é possível visualizar o motivo dos métodos convergirem para pontos de mínimo distintos através das figuras 4.4, 4.5 e 4.6. Para a primeira figura 4.4 (método do *Gradient Sampling*), nota-se que os primeiros passos entre os iterandos (x^k e x^{k+1}) são longos, sendo cruciais para a localização do mínimo local $(0, 0)$. Já as figuras 4.5 e 4.6 mostram que restringindo os passos entre os iterandos a uma região específica, garante-se que o método do *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado não seja sensível ao comprimento (norma) do vetor de direção de descida para os iterandos iniciais, fazendo com que o método possua um bom comportamento numérico segundo a métrica estabelecida.

Por último, adotando-se os mesmos estados iniciais gerados e utilizando a mesma métrica (4.1) para os métodos, a figura 4.7 exhibe o resultado do mapeamento de mínimos locais para os métodos puramente determinísticos: Pontos Interiores (*Interior Point*) com $KNN_{IP} = 0,675$; *Trust Region-Reflective* com $KNN_{TRR} = 0,710$; *SQP - Sequential Quadratic Programming* com $KNN_{SQP} = 0,740$; *Active-Set* com $KNN_{AS} = 0,710$. Então, conclui-se, com base na métrica (4.1), que o método do *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado apresenta uma capacidade de identificar e delinear regiões de convergência superior aos demais métodos determinísticos.

Mostradas as principais características do método desenvolvido, são apresentados os resultados práticos, a fim de encontrar pontos de equilíbrio operacionais de sistemas dinâmicos, seção 1.1.

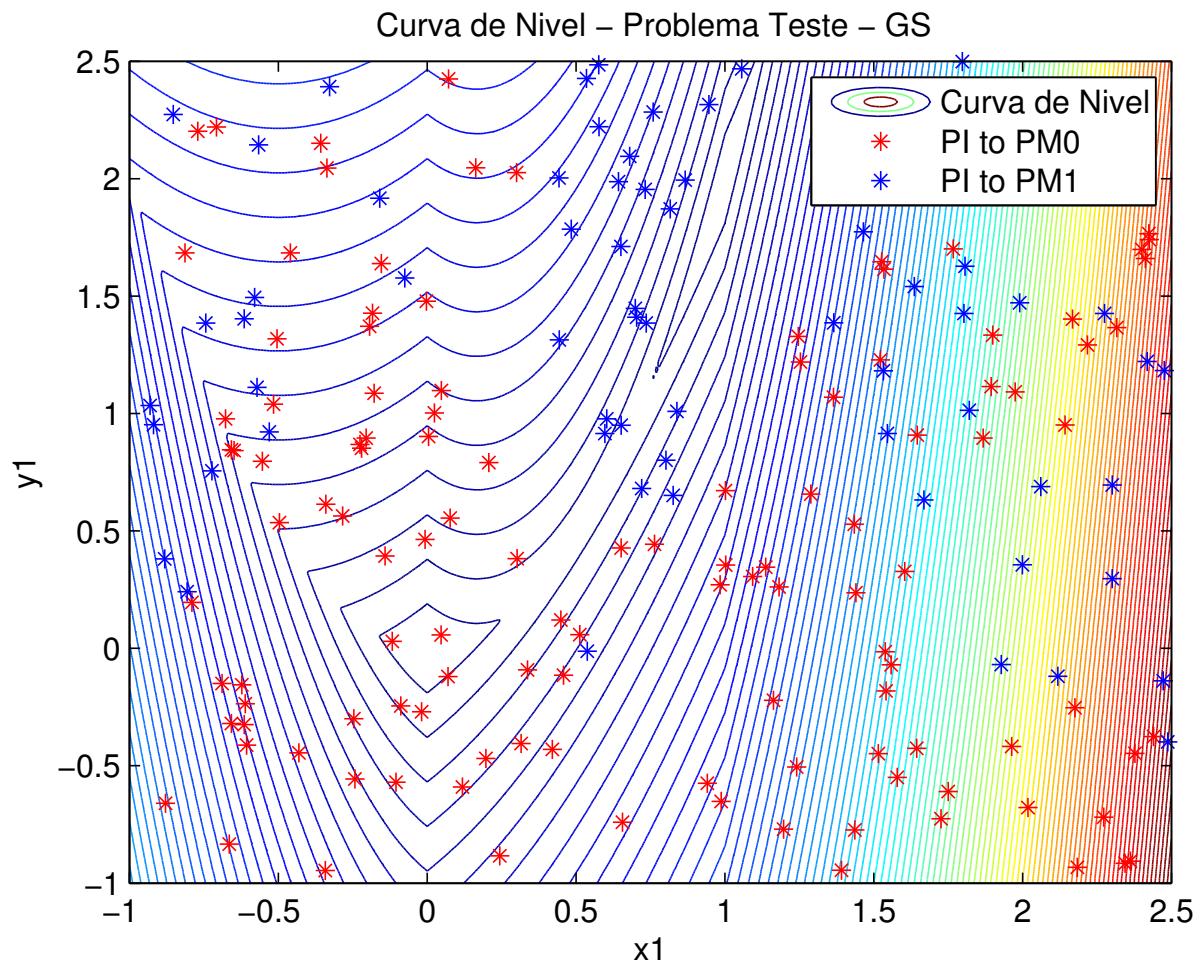


Figura 4.2: Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com os pontos iniciais que convergem para o ponto de mínimo local (0, 0) em vermelho e, em azul, os pontos que convergem para o ponto de mínimo (1, 2) para o método do *Gradient Sampling*, $KNN_{GS} = 0, 460$.

4.2 Determinação de Condições Operacionais de Sistemas Termo - Pneumáticos

São escolhidos modelos Termo-Pneumáticos para representarem os sistemas dinâmicos utilizados a fim de encontrar os seus pontos de equilíbrio operacionais. Todo o equacionamento fenomenológico desses modelos está descrito no apêndice A, destacando que esses modelos possuem a característica de serem de estrutura variável (Utkin, 1977). A relevância dessa característica de sistema é fundamental para escolha do método GS como base do algoritmo 1, já que se utiliza o conceito de subgradiente 2.2.4, uma vez que a derivada da função que descreve o comportamento dinâmico do sistema em relação às variáveis de estado possui descontinuidade. Assim sendo, o método de otimização para solucionar o problema de otimização (4.8) não se pode limitar unicamente ao uso do seu gradiente.

Antes de se apresentar os resultados, é detalhada a construção do problema de otimiza-

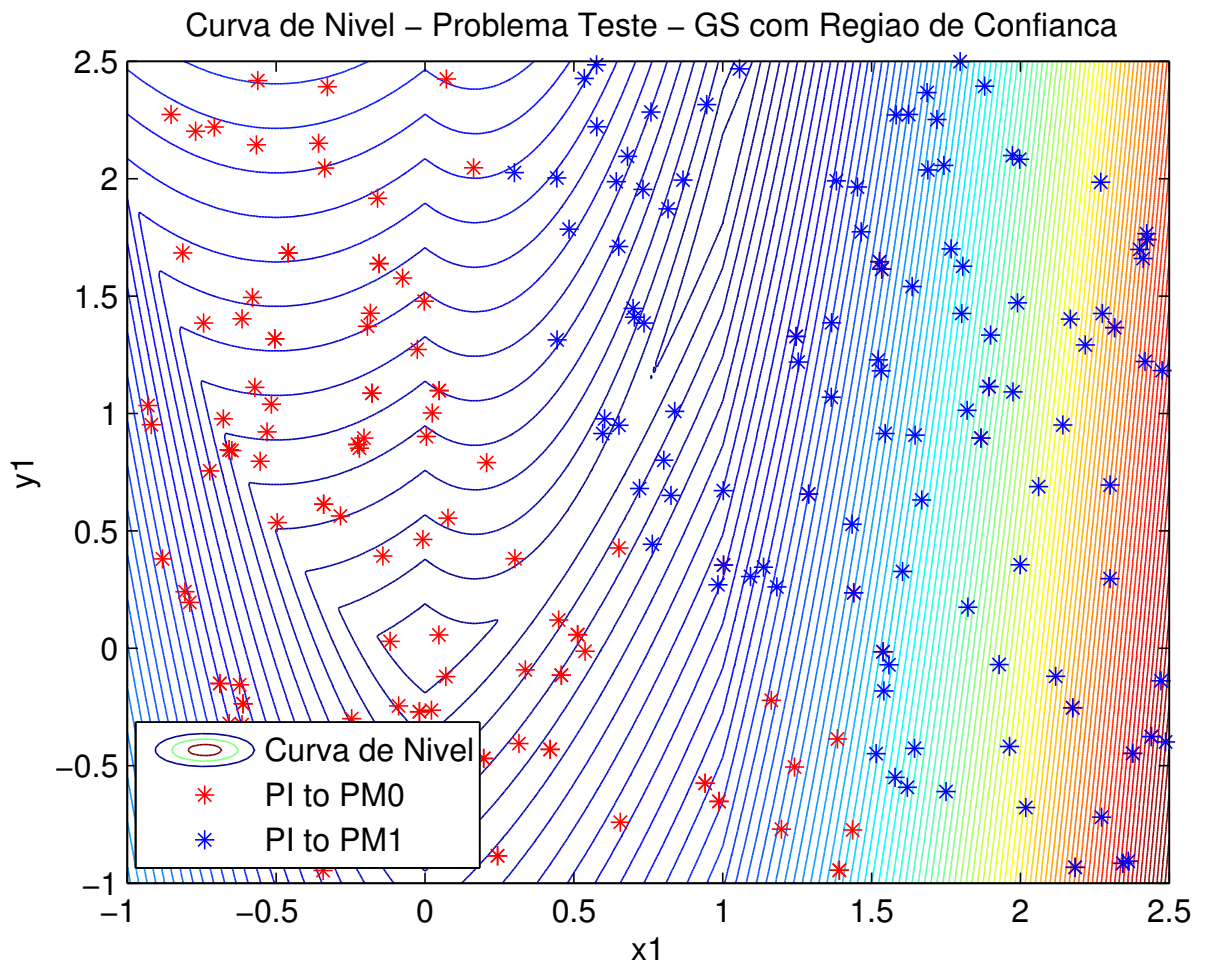


Figura 4.3: Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com os pontos iniciais que convergem para o ponto de mínimo local (0, 0) em vermelho e, em azul, os pontos que convergem para o ponto de mínimo (1, 2) para o método do *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado, $KNN_{GS CPL} = 0,915$.

ção (3.1), a fim de estruturá-lo para solucionar o problema proposto (determinar as condições de equilíbrio operacionais de sistemas dinâmicos). Então, para facilitar a organização do trabalho, são alocados em subseções os seguintes itens:

- Variáveis de Otimização x , subseção 4.2.1. Define-se as variáveis de Otimização do problema (3.1).
- Função Objetivo f , subseção 4.2.2. É aprofundada a construção da função objetivo f do problema (3.1).
- Definição da restrição de caixa (*box constraint*) ν , subseção 4.2.3. Apresenta-se a especificação da restrição de caixa para o problema quadrático (3.17).
- Sistema Termo-Pneumático 1, subseção 4.2.4. Exibe o sistema dinâmico escolhido,

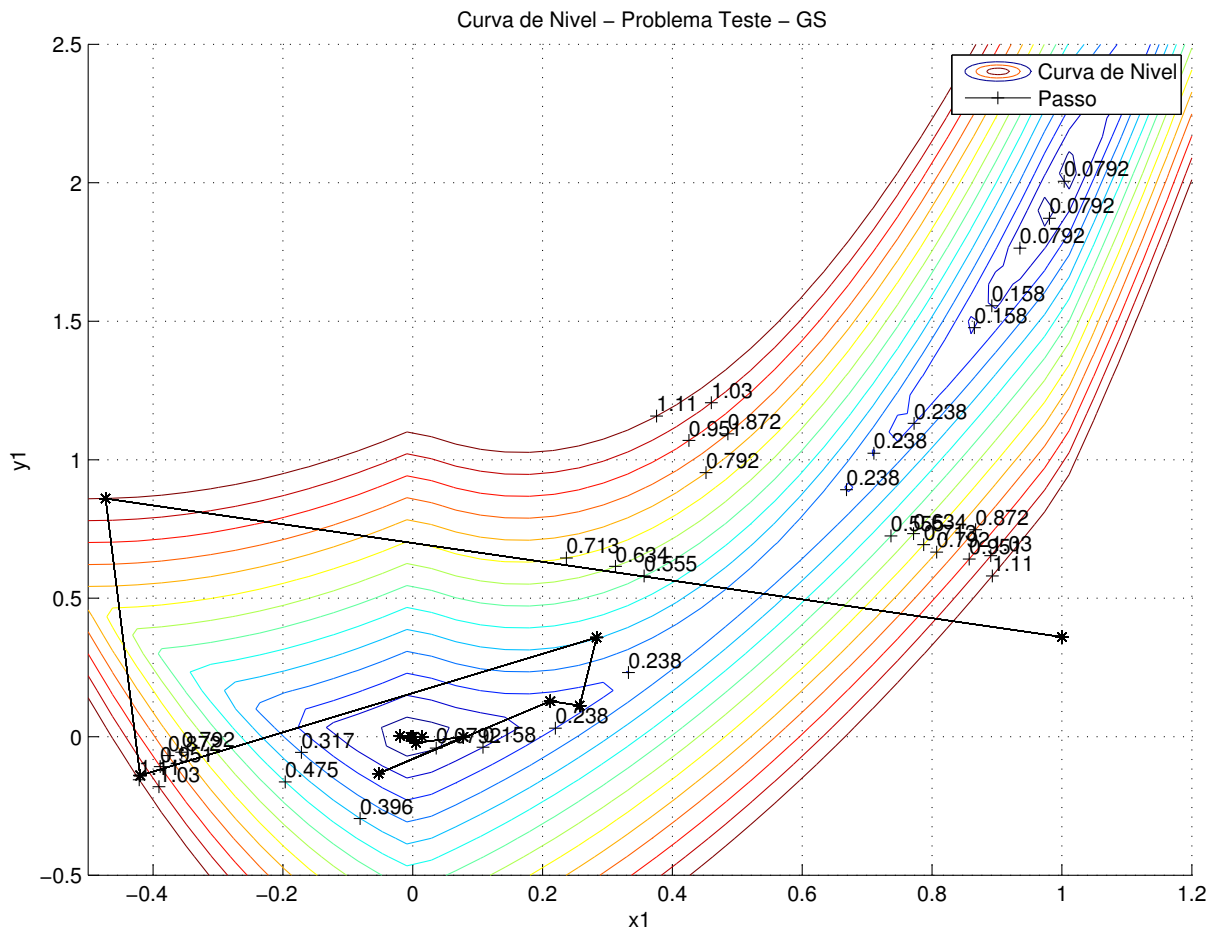


Figura 4.4: Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com os passos de iterações para o método GS.

juntamente com os resultados dos experimentos numéricos do algoritmo 1 empregado nesse sistema.

- Sistema Termo-Pneumático 2, subsecção 4.2.5. Réplica do ítem anterior para o sistema dinâmico 2.

4.2.1 Variáveis de Otimização x

Como tratado no apêndice A.3, um sistema dinâmico pode ser equacionado por uma Representação em Espaço de Estados:

$$\dot{x} = F(x, u), \quad (4.3)$$

$$y = G(x, u), \quad (4.4)$$

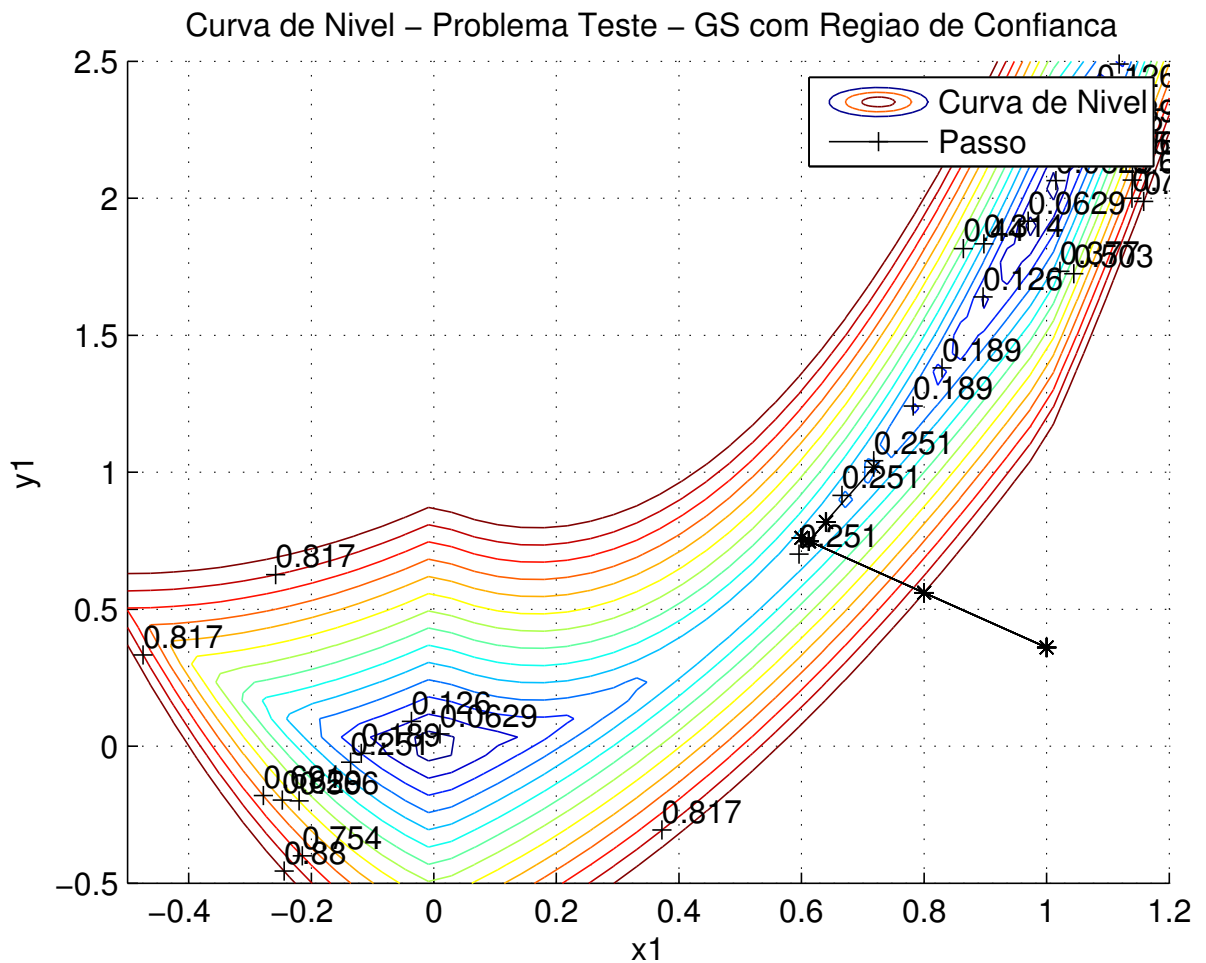


Figura 4.5: Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com os primeiros passos de iterações para o método GS com Comprimento de Passo Limitado.

onde:

- $\dot{x} \in \mathbb{R}^n$ representa a taxa de variação do vetor de variáveis de estado;
- $F(x, u)$ e $G(x, u)$ são funções conhecidas, onde os argumentos são as variáveis de estado ($x \in \mathbb{R}^n$) atuais e as entradas do sistema ($u \in \mathbb{R}^m$), respectivamente;
- $y \in \mathbb{R}^p$ representa a saída do sistema;
- $n, m, p \in \mathbb{N}$.

O problema definido em 1.1 para os sistemas dinâmicos 1 e 2 consiste em achar as variáveis de estado na condição de equilíbrio (eq). Parte-se do pressuposto que todas as entradas ($u_{eq} \in \mathbb{R}^m$) são conhecidas e que não há restrições para as saídas no ponto de equilíbrio ($y_{eq} \in \mathbb{R}^p$), ou seja, necessita-se apenas encontrar $x_{eq} \in \mathbb{R}^n$ que satisfaz:

$$\dot{x}_{eq} = F(x_{eq}, u_{eq}) = 0. \quad (4.5)$$

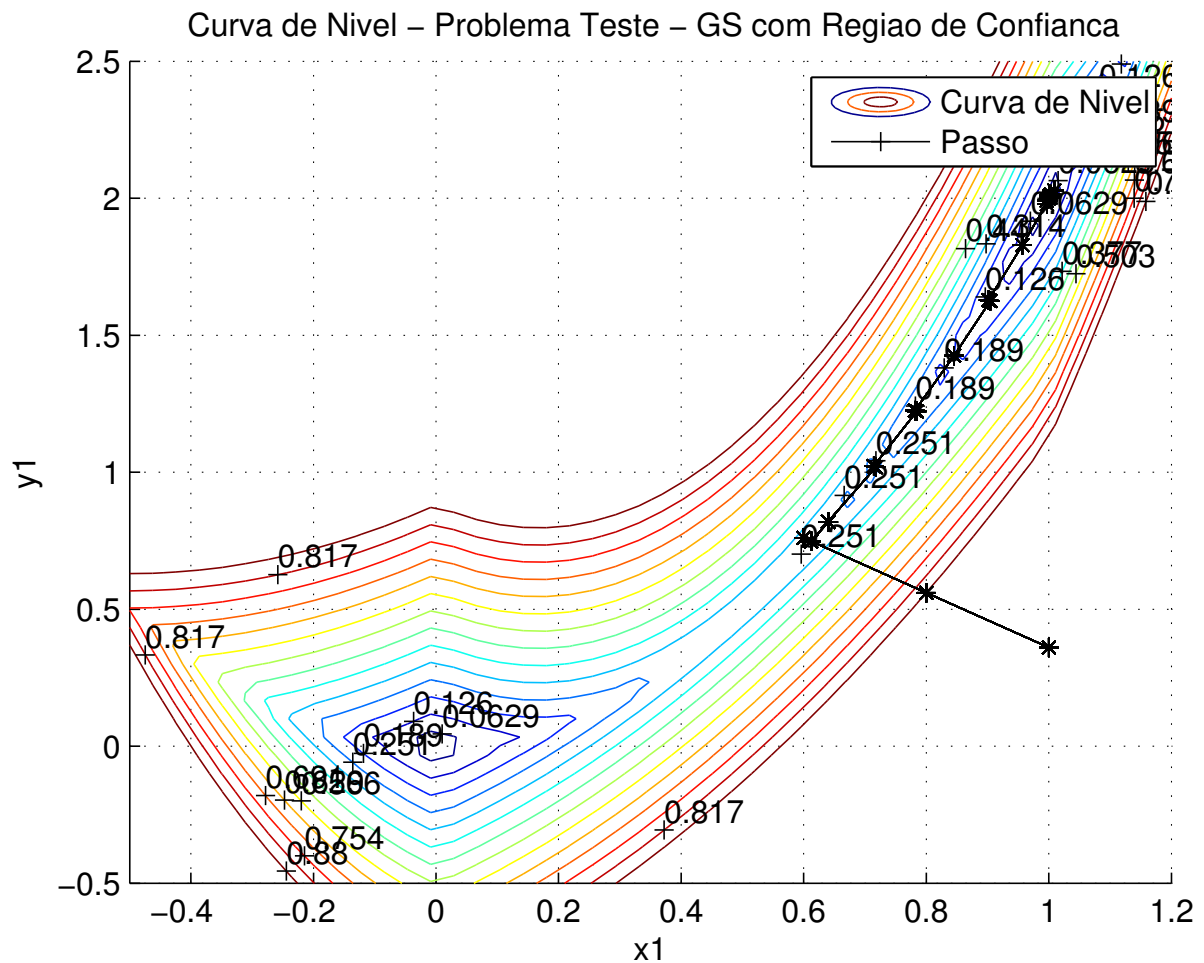


Figura 4.6: Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com todos os passos de iterações para o método GS com Comprimento de Passo Limitado.

Para obter as saídas y_{eq} no ponto (x_{eq}, u_{eq}) basta realizar a operação algébrica:

$$y_{eq} = G(x_{eq}, u_{eq}). \quad (4.6)$$

Portanto, utiliza-se como variáveis de otimização as variáveis de estado originais dos sistemas dinâmicos 1 e 2 escolhidos (sistemas termo-pneumáticos), isto é, massa (kg) e energia (J). Essa escolha foi motivada por dois fatores:

- foram empregados balanços de massa e energia para modelar matematicamente o bloco Reservatório (equacionamento fenomenológico descrito do apêndice A.1.2);
- facilidade de alterar e obter, no *software MATLAB/Simulink*, os estados (x) (massa e energia) e suas derivadas (\dot{x}), respectivamente, por meio do comando “*model*” (MathWorks, 2014). Essa simplicidade facilita a construção da função objetivo que será tratada na próxima subseção.

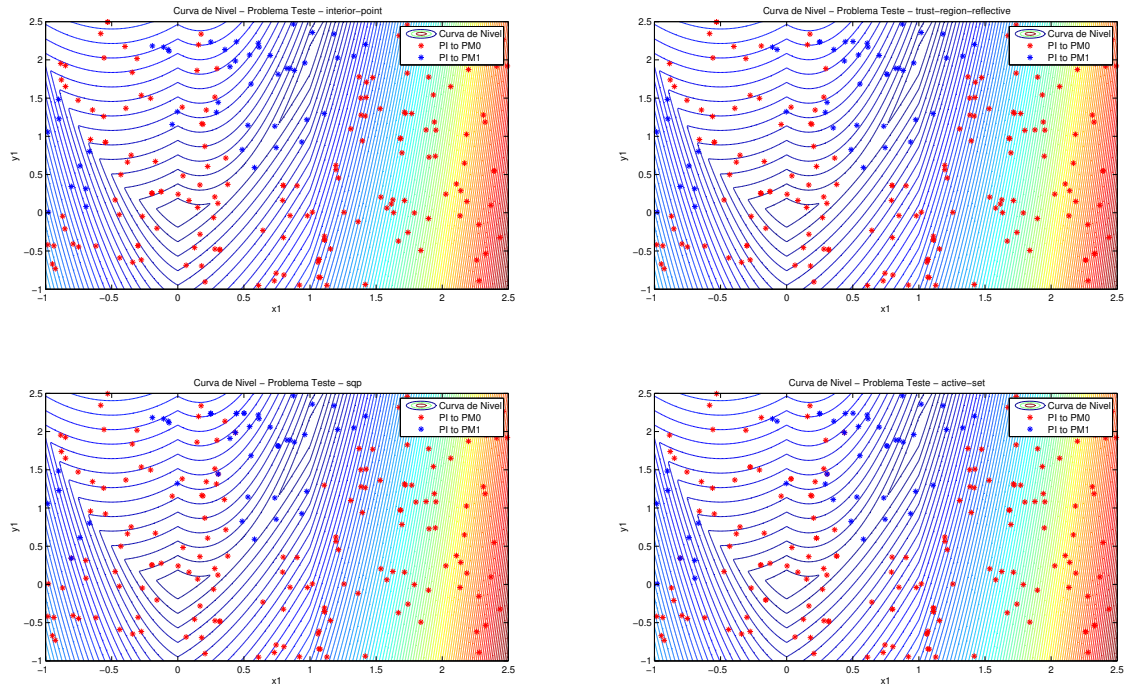


Figura 4.7: Curva de Nível do Problema Teste (4.2) com os pontos iniciais que convergem para o ponto de mínimo local (0, 0) em vermelho e, em azul, os pontos que convergem para o ponto de mínimo (1, 2) para os métodos de *Interior-Point* ($KNN_{IP} = 0,675$), *Trust Region-Reflective* ($KNN_{TRR} = 0,710$), *SQP* (*Sequential Quadratic Programming*) ($KNN_{SQP} = 0,740$) e *Active-Set* ($KNN_{AS} = 0,710$).

4.2.2 Função Objetivo (Custo) f

Podendo um sistema dinâmico ser representado pelas equações 4.3, 4.4 e tendo dito na subseção 4.2.1 que os sistemas 1 e 2 estarão em equilíbrio dinâmico quando todas as derivadas das variáveis de estado forem iguais a zero, como representado na equação (4.5), então tem-se:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_1(x_{eq}, u_{eq}) = 0, \\ \dot{x}_2 &= f_2(x_{eq}, u_{eq}) = 0, \\ &\vdots \\ \dot{x}_n &= f_n(x_{eq}, u_{eq}) = 0; \end{aligned} \tag{4.7}$$

sendo que $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) são funções algébricas não-lineares.

Contudo, o vetor $F(x, u)$ ($F = [f_1 \ f_2 \ \dots \ f_n]^T$) possui a mesma dimensão do vetor de variáveis de estado x , sendo necessária uma técnica para transformar o problema com muitos objetivos ($f_1 = 0, f_2 = 0, \dots, f_n = 0$) em um problema de otimização mono objetivo, a fim de se aplicar o método proposto (*Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado).

Para tal tarefa, adotada-se uma função quadrática para agregar os objetivos, resultando na função objetivo (f) e no problema de otimização:

$$\begin{aligned}
x_{\text{eq}} &= \arg \min f(x), \\
&= \arg \min \frac{1}{2} F(x, u_{\text{eq}})^\top Q F(x, u_{\text{eq}}), \\
&= \arg \min \left(\frac{f_1(x, u_{\text{eq}})^2}{b_1} + \frac{f_2(x, u_{\text{eq}})^2}{b_2} + \dots + \frac{f_n(x, u_{\text{eq}})^2}{b_n} \right),
\end{aligned} \tag{4.8}$$

onde $Q_{n \times n}$ é uma matriz de normalização, definida por:

$$Q = \begin{pmatrix} b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & b_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & b_n \end{pmatrix}, \tag{4.9}$$

utilizada para tratar as ordens de grandeza distintas entre as variáveis de otimização (estado), e.g. massa (kg), que possui ordem de grandeza de 10^{-2} , e energia (Pa), com ordem de grandeza de 10^3 . Já $b_i \in \mathbb{R}_+ \setminus \{0\}$, com $i = 1, 2, 3, \dots, n$, é a ordem de grandeza dessas variáveis de otimização.

Definidas as variáveis de otimização (x) e a função custo (f), para que o problema (3.1) seja solucionado pelo método do GS com Comprimento de Passo Limitado falta a definição da restrição de caixa ν .

4.2.3 Definição da Restrição de Caixa ν

Na seção 3.2 explica-se o motivo de se empregar esse tipo de abordagem, principalmente, para evitar grandes deslocamentos entre os iterandos x^k e x^{k+1} , evitando problemas numéricos e de convergência para pontos de equilíbrio indesejados, ou seja, que não representam condições físicas operacionais para os sistemas dinâmicos.

Então, é permitido apenas um deslocamento máximo (ν_i) de cada variável de otimização (x_i^k) no iterando k , isto é:

$$x_i^{k+1} = x_i^k + td_i, \quad |d_i| \leq \nu_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \tag{4.10}$$

Em vista disso, limitou-se empiricamente o deslocamento da variável de otimização (que é também variável de estado) energia (J) em 10% da sua ordem de grandeza (10^3). A mesma métrica foi utilizada para a variável massa (kg), 10% da sua ordem de grandeza (10^{-2}).

Assim, o problema de otimização (3.1) está bem definido para ser solucionado pelo algoritmo 1: *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado.

Nas duas próximas subseções são apresentados os resultados dos experimentos numéricos para os sistemas termo-pneumáticos. Destaca-se que, sem a técnica tratada nessa subseção, o método GS base não converge, ou, converge para pontos de equilíbrio indesejados e que não possuem sentido físico, e.g. energia (J) e massa (kg) com valores negativos ou nulos. Uma análise semelhante à apresentada na seção 4.1 (utilizar vários pontos iniciais e

empregar outros métodos de otimização não-linear) é realizada com a finalidade de destacar a importância dessa estratégia para o problema discutido em 1.1.

4.2.4 Sistema Termo - Pneumático 1

O sistema Termo-Pneumático 1, representado por meio do diagrama de blocos da figura 4.8, é constituído de 8 volumes adiabáticos e 16 orifícios isentrópicos (apêndice A), resultando num modelo de 16 variáveis de estado, pois, em cada volume há duas variáveis de estado: energia (J) e massa (kg).

Configura-se os parâmetros iniciais do método GS com Comprimento de Passo Limitado (Passo 1 do algoritmo 1) conforme as tabelas 4.1 e 4.5. Como trata-se de um algoritmo híbrido (Rao, 2010) (estocástico e determinístico), este deve ser executado algumas vezes a partir da mesma condição inicial, a fim de validar a sua convergência para os estados de interesse. Decidiu-se realizar dez experimentos para as condições iniciais das variáveis de estado apresentadas na segunda coluna da tabela 4.7. Já os resultados são mostrados na tabela 4.6.

A análise da tabela 4.6 permite observar a natureza estocástica do método, pois, apesar deste convergir para o regime permanente (terceira coluna da tabela 4.7) em todos os dez experimentos, não há igualdade para o número de iterações (terceira coluna da tabela 4.6), valor da função objetivo (4.8) final (segunda coluna da tabela 4.6) e, conseqüentemente, tempo de execução (última coluna da tabela 4.6).

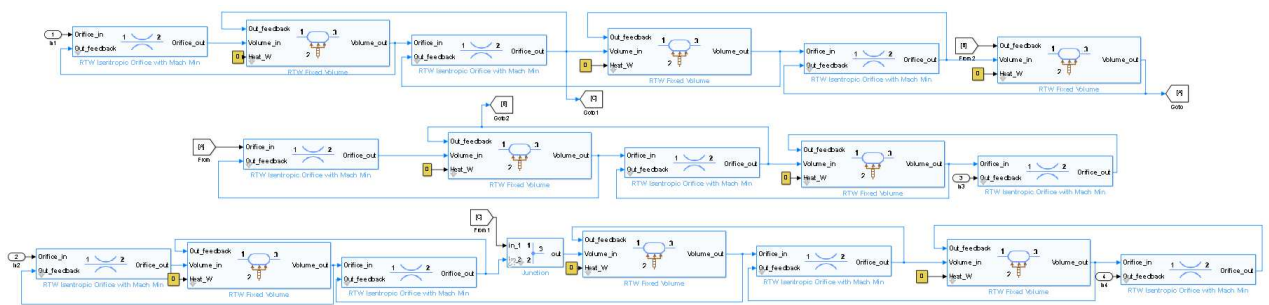


Figura 4.8: Sistema Termo-Pneumático 1 - Constituído de 8 Volumes Adiabáticos, portando 16 variáveis de estado, e 10 orifícios Isentrópicos

Com o objetivo de verificar a robustez do algoritmo 1 (Gradient Samplig com Comprimento de Passo Limitado), testou-se a convergência desse método para cinquenta pontos iniciais (tabelas C.3, C.4, C.5, C.6 e C.7) amostrados aleatoriamente e uniformemente numa região das variáveis de estado, determinados com base nos valores de pressão e temperatura das fontes externas do modelo da figura 4.8. Além disso, testou-se os métodos dos Pontos Interiores (resultado na tabela C.9), *Trust Region Reflective* (resultado na tabela C.10), SQP (resultado na tabela C.11) e *Active Set* (resultado na tabela C.12) utilizando esses mesmos 50 pontos iniciais e a função objetivo (4.8), sendo os resultados apresentados na tabela C.1 do apêndice C.

A tabela C.1 apresenta a convergência para o ponto de equilíbrio operacional (terceira coluna da tabela 4.7) utilizando todos os métodos numéricos citados, inclusive o método *Gradient Sampling* (Burke et al., 2005). É possível concluir que 96% dos pontos iniciais alcançaram o ponto de equilíbrio operacional empregando o método do GS com Comprimento

Tabela 4.5: Valores Iniciais dos Parâmetros do Algoritmo 1 - Sistema 1

Parâmetros	Valores
ϵ_1 (Raio de Amostragem)	7,00E-01
μ (Atualização ϵ_k)	2,00E-01
v_1 (Tolerância Otimalidade)	1,00E-01
ρ (Atualização v_k)	8,00E-01
$f(x^1)$ (Função Objetivo Inicial)	7,26E+06

Tabela 4.6: Experimento Numérico - Sistema 1

Número do Experimento	Função Objetivo Final ($f(x^k)$)	Raio de Amostragem Final (ϵ_k)	Número de Iterações (k)	Tempo (s)
1	1,93E-05	2,24E-04	296	17,63
2	4,25E-05	2,24E-04	315	18,71
3	1,60E-05	2,24E-04	328	19,76
4	1,41E-05	2,24E-04	338	20,62
5	2,10E-05	2,24E-04	297	17,48
6	1,16E-05	2,24E-04	328	19,75
7	6,80E-05	2,24E-04	266	14,88
8	2,29E-05	2,24E-04	535	36,17
9	5,24E-05	2,24E-04	332	20,19
10	1,60E-05	2,24E-04	311	18,45

de Passo Limitado, enquanto não houve convergência para os demais métodos de otimização utilizando a função objetivo (4.8).

Utiliza-se a ferramenta *Trim* (MathWorks, 2014) do software Matlab/Simulink, especializada em encontrar pontos de equilíbrio de sistemas dinâmicos, entretanto não se tem informações de como essa ferramenta funciona, i.e. como é construída a função objetivo e os detalhes de implementação dos métodos de otimização. Repete-se os experimentos para os 50 pontos iniciais definidos anteriormente e apresenta-se os resultados na tabela C.2 do apêndice C.

Apesar do método do Gradiente *Sampling* ser um método computacional dispendioso, pois a cada iteração há necessidade de avaliar a função objetivo (4.8) e computar os seus gradientes $n + 1$ vezes, este revelou-se um método robusto, convergindo em 96% dos pontos iniciais, enquanto, utilizando a ferramenta *Trim* do software Matlab/Simulink com o algoritmo de Pontos Interiores (resultados nas tabelas C.13 e C.14) a convergência foi 22% e 2% com os algoritmos *Trust Region Reflective* (resultados nas tabelas C.15 e C.16) e *Active Set* (resultados nas tabelas C.17 e C.18).

Notifica-se que todas as tabelas de resultado estão apresentadas no apêndice C.

4.2.5 Sistema Termo-Pneumático 2

O sistema Termo-Pneumático 2, representado pelo diagrama de blocos da figura 4.9, é constituído por 19 volumes adiabáticos, consequentemente, 38 variáveis de estado (Energia (J) e Massa (kg) por volume), e 23 orifícios isentrópicos. A configuração dos parâmetros iniciais do algoritmo 1 é realizada de acordo com as tabelas 4.1 e 4.8. Destaca-se que, diferentemente do sistema termo-pneumático 1 (subseção 4.2.4), o critério de parada foi modificado

Tabela 4.7: Valor das Variáveis de Estado em Regime Estacionário - Sistema 1

Variáveis de Otimização/Estado	Valor Inicial	Valor Final
Volume 1 - Energia	2,97E+03	5,07E+03
Volume 1 - Massa	7,67E-03	1,31E-02
Volume 2 - Energia	4,05E+03	4,71E+03
Volume 2 - Massa	1,05E-02	1,21E-02
Volume 3 - Energia	2,97E+03	4,31E+03
Volume 3 - Massa	7,67E-03	1,11E-02
Volume 4 - Energia	2,97E+03	3,87E+03
Volume 4 - Massa	7,67E-03	9,98E-03
Volume 5 - Energia	2,97E+03	3,36E+03
Volume 5 - Massa	7,67E-03	8,67E-03
Volume 6 - Energia	4,05E+03	6,36E+03
Volume 6 - Massa	1,05E-02	1,53E-02
Volume 7 - Energia	2,97E+03	5,18E+03
Volume 7 - Massa	7,67E-03	1,25E-02
Volume 8 - Energia	2,97E+03	6,56E+03
Volume 8 - Massa	7,67E-03	1,46E-02

Tabela 4.8: Valores Iniciais dos Parâmetros do Algoritmo 1 - Sistema 2

Parâmetros	Valores
ϵ_1 (Raio de Amostragem)	7,00E-01
μ (Atualização ϵ_k)	5,00E-01
ν_1 (Tolerância Otimalidade)	1,00E-01
ρ (Atualização ν_k)	8,00E-01
$f(x^1)$ (Função Objetivo Inicial)	2,32E+07

e acrescentou-se ao passo 2 (Critério de Parada) do algoritmo 1 a condição:

- Se ($\|g^k\| \leq \nu_{opt}$ e $\epsilon_k \leq \epsilon_{opt}$) ou ($f(x^k) \leq 8E^{-4}$) o algoritmo é finalizado;

Adota-se esse procedimento devido à dificuldade de se ajustar os parâmetros do método GS com Comprimento de Passo Limitado para atender $\epsilon_k \leq \epsilon_{opt}$ e $\nu_k \leq \nu_{opt}$. Sem a condição adicionada, o algoritmo 1 finaliza ao atingir o número máximo de iterações. Porém, percebe-se que $f(x^k) \leq 8,00E^{-4}$ garante que as variáveis de estado (otimização) do sistema atinjam erro relativo de 2,00% em relação as variáveis de estado em regime permanente. Por esse motivo, escolheu-se o valor $8,00E^{-4}$.

A condição inicial para cada variável de estado (otimização) é apresentada na segunda coluna da tabela 4.10, assim como os valores em regime estacionário na terceira coluna. Nota-se que há uma distância entre as variáveis de estado iniciais e em regime permanente, demonstrando a capacidade de convergência do método GS com Comprimento de Passo Limitado ao ponto ϵ -estacionário.

Devido à característica estocástica do método proposto, realiza-se dez experimentos, sendo os resultados apresentados na tabela 4.9. Nota-se que esta tabela possui uma coluna a mais que a tabela 4.6, a coluna Tolerância Final, fazendo-se necessária devido ao acréscimo da condição de parada já citado. Acentua-se que todos os experimentos atenderam ao critério de parada adicional, apesar do aumento do número de iterações e tempo de execução

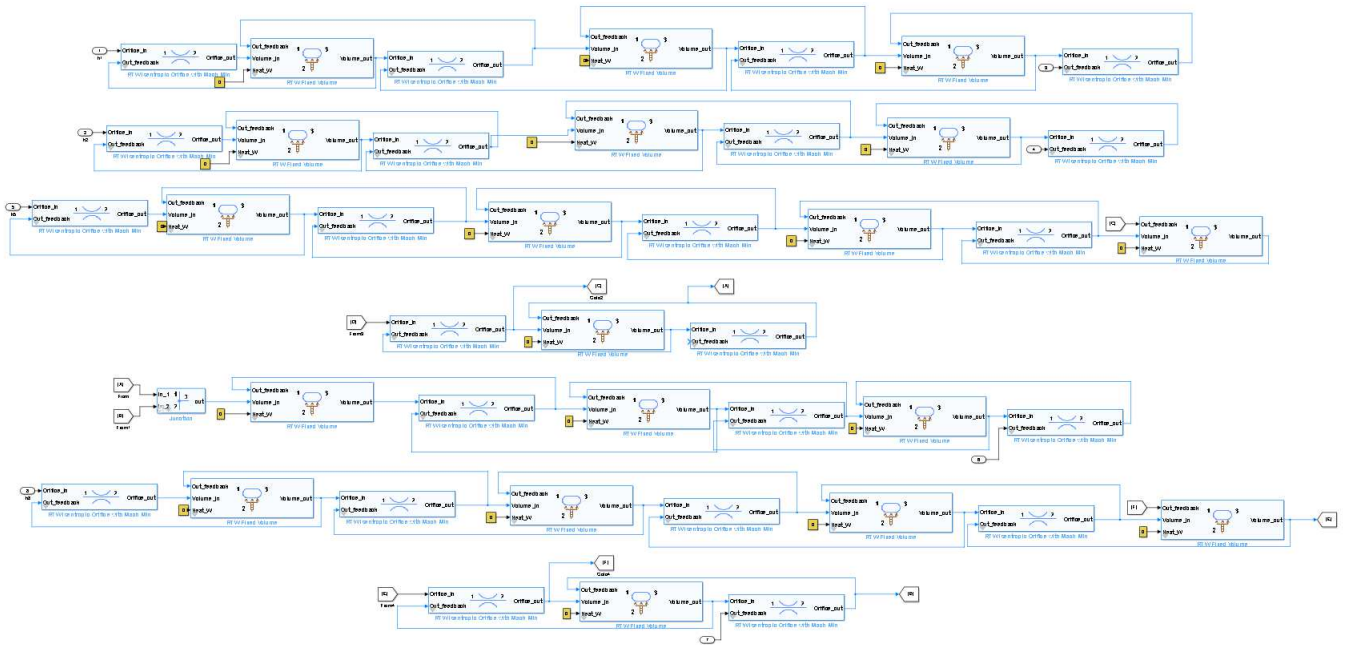


Figura 4.9: Sistema Termo-Pneumático 2 - Constituído de 19 Volumes Adiabáticos, portando 38 variáveis de estado, e 23 orifícios Isentrópicos

do algoritmo 1, consequência direta do aumento da complexidade (número de variáveis de estado) do modelo.

Semelhante ao realizado na subseção anterior 4.2.4 e com objetivo de validar a robustez do método GS com Comprimento de Passo Limitado, ou seja, a sua capacidade de convergência para pontos de equilíbrio do sistema termo-pneumático 2, gerou-se dez pontos iniciais (tabela C.23) aleatoriamente e uniformemente numa região das variáveis de estado, determinados também com base nos valores de pressão e temperatura das fontes externas do modelo da figura 4.9. A tabela C.21 mostra que 80% das condições iniciais alcançaram o regime permanente (terceira coluna da tabela 4.10 ou os valores das variáveis de estado, ao término do algoritmo 1, na tabela C.21).

Fazendo-se o uso da ferramenta *Trim* do *software Matlab/Simulink* percebe-se que há convergência (tabela C.22), utilizando o algoritmo dos pontos interiores (tabela C.29), apenas para 20% das condições iniciais ao regime estacionário. Já para os demais métodos, *Trust Region Reflective* (tabela C.30) e *Active Set* (tabela C.31), não houve convergência para ponto de equilíbrio.

Utilizando a função objetivo definida em (4.8) não se obteve convergência (tabela C.21) para os pontos de equilíbrio do sistema termo-pneumático 2 com o método GS (*Gradient Sampling*) e os métodos: Pontos Interiores, *Trust Region Reflective*, *SQP* e *Active Set* (tabelas de resultados C.25, C.26, C.27 e C.28, respectivamente). Possivelmente, a não convergência desses métodos determinísticos para a função Custo (4.8) reside no fato desta não ser continuamente diferenciável e os pontos iniciais (tabela C.23) estarem afastados do ponto de mínimo local ou do ponto em regime estacionário (terceira coluna da tabela 4.10). Todas as tabelas expondo os resultados dos métodos testados estão alocadas no apêndice C.

Tabela 4.9: Experimento Numérico - Sistema 2

Número do Experimento	Função Objetivo Final ($f(x^k)$)	Tolerância Final (v_k)	Raio de Amostragem Final (ϵ_k)	Número de Iterações (k)	Tempo (min)
1	7,98E-04	4,10E-02	4,38E-02	1857	13,77
2	7,98E-04	3,28E-02	2,19E-02	1948	14,46
3	7,97E-04	3,28E-02	2,19E-02	1962	14,61
4	7,97E-04	2,62E-02	1,09E-03	1677	12,50
5	7,94E-04	3,28E-02	2,19E-02	1702	12,61
6	7,97E-04	3,28E-02	2,19E-02	1584	11,75
7	7,84E-04	4,10E-02	4,38E-02	1733	13,09
8	7,89E-04	2,10E-02	5,47E-03	1923	14,46
9	7,91E-04	2,62E-02	1,09E-03	1635	12,31
10	7,99E-04	2,62E-02	1,09E-03	1689	12,49

4.3 Resumo do Capítulo

Inicia-se o capítulo (seção 4.1) com uma análise do método GS com Comprimento de Passo Limitado aplicado a um problema benchmark, a fim de evidenciar as suas características numérico/matemáticas, discutidas no capítulo 3, em relação a outros métodos.

A segunda seção (4.2) é destinada à construção do problema de otimização para o problema de determinar as condições de equilíbrio operacionais de sistemas dinâmicos, em especial, para sistemas termo-pneumáticos (subseções 4.2.1, 4.2.2 e 4.2.3). Já os resultados, são apresentados nas subseções 4.2.4 e 4.2.5 para os dois sistemas termo-pneumáticos de complexidades (número de variáveis de estado) diferentes.

Tabela 4.10: Valor das Variáveis de Estado em Regime Estacionário - Sistema 2

Variáveis de Otimização / Estado	Valor Inicial	Valor Final
Volume 1 - Energia	2,68E+03	6,77E+03
Volume 1 - Massa	6,90E-03	1,75E-02
Volume 2 - Energia	3,24E+03	5,98E+03
Volume 2 - Massa	8,36E-03	1,54E-02
Volume 3 - Energia	1,49E+03	3,71E+03
Volume 3 - Massa	3,83E-03	9,57E-03
Volume 4 - Energia	2,38E+03	5,90E+03
Volume 4 - Massa	6,13E-03	1,52E-02
Volume 5 - Energia	2,53E+03	6,23E+03
Volume 5 - Massa	6,52E-03	1,61E-02
Volume 6 - Energia	3,89E+03	5,17E+03
Volume 6 - Massa	1,00E-02	1,15E-02
Volume 7 - Energia	2,97E+03	4,50E+03
Volume 7 - Massa	7,67E-03	1,00E-02
Volume 8 - Energia	2,53E+03	5,20E+03
Volume 8 - Massa	6,52E-03	1,16E-02
Volume 9 - Energia	2,97E+03	9,13E+03
Volume 9 - Massa	7,67E-03	1,96E-02
Volume 10 - Energia	4,05E+03	8,80E+03
Volume 10 - Massa	1,05E-02	1,89E-02
Volume 11 - Energia	1,49E+03	4,22E+03
Volume 11 - Massa	3,83E-03	9,07E-03
Volume 12 - Energia	2,38E+03	6,46E+03
Volume 12 - Massa	6,13E-03	1,39E-02
Volume 13 - Energia	2,97E+03	7,69E+03
Volume 13 - Massa	7,67E-03	1,65E-02
Volume 14 - Energia	1,62E+03	2,23E+03
Volume 14 - Massa	4,18E-03	6,38E-03
Volume 15 - Energia	2,97E+03	4,63E+03
Volume 15 - Massa	7,67E-03	1,33E-02
Volume 16 - Energia	2,97E+03	6,35E+03
Volume 16 - Massa	7,67E-03	1,82E-02
Volume 17 - Energia	2,38E+03	5,82E+03
Volume 17 - Massa	6,13E-03	1,31E-02
Volume 18 - Energia	2,97E+03	6,43E+03
Volume 18 - Massa	7,67E-03	1,45E-02
Volume 19 - Energia	2,97E+03	5,42E+03
Volume 19 - Massa	7,67E-03	1,22E-02

Capítulo 5

Conclusões

Nesse trabalho o problema 1.1 é formulado como um problema de otimização mono objetivo, não-linear, irrestrito, não-convexo e não continuamente diferenciável. Havendo a necessidade da escolha de um método numérico de otimização que verse sobre essas características matemáticas, escolheu-se o método do *Gradient Samplig* (Burke et al., 2005) e (Kiwiel, 2007). Nesse método, lida-se com subgradientes, aproximando o diferencial de Goldstein de uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, no ponto $x \in \mathbb{R}^n$, pelo fecho convexo de m ($m \geq n + 1$) gradientes avaliados em pontos distribuídos aleatoriamente e uniformemente no conjunto $\mathbb{B}_\epsilon^f(x) = B(x; \epsilon) \cap D \subseteq \mathbb{R}^n$, em que D é um conjunto aberto e denso, onde f é continuamente diferenciável, como abordado em (Burke et al., 2002). O subgradiente desejado é o elemento de menor norma desse fecho convexo.

De imediato, uma desvantagem do método escolhido é a necessidade de avaliar a função objetivo e os respectivos gradientes em m pontos distintos, tornando essa etapa do método inviável para problemas em que avaliar a função objetivo f é custoso computacionalmente ou que o número de variáveis de otimização é elevado. Outro ponto negativo, para n grande, é a necessidade de solucionar o problema quadrático (3.17) a cada iteração k a fim de se encontrar a direção de descida, como mostrado na subseção 3.1.2. Entretanto, conforme apresentado no capítulo 4, o método *Gradient Samplig* com Comprimento de Passo Limitado mostrou-se um método robusto, obtendo sucesso de convergência para as variáveis de estado (otimização) ao regime estacionário em 96% dos experimentos realizados para o sistema termo-pneumático 1 e 80% para o sistema termo-pneumático 2, superior a todos os outros métodos de otimização testados.

Mas, para o sucesso nos experimentos numéricos, houve a necessidade de se restringir o problema quadrático (3.11) a uma restrição em caixa 3.2, impedindo que o método do *Gradient Samplig* original desse grandes passos entre os iterandos, o que resultaria em pontos (variáveis de estado) indesejados. Portanto, o método do *Gradient Samplig* com Comprimento de Passo Limitado é a contribuição acadêmica desse trabalho. Prova-se na subseção 3.4 que a direção de descida obtida por meio da solução do problema quadrático (3.17) não altera a análise de convergência realizada em (Kiwiel, 2007), entretanto são necessários alguns ajustes, sendo estes apresentados na mesma subseção.

O capítulo 2 apresentou as principais definições, lemas, proposições e teoremas para o entendimento completo do método do *Gradient Samplig* com Comprimento de Passo Limitado, estando citados no capítulo 3, quando há necessidade de se justificar as estratégias adotadas.

Por fim, salienta-se que, embora o problema seja construído para tratar problemas de otimização com as características matemáticas já especificadas, o algoritmo construído em [1](#) pode ser aplicado a problemas convexos e diferenciáveis. Porém, há outros métodos mais atrativos do ponto de vista de performance computacional, como:

- SQP - Programação Sequencial Quadrática - ([A.F. Izmailov, 2012](#)) e ([Fletcher, 1981](#));
- Pontos Interiores ([Byrd et al., 2000](#)) ;
- Região de Confiança ([N.R. Conn, 2000](#));
- Métodos Quasi-Newton ([Nocedal and Wright, 2006](#));

Caso o problema fosse convexo, mas não diferenciável, poder-se-ia utilizar os métodos *Bundle Methods* ([Lemaréchal, 1982](#)).

5.1 Propostas de Continuidade

Lista-se as seguintes propostas de trabalho como continuidade:

- Aplicar a metodologia abordada em ([Curtis and Que, 2013](#)) a fim de reduzir o número de avaliações da função objetivo e de gradientes a cada iteração do método do *Gradient Sampling* com Comprimento de Passo Limitado;
- Desenvolver uma estratégia para atualização corrente da restrição em caixa [3.2](#), permitindo, quando possível, que passos maiores possam ser dados em direção ao ponto de equilíbrio esperado.

Referências Bibliográficas

- A.F. Izmailov, M. S. (2012). *Otimização Vol 2: Métodos Computacionais*. IMPA, 2 edition.
- Bagirov, A., Karmita, N., and Makela, M. M. (2014). *Introduction to Nonsmooth Optimization*, volume 1. Springer.
- Burke, J. V., Lewis, A., and Overton, M. L. (2002). Approximating subdifferentials by random sampling of gradients. *Math. Oper. Res.*, 27:567 - 584.
- Burke, J. V., Lewis, A., and Overton, M. L. (2005). A robust gradient sampling algorithm for nonsmooth, nonconvex optimization. *SIAM J. Optim.*, 15:751 - 779.
- Byrd, R. H., Gilbert, J. C., and Nocedal, J. (2000). A trust region method based on interior point techniques for nonlinear programming. *Math.Program.*, 89:149 - 185.
- Clarke, F. H. (1983). *Optimization and Nonsmooth Analysis*, volume 1. CMS Ser. Monogr. Adv. Texts, John Wiley.
- Curtis, F. E. and Que, X. (2013). An adaptive gradient sampling algorithm for non-smooth optimization. *Optimization Methods and Software*, 28:6:1302 - 1324.
- Dorf, R. C. and Bishop, R. H. (2010). *Sistemas de Controle Modernos*. LTC, 11 edition.
- Fletcher, R. (1981). *Practical Methods of Optimization*, volume 1. John Wiley & Sons.
- Fox, R., Pritchard, P., and McDonald, A. (2010). *Introdução a Mecânica dos Fluidos*. LTC, 7 edition.
- Franklin, G. F., Powell, J., and Emami-Naeini, A. (2009). *Feedback Control of Dynamic Systems*. Addison Wesley, 6 edition.
- Fukunaga, K. and Narendra, M. (1975). A branch and bound algorithm for computing k nearest neighbors. *IEEE Trans. Computing*, 24:750 - 753.
- Isnard, C. (2013). *Introdução à medida e integração 3ed.*, volume 1. IMPA.
- Izmailov, A. F. and Solodov, M. V. (2012). *Otimização: Métodos Computacionais 2ed.*, volume 2. IMPA.
- Izmailov, A. F. and Solodov, M. V. (2014). *Otimização: Condições de Otimalidade, Elementos de Análise Convexa e Dualidade 3ed.*, volume 1. IMPA.
- Kiwiel, K. C. (2007). Convergence of the gradient sampling algorithm for nonsmooth nonconvex optimization. *SIAM J. Optim.*, 18:379 - 388.

- Lemaréchal, C. (1982). *Numerical experiments in nonsmooth optimization*, volume 1. International Institute for Applied Systems Analysis(IIASA).
- Lima, E. L. (2003). *Álgebra Linear 6ed.*, volume 1. IMPA.
- Lima, E. L. (2004a). *Análise Real*, volume 2. IMPA.
- Lima, E. L. (2004b). *Análise Real 7ed.*, volume 1. IMPA.
- MathWorks (2014). *Optimization toolbox: Users Guide R2014b*. MathWorks.
- M.J. Moran, H. S. (2009). *Principles of Thermodynamics Engineering*. LTC, 1 edition.
- M.S. Bazarra, C.M Shetty, H. S. (1993). *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*. John Wiley Sons, 2 edition.
- Nocedal, J. and Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization, 2nd ed.*, volume 1. Springer Ser. Oper. Res.
- N.R. Conn, N.I.M Gould, P. T. (2000). Trust-region methods. *MPS/SIAM Series on Optimization*.
- P.W. Atkins, L. J. (2006). *Princípios de Química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*. Bookman, 3 edition.
- Rao, S. (2010). *Engineering Optimization*. John Wiley & Son Ltd, 4 edition.
- Russel, J. (1994). *Química Geral*, volume 1. Pearson Makron Books, 1 edition.
- Ruszczynski, A. (2006). *Nonlinear Optimization*, volume 1. Princeton University Press.
- Utkin, V. I. (1977). Variable structure systems with sliding modes. *IEEE*, 22:212 - 222.

Apêndice A

Fundamentos Teóricos em Física e Matemática de Sistemas Dinâmicos Termo-Pneumáticos

Esse Apêndice tem como objetivo apresentar ao leitor os fundamentos físico/matemáticos utilizados para construção dos sistemas dinâmicos utilizados na seção 4. Estes são construídos por meio de modelos matemáticos em ambiente de simulação virtual, e.g. *Simulink*.

A.1 Sistemas Termo-Pneumáticos

Os modelos utilizados são constituídos de reservatórios adiabáticos e orifícios isentrópicos, representando uma parte do sistema de utilização de ar comprimido produzido pelos motores da aeronave, ou *Bleed Air System*, responsável por impedir a formação de gelo nas asas dos aviões. Estes modelos representam as tubulações presentes nesse sistema. O objetivo é encontrar as condições de operação do gás ideal (P.W. Atkins, 2006), em regime permanente, dentro dos reservatórios, fidedignos com o modo de operação real, dadas as condições de temperatura e pressão externas aos orifícios.

Por exemplo, o diagrama de fluxo da figura A.1 representa o escoamento (comportamento dinâmico) do gás ideal dentro da tubulação, como apresentado na figura A.2. A figura A.1 é constituído de 3 blocos: 2 orifícios isentrópicos, localizados aos extremos, e 1 reservatório adiabático, ao meio. Observa-se que a maneira como esses blocos foram projetados facilita a sua utilização.

A seguir são descritos os equacionamentos físico/matemáticos de cada bloco presentes na figura A.1, base da construção dos sistemas termo-pneumáticos 1 e 2 utilizados no capítulo 4.

A.1.1 Orifícios Isentrópicos

Os orifícios isentrópicos descritos nesta subseção abordam exclusivamente escoamentos compressíveis unidimensionais de substâncias puras (M.J. Moran, 2009), ou seja, substâncias em que a composição química é uniforme e invariável (Russel, 1994).

No equacionamento do modelo utiliza-se como fluido de escoamento o gás ideal (P.W. Atkins, 2006) caracterizado pelo fator de compressibilidade (Z) unitário e características abor-

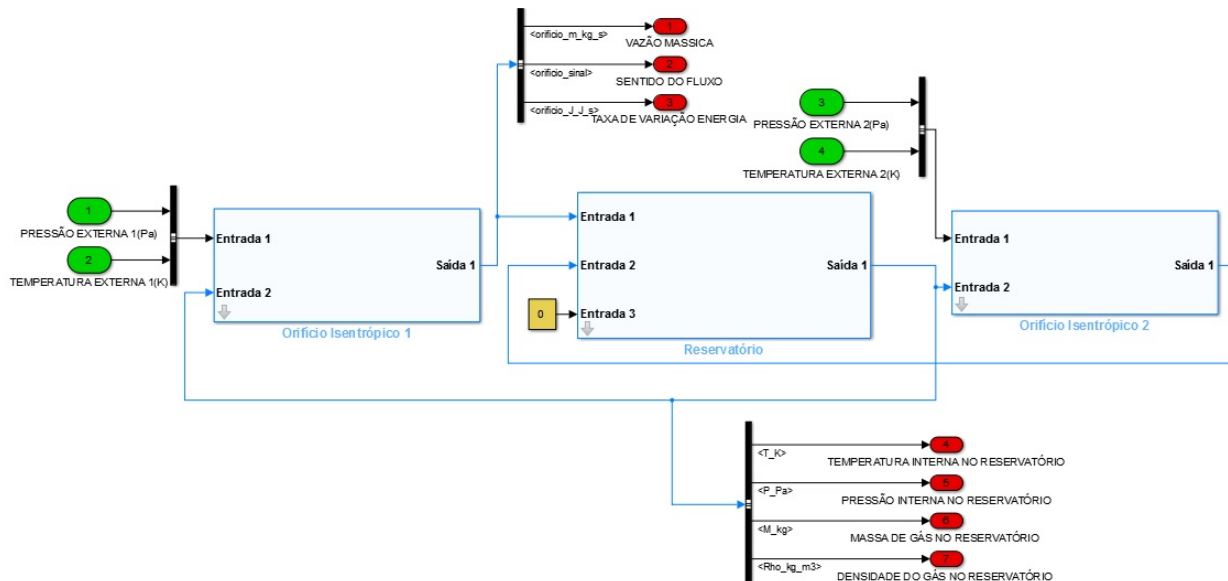


Figura A.1: Diagrama de Fluxo de um sistema de Termo-Pneumático simples



Figura A.2: Representação do Física do Diagrama de Fluxo da figura A.1

dadas em (M.J. Moran, 2009), como a energia interna (U) e a entalpia (H) dependerem exclusivamente da temperatura do gás.

O orifício é caracterizado como isentrópico devido a experimentos indicarem uma relação entre pressão e massa específica, através de uma onda sonora no fluido, comportamento quase isentrópico (M.J. Moran, 2009). Esta consideração e as características do gás ideal permitem desenvolver todo o equacionamento algébrico, já que o bloco “orifício” não acrescenta variáveis de estado ao processo.

A seguir, as equações algébricas, empregadas para a representação física do orifício isentrópico, serão apresentadas. Essas equações são associadas às propriedades do estado do gás, e.g. pressão (P), temperatura (T), volume (V), massa (m), e relacionadas a condição de estado de estagnação do fluido (M.J. Moran, 2009).

Cálculo do Número de Mach

O número de Mach é definido como a razão entre a velocidade de escoamento do fluido e a velocidade sônica (Fox et al., 2010), e dado por

$$M = \left[\frac{2}{k-1} \left(\left(\frac{P_o}{P_{sg}} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1 \right) \right]^{0,5}, \quad (\text{A.1})$$

onde:

- P_o é a pressão(Pa) de estagnação (maior pressão);
- P_{sg} é a pressão(Pa) do gás que escoar (menor pressão);
- k é o coeficiente de Poisson, $k = \frac{c_p}{c_v}$, que é adimensional;
- c_p é o calor específico a pressão constante ($\frac{J}{kg.K}$);
- c_v é o calor específico a volume constante ($\frac{J}{kg.K}$);
- M é o número de Mach do fluido que escoar.

Após o cálculo do número de Mach (M), deve-se verificar a característica do escoamento, pois este pode estar estrangulado. Isso significa que há um limite para a redução da pressão a jusante do escoamento que aumenta o Mach ao valor máximo (unitário). Para esse tipo de escoamento, "a vazão mássica é a máxima possível para as condições de estagnação dadas", (M.J. Moran, 2009). Esse fenômeno caracteriza um tipo de comportamento não-linear.

Cálculo da Temperatura de Saída do Gás Ideal

$$T_{sg} = \frac{T_o}{1 + 0,5(k-1)M^2}, \quad (\text{A.2})$$

onde:

- T_o é a temperatura(K) de estagnação (temperatura relacionada a pressão de estagnação);
- T_{sg} é a temperatura(K) do gás que escoar;
- k é o coeficiente de Poisson, $k = \frac{c_p}{c_v}$, que é adimensional;
- c_p é o calor específico a pressão constante ($\frac{J}{kg.K}$);
- c_v é o calor específico a volume constante ($\frac{J}{kg.K}$);
- M é o número de Mach.

A temperatura de saída do gás (T_{sg}) é utilizada para cálculo da vazão mássica($\frac{kg}{s}$) e variação da energia (E) relacionada ao fluxo de massa (Fox et al., 2010).

Cálculo da Pressão de Saída do Gás Ideal

$$P_{sg} = \frac{P_o}{(1 + 0,5(k-1)M^2)^{\frac{k}{k-1}}} \quad (\text{A.3})$$

Os parâmetros da Equação (A.3) já foram descritos acima. A necessidade de recalculer a pressão de saída do gás ideal (P_{sg}) advém do fenômeno do escoamento estrangulado, que limita as condições de escoamento dentro do bocal.

Cálculo da Vazão Mássica

$$\dot{m} = AP_{sg}M \left(\frac{k}{RT_{sg}} \right)^{0,5}, \quad (\text{A.4})$$

onde:

- A é a área (m^2);
- P_{sg} é a pressão(Pa) do gás que escoo;
- M é o número de Mach;
- T_{sg} é a temperatura(K) do gás que escoo;
- R é a constante universal dos gases ($\frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}}$).

A Equação (A.4) é uma manipulação algébrica entre as Equações (A.5), (A.6) e (A.7), sendo válida apenas para as considerações feitas sobre o gás ideal e as condições de escoamento dadas por (M.J. Moran, 2009).

$$P_{sg}\nu = RT_{sg}, \quad (\text{A.5})$$

$$\dot{m} = A\rho v, \quad (\text{A.6})$$

$$c = \sqrt{kRT_{sg}}, \quad (\text{A.7})$$

onde:

- ν é o volume específico ($\frac{\text{m}^3}{\text{mol}}$) do gás;
- ρ é a densidade ($\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$) do fluido que escoo;
- v é a velocidade ($\frac{\text{m}}{\text{s}}$) de escoamento do fluido.

Cálculo da Variação de Energia

$$\dot{Q} = \dot{m}c_p T_o, \quad (\text{A.8})$$

onde:

- \dot{Q} é a variação de energia, sob a forma de calor, através do fluxo de massa;
- \dot{m} é a vazão mássica ($\frac{\text{kg}}{\text{s}}$);

- c_p é o calor específico a pressão constante ($\frac{J}{kg.K}$);
- T_0 é a temperatura(K) de estagnação.

A variação de energia \dot{Q} , sob a forma de calor, será utilizada para balanço de energia do volume de controle no reservatório.

A.1.2 Reservatório Adiabático

Os reservatórios utilizados nos modelos são caracterizados como volume fixo e adiabático, ou seja, não ocorre troca de energia sob forma de calor entre as paredes do reservatório e o meio externo (P.W. Atikins, 2006). Isso implica em que a única forma de troca de energia entre os meios é por meio do fluido que escoar através dos orifícios isentrópicos.

O conceito de volume de controle (Fox et al., 2010) é aplicado para cálculo das propriedades do estado do gás ideal dentro do reservatório, e.g. massa, temperatura, pressão.

Balanço de Massa no Volume de Controle

$$\left. \frac{dm}{dt} \right|_s = \frac{\partial}{\partial t} \int_{vc} \rho dV + \int_{sc} \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} \quad (A.9)$$

O primeiro termo, antes do sinal de igualdade, é igual a zero, devido à conservação de massa do sistema, lei de Lavoisier (Russel, 1994). O segundo termo significa a taxa de variação de massa dentro do volume de controle (vc), e o terceiro, a vazão mássica através da superfície de controle (sc), (Fox et al., 2010).

A partir da Equação (A.9) é calculado o valor da massa em um instante arbitrário dentro do reservatório adiabático.

Balanço de Energia no Volume de Controle

$$\frac{dE_{vc}}{dt} = \dot{Q}_{vc} - \dot{W}_{vc} + \sum_e \dot{m}_e \left(h_e + \frac{v_e^2}{2} + gz_e \right) - \sum_s \dot{m}_s \left(h_s + \frac{v_s^2}{2} + gz_s \right), \quad (A.10)$$

onde:

- \dot{Q}_{vc} é a variação de calor (J) por unidade de tempo (s) ao longo da superfície do volume de controle;
- \dot{W}_{vc} é a taxa de transferência de energia ($\frac{J}{s}$) associada ao trabalho através da superfície de controle;
- \dot{m}_e e \dot{m}_s são as vazões mássicas ($\frac{kg}{s}$) na entrada e saída respectivamente;
- v_e e v_s são as velocidades ($\frac{m}{s}$) do escoamento que entra e sai, respectivamente, através da superfície de controle;
- h_e e h_s estão relacionados com a entalpia do escoamento que entra e sai do volume de controle, respectivamente;

- $\dot{m}_e g z_e$ e $\dot{m}_s g z_s$, onde g é a aceleração da gravidade ($\frac{m}{s^2}$), são representações da variação de energia potencial gravitacional do fluido que escoar para dentro e para fora do volume de controle, respectivamente.

Como o modelo representa um reservatório isovolumétrico, $\dot{W}_{vc} = 0$, e adiabático, $\dot{Q}_{vc} = 0$, a solução do problema se restringe apenas ao primeiro e aos dois últimos termos da Equação (A.10), significando que a taxa de variação de energia dentro do volume de controle $\left(\frac{dE_{vc}}{dt}\right)$ depende apenas do fluido que escoar para dentro e para fora do volume de controle (vc).

Por meio do balanço de energia e massa é calculada a temperatura dentro do reservatório em um instante arbitrário (M.J. Moran, 2009). A pressão dentro do reservatório pode ser obtida por meio da equação de Clapeyron (A.5) para gases ideais.

A seguir é descrito o significado das entradas e saídas por blocos para construção do diagrama de fluxo da figura A.1.

A.2 Entradas e Saídas dos Blocos

A fim de facilitar o entendimento do processo e não deixar o diagrama de simulação com excesso de linhas, estas representam na Figura A.1 um conjunto (barramento) de sinais, que são identificados e explicados.

A.2.1 Bloco Orifício

Na Figura A.1, o modelo do bloco “orifício isentrópico” é composto por duas entradas e uma saída, sendo internamente descrito por equações algébricas expostas na subseção A.1.1.

As informações da área do orifício em (m^2), constante universal dos gases (R) e coeficiente de Poisson ($k = \frac{c_p}{c_v}$) são fornecidas para as equações do bloco como parâmetros internos, podendo também ser alteradas diretamente no bloco.

Entrada 1 do Bloco “Orifício”

A Entrada 1 representa as condições externas ao bloco “orifício”, possuindo o barramento que a conecta dois sinais, com as seguintes informações:

- Sinal 1: Pressão externa (Pa);
- Sinal 2: Temperatura externa (K).

Entrada 2 do Bloco “Orifício”

A Entrada 2 representa as condições do gás dentro do reservatório, possuindo o barramento que a conecta dois sinais, com as seguintes informações:

- Sinal 1: Pressão interna do gás dentro do reservatório (Pa);
- Sinal 2: Temperatura interna do gás dentro do reservatório (K).

Estes sinais são provenientes da saída do bloco reservatório.

Saída 1 do Bloco “Orifício”

A saída do orifício está conectada a entrada do reservatório por um barramento, que é composto pelos seguintes sinais:

- Sinal 1: Pressão de saída do gás (P_{sg}) (Pa), calculado da equação (A.3);
- Sinal 2: Velocidade do gás (Mach), calculado da equação (A.1);
- Sinal 3: Temperatura de saída do gás (T_{sg}) (K), calculado da equação (A.2);
- Sinal 4: Temperatura de estagnação (T_o) (K), relacionado a pressão de estagnação (P_o);
- Sinal 5: Vazão mássica do gás que escoar (\dot{m}) ($\frac{Kg}{s}$), calculado da equação (A.6);
- Sinal 6: Indicação do sentido de escoamento do gás para o cálculo do balanço de massa (A.9) e balanço de energia (A.10), e.g. do meio externo para o interior do reservatório é 1, o fluxo inverso é -1.
- Sinal 7: Taxa de variação de energia, sob forma de calor, que atravessa o orifício, calculado por meio da equação de variação da quantidade de calor, (P.W. Atikins, 2006).

A.2.2 Bloco Reservatório

Como representado no diagrama de fluxo geral da Figura A.1, o bloco que representa o reservatório isovolumétrico é constituído de três entradas e uma saída, sendo o responsável por calcular o balanço de massa (A.9) e balanço de energia (A.10) no volume de controle (Seção A.1.2). Este bloco é o responsável pela dinâmica do modelo, já que é representado por equações diferenciais.

As informações da constante universal dos gases (R), coeficiente de Poisson (k), volume do reservatório (m^3), temperatura inicial do reservatório (K) e pressão inicial do reservatório (Pa) são parâmetros internos, podendo ser configuradas diretamente no bloco, caso necessário.

Entrada 1

A Entrada 1 do reservatório recebe o barramento de sinal proveniente da Saída 1 do Orifício 1. Os sinais 5, 6 e 7 contidos nesse barramento são utilizados para o cálculo do balanço de massa e energia, (A.9) e (A.10), respectivamente.

Entrada 2

A Entrada 2 do reservatório é conectada à Saída 1 do Orifício 2, sendo as informações presentes nos Sinais 5, 6 e 7 utilizadas no cálculo do balanço de massa (A.9) e energia (A.10).

Entrada 3

A Entrada 3 está relacionada a \dot{Q}_{vc} , que é a variação de calor (J) por unidade de tempo (s) ao longo da superfície do volume de controle, e \dot{W}_{vc} , que é a taxa de transferência de energia ($\frac{J}{s}$) associada ao trabalho através da superfície de controle. Como o reservatório é caracterizado como adiabático e isovolumétrico, então $\dot{Q}_{vc} = 0$ e $\dot{W}_{vc} = 0$, sendo essa entrada representada por um bloco constante de valor nulo.

Saída 1

A Saída 1 do reservatório apresenta os seguintes sinais em seu barramento:

- Sinal 1: Temperatura do gás dentro do reservatório (K), calculado integrando a equação de balanço de energia (A.10) no tempo (s) e aplicando a fórmula de quantidade de calor (P.W. Atikins, 2006);
- Sinal 2: Pressão do gás dentro do reservatório (Pa), calculado por meio da equação de Clapeyron (A.5);
- Sinal 3: Massa do gás dentro do reservatório (kg), calculado por meio da equação de balanço de massa (A.9);
- Sinal 4: Densidade do gás dentro do reservatório ($\frac{kg}{m^3}$), calculado dividindo-se a massa (kg) pelo volume fixo (m^3), já que o reservatório é isovolumétrico.

É visto por meio da Figura A.1 que a Saída 1 do reservatório é conectada, por meio de um barramento de sinal, à Entrada 2 dos blocos “orifício isentrópico”. Contudo estes blocos só utilizarão para cálculo interno as informações de pressão e temperatura interna do gás.

A.3 Condições de Equilíbrio de Sistemas Dinâmicos

Em (Franklin et al., 2009; Dorf and Bishop, 2010) define-se Representação em Espaço de Estados como um conjunto de equações de primeira ordem que descrevem o comportamento dinâmico do sistema, por meio da evolução do vetor de variáveis de estado com o tempo. A principal vantagem desse tipo de representação é o fato da ODE (*Ordinary Differential Equation*) poder representar sistemas não-lineares, como os sistemas termo-pneumáticos em análise, e variantes no tempo (Dorf and Bishop, 2010). Essa abordagem pode ser expressa matematicamente como,

$$\dot{\vec{x}} = F(\vec{x}, \vec{u}), \quad (A.11)$$

$$\vec{y} = G(\vec{x}, \vec{u}), \quad (A.12)$$

onde:

- $\dot{\vec{x}}$ representa a taxa de variação do vetor de variáveis de estado;

- $F(\vec{x}, \vec{u})$ e $G(\vec{x}, \vec{u})$ são funções conhecidas, onde os argumentos são as variáveis de estado atuais e as entradas do sistema, respectivamente;
- \vec{y} representa a saída do sistema.

Para que ocorra condição de equilíbrio (eq) é preciso que a derivada dos estados do sistema ($\dot{\vec{x}}$) seja nula (Fletcher, 1981) para valores constantes \vec{x}_{eq} e \vec{u}_{eq} , acarretando:

$$\dot{\vec{x}}_{eq} = F(\vec{x}_{eq}, \vec{u}_{eq}) = 0, \quad (\text{A.13})$$

$$\vec{y}_{eq} = G(\vec{x}_{eq}, \vec{u}_{eq}). \quad (\text{A.14})$$

A interpretação das Equações (A.13) e (A.14) é que não há variação das variáveis de estado (\vec{x}_{eq}) e saídas (\vec{y}_{eq}) com o tempo na condição de equilíbrio. Estes permanecem constantes caso não haja nenhuma perturbação no sistema (Franklin et al., 2009), ou mudança da entrada (\vec{u}) em relação a entrada no estado de equilíbrio (\vec{u}_{eq}).

Deve-se ressaltar que a condição de equilíbrio não está relacionada com a estabilidade do sistema. Esta é uma propriedade do comportamento dinâmico do sistema em torno dos pontos de equilíbrio, que podem ser estáveis ou instáveis. Por exemplo, um sistema como o Pêndulo Invertido possui o ponto máximo, em que a haste está na posição vertical para cima, como equilíbrio instável, pois qualquer variação em torno deste ponto (equilíbrio) incapacita o sistema a retorná-lo de forma natural, (Dorf and Bishop, 2010).

Apêndice B

Demonstrações do Capítulo 3

B.1 Demonstração 1

Demonstra-se a equivalência entre os problemas (3.9) e (3.10).

Dado o problema (3.9)

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_g f(g) = \frac{1}{2} \|g\|^2 \\ s.t. g \in \mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x) \end{array} \right\}. \quad (\text{B.1})$$

Tem-se que $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x)$ é um conjunto compacto e $f(g)$ é uma função contínua, pelo Teorema de Weierstrass (Lima, 2004a), existe um g^* que minimiza f . Sendo $f(g)$ uma função convexa definida em um conjunto $\mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x)$ convexo então g^* é único. Pelo teorema 2.1.4,

$$g^* = \sum \alpha_i \nabla f(x^i), \quad (\text{B.2})$$

onde,

$$\sum \alpha_i = 1, \quad \alpha_i \in \mathbb{R}_+, \quad i = 1, \dots, m \quad \text{e} \quad x^i \in \Gamma_\epsilon^{f,m}(x) \quad (\text{B.3})$$

e $\Gamma_\epsilon^{f,m}(x)$ definido na equação 3.4.

Define-se:

$$\nabla_g L(g, \alpha) = g - \sum \alpha_i \nabla f(x_i) \quad \text{com} \quad \nabla_g L(g^*, \alpha) = 0. \quad (\text{B.4})$$

E pelo teorema Fundamental do Cálculo (Lima, 2004a), integra-se $\nabla_g L(g, \alpha)$ em g , obtendo-se

$$L(g, \alpha) = \frac{1}{2} \langle g, g \rangle + \langle Q\alpha, -g \rangle, \quad (\text{B.5})$$

onde

$$(g, \alpha) \in G_\epsilon^f \times \mathbb{R}_+^m \quad \text{e} \quad Q = [\nabla f(x_1), \dots, \nabla f(x_m)]. \quad (\text{B.6})$$

Expandindo (B.5) e “adicionando” z , tem-se:

$$L(g, \alpha) = \frac{1}{2} \langle g, g \rangle + \sum \alpha_i \langle \nabla f(x_i), -g \rangle + z - z, \quad (\text{B.7})$$

$$L(g, \alpha) = \frac{1}{2}\langle g, g \rangle + z + \sum \alpha_i (\langle \nabla f(x_i), -g \rangle - z). \quad (\text{B.8})$$

Como

$$\sum \alpha_i = 1, \quad \alpha_i \geq 0 \quad \text{e} \quad i = 1, \dots, m. \quad (\text{B.9})$$

Então (B.8) é a Lagrangiana (Izmailov and Solodov, 2014) do problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{g,z} \quad z + \frac{1}{2} \|g\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad \nabla f(y)^\top (-g) \leq z \quad \forall y \in \Gamma_\epsilon^{f,m}(x) \end{array} \right\}. \quad (\text{B.10})$$

Assim, os problemas (B.1) e (B.10) são equivalentes no sentido que o ponto estacionário (M.S. Bazarra, 1993) deste é solução daquele problema.

B.2 Demonstração 2

Demonstra-se nessa seção que $f'(x^k; d) = \nabla f(x^k)^\top d \leq -d^\top H d$.

O problema de otimização

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{d,z} \quad z + \frac{1}{2} d^\top H d \\ \text{s.t.} \quad f(x^k) + \nabla f(x)^\top d \leq z \quad \forall x \in \Gamma_\epsilon^{f,m}(x^k) \end{array} \right\} \quad (\text{B.11})$$

é equivalente ao problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_v \quad \frac{1}{2} \|v\|^2 \\ \text{s.t.} \quad v \in \mathcal{AG}_\epsilon^{f,m}(x^k) \end{array} \right\}, \quad (\text{B.12})$$

em que $H^{-1} = \mathcal{A}^\top \mathcal{A}$, lembrando que H é uma matriz simétrica e definida positiva que sempre admite essa decomposição (e.g. via decomposição de Cholesky).

Aplicando o teorema 2.1.12, tem-se que se v^* é solução de (B.12), então:

$$\langle v^*, (v - v^*) \rangle \geq 0, \quad \forall v \in \mathcal{AG}_\epsilon^{f,m}(x^k), \quad (\text{B.13})$$

e, conseqüentemente,

$$\langle v^*, v \rangle \geq \langle v^*, v^* \rangle, \quad \forall v \in \mathcal{AG}_\epsilon^{f,m}(x^k). \quad (\text{B.14})$$

Fazendo $v = \mathcal{A} \nabla f(x^k)$, tem-se que

$$\langle v^*, \mathcal{A} \nabla f(x^k) \rangle \geq \langle v^*, v^* \rangle \quad (\text{B.15})$$

e

$$\langle v^*, \mathcal{A} \nabla f(x^k) \rangle = \langle \mathcal{A}^\top v^*, \nabla f(x^k) \rangle \geq \langle v^*, v^* \rangle. \quad (\text{B.16})$$

Visto que $d = -\mathcal{A}^\top v^* = -H^{-1} g^*$ para algum $g^* \in \mathcal{G}_\epsilon^{f,m}(x^k)$ e realizando algumas manipulações algébricas, chega-se a:

$$\langle d, \nabla f(x^k) \rangle \leq -d^\top H d. \quad (\text{B.17})$$

B.3 Demonstração 3

Análise do problema de otimização (3.17) com a adição do Comprimento de Passo Limitado

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{d,z} \quad z + \frac{1}{2}d^\top Hd \\ \text{s.t.} \quad f(x) + \nabla f(y)^\top d \leq z \quad \forall y \in \Gamma_\epsilon^{f,m}(x) \\ |d_i| \leq \eta_i \quad i = 1, 2, \dots, n \end{array} \right\}. \quad (\text{B.18})$$

Construindo a Lagrangiana do problema (B.18), tem-se $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^m \times \mathbb{R}_+^n \times \mathbb{R}_+^n \rightarrow \mathbb{R}$ com:

$$L(d, z, \alpha, \delta, \theta) = z + \frac{1}{2}d^\top Hd + \alpha^\top (f(x) + \nabla f^\top(y)d - z) + \delta_1(d^1 - \eta_1) + \dots + \delta_n(d^n - \eta_n) + \theta_1(-d^1 - \eta_1) + \dots + \theta_n(-d^n - \eta_n); \quad (\text{B.19})$$

e na condição de otimalidade de KKT (Kurush-Kuhn-Tucker) no ponto ótimo $(d^*, z^*, \alpha^*, \delta^*, \theta^*)$ tem-se:

$$\frac{\partial L}{\partial d}(d^*, z^*, \alpha^*, \delta^*, \theta^*) = Hd^* + \sum_{j=0}^m \alpha_j \nabla f(y^j) + \delta^* - \theta^* = 0, \quad (\text{B.20})$$

$$\delta^* = \begin{pmatrix} \delta_1^* \\ \vdots \\ \delta_n^* \end{pmatrix}, \quad (\text{B.21})$$

$$\theta^* = \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_n^* \end{pmatrix}, \quad (\text{B.22})$$

$$\frac{\partial L}{\partial z}(d^*, z^*, \alpha^*, \delta^*, \theta^*) = 1 + \left(-\sum_{j=0}^m \alpha_j\right) = 0 \Leftrightarrow \sum_{j=0}^m \alpha_j = 1, \quad (\text{B.23})$$

$$f(x^k) + \nabla f(y)^\top d - z \leq 0 \quad \forall y \in \Gamma_\epsilon^{f,m}(x), \quad (\text{B.24})$$

$$\left. \begin{array}{l} \alpha_j (f(x) + \nabla f^\top(y^j)d - z) = 0 \\ \alpha_j \geq 0 \end{array} \right\} j = 0, 1, \dots, m, \quad (\text{B.25})$$

$$\left. \begin{array}{l} |d_i| \leq \eta_i \\ \delta_i(d_i - \eta_i) = 0 \\ \theta_i(-d_i - \eta_i) = 0 \\ \theta_i, \delta_i \geq 0 \end{array} \right\} i = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{B.26})$$

De (B.20), tem-se que

$$d^s = \underbrace{-H^{-1}\left(\sum_{j=0}^m \alpha_j \nabla f(x^j)\right)}_{d^*} + \underbrace{H^{-1}(\theta - \delta)}_{d'} \quad (\text{B.27})$$

e, portanto,

$$d^s = d^* + d'. \quad (\text{B.28})$$

Já de **B.23**, obtem-se que

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j = 1. \quad (\text{B.29})$$

Substituindo (**B.28**) nas equações (**B.26**), tem-se:

- $\delta_i(d_i^s - \eta_i) = 0$:

$$d_i^s - \eta_i = 0 \Rightarrow d_i^* + d_i' - \eta_i = 0 \Rightarrow d_i' = \eta_i - d_i^* \quad (\text{B.30})$$

No caso $d_i^* \geq \eta_i \Rightarrow \eta_i = B_i d_i^*$, com $B_i \in (0, 1]$, resultando em:

$$d_i' = (B_i - 1)d_i^*. \quad (\text{B.31})$$

Caso contrário $d_i' = 0$, $B_i = 1$ e $\delta_i = 0$.

- $\theta_i(-d_i^s - \eta_i) = 0$:

$$-(d_i^* + d_i') - \eta_i = 0 \Rightarrow d_i' = -\eta_i - d_i^*, \quad (\text{B.32})$$

No caso $d_i^* \leq -\eta_i \Rightarrow -\eta_i = B_i d_i^*$, com $B_i \in (0, 1]$, resultando em:

$$d_i' = B_i d_i^* - d_i^* = (B_i - 1)d_i^*. \quad (\text{B.33})$$

Caso contrário $d_i' = 0$, $B_i = 1$ e $\theta_i = 0$.

Desse modo:

$$d^s = d^* + d' = Qd^*, \quad (\text{B.34})$$

onde:

$$Q = \begin{pmatrix} B_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & B_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & B_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & B_n \end{pmatrix}, \quad (\text{B.35})$$

com $B_i \in (0, 1]$, definido nos itens anteriores.

Da demonstração **B.2**, tem-se que:

$$\langle d, \nabla f(x^k) \rangle \leq -d^\top H d, \quad \text{onde } d = d^*. \quad (\text{B.36})$$

Fazendo $d = Q^{-1}d^s$ e sabendo que Q^{-1} é uma matriz diagonal, com todos os elementos $a_{ii} \geq 1$, para $i = 1, 2, \dots, n$, obtem-se:

$$\langle Q^{-1}d^s, \nabla f(x^k) \rangle \leq -(Q^{-1}d^s)^\top H(Q^{-1}d^s) \quad (\text{B.37})$$

e, chamando $M = Q^{-1}$, com λ_{min} o menor elemento da sua diagonal, que é maior, ou, igual a 1, tem-se.

$$\lambda_{min} \langle d^s, \nabla f(x^k) \rangle \leq \langle Md^s, \nabla f(x^k) \rangle \leq -(d^s)^\top HM^2d^s \leq -(d^s)^\top Hd^s, \quad (\text{B.38})$$

implicando em:

$$\langle d^s, \nabla f(x^k) \rangle \leq -(d^s)^\top Hd^s. \quad (\text{B.39})$$

Ou seja, limitar o comprimento de passo, através de uma restrição em caixa (*Box Constraints*) acrescentada ao problema (3.11), resultando no problema quadrático (B.18), não invalida a busca em linha, ou, *line Search* abordada na seção 3.1.3.

Apêndice C

Tabelas de Resultados

Tabela C.1: Mapeamento de Convergência utilizando a Função Objetivo (4.8)-Sistema Dinâmico 1. Número 1 - Convergência para o ponto de equilíbrio operacional. Número 0 - Não convergência.

Vetor de Variáveis de Estado Iniciais	Algoritmos Numéricos					
	GS com Passo Limitado	GS	Interior-Point	SQP	Active Set	Trust Region Reflective
1	1	0	0	0	0	0
2	1	0	0	0	0	0
3	1	0	0	0	0	0
4	1	0	0	0	0	0
5	1	0	0	0	0	0
6	1	0	0	0	0	0
7	1	0	0	0	0	0
8	1	0	0	0	0	0
9	1	0	0	0	0	0
10	1	0	0	0	0	0
11	1	0	0	0	0	0
12	1	0	0	0	0	0
13	1	0	0	0	0	0
14	0	0	0	0	0	0
15	1	0	0	0	0	0
16	1	0	0	0	0	0
17	1	0	0	0	0	0
18	1	0	0	0	0	0
19	1	0	0	0	0	0
20	1	0	0	0	0	0
21	1	0	0	0	0	0
22	0	0	0	0	0	0
23	1	0	0	0	0	0
24	1	0	0	0	0	0
25	1	0	0	0	0	0
26	1	0	0	0	0	0
27	1	0	0	0	0	0
28	1	0	0	0	0	0
29	1	0	0	0	0	0
30	1	0	0	0	0	0
31	1	0	0	0	0	0
32	1	0	0	0	0	0
33	1	0	0	0	0	0
34	1	0	0	0	0	0
35	1	0	0	0	0	0
36	1	0	0	0	0	0
37	1	0	0	0	0	0
38	1	0	0	0	0	0
39	1	0	0	0	0	0
40	1	0	0	0	0	0
41	1	0	0	0	0	0
42	1	0	0	0	0	0
43	1	0	0	0	0	0
44	1	0	0	0	0	0
45	1	0	0	0	0	0
46	1	0	0	0	0	0
47	1	0	0	0	0	0
48	1	0	0	0	0	0
49	1	0	0	0	0	0
50	1	0	0	0	0	0

Tabela C.2: Mapeamento de Convergência utilizando o Software Trim (MatLab) - Sistema Dinâmico 1. Número 1 - Convergência para o ponto de equilíbrio operacional. Número 0 - Não convergência.

Vetor de Variáveis de Estado Iniciais	Algoritmos Numéricos			
	GS com Passo Limitado	Interior-Point	Active Set	Trust Region Reflective
1	1	1	1	1
2	1	0	0	0
3	1	0	0	0
4	1	1	0	0
5	1	0	0	0
6	1	1	0	0
7	1	0	0	0
8	1	0	0	0
9	1	0	0	0
10	1	0	0	0
11	1	0	0	0
12	1	0	0	0
13	1	0	0	0
14	0	0	0	0
15	1	0	0	0
16	1	0	0	0
17	1	0	0	0
18	1	0	0	0
19	1	1	0	0
20	1	0	0	0
21	1	0	0	0
22	0	0	0	0
23	1	0	0	0
24	1	0	0	0
25	1	0	0	0
26	1	0	0	0
27	1	1	0	0
28	1	0	0	0
29	1	0	0	0
30	1	0	0	0
31	1	0	0	0
32	1	0	0	0
33	1	0	0	0
34	1	1	0	0
35	1	1	0	0
36	1	1	0	0
37	1	0	0	0
38	1	1	0	0
39	1	0	0	0
40	1	0	0	0
41	1	0	0	0
42	1	0	0	0
43	1	0	0	0
44	1	1	0	0
45	1	0	0	0
46	1	0	0	0
47	1	0	0	0
48	1	0	0	0
49	1	0	0	0
50	1	1	0	0

Tabela C.3: Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Algoritmos Numéricos									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Volume1-Energia	5,40E+03	6,42E+03	5,52E+03	6,07E+03	3,97E+03	4,35E+03	5,11E+03	4,89E+03	5,33E+03	6,56E+03
Volume1-Massa	5,15E-01	1,45E-02	1,63E-02	2,38E-02	9,72E-03	1,72E-02	1,47E-02	1,28E-02	1,26E-02	2,49E-02
Volume2-Energia	3,77E+03	5,52E+03	5,56E+03	5,79E+03	5,77E+03	4,43E+03	4,90E+03	3,24E+03	5,13E+03	3,97E+03
Volume2-Massa	4,39E-01	1,77E-02	1,40E-02	2,30E-02	1,36E-02	1,65E-02	1,68E-02	1,18E-02	1,96E-02	1,37E-02
Volume3-Energia	5,23E+03	6,45E+03	3,06E+03	5,00E+03	3,50E+03	4,76E+03	3,60E+03	5,59E+03	4,83E+03	2,95E+03
Volume3-Massa	5,21E-01	2,12E-02	8,74E-03	1,54E-02	9,01E-03	2,01E-02	1,48E-02	1,44E-02	1,97E-02	7,34E-03
Volume4-Energia	4,93E+03	2,85E+03	5,82E+03	6,10E+03	5,40E+03	4,04E+03	5,95E+03	5,20E+03	6,33E+03	6,53E+03
Volume4-Massa	5,19E-01	6,41E-03	1,68E-02	1,50E-02	1,93E-02	1,07E-02	2,28E-02	1,94E-02	2,47E-02	1,84E-02
Volume5-Energia	4,45E+03	5,00E+03	3,01E+03	6,29E+03	3,46E+03	3,11E+03	2,81E+03	5,64E+03	5,45E+03	6,46E+03
Volume5-Massa	5,06E-01	1,40E-02	8,81E-03	2,20E-02	1,16E-02	8,18E-03	6,84E-03	1,53E-02	1,81E-02	1,68E-02
Volume6-Energia	5,35E+03	6,75E+03	5,39E+03	5,87E+03	4,67E+03	6,62E+03	3,52E+03	2,97E+03	6,27E+03	4,28E+03
Volume6-Massa	9,07E-02	1,60E-02	1,23E-02	1,58E-02	1,28E-02	1,84E-02	1,19E-02	8,11E-03	1,43E-02	1,39E-02
Volume7-Energia	6,67E+03	3,45E+03	3,69E+03	5,20E+03	6,19E+03	3,90E+03	3,05E+03	5,80E+03	4,47E+03	3,16E+03
Volume7-Massa	1,48E-02	1,33E-02	8,58E-03	1,76E-02	2,51E-02	1,49E-02	7,26E-03	2,11E-02	1,61E-02	1,14E-02
Volume8-Energia	6,57E+03	5,04E+03	3,62E+03	5,95E+03	6,47E+03	5,40E+03	6,67E+03	4,96E+03	5,92E+03	5,92E+03
Volume8-Massa	1,11E-01	1,13E-02	1,55E-02	2,09E-02	2,68E-02	1,60E-02	2,62E-02	1,49E-02	1,88E-02	1,36E-02

Tabela C.4: Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Volume1-Energia	3,98E+03	6,59E+03	5,41E+03	5,06E+03	3,23E+03	5,87E+03	3,65E+03	4,38E+03	6,33E+03	6,72E+03
Volume1-Massa	1,22E-02	2,81E-02	1,99E-02	1,74E-02	8,69E-03	1,54E-02	1,02E-02	1,39E-02	2,14E-02	1,61E-02
Volume2-Energia	5,91E+03	2,90E+03	5,35E+03	4,40E+03	5,32E+03	6,50E+03	5,76E+03	5,99E+03	3,19E+03	4,56E+03
Volume2-Massa	2,40E-02	6,90E-03	1,96E-02	1,27E-02	1,23E-02	1,61E-02	1,58E-02	1,44E-02	9,77E-03	1,22E-02
Volume3-Energia	4,48E+03	5,66E+03	4,32E+03	4,26E+03	5,25E+03	5,91E+03	5,54E+03	6,59E+03	6,82E+03	3,40E+03
Volume3-Massa	1,07E-02	1,71E-02	1,10E-02	1,06E-02	1,23E-02	2,09E-02	1,96E-02	1,88E-02	1,78E-02	8,23E-03
Volume4-Energia	3,74E+03	5,31E+03	2,94E+03	5,27E+03	4,11E+03	5,48E+03	6,04E+03	4,82E+03	6,48E+03	4,61E+03
Volume4-Massa	8,44E-03	1,36E-02	7,12E-03	1,25E-02	1,74E-02	1,97E-02	1,78E-02	1,27E-02	1,84E-02	1,64E-02
Volume5-Energia	4,29E+03	6,37E+03	4,97E+03	5,70E+03	4,64E+03	4,65E+03	5,71E+03	5,94E+03	5,82E+03	3,96E+03
Volume5-Massa	1,54E-02	2,72E-02	1,23E-02	1,41E-02	1,15E-02	1,38E-02	1,48E-02	1,48E-02	2,14E-02	9,07E-03
Volume6-Energia	3,98E+03	5,89E+03	3,86E+03	6,44E+03	4,16E+03	3,67E+03	5,81E+03	3,57E+03	3,15E+03	4,67E+03
Volume6-Massa	1,25E-02	1,36E-02	9,73E-03	2,65E-02	1,66E-02	1,28E-02	1,50E-02	8,63E-03	1,06E-02	1,56E-02
Volume7-Energia	5,04E+03	4,89E+03	5,82E+03	5,47E+03	4,70E+03	6,26E+03	6,78E+03	5,80E+03	5,93E+03	4,61E+03
Volume7-Massa	1,82E-02	1,96E-02	1,63E-02	1,61E-02	1,37E-02	1,41E-02	1,52E-02	1,45E-02	2,52E-02	1,43E-02
Volume8-Energia	3,89E+03	5,16E+03	6,69E+03	2,89E+03	4,88E+03	3,58E+03	2,89E+03	5,50E+03	3,54E+03	4,20E+03
Volume8-Massa	1,43E-02	1,70E-02	2,41E-02	6,48E-03	1,49E-02	1,32E-02	7,97E-03	1,33E-02	1,45E-02	9,37E-03

Tabela C.5: Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Volume1-Energia	5,35E+03	6,13E+03	4,26E+03	5,11E+03	3,94E+03	4,34E+03	3,40E+03	4,25E+03	5,62E+03	6,56E+03
Volume1-Massa	1,50E-02	2,55E-02	1,44E-02	1,95E-02	9,43E-03	1,54E-02	1,44E-02	1,33E-02	1,80E-02	1,87E-02
Volume2-Energia	2,93E+03	3,08E+03	3,70E+03	4,54E+03	6,45E+03	4,72E+03	6,55E+03	5,00E+03	6,51E+03	3,55E+03
Volume2-Massa	7,46E-03	1,06E-02	1,25E-02	1,23E-02	2,28E-02	1,31E-02	2,81E-02	1,13E-02	1,90E-02	9,96E-03
Volume3-Energia	6,36E+03	5,70E+03	2,79E+03	4,52E+03	6,17E+03	3,90E+03	3,69E+03	6,16E+03	6,15E+03	3,52E+03
Volume3-Massa	2,01E-02	1,66E-02	8,27E-03	1,53E-02	2,64E-02	1,06E-02	1,18E-02	1,94E-02	1,89E-02	8,39E-03
Volume4-Energia	5,56E+03	3,94E+03	4,28E+03	3,98E+03	3,54E+03	2,76E+03	3,79E+03	5,84E+03	2,96E+03	5,31E+03
Volume4-Massa	2,26E-02	9,53E-03	1,35E-02	1,05E-02	1,22E-02	7,10E-03	1,13E-02	1,33E-02	1,09E-02	1,42E-02
Volume5-Energia	6,65E+03	6,69E+03	6,76E+03	4,28E+03	5,96E+03	4,77E+03	6,04E+03	3,34E+03	4,04E+03	2,97E+03
Volume5-Massa	2,60E-02	1,61E-02	2,64E-02	1,63E-02	1,77E-02	1,40E-02	1,63E-02	7,55E-03	1,55E-02	7,86E-03
Volume6-Energia	6,15E+03	6,24E+03	3,15E+03	5,16E+03	4,85E+03	3,97E+03	4,02E+03	2,90E+03	5,50E+03	5,37E+03
Volume6-Massa	1,69E-02	2,45E-02	8,81E-03	1,58E-02	1,62E-02	1,10E-02	1,37E-02	7,32E-03	2,36E-02	2,12E-02
Volume7-Energia	3,96E+03	3,70E+03	3,42E+03	5,26E+03	4,40E+03	3,33E+03	2,93E+03	3,31E+03	6,48E+03	3,26E+03
Volume7-Massa	1,03E-02	8,72E-03	1,01E-02	1,63E-02	1,14E-02	1,02E-02	7,89E-03	8,94E-03	2,09E-02	1,04E-02
Volume8-Energia	6,25E+03	3,71E+03	3,09E+03	6,61E+03	6,70E+03	3,49E+03	4,38E+03	6,05E+03	4,70E+03	5,28E+03
Volume8-Massa	2,26E-02	1,35E-02	8,79E-03	1,86E-02	1,67E-02	1,37E-02	1,56E-02	1,83E-02	1,94E-02	1,51E-02

Tabela C.6: Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
Volume1-Energia	5,13E+03	6,30E+03	4,12E+03	5,85E+03	5,92E+03	6,57E+03	4,81E+03	4,97E+03	3,69E+03	6,05E+03
Volume1-Massa	1,14E-02	1,80E-02	9,50E-03	1,78E-02	1,71E-02	2,44E-02	1,63E-02	1,92E-02	8,49E-03	1,67E-02
Volume2-Energia	4,33E+03	4,56E+03	6,51E+03	4,48E+03	3,58E+03	4,50E+03	3,82E+03	4,15E+03	5,61E+03	5,44E+03
Volume2-Massa	1,00E-02	1,50E-02	2,45E-02	1,47E-02	8,47E-03	1,29E-02	1,09E-02	1,02E-02	1,83E-02	1,59E-02
Volume3-Energia	5,66E+03	5,40E+03	4,48E+03	6,79E+03	6,21E+03	5,16E+03	3,03E+03	4,15E+03	3,82E+03	5,98E+03
Volume3-Massa	1,63E-02	1,21E-02	1,08E-02	2,07E-02	1,46E-02	1,66E-02	1,16E-02	1,37E-02	9,88E-03	1,55E-02
Volume4-Energia	6,16E+03	4,98E+03	3,58E+03	6,03E+03	4,20E+03	3,90E+03	5,49E+03	5,78E+03	3,39E+03	5,70E+03
Volume4-Massa	1,60E-02	1,91E-02	1,44E-02	2,16E-02	1,17E-02	1,49E-02	1,64E-02	2,13E-02	9,41E-03	1,37E-02
Volume5-Energia	4,40E+03	6,75E+03	3,19E+03	4,66E+03	3,64E+03	6,00E+03	5,93E+03	6,02E+03	4,00E+03	5,28E+03
Volume5-Massa	1,20E-02	1,98E-02	7,19E-03	1,68E-02	8,24E-03	2,24E-02	1,48E-02	1,39E-02	8,99E-03	2,23E-02
Volume6-Energia	3,32E+03	6,40E+03	6,53E+03	3,57E+03	4,63E+03	6,12E+03	5,11E+03	4,25E+03	5,57E+03	3,22E+03
Volume6-Massa	9,51E-03	2,60E-02	1,60E-02	1,23E-02	1,74E-02	2,18E-02	1,57E-02	1,39E-02	1,32E-02	9,64E-03
Volume7-Energia	4,90E+03	4,67E+03	6,13E+03	3,98E+03	6,24E+03	5,03E+03	5,19E+03	6,45E+03	4,80E+03	3,50E+03
Volume7-Massa	2,05E-02	1,05E-02	1,98E-02	1,58E-02	2,43E-02	1,15E-02	1,53E-02	2,37E-02	1,13E-02	8,82E-03
Volume8-Energia	3,78E+03	3,13E+03	5,28E+03	4,32E+03	4,08E+03	4,56E+03	3,38E+03	4,77E+03	3,94E+03	5,83E+03
Volume8-Massa	8,77E-03	1,00E-02	2,08E-02	1,06E-02	9,50E-03	1,31E-02	1,02E-02	1,25E-02	1,48E-02	1,35E-02

Tabela C.7: Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
Volume1-Energia	5,69E+03	4,16E+03	4,39E+03	4,46E+03	3,38E+03	6,13E+03	3,80E+03	4,43E+03	4,07E+03	5,45E+03
Volume1-Massa	1,63E-02	1,26E-02	1,29E-02	1,37E-02	8,95E-03	2,41E-02	1,43E-02	1,01E-02	1,34E-02	2,00E-02
Volume2-Energia	3,51E+03	5,89E+03	5,35E+03	4,13E+03	5,73E+03	5,33E+03	5,72E+03	2,86E+03	3,10E+03	3,05E+03
Volume2-Massa	1,29E-02	2,35E-02	1,29E-02	1,45E-02	1,48E-02	1,60E-02	2,41E-02	8,27E-03	8,59E-03	9,09E-03
Volume3-Energia	6,58E+03	3,78E+03	3,84E+03	5,35E+03	6,45E+03	4,10E+03	6,64E+03	4,59E+03	5,48E+03	6,31E+03
Volume3-Massa	2,09E-02	1,27E-02	1,25E-02	1,90E-02	1,45E-02	1,71E-02	1,71E-02	1,46E-02	1,63E-02	2,14E-02
Volume4-Energia	3,16E+03	5,99E+03	5,81E+03	3,92E+03	5,37E+03	2,95E+03	4,56E+03	4,18E+03	3,43E+03	5,28E+03
Volume4-Massa	1,12E-02	1,69E-02	2,43E-02	1,60E-02	1,42E-02	8,42E-03	1,47E-02	1,33E-02	1,07E-02	1,78E-02
Volume5-Energia	6,46E+03	3,28E+03	6,77E+03	3,81E+03	4,93E+03	5,04E+03	5,61E+03	6,40E+03	3,03E+03	4,41E+03
Volume5-Massa	1,63E-02	7,67E-03	2,40E-02	1,48E-02	1,41E-02	1,40E-02	1,47E-02	1,46E-02	1,14E-02	1,18E-02
Volume6-Energia	2,92E+03	6,32E+03	3,44E+03	4,98E+03	4,06E+03	6,73E+03	3,77E+03	5,30E+03	3,16E+03	3,88E+03
Volume6-Massa	8,80E-03	1,52E-02	1,06E-02	1,36E-02	1,61E-02	1,67E-02	1,13E-02	1,72E-02	1,02E-02	1,09E-02
Volume7-Energia	5,24E+03	6,70E+03	3,23E+03	5,56E+03	4,19E+03	4,18E+03	3,90E+03	3,97E+03	2,96E+03	5,14E+03
Volume7-Massa	2,04E-02	1,70E-02	8,48E-03	1,43E-02	1,37E-02	1,13E-02	9,37E-03	9,38E-03	1,22E-02	1,90E-02
Volume8-Energia	5,15E+03	5,30E+03	3,72E+03	6,67E+03	5,16E+03	3,14E+03	3,34E+03	3,29E+03	3,67E+03	4,81E+03
Volume8-Massa	1,44E-02	2,04E-02	1,15E-02	1,93E-02	1,33E-02	9,63E-03	1,27E-02	7,52E-03	9,26E-03	1,33E-02

Tabela C.8: Significado dos números na Coluna de Causa de Término do Algoritmo-sistema dinâmico 1

Significado do Término do Algoritmo	
Todos os Algoritmos	
1	Critério de medida de otimalidade é menor que a estipulada pelo usuário, entretando o ponto encontrado não corresponde a um ponto factível.
0	Número de iterações ou avaliações da Função Objetivo alcançou o valor máximo estipulado pelo usuário.
Algoritmos Trust Region Reflective e Interior Point	
2	Passo na variável x é menor que a especificada pelo usuário.
Algoritmo Trust Region Reflective	
3	Mudança na função objetivo é menor que a especificada pelo usuário.
Algoritmo Active-Set	
4	Magnitude da direção de busca é menor que a especificada pelo usuário.
5	Magnitude da derivada direcional na direção de busca é menor que a especificada pelo usuário.

Tabela C.9: Sistema Dinâmico 1 - Método Interior Point (Pontos Interiores) - Sistema Dinâmico 1

Vetor de Variáveis de Estado Inicial	Valor da Função Objetivo	Número de Avaliações da Função Objetivo	Iterações	Tempo (s)	Motivo do Término do Algoritmo
1	8,28E-03	5050	288	1,252	2
2	4,46E+00	5931	329	0,697	2
3	7,92E-01	6800	386	0,668	2
4	2,21E-01	5074	290	0,668	2
5	1,36E-01	17169	1000	0,668	0
6	2,19E-01	4540	260	0,666	2
7	2,58E-01	5512	314	0,665	2
8	1,03E-02	4812	277	0,666	2
9	2,83E+00	4792	273	0,665	2
10	7,96E-02	17181	1000	0,665	0
11	5,48E+00	4799	251	0,662	2
12	2,01E-01	4141	237	0,664	2
13	2,47E-02	5174	289	0,667	2
14	1,24E+01	17136	1000	0,665	0
15	9,60E-02	5233	302	0,668	2
16	1,36E-01	4276	244	0,666	2
17	5,56E+00	18540	1000	0,671	0
18	9,74E-02	12713	667	0,707	2
19	2,64E-01	4813	275	0,669	2
20	3,58E-02	4585	260	0,686	2
21	1,06E+00	6274	358	0,672	2
22	3,08E-02	7685	437	0,668	2
23	3,00E+00	6029	341	0,668	2
24	1,09E-02	17232	1000	0,831	0
25	2,41E-01	5192	292	0,668	2
26	6,06E-02	7232	400	0,668	2
27	2,27E+01	17214	1000	0,666	0
28	8,24E-01	5131	291	0,668	2
29	7,29E+01	4340	247	0,706	2
30	1,20E-02	5016	286	0,706	2
31	2,66E+02	2014	110	0,871	2
32	9,33E+00	4032	219	0,732	2
33	9,42E+01	2676	143	0,712	2
34	9,06E-01	4778	276	0,727	2
35	3,45E+02	2510	143	0,717	2
36	1,05E-01	2730	153	0,715	2
37	4,94E-01	5388	299	0,715	2
38	4,55E+01	7755	453	0,706	2
39	1,20E-01	4689	256	0,716	2
40	2,47E-02	4793	274	0,717	2
41	7,43E-02	4719	266	0,716	2
42	1,66E-01	5074	292	0,718	2
43	6,61E-02	6121	349	0,708	2
44	7,96E-02	4378	252	0,721	2
45	1,46E-01	4712	269	0,715	2
46	4,05E+00	10597	607	0,718	2
47	7,89E-01	5950	335	0,710	2
48	7,42E-02	6038	342	0,678	2
49	6,01E-01	17208	1000	0,664	0
50	1,43E-02	4793	276	0,780	2

Tabela C.10: Sistema Dinâmico 1 - Método Trust Region Reflective - Sistema Dinâmico 1

Vetor de Variáveis de Estado Inicial	Valor da Função Objetivo	Número de Avaliações da Função Objetivo	Iterações	Tempo (s)	Motivo do Término do Algoritmo
1	NaN	17017	1000	5,113	0
2	4,39E-03	68	4	0,024	5
3	1,07E-03	102	5	0,032	1
4	2,77E-03	68	4	0,024	5
5	6,03E-03	85	5	0,028	5
6	5,04E-03	68	4	0,024	5
7	1,05E-02	68	4	0,024	5
8	NaN	17017	1000	5,827	0
9	1,24E-02	68	4	0,026	5
10	NaN	17017	1000	5,841	0
11	NaN	17017	1000	5,380	0
12	9,74E-03	68	4	0,024	5
13	1,18E-02	68	4	0,024	5
14	NaN	17017	1000	5,984	0
15	NaN	17017	1000	5,116	0
16	2,23E-02	85	5	0,180	5
17	NaN	17017	1000	5,270	0
18	NaN	17017	1000	5,615	0
19	1,25E-01	86	5	0,033	5
20	2,14E-02	85	5	0,031	5
21	5,33E-03	68	4	0,027	5
22	8,11E-03	68	4	0,026	5
23	3,51E-03	102	6	0,036	5
24	NaN	17017	1000	6,244	0
25	NaN	17017	1000	5,164	0
26	3,80E-02	85	5	0,030	5
27	2,26E-02	68	4	0,025	5
28	6,02E-04	68	4	0,025	5
29	5,79E-02	3677	216	1,043	5
30	6,42E-04	85	4	0,029	1
31	NaN	17017	1000	5,123	0
32	NaN	17017	1000	5,104	0
33	NaN	17017	1000	5,415	0
34	1,95E-01	86	5	0,033	5
35	NaN	17017	1000	5,578	0
36	3,02E-03	68	4	0,027	5
37	NaN	17017	1000	5,537	0
38	NaN	17017	1000	5,710	0
39	5,68E-03	68	4	0,026	5
40	4,88E-02	68	4	0,183	5
41	NaN	17017	1000	5,389	0
42	1,80E-03	68	3	0,024	1
43	NaN	17017	1000	5,119	0
44	4,42E-01	68	4	0,026	5
45	NaN	17017	1000	5,542	0
46	1,44E-02	102	6	0,039	5
47	1,66E-01	68	4	0,028	5
48	4,11E-03	85	5	0,034	5
49	1,85E-02	119	7	0,045	5
50	NaN	17017	1000	6,212	0

Tabela C.11: Sistema Dinâmico 1 - SQP (Sequential Quadratic Programming) - Sistema Dinâmico 1

Vetor de Variáveis de Estado Inicial	Valor da Função Objetivo	Número de Avaliações da Função Objetivo	Iterações	Tempo (s)	Motivo do Término do Algoritmo
1	NaN	17017	1000	5,104	0
2	4,39E-03	68	4	0,024	5
3	1,07E-03	102	5	0,032	1
4	2,77E-03	68	4	0,024	5
5	6,03E-03	85	5	0,029	5
6	5,04E-03	68	4	0,023	5
7	1,05E-02	68	4	0,024	5
8	NaN	17017	1000	5,405	0
9	1,24E-02	68	4	0,024	5
10	NaN	17017	1000	5,734	0
11	NaN	17017	1000	5,560	0
12	9,74E-03	68	4	0,028	5
13	1,18E-02	68	4	0,026	5
14	NaN	17017	1000	6,413	0
15	NaN	17017	1000	5,110	0
16	2,23E-02	85	5	0,029	5
17	NaN	17017	1000	5,174	0
18	NaN	17017	1000	5,124	0
19	1,25E-01	86	5	0,202	5
20	2,14E-02	85	5	0,030	5
21	5,33E-03	68	4	0,025	5
22	8,11E-03	68	4	0,026	5
23	3,51E-03	102	6	0,034	5
24	NaN	17017	1000	6,146	0
25	NaN	17017	1000	5,571	0
26	3,80E-02	85	5	0,033	5
27	2,26E-02	68	4	0,028	5
28	6,02E-04	68	4	0,027	5
29	5,79E-02	3677	216	1,147	5
30	6,42E-04	85	4	0,032	1
31	NaN	17017	1000	5,346	0
32	NaN	17017	1000	5,107	0
33	NaN	17017	1000	5,134	0
34	1,95E-01	86	5	0,031	5
35	NaN	17017	1000	5,250	0
36	3,02E-03	68	4	0,037	5
37	NaN	17017	1000	5,589	0
38	NaN	17017	1000	6,197	0
39	5,68E-03	68	4	0,030	5
40	4,88E-02	68	4	0,027	5
41	NaN	17017	1000	5,439	0
42	1,80E-03	68	3	0,024	1
43	NaN	17017	1000	5,114	0
44	4,42E-01	68	4	0,026	5
45	NaN	17017	1000	5,112	0
46	1,44E-02	102	6	0,035	5
47	1,66E-01	68	4	0,026	5
48	4,11E-03	85	5	0,031	5
49	1,85E-02	119	7	0,041	5
50	NaN	17017	1000	6,022	0

Tabela C.12: Sistema Dinâmico 1 - Active - Set - Sistema Dinâmico 1

Vetor de Variáveis de Estado Inicial	Valor da Função Objetivo	Número de Avaliações da Função Objetivo	Iterações	Tempo (s)	Motivo do Término do Algoritmo
1	NaN	17017	1000	5,488	0
2	4,39E-03	68	4	0,026	5
3	1,07E-03	102	5	0,036	1
4	2,77E-03	68	4	0,025	5
5	6,03E-03	85	5	0,030	5
6	5,04E-03	68	4	0,025	5
7	1,05E-02	68	4	0,025	5
8	NaN	17017	1000	5,889	0
9	1,24E-02	68	4	0,024	5
10	NaN	17017	1000	5,703	0
11	NaN	17017	1000	5,165	0
12	9,74E-03	68	4	0,023	5
13	1,18E-02	68	4	0,023	5
14	NaN	17017	1000	6,004	0
15	NaN	17017	1000	5,131	0
16	2,23E-02	85	5	0,028	5
17	NaN	17017	1000	5,635	0
18	NaN	17017	1000	5,552	0
19	1,25E-01	86	5	0,034	5
20	2,14E-02	85	5	0,032	5
21	5,33E-03	68	4	0,026	5
22	8,11E-03	68	4	0,027	5
23	3,51E-03	102	6	0,037	5
24	NaN	17017	1000	5,916	0
25	NaN	17017	1000	5,123	0
26	3,80E-02	85	5	0,029	5
27	2,26E-02	68	4	0,024	5
28	6,02E-04	68	4	0,024	5
29	5,79E-02	3677	216	1,046	5
30	6,42E-04	85	4	0,029	1
31	NaN	17017	1000	5,126	0
32	NaN	17017	1000	5,311	0
33	NaN	17017	1000	5,563	0
34	1,95E-01	86	5	0,033	5
35	NaN	17017	1000	5,576	0
36	3,02E-03	68	4	0,026	5
37	NaN	17017	1000	5,143	0
38	NaN	17017	1000	5,702	0
39	5,68E-03	68	4	0,025	5
40	4,88E-02	68	4	0,024	5
41	NaN	17017	1000	5,397	0
42	1,80E-03	68	3	0,023	1
43	NaN	17017	1000	5,433	0
44	4,42E-01	68	4	0,026	5
45	NaN	17017	1000	5,536	0
46	1,44E-02	102	6	0,037	5
47	1,66E-01	68	4	0,203	5
48	4,11E-03	85	5	0,030	5
49	1,85E-02	119	7	0,041	5
50	NaN	17017	1000	6,101	0

Tabela C.13: Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Interior-Point) - Sistema Dinâmico
1

Variável de Estado	Resultado Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Volume1-Energia	5,26E+03	-1,74E+04	5,07E+03	5,13E+03	5,25E+03	5,10E+03	4,98E+03	5,01E+03	5,41E+03	4,88E+03
Volume1-Massa	-9,12E-06	1,51E-01	1,31E-02	1,31E-02	1,52E-02	1,41E-02	1,14E-02	1,20E-02	6,13E+00	8,59E-03
Volume2-Energia	3,84E+03	-3,36E+03	3,36E+03	3,50E+03	3,24E+03	3,39E+03	2,73E+03	3,28E+03	2,73E+03	3,14E+03
Volume2-Massa	3,09E-02	-7,08E-02	8,67E-03	8,74E-03	1,37E-02	1,00E-02	-2,46E-07	6,31E-03	3,57E+01	3,08E-03
Volume3-Energia	5,26E+03	7,05E+01	4,71E+03	4,66E+03	4,25E+03	4,75E+03	4,47E+03	4,60E+03	-7,12E+03	4,38E+03
Volume3-Massa	-1,00E-03	1,58E-03	1,21E-02	1,18E-02	1,42E-02	1,36E-02	-3,03E-03	1,03E-02	1,21E+01	6,56E-03
Volume4-Energia	5,25E+03	8,54E+01	4,31E+03	4,13E+03	3,97E+03	4,36E+03	4,30E+03	4,19E+03	5,48E+02	3,90E+03
Volume4-Massa	3,16E-02	-1,64E-02	1,11E-02	1,03E-02	2,22E-02	1,28E-02	8,59E-03	8,78E-03	1,50E+00	4,89E-03
Volume5-Energia	4,80E+03	-2,19E+03	3,87E+03	3,50E+03	3,22E+03	3,91E+03	3,64E+03	3,75E+03	-3,33E-03	3,45E+03
Volume5-Massa	4,96E-02	1,45E-01	9,98E-03	-8,28E-07	4,73E+00	1,15E-02	6,83E-03	7,44E-03	-4,51E-01	2,96E-03
Volume6-Energia	5,09E+03	3,27E+03	5,18E+03	5,29E+03	5,92E+03	5,18E+03	5,28E+03	5,21E+03	-3,60E+03	3,85E+03
Volume6-Massa	1,38E-02	-4,71E-07	1,25E-02	1,25E-02	1,38E-02	1,29E-02	1,10E-02	1,21E-02	3,60E-01	-1,01E-03
Volume7-Energia	6,51E+03	5,97E+03	6,56E+03	6,62E+03	6,19E+03	6,55E+03	6,64E+03	6,57E+03	-6,46E+04	5,69E+03
Volume7-Massa	1,37E-02	1,57E-02	1,46E-02	1,45E-02	1,80E-02	1,41E-02	1,39E-02	1,46E-02	-2,67E+01	1,66E-02
Volume8-Energia	6,25E+03	4,70E+03	6,36E+03	6,48E+03	5,92E+03	6,35E+03	6,54E+03	6,39E+03	-3,26E+03	3,85E+03
Volume8-Massa	1,74E-02	1,07E-02	1,53E-02	1,57E-02	-3,55E-07	1,57E-02	1,51E-02	1,48E-02	9,19E-03	-1,11E-06
Time (s)	2,789053	8,960055	6,261792	10,93633	58,45604	5,561199	7,145628	5,179238	4,533641	6,491848

1 Tabela C.14: Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Interior-Point) - Sistema Dinâmico

Variável de Estado	Resultado Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46
Volume1-Energia	4,31E+03	5,07E+03	5,49E+03	5,41E+03	5,41E+03	4,89E+03	5,09E+03	5,07E+03	5,16E+03	5,34E+03
Volume1-Massa	4,59E-03	1,31E-02	-4,13E+02	-6,04E+02	1,33E+05	1,08E-02	1,40E-02	1,31E-02	2,40E-02	-4,80E-06
Volume2-Energia	2,92E+03	3,36E+03	2,73E+03	2,73E+03	-6,66E+07	3,39E+03	3,61E+03	3,36E+03	3,67E+03	4,35E+03
Volume2-Massa	7,12E-04	8,67E-03	3,76E+04	-2,41E+03	-6,00E+02	-5,22E-03	1,35E-02	8,67E-03	2,39E-02	-1,11E-01
Volume3-Energia	3,76E+03	4,71E+03	5,34E+03	5,41E+03	5,40E+03	4,38E+03	4,73E+03	4,71E+03	4,69E+03	5,34E+03
Volume3-Massa	2,74E-03	1,21E-02	-2,05E+03	1,78E+02	2,60E+04	8,10E-03	-1,24E-05	1,21E-02	2,88E-02	7,29E-03
Volume4-Energia	3,30E+03	4,31E+03	4,59E+03	-2,30E+02	5,35E+03	3,82E+03	4,73E+03	4,31E+03	4,15E+03	5,31E+03
Volume4-Massa	1,66E-03	1,11E-02	-1,98E+03	-8,42E+01	1,56E+04	5,38E-03	1,56E-02	1,11E-02	2,29E-02	-9,09E-02
Volume5-Energia	2,94E+03	3,87E+03	2,76E+03	-4,44E+02	-2,05E+08	3,39E+03	4,24E+03	3,87E+03	3,67E+03	4,67E+03
Volume5-Massa	-8,80E-05	9,98E-03	-2,00E+04	-5,77E+03	-6,71E+02	-2,59E-07	1,52E-02	9,98E-03	-7,37E-07	-3,91E-02
Volume6-Energia	3,27E+03	5,18E+03	-5,99E+03	-1,62E+03	3,30E+03	5,27E+03	5,17E+03	5,18E+03	5,65E+03	4,77E+03
Volume6-Massa	-1,06E-06	1,25E-02	1,45E+03	-4,40E+03	4,42E+04	1,15E-02	1,26E-02	1,25E-02	5,39E-02	9,94E-03
Volume7-Energia	6,52E+03	6,56E+03	-6,48E+01	6,76E+03	6,89E+03	6,61E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,73E+03	6,35E+03
Volume7-Massa	9,45E-03	1,46E-02	1,53E+03	-1,25E+02	-6,17E+02	1,42E-02	1,44E-02	1,46E-02	-1,11E-01	1,73E-02
Volume8-Energia	6,40E+03	6,36E+03	-3,14E+03	-1,35E+03	6,86E+03	6,47E+03	6,35E+03	6,36E+03	6,72E+03	5,79E+03
Volume8-Massa	-1,17E-02	1,53E-02	8,52E+02	-1,01E+02	1,47E+03	1,42E-02	1,56E-02	1,53E-02	5,55E-02	1,23E-02
Time (s)	10,04017	1,643325	8,546856	11,57921	3,915356	11,21063	14,26351	1,616037	6,326397	10,88105

Tabela C.15: Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Trust-Region-Reflective) - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Resultado Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Volume1-Energia										
Volume1-Massa	1,47E-02	1,28E-02	1,26E-02	2,49E-02	1,22E-02	2,81E-02	1,99E-02	1,74E-02	8,69E-03	1,54E-02
Volume2-Energia	4,90E+03	3,24E+03	5,13E+03	3,97E+03	5,91E+03	2,90E+03	5,35E+03	4,40E+03	5,32E+03	6,50E+03
Volume2-Massa	1,68E-02	1,18E-02	1,96E-02	1,37E-02	2,40E-02	6,90E-03	1,96E-02	1,27E-02	1,23E-02	1,61E-02
Volume3-Energia	3,60E+03	5,59E+03	4,83E+03	2,95E+03	4,48E+03	5,66E+03	4,32E+03	4,26E+03	5,25E+03	5,91E+03
Volume3-Massa	1,48E-02	1,44E-02	1,97E-02	7,34E-03	1,07E-02	1,71E-02	1,10E-02	1,06E-02	1,23E-02	2,09E-02
Volume4-Energia	5,95E+03	5,20E+03	6,33E+03	6,53E+03	3,74E+03	5,31E+03	2,94E+03	5,27E+03	4,11E+03	5,48E+03
Volume4-Massa	2,28E-02	1,94E-02	2,47E-02	1,84E-02	8,44E-03	1,36E-02	7,12E-03	1,25E-02	1,74E-02	1,97E-02
Volume5-Energia	2,81E+03	5,64E+03	5,45E+03	6,46E+03	4,29E+03	6,37E+03	4,97E+03	5,70E+03	4,64E+03	4,65E+03
Volume5-Massa	6,84E-03	1,53E-02	1,81E-02	1,68E-02	1,54E-02	2,72E-02	1,23E-02	1,41E-02	1,15E-02	1,38E-02
Volume6-Energia	3,52E+03	2,97E+03	6,27E+03	4,28E+03	3,98E+03	5,89E+03	3,86E+03	6,44E+03	4,16E+03	3,67E+03
Volume6-Massa	1,19E-02	8,11E-03	1,43E-02	1,39E-02	1,25E-02	1,36E-02	9,73E-03	2,65E-02	1,66E-02	1,28E-02
Volume7-Energia	3,05E+03	5,80E+03	4,47E+03	3,16E+03	5,04E+03	4,89E+03	5,82E+03	5,47E+03	4,70E+03	6,26E+03
Volume7-Massa	7,26E-03	2,11E-02	1,61E-02	1,14E-02	1,82E-02	1,96E-02	1,63E-02	1,61E-02	1,37E-02	1,41E-02
Volume8-Energia	6,67E+03	4,96E+03	5,92E+03	5,92E+03	3,89E+03	5,16E+03	6,69E+03	2,89E+03	4,88E+03	3,58E+03
Volume8-Massa	2,62E-02	1,49E-02	1,88E-02	1,36E-02	1,43E-02	1,70E-02	2,41E-02	6,48E-03	1,49E-02	1,32E-02
Time (s)	0,671734	0,669472	0,675286	0,671183	0,669825	0,672549	0,672771	0,674568	0,669954	0,672648

Tabela C.16: Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Trust-Region-Reflective) - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Resultado Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
Volume1-Energia	3,40E+03	4,25E+03	5,62E+03	6,56E+03	5,22E+03	6,30E+03	4,12E+03	5,85E+03	5,92E+03	6,57E+03
Volume1-Massa	1,44E-02	1,33E-02	1,80E-02	1,87E-02	-3,39E+05	1,80E-02	9,50E-03	1,78E-02	1,71E-02	2,44E-02
Volume2-Energia	6,55E+03	5,00E+03	6,51E+03	3,55E+03	2,63E+03	4,56E+03	6,51E+03	4,48E+03	3,58E+03	4,50E+03
Volume2-Massa	2,81E-02	1,13E-02	1,90E-02	9,96E-03	6,67E-03	1,50E-02	2,45E-02	1,47E-02	8,47E-03	1,29E-02
Volume3-Energia	3,69E+03	6,16E+03	6,15E+03	3,52E+03	3,93E+03	5,40E+03	4,48E+03	6,79E+03	6,21E+03	5,16E+03
Volume3-Massa	1,18E-02	1,94E-02	1,89E-02	8,39E-03	1,24E-02	1,21E-02	1,08E-02	2,07E-02	1,46E-02	1,66E-02
Volume4-Energia	3,79E+03	5,84E+03	2,96E+03	5,31E+03	2,97E+03	4,98E+03	3,58E+03	6,03E+03	4,20E+03	3,90E+03
Volume4-Massa	1,13E-02	1,33E-02	1,09E-02	1,42E-02	7,71E-03	1,91E-02	1,44E-02	2,16E-02	1,17E-02	1,49E-02
Volume5-Energia	6,04E+03	3,34E+03	4,04E+03	2,97E+03	2,85E+03	6,75E+03	3,19E+03	4,66E+03	3,64E+03	6,00E+03
Volume5-Massa	1,63E-02	7,55E-03	1,55E-02	7,86E-03	6,70E-03	1,98E-02	7,19E-03	1,68E-02	8,24E-03	2,24E-02
Volume6-Energia	4,02E+03	2,90E+03	5,50E+03	5,37E+03	3,99E+03	6,40E+03	6,53E+03	3,57E+03	4,63E+03	6,12E+03
Volume6-Massa	1,37E-02	7,32E-03	2,36E-02	2,12E-02	-4,63E-03	2,60E-02	1,60E-02	1,23E-02	1,74E-02	2,18E-02
Volume7-Energia	2,93E+03	3,31E+03	6,48E+03	3,26E+03	6,61E+03	4,67E+03	6,13E+03	3,98E+03	6,24E+03	5,03E+03
Volume7-Massa	7,89E-03	8,94E-03	2,09E-02	1,04E-02	1,35E-02	1,05E-02	1,98E-02	1,58E-02	2,43E-02	1,15E-02
Volume8-Energia	4,38E+03	6,05E+03	4,70E+03	5,28E+03	5,85E+03	3,13E+03	5,28E+03	4,32E+03	4,08E+03	4,56E+03
Volume8-Massa	1,56E-02	1,83E-02	1,94E-02	1,51E-02	1,37E-02	1,00E-02	2,08E-02	1,06E-02	9,50E-03	1,31E-02
Time (s)	0,780465	0,725397	0,724683	0,723186	0,846292	0,717531	0,726648	0,725419	0,72547	0,720936

Tabela C.17: Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Active-Set) - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Resultdo Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Volume1-Energia										
Volume1-Massa	1,02E-02	1,39E-02	2,14E-02	1,61E-02	1,50E-02	2,55E-02	1,44E-02	1,33E-02	9,43E-03	1,54E-02
Volume2-Energia	5,76E+03	5,99E+03	3,19E+03	4,56E+03	2,93E+03	3,08E+03	3,70E+03	2,94E+03	6,45E+03	4,72E+03
Volume2-Massa	1,58E-02	1,44E-02	9,77E-03	1,22E-02	7,46E-03	1,06E-02	1,25E-02	7,94E-03	2,28E-02	1,31E-02
Volume3-Energia	5,54E+03	6,59E+03	6,82E+03	3,40E+03	6,36E+03	5,70E+03	2,79E+03	4,74E+03	6,17E+03	3,90E+03
Volume3-Massa	1,96E-02	1,88E-02	1,78E-02	8,23E-03	2,01E-02	1,66E-02	8,27E-03	1,22E-02	2,64E-02	1,06E-02
Volume4-Energia	6,04E+03	4,82E+03	6,48E+03	4,61E+03	5,56E+03	3,94E+03	4,28E+03	4,89E+03	3,54E+03	2,76E+03
Volume4-Massa	1,78E-02	1,27E-02	1,84E-02	1,64E-02	2,26E-02	9,53E-03	1,35E-02	2,66E+06	1,22E-02	7,10E-03
Volume5-Energia	5,71E+03	5,94E+03	5,82E+03	3,96E+03	6,65E+03	6,69E+03	6,76E+03	3,81E+03	5,96E+03	4,77E+03
Volume5-Massa	1,48E-02	1,48E-02	2,14E-02	9,07E-03	2,60E-02	1,61E-02	2,64E-02	2,11E-02	1,77E-02	1,40E-02
Volume6-Energia	5,81E+03	3,57E+03	3,15E+03	4,67E+03	6,15E+03	6,24E+03	3,15E+03	5,49E+03	4,85E+03	3,97E+03
Volume6-Massa	1,50E-02	8,63E-03	1,06E-02	1,56E-02	1,69E-02	2,45E-02	8,81E-03	1,50E-02	1,62E-02	1,10E-02
Volume7-Energia	6,78E+03	5,80E+03	5,93E+03	4,61E+03	3,96E+03	3,70E+03	3,42E+03	1,12E+04	4,40E+03	3,33E+03
Volume7-Massa	1,52E-02	1,45E-02	2,52E-02	1,43E-02	1,03E-02	8,72E-03	1,01E-02	2,67E+07	1,14E-02	1,02E-02
Volume8-Energia	2,89E+03	5,50E+03	3,54E+03	4,20E+03	6,25E+03	3,71E+03	3,09E+03	6,75E+03	6,70E+03	3,49E+03
Volume8-Massa	7,97E-03	1,33E-02	1,45E-02	9,37E-03	2,26E-02	1,35E-02	8,79E-03	1,86E-02	1,67E-02	1,37E-02
Time (s)	0,678629	0,660974	0,661837	0,662403	0,661149	0,660203	0,662786	0,768105	0,658316	0,661393

Tabela C.18: Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Active-Set) - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Resultdo Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46
Volume1-Energia	4,81E+03	4,97E+03	3,69E+03	6,05E+03	5,69E+03	4,16E+03	4,39E+03	4,46E+03	3,38E+03	6,13E+03
Volume1-Massa	1,63E-02	1,92E-02	8,49E-03	1,67E-02	1,63E-02	1,26E-02	1,29E-02	1,37E-02	8,95E-03	2,41E-02
Volume2-Energia	3,82E+03	4,15E+03	5,61E+03	5,44E+03	3,51E+03	5,89E+03	5,35E+03	4,13E+03	5,73E+03	5,33E+03
Volume2-Massa	1,09E-02	1,02E-02	1,83E-02	1,59E-02	1,29E-02	2,35E-02	1,29E-02	1,45E-02	1,48E-02	1,60E-02
Volume3-Energia	3,03E+03	4,15E+03	3,82E+03	5,98E+03	6,58E+03	3,78E+03	3,84E+03	5,35E+03	6,45E+03	4,10E+03
Volume3-Massa	1,16E-02	1,37E-02	9,88E-03	1,55E-02	2,09E-02	1,27E-02	1,25E-02	1,90E-02	1,45E-02	1,71E-02
Volume4-Energia	5,49E+03	5,78E+03	3,39E+03	5,70E+03	3,16E+03	5,99E+03	5,81E+03	3,92E+03	5,37E+03	2,95E+03
Volume4-Massa	1,64E-02	2,13E-02	9,41E-03	1,37E-02	1,12E-02	1,69E-02	2,43E-02	1,60E-02	1,42E-02	8,42E-03
Volume5-Energia	5,93E+03	6,02E+03	4,00E+03	5,28E+03	6,46E+03	3,28E+03	6,77E+03	3,81E+03	4,93E+03	5,04E+03
Volume5-Massa	1,48E-02	1,39E-02	8,99E-03	2,23E-02	1,63E-02	7,67E-03	2,40E-02	1,48E-02	1,41E-02	1,40E-02
Volume6-Energia	5,11E+03	4,25E+03	5,57E+03	3,22E+03	2,92E+03	6,32E+03	3,44E+03	4,98E+03	4,06E+03	6,73E+03
Volume6-Massa	1,57E-02	1,39E-02	1,32E-02	9,64E-03	8,80E-03	1,52E-02	1,06E-02	1,36E-02	1,61E-02	1,67E-02
Volume7-Energia	5,19E+03	6,45E+03	4,80E+03	3,50E+03	5,24E+03	6,70E+03	3,23E+03	5,56E+03	4,19E+03	4,18E+03
Volume7-Massa	1,53E-02	2,37E-02	1,13E-02	8,82E-03	2,04E-02	1,70E-02	8,48E-03	1,43E-02	1,37E-02	1,13E-02
Volume8-Energia	3,38E+03	4,77E+03	3,94E+03	5,83E+03	5,15E+03	5,30E+03	3,72E+03	6,67E+03	5,16E+03	3,14E+03
Volume8-Massa	1,02E-02	1,25E-02	1,48E-02	1,35E-02	1,44E-02	2,04E-02	1,15E-02	1,93E-02	1,33E-02	9,63E-03
Time (s)	0,662709	0,660589	0,660154	0,663207	0,663419	0,679403	0,710097	0,75018	0,714946	0,708077

Tabela C.19: Resultado Gradient Sampling com Comprimento de Passo Limitado - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Resultado Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Volume1-Energia										
Volume1-Massa	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	5,15E-01	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02
Volume2-Energia	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,77E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03
Volume2-Massa	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	4,39E-01	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03
Volume3-Energia	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	5,23E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03
Volume3-Massa	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	5,21E-01	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02
Volume4-Energia	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,93E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03
Volume4-Massa	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	5,19E-01	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02
Volume5-Energia	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	4,45E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03
Volume5-Massa	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	5,06E-01	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03
Volume6-Energia	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,35E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03
Volume6-Massa	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	9,07E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02
Volume7-Energia	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,67E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03
Volume7-Massa	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,48E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02
Volume8-Energia	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,57E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03
Volume8-Massa	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,11E-01	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02
Time (s)	26,30832	25,58724	38,80234	21,65325	18,43177	157,311	26,67368	16,65469	21,84991	18,11824

Tabela C.20: Resultado Gradient Sampling com Comprimento de Passo Limitado - Sistema Dinâmico 1

Variável de Estado	Resultado Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46
Volume1-Energia	5,07E+03	5,07E+03	5,07E+03	5,07E+03	5,07E+03	5,07E+03	5,07E+03	5,07E+03	5,07E+03	5,07E+03
Volume1-Massa	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02
Volume2-Energia	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03	3,36E+03
Volume2-Massa	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03	8,67E-03
Volume3-Energia	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03	4,71E+03
Volume3-Massa	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02	1,21E-02
Volume4-Energia	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03	4,31E+03
Volume4-Massa	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02	1,11E-02
Volume5-Energia	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03	3,87E+03
Volume5-Massa	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03	9,98E-03
Volume6-Energia	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03	5,18E+03
Volume6-Massa	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02	1,25E-02
Volume7-Energia	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03	6,56E+03
Volume7-Massa	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02	1,46E-02
Volume8-Energia	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03	6,36E+03
Volume8-Massa	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02	1,53E-02
Time (s)	28,04423	27,09334	25,48362	36,77491	35,29467	56,45664	41,50304	26,7464	24,42145	25,62263

Tabela C.21: Mapeamento de Convergência utilizando a Função Objetivo (4.8) - Sistema Dinâmico 2. Número 1 - Convergência para o ponto de equilíbrio operacional. Número 0 - Não convergência.

Estados Iniciais	Algoritmos Numéricos					
	GS com Passo Limitado	GS	Interior-Point	SQP	Active Set	Trust Region Reflective
1	1	0	0	0	0	0
2	1	0	0	0	0	0
3	1	0	0	0	0	0
4	1	0	0	0	0	0
5	1	0	0	0	0	0
6	1	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0
8	1	0	0	0	0	0
9	1	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0

Tabela C.22: Mapeamento de Convergência utilizando o Software Trim (MatLab) - Sistema Dinâmico 2. Número 1 - Convergência para o ponto de equilíbrio operacional. Número 0 - Não convergência.

Estados Iniciais	Algoritmos Numéricos			
	GS com Passo Limitado	Interior-Point	Active Set	Trust Region Reflective
1	1	1	0	0
2	1	1	0	0
3	1	0	0	0
4	1	0	0	0
5	1	0	0	0
6	1	0	0	0
7	0	0	0	0
8	1	0	0	0
9	1	0	0	0
10	0	0	0	0

Tabela C.23: Variáveis de estado Iniciais para Comparação dos Algoritmos Numéricos - Sistema Dinâmico 2

Variável de Estado	Número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Volume1-Massa	1,08E-02	1,20E-02	1,38E-02	1,06E-02	1,03E-02	8,82E-03	1,32E-02	1,16E-02	1,27E-02	1,09E-02
Volume2-Energia	3,03E+03	4,88E+03	2,53E+03	3,92E+03	4,74E+03	2,99E+03	3,14E+03	2,75E+03	3,29E+03	4,32E+03
Volume2-Massa	6,92E-03	1,42E-02	6,50E-03	1,48E-02	1,53E-02	9,39E-03	1,15E-02	7,89E-03	8,70E-03	1,03E-02
Volume3-Energia	2,51E+03	1,66E+03	1,89E+03	2,72E+03	1,39E+03	2,60E+03	2,03E+03	3,09E+03	2,58E+03	2,83E+03
Volume3-Massa	9,27E-03	5,75E-03	6,77E-03	1,02E-02	3,15E-03	8,40E-03	8,63E-03	1,15E-02	6,64E-03	6,55E-03
Volume4-Energia	3,56E+03	4,71E+03	2,53E+03	3,55E+03	3,38E+03	3,24E+03	3,87E+03	4,18E+03	2,72E+03	4,97E+03
Volume4-Massa	8,35E-03	1,19E-02	5,81E-03	9,58E-03	1,45E-02	8,96E-03	1,46E-02	1,71E-02	9,17E-03	1,95E-02
Volume5-Energia	3,96E+03	4,80E+03	2,45E+03	3,09E+03	3,66E+03	2,99E+03	3,87E+03	3,55E+03	4,69E+03	3,61E+03
Volume5-Massa	1,01E-02	1,92E-02	6,53E-03	6,91E-03	8,38E-03	9,52E-03	1,58E-02	1,03E-02	1,43E-02	1,23E-02
Volume6-Energia	5,95E+03	2,84E+03	5,87E+03	5,72E+03	3,79E+03	4,97E+03	5,86E+03	3,37E+03	3,34E+03	4,16E+03
Volume6-Massa	2,19E-02	8,05E-03	1,51E-02	2,07E-02	8,63E-03	1,35E-02	1,58E-02	1,26E-02	7,50E-03	1,29E-02
Volume7-Energia	4,92E+03	2,98E+03	5,30E+03	4,02E+03	4,61E+03	3,40E+03	2,79E+03	5,21E+03	5,74E+03	5,16E+03
Volume7-Massa	1,56E-02	9,54E-03	1,99E-02	1,10E-02	1,35E-02	9,10E-03	8,65E-03	1,41E-02	1,37E-02	1,87E-02
Volume8-Energia	3,56E+03	3,83E+03	4,15E+03	4,83E+03	3,97E+03	3,73E+03	3,25E+03	2,85E+03	4,56E+03	2,77E+03
Volume8-Massa	8,79E-03	1,37E-02	1,12E-02	1,87E-02	9,75E-03	1,46E-02	7,42E-03	9,43E-03	1,10E-02	7,84E-03
Volume9-Energia	2,99E+03	4,72E+03	3,19E+03	4,22E+03	5,23E+03	2,77E+03	2,93E+03	5,92E+03	3,01E+03	2,96E+03
Volume9-Massa	7,84E-03	1,40E-02	8,35E-03	1,67E-02	2,15E-02	1,14E-02	8,78E-03	1,75E-02	7,61E-03	1,22E-02
Volume10-Energia	4,28E+03	4,22E+03	4,24E+03	5,94E+03	6,27E+03	5,74E+03	3,02E+03	5,56E+03	2,77E+03	4,91E+03
Volume10-Massa	1,08E-02	9,94E-03	9,82E-03	1,43E-02	2,39E-02	1,74E-02	7,15E-03	1,53E-02	7,27E-03	1,56E-02
Volume11-Energia	3,07E+03	2,17E+03	2,34E+03	1,60E+03	2,91E+03	2,33E+03	2,93E+03	2,12E+03	1,92E+03	2,42E+03
Volume11-Massa	1,11E-02	8,49E-03	7,21E-03	4,64E-03	8,44E-03	8,38E-03	1,16E-02	5,85E-03	6,62E-03	8,68E-03
Volume12-Energia	3,39E+03	4,69E+03	3,98E+03	2,48E+03	3,84E+03	4,74E+03	4,46E+03	4,05E+03	4,28E+03	4,39E+03
Volume12-Massa	1,22E-02	1,67E-02	1,44E-02	8,26E-03	1,42E-02	1,23E-02	1,12E-02	1,05E-02	1,61E-02	1,26E-02
Volume13-Energia	3,96E+03	5,97E+03	5,34E+03	5,86E+03	3,23E+03	4,77E+03	5,87E+03	3,39E+03	5,16E+03	5,43E+03
Volume13-Massa	1,31E-02	2,32E-02	1,54E-02	1,39E-02	1,20E-02	1,09E-02	1,39E-02	1,38E-02	1,36E-02	1,98E-02
Volume14-Energia	1,18E+03	1,80E+03	2,38E+03	2,27E+03	1,80E+03	1,21E+03	2,04E+03	2,31E+03	1,36E+03	1,82E+03
Volume14-Massa	2,79E-03	5,45E-03	6,87E-03	7,08E-03	4,37E-03	4,55E-03	6,96E-03	5,27E-03	4,76E-03	6,35E-03
Volume15-Energia	5,75E+03	3,93E+03	4,54E+03	4,63E+03	3,25E+03	3,38E+03	4,62E+03	3,87E+03	5,76E+03	3,74E+03
Volume15-Massa	1,49E-02	1,68E-02	1,06E-02	1,85E-02	7,80E-03	9,27E-03	1,12E-02	9,07E-03	1,99E-02	9,87E-03
Volume16-Energia	4,80E+03	5,38E+03	4,38E+03	4,38E+03	2,94E+03	2,95E+03	4,68E+03	4,83E+03	6,01E+03	4,67E+03
Volume16-Massa	1,11E-02	1,36E-02	1,20E-02	1,28E-02	6,56E-03	8,94E-03	1,09E-02	1,08E-02	2,07E-02	1,46E-02
Volume17-Energia	2,49E+03	4,54E+03	4,45E+03	3,39E+03	4,07E+03	4,47E+03	4,77E+03	4,98E+03	4,52E+03	2,21E+03
Volume17-Massa	5,60E-03	1,60E-02	1,55E-02	7,71E-03	1,01E-02	1,69E-02	1,40E-02	2,06E-02	1,57E-02	8,19E-03
Volume18-Energia	4,78E+03	5,04E+03	5,20E+03	3,78E+03	5,61E+03	6,11E+03	5,46E+03	3,78E+03	6,22E+03	2,85E+03
Volume18-Massa	1,08E-02	1,78E-02	1,44E-02	1,09E-02	2,05E-02	1,81E-02	1,98E-02	9,52E-03	2,33E-02	6,44E-03
Volume19-Energia	4,19E+03	4,71E+03	4,66E+03	5,07E+03	4,43E+03	3,55E+03	5,17E+03	4,11E+03	4,40E+03	3,91E+03
Volume19-Massa	1,04E-02	1,82E-02	1,59E-02	1,35E-02	1,06E-02	1,08E-02	1,68E-02	1,19E-02	1,57E-02	1,13E-02

Tabela C.24: Significado dos números na Coluna de Causa de Término do Algoritmo-sistema dinâmico 2

Significado do Término do Algoritmo	
Todos os Algoritmos	
1	Critério de medida de otimalidade é menor que a estipulada pelo usuário, entretando o ponto encontrado não corresponde a um ponto factível.
0	Número de iterações ou avaliações da Função Objetivo alcançou o valor máximo estipulado pelo usuário.
Algoritmos Trust Region Reflective e Interior Point	
2	Passo na variável x é menor que a especificada pelo usuário.
Algoritmo Trust Region Reflective	
3	Mudança na função objetivo é menor que a especificada pelo usuário.
Algoritmo Active-Set	
4	Magnitude da direção de busca é menor que a especificada pelo usuário.
5	Magnitude da derivada direcional na direção de busca é menor que a especificada pelo usuário.

Tabela C.25: Método Interior Point (Pontos Interiores) - Sistema Dinâmico 2

Vetor de Variáveis de Estado Inicial	Valor da Função Objetivo	Número de Avaliações da Função Objetivo	Iterações	Tempo (s)	Motivo do Término do Algoritmo
1	1,28E+06	38822	933	17,025	2
2	4,31E+05	40000	1007	20,662	0
3	1,21E+06	16838	415	7,519	2
4	8,67E+05	22854	572	10,927	2
5	3,17E+06	10557	262	4,968	2
6	6,09E+05	24451	601	10,672	2
7	5,01E+05	23358	582	11,246	2
8	3,68E+06	10391	260	4,789	2
9	5,50E+05	30073	753	14,077	2
10	5,11E+05	40016	1012	16,907	0

Tabela C.26: Sistema Dinâmico 2 - Método Trust Region Reflective - Sistema Dinâmico 2

Vetor de Variáveis de Estado Inicial	Valor da Função Objetivo	Número de Avaliações da Função Objetivo	Iterações	Tempo (s)	Motivo do Término do Algoritmo
1	NaN	40014	1025	18,180	0
2	NaN	40014	1025	17,425	0
3	NaN	40008	1024	18,528	0
4	NaN	40037	1024	20,438	0
5	NaN	40014	1025	19,363	0
6	NaN	40006	1024	20,330	0
7	NaN	40006	1024	18,679	0
8	NaN	40014	1025	19,106	0
9	NaN	40006	1024	20,605	0
10	NaN	40004	1024	19,303	0

Tabela C.27: SQP (Sequential Quadratic Programming) - Sistema Dinâmico 2

Vetor de Variáveis de Estado Inicial	Valor da Função Objetivo	Número de Avaliações da Função Objetivo	Iterações	Tempo (s)	Motivo do Término do Algoritmo
1	NaN	40014	1025	17,881	0
2	NaN	40014	1025	18,593	0
3	NaN	40008	1024	17,208	0
4	NaN	40037	1024	19,306	0
5	NaN	40014	1025	18,200	0
6	NaN	40006	1024	19,173	0
7	NaN	40006	1024	17,791	0
8	NaN	40014	1025	17,231	0
9	NaN	40006	1024	19,965	0
10	NaN	40004	1024	18,508	0

Tabela C.28: Active - Set - Sistema Dinâmico 2

Vetor de Variáveis de Estado Inicial	Valor da Função Objetivo	Número de Avaliações da Função Objetivo	Iterações	Tempo (s)	Motivo do Término do Algoritmo
1	NaN	40014	1025	18,688	0
2	NaN	40014	1025	17,469	0
3	NaN	40008	1024	17,742	0
4	NaN	40037	1024	17,950	0
5	NaN	40014	1025	18,474	0
6	NaN	40006	1024	19,473	0
7	NaN	40006	1024	16,783	0
8	NaN	40014	1025	18,723	0
9	NaN	40006	1024	19,049	0
10	NaN	40004	1024	19,370	0

Tabela C.29: Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Interior-Point) - Sistema Dinâmico

Variável de Estado	Resultado Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Volume1-Massa	1,75E-02	1,75E-02	3,84E-02	9,30E-01	1,71E-02	4,49E-02	1,25E-01	1,72E-02	1,03E+03	3,23E-02
Volume2-Energia	5,98E+03	5,98E+03	6,05E+03	5,50E+03	5,96E+03	2,80E+03	6,05E+03	6,05E+03	6,05E+03	5,99E+03
Volume2-Massa	1,54E-02	1,54E-02	7,84E-02	3,09E-02	1,47E-02	1,89E+03	1,99E-01	2,42E-01	1,22E+00	9,00E-04
Volume3-Energia	3,71E+03	3,71E+03	3,77E+03	3,44E+03	3,69E+03	1,85E+03	3,78E+03	3,78E+03	3,78E+03	3,74E+03
Volume3-Massa	9,57E-03	9,57E-03	5,77E-02	4,52E+01	8,77E-03	1,15E-01	1,78E-01	7,14E-01	5,34E+00	1,52E-01
Volume4-Energia	6,23E+03	6,23E+03	6,38E+03	5,84E+03	6,18E+03	3,14E-04	6,42E+03	6,43E+03	6,43E+03	6,26E+03
Volume4-Massa	1,61E-02	1,61E-02	1,19E-01	5,34E+02	1,34E-02	3,79E+03	4,35E-01	1,61E+03	1,96E-07	1,09E-09
Volume5-Energia	5,90E+03	5,90E+03	6,02E+03	5,50E+03	5,86E+03	1,40E+03	6,05E+03	6,05E+03	6,05E+03	5,97E+03
Volume5-Massa	1,52E-02	1,52E-02	1,02E-01	4,15E+01	1,34E-02	5,38E-02	3,49E-01	8,46E-01	1,38E+03	3,19E-02
Volume6-Energia	9,13E+03	9,13E+03	9,16E+03	9,45E+03	9,12E+03	2,85E+03	9,22E+03	9,17E+03	9,16E+03	9,45E+03
Volume6-Massa	1,96E-02	1,96E-02	1,91E-02	3,60E+01	1,94E-02	2,19E+03	2,06E-02	1,62E-02	1,61E-02	6,86E-02
Volume7-Energia	8,80E+03	8,80E+03	8,86E+03	9,31E+03	8,76E+03	8,14E+03	8,95E+03	8,93E+03	8,90E+03	8,62E+03
Volume7-Massa	1,89E-02	1,89E-02	1,83E-02	1,81E-08	1,85E-02	6,69E-01	2,13E-02	1,49E-02	1,46E-02	5,09E-02
Volume8-Energia	4,22E+03	4,22E+03	4,27E+03	4,65E+03	4,20E+03	1,16E-02	4,33E+03	4,35E+03	4,33E+03	4,14E+03
Volume8-Massa	9,07E-03	9,07E-03	8,95E-03	4,06E+01	8,73E-03	1,36E-06	1,12E-02	8,10E-03	7,75E-03	3,15E-02
Volume9-Energia	7,69E+03	7,69E+03	7,87E+03	7,31E+03	7,63E+03	2,17E+03	7,97E+03	8,07E+03	8,04E+03	7,57E+03
Volume9-Massa	1,65E-02	1,65E-02	1,81E-02	7,01E+01	1,53E-02	4,69E+04	2,45E-02	2,52E-02	2,25E-02	2,09E-02
Volume10-Energia	6,46E+03	6,46E+03	6,58E+03	7,25E+03	6,41E+03	1,95E+03	6,67E+03	6,74E+03	6,71E+03	6,32E+03
Volume10-Massa	1,39E-02	1,39E-02	1,43E-02	2,42E+01	1,31E-02	6,67E-02	1,87E-02	1,58E-02	1,45E-02	3,27E-02
Volume11-Energia	5,42E+03	5,42E+03	5,56E+03	4,51E+03	5,38E+03	3,83E+03	5,61E+03	5,73E+03	5,75E+03	5,24E+03
Volume11-Massa	1,22E-02	1,22E-02	2,18E-02	2,59E+01	1,06E-02	2,18E-02	3,10E-02	3,09E-02	2,97E-02	2,94E-02
Volume12-Energia	5,82E+03	5,82E+03	5,98E+03	5,50E+03	5,78E+03	3,01E+03	6,04E+03	6,05E+03	6,05E+03	5,89E+03
Volume12-Massa	1,31E-02	1,31E-02	2,24E-02	3,97E+01	1,16E-02	1,69E-01	3,10E-02	2,55E-02	2,39E-02	3,84E-02
Volume13-Energia	6,43E+03	6,43E+03	6,62E+03	6,65E+03	6,38E+03	3,76E+03	6,69E+03	6,81E+03	6,82E+03	6,63E+03
Volume13-Massa	1,45E-02	1,45E-02	2,56E-02	3,78E+00	1,27E-02	7,19E-09	3,59E-02	3,38E-02	3,23E-02	2,66E-02
Volume14-Energia	4,50E+03	4,50E+03	4,50E+03	4,25E+03	4,36E+03	3,81E+03	4,50E+03	4,50E+03	4,18E+03	4,90E+03
Volume14-Massa	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	3,48E-01	7,40E-03	4,28E-02	1,00E-02	1,00E-02	5,58E-03	1,64E-02
Volume15-Energia	5,20E+03	5,20E+03	5,20E+03	5,71E+03	5,09E+03	4,45E+03	5,20E+03	5,20E+03	5,04E+03	5,38E+03
Volume15-Massa	1,16E-02	1,16E-02	1,16E-02	6,32E-02	1,02E-02	2,40E+03	1,16E-02	1,16E-02	9,80E-03	2,04E-02
Volume16-Energia	5,17E+03	5,17E+03	5,17E+03	6,33E+03	4,99E+03	5,28E+03	5,17E+03	5,17E+03	4,88E+03	5,28E+03
Volume16-Massa	1,15E-02	1,15E-02	1,15E-02	1,56E+00	8,78E-03	2,44E-01	1,15E-02	1,15E-02	8,26E-03	1,51E-02
Volume17-Energia	4,63E+03	4,63E+03	4,63E+03	5,23E+03	4,63E+03	4,05E+03	4,63E+03	4,63E+03	4,59E+03	4,48E+03
Volume17-Massa	1,33E-02	1,33E-02	1,33E-02	2,03E+00	1,33E-02	1,12E-01	1,33E-02	1,33E-02	1,27E-02	1,20E-02
Volume18-Energia	6,35E+03	6,35E+03	6,35E+03	6,99E+03	6,35E+03	4,70E+03	6,35E+03	6,35E+03	6,35E+03	6,11E+03
Volume18-Massa	1,82E-02	1,82E-02	1,82E-02	5,88E-02	1,82E-02	9,04E-03	1,82E-02	1,82E-02	1,83E-02	1,72E-02
Volume19-Energia	2,23E+03	2,23E+03	2,23E+03	2,77E+03	2,23E+03	1,67E+03	2,23E+03	2,23E+03	2,22E+03	2,18E+03
Volume19-Massa	6,38E-03	6,38E-03	6,38E-03	1,52E+00	6,37E-03	2,07E-02	6,38E-03	6,38E-03	6,53E-03	6,19E-03
Time (s)	34,69656	14,0095982	86,841021	82,2014075	86,983833	83,99687	90,548844	49,31031	85,5418617	25,30566

Resultado Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial

Variável de Estado	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Volume1-Massa	1,08E-02	1,20E-02	1,38E-02	1,06E-02	1,03E-02	8,82E-03	1,32E-02	1,16E-02	1,27E-02	1,09E-02
Volume2-Energia	3,03E+03	4,88E+03	2,53E+03	3,92E+03	4,74E+03	2,99E+03	3,14E+03	2,75E+03	3,29E+03	4,32E+03
Volume2-Massa	6,92E-03	1,42E-02	6,50E-03	1,48E-02	1,53E-02	9,39E-03	1,15E-02	7,89E-03	8,70E-03	1,03E-02
Volume3-Energia	2,51E+03	1,66E+03	1,89E+03	2,72E+03	1,39E+03	2,60E+03	2,03E+03	3,09E+03	2,58E+03	2,83E+03
Volume3-Massa	9,27E-03	5,75E-03	6,77E-03	1,02E-02	3,15E-03	8,40E-03	8,63E-03	1,15E-02	6,64E-03	6,55E-03
Volume4-Energia	3,96E+03	4,80E+03	2,45E+03	3,09E+03	3,66E+03	2,99E+03	3,87E+03	3,55E+03	4,69E+03	3,61E+03
Volume4-Massa	1,01E-02	1,92E-02	6,53E-03	6,91E-03	8,38E-03	9,52E-03	1,58E-02	1,03E-02	1,43E-02	1,23E-02
Volume5-Energia	3,56E+03	4,71E+03	2,53E+03	3,55E+03	3,38E+03	3,24E+03	3,87E+03	4,18E+03	2,72E+03	4,97E+03
Volume5-Massa	8,35E-03	1,19E-02	5,81E-03	9,58E-03	1,45E-02	8,96E-03	1,46E-02	1,71E-02	9,17E-03	1,95E-02
Volume6-Energia	2,99E+03	4,72E+03	3,19E+03	4,22E+03	5,23E+03	2,77E+03	2,93E+03	5,92E+03	3,01E+03	2,96E+03
Volume6-Massa	7,84E-03	1,40E-02	8,35E-03	1,67E-02	2,15E-02	1,14E-02	8,78E-03	1,75E-02	7,61E-03	1,22E-02
Volume7-Energia	4,28E+03	4,22E+03	4,24E+03	5,94E+03	6,27E+03	5,74E+03	3,02E+03	5,56E+03	2,77E+03	4,91E+03
Volume7-Massa	1,08E-02	9,94E-03	9,82E-03	1,43E-02	2,39E-02	1,74E-02	7,15E-03	1,53E-02	7,27E-03	1,56E-02
Volume8-Energia	3,07E+03	2,17E+03	2,34E+03	1,60E+03	2,91E+03	2,33E+03	2,93E+03	2,12E+03	1,92E+03	2,42E+03
Volume8-Massa	1,11E-02	8,49E-03	7,21E-03	4,64E-03	8,44E-03	8,38E-03	1,16E-02	5,85E-03	6,62E-03	8,68E-03
Volume9-Energia	3,96E+03	5,97E+03	5,34E+03	5,86E+03	3,23E+03	4,77E+03	5,87E+03	3,39E+03	5,16E+03	5,43E+03
Volume9-Massa	1,31E-02	2,32E-02	1,54E-02	1,39E-02	1,30E-02	1,09E-02	1,39E-02	1,38E-02	1,36E-02	1,98E-02
Volume10-Energia	3,39E+03	4,69E+03	3,98E+03	2,48E+03	3,84E+03	4,74E+03	4,46E+03	4,05E+03	4,28E+03	4,39E+03
Volume10-Massa	1,22E-02	1,67E-02	1,44E-02	8,26E-03	1,42E-02	1,23E-02	1,12E-02	1,05E-02	1,61E-02	1,26E-02
Volume11-Energia	4,19E+03	4,71E+03	4,66E+03	5,07E+03	4,43E+03	3,55E+03	5,17E+03	4,11E+03	4,40E+03	3,91E+03
Volume11-Massa	1,04E-02	1,82E-02	1,59E-02	1,35E-02	1,06E-02	1,08E-02	1,68E-02	1,19E-02	1,57E-02	1,13E-02
Volume12-Energia	2,49E+03	4,54E+03	4,45E+03	3,39E+03	4,07E+03	4,47E+03	4,77E+03	4,98E+03	4,52E+03	2,21E+03
Volume12-Massa	5,60E-03	1,60E-02	1,55E-02	7,71E-03	1,01E-02	1,69E-02	1,40E-02	2,06E-02	1,57E-02	8,19E-03
Volume13-Energia	4,78E+03	5,04E+03	5,20E+03	3,78E+03	5,61E+03	6,11E+03	5,46E+03	3,78E+03	6,22E+03	2,85E+03
Volume13-Massa	1,08E-02	1,78E-02	1,44E-02	1,09E-02	2,05E-02	1,81E-02	1,98E-02	9,52E-03	2,33E-02	6,44E-03
Volume14-Energia	4,92E+03	2,98E+03	5,30E+03	4,02E+03	4,61E+03	3,40E+03	2,79E+03	5,21E+03	5,74E+03	5,16E+03
Volume14-Massa	1,56E-02	9,54E-03	1,99E-02	1,10E-02	1,35E-02	9,10E-03	8,65E-03	1,41E-02	1,37E-02	1,87E-02
Volume15-Energia	3,56E+03	3,83E+03	4,15E+03	4,83E+03	3,97E+03	3,73E+03	3,25E+03	2,85E+03	4,56E+03	2,77E+03
Volume15-Massa	8,79E-03	1,37E-02	1,12E-02	1,87E-02	9,75E-03	1,46E-02	7,42E-03	9,43E-03	1,10E-02	7,84E-03
Volume16-Energia	5,95E+03	2,84E+03	5,87E+03	5,72E+03	3,79E+03	4,97E+03	5,86E+03	3,37E+03	3,34E+03	4,16E+03
Volume16-Massa	2,19E-02	8,05E-03	1,51E-02	2,07E-02	8,63E-03	1,35E-02	1,58E-02	1,26E-02	7,50E-03	1,29E-02
Volume17-Energia	5,75E+03	3,93E+03	4,54E+03	4,63E+03	3,25E+03	3,38E+03	4,62E+03	3,87E+03	5,76E+03	3,74E+03
Volume17-Massa	1,49E-02	1,68E-02	1,06E-02	1,85E-02	7,80E-03	9,27E-03	1,12E-02	9,07E-03	1,99E-02	9,87E-03
Volume18-Energia	4,80E+03	5,38E+03	4,38E+03	4,38E+03	2,94E+03	2,95E+03	4,68E+03	4,83E+03	6,01E+03	4,67E+03
Volume18-Massa	1,11E-02	1,36E-02	1,20E-02	1,28E-02	6,56E-03	8,94E-03	1,09E-02	1,08E-02	2,07E-02	1,46E-02
Volume19-Energia	1,18E+03	1,80E+03	2,38E+03	2,27E+03	1,80E+03	1,21E+03	2,04E+03	2,31E+03	1,36E+03	1,82E+03
Volume19-Massa	2,79E-03	5,45E-03	6,87E-03	7,08E-03	4,37E-03	4,55E-03	6,96E-03	5,27E-03	4,76E-03	6,35E-03
Time (s)	3,566654	1,884912	1,842877	1,842783	1,843828	1,88365	1,714723	1,737905	1,713013	1,70968

Tabela C.30: Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Trust Region Reflective) - Sistema Dinâmico 2

Resultado Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial

Variável de Estado	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Volume1-Massa	1,08E-02	1,20E-02	1,38E-02	1,06E-02	1,03E-02	8,82E-03	1,32E-02	1,16E-02	1,27E-02	1,09E-02
Volume2-Energia	3,03E+03	4,88E+03	2,53E+03	3,92E+03	4,74E+03	2,99E+03	3,14E+03	2,75E+03	3,29E+03	4,32E+03
Volume2-Massa	6,92E-03	1,42E-02	6,50E-03	1,48E-02	1,53E-02	9,39E-03	1,15E-02	7,89E-03	8,70E-03	1,03E-02
Volume3-Energia	2,51E+03	1,66E+03	1,89E+03	2,72E+03	1,39E+03	2,60E+03	2,03E+03	3,09E+03	2,58E+03	2,83E+03
Volume3-Massa	9,27E-03	5,75E-03	6,77E-03	1,02E-02	3,15E-03	8,40E-03	8,63E-03	1,15E-02	6,64E-03	6,55E-03
Volume4-Energia	3,96E+03	4,80E+03	2,45E+03	3,09E+03	3,66E+03	2,99E+03	3,87E+03	3,55E+03	4,69E+03	3,61E+03
Volume4-Massa	1,01E-02	1,92E-02	6,53E-03	6,91E-03	8,38E-03	9,52E-03	1,58E-02	1,03E-02	1,43E-02	1,23E-02
Volume5-Energia	3,56E+03	4,71E+03	2,53E+03	3,55E+03	3,38E+03	3,24E+03	3,87E+03	4,18E+03	2,72E+03	4,97E+03
Volume5-Massa	8,35E-03	1,19E-02	5,81E-03	9,58E-03	1,45E-02	8,96E-03	1,46E-02	1,71E-02	9,17E-03	1,95E-02
Volume6-Energia	2,99E+03	4,72E+03	3,19E+03	4,22E+03	5,23E+03	2,77E+03	2,93E+03	5,92E+03	3,01E+03	2,96E+03
Volume6-Massa	7,84E-03	1,40E-02	8,35E-03	1,67E-02	2,15E-02	1,14E-02	8,78E-03	1,75E-02	7,61E-03	1,22E-02
Volume7-Energia	4,28E+03	4,22E+03	4,24E+03	5,94E+03	6,27E+03	5,74E+03	3,02E+03	5,56E+03	2,77E+03	4,91E+03
Volume7-Massa	1,08E-02	9,94E-03	9,82E-03	1,43E-02	2,39E-02	1,74E-02	7,15E-03	1,53E-02	7,27E-03	1,56E-02
Volume8-Energia	3,07E+03	2,17E+03	2,34E+03	1,60E+03	2,91E+03	2,33E+03	2,93E+03	2,12E+03	1,92E+03	2,42E+03
Volume8-Massa	1,11E-02	8,49E-03	7,21E-03	4,64E-03	8,44E-03	8,38E-03	1,16E-02	5,85E-03	6,62E-03	8,68E-03
Volume9-Energia	3,96E+03	5,97E+03	5,34E+03	5,86E+03	3,23E+03	4,77E+03	5,87E+03	3,39E+03	5,16E+03	5,43E+03
Volume9-Massa	1,31E-02	2,32E-02	1,54E-02	1,39E-02	1,30E-02	1,09E-02	1,39E-02	1,38E-02	1,36E-02	1,98E-02
Volume10-Energia	3,39E+03	4,69E+03	3,98E+03	2,48E+03	3,84E+03	4,74E+03	4,46E+03	4,05E+03	4,28E+03	4,39E+03
Volume10-Massa	1,22E-02	1,67E-02	1,44E-02	8,26E-03	1,42E-02	1,23E-02	1,12E-02	1,05E-02	1,61E-02	1,26E-02
Volume11-Energia	4,19E+03	4,71E+03	4,66E+03	5,07E+03	4,43E+03	3,55E+03	5,17E+03	4,11E+03	4,40E+03	3,91E+03
Volume11-Massa	1,04E-02	1,82E-02	1,59E-02	1,35E-02	1,06E-02	1,08E-02	1,68E-02	1,19E-02	1,57E-02	1,13E-02
Volume12-Energia	2,49E+03	4,54E+03	4,45E+03	3,39E+03	4,07E+03	4,47E+03	4,77E+03	4,98E+03	4,52E+03	2,21E+03
Volume12-Massa	5,60E-03	1,60E-02	1,55E-02	7,71E-03	1,01E-02	1,69E-02	1,40E-02	2,06E-02	1,57E-02	8,19E-03
Volume13-Energia	4,78E+03	5,04E+03	5,20E+03	3,78E+03	5,61E+03	6,11E+03	5,46E+03	3,78E+03	6,22E+03	2,85E+03
Volume13-Massa	1,08E-02	1,78E-02	1,44E-02	1,09E-02	2,05E-02	1,81E-02	1,98E-02	9,52E-03	2,33E-02	6,44E-03
Volume14-Energia	4,92E+03	2,98E+03	5,30E+03	4,02E+03	4,61E+03	3,40E+03	2,79E+03	5,21E+03	5,74E+03	5,16E+03
Volume14-Massa	1,56E-02	9,54E-03	1,99E-02	1,10E-02	1,35E-02	9,10E-03	8,65E-03	1,41E-02	1,37E-02	1,87E-02
Volume15-Energia	3,56E+03	3,83E+03	4,15E+03	4,83E+03	3,97E+03	3,73E+03	3,25E+03	2,85E+03	4,56E+03	2,77E+03
Volume15-Massa	8,79E-03	1,37E-02	1,12E-02	1,87E-02	9,75E-03	1,46E-02	7,42E-03	9,43E-03	1,10E-02	7,84E-03
Volume16-Energia	5,95E+03	2,84E+03	5,87E+03	5,72E+03	3,79E+03	4,97E+03	5,86E+03	3,37E+03	3,34E+03	4,16E+03
Volume16-Massa	2,19E-02	8,05E-03	1,51E-02	2,07E-02	8,63E-03	1,35E-02	1,58E-02	1,26E-02	7,50E-03	1,29E-02
Volume17-Energia	5,75E+03	3,93E+03	4,54E+03	4,63E+03	3,25E+03	3,38E+03	4,62E+03	3,87E+03	5,76E+03	3,74E+03
Volume17-Massa	1,49E-02	1,68E-02	1,06E-02	1,85E-02	7,80E-03	9,27E-03	1,12E-02	9,07E-03	1,99E-02	9,87E-03
Volume18-Energia	4,80E+03	5,38E+03	4,38E+03	4,38E+03	2,94E+03	2,95E+03	4,68E+03	4,83E+03	6,01E+03	4,67E+03
Volume18-Massa	1,11E-02	1,36E-02	1,20E-02	1,28E-02	6,56E-03	8,94E-03	1,09E-02	1,08E-02	2,07E-02	1,46E-02
Volume19-Energia	1,18E+03	1,80E+03	2,38E+03	2,27E+03	1,80E+03	1,21E+03	2,04E+03	2,31E+03	1,36E+03	1,82E+03
Volume19-Massa	2,79E-03	5,45E-03	6,87E-03	7,08E-03	4,37E-03	4,55E-03	6,96E-03	5,27E-03	4,76E-03	6,35E-03
Time (s)	1,704741	1,665778	1,732988	1,842393	1,842082	1,82194	1,849026	1,816161	1,842321	1,823227

Tabela C.31: Resultado Utilizando a Ferramenta TRIM (Active Set) - Sistema Dinâmico 2

Resultado Final para o número do Vetor de Variáveis de Estado Inicial

Variável de Estado	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Volume1-Massa	1,75E-02	1,75E-02	1,75E-02	1,75E-02	1,75E-02	1,74E-02	2,21E-01	1,75E-02	1,75E-02	2,06E-01
Volume2-Energia	5,98E+03	5,98E+03	5,98E+03	5,98E+03	5,98E+03	5,98E+03	6,04E+03	5,98E+03	5,98E+03	6,04E+03
Volume2-Massa	1,54E-02	1,54E-02	1,54E-02	1,54E-02	1,54E-02	1,54E-02	2,20E-01	1,54E-02	1,54E-02	2,10E-01
Volume3-Energia	3,71E+03	3,71E+03	3,71E+03	3,71E+03	3,71E+03	3,71E+03	3,77E+03	3,71E+03	3,71E+03	3,77E+03
Volume3-Massa	9,57E-03	9,57E-03	9,57E-03	9,57E-03	9,57E-03	9,57E-03	1,41E-01	9,57E-03	9,57E-03	1,34E-01
Volume4-Energia	6,23E+03	6,23E+03	6,23E+03	6,23E+03	6,23E+03	6,23E+03	6,37E+03	6,23E+03	6,23E+03	6,37E+03
Volume4-Massa	1,61E-02	1,61E-02	1,61E-02	1,61E-02	1,61E-02	1,61E-02	2,23E-01	1,61E-02	1,61E-02	2,22E-01
Volume5-Energia	5,90E+03	5,90E+03	5,90E+03	5,90E+03	5,90E+03	5,90E+03	6,01E+03	5,90E+03	5,90E+03	6,02E+03
Volume5-Massa	1,52E-02	1,52E-02	1,52E-02	1,52E-02	1,52E-02	1,52E-02	2,20E-01	1,52E-02	1,52E-02	2,13E-01
Volume6-Energia	9,13E+03	9,13E+03	9,13E+03	9,13E+03	9,13E+03	9,13E+03	9,16E+03	9,13E+03	9,13E+03	9,16E+03
Volume6-Massa	1,96E-02	1,96E-02	1,96E-02	1,96E-02	1,96E-02	1,96E-02	1,98E-02	1,96E-02	1,96E-02	1,98E-02
Volume7-Energia	8,80E+03	8,80E+03	8,80E+03	8,80E+03	8,80E+03	8,80E+03	8,85E+03	8,80E+03	8,80E+03	8,85E+03
Volume7-Massa	1,89E-02	1,89E-02	1,89E-02	1,89E-02	1,89E-02	1,89E-02	1,92E-02	1,89E-02	1,89E-02	1,91E-02
Volume8-Energia	4,22E+03	4,22E+03	4,22E+03	4,22E+03	4,22E+03	4,22E+03	4,26E+03	4,22E+03	4,22E+03	4,26E+03
Volume8-Massa	9,07E-03	9,07E-03	9,07E-03	9,07E-03	9,07E-03	9,07E-03	9,23E-03	9,07E-03	9,07E-03	9,24E-03
Volume9-Energia	7,69E+03	7,69E+03	7,69E+03	7,69E+03	7,69E+03	7,69E+03	7,84E+03	7,69E+03	7,69E+03	7,84E+03
Volume9-Massa	1,65E-02	1,65E-02	1,65E-02	1,65E-02	1,65E-02	1,65E-02	1,70E-02	1,65E-02	1,65E-02	1,71E-02
Volume10-Energia	6,46E+03	6,46E+03	6,46E+03	6,46E+03	6,46E+03	6,46E+03	6,56E+03	6,46E+03	6,46E+03	6,56E+03
Volume10-Massa	1,39E-02	1,39E-02	1,39E-02	1,39E-02	1,39E-02	1,39E-02	1,42E-02	1,39E-02	1,39E-02	1,42E-02
Volume11-Energia	5,42E+03	5,42E+03	5,42E+03	5,42E+03	5,42E+03	5,42E+03	5,52E+03	5,42E+03	5,42E+03	5,53E+03
Volume11-Massa	1,22E-02	1,22E-02	1,22E-02	1,22E-02	1,22E-02	1,22E-02	2,25E-02	1,22E-02	1,22E-02	2,26E-02
Volume12-Energia	5,82E+03	5,82E+03	5,82E+03	5,82E+03	5,82E+03	5,82E+03	5,98E+03	5,82E+03	5,82E+03	5,98E+03
Volume12-Massa	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	1,31E-02	2,43E-02	1,31E-02	1,31E-02	2,44E-02
Volume13-Energia	6,43E+03	6,43E+03	6,43E+03	6,43E+03	6,43E+03	6,43E+03	6,59E+03	6,43E+03	6,43E+03	6,59E+03
Volume13-Massa	1,45E-02	1,45E-02	1,45E-02	1,45E-02	1,45E-02	1,45E-02	2,68E-02	1,45E-02	1,45E-02	2,69E-02
Volume14-Energia	4,50E+03	4,50E+03	4,50E+03	4,50E+03	4,50E+03	4,50E+03	4,50E+03	4,50E+03	4,50E+03	4,50E+03
Volume14-Massa	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02
Volume15-Energia	5,20E+03	5,20E+03	5,20E+03	5,20E+03	5,20E+03	5,20E+03	5,20E+03	5,20E+03	5,20E+03	5,20E+03
Volume15-Massa	1,16E-02	1,16E-02	1,16E-02	1,16E-02	1,16E-02	1,16E-02	1,16E-02	1,16E-02	1,16E-02	1,16E-02
Volume16-Energia	5,17E+03	5,17E+03	5,17E+03	5,17E+03	5,17E+03	5,17E+03	5,17E+03	5,17E+03	5,17E+03	5,17E+03
Volume16-Massa	1,15E-02	1,15E-02	1,15E-02	1,15E-02	1,15E-02	1,15E-02	1,15E-02	1,15E-02	1,15E-02	1,15E-02
Volume17-Energia	4,63E+03	4,63E+03	4,63E+03	4,63E+03	4,63E+03	4,63E+03	4,63E+03	4,63E+03	4,63E+03	4,63E+03
Volume17-Massa	1,33E-02	1,33E-02	1,33E-02	1,33E-02	1,33E-02	1,33E-02	1,33E-02	1,33E-02	1,33E-02	1,33E-02
Volume18-Energia	6,35E+03	6,35E+03	6,35E+03	6,35E+03	6,35E+03	6,35E+03	6,35E+03	6,35E+03	6,35E+03	6,35E+03
Volume18-Massa	1,82E-02	1,82E-02	1,82E-02	1,82E-02	1,82E-02	1,82E-02	1,83E-02	1,82E-02	1,82E-02	1,83E-02
Volume19-Energia	2,23E+03	2,23E+03	2,23E+03	2,23E+03	2,23E+03	2,23E+03	2,23E+03	2,23E+03	2,23E+03	2,23E+03
Volume19-Massa	6,38E-03	6,38E-03	6,38E-03	6,38E-03	6,38E-03	6,38E-03	6,42E-03	6,38E-03	6,38E-03	6,42E-03
Time (s)	6,93E+02	7,43E+02	8,32E+02	7,65E+02	7,13E+02	6,94E+02	9,90E+02	7,43E+02	9,89E+02	9,91E+02

Tabela C.32: Resultado Utilizando o Algoritmo GS com Comprimento de Passo Limitado - Sistema Dinâmico 2