

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALFENAS

CAMILA ASSIS TAVARES

USO DA REDE NEURAL FRACIONÁRIA DE HOPFIELD NA SOLUÇÃO
DE PROBLEMAS INVERSOS EM QUÍMICA

Alfenas/MG
2020

CAMILA ASSIS TAVARES

USO DA REDE NEURAL FRACIONÁRIA DE HOPFIELD NA SOLUÇÃO DE
PROBLEMAS INVERSOS EM QUÍMICA

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Química pela Universidade Federal de Alfenas. Área de concentração: Físico-Química.

Orientador: Prof. Dr. Nelson Henrique Teixeira Lemes

Alfenas/MG
2020

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal de Alfenas

T231u Tavares, Camila Assis.
Uso da rede neural fracionária de Hopfield na solução de problemas inversos em química / Camila Assis Tavares - Alfenas/MG, 2020.
85 f. : il. --

Orientador: Nelson Henrique Teixeira Lemes.
Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal de Alfenas, 2020.

Bibliografia.

1. Físico-química. 2. Problema inverso (Equações diferenciais). 3. Cálculo diferencial. 4. Redes neurais (Computação). I. Lemes, Nelson Henrique Teixeira. II. Título.

CDD-541

CAMILA ASSIS TAVARES

"USO DA REDE NEURAL FRACIONÁRIA DE HOPFIELD NA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS INVERSOS EM QUÍMICA"

A Banca examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação apresentada como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Química pela Universidade Federal de Alfenas. Área de concentração: Físico - Química.

Aprovada em: 07/02/2020

Prof. Dr. Nelson Henrique Teixeira Lemes - UNIFAL

Assinatura: Nelson Henrique Teixeira Lemes

Prof. Dr. Ihosvany Camps Rodriguez - UNIFAL

Assinatura: Ihosvany Camps Rodriguez

Prof. Dr. Teodorico de Castro Ramalho - UFLA

Assinatura: Teodorico de Castro Ramalho

À jovem Camila do passado e à todas as pessoas que a fizeram crescer.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Juscelino e Maria Aparecida, que desempenharam seus papéis da melhor maneira possível, por todas as horas acordados, por toda a preocupação e por todo o incentivo. As minhas conquistas sempre serão as conquistas de vocês. O amor incondicional de vocês dois me fez uma pessoa melhor.

Aos meus irmãos, Luciana e Junior, pela nossa agitada e divertida co-existência e pela reafirmação dos valores que nos foram passados. Agradeço também por toda motivação durante esse tempo.

Aos meus sobrinhos, Ana Júlia e Renato, por me mostrarem que a curiosidade de criança jamais deve desvanecer.

À minha tia Neila, por ser refúgio sempre que precisei e por ser meu primeiro modelo de professora, uma grande influência na minha vida.

À minha madrinha Scheila e ao meu padrinho Venaci, por sempre estarem presentes e dispostos a me ajudar desde pequena. Vocês são seres humanos incríveis e eu tenho a maior sorte de tê-los tão próximo de mim.

Aos meus amigos que prazerosamente fiz em Alfenas, Andrilene, Elizandra, Gabriela, Mayra, Monique, Olívia, Tatieska e Venan, por todo o tempo que passamos juntos, por todas as alegrias e todo o suporte que vocês me deram nesse tempo, sempre me acompanhando em toda nova jornada. Minha vida não seria a mesma sem vocês.

Aos meus extraordinários amigos que se pudessem estariam sempre por perto, Flávia, Karen, Leonardo, Marlene, Mary e Ricardo, por estarem presentes até em pensamento e por fazerem meus dias mais felizes. A saudade mora nas lembranças que temos juntos.

À minha amiga e colega de pós-graduação Michele, pela empatia diante de todas as situações e por sempre ser um ponto de equilíbrio quando mais precisava. Quero levar sua amizade comigo para sempre.

À minha querida companheira de laboratório Taináh, por quem tenho grande admiração, por me ajudar a resgatar minha paixão pela ciência e me mostrar a melhor relação de amor e ódio que eu poderia ter por alguém. Espero que você tenha se beneficiado dessa amizade tanto quanto eu.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Nelson H. T. Lemes, pela sua infundável compreensão, disponibilidade, paciência e dedicação. Obrigada por compartilhar comigo sua visão sobre o mundo e me incentivar a desenvolver a minha própria. Carrego comigo o imenso respeito que tenho sobre sua pessoa.

Aos professores Dr. Ihosvany Camps Rodríguez e Dr. Teodorico de Castro Ramalho pela atenção, disponibilidade e por todas as contribuições que feitas.

A todos os professores que serviram de modelo para a minha formação profissional.

À FAPEMIG, pela bolsa concedida e à CAPES. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

E por fim, a todos que contribuíram de alguma forma em mais um etapa da minha vida.

Eu faço parte dos pensam que a Ciência é belíssima. Um cientista em um laboratório não é apenas um técnico, ele é também uma criança diante de fenômenos naturais que o impressionam como um conto de fada.

(CURIE, 1933)

RESUMO

Usualmente, a rotina de um laboratório se resume a observar um fenômeno e determinar o agente causador do mesmo, ou seja, busca-se relacionar a causa a um efeito. Essa relação pode ser expressa matricialmente como $\mathbf{Kf} = \mathbf{g}$, onde \mathbf{f} representa a causa e não está acessível de forma direta, \mathbf{g} representa efeito que pode ser mensurado e, por fim, \mathbf{K} , o operador matemático que relaciona os dois parâmetros. Encontrar \mathbf{f} a partir de \mathbf{K} e \mathbf{g} é conhecido como problema inverso. Esse é um assunto muito recorrente em diversas áreas e que apresenta complicações na sua resolução, como por exemplo, a amplificação do erro no resultado final, ocasionando em uma solução incoerente com a interpretação física. Existem inúmeros estudos que investigam métodos eficientes para a obtenção da solução de tais problemas, dentre eles, se destacam as Redes Neurais Artificiais. O emprego dessas redes tem gerado grande avanço científico para a otimização da solução desses problemas. De forma a generalizar o modelo de Rede Neural Artificial de Ordem Inteira, que é assim denominado por ser descrito por uma equação diferencial de ordem inteira, estudos propuseram a implementação da Rede Neural de Hopfield com o Cálculo Fracionário, onde a derivada passa a ter ordem fracionária, incorporando o conjunto dos números racionais \mathbb{Q} , obtendo-se ótimos resultados quando comparados ao Cálculo tradicional. Essa metodologia consegue contornar diversas dificuldades encontradas, diferente das técnicas usuais. A originalidade deste projeto se encontra na implementação das Redes Neurais de Hopfield com Cálculo Fracionário (RNFH) para a solução do problema da densidade de estados de fônons da capacidade calorífica, utilizando o software MATLAB para auxiliar no cálculo numérico, havendo uma melhora na velocidade de convergência dos resultados. Tal metodologia também foi empregada na resolução de problemas mais simples, com o intuito de introduzir conceitos e avaliar o desempenho da RNFH, na qual também se mostrou eficiente em relação a velocidade de convergência da solução. A RNFH proporcionou resultados próximos do exato, chegando a ser até 202 vezes mais rápida que a Rede Neural de Hopfield, diminuindo o custo computacional de forma considerável.

Palavras-chave: Cálculo Fracionário. Rede Neural de Hopfield. Problemas Inversos.

ABSTRACT

Usually, the laboratory routine is summed up to observing a phenomenon and determining its causative agent, in other words, it seeks to relate the cause to an effect. This relationship can be expressed through matrices as $\mathbf{Kf} = \mathbf{g}$, where \mathbf{f} represents the cause and it is not directly accessible, \mathbf{g} represents an effect that can be measured and, finally, \mathbf{K} , the mathematical operator that relates the two parameters. Finding \mathbf{f} through \mathbf{K} and \mathbf{g} is known as inverse problem. This is a very recurring subject in several areas and has complications in its resolution, such as the amplification of the error in the result, leading to a solution inconsistent with the physical interpretation. There are numerous studies that investigate efficient methods to obtain a result, among them, the Artificial Neural Networks stand out. The use of these networks has generated great scientific advance for the optimization of such problems. In order to generalize the Integer Order Artificial Neural Network model, which is named after being described by an integer derivative, studies have proposed the implementation of the Artificial Neural Network with Fractional Calculus, where the order of the derivative is fractional, incorporating the set of rational numbers, obtaining excellent results when compared to the traditional Calculus. The methodology used in this work can circumvent difficulties that are not tractable by traditional means. The originality of this project lies in the implementation of Hopfield Neural Networks with Fractional Calculus (FHNN) to solve the density of phonon states of heat capacity, using the MATLAB software to aid in numerical analysis, with an improvement at the speed of convergence of results. This methodology was also used to solve simpler problems, in order to introduce concepts and evaluate the performance of the FHNN, which was also efficient regarding the speed of convergence of the solution. This method provided accurate solutions, being 202 times faster than the Hopfield Neural Network, significantly decreasing the processing time.

Keywords: Fractional Calculus. Hopfield Neural Network. Inverse Problems.

LISTA DE FIGURAS

Figura 4.1	–	Representação esquemática de problema direto e problema inverso.	20
Figura 4.2	–	Representação esquemática da rede neural McCulloch-Pitts.	26
Figura 4.3	–	Esquema da Rede Neural de Hopfield.	27
Figura 4.4	–	Gráfico da função $f(x) = 4$	33
Figura 5.1	–	Gráfico da Função Gama.	38
Figura 5.2	–	Ambiente de programação do MATLAB.	45
Figura 5.3	–	Aproximação da área da curva através do método de quadratura por trapézios.	46
Figura 6.1	–	(a) Refinamento da solução ao longo do tempo, usando RNH (-----), para o sistema linear com $\epsilon = 0,1$ e dados experimentais com erro de $\eta = 0,01$. A solução com RNFH ($\alpha = 1,3$) (——) converge para $[1,000;0,0450]$ no tempo de 5000 unidades. O resíduo final é de $\ \mathbf{Kf} - \mathbf{g}\ = [-4,1 \times 10^{-6}, -4,5 \times 10^{-4}]$ e o erro é de $\ \mathbf{f} - \mathbf{f}_{\text{exato}}\ = [0,000; 0,0450]$. (b) Resultado para o mesmo problema usando $\alpha = 1,7$	53
Figura 6.2	–	(a) Resíduo em relação ao tempo, empregando o modelo RNH (-----), para o sistema linear $\epsilon = 0,01$ e erro experimental $\eta = 0,001$. Solução usando modelo RNFH ($\alpha = 1,3$, ——). (b) A norma do resíduo para o mesmo problema usando RNFH com $\alpha = 1,7$	55
Figura 6.3	–	(a) Resíduo em relação ao tempo, empregando o modelo RNH (-----), para o sistema linear $\epsilon = 0,1$ e erro experimental $\eta = 0,01$. Solução usando modelo RNFH ($\alpha = 1,3$, ——). (b) Refinamento da solução ao longo de 25 unidades arbitrárias de tempo, usando RNH (.....), para o mesmo sistema.	56
Figura 6.4	–	(a) Resíduo em relação ao tempo, empregando o modelo RNH (-----), para o sistema linear $\epsilon = 0,1$ e erro experimental $\eta = 0,01$. Solução usando modelo RNFH ($\alpha = 1,7$, ——). (b) Refinamento da solução ao longo de 25 unidades arbitrárias de tempo, usando RNH (.....), para o mesmo sistema.	57
Figura 6.5	–	Refinamento da solução em função do tempo, referente ao segundo problema, no qual foi empregada RNH (-----), e RNFH (——) usando $\alpha = 1,2$	58
Figura 6.6	–	Resíduo $\ \mathbf{Kf} - \mathbf{g}\ $ ao longo do tempo, usando RNH (-----) e RNFH com $\alpha = 1,2$, (——).	59

- Figura 6.7 – Refinamento da solução ao longo do tempo, usando RNH ($\cdots\circ\cdots$), para o exemplo 3. A solução com RNFH usando $\alpha = 0,9$ é apresentada como ($-*-$). ($---$) representa o dado exato e ($-\square-$) representa o valor usado como conhecimento *a priori* da rede. 61
- Figura 6.8 – Resíduo $\|\mathbf{Kf}-\mathbf{g}\|$ ao longo do tempo, usando RNH ($-----$), para o terceiro exemplo. A solução com RNFH usando $\alpha = 0,9$ é apresentada como ($---$). 62
- Figura 6.9 – (a) (\square) representa dados experimentais para $C_V(T_i)$, simulados entre 0 e 2000K. ($*$) representa $C_V(T_i)$ obtido a partir de $g(\nu)$ encontrado utilizando o modelo RNFH, com $\alpha = 0,9$ e (\circ) representa $C_V(T_i)$ obtido através de $g(\nu)$ empregado utilizando o modelo RNH. (b) (Δ) representa o erro do resultado obtido pela Equação (5.9) com $\alpha = 0,9$ e (\square) representa o erro do resultado obtido pela Equação (5.9) com $\alpha = 1$. A barra de erro representa o coeficiente de variação de 3,0%, para valores de T entre 0K e 300K, e 1,5%, para valores de T entre 300K e 2000K..... 63
- Figura 6.10 – (a) A solução encontrada usando o modelo RNH ($\cdots\circ\cdots$), para o terceiro exemplo com erro simulado (coeficiente de variação de 3,0%, para valores de T entre 0K e 300K e 1,5% para valores de T entre 300K e 2000K. A solução empregando o modelo de RNFH com $\alpha = 0,9$ é representada por ($-*-$). ($---$) representa os valores exatos. ($-\square-$) representa o valor usado como conhecimento *a priori* da rede. (b) Norma residual ao longo do tempo, empregando o modelo RNH ($-----$). $\|\mathbf{Kf}-\mathbf{g}\|$ usando o modelo RNFH com $\alpha = 0,9$ é representado por ($---$). 64
- Figura 6.11 – (a) $g(\nu)$ simulados para o diamante utilizando o modelo de Debye. (b) Valores de C_V gerados a partir de $g(\nu)$ (Problema direto)..... 65
- Figura 6.12 – (a) Valores de $g(\nu)$ recuperados utilizando a matriz inversa, $g = (\mathbf{K}^T\mathbf{K})^{-1}\mathbf{K}^Tc$. (b) Valores C_V obtidos com o cálculo de $g(\nu)$ empregando a matriz inversa (Problema inverso), ($*$) corresponde ao dado exato. 66

LISTA DE TABELAS

Tabela 6.1	–	Comparação dos resultados usando RNH ($\alpha = 1$) e RNFH.....	54
Tabela A.1	–	Transformadas de Laplace de algumas funções	75

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
2	JUSTIFICATIVA	17
3	OBJETIVOS	18
3.1	Objetivo Geral	18
3.2	Objetivos Específicos	18
4	REFERENCIAL TEÓRICO	19
4.1	Problemas Inversos Mal Colocados	19
4.1.1	A Definição de Problemas Inversos	19
4.1.2	A Primeira Tentativa para Resolver um Problema Inverso.....	20
4.1.3	Representação na Forma Matricial.....	22
4.2	Densidade de Estados de Fônons da Capacidade Calorífica	24
4.2.1	A Lei de Dulong-Petit	24
4.2.2	Albert Einstein e Seu Estudo.....	24
4.3	Rede Neural Fracionária de Hopfield	24
4.3.1	Simulando Neurônios Biológicos.....	25
4.3.2	A Rede Neural de Hopfield	25
4.3.3	Emprego do Cálculo Fracionário na RNH	27
4.4	Cálculo Fracionário: uma alternativa ao clássico	27
4.4.1	Contexto do Cálculo Fracionário	28
4.4.2	A Derivada Fracionária Segundo Caputo	28
4.4.3	O Efeito de Memória.....	29
4.4.4	Critérios para uma Derivada Fracionária	30
4.4.5	Alguns Exemplos	30
4.4.6	Transformada de Laplace de Derivadas Fracionárias	33
5	METODOLOGIA	36
5.1	Rede Neural Fracionária de Hopfield	36
5.2	A Função Gama	37
5.3	Cálculo Fracionário	39
5.3.1	A integral de Riemann-Liouville	39
5.3.2	As Derivadas Fracionárias Segundo Riemann-Liouville e Caputo	40
5.4	Implementação da RNH com Cálculo Fracionário	42
5.4.1	A Regra da Cadeia para Derivadas Fracionárias	42
5.4.2	Sobre a Monotonicidade das Funções	44
5.5	O Ambiente de Programação	45

5.5.1	MATLAB	45
5.5.2	Método de Quadratura por Trapézios	46
5.6	Método Numérico para Equação Diferencial Fracionária	47
5.7	Método Numérico para Determinação de Distribuição de Frequências através de Dados Experimentais	48
6	RESULTADOS E DISCUSSÃO	51
6.1	Problema de dimensão 2×2	51
6.2	A Matriz de Vandermonde	54
6.3	Densidade de Estados de Fônons da Capacidade Calorífica	59
6.4	A Rede Neural Fracionária de Hopfield	61
7	CONCLUSÃO	67
8	PERSPECTIVAS	68
	REFERÊNCIAS	69
	ANEXO	75
	APÊNDICES	76

1 INTRODUÇÃO

Uma área do Cálculo que teve sua origem em 1695 e que tem como principal fundamento generalizar operações de derivação e integração para ordens não inteiras é conhecida por Cálculo Fracionário¹. Tal área vem se mostrando uma ótima ferramenta alternativa por complementar o cálculo tradicional em diversos problemas na Ciência, o que tem atraído a atenção de inúmeros pesquisadores, pois apresenta propriedades que a destacam do clássico, como por exemplo, o efeito de memória, que será discutido posteriormente. O Cálculo Fracionário apresenta muitas formulações de derivadas, porém há um interesse em adotar a derivada proposta por Caputo para trabalhar com problemas na Física e na Química, devido ao fato de que, ao aplicar essa derivada fracionária a uma função constante, o resultado encontrado é igual a zero. Diversos artigos²⁻⁵ mostram sua eficiência, comprovando que o Cálculo Fracionário possui aplicação em diversas áreas da Ciência⁶⁻⁹. Uma área que desperta grande interesse é a do estudo com modificações na arquitetura de redes neurais^{10,11}.

A ideia de se criar um modelo matemático para sistemas físicos que mimetizava o funcionamento de um neurônio biológico surgiu em 1982 por J. J. Hopfield¹², que propôs aplicar tal modelo em cálculos de problemas matemáticos. Esse modelo ficou conhecido por Rede Neural de Hopfield (RNH) e vem sendo empregado em diversos problemas^{13,14}. Vale ressaltar a aplicação da RNH em problemas inversos em Química, onde se observa o aperfeiçoamento da propriedade desejada de forma iterada¹⁵. Ótimos resultados foram obtidos no trabalho em que um algoritmo generalizado foi empregado para resolver problemas lineares e não lineares mal colocados, com base na RNH, além de se concluir que a técnica de rede neural apresenta melhor performance quando comparada aos métodos tradicionais¹⁷.

Recentemente, inúmeros estudos têm sido conduzidos a fim de entender o comportamento dinâmico e as propriedades estáveis do sistema de equações de ordem fracionária^{11,18-21}. Contudo, nenhum desses trabalhos exploram o uso do modelo RNFH para resolver problemas lineares mal colocados. O objetivo principal desse trabalho é analisar a eficiência do modelo RNFH para resolver problemas lineares mal colocados.

O conceito de problemas bem-colocados e mal colocados foi apresentado por Jacques Hadamard em 1923²², onde é proposto que um sistema linear de equações é bem-colocado quando uma solução existe, é única e possui uma dependência contínua em relação aos dados, caso contrário, o problema é chamado de mal colocado ou mal condicionado. Em princípio, segundo Hadamard, as interpretações dos resultados experimentais são mal colocadas devido ao erro experimental. Dessa forma, diversos problemas em Química são mal colocados^{13,23}. Esses problemas são difíceis de serem resolvidos na prática, uma vez que os erros originados são amplificados na solução.

O software MATLAB (MATrix LABoratory) é uma ferramenta amplamente em-

pregada para cálculos numéricos em diversas áreas, que permite a utilização de matrizes e vetores na sua execução²⁴. Tal software possui ambiente computacional bastante robusto e fácil de programar, o que o torna atrativo para resolver equações diferenciais ordinárias²⁵. Além disso, ainda dispõe da possibilidade de empregar subrotinas, como por exemplo, a chamada FDE12 (do inglês, *Fractional Derivative Equation*), para realizar cálculos numéricos de problemas que envolvam derivadas fracionárias²⁶.

Dessa forma, será realizado um estudo aplicando o modelo RNFH para solucionar problemas mal colocados. Nesse trabalho, os resultados obtidos pelo modelo de ordem fracionária (RNFH) em três casos foram comparados com o modelo clássico de ordem inteira (RNH). O primeiro exemplo é um estudo de um sistema linear mal condicionado 2×2 simples, no qual o número de condicionamento é dependente do valor de ϵ . O próximo exemplo lida com um sistema linear do tipo $\mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{f}$, onde \mathbf{X} é a matriz de Vandermonde, com $\dim(\mathbf{X})=21 \times 21$. Por fim, a RNFH é usada para obter a densidade de estados de fônons para o diamante a partir da capacidade calorífica para diferentes temperaturas. Este é um problema clássico e também importante dentro da área de Físico-Química²⁷⁻²⁹, no qual busca encontrar o melhor algoritmo para resolver este problema.

2 JUSTIFICATIVA

Estudos envolvendo o uso de Redes Neurais tem despertado grande interesse do meio científico, uma vez que, quando comparadas à métodos tradicionais, mostram melhor desempenho para atingir os resultados desejados^{30,31}. Mais especificamente, a Rede Neural de Hopfield mostrou-se bastante eficiente em problemas de otimização^{18,19,21}. Dessa forma, pode-se destacar as Redes Neurais de Hopfield como uma área promissora quando se trata de otimização de problemas lineares e não lineares^{10,14,20,30}.

Nos últimos anos, o Cálculo Fracionário tem sido explorado em inúmeras áreas, grandes avanços já foram reportados e, acredita-se que em seu futuro desenvolvimento, esse assunto trará uma maior contribuição à comunidade científica³². Uma das vantagens do uso do Cálculo Fracionário se baseia na obtenção de resultados mais coerentes aos dados experimentais na resolução de diversos problemas³. Sendo, portanto, uma forma muito eficiente de modelar fenômenos naturais quando comparados à abordagem clássica⁴.

Mesmo com as vantagens associadas ao uso de RNH, a implementação do Cálculo Fracionário, como uma forma de generalizar o funcionamento da rede, agrega propriedades de não localidade e efeito de memória, o que pode contribuir para a modelagem matemática³¹.

A relevância e a originalidade do presente trabalho estão centradas no uso da Rede Neural de Hopfield Fracionária para solução de problemas inversos mal colocados em Química, bem como a comparação com a Rede Neural de Hopfield em relação a eficiência para a obtenção da solução de tais problemas.

3 OBJETIVOS

3.1 Objetivo Geral

Este trabalho visa explorar o modelo de RNFH, empregando-o na solução de problemas lineares inversos mal colocados, a fim de encontrar um algoritmo de melhor performance no estudo de tais problemas em Química.

3.2 Objetivos Específicos

Sendo assim, os objetivos específicos deste trabalho incluem:

- a) empregar a definição de derivada fracionária segundo Caputo na implementação da RNH;
- b) utilizar um método numérico para resolver a equação integral fracionária;
- c) aplicar RNFH a fim de resolver problemas lineares inversos em Química;
- d) analisar eficiência do método empregado;
- e) comparar e discutir resultados obtidos utilizando a RNFH e a Rede Neural de Hopfield de Ordem Inteira.

4 REFERENCIAL TEÓRICO

4.1 Problemas Inversos Mal Colocados

4.1.1 A Definição de Problemas Inversos

Apesar de ainda não haver um consenso sobre a origem dos problemas inversos, alguns autores afirmam que essa área multidisciplinar teve origem com Platão no século IV a.C. Com a famosa alegoria da caverna, Platão inseriu o primeiro exemplo de problema inverso, no qual ele buscava a realidade através de sombras de objetos projetadas na parede. Outros exemplos que surgiram após a proposta de Platão são citados pelos mesmos autores em Problemas Inversos em Tomografias: Notas em Matemática Aplicada³³.

Em 1826, atuando na vanguarda da área de problemas inversos, o matemático norueguês Niels Henrik Abel fez a primeira formulação matemática da qual seria considerada como o ponto de partida para o desenvolvimento da área³⁴. A partir desse estudo, uma grande variedade de problemas diretos e inversos puderam ser tratados com mais rigor e propriedade.

Seguindo a ideia apresentada anteriormente, é possível explorar brevemente a essência de um problema inverso. Usualmente, a rotina de laboratório se resume a obter informações a partir de observações de resultados. Essa associação feita entre as observações experimentais e aquilo que as originou é denominada de problema inverso. Um modelo matemático discreto e linear que expressa relação entre a causa e o efeito observado, onde o comportamento específico àquele fenômeno é interpretado, pode ser descrito matricialmente da seguinte forma,

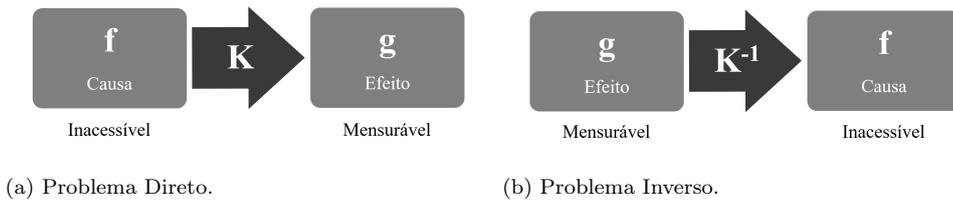
$$\mathbf{Kf} = \mathbf{g} \quad (4.1)$$

onde \mathbf{K} é o operador e está relacionado ao modelo físico utilizado, \mathbf{f} e \mathbf{g} representam a causa (que não se pode acessar diretamente no laboratório) e o efeito do fenômeno estudado, respectivamente^{13,35}.

O problema que busca saber o efeito \mathbf{g} a partir de um sistema de parâmetros \mathbf{K} e da causa \mathbf{f} é definido como Problema Direto. Por outro lado, o Problema Inverso pode ser apresentado quando são dados um sistema de parâmetros \mathbf{K} e o efeito \mathbf{g} e, procura-se conhecer a causa \mathbf{f} ³⁵, como é demonstrado na Figura (4.1). Em outras palavras, encontrar \mathbf{f} a partir de \mathbf{K} e \mathbf{g} é o mesmo que obter informações microscópicas a partir de um sistema macroscópico³⁶.

É importante destacar que, ao se trabalhar com dados obtidos em laboratório, erros experimentais se tornam parte do problema e podem ser amplificados na solução. Esse fator a mais deve ser considerado e caracteriza um tipo específico de problema, o

Figura 4.1 – Representação esquemática de problema direto e problema inverso.



Fonte: Da autora (2020).

chamado problema mal colocado¹³.

Em 1923, o matemático francês Jacques Hadamard definiu os conceitos de problemas bem-colocados e mal colocados. É dito um problema bem-colocado aquele estabelecido pelas seguintes condições^{37,38}:

- a) A solução existe;
- b) A solução é única e
- c) Ela depende continuamente de \mathbf{f} em \mathbf{g} , isto é, uma pequena alteração em \mathbf{g} acarreta em uma pequena alteração em \mathbf{f} .

Caso uma das três condições propostas por Hadamard não seja satisfeita, o problema é definido como mal colocado³⁷. Cabe agora entender como esses problemas que apresentam essa particularidade devem ser abordados.

4.1.2 A Primeira Tentativa para Resolver um Problema Inverso

Primeiramente, precisa-se compreender qual o método matemático utilizado para encontrar a solução de problemas inversos bem-colocados. Esse procedimento, que é conhecido por inversão direta³⁹, deve ser feito da seguinte maneira:

$$\mathbf{f} = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{g} \quad (4.2)$$

para problemas inversos mal colocados, a presença de erro experimental dificulta o cálculo de sua solução. Qualquer pequena perturbação em \mathbf{g} é amplificada por \mathbf{K}^{-1} , acarretando em uma grande perturbação em \mathbf{f} , ou seja, não há uma continuidade entre \mathbf{g} e \mathbf{f} , levando a resultados inaceitáveis ao tratar problemas em Física e Química^{37,38,40}.

Um exemplo de problema mal colocado é dado a seguir para um sistema de equações linear, onde x_1 e x_2 são desconhecidos,

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + (1 + \epsilon)x_2 = 1 + \eta \end{cases} \quad (4.3)$$

Esse sistema de equações pode ser reescrito de forma matricial, no qual a matriz \mathbf{K} é dada por $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1+\epsilon \end{bmatrix}$, a matriz \mathbf{f} , por $\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ e a matriz \mathbf{g} , por $\begin{bmatrix} 1 \\ 1+\eta \end{bmatrix}$.

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1+\epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1+\eta \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

ou seja,

$$\mathbf{Kf}=\mathbf{g} \quad (4.5)$$

onde ϵ controla o condicionamento da matriz e η representa o erro experimental. Se $\epsilon = 1$, o posto de \mathbf{K} é igual a 2, a matriz é bem-condicionada, porém se $\epsilon = 0$, as linhas de \mathbf{K} são linearmente dependentes e a matriz é chamada de mal condicionada.

O objetivo é encontrar valores de x_1 e x_2 que satisfaçam o sistema, ou seja, deve-se encontrar \mathbf{f}^{cal} . Uma forma de resolver esse problema é calculando $\mathbf{K}^{-1}\mathbf{g}$, onde

$$\mathbf{f}^{cal} = \begin{bmatrix} \frac{1+\epsilon}{\epsilon} & \frac{-1}{\epsilon} \\ \frac{-1}{\epsilon} & \frac{1}{\epsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\epsilon+\eta}{\epsilon} \\ \frac{\eta}{\epsilon} \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

A norma do resíduo, para a solução obtida a partir do cálculo da inversa, é dada por

$$\|\mathbf{Kf}^{cal} - \mathbf{g}\| = |\eta| \quad (4.7)$$

e tem a mesma magnitude do erro em \mathbf{b} . Por outro lado, a norma do erro, para esta solução, é dada por

$$\|\mathbf{f}^{cal} - \mathbf{f}^{ext}\| = \sqrt{2} \left| \frac{\eta}{\epsilon} \right| \quad (4.8)$$

Como pode-se observar a norma do resíduo na solução é maior que a norma do erro introduzido em \mathbf{g} por um fator $\frac{1}{|\epsilon|}$.

Quando o sistema é linearmente dependente, isto é, $\epsilon = 0$, a norma do erro cometido em \mathbf{f}^{cal} diverge, apesar da norma do resíduo ainda permanecer pequena. A situação ainda é complicada, mesmo quando $\epsilon \neq 0$, mas assume valores muito pequenos. Neste caso, o cálculo a partir da matriz inversa não é um caminho adequado para encontrar a solução para esse problema, quando erros estão presentes em \mathbf{b} .

A inversão direta, descrita pela Equação (4.2), é apenas válida para matrizes quadradas. Para matrizes retangulares, utiliza-se, por exemplo, o que é denominado pseudo-inversa, $(\mathbf{K}^T\mathbf{K})^{-1}\mathbf{K}^T$ ⁴¹. Dessa forma, a partir da Equação (4.9), é possível obter a Equação (4.10), onde foi feita a multiplicação pela matriz transposta \mathbf{K}^T em ambos os lados da igualdade. Essa estratégia é empregada para contornar o problema ao se

trabalhar com matrizes que não são quadradas.

$$\mathbf{K}^T \mathbf{K} \mathbf{f} = \mathbf{K}^T \mathbf{g} \quad (4.9)$$

$$\mathbf{f} = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{g} \quad (4.10)$$

No entanto, em problemas mal colocados, existem dificuldades numéricas no cálculo da matriz inversa acima. Como visto na seção (4.1.1), um problema inverso, classificado como mal colocado, não satisfaz as condições impostas por Hadamard. Portanto, é indiscutível a necessidade em empregar métodos específicos para tratar tais problemas, como métodos de regularização e redes neurais artificiais⁴².

Além disso, é importante destacar que existem outros erros envolvidos ao se trabalhar com cálculos teóricos. Alguns se resumem a aproximações, como por exemplo, o método numérico empregado, ou a limitações do próprio computador, como a representação binária dos números⁴¹.

4.1.3 Representação na Forma Matricial

O exemplo mais comum de uma equação linear conhecido é a Equação integral de Fredholm de primeira ordem, cujo operador \mathbf{K} , conhecido como núcleo, é representado por uma integral. Essa é uma das equações, dentre muitas, utilizada para representar matematicamente fenômenos físicos, que pode ser escrita genericamente como³⁹

$$\int_a^b K(x, y) f(y) dy = g(x) \quad (4.11)$$

onde $g(x)$ e $K(x, y)$ são, em princípio, funções conhecidas e $f(y)$, a função a ser obtida, para um problema inverso.

Numericamente, é possível resolver essa equação através da discretização das equações lineares pelo método da quadratura⁴¹, que será abordado na seção (5.7). Reescrevendo a Equação (4.11) utilizando o método de quadratura, considerando que o valores

de $f(y)$ sejam discretos, obtém-se³⁹

$$\begin{aligned}
 \int_a^b K(x_1, y)f(y)dy &= g(x_1) \\
 \int_a^b K(x_2, y)f(y)dy &= g(x_2) \\
 \int_a^b K(x_3, y)f(y)dy &= g(x_3) \\
 &\vdots \\
 \int_a^b K(x_m, y)f(y)dy &= g(x_m)
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Logo, para o ponto x_i , tem-se que

$$\int_a^b K(x_i, y)f(y)dy = g(x_i) \simeq \sum_j^m w_j K(x_i, y_j)f_j = g(x_m) \tag{4.13}$$

Podendo ser simplificada, incorporando os pesos w_j ao núcleo

$$\sum_j^m K_{ij}f_j = g_i \tag{4.14}$$

A Equação (4.14) pode ser reescrita ainda na forma matricial, como descrita pela Equação(4.1), onde

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} w_1K(x_1, y_1) & w_2K(x_1, y_2) & w_3K(x_1, y_3) & \dots & w_nK(x_1, y_n) \\ w_1K(x_2, y_1) & w_1K(x_2, y_2) & w_1K(x_2, y_3) & \dots & w_nK(x_2, y_n) \\ w_1K(x_3, y_1) & w_2K(x_3, y_2) & w_3K(x_3, y_3) & \dots & w_nK(x_3, y_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_1K(x_m, y_1) & w_2K(x_m, y_2) & w_3K(x_m, y_3) & \dots & w_nK(x_m, y_n) \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} f(y_1) \\ f(y_2) \\ f(y_3) \\ \dots \\ f(y_n) \end{bmatrix}, \mathbf{g} = \begin{bmatrix} g(x_1) \\ g(x_2) \\ g(x_3) \\ \dots \\ g(x_m) \end{bmatrix}$$

sendo $dim(\mathbf{K}) = m \times n$, $dim(\mathbf{f}) = n \times 1$ e $dim(\mathbf{g}) = m \times 1$.

4.2 Densidade de Estados de Fônons da Capacidade Calorífica

4.2.1 A Lei de Dulong-Petit

A Lei de Dulong-Petit é uma lei empírica, na qual obteve-se valores de capacidade calorífica para treze substâncias diferentes, enunciada em 1819, em um estudo denominado *Recherches sur quelques points importants de la théorie de la chaleur*. Tal lei estabelece uma relação de proporcionalidade matematicamente descrita como⁴³

$$C_V = 3R \quad (4.15)$$

A explicação teórica para os dados observados experimentalmente só surgiu há algum tempo depois, quando se definiu a função equipartição de energia⁴⁴.

4.2.2 Albert Einstein e Seu Estudo

Em 1907, o renomado físico Albert Einstein, fez um relevante relato sobre a obtenção da energia interna e da capacidade calorífica de um sólido⁴⁵, baseando-se em um estudo previamente desenvolvido por Planck em 1901⁴⁶. A lei empírica de Dulong-Petit estava coerente com os resultados obtidos experimentalmente, a altas temperaturas, quando a capacidade calorífica vai para $3R = 24,94 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$. Por outro lado, não foi possível observar o mesmo para baixas temperaturas.

Einstein assumiu que os átomos estavam conectados por molas e vibravam de forma independente, em volta de suas posições de equilíbrio, com uma única frequência ν_E , conhecida como frequência de Einstein⁴⁵. Nesse modelo de sólido, a energia de cada oscilador foi quantizada de acordo com a relação de Planck, $E_n = nh\nu_E$. A equação de Einstein para a capacidade calorífica de um sólido estava em perfeito acordo com dados de baixa temperaturas para o diamante. Isso acontece devido ao modelo de Einstein ignorar o fato de que as vibrações atômicas são acopladas. Conseqüentemente, deve-se considerar a distribuição de frequências $g(\nu)$ em vez de um valor único para descrever padrões de vibrações do retículo. Nessa hipótese, uma capacidade calorífica precisa em função da temperatura pode ser determinada a partir de $g(\nu)$, um problema direto bem conhecido, resolvido em 1912 por Debye⁴⁷. Em contrapartida, esse exemplo lida com um problema inverso, onde $g(\nu)$ é determinado a partir de dados experimentais de capacidade calorífica.

4.3 Rede Neural Fracionária de Hopfield

A Ciência da Computação desenvolveu uma subárea conhecida como Inteligência Artificial, no qual trata do desenvolvimento de sistemas inteligentes baseando-se nas características do cérebro humano, como a capacidade de aprendizagem, tomada de decisão

e resolução de problemas⁴⁸. Nesta seção, será abordada a técnica computacional denominada Rede Neural Artificial de Hopfield, ferramenta empregada na execução desse trabalho.

4.3.1 Simulando Neurônios Biológicos

As Redes Neurais Artificiais surgiram a partir do interesse em simular o processamento de informações de redes neurais biológicas, a fim de realizar o aprendizado e reconhecer padrões na otimização ou solução de problemas^{48,50}. A simulação de redes neurais permite adaptação rápida quando ocorre uma repentina mudança de estímulo¹¹. Sendo assim, a rede neural melhora seu desempenho em função do tempo, quando sujeita a novos treinamentos.

Em 1943, o neuroanatomista estadunidense Warren McCulloch, juntamente com o matemático estadunidense Walter Pitts descreveram o possível funcionamento de um neurônio biológico¹⁸, no qual, atualmente, é considerado o modelo básico de funcionamento de um neurônio artificial. Apesar de ser um modelo simples quando comparado com o funcionamento de um neurônio biológico, é considerado uma ótima aproximação⁴⁸.

Levando-se em consideração que as redes neurais simulam o processo de funcionamento das células dos sistema nervoso que são responsáveis por transmitir impulsos nervosos, algumas comparações podem ser levantadas. A principal delas é que a rede neural emula o circuito neural biológico, onde diversas unidades computacionais, que podem ser constituídas por um único neurônio ou um conjunto deles, estão conectadas entre si.

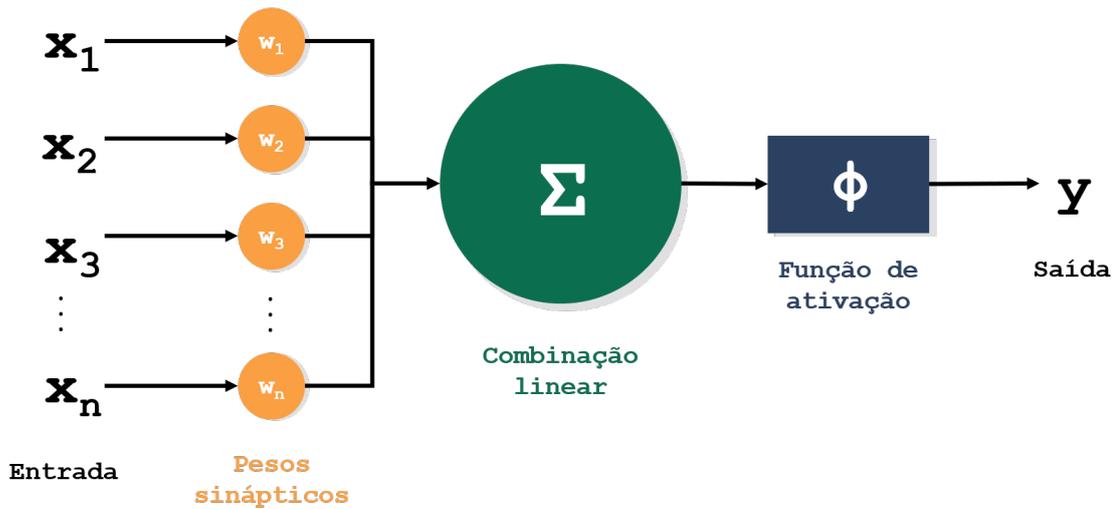
O processo de aprendizagem da rede neural acontece de forma adaptativa, a partir do treinamento dos neurônios, onde os pesos sinápticos são variados em relação aos dados de saída e entrada.

Em termos gerais, o funcionamento das unidades neurais acontece da seguinte forma: determinados valores (dados de entrada) são associados a pesos sinápticos, que são ajustados de acordo com a importância desse *input*. Em seguida, esses dados passam por uma combinação linear; se ultrapassarem o limiar da função de ativação, o neurônio transmite os dados para o neurônio seguinte, gerando os dados de saída, caso contrário, eles não são transmitidos⁴⁹, como representado na Figura (4.2). Desde então, diversos estudos foram feitos a fim de caracterizar as redes neurais artificiais⁵⁰.

4.3.2 A Rede Neural de Hopfield

John Joseph Hopfield, em seu estudo *Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities*, de 1982, percebendo que modelos físicos poderiam ser usados para cálculos computacionais, apresentou um modelo matemático, de grande impacto na arquitetura de redes, de uma rede neural associativa, da qual possibi-

Figura 4.2 – Representação esquemática da rede neural McCulloch-Pitts.



Fonte: Da autora (2020).

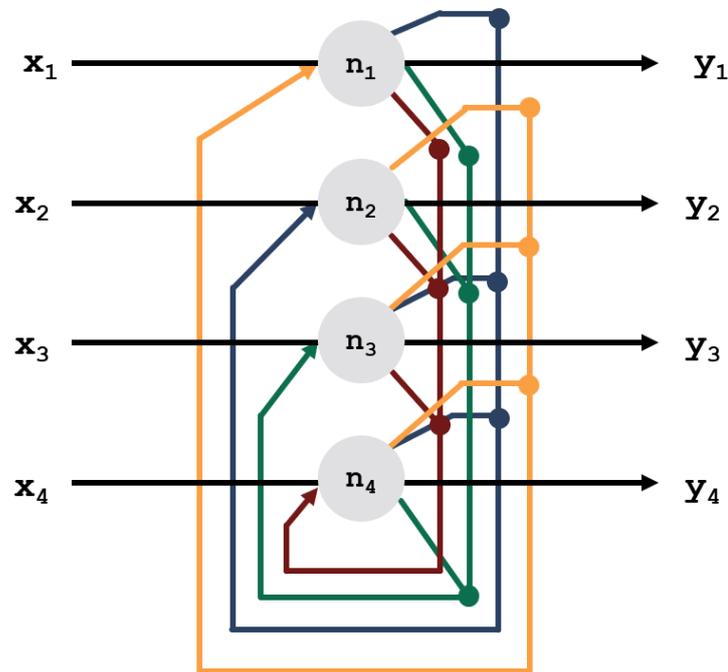
litaria a recuperação de informação a partir do conhecimento parcial do conteúdo^{12,18}.

Assim como no modelo proposto por McCulloch-Pitts, os pesos sinápticos também são adaptados de acordo com a importância das variáveis a serem processadas e o neurônio da rede de Hopfield varia entre dois estados: ativo ou inativo. Mais uma vez, as variáveis são só transmitidas se excederem o limiar da rede. Além disso, na RNH, representada pela Figura (4.3), não há distinção entre dados de entrada e de saída, uma vez que o sinal pode ser realimentado e servir como entrada do mesmo neurônio. É isso que a diferencia do modelo básico, pois é uma rede associativa que reconhece padrões e os retorna de forma a recuperar informações⁴⁸.

A RNH foi descrita pelo seu criador como um simples conjunto, agrupamento de perceptrons¹², porém com algumas diferenças. O perceptron é um modelo de rede neural criado por Frank Rosenblatt, em 1957, em que não ocorre realimentação dos dados entre os neurônios, característica conhecida como *feedforward*⁵¹. Além disso, o perceptron, como um dos modelos mais simples de rede artificial, ajusta seus pesos para que estejam de acordo com os dados de saída desejados. Já a RNH utiliza o conceito de energia da rede, em que esta alcança seu mínimo quando atinge uma solução estável⁵².

A partir daí, as Redes Neurais de Hopfield tem sido usadas em estudos para resolver problemas inversos lineares e não lineares¹⁴, determinação de constantes de acidez⁵³, constante cinética e coeficientes de absorção em dados experimentais¹⁵, além do emprego de RNH para otimização de problemas lineares de larga escala⁵⁴.

Figura 4.3 – Esquema da Rede Neural de Hopfield.



Fonte: Da autora (2020).

4.3.3 Emprego do Cálculo Fracionário na RNH

Uma das áreas exploradas é a implementação das redes neurais de Hopfield com Cálculo Fracionário. O estudo de modelos matemáticos de ordem não inteira em redes neurais evidencia uma maior capacidade computacional com grande eficiência para processamento de informação e antecipação de estímulo decorrente do emprego de derivadas fracionárias¹¹.

Dentre os autores que reportaram trabalhos que incorporam Cálculo Fracionário às redes neurais de Hopfield, o fato de as RNFH serem uma ferramenta útil e precisa para lidar com modelos matemáticos que representam fenômenos observados pela ciência é unanimidade^{10,18–21,30,31}.

4.4 Cálculo Fracionário: uma alternativa ao clássico

A troca de correspondência entre dois célebres matemáticos deu origem a uma área do cálculo pouco conhecida, mas que tem atraído interesse de diversos cientistas. O Cálculo Fracionário (CF) será abordado nesta seção, assim como algumas de suas formulações e características.

4.4.1 Contexto do Cálculo Fracionário

O conceito de cálculo fracionário (CF) surgiu em 1695, quando, por correspondência, o filósofo e matemático alemão Gottfried Wilhelm Leibniz foi questionado pelo matemático francês Guillaume de l'Hôpital sobre a generalização de derivadas de ordem inteira para derivadas de ordem fracionária. Leibniz reconheceu que a resposta a essa pergunta geraria consequências de extrema importância¹.

Essa questão fez com que o interesse de grandes nomes da Matemática se voltassem para o CF. Um histórico detalhado das contribuições da comunidade científica neste assunto pode ser encontrado na literatura^{1,6,9}, além de um levantamento que destaca alguns estudos de grande importância⁵⁵ e uma linha do tempo com eventos que contribuíram para o progresso do Cálculo Fracionário³².

Apesar de o termo Cálculo Fracionário ainda ser utilizado por questões históricas⁵⁶, é considerado mais adequado se referir à área como Cálculo de Ordem Generalizada, tendo em vista que a teoria se estende a operadores D^α , onde α pode ser racional ou irracional, positivo ou negativo, real ou complexo⁵⁷.

Um dos motivos de não ter sido bem explorada até recentemente é que o Cálculo Fracionário ainda deixa em aberto algumas questões, como por exemplo, as interpretações físicas e geométricas de derivadas fracionárias, ao passo que, para derivadas de ordem inteira, as informações já foram obtidas¹. Deve-se ressaltar que tentativas em caracterizar tais informações podem ser encontrados na literatura^{58,59}.

4.4.2 A Derivada Fracionária Segundo Caputo

Dentre tantas definições de derivadas fracionárias existentes, duas delas são empregadas nesse estudo, a derivada fracionária segundo Riemann-Liouville e a derivada fracionária segundo Caputo. O interesse nas citadas derivadas se dá por motivos de interpretações físicas. Caputo propôs uma formulação para a derivada fracionária baseando-se no que foi apresentado por Riemann-Liouville¹, onde a derivada de ordem generalizada é definida a partir da integral também apresentada por Riemann-Liouville. Tais conceitos serão introduzidos na seção 5.3.

A derivada fracionária segundo Caputo é definida como⁴¹

$$({}^C D^\alpha f)(t) = (J^{n-\alpha} D^n f)(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha-1)} \int_0^t \frac{\frac{d^n f(s)}{ds^n} ds}{(t-s)^{\alpha-n+1}} \quad (4.16)$$

onde o operador derivada é indicado por D , o operador integral é representado por J , n é um inteiro positivo e $\alpha \in \mathbb{R}^+$.

A principal vantagem em utilizar a derivada fracionária proposta por Caputo é que ela requer apenas condições iniciais dadas em termos de derivadas de ordem inteira,

representando características bem compreendidas de situações físicas e portanto, fazendo-se aplicável ao mundo real¹.

4.4.3 O Efeito de Memória

Há uma diferença importante entre operadores diferenciais de ordem inteira e os de ordem não inteira. A propriedade que os diferencia é chamada de localidade. Um operador local é aquele que ao calcular a derivada de uma função, não requer nenhuma informação adicional além de valores próximos a x . Por outro lado, ao se calcular a derivada fracionária de uma função em um determinado intervalo, é preciso conhecer os valores de tal função em todo o intervalo^{60,61}.

Como mostrado no item (4.4.2), a Equação (4.16), que se refere a derivada fracionária no sentido de Caputo, é definida por uma integral no intervalo $[0, t]$, ou seja, a integral depende do limite inferior, onde todos os pontos anteriores à t devem ser considerados para a solução desta. Essa característica na qual o intervalo abrange desde o instante inicial até o presente é chamada de não localidade e incluiu à essa definição o que é chamado de Efeito de Memória⁹.

Esse efeito também pode ser observado na discretização da integral presente na Equação (4.16), empregando método de quadratura por retângulos⁴¹, e que é dada por

$$\sum_{i=0}^N \frac{f^{(n)}(x_0 + ih)h}{[t - (x_0 + ih)]^{\alpha-n+1}} \quad (4.17)$$

onde o somatório compreende desde instante inicial x_0 até o índice final N e $n \in \mathbb{Z}^+$, indicando a ordem da derivada.

Uma abordagem matemática da não localidade é feita por Teodoro (2018), onde é demonstrada a contribuição dos valores entre um certo intervalo de integração. Além disso, a autora ainda considera o cálculo fracionário como um refinamento do Cálculo clássico⁹.

Derivadas de ordem fracionária se ajustam melhor a um comportamento específico além de não depender apenas de condições locais em determinado tempo e da história da função, garantindo algumas vantagens frente ao Cálculo tradicional para representar sistemas dinâmicos de alta ordem e fenômenos complexos não lineares⁶. Tendo em vista tais vantagens, além das características atribuídas à definição no sentido de Caputo, destacam-se alguns estudos em que a definição segundo Caputo é empregada para descrever alguns modelos físicos, como por exemplo, na equação de difusão, viscoelasticidade, relaxação dielétrica⁸, além de ser empregado nas áreas de engenharia de alimentos, robótica, econofísica⁶ e cinética de absorção de fármacos⁷.

4.4.4 Critérios para uma Derivada Fracionária

É possível encontrar na literatura critérios para afirmar quando um determinado operador é considerado um operador diferencial fracionário. Em 1978, Bertram Ross reportou, em seu trabalho intitulado *A Brief History and Exposition of the Fundamental Theory of Fractional Calculus*, cinco propriedades necessárias para caracterizar um operador diferencial fracionário⁶². Recentemente, critérios mais amplos foram apresentados, baseando nas seguintes propriedades para garantir que um operador seja reconhecido como um operador diferencial fracionário⁶³:

- a) O operador deve ser linear;
- b) A derivada de ordem zero de uma função retorna à própria função;
- c) Para uma derivada fracionária de ordem inteira, o resultado obtido é igual ao de uma derivada ordinária;
- d) A lei dos expoentes diz que $D^\alpha D^\beta f(t) = D^{\alpha+\beta} f(t)$, para α e $\beta \in \mathbb{R}$;
- e) A regra de Leibniz dita que

$$D^\alpha [f(t)g(t)] = \sum_{i=0}^{\infty} \binom{\alpha}{i} D^i f(t) D^{\alpha-i} g(t) \quad (4.18)$$

$$\text{sendo } \binom{\alpha}{i} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-i+1)i!}$$

Tais critérios são melhor abordados detalhadamente no artigo⁶³, onde as propriedades foram todas verificadas e validadas.

4.4.5 Alguns Exemplos

Com o intuito de familiarizar o conteúdo de derivadas fracionárias, alguns exemplos serão dados neste item.

A definição da derivada fracionária segundo Riemann-Liouville é dada pela equação

$$({}^{RL}D^\alpha f)(t) = (D^n J^{n-\alpha} f)(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \int_0^t f(s)(t-s)^{n-\alpha-1} ds \quad (4.19)$$

onde $n \in \mathbb{Z}^+$, $\alpha \in \mathbb{R}^+$, D é o operador derivada e J, o operador integral. A obtenção dessa definição de derivada fracionária é mostrada com detalhes posteriormente no item (5.3.2).

A fim de obter a fórmula de $({}^{RL}D^\alpha f)(t)$, sendo $f(t) = t^m$, primeiramente, é preciso resolver a integral presente na Equação (4.19)⁴¹. Por conveniência, reescreve-se a Equação (4.19) da seguinte forma

$$(J^\beta f)(t) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_0^t t^{\beta-1} \left(1 - \frac{s}{t}\right)^{\beta-1} s^m ds \quad (4.20)$$

sendo $\beta = n - \alpha$.

Para $u = \frac{s}{t}$, $s = ut$ e $ds = du$, temos

$$(J^\beta f)(t) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_0^1 t^{\beta-1} (1-u)^{\beta-1} (tu)^m du = \frac{t^{\beta+m}}{\Gamma(\beta)} \int_0^1 (1-u)^{\beta-1} u^m du \quad (4.21)$$

Se $p = \beta$ e $q = m + 1$, temos que

$$\frac{t^{p+q-1}}{\Gamma(p)} \int_0^1 (1-u)^{p-1} u^{q-1} du \quad (4.22)$$

Desconsiderando $\frac{t^{p+q-1}}{\Gamma(p)}$, a integral se assemelha bastante a função Beta⁴¹, $B(q, p)$, também conhecida por integral de Euler de primeiro tipo, na qual possui uma relação com a função gama dada por

$$B(q, p) = \frac{\Gamma(q)\Gamma(p)}{\Gamma(q+p)} \quad (4.23)$$

então

$$(J^\alpha f)(t) = \frac{\Gamma(m+1)\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(m+\alpha+1)} t^{\alpha+m} = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m+\alpha+1)} t^{\alpha+m} \quad (4.24)$$

A Equação (4.24) fornece a fórmula para calcular a derivada fracionária de Riemann-Liouville de uma função do tipo $f(t) = t^m$. Sendo $f(t) = t^2$, a derivada fracionária no sentido de Riemann-Liouville de ordem $\frac{1}{2}$ dessa função é calculada através da Equação (4.24), obtendo resultado igual a $1,5045t^{2.5}$.

O cálculo da derivada fracionária de Riemann-Liouville de uma função constante do tipo $f(t) = t^m$, com $m = 0$ resulta em $0,75225t^{1.5}$. Sendo assim, a derivada de Riemann-Liouville, apesar de possuir grande aplicabilidade, não é conveniente seu emprego, caso haja o interesse em obter uma derivada de uma função constante igual a zero⁴¹.

É possível mostrar uma equivalência entre o cálculo da derivada de ordem α de Riemann-Liouville e Caputo para a função $f(t) = t^m$. A definição da derivada fracionária de Caputo é dada pela Equação (4.16), onde temos a seguinte relação

$$({}^C D^\alpha f)(t) = (J^{n-\alpha} D^n s^m) \quad (4.25)$$

A partir da relação dada pela Equação (4.26)

$$\frac{d^a t^b}{dt^a} = \frac{b!}{(b-a)!} t^{b-a} \quad (4.26)$$

Temos que

$$D^n(s^m) = \frac{m!}{(m-n)!} t^{m-n} \quad (4.27)$$

Como visto pela dedução feita para Riemann-Liouville,

$$(J^\beta s^q)(t) = \frac{\Gamma(q+1)}{\Gamma(q+1+\beta)} t^{\beta+q} \quad (4.28)$$

Logo,

$$(J^{n-\alpha} D^n(s^m))(t) = \frac{m!}{(m-n)!} (J^{n-\alpha} t^{m-n}) = \frac{m!}{(m-n)!} \frac{\Gamma(m-n+1)}{\Gamma(m-n+1+n-\alpha)} t^{n-\alpha+m-n} \quad (4.29)$$

Sendo assim

$$({}^C D^\alpha f)(t) = \frac{m!}{(m-n)!} \frac{\Gamma(m-n+1)}{\Gamma(m+1-\alpha)} t^{-\alpha+m} \quad (4.30)$$

Portanto,

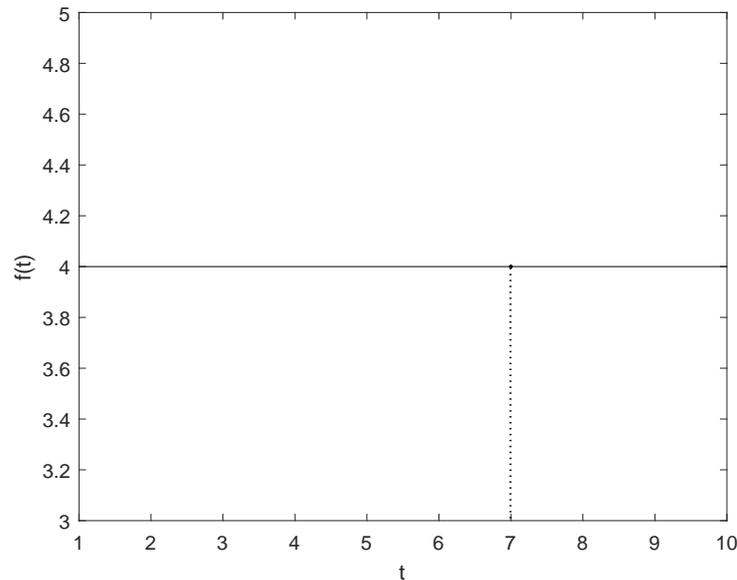
$$({}^C D^\alpha f)(t) = \frac{m!}{\Gamma(m+1-\alpha)} t^{-\alpha+m} = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m-\alpha+1)} t^{-\alpha+m} \quad (4.31)$$

Note que a Equação (4.31) equivale à Equação (4.24) e, portanto, a derivada de Caputo para a função $f(t) = t^m$, quando $m = 0$ é diferente de zero. Porém, há um detalhe que deve ser salientado. Para esse caso, a Equação (4.31) é válida somente para $m \neq 0$ pois para a Equação (4.27), a função fatorial não é definida para números negativos. Logo, esta equação não é apropriada para determinar a derivada de uma função constante do tipo $f(t) = t^m$, quando $m=0$ ⁴¹.

Uma maneira de facilitar a visualização da derivada fracionária de Caputo de um função constante pode ser abordada da seguinte maneira. Primeiramente, considera-se a definição da derivada de Caputo dada pela Equação (4.16), na qual é representada através de uma integral de ordem α , para $0 < \alpha < 1$, de uma derivada de ordem inteira. Supondo que a função $f(t) = 4$, como mostrada na Figura (4.4). A derivada de ordem inteira dessa função é igual a zero. Logo, para o ponto $t = 7$, $\frac{df}{dt} = 0$ e, ao calcular $({}^C Df)(t)$, o resultado consequentemente será igual ao zero.

Essa característica é muito relevante ao empregar a derivada fracionária proposta por Caputo, pois ao tratar de problemas físicos, que envolvam taxas, é de extrema importância que a derivada de função constante seja igual a zero¹.

Figura 4.4 – Gráfico da função $f(x) = 4$.



Fonte: Da autora (2020).

4.4.6 Transformada de Laplace de Derivadas Fracionárias

Um método operacional para encontrar uma solução analítica de uma equação diferencial é a transformada de Laplace, na qual substitui-se as operações de integração ou derivação por equações algébricas⁶⁴. A transformada de Laplace é dada pela equação

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = F(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (4.32)$$

onde $f(t)$ é definida no intervalo $0 \leq t \leq \infty$, s é uma variável complexa e $F(s)$ é a transformada de Laplace de $f(t)$.

Por exemplo, para resolver um problema de valor inicial $f(0)$, do tipo

$$\frac{df(t)}{dt} = kf(t) \quad (4.33)$$

Aplica-se a transformada de Laplace em ambos os lados da igualdade da Equação (4.33), como demonstrado a seguir, obtendo

$$\mathcal{L}\left\{\frac{df(t)}{dt}\right\} = \mathcal{L}\{kf(t)\} \quad (4.34)$$

Embora para se obter as transformadas de Laplace seja necessário ter conhecimento de suas propriedades matemáticas, estão disponíveis na literatura tabelas com as principais transformadas, facilitando ainda mais o cálculo de tais soluções^{41,64}. Para o exemplo apresentado aqui, e fazendo uso da Tabela (A.1), disponível no Anexo A, tem-se

que

$$sF(s) - f(0) = kF(s) \quad (4.35)$$

cuja solução para $F(s)$ é dada por

$$F(s) = \frac{f(0)}{s - k} \quad (4.36)$$

Como $F(s) = \mathcal{L}\{f(t)\}$ então $f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{F(s)\}$. Isso indica que a derivada de primeira ordem depende das condições iniciais para ser calculada.

A transformada de Laplace do mesmo problema também pode ser aplicada em derivadas fracionárias⁴¹, por exemplo, para a derivada fracionária de Riemann-Liouville, na qual é definida como

$${}^{RL}D^\alpha f = D^n J^{n-\alpha} f \quad (4.37)$$

Seguindo os mesmos passos do exemplo anterior, aplica-se a transformada de Laplace em ambos os lados da igualdade, obtendo

$$\mathcal{L}\{{}^{RL}D^\alpha f\} = \mathcal{L}\{kf(t)\} \quad (4.38)$$

Mais uma vez, como auxílio de valores fornecidos pela Tabela (A.1), tem-se que

$$\mathcal{L}\{{}^{RL}D^\alpha f\} = s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{n-1-k} D^k J^{n-\alpha} f(0) \quad (4.39)$$

para $n - 1 < \alpha < n$ e $n \in \mathbb{Z}$.

Substituindo a Equação (4.39) em (4.38), tem-se que

$$s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{n-1-k} D^k J^{n-\alpha} f(0) = \mathcal{L}\{kf(t)\} \quad (4.40)$$

Sabendo que $\mathcal{L}\{kf(t)\} = kF(s)$ e isolando $F(s)$, obtém-se

$$F(s) = \frac{\sum_{k=0}^{n-1} s^{n-1-k} D^k J^{n-\alpha} f(0)}{s - k} \quad (4.41)$$

É possível observar que a transformada de Laplace da derivada no sentido de Riemann-Liouville requer condições iniciais dadas a partir de uma integral de ordem fracionária $(J^{n-\alpha})f(0)$, que até então não apresenta interpretação física.

O mesmo procedimento pode ser empregado para calcular a derivada de um problema de valor inicial utilizando a derivada proposta por Caputo. O resultado encontrado

é dado pela Equação (4.42)

$$F(s) = \frac{\sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-1-k} D^k f(0)}{s^\alpha - k} \quad (4.42)$$

A derivada fracionária proposta por Caputo necessita de $D^k f(0)$, em outras palavras, é mostrado que é preciso conhecer as derivadas de ordem inteira da função. Tais derivadas representam fenômenos com interpretações físicas das quais já estamos familiarizados.

5 METODOLOGIA

5.1 Rede Neural Fracionária de Hopfield

Primeiramente, considera-se um problema linear do tipo $\mathbf{Kf} = \mathbf{g}^{exp}$, onde \mathbf{K} , \mathbf{f} e \mathbf{g}^{exp} correspondem ao operador, a causa e ao dado experimental, respectivamente. Sendo E a soma dos quadrados da diferença entre o valor calculado \mathbf{g}^{calc} e o valor experimental \mathbf{g}^{exp} ¹², tem-se que

$$E = \frac{1}{2} \|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}^{exp}\|^2 = \frac{1}{2} \sum_i^n e_i^2 \quad (5.1)$$

onde $e_i = \left[\left(\sum_j^m K_{ij} f_j \right) - g_i^{exp} \right]$ e n é o número de dados experimentais.

O objetivo, então, é encontrar uma função ótima \mathbf{f}^* que minimize o funcional E , em outras palavras, que a diferença entre o \mathbf{g}^{calc} e \mathbf{g}^{exp} seja a menor possível. Portanto, a função objetiva, também conhecida por função custo, avaliará o conhecimento da rede neural⁴¹.

A rede neural, que é descrita por um conjunto de equações diferenciais de primeira ordem, é constituída por neurônios interligados entre si e cujo estado u_j , para os neurônios $j = 1, 2, 3, \dots, m$, é uma função de $f_j(t)$, tal que $u_j(t) = h^{-1}(f_j(t))$ e $f_j(t) = h(u_j(t))$, com $m = \dim(\mathbf{f})$. Esse estado do neurônio u_j evolui em função do tempo e está associado ao tempo de aprendizagem da rede.

O processo de aprendizagem acontece quando a condição $\frac{\partial E}{\partial t} < 0$ é imposta, pois assim será garantido que a rede sempre evoluirá, onde a função custo E assumirá valores sempre menores que os anteriores.

Logo,

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \sum_i^n e_i \left(\sum_j^m K_{ij} \frac{\partial f_j}{\partial t} \right) \quad (5.2)$$

sendo $j = 1, 2, \dots, m$, onde m é o número de neurônios da rede.

Como $\frac{\partial f_j}{\partial t} = \frac{dh}{du_j} \frac{\partial u_j}{\partial t}$, tem-se que

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \sum_i^n e_i \left(\sum_j^m K_{ij} \frac{dh}{du_j} \frac{\partial u_j}{\partial t} \right) \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \sum_j^m \left(\sum_i^n e_i K_{ij} \right) \frac{dh}{du_j} \frac{\partial u_j}{\partial t} \quad (5.4)$$

Dessa forma, duas condições são necessárias para satisfazer o critério de aprendi-

zagem:

$$\frac{du_j}{dt} = - \sum_i^n e_i K_{ij} \quad (5.5)$$

e

$$\frac{dh}{du_j} \geq 0 \quad (5.6)$$

Em relação as escolhas de $h(u_j)$, usualmente a função tangente hiperbólica escolhida é $h = \frac{\tanh(u_j)+1}{2} \times (b - a) + a$, na qual é sempre crescente em relação a u_j , como estabelecido pela Equação (5.6). Essa equação impõe uma restrição no espaço de solução⁴¹, com valores de f_j entre a e b . Nesse caso, a Equação (5.4) é reescrita como

$$\frac{\partial E}{\partial t} = - \sum_{j=1}^m \frac{\partial h}{\partial u_j} \left(\frac{\partial u_j}{\partial t} \right)^2 \quad (5.7)$$

tendo $\frac{\partial E}{\partial t} < 0$, como desejado.

Para encontrar uma equação correspondente a evolução do neurônio, reescreve-se a Equação (5.5) como

$$\frac{du_j}{dt} = - \sum_i^n \left[\left(\sum_j^m K_{ij} f_j \right) - g_i^{\text{exp}} \right] K_{ij} = - \sum_i^n K_{ij}^T \left(\sum_j^m K_{ij} f_j \right) + \sum_i^n K_{ij}^T g_i^{\text{exp}} \quad (5.8)$$

ou ainda

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\mathbf{K}^T \mathbf{K} \mathbf{f} + \mathbf{K}^T \mathbf{g}^{\text{exp}} = \mathbf{\Omega}(\mathbf{u}) \quad (5.9)$$

A Equação (5.9) é um sistema de equações diferenciais de ordem inteira, com condição inicial $u_j(0) = h^{-1}(f_j(0))$. Nesse modelo, o estado do neurônio u_j se propaga até atingir um mínimo em E , no qual um novo estado do neurônio no tempo $t+dt$ é atualizado utilizando uma expressão que envolve a matriz, $\mathbf{K}^T \mathbf{K}$, como critério. A diferença desse método é que o cálculo da inversa de $\mathbf{K}^T \mathbf{K}$ não é necessário. Esse procedimento de otimização representa o processo de aprendizagem da RNH. Quando $\frac{du_j}{dt} \approx 0$, para todo j , significa que a rede aprendeu a resolver o problema proposto, nesse caso $f_j = h(u_j)$.

5.2 A Função Gama

Uma ferramenta matemática empregada para a generalização do Cálculo tradicional para ordens arbitrárias é a função gama, que é definida por

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} \exp^{-t} dt \quad (5.10)$$

onde $x \in \mathbb{R}$.

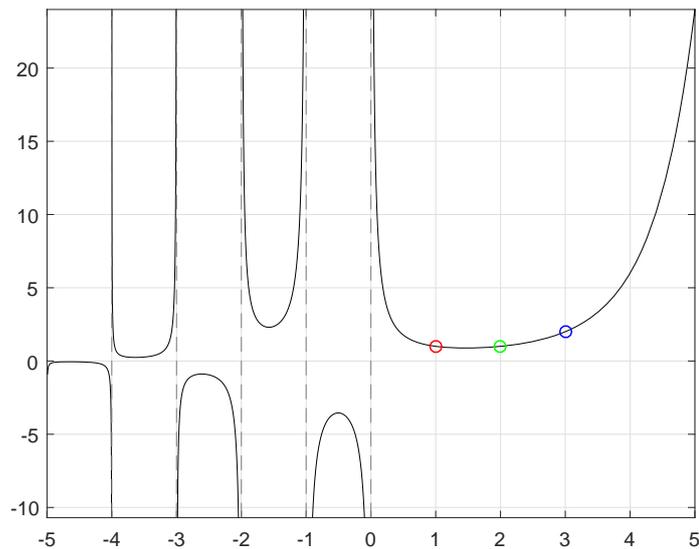
A propriedade descrita pela Equação (5.11) faz a interpolação entre a função fatorial e a função gama⁶⁵. Isso é necessário pois a função fatorial é definida apenas para números inteiros positivos. Dessa forma, é possível estender o domínio de equações para números reais positivos.

$$(x - 1)! = \Gamma(x) \quad (5.11)$$

Basicamente, o objetivo da função gama é definir uma curva que passe pelos pontos da função fatorial⁶⁵. O gráfico da função gama está representado na Figura (5.1). É possível observar três pontos destacados (○), (○) e (○) que representam os pontos $x = 1$, $x = 2$ e $x = 3$, respectivamente, onde a propriedade dada pela Equação (5.11) é satisfeita. Tais pontos correspondem exatamente ao fatorial de $(x - 1)!$. Matematicamente, isso é demonstrado pelo conjunto de equações (5.12):

$$\begin{aligned} \Gamma(1) &= (1 - 1)! = 1 \\ \Gamma(2) &= (2 - 1)! = 1 \\ \Gamma(3) &= (3 - 1)! = 2 \end{aligned} \quad (5.12)$$

Figura 5.1 – Gráfico da Função Gama.



Fonte: Da autora (2020).

5.3 Cálculo Fracionário

5.3.1 A integral de Riemann-Liouville

Três definições de derivadas fracionárias são amplamente empregadas: a derivada de Grünwald-Letnikov, a derivada de Riemann-Liouville e a derivada de Caputo. Dessas três definições previamente citadas, a definição de derivada fracionária segundo Caputo é a mais usada quando existe a necessidade de empregar derivadas de funções constantes iguais a zero. A vantagem principal que justifica esse fato é que ela requer condições iniciais dadas em termos de derivadas de ordem inteira, como visto no item (4.4.6), representando características bem compreendidas de situações físicas e assim, deixando-a aplicável aos problemas do mundo real.

Antes de introduzir a definição de derivada de Caputo, é preciso definir a integral que foi proposta por Riemann-Liouville. De início, emprega-se o método de integrações sucessivas a fim de generalizar a ordem da operação. Considerando que J representa o operador integral, tem-se que

$$(Jf)(t) = \int_0^t f(s)ds \quad (5.13)$$

neste caso,

$$(JJf)(t) = (J^2f)(t) = \int_0^t J(u)du = \int_0^t \left(\int_0^u f(s)ds \right) du \quad (5.14)$$

mudando a ordem de integração, é possível obter

$$(J^2f)(t) = \int_0^t \int_t^s f(s)duds = \int_0^t f(s) \left(\int_t^s du \right) ds = \int_0^t f(s)(s-t)ds \quad (5.15)$$

onde os limites são alterados de maneira conveniente.

Fazendo uma nova integração, tem-se

$$(JJJf)(t) = (J^3f)(t) = \int_0^t J^2(u)du = \int_0^t \left(\int_0^u f(s)(s-u)ds \right) du \quad (5.16)$$

o que leva, pelo mesmo procedimento, ao resultado

$$(J^3f)(t) = \int_0^t \int_t^s f(s)(s-u)duds = \int_0^t f(s) \left[-\frac{(s-u)^2}{2} \right]_t^s ds = \int_0^t f(s) \frac{(s-t)^2}{2} ds \quad (5.17)$$

Integrando mais uma vez

$$(JJJJf)(t) = (J^4f)(t) = \int_0^t J^3(u)du = \int_0^t \left(\int_0^u f(s) \frac{(s-u)^2}{2} ds \right) du \quad (5.18)$$

chega-se em

$$\begin{aligned} (J^4 f)(t) &= \int_0^t \int_t^s f(s) \frac{(s-u)^2}{2} du ds = \int_0^t f(s) \left[-\frac{(s-u)^3}{3 \cdot 2} \right]_t^s ds \\ &= \int_0^t f(s) \frac{(t-s)^3}{3!} ds \end{aligned} \quad (5.19)$$

Este resultado já é suficiente para sugerir que

$$(JJJJ\dots JJf)(t) = (J^n f)(t) = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^t (t-s)^{n-1} f(s) ds \quad (5.20)$$

A Equação (5.20) é bem definida para todo n inteiro positivo.

Na tentativa de encontrar uma expressão que generalize a Equação (5.20), incorporando números não inteiros a ela, é necessário utilizar uma ferramenta um pouco mais avançada da matemática, a função gama, descrita na seção (5.2)

$$(JJJJ\dots JJf)(t) = (J^n f)(t) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^t (t-s)^{n-1} f(s) ds \quad (5.21)$$

agora pode-se fazer $n = \alpha$ e obter

$$(J^\alpha f)(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} f(s) ds \quad (5.22)$$

onde α é um número real positivo e $t > 0$.

A equação acima representa uma possível generalização para uma integral de ordem α . Esta integral é conhecida como integral fracionária de Riemann-Liouville de ordem α .

5.3.2 As Derivadas Fracionárias Segundo Riemann-Liouville e Caputo

Para introduzir a definição de derivada fracionária, Bernhard Riemann e Joseph Liouville partiram do Teorema Fundamental do Cálculo, que afirma que $DJf(t) = f(t)$, ou seja

$$\frac{d}{dt} \int_0^t f(s) ds = f(t) \quad (5.23)$$

Logo, o Teorema Fundamental do Cálculo afirma que se uma função contínua é integrada e depois diferenciada, obtém-se a função original como resultado. Empregando o método de indução, temos que

$$D^r J^r f(t) = f(t) \quad (5.24)$$

onde r é um valor inteiro positivo. A definição da derivada de ordem não inteira é feita a partir da Equação (5.24). Para tal, faz-se $r = n - \alpha$, neste caso

$$(D^{n-\alpha} J^{n-\alpha} f)(t) = f(t) \quad (5.25)$$

aplicando o operador D^α em ambos os lados da equação, obtém-se o seguinte resultado

$$(D^\alpha D^{n-\alpha} J^{n-\alpha} f)(t) = (D^\alpha f)(t) \quad (5.26)$$

Usando a regra da composição de derivadas, que $D^\alpha D^b f = D^{\alpha+b} f$, obtém-se

$$(D^n J^{n-\alpha} f)(t) = (D^\alpha f)(t) \quad (5.27)$$

O operador D^n é bem definido para n inteiro e o operador $J^{n-\alpha}$ para um expoente real positivo. Neste caso,

$$({}^{RL}D^\alpha f)(t) = (D^n J^{n-\alpha} f)(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \int_0^t f(s)(t-s)^{n-\alpha-1} ds \quad (5.28)$$

tal que $n \in \mathbb{Z}^+$.

A derivada fracionária de Riemann-Liouville de ordem α é, então, obtida.

Já a derivada de Caputo é definida como uma integral fracionária de uma derivada de ordem inteira⁹. Ou seja,

$$({}^C D^\alpha f)(t) = (J^{n-\alpha} D^n f)(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha-1)} \int_0^t \frac{d^n f(s)}{ds^n} ds \quad (5.29)$$

O operador fracionário é não local, uma vez que a derivada fracionária depende do limite inferior da integral. Essa característica contrasta com a derivada de ordem inteira, que é um operador local. Outras propriedades da derivada de Caputo incluem:

1. A derivada de ordem zero de uma função retorna a função original;
2. A derivada de Caputo para $n \in \mathbb{Z}$ tem o resultado igual ao da derivada clássica de ordem n ;
3. Ao derivar uma função constante empregando a definição segundo Caputo, o resultado é igual a zero;
4. A derivada fracionária de Caputo é um operador mal colocado, não cumprindo o critério de continuidade entre dados de entrada e dados de saída.

5.4 Implementação da RNH com Cálculo Fracionário

A modificação da rede neural de Hopfield com cálculo fracionário utiliza a derivada fracionária em função do tempo segundo Caputo. Portanto, o comportamento dinâmico do modelo RNFH pode ser descrito da seguinte maneira

$$({}^C D_t^\alpha \mathbf{u})(t) = -\mathbf{K}^T \mathbf{K} \mathbf{f} + \mathbf{K}^T \mathbf{g}^{exp} = \Omega(\mathbf{u}) \quad (5.30)$$

com condição inicial $u_j(0) = h^{-1}(f_j(0))$, quando $0 < \alpha < 1$.

Agora, o resultado depende da derivada de ordem fracionária, α , $x_i(\alpha) = f^{-1}(u_i(\alpha))$, isto é, $f_j^*(\alpha) = h^{-1}(u_i(t; \alpha))$ quando $t \rightarrow \infty$.

Como visto anteriormente, a derivada fracionária de Caputo de uma função constante é igual a zero. Logo, a solução encontrada pelas Equações (5.9) e (5.30), quando a rede aprender, estará num ponto de equilíbrio $\mathbf{f}^* = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{g}^{exp}$. O ponto de equilíbrio é obtido quando $\Omega = 0$ para as Equações (5.9) e (5.30).

É possível notar que \mathbf{f}^* é a solução que minimiza E , entretanto, \mathbf{f}^* não pode ser obtida diretamente, apenas calculando $(\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{g}^{exp}$, devido a esse problema ser classificado como mal condicionado. Por outro lado, a solução encontrada pela RNH ou pela RNFH não requer o cálculo da matriz inversa. Além disso, a função de ativação impõe uma restrição no espaço de solução.

As RNH e RNFH são métodos capazes de fornecer uma solução estável e finita. É importante ressaltar que as soluções obtidas pelos métodos RNH e RNFH são as mesmas, porém as trajetórias do estado do neurônio da condição inicial ao ponto de equilíbrio são diferentes. Além disso, vale ressaltar que, neste caso, não se faz necessário que a rede passe pelo processo de treinamento, uma vez que o modelo físico já é bem estabelecido e conhecido.

5.4.1 A Regra da Cadeia para Derivadas Fracionárias

Ao realizar uma derivada de uma função composta do tipo, $F(x) = f(g(x))$ ou, ainda, $F(x) = f \circ g$, usualmente utiliza-se de uma regra bastante conhecida no Cálculo Clássico chamada de Regra da Cadeia⁶⁶, na qual $\frac{df}{dg}$ é a taxa de variação de f com respeito a g e $\frac{dg}{dx}$ é a taxa de variação de g em relação a x . Matematicamente,

$$F'(x) = \frac{df}{dg} \frac{dg}{dx} \quad (5.31)$$

Porém, pode-se afirmar que a regra da cadeia não é válida para as definições de derivada fracionária de Riemann-Liouville e Caputo⁶⁷.

A Regra da Cadeia para uma função composta de uma derivada fracionária possui

uma forma diferente da apresentada para derivadas de ordem inteira, e é dada por⁶⁷

$$D_x^\alpha f(g(x)) = (D_g^1 f(g))_{g=g(x)} D_x^\alpha g(x) \quad (5.32)$$

onde D^α é a derivada fracionária de ordem α em relação a x .

Fica evidente que a Equação (5.32) se difere da regra da cadeia para derivada de primeira ordem dada pela Equação (5.31). Um exemplo prático para auxiliar nessa observação será dado a seguir. Tomando a função $f(g(x))$, onde $f(g) = g^2$ e $g(x) = x^3$, é possível reescrevê-la na forma $f(g(x)) = (x^3)^2 = x^6$. A definição de derivada fracionária para uma função de potência é dada por⁶⁷

$$D_x^\alpha x^m = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m-\alpha+1)} x^{m-\alpha} \quad (5.33)$$

Sendo $m = 6$, obtém-se que

$$D_x^\alpha x^6 = \frac{\Gamma(7)}{\Gamma(7-\alpha)} x^{6-\alpha} \quad (5.34)$$

Porém ao aplicar a definição dada pela Equação (5.32) para a mesma função $f(g(x))$, o resultado obtido é

$$D_x^\alpha f(g(x)) = 2 \frac{\Gamma(4)}{\Gamma(4-\alpha)} x^{4-\alpha} \quad (5.35)$$

É demonstrado então que existe uma desigualdade entre as Equações (5.34) e (5.35), e, portanto, a regra da cadeia não é satisfeita para $\alpha \neq 1$.

Um exemplo será apresentado a seguir, empregando a Regra da Cadeia descrita pela Equação (5.32) para uma função do tipo $F(x) = f(g(x))$

A partir da definição proposta por Caputo para a derivada de ordem α , Equação (4.16), e considerando $n = 1$, tem-se que

$$({}^C D_x^\alpha F)(x) = J^{1-\alpha} \left(\frac{df}{dg} \frac{dg}{dx} \right) \quad (5.36)$$

onde a derivada será feita em função de t .

A Equação (5.36) pode ser reescrita da seguinte forma

$$({}^C D_x^\alpha F)(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-s)^{-\alpha} \frac{df}{dg} \frac{dg}{ds} ds \quad (5.37)$$

Em seguida, tem-se que

$$({}^C D_x^\alpha F)(x) = \frac{df}{dg} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-s)^{-\alpha} \frac{dg}{ds} ds \quad (5.38)$$

Logo,

$$({}^C D_x^\alpha F)(x) = \frac{df}{dg} J^{1-\alpha} \frac{dg}{dx} \quad (5.39)$$

Reescrevendo a Equação (5.39), tem-se

$$({}^C D_x^\alpha F)(x) = \frac{df}{dg} D_x^\alpha g \quad (5.40)$$

Então

$$({}^C D_x^\alpha F)(x) = D_g^1 f(g) D_x^\alpha g \quad (5.41)$$

A Equação (5.41) encontrada equivale a Regra da Cadeia apresentada pela Equação (5.32). Porém é preciso ressaltar que ao considerar a derivada parcial $\frac{df}{dg}$ como uma constante ao calcular a integral, ignora-se o fato de que g é função de x . Logo, a Regra da Cadeia proposta pela Equação (5.32) não é válida.

5.4.2 Sobre a Monotonicidade das Funções

No Cálculo tradicional, uma função é denominada monótona em um intervalo $[a, b]$ quando a primeira derivada f' não muda seu sinal, como descrito pelo **Teorema 1**. Além disso, o máximo global dessa mesma função ocorre quando $f' = 0$ e $f'' \leq 0$. Já o mínimo global, ocorre quando $f' = 0$ e $f'' \geq 0$ ⁶⁶.

Teorema 1 *Uma função $f \in [a, b]$ é monótona em $[a, b]$ se, e somente se, sua primeira derivada f' não muda seu sinal no intervalo.*

É pertinente verificar se esse teorema também é válido ao empregar derivadas fracionárias. Seria intuitivo abranger o **Teorema 1** para derivadas de ordem não inteira, porém, Kai Diethelm, em seu artigo *Monotonicity of functions and sign changes of their Caputo derivatives*⁶⁸, conduziu um estudo onde esse teorema foi verificado utilizando a derivada fracionária no sentido de Caputo, no intervalo $\alpha \in (a, b)$.

Foi concluído que o fato de não haver mudança de sinal na $D^\alpha f$ não é suficiente para definir se tal função é monótona ou não, quando empregada a definição de derivada fracionária segundo Caputo. Para valores que α pode assumir, sendo eles $\alpha \in (0, 1)$, existe um α^* , no qual não se garante a monotonicidade da função f .

É previsto a função custo diminuir quando $t \rightarrow \infty$ para valores de α inteiros. Tendo em vista que não é garantido o mesmo quando α assume valores fracionários, certas oscilações para a norma do resíduo em função do tempo são esperadas.

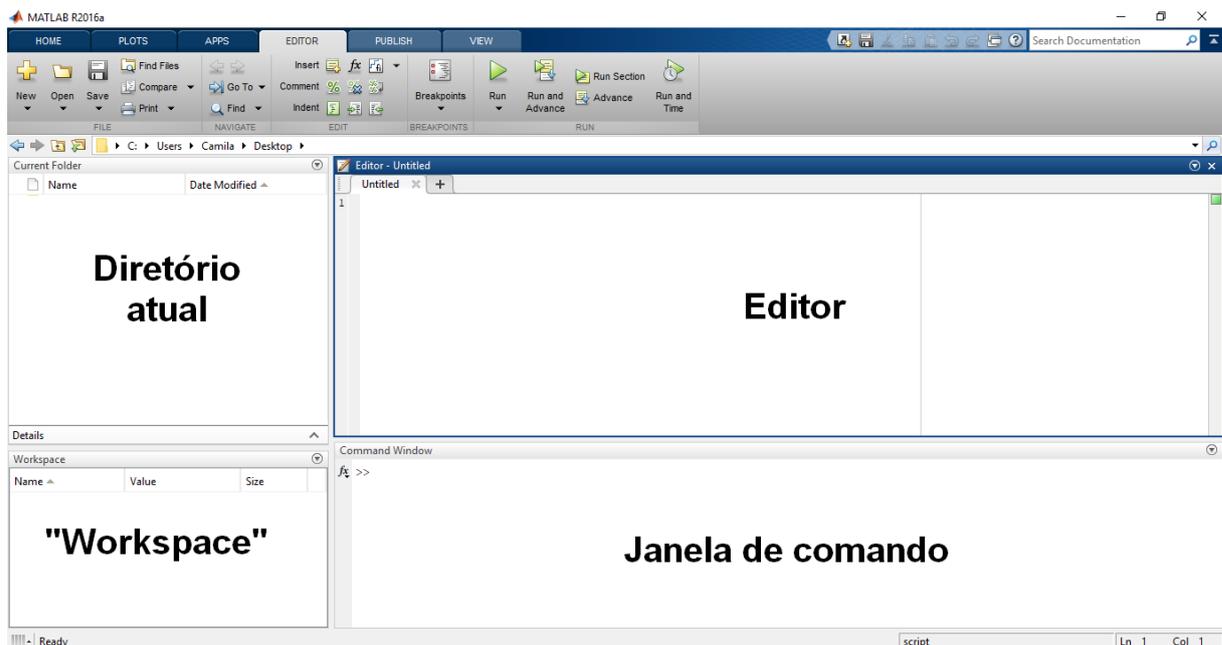
5.5 O Ambiente de Programação

5.5.1 MATLAB

Desenvolvido pela Mathworks Inc., no final da década de 70, o MATrix LABoratory (MATLAB) é um software disponível para diferentes plataformas, incluindo Windows e Mac, utilizado para cálculos numéricos e visualização computacional. Utiliza linguagem semelhante ao C e Fortran e é destinado a fazer cálculos com matrizes²⁴.

O espaço de trabalho do MATLAB é constituído basicamente de quatro janelas, como mostrado na Figura (5.2). A janela principal é chamada de janela de Comando, onde é exibido o *prompt*, no qual serão introduzidos comandos para o MATLAB executar. Em seguida, tem-se o Diretório Atual que é a interface para manipulação de diretórios e arquivos. A janela denominada *Workspace* é responsável por salvar e exibir as variáveis salvas. E, por fim, a janela Editor possibilita a criação de subrotinas e algoritmos²⁴. É na janela Editor que os programas desenvolvidos nesse trabalho foram criados.

Figura 5.2 – Ambiente de programação do MATLAB.



Fonte: Da autora (2020).

O MATLAB possui uma biblioteca que fornece uma coleção de arquivos para resolver numericamente equações diferenciais ordinárias (ODEs, do inglês *Ordinary Differential Equations*). Tal coleção é constituída de sete métodos com características próprias adequadas a diferentes tipos de problemas, como por exemplo, a ODE45, que é reportado como um dos primeiros métodos a serem utilizados para obter a solução de novos problemas²⁴.

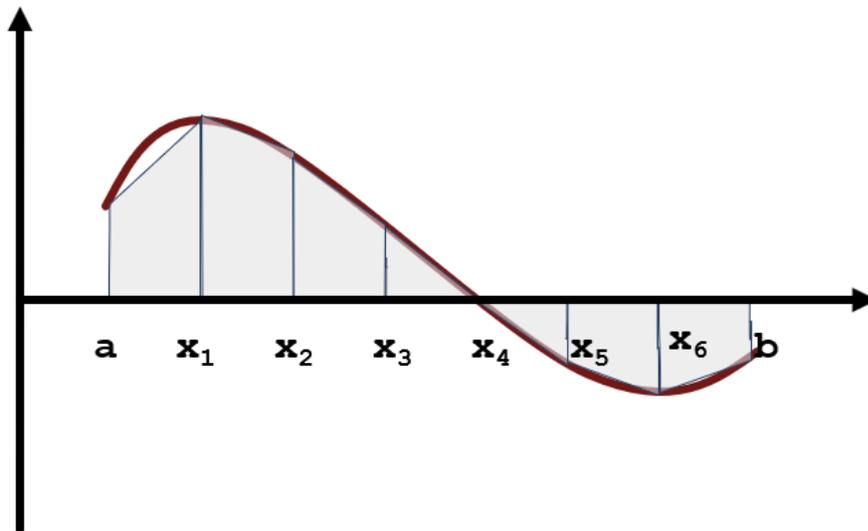
Além das subrotinas para resolver equações diferenciais ordinárias, está disponível gratuitamente na plataforma de troca de arquivos do MATLAB, a subrotina FDE12 utilizada para tratamento numérico de equações diferenciais fracionárias. O método contido na FDE12 é uma generalização do método Adams-Bashforth-Moulton, no qual foi reportado como um método numérico bastante adequado e útil para a resolução de equações diferencial de ordem generalizada, como as equações de Mittag-Leffler⁶⁹.

5.5.2 Método de Quadratura por Trapézios

A integração numérica pode ser feita por diversos métodos, incluindo os métodos de quadratura por retângulos, trapézios ou parábolas, principalmente em casos em que não se tem uma função definida por uma fórmula analítica e sim por um conjunto de dados do tipo $x_i, f(x_i)$, tal que $i = 0, 1, \dots, n$ ⁴¹.

O método de quadratura por trapézios está entre os métodos mais simples empregados e que garante boa velocidade de convergência⁴¹. E se baseia na aproximação da área de uma função por trapézios. Sendo assim, a integral corresponde a soma das área dos trapézios, $(\text{base maior} + \text{base menor}) \times \text{altura} / 2$, que estão acima do eixo x, menos as áreas dos trapézios que estão abaixo do eixo x, como mostrado na Figura (5.3).

Figura 5.3 – Aproximação da área da curva através do método de quadratura por trapézios.



Fonte: Da autora (2020).

A área do trapézio é dada pela Equação (5.42).

$$I = \int_a^b f(x)dx = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{[f(x_i) + f(x_{i+1})]\Delta x}{2} \quad (5.42)$$

onde $\Delta x = (b - a)/n$ e $x_i = a + i\Delta x$.

A subrotina a seguir mostra o cálculo realizado da integral da função $f(x) = \sin(x)$, através do método de quadratura por trapézios.

```
function sab=inttrap(n)
a=0; b=pi/2; dx=(b-a)/n;
i=0:n; x=a+i*dx; f=func(x);
s=sum(f(2:n)); sab=[f(1)+2*s+f(n+1)]*dx/2;
end

function f=func(x)
f=sin(x);
end
```

5.6 Método Numérico para Equação Diferencial Fracionária

Um dos métodos numéricos mais comuns e confiáveis é o algoritmo Previsor-Corretor (do inglês, *Predictor-Corrector*) baseado no método fracionário de Adams-Bashforth. Esse algoritmo é uma generalização do integrador clássico Adams-Bashforth-Moulton, bastante empregado na solução numérica de problemas de primeira ordem⁷⁰, cuja subrotina disponibilizada pelo MATLAB é a FDE12, citada na seção (5.5.1).

Nesta seção, um método numérico para a solução de sistemas de equações não lineares é discutido, onde

$$({}_0^C D^\alpha u_j)(t) = \Omega(u_1(t), u_2(t), u_3(t), \dots, u_m(t)) \quad (5.43)$$

sendo $u_j(t_0) = u_j(0)$, $0 < \alpha < 1$. Para resolver a Equação (5.43), aplica-se o operador integral fracionário J^α em ambos os lados da equação,

$$J^\alpha({}_0^C D^\alpha u_j)(t) = u_j(t) - u_j(0), \quad (5.44)$$

onde $j = 1, 2, \dots, m$. Finalmente, a Equação (5.44) é mudada para sua forma equivalente

$$u_j(t_k) = u_j^0 + (J^\alpha \Omega(u_1(s), u_2(s), u_3(s), \dots, u_m(s)))(t_k), \quad (5.45)$$

que é a equação de Volterra de segunda ordem, sendo $0 < s < t_k$. A Equação (5.45) é a generalização do método Adams-Bashforth-Moulton. Portanto, conhecendo $J^\alpha \Omega(u_{j=1\dots m}(s))$, é possível encontrar $u_j(t)$ para todo o tempo e $j = 1, 2, \dots, m$.

Também é descrito o método numérico baseado na regra de trapézios, citado anteriormente no item (5.5.2), para resolver a equação integral fracionária $(J^\alpha \Omega)(t)$ ⁴¹.

Suponha que o intervalo $[0, t]$ é subdividido em q entre $s_k = kh$ e $s_{k+1} = (k+1)h$, onde $h = t/q$,

$$J^\alpha \Omega = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{k=0}^{q-1} \left[\int_{kh}^{(k+1)h} (t-s)^{\alpha-1} \Omega(u_{j=1\dots m}(s)) ds \right] \quad (5.46)$$

onde $0 \leq s \leq t$ e $0 \leq t \leq qh$. Para encontrar $\Omega(u_{j=1\dots m}(s))$, com $kh < s < (k+1)h$, a série de Taylor aproximada em múltiplas variáveis é empregada,

$$\Omega(u_{j=1\dots m}(s)) \approx \Omega(kh, u_{j=1\dots m}(kh)) + \sum_i \Omega_{u_i} (u_i(s) - u_i(kh)) \quad (5.47)$$

sendo $\Omega_{u_i} = \left. \frac{d\Omega(u_{j=1\dots m}(s))}{du_i} \right|_{u_i=u_i(kh)}$. Reescrevendo a Equação (5.46) como

$$J^\alpha f = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{k=0}^{q-1} \left[\Omega(kh, u_{j=1\dots m}(kh)) \int_{kh}^{(k+1)h} (t-s)^{\alpha-1} ds + \sum_i \Omega_{u_i} \int_{kh}^{(k+1)h} (t-s)^{\alpha-1} (u_i(s) - u_i(kh)) ds \right] \quad (5.48)$$

Agora, se $u_i(s) = \tilde{u}_i(s)$, no qual $\tilde{u}_i(s)$ é um valor aproximado, temos que

$$J^\alpha \Omega = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{k=0}^{q-1} \left\{ \left[\Omega(kh, u_{j=1\dots m}(kh)) + \sum_i \Omega_{u_i} (\tilde{u}_i(s) - u_i(kh)) \right] w_{n-k}^\alpha \right\} \quad (5.49)$$

onde

$$w_{n-k}^\alpha = \int_{kh}^{(k+1)h} (t-s)^{\alpha-1} ds = \frac{h^\alpha}{\alpha} [i^\alpha - (i-1)^\alpha], \quad (5.50)$$

com $i = n-k$. Mais informações sobre esse método podem ser encontrados na literatura²⁶.

5.7 Método Numérico para Determinação de Distribuição de Frequências através de Dados Experimentais

Primeiramente, é necessário determinar a relação entre $C_V(T)$ e $g(\nu)$. Em termodinâmica estatística, essa conexão é feita através da função de partição, de acordo com

$$z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n/kT} = e^{-h\nu/2kt} \sum_n \left(e^{-h\nu/kT} \right)^n \approx \frac{e^{-h\nu/2kt}}{1 - e^{-h\nu/kT}} \quad (5.51)$$

onde $E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu$, e k e h são a constante de Boltzmann e Planck, respectivamente. Enquanto a energia vibracional é menor que kT , dessa forma $x = h\nu/kT < 1$, a soma $\sum_0^\infty x^n$ pode ser aproximada por $\frac{1}{(1-x)}$. Seguindo o procedimento

$$\ln z = -\frac{h\nu}{2kT} - \ln(1 - e^{-h\nu/kT}), \quad (5.52)$$

e $\ln Z = 3N \ln z$, no qual foi considerada apenas uma frequência vibracional, próxima àquela considerada por Einstein.

Levando em consideração a distribuição de frequências $g(\nu)$ em vez de um único valor, como foi feito por Debye, pode escrever $\ln Z$ como

$$\ln Z = - \int_0^\infty \frac{u\nu}{2} g(\nu) d\nu - \int_0^\infty \ln(1 - e^{-u\nu}) g(\nu) d\nu, \quad (5.53)$$

onde $u = h/kT$. A energia interna é calculada como $U = kT^2 (\frac{\partial \ln Z}{\partial T})_V$, de onde a capacidade calorífica pode ser estabelecida por $C_V(T) = (\partial U / \partial T)_T$. Finalmente, a capacidade calorífica do sólido é dada por

$$C_V(T) = k \int_0^\infty \frac{(u\nu)^2 e^{u\nu}}{(e^{u\nu} - 1)^2} g(\nu) d\nu \quad (5.54)$$

A Equação (5.54) permite determinar o $C_V(T)$ a partir de $g(\nu)$. A questão que vem à tona é se existe uma equação para determinar $g(\nu)$ a partir de $C_V(T)$.

Várias tentativas para lidar com o problema inverso da capacidade calorífica são encontradas na literatura. Primeiramente, Montroll, em 1942, usando a transformada de Fourier, encontrou uma expressão para determinar $g(\nu)$ a partir de $C_V(T)$, na qual é difícil de ser aplicada, visto que essa expressão apresenta a integral do núcleo no plano complexo. Além disso, com um mínimo de erro nos dados de $C_V(T)$, a inversão se torna instável. O mesmo problema ocorre em outras fórmulas.

A Equação (5.54) é uma equação linear integral de Fredholm de primeira ordem, conhecida como um problema mal colocado. Portanto, métodos apropriados como a Rede Neural de Hopfield foram usadas para determinar uma solução adequada. Antes disso, a quadratura por trapézios foi usada para discretizar a equação linear integral como $c_j = \sum_i^n K_{ij} g_i$, com $j = 1, 2, \dots, m$, $K_{ij} = K(u_j, \nu_i) w_i$, $c_j = C_V(u_j)$ e $g_i = g(\nu_i)$, no qual $w_i = 1/2$ para todo $1 < i < n$ e $w_i = w_n = 1$. Logo, a equação (5.54) pode ser expressa como

$$\mathbf{c} = \mathbf{K} \mathbf{g}, \quad (5.55)$$

onde o vetor coluna \mathbf{c} representa a capacidade calorífica ($C_V(u_j)$), \mathbf{g} caracteriza a função $g(\nu)$ e \mathbf{K} é o operador linear entre as duas quantidades.

Usando a Rede Neural de Hopfield generalizada com derivadas de ordem fracionária, é possível se obter $g(\nu)$ através de $C_V(T)$, resolvendo algumas equações diferenciais de ordem fracionária da forma

$$\frac{d^\alpha u}{dt^\alpha} = -\mathbf{K}^T \mathbf{K} \mathbf{g} + \mathbf{K}^T \mathbf{c} \quad (5.56)$$

Essas equações foram integradas como descrito no item (5.6). O estado do neurônio evolui de acordo com o tempo, de uma condição inicial $u_i = \text{arctanh}(2f_i(t) - 1)$, com $g_i(t) = 0$,

até o estado final.

6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos ao empregar a metodologia em problemas inversos mal colocados discutida na seção (5) são apresentados a seguir, além de uma breve discussão sobre a RNFH. Os algoritmos de resolução dos problemas 2×2 ; Matriz de Vandermonde e Densidade de Estados de Fônons da Capacidade Calorífica, elaborados pelo grupo de pesquisa do Laboratório Química Matemática da UNIFAL-MG, estão incluídos nos Apêndices A, B e C, respectivamente.

A rotina FDE12 disponível em <https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/32918-predictor-corrector-pece-method-for-fractional-differential-equations> é requerida para executar os algoritmos.

6.1 Problema de dimensão 2×2

A princípio, tomou-se um sistema linear do tipo $\mathbf{Kf}=\mathbf{g}$, onde $\mathbf{K}=[1 \ 1; 1 \ 1+\epsilon]$ e $\mathbf{g}=[1; 1+\eta]$ como o problema inicial no qual foi aplicada a RNHF para investigar sua eficiência. Sabendo-se que o posto da matriz \mathbf{K} corresponde ao número de linhas linearmente independentes da mesma, pôde-se observar que o posto dessa matriz é dependente do valor de ϵ . Assumindo um valor para ϵ , por exemplo, $\epsilon = 1$, o posto da matriz \mathbf{K} é 2 e, portanto as linhas de \mathbf{K} são linearmente independentes, logo a matriz é considerada bem-condicionada. Agora, para $\epsilon = 0$, a matriz possui linhas linearmente dependentes e, portanto, a matriz é chamada de mal condicionada. Para valores de ϵ entre 0 e 1, o sistema citado possui diferentes graus de mal condicionamento. Dessa forma, pôde-se concluir que o posto da matriz empregada nesse primeiro exemplo é dependente do valor de ϵ .

O número de condicionamento da matriz \mathbf{K} é dado por

$$\text{cond}(\mathbf{K}) = \frac{\sqrt{4 + 2\epsilon + \epsilon^2 + (2 + \epsilon)\sqrt{4 + \epsilon^2}}}{\sqrt{4 + 2\epsilon + \epsilon^2 - (2 + \epsilon)\sqrt{4 + \epsilon^2}}} \quad (6.1)$$

Quando o problema é mal colocado, não há uma solução única e estável devido aos erros experimentais e a solução obtida pelos métodos usuais não representam resultados fisicamente aceitáveis.

Um sistema linear com número de condicionamento baixo é dito bem-condicionado, enquanto que um sistema linear que apresenta número de condicionamento alto é conhecido como mal condicionado. A dificuldade se encontra justamente no sistema linear mal condicionado ao empregar métodos usuais, como por exemplo o método de eliminação de Gauss e o método Newton-Raphson.

Utilizando o método de eliminação de Gauss (MEG), foi possível obter uma solução

de $\mathbf{f}_{\text{MEG}} = [1 - \eta/\epsilon; \eta/\epsilon] = [-9; 10]$, quando o valor de $\epsilon = 0,01$ e $\eta = 0,1$, com número de condicionamento $\text{cond}(\mathbf{K}) = 402$. Tendo em vista que a solução exata para $\mathbf{K}\mathbf{f} = \mathbf{g}$ corresponde a $\mathbf{f}_{\text{ext}} = [1; 0]$. Entretanto, pôde-se observar nesse exemplo o não cumprimento de um dos requisitos impostos por Hadamard, a continuidade da função, onde pequenas alterações em \mathbf{g} , que são controladas por η , podem levar a diferenças na solução \mathbf{f} , quando $\text{cond}(\mathbf{K})$ é grande. A mesma dificuldade é encontrada ao empregar o método Newton-Raphson, cujo resultado $\mathbf{f}_{\text{MNR}} = [-1; 1]$. O MNR consiste em minimizar a função custo E (5.1), onde a atualização do valor inicial é dado por $(\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1}$. Se tratando de um problema mal colocado, há dificuldades em se calcular numericamente a inversa da matriz \mathbf{K} .

Uma maneira de impedir que a solução tenha uma discrepância em relação ao valor exato é restringir a norma da solução. O método de regularização de Tikhonov adiciona novos termos à função objetivo E representando tal restrição. Estes novos termos referem-se à norma da solução, assim como a norma da derivada primeira e segunda da solução.

Por outro lado, a restrição na RNH é imposta quando se escolhe a função \tanh como função de ativação da rede. A RNH não requer o cálculo da matriz inversa, como mostrado na Equação (5.9), e além disso, ela converge para uma solução correta e de forma estável.

Empregando a RNH para encontrar a solução deste exemplo proposto, o resultado encontrado convergiu para a solução exata, $\mathbf{f}_{\text{RNH}} = [1,0000; 0,0450]$, quando $\epsilon = 0,01$ e $\eta = 0,1$, como mostrado na Figura (6.1), o que é próximo do resultado esperado. O sistema de equações diferenciais (5.56), com $\alpha = 1$, foi integrado pelo método apresentado na seção (5.6).

Empregando a RNFH, com $\alpha = 1, 3$, a taxa de convergência foi cinco vezes maior que a taxa encontrada para o algoritmo usual (RNH). A solução encontrada para esse problema pela RNFH convergiu para $\mathbf{f}_{\text{RNFH}} = [1,0000; 0,0450]$, na qual foi o mesmo resultado encontrado pela RNH. A comparação entre o modelo RNH ($\alpha = 1$) e o modelo RNFH é mostrado nas Figuras (6.1), usando $\alpha = 1, 3$ e $\alpha = 1, 7$, respectivamente.

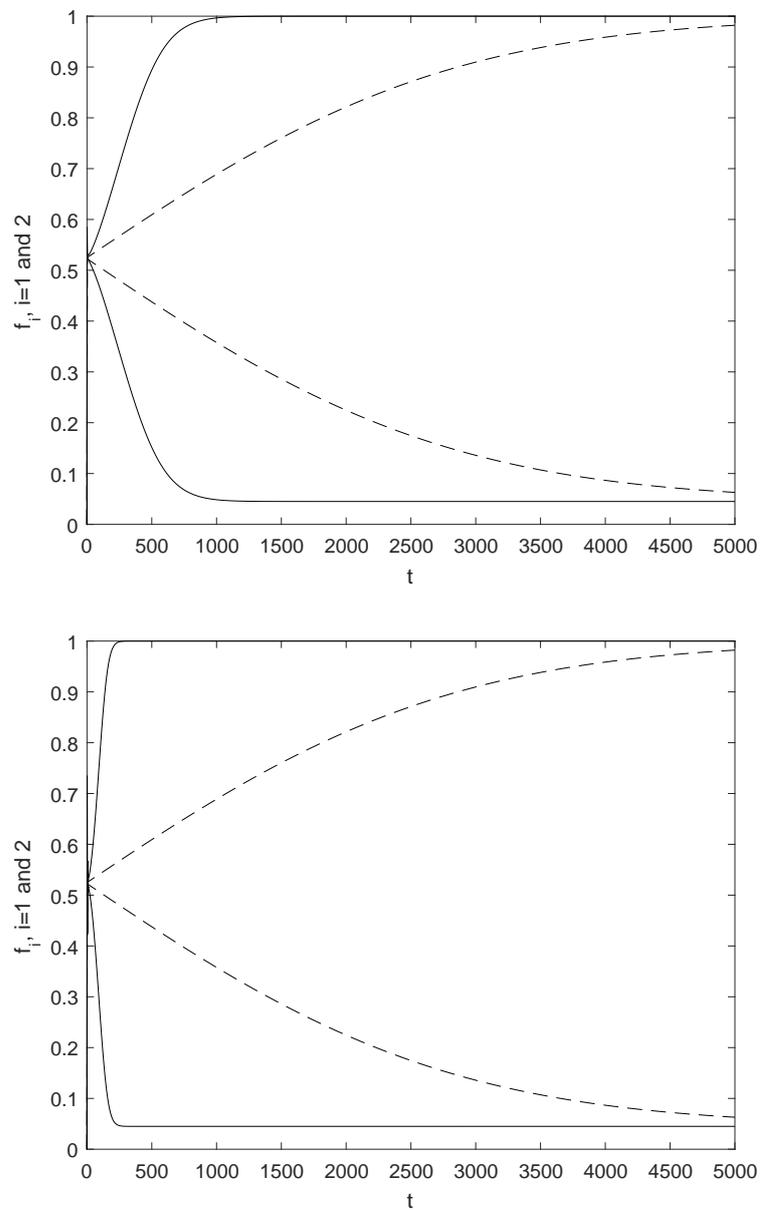
As Figuras (6.2(a)) e (6.2(b)) mostram a comparação da norma do resíduo obtida pelo modelo RNH ($\alpha = 1$) e o modelo RNFH em função do tempo, usando $\alpha = 1, 3$ e $\alpha = 1, 7$, respectivamente. É possível observar também que a taxa de convergência foi maior quando α é maior que 1.

A Tabela (6.1) mostra o tempo $\tau_{0,0655}$ para diferentes valores de α , no qual $\|\mathbf{K}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|$ decai para menos que 0,0655. A partir da Tabela (6.1), foi possível inferir que uma melhor performance ocorreu quando α é maior que 1. A taxa de convergência usando o modelo RNFH com $\alpha = 1, 7$ foi de 15 vezes maior quando comparado com o modelo RNH ($\alpha = 1$). Essa performance foi ainda melhor com $\alpha = 1, 9$, cerca de 22 vezes maior quando comparado com o modelo usual.

Quando $\epsilon = 0,001$ e $\eta = 0,01$ foram empregados, o número de mal condicionamento foi de 4×10^3 . Para esse sistema linear, ambos métodos (RNH e RNFH) convergiram

para a solução desejada ($\mathbf{f}_{RNH} = \mathbf{f}_{RNFH} = [1, 0000; 0, 0450]$), entretanto, com uma grande diferença na performance, como mostrado pela Tabela (6.1).

Figura 6.1 – (a) Refinamento da solução ao longo do tempo, usando RNH (-----), para o sistema linear com $\epsilon = 0, 1$ e dados experimentais com erro de $\eta = 0, 01$. A solução com RNFH ($\alpha = 1, 3$) (——) converge para $[1, 000; 0, 0450]$ no tempo de 5000 unidades. O resíduo final é de $\|\mathbf{K}\mathbf{f} - \mathbf{g}\| = [-4, 1 \times 10^{-6}, -4, 5 \times 10^{-4}]$ e o erro de $\|\mathbf{f} - \mathbf{f}_{\text{exato}}\| = [0, 000; 0, 0450]$. (b) Resultado para o mesmo problema usando $\alpha = 1, 7$.



Fonte: Da autora (2020).

O tempo $\tau_{0,00655}$ para diferentes valores de α , no qual $\|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}\|$ decai para um valor menor que 0,00655 também foi mostrado na Tabela (6.1). Nesse caso, a taxa de convergência usando o modelo RNFH com $\alpha = 1,7$ foi 103 vezes maior quando comparado com o modelo RNH ($\alpha = 1$). A taxa de convergência foi ainda maior para o modelo RNFH com $\alpha = 1,9$, cerca de 202 vezes maior que o obtido com RNH. A partir desses resultados, pode-se concluir que a Rede Neural Fracionária de Hopfield proporciona uma melhor performance em relação a Rede Neural de Hopfield.

Tabela 6.1 – Comparação dos resultados usando RNH ($\alpha = 1$) e RNFH

$\epsilon = 0,01, \eta = 0,1$				
α	$\tau_{<0,0655}^\alpha$	$\tau_{<0,0655}^{\alpha=1} / \tau_{<0,0655}^\alpha$	$\ \mathbf{Kf} - \mathbf{g}\ _{t=5000}$	$\ \mathbf{g}^{exp} - \mathbf{g}^{ext}\ _{t=5000}$
1,0	1300	1	0,064	0,065
1,3	280	4,7	0,064	0,045
1,7	88	15	0,064	0,045
1,9	60	22	0,064	0,045
$\epsilon = 0,001, \eta = 0,01$				
α	$\tau_{<0,00655}^\alpha$	$\tau_{<0,00655}^{\alpha=1} / \tau_{<0,00655}^\alpha$	$\ \mathbf{Kf} - \mathbf{g}\ _{t=5000}$	$\ \mathbf{g}^{exp} - \mathbf{g}^{ext}\ _{t=5000}$
1,0	142740	1	0,0067	0,67
1,3	10361	14	0,0064	0,22
1,7	1385	103	0,0064	0,0045
1,9	71	202	0,0064	0,0044

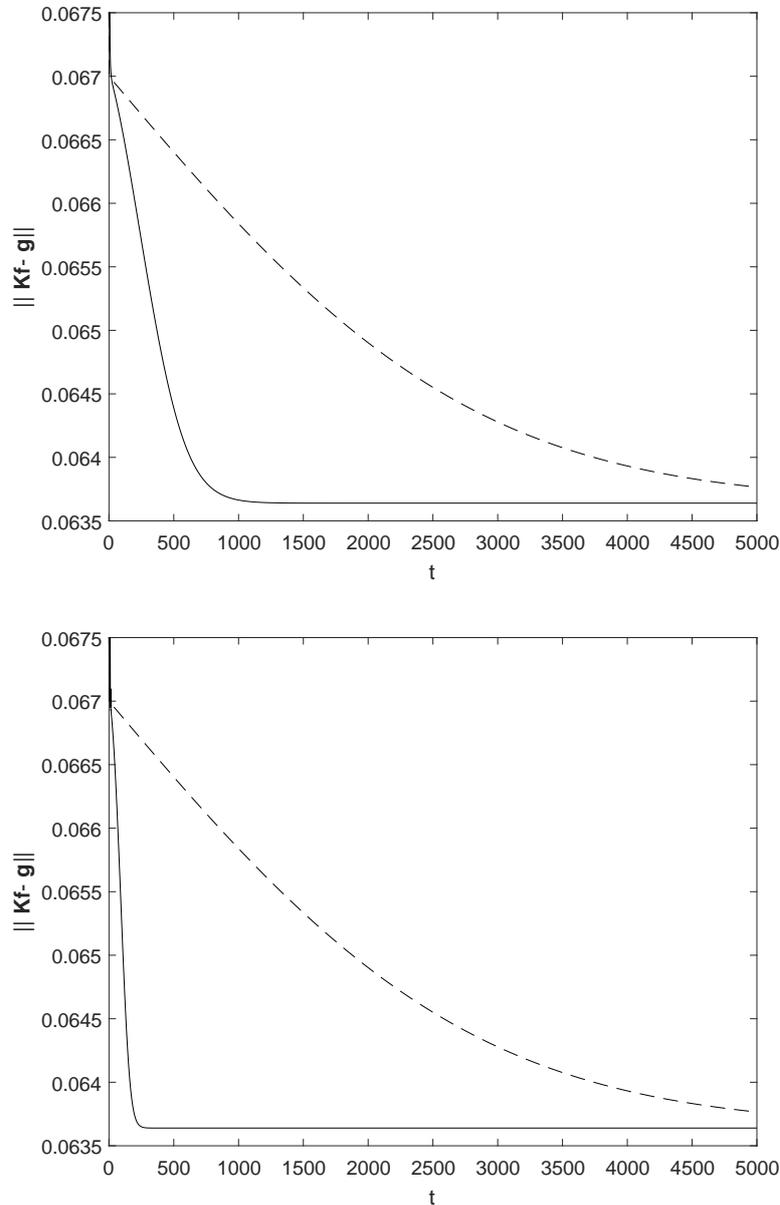
Fonte: Da autora (2020).

Demonstrando o que foi dito no item (5.4.2), o comportamento esperado para o resíduo em função do tempo para $\alpha = 1,3$ e $\alpha = 1,7$, respectivamente, é mostrado nas Figuras (6.3(a)) e (6.4(a)). Onde, para os dois casos, num período pequeno de 10 unidades, é possível observar oscilações. Dessa forma, para $0 < \alpha < 1$, não há garantia de que $\|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}\|$ irá decair em todo o intervalo. As Figuras (6.3(b)) e (6.4(b)) mostram a comparação entre a RNH e RNFH durante o tempo de 10 unidades e apresenta a trajetória do neurônio nos pontos iniciais, indicando o processo de aprendizagem da rede neural.

6.2 A Matriz de Vandermonde

O próximo exemplo discute o caso da matriz de Vandermonde, um problema bastante conhecido por ser mal colocado. Dados os valores de uma função $f(x)$, em dois

Figura 6.2 – (a) Resíduo em relação ao tempo, empregando o modelo RNH (-----), para o sistema linear $\epsilon = 0,01$ e erro experimental $\eta = 0,001$. Solução usando modelo RNFH ($\alpha = 1, 3$, ———). (b) A norma do resíduo para o mesmo problema usando RNFH com $\alpha = 1, 7$.

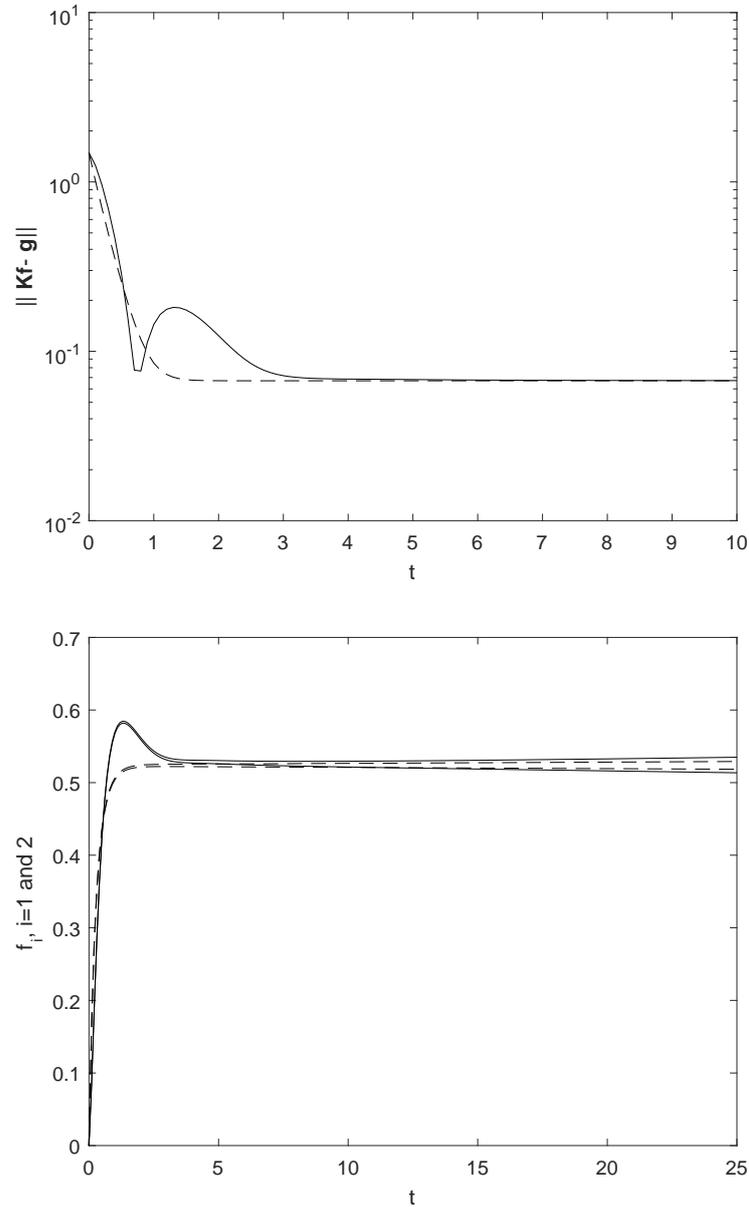


Fonte: Da autora (2020).

valores distintos de x , por exemplo x_0 e x_1 , podemos aproximar $f(x)$ por uma função polinomial de grau 1, $p_1(x) = a_0x + a_1$, que satisfaz as condições $p_1(x_0) = f(x_0)$ e $p_1(x_1) = f(x_1)$. Nesse caso, a solução desejada (valores de a_0 e a_1) é obtida resolvendo o sistema $p_1(x_0) = a_0x_0 + a_1 = f(x_0)$ e $p_1(x_1) = a_0x_1 + a_1 = f(x_1)$.

O polinômio interpolador de grau n pode ser escrito na forma $P_n = a_n + a_{n-1}x + a_{n-2}x^2 + \dots + a_0x^n$. Para que $P_n(x)$ substitua $f(x)$, os coeficientes a_j devem ser determina-

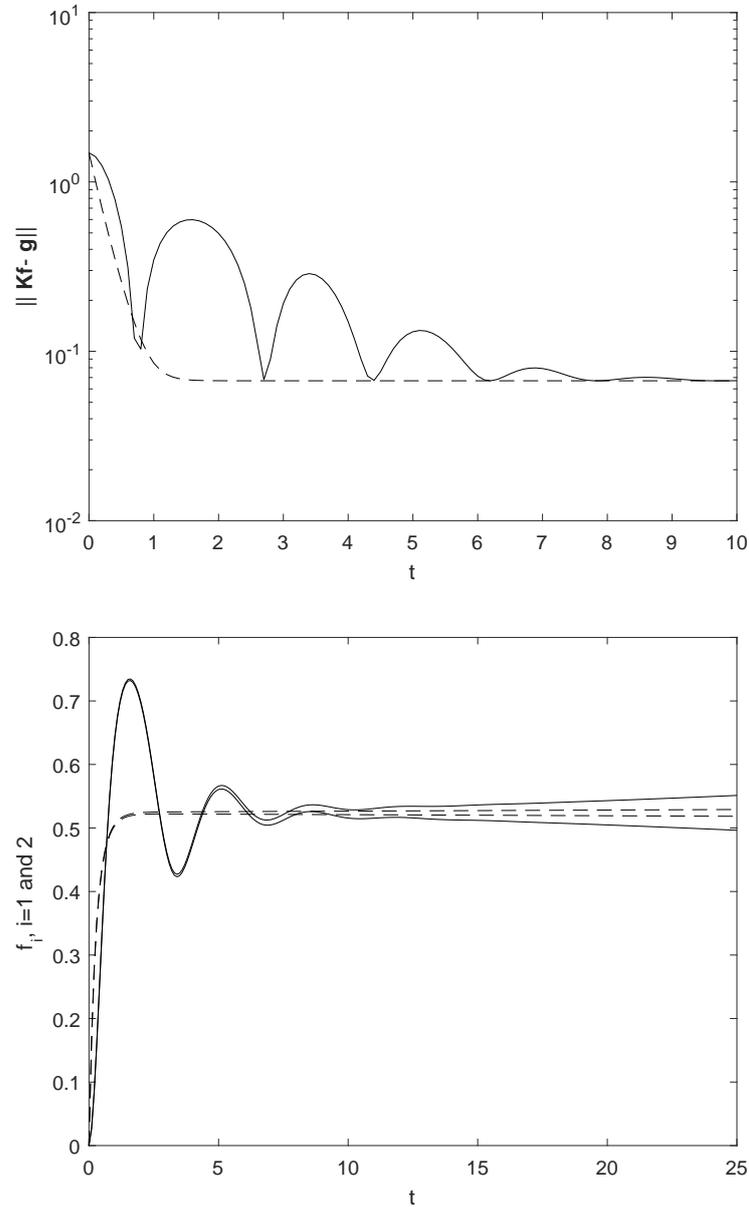
Figura 6.3 – (a) Resíduo em relação ao tempo, empregando o modelo RNH (-----), para o sistema linear $\epsilon = 0,1$ e erro experimental $\eta = 0,01$. Solução usando modelo RNFH ($\alpha = 1, 3$, ———). (b) Refinamento da solução ao longo de 25 unidades arbitrárias de tempo, usando RNH (.....), para o mesmo sistema.



Fonte: Da autora (2020).

dos, para todo $0 \leq j \leq n$. De modo a ajustar esses coeficientes aos dados, $p_n(x_j) = f(x_j)$ deve ser satisfeito para todo j entre 1 e n . Neste caso, os coeficientes a_i são obtidos

Figura 6.4 – (a) Resíduo em relação ao tempo, empregando o modelo RNH (-----), para o sistema linear $\epsilon = 0,1$ e erro experimental $\eta = 0,01$. Solução usando modelo RNFH ($\alpha = 1,7$, ———). (b) Refinamento da solução ao longo de 25 unidades arbitrárias de tempo, usando RNH (.....), para o mesmo sistema.



Fonte: Da autora (2020).

resolvendo o sistema linear $\mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{f}$, ou

$$\begin{bmatrix} x_0^n & \dots & x_0^2 & x_0 & 1 \\ x_1^n & \dots & x_1^2 & x_1 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_n^n & \dots & x_n^2 & x_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_n \end{bmatrix}.$$

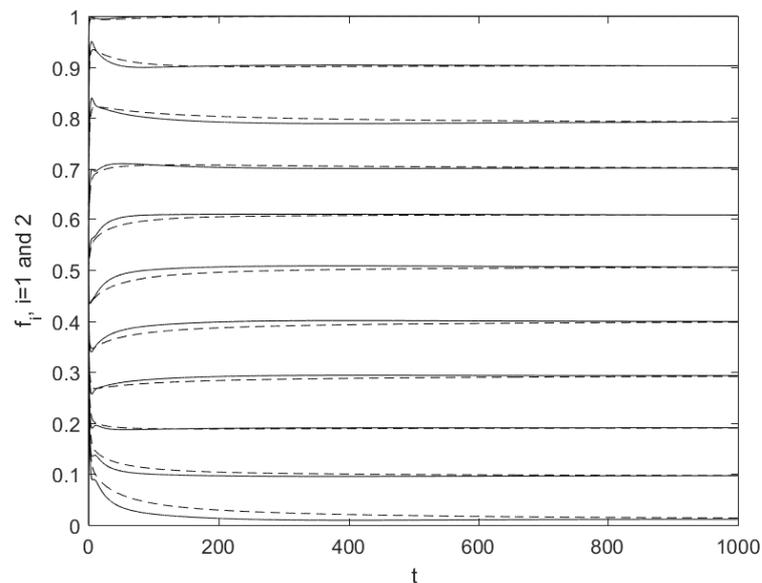
Portanto, a questão de encontrar os coeficientes está resolvida, por métodos vistos anteriormente, tomando $\mathbf{a} = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{f}$. A matriz \mathbf{X} é conhecida como matriz de Vandermonde.

Os coeficientes podem ser encontrados por métodos citados na seção (6.1), MEG e MNR. Entretanto, diferentes estudos tem mostrado que matrizes de Vandermonde tendem a ser bastante mal condicionadas. Nesse caso, como visto anteriormente, MEG e MNR não obterão uma solução adequada. Dessa forma, os modelos RNH e RNFH foram empregados.

A matriz de Vandermonde de dimensão 21×21 , com $0 < x_i < 1$, foi utilizada para investigar a performance do modelo RNFH. O número de condicionamento da matriz é igual a 10^{17} . Para ambos os métodos (RNH e RNFH), a função \tanh foi utilizada como função de ativação. A equação diferencial (5.30), com $\alpha = 1$ para RNH e $0 < \alpha < 1$ para RNFH foi integrada pelo método apresentado na seção 5.6.

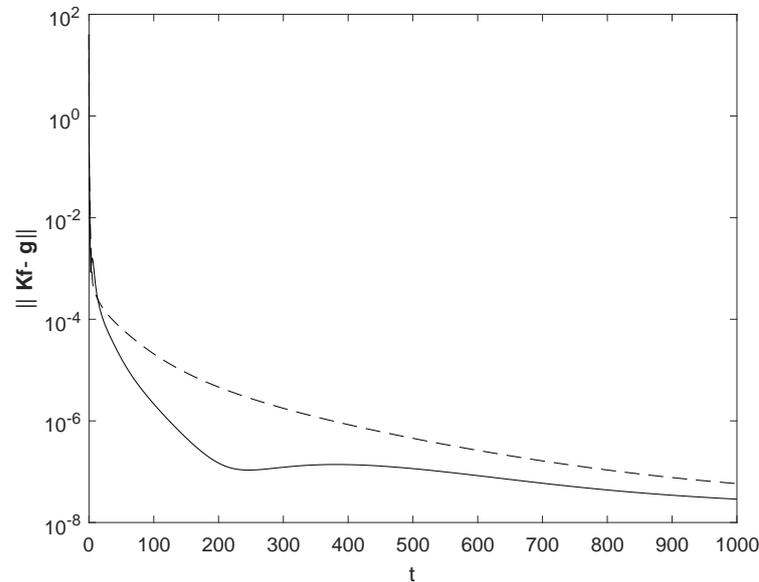
A comparação entre a_j , para todo $1 \leq j \leq n$ obtida, em relação ao tempo, usando o modelo RNFH com $\alpha = 1, 2$ e o modelo RNH com $\alpha = 1$, é mostrado na Figura (6.5). A Figura (6.6) mostra a norma do resíduo, quando RNFH com $\alpha = 1, 2$ é utilizado ($1,6688 \times 10^{-8}$), decai para um valor menor que o obtido pelo modelo RNH ($3,7017 \times 10^{-7}$) com o mesmo tempo de propagação (1000 unidades arbitrárias). E dessa forma, mais uma vez, a RNFH convergiu para a solução esperada em menos tempo que a RNH.

Figura 6.5 – Refinamento da solução em função do tempo, referente ao segundo problema, no qual foi empregada RNH (-----), e RNFH (——) usando $\alpha = 1, 2$.



Fonte: Da autora (2020).

Figura 6.6 – Resíduo $\|\mathbf{Kf}-\mathbf{g}\|$ ao longo do tempo, usando RNH (-----) e RNFH com $\alpha = 1, 2$, (—).



Fonte: Da autora (2020).

6.3 Densidade de Estados de Fônons da Capacidade Calorífica

Por fim, a RNH e a RNFH foram empregadas para recuperar valores de densidade de fônons do diamante a partir da capacidade calorífica para diferentes temperaturas, empregando a metodologia descrita na seção (5.7).

A Figura (6.7) mostra dados simulados para o diamante obtidos a partir da Equação (5.52), onde o modelo de Debye, $g(\nu) = 9N_A\nu^2/\nu_m^3$, foi empregado com $h\nu_m/k_B = 1860K$. Tomando $m = 20$ e $n = 20$, obteve-se uma matriz \mathbf{K} de dimensão 20×20 com número de condicionamento na ordem de 10^{17} .

Agora, usando a rede neural de Hopfield generalizada com derivada de ordem fracionária α , $g(\nu)$ pôde ser obtido a partir de $C_V(T)$ através da resolução de um conjunto de equações diferenciais de ordem fracionária (5.30). Essas equações foram integradas pelo método descrito na seção (5.6). O estado do neurônio muda em função do tempo, a partir da condição inicial $u_i(t) = \arctanh(2g_i(t) - 1)$, com $g_i = 7.7 \times 10^{-14}$, para o estado final no tempo 10^{-13} e unidades arbitrárias. A condição inicial de g_i é mostrada na Figura (6.7).

A Figura (6.8) mostra que a função custo (norma do resíduo) decaiu para um valor menor que 5×10^{-4} para o modelo RNFH com $\alpha = 0,9$. Para esse mesmo período

de tempo, o modelo RNH convergiu para a solução com norma do resíduo de 7×10^{-2} . Dessa forma, o modelo RNFH convergiu para a solução desejada em menor tempo quando comparado com o modelo RNH.

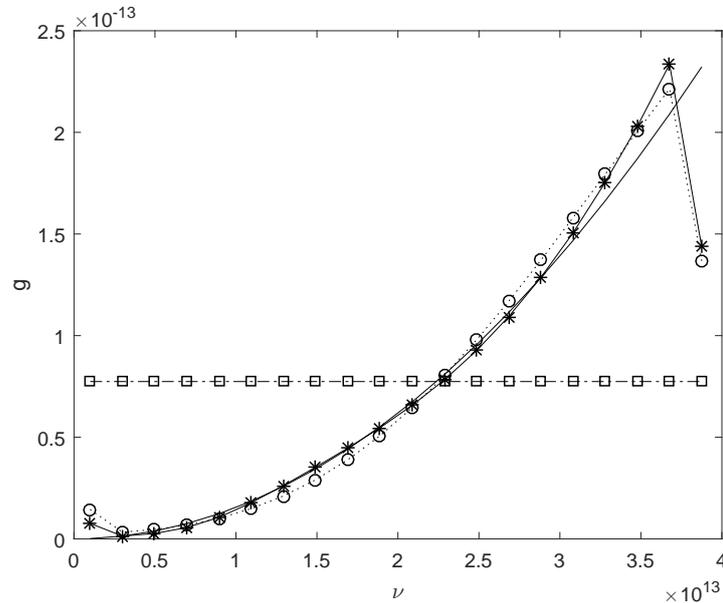
Por fim, a densidade de estado de fônons ótima é determinada através da função de ativação, $g_i(t) = h(u_i) = (1 + \tanh(u_i(t)))/2$. A partir da Figura (6.7), é possível observar que a solução encontrada pelo modelo RNFH está de acordo com a função exata utilizada.

Para uma análise mais realista, propondo uma simulação que reproduza mais a realidade dos laboratórios, erros experimentais foram introduzidos aos dados simulados de capacidade calorífica através da adição de ruído aleatório de média zero com desvio padrão σ . O desvio padrão empregado foi de 3,0% do C_V , para valores de T entre 0 e 300K. Para valores maiores de T (entre 300K e 2000K), o desvio padrão foi de 1,5% do valor de C_V . Os dados experimentais de $C_V(T_i)$, simulados entre 0 e 2000K, são mostrados na Figura (6.9)(a) e (b), onde pôde ser observado que a solução encontrada por RNFH com $\alpha = 0,9$ fornece C_V , pela Equação (5.54), dentro dos erros experimentais simulados.

Na Figura (6.10), pôde ser observado que a solução encontrada pelo modelo RNFH está de acordo com a função exata empregada. Para esse caso, a condição inicial g_i também está reportada nessa figura. Quando a RNFH é utilizada, a norma do resíduo decai para um valor menor que o obtido pela RNH no tempo $0,2 \times 10^{-14}$ unidades arbitrárias. Essa observação pode ser vista na Figura (6.10). Portanto, mesmo na presença do erro experimental, a RNFH convergiu para a solução desejada em menos tempo quando comparada a RNH.

Para complementar a discussão de que o cálculo da solução feitos através de $g = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T c$ alguns dados foram obtidos. Primeiramente, através de dados simulados de $g(\nu)$, mostrados na Figura (6.11(a)), foram gerados os dados de capacidade calorífica C_V , indicados na Figura (6.11(b)). Ao empregar a matriz inversa nos cálculos para a obtenção da densidade de frequência através dos dados de capacidade calorífica, o resultado encontrado, mostrado na Figura (6.12(a)) possui oscilações e não corresponde ao modelo reportado por Debye, indicando uma inadequação ao empregar esse método. É importante notar que a solução encontrada recupera os valores exatos de C_V , mas não possui nenhuma interpretação física, como destacado na Figura (6.12(b)).

Figura 6.7 – Refinamento da solução ao longo do tempo, usando RNH ($\cdots\circ\cdots$), para o exemplo 3. A solução com RNFH usando $\alpha = 0,9$ é apresentada como ($\cdots*$). (\cdots) representa o dado exato e ($\cdots\square\cdots$) representa o valor usado como conhecimento *a priori* da rede.



Fonte: Da autora (2020).

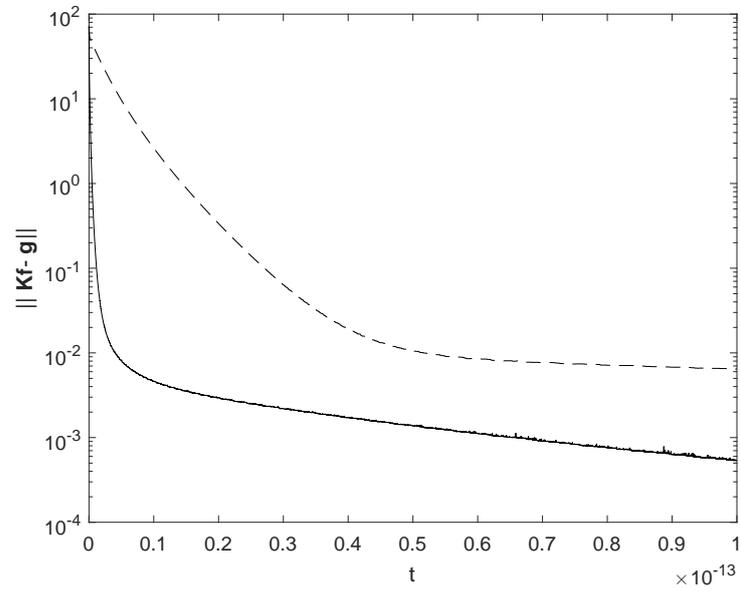
6.4 A Rede Neural Fracionária de Hopfield

Primeiramente, a rede neural de Hopfield, governada pela Equação (5.9), converge para um ponto de extremo mínimo da função custo E . Logo, encontrar \mathbf{f} tal que $\|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}^{\text{exp}}\|^2$ é denominado problema de otimização. Para esse caso, o ponto de mínimo coincide com o ponto de equilíbrio e, portanto, espera-se que os valores do estado do neurônio sejam constantes.

Baseando-se no trabalho de J. J. Hopfield, um estudo foi conduzido com o objetivo de demonstrar que a rede governada pelo sistema de equações (5.30) converge para o ponto extremo de E ¹⁸. Porém, em sua dedução, a Regra da Cadeia para derivadas fracionárias foi empregada, além de considerar o fato de que a função E era monotonicamente decrescente. Esses dois pontos foram discutidos nos itens (5.4.1) e (5.4.2), onde foi possível concluir que são estratégias inválidas ao tratar de derivadas fracionárias.

Os resultados obtidos nesse trabalho apontaram que o modelo RNFH convergiu para pontos de extremo mínimo, porém ainda é necessário provar, com rigor, que a rede converge. Um estudo está em desenvolvimento para demonstrar que o estado do

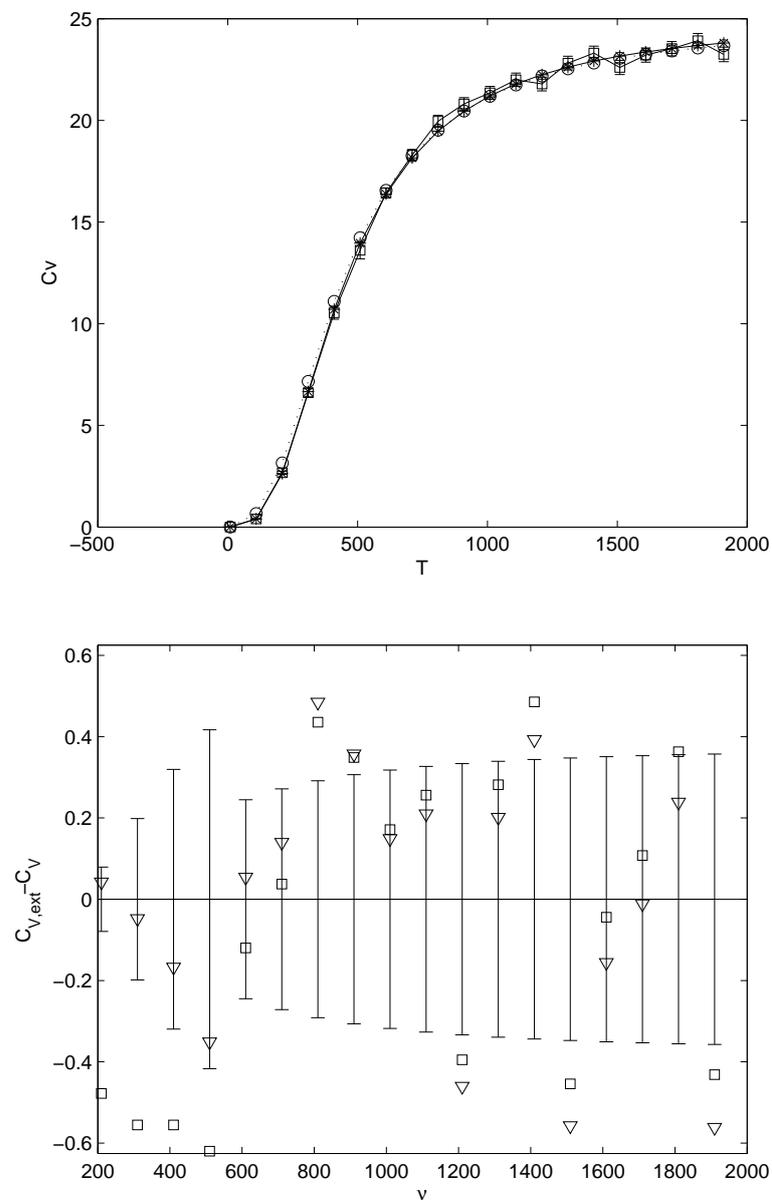
Figura 6.8 – Resíduo $\|\mathbf{Kf-g}\|$ ao longo do tempo, usando RNH (-----), para o terceiro exemplo. A solução com RNFH usando $\alpha = 0,9$ é apresentada como (—).



Fonte: Da autora (2020).

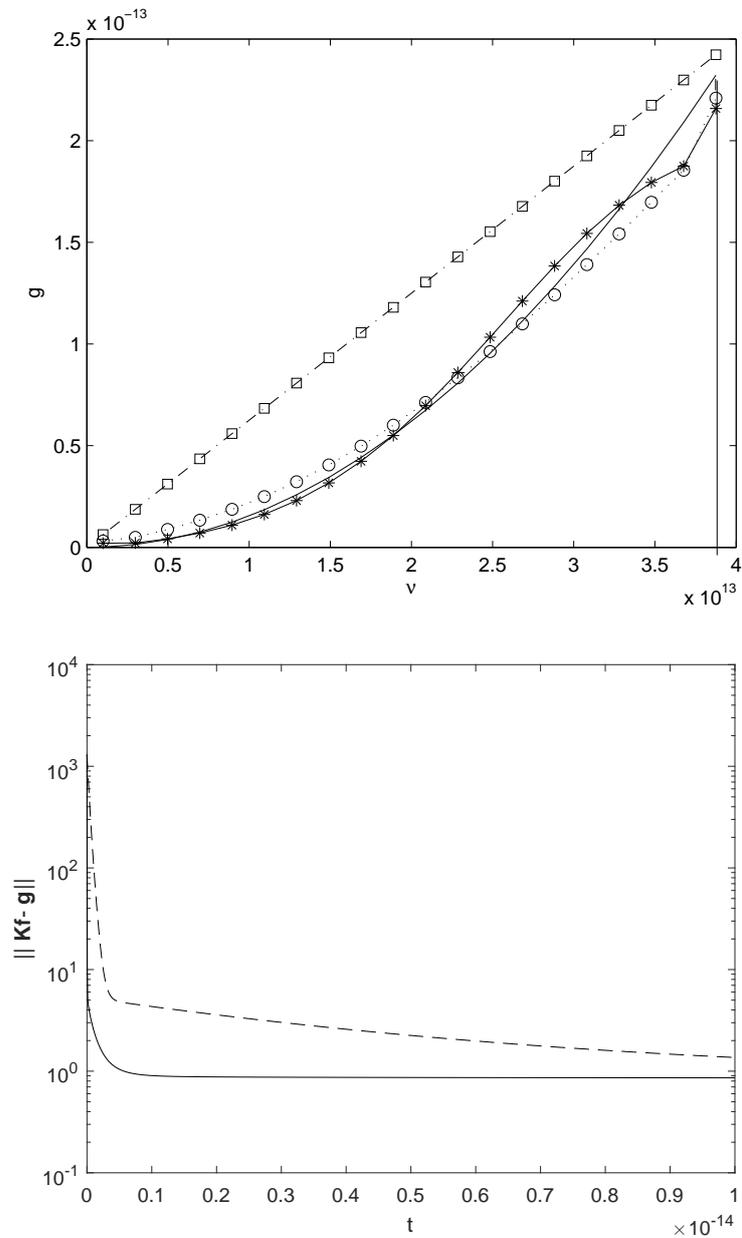
neurônio converge sempre assumindo valores menores que a função de Mittag-Leffler, na qual também converge oscilando, quando $t \rightarrow \infty$.

Figura 6.9 – (a) (\square) representa dados experimentais para $C_V(T_i)$, simulados entre 0 e 2000K. ($*$) representa $C_V(T_i)$ obtido a partir de $g(\nu)$ encontrado utilizando o modelo RNFH, com $\alpha = 0,9$ e (\circ) representa $C_V(T_i)$ obtido através de $g(\nu)$ empregado utilizando o modelo RNH. (b) (\triangle) representa o erro do resultado obtido pela Equação (5.9) com $\alpha = 0,9$ e (\square) representa o erro do resultado obtido pela Equação (5.9) com $\alpha = 1$. A barra de erro representa o coeficiente de variação de 3,0%, para valores de T entre 0K e 300K, e 1,5%, para valores de T entre 300K e 2000K.



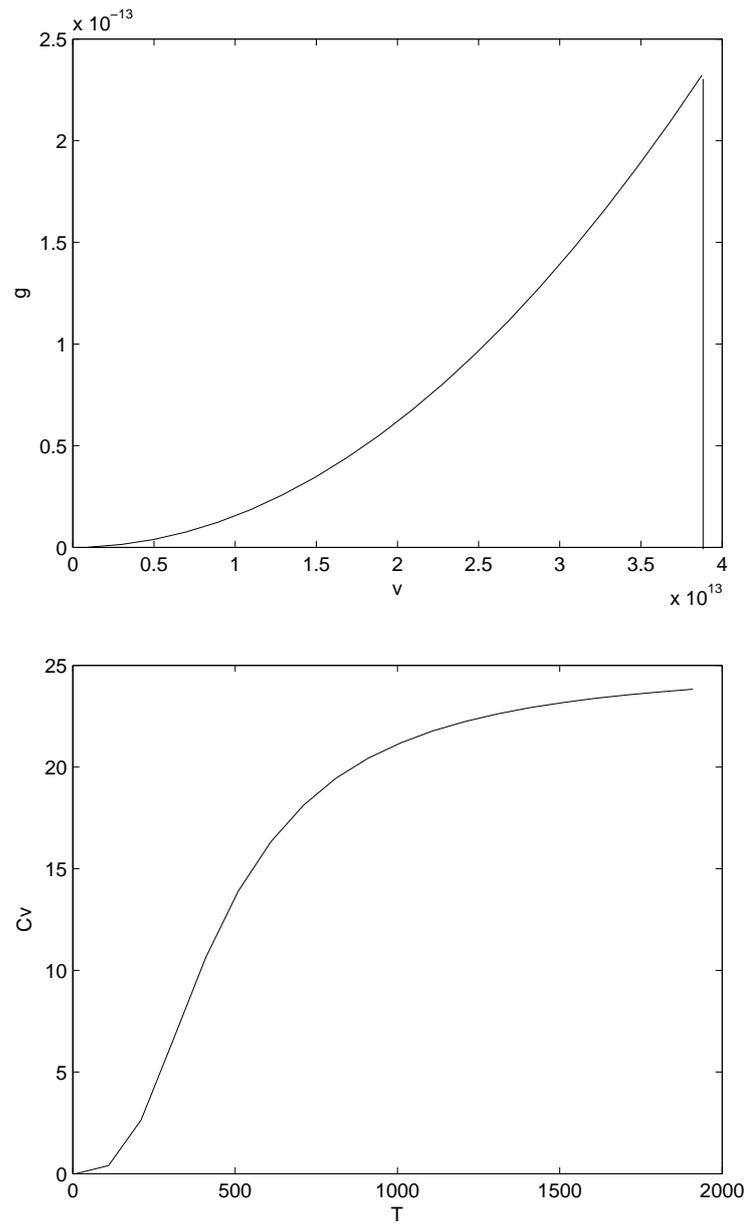
Fonte: Da autora (2020).

Figura 6.10 – (a) A solução encontrada usando o modelo RNH ($\cdots\circ\cdots$), para o terceiro exemplo com erro simulado (coeficiente de variação de 3,0%, para valores de T entre 0K e 300K e 1,5% para valores de T entre 300K e 2000K. A solução empregando o modelo de RNFH com $\alpha = 0,9$ é representada por ($\text{---}\ast\text{---}$). (---) representa os valores exatos. ($\text{---}\square\text{---}$) representa o valor usado como conhecimento *a priori* da rede. (b) Norma residual ao longo do tempo, empregando o modelo RNH (---). $\|\mathbf{Kf}-\mathbf{g}\|$ usando o modelo RNFH com $\alpha = 0,9$ é representado por (---).



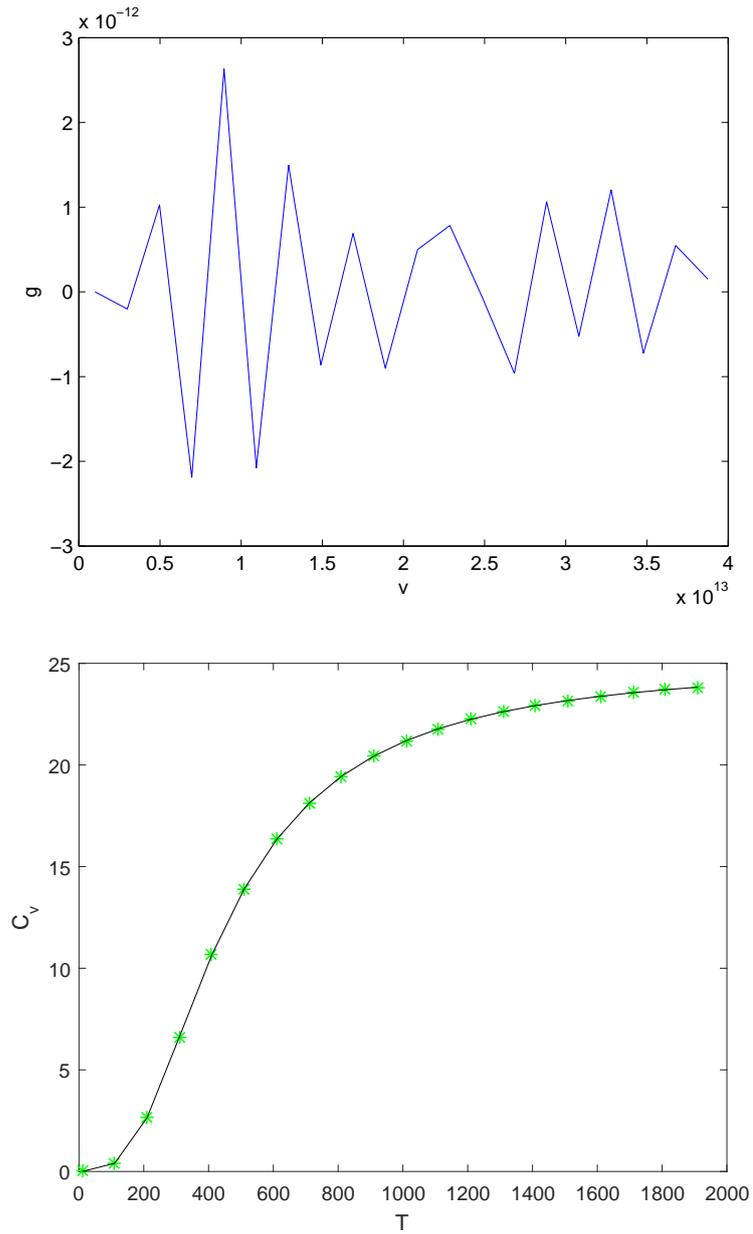
Fonte: Da autora (2020).

Figura 6.11 – (a) $g(\nu)$ simulados para o diamante utilizando o modelo de Debye. (b) Valores de C_V gerados a partir de $g(\nu)$ (Problema direto).



Fonte: Da autora (2020).

Figura 6.12 – (a) Valores de $g(\nu)$ recuperados utilizando a matriz inversa, $g = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T c$. (b) Valores C_V obtidos com o cálculo de $g(\nu)$ empregando a matriz inversa (Problema inverso), (*) corresponde ao dado exato.



Fonte: Da autora (2020).

7 CONCLUSÃO

Este estudo apresenta uma metodologia implementa a rede neural de Hopfield com o cálculo fracionário para tratar problemas inversos em Química. Tal técnica foi empregada em três exemplos, para um sistema linear do tipo $\mathbf{Kf}=\mathbf{g}$ e para o cálculo dos polinômios da matriz de Vandermonde e, por fim, foi utilizada para refinar a solução de um problema envolvendo capacidade calorífica, no qual obteve-se a densidade de fônons a partir de dados simulados de capacidade calorífica contendo erros experimentais. Esses erros nas condições iniciais foram usados para testar a robustez da metodologia. Em todos os casos, seja com erros experimentais ou com desvios de condições iniciais, a abordagem atual é estável, dando resultados físicos precisos. A performance da RNFH foi comparada com o método tradicional, RNH, obtendo-se um resultado bastante satisfatório. Além disso, o método é simples e representa uma extensão do algoritmo usado anteriormente. Por fim, uma característica importante da metodologia empregada deve ser destacada, o tempo em que esta converge para a solução, fazendo dela uma técnica bastante efetiva.

8 PERSPECTIVAS

Com o intuito de dar continuidade ao trabalho aqui apresentado, algumas investigações ainda podem ser realizadas. Dentre elas:

- a) Investigar como a escolha de α afeta a velocidade de obtenção da solução;
- b) Explorar a parte numérica;
- c) Aplicar a RNFH em outros problemas inversos;
- d) Investigar convergência da RNFH.

REFERÊNCIAS

1. CAMARGO, R. F.; OLIVEIRA, E. C. **Cálculo Fracionário**. São Paulo: Livraria da Física, 2015.
2. LEMES, N.H.T.; SANTOS, J. P. C.; P. BRAGA, J. P. A Generalized Mittag-Leffler Function to Describe Nonexponential Chemical Effects. **Applied Mathematical Modelling**, v. 40, p. 7971-7976, 2016.
3. RODRIGUES, F. G.; OLIVEIRA, E. C. DE. Introdução às Técnicas do Cálculo Fracionário para Estudar Modelos da Física Matemática. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 37, p. 3305-1-3305-12, 2015.
4. SANTOS, J. P. C. *et al.* Cálculo de Ordem Fracionária e Aplicações. **Sigmae**, v.1, p. 18-32. 2012.
5. LEMES, N. H. T., SIMPAO V. A., SANTOS, J. P. C., A Speculative Study of Non-linear Arrhenius Plot by Using Fractional Calculus. **Physics.chem-ph**, 2016.
6. DAVID, S. A.; LINARES, J. L.; PALLONE, E. M. J. A. Fractional order calculus: historical apologia, basic concepts and some applications. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 33, p. 4302-4302, 2011.
7. DOKOUMETZIDIS, A.; MACHERAS, P. Fractional kinetics in drug absorption and disposition processes. **Journal of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics**, v. 36, p. 165-178, 2009.
8. STANISLAVSKY, A. A. Nonlinear reaction with fractional dynamics. **Applied Mathematics and Computation**, v. 174, p. 1122-1134, 2006.
9. TEODORO, G. S.; OLIVEIRA, D. S.; OLIVEIRA, E. C. Sobre derivadas fracionárias. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, São Paulo, v. 40, 2018.
10. KASLIK, E.; SIVASUNDARAM, S. Nonlinear dynamics and chaos in fractional-order neural networks. **Neural Networks**, v. 32, p. 245-256, 2012.
11. LUNDSTROM, B. N. *et al.* Fractional differentiation by neocortical pyramidal neurons. **Nature Neuroscience**, v. 11, p. 1335-1342, 2008.
12. HOPFIELD, J. J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 79, p. 2554-2558, 1982.

13. BRAGA, J. P.; LEMES, N.H.T.; BORGES, E.; SEBASTIAO, R. C. O. Ill-posed Inverse Problems in Chemistry. **Química Nova**, v. 39, p. 886-891, 2016.
14. LEMES, N. H. T.; BORGES, E.; BRAGA, J. P. A General Algorithm to Solve Linear and Nonlinear Inverse Problems. **Journal of the Brazilian Chemistry Society**, v. 18, p. 1342-1347, 2007.
15. LEMES, N. H. T.; BORGES, E.; BRAGA, J. P. Rate constants and absorption coefficients from experimental data: An inversion procedure based on recursive neural networks. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 96, p. 84-87, 2009.
16. COSTA, É. D'M. *et al.* Uso de redes neurais recorrentes na determinação das constantes de acidez para a 7-epiclusianona em misturas etanol-água. **Química Nova**, v. 35, p. 91-96, 2012.
17. LEMES, N. H. T.; BORGES, E.; BRAGA, J. P. A general algorithm to solve linear and nonlinear inverse problems. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 18, p. 1342-1347, 2007.
18. BORROOMAND, A.; MENHAJ, M. Fractional-order Hopfield neural networks. **Advances in Neuro-Information Processing**, p. 883-890, 2009.
19. AGHABABA, M. P. Fractional-Neuro-Optimizer: A Neural-Network-Based Optimization Method. **Neural Processing Letters**, v. 40, p. 169-189, 2013.
20. ZHANG, R.; QI, D.; WANG, Y. Dynamics analysis of fractional order three-dimensional Hopfield neural network. In: SIXTH INTERNATIONAL CONFERENCE ON NATURAL COMPUTATION, 6, Yantai. **Proceedings...** Yantai: Institute of Electrical and Electronics Engineers, 2010, p. 3037-3039.
21. BENOÎT-MARAND, F. *et al.* Identification of Non Linear Fractional Systems Using Continuous Time Neural Networks. **IFAC Proceedings Volumes**, v. 39, p. 402-407, 2006.
22. HADAMARD, J. **Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations**. New Haven: Yale University, 1923.
23. DREHER, M.; QUINTANILLA, R.; RACKE, R. Ill-posed problems in thermomechanics. **Applied Mathematics Letters**, v. 22, p. 13740-1379, 2009.
24. HANSELMAN, D.; LITTLEFIELD, B. **Matlab 6: curso completo**. São Paulo: Prentice Hall, v.1, 2003.

25. GARRAPPA, R. Numerical solution of fractional differential equations: a survey and a software tutorial. **Mathematics**, v. 6, p. 16-39, 2018.
26. DIETHELM, K.; FREED, A. D. The FracPECE subroutine for the numerical solution of differential equations of fractional order. **Forschung und wissenschaftliches Rechnen**, v. 1999, p. 57-71, 1998.
27. GU, B.Y.; DONG, B.Z.; YANG, G. Z. Investigations of the recovery of the phonon density of states from specific heat: numerical study. **Physics Letters A**, v. 170, p. 201-209, 1992.
28. HAGUE, J. P. Determining the phonon density of states from specific heat measurements via maximum entropy. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 17, p. 2397-2405, 2005.
29. NAUMOV, V.N.; MUSIKHIN, A.E. Numerical solution of the inverse problem of reconstructing phonon density of states from experimental heat capacity. **Physica B: Condensed Matter**, v. 476, p. 41-49, 2015.
30. HUANG, X.; WANG, Z.; LI, Y. Nonlinear Dynamics and Chaos in Fractional-Order Hopfield Neural Networks with Delay. **Advances in Mathematical Physics**, v. 2013, 2013.
31. PU, Y. F.; YI, Z. Fractional Hopfield Neural Networks: Fractional Dynamic Associative Recurrent Neural Networks. **IEEE Transactions On Neural Networks and Learning Systems**, v. 28, p. 2319-2333, 2017.
32. MACHADO, J. A. T.; KIRYAKOVA V.; MAINARDI, F. A poster about the recent history of fractional calculus, **Fractional Calculus and Applied Analysis**, v. 13, p. 329-334, 2010.
33. DE CEZARO, A.; DE CEZARO, F. T. **Problemas Inversos em Tomografias: Notas em Matemática Aplicada**. São Carlos: SBMAC, v.59, 2012. 132p. Disponível em <http://www.sbmac.org.br/arquivos/notas/livro_59.pdf>. Acesso em: 06 fev. 2019.
34. ABEL, N. H. **Em Oeuvres complètes de Niels Henrik Abel**. Cambridge: Cambridge University, 2012, v. 1.
35. OLIVEIRA, J. M. **Equações algébricas, máxima absorção ressonante em espectroscopia Mössbauer, problemas diretos e inversos em espalhamento de partículas e problema inverso em dinâmica**. 2014. 134f. Tese (Doutorado em Química) - Instituto de Ciências Exatas, UFMG, Belo Horizonte, 2014.

36. ALVES, M. O. **Análise sensitiva aplicada à solução de problemas diretos e inversos em química**. 2016. 130f. Tese (Doutorado em Química) - Instituto de Ciências Exatas, UFMG, Belo Horizonte, 2016.
37. BRAGA, J. P. Numerical comparison between Tikhonov regularization and singular value decomposition methods using the L curve criterion. **Journal of Mathematical Chemistry** v. 29, p. 151-161, 2001.
38. ZHDANOV, M. S. **Foundations of Geophysical Electromagnetic Theory and Methods**. 2. ed. Cambridge: Elsevier, 2017.
39. FERREIRA, B. D. L. **Problemas diretos e inversos em cinética química e ressonância magnética nuclear**. 2012. 130f. Dissertação (Mestrado em Química) - Instituto de Ciências Exatas, UFMG, Belo Horizonte, 2012.
40. GRASMAIR, M.; HALTMEIER, M.; SCHERZER, O. The residual method for regularizing ill-posed problems. **Applied Mathematics and Computation**, v. 218, p. 2693-2710, 2011.
41. LEMES, N. H. T. **Equações integrais, problemas inversos e cálculo fracionário**. Alfenas: Instituto de Química da Universidade Federal de Alfenas, 2018. 199f. Notas de aula.
42. CAMPOS VELHO, H. F. **Problemas Inversos: Conceitos Básicos e Aplicações**, 2017. 17p. Disponível em <<http://www.lac.inpe.br/~haroldo/CursoPI/CursoPI.pdf>>. Acessado em: 06 fev. 2019.
43. PETIT, A. T.; DULONG, P.L. Recherches sur quelques points importants de la Théorie de la Chaleur. **Annales de Chimie et de Physique**, v.10 , p 395-413 1819.
44. BRAGA, J. P. **Físico-química: aspectos moleculares e fenomenológicos**, Viçosa: UFV, 2002.
45. EINSTEIN, A. Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme. **Annalen der Physik**, v. 22, p. 180-190, 1906.
46. PLANCK, M. On the Law of the Energy Distribution in the Normal Spectrum. **Annals of Physics**, v. 4, p. 553-660, 1901.
47. DEBYE, P. Zur Theorie der spezifischen Wärmen. **Annalen der Physik**, v. 39, p. 789-839, 1912.

48. UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO. Departamento de Informática. **Redes Neurais Artificiais**. Vitória: 1997. Disponível em: <<http://www.inf.ufes.br/~thomas/pubs/eri98.pdf>>. Acesso em: 25 abr. 2018.
49. LEVINE, . W.; PARKS, D. S.; LONG, D. L. Fundamentals of neural network modeling: Neuropsychology and cognitive neuroscience, **Mit**, p.5-6, 1998.
50. WEN, U. P.; LAN, K. M.; SHIH, H. S. A review of Hopfield neural networks for solving mathematical programming problems. **European Journal of Operational Research**, v. 198, p. 675-687, 2009.
51. THEODORIDIS, S.; CHELLAPPA, R. **Academic press library in signal processing: signal processing theory and machine learning**. Nova York: Elsevier, 2013, v. 1, p. 817-855.
52. WITTEK, P. **Quantum machine learning: what quantum computing means to data mining**. Nova York: Elsevier, 2014, v. 1, p. 63-71.
53. COSTA, É. D'M. et al. Uso de redes neurais recorrentes na determinação das constantes de acidez para a 7-epiclusianona em misturas etanol-água. **Química Nova**, v. 35, p. 91-96, 2012.
54. FONTOVA, M. I. V.; OLIVEIRA, A. R. L.; LYRA, C. Hopfield neural networks in large-scale linear optimization problems. **Applied Mathematics and Computation**, v. 218, p. 6851-6859, 2012.
55. MACHADO, J. A. T.; KIRYAKOVA, V. The Chronicles of Fractional Calculus. **Fractional Calculus and Applied Analysis**, v. 20, p. 307-336, 2017.
56. MACHADO, J. A. T.; KIRYAKOVA V.; MAINARDI, F. Recent history of fractional calculus. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, v. 16, p. 1140-1153, 2011.
57. MILLER, K. S. ROSS, B. **An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations**. Nova Iorque: Wiley-Interscience, 1993.
58. HEYMANS, N.; PODLUBNY, I. Physical interpretation of initial conditions for fractional differential equations with Riemann-Liouville fractional derivatives. **Rheologica Acta**, v. 45, n. 5, p. 765-771, 2006.
59. MACHADO, J. A. T. *et al.* A probabilistic interpretation of the fractional-order differentiation. **Fractional Calculus and applied Analysis**, v. 6, n. 1, p. 73-80, 2003.

60. DIETHELM, K. The analysis of fractional differential equations: An application-oriented exposition using differential operators of Caputo type. **Springer Science And Business Media**, p.37 , 2010.
61. TARASOV, V. E. No nonlocality. No fractional derivative. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, v. 62, p. 157-163, 2018.
62. ROSS, B. A brief history and exposition of the fundamental theory of fractional calculus. In: ROSS, B. **Fractional calculus and its applications**. Heidelberg: Springer, 1975. cap. 1, p. 1-36.
63. ORTIGUEIRA, M. D.; MACHADO, J. A. T. What is a fractional derivative? **Journal of computational Physics**, v. 293, p. 4-13, 2015.
64. OGATA, K. **Engenharia de controle moderno**. 4. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2010, v. 1.
65. BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. **Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno**. Rio de Janeiro: LTC, 2010, v. 1.
66. STEWART, J. **Calculus**. 8. ed. Boston: Cengage Learning, 2015, v. 1.
67. TARASOV, V. E. On chain rule for fractional derivatives. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, v. 30, n. 1-3, p. 1-4, 2016.
68. DIETHELM, K. Monotonicity of functions and sign changes of their Caputo derivatives. **Fractional Calculus and Applied Analysis**, v. 19, n. 2, p. 561-566, 2016.
69. GARRAPPA, R. Short tutorial: solving fractional differential equations by Matlab codes. 2014. 6p. Disponível em <<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.710.169&rep=rep1&type=pdf>>. Acesso em: 14 abr. 2019.
70. DIETHELM, K. **The analysis of fractional differential equations: an application-oriented exposition using differential operators of Caputo type**. Heidelberg: Springer Science & Business Media, 2010, v.1.

ANEXO A - Tabela de Algumas Transformadas de Laplace

A partir do conhecimento do método para obtenção da transformada de Laplace, não se faz necessário deduzi-la todas as vezes, podendo obter as soluções através de tabelas disponíveis na literatura. Transformadas de Laplace estão descritas na Tabela (A.1).

Tabela A.1 – Transformadas de Laplace de algumas funções

$f(t)$	$F(s) = \mathcal{L}\{f(t)\}(S)$
$af(t)$	$aF(s)$
$af_1(t) = bf_2(t)$	$aF_1(s) + bF_2(s)$
$f'(t)$	$sF(s) - f(0)$
$f^{(n)}(t)$	$s^n F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{n-1-k} f^{(k)}(0)$
$(-1)^n t^n f(t)$	$F^{(n)}(s)$
$\int_0^t \frac{(t-u)^{n-1}}{(n-1)!} f(u) du$	$F(s)/s^n$
$f_1 * f_2$	$F_1(s)F_2(s)$
$\frac{\partial f(t,x)}{\partial x}$	$\frac{\partial F(s,x)}{\partial x}$
${}^{RL}D^\alpha f(t)$	$s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} D^k J^{n-\alpha} f(0) s^{n-1-k}, n-1 < \alpha < n$
${}^C D^\alpha f(t)$	$s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} D^k f(0) s^{\alpha-1-k}, n-1 < \alpha < n$

Fonte: Adaptada de OGATA (2010) e LEMES (2018).

APÊNDICE A - Algoritmo para o Problema 2×2

```

function []=frachopmalcolocadoresumo(alp,tfinal)
%>> frachopmalcolocadoresumo(1.3,5000)
%>> frachopmalcolocadoresumo(1.7,5000)
global A b
close all

e = 1e-2;          % parâmetro epsilon
a = 1e-1;          % parâmetro alpha

%e = 1e-3;        % parâmetro epsilon
%a = 1e-2;        % parâmetro alpha

%e = 1;           % parâmetro epsilon
%a = 0;           % parâmetro alpha

A=[1 1; 1 1+e];   % matriz A

b=[1; 1+a];       % matriz coluna b

t0=0; h=.1;

f0=[0;0]; u0=atanh(f0);

u0=[u0 [0;0]];
%u0=[u0 [0;0] [0;0]];

alpha=alp;

[t, u] = fde12(alpha,@fdefun,t0,tfinal,u0,h);
zf=tanh(u);

%opcoes = odeset('AbsTol',1e-6,'RelTol',1e-4);
%[t,u] = ode45(@fdefun,[t0,8000],u0,opcoes);
%zf=tanh(u);

[t1, u1] = fde12(1,@fdefun,t0,tfinal,u0,h);
zf1=tanh(u1);

```

```

figure
plot(t,zf,'k-',t1,zf1,'k:')
xlabel('t')
ylabel('f_i, i=1 and 2')

kk=1;
for k=1:length(t)
E(kk)=norm(A*zf(:,k)-b);
E1(kk)=norm(A*zf1(:,k)-b);
tk(kk)=t(kk);
kk=kk+1;
end
clc

xx=min(find(E < 0.07))
[tk(xx) E(xx) norm([0;1]-zf(:,xx)) E(end) norm([0;1]-zf(:,end))]

figure
plot(tk,E,'k-',tk,E1,'k:')
xlabel('t')
ylabel('||{\bf Kf}-{\bf g}||')

end

function up = fdefun(t,u)
global A b
f=tanh(u);%f=u;
up=-A'*A*f+A'*b;
.5*sum((A*f-b).^2)

end

```

APÊNDICE B - Algoritmo para o Problema Envolvendo a Matriz de Vandermonde

```

function []=frachopmalcolocadovan(alp,tfinal)
%frachopmalcolocadovan(1.2,1000)
global A b
close all

%e = 1e-2;          % parâmetro epsilon
%a = 1e-1;          % parâmetro alpha

%A=[1 1; 1 1+e];    % matriz A
v=0:.1:1;v=v';
A=vander(v);
%size(A)
%cond(A)
%pause
%A=hilb(11);
b=A*v;
%b=[1; 1+a];        % matriz coluna b

t0=0; h=.1;
%f0=[0;0];
f0=zeros(size(v));
u0=atanh(f0);
r0=zeros(size(v));
%u0=[u0 [0;0]];
u0=[u0 r0];
alpha=alp;

[t, u] = fde12(alpha,@fdefun,t0,tfinal,u0,h);
uq=u(:,end);
zf=tanh(u);

%opcoes = odeset('AbsTol',1e-6,'RelTol',1e-4);
%[t,u] = ode45(@fdefun,[t0,8000],u0,opcoes);
%zf=tanh(u);

[t1, u1] = fde12(1,@fdefun,t0,tfinal,u0,h);
%uq=u1(:,end);

```

```

zf1=tanh(u1);

%zf(end,:)
[zf1(:,end) zf(:,end)]

figure
plot(t,zf,'k-',t1,zf1,'k:')
xlabel('t')
ylabel('f_i, i=1 and 2')

kk=1;
for k=1:length(t)
E1(kk)=.5*sum((b-A*zf1(:,k)).^2);
E(kk)=.5*sum((b-A*zf(:,k)).^2);
tk(kk)=t(kk);
kk=kk+1;
end

figure
semilogy(tk,E,'k',tk,E1,'k:')
%legend('alpha','1')
xlabel('t')
ylabel('||{\bf Kf}-{\bf g}||')

AT=A;
[im,jm]=size(A'*A);
for i=1:im
    for j=1:jm
J(j,i)=-sum(AT(j,:)*A(:,i))*sech(uq(i))^2;
    end
end

-A'*A*tanh(uq)+A'*b
%size(J);
lam=eig(J);
%pause

for s=1:length(lam)
z1=lam(s);

```

```
a=real(z1);b=imag(z1);m=sqrt(a^2+b^2);
if a>0
    arg(s)=atan(b/a);
end
if a==0 & b>0
    arg(s)=pi/2;
end
if a<0
    arg(s)=atan(b/a)+pi;
end
if a==0 & b<0
    arg(s)=-pi/2;
end

end
arg'
```

```
function up = fdefun(t,u)
global A b
f=tanh(u);
up=-A'*A*f+A'*b;
[.5*sum((A*f-b).^2) f(1) f(2)]
%pause
end
```

APÊNDICE C - Algoritmo para o Problema de Densidade de Estados de Fônons da Capacidade Calorífica com Erro Experimental

```

function frachopcv2
format short e
clear all
close all
global K c

h=6.6260693e-34; %J.s
kB=1.3806503e-23; %J/K
NA=6.02214129e23;

T=10:100:2000; T=T';
u=h./(kB*T);

N=20;
ThD=1860; vm=ThD*kB/h; vi=1e12; s=(vm-vi)/(N-1);
v=vi:s:vm;

K=((u*v).^2.*exp(u*v))./((exp(u*v)-1).^2);
w=[0.5,ones(1,N-2),0.5]; w= repmat(w,length(T),1); w=w*s;
K=8.3144621*K.*w;

g=9*(v').^2/v(N)^3;
%g0=g;
%g0=ones(size(g))*3*2/v(N);
g0=(v')*2.5e-13/4e13;
%7.7407e-14
%g0(1)
%g0=(6/v(N)^2)*v';
%g0=zeros(size(g));
figure(1)
plot(v,g,'k-',v,g0,'k:')
xlabel('\nu,Hz')
ylabel('g')

gext=g;
cext=K*gext;

```

```

randn('seed',1.7282e9);

CV=1.5;
sdp1=(CV/100).*cext(7:end);
sdp2=2*(CV/100).*cext(1:6);
sdp=[sdp2; sdp1];
simerro=sdp.*randn(size(cext));
c=cext+simerro;

figure(2)
plot(T,cext,'ko',T,c,'k*')
hold on
errorbar(T,cext,sdp,'k')
xlabel('T,K')
ylabel('C_V(J/mol.K)')

I=eye(N,N);

%parametros da integracao
tol=1e-6;
tmax=1e-12;
%condicoes iniciais
uini=desativa(g0)

%options = odeset('RelTol',tol,'AbsTol',tol*ones(size(uini)));
%[t,u] = ode45(@func,[0 tmax],uini,options);
hx=1e-19;
tfinal=100000*hx;
u0=uini;

alpha=.9;
r0=zeros(size(u0));
u02=[u0 r0];
[t, u] = fde12(alpha,@func,0,tfinal,u0,hx);
u=u'; t=t';

[t1, u1] = fde12(1,@func,0,tfinal,u0,hx);
u1=u1'; t1=t1';

```

```

figure(3)
plot(t,u)
xlabel('t, arbitrary unit')
ylabel('u')
%pause

ghop=ativa(u(length(t),:));
ghop1=ativa(u1(length(t),:));

figure(4)
plot(v,ghop,'k-*',v,ghop1,'k:o',v,g,'k-',v,g0,'k-.s')
xlabel('\nu')
ylabel('g')

Cvhop=K*ghop';
Cvhop1=K*ghop1';

figure(5)
plot(T,Cvhop,'k-*',T,Cvhop1,'k:o',T,c,'ks')
%,T,cext,'r')
hold on
errorbar(T,c,sdp,'k')
ylabel('Cv')
xlabel('T')

gruim=(K'*K)\K'*c;

figure(6)
plot(v,gruim)
ylabel('g')
xlabel('v')

Cv9=K*gruim;

figure(7)
plot(T,Cv9,'g*',T,c,'k-')

kk=1;
g1=ativa(u1');

```

```

g=ativa(u');
size(K), size(g1), size(c)
cond(K)
for k=1:length(t)
E1(kk)=.5*sum((c-K*g1(:,k)).^2);
E(kk)=.5*sum((c-K*g(:,k)).^2);
tk(kk)=t(kk);
kk=kk+1;
end

figure(8)
semilogy(tk,E,'k-',tk,E1,'k:')
%legend('alpha','1')
xlabel('t')
ylabel('||{\bf Kf}-{\bf g}||')

figure(9)
v1=[0, 2e14];v2=[0, 0];
plot(v1,v2,'k-')
hold on
axis([200 2000 -max(sdp)*1.5 max(sdp)*1.5])
plot(T,c-K*ghop','kv')
plot(T,c-K*ghop1','ks')
xx=zeros(size(cext));
errag=sdp;
errorbar(T,xx,errag,'k')
xlabel('\nu')
ylabel('C_{V,ext}-C_V')

end

function du = func(t,u)
global K c
g=ativa(u);
[t norm(K*g-c)]
du = -K'*K*g+K'*c;
end

function u=desativa(g)

```

```
u=atanh(2*g-1);  
end
```

```
function g=ativa(u)  
g=(1+tanh(u))/2;  
end
```