

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS COMPUTACIONAIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL  
CURSO DE MESTRADO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

Dissertação de Mestrado

**MODELAGEM DA BIOCONVERSÃO DE GLICEROL  
EM 1,3-PROPANODIOL ATRAVÉS DE DERIVADAS  
FRACIONÁRIAS**

Estefani de Souza Oxley

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal do Rio Grande, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional

Orientador: Prof. Dr. Adriano De Cezaro  
Co-orientadora: Prof.<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Fabiana Travessini De Cezaro

Rio Grande, 2016

### Ficha catalográfica

O987m Oxley, Estefani de Souza.

Modelagem de bioconversão de glicerol em 1,3-propanodiol  
através derivadas fracionárias / Estefani de Souza Oxley. – 2016.  
76 f.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Rio Grande –  
FURG, Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional,  
Rio Grande/RS, 2016.

Orientador: Dr. Adriano De Cazaro.

Coorientadora: Dr<sup>a</sup>. Fabiana Travessini De Cezaro.

1. Bioconversão 2. Glicerol 3. Modelagem matemática  
4. Derivadas I. De Cazaro, Adriano II. De Cezaro, Fabiana Travessini  
III. Título.

CDU 004

**Banca examinadora:**

---

Prof. Dr. Adriano De Cezaro (FURG)

---

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Celene Buriol (UFSM)

---

Prof. Dr. Antonio Goulart (FURG)

*Dedico esse trabalho para as pessoas mais importantes na minha vida a minha familia.*

## **AGRADECIMENTOS**

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus pela possibilidade de concluir esse mestrado.

Aos meus pais Neuza de Souza e Carlos Jesus Bilhalva Jaques por sempre me apoiarem em meus estudos e me incentivarem a continuar me aperfeiçoando.

Ao meu esposo Jeferson Frechou Cardoso pelo o incentivo, pelas compreensões das minhas ausências e pelas ajudas constantes.

Ao meu Orientador Adriano de Cezaro pela atenção, seriedade, competência, dedicação e pela paciência.

A minha Co - orientadora Fabiana Travessini de Cezaro pela seriedade e a dedicação.

A CAPES pelo apoio financeiro e a possibilidade de continuar me aperfeiçoando.

E a todos os meus professores que contribuíram com a minha formação tanto na graduação quanto na pós - graduação.

*A persistência é o menor caminho do êxito.*

CHARLES CHAPLIN

## RESUMO

OXLEY, Estefani de Souza. **MODELAGEM DA BIOCONVERSÃO DE GLICEROL EM 1,3-PROPANODIOL ATRAVÉS DE DERIVADAS FRACIONÁRIAS**. 2016. 76 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional. Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande.

Nesta dissertação discutiremos a modelagem do problema de bio-conversão de glicerol em 1,3 - Propanodiol usando derivadas de ordem fracionária. Como tais derivadas de ordem fracionária possuem propriedades interessantes, como efeitos não locais, propriedades de memória etc, espera-se que estas forneçam uma descrição mais precisa da realidade do que os modelos utilizando dinâmicas usuais (derivadas de ordem inteira) (2) e (8). Provamos resultados de boa-colocação do modelo com derivadas de ordem fracionária em outras palavras, existência, unicidade e dependência contínua dos dados iniciais e dos parâmetros para as soluções do sistema de EDO's de ordem fracionária que modela o problema. Uma vez provada a boa colocação do problema, faremos uso de técnicas numéricas (métodos de colocação para termos convolutivos) para computar soluções do modelo para diferentes valores das derivadas ( $n$ ). Finalmente, utilizaremos os resultados conhecidos na literatura para comparar com os resultados do modelo proposto. Com a utilização das derivadas de ordem fracionária, espera-se modelar a dinâmica de bioconversão de glicerol em 1,3 - Propanodiol que represente de maneira fidedigna os resultados observados na prática. Desta forma, que o modelo sirva de guia teórico/computacional para a determinação de quantidades de biomassa e bio-reagentes (condições iniciais do sistema) para a obtenção, de maneira ótima, do máximo de subprodutos de interesse (1,3 - Propanodiol).

**Palavras-chave:** Bioconversão, Glicerol - 1,3 PD, Modelagem Matemática, Derivadas Fracionárias.

## ABSTRACT

OXLEY, Estefani de Souza. **MODELING BIONCONVERSÃO GLYCEROL TO 1,3-PROPANEDIOL VIA FRACTIONAL DERIVATIVES**. 2016. 76 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional. Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande.

In this dissertation we investigate the dynamic of the bio-conversion of glycerol in 1,3-Propanediol modeling by fractional order differentiation. The uses of such fractional order differentiation to drift the dynamics are motivated by some interesting properties, such as non-local effects, memory effects, etc. With such approach we expect to provide a more accurate description of the reality of what the models using the usual dynamics (integer order derivation) (2) and (8). We proof the well-posedness of the proposed model, that is, we proof existence, uniqueness and continuous dependence of initial data and for the parameters of a solution of the fractional order ODE's systems that models the problem. Finally, we utilize some numerical techniques (based of collocation methods for convolution integrals) to compute the solution for different values of the derivative  $n \in \mathbb{R}_+$ . The corresponding numerical solutions are compared with the solution of the well known first order dynamics for the problem studied in this work. Our hope it to provide a theoretical/computational guide for the determination of amounts of biomass and bio-reagents (initial conditions) to obtain, so great, as many by-products of interest (1,3-Propanediol). Once proven good placement of the problem, we will use numerical techniques (methods like pontências series) to compute model solutions for different values of the derivatives ( $n$ ). Finally, we will use the results known in literature to compare with the results of the proposed model. With the use of the derivatives of fractional order expected to model the dynamics of glycerol in bioconversão 1,3-Propanediol representing reliable manner the results observed in practice. In this way, the model will serve as a theoretical/computational guide for the determination of amounts of biomass and bio-reagents (initial conditions) to obtain, in optimal ways, the main by-products of interest (1,3-Propanediol), out of the bio-reaction.

**Keywords:** Bioconversion, Glycerol - 1,3 PD, Mathematical modeling, Fractional derivatives.

## LISTA DE FIGURAS

|           |                                                                                                          |    |
|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1  | Solução do PVI (47) para a ordem da derivada $n = 1$ . . . . .                                           | 51 |
| Figura 2  | Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para $n = 1,0$ . . .                                       | 52 |
| Figura 3  | Solução do PVI (47) para a ordem da derivada $n = 0,99$ . . . . .                                        | 52 |
| Figura 4  | Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para $n = 0,99$ . . .                                      | 53 |
| Figura 5  | Solução do PVI (47) para a ordem da derivada $n = 0,97$ . . . . .                                        | 53 |
| Figura 6  | Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para $n = 0,97$ . . .                                      | 54 |
| Figura 7  | Solução do PVI (47) para a ordem da derivada $n = 0,95$ . . . . .                                        | 54 |
| Figura 8  | Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para $n = 0,95$ . . .                                      | 55 |
| Figura 9  | Solução do PVI (47) para a ordem da derivada $n = 0,8$ . . . . .                                         | 55 |
| Figura 10 | Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para $n = 0,8$ . . .                                       | 56 |
| Figura 11 | Solução do PVI (47) para a ordem da derivada $n = 0,5$ . . . . .                                         | 56 |
| Figura 12 | Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para $n = 0,5$ . . . .                                     | 57 |
| Figura 13 | Dinâmica da Biomassa como solução do PVI (47), para diferentes ordens da derivada $n$ . . . . .          | 59 |
| Figura 14 | Dinâmica do Glicerol como solução do PVI (47), para diferentes ordens da derivada $n$ . . . . .          | 60 |
| Figura 15 | Dinâmica de 1,3 - Propanodiol como solução do PVI (47), para diferentes ordens da derivada $n$ . . . . . | 61 |
| Figura 16 | Dinâmica do Acetato como solução do PVI (47), para diferentes ordens da derivada $n$ . . . . .           | 62 |
| Figura 17 | Dinâmica do Etanol como solução do PVI (47), para diferentes ordens da derivada $n$ . . . . .            | 63 |

# LISTA DE TABELAS

|          |                                                                                          |    |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabela 1 | Tabela com os valores dos parâmetros. . . . .                                            | 47 |
| Tabela 2 | Tabela com os valores da solução do modelo do nosso problema<br>usando fde12.m . . . . . | 57 |
| Tabela 3 | Tabela com os valores da solução do modelo do nosso problema<br>usando flmm2.m . . . . . | 58 |

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

|         |                                                                        |
|---------|------------------------------------------------------------------------|
| PD      | Propanodiol                                                            |
| PPT     | Polímero polipropileno tereftalato                                     |
| PTT     | Politrimetileno tereftalato                                            |
| 3 GT    | Glicol de 3 carbono/tereftalato                                        |
| PBT     | Polibutileno tereftalato                                               |
| $m_2$   | Massa de Glicerol que será consumida ao longo do tempo                 |
| $m_3$   | Massa do 1,3-PD gerada somente após iniciado o processo de biodigestão |
| $m_4$   | Massa do Acetato subproduto gerado a partir da biodigestão             |
| $m_5$   | Massa de Etanol subproduto gerado a partir da biodigestão              |
| $t_m$   | Tempo onde se inicia o crescimento exponencial                         |
| $t_l$   | Tempo de latência                                                      |
| $\mu_m$ | Taxa máxima de crescimento específica                                  |
| $x_1^*$ | Concentração crítica para o crescimento da Biomassa                    |
| $x_2^*$ | Concentração crítica para o crescimento do Glicerol                    |
| $x_3^*$ | Concentração crítica para o crescimento do 1,3-Propanodiol             |
| $x_4^*$ | Concentração crítica para o crescimento do Acetato                     |
| $x_5^*$ | Concentração crítica para o crescimento do Etanol                      |

# SUMÁRIO

|                                                                                                                                    |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>INTRODUÇÃO</b>                                                                                                                  | 13 |
| <b>1 GLICEROL E 1,3 - PROPANODIOL</b>                                                                                              | 15 |
| 1.1 Produção biotecnológica do 1,3 - propanodiol                                                                                   | 16 |
| <b>2 DERIVADA FRACIONÁRIA</b>                                                                                                      | 17 |
| 2.1 Derivada fracionária Segundo Riemann - Liouville                                                                               | 18 |
| 2.2 Derivada fracionária Segundo Caputo                                                                                            | 25 |
| 2.3 Análise do método de Riemann - Liouville e Caputo                                                                              | 28 |
| 2.4 Boa colocação para sistemas de equações diferenciais fracionárias segundo Caputo                                               | 32 |
| 2.4.1 Resultados de Existência, Unicidade e dependência contínua dos dados iniciais para EDO's com derivadas de ordem fracionárias | 33 |
| <b>3 MODELAGEM DO PROBLEMA DE INTERESSE</b>                                                                                        | 45 |
| 3.1 Sistemas biológicos em batelada                                                                                                | 45 |
| 3.2 Propriedades do modelo de bioconversão do glicerol em 1,3 - Propanodiol com derivadas fracionárias                             | 47 |
| 3.3 Resultados de Boa colocação para problema estudado                                                                             | 49 |
| <b>4 RESULTADOS NUMÉRICOS</b>                                                                                                      | 50 |
| 4.1 Simulações numéricas                                                                                                           | 51 |
| <b>5 CONSIDERAÇÕES FINAIS E TRABALHOS FUTUROS</b>                                                                                  | 64 |
| <b>APÊNDICE A TEOREMAS FUNDAMENTAIS</b>                                                                                            | 66 |
| A.1 Função Gama                                                                                                                    | 66 |
| A.2 Função Mittag - Leffler                                                                                                        | 68 |
| A.3 Teoremas do ponto fixo e teorema do valor médio                                                                                | 70 |
| A.4 Função de Borel e Lebesgue mensuráveis                                                                                         | 71 |
| A.5 Cálculo do operador Jacobiano para o problema estudado                                                                         | 72 |
| <b>REFERÊNCIAS</b>                                                                                                                 | 74 |

## INTRODUÇÃO

Há uma imensa quantidade de fontes de energia renováveis, derivadas dos mais variados materiais orgânicos como plantas oleaginosas, biomassa florestal, cana-de-açúcar, etc. A estas chamamos de *biocombustível* ou *agrocombustível* por serem combustíveis de origem biológica não fóssil.

Neste trabalho, usaremos o termo *biocombustíveis* como sinônimo das fontes de energia derivadas de plantas oleaginosas, para as quais a produção de biocombustíveis gera cerca de 10% do volume em forma de glicerol que é descartado no processo. Dado o grande volume deste subproduto derivado no processo e as implicações ecológicas de seu descarte inadequado, recentemente, tem se investido grande esforço científico e tecnológico para a transformação do Glicerol em subprodutos com maior valor agregado. Um destes subprodutos é o 1,3 - PD, visto a quantidade de aplicações no segmento industrial (27).

Há essencialmente duas maneiras de converter glicerol em 1,3 - PD: de forma química ou através de processos biológicos (bio-conversão ou fermentação através de bactérias).

O primeiro processo apresenta muitas desvantagens com relação ao segundo, pois requer o uso de altas pressões, altas temperaturas, presença de catalisadores os quais geram intermediários tóxicos (5), com alto custo de produção e agressão ao meio ambiente. Ainda, o segundo processo é ecologicamente correto, produz 1,3 - PD com um grau de pureza próximo do ótimo, apresenta menores números de fases, condições moderadas de pressão e temperatura, não gera intermediários tóxicos, os isômeros produzidos são opticamente puros e é um processo mais econômico que o anterior.

Como o Brasil se encontra num cenário de destaque na produção de biocombustíveis, o problema acima descrito demanda iniciativas científicas e tecnológicas urgentes. Porém, a viabilidade econômica do processo de bioconversão de glicerol em 1,3 - PD ainda está em fase de estudos (5). Em outras palavras, como em qualquer processo industrial, existe a necessidade de estudos intensivos de forma a obter a máxima produtividade do produto de interesse (1,3-PD) a partir da bio-conversão do glicerol. Testes “*in vivo*” e “*in vitro*” vem sendo estudados por diversos grupos mundo a fora tais como (22), (7) e (28). No entanto, tais experiências são caras, por demandarem grandes investimentos em tempo e material (inclusive humano), pois as condições ideais de funcionamento do processo de bioconversão está imerso num oceano de possibilidades. Uma alternativa viável é a modelagem matemática do fenômeno, a qual permite simulações numéricas das condições ótimas de funcionamento do sistema e, conseqüentemente, serve de linha guia para a otimização dos processos práticos.

Em nosso trabalho temos como objetivo modelar o problema de conversão de glicerol em 1,3 - propanodiol. Diferentemente dos modelos conhecidos na literatura que são dados por sistema de EDO's com derivadas inteiras (27), nossa proposta é utilizar derivadas

de ordem fracionárias (8) para representar as variações dinâmica do modelo. Estas derivadas de ordem fracionárias possuem propriedades bastante interessantes como efeitos de memória, efeitos não locais, etc, as quais podem ser de grande utilidade para a descrição do fenômeno bio-químico sob investigação.

A dissertação está dividida da seguinte forma: no Capítulo 1, faremos uma breve introdução do glicerol e o 1,3 - propanodiol, sem a intenção de sermos especialistas no assunto. No Capítulo 2, faremos uma breve introdução sobre algumas propostas ao cálculo fracionário. Em particular, queremos mostrar que a derivada segundo Caputo é mais adequada ao tratarmos problemas biológicos. Além disso, discutiremos resultados de boa colocação de problemas de valor inicial usando derivadas de ordem fracionárias.

No Capítulo 3, proporemos o modelo de bioconversão do glicerol em 1,3 - propanodiol utilizando derivadas de ordem fracionárias e na Seção 3.2, faremos uma descrição sobre as propriedades do modelo proposto. O objetivo é obter condições necessárias e suficientes sobre o modelo de forma a provar a boa colocação do mesmo. Em outras palavras, estudaremos a existência, unicidade e dependência contínua dos dados iniciais para as soluções do sistema de EDO's de ordem fracionárias que modela o problema de conversão em estudo.

No Capítulo 4, faremos uma breve introdução dos códigos numéricos que serão utilizadas para a simulação do modelo e na Seção 4.1 exploraremos as soluções do modelo para diferentes valores das derivadas de ordem fracionária ( $n$ ), através de simulações numéricas.

No Capítulo 5, apresentaremos as conclusões e considerações finais.

## 1 GLICEROL E 1,3 - PROPANODIOL

Glicerol é um composto orgânico e pode ser utilizado como matéria prima para a produção de diversos produtos de cosméticos. Atualmente, a produção de biodiesel por catálise ácida produz uma grande quantidade de glicerol como subproduto. O excedente não pode ser descartado na natureza. Normalmente, cerca de 10% do volume de biomassa na produção de biocombustíveis é descartado em forma de glicerol. Segundo (11) em 2010, a produção de biodiesel foi de aproximadamente 2,4 bilhões de litros, gerando aproximadamente de 240 milhões litros de glicerol bruto, quantidade que o mercado brasileiro não é capaz de consumir nessas condições sem algum tratamento.

Dada a grande quantidade deste subproduto e a preocupação do seu descarte inadequado estão sendo realizadas muitas pesquisas científicas e tecnológicas a fim de descobrir novas aplicações. Uma destas alternativas estudadas é a maneira de realizar transformações do glicerol em subprodutos com maior valor agregado, por exemplo subprodutos como 1,3 - propanodiol, devido a quantidade de aplicações no segmento industrial (27).

O 1,3 - propanodiol é um diol contendo três carbonos na sua estrutura. Em condições normais de temperatura e pressão é um líquido viscoso, transparente e incolor, miscível com a água e com etanol. O 1,3 - propanodiol (19) é um composto orgânico intermediário para a síntese de compostos cíclicos e monômeros para poliésteres, poliuretanos e polipropileno tereftalato, também conhecido como trimetilenoglicol ou 1,3 - dihidroxipropano (11). Uma das principais aplicações do 1,3 - PD é na produção do polímero polipropileno tereftalato (PPT), também denominado politrimetileno tereftalato (PTT) ou glicol de 3 carbonos/ tereftalato (3GT).

O PPT (4) é um polímero relacionado ao PET, produzido a partir do óxido de etileno (etileno glicol), e ao PBT, produzido a partir do 1,4 - butanodiol. O PPT apresenta melhor resiliência, maior facilidade de coloração e melhores propriedades elásticas. Ainda, o PPT é resistente à descoloração e à estática, podendo ser utilizado em áreas tão distintas como carpetes, vestuário, têxtil, termoplásticos de engenharia e monofilamentos. Para aplicações na indústria de vestuários, as características que fazem do PPT um polímero interessante incluem maciez, elasticidade e coloração duradoura.

Sendo assim é considerado amplamente abrangente, diferentes setores comerciais, desde a produção de polímeros, tintas, resinas de poliéster, lubrificantes, detergentes, até produção de cosméticos.

## **1.1 Produção biotecnológica do 1,3 - propanodiol**

Há essencialmente duas maneiras de converter glicerol em 1,3 - PD: de forma química ou através de processos biológicos (bio-conversão ou fermentação através de bactérias).

O processos químicos (26) apresentam diversas desvantagens com relação ao processo biológico, tais como a exigência de altas pressões e temperaturas, uso de catalisadores de maior custo, liberação de intermediários tóxicos, dependência de materiais não renováveis e baixo rendimento, complexidade dos processos de produção. É muito mais interessante utilizarmos o processo biológico pelos seguintes motivos: gera um produto mais limpo, sem intermediários tóxicos, não é prejudicial ao meio ambiente, os processos microbianos são mais viáveis economicamente que o processo químico.

Em nosso trabalho estudaremos o processo biológico devido as diversas vantagens citadas acima. Modelaremos o processo biológico em batelada. Este consiste em um processo que transforma uma quantidade finitas de material (glicerol no nosso caso) em subprodutos durante um período finito de tempo. Seremos mais específicos quando apresentarmos o problema estudado neste trabalho.

## 2 DERIVADA FRACIONÁRIA

O Cálculo Fracionário teve origem durante a formalização, no século XVII, por Newton e Leibniz, do Cálculo clássico. Os registros datam de uma carta de Leibniz para l'Hospital, introduzindo a notação  $\frac{d^n}{dt^n}$  que, supostamente, era válida para  $n \in \mathbb{N}$ .

Em resposta a esta carta, l'Hospital perguntara o significado da notação para  $n \notin \mathbb{N}$  (14). Desde então uma série de novas definições e resultados decorrentes foram obtidos, cada uma, com suas peculiaridades e vantagens em certas aplicações (14). Como a resposta decorrente são dependentes de tais definições e, conseqüentemente, a interpretação dos resultados também o são, nesse Capítulo nos deteremos a definição da derivada de ordem fracionária segundo Riemann - Liouville e Caputo, pois há interrelação entre estas definições. Nosso objetivo é mostrar que a escolha específica da derivada de ordem fracionária segundo Caputo na Seção 2.2.1 é a mais adequada para descrever o modelo de bioconversão de glicerol em 1,3 - propanodiol.

Antes disso, faremos uma breve introdução ao Cálculo Fracionário, que terá dois propósitos: motivar o assunto e introduzir as definições necessárias para o que segue.

Iniciamos relembando um dos resultados fundamentais do Cálculo clássico: o Teorema Fundamental do Cálculo (15).

**Teorema 2.0.1.** (*Teorema Fundamental do Cálculo*) Seja  $x : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  uma função contínua e seja  $X : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  definida por

$$X(t) = \int_a^t x(s)ds, \quad (1)$$

então  $X$  é diferenciável e  $X' = x$ .

**Demonstração 2.0.2.** A demonstração é bem conhecida e pode ser encontrada em detalhes em (15).

O que podemos aprender com o Teorema Fundamental do Cálculo é a relação entre os operadores de diferenciação, que denotaremos aqui por  $D$ , e o operador de integração, que denotaremos aqui por  $J$ , os quais assumiremos que estão definidos em espaços de funções adequadas.

**Definição 2.0.1.** Por  $D$  denotaremos o operador que mapeia uma função diferenciável em sua derivada, de forma que  $Dx(t) = x'(t)$ .

Definiremos o operador  $J_a$  com uma função integrável num conjunto compacto em sua primitiva centrada em  $a$ , de forma que  $J_ax(t) = \int_a^t x(s)ds$ , para  $a \leq t \leq b$ .

Ainda, para  $n \in \mathbb{N}$ , usaremos o símbolo  $D^n$  e  $J_a^n$  para denotar a  $n$ -ésima iterada de  $D$  e  $J_a$ , respectivamente. Assim,  $D^n := DD^{n-1}$ , com  $D^1 = D$  e  $J_a^n = J_a J_a^{n-1}$ , com  $J_a^1 = J_a$ .

Alguns resultados que seguem diretamente da definição do operador de derivação e de integração por isso não os demonstraremos, são os seguintes:

**Lema 2.0.3.** Seja  $x$  uma função integrável em  $[a, b]$ . Então, para qualquer  $a \leq t \leq b$  temos que

$$J_a^n x(t) = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t (t-s)^{n-1} x(s) ds. \quad (2)$$

Sejam  $m > n$ , com  $m, n \in \mathbb{N}$ . Para qualquer função  $x$  que possui  $n$ -ésima derivada contínua em  $[a, b]$  vale que

$$D^n x = D^m J_a^{m-n} x. \quad (3)$$

O desafio é generalizar o resultado acima, para  $n \notin \mathbb{N}$ . Com uma breve observação na equação (2) do Lema 2.0.3, notamos a necessidade de generalizar o fatorial. Isso é feito com a função *Gamma de Euler*.

**Definição 2.0.2.** A função  $\Gamma : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ , conhecida como *função Gamma de Euler*, é definida por

$$\Gamma(t) := \int_0^\infty s^{t-1} e^{-s} ds \quad (4)$$

Os resultados relevantes e necessários para este trabalho sobre a função Gamma de Euler é apresentado no Apêndice A.1.

Nas próximas seções apresentaremos algumas definições interessantes sobre derivadas de ordem fracionárias que serão utilizadas no restante do trabalho.

## 2.1 Derivada fracionária Segundo Riemann - Liouville

A definição da derivada de ordem fracionária, segundo Riemann - Liouville, está baseada essencialmente no fato de a derivada ser a operação “inversa” da integração. Em outras palavras, a derivada de ordem fracionária segundo Riemann - Liouville estabelece que a derivada de ordem fracionária é a derivada de ordem inteira de uma determinada integral de ordem fracionária.

Primeiramente introduziremos duas definições e um teorema que serão utilizados no decorrer da dissertação.

**Definição 2.1.1.** *Seja  $1 \leq p < \infty$ . Denotaremos por  $L_p[a, b]$  o espaço de das funções  $p$  integráveis segundo Lebesgue :  $L_p[a, b] := \{f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}; f \text{ é mensurável em } [a, b] \text{ e } \int_a^b |f(t)|^p dt < \infty\}$ .*

**Teorema 2.1.1.** *(Teorema fundamental do espaço de Lebesgue) Seja  $x \in L_1[a, b]$ , então  $J_a x$  é diferenciável em quase toda a parte em  $[a, b]$  e  $DJ_a x = x$  também em quase toda a parte em  $[a, b]$ .*

**Demonstração 2.1.2.** *Para detalhes sobre a demonstração (8, Teorema 1B pag.10).*

**Definição 2.1.2.** *Seja  $A^n$  ou  $A^n[a, b]$  o conjunto de funções com  $(n - 1)$  esima derivadas absolutamente contínua em  $[a, b]$ , ou seja, as funções  $x$  para que exista (quase em todos os lugares) a função  $g \in L_1[a, b]$  tal que*

$$x^{(n-1)}(t) = x^{(n-1)}(a) + \int_a^t g(s) ds.$$

*Neste caso chamamos  $g$   $n$ -ésima derivada “generalizada” de  $x$  e escrevemos  $g = x^{(n)}$ .*

Postos os resultados e definições logo acima apartir deste momento, abordaremos a motivação da definição da integral fracionária, que surgiu através do seguinte conceito: Seja  $x \doteq I \rightarrow \mathbb{R}$  uma função contínua por partes no intervalo  $I := [0, \infty)$  e integrável em todo subintervalo de  $[0, \infty)$ . Denotamos por  $Jx(t)$  o seguinte operador integral

$$Jx(t) = \int_0^t x(s) ds, \quad (5)$$

e por

$$J^k x(t) = J(J^{k-1} x(t))$$

a composição do operador  $J$  em  $k$  vezes.

Observamos que

$$J^2 x(t) = JJx(t) = \int_0^t Jx(s) ds = \int_0^t \int_0^s x(\epsilon) d\epsilon ds.$$

Pelo Teorema de Fubini (10), obtemos:

$$\begin{aligned} J^2 x &= \int_0^t \int_0^s x(\epsilon) d\epsilon ds = \int_0^t \left( \int_\epsilon^t x(\epsilon) ds \right) d\epsilon \\ &= \int_0^t x(\epsilon)(t - \epsilon) d\epsilon. \end{aligned}$$

Analogamente,

$$\begin{aligned} J^3 x &= \int_0^t \int_0^s x(\xi)(s - \xi) d\xi ds = \int_0^t \int_\xi^t x(\xi)(s - \xi) ds d\xi \\ &= \int_0^t x(\xi) \frac{(t - \xi)^2}{2} d\xi. \end{aligned}$$

Usando esse procedimento sucessivamente obtemos a seguinte expressão para a integral com o operador  $J^n x$ :

$$J^n x = \int_0^t \frac{(t - s)^{n-1}}{(n - 1)!} x(s) ds. \quad (6)$$

Agora, utilizando a definição da função  $\Gamma(n)$  e suas propriedades (A.1), podemos escrever a integral (6):

$$J^n x = \int_0^t \frac{(t - s)^{n-1}}{\Gamma(n)} x(s) ds = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t - s)^{n-1} x(s) ds. \quad (7)$$

Como a equação (7) é contínua e bem definida para  $n \in \mathbb{R}_+$ , este fato acabou sendo a motivação do surgimento da integral fracionária segundo Riemann - Liouville.

**Definição 2.1.3.** [Integral de ordem fracionária segundo Riemann - Liouville] Dado  $n \in \mathbb{R}_+$  e  $x(t) \in L_1[a, b]$ . O operador da integral fracionária segundo Riemann - Liouville, denotado por  $J_a^n$ , é dada por

$$J_a^n x(t) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_a^t (t - s)^{n-1} x(s) ds \quad (8)$$

onde  $a \leq t \leq b$ .

**Exemplo 2.1.3.** Seja o monômio  $x(t) = t^\mu$ , com  $t > 0$  e  $-1 < \mu < 0$ . A integral de  $t^\mu$  é dada por

$$J^n t^\mu = \frac{t^{n+\mu} \Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\mu + n + 1)} \quad n \in \mathbb{R}_+. \quad (9)$$

**Demonstração 2.1.4.** De fato, fazendo uma mudança de variáveis  $u = \frac{s}{t}$ , obtemos

$$\begin{aligned} J^n t^\mu &= \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t - s)^{n-1} s^\mu ds = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t t^{n-1} \left(1 - \frac{s}{t}\right)^{n-1} s^\mu ds \\ &= \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^1 t^{n-1} (1 - u)^{n-1} (tu)^\mu t du = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^1 t^n (1 - u)^{n-1} t^\mu u^\mu du \\ &= \frac{t^{n+\mu}}{\Gamma(n)} \int_0^1 (1 - u)^{n-1} u^\mu du. \end{aligned}$$

Reescrevendo a última integral utilizando as propriedades da função Gamma (A.1),

obtemos:

$$J^n t^\mu = \frac{t^{n+\mu}}{\Gamma(n)} B(\mu+1, n) = \frac{t^{n+\mu}}{\Gamma(n)} \frac{\Gamma(\mu+1)\Gamma(n)}{\Gamma(\mu+1+n)} = \frac{t^{n+\mu}\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu+n+1)}.$$

onde  $B(.,.)$  significa a função Beta tal que  $B(n, m) = \frac{\Gamma(n)\Gamma(m)}{\Gamma(n+m)}$ .

Definindo a função  $\Phi_n = \frac{t^{n-1}}{\Gamma(n)}$ , para  $t > 0$  e fazendo o produto convolução entre as funções  $x$  e  $\Phi$ , obtemos:

$$(\Phi_n * x)(t) = \int_0^t \Phi_n(t-s)x(s)ds = \int_0^t \frac{(t-s)^{n-1}}{\Gamma(n)} x(s)ds = J^n x(t). \quad (10)$$

Portanto, a definição da integral pode ser interpretada como o produto de convolução entre as funções  $\Phi_n$  e  $x$ .

**Teorema 2.1.5.** *Sejam  $n, m \geq 0$ , então temos que  $J^n J^m = J^{n+m}$ . Em particular vale a propriedade comutativa  $J^n J^m = J^m J^n$ .*

**Demonstração 2.1.6.** *Seja  $f$  uma função suficientemente suave. Pela equação (10) temos*

$$(J^n x)(t) = \Phi_n(t) * x(t) \quad (11)$$

Agora, vamos mostrar que

$$\Phi_n(t) * \Phi_m(t) = \Phi_{n+m}(t).$$

De fato,

$$\Phi_n(t) * \Phi_m(t) = \int_0^t \frac{(t-y)^{n-1}}{\Gamma(n)} \frac{y^{m-1}}{\Gamma(m)} dy = \int_0^t \frac{t^{n-1}(1-\frac{y}{t})^{n-1}}{\Gamma(n)} \frac{y^{m-1}}{\Gamma(m)} dy.$$

Seja  $u = \frac{y}{t}$ , temos:

$$\begin{aligned} \Phi_n(t) * \Phi_m(t) &= \frac{t^{n-1}}{\Gamma(n)\Gamma(m)} \int_0^1 (1-u)^{n-1} (ut)^{m-1} t du \\ &= \frac{t^{n-1}}{\Gamma(n)\Gamma(m)} \int_0^1 (1-u)^{n-1} u^{m-1} t^m du \\ &= \frac{t^{n+m-1}}{\Gamma(n)\Gamma(m)} \int_0^1 (1-u)^{n-1} u^{m-1} du. \end{aligned}$$

Com a mudança de variável  $x = 1 - u$ , obtemos

$$\Phi_n(t) * \Phi_m(t) = \frac{t^{n+m-1}}{\Gamma(n)\Gamma(m)} \int_1^0 x^{n-1} (1-x)^{m-1} dx.$$

Multiplicando e dividindo por  $\Gamma(n + m)$ , obtemos:

$$\Phi_n(t) * \Phi_m(t) = \frac{t^{n+m-1}\Gamma(n+m)}{\Gamma(n+m)\Gamma(n)\Gamma(m)} \int_0^1 x^{n-1}(1-x)^{m-1}dx. \quad (12)$$

Considerando a função Beta definida como  $B(n, m) = \frac{\Gamma(n)\Gamma(m)}{\Gamma(n+m)} = \int_0^1 x^{n-1}(1-x)^{m-1}dx$  e relacionando as funções Beta e Gama (ver apêndice A.1), substituindo na equação (12), encontramos:

$$\Phi_n(t) * \Phi_m(t) = \frac{t^{n+m-1}}{\Gamma(n+m)B(n, m)} B(n, m) = \frac{t^{n+m-1}}{\Gamma(n+m)} = \Phi_{n+m}(t) \quad (13)$$

Portanto, considerando as equações (11) e (13), obtemos:

$$(J^n J^m x)(t) = \Phi_n(t) * J^m x(t) = \Phi_n(t) * \Phi_m(t) * x(t) = \Phi_{n+m}(t) * x(t) = (J^{n+m} x)(t).$$

Agora apresentaremos outro exemplo sobre integral fracionária, que servirá como base para resolver derivada fracionária.

**Exemplo 2.1.7.** Seja  $x(t) = t$ . Então a integral fracionária de ordem  $\frac{1}{2}$  de  $x$  é:

$$J^{\frac{1}{2}} t = \frac{t^{(\frac{1}{2}+1)}\Gamma(1+1)}{\Gamma(1+\frac{1}{2}+1)} = \frac{t^{\frac{3}{2}}\Gamma(2)}{\Gamma(\frac{5}{2})}.$$

Sabendo que  $\Gamma(2) = 1$  e  $\Gamma(\frac{5}{2}) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$  temos

$$J^{\frac{1}{2}} t = \frac{4t^{\frac{3}{2}}}{3\sqrt{\pi}}.$$

Após compreender como se calcula uma integral de ordem arbitrária que é considerada muito importante para resolução da derivada fracionária, definiremos logo abaixo a derivada fracionária segundo Riemann - Liouville.

**Definição 2.1.4.** Seja  $n \in \mathbb{R}_+$ ,  $x \in A^1[a, b]$  e  $m = \lceil n \rceil$ . Definimos o operador derivada fracionária segundo Riemann - Liouville de ordem  $n \in \mathbb{R}_+$ , denotado por  $D_a^n$

$$D_a^n x = D^m J_a^{m-n} x. \quad (14)$$

O próximo resultado garante sob quais condições a derivada de ordem fracionária segundo Riemann - Liouville está bem definida.

**Lema 2.1.8.** Seja  $x \in A^1[a, b]$  e  $0 < n < 1$ , então  $D_a^n x$  existe em quase toda parte em

$[a, b]$ . Além disso  $D_a^n x \in L^p[a, b]$  para  $1 \leq p \leq \frac{1}{n}$  e

$$D_a^n x(t) = \frac{1}{\Gamma(1-n)} \left( \frac{x(a)}{(t-a)^n} + \int_a^t x'(s)(s-t)^{-n} dt \right).$$

**Demonstração 2.1.9.** Usando a definição da derivada fracionária segundo Riemann - Liouville e  $f \in A^1$  temos

$$\begin{aligned} D_a^n x(t) &= \frac{1}{\Gamma(1-n)} \frac{d}{dt} \int_a^t x(s)(s-t)^{-n} ds \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-n)} \frac{d}{dt} \int_a^s \left( x(a) + \int_a^t x'(u) du \right) (s-t)^{-n} dt \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-n)} \frac{d}{ds} \left( x(a) \int_a^s \frac{dt}{(s-t)^n} + \int_a^s \int_a^s x'(u)(u-t)^{-n} du dt \right) \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-n)} \left( \frac{x(a)}{(s-a)^n} + \frac{d}{ds} \int_a^s \int_a^t x'(u)(s-t)^{-n} du dt \right). \end{aligned}$$

Utilizando o teorema de Fubini (8) chegamos no seguinte resultado

$$D_a^n x(t) = \frac{1}{\Gamma(1-n)} \left( \frac{x(a)}{(s-a)^n} + \frac{d}{ds} \int_a^s x'(u) \frac{(s-u)^{1-n}}{1-n} du \right).$$

A declaração integrabilidade é uma consequência imediata dessa representação utilizando os resultados clássicos da teoria da integração de Lebesgue (21).

**Teorema 2.1.10.** Sejam  $n_1, n_2 \geq 0$ ,  $\phi \in L_1[a, b]$  e  $x = J_a^{n_1+n_2} \phi$ . Então, temos que

$$D_a^{n_1} D_a^{n_2} x = D_a^{n_1+n_2} x. \quad (15)$$

**Demonstração 2.1.11.** A demonstração segue os seguintes argumentos. Primeiro,

$$D_a^{n_1} D_a^{n_2} x = D_a^{n_1} D_a^{n_2} J_a^{n_1+n_2} \phi = D^{[n_1]} J_a^{[n_1]-n_1} D^{[n_2]} J_a^{[n_2]-n_2} J_a^{n_1+n_2} \phi.$$

Considerando as propriedades do operador integral, obtidas no Teorema 2.1.5, obtemos que

$$D_a^{n_1} D_a^{n_2} x = D^{[n_1]} J_a^{[n_1]-n_1} D^{[n_2]} J_a^{[n_2]+n_1} \phi = D^{[n_1]} J_a^{[n_1]-n_1} D^{[n_2]} J_a^{[n_2]-n_2} J_a^{n_1} \phi.$$

Segundo (8) esse resultado é equivalente a:

$$D_a^{n_1} D_a^{n_2} x = D^{[n_1]} J_a^{[n_1]-n_1} J_a^{n_1} \phi = D^{[n_1]} J_a^{[n_1]} \phi.$$

Utilizando novamente as propriedades do operador integral, temos

$$D_a^{n_1} D_a^{n_2} x = \phi$$

o que implica na demonstração de que  $D_a^{n_1+n_2} x = \phi$ .

**Teorema 2.1.12.** *Seja  $n \geq 0$ . Para cada  $x \in L_1[a, b]$ , temos*

$$D_a^n J_a^n x = x.$$

**Demonstração 2.1.13.** *Usando propriedades de integração e o Teorema 2.1.5, obtemos:*

$$D_a^n J_a^n x(t) = D^m J_a^{m-n} J_a^n x(t) = D^m J_a^m x(t) = x(t).$$

**Teorema 2.1.14.** *O operador de diferenciação fracionária é linear. Em outras palavras, sejam  $x_1$  e  $x_2$  funções em  $A^1[a, b]$  e  $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$  então*

$$D_a^n (c_1 x_1 + c_2 x_2) = (c_1 D_a^n x_1 + c_2 D_a^n x_2).$$

**Demonstração 2.1.15.** *Segue imediato consequência da definição de  $D_a^n$ .*

Abaixo apresentaremos alguns exemplos simples de derivada fracionária segundo Riemann - Liouville que servirão de motivação para determinar o tipo de derivada de ordem fracionária que utilizaremos em nosso problema.

**Exemplo 2.1.16.** *Seja  $x(t) = 1$  (função constante), então a derivada fracionária segundo Riemann - Liouville de ordem  $\frac{1}{2}$  é:*

$$D_t^{\frac{1}{2}}(1) = D^1[J^{\frac{1}{2}}(1)] = D \left[ \frac{\Gamma(0+1)}{\Gamma(0+\frac{1}{2}+1)} t^{\frac{1}{2}+0} \right].$$

Como,  $\Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$  e  $\Gamma(1) = 1$ , temos:

$$D_t^{\frac{1}{2}}(1) = D \left[ \frac{\Gamma(1)}{\Gamma(\frac{3}{2})} t^{\frac{1}{2}} \right] = D \left[ \frac{(1)t^{\frac{1}{2}}}{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} \right] = D \left[ \frac{2t^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}} \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \neq 0 \quad \text{para } t \neq 0.$$

**Observação 2.1.** *A derivada de ordem fracionária segundo Riemann - Liouville de uma constante não é nula, isso implica que essa derivada não pode ser considerada como uma taxa de variação. Além disso, como veremos abaixo, na modelagem de problemas de valores iniciais, as condições iniciais não necessariamente possuem uma interpretação do ponto de vista biológico. Decorrente a esses fatos não utilizaremos essa definição na modelagem do problema de bio-conversão que investigaremos nesta dissertação.*

**Exemplo 2.1.17.** Seja  $x(t) = t^2$  então a derivada fracionária segundo Riemann - Liouville de ordem  $\frac{3}{2}$  é:

$$D_t^{\frac{3}{2}} t^2 = D^2 \left[ J^{\frac{1}{2}} t^2 \right] = D^2 \left[ \frac{\Gamma(2+1)}{\Gamma(2+\frac{1}{2}+1)} t^{2+\frac{1}{2}} \right] = D^2 \left[ \frac{\Gamma(3)t^{\frac{5}{2}}}{\Gamma(\frac{7}{2})} \right].$$

Como,  $\Gamma(3) = 2$  e  $\Gamma(\frac{7}{2}) = \frac{15\sqrt{\pi}}{8}$ , temos:

$$D_t^{\frac{3}{2}} t^2 = D^2 \left[ \frac{2t^{\frac{5}{2}}}{\frac{15\sqrt{\pi}}{8}} \right] = D^2 \left[ \frac{16t^{\frac{5}{2}}}{15\sqrt{\pi}} \right] = \frac{4t^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}}.$$

## 2.2 Derivada fracionária Segundo Caputo

Vimos na seção anterior que, segundo Riemann - Liouville, a derivada fracionária é a derivada de ordem inteira de uma integral fracionária. Nesta seção apresentamos a definição da derivada fracionária segundo Caputo que é bastante similar a de Riemann - Liouville, porém invertendo a ordem de integração fracionária com a ordem da derivação. Em outras palavras,

**Definição 2.2.1.** [Derivada de ordem fracionária segundo Caputo] Seja  $n \in \mathbb{R}_+$ ,  $x \in A^1[a, b]$  e  $m = \lceil n \rceil$ . O operador  $\hat{D}_a^n$ , é definido por

$$\hat{D}_a^n x = J_a^{m-n} D^m x \quad (16)$$

para qualquer  $D^m x \in L_1[a, b]$  em que  $D^m$  denota o operador da derivada fracionária segundo Caputo de ordem  $n \in \mathbb{R}_+$ .

Os próximos resultados garantem sob quais condições a derivada de ordem fracionária segundo Caputo está bem definida.

**Teorema 2.2.1.** Sejam  $n \geq 0$ ,  $m = \lceil n \rceil$  e  $x \in A^m[a, b]$ . Então

$$\hat{D}_a^n x = D_a^n (x - T_{m-1}[x; a]),$$

onde  $T_{m-1}[x; a]$  é o polinômio de Taylor de grau  $m - 1$  para  $x$ .

**Demonstração 2.2.2.** Para detalhes sobre demonstração veja (8, Teorema 3.1 pg.50).

**Definição 2.2.2.** Sejam  $n \geq 0$  e  $m = \lceil n \rceil$  e  $x \in A^m[a, b]$ . Então,

$$D_{*a}^n x = D_a^n (x - T_{m-1}[x; a]). \quad (17)$$

O operador  $D_{*a}^n$  é chamado de operador diferencial de Caputo de ordem  $n$ .

**Demonstração 2.2.3.** Note que, no caso do  $n \in \mathbb{N}$  a afirmação é trivial. Só teremos que analisar o caso  $n \notin \mathbb{N}$ . Neste caso, consideraremos  $m$  como o primeiro inteiro tal que  $m > n$ . Assim, temos que

$$\begin{aligned} D_a^n(x - T_{m-1}[x; a])(t) &= D^m J_a^{m-n}(x - T_{m-1}[x; a])(t) \\ &= \frac{d^m}{ds^m} \int_a^s \frac{(s-t)^{m-n-1}}{\Gamma(m-n)} (x(t) - T_{m-1}[x; a](t)) dt. \end{aligned}$$

Primeiramente, faremos a integração, a qual resulta em

$$\begin{aligned} &\int_a^s \frac{1}{\Gamma(m-n)} (x(t) - T_{m-1}[x; a](t)) (s-t)^{m-n-1} dt = \\ &- \frac{1}{\Gamma(m-n+1)} [(x(t) - T_{m-1}[x; a](t)) (s-t)^{m-n}]_{t=a}^{t=s} \\ &+ \frac{1}{\Gamma(m-n+1)} \int_a^s (Dx(t) - DT_{m-1}[x; a](t)) (s-t)^{m-n} dt. \end{aligned}$$

Notemos que o termo da primeira equação acima é zero. Assim

$$J_a^{m-n}(x - T_{m-1}[x; a]) = J_a^{m-n+1} D(x - T_{m-1}[x; a]).$$

Repetindo este processo um número total de  $m$  vezes resulta em

$$J_a^{m-n}(x - T_{m-1}[x; a]) = J_a^{2m-n} D^m(x - T_{m-1}[x; a]) = J_a^m J_a^{m-n} D^m(x - T_{m-1}[x; a]).$$

Notamos que  $D^m T_{m-1}[x; a] \equiv 0$  porque  $T_{m-1}[x; a]$  é um polinômio de grau  $m-1$ . Logo

$$J_a^{m-n}(x - T_{m-1}[x; a]) = J_a^m J_a^{m-n} D^m x.$$

Segue agora do Teorema 2.2.1 que

$$D_a^n(x - T_{m-1}[x; a]) = D^m J_a^m J_a^{m-n} D^m x = J_a^{m-n} D^m x = \hat{D}_a^n x.$$

**Lema 2.2.4.** Sejam  $n \geq 0$  e  $m = \lceil n \rceil$ . Supondo que  $x$  seja uma função de tal modo que ambos  $D_{*a}^n x$  e  $D_a^n x$  existam. Então,

$$D_{*a}^n x(t) = D_a^n x - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{D^k x(a)}{\Gamma(k-n+1)}.$$

**Demonstração 2.2.5.**

$$\begin{aligned}
D_{*a}^n x(t) &= D_a^n x - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{D^k x(a)}{k!} D_a^n ((\cdot - a)^k)(t) \\
&= D_a^n x(t) - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{D^k x(a)}{\Gamma(k - n + 1)(t - a)^{k-n}}.
\end{aligned}$$

O próximo resultado estabelece a relação entre a derivada de ordem fracionária de Riemann - Liouville e de Caputo.

**Lema 2.2.6.** *Assumindo as mesmas hipóteses do lema anterior, temos:*

$$D_a^n x = D_{*a}^n x$$

se e somente se  $x$  possui  $m$  derivadas nulas em um dado ponto  $a$  e  $D^k x(a) = x(0)$  se  $k = 0, 1, \dots, m - 1$ .

**Demonstração 2.2.7.** *Para detalhes sobre demonstração veja (8, Lema 3.4 pg.53).*

**Teorema 2.2.8.** *Se  $x$  for contínua e  $n \geq 0$ , então*

$$D_{*a}^n J_a^n x = x.$$

**Demonstração 2.2.9.** *Assumindo que  $\phi = J_a^n x$  e utilizando o Teorema 2.1.5, temos  $D^k \phi(a) = 0$  para  $k = 0, 1, \dots, m - 1$ . Considerando agora o lema anterior e o Teorema 2.1.10, temos que*

$$D_{*a}^n J_a^n x = D_{*a}^n \phi = D_a^n \phi = D_a^n J_a^n x = x.$$

**Lema 2.2.10.** *Seja  $x \in C^k[a, b]$ ,  $a < b$  e  $k \in \mathbb{N}$ . Sejam  $n, \varepsilon > 0$  tal que existe  $l \in \mathbb{N}$  com  $l \leq k$  e  $n, n + \varepsilon \in [l - 1, l]$ , então*

$$D_{*a}^\varepsilon D_{*a}^n x = D_{*a}^{n+\varepsilon} x.$$

**Demonstração 2.2.11.** *Para detalhes da demonstração veja (8, Lema 3.13 pg.57).*

Provaremos a seguir que, como a derivada de ordem fracionária de Riemann - Liouville, a derivada de ordem fracionária segundo Caputo é um operador linear.

**Teorema 2.2.12.** *Sejam as funções  $x_1, x_2 : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ , onde  $D_{*a}^n x_1$  e  $D_{*a}^n x_2$  existem em quase toda parte e  $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ , então*

$$D_{*a}^n (c_1 x_1 + c_2 x_2) = c_1 D_{*a}^n x_1 + c_2 D_{*a}^n x_2.$$

**Demonstração 2.2.13.** *Essa propriedade e a linearidade do operador diferencial fracionário é uma consequência imediata da definição de  $D_{*a}^n$ .*

Abaixo apresentaremos alguns exemplos de derivada fracionária segundo Caputo que servirão para determinar o tipo de derivada de ordem fracionária que utilizaremos neste trabalho.

**Exemplo 2.2.14.** *Seja  $x(t) = 1$  (função constante), então a derivada fracionária segundo Caputo de ordem  $\frac{1}{2}$  é:*

$$D_{*a}^{\frac{1}{2}}(1) = J^{\frac{1}{2}}(D^1(1)) = J^{\frac{1}{2}}(0) = 0.$$

**Observação 2.2.** *A derivada de ordem fracionária segundo Caputo de uma constante é nula. Portanto, esta derivada faz mais sentido para modelar dinâmicas de valores iniciais, uma vez que, se a dinâmica independe de  $t$ , então a derivada é nula. Por isso esse é o melhor método para utilizarmos em nosso problema.*

**Exemplo 2.2.15.** *Seja  $x(t) = t^2$ , então a derivada fracionária segundo Caputo de ordem  $\frac{3}{2}$  é:*

$$D_{*t}^{\frac{3}{2}}(t^2) = J^{\frac{1}{2}}(D^2(t^2)) = J^{\frac{1}{2}}(2) = \frac{2t^{0+\frac{1}{2}}\Gamma(0+1)}{\Gamma(0+\frac{1}{2}+1)} = \frac{2t^{\frac{1}{2}}\Gamma(1)}{\Gamma(\frac{3}{2})}.$$

De fato,  $\Gamma(1) = 1$  e  $\Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ , logo

$$D_{*t}^{\frac{3}{2}}[t^2] = \frac{2t^{\frac{1}{2}}}{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} = \frac{4\sqrt{t}}{\sqrt{\pi}}.$$

## 2.3 Análise do método de Riemann - Liouville e Caputo

Nessa seção analisaremos como funciona um problema de valor inicial com a derivada arbitrária segundo Riemann - Liouville e Caputo, com o objetivo de verificar qual derivada fracionária melhor se aplica no nosso sistema. Não demonstraremos os resultados nesta seção, mas usaremos as consequências de tais resultados como o argumento básico da escolha da derivada de ordem fracionária segundo Caputo para modelar o problema de interesse. Esta análise é baseada nos seguintes resultados:

**Teorema 2.3.1.** *Sejam  $n > 0$ ,  $n \notin \mathbb{N}$ ,  $m = \lceil n \rceil$ ,  $k > 0$ ,  $h^* > 0$  e  $b_1, \dots, b_m \in \mathbb{R}$ . Seja  $G := \{(t, x) \in \mathbb{R}^{s+1} : 0 \leq t \leq h^*, x \in \mathbb{R}^s \text{ se } t = 0 \text{ e } |t^{m-n}x - \sum_{k=1}^m \frac{b_k t^{m-k}}{\Gamma(n-k+1)}| < k \text{ caso contrário}\}$ . Supondo que a função  $f : G \rightarrow \mathbb{R}$  é contínua, limitada e Lipschitziana em relação a segunda variável, ou seja, existe uma constante  $L > 0$  tal que, para todo  $(t, x_1), (t, x_2) \in G$ , temos*

$$|f(t, x_1(t)) - f(t, x_2(t))| < L|x_1(t) - x_2(t)|. \quad (18)$$

Então a equação diferencial

$$D_0^n x(t) = f(t, x(t)) \quad (19)$$

com as condições iniciais

$$D_0^{n-k} x(0) = b_k \quad (k = 1, 2, \dots, m-1), \quad \lim_{z \rightarrow 0^+} J_0^{m-n} x(z) = b_m \quad (20)$$

possui uma única solução  $x$  que é uma função contínua definida em  $(0, h]$  com

$$h := \min \left\{ h^*, \tilde{h}, \left( \frac{\Gamma(n+1)k}{M} \right)^{\frac{1}{m}} \right\}$$

onde  $M := \sup_{(t,z) \in G} |f(t, z)|$  e  $\tilde{h}$  é um número positivo arbitrário que satisfaz a seguinte restrição

$$\tilde{h} < \left( \frac{\Gamma(2n-m+1)}{\Gamma(n-m+1)L} \right)^{\frac{1}{n}}. \quad (21)$$

A demonstração é similar a demonstração de existência e unicidade para EDO's de ordem inteira. Para detalhes veja (8, Capítulo 5). Assim como no caso clássico, a demonstração passa por transformar o problema na sua forma integral e será enunciado no próximo lema.

**Lema 2.3.2.** *Suponha  $h > 0$  e as hipóteses enunciadas no Teorema 2.3.1. Então,  $x \in C(0, h]$  é uma solução da equação diferencial (19) - (20) se e somente se é uma solução da equação integral de Volterra*

$$x(t) = \sum_{k=1}^m \frac{b_k t^{n-k}}{\Gamma(n-k+1)} + \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} f(s, x(s)) ds. \quad (22)$$

**Observação 2.3.** *Nesta observação, argumentaremos por que o uso de derivadas de ordem fracionária segundo Riemann - Liouville não é o mais adequado para a modelagem de sistemas em batelada. De fato, ao observar a equação da integral precebemos porque a solução  $x$  é contínuo no intervalo semi-aberto  $(0, h]$  e não no intervalo fechado  $[0, h]$ .*

*Se  $x$  fosse contínuo ao longo de  $[0, h]$ , então, o lado direito da equação (22) também deveria ser contínuo em  $[0, h]$ . Tendo em consideração a definição de  $m$ , podemos facilmente ver que as parcelas do  $\sum_{k=1}^m \frac{b_k t^{n-k}}{\Gamma(n-k+1)}$  são de fato contínuas em  $[0, h]$  para  $k = 1, 2, \dots, m-1$ . No entanto, o termo ( $k = m$ ) é limitado quando  $x \rightarrow 0$ , haja visto que  $m > n$ , com  $n \notin \mathbb{N}$  a menos que  $b_m = 0$ .*

Agora estudaremos teoremas e lemas fundamentais para existência de soluções para o problema de valor inicial com derivadas fracionárias segundo Caputo.

**Definição 2.3.1.** O problema de valor inicial com derivada fracionária segundo Caputo é escrito da seguinte forma:

$$D_{*0}^n x(t) = f(t, x(t)), \quad (23)$$

com as condições iniciais

$$D^k x(0) = x_0^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots, m-1 \quad (24)$$

onde operador diferencial de ordem fracionária segundo Caputo é  $D_{*0}^n$ , como definido na Seção 2.2.1.

**Teorema 2.3.3.** Sejam  $0 < n$  e  $m = \lceil n \rceil$ ,  $(x_0^0, \dots, x_0^{(m-1)}) \in \mathbb{R}^n$ ,  $k > 0$  e  $h^* > 0$ . Seja  $G := \{(t, x) : t \in [0, h^*], |x - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k x_0^{(k)}}{k!}| \leq k\}$ . A função  $f : G \rightarrow \mathbb{R}$  é contínua,  $M := \sup_{(t,z) \in G} |f(t, z)|$  e

$$h := \begin{cases} h^* & \text{se } M = 0, \\ \min\{h^*, \frac{(k\Gamma(n+1))^{\frac{1}{n}}}{M}\} & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (25)$$

Então, existe uma função  $x \in C[0, h]$  solução o problema de valor inicial definido (23)-(24).

**Lema 2.3.4.** Nas mesmas hipóteses do Teorema 2.3.3. Temos que  $x \in C[0, h]$  é uma solução do problema de valor inicial (23) - (24) se e somente se é uma solução da equação integral de Volterra não - linear do segundo tipo

$$x(t) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k}{k!} x_0^{(k)} + \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} f(s, x(s)) ds \quad (26)$$

onde  $m = \lceil n \rceil$ .

**Observação 2.4.** Usando a observação 2.3 e usando os Lemas 2.3.2 e 2.3.4, podemos comparar o comportamento das soluções de equações diferenciais fracionárias segundo Caputo com as de Riemann - Liouville. Ao fazer isso descobrimos que o problema de continuidade na origem encontrado para Riemann - Liouville não ocorre para Caputo. Pelo contrário, verificamos que a continuidade da função  $f$  implica na continuidade da solução  $x$  durante todo intervalo fechado  $[0, h]$ .

**Observação 2.5.** Se olharmos para equação (26) para algum  $n \in (0, 1]$  e para dois valores diferentes de  $t$ , digamos  $t_1$  e  $t_2$  com  $t_1 < t_2$ , e subtrairmos a segunda destas

equações pela primeira, obtemos que:

$$\begin{aligned}
 x(t_2) - x(t_1) &= \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{t_2} (t_2 - s)^{n-1} f(s, x(s)) ds \\
 &\quad - \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{t_1} (t_1 - s)^{n-1} f(s, x(s)) ds \\
 &= \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{t_1} [(t_2 - s)^{n-1} - (t_1 - s)^{n-1}] f(s, x(s)) ds \\
 &\quad + \frac{1}{\Gamma(n)} \int_{t_1}^{t_2} (t_2 - s)^{n-1} f(s, x(s)) ds.
 \end{aligned} \tag{27}$$

Agora, vamos considerar o caso clássico (não - fracionário) onde  $n = 1$ . Se analisarmos o lado direito da equação (27) ela vai ser zero e, portanto, a integral toda desaparece. Então esta equação implica que  $x(t_1)$  é a solução de nosso problema de valor inicial dado (23) - (24) no ponto  $x(t_1)$  e, em seguida, nós podemos calcular a solução em  $t_2$  com  $t_2 > t_1$  exclusivamente com base em  $x(t_1)$  e a função  $f$ . Não precisamos usar qualquer informação em  $x(t)$  para  $t \in [0, t_1)$ . Esta observação é apenas outra maneira de expressar a localidade de ordem inteira do operador diferencial. Este é a base de quase todos os métodos numéricos clássicos da solução de equações diferenciais de primeira ordem. Também é fundamental para a modelagem matemática de muitos sistemas na Física, engenharia e outras ciências porque ele afirma que isso é suficiente para analisar o estado da primeira ordem de um sistema em um ponto arbitrário na hora de calcular o seu comportamento no futuro.

Quando analisamos o caso fracionário  $0 < n < 1$  a situação é fundamentalmente diferente. Nesse caso a primeira integral do lado direito da equação (27) não desaparece.

Portanto, sempre que queremos calcular a solução  $x(t_2)$ , em algum momento  $t_2$ , é necessário considerar o que acontece no ponto inicial 0 e levar em conta toda a informação até o ponto de interesse  $t_2$ . Isso reflete a não - localidade dos operadores diferenciais segundo Caputo. Obviamente, essa observação tem uma influência substancial sobre a construção de métodos numéricos para tais equações. Além disso, para a modelagem de um sistema de ordem fracionária, com fenômenos reais, interpretarmos o termo que não se anula como um termo que descreve sistemas com memória. Claro que as derivadas segundo Riemann - Liouville são não locais também.

**Observação 2.6.** Como afirmado na observação anterior, a equação (27) tem um grande impacto sobre a base teórica para os métodos numéricos para equações diferenciais fracionárias. O método padrão geralmente funciona corretamente mas, muitas vezes, não faz o uso de todo o poder desta equação, pois o mesmo termo entre parênteses no lado direito da equação (27) não é nulo, ele vai ser muito pequeno em magnitude em determinadas situações (por exemplo se  $t_1$  e  $t_2$  são suficientemente grandes em comparação com  $t_2 - t_1$ ).

Quando analisamos o problema de valor inicial com derivadas fracionárias percebemos que o método de Caputo é mais adequado para aplicações em sistemas biológicos que Riemann - Liouville visto que a derivada de uma constante é nula. Além disso, as condições iniciais em sistemas de EDO's fracionárias dependem de condições que são fisicamente interpretáveis. Mesmo que derivadas de ordem fracionária segundo Riemann - Liouville seja bem posto (existência e unicidade de solução), depende de condições iniciais que não necessariamente possuem uma interpretação do ponto de vista biológico (8). Logo, para modelar o problema de conversão de glicerol em 1,3 - propanodiol utilizaremos a derivada fracionária segundo Caputo.

## 2.4 Boa colocação para sistemas de equações diferenciais fracionárias segundo Caputo

Nesta seção estudaremos resultados de existência, unicidade e dependência contínua dos dados iniciais (boa colocação segundo Hadamard) para sistemas de equações com derivada de ordem inteira e de ordem fracionárias. Nosso objetivo é garantir resultados suficientes com respeito a boa colocação do sistema de EDO's de ordem fracionária que modelam o problema que estudaremos.

A ideia é fazer um paralelo com o problema envolvendo derivadas de ordem  $n$  não inteiras que serão apresentadas posteriormente. Em particular, para  $n = 1$  temos:

**Definição 2.4.1.** (*Problema de valor inicial ou Problema de Cauchy*) Seja  $U$  contido em  $I \times E$  onde  $I$  é um intervalo não degenerado da reta e  $E$  é um espaço vetorial normado completo. Seja a função  $f : U \rightarrow E$  uma aplicação pelo menos contínua. Fixado um par  $(t_0, x_0) \in U$ , chamado problema de valor inicial (PVI) para a equação diferencial ordinária dada por  $f$  ou de problema de Cauchy associado a  $f$  com valor inicial  $(t_0, x_0)$  ao problema definido formalmente por:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}x(t) = f(t, x(t)) \\ x(t_0) = x_0. \end{cases} \quad (28)$$

Nosso próximo passo é definir o que entendemos por uma solução do problema de Cauchy (28).

**Definição 2.4.2.** Uma função  $\varphi : I \rightarrow E$  (onde  $I$  é intervalo não degenerado da reta contendo  $t_0$ ) é uma solução do problema de Cauchy dado por  $f$  com valor inicial  $(t_0, x_0)$  se  $\varphi$  satisfaz a equação (28) e  $\varphi(t_0) = x_0$ .

Nossa próxima definição é uma condição suficiente para garantir resultados de existência e unicidade para o problema de Cauchy apresentado na definição 2.4.1.

**Definição 2.4.3.** (Condição de Lipschitz) Seja  $f : U \longrightarrow E$  uma função definida em um conjunto aberto  $U \subset I \times E$ , onde  $I$  e  $E$  são como na definição 2.4.1.

Dizemos que  $f$  satisfaz a condição de Lipschitz com relação a segunda variável, se existir uma constante  $L > 0$  tal que  $|f(t, y) - f(t, z)| \leq L|y - z|$  para quaisquer  $(t, y), (t, z) \in U$ .

O próximo teorema garante que, se  $f$  é Lipschitziana com relação a segunda variável, então o sistema de EDO's (28) possui uma única solução.

**Teorema 2.4.1.** Seja  $f : U \longrightarrow \mathbb{R}^n$  uma aplicação contínua, aberto  $U \subseteq \mathbb{R}^{n+1}$ . Se  $[a, b] \times \mathbb{R}^n \subseteq U$  e  $f$  é lipschitziana em  $[a, b] \times \mathbb{R}^n$ . Então, para quaisquer  $t_0 \in [a, b]$  e  $x_0 \in \mathbb{R}^n$ , existe uma única solução do problema de valor inicial definida no intervalo  $[a, b]$ .

**Demonstração 2.4.2.** Esta demonstração é bem conhecida da teoria de EDO's e a maneira clássica de provar este resultado é escrever o problema como uma equação de Volterra e provar que o operador associado possui um único ponto fixo (9, Teorema 10.2 pg. 382).

**Lema 2.4.3.** (Dependência contínua dos dados iniciais) Consideremos  $f_j : U \longrightarrow \mathbb{R}^n$  uma sequência de aplicações contínuas definidas em  $U \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ , com  $f_j \longrightarrow f_0$  uniformemente em subconjuntos compactos de  $U$ . Dada uma sequência  $(t_j, x_j)$ , com  $(t_j, x_j) \longrightarrow (t_0, x_0)$ , se o problema de cauchy

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f_k(t, x) \\ x(t_k) = x_k \end{cases} \quad k \geq 0 \quad (29)$$

possui solução maximal única  $\varphi_k$  em  $J_k$ , então  $\forall [a, b] \subset J_0$ , existe  $k_0 = k_0(a, b) \geq 1$  tal que  $j \geq k_0 \Rightarrow J_j \supset [a, b]$  e  $\varphi_k|_{[a, b]} \longrightarrow \varphi_0|_{[a, b]}$  uniformemente.

**Demonstração 2.4.4.** A demonstração (6, Lema 3.11 pg. 58).

## 2.4.1 Resultados de Existência, Unicidade e dependência contínua dos dados iniciais para EDO's com derivadas de ordem fracionárias

Nesta subseção apresentaremos as condições necessárias e suficientes para obter resultados de boa colocação para o modelo com derivadas de ordem fracionária segundo Caputo.

**Definição 2.4.4.** Um problema de valor inicial com derivada fracionária segundo Caputo é definido da seguinte forma:

$$\begin{cases} D_{*0}^n x(t) = f(t, x(t)) \\ D^k x(0) = x_0^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots, m-1. \end{cases} \quad (30)$$

onde operador diferencial de ordem fracionária segundo Caputo é  $D_{*0}^n$ , esta definido no Seção 2.2.1 e  $D^k x(0)$  é a condição inicial.

Nosso primeiro resultado desta seção vai em direção a provar existência de uma solução do PVI (30). Neste sentido, temos que formalizar o que entendemos por uma solução do PVI (30).

**Lema 2.4.5.** *Dadas as mesmas hipóteses do Teorema 2.3.3. Então,  $x \in C[0, h]$  é uma solução do problema de valor inicial (30) se e somente se essa solução é solução da equação integral de Volterra não-linear do segundo tipo*

$$x(t) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k}{k!} x_0^{(k)} + \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} f(s, x(s)) ds \quad (31)$$

onde  $m = \lceil n \rceil$ .

**Demonstração 2.4.6.** *Primeiramente definimos  $z(t) := f(t, x(t))$ . Notemos que dadas as hipóteses sobre  $x$  e  $f$  temos que  $z \in C[0, h]$ . Em seguida, usando a definição do operador diferencial do Caputo reescrevemos a equação:*

$$\begin{aligned} z(t) &= f(t, x(t)) = D_{*0}^n x(t) = D_0^n (x - T_{m-1}[x; 0])(t) \\ &= D^m J_0^{m-n} (x - T_{m-1}[x; 0])(t). \end{aligned}$$

Uma vez que estamos lidando com funções contínuas, podemos aplicar o operador  $J_0^m$  em ambos os lados e encontrar

$$J_0^m z(t) = J_0^{m-n} (x - T_{m-1}[x; 0])(t) + q(t)$$

com  $q$  um polinomial de grau não superior a  $(m-1)$ . Como  $z$  é contínua, a função  $J_0^m z$  no lado esquerdo da equação acima tem um zero de ordem  $m$  na origem. Além disso, a diferença  $x - T_{m-1}[x; 0]$  tem a mesma propriedade por construção e, portanto, a função  $J_0^{m-n} (x - T_{m-1}[x; 0])$  no lado direito da nossa equação tem um zero de ordem  $m$  na origem também. Assim, resta que o polinômio  $q$  tem a mesma propriedade e podemos então deduzir imediatamente (desde que seu grau não seja superior  $m-1$ ) que:

$$J_0^m z(t) = J_0^{m-n} (x - T_{m-1}[x; 0])(t).$$

Agora aplicando o operador de Riemann - Liouville  $D_0^{m-n}$  para esta equação deduzimos que

$$\begin{aligned} x(t) - T_{m-1}[x; 0](t) &= D_0^{m-n} J_0^m z(t) = D^1 J_0^{1+n-m} J_0^m z(t) \\ &= D J_0^{1+n} z(t) = J_0^n z(t). \end{aligned}$$

Recordando as definições e que  $T_{m-1}$  é o polinômio de Taylor em  $[x; 0]$ , obtemos que é uma condição necessária para  $x$  ser solução do problema (30) satisfazer a equação integral de Volterra.

O resultado abaixo é uma adaptação do clássico Teorema de Peano (6) para sistemas de EDO's de ordem inteira. Seguiremos os passos apresentados em (8, Teorema 6.1 pg.86).

**Teorema 2.4.7. (Existência)** *Sejam  $0 < n$ ,  $m = \lceil n \rceil$ ,  $x_0^0, \dots, x_0^{(m-1)} \in \mathbb{R}$ ,  $k > 0$ ,  $h^* > 0$  e  $G := \{(t, x) : t \in [0, h^*], |x - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k x_0^k}{k!}| \leq k\}$ , sendo a função  $f : G \rightarrow \mathbb{R}$  contínua,  $M := \sup_{(t,z) \in G} |f(t, z)|$  e*

$$h := \begin{cases} h^* & \text{se } M = 0, \\ \min\{h^*, \frac{k\Gamma(n+1)\frac{1}{n}}{M}\} & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (32)$$

Então, existe uma função  $x \in C[0, h]$  que resolve o problema de valor inicial definido (30).

**Demonstração 2.4.8.** *No caso em que  $M = 0$ , temos que  $f(t, x) = 0$  para todos  $(t, x) \in G$ . Portanto, a função  $x : [0, h] \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $x(t) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{x_0^{(k)} t^k}{k!}$  é solução do problema de valor inicial (30).*

Assim, apresentamos o polinômio  $T$  que satisfaz as condições iniciais, tal que

$$T(t) := \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k}{k!} x_0^{(k)} \quad (33)$$

e o conjunto  $U := \{x \in C[0, h] : \|x - T\|_\infty \leq K\}$ . É evidente que  $U$  é um subconjunto fechado e convexo do espaço de Banach de todas as funções contínuas em  $[0, h]$ , com a norma de Chebyshev. Portanto,  $U$  também é um espaço de Banach (18). Como o polinômio  $T$  é um elemento de  $U$ , vemos também que  $U$  não é vazio. Sobre este conjunto  $U$ , definimos o operador  $A$  por

$$(Ax)(t) := T(t) + \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} f(s, x(s)) ds. \quad (34)$$

Usando esse operador, a equação cuja solvabilidade precisamos provar pode ser reescrita como  $x = Ax$ .

E assim, a fim de provar o nosso resultado desejado de existência, temos que mostrar que temos um ponto fixo. Vamos, portanto, proceder por investigar as propriedades do operador  $A$  mais de perto.

**Afirmção 1:**  $Ax \in U$  para qualquer  $x \in U$ .

De fato, seja  $0 \leq t_1 \leq t_2 \leq h$ , então:

$$\begin{aligned}
 |(Ax)(t_1) - (Ax)(t_2)| &= \frac{1}{\Gamma(n)} \left| \int_0^{t_1} (t_1 - s)^{n-1} f(s, x(s)) ds - \int_0^{t_2} (t_2 - s)^{n-1} f(s, x(s)) ds \right| \\
 &= \frac{1}{\Gamma(n)} \left| \int_0^{t_1} ((t_1 - s)^{n-1} - (t_2 - s)^{n-1}) f(s, x(s)) ds \right. \\
 &\quad \left. + \int_{t_1}^{t_2} (t_2 - s)^{n-1} f(s, x(s)) ds \right| \\
 &\leq \frac{M}{\Gamma(n)} \left( \int_0^{t_1} |(t_1 - s)^{n-1} - (t_2 - s)^{n-1}| ds + \int_{t_1}^{t_2} (t_2 - s)^{n-1} ds \right).
 \end{aligned}$$

Note que a segunda integral no lado direito da equação acima tem o valor  $\frac{(t_2 - t_1)^n}{n}$ . Para a primeira integral, olhamos para os três casos  $n = 1$ ,  $n < 1$  e  $n > 1$ , separadamente.

Para  $n = 1$ , o integrando é identicamente nulo, e, portanto, a integral tem o valor zero.

Para  $n < 1$ , temos  $n - 1 < 0$  e, portanto,  $(t_1 - s)^{n-1} \geq (t_2 - s)^{n-1}$ . Assim,

$$\begin{aligned}
 \int_0^{t_1} |(t_1 - s)^{n-1} - (t_2 - s)^{n-1}| ds &= \int_0^{t_1} ((t_1 - s)^{n-1} - (t_2 - s)^{n-1}) ds \\
 &= \frac{1}{n} (t_1^n - t_2^n + (t_2 - t_1)^n) \\
 &\leq \frac{1}{n} (t_2 - t_1)^n.
 \end{aligned}$$

Finalmente, se  $n > 1$  então  $(t_1 - s)^{n-1} \leq (t_2 - s)^{n-1}$  e, portanto,

$$\begin{aligned}
 \int_0^{t_1} |(t_1 - s)^{n-1} - (t_2 - s)^{n-1}| ds &= \int_0^{t_1} ((t_2 - s)^{n-1} - (t_1 - s)^{n-1}) ds \\
 &= \frac{1}{n} (-t_1^n + t_2^n - (t_2 - t_1)^n) \\
 &\leq \frac{1}{n} (t_2^n - t_1^n).
 \end{aligned}$$

Da combinação destes resultados, obtemos:

$$|(Ax)(t_1) - (Ax)(t_2)| \leq \begin{cases} \frac{2M}{\Gamma(n+1)} (t_2 - t_1)^n & \text{se } n \leq 1, \\ \frac{M}{\Gamma(n+1)} ((t_2 - t_1)^n + t_2^n - t_1^n), & \text{se } n > 1. \end{cases} \quad (35)$$

Em ambos os casos, a expressão do lado direito de (35) converge para 0 quando  $t_2 \rightarrow t_1$ . Isso é suficiente para provar que  $Ax$  é uma função contínua. Além disso, para

$x \in U$  e  $t \in [0, h]$  vale que

$$\begin{aligned}
 |(Ax)(t) - T(t)| &= \frac{1}{\Gamma(n)} \left| \int_0^t (t-s)^{n-1} f(s, x(s)) ds \right| \\
 &\leq \frac{1}{\Gamma(n+1)} M t^n \\
 &\leq \frac{1}{\Gamma(n+1)} M h^n \\
 &\leq \frac{1}{\Gamma(n+1)} M \frac{k\Gamma(n+1)}{M} \\
 &= K.
 \end{aligned}$$

Assim, acabamos de mostrar que  $Ax \in U$  para todo  $x \in U$ .

Como nossa intenção é aplicar o teorema de ponto fixo de Schauder, ver no apêndice A.3.2, tudo o que nos resta agora é mostrar que  $A(U) := \{Au : u \in U\}$  é um conjunto relativamente compacto. Isto pode ser feito por meio do Teorema de Arzela - Ascoli definido no apêndice A.3.3. Agora vamos a demonstração deste fato. Para cada  $z \in A(U)$ , descobrimos que, para todos  $t \in [0, h]$ ,

$$\begin{aligned}
 |z(t)| &= |(Ax)(t)| \\
 &\leq \|T\|_\infty + \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} |f(s, x(s))| ds \\
 &\leq \|T\|_\infty + \frac{1}{\Gamma(n+1)} M h^n \\
 &\leq \|T\|_\infty + K,
 \end{aligned}$$

desta forma, provamos a limitação do conjunto  $A(U)$ .

Para provar a continuidade do conjunto  $A(U)$ , vamos considerar novamente os três casos. Claro que para  $n \in \mathbb{N}$ , o resultado segue diretamente pelo Teorema de Existência para EDO's clássico.

Se especificarmos,  $0 \leq t_1 \leq t_2 \leq h$ , encontramos o caso  $n \leq 1$  que

$$|(Ax)(t_1) - (Ax)(t_2)| \leq \frac{2M}{\Gamma(n+1)} (t_2 - t_1)^n.$$

Assim, para  $|t_2 - t_1| < \delta$ , temos

$$|(Ax)(t_1) - (Ax)(t_2)| \leq 2 \frac{M}{\Gamma(n+1)} \delta^n.$$

Observando que a expressão sobre o lado direito é independente de  $x$ ,  $t_1$  e  $t_2$ , vemos que o conjunto  $A(U)$  é contínuo.

Para o caso em que  $n > 1$ , podemos usar o Teorema do Valor Intermediário (ver

apêndice A.3.4) para obtermos que

$$\begin{aligned} |(Ax)(t_1) - (Ax)(t_2)| &\leq \frac{M}{\Gamma(n+1)}((t_2 - t_1)^n + t_2^n - t_1^n) \\ &= \frac{M}{\Gamma(n+1)}((t_2 - t_1)^n + n(t_2 - t_1)\xi^{n+1}) \\ &\leq \frac{M}{\Gamma(n+1)}((t_2 - t_1)^n + n(t_2 - t_1)h^{n-1}) \end{aligned}$$

para algum  $\xi \in [t_1, t_2] \subseteq [0, h]$ . Portanto, mais uma vez, se  $|t_2 - t_1| < \delta$ , então

$$|(Ax)(t_1) - (Ax)(t_2)| \leq \frac{M}{\Gamma(n+1)}(\delta^n + n\delta h^{n-1}). \quad (36)$$

Novamente, o lado direito é independente de  $x$ ,  $t_1$  e  $t_2$ , provando assim a continuidade do conjunto  $A(U)$ . Usando o Teorema de Ascoli-Arzelá (A.3.3), em qualquer um dos casos, concluímos que  $A(U)$  é relativamente compacto. Portanto, pelo Teorema de Ponto Fixo de Schauder (8), obtemos que o operador  $A$  tem um ponto fixo. Por construção, um ponto fixo de  $A$  é uma solução de nosso problema do valor inicial (30).

Notamos que, se  $0 < n \leq 1$ , então o conjunto  $G$  definido no Teorema 2.4.7 é o retângulo (hiper-retângulo)  $G = [0, h^*] \times [x^{(0)} - K, x^{(0)} + K]$ . Agora iremos fazer alguns exemplos de derivadas fracionárias segundo Caputo com a função (33) e após faremos uma observação sobre essa função.

**Exemplo 2.4.9.** Seja  $x(t) = \sum_{k=0}^{m-1} x_0^{(k)} \frac{t^k}{k!}$ . Então a derivada fracionária segundo Caputo de ordem  $n = \frac{1}{2}$  é zero?

De fato se  $n = \frac{1}{2}$  então  $m = 1$ . Se substituirmos o valor de  $m$  em  $x(t)$ , obtemos:

$$x(t) = \sum_{k=0}^{1-1} x_0^{(k)} \frac{t^k}{k!} = \sum_{k=0}^0 x_0^{(k)} \frac{t^k}{k!} = 0.$$

Portanto, fazendo a derivada fracionária segundo Caputo:

$$D_{*a}^{\frac{1}{2}}(0) = J^{\frac{1}{2}}(D^1(0)) = 0.$$

**Exemplo 2.4.10.** Seja  $x(t) = \sum_{k=0}^{m-1} x_0^{(k)} \frac{t^k}{k!}$ . A derivada fracionária segundo Caputo de ordem  $\frac{3}{2}$  é zero?

Se  $n = \frac{3}{2}$  então  $m = 2$ . Se substituirmos o valor de  $m$  em  $x(t)$ , obtemos:

$$x(t) = \sum_{k=0}^{2-1} x_0^{(k)} \frac{t^k}{k!} = \sum_{k=0}^1 x_0^{(k)} \frac{t^k}{k!}.$$

Portanto, fazendo a derivada fracionária segundo Caputo:

$$D_{*a}^{\frac{3}{2}} \sum_{k=0}^1 x_0^{(k)} \frac{t^k}{k!} = J^{\frac{3}{2}}(D^2 \sum_{k=0}^1 x_0^{(k)} \frac{t^k}{k!}) = J^{\frac{3}{2}}(0) = 0.$$

**Observação 2.7.** Percebemos através desses exemplos que a derivada de ordem fracionária segundo Caputo de ordem  $n$  da função  $x(t) = \sum_{k=0}^{m-1} x_0^{(k)} \frac{t^k}{k!}$  é sempre nula.

O próximo resultado é para garantir a unicidade de solução para o PVI (30). A demonstração é muito parecida com a demonstração do caso de derivadas de ordem inteiras.

**Teorema 2.4.11.** (Unicidade) Seja  $0 < n$  e  $m = \lceil n \rceil$ ,  $x_0^{(0)}, \dots, x_0^{(m-1)} \in \mathbb{R}$ ,  $k > 0$  e  $h^* > 0$ . Definido  $G$  no Teorema 2.4.7 e a função  $f : G \rightarrow \mathbb{R}$  satisfazendo a condição de Lipschitz em relação a segunda variável dada na definição (18) com a constante  $L > 0$  independente de  $t$ ,  $x_1$  e  $x_2$ . Para  $h$  como no Teorema 2.4.7, existe uma única função  $x \in C[0, h]$  solução do problema de valor inicial (30).

**Demonstração 2.4.12.** Considere o polinômio  $T$  definido em (33) e o operador  $A$  definido em (34). Ainda, lembremos que o conjunto  $U = \{x \in C[0, h] : \|x - T\|_\infty \leq K\}$  é não-vazio, convexo e fechado. Agora temos que provar que  $A$  tem um único ponto fixo. A fim de fazermos isso, primeiramente provaremos que para cada  $j \in \mathbb{N}_0$ , para todo  $t \in [0, h]$  e para todo  $x, \tilde{x} \in U$ , vale que

$$\|A^j x - A^j \tilde{x}\|_{L_\infty[0, t]} \leq \frac{(Lt^n)^j}{\Gamma(1 + nj)} \|x - \tilde{x}\|_{L_\infty[0, t]}. \quad (37)$$

Isto pode ser feito pelo método de indução. No caso  $j = 0$ , a afirmação é trivialmente verdadeira. Se utilizarmos esse método para  $j - 1 \rightarrow j$ , obtemos

$$\begin{aligned} \|A^j x - A^j \tilde{x}\|_{L_\infty[0, t]} &= \|A(A^{j-1}x) - A(A^{j-1}\tilde{x})\|_{L_\infty[0, t]} \\ &= \frac{1}{\Gamma(n)} \sup_{0 \leq w \leq t} \left| \int_0^w (w-s)^{n-1} [f(s, A^{j-1}x(s)) - f(s, A^{j-1}\tilde{x}(s))] ds \right|. \end{aligned}$$

Usando agora que  $f$  é Lipschitz contínua com relação a segunda variável e a hipótese

de indução, temos

$$\begin{aligned}
\|A^j x - A^j \tilde{x}\|_{L_\infty[0,t]} &\leq \frac{L}{\Gamma(n)} \sup_{0 \leq w \leq t} \int_0^w (w-s)^{n-1} |A^{j-1}x(s) - A^{j-1}\tilde{x}(s)| ds \\
&\leq \frac{L}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} \sup_{0 \leq w \leq s} |A^{j-1}x(w) - A^{j-1}\tilde{x}(w)| ds \\
&\leq \frac{L^j}{\Gamma(n)\Gamma(1+n(j-1))} \int_0^t (t-s)^{n-1} t^{n(j-1)} \sup_{0 \leq w \leq s} \|x(w) - \tilde{x}(w)\| ds \\
&\leq \frac{L^j}{\Gamma(n)\Gamma(1+n(j-1))} \sup_{0 \leq w \leq t} \|x(w) - \tilde{x}(w)\| \int_0^t (t-s)^{n-1} t^{n(j-1)} ds \\
&= \frac{L^j}{\Gamma(n)\Gamma(1+n(j-1))} \|x - \tilde{x}\|_{L_\infty[0,t]} \frac{\Gamma(n)\Gamma(1+n(j-1))}{\Gamma(1+nj)} t^{nj}.
\end{aligned}$$

Como  $t \in [0, h]$ , podemos reformular a estimativa acima em todo o intervalo  $[0, h]$ , obtendo

$$\|A^j x - A^j \tilde{x}\|_\infty \leq \frac{(Lh^n)^j}{\Gamma(1+nj)} \|x - \tilde{x}\|_\infty.$$

Definindo  $\alpha_j = \frac{(Lh^n)^j}{\Gamma(1+nj)}$  temos que a série  $\sum_{j=0}^\infty \alpha_j$  é a representação em séries de potências da função de Mittag-Leffler  $E_N(Lh^n)$  (ver o Apêndice para maiores detalhes A.2). Portanto, converge uniformemente. Assim, o operador  $A$  satisfaz as hipóteses do Teorema de Ponto Fixo de Weisinger's (A.3.1) com  $\alpha_j$  definido acima. Logo, existe uma única solução do PVI (30).

Logo abaixo estudaremos a dependência contínua das derivadas fracionárias através de lemas e teoremas. Primeiramente lembraremos que assumiremos nessa seção que  $x$  é a solução exata do PVI, onde o problema de valor inicial é definido (30).

**Lema 2.4.13.** *Sejam  $n, T, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \in \mathbb{R}_+$  e  $\delta : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$  uma função contínua que satisfaz a seguinte desigualdade*

$$|\delta(t)| \leq \varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_2}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} |\delta(s)| ds$$

para todo  $t \in [0, T]$ . Em seguida

$$|\delta(t)| \leq \varepsilon_1 E_n(\varepsilon_2 t^n)$$

para  $t \in [0, T]$ . Onde,  $E_n$  denotada como a função Mittag - Leffler de ordem  $n$  (ver o Apêndice na definição A.2).

**Demonstração 2.4.14.** *Sejam  $\varepsilon_3 > 0$  e a função  $\Phi(t) := (\varepsilon_1 + \varepsilon_3) E_n(\varepsilon_2 t^n)$ , obtida aplicando o Teorema A.2.5 e usando a linearidade do problema de valor inicial considerando*

a função  $\Phi$  a solução do problema de valor inicial

$$D_{*0}^n \Phi(t) = \varepsilon_2 \Phi(t)$$

onde  $\Phi(0) = \varepsilon_1 + \varepsilon_3$  e  $D^k \Phi(0) = 0$  para  $k = 1, 2, \dots, [n] - 1$ . Considerando o Lema 2.4.5 podemos deduzir que  $\Phi$  satisfaz a equação

$$\Phi(t) = \varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \frac{\varepsilon_2}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} \Phi(s) ds.$$

Pela suposição sobre a função  $\delta$ , descobrimos que  $|\delta(0)| \leq \varepsilon_1 < \varepsilon_1 + \varepsilon_3 = \Phi(0)$ .

Pela continuidade das funções envolvidas podemos deduzir que  $|\delta(t)| < \Phi(t)$  para todo  $t \in [0, \eta]$  com  $\eta > 0$ . Para provar que a desigualdade se mantém ao longo de todo o intervalo  $[0, T]$ , denotamos  $t_0$  como o menor número positivo com a propriedade que  $|\delta(t_0)| = \Phi(t_0)$ . Então, para  $0 \leq t \leq t_0$  temos  $|\delta(t)| \leq \Phi(t)$  e portanto,

$$\begin{aligned} |\delta(t_0)| &\leq \varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_2}{\Gamma(n)} \int_0^{t_0} (t_0 - s)^{n-1} |\delta(s)| ds \\ &\leq \varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_2}{\Gamma(n)} \int_0^{t_0} (t_0 - s)^{n-1} \Phi(s) ds \\ &< \varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \frac{\varepsilon_2}{\Gamma(n)} \int_0^{t_0} (t_0 - s)^{n-1} \Phi(s) ds \\ &= \Phi(t_0). \end{aligned}$$

Note que a igualdade não pode ser verdade, tendo em conta a escolha de  $t_0$ . Assim, a suposição deve ser falsa. Portanto, descobrimos que na verdade

$$|\delta(t)| < \Phi(t) = (\varepsilon_1 + \varepsilon_3) E_n(\varepsilon_2 t^n)$$

para  $t \in [0, T]$  e  $\varepsilon_3 > 0$ , o que resulta no resultado desejado.

**Teorema 2.4.15.** *Seja  $x$  a solução do problema de valor inicial (30) e  $z$  a solução do problema de valor inicial*

$$D_{*0}^n z(t) = f(t, z(t)), \quad (38)$$

$$D^k z(0) = z_0^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots, m-1 \quad (39)$$

Se  $\varepsilon := \max_{k=0,1,\dots,m-1} |x_0^{(k)} - z_0^{(k)}|$  é suficientemente pequeno, então existe algum  $h > 0$  tal que tanto as funções  $x$  e  $z$  estão bem definidas no intervalo  $[0, h]$ , e

$$\sup_{0 \leq t \leq h} |x(t) - z(t)| = O \left( \max_{\{k=0,1,\dots,m-1\}} |x_0^{(k)} - z_0^{(k)}| \right). \quad (40)$$

**Demonstração 2.4.16.** Definindo  $\delta(t) := x(t) - z(t)$ , deduzimos que  $\delta$  é a solução do problema de valor inicial

$$\begin{cases} D_{*0}^n \delta(t) = f(t, x(t)) - f(t, z(t)), \\ D^k \delta(0) = x_0^{(k)} - z_0^{(k)}, \quad k = 0, \dots, m-1. \end{cases} \quad (41)$$

pois o PVI acima satisfaz as hipóteses do Teorema 2.4.7.

Considerando o Lema 2.4.5, o problema de valor inicial é equivalente à equação

$$\delta(t) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k}{k!} (x_0^{(k)} - z_0^{(k)}) + \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} (f(s, x(s)) - f(s, z(s))) ds.$$

Usando desigualdade de Hölder e a condição de Lipchitz de  $f$ , encontramos que:

$$|\delta(t)| \leq \varepsilon \sum_{k=0}^{m-1} \frac{h^k}{k!} + \frac{L}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} |\delta(s)| ds$$

onde  $L$  é a constante de Lipschitz. Pelo Lema 2.4.13, obtemos:

$$|\delta(t)| \leq O(\varepsilon) E_n(Lh^n) = O(\varepsilon)$$

como o desejado.

**Teorema 2.4.17.** Seja  $x$  a solução do problema de valor inicial (30) e  $z$  a solução do problema de valor inicial

$$D_{*0}^n z(t) = \tilde{f}(t, z(t)), \quad (42)$$

$$D^k z(0) = x_0^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots, m-1, \quad (43)$$

onde  $\tilde{f}$  deve satisfazer as mesmas hipóteses de  $f$  e

$$\varepsilon := \max_{(t_1, t_2) \in G} |f(t_1, t_2) - \tilde{f}(t_1, t_2)|. \quad (44)$$

Se  $\varepsilon$  é suficientemente pequeno, então existe  $h > 0$  tal que tanto as funções  $x$  e  $z$  estão bem definidas em  $[0, h]$  e

$$\sup_{0 \leq t \leq h} |x(t) - z(t)| = O(\max_{(t_1, t_2) \in G} |f(t_1, t_2) - \tilde{f}(t_1, t_2)|).$$

**Demonstração 2.4.18.** Primeiramente definiremos  $\delta(t) := x(t) - z(t)$  onde  $\delta$  é a solução

do problema de valor inicial

$$\begin{cases} D_{*0}^n \delta(t) = f(t, x(t)) - \tilde{f}(t, z(t)), \\ D^k \delta(0) = 0, \quad k = 0, 1, \dots, m-1. \end{cases} \quad (45)$$

Isso é equivalente á equação

$$\delta(t) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} (f(s, y(s)) - \tilde{f}(s, z(s))) ds.$$

Usando a hipótese de Lipschitz continuidade de  $f$  e  $\tilde{f}$ , podemos deduzir que

$$\begin{aligned} |\delta(t)| &\leq \int_0^t \frac{(t-s)^{n-1}}{\Gamma(n)} (|f(s, x(s)) - f(s, z(s))| + |f(s, z(s)) - \tilde{f}(s, z(s))|) ds \\ &\leq \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} |\delta(s)| ds + \varepsilon \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} ds \\ &\leq \frac{L}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s) |\delta(s)| ds + \varepsilon \frac{h^n}{\Gamma(n+1)}. \end{aligned}$$

Podemos agora aplicar o Lema 2.4.13 para encontramos novamente

$$|\delta(t)| \leq O(\varepsilon) E_n(Lh^n) = O(\varepsilon).$$

**Teorema 2.4.19.** *Seja  $x$  a solução do PVI (30) e  $z$  a solução do problema de valor inicial*

$$\begin{cases} D_{*0}^{\tilde{n}} z(t) = f(t, z(t)), \\ D^k z(0) = x_0^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots, \tilde{m}-1. \end{cases} \quad (46)$$

onde  $\tilde{n} > n$ ,  $\tilde{m} := \lceil \tilde{n} \rceil$ ,  $\varepsilon := \tilde{n} - n$  e

$$\varepsilon^* := \begin{cases} 0 & \text{se } m = \tilde{m}, \\ \max\{|x_0^{(k)}| : m \leq k \leq \tilde{m}-1\} & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Se  $\varepsilon$  e  $\varepsilon^*$  são suficientemente pequenos, então existe  $h > 0$  tal que tanto  $z$  como  $x$  são funções definidas em  $[0, h]$  e

$$\sup_{0 \leq t \leq h} |x(t) - z(t)| = O(\tilde{n} - n) + O(\max\{0, \max\{|x_0^{(k)}| : m \leq k \leq \tilde{m}-1\}\}).$$

**Demonstração 2.4.20.** *Seja*

$$\begin{aligned}
\delta(t) &:= x(t) - z(t) \\
&= - \sum_{k=m}^{\tilde{m}-1} \frac{t^k}{k!} x_0^{(k)} + \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} f(s, x(s)) ds \\
&\quad - \frac{1}{\Gamma(\tilde{n})} \int_0^t (t-s)^{\tilde{n}-1} f(s, z(s)) ds \\
&= - \sum_{k=m}^{\tilde{m}-1} \frac{t^k}{k!} x_0^{(k)} + \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} (f(s, x(s)) - f(s, z(s))) ds \\
&\quad + \int_0^t \left( \frac{(t-1)^{n-1}}{\Gamma(n)} - \frac{(t-s)^{\tilde{n}-1}}{\Gamma(\tilde{n})} \right) f(s, z(s)) ds.
\end{aligned}$$

*Obviamente a soma é  $O(\varepsilon^*)$ . Logo,*

$$\begin{aligned}
\int_0^t \left| \frac{(t-s)^{n-1}}{\Gamma(n)} - \frac{(t-s)^{\tilde{n}-1}}{\Gamma(\tilde{n})} \right| ds &= \int_0^t \left| \frac{u^{n-1}}{\Gamma(n)} - \frac{u^{\tilde{n}-1}}{\Gamma(\tilde{n})} \right| ds \\
&\leq \int_0^h \left| \frac{u^{n-1}}{\Gamma(n)} - \frac{u^{\tilde{n}-1}}{\Gamma(\tilde{n})} \right| ds \\
&= O(\varepsilon).
\end{aligned}$$

*Podemos calcular a integral explicitamente, entretanto, primeiro temos que achar o zero da integração que está localizado em  $\left( \frac{\Gamma(\tilde{n})}{\Gamma(n)} \right)^{\frac{1}{\tilde{n}-n}}$  (uma quantidade que converge para  $\exp(\psi(n))$  e  $\tilde{n} \rightarrow n$  onde  $\psi = \frac{\Gamma'}{\Gamma}$ ). Se  $h$  é o menor do que esse valor, então o integrando não tem nenhuma mudança de sinal. Caso contrário devemos dividir o intervalo de integração neste ponto. Em qualquer caso, podemos dizer que a expressão resultante é delimitada por  $O(\tilde{n} - n) = O(\varepsilon)$ . Então*

$$|\delta(t)| \leq O(\varepsilon) + O(\varepsilon^*) + \frac{L}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} |\delta(s)| ds$$

*se utilizarmos o Lema 2.4.13 produzimos o resultado desejado.*

**Corolário 2.4.21.** *Assumindo as hipóteses do Teorema 2.4.19 e  $\tilde{m} = m$ , então*

$$\sup_{0 \leq t \leq h} |x(t) - z(t)| = O(\tilde{n} - n).$$

**Corolário 2.4.22.** *Assumindo a hipóteses do Teorema 2.4.19 e sejam  $\tilde{m} > m$  e  $x_0^{(k)} = 0$  para  $k = m, m+1, \dots, \tilde{m}-1$ , então*

$$\sup_{0 \leq t \leq h} |x(t) - z(t)| = O(\tilde{n} - n).$$

### 3 MODELAGEM DO PROBLEMA DE INTERESSE

Uma ideia recorrente no campo de pesquisa chamado de *Sistemas Biológicos* é que a maneira em que células e organismos exercem suas funções não podem ser compreendidos, a menos que se tenha uma visão global do fenômeno. Baseados nesta premissa, entender como diferentes partes do sistema interagem é indispensável para analisar, modelar e prever o comportamento do sistema, em oposição ao entendimento individual de cada célula (indivíduo). Disto surge a necessidade de uma abordagem multidisciplinar do problema, combinando técnicas experimentais, métodos computacionais, ambos amparados por uma teoria matemática consistente, na constituição de modelos preditivos que, por um lado descrevam de maneira precisa sistemas biológicos existentes, por outro lado possam elucidar novas características do sistema que possibilitam descrever uma determinada dinâmica desejada.

Neste capítulo, procuramos descrever características de um sistema biológico em batelada utilizando derivadas de ordem fracionária, conforme descreveremos na próxima seção.

#### 3.1 Sistemas biológicos em batelada

Nesta seção apresentaremos o sistema biológico de interesse que são sistemas em batelada. Sistemas em batelada consistem em ter controle sobre todas as variáveis de entrada, algumas variáveis de estado e as condições de saída. A operação deste sistema pode ser sintetizada da seguinte forma: no instante inicial a solução nutriente é inoculada com os microrganismos e incubado; ao sistema não é imposta nenhuma alteração até o término do processo fermentativo (3), (1), (23) e (24). Dada a complexidade de tais processos, a correspondência entre os dados de entrada e saída ocorrem, geralmente, de forma não - linear. Neste trabalho nos deteremos a estudar o modelo de balanço de biomassa, substrato e produto de culturas em sistemas de batelada, descritos pelo problema da valor inicial fracionário

$$\begin{cases} D_*^n x(t) = f(t, x(t, u)), & t \in [0, T], \\ D^k x(0) = x_0^{(k)} = \xi, & k = 0, 1, \dots, m-1 \end{cases} \quad (47)$$

onde

$$\begin{aligned} f(t, x(t, u)) &= (f_1(t, x(t, u)), f_2(t, x(t, u)), f_3(t, x(t, u)), f_4(t, x(t, u)), f_5(t, x(t, u)))^T \\ &= (\mu x_1(t, u), -q_2 x_1(t, u), q_3 x_1(t, u), q_4 x_1(t, u), q_5 x_1(t, u)) \end{aligned} \quad (48)$$

onde  $x = (x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t), x_5(t))$  é o vetor que contem as concentrações de biomassa, glicerol, 1,3-PD, acetato e etanol no reator, no instante  $t$ , respectivamente. As condições iniciais do sistema são dadas por  $\xi$ . O vetor  $u = (t_l, t_m)$ , é o tempo onde a população deixa o estado de latência e inicia o crescimento exponencial e o momento que  $\mu$  atinge o seu maior índice. A taxa  $\mu$  é o crescimento específico da população biológica,  $q_2$  é a taxa de consumo específica do substrato (glicerol) e  $q_j$ , para  $j = 3, 4, 5$ , são as taxas específicas de formação dos subprodutos (1,3-PD, acetato e etanol). As taxas específicas  $\mu$  e  $q_j$  para  $j = 3, 4, 5$ ; são definidas pelas as expressões abaixo:

$$\mu = \mu_m \exp\left(\frac{-(t - t_m)^2}{2t_l^2}\right) \prod_{i=2}^5 \left(1 - \frac{x_i(t)}{x^*}\right) \quad (49)$$

$$q_2 = m_2 + \frac{\mu}{Y_2} \quad (50)$$

$$q_i = m_i + \mu Y_i, \quad i = 3, 4, 5. \quad (51)$$

onde  $D_*^n x(t)$  representa a derivada de ordem fracionária  $n$  segundo Caputo definida na Seção 2.2.1 para detalhes da definição. Para que as derivadas fracionárias segundo Caputo estejam bem definidas, a partir de agora assumiremos que  $x_j \in A^1[0, T]$ , para  $j = 1, \dots, 5$ .

Uma vez que estamos estudando o sistema em batelada, existem condições críticas  $x_j^*$ , para  $j = 1, \dots, 5$  para a concentração de biomassa, do glicerol, do 1,3 - PD, do acetato e do etanol, para o crescimento das bactérias. Estes valores, bem como os valores dos demais parâmetros utilizados nesta dissertação serão apresentados na tabela abaixo.

Tabela 1: Tabela com os valores dos parâmetros.

| Variável | Valores       |
|----------|---------------|
| $m_2$    | 1,358         |
| $m_3$    | -8,9346       |
| $m_4$    | 2,1098        |
| $m_5$    | -0,183        |
| $t_m$    | 2,944         |
| $t_l$    | 1,769         |
| $\mu_m$  | $0,67h^{-1}$  |
| $x_1^*$  | $10g/L$       |
| $x_2^*$  | $2039mmol/L$  |
| $x_3^*$  | $939,5mmol/L$ |
| $x_4^*$  | $1026mmol/L$  |
| $x_5^*$  | $360,9mmol/L$ |

Dada as restrições necessárias para a bio-conversão em aplicações práticas, consideraremos as concentrações de biomassa, glicerol, 1,3-PD, acetato e etanol restritas ao conjunto

$$W := \{x \in \mathbb{R}^5 / x_1 \in [0,001, x_1^*], \text{ e } x_j \in [0, x_j^*] \quad j = 2, 3, 4, 5\}. \quad (52)$$

O caso particular em que  $n = 1$  já é amplamente estudado na literatura (27). É interessante ressaltar que os resultados na literatura com derivadas de ordem inteira, embora bons, não descrevem de maneira totalmente fidedigna os experimentos realizados na prática. Além disso, um dos problemas das derivadas de ordem inteira é a obtenção de  $f(t, x(t, u))$  que é altamente não linear, como pode ser observado nas equações (48).

Estão entre nossos objetivos neste trabalho estudar o modelo (47) com derivadas de ordem fracionária  $n \in ]0, 1]$ . Em particular, temos a liberdade de escolher este fator no modelo, haja visto que ele é livre. Desta forma, pretendemos descrever de maneira mais fidedigna os resultados obtidos em experimentos práticos. Além disso, como as derivadas de ordem fracionárias possuem propriedades não locais, pretendemos utilizar tais propriedades e analisar a possibilidade de reduzir a alta não linearidade do problema.

Outra possibilidade interessante é descrevermos o sistema acima com derivadas de ordem fracionárias diferentes para cada linha do sistema, que será explorado no futuro.

### 3.2 Propriedades do modelo de bioconversão do glicerol em 1,3 - Propanodiol com derivadas fracionárias

Nesta seção estudaremos propriedades do modelo (47), de forma a garantir a boa colocação do problema usando derivadas de ordem fracionárias propostas neste trabalho.

Começaremos por um resultado simples de análise:

**Lema 3.2.1.** *O conjunto  $W$  definido acima em (52) é um subconjunto compacto do  $\mathbb{R}^5$ .*

**Demonstração 3.2.2.**  *$W$  é um subconjunto fechado e limitado do  $\mathbb{R}^5$ , portanto, compacto.*

O próximo resultado é fundamental para obtermos resultados de boa colocação para o problema estudado.

**Teorema 3.2.3.** *A função  $f(t, x(t))$  definida em (48) é contínua com relação a  $t \in [0, T]$  e  $f$  Lipschitziana com relação a segunda variável em  $W \subset \mathbb{R}^5$ .*

**Demonstração 3.2.4.** *Por hipótese,  $x_j(\cdot)$ ,  $j = 1 \dots, 5$  são contínuas com relação a  $t \in [0, T]$ . Portanto são contínuas as funções da forma  $1 - \frac{x_j(t)}{x_j^*}$ . Agora, a continuidade de  $f$  com relação a variável  $t$  segue do fato que cada coordenada é a soma e o produto de funções contínuas.*

*Para provarmos que  $f$  é Lipschitz contínua com relação a segunda da variável, considere quaisquer funções contínuas  $x, y \in W$ . Segue do Teorema do Valor Médio definido no Apêndice A.3.4, que existe  $\theta \in ]0, 1[$  tal que*

$$f(t, x(t)) - f(t, y(t)) = Jf(t, x(t) + \theta(y(t) - x(t)))(x(t) - y(t))$$

*onde  $Jf(t, x(t) + \theta(y(t) - x(t)))$  representa o Jacobiano de  $f$ . Portanto, temos que*

$$\|f(t, x(t)) - f(t, y(t))\| \leq \|Jf(t, x(t) + \theta(y(t) - x(t)))\| \|x(t) - y(t)\|,$$

*Como as derivadas parciais de  $f$  com relação a cada uma de suas entradas são contínuas (ver os detalhes dos cálculos do Jacobiano no apêndice A.5) e  $[0, T]$  é compacto, segue que a aplicação Jacobiana é uniformemente limitada em  $W$ . Em outras palavras, existe  $L := \max_{t \in [0, T]} \|Jf(t, x(t) + \theta(y(t) - x(t)))\|$ . Assim, concluímos  $f$  é Lipschitz contínua com constante de Lipschitz  $L$ .*

**Corolário 3.2.5.** *Para  $k \in K$  fixo, a função  $f(t, x(t))$  definida em (47) é Lebesgue mensurável em  $t \in [0, T]$ .*

**Demonstração 3.2.6.** *Como cada coordenada de  $f$  é contínua com relação a  $t$ , como provado no Teorema 3.2.3. Portanto, é Lebesgue mensurável (21).*

**Lema 3.2.7.** *A função  $f(t, x(t))$  satisfaz a seguinte condição de crescimento*

$$\|f(t, x(t))\| \leq C(\|x(t)\| + 1)$$

*para  $x(t) \in W$ , onde  $C$  é uma constante que não depende de  $t \in [0, T]$ .*

**Demonstração 3.2.8.** Da definição de  $f$  em (47), temos que

$$\|f(t, x(t))\| = \left( \sum_{j=1}^5 f_j(t, x_1(t)) \right)^{1/2} = \|x_1(t)\|(\mu^2 + \sum_{j=2}^5 q_j^2)^{1/2}. \quad (53)$$

Defina  $a_1 = \max\{Y_2^{-1}, Y_3, Y_4, Y_5, 1\}$  e  $a_2 = \max\{m_2, m_3, m_4, m_5, 0\}$ . Como, para cada  $x \in W$ , temos que  $1 - \frac{x_i(t)}{x_i^*} \leq 1$  para qualquer  $i$ , temos que  $q_j^2 \leq (a_1\mu + a_2)^{1/2} \leq (a_1\mu_m + a_2)^{1/2}$ . Defina  $C := \sqrt{5}(a_1\mu_m + a_2)^{1/2}$ . Então, segue da estimativa (53) que

$$\|f(t, x(t))\| \leq C\|x_1(t)\| \leq C(\|x(t)\| + 1). \quad (54)$$

E o lema está provado.

### 3.3 Resultados de Boa colocação para problema estudado

Nesta seção, vamos verificar que o PVI de ordem fracionária (47) é bem posto no sentido de Hadamard, isto é, vamos garantir resultados de existência, unicidade e dependência contínua para o PVI que estamos propondo.

**Teorema 3.3.1.** Existe uma única solução  $x \in C([0, h], \mathbb{R}^5)$  do PVI (47), onde  $h$  é dado como no Teorema 2.4.7. Além disso, o PVI depende continuamente dos dados iniciais, do lado direito  $f$ , bem como, da ordem da derivada  $n$ .

**Demonstração 3.3.2.** Como  $f$  definida no lado direito do problema (47) é Lipschitziana com relação a segunda variável, como provado no Teorema 3.2.3, segue que as hipóteses dos Teoremas 2.4.7, 2.4.11, 2.4.15, 2.4.17 e 2.4.19 são satisfeitas e, portanto, o teorema está provado.

O próximo resultado está relacionado com os métodos numéricos para resolver EDO's de ordem fracionárias, uma vez que os métodos numéricos que utilizaremos estão baseados em métodos de colocação para resolver integrais como as que aparecem no próximo resultado (12).

**Corolário 3.3.3.** A solução  $x \in C[0, h]$  do problema (47) satisfaz a equação integral de Volterra não-linear do segundo tipo

$$x(t) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k}{k!} x_0^{(k)} + \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} f(s, x(s)) ds \quad (55)$$

onde  $m = \lceil n \rceil$ .

**Demonstração 3.3.4.** De fato, como as hipóteses do Teorema 2.4.7 são satisfeitas, então também são satisfeitas as hipóteses do Lema 2.4.5.

## 4 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo apresentaremos alguns resultados numéricos para a solução do sistema de equações diferenciais fracionárias (47), para alguns valores de  $n \in ]0, 1]$ . Os parâmetros utilizados aparecem na Tabela 1. As condições iniciais do sobprodutos são  $x_1(0) = 0,5$  g/L (Biomassa),  $x_2(0) = 400$  mmol/L (glicerol) e  $x_3(0) = x_4(0) = x_5(0) = 0$  mmol/L (1,3-PD, Acetato, Etanol, respectivamente), haja visto que não há indícios destes subprodutos no início do processo. Os valores correspondentes para as derivadas de ordem fracionária  $n \in ]0, 1]$  utilizadas são apresentados na seção abaixo. Aproveitamos para salientar que, embora seja possível provar resultados de existência, unicidade e dependência contínua para  $n \in \mathbb{R}_+$  para o problema estudado, para o caso em que  $n \in ]1, \infty[$ , o problema necessita de outras condições iniciais, cujos valores não temos acesso. Para este caso faz-se necessário o contato com especialistas na área para determinar condições adequadas ou então obter dados reais para as simulações.

Para a simulação numérica utilizamos os códigos *fde12.m* e o *flmm.m* em linguagem Matlab adaptados de (20).

O método *fde12* utiliza uma combinação de algumas regras de integração para integrandos do tipo produto (como o que aparece na equação de Volterra de segunda espécie (55)), conhecidas como método de Adams-Bashforth-Moulton. Detalhes de convergência, estabilidade e especificações do método podem ser encontradas em (12).

O código *flmm* usa diferentes versões fracionárias de métodos lineares do tipo multi-passos (LMMs) de segunda ordem descritos em (13). Tais métodos podem ser vistos como uma generalização da regra do Trapézio (conhecida como método Tustin), que é de fato uma generalização da fórmula de Newton-Gregory ou ainda, uma generalização do método de diferenciação para a frente.

Ambos os métodos estão baseados na regra de quadratura discreta para convoluções. A regra da quadratura para a convolução é avaliada utilizando a Transformada de Fourier rápida (FFT), reduzindo o custo computacional de  $N^2$  para  $N(\log(N))^2$ , onde  $N$  é o número de pontos de integração no tempo em  $[0, T]$ .

## 4.1 Simulações numéricas

Nessa seção apresentaremos algumas simulações numéricas para diferentes valores de  $n$  (lembrando-os que  $n$  é a ordem da derivada fracionária segundo Caputo) e faremos alguns comentários sobre os resultados encontrados. Em todos os casos mostraremos três gráficos, onde o primeiro aborda a solução do PVI representando todos os subprodutos, o segundo e o terceiro mostra os componentes mais interessantes para o nosso estudo. Estes são o crescimento da biomassa, consumo do glicerol e a produção de 1,3-PD. Em todas as simulações foram utilizados os códigos `fde12.m` e o `flmm.m`, entretanto abaixo mostraremos apenas os gráficos obtidos através do código `fde12.m` visto que seus resultados são idênticos.

Primeiramente simularemos um caso particular em que a derivada é de ordem inteira ( $n = 1, 0$ ), o qual já é amplamente estudado na literatura (27).

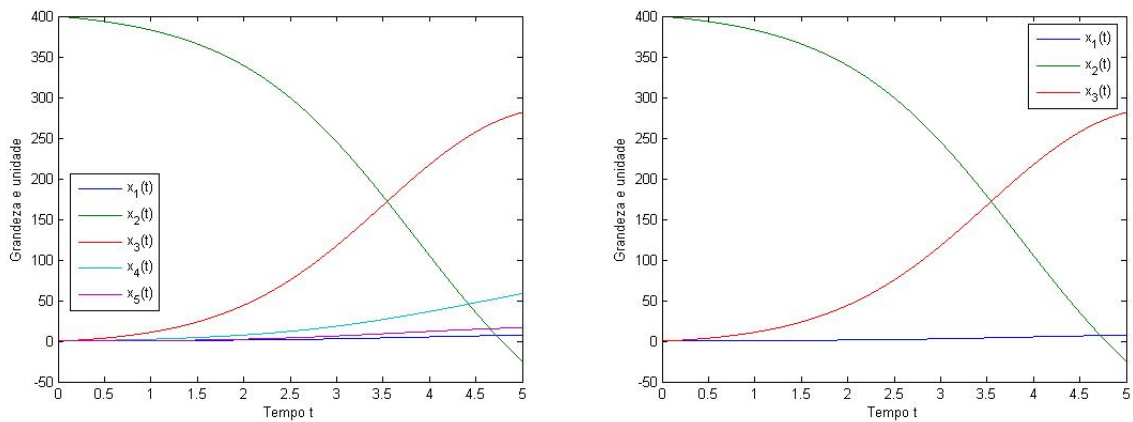


Figura 1: Solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 1$ .

Na figura acima apresentamos os gráficos da solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 1, 0$ , usando o algoritmo `fde12.m`. A figura a esquerda apresenta o comportamento da biomassa ( $x_1(t)$ ), do glicerol ( $x_2(t)$ ), do 1,3-propanodiol ( $x_3(t)$ ), do acetato ( $x_4(t)$ ) e do etanol ( $x_5(t)$ ). Na figura a direita apresentamos somente o comportamento das dinâmicas mais interessantes para o problema, que são a biomassa, o glicerol e o 1,3-PD.

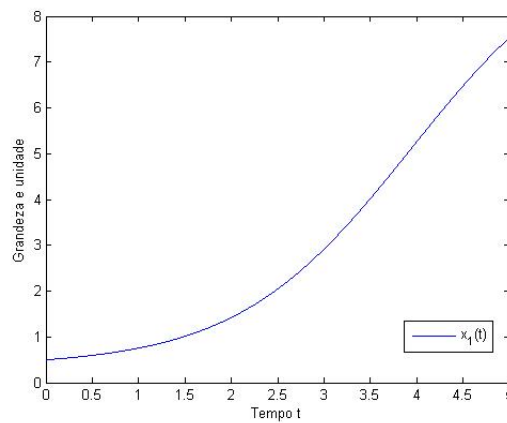


Figura 2: Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para  $n = 1,0$

Se analisarmos os gráficos acima, descobrimos que o máximo de produção 1,3-propanodiol é 273,1746 mmol/L. Obtemos esse valor exatamente no tempo 4,7834 horas, quando o valor da biomassa atingir 7,0947 g/L e o glicerol reduzi-se a 0,0037 mmol/L. Podemos afirmar que a aproximadamente 60% do glicerol foi transformado em 1,3-propanodiol.

Para a ordem da derivada  $n = 0,99$  apresentaremos abaixo os gráficos obtidos utilizando os algoritmos fde12.m e flmm2.m. Como os resultados independem do algoritmo utilizado, apresentaremos somente um deles, utilizando o algoritmo fde12.m. Abaixo apresentaremos algumas tabelas comparativas dos valores obtidos utilizando ambos os algoritmos para comprovar este fato.

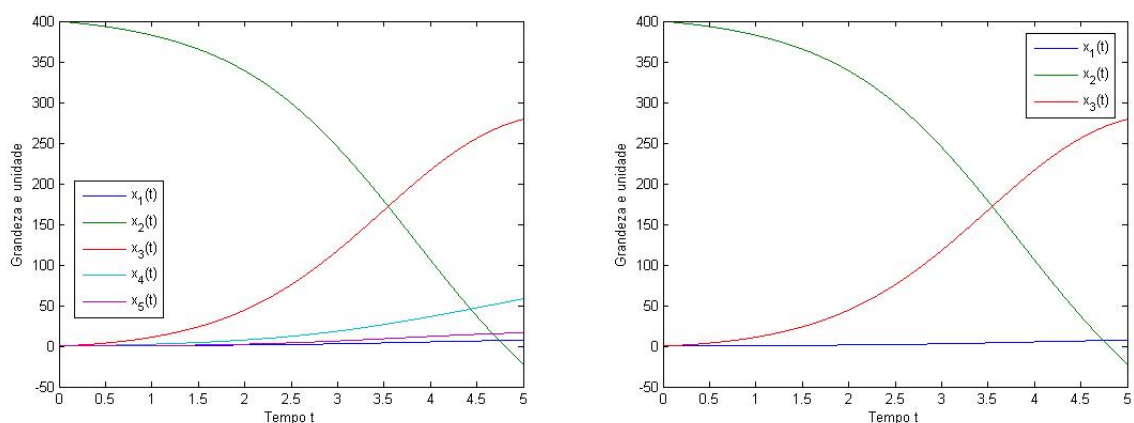


Figura 3: Solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 0,99$ .

Na figura acima apresentamos os gráficos da solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 0.99$ , usando o algoritmo fde12.m. A figura a esquerda apresenta o comportamento da biomassa ( $x_1(t)$ ), do glicerol ( $x_2(t)$ ), do 1,3-propanodiol ( $x_3(t)$ ), do acetato

( $x_4(t)$ ) e do etanol ( $x_5(t)$ ). Na figura a direita apresentamos somente o comportamento das dinâmicas mais interessantes para o problema, que são a biomassa, o glicerol e o 1,3-PD.

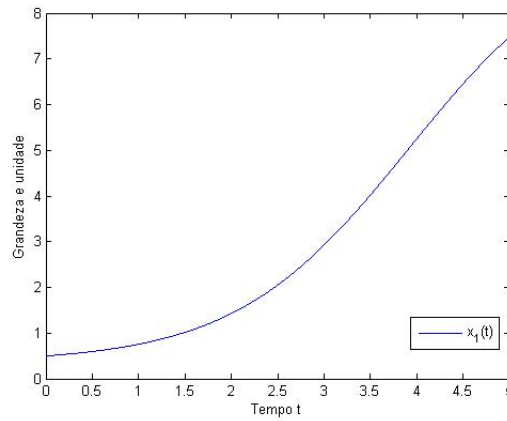


Figura 4: Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para  $n = 0,99$ .

Se analisarmos os gráficos, descobrimos o máximo de produção 1,3-propanodiol é 272,1661 mmol/L. Obtemos esse valor exatamente no tempo 4,8062 horas, quando o valor da biomassa atinge 7,0976 g/L e o glicerol é 0,0066 mmol/L. Podemos notar uma redução na produção total de 1,3-propanodiol e um leve aumento de subprodutos como acetato.

Os próximos gráficos mostram o dinâmica para a ordem da derivada igual a  $n = 0,97$ .

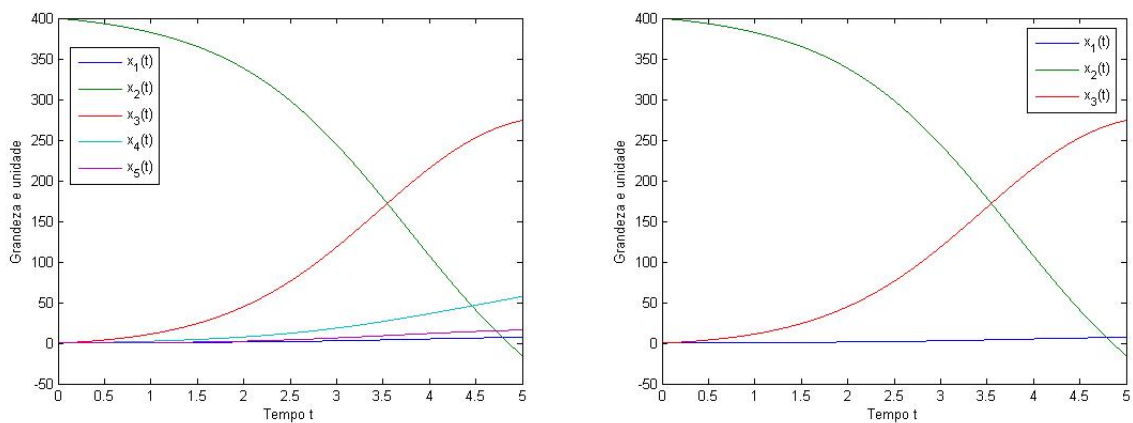


Figura 5: Solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 0,97$ .

Na figura acima apresentamos os gráficos da solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 0,97$ , usando o algoritmo fde12.m. A figura a esquerda apresenta o comportamento da biomassa ( $x_1(t)$ ), do glicerol ( $x_2(t)$ ), do 1,3-propanodiol ( $x_3(t)$ ), do acetato

( $x_4(t)$ ) e do etanol ( $x_5(t)$ ). Na figura a direita apresentamos somente o comportamento das dinâmicas mais interessantes para o problema, que são a biomassa, o glicerol e o 1,3-PD.

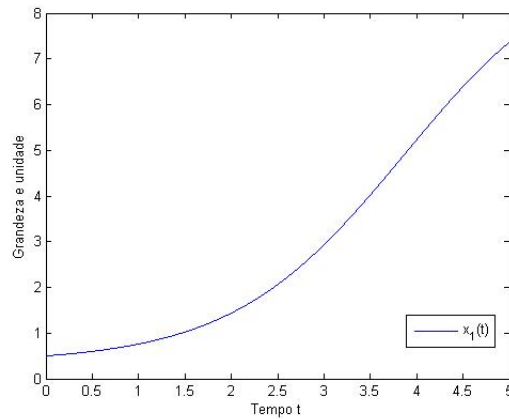


Figura 6: Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para  $n = 0,97$ .

Se analisarmos os gráficos, descobrimos que o máximo de produção 1,3-propanodiol é 269,9101 mmol/L. Obtemos esse valor exatamente no tempo 4,8574 horas, quando o valor da biomassa atinge 7,1030 g/L e o glicerol é 0,0058 mmol/L. Percebe-se uma pequena diminuição da produção de 1,3-propanodiol e um leve aumento dos outros subprodutos.

Para a ordem da derivada  $n = 0,95$  podemos ver os seguintes resultados.

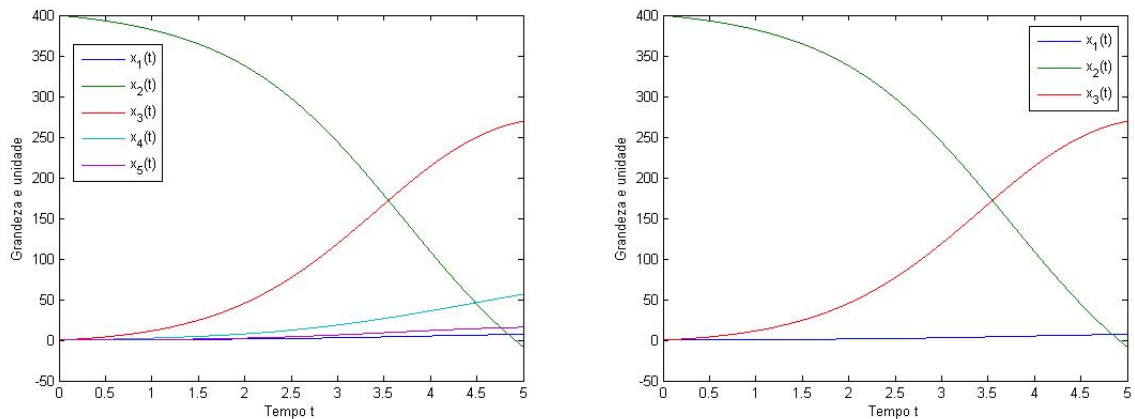


Figura 7: Solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 0,95$ .

Na figura acima apresentamos os gráficos da solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 0,95$ , usando o algoritmo fde12.m. A figura a esquerda apresenta o comportamento da biomassa ( $x_1(t)$ ), do glicerol ( $x_2(t)$ ), do 1,3-propanodiol ( $x_3(t)$ ), do acetato ( $x_4(t)$ ) e do etanol ( $x_5(t)$ ). Na figura a direita apresentamos somente o comportamento

das dinâmicas mais interessantes para o problema, que são a biomassa, o glicerol e o 1,3-PD.

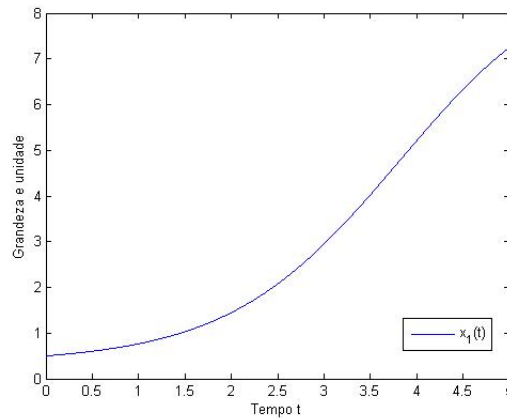


Figura 8: Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para  $n = 0,95$ .

Se analisarmos os gráficos, descobrimos que em ambos os códigos obtemos o máximo de produção 1,3-propanodiol é 267,2467 mmol/L. Obtemos esse valor exatamente no tempo 4,9179 horas, quando o valor da biomassa atinge 7,1075 g/L e o glicerol é 0,0040 mmol/L. Como anteriormente, há uma redução na produção de 1,3-propanodiol com a redução da ordem da derivada.

Para verificar se o fenômeno observado acima, de redução da produção de 1,3-propanodiol com relação a ordem da derivada, apresentaremos abaixo os resultados para  $n = 0,8$ .

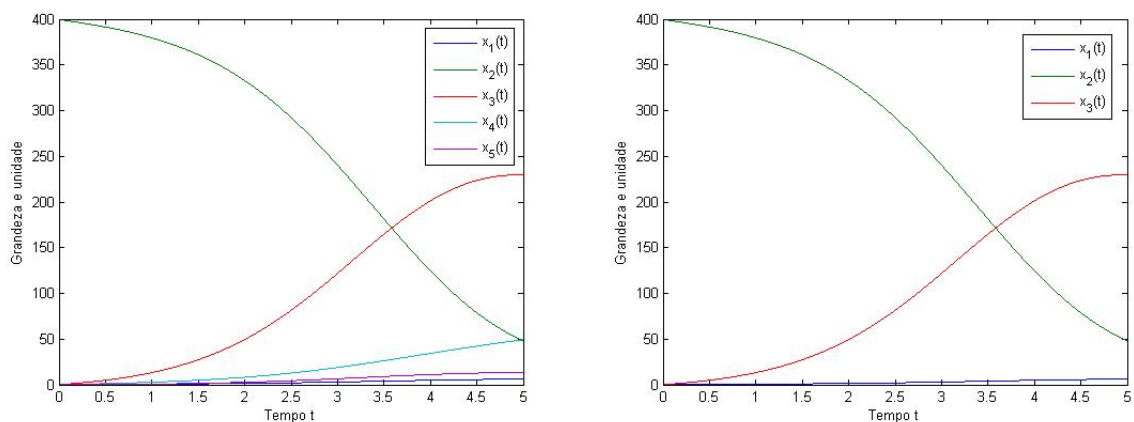


Figura 9: Solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 0,8$ .

Na figura acima apresentamos os gráficos da solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 0, 8$ , usando o algoritmo fde12.m. A figura a esquerda apresenta o comportamento da biomassa ( $x_1(t)$ ), do glicerol ( $x_2(t)$ ), do 1,3-propanodiol ( $x_3(t)$ ), do acetato ( $x_4(t)$ ) e do etanol ( $x_5(t)$ ). Na figura a direita apresentamos somente o comportamento das dinâmicas mais interessantes para o problema, que são a biomassa, o glicerol e o 1,3-PD.

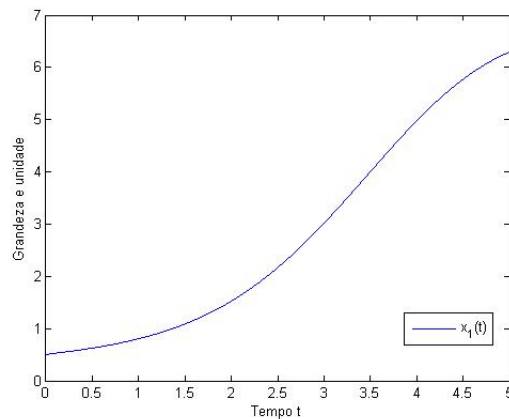


Figura 10: Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para  $n = 0, 8$

Se analisarmos os gráficos, descobrimos que o máximo de produção 1,3-propanodiol é 229, 5137 mmol/L. Obtemos esse valor exatamente no tempo 4, 9297 horas, quando o valor da biomassa atinge 6, 2328 g/L e o glicerol é 51, 7584 mmol/L.

Por fim, apresentamos os resultados para a ordem da derivada  $n = 0, 5$ , como objeto de curiosidade.

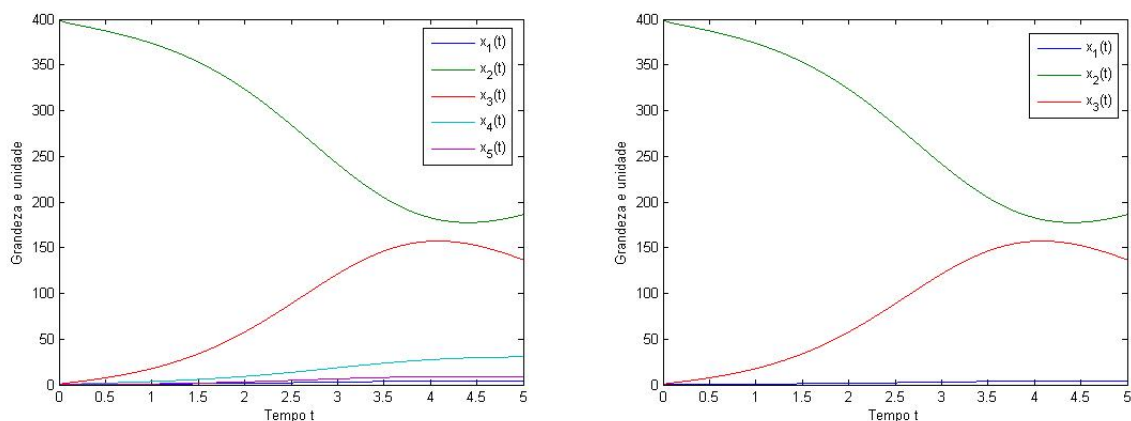


Figura 11: Solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 0, 5$ .

Na figura acima apresentamos os gráficos da solução do PVI (47) para a ordem da derivada  $n = 0, 5$ , usando o algoritmo fde12.m. A figura a esquerda apresenta o compor-

tamento da biomassa ( $x_1(t)$ ), do glicerol ( $x_2(t)$ ), do 1,3-propanodiol ( $x_3(t)$ ), do acetato ( $x_4(t)$ ) e do etanol ( $x_5(t)$ ). Na figura a direita apresentamos somente o comportamento das dinâmicas mais interessantes para o problema, que são a biomassa, o glicerol e o 1,3-PD.

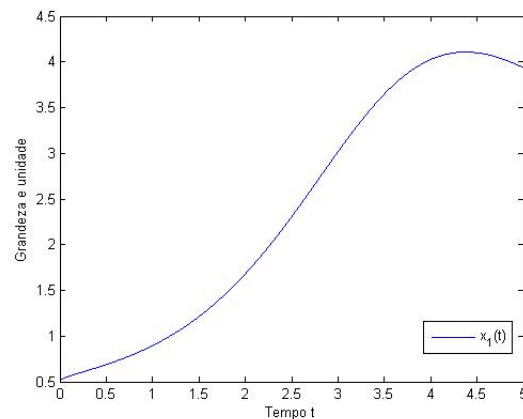


Figura 12: Dinâmica da biomassa como solução do PVI (47) para  $n = 0, 5$ .

Se analisarmos os gráficos descobrimos que o máximo de produção 1,3-propanodiol é 157,2336 mmol/L. Obtemos esse valor exatamente no tempo 4,0867 horas, quando o valor da biomassa atinge 4,0581 g/L e o glicerol é 180,8366 mmol/L.

Tabela 2: Tabela com os valores da solução do modelo do nosso problema usando fde12.m

| $n$  | $t(\text{Tempo})$ | $x_1(t)(\text{Biomassa})$ | $x_2(t)(\text{Glicerol})$ | $x_3(t)(1,3 - \text{Propanodiol})$ |
|------|-------------------|---------------------------|---------------------------|------------------------------------|
| 1,0  | 4,7834 horas      | 7,0947 g/L                | 0,0037 mmol/L             | 273,1746 mmol/L                    |
| 0,99 | 4,8063 horas      | 7,0976 g/L                | 0,0066 mmol/L             | 272,1661 mmol/L                    |
| 0,97 | 4,8063 horas      | 7,1030 g/L                | 0,0058 mmol/L             | 269,9101 mmol/L                    |
| 0,95 | 4,9179 horas      | 7,1075 g/L                | 0,0040 mmol/L             | 267,2467 mmol/L                    |
| 0,8  | 4,9297 horas      | 6,2328 g/L                | 51,7584 mmol/L            | 229,5137 mmol/L                    |
| 0,5  | 4,0867 horas      | 4,0581 g/L                | 180,8366 mmol/L           | 157,2336 mmol/L                    |

Tabela 3: Tabela com os valores da solução do modelo do nosso problema usando flmm2.m

| $n$  | $t(Tempo)$   | $x_1(t)(Biomassa)$ | $x_2(t)(Glicerol)$ | $x_3(t)(1,3 - Propanodiol)$ |
|------|--------------|--------------------|--------------------|-----------------------------|
| 1,0  | 4,7836 horas | 7,0947 g/L         | 0,0037 mmol/L      | 273,1746 mmol/L             |
| 0,99 | 4,8062 horas | 7,0976 g/L         | 0,0066 mmol/L      | 272,1661 mmol/L             |
| 0,97 | 4,8063 horas | 7,0976 g/L         | 0,0066 mmol/L      | 272,1661 mmol/L             |
| 0,95 | 4,9179 horas | 7,1075 g/L         | 0,0040 mmol/L      | 267,2467 mmol/L             |
| 0,8  | 4,9311 horas | 6,2340 g/L         | 51,6872 mmol/L     | 229,5139 mmol/L             |
| 0,5  | 4,0870 horas | 4,0582 g/L         | 180,8302 mmol/L    | 157,2337 mmol/L             |

Algumas conclusões a cerca dos resultados obtidos:

- Se observarmos os valores das tabelas percebemos que o melhor resultado encontrado que descreve o nosso problema considerando as derivadas fracionárias segundo Caputo são obtidos para em torno de  $n = 1$ .
- A produção de 1,3-propanodiol diminui diretamente proporcional a ordem da derivada.

A seguir apresetaremos os gráficos comparativos entre as ordens das derivadas e os subprodutos do processo. Nota-se que a produção dos sub-produtos, 1,3-propanodiol, acetato e etanol, bem como o crescimento da biomassa e o crescimento do consumo do glicerol são maiores quanto menor for o valor da ordem da derivada  $n$ , até o ponto  $t_m$ . Depois este comportamento se inverte. Isso significa que o que pode estar acontecendo é que o valor de  $t_m$  usado não seja o ótimo. O mesmo nos faz pensar que necessitamos calibrar todos os parâmetros do modelo, para cada valor de  $n$ . No entanto, estes assuntos ficarão como trabalhos futuros.

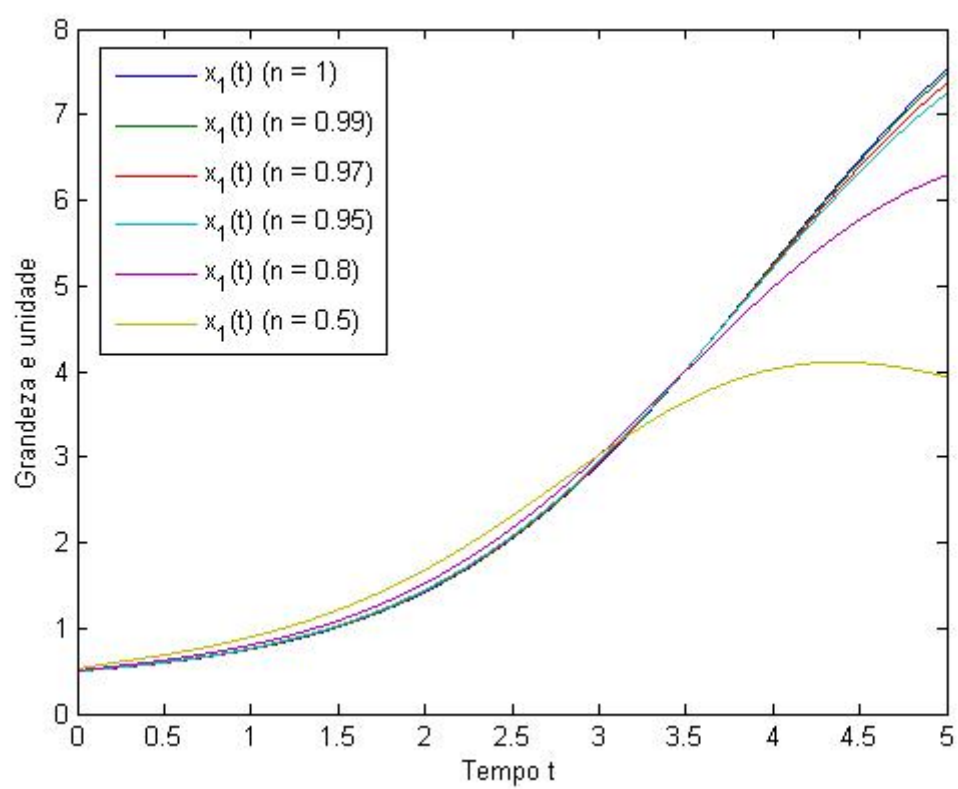


Figura 13: Dinâmica da Biomassa como solução do PVI (47), para diferentes ordens da derivada  $n$ .

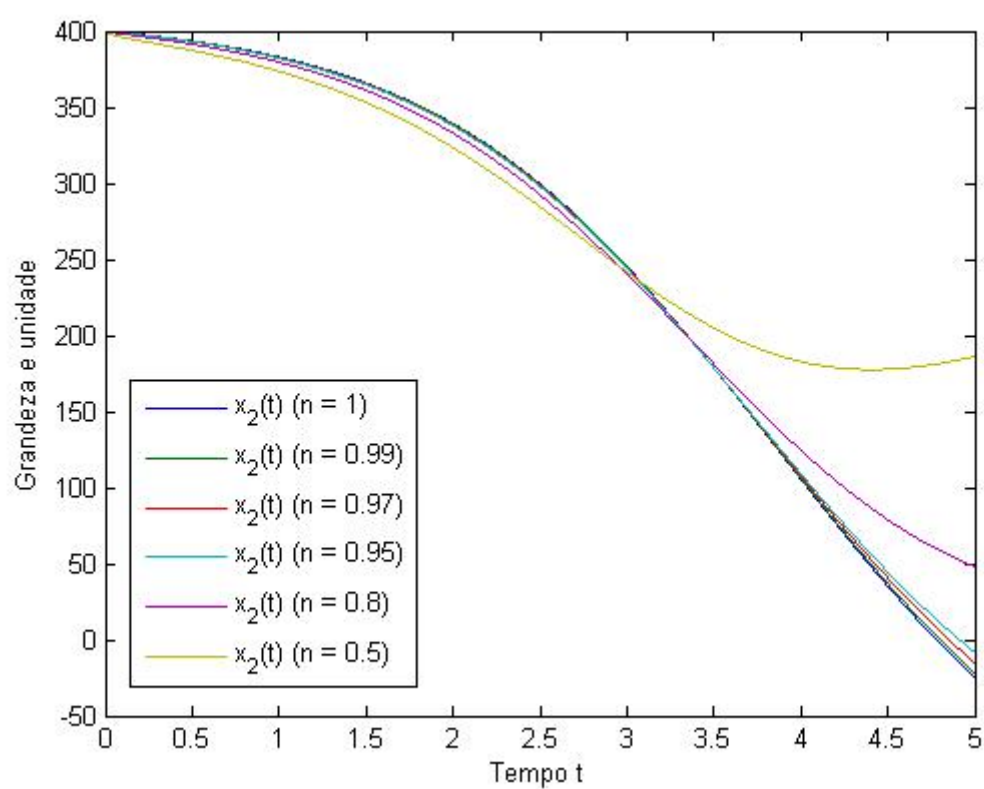


Figura 14: Dinâmica do Glicerol como solução do PVI (47), para diferentes ordens da derivada  $n$ .

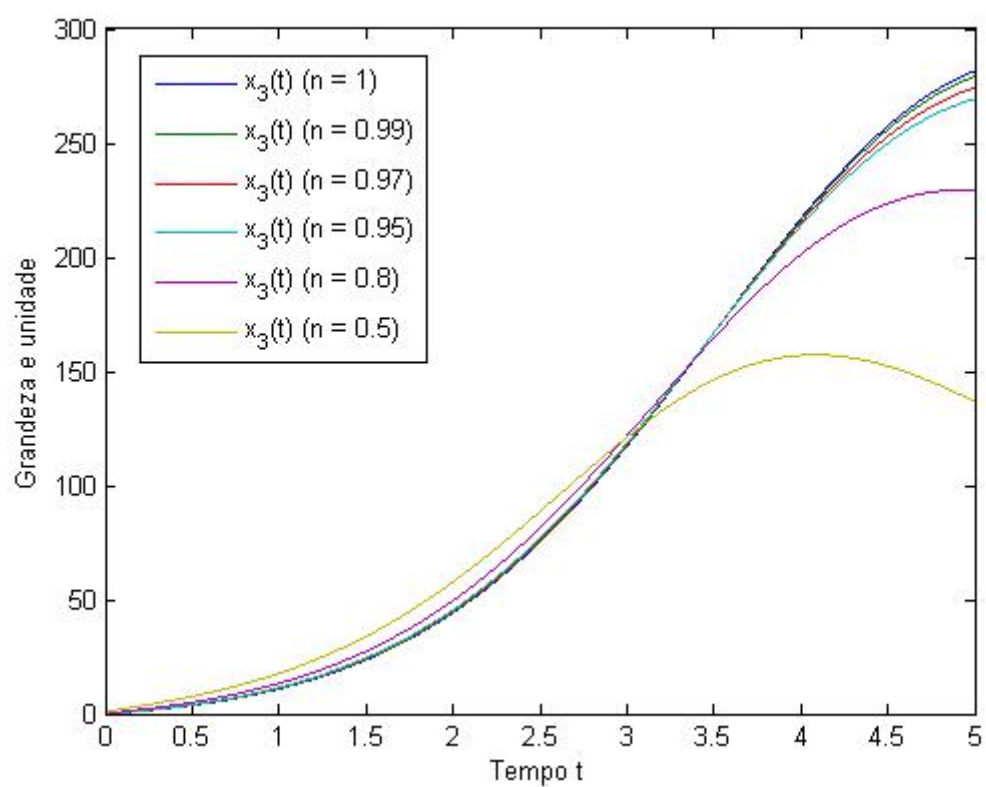


Figura 15: Dinâmica de 1,3 - Propanodiol como solução do PVI (47), para diferentes ordens da derivada  $n$ .

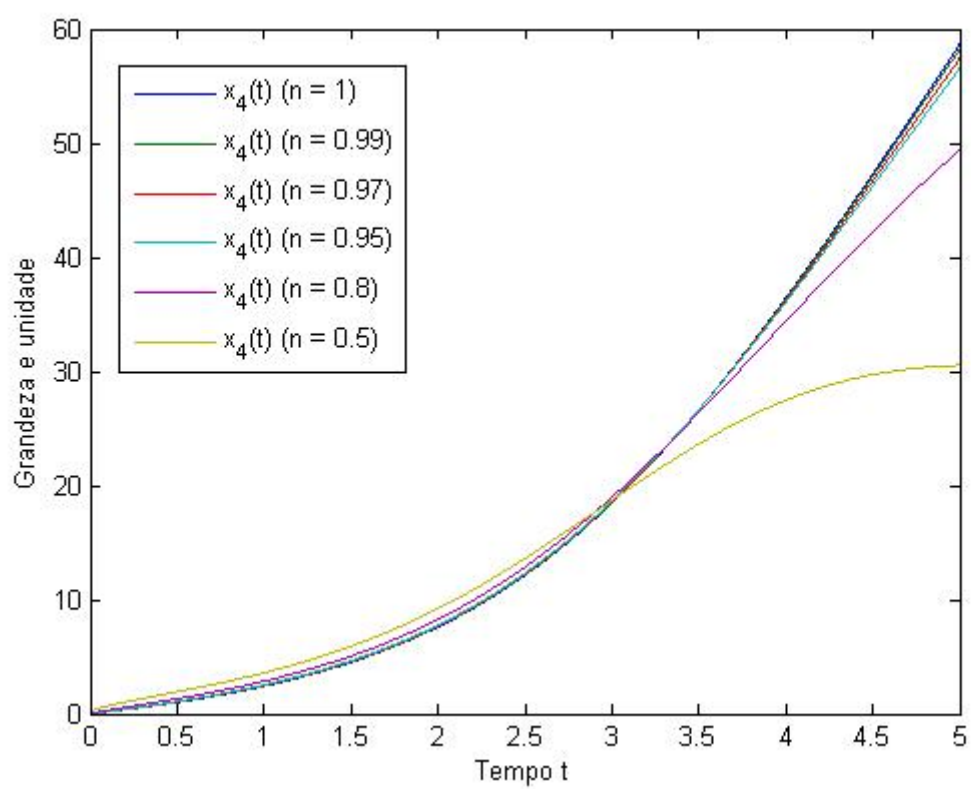


Figura 16: Dinâmica do Acetato como solução do PVI (47), para diferentes ordens da derivada  $n$ .

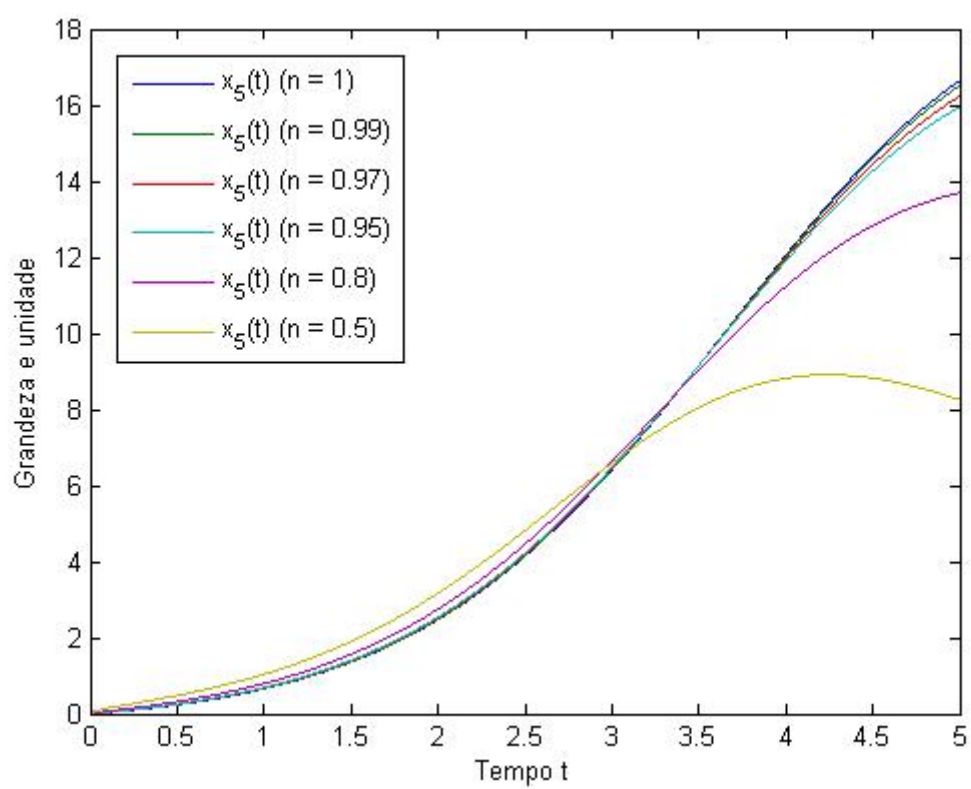


Figura 17: Dinâmica do Etanol como solução do PVI (47), para diferentes ordens da derivada  $n$ .

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho nos propomos a modelagem da bioconversão de glicerol em 1,3-propanodiol utilizando derivadas de ordem fracionárias, em contrapartida a modelagem com derivadas de ordem inteira conhecidas na literatura. Em outras palavras, propomos um modelo de balanço de massa que leva em consideração alguns aspectos de memória, herdados da dinâmica fracionária proposta. Sendo esta umas das principais contribuições e novidades deste trabalho. Provamos para este modelo, resultados de existência, unicidade e dependência contínua dos dados iniciais, dos parâmetros, bem como, é possível obter alguns resultados de dependência contínua com relação a ordem das derivadas.

Com esta abordagem, prevíamos obter resultados melhores para a conversão de glicerol em 1,3-propanodiol. O que podemos concluir dos resultados numéricos é que, enquanto o tempo for menor que  $t_m$ , este fato se confirma, mas não é mantido durante todo o processo. Em outras palavras, observamos pelos experimentos numéricos (que não foram provados teoricamente), dado o conjunto de parâmetros usados, a produção máxima de 1,3-PD é monótona crescente com a ordem da derivada fracionária  $n$ , para  $n \in ]0, 1]$ . Caso seja possível provar tal resultado para  $n \in ]0, 2]$ , nos faltaria acesso a dados numéricos para simulação usando  $n > 1$ . Como não tivemos acesso a dados reais até o presente momento, não podemos afirmar que a modelagem com derivadas de ordem fracionárias seja melhor ou pior que a modelagem com derivadas de ordem inteira. Esta comparação está entre nossos objetivos para trabalhos futuros.

Agora apresentaremos alguns trabalhos futuros a esta dissertação:

1. Utilizamos em nossas simulações numéricas um conjunto de parâmetros que foram obtidos por calibração do modelo com a derivada de ordem 1, em (27). Por este motivo, há a possibilidade de que os resultados obtidos com derivadas de ordem fracionária sejam melhorados a partir do momento que os parâmetros sejam calibrados de acordo com a dinâmica envolvendo tais derivadas. No entanto, isso só será possível se obtivermos dados reais do processo de bioconversão, o qual também é objetivo futuro via contatos com pesquisadores na área de bio-engenharia. O problema de calibração dos parâmetros se encaixa na área de problemas inversos.

2. Com os parâmetros atuais, os resultados numéricos mostraram que as derivadas de ordem 1 produzem a máxima produção de 1,3 - propanoidiol com o consumo máximo do glicerol. No entanto, não investigamos numericamente os resultados para  $n \in ]1, \infty[$ . Não o fizemos por dois motivos distintos: primeiro por não termos dados iniciais suficientes (só possuímos um conjunto de dados iniciais que correspondem ao valor dos bio-reagentes e sub-produtos em  $t = 0$ , os quais não são suficientes para provar resultados de boa-colocação do problema (47)). Em segundo lugar, há a necessidade de mudar os algoritmos utilizados para simular o problema. Como vale a propriedade da soma dos índices da derivada de ordem fracionária como estabelecido no Lema 2.2.10, podemos concluir que as alterações necessárias no algoritmo é primeiro calcular a derivada de ordem inteira e a este valor agregar a derivada de ordem fracionária com  $n \in ]0, 1]$ . Portanto, estão entre nossos objetivos futuros obter dados iniciais correspondentes ao PVI (47), para  $n > 1$  e modificar os algoritmos fde12 e/ou flmm para simular a dinâmica da bio-conversão para tais valores de  $n$ .

## APÊNDICE A TEOREMAS FUNDAMENTAIS

Nesse apêndice descrevemos definições, teoremas e alguns cálculos encontrados, onde primeiramente definiremos a função gama, função de Mittag-Leffler, teoremas de ponto fixo e o teorema do valor médio. Após descreveremos função de Borel e Lebesgue mensuráveis e o Cálculo do operador Jacobiano para o problema estudado.

### A.1 Função Gama

Segundo (25) a função gama também conhecida como integral de Euler do segundo tipo,  $\Gamma(x)$ , é indiscutivelmente a função básica do cálculo fracionário, considerado uma generalização do conceito do fatorial.

**Definição A.1.1.** A função  $\Gamma : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ , é definida por

$$\Gamma(x) := \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt. \quad (56)$$

**Exemplo A.1.1.** Considerando  $x = 1$ , obtemos:

$$\Gamma(1) = \int_0^{\infty} e^{-t} dt = \lim_{z \rightarrow \infty} \int_0^z e^{-t} dt = \lim_{z \rightarrow \infty} [-e^{-t}]_0^z = \lim_{z \rightarrow \infty} (1 - e^{-z}) = 1. \quad (57)$$

**Teorema A.1.2.** Se  $x \in \mathbb{N}$ , então,  $x\Gamma(x) = \Gamma(x+1)$ .

**Demonstração A.1.3.** A prova usa indução matemática. Onde ( $x = 1$ ) obtemos  $\Gamma(1) = 0! = 1$ , que é verdade por (A.1.1). Usando a equação funcional e a hipótese de indução:

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) = x(x-1)! = x!$$

Para definirmos alguns valores da função gama usaremos (A.1.1) e (A.1.2). Sabendo que  $\Gamma(1) = 1$ , conseguiremos então calcular o  $\Gamma(2)$  e  $\Gamma(3)$  utilizando a primeira propriedade. Onde:

$$\Gamma(2) = \Gamma(1+1) = 1\Gamma(1) = 1$$

$$\Gamma(3) = \Gamma(2+1) = 2\Gamma(2) = 2$$

para obter os valores  $\Gamma(4)$ ,  $\Gamma(5)$ ,  $\Gamma(6)$  e assim sucessivamente se utiliza o mesmo método.

Para encontrar alguns valores fracionários, primeiramente devemos calcular o  $\Gamma(\frac{1}{2})$  onde segundo (14) calculamos da seguinte forma:

$$\Gamma(\frac{1}{2}) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{(\frac{1}{2}-1)} dt = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{-\frac{1}{2}} dt.$$

Substituindo

$$t = x^2 \longrightarrow dt = 2x dx$$

obtemos

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} x^{-1} e^{-x^2} 2x dx &= 2 \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx \\ \frac{1}{2} \Gamma(\frac{1}{2}) &= \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx. \end{aligned}$$

Seja

$$I = \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy = \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx$$

então

$$I^2 = \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-y^2} e^{-x^2} dx dy = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-(y^2+x^2)} dx dy.$$

Logo utilizando coordenadas polares definimos que

$$\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-(y^2+x^2)} dx dy = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\infty} r e^{-r^2} dr d\theta.$$

Substituindo  $u = r^2$  derivando temos  $du = 2r dr$ , então

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\infty} \frac{1}{2} e^{-u} du d\theta &= \\ \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left( -\frac{1}{2} e^{-u} \right) \Big|_0^{\infty} d\theta &= \\ \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left( \frac{1}{2} \right) d\theta &= \\ \frac{\pi}{4}. \end{aligned}$$

Sabendo que  $I^2 = \frac{\pi}{4}$ , podemos concluir que  $I = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$  e que  $\frac{1}{2} \Gamma(\frac{1}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ , então  $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$ . A partir desse resultado podemos encontrar outros valores da função gama, como:

$$\Gamma(\frac{3}{2}) = \Gamma(\frac{1}{2} + 1) = \frac{1}{2} \Gamma(\frac{1}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{3}{2} + 1\right) = \frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$$

$$\Gamma\left(\frac{7}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{5}{2} + 1\right) = \frac{5}{2}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{15\sqrt{\pi}}{8}.$$

E assim sucessivamente encontramos outros valores fracionários da função gama. Abaixo está ressaltado outro método (17) utilizado para encontrar os valores da função gama.

Para  $x > 0$ , temos:

$$\left(\frac{1}{2} + n\right) = \frac{(2n)!\sqrt{\pi}}{4^n n!} \quad (58)$$

Para  $x < 0$ , temos:

$$\left(\frac{1}{2} - n\right) = \frac{[-4]^n n! \sqrt{\pi}}{(2n)!} \quad (59)$$

Utilizando a fórmula que foi enunciada logo acima, obtemos os seguintes valores:

$$\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{1}{2} - 1\right) = \frac{[-4]^1 \cdot 1! \sqrt{\pi}}{(2 \cdot 1)!} = -2\sqrt{\pi};$$

$$\Gamma\left(-\frac{3}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{1}{2} - 2\right) = \frac{[-4]^2 \cdot 2! \sqrt{\pi}}{(2 \cdot 2)!} = \frac{4\sqrt{\pi}}{3};$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{1}{2} + 0\right) = \frac{2 \cdot (0)! \sqrt{\pi}}{(4^0) 0!} = \sqrt{\pi};$$

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{2 \cdot (1)! \sqrt{\pi}}{(4^1) 1!} = \frac{\sqrt{\pi}}{2};$$

Tabela 4: Tabela com alguns valores da função gama

| x é número inteiro    | x é número fracionário                                    |
|-----------------------|-----------------------------------------------------------|
| $\Gamma(-1) = \infty$ | $\Gamma\left(-\frac{3}{2}\right) = \frac{4\sqrt{\pi}}{3}$ |
| $\Gamma(0) = \infty$  | $\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) = -2\sqrt{\pi}$          |
| $\Gamma(1) = 1$       | $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$             |
| $\Gamma(2) = 1$       | $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$   |
| $\Gamma(3) = 2$       | $\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$  |
| $\Gamma(4) = 6$       | $\Gamma\left(\frac{7}{2}\right) = \frac{15\sqrt{\pi}}{8}$ |

## A.2 Função Mittag - Leffler

Essa função é fundamental e importante em nosso contexto, e ela será usada em alguns lugares durante toda a dissertação. Nós começamos com dois conceitos após definimos dois teoremas.

**Definição A.2.1.** *Seja  $n > 0$ , a função  $E_n$  definido como*

$$E_n(z) := \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z^j}{\Gamma(jn + 1)}$$

*sempre que a série converge é chamada função de Mittag-Leffler com ordem  $n$ .*

**Definição A.2.2.** *Sejam  $n_1, n_2 > 0$ , a função  $E_{n_1, n_2}$  é definida*

$$E_{n_1, n_2}(z) := \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z^j}{\Gamma(jn_1 + n_2)}$$

*sempre que a série converge é chamado função de Mittag-Leffler com dois parâmetros  $n_1$  e  $n_2$ .*

**Teorema A.2.1.** *Sejam  $n_1, n_2 > 0$  e  $x \in C$ . Então,*

$$E_{n_1, n_2}(x) = xE_{n_1, n_1+n_2}(x) + \frac{1}{\Gamma(n_2)}.$$

**Demonstração A.2.2.** *Interessados nos detalhes podem consultar (8, teorema 4.2 pg. 69).*

**Teorema A.2.3.** *Sejam  $n > 0$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$  e  $x(t) := E_n(\lambda t^n), t \geq 0$ . Então,*

$$D_{*0}^n x(t) = \lambda x(t).$$

**Demonstração A.2.4.** *Se considerarmos  $\lambda = 0$ , note que  $x(t) = E_n(0) = 1$ . Portanto  $D_{*0}^n x(t) = 0 = \lambda x(t)$  conforme o necessário. Por outro lado  $pk(x) := xk$ :*

$$\begin{aligned} D_{*0}^n x(t) &= D_{*0}^n \left[ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\lambda p_n)^j}{\Gamma(1 + jn)} \right] (t) \\ &= J_0^{m-n} D^m \left[ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^j p_{nj}}{\Gamma(1 + jn)} \right] (t) = J_0^{m-n} \left[ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^j D^m p_{nj}}{\Gamma(1 + jn)} \right] (t) \\ &= J_0^{m-n} \left[ \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\lambda^j D^m p_{nj}}{\Gamma(1 + jn)} \right] (t) = J_0^{m-n} \left[ \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\lambda^j p_{nj-n}}{\Gamma(1 + jn - m)} \right] (t) \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\lambda^j J_0^{m-n} p_{nj-m}}{\Gamma(1 + jn - m)} (t) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\lambda^j p_{nj-n}}{\Gamma(1 + jn - n)} (t) \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\lambda^j t^{nj-n}}{\Gamma(1 + jn - n)} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\lambda^j t^{nj}}{\Gamma(1 + jn)} \\ &= \lambda \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\lambda t^n)^j}{\Gamma(1 + jn)} = \lambda x(t). \end{aligned}$$

**Teorema A.2.5.** *Sejam  $n > 0$ ,  $m = \lceil n \rceil$  e  $\lambda \in \mathbb{R}$ . A solução do problema de valor inicial*

$$\begin{cases} D_{*0}^n x(t) = \lambda x(t), \\ x(0) = x_0, \quad x^{(k)}(0) = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, m-1) \end{cases}$$

*é dada por*

$$x(t) = x_0 E_n(\lambda t^n), \quad t \geq 0.$$

**Demonstração A.2.6.** *Interessados nos detalhes podem consultar (8, teorema 6.11 pg. 101).*

### A.3 Teoremas do ponto fixo e teorema do valor médio

**Teorema A.3.1.** *(Teorema do ponto fixo Weissinger) Seja  $(U, d)$  um espaço métrico não-vazio e  $\alpha_j \geq 0$ , para todo  $j \in \mathbb{N}_0$ , tal que  $\sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j$  converge. Se  $A : U \rightarrow U$  satisfaz a desigualdade*

$$d(A^j u, A_v^j) \leq \alpha_j d(u, v) \quad (60)$$

*onde  $j \in \mathbb{N}$  e  $u, v \in U$ .*

*Então,  $A$  está no ponto fixo  $u^*$ . Além disso, para qualquer  $u_0 \in U$  a sequência  $(A^j u_0)_{j=1}^{\infty}$  converge para o ponto fixo  $u^*$ .*

**Teorema A.3.2.** *(Teorema de ponto fixo Schauder's) Seja  $(E, d)$  um espaço métrico,  $U$  um subconjunto convexo, fechado em  $E$  e  $A : U \rightarrow U$  tal que o conjunto  $\{Au : u \in U\}$  é relativamente compacta em  $E$ . Então  $A$  tem pelo menos um ponto fixo.*

Neste contexto, lembramos da seguinte definição:

**Definição A.3.1.** *Seja  $(E, d)$  um espaço métrico e  $F \subseteq E$ . O subconjunto  $F$  é relativamente compacto em  $E$  se o subconjunto  $F$  é fechado.*

**Teorema A.3.3.** *(Arzelá-Ascoli) Seja  $F \subseteq C[a, b]$  para  $b > a$  e assumindo a definição da norma de Chebyshev, então temos que  $F$  é relativamente compacto em  $C([a, b])$ . Para cada  $\varepsilon > 0$  existe um  $\delta > 0$  tal que para todo  $f \in F$  e  $x, x^* \in [a, b]$  com  $|x - x^*| < \delta$  temos  $|f(x) - f(x^*)| < \varepsilon$  e é uniformemente limitada, ou seja,  $\|f\|_{\infty} \leq C$  tal que  $f \in F$ .*

**Teorema A.3.4.** *(Teorema do valor médio) Seja  $f$  uma função contínua definida num intervalo fechado  $[a, b]$  e diferenciável em  $[a, b]$  existe algum ponto  $c$  em  $[a, b]$  tal que:*

$$f'(c) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}.$$

**Demonstração A.3.5.** *Interessados nos detalhes podem consultar (16, teorema 4.6 pg. 69).*

## A.4 Função de Borel e Lebesgue mensuráveis

**Definição A.4.1.** (*Função Mensurável*) Seja  $f : X \longrightarrow Y$  uma função, onde  $(X, \mathfrak{M})$  e  $(Y, \mathfrak{N})$  são espaços mensuráveis. Uma função é dita  $(\mathfrak{M}, \mathfrak{N})$  - mensurável se  $f^{-1}(E) \in \mathfrak{M}, \forall E \in \mathfrak{N}$ , isto é, se a pré - imagem de todo conjunto  $\mathfrak{N}$  - mensurável é  $\mathfrak{M}$  - mensurável.

### Função de Borel

Um caso particular importante da definição acima acontece quando tomamos  $\mathfrak{N}$ , como sendo a álgebra de Borel, neste caso (se a definirmos como a menor sigma-álgebra contendo a topologia), a seguinte definição é equivalente:

Seja  $f : X \longrightarrow Y$ , uma função, onde  $(X, \mathfrak{M})$ , é um espaço mensurável e  $(Y, \mathfrak{N})$ , é um espaço topológico. Uma função é dita Borel- $\mathfrak{M}$  - mensurável se:

$$f^{-1}(O) \in \mathfrak{M}, \forall O \in \mathfrak{N}.$$

### Função Borel-Lebesgue mensurável

Uma função é dita Borel-Lebesgue mensurável quando  $\mathfrak{M} = \mathfrak{L}$ , a  $\alpha$  - álgebra de Lebesgue e  $\mathfrak{N} = \mathfrak{B}$ , a álgebra de Borel. Muitas vezes, uma função Borel-Lebesgue mensurável é dita apenas Lebesgue - mensurável ou simplesmente mensurável.

### Função reais Borel-Lebesgue mensurável

É costume representar uma função  $f : D \subset \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n$ , pelas suas componente no contra-domínio:

$$f(x) = (f^1(x), f^2(x), \dots, f^n(x)).$$

Pode-se mostrar que  $f : D \longrightarrow \mathbb{R}^n$ , é Borel-Lebesgue-mensurável se e somente se cada uma das  $f^k : D \longrightarrow \mathbb{R}$ , é Borel-Lebesgue-mensurável.

**Observação A.1.** *Todas as funções contínuas são funções de Borel, mas nem todas as funções de Borel são contínuas.*

**Observação A.2.** *Todas funções contínuas, funções monótonas, funções semicontínuas, funções integráveis de Riemann e funções de variação limitada são funções de Lebesgue mensuráveis.*

### Propriedades:

Sejam  $f : D \longrightarrow \mathbb{R}^n$  e  $g : D \longrightarrow \mathbb{R}^n$ , funções Borel-Lebesgue-mensuráveis onde  $D$  é um conjunto mensurável de  $\mathbb{R}^m$ , e  $\alpha$ , e  $\beta$ , reais então:

- 1  $\alpha f(x) + \beta g(x)$ , é mensurável;
- 2  $f(x)g(x) := (f^1(x)g^1(x), f^2(x)g^2(x), \dots, f^n(x)g^n(x))$ , é mensurável;
- 3  $f(x + \lambda)$ , é mensurável para todo  $\lambda \in \mathbb{R}^m$ ;
- 4 Se  $h : D \longrightarrow \mathbb{R}^n$  e  $\mu(\{f(x) = h(x)\})$ , então  $h$ , é mensurável.
- 5 Se  $f_n : D \longrightarrow \mathbb{R}$ , são mensuráveis e convergem quase-sempre então o limite é uma função mensurável.

## A.5 Cálculo do operador Jacobiano para o problema estudado

Para mostrarmos que a função  $f$  definida em (47) é localmente lipschitz contínua em  $W$  com relação a  $x$ , conforme foi usado no Teorema 3.2.3, utilizamos o Teorema do Valor Médio para garantir a existência de  $\theta \in ]0, 1[$  tal que  $\|f(t, x_1) - f(t, x_2)\| \leq \|Jf(x_2 - \theta(x_1 - x_2))\| \|x_1 - x_2\|$ ,  $\forall x_1, x_2 \in C([0, T], \mathbb{R}^5)$ .

Para completar a demonstração do Teorema 3.2.3, basta mostrar que o operador Jacobiano é limitado em  $W$ . Assim, escrevendo o Jacobiano, obtemos:

$$Jf(t, x_1(t) + \theta(x_2(t) - x_1(t))) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial f_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f}{\partial f_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f}{\partial f_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_3} & \frac{\partial f}{\partial f_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_4} & \frac{\partial f}{\partial f_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_5} \\ \frac{\partial f}{\partial f_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f}{\partial f_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f}{\partial f_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_3} & \frac{\partial f}{\partial f_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_4} & \frac{\partial f}{\partial f_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_5} \\ \frac{\partial f}{\partial f_3} \frac{\partial f_3}{\partial x_1} & \frac{\partial f}{\partial f_3} \frac{\partial f_3}{\partial x_2} & \frac{\partial f}{\partial f_3} \frac{\partial f_3}{\partial x_3} & \frac{\partial f}{\partial f_3} \frac{\partial f_3}{\partial x_4} & \frac{\partial f}{\partial f_3} \frac{\partial f_3}{\partial x_5} \\ \frac{\partial f}{\partial f_4} \frac{\partial f_4}{\partial x_1} & \frac{\partial f}{\partial f_4} \frac{\partial f_4}{\partial x_2} & \frac{\partial f}{\partial f_4} \frac{\partial f_4}{\partial x_3} & \frac{\partial f}{\partial f_4} \frac{\partial f_4}{\partial x_4} & \frac{\partial f}{\partial f_4} \frac{\partial f_4}{\partial x_5} \\ \frac{\partial f}{\partial f_5} \frac{\partial f_5}{\partial x_1} & \frac{\partial f}{\partial f_5} \frac{\partial f_5}{\partial x_2} & \frac{\partial f}{\partial f_5} \frac{\partial f_5}{\partial x_3} & \frac{\partial f}{\partial f_5} \frac{\partial f_5}{\partial x_4} & \frac{\partial f}{\partial f_5} \frac{\partial f_5}{\partial x_5} \end{bmatrix}$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial f_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} &= \mu(1 - \theta), \\ \frac{\partial f}{\partial f_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_2} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \mu_m \prod_{i=3}^5 \left(1 - \frac{x_i(t)}{x_i^*}\right) \left[ \frac{-x_2^2(t) + x_2^* k_s - 2x_2(t)k_s}{x_2^*(x_2(t) + k_s)^2} \right], \\ \frac{\partial f}{\partial f_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_3} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -\mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left(1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*}\right) \left(\frac{1}{x_3^*}\right) \left(1 - \frac{x_4(t)}{x_4^*}\right) \left(1 - \frac{x_5(t)}{x_5^*}\right) \right], \\ \frac{\partial f}{\partial f_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_4} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -\mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left(1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*}\right) \left(1 - \frac{x_3(t)}{x_3^*}\right) \left(\frac{1}{x_4^*}\right) \left(1 - \frac{x_5(t)}{x_5^*}\right) \right], \\ \frac{\partial f}{\partial f_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_5} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -\mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left(1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*}\right) \left(1 - \frac{x_3(t)}{x_3^*}\right) \left(1 - \frac{x_4(t)}{x_4^*}\right) \left(\frac{1}{x_5^*}\right) \right], \\ \frac{\partial f}{\partial f_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_1} &= q_2(\theta - 1), \\ \frac{\partial f}{\partial f_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_2} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left\{ \frac{1}{y_2} (-\mu_m) \prod_{i=3}^5 \left(1 - \frac{x_i(t)}{x_i^*}\right) \left[ \frac{-x_2^2(t) + x_2^* k_s - 2x_2(t)k_s}{x_2^*(x_2(t) + k_s)^2} \right] - q_2 \theta \right\}, \\ \frac{\partial f}{\partial f_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_3} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ \frac{1}{y_2} \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left(1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*}\right) \left(\frac{1}{x_3^*}\right) \left(1 - \frac{x_4(t)}{x_4^*}\right) \left(1 - \frac{x_5(t)}{x_5^*}\right) \right], \\ \frac{\partial f}{\partial f_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_4} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ \frac{1}{y_2} \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left(1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*}\right) \left(1 - \frac{x_3(t)}{x_3^*}\right) \left(\frac{1}{x_4^*}\right) \left(1 - \frac{x_5(t)}{x_5^*}\right) \right], \\ \frac{\partial f}{\partial f_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_5} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ \frac{1}{y_2} \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left(1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*}\right) \left(1 - \frac{x_3(t)}{x_3^*}\right) \left(1 - \frac{x_4(t)}{x_4^*}\right) \left(\frac{1}{x_5^*}\right) \right], \\ \frac{\partial f}{\partial f_3} \frac{\partial f_3}{\partial x_1} &= q_3(1 - \theta), \\ \frac{\partial f}{\partial f_3} \frac{\partial f_3}{\partial x_2} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left\{ y_3(\mu_m) \prod_{i=3}^5 \left(1 - \frac{x_i(t)}{x_i^*}\right) \left[ \frac{-x_2^2(t) + x_2^* k_s - 2x_2(t)k_s}{x_2^*(x_2(t) + k_s)^2} \right] + q_3 \theta \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial f_3} \frac{\partial f_3}{\partial x_3} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -y_3 \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left( 1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*} \right) \left( \frac{1}{x_3^*} \right) \left( 1 - \frac{x_4(t)}{x_4^*} \right) \left( 1 - \frac{x_5(t)}{x_5^*} \right) \right], \\
\frac{\partial f}{\partial f_3} \frac{\partial f_3}{\partial x_4} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -y_3 \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left( 1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*} \right) \left( 1 - \frac{x_3(t)}{x_3^*} \right) \left( \frac{1}{x_4^*} \right) \left( 1 - \frac{x_5(t)}{x_5^*} \right) \right], \\
\frac{\partial f}{\partial f_3} \frac{\partial f_3}{\partial x_5} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -y_3 \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left( 1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*} \right) \left( 1 - \frac{x_3(t)}{x_3^*} \right) \left( 1 - \frac{x_4(t)}{x_4^*} \right) \left( \frac{1}{x_5^*} \right) \right], \\
\frac{\partial f}{\partial f_4} \frac{\partial f_4}{\partial x_1} &= q_4(1 - \theta), \\
\frac{\partial f}{\partial f_4} \frac{\partial f_4}{\partial x_2} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left\{ y_4(\mu_m) \prod_{i=3}^5 \left( 1 - \frac{x_i(t)}{x_i^*} \right) \left[ \frac{-x_2^2(t) + x_2^* k_s - 2x_2(t) k_s}{x_2^*(x_2(t) + k_s)^2} \right] + q_4 \theta \right\}, \\
\frac{\partial f}{\partial f_4} \frac{\partial f_4}{\partial x_3} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -y_4 \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left( 1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*} \right) \left( \frac{1}{x_3^*} \right) \left( 1 - \frac{x_4(t)}{x_4^*} \right) \left( 1 - \frac{x_5(t)}{x_5^*} \right) \right], \\
\frac{\partial f}{\partial f_4} \frac{\partial f_4}{\partial x_4} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -y_4 \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left( 1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*} \right) \left( 1 - \frac{x_3(t)}{x_3^*} \right) \left( \frac{1}{x_4^*} \right) \left( 1 - \frac{x_5(t)}{x_5^*} \right) \right], \\
\frac{\partial f}{\partial f_4} \frac{\partial f_4}{\partial x_5} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -y_4 \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left( 1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*} \right) \left( 1 - \frac{x_3(t)}{x_3^*} \right) \left( 1 - \frac{x_4(t)}{x_4^*} \right) \left( \frac{1}{x_5^*} \right) \right], \\
\frac{\partial f}{\partial f_5} \frac{\partial f_5}{\partial x_1} &= q_5(1 - \theta), \\
\frac{\partial f}{\partial f_5} \frac{\partial f_5}{\partial x_2} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left\{ y_5(\mu_m) \prod_{i=3}^5 \left( 1 - \frac{x_i(t)}{x_i^*} \right) \left[ \frac{-x_2^2(t) + x_2^* k_s - 2x_2(t) k_s}{x_2^*(x_2(t) + k_s)^2} \right] + q_5 \theta \right\}, \\
\frac{\partial f}{\partial f_5} \frac{\partial f_5}{\partial x_3} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -y_5 \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left( 1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*} \right) \left( \frac{1}{x_3^*} \right) \left( 1 - \frac{x_4(t)}{x_4^*} \right) \left( 1 - \frac{x_5(t)}{x_5^*} \right) \right], \\
\frac{\partial f}{\partial f_5} \frac{\partial f_5}{\partial x_4} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -y_5 \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left( 1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*} \right) \left( 1 - \frac{x_3(t)}{x_3^*} \right) \left( \frac{1}{x_4^*} \right) \left( 1 - \frac{x_5(t)}{x_5^*} \right) \right], \\
\frac{\partial f}{\partial f_5} \frac{\partial f_5}{\partial x_5} &= [x_1 + \theta(x_2 - x_1)] \left[ -y_5 \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_s} \left( 1 - \frac{x_2(t)}{x_2^*} \right) \left( 1 - \frac{x_3(t)}{x_3^*} \right) \left( 1 - \frac{x_4(t)}{x_4^*} \right) \left( \frac{1}{x_5^*} \right) \right].
\end{aligned}$$

Se observarmos cada coordenada do operador jacobiano percebemos que cada coordenada é contínua. Como  $W \subset R^5$  é compacto, segue que o operador Jacobiano é limitado. Portanto é possível mostrarmos que existe  $L = \max_{x \in W} \|Jf(x_1(t, u) + \theta(x_2(t, u) - x_1(t, u)))\|$ .

## REFERÊNCIAS

- [1] A. Bonomi and W. Schmidell, *Biotecnologia industrial*, vol. 2, ch. 7 - Modelagem matemática e simulação de processos fermentativos, pp. 123 – 178, Edgard Blucher LTDA, São Paulo, 2001.
- [2] R Figueiredo Camargo, *Cálculo fracionário e aplicações*, Ph.D. thesis, Tese de Doutorado, IMECC, UNICAMP, 2009.
- [3] J. C. M. Carvalho and S. Sato, *Biotecnologia industrial*, vol. 2, ch. 9 - Fermentação Descontínua, pp. 193–204, Edgard Blucher LTDA, São Paulo, 2001.
- [4] Gervásio Paulo da Silva, Jonas Contierob, Paulo Marcelo Ávila Netob, and Cristian Jacques Bolner de Limab, *1, 3-propanodiol: Produção, aplicações e potencial biotecnológico*, *Quim. Nova* **37** (2014), no. 3, 527–534.
- [5] Gervásio Paulo da Silva, Jonas Contierob, Paulo Marcelo Ávila Netob, and Cristian Jacques Bolner de Limab, *1, 3-propanodiol: produção, aplicações e potencial biotecnológico*, *Quim. Nova* **37** (2014), no. 3, 527–534.
- [6] Augusto Armando de Castro Júnior, *Curso de equações diferenciais ordinárias*, Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada (IMPA) (2009).
- [7] Sérgio Milton Martins de Oliveira Penido, Cláudia Valéria de Sousa Resende Penido, Ary dos Santos-Pinto, Tatsuko Sakima, and Carla Raquel Fontana, *Estudo in vivo e in vitro com e sem termociclagem, da resistência ao cisalhamento de braquetes colados com fonte de luz halógena*, (2008).
- [8] Kai Diethelm, *The analysis of fractional differential equations: An application-oriented exposition using differential operators of caputo type*, vol. 2004, Springer Science & Business Media, 2010.
- [9] Claus I Doering and Artur Oscar Lopes, *Equações diferenciais ordinárias*, IMPA, 2008.

- [10] José Paulo Carvalho dos Santos, Andrea Cardoso, Estela C Ferreira, Janaína C Franco, and José Carlos Souza Junior, *Cálculo de ordem fracionária e aplicações*, Sigmae **1** (2012), no. 1, 18–32.
- [11] Flávia Gonçalves Domingues Ferreira, Yêda Medeiros Bastos de Orientadora Almeida, Glória Maria Coorientadora Vinhas, and Maria Alice Gomes de Andrade Coorientadora Lima, *Bioconversão do glicerol a 1, 3-propanodiol para aplicação na obtenção do poli (tereftalato de trimetileno)*, (2013).
- [12] Roberto Garrappa, *On linear stability of predictor–corrector algorithms for fractional differential equations*, International Journal of Computer Mathematics **87** (2010), no. 10, 2281–2290.
- [13] ———, *Trapezoidal methods for fractional differential equations: Theoretical and computational aspects*, Mathematics and Computers in Simulation (2013).
- [14] Arianne Vellasco Gomes, *Transformadas integrais, modelagem fracionária e o sistema de lotka-volterra*, (2014).
- [15] Gelson Iezzi, Carlos Murakami, and Nilson Jose Machado, *Fundamentos de matemática elementar, 8: limites, derivadas, noções de integral*, Atual, 1977.
- [16] Paulo Cupertino Lima, *Fundamentos de análise ii*, UFMG, 2013.
- [17] Keith B Oldham and Jerome Spanier, *The fractional calculus: Theory and applications of differentiation and integration to arbitrary order*, dover ed., Academic Press, 2006.
- [18] César R Oliveira, *Introdução à análise funcional*, Impa, 2010.
- [19] Juan Daniel Rivaldi, BF Sarrouh, Rodolfo Fiorilo, and SS da Silva, *Glicerol de biodiesel: Estratégias biotecnológicas para o aproveitamento do glicerol gerado da produção de biodiesel*, Biotecnologia Ciência e Desenvolvimento **37** (2007), 44–51.
- [20] Garrappa Roberto, *Short tutorial: Solving fractional differential equations by matlab codes*, Department of Mathematics - University of Bari - Italy (2014).
- [21] Walter Rudin, *Principles of mathematical analysis (international series in pure & applied mathematics)*, (1976).
- [22] DP SANTOS, JCCS PINTO, and TLM ALVES, *Produção de poli (hidroxialcanoatos) a partir de glicerol*, Ph.D. thesis, Dissertação de Mestrado)-Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.

- [23] W. Schmidell, *Biotechnologia industrial*, vol. 2, ch. 2 - Microrganismos e meios de cultura para utilização industrial, pp. 5 – 18, Edgard Blucher LTDA, São Paulo, 2001.
- [24] W. Schmidell and M. C. R Facciotti, *Biotechnologia industrial*, vol. 2, ch. 8 - Biorreatores e Processos Fermentativos, pp. 179 – 192, Edgard Blucher LTDA, São Paulo, 2001.
- [25] Najla Varalta, *Das transformadas integrais ao cálculo fracionário aplicado à equação logística*, (2014).
- [26] Paula Bruzadelle Vieira, *Estudos de processos para a produção de 1, 3-propanodiol por lactobacillus reuteri*, Ph.D. thesis, Universidade de São Paulo, 2014.
- [27] Lei Wang, Jianxiong Ye, Enmin Feng, and Zhilong Xiu, *An improved model for multistage simulation of glycerol fermentation in batch culture and its parameter identification*, *Nonlinear Analysis: Hybrid Systems* **3** (2009), no. 4, 455–462.
- [28] Anna Werner Omazic, *Glycerol supplementation in dairy cows and calves*, (2013).