Controle Ótimo com Aplicações em Modelos Biológicos

Resumo dos capítulos do livro de Suzanne Lenhart e John T. Workman.

Lucas Machado Moschen

Escola de Matemática Aplicada

Fundação Getulio Vargas

Rio de Janeiro

2020

Conteúdo

Capítulo 1

Introdução

Procura-se nesse texto estudar o livro de Lenhart and Workman (2007) que estuda os problemas de controle ótimo. O texto terá a mesma estrutura do livro e servirá de guia em português de estudos sobre o tema.

Apresenta-se inicialmente um problema motivador que considera duas equações: uma representa a variação do peso da parte vegetativa, enquanto a outra representa o peso da parte reprodutiva. O crescimento das plantas é modelado pelo modelo de Cohen (1971). Nesse caso, o *controle* sobre o sistema é a fração da fotossíntese destinada para a parte vegetativa. Queremos *maximizar* o crescimento da parte reprodutiva, que garante o mantimento da espécie.

Sejam $x(t)$ a parte vegetativa e $y(t)$ a parte reprodutiva no tempo t. Nosso objetivo será maximizar o funcional 1.1 segundo a função $u(t)$ que representa a fração de fotossíntese para o crescimento vegetativo:

$$F(x, u, t) := \int_0^T \ln(y(t))dt, \tag{1.1}$$

onde T é o limite superior do intervalo de tempo considerado e tal que o modelo é um sistema de equações diferenciais com restrições:

$$\begin{aligned}
x'(t) &= u(t)x(t) \\
y'(t) &= (1 - u(t))y(t) \\
0 \leq & u(t) \leq 1 \\
x(0) &> 0, \\
y(0) &\geq 0
\end{aligned}$$

Um problema como esse é chamado de **problema de controle ótimo**, pois queremos encontrar uma função u, denominada controle, ótima, segundo um funcional objetivo. Nesse exemplo, podemos tirar conclusões interessantes sobre o sistema, como, por exemplo, como a planta distribui seu fotossintato. Outros problemas interessantes que surgem tem aplicações bem mundanas: qual a porcentagem da população deveria ser vacinada em uma epidemia, a fim de que se minimize o número de infectados e o custo de implementação? Qual a quantidade de remédio deve ser ministrado para que se minimize a carga viral e a quantidade administrada de remédio? Nesse caso a carga viral e a quantidade de remédio formariam o sistema. Em um problemas como esse, encontramos:

1. variáveis de **estado**: descrevem a dinâmica do sistema.
2. variáveis de **controle**: conduzem o estado segundo uma ação.
3. **funcional** [1] **objetivo**: Procuramos a função de controle de forma que esse funcional seja minimizado (ou maximizado). Ele representa o custo (ou ganho) ao se tomar uma atitude no sistema.

[1] Funcional: Mapa entre um conjunto de funções ao conjunto dos números reais

Capítulo 2

Problemas Básicos de Controle Ótimo

2.1 Preliminares

Alguns conceitos e teoremas básicos de análise que serão utilizados durante o texto e podem ser encontrados em diversos livros:

1. **Continuidade por partes:** Função contínua em cada ponto em que é definida, exceto em uma quantidade finita deles, e igual a seu limite à esquerda ou à direita em cada ponto. Logo, podemos ter finitos saltos, mas não podemos ter pontos isolados.

2. **Diferenciável por partes:** Função contínua que é diferenciável em cada ponto em que é definida, exceto em uma quantidade finita deles. Além disso, sua derivada é contínua sempre que definida.

3. **Convexidade:** A função k é convexa se $\forall 0 \leq \alpha \leq 1$ e para qualquer $a \leq t_1, t_2 \leq b$, $\alpha k(t_1) + (1-\alpha)k(t_2) \geq k(\alpha t_1 + (1-\alpha)t_2)$. A definição é equivalente para funções de duas ou mais variáveis. Ela será côncava se $-k$ for convexa.

4. **Lipschitz:** Função k em que existe c constante tal que $|k(t_1)-k(t_2)| \leq c|t_1 - t_2|$, para todos os pontos do domínio de k.

5. **Teorema do Valor Médio:** Seja k contínua em $[a, b]$ e diferenciável em (a, b). Então existe $x_0 \in (a, b)$ tal que $k(b) - k(a) = k'(x_0)(b - a)$.

6. **Teorema da Convergência Dominada:** Considere uma sequência $\{f_n\}$ dominada por uma função Lebesgue integrável g. Suponha que essa sequência converge ponto a ponto para uma função f. Então f é integrável e $\lim_{n\to\infty} \int_S f_n d\mu = \int_S f d\mu$.

Observação. *Se x é solução da equação diferencial $x'(t) = g(t, x(t), u(t))$, em que g é contínua nas três variáveis, então x é diferenciável sempre que u é contínua. Se u for contínua por partes, então x será diferenciável por partes.*

Exercício 2.1.1. Se $k : I \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ é diferenciável por partes em um intervalo I limitado, k é Lipschitz.

2.2 Condições necessárias para o problema básico

Considere $u(t)$ uma variável de controle e $x(t)$ variável de estado que satisfaz

$$x'(t) = g(t, x(t), u(t)). \tag{2.1}$$

Podemos ver a relação entre essas variáveis como $u(t) \mapsto x = x(u)$. O problema básico do controle ótimo é encontrar uma função de controle contínua por partes 1 $u(t)$ que maximize um dado funcional objetivo

$$J(u) := \int_{t_0}^{t_1} f(t, x(t), u(t))dt \tag{2.2}$$

Nos problemas encontrados nesse texto, f e g são sempre continuamente diferenciáveis. Para isso, se $u^*(t)$ e $x^*(t) = x(u^*(t))$ são argumentos ótimos, podemos extrair condições necessárias para o problema. No capítulo 3, são discutidas as condições suficientes.

Função Adjunta: proposta similar aos multiplicadores de Lagrange para o cálculo multivariado. $\lambda : [t_0, t_1] \to \mathbb{R}$ é diferenciável por partes e deve satisfazer algumas condições que serão derivadas posteriormente.

Assuma a existência de u^* e x^* em um problema de maximização. Nesse caso, $J(u) \leq J(u^*) < \infty$, para todo controle u. Seja $h(t)$ uma função contínua por partes e $\epsilon \in \mathbb{R}$. Então:

$$u^\epsilon(t) = u^*(t) + \epsilon h(t), u^\epsilon \mapsto x^\epsilon,$$

tal que x^ϵ satisfaz 2.1 sempre que u^ϵ é contínua. Consideramos $x^\epsilon(t_0) = x_0$.

Para todo t, quando $\epsilon \to 0$, temos que $u^\epsilon(t) \to u^*(t)$, pela própria definição. Além disso,

$$\left.\frac{\partial u^\epsilon(t)}{\partial \epsilon}\right|_{\epsilon=0} = h(t).$$

Como a função g é continuamente diferenciável, também ocorre que, para todo t fixo,

$$x^\epsilon(t) \to x^*(t) \text{ e } \left.\frac{\partial}{\partial \epsilon} x^\epsilon(t)\right|_{\epsilon=0} \text{ existe.}$$

Observação. *Se for difícil enxergar isso, pense que*

$$x^\epsilon(t) = x_0 + \int_{t_0}^{t} g(s, x^\epsilon(s), u^\epsilon(s))ds$$

Seja $\lambda(t)$ a função adjunta (2.2) no intervalo $[t_0, t_1]$. Pelo Teorema Fundamental do Cálculo,

$$\int_{t_0}^{t_1} \frac{d}{dt}[\lambda(t)x^\epsilon(t)]dt = \lambda(t_1)x^\epsilon(t_1) - \lambda(t_0)x^\epsilon(t_0),$$

e, portanto, exceto em uma finidade de pontos,

$$\begin{aligned} J(u^\epsilon) = &\int_{t_0}^{t_1} [f(t, x^\epsilon(t), u^\epsilon(t)) + \frac{d}{dt}(\lambda(t)x^\epsilon(t))]dt \\ &+ \lambda(t_0)x_0 - \lambda(t_1)x^\epsilon(t_1) \\ = &\int_{t_0}^{t_1} [f(t, x^\epsilon(t), u^\epsilon(t)) + \lambda'(t)x^\epsilon(t) + \lambda(t)\overbrace{g(t, x^\epsilon(t), u^\epsilon(t))}^{(x^\epsilon)'(t)}]dt \\ &+ \lambda(t_0)x_0 - \lambda(t_1)x^\epsilon(t_1). \end{aligned}$$

Sabemos que

$$0 = \frac{d}{d\epsilon}J(u^\epsilon)\bigg|_{\epsilon=0} = \lim_{\epsilon\to 0} \frac{J(u^\epsilon) - J(u^*)}{\epsilon},$$

pois $J(u^*)$ é máximo. Desta maneira, como o integrando é diferenciável por partes e o intervalo é compacto, pelo Teorema da Convergência Dominada (6), podemos mover o limite para dentro da integral. Em especial, podemos mover a própria derivada.

$$\begin{aligned} 0 = &\frac{d}{d\epsilon}J(u^\epsilon)\bigg|_{\epsilon=0} \\ = &\int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial}{\partial\epsilon}\left[f(t, x^\epsilon(t), u^\epsilon(t)) + \lambda'(t)x^\epsilon(t) + \lambda(t)g(t, x^\epsilon(t), u^\epsilon(t))dt\right]\bigg|_{\epsilon=0} \\ &- \lambda(t_1)\frac{\partial x^\epsilon}{\epsilon}(t_1)\bigg|_{\epsilon=0} \\ = &\int_{t_0}^{t_1} \left[(f_x + \lambda(t)g_x + \lambda'(t))\frac{\partial x^\epsilon}{\partial\epsilon}(t)\bigg|_{\epsilon=0} + (f_u + \lambda(t)g_u)h(t)\right] dt \\ &- \lambda(t_1)\frac{\partial x^\epsilon}{\epsilon}(t_1)\bigg|_{\epsilon=0}, \end{aligned}$$

onde os termos de $f_x, f_u, g_x, \text{e} g_u$ são $(t, x^*(t), u^*(t))$. Para garantir que ocorra a igualdade citada acima, definimos

Definição 2.2.1 (Hamiltoniano).

$$H(t, x, u, \lambda) = f(t, x, u) + \lambda g(t, x, u)$$

Para obter a igualdade acima para qualquer função h, precisamos que as condições abaixo sejam satisfeitas e, em particular estamos maximizando H com respeito a u em u^* e, então:

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial H}{\partial u}\right|_{u=u^*} = f_u + \lambda g_u = 0, & \text{(condição de otimalidade)} \\ \left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_{x=x^*} = -\lambda' = -(f_x + \lambda g_x), & \text{(equação adjunta)} \\ \dfrac{\partial H}{\partial \lambda} = x' & \\ \lambda(t_1) = 0, & \text{(condição de transversalidade)} \end{cases} \tag{2.3}$$

2.3 Princípio Máximo de Pontryagin

Teorema 2.3.1. *Se $u^*(t)$ e $x^*(t)$ são ótimos para o problema de controle ótimo, então existe $\lambda(t)$ adjunta diferenciável por partes tal que*

$$H(t, x^*(t), u(t), \lambda(t)) \leq H(t, x^*(t), u^*(t), \lambda(t)) \tag{2.4}$$

para todas as funções de controle u e cada t, onde

$$H = f(t, x(t), u(t)) + \lambda(t) g(t, x(t), u(t))$$

e

$$\lambda'(t) = \frac{\partial H(t, x^*(t), u^*(t), \lambda(t))}{\partial x}$$
$$\lambda(t_1) = 0$$

Já mostramos que $H_u = 0$ em u^* para cada t. De fato existe um ponto crítico em u^* e faltaria provar que ele é máximo. A demonstração para isso é complicada e é omitida do texto.

Teorema 2.3.2. *Suponha que f e g sejam continuamente diferenciáveis nos três argumentos e côncava em u. Suponha que u^* seja o controle ótimo associado ao estado x^* e que λ seja uma função diferenciável por partes não negativa. Suponha que $\forall t_0 \leq t \leq t_1$*

$$0 = H_u(t, x^*(t), u^*(t), \lambda(t))$$

Então vale 2.4.

Demonstração. Tome uma função u contínua por partes e $t \in [t_0, t_1]$. Então

$$\begin{aligned}
H(t,&x^*(t), u^*(t), \lambda(t)) - H(t, x^*(t), u(t), \lambda(t)) \\
&= \left[f(t, x^*(t), u^*(t)) + \lambda(t) g(t, x^*(t), u^*(t))\right] \\
&\quad - \left[f(t, x^*(t), u(t)) + \lambda(t) g(t, x^*(t), u(t))\right] \\
&= \left[f(t, x^*(t), u^*(t)) - f(t, x^*(t), u(t))\right] \\
&\quad + \lambda(t) \left[g(t, x^*(t), u^*(t)) - g(t, x^*(t), u(t))\right] \\
&\geq (u^*(t) - u(t)) f_u(t, x^*(t), u^*(t)) + \lambda(t)(u^*(t) - u(t)) g_u(t, x^*(t), u^*(t)) \\
&= (u^*(t) - u(t)) H_u(t, x^*(t), u^*(t), \lambda(t)) = 0,
\end{aligned}$$

onde a desigualdade vem da concavidade de f e g e $\lambda(t) \geq 0$. □

Observação. *Convertemos o problema de encontrar uma função de controle que maximize um funcional para um problema de maximizar pontualmente o Hamiltoniano com respeito a um controle.*

Observação. *A concavidade de H nos fala sobre o tipo de problema que está sendo considerado: se a segunda derivada é negativa em u^*, tem-se um problema de maximização, enquanto se ela for positiva, o problema é de minimização.*

2.4 Exemplos

Exemplo 2.4.1.

$$\min_u \int_1^2 tu(t)^2 + t^2 x(t) dt$$

$$\text{sujeito a} x'(t) = -u(t), x(1) = 1$$

Primeiro definimos o Hamiltoniano

$$H = [tu(t)^2 + t^2 x(t)] + \lambda(-u(t))$$

Agora vamos observar as condições sobre o Hamiltoniano:

1. *Otimalidade*: $H_u = 0 \implies 2tu^*(t) - \lambda \implies u^*(t) = \dfrac{\lambda}{2t}$
2. *Equação adjunta*: $H_x = t^2 = -\lambda' \implies \lambda(t) = -\frac{1}{3}t^3 + C$
3. *Transversalidade*: $\lambda(2) = 0 \implies C = \frac{8}{3} \implies \lambda(t) = -\frac{1}{3}t^3 + \frac{8}{3}$.

Com essas condições, podemos ver que o controle ótimo é dado por

$$u^*(t) = -\frac{1}{6}t^2 + \frac{8}{6}t^{-1}$$

Note que não provamos a existência de tal controle, o que está sendo feito é: supondo a existência de um controle ótimo, usamos os teoremas da seção 2.3 para encontrar a função adjunta e, assim, encontrar as funções ótimas que resolvem o problema. Além disso, podemos observar que as condições do Teorema 2.3.2 são satisfeitas.

Para encontrar o estado, resolvemos $x'(t) = -u(t)$ e temos:

$$x^*(t) = \frac{1}{18}t^3 - \frac{8}{6}\ln(t) + D,$$

tal que $x^*(1) = 1 = \frac{1}{18} + D$ e, portanto

$$x^*(t) = \frac{1}{18}t^3 - \frac{8}{6}\ln(t) + \frac{17}{18}$$

Exemplo 2.4.2 (Efeito Alle)**.** Formule um problema de controle ótimo para uma população com um termo de crescimento de efeito Allee, em que o controle é a proporção da população caçada. Escolha um funcional objetivo que maximize a receita da caça enquanto minimiza o seu custo. A receita é a integral da quantidade caçada no tempo. O custo tem formato quadrático.

O efeito Allee descreve um crescimento conforme a equação

$$x'(t) = rx(t)\left(\frac{x(t)}{x_{min}} - 1\right)\left(1 - \frac{x(t)}{x_{max}}\right) \tag{2.5}$$

Nessa equação, temos um limiar x_{min} e uma capacidade de carga do ambiente x_{max}. Se $x(0) > x_{min}$, a solução $x(t)$ se aproxima de x_{max}. Se ela começa abaixo, ela decairá para 0. Como o crescimento líquido é negativo em níveis populacionais baixos, a população não consegue se manter e morre. O crescimento per capita também não é monotonicamente decrescente e mostra o efeito que chamamos de Allee, figura 2.1. Para entender mais sobre o efeito Allee, sugere-se Kot (2001).

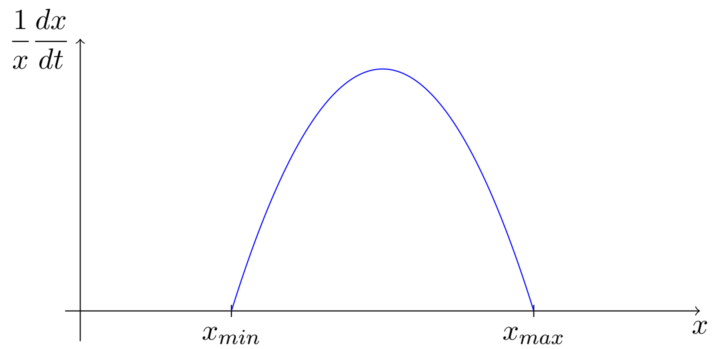

Figura 2.1: Efeito Allee

Existe uma certa liberdade em como fazer essa modelagem. Mas uma possível proposta é a seguinte: Se $x(t)$ é o tamanho da população no tempo t e $u(t)$ é a proporção da população caçada, a variação da população é dada por

$$x'(t) = rx(t)\left(\frac{x(t)}{x_{min}} - 1\right)\left(1 - \frac{x(t)}{x_{max}}\right) - u(t)x(t)$$

$$x(0) = \frac{x_{min} + x_{max}}{2}$$

Para definir um objetivo, queremos maximizar a receita, que é dada por, se T for o final do período,

$$R(u) = \int_0^T u(t)x(t)dt$$

E queremos minimizar o custo da caça, que é assumido como quadrático:

$$C(u) = \int_0^T [u(t)x(t)]^2 dt$$

Queremos portanto

$$\max_u [R(u) - C(u)]$$

Capítulo 3

Existência e Outras Propriedades

Após desenvolver as condições necessárias para resolver o problema de controle ótimo inicial, alguns problemas podem surgir. Como assumimos a existência de controle ótimo, podemos encontrar uma função de controle pelas condições mesmo quando não haja. Também pode ser obtido um funcional que tem valor infinito, algo que não desejado. Portanto, se o funcional objetivo tiver valor mais ou menos infinito, o problema não tem solução.

3.1 Existência e Unicidade

Teorema 3.1.1. *Seja*

$$J(u) := \int_{t_0}^{t_1} f(t, x(t), u(t))dt$$

$$\textit{sujeito a } x'(t) = g(t, x(t), u(t)), x(t_0) = x_0.$$

Suponha que $f(t, x, u)$ e $g(t, x, u)$ sejam continuamente diferenciáveis nos três argumentos e côncavos no segundo e terceiro argumentos. Suponha que u^* é um controle, com estado associado a x^*, a λ uma função diferenciável por partes, tal que $t_0 \leq t \leq t_1$:

$$f_u + \lambda g_u = 0, \tag{3.1a}$$

$$\lambda' = -(f_x + \lambda g_x), \tag{3.1b}$$

$$\lambda(t_1) = 0, \tag{3.1c}$$

$$\lambda(t) \geq 0. \tag{3.1d}$$

Então, para todos os controles u, $J(u^*) \geq J(u)$.

Demonstração. Seja u um controle qualquer. Assim, usando a concavidade de f,

$$\begin{aligned} J(u^*) - J(u) &= \int_{t_0}^{t_1} f(t, x^*, u^*) - f(t, x, u)dt \\ &\geq \int_{t_0}^{t_1} (x^*(t) - x(t))f_x(t, x^*, u^*) \\ &\quad + (u^*(t) - u(t))f_u(t, x^*, u^*)dt \end{aligned} \tag{3.2}$$

Aplicando 3.1a e 3.1b ao último termo de 3.2, ele será

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^{t_1} (x^*(t) - x(t))(-\lambda(t)g_x(t, x^*, u^*) - \lambda'(t)) \\ &\qquad + (u^*(t) - u(t))(-\lambda(t)g_u(t, x^*, u^*))dt. \end{aligned}$$

Integrando por partes, com $\lambda(t_1) = 0$ e $x(t_0) = x^*(t_0)$, vemos que

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t_1} -\lambda'(t)(x^*(t) - x(t))dt &= \cancel{-(x^*(t) - x(t))\lambda(t)}\Big|_{t_0}^{t_1} \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_1} \lambda(t)(x^*(t) - x(t))'dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \lambda(t)(g(t, x^*(t), u^*(t)) - g(t, x(t), u(t)))dt \end{aligned}$$

Substituindo e usando tanto a concavidade de g quanto 3.1d,

$$\begin{aligned} J(u^*) - J(u) &\geq \int_{t_0}^{t_1} \lambda(t)[g(t, x^*, u^*) - g(t, x, u) - \\ &\qquad (x^* - x)g_x(t, x^*, u^*) - (u^* - u)g_u(t, x^*, u^*)]dt \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

□

Falta garantir que $J(u^*)$ seja finito. Para isso, algumas restrições sobre f e/ou g são necessárias. O próximo teorema é um exemplo sobre isso.

Teorema 3.1.2. *Seja $u \in L([t_0, t_1]; \mathbb{R})$, f é convexa em u, e existam constantes C_4 e C_1,C_2,$C_3 > 0$ e $\beta > 1$, tal que, $\forall t \in [t_0, t_1], x, x_1, u \in \mathbb{R}$.*

$$\begin{cases} g(t, x, u) = \alpha(t, x) + \beta(t, x)u \\ |g(t, x, u)| \leq C_1(1 + |x| + |u|) \\ |g(t, x_1, u) - g(t, x, u)| \leq C_2|x_1 - x|(1 + |u|) \\ f(t, x, u) \geq C_3|u|^\beta - C_4 \end{cases}$$

Então existe um controle ótimo u^* maximizando $J(u)$ com $J(u^*)$ finito.

Em problemas de minimização, g seria côncava e a desigualdade de f é revertida. Podemos extender as condições necessárias para funções de controle Lebesgue integráveis, mas isso não é feito aqui. Alguns resultados de existência de controle ótimo podem ser encontrados em Filippov (1962).

Unicidade: Unicidade de soluções do sistema de otimalidade implica unicidade do controle ótimo, se existir. Em geral, podemos provar a unicidade de soluções do sistema de otimalidade em intervalos de tempo curtos. A volta nem sempre é verdadeira, isto é, unicidade do controle ótimo não garante a unicidade do sistema.

Os exemplos e laboratórios satisfazem as condições de existência e unicidade para intervalos de tempo pequenos. Portanto, resolver através das condições necessárias já se torna suficiente.

3.2 Interpretação da Adjunta

Defina

$$V(x_0, t_0) := \max_u \int_{t_0}^{t_1} f(t, x(t), u(t))dt$$
$$\text{sujeito a } x'(t) = g(t, x, u), x(t_0) = x_0.$$

Estabelecemos que

$$\frac{\partial V}{\partial x}(x_0, t_0) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{V(x_0 + \epsilon, t_0) - V(x_0, t_0)}{\epsilon} = \lambda(t_0).$$

Podemos relacionar, então, a função adjunta à variação marginal da função custo/lucro com respeito ao estado. É o valor adicional associado com um incremento adicional da variável de estado. Na verdade, essa aproximação é válida para todo tempo t (Kamien and Schwartz, 2012, 136-139). Podemos aproximar:

$$V(x_0 + \epsilon, t_0) \approx V(x_0, t_0) + \epsilon\lambda(t_0).$$

Se $\epsilon = 1$, podemos ver que ao adicionar um unidade à condição inicial, $\lambda(t_0)$ será adicionado ao lucro resultante.

3.3 Princípio da Otimalidade

É um resultado importante sobre otimizar um sistema sobre um subintervalo do intervalo original e, em particular, como o controle ótimo nesse subintervalo se relaciona com o controle no intervalo inteiro.

Teorema 3.3.1. *Considere u^* o controle ótimo associado ao estado x^* para o problema*

$$\max_u J(u) = \max_u \int_{t_0}^{t_1} f(t, x(t), u(t))dt$$

$$\textit{sujeito a } x'(t) = g(t, x(t), u(t)), x(t_0) = x_0.$$

Seja $\hat{t} \in (t_0, t_1)$ fixo. Então as funções $\hat{u}^*$ e $\hat{x}^*$ restritas ao intervalo $[\hat{t}, t_1]$ formam uma solução ótima para o problema

$$\max_u \hat{J}(u) = \max_u \int_{t_0}^{t_1} f(t, x(t), u(t))dt$$

$$\textit{sujeito a } x'(t) = g(t, x(t), u(t)), x(\hat{t}) = x^*(\hat{t}).$$

Além disso, se u^* é controle ótimo único, então $\hat{u}^*$ é também.

Demonstração. Esta prova se dá por contradição. Suponha que $\hat{u}^*$ não seja ótimo, isto é, exista uma função de controle $\hat{u}_1$ no intervalo $[\hat{t}, t_1]$ tal que $\hat{J}(\hat{u}_1) > \hat{J}(\hat{u}^*)$. Defina

$$u_1(t) = \begin{cases} u^*(t), & t \in [t_0, \hat{t}] \\ \hat{u}_1(t), & t \in [\hat{t}, t_1] \end{cases}$$

Seja x_1 o estado associado a u_1. Assim

$$\begin{aligned} J(u_1) - J(u^*) &= \left(\int_{t_0}^{\hat{t}} f(t, x_1, u_1)dt + \hat{J}(\hat{u}_1) \right) - \left(\int_{t_0}^{\hat{t}} f(t, x^*, u^*)dt + \hat{J}(\hat{u}^*) \right) \\ &= \hat{J}(\hat{u}_1) - \hat{J}(\hat{u}^*) > 0 \end{aligned}$$

Isso contradiz a hipótese inicial de que u^* é controle ótimo. □

Observação. *Note que nada pode ser dito sobre o intervalo $[t_0, \hat{t}]$, pois podemos construir contra-exemplos.*

3.4 Os Problemas Autônomo e Hamiltoniano

Teorema 3.4.1. *O Hamiltoniano é uma função contínua Lipschitz do tempo t no caminho ótimo.*

Definição 3.4.1 (Autônomo)**.** Se um problema de controle ótimo não tem dependência explícita do tempo, ele é dito autônomo. Isso significa que f e g, em nossa notação, são funções apenas de x e u.

Teorema 3.4.2. *Se um problema de controle ótimo é autônomo, então o Hamiltoniano é uma função constante do tempo ao longo da solução ótima.*

3.5 Exemplos

Exemplo 3.5.1. Queremos resolver o problema

$$\min_u \int_{t_0}^{t_1} x(t) + \frac{1}{2}u(t)^2 dt$$

$$\text{sujeito a } x'(t) = x(t) + u(t), x(0) = \frac{1}{2}e^2 - 1$$

no intervalo $[0, 2]$ e, posteriormente, no intervalo $[1, 2]$.

Observe inicialmente que f e g são continuamente diferenciáveis e convexos no segundo e terceiro argumentos, dado que o problema é de minimização. Vamos então conferir as condições necessárias e, então, saberemos que $J(u^*) \leq J(u)$ para toda função de controle u, pelo teorema de existência.

O Hamiltoniano é

$$H = x + \frac{1}{2}u^2 + x\lambda + u\lambda$$

A equação adjunta é dada por

$$\lambda' = -H_x = -1 - \lambda, \lambda(2) = 0 \implies \lambda(t) = e^{2-t} - 1 \geq 0,$$

A condição de otimalidade é dada por

$$H_u = u + \lambda = 0 \implies u^*(t) = -\lambda(t) = 1 - e^{2-t}$$

E, portanto

$$x'(t) - x(t) = 1 - e^{2-t} \implies x(t) = Ce^t + \frac{1}{2}e^{2-t} - 1$$

Usando a condição inicial

$$\frac{1}{2}e^2 - 1 = C + \frac{1}{2}e^2 - 1 \implies x^*(t) = \frac{1}{2}e^{2-t} - 1$$

Considerando o intervalo em $[1, 2]$, vemos que $\hat{u}^* = u^*$ em $[1, 2]$. Se fôssemos resolver fazendo as contas, veja que todos os passos poderiam ser repetidos, com exceção de que $x(1) = \frac{1}{2}e - 1$, o que não mudaria a solução.

Exemplo 3.5.2. Considere o problema acima, mas no intervalo $[0, 1]$.

O Hamiltoniano é o mesmo e $u^*(t) = -\lambda(t)$. Mas a condição de transversalidade é diferente: $\lambda(1) = 0 \implies \lambda(t) = e^{1-t} - 1$ e $u^*(t) = 1 - e^{1-t}$. Ao usarmos a equação do estado, obteremos que

$$x^*(t) = \frac{1}{2}e^{1-t} - 1 + \frac{1}{2}(e^2 - e)e^t$$

Note que a solução é diferente da anterior restrita a $[0, 1]$.

Capítulo 4

Condições Finais do Estado

4.1 Termos Payoff

Em muitos problemas, também queremos maximizar o valor de uma função em um determinado ponto no tempo, como, por exemplo, no final do intervalo. Assim, o problema é do tipo:

$$\max_u \left[\phi(x(t_1)) + \int_{t_0}^{t_1} f(t, x(t), u(t))dt \right]$$

$$x' = g(t, x(t), u(t)), x(t_0) = x_0$$

O termo $\phi(x(t_1))$ é conhecido como termo *payoff*. Assim o funcional objetivo se torna

$$J(u) = \int_{t_0}^{t_1} f(t, x(t), u(t))dt + \phi(x(t_1))$$

A única mudança em relação ao cálculos do Capítulo 2 é a condição de transversalidade.

$$\lambda(t_1) = \phi'(x^*(t_1)).$$

4.2 Estados com Pontos Finais Fixos

Considere o problema

$$\max_u \int_{t_0}^{t_1} f(t, x(t), u(t))dt + \phi(x(t_0))$$

$$\text{sujeito a } x'(t) = g(t, x(t), u(t)), x(t_1) = x_1$$

Diferente do problema que estávamos estudando, fixamos o estado no ponto final. Entretanto, o argumento utilizado no Capítulo 2 pode ser replicado aqui. As condições necessárias serão as mesmas, exceto pela condição de transversalidade. Especificamente,

$$\lambda(t_0) = \phi'(x(t_0))$$

Isso sugere que exista uma dualidade entre as condições de fronteira do estado e da adjunta. A maximização é sobre os controles *admissíveis*, no sentido que respeite todas as restrições definidas.

Também podemos fixar os pontos inicial e final de estado. Notamos que estamos considerando a maximização sobre o conjunto de controles admissíveis, que respeitem as condições, inclusive sobre a variável de estado. Porém, nesse caso, uma mudança nas condições necessárias é realizada no seguinte teorema.

Teorema 4.2.1. *Se $u^*(t)$ e $x^*(t)$ são ótimos para o problema com pontos inicial e final fixados, então existe uma função $\lambda(t)$ diferenciável por partes e uma contante λ_0 igual a 0 ou 1, tal que*

$$H(t, x^*(t), u(t), \lambda(t)) \leq H(t, x^*(t), u^*(t), \lambda(t))$$

para todos os controles admissíveis u no tempo t e o Hamiltoniano é

$$H = \lambda_0 f(t, x(t), u(t)) + \lambda(t) g(t, x(t), u(t))$$

e

$$\lambda'(t) = -\frac{\partial H(t, x^*(t), u^*(t))}{\partial x}.$$

A diferença das condições apresentadas no capítulo 2 é que a função adjunta não tem restrições. A demonstração utiliza uma técnica diferente da utilizada até então (Kamien and Schwartz, 2012, 147-153). A constante λ_0 ajusta para problemas degenerados ou problemas onde o funcional objetivo é imaterial.

Definição 4.2.1. O funcional objetivo ser imaterial significa que não depende da condição final do estado.

4.3 Exemplos

Exemplo 4.3.1.

$$\min_u \frac{1}{2}\int_0^1 u(t)^2 dt + 5x(1)^2$$
$$\text{sujeito a } x'(t) = x(t) + u(t), x(0) = 1$$

Observe que nesse exemplo estamos lidando com o termo *payoff* $5x(1)^2$, onde $\phi(x) = 5x^2$. Nesse caso

$$H = \frac{1}{2}u^2 + \lambda(x + u)$$

A condição de otimalidade,

$$0 = H_u = u^* + \lambda \implies u^*(t) = -\lambda(t)$$

A equação adjunta,

$$\lambda'(t) = -H_x = -\lambda \implies \lambda(t) = Ce^{-t}$$

A condição de transversalidade é

$$\lambda(1) = \phi'(x(1)) = 10x(1)$$

Sabemos que $u^*(t) = -Ce^{-t}$. Usando a equação do estado,

$$x' = x - Ce^{-t} \implies x^*(t) = \frac{C}{2}e^{-t} + De^t$$

Agora, utilizando as condições de fronteira,

$$\lambda(1) = Ce^{-1} = 10x^*(1) = 10\left(\frac{C}{2}e^{-1} + De\right)$$

$$x(0) = \frac{C}{2} + D = 1 \implies D = 1 - \frac{C}{2}$$

Obtemos a equação

$$e^{-1} = 5e^{-1} + 10e\frac{D}{C} \implies -\frac{4}{10}e^{-2} = \frac{D}{C} \implies 1 - \frac{C}{2} = -\frac{2}{5}Ce^{-2}$$

Assim

$$C = \frac{1}{\frac{1}{2} - \frac{2}{5}e^{-2}} = \frac{10}{5 - 4e^{-2}} \implies D = 1 - \frac{5}{5 - 4e^{-2}} = \frac{-4e^{-2}}{5 - 4e^{-2}}$$

Concluímos, portanto, que

$$u^*(t) = -\frac{10}{5 - 4e^{-2}}e^{-t} \text{ e } x^*(t) = \frac{5}{5 - 4e^{-2}}e^{-t} - \frac{4e^{-2}}{5 - 4e^{-2}}e^t$$

Exemplo 4.3.2.

$$\min_u \int_0^1 u(t)dt$$

$$\text{sujeito a } x'(t) = u(t)^2, x(0) = 0, x(1) = 0$$

Observe que $x(t) = \int_0^t u(s)^2 ds$ e, como $x(1) = 0$, temos que $u \equiv 0$ é o único controle admissível. Portanto ele será o único controle ótimo. Agora, vamos examinar as condições necessárias, para fazer o *sanity check*.

$$H = \lambda_0 u + u^2\lambda$$

Assim

$$0 = H_u = \lambda_0 + 2u\lambda \implies u^*(t) = -\frac{\lambda_0}{2\lambda(t)}$$

Pela equação adjunta, $H_x = 0 \implies \lambda \equiv C$, para alguma constante C. Isto é, $u^*(t) = -\lambda_0/2C$. Usando a equação do estado, obtemos que

$$x^*(t) = \lambda_0^2 \frac{t}{4C^2} + D$$

tal que $D = 0$ e $\frac{\lambda_0^2}{4C^2} = 0 \implies \lambda_0 = 0$. Checamos então que o Teorema é satisfeito com $\lambda_0 = 0$ e $u^* \equiv 0$, como já era esperado.

Exemplo 4.3.3. Seja $x(t)$ o número de célular de tumor no tempo t com crescimento exponencial α e $u(t)$ a concentração de drogas. Queremos minimizar o número de células tumorais ao final do tratamento e os efeitos negativos acumulados do tratamento no corpo. Assim, o problema é resumido em

$$\min_u x(T) + \int_0^T u(t)^2 dt$$
$$\text{sujeito a } x'(t) = \alpha x(t) - u(t), x(0) = x_0 > 0$$

Esse é um simples modelo, não realístico, com objetivo ilustrativo apenas. O termo *payoff* é $X(T)$ e, portanto, $\phi(x) = x$. Podemos calcular as condições necessárias.

$$H = u^2 + \lambda(\alpha x - u)$$
$$0 = H_u = 2u - \lambda \implies u^* = \frac{\lambda}{2}$$
$$\lambda' = \frac{\partial H}{\partial x} = -\alpha\lambda \implies \lambda(t) = Ce^{-\alpha t}$$
$$\lambda(T) = \phi'(x(T)) = 1 \implies \lambda(t) = e^{\alpha(T-t)}$$

Portanto o controle ótimo é

$$u^*(t) = \frac{1}{2}e^{\alpha(T-t)},$$

Observando a equação do estado, temos que

$$x' - x = -\frac{1}{2}e^{\alpha(T-t)} \implies x^*(t) = x_0 e^{\alpha t} + e^{\alpha T}\frac{e^{-\alpha t} - e^{\alpha t}}{4\alpha}$$

Com esse método, podemos obter a quantidade de droga a ser utilizada a cada tempo t e também saberemos a quantidade de células cancerosas. Todavia é importante notar que esse é um modelo simplificado que não leva em consideração diversos fatores importantes ao processo.

Capítulo 5

Método Backward/Forward

Queremos agora resolver os problemas de controle ótimo até agora apresentados numericamente, de forma que a solução seja uma aproximação a função u^*. Para isso tomamos uma partição $\{t_0 = b_1, b_2, ..., b_{N+1} = t_1\}$, usualmente com pontos igualmente espaçados, tal que a aproximação será dara por $u_i \approx u(b_i)$. Sabemos que a solução deve satisfazer as condições necessárias apresentadas no capítulo 2.

Em geral, a equação $\frac{\partial H}{\partial u} = 0$ pode ser manipulada para encontrarmos u em função de x e de λ, para então termos a expressão de u^*. A partir disso, podemos utilizar um método como Runge-Kutta para resolver o sistema ótimo. Ele vai encontrar o controle ótimo se esse existir.

5.1 Algoritmo

O método apresentado a seguir é bem intuitivo e é conhecido como *Forward-Backward Sweep*. Seja $\vec{x} = (x_1, ..., x_{N+1})$ e $\vec{\lambda} = (\lambda_1, ..., \lambda_{N+1})$ vetores que aproximação nos pontos da partição as funções estado e adjunta. Informações sobre convergência e estabilidade podem ser encontradas em Hackbusch (1978).

1. Chute inicial para $\vec{u}$.
2. Usando a condição inicial $x(t_0)$ e os valores de $\vec{u}$, encontre $\vec{x}$ passo a frente através da equação diferencial.
3. Usando a condição de transversalidade $\lambda(t_1) = 0$ e os valores $\vec{u}$ e $\vec{x}$, resolva $\vec{\lambda}$ para trás de acordo com a equação adjunta.
4. Atualize o vetor de controle com os novos valores de $\vec{x}$ e $\vec{\lambda}$ através da equação $H_u = 0$.
5. Confira a convergência. Se dois passos subjacentes não estão suficientemente próximos, repita a partir do segundo passo.

Frequentemente é necessário usar uma combinação convexa [1] entre dois controles sequenciais para acelerar a convergência do algoritmo. Para os passos 2 e 3, o método de Runge-Kutta é suficiente.

Muitos tipos de teste de convergência existem. Frequentemente, considerar

$$||\vec{u} - \text{old } \vec{u}||_1 = \sum_{i=1}^{N+1} |u_i - \text{old } u_i| < \epsilon$$

Nesse texto, usaremos o erro relativo com tolerância ϵ,

$$\frac{||\vec{u} - \text{old } \vec{u}||_1}{||\vec{u}||_1} \leq \epsilon$$

Ou, de outra forma, queremos que

$$\epsilon||\vec{u}|| - ||\vec{u} - \text{old } \vec{u}|| \geq 0$$

Vamos fazer esse requerimento para todas as variáveis, não apenas para o controle.

Ao longo do texto esse algoritmo será utilizado para fazer as experimentações através dos Laboratórios escritos em formato notebook.

5.2 Runge-Kutta

Seja $x'(t) = f(t, x)$. O método pode ser resumido pelas seguintes equações, dado um passo h.

$$x(t+h) \approx x(t) + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$\begin{cases} k1 = f(t, x(t)) \\ k2 = f(t + \frac{h}{2}, x(t) + \frac{h}{2}k_1) \\ k3 = f(t + \frac{h}{2}, x(t) + \frac{h}{2}k_2) \\ k4 = f(t + h, x(t) + hk_3) \end{cases}$$

O erro é da ordem de h^4.

[1]**Combinação Convexa:** Combinação linear de pontos, tal que os coeficientes são não negativos e somam 1.

Capítulo 6

Laboratórios 1, 2 e 3

Nesse capítulo serão realizados os laboratórios 1, 2 e 3. Os laboratórios tratam de aplicações simplificadas de situações reais que envolvem conceitos de biologia. Eles são auto-contidos se a teoria dos capítulos anteriores for conhecida.

Lab 1: Exemplo Introdutório

Algoritmo em Python explicado a cada passo e exemplo do problema de controle ótimo simples desenvolvido.

Lab 2: Mofo e Fungicida

Modelo simplificado do crescimento de um mofo contra a ação de um fungicida, que serve de controle para o aumento do mofo, que é um efeito indesejado.

Lab 3: Bacteria

Uma bacteria tem seu crescimento acelerado por um químico, mas simultaneamente é criado um subproduto tóxico à bactéria. Queremos que no final do experimento, tenhamos o máximo de bactéria, mas sem usar muito químico.

Capítulo 7

Controles Limitados

Muitos problemas reais de controle ótimo apresentam um controle limitado, dado que em geral o controle indica uma medida a ser tomada. Por exemplo, se o controle for a quantidade de um químico, no Laboratório 3 do Capítulo 6, não podemos adicionar uma quantidade negativa desse químico, o que nos leva a ter $u(t) \geq 0$ e também não temos componente infinito para o químico. Se tivermos pouco, por exemplo, talvez seja importante determinar que $u(t) \leq C$.

7.1 Condições Necessárias

Considere o problema

$$\begin{gathered}\max_u J(u) = \max_u \int_{t_0}^{t_1} f(t, x(t), u(t))dt + \phi(x(t_1)) \\ \text{sujeito a } x'(t) = g(t, x(t), u(t)), x(t_0) = x_0, \\ a \leq u(t) \leq b, a < b\end{gathered}$$

Seja u^* e x^* o par ótimo. Seja $h(t)$ uma função contínua por partes tal que exista ϵ_0, de forma que $\forall \epsilon \in (0, \epsilon_0], u^\epsilon(t) = u^*(t) + \epsilon h(t)$ é admissível sob os limites inferior e superior. Devido aos limites, o funcional pode não ser zero no controle ótimo, dado que esse pode estar nos limites. Seja $x^\epsilon(t)$ a variável do estado correspondente. Da mesma forma que fizemos no capítulo 2, seja $\lambda(t)$ uma função diferenciável por partes e, assim

$$\begin{aligned}J(u^\epsilon) = \int_{t_0}^{t_1} &\left[f(t, x^\epsilon, u^\epsilon) + \lambda(t)g(t, x^\epsilon, u^\epsilon) + x^\epsilon \lambda'(t)\right] dt \\ &- \lambda(t_0)x_0 + \lambda(t_1)x^\epsilon(t_1) + \phi(x(t_1)) \quad (7.1)\end{aligned}$$

Como $J(u^*)$ é máximo, temos que

$$0 \geq \frac{d}{d\epsilon} J(u^\epsilon)\bigg|_{\epsilon=0} = \lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{J(u^\epsilon) - J(u^*)}{\epsilon} \quad (7.2)$$

Como já fizemos, tome a variável $\lambda(t)$ de forma que

$$\lambda'(t) = -[f_x(t, x^*, u^*) + \lambda(t)g_x(t, x^*, u^*)], \lambda(t_1) = \phi'(x^*(t_1))$$

Então 7.1 e 7.2 se reduzem a

$$0 \geq \int_{t_0}^{t_1} (f_u + \lambda g_u)hdt,$$

E essa desigualdade vale para todo h. Seja s um ponto de continuidade tal que $a \leq u^*(s) < b$. Suponha que $f_u + \lambda g_u > 0$ em s. Pela continuidade de u^* em s, vale que $f_u + \lambda g_u$ é contínua em s e, portanto, deve ser positiva em uma vizinhança do ponto. Podemos tomar esse intervalo menor para que tenhamos $u^* < b$. Seja I esse o maior intervalo fechado com essas características e defina

$$M = \max\{u^*(t) : t \in I\}$$

Seja

$$h(t) = \begin{cases} b - M > 0, & \text{se } t \in I, \\ 0, & \text{se } t \notin I \end{cases}$$

Portanto $a \leq u^* + \epsilon h \geq b$ quando $\epsilon \in [0, 1]$. Mas

$$\int_{t_0}^{t_1} (f_u + \lambda g_u)hdt = \int_I (f_u + \lambda g_u)hdt > 0,$$

uma contradição. Portanto $f_u + \lambda g_u \leq 0$.

De forma similar, se s é um ponto onde u^* é contínua e $a < u^*(s) \leq b$, teremos que em s, $f_u + \lambda g_u \geq 0$. E assim,

$$\begin{aligned} u^*(t) = a &\implies f_u + \lambda g_u \leq 0 \text{ em } t, \\ a < u^*(t) < b &\implies f_u + \lambda g_u = 0 \text{ em } t, \\ u^*(t) = b &\implies f_u + \lambda g_u \geq 0 \text{ em } t, \end{aligned}$$

De forma equivalente

$$f_u + \lambda g_u > 0 \text{ em } t \implies u^*(t) \neq a, \tag{7.3}$$

$$f_u + \lambda g_u \neq 0 \text{ em } t \implies u^*(t) = a \text{ ou } u^*(t) = b, \tag{7.4}$$

$$f_u + \lambda g_u < 0 \text{ em } t \implies u^*(t) \neq b, \tag{7.5}$$

De 7.3 e 7.4, vemos que $f_u + \lambda g_u > 0 \implies u^*(t) = b$. De 7.4 e 7.5, vemos que $f_u + \lambda g_u < 0 \implies u^*(t) = a$. E, por fim, se $f_u + \lambda g_u = 0 \implies a \leq u^*(t) \leq b$. Para os pontos em que u^* não é contínua, não precisamos nos preocupar, pois não afetam o funcional objetivo. Portanto, temos que, dado o Hamiltoniano,

$$x'(t) = \frac{\partial H}{\partial \lambda}, x(t_0) = x_0$$
$$\lambda'(t) = -\frac{\partial H}{\partial x}, \lambda(t_1) = \phi'(x(t_1))$$
$$\begin{cases} u^* = a & \text{se } H_u < 0 \\ a \leq u^* \leq b & \text{se } H_u = 0 \\ u^* = b & \text{se } H_u > 0 \end{cases}$$

Em um problema de minimização, as desigualdades da primeira e terceira linhas são revertidas. A condições de transversalidade são todas equivalentes ao caso não limitado.

7.2 Soluções Numéricas

Uma mudança no algoritmo é necessária para calcular a solução numérica. As equações estado e adjunta não são alteradas, pois não dependem dos limites de u^*. Apenas a caracterização do controle é alterada. Além disso, o chute inicial deve ser entre os limites do controle. As mudanças necessárias podem ser visualizadas na seção de exemplos.

7.3 Exemplos

Exemplo 7.3.1.

$$\max_u x(4) - \int_0^4 u(t)^2 dt$$
$$\text{sujeito a } x'(t) = x(t) + u(t), x(0) = 0,$$
$$u(t) \leq 5$$

O Hamiltoniano é dado por $H = -u^2 + \lambda x + \lambda u$. A equação adjunta é dada por

$$\lambda'(t) = -H_x = -la \implies \lambda(t) = Ke^{-t}$$

Como $\lambda(4) = \phi'(x^*(4)) = 1$, temos que $Ke^{-4} = 1 \implies K = e^4$. Assim

$$\lambda(t) = e^{4-t}.$$

Além disso, $H_u = -2u + \lambda$. Como o controle não tem limite inferior, temos que $H_u < 0$ não pode ocorrer.

Se $H_u > 0 \implies u^*(t) = 5 \implies \lambda - 10 > 0 \implies e^{4-t} > 10 \implies t < 4 - \log 10$

Se $H_u = 0 \implies u^*(t) = \frac{1}{2}e^{4-t} \leq 5$. Portanto $t \geq 4 - \log 10$.
Consequentemente,

$$u^* = \begin{cases} 5 & \text{quando } 0 \leq t < 4 - \log 10 \\ \frac{1}{2}e^{4-t} & \text{quando } 4 - \log 10 \leq t \leq 4 \end{cases}$$

Agora vamos encontrar o estado associado.

$$x'(t) = x(t) + 5 \implies x(t) = 5e^t - 5, t \in [0, 4 - \log 10]$$
$$x'(t) = x(t) + \frac{1}{2}e^{4-t} \implies x(t) = -\frac{1}{4}e^{4-t} + ke^t, t \in [4 - \log 10, 4]$$

para alguma constante k de forma que x^* seja contínua, isto é, as expressões concordem. Isso ocorre quando $k = 5 - 25e^{-4}$.

Exemplo 7.3.2. Considere o simples exemplo

$$\min_u \int_0^4 u(t)^2 + x(t)dt$$
$$\text{sujeito a } x'(t) = u(t), x(0) = 0, x(4) = 1$$
$$u(t) \geq 0$$

Vamos visualizar a diferença entre a solução com limites e sem limites. Para problemas com limites, é importante que não apenas truncar o resultado.

No exemplo, o Hamiltoniano é dado por $H = \lambda_0(u^2 + x) + \lambda u$. A função adjunta é dada por

$$\lambda'(t) = -H_x = -\lambda_0 \implies \lambda(t) = k - \lambda_0 t,$$

para alguma constante k e $\lambda_0 = 0$ ou $\lambda_0 = 1$. A condição de otimalidade é

$$H_u = 2\lambda_0 u + \lambda,$$

$$H_u > 0 \implies u^*(t) = 0 \implies 0 < \lambda = k - t \implies t < k,$$

Suponha $\lambda_0 = 1$.

$$H_u = 0 \implies 0 \leq u^*(t) = -\frac{\lambda}{2} = \frac{t-k}{2} \implies t \geq k$$

Portanto

$$u^*(t) = \begin{cases} 0, & \text{quando } 0 \leq t < k, \\ \frac{t-k}{2} & \text{quando } k \leq t \leq 4 \end{cases}$$

Agora precisamos encontrar o valor de k. Para isso, precisamos utilizar as condições de estado inicial e de fronteira. Para isso, vou separar em três casos.

Caso 1: $k \leq 0$. Assim $x'(t) = u = \frac{t-k}{2} \implies x(t) = \frac{t^2}{4} - \frac{kt}{2} + c$, tal que $c = 0$ e $x(4) = 4 - 2k = 1 \implies k = 3/2$, um absurdo.

Caso 2: $k \geq 4$. Assim $u^* \equiv 0$. Então $x^* \equiv c$, o que também é um absurdo.

Caso 3: Então $0 < k < 4$. Nesse caso $x'(t) = 0 \implies x \equiv c = 0$ em $[0, k)$. Em $[k, 4], x'(t) = \frac{t-k}{2}$ e, portanto,

$$x(t) = \frac{t^2}{4} - \frac{kt}{2} + c,$$

para alguma constante c. Pela continuidade de x, $c = \frac{k^2}{4}$, pois $x(k) = 0$. Por fim, $1 = x(4) = 4 - 2k + k^2/4$. A solução é portanto $k = 2$ ou 6. Como $k < 4 \implies k = 2$. Concluímos então que

$$u^*(t) = \begin{cases} 0, & \text{quando } 0 \leq t < 2, \\ \frac{t-2}{2} & \text{quando } 2 \leq t \leq 4 \end{cases} \quad \text{e } x^*(t) = \begin{cases} 0, & \text{quando } 0 \leq t < 2, \\ \frac{(t-2)^2}{4} & \text{quando } 2 \leq t \leq 4 \end{cases}$$

Agora, vamos procurar o controle ótimo $\hat{u}$ sem restrição. Nesse caso

$$\hat{u}(t) = \frac{t-k}{2} \implies \hat{x}(t) = \frac{t^2}{4} - \frac{kt}{2} + c$$

tal que $x(0) = c = 0$ e $x(4) = 4 - 2k = 1 \implies k = 3/2$. Assim, se só truncássemos a solução, teríamos

$$\hat{u}(t) = \begin{cases} 0, & \text{quando } 0 \leq t < 3/2, \\ \frac{2t-3}{4} & \text{quando } 3/2 \leq t \leq 4 \end{cases}$$

Em conclusão, para encontrar controle ótimo com restrição, devemos considerá-los nas contas.

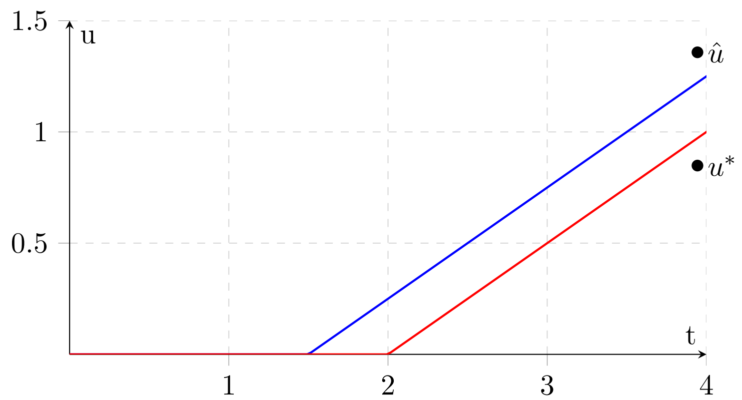

Figura 7.1: Controles ótimo e com truncagem

Capítulo 8

Laboratórios 4, 5 e 6

Nesse capítulo serão realizados os laboratórios 4, 5 e 6. Mais algumas aplicações em biologia são desenvolvidas.

Lab 4: Caso limitado

É um reexame do problema do primeiro laboratório. A diferença agora é a presença de limites inferior e superior.

Lab 5: Câncer

Modelo do tratamento de células cancerosas por quimioterapia, com objetivo de minimizar os efeitos negativos do uso das drogas, mas também minimizar a densidade dessas células no corpo. É simplificado, porém apresenta dois componentes importantes: o crescimento Gompertzian e a hipótese de Skipper para a morte das células segundo o uso das drogas.

Lab 6: Colheita de peixe

Uma população de peixes é inserida em um tanque e é deixada para ser caçada, com morte natural, mas sem taxa de nascimento. Queremos maximizar a massa de peixes caçada, enquanto minimizamos o gasto com a colheita. Restrições são consideradas.

Capítulo 9

Optimal Control of Several Variables

Até agora nos preocupamos apenas com problemas com uma variável de estado e uma variável de controle. Nesse capítulo vamos estudar as condições necessárias para um problema com mais de uma variável de cada tipo.

9.1 Condições Necessárias

Faremos uma extensão natural dos problemas desenvolvidos até então. Seja o problema com n variáveis de estado, m variáveis de controle e uma função *payoff* ϕ.

$$max_{u_1,...,u_m} \int_{t_0}^{t_1} f(t, x_1(t), ..., x_n(t), u_1(t), ..., u_m(t))dt + \phi(x_1(t_1), ..., x_n(t_1))$$

$$\text{sujeito a } x_i'(t) = g_i(t, x_1(t), ..., x_n(t), u_1(t), ..., u_m(t))$$

$$x_i(t_0) = x_{i0} \text{ para } i = 1, 2, ..., n$$

onde as função f e g_i são continuamente diferenciáveis em cada variável. Em notação vetorial, seja $\vec{x}(t), \vec{u}(t), \vec{g}(t, \vec{x}, \vec{u})$ e $\vec{x_0}$ os vetores, respectivamente, do estado, do controle, das funções derivada do estado e da condição inicial. Podemos escrever o problema, portanto, como

$$max_{\vec{u}} \int_{t_0}^{t_1} f(t, \vec{x}(t), \vec{u}(t))dt + \phi(\vec{x}(t_1))$$

$$\text{sujeito a } \vec{x}'(t) = \vec{g}(t, \vec{x}(t), \vec{u}(t)), \vec{x}(t_0) = \vec{x}_0$$

Seja $\vec{u}^*$ o vetor de funções controle ótimo e $\vec{x}^*$ o vetor de estados correspondente. Seja $\vec{\lambda}(t) = [\lambda_1(t), ..., \lambda_n(t)]$ um vetor com funções diferenciáveis por partes, que serão as funções adjuntas. Defina o Hamiltoniano

$$H(t, \vec{x}, \vec{u}, \vec{\lambda}) = f(t, \vec{x}, \vec{u}) + \vec{\lambda}(t) \cdot \vec{g}(t, \vec{x}, \vec{u}),$$

onde $\cdot$ é o produto escalar de vetores. Pelo mesmo argumento apresentado no capítulo 2, encontramos que $\vec{u}^*$ maximiza a função $\vec{u} \mapsto H(t, \vec{x}^*, \vec{u}, \vec{\lambda})$ e satisfaz

$$x_i'(t) = \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} = g_i(t, \vec{x}, \vec{u}), x_i(0) = x_{i0} \text{ para } i = 1, ...n$$

$$\lambda_j'(t) = -\frac{\partial H}{\partial x_j}, \lambda_j(t_1) = \phi_{x_j}(\vec{x}(t_1)) \text{ para } j = 1, ..., n$$

$$0 = \frac{\partial H}{\partial u_k} \text{ em } u_k^* \text{ para } k = 1, ..., m$$

Modificações nesse problema repercutem no caso multivariado, com extensões similares. A dualidade entre x_i e λ_i para $i = 1, ..., n$ é ainda observada e quando impomos limites sobre os controles, para cada controle, as condições de otimalidade são idênticas ao caso unidimensional.

Exemplo 9.1.1.

$$\min_u \int_0^1 x_2(t) + u(t)^2 dt$$
$$\text{sujeito a } x_1'(t) = x_2(t), x_1(0) = 0, x_1(1) = 1,$$
$$x_2'(t) = u(t), x_2(0) = 0,$$
$$a \leq u(t) \leq b$$

Sejam λ_1 e λ_2 variáveis adjuntas e defina

$$H = x_2 + u^2 + \lambda_1 x_2 + \lambda_2 u$$

As equações adjuntas são dadas por

$$\lambda_1'(t) = -\frac{\partial H}{\partial x_1} = 0 \implies \lambda_1(t) \equiv C$$
$$\lambda_2'(t) = -\frac{\partial H}{\partial x_2} = -1 - \lambda_1 \implies \lambda_2(t) = -(1 + C)t + D,$$
$$\text{como } \lambda_2(1) = 0 \implies D = 1 + C \implies \lambda_2(t) = -(1 + C)(t - 1)$$

Usando as condições de otimalidade, obtemos

$$H_u = 2u + \lambda_2$$

$$H_u > 0 \implies u^*(t) = a \implies -\frac{1}{2}\lambda_2 < a$$
$$H_u < 0 \implies u^*(t) = b \implies -\frac{1}{2}\lambda_2 > b$$
$$H_u = 0 \implies a \leq u^*(t) = -\frac{1}{2}\lambda_2(t) \leq b$$

Portanto,

$$u^*(t) = \begin{cases} a & t < \frac{2}{1+C}a + 1 \\ \frac{1+C}{2}(t-1) & t \in \left[\frac{2}{1+C}a + 1, \frac{2}{1+C}b + 1\right] \\ b & t > \frac{2}{1+C}b + 1 \end{cases}$$

Para encontrar o calor de C, algumas contas complicadas precisam ser feitas e não o são não no texto. Precisa-se integrar a equação $x_2' = u$, assegurando a continuidade de x_2 e considerando a sua condição inicial. Após integramos a equação $x_1' = x_2$ e usamos as condições de continuidade em x_1, inicial e final.

9.2 Problemas de Regulador Linear Quadrático

Nessa seção será desenvolvido um caso especial de sistemas de controle ótimo, em que as equações diferenciais são lineares em x e u e o funcional objetivo é quadrático. Assim descrevemos o problema da seguinte forma:

$$J(u) := \frac{1}{2}[x^T(T)Mx(t) + \int_0^T x^T(t)Q(t)x(t) + u^T R(t)u(t)dt]$$

$$x'(t) = A(t)x(t) + B(t)u(t)$$

onde $x \in \mathbb{R}n, u \in \mathbb{R}^m, A(t) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ e $B(t) \in \mathbb{R}^{n\times m}$. Além disso $M, Q(t)$ são positivas semidefinidas e $R(t)$ é positiva definida para garantir invertibilidade, para todo t em $[0,T]$. As três matrizes são simétricas. Observe que isso garante a diagonalização. O Hamiltoniano é, portanto,

$$H = \frac{1}{2}x^T Qx + \frac{1}{2}u^T Ru + \lambda^T(Ax + Bu).$$

Derivação de expressões matriciais é uma ferramenta poderosa, pois simplifica a notação, mas é importante que se conheça o processo. A simetria das matrizes é utilizada nesse passo. A equação de otimalidade é dada por

$$H_u = Ru + B^T\lambda = 0 \implies u^* = -R^{-1}B^T\lambda,$$

enquanto a equação adjunta é dada por

$$\lambda' = -H_x = -Qx - A^T\lambda, \lambda(T) = Mx(T)$$

Para resolvermos esse problema, utilizaremos o método *sweep*. Para isso, vamos encontrar uma matriz $S(t)$ de forma que $\lambda(t) = S(t)x(t)$. Assim

$$\lambda'(t) = S'(t)x(t) + S(t)(Ax + Bu) = -Qx - A^T(Sx)$$

Obtemos, portanto, utilizando a condição de otimalidade,

$$\begin{aligned}-S'x &= Qx + A^TSx + SAx - SBR^{-1}B^TSx\\ &= (Q + A^TS + SA - SBR^{-1}B^TS)x\end{aligned}$$

Temos, portanto, a equação matricial de *Ricatti*

$$-S' = A^TS + SA - SBR^{-1}B^TS + Q, S(T) = M$$

Esse controle é um tipo de controle *feedback*, pois é uma função linear do estado apenas. A matriz $R^{-1}B^TS$ é chamada e *gain*. O interessante dessa solução é que eliminamos a necessidade da função adjunta.

Exemplo 9.2.1.

$$\min_u \frac{1}{2}\int_0^T x(t)^2 + u(t)^2 dt$$
$$\text{sujeito a } x'(t) = u(t), x(0) = x_0$$

Nesse caso $M = A = 0$ e $B = R = Q = 1$. Pela equação de Ricatti,

$$-S' = -S^2 + 1, S(T) = 0 \implies S(t) = \frac{1 - Ce^{2t}}{1 + Ce^{2t}},$$

tal que $S(T) = \dfrac{1 - Ce^{2T}}{1 + Ce^{2t}} = 0 \implies C = e^{-2T}$, isto é,

$$S(t) = \frac{1 - e^{2(t-T)}}{1 + e^{2(t-T)}}$$

Temos que $u^*(t) = -R^{-1}B^TSx = -Sx$ e $x'(t) = -Sx$, e

$$x^*(t) = x_0 e^{-\int S dt}$$

Exemplo carece de revisão.

9.3 Equações Diferenciais de Ordem mais Alta

Quando temos uma equação diferencial de ordem mais alta relacionada ao estado, podemos definir um sistema de equações diferenciais, de forma que $x_1(t) = x(t), x_2(t) = x'(t), ..., x_{n+1}(t) = x^{(n)}(t)$. A partir dessa transformação, podemos resolver o problem com o Princípio Máximo de Pontryagin.

9.4 Restrições Isoperimétricas

Ao invés de tomar limites inferior e superior com relação ao controle, podemos restringir a integral sobre uma função do controle, assim, podemos ter o seguinte problema, sendo f, g, h funções continuamente diferenciáveis nas três variáveis.

$$\begin{gathered}\max_u \int_{t_0}^{t_1} f(t, x(t), u(t))dt + \phi(x(t_1)) \\ \text{sujeito a } x'(t) = g(t, x(t), u(t)), x(t_0) = x_0, \\ \int_{t_0}^{t_1} h(t, x(t), u(t))dt = B, \\ a \leq u(t) \leq b\end{gathered}$$

Esse tipo de restrição é conhecido como *restrição isoperimétrica*. De fato não podemos lidar de forma direta com esse problema pelo Principio Máximo de Pontryagin. Entretanto, podemos introduzir uma segunda variável $z(t)$ tal que

$$z(t) = \int_{t_0}^{t} h(s, x(s), u(s))ds$$

e, portanto,

$$\begin{aligned}z'(t) &= h(t, x(t), u(t)), \\ z(t_0) &= 0, \\ z(t_1) &= B\end{aligned}$$

A partir disso, podemos resolver através do método estudado até então.

Exemplo 9.4.1. Inserir exemplo.

9.5 Soluções Numéricas

O método para resolver esses sistemas numericamente é basicamente o mesmo. Primeiro, fazemos um chute inicial para cada controle. Depois resolvemos simultaneamente os estados para frente no tempo. Então resolvemos todas as adjuntas simultaneamente para trás no tempo. Cada controle é então atualizado segundo sua caracterização. Esse processo ocorre iterativamente até atingir convergência desejada. Usaremos o método Runge-Kutta para sistemas na integração. O método de Runge-Kutta vetorial precisa resolver $\vec{k}_1$ inicialmente, ou seja, k_1^i para cada estado x_i, para então resolver $\vec{k}_2$.

Capítulo 10

Laboratórios 7, 8, 9 e 10

Nesse capítulo serão realizados os laboratórios 7, 8, 9 e 10. Mais algumas aplicações em biologia são desenvolvidas.

Lab 7: Modelo para Epidemia

Nesse laboratório, um simples modelo compartimental SEIR é desenvolvido segundo a figura 10.1. Um controle de vacinação é visualizado como efeito. É uma simplificação que permite tirar conclusões similares àquelas obtidas pela comunidade científica.

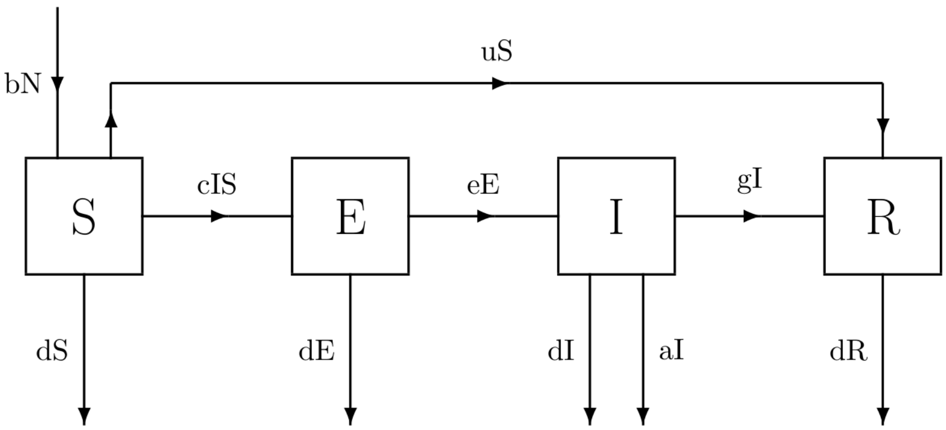

Figura 10.1: O gráfico de fluxo do modelo é explicado aqui.

Lab 8: Câncer

Modelo do tratamento de células cancerosas por quimioterapia, com objetivo de minimizar os efeitos negativos do uso das drogas, mas também minimizar a densidade dessas células no corpo. É simplificado, porém apresenta dois componentes importantes: o crescimento

Gompertzian e a hipótese de Skipper para a morte das células segundo o uso das drogas.

Lab 9: Colheita de peixe

Uma população de peixes é inserida em um tanque e é deixada para ser caçada, com morte natural, mas sem taxa de nascimento. Queremos maximizar a massa de peixes caçada, enquanto minimizamos o gasto com a colheita. Restrições são consideradas.

Capítulo 11

Linear Dependence on the Control

Vamos considerar problemas especiais em que o problema é linear no controle $u(t)$.

11.1 Controle Bang-Bang

Considere o problema de controle ótimo.

$$
\begin{aligned}
max_u \int_{t_0}^{t_1} f_1(t,x) + u(t)f_2(t,x)dt \\
s.a. \;\; x'(t) = g_1(t,x) + u(t)g_2(t,x), x(0) = x_0 \\
a \leq u(t) \leq b
\end{aligned}
$$

Assim $H(t,x,u,\lambda) = f_1(t,x) + \lambda g_1(t,x) + u(t)(f_2(t,x) + \lambda g_2(t,x))$, linear em $u(t)$. Observe a derivada parcial em relação a u não carrega informação sobre $u(t)$. Assim definimos $\psi(t) := f_2(t,x(t)) + \lambda(t)g_2(t,x(t))$, muitas vezes chamada de função de troca. Se $\psi = 0$ não pode ser obtido em um intervalo de tempo, mas ocorre apenas em pontos finitos, o controle é dito "Bing Bang", porque só varia entre os valores mínimo e máximo de $u(t)$. Os valores de $u(t)$ nesses pontos não são de interesse, portanto.

Em contrapartida, se $\psi(t) \equiv 0$ em um intervalo de tempo, dizemos que u^* é singular nesse intervalo. Esse caso será explorado na próxima sessão.

Para resolver esse tipo de problema, primeiro precisamos verificar se de fato o problema é Bang-Bang. Numericamente, o problema é apenas em verificar a positividade ou negatividade da função de troca.

11.1.1 Controles Singulares

O livro explora um exemplo inicial:

$$max_u \int_0^2 (x(t) - t^2)^2 dt$$
$$s.a. \quad x'(t) = u(t), x(0) = 1$$
$$0 \leq u(t) \leq 4$$

Calculamos o Hamiltoniano e encontramos $u^*(t)$ em função da adjunta. Para sair dessa hipótese, precisamos fazer uma análise mais minunciosa. Ela começa em provar que $x(t) \geq t^2 \rightarrow \lambda'(t) \leq 0 \wedge \lambda(t) \geq 0$. Então, basta encontrar os valores de t em que essa função é positiva ou igual a 0. Dessa forma, teremos descrito o controle e estado ótimos.

No caso numérico, podemos ter que analisar quando nossa função de troca vai ser maior, igual ou menor que zero. Porém, a igualdade a 0 é complicada computacionalmente. Nesse sentido, estabelecemos um intervalo. No exemplo 17.4 do livro, quando o controle é Bang-Bang, houve convergência. Já o contrário não ocorreu. Como a função de troca é identicamente zero, problemas singulares são frequentemente instáveis.

Pesquisa tem sido feita nesse sentido. A condição de Legendre-Clebsch é um exemplo. É uma condição de segunda ordem, porque envolve ordem de derivadas mais altas.

Bibliografia

D. Cohen. Maximizing final yield when growth is limited by time or by limiting resources. *Journal of Theoretical Biology*, 33(2):299 – 307, 1971. ISSN 0022-5193. doi: https://doi.org/10.1016/0022-5193(71)90068-3. URL `http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022519371900683`.

A. Filippov. On certain questions in the theory of optimal control. *Journal of The Society for Industrial and Applied Mathematics, Series A: Control*, 1, 01 1962. doi: 10.1137/0301006.

W. Hackbusch. A numerical method for solving parabolic equations with opposite orientations. *Computing*, 20:229–240, 08 1978. doi: 10.1007/BF02251947.

M. Kamien and N. Schwartz. *Dynamic Optimization: The Calculus of Variations and Optimal Control in Economics and Management*. Dover books on mathematics. Dover Publications, 2012. ISBN 9780486488561. URL `https://books.google.com.br/books?id=0IoGUn8wjDQC`.

M. Kot. *Elements of Mathematical Ecology*. Elements of Mathematical Ecology. Cambridge University Press, 2001. ISBN 9780521001502. URL `https://books.google.sm/books?id=7_IRlnNON7oC`.

S. Lenhart and J. Workman. Optimal control applied to biological models. 01 2007.