Modelo de otimização para o controle de plantas daninhas usando programação não linear inteira mista

Elenice Weber Stiegelmeier

Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutora em Ciências, Programa de Engenharia Elétrica.

ORIENTADORA: Profa. Dra. Vilma Alves de Oliveira

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento
da Informação do Serviço de Biblioteca – EESC/USP

S855m Stiegelmeier, Elenice Weber
Modelo de otimização para o controle de plantas
daninhas usando programação não linear inteira mista /
Elenice Weber Stiegelmeier ; orientador Vilma Alves de
Oliveira e co-orientador Geraldo Nunes Silva. -- São
Carlos, 2012.

Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Elétrica e Área de Concentração em Sistemas
Dinâmicos) -- Escola de Engenharia de São Carlos da
Universidade de São Paulo, 2012.

1. Modelagem. 2. Pressão seletiva. 3. Manejo de
plantas daninhas. 4. *Bidens subalternus*. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidata: Licenciada **ELENICE WEBER STIEGELMEIER**.

Título da tese: "Modelo de otimização para o controle de plantas daninhas usando programação não linear inteira mista".

Data da defesa: 08/03/2012

Comissão Julgadora:

Resultado:

Prof^a. Titular **Vilma Alves de Oliveira (Orientadora)**
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Aprovada

Prof. ~~Dr. Geraldo~~ **Nunes Silva**
(Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho/UNESP - campus São José do Rio Preto)

Aprovado

Prof^a. Dr^a. **Marina Andretta**
(Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação/USP)

Aprovada

Dr. **Elbert Einstein Nehrer Macau**
(Instituto Nacional de Pesquisa Espaciais/INPE)

Aprovada

Prof. Dr. **Weldon Alexander Lodwick**
(University of Colorado Denver)

Aprovado

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica:
Prof. Titular **Denis Vinicius Coury**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:
Prof. Associado **Paulo Cesar Lima Segantine**

ELENICE WEBER STIEGELMEIER

**MODELO DE OTIMIZAÇÃO PARA O CONTROLE
DE PLANTAS DANINHAS USANDO PROGRA-
MAÇÃO NÃO LINEAR INTEIRA MISTA**

Monografia de defesa apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do Título de Doutora em Ciências, Programa de Engenharia Elétrica.

Área de Concentração: Sistemas Dinâmicos
Orientador: Profa. Dra. Vilma Alves de Oliveira
Co-orientador: Prof. Dr. Geraldo Nunes Silva

São Carlos
2012

Trata-se da versão corrigida da tese. A versão original se encontra disponível na EESC/USP que aloja o Programa de Pós-graduação de Engenharia Elétrica.

*A minha família por acreditar e apoiar os meus sonhos.
Em especial a minha mãe Neiva Weber e meu avô (in memoriam) Eugem Albino
Weber.*

Primeiramente a Deus, por estar presente em todos os momentos da minha vida, por guiar os meus caminhos e me conceder sabedoria e saúde.

A minha família, em especial a minha mãe Neiva Weber, pelo amor, carinho e apoio incondicional.

*Ao meu avô (*in memoriam*), Eugem Albino Weber, que tanto fez por mim.*

A Profa. Dra. Vilma Alves de Oliveira, ao Prof. Dr. Geraldo Nunes Silva e ao Dr. Décio Karam, pela atenção, compreensão e ensinamentos.

Ao meu namorado, Renan Corrêa, que sempre esteve ao meu lado, me apoiando em todos os momentos.

A todos os meus amigos e colegas do LAC, pela companhia e amizade ao longo destes anos.

Ao Marcos Furlan e ao Pedro Munari, pela atenção e ajuda na realização deste trabalho.

Ao CNPq e a CAPES/PROCAD, pelo auxílio financeiro.

Sumário

Lista de Figuras	vii
Lista de Tabelas	ix
Resumo	xi
Abstract	xiii
1 Introdução	1
1.1 Objetivos	2
1.2 Organização do trabalho	2
2 Revisão bibliográfica	5
2.1 Manejo de plantas daninhas	6
2.2 Resistência de plantas daninhas a herbicidas	10
2.2.1 Dinâmica da resistência	13
3 Controle ótimo	19
3.1 Controle ótimo contínuo	19
3.1.1 O princípio do máximo para o caso contínuo	22
3.2 Controle ótimo para tempo discreto	23
3.2.1 O princípio do máximo para o caso discreto	24
3.3 Solução numérica	26
3.3.1 Programação não linear	27
3.3.2 Programação não linear inteira mista	29
4 Modelos para análise de populações de plantas daninhas	37
4.1 Modelo populacional	38
4.2 Modelo de dose-resposta	39
4.3 Modelo de pressão seletiva	40

5	Modelo populacional de plantas daninhas considerando a dinâmica da resistência	45
5.1	Modelo de densidade do banco de sementes	45
5.2	Modelo de dose-resposta	46
5.3	Modelo dinâmico da resistência de plantas daninhas	47
5.3.1	Pressão seletiva para a frequência dos alelos dominante e recessivo	47
5.3.2	Genótipo resistente	48
5.4	Modelo dinâmico para múltipla resistência	49
6	Problema de otimização do manejo de plantas daninhas	51
6.1	Definindo o problema econômico	51
6.2	Modelo de otimização com aplicação da sequência de um único herbicida	53
6.3	Modelo de otimização com rotação de herbicidas	56
6.4	Solução numérica	59
6.4.1	Aplicação do método <i>branch and bound</i>	59
6.4.2	Algoritmo ASA	61
7	Resultados de simulação	63
7.1	Equilíbrio da população de plantas daninhas	64
7.2	Frequência genética	66
7.3	Estratégia de controle ótimo	67
7.4	Impacto da resistência de plantas daninhas na solução	69
8	Conclusões	71
A	Implementação dos algoritmos	73
A.1	<i>Branch and bound</i> com o método ASA para as relaxações	73
A.2	Estratégia de reinícios para o método ASA	77
A.3	Estratégia de seleção do subproblema no método <i>branch and bound</i> . .	78
A.4	Estratégia de cortes na árvore de busca	79
	Referências Bibliográficas	83

Lista de Figuras

FIGURA 3.1	Problema com 3 variáveis binárias. λ_1 , λ_2 e λ_3 . Problema original P . Branch na variável λ_1 , criam-se subproblemas P_1 e P_2 . Branch na variável λ_2 , criam-se subproblemas P_{11} , P_{12} , P_{21} e P_{22} . Branch na variável λ_3 , levam as soluções completas.	31
FIGURA 3.2	Divisão de um problema em dois subproblemas através da fixação do valor da variável λ_t em 0 no primeiro subproblema e em 1 no segundo.	32
FIGURA 3.3	Limitantes superior e inferior para um problema de controle ótimo.	32
FIGURA 3.4	Note: $\bar{z} = \max \{20, 26\} = 26$ e $\underline{z} = \max \{18, 21\} = 21$. Não é possível encontrar soluções melhores em P_1 , logo pode-se descartar este ramo da árvore.	34
FIGURA 3.5	Note: $\bar{z} = \max \{20, 25\} = 25$ e $\underline{z} = \max \{20, 15\} = 20$. O limite superior e inferior são iguais em P_1 , logo não há razões para explorar o nó P_1	34
FIGURA 3.6	Note: $\bar{z} = \max \{24, 37\} = 37$ e $\underline{z} = \max \{13, -\infty\} = 13$. Aqui não se pode tirar nenhuma conclusão sobre os limitantes, logo ambos os nós precisam ser explorados.	35
FIGURA 4.1	Soluções numéricas para forte seleção para os alelos dominante e recessivo. Toma-se $s = 0.2$ para forte seleção.	43
FIGURA 4.2	Soluções numéricas para fraca seleção para os alelos dominante e recessivo. Toma-se $s = 0.002$ para fraca seleção.	44

FIGURA 7.1	Plano de fase com dose fixa para diferentes condições iniciais (a) Nicosulfuron ($u = 517.25 \cdot 10^{-4}$ litros ha^{-1}) com $s = 0.2$ para forte seleção; (b) Atrazine ($u = 188.96 \cdot 10^{-2}$ litros ha^{-1}) com $s = 0.03$ para fraca seleção	66
FIGURA 7.2	Frequência dos alelos (—) modelo FHW (5.4) usando o banco de sementes (5.1) e dose-resposta (5.2) com (5.3) e (5.8) e (---) modelo FHW (4.10) para a planta daninha <i>Bidens subalternans</i> com alelo domi- nante. (a) Aplicação de nicosulfuron ($i = 1$) com $s = 0.2$; (b) Aplicação de atrazine ($i = 2$) com $s = 0.2$	67
FIGURA 7.3	Árvore de enumeração binária do método <i>branch and bound</i> com poda por limitante. Os nós da árvore $S_j, j = 0, \dots, 20$ descrevem a solução de cada subproblema relaxado. Para um horizonte de 4 anos de simulação, a estratégia de controle ótimo $(1, 0, 0, 1)$ é encontrada no nó S_{18} com lucro $L_r = 1609.33$	68
FIGURA 7.4	Banco de sementes ótimo com aplicação de nicosulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i = 2$) e estratégia ótima MINLP para um horizonte de 10 anos.	69
FIGURA 7.5	Frequência do alelo resistente (p_t^*) ótimo com aplicação de nico- sulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i = 2$) e estratégia ótima MINLP para um horizonte de 10 anos.	70
FIGURA 7.6	Lucro médio anual para nicosulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i =$ 2) e estratégia de controle ótima MINLP comparado com um sistema convencional de cultivo para um horizonte de 10 anos.	70

Lista de Tabelas

TABELA 4.1	Definição dos parâmetros e variáveis do modelo populacional de plantas daninhas	39
TABELA 4.2	Definição dos parâmetros e variáveis relacionados a frequência dos alelos	42
TABELA 7.1	Parâmetros populacionais e econômicos utilizados nas simulações numéricas	64
TABELA 7.2	Parâmetros do modelo de dose-resposta para nicosulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i = 2$) usados no modelo proposto de resistência de plantas daninhas	64
TABELA 7.3	Pontos de equilíbrio do modelo dinâmico usando dose fixa de nicosulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i = 2$)	65
TABELA 7.4	Estratégia de controle ótimo com retardo da resistência de plantas daninhas para um horizonte de 10 anos	69

Resumo

Este trabalho propõe um modelo de otimização dinâmico para o controle da infestação por plantas daninhas usando aplicação seletiva de herbicida em um sistema anual de colheita da cultura do milho. A densidade do banco de sementes da população de plantas daninhas e a frequência dos alelos dominante e recessivo são tomadas como variáveis de estado. A variável de controle é dada pela função de dose-resposta. O objetivo é reduzir o uso de herbicida, maximizar o lucro em um período pré-determinado de tempo e minimizar os impactos ambientais causados pelo uso excessivo de herbicida. O modelo de otimização leva em consideração a diminuição da eficácia do herbicida ao longo do tempo causada pela pressão seletiva. O problema de otimização dinâmico envolve variáveis inteiras e contínuas que foram modeladas como um problema de programação não linear inteiro misto (MINLP). O problema MINLP foi resolvido por enumeração implícita usando o método *branch and bound*. Simulações numéricas de uma estratégia ótima ilustra o manejo da planta daninha *Bidens subalternans* em uma plantação de milho com utilização da seleção de uma sequência de dois herbicidas. A solução obtida é comparada com a solução do problema com aplicação de uma sequência de somente um único herbicida.

Palavras-chave: modelagem, pressão seletiva, manejo de plantas daninhas, *Bidens subalternans*.

Abstract

*A dynamic optimization model for weed infestation control using selective herbicide application in a corn crop system is presented. The seed bank density of the weed population and frequency of dominant and recessive alleles are taken as state variables of the growing cycle. The control variable is taken as the dose response-function. The goal is to reduce herbicide use, maximize profit in a pre-determined period of time and minimize the environmental impacts caused by excessive use of herbicides. The dynamic optimization model takes into account the decreased herbicide efficacy over time due to weed resistance evolution caused by selective pressure. The dynamic optimization problem involves integer and continuous variables which are modeled as a mixed integer nonlinear programming (MINLP) problem. The MINLP problem was solved by an implicit enumeration known as branch and bound method. Numerical simulations for a case study illustrate the management of the *Bidens subalternans* in a corn crop by selecting a sequence of two herbicides. The solution presented is compared to the solution of a sequence of only one herbicide.*

Keywords: modelling, selection pressure, weed management, *Bidens subalternans*.

Capítulo 1

Introdução

As plantas daninhas interferem na agricultura, na pecuária, na saúde e na vida do homem, causando maiores ou menores transtornos. Porém, é na agricultura que as plantas daninhas causam as maiores preocupações e danos econômicos. Segundo Lorenzi (2000b) 30 a 40% de redução da produção agrícola no mundo tropical é atribuído a interferência de plantas daninhas. Além desses prejuízos diretos, a presença das plantas daninhas reduz a eficiência agrícola, aumentando os custos de produção (Lorenzi 2000a).

Um fato importante é a existência de plantas daninhas resistentes a herbicidas. Sabe-se que sua evolução em uma área é dependente da pressão de seleção, da variabilidade genética da planta daninha, do número de genes envolvidos na seleção, do padrão de herança, do fluxo gênico e da dispersão de propágulos (Christoffoleti 2008). O conhecimento dessas características das plantas daninhas nos auxiliam na seleção dos métodos de manejo e controle das plantas daninhas, buscando impedir a multiplicação e a disseminação dos genes resistentes para outras populações. Portanto, estudos sobre esta questão devem ser realizados, para que se possa entender e estabelecer estratégias de controle e prevenção mais eficientes.

O fato do controle das plantas daninhas ser realizado basicamente pelo uso de herbicidas, acaba selecionando certas populações resistentes a alguns herbicidas (Christoffoleti 2008). Dessa forma, o uso intensivo de herbicidas, com o mesmo mecanismo de ação, no controle de plantas daninhas gera a seleção de espécies resistentes a determinado herbicida e, também, gera perdas de produção e alto custo ao produtor no controle da infestação.

Portanto, as perdas aliadas ao alto custo de controle, o pouco conhecimento da dinâmica da resistência a herbicidas e os impactos ambientais causados pelo uso excessivo de herbicida motivam o desenvolvimento deste trabalho.

Este trabalho de pesquisa envolve o estudo de modelos relacionados a otimização do processo de produção de uma lavoura a partir do controle de plantas daninhas e da dinâmica da resistência. O presente trabalho está integrado a um projeto multidisciplinar que visa o desenvolvimento de técnicas de análise e controle de infestação de culturas por plantas daninhas. Este trabalho é realizado em parceria com IBILCE/UNESP de São José do Rio Preto e EMBRAPA Milho e Sorgo de Sete Lagoas - MG.

1.1 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é estender o modelo populacional de plantas daninhas proposto por Jones e Cacho (2000) para incorporar a rotação de herbicidas e a dinâmica da resistência. Também, propor estratégias de controle das plantas daninhas visando reduzir o uso de herbicida, maximizar o retorno econômico e minimizar os impactos ambientais causados pelo uso excessivo de herbicida. Para a resolução numérica serão utilizadas técnicas de programação não linear e programação não linear inteira mista através do método ASA e do método *branch and bound*, respectivamente. A solução numérica do problema de rotação de herbicidas será comparada com a solução de problemas com a aplicação da sequência de um único herbicida. Com isso, busca-se uma melhor utilização do produto químico e, conseqüentemente, gerar benefícios ao meio ambiente.

1.2 Organização do trabalho

O presente texto está dividido em 8 capítulos. O Capítulo 2, seguinte a esta introdução, apresenta uma revisão bibliográfica sobre os temas relevantes relacionados a este trabalho, o manejo de plantas daninhas e a resistência a herbicidas. O Capítulo 3 introduz a teoria de controle ótimo utilizada, onde são descritos o caso de controle ótimo contínuo e discreto para problemas com restrição de estado e é desenvolvida uma

abordagem sobre a obtenção da solução numérica para problemas de controle ótimo utilizando programação não linear e programação não linear inteira mista através do método ASA e do método *branch and bound*, respectivamente. No Capítulo 4 apresenta-se o modelo populacional de plantas daninhas, o modelo de dose-resposta e de pressão seletiva com base no modelo genético populacional de Fisher-Haldane-Wright utilizado na modelagem do problema. O Capítulo 5 descreve o modelo populacional de plantas daninhas considerando a dinâmica da resistência aos herbicidas, onde são utilizados conceitos de Mendel e do equilíbrio de Hardy-Weinberg para a modelagem do problema. O Capítulo 6 apresenta a formulação do problema de otimização com aplicação da sequência de um único herbicida e a formulação do problema de otimização com rotação de herbicidas. O Capítulo 7 apresenta os resultados numéricos obtidos utilizando o método ASA e o método *branch and bound*. Finalmente, no Capítulo 8 são apresentadas as conclusões obtidas do presente trabalho.

Capítulo 2

Revisão bibliográfica

O crescimento mundial da população urbana e a redução da população rural tem estimulado a adoção de tecnologias para o aumento da produção agrícola. Entretanto, os custos de produção têm, nos últimos anos, aumentado substancialmente devido, principalmente, à utilização de herbicidas.

Dentre os fatores que contribuem para a baixa produtividade das plantas cultivadas, as plantas daninhas podem ocasionar, através da competição com a cultura, perdas de até 90%, quando nenhum método de controle for empregado. Neste ponto de vista, o gasto com o manejo de plantas daninhas tem ultrapassado, em alguns casos, mais de 12% do custo de produção agrícola (Velini e Karam 2008). Apesar do grande avanço no desenvolvimento de tecnologias para o manejo de plantas daninhas, estas ainda continuam sendo um dos grandes problemas na produção agrícola.

A insuficiência de conhecimentos básicos, tais como a biologia, a ecologia, a dinâmica das plantas daninhas, as alternativas de controle, a dinâmica da resistência e os impactos ambientais tem contribuído para o uso indiscriminado e o aumento significativo na probabilidade de contaminação ambiental e impacto na saúde humana. Neste contexto, o desenvolvimento de técnicas de controle tem motivado muitas pesquisas no sentido de otimizar a produtividade de uma lavoura. Este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica sobre o manejo e a resistência de plantas daninhas a herbicidas.

2.1 Manejo de plantas daninhas

Plantas daninhas são plantas que crescem espontaneamente em solo agrícolas, competindo rigorosamente com a população cultivada, comprometendo a produção (Jones e Cacho 2000). Uma das principais características responsáveis pelo mecanismo de sobrevivência das plantas daninhas é a alta produção de sementes (Lacerda 2003), que, aliada à longevidade e capacidade de sobreviver sob condições adversas e em baixo nível de atividade metabólica, podem garantir grandes reservas de sementes de plantas daninhas no solo, as quais podem germinar em gerações futuras (Lorenzi 2000b), causando grandes problemas a lavoura. Com isso, o controle de plantas daninhas é uma prática importante para a obtenção de bons resultados em um sistema de cultivo.

A principal técnica utilizada no manejo de plantas daninhas é a aplicação de herbicidas. Tendo como base da estratégia de controle a aplicação de herbicidas, o foco principal dos estudos desenvolvidos sobre o combate às infestações por plantas daninhas na agricultura é puramente a maximização dos lucros de produção (Jones 2005), deixando em segundo plano as preocupações relacionadas aos recursos naturais e aos impactos ambientais causados pela técnica de controle aplicada (Burn et al. 1987).

Para que se possa desenvolver uma estratégia de controle de plantas daninhas de forma a levar em consideração não só os custos de produção e perdas de rendimentos causados pela planta, mas, também, os impactos ambientais gerados pelo processo, é necessário obter maior conhecimento do desenvolvimento biológico da planta daninhas e da forma como essa compete com a cultura cultivada. Tão importante como conhecer os aspectos citados a pouco é estudar a fundo os riscos e benefícios das estratégias de controle utilizadas, pois, dessa forma, aumentam-se as chances de obter sucesso. Para descrever esses aspectos são usados modelos matemáticos definidos por uma ou um conjunto de equações (Aguirre 2004).

Modelos matemáticos que descrevem a dinâmica populacional de plantas daninhas a longo prazo ajudam a entender com que intensidade essa planta se reproduz e de que forma competem entre si, possibilitando inserir ao processo algum mecanismo de controle (Holst et al. 2007). Um modelo desse tipo normalmente é descrito por equações de diferenças e descrevem o tamanho da população de plantas daninhas no ciclo de vida t através de uma função avaliada no ciclo de vida $t - 1$ (Sakai 2001). Assim, modelos

matemáticos que descrevem infestações de plantas daninhas, crescimento populacional e aplicação de herbicidas, servem para fornecer informações sobre a biologia da planta e possibilitar o desenvolvimento de estratégias de controle (Mortimer et al. 1980, Doyle 1991).

A partir do uso de modelos matemáticos, pode-se entender, prever e simular os impactos causados pela interferência das plantas daninhas em uma certa cultura (Lotz et al. 1996). Pois, devido às plantas daninhas invadirem os ecossistemas naturais e apresentarem sérias ameaças para a biodiversidade, é necessário se fazer uma abordagem estratégica, integrada, ecológica e econômica para o manejo de plantas daninhas. E, para isso, foram desenvolvidos modelos matemáticos que descrevem a dinâmica populacional da planta daninha, os quais possibilitam entender como esta planta se relaciona com o meio, de que forma compete com a plantação (Park et al. 2003), qual o seu comportamento quando se tenta controlar a infestação, qual a probabilidade e a taxa de evolução da resistência a herbicidas (Maxwell et al. 1990, Diggle et al. 2003) e quais as formas de atacar o problema de infestação. No entanto, muitas vezes não é possível desenvolver pesquisas de campo sobre a infestação por plantas daninhas, devido às restrições físicas e econômicas. Dessa forma, os modelos matemáticos servem de forma eficiente para testar o experimento.

Basicamente, modelos de manejo de plantas daninhas são feitos a partir de três questões principais: (1) qual é a relação entre a densidade de planta daninha e as perdas de rendimento na lavoura; (2) qual é a quantidade necessária de controle para conter a infestação ou erradicar totalmente as plantas daninhas; (3) qual é o grau de infestação das plantas daninhas para o qual medidas de controle são justificáveis (Mortimer 1987, Doyle 1991). Essas questões são bases para modelos que visam apenas a redução das perdas de rendimento e maximização dos lucros de produção, porém, de um ponto de vista mais amplo e abordando outros aspectos, como os impactos ambientais, encontram-se diferentes técnicas de manejo mais eficientes e rentáveis. Para que se alcance essa maior amplitude do assunto é interessante adicionar às três questões levantadas há pouco outras três: (1) como é possível usar herbicidas de forma mais seletiva a ponto de manter viável economicamente o controle da planta daninha; (2) de que forma podem ser utilizadas técnicas de controles físicos e biológicos, a fim de minimizar os impactos ambientais causados pelos herbicidas; (3) quais são os riscos

econômicos assumidos ao utilizar controles físicos e biológicos (Doyle 1997).

Para responder a algumas das questões levantadas acima, como, por exemplo, o fato de utilizar o herbicida de forma seletiva maximizando os lucros de produção, tem-se em mãos ferramentas importantíssimas que são os modelos de otimização.

Modelos de otimização que buscam diminuir os custos num sistema de colheita são dados em Jones e Cacho (2000) e Jones (2005). Esses trabalhos traçam estratégias de controle da infestação para um período pré-determinado de anos, utilizando modelos dinâmicos de otimização. O primeiro trabalho faz um comparativo entre a estratégia de controle estática, onde leva-se em consideração apenas o período de colheita atual, e a dinâmica (ou de manejo de recursos), onde leva-se em consideração um período pré-determinado de anos co-relacionados. O segundo trabalho faz uma análise bioeconômica da estratégia de controle da infestação utilizando um modelo bioeconômico estocástico, o qual inclui, além da aplicação de herbicidas, técnicas de manejo integrado de plantas daninhas. Ambos os trabalhos não utilizam aplicação seletiva de herbicidas.

Normalmente, o combate à planta daninha é feito através da aplicação uniforme de herbicidas em toda a área de plantio. Porém, a infestação não está distribuída uniformemente na plantação. Logo, a aplicação do herbicida pode ser reduzida se aplicado proporcionalmente nas áreas infestadas (Wallinga et al. 1998). Esta forma de aplicação é denominada aplicação seletiva de herbicida. Considerações sobre fatores de saúde, ambientais e econômicos estão estimulando o desenvolvimento de tecnologias pela aplicação seletiva de herbicidas (Alchanatis et al. 2005). Esse processo favorece a redução de resíduos de herbicidas na água, nos alimentos e no ambiente (Aitkenhead et al. 2003).

Em Odom et al. (2003), um modelo de programação dinâmica determinístico é desenvolvido. Um estudo de caso para a planta daninha vassoura foi analisado, avaliando-se as maneiras nas quais o modelo de programação dinâmica pode levar em conta as questões políticas associadas ao manejo de uma planta daninha em um parque nacional. O modelo considera a dinâmica da população de plantas daninhas, o custo e os efeitos das medidas de controle, incluindo a densidade das plantas daninhas e o banco de sementes como variáveis de estado. Uma regra de decisão ótima fornece um conjunto de medidas de controle que pode ser usado para tratar o problema a cada ano, dependendo da densidade de plantas daninhas.

Em Sakai (2001) é descrito a dinâmica populacional de plantas daninhas através de

fatores dependentes e independentes da densidade de plantas daninhas, onde o número de sementes por área nos sucessivos anos pode ser obtido sequencialmente a partir do número de sementes do ano inicial medido. Gonzalez-Andujar (1996) discute como a persistência de populações de plantas daninhas no campo pode ser explicada pelo comportamento dinâmico de suas populações apesar do uso de altas taxas de aplicação de herbicida.

Em Doyle (1997) é discutido o papel da modelagem matemática no desenvolvimento de estratégias integradas, envolvendo a redução de defensivos químicos, para o controle de plantas daninhas, pestes e doenças na colheita. Existe uma grande preocupação em simular e modelar os impactos de herbicidas e identificar os limiares para aplicá-los, com especial atenção a questões como interferência de plantas na colheita e sistemas de manejo. Além disso, no caso de algumas formas de controle, tais como genética e biológica, modelar as consequências antes da aplicação prática é imprescindível, dado o potencial ecológico e os riscos ambientais envolvidos.

Os modelos dinâmicos indicam que a infestação não é apenas dependente da densidade de plantas daninhas mas, também, da produção de sementes e competitividade das espécies (Park et al. 2003, Firbank e Watkinson 1985). Usando um modelo hiperbólico, Cousens (1985b) descreve a perda de rendimento causada pela competição de plantas daninhas em uma cultura, baseado na possível forma em que os indivíduos se relacionam através de competição inter-específica. Recentemente foi quantificada a competição entre planta daninha e a cultura de feijão-soja a partir de índices de competitividade e a distribuição da planta daninha na cultura (Hock et al. 2006).

Visando reduzir as perdas de rendimento causadas pela competição da planta daninha com a lavoura (Cousens 1985a), perdas estas que chegam a inviabilizar o plantio, diversas formas de controle foram desenvolvidas para maximizar os lucros em uma determinada estação ou ano e, conseqüentemente, diminuir os custos em um sistema de colheita (Auld e Tisdell 1987, Cacho 1998, Jones e Cacho 2000, Jones 2005, Jones et al. 2006, Chela 2007).

Portanto, estratégias de otimização em diversos programas de manejo de plantas daninhas vem sendo utilizados (Jones e Cacho 2000, Jones et al. 2006, Kotani et al. 2009, Kotani et al. 2011). Nestes trabalhos, são utilizadas técnicas de programação dinâmica para encontrar estratégias de controle ótimas. Em Jones e Cacho (2000) e Jones et al.

(2006), foi obtido o nível ótimo de controle das plantas daninhas que maximize os benefícios econômicos em termos da aplicação de doses de um único herbicida. Em Kotani et al. (2009) e Kotani et al. (2011), foi proposto um modelo dinâmico para a remoção de plantas daninhas, incluindo erradicar ou não erradicá-las.

No entanto, é importante considerar a rotação de herbicidas no modelo de otimização por causa da evolução da resistência a certo herbicida. Pois, a partir do momento que aplica-se apenas um único herbicida como forma de controle, com o tempo, a planta adquire resistência a este herbicida, o qual passa a não ser mais eficaz no controle da infestação.

2.2 Resistência de plantas daninhas a herbicidas

A resistência de plantas daninhas aos herbicidas dentro de uma determinada população, é a capacidade adquirida e herdável de alguns biótipos, da mesma espécie, de sobreviverem e se reproduzirem após a exposição a dose de um herbicida (Christoffoleti et al. 2004). Por sua vez, a pressão seletiva gerada pelos herbicidas aumenta a frequência dos biótipos resistentes (Rizzardi 2002). A utilização de herbicidas com residual prolongado ou herbicidas sem ação residual (mas aplicados repetidamente), o uso de herbicidas com alto grau de eficiência no controle do biótipo suscetível e a aplicação de doses elevadas proporcionam uma pressão de seleção muito grande, favorecendo o desenvolvimento do biótipo resistente (Christoffoleti et al. 1994b, Vidal e Fleck 1997).

As plantas daninhas surgiram de um processo dinâmico de evolução ao adaptarem-se às perturbações ambientais provocadas pela natureza ou pelo homem através da agricultura. Esta evolução continua até hoje em resposta a modernização da agricultura. Dentre as modernas técnicas usadas na agricultura, os herbicidas aplicados no controle das plantas daninhas têm proporcionado uma evolução bastante rápida das mesmas, tornando-as, em algumas situações, resistentes a estes produtos químicos. Logo, a resistência de plantas daninhas aos herbicidas ocorre em função de um processo evolutivo e o desenvolvimento de biótipos de plantas daninhas resistentes é imposto através da pressão de seleção causada pelo uso intensivo dos herbicidas. O conhecimento dos mecanismos e fatores que favorecem o aparecimento de biótipos de plantas daninhas resistentes é fundamental para que técnicas de manejo sejam utilizadas no sentido de

evitar ou retardar o aparecimento de plantas resistentes em uma área.

De acordo com Christoffoleti (2008), qualquer população em que os indivíduos mostram uma base genética variável quanto à tolerância a uma medida de controle, irá, com o tempo, mudar sua composição populacional como mecanismo de fuga para sobrevivência diminuindo a sensibilidade a esta medida de controle.

O desenvolvimento da resistência a herbicidas na população de plantas daninhas sob seleção de herbicidas é um fenômeno evolucionário. Os herbicidas são fortes agentes de seleção e, onde a variabilidade genética é grande, são capazes de pressionar toda essa variedade para apenas uma direção, a dos indivíduos que carregam características que os tornam resistentes aos herbicidas.

A grande variabilidade genética das plantas daninhas se deve a fatores característicos desses indivíduos, tais como a presença de plantas daninhas em diversas áreas, adaptabilidade a diversos climas e solos, diferentes métodos de reprodução, facilidade e rapidez de reprodução e a existência de um banco de sementes dormentes capaz de manter múltiplas gerações protegidas de condições não favoráveis durante períodos prolongados.

Não há apenas a resistência de plantas daninhas a herbicidas. As plantas daninhas podem ser consideradas resistentes também a métodos de manejo utilizados com os mesmos objetivos de extermínio. Um exemplo claro são os métodos de aragem do solo, plantio direto e cobertura do solo utilizados para controle físico do banco de sementes e plantas germinando. Nesses casos, as plantas daninhas se adaptaram mudando para um ciclo de vida mais rápido, sendo capazes de sobreviver com menor umidade e mais calor e tendo uma força de germinação superior.

O conceito de resistência também pode ser aplicado de modo mais abrangente, ao observar certas espécies que desenvolveram substâncias que tornam seu paladar não agradável aos animais que antes as comiam, como sementes com casca mais rígida ou cada vez menores e com menos nutrientes (portanto, menos atrativas a se tornarem alimento). São estas adaptações que as tornam mais resistentes a serem exterminadas por seres que se alimentam delas.

A resistência a herbicidas, portanto, é mais um capítulo na evolução destes seres. O que a difere é que a resistência provém de características dificilmente observáveis.

Afinal, devido a ação específica e molecular do herbicida, as diferenças que tornam as plantas resistentes estão presentes em pequenas mudanças na estrutura interna da planta, quase sempre em alguma enzima ou vacúolo da planta (algo que não pode ser observado sem uma profunda análise laboratorial).

O fato de não observar esta resistência torna sua detecção mais difícil. Métodos de detecção e confirmação da resistência têm sido desenvolvidos e utilizados largamente no mundo, sendo que o número de casos registrados no portal do HRAC (*Herbicide Action Committee*) tem aumentado rapidamente nos últimos anos (Weeds 2010).

Com isso, diversas tentativas tem sido feitas no sentido de desenvolver modelos matemáticos que integrem processos genéticos, fisiológicos e ecológicos envolvidos na evolução de populações de plantas daninhas resistentes aos herbicidas (Gressel e Segel 1990). Esses modelos enfatizam a importância relativa dos fatores que afetam o desenvolvimento e disseminação da resistência.

Os modelos, em geral, referem-se à resistência herdada por um ou poucos genes principais, por exemplo, resistência às triazinas, inibidores da enzima ALS, paraquat e dinitroanilinas, as quais são herdadas monogenicamente na maioria dos casos estudados até agora. Contudo, a maioria dos princípios incorporadores nos modelos também deve ser relevante à resistência herdada poligenicamente.

Segundo Neve (2008), plantas controladas com métodos de manejo tradicionais e doses comerciais de herbicida apresentam resistência detectável somente após longos ciclos da cultura. Harper (1956) previu o aparecimento de plantas resistentes juntamente com a resistência aos herbicidas que começaram a ser utilizados na época. Portanto, o problema está evoluindo, pois as plantas daninhas aumentaram a taxa de indivíduos resistentes na população e, segundo Gressel (2009) e Gressel (2011), o cenário esperado tende a piorar nos próximos anos. Com isso, é necessário desenvolver modelos que descrevem este comportamento para entender como estas plantas evoluem e poder tomar decisões mais eficientes no controle da resistência.

Portanto, evolução e o manejo da resistência tem sido foco de muitos estudos nos últimos anos (Neve 2008, Neve et al. 2011). Em Neve (2008) foi proposto um estudo da evolução e manejo da resistência ao glifosato em plantas daninhas. Em Neve et al. (2011) foi apresentado um modelo populacional para simular a evolução da resistência ao glifosato em populações de *Amaranthus palmeri*.

O modelo apresentado por Gressel e Segel (1990) estima o aumento na proporção de plantas resistentes relacionado com o tempo, baseado nos seguintes aspectos: frequência inicial de um genótipo resistente, pressão de seleção imposta pelo herbicida, adaptação ecológica relativa do biótipo resistente comparada à do suscetível na ausência de herbicida e longevidade do banco de sementes no solo.

Em Maxwell et al. (1990) foi proposto um modelo de manejo de plantas daninhas com resistência, o qual enfatiza a importância dos principais processos que determinam a dinâmica da resistência de plantas daninhas aos herbicidas. Dentre estes, destacam-se a sobrevivência e a fecundidade, ambas influenciadas pela competição entre plantas e que afetam a adaptação de biótipos resistentes relativamente ao biótipo suscetível. Em seguida, destaca processos que contribuem para o fluxo de genes no espaço e no tempo e que alteram a frequência de alelos resistentes e suscetíveis em uma população, tais como a imigração de pólen e sementes, dormência de sementes e tipo de sistema de seleção. Ambos os modelos concluem que a pressão de seleção deve ser reduzida para prevenir o desenvolvimento da resistência.

Diggle et al. (2003) desenvolveram um modelo de resistência múltipla para investigar a influência do ciclo de vida da planta daninha sob a restrição de manejo de herbicidas. De acordo com Diggle et al. (2003), a probabilidade e a taxa de evolução da resistência a herbicida depende da interação entre a dinâmica populacional e a genética populacional de plantas daninhas. O que nos submete a alguns fatores evolucionários importantes como a intensidade de seleção (grau de discriminação entre os biótipos), a frequência do traço de resistência em populações naturais (seleção natural), o modelo de herança da resistência, o fitness relativo a biótipos suscetíveis e resistentes na presença e ausência de herbicida e o gene de transição entre a população.

Assim, o estudo da dinâmica da resistência é um ponto importante na tomada de decisão para o manejo de plantas daninhas.

2.2.1 Dinâmica da resistência

A resistência de plantas daninhas aos herbicidas pode resultar de mudanças bioquímicas e fisiológicas, alterações morfológicas ou mudanças fenológicas de certos biótipos de plantas daninhas. Muitos casos de resistência aos herbicidas resultam tanto de alteração do sítio de ação do herbicida ou aumento da seu metabolismo, quanto da

departamentalização e compartimentalização do herbicida na planta.

Os mecanismos responsáveis pela maioria dos casos de resistência envolvem modificações nos sítios de ação dos herbicidas. Os herbicidas do grupo das triazinas possuem como modo de ação a inibição fotossintética. Na maioria das plantas daninhas a resistência é devida a mutações que alteram o sítio de ação da triazina na membrana tilacóide no cloroplasto (Christoffoleti et al. 1994a). A resistência à triazina é absoluta, de tal forma que plantas daninhas resistentes suportam muitas vezes a dose do herbicida normalmente recomendada para o seu controle.

Dentre os principais fatores que afetam a evolução da dinâmica da resistência da planta daninha a herbicidas destacam-se a frequência inicial do alelo, a pressão de seleção exercida pelo herbicida, a adaptação ecológica e o banco de sementes presente no solo.

É provável que os biótipos de plantas daninhas resistentes estejam presentes nas populações de campo antes mesmo de qualquer exposição aos herbicidas, porém, em frequências variáveis e bastante baixas. A frequência inicial do genoma herdado com relação à resistência às triazinas em populações não selecionadas está entre 10^{-10} e 10^{-20} plantas por hectare (Gressel 1991), enquanto que a frequência inicial mais alta, de 10^{-6} plantas por hectare, ocorre nos biótipos resistentes aos herbicidas inibidores da enzima ALS (Christoffoleti 2008). Essas frequências tendem a variar com a espécie de planta daninha, local e tipo de resistência, de modo que é muito difícil prever a frequência inicial de um biótipo resistente em qualquer população de plantas daninhas.

A pressão de seleção refere-se à proporção relativa de indivíduos resistentes e suscetíveis existentes antes e após o tratamento com herbicida (Gressel e Segel 1990, Gressel 1991). Aplicações de herbicidas com efeito residual prolongado, como as triazinas, proporcionam uma alta pressão de seleção, pois as germinações sucessivas das diversas gerações de plantas daninhas ficam expostas ao herbicida e, conseqüentemente, a população de plantas daninhas sobreviventes adquirem uma proporção cada vez mais alta de indivíduos resistentes.

Os fatores que tendem a influenciar a pressão de seleção são a intensidade de uso do herbicida, eficiência e persistência do herbicida, eficácia dos mecanismos de resistência, especificidade do herbicida com relação ao seu modo de ação, padrão de emergência da planta daninha e eficiência dos métodos de controle não químicos (Christoffoleti

et al. 1994a).

Outro fator que merece destaque é a existência do banco de sementes das plantas daninhas. O banco de sementes pode retardar o aparecimento de plantas daninhas resistentes a um determinado herbicida. Quanto maior for o período de dormência das sementes das plantas daninhas, maior será o tempo necessário para esgotar o banco de sementes do biótipo suscetível no solo, mesmo que exista pressão de seleção muito forte. A rapidez no desenvolvimento da resistência de plantas daninhas aos herbicidas depende muito da persistência das sementes no solo, características de germinação da espécie daninha e sistema de cultivo usado anteriormente ao estabelecimento da cultura (Gressel e Segel 1990).

Dentre algumas práticas de manejo para retardar a dinâmica de evolução da resistência, pode-se destacar, o uso de herbicidas alternativos, de misturas de herbicidas, de rotação de herbicidas, de rotação de culturas na área e de otimização da dose de herbicida.

O uso de herbicidas alternativos, herbicidas com mecanismos de ação diferenciados, ainda eficazes em populações de plantas daninhas resistentes pode ser uma estratégia de sucesso, pelo menos a curto prazo. Em algumas situações as plantas resistentes são mais facilmente controladas por herbicidas alternativos que as plantas suscetíveis (Gressel e Segel 1990). Isso é normalmente denominado resistência cruzada negativa. Contudo, se o herbicida for usado repetidamente há um alto risco de se desenvolver resistência ao herbicida alternativo.

O uso de misturas de herbicidas, com diferentes mecanismos de ação, deve reduzir a pressão de seleção do genótipo resistente. O valor de tal estratégia depende da eficácia relativa de cada um dos herbicidas na planta daninha alvo e a especificidade dos mecanismo de resistência.

A pressão de seleção é reduzida se forem usados herbicidas sem nenhuma ou pouca atividade residual no solo e, também, as reduções de doses de herbicida e do número de aplicações por ano agrícola reduzem os riscos de desenvolvimento de resistência de plantas daninhas aos herbicidas. A rotação de herbicidas pode ser uma alternativa viável para reduzir a probabilidade do aparecimento de plantas resistentes a estes herbicidas.

Muitas espécies daninhas estão em sincronia com culturas específicas. Assim, a ro-

tação de culturas pode reduzir o sucesso intrínseco dessas plantas e, em muitas situações, permitir o uso de herbicidas alternativos.

A otimização das doses e do número de aplicações do herbicida de tal forma que a intensidade de controle das plantas daninhas seja feita até se atingir o nível de dano econômico, reduz o impacto ambiental causado pelo uso desnecessário do herbicida. Esta medida de otimização reduz a pressão de seleção imposta pelo herbicida. Além disso, permite a sobrevivência de plantas suscetíveis, proporcionando mais polinização cruzada entre indivíduos resistentes e suscetíveis em espécies alógamas, o que pode reverter o processo de seleção.

Pode-se observar que todas as recomendações para prevenção e controle da resistência de plantas daninhas aos herbicidas são baseadas em alternativas que auxiliem o controle químico das mesmas. Sendo assim, fica claro que o método integrado de controle das plantas daninhas é a alternativa mais viável para a agricultura.

Os herbicidas constituem-se hoje no principal método de controle das plantas daninhas. No entanto, não se deve esquecer que a integração com outros métodos possibilita que tais espécies não evoluam de tal maneira a tornarem-se resistente ao herbicida utilizado para o controle. É importante ressaltar que as plantas daninhas podem desenvolver resistência não apenas ao controle químico, mas a qualquer outro método de controle desde que este seja usado de maneira intensa, impondo uma forte pressão de seleção sobre as espécies.

Observa-se que em sistemas de monocultivos de áreas extensivas é comum que certos herbicidas sejam preferencialmente aplicados no controle de plantas daninhas. Desta forma, o agricultor muitas vezes usa apenas um único herbicida nas diversas safras agrícolas. A aplicação sequencial de dois herbicidas diferentes, porém, com o mesmo mecanismo de ação, tem um efeito semelhante à aplicação repetitiva de um dos herbicidas isoladamente, pois, ambos exercem pressão de seleção semelhante na população. Por esse motivo, a rotação de herbicidas, com diferentes mecanismos de ação, é importante para retardar o aparecimento de biótipos resistentes e, com isso, obter uma maior eficácia no controle de plantas daninhas e uma melhor utilização do herbicida com baixo comprometimento ambiental.

Portanto, na maioria das vezes, a resistência de biótipos de plantas daninhas aos herbicidas ocorre como consequência do uso repetitivo do mesmo herbicida ou de herbi-

cidas com o mesmo mecanismo de ação. No entanto, é necessário modificar essa prática de modo a prevenir ou retardar o estabelecimento da resistência em alguns biótipos de plantas daninhas.

Capítulo 3

Controle ótimo

A teoria de controle ótimo pode ser aplicada nos mais diversos tipos de problemas, por exemplo, em problemas físicos, biológicos, em problemas relacionados a processos químicos, na área econômica e produtiva, entre outros (Kennedy 1986, Cacho 1999, Campo et al. 2006). Sendo assim, pode-se encontrar diversas formas de apresentar um problema de controle, dependendo de cada problema em particular.

Este capítulo apresenta os resultados básicos da teoria de controle ótimo para o caso contínuo e discreto, e uma condição necessária de otimalidade conhecida como princípio do máximo de Pontryagin (PMP) para problemas com restrição de estado e controle. E, ainda, os principais métodos utilizados na obtenção da solução numérica do problema de controle ótimo.

3.1 Controle ótimo contínuo

O estudo de problemas de controle ótimo originou-se da teoria de cálculo variacional por volta de 1956. Bellman (1957) e Pontryagin et al. (1965) deram grande contribuição para o desenvolvimento do tema. Problemas de controle ótimo são geralmente definidos em um espaço de dimensão infinita, onde os controles podem ser funções do tempo que são limitadas ou integráveis.

De forma geral, um problema de controle ótimo contínuo com restrição de estado

pode ser representado da seguinte forma (Vinter 2000):

$$\min f(x_T, u_T) \quad (3.1)$$

sujeito a

$$\dot{x}_t = g(x_t, u_t), \text{ para todo } t \in [0, T] \quad (3.2)$$

$$u_t \in \Omega(t), \text{ para todo } t \in [0, T] \quad (3.3)$$

$$x_0 = x(0) \quad (3.4)$$

com dados no intervalo $[0, T]$, $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : [0, T] \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $\Omega(t)$ o conjunto de controles admissíveis para o problema.

No problema de controle ótimo (3.1) - (3.4) as variáveis x_t e u_t são chamadas de variáveis de estado e controle, respectivamente. Então, o problema (3.1) - (3.4) consiste de:

- Funcional objetivo: $f(x_T, u_T)$.
- Equação de estado: descrita por (3.2).
- Função trajetória de estado: uma função absolutamente contínua x_t , que satisfaz (3.2).
- Função de controle: uma função mensurável $u_t \in \Omega(t)$ que satisfaz (3.3).
- Condições iniciais do sistema: dado por (3.4).

O processo (x_t, u_t) é admissível se a trajetória de estado x_t satisfaz as restrições (3.2) - (3.4).

Quando se procura uma solução do problema de controle ótimo, pode-se especificar o interesse em examinar a solução global ou a solução local. No caso da solução local, pode-se dividir entre minimizador (forte) local ou minimizador (fraco) local, pois a solução consiste de uma função de estado x_t e de uma função de controle u_t .

Definição 3.1 *Seja (x_t^*, u_t^*) um processo admissível do problema (3.1) - (3.4). Um processo (x_t^*, u_t^*) é chamado de minimizador local se, e somente se, existir algum $\epsilon > 0$*

que minimiza o custo sobre todo processo (x_t, u_t) de (3.1) - (3.4) e satisfaz

$$\|x_t - x_t^*\| < \epsilon \quad (3.5)$$

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

Definição 3.2 *Seja (x_t^*, u_t^*) um processo admissível do problema (3.1) - (3.4). Um processo (x_t^*, u_t^*) é chamado de minimizador fraco local se, e somente se, existir algum $\epsilon > 0$ que minimiza o custo sobre todo processo (x_t, u_t) de (3.1) - (3.4) e satisfaz*

$$\|x_t - x_t^*\| < \epsilon \text{ e } \|u_t - u_t^*\| < \epsilon \quad (3.6)$$

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

Para a obtenção da solução de um problema como o descrito acima, pode-se utilizar uma condição necessária de otimalidade, a qual permite a obtenção de uma candidata à solução analítica para o problema e, portanto, exata. Porém, em muitos casos, se torna difícil e até mesmo impraticável, obter uma candidata à solução analítica devido à complexidade das expressões envolvidas. Em casos como esses, precisa-se utilizar métodos numéricos, com os quais é possível a obtenção de uma solução aproximada.

Problemas de controle ótimo podem ser representados considerando o tempo contínuo, $t \in \mathbb{R}$ ou discreto, $t \in A$, onde A é um subconjunto discreto de $\mathbb{R}$. Uma das diferenças entre esses dois processos é que, no caso contínuo, o sistema dinâmico relacionado ao estado do problema é descrito por uma equação diferencial, enquanto o caso discreto está relacionado a equações de diferenças. Essa diferença tem grande importância, pois resolver uma equação de diferenças, em geral, é mais simples que resolver uma equação diferencial. De fato, em uma equação de diferenças, resolvem-se somas e produtos, enquanto a solução de uma equação diferencial envolve a integração de uma determinada expressão.

A seguir são descritos sistemas cujos comportamentos podem ser modelados por um conjunto de n equações diferenciais ordinárias da forma (3.2). De forma geral, precisa-se controlar o sistema a partir de um ponto inicial dado x_0 em 0, em um tempo final T variável, de tal forma que o funcional objetivo (3.1) seja minimizado, ou seja, existem controles admissíveis u_t que levam o sistema do estado inicial x_0 ao estado final x_T ,

e dentre esses, está-se procurando o que minimize (3.1). Este controle é chamado de controle ótimo, denotado por u_t^* . Admite-se a existência deste controle ótimo. Dessa forma, precisa-se agora determinar uma forma de distinguir esse controle dos demais. Uma condição necessária é dada pelo PMP (Pontryagin et al. 1965).

3.1.1 O princípio do máximo para o caso contínuo

O PMP é um resultado fundamental para a obtenção da solução analítica de um problema de controle ótimo. Foi desenvolvido com base nos resultados obtidos por Euler e Lagrange em cálculo de variações e por Hamilton em mecânica clássica (Thornton e Marion 2004).

De acordo com Vinter (2000), o PMP estabelece condições necessárias para a existência do controle ótimo do problema em questão. Para a aplicação desse princípio no problema de controle ótimo (3.1) - (3.4), deve-se inicialmente definir o Hamiltoniano associado ao problema. Seja $\mu_t \in \mathbb{R}$ o vetor denominado variáveis de co-estado, ou variáveis adjuntas, do problema. Desse modo, a função Hamiltoniana H associado a (3.1) - (3.4) possui a seguinte forma:

$$H(x_t, u_t, \mu_t) = f(x_t, u_t) + \mu_t g(x_t, u_t). \quad (3.7)$$

Com isso, pode-se apresentar o princípio do máximo de Pontryagin para problemas definidos como (3.1) - (3.4).

Teorema 3.1 (*Princípio do Máximo de Pontryagin*) *Seja u_t^* a trajetória ótima de controle, contínua por parte, e x_t^* a trajetória de estado ótima associada, definidas no intervalo $[0, T]$. Então existe uma função μ contínua, que possui derivadas primeiras contínuas por partes, tal que para cada $t \in [0, T]$ as condições abaixo valem:*

(i) *Equações adjuntas:*

$$-\dot{\mu}_t = \frac{\partial H(x_t^*, u_t^*, \mu_t)}{\partial x_t}, \quad t = 0, 1, \dots, T.$$

(ii) *Equações de estado:*

$$\dot{x}_t^* = \frac{\partial H(x_t^*, u_t^*, \mu_t)}{\partial \mu_t} = g(x_t^*, u_t^*), \quad t = 0, 1, \dots, T.$$

(iii) *Condição de máximo:*

$$u_t^* \in \arg \max_{u \in \Omega(t)} H(x_t^*, u_t, \mu_t).$$

(iv) *Condição de transversalidade:*

$$-\mu_T = \frac{\partial f(x_T, u_T)}{\partial x_T}.$$

Detalhes sobre o teorema acima podem ser encontradas em Vinter (2000).

3.2 Controle ótimo para tempo discreto

A seguir é apresentado o problema de controle ótimo discreto. Uma característica desse problema é o fato de tratar de equações de diferença ao invés de equações diferenciais, como no caso contínuo. De forma geral, um problema de controle ótimo de tempo discreto é dado da seguinte forma:

$$\max \sum_{t=0}^T f(x_t, u_t) \tag{3.8}$$

sujeito a

$$x_{t+1} - x_t = g(x_t, u_t), \tag{3.9}$$

$$x_0 = x(0), \quad t = 0, 1, \dots, T \tag{3.10}$$

$$u(t) \in \Omega(t) \tag{3.11}$$

onde $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é a equação dinâmica, $\Omega(t)$ é o conjunto de controles admissíveis, $T \geq 0$ é o tempo final e $x(0)$ é a condição inicial para a variável de estado. Supõe-se que o tempo final T é fixo e que não há restrição sobre o estado final x_T .

Adicionados ao problema acima, pode-se ter restrições sobre as variáveis x_t e u_t , dependendo do problema em questão. De forma geral, o problema de controle ótimo discreto possui três características principais que o definem:

1. As variáveis podem ser divididas em dois conjuntos distintos, as variáveis de es-

tado, x_t , e as variáveis de controle, u_t .

2. O conjunto de restrições (3.9) relaciona a diferença entre as variáveis de estado, $x_{t+1} - x_t$, para os valores atuais, x_t , u_t , através da função g_t . A expressão (3.9) para cada t é chamada de equação dinâmica do problema.
3. A função objetivo (3.8) está expressa como a soma de $(n + 1)$ termos, e cada t -ésimo termo do somatório depende somente dos t -ésimos valores das variáveis de estado e controle. Uma função objetivo deste tipo é dita separável.

Um problema de controle ótimo como o representado por (3.1) - (3.4) e (3.8) - (3.11) pode ser redefinido de várias maneiras. Entre essas, pode-se reescrever o problema e deixá-lo na forma de Mayer, onde o funcional objetivo é expresso em função da variável de estado avaliada no tempo final. Pode-se descrever também o sistema nas formas de Bolza e Lagrange, de acordo com a definição de seu funcional objetivo, sendo essas formas equivalentes (Cesari 1983).

3.2.1 O princípio do máximo para o caso discreto

Considere o problema de otimização dado por (3.8) - (3.11). A função de Lagrange para este caso é dada por:

$$L = \sum_{t=0}^T f(x_t, u_t) - \sum_{t=0}^T \mu_t (x_{t+1} - x_t - g(x_t, u_t)) \quad (3.12)$$

onde μ_t é o multiplicador de Lagrange para a t -ésima equação de (3.9).

Primeiramente, observe a forma expandida do somatório (3.12),

$$\begin{aligned} L &= f(x_0, u_0) - \mu_0 (x_1 - x_0 - g(x_0, u_0)) \\ &+ f(x_1, u_1) - \mu_1 (x_2 - x_1 - g(x_1, u_1)) \\ &\dots\dots\dots \\ &+ f(x_{t-1}, u_{t-1}) - \mu_{t-1} (x_t - x_{t-1} - g(x_{t-1}, u_{t-1})) \\ &+ f(x_t, u_t) - \mu_t (x_{t+1} - x_t - g(x_t, u_t)) \\ &\dots\dots\dots \\ &+ f(x_T, u_T) - \mu_T (x_{n+1} - x_T - g(x_T, u_T)). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Derivando L em relação a x_t num ponto estacionário, chega-se à seguinte relação:

$$\frac{\partial L}{\partial x_t} = \frac{\partial f}{\partial x_t} + \mu_t \frac{\partial g}{\partial x_t} - \mu_{t-1} + \mu_t = 0, \quad t = 1, 2, \dots, T. \quad (3.14)$$

Derivando agora a função L em relação a u_t , tem-se:

$$\frac{\partial L}{\partial u_t} = \frac{\partial f}{\partial u_t} + \mu_t \frac{\partial g}{\partial u_t} = 0. \quad (3.15)$$

As duas relações dadas por (3.14) e (3.15) são apresentadas mais formalmente quando se define uma função H da seguinte forma:

$$H(\mu_t, x_t, u_t) = f(x_t, u_t) + \mu_t g(x_t, u_t). \quad (3.16)$$

Logo, tem-se o seguinte sistemas de equações relacionadas a H :

$$0 = \frac{\partial H}{\partial u_t}, \quad t = 0, 1, \dots, T \quad (3.17)$$

$$\mu_{t+1} - \mu_t = -\frac{\partial H}{\partial x_t}, \quad t = 0, 1, \dots, T-1 \quad (3.18)$$

$$x_{t+1} - x_t = \frac{\partial H}{\partial \mu_t}, \quad t = 0, 1, \dots, T \quad (3.19)$$

$$\mu_T = \frac{\partial f(x_T, u_T)}{\partial u_T} \quad (3.20)$$

em que (3.17) se refere à condição necessária de otimalidade dada pelo PMP, (3.18) e (3.19) são as chamadas equações de diferença de Hamilton para o problema de controle ótimo discreto e (3.20) se refere à condição de transversalidade.

A iteração de (3.17)-(3.19) possibilita determinar o conjunto de solução para as variáveis x_t, u_t e μ_t . A variável μ_t é a variável de coestado do problema. É importante lembrar que o coestado para o caso discreto é originado do multiplicador de Lagrange.

A estratégia usada para resolver o sistema determinado por (3.17)-(3.19) é usar (3.17) para expressar u_t em termos de x_t e μ_t e, então, substituir u_t em (3.18) e (3.19), as quais se tornam dependentes somente de x_t e μ_t . Embora x_0 seja dado, μ_0 é desconhecido, então, a condição de transversalidade é requerida para obter uma única solução.

Para o caso de se ter inicialmente um problema de tempo contínuo, sua discretização pode ser dada utilizando vários métodos. Dentre esses, destaca-se o método de Runge-

Kutta (Campos 2005).

A teoria de controle ótimo é muito ampla e pode ser usada para resolver vários tipos de problemas dependendo das restrições de cada situação. Algumas variações em problemas de otimização com aplicação de controle podem ser dadas quando se supõe condições relacionadas ao tempo final T e/ou estado final x_T . Pode-se ainda impor restrições às variáveis de estado e controle, x_t e u_t , em todo o tempo t .

3.3 Solução numérica

Desde a apresentação do PMP, diversos métodos numéricos vêm sendo desenvolvidos com o objetivo de obter uma solução numérica para problemas de controle ótimo. Os primeiros métodos buscavam obter uma solução a partir do princípio de otimalidade, ao invés de realizar uma otimização direta do funcional objetivo do problema em questão (Schwartz 1996).

Algumas dificuldades podem ser encontradas quando se tenta resolver um problema de controle ótimo utilizando o princípio do máximo. A principal dificuldade está relacionada à diferenciabilidade da função de Hamilton (Pontryagin et al. 1965), a qual nem sempre possui derivadas bem definidas. Uma alternativa para resolver problemas desse tipo é utilizar programação dinâmica (Bertsekas 1995), ou transformar o problema de controle ótimo em um problema de programação não linear padrão (Bertsekas 1999). Outra forma, seria utilizar o PMP a fim de obter condições necessárias para a otimização do problema, pois essas condições transformam as equações de estado e adjuntas em um problema de valor de contorno que pode ser resolvido numericamente (Griesse e Walther 2004).

Hager (2001) utiliza a técnica de discretização completa para problemas de controle ótimo sem restrições, tratando as equações do método de discretização como uma restrição adicional. São introduzidas variáveis adicionais de otimização correspondentes às funções de controle em pontos intermediários da malha de discretização. Com isso, se elimina a necessidade de interpolação do controle, porém, o problema de otimização obtido se torna maior (o que não é desejável para algoritmos práticos). A técnica de discretização utilizada é baseada nos métodos de Runge-Kutta para a obtenção de soluções aproximadas de equações diferenciais sujeitas a condições iniciais (problemas

de valor inicial).

A seguir, são descritas as técnicas de programação não linear e programação não linear inteira mista, técnicas consideradas neste trabalho para a resolução do problema de manejo de plantas daninhas.

3.3.1 Programação não linear

Programação não linear (NLP - *Nonlinear Programming*) são programas de otimização que envolvem variáveis contínuas, cuja solução é composta de um número finito de valores reais que satisfazem as restrições e o funcional objetivo do problema. Neste caso, está-se interessado no seguinte problema de otimização com variáveis restritas:

$$\max f(x_t, u_t) \tag{3.21}$$

sujeito a

$$lo \leq u_t \leq up$$

$$x_t, u_t \in \mathbb{R}$$

onde f é uma função contínua e diferenciável, x_t e u_t são variáveis contínuas e lo e up são os limitantes inferiores e superiores, respectivamente.

Para a resolução numérica do problema de controle ótimo de tempo contínuo, o primeiro passo é discretizar o problema original a fim de obter um problema aproximado equivalente. Desse modo, transformar o problema original em um problema de programação não linear padrão. Resolvendo esse novo problema obtém-se uma solução aproximada para o problema original.

Nesta estratégia, as variáveis de decisão são dadas por u_t , $t = 0, 1, \dots, T$, e as variáveis de estado x_t passam a ser determinadas em função de u_t , não sendo consideradas como variáveis do problema de programação não linear. Com isso, um método de programação não linear pode ser utilizado para a obtenção do controle ótimo u_t^* . Vale ressaltar que, dependendo do método adotado, o controle u_t^* pode corresponder a um ótimo local.

Método ASA

Dado que o problema de controle ótimo possui restrições sobre a variável de controle u_t na forma de limitantes inferiores e superiores, um método de programação não linear para variáveis restritas pode ser adotado. Assim, pode-se utilizar o método *Active Set Algorithm* (ASA) proposto por Hager e Zhang (2006), disponível em Hager (2009). Este método consiste na combinação entre os métodos gradiente conjugado e gradiente projetado, e possui garantia de convergência global para problemas convexos.

Teorema 3.2 (*Convergência global*) *Seja $\mathcal{L}$ o conjunto dos níveis definidos por*

$$\{x \in \beta : f(x) \leq f(x_0)\}$$

onde β é o conjunto fechado não vazio.

Assume-se que as seguintes condições são válidas:

- A1. f é limitada inferiormente por $\mathcal{L}$ e $d_{\max} = \sup_k \|d_k\| < \infty$.*
- A2. Se $\bar{\mathcal{L}}$ é a coleção de $x \in \beta$ cuja distância de $\mathcal{L}$ é no máximo $d_{\max}$, então ∇f é Lipschitz contínua em $\bar{\mathcal{L}}$.*
- A3. O algoritmo irrestrito (UA) satisfaz U1-U3 (apresentado em Hager e Zhang (2006)). Então, ou o ASA com $\epsilon = 0$ termina em um número finito de iterações em um ponto estacionário, ou tem-se*

$$\liminf_{K \rightarrow \infty} \|d^1(x_k)\| = 0.$$

Detalhes e a demonstração do Teorema 3.2 podem ser encontrada em Hager e Zhang (2006).

De acordo com testes computacionais apresentados em Hager e Zhang (2006), o método ASA possui desempenho computacional superior em relação aos principais métodos da literatura, L-BFGS-B (Byrd et al. 1995), SPG2 v. 2.1 (Birgin et al. 2000), GENCAN (Birgin e Martínez 2002) e TRON v. 1.2 (Lin e Moré 1999).

O método ASA requer como entrada uma solução inicial u_0 e um procedimento que calcula o gradiente da função a ser maximizada. Basicamente, o algoritmo ASA pode ser descrito como um método iterativo em que novos pontos u_{k+1} são gerados a partir

do ponto atual u_k :

$$u_{k+1} = u_k + \epsilon_k d_k \quad (3.22)$$

onde d_k é a direção de busca linear (de descida no caso de problemas de maximização) e ϵ_k representa o tamanho do passo a ser dado ao longo da direção de busca. O algoritmo, então, é dividido em duas etapas, a determinação da direção de busca d_k e a avaliação do parâmetro ϵ_k . A forma como o algoritmo escolhe a direção de busca d_k e avalia o parâmetro ϵ_k são descritos em Hager e Zhang (2006).

O cálculo de ϵ_k é feito por uma busca linear na direção d_k . Essa direção é baseada no gradiente da função Hamiltoniana do problema original, já que se busca um ponto crítico desta função ($Grad(H) = 0$). O procedimento que calcula o gradiente desta função utiliza as variáveis de estado e coestado, conforme descrito no Algoritmo 3.1. Detalhes do método ASA podem ser encontrados em Hager e Zhang (2006).

Algoritmo 3.1: Cálculo do gradiente

Entrada: u_k, x_0

Saída: gradiente da H no tempo k

- 1 Inicializar $k = 0$;
 - 2 Calcular variáveis estado (progressivo);
 - 3 Definir coestado final usando estado final;
 - 4 Calcular coestado (regressivo);
 - 5 Calcular gradiente da H usando o estado e coestado calculados nos passos 1 e 3 ;
 - 6 **retorna** gradiente da H .
-

3.3.2 Programação não linear inteira mista

Programação não linear inteira mista (MINLP - *Mixed Integer Nonlinear Programming*) são programas de otimização que envolvem variáveis inteiras e contínuas, permitem não linearidades no funcional objetivo e nas restrições. Para o caso particular em que uma variável inteira pode assumir valores sobre o conjunto $\{0, 1\}$, diz-se que tal variável é binária.

Um problema de MINLP pode assumir a seguinte forma:

$$\max f(x_t, u_t, \lambda_t) \quad (3.23)$$

sujeito a

$$lo \leq x_t \leq up$$

$$\lambda_t \in \{0, 1\}$$

onde λ é um vetor de variáveis binárias, x_t e u_t são variáveis contínuas e lo e up são os limitantes inferiores e superiores, respectivamente. O funcional objetivo f é uma função suave não linear e, geralmente, não concava.

Problemas de programação não linear inteira mista são, em geral, problemas difíceis de serem resolvidos devido a complexidade das funções envolvidas. Dois fatores principais contribuem para a dificuldade de resolução de problemas dessa forma (3.23), a não convexidade dos problemas, que possibilita a presença de múltiplas soluções locais, e a natureza combinatória dos problemas, promovida pela presença de variáveis inteiras (Wolsey 1998). A MINLP é amplamente utilizada na prática em problemas que envolvem frequentemente, síntese de processos na engenharia química (Adjiman et al. 1997), minimização de desperdício em corte de papel (Giannelos e Georgiadis 2001) e em problemas de empacotamento (Birgin et al. 2006, Birgin e Gentil 2010).

Uma das técnicas usadas na resolução de MINLP é a enumeração implícita ou o *branch and bound* (Wolsey 1998, Arenales et al. 2007). Essa técnica geralmente lida com a resolução de sucessivos subproblemas (problemas aproximados) de programação não linear. O método *branch and bound* envolve a resolução de problemas de programação não linear, que são relaxações do problema original obtidas, por exemplo, através da remoção das restrições de integralidades das variáveis inteiras. Portanto, um conceito fundamental usado neste método é a relaxação não linear que torna o problema original em um problema de programação não linear, o qual pode ser resolvido usando a teoria de controle ótimo.

Método *branch and bound*

Branch and bound é uma técnica de otimização que utiliza uma árvore de enumeração para resolver um problema (Wolsey 1998). Cada nó desta árvore representa um subproblema do problema inicial e cada ramo representa uma nova restrição a ser considerada. A descrição do método *branch and bound* para resolver problemas de pro-

gramação não linear inteira mista está associado, de forma específica, a uma árvore de enumeração da seguinte forma: cada nó da árvore representará um problema de programação não linear inteira mista, sendo a raiz o problema principal, e cada ramo representará a adição de uma nova restrição de limite inferior, superior ou de igualdade em uma variável. Com isso, cada nó herdará o problema do nó pai, isto é, do nó antecessor, com uma restrição a mais.

O método *branch and bound* foi introduzido por Land e Doig (1960). Desde então, foi e ainda é bastante utilizado como base para resolver muitos problemas de otimização. Pode-se citar, por exemplo, Bonami et al. (2008), Fletcher e Leyffer (1998), Eckstein (1994) e Grossmann e Quesada (1992) para aplicações de *branch and bound* na resolução de problemas de programação não linear inteira mista.

O algoritmo *branch and bound* consiste em dividir o problema em subproblemas mais simples, calcular limitantes inferior e superior para o valor ótimo do subproblema, no pior caso, todas as soluções serão exploradas, e cortar ramos da árvore que não precisam ser visitados. Na prática, frequentemente vários ramos são podados com o uso de limitantes z .

Seja um problema P dividido em m subproblemas $P_1, P_2, \dots, P_m$ tal que $P_1 \cup P_2, \dots, \cup P_m = P$. A fixação recursiva de diferentes variáveis cria uma árvore com nós internos, esses nós representam todas as soluções que podem ser obtidas respeitando a fixação das variáveis, e folhas, que representam as soluções completas. A Figura 3.1 descreve uma árvore de enumeração completa.

Figura 3.1: Problema com 3 variáveis binárias. λ_1 , λ_2 e λ_3 . Problema original P . Branch na variável λ_1 , criam-se subproblemas P_1 e P_2 . Branch na variável λ_2 , criam-se subproblemas P_{11} , P_{12} , P_{21} e P_{22} . Branch na variável λ_3 , levam as soluções completas.

Considere o conjunto de soluções viáveis de um problema P . O problema será di-

vidido em dois subproblemas de modo que qualquer solução viável de um subproblema seja uma solução viável de P . Seja λ_t uma variável que viola uma restrição de integridade e que foi escolhida como variável de decisão. Se λ_t for uma variável binária, um nó com uma variável com valor fracionário entre 0 e 1 é ramificado em dois nós filhos, ou seja, serão criados dois subproblemas. No primeiro subproblema, o valor da variável λ_t será fixado em 0 e no segundo subproblema seu valor será fixado em 1. A Figura 3.2 ilustra esse caso.

Figura 3.2: Divisão de um problema em dois subproblemas através da fixação do valor da variável λ_t em 0 no primeiro subproblema e em 1 no segundo.

Usando somente o *branch* tem-se um algoritmo exato que em um número finito de passos fornece a solução ótima, mas extremamente difíceis de serem resolvido, pois para n variáveis binárias tem-se 2^n nós a serem explorados. A chave para melhorar a eficiência do *branch and bound* é usar limitantes para podar ramos da árvore que não contém a solução ótima (Wolsey 1998).

Considere um problema onde se quer obter o lucro máximo da solução ótima $z = \max f(x)$. Mesmo que z seja difícil de calcular, eventualmente pode-se ter limites para z que podem ser calculados com mais facilidade (Figura 3.3).

Figura 3.3: Limitantes superior e inferior para um problema de controle ótimo.

O método mantém a melhor solução S conhecida para o problema, cujo valor do limitante $z = -\infty$, e um conjunto de problemas candidatos (problemas ainda não visitados) que começa contendo apenas o problema principal. Enquanto houver apenas problemas candidatos, seleciona-se e remove-se um problema P_m desse conjunto.

Seja P_m o problema que se obtém a partir de P através da relaxação das restrições de integralidade. Dessa forma, P_m é um problema de programação não linear padrão. Se a solução de P_m satisfaz as restrições de integralidade, então também é uma solução ótima do problema P . Compara-se o valor do limitante z_P para o problema P dessa solução com o valor do limitante z da melhor solução conhecida até o momento. Se $z_P > z$, então uma solução melhor do que a anterior foi encontrada e S , assim como o seu correspondente valor do limitante z_P , são atualizados.

Se a solução de P_m não satisfaz as restrições de integralidade, existe uma variável que viola uma dessas restrições. Essa variável é chamada de variável de decisão. Então, P é dividido em dois subproblemas. Cada um dos subproblemas criados é incorporado ao conjunto de problemas candidatos e o método segue resolvendo o próximo subproblema. Após todos os subproblemas terem sido resolvidos ou explorados, a solução ótima é a melhor solução descoberta durante o processo.

Na análise dos subproblemas candidatos, é necessário definir quais devem ser explorados e quais devem ser eliminados. Um subproblema P_m será considerado explorado se garantir que o seu conjunto de soluções viáveis não contém uma solução melhor do que a melhor solução encontrada até o momento ou se uma solução ótima de P_m for encontrada. Assim, o subproblema P_m pode ser considerado resolvido e não precisa ser examinado em mais detalhes através de uma nova divisão.

Para o caso do problema de maximização $z = \max f(x)$, a melhor solução encontrada até o momento durante a busca fornece o limite inferior. A solução do subproblema relaxado oferece uma solução cujo valor de $f(x)$ é melhor ou igual ao da solução ótima do problema original (limite superior). Na Figura 3.4, apresenta-se um exemplo de como é realizada a poda por limitantes, observe que não é possível encontrar soluções melhores em P_1 , logo pode-se descartar este ramo da árvore de busca.

Para o caso da poda por otimalidade (Figura 3.5), é feita a decomposição de P em dois nós P_1 e P_2 , com limites superior e inferior. Observa-se que o limite superior e inferior são iguais em P_1 , logo não há razões para explorar o nó P_1 .

Figura 3.4: Note: $\bar{z} = \max \{20, 26\} = 26$ e $\underline{z} = \max \{18, 21\} = 21$. Não é possível encontrar soluções melhores em P_1 , logo pode-se descartar este ramo da árvore.

Figura 3.5: Note: $\bar{z} = \max \{20, 25\} = 25$ e $\underline{z} = \max \{20, 15\} = 20$. O limite superior e inferior são iguais em P_1 , logo não há razões para explorar o nó P_1 .

No caso do problema ser infactível, é feita a decomposição de P em dois nós P_1 e P_2 , com limites superior e inferior diferentes (veja Figura 3.6). Aqui não se pode tirar nenhuma conclusão sobre os limitantes, logo ambos os nós precisam ser explorados.

Portanto, considerando a relaxação P_m de P , existem três situações que permitem podar um nó da árvore de busca:

1. Poda por limitante: O limitante superior de P é pior ou igual ao valor da melhor solução viável até o momento. Nesse caso, não há possibilidade de encontrar uma solução melhor do que a atual e o subproblema pode ser descartado da busca.
2. Poda por otimalidade: A solução ótima de P_m é solução viável inteira de P e, portanto, é solução ótima de P .
3. Infactibilidade: P_m não possui solução factível. Nesse caso, P também não possuirá solução factível e pode ser descartado da busca.

Figura 3.6: Note: $\bar{z} = \max \{24, 37\} = 37$ e $\underline{z} = \max \{13, -\infty\} = 13$. Aqui não se pode tirar nenhuma conclusão sobre os limitantes, logo ambos os nós precisam ser explorados.

O processo de divisão ocorre quando, através dos critérios apresentados anteriormente, não for possível cortar o ramo correspondente ao problema em questão. Assim, é necessário utilizar a idéia da divisão e conquista para resolver o problema.

Assim, o método *branch and bound* é uma alternativa útil na resolução de problemas da forma (3.23), pois o objetivo desta estratégia é minimizar o número de nós explorados na busca da melhor solução inteira e, com isso, diminuir o tempo do processamento computacional.

Capítulo 4

Modelos para análise de populações de plantas daninhas

Devido à necessidade de gerar mecanismos de controle, foram desenvolvidos modelos matemáticos que descrevem a dinâmica populacional da planta daninha, os quais possibilitam entender como esta se relaciona com o meio (por exemplo, clima e solo), de que forma compete com a plantação (Park et al. 2003), qual o seu comportamento quando se tenta controlar a infestação, qual a probabilidade e a taxa de evolução da resistência a herbicidas (Maxwell et al. 1990, Diggle et al. 2003) e quais as formas de atacar o problema de infestação.

Muitas vezes deve-se decidir se é necessário, ou não, controlar a infestação (Cacho et al. 2004), pois o processo de controle gera gastos que podem ser evitados caso a infestação não prejudique a plantação. De forma geral, nem sempre é prejudicial a presença de alguma planta daninha na lavoura e, além disso, deve ficar claro que o objetivo em geral não é erradicar totalmente a daninha, e, sim, garantir uma relação favorável entre o equilíbrio da lavoura com a planta daninha e os custos de controle.

Neste capítulo são descritos os modelos utilizados na análise de populações de plantas daninhas, o modelo populacional de plantas daninhas utilizado para definir a densidade do banco de sementes, o modelo de dose-resposta utilizado para definir a ação da dose no controle da infestação e o modelo de pressão seletiva utilizado para descrever a dinâmica da resistência.

4.1 Modelo populacional

As plantas daninhas competem vigorosamente com a cultura, resultando em grande perda de rendimento, devido ao seu alto poder de reprodução, pois geram um grande número de sementes que afetam diretamente o tamanho do banco de sementes no solo.

Jones e Cacho (2000) apresentam um modelo dinâmico populacional de plantas daninhas considerando três coortes na população, onde cada coorte está relacionado com diferentes porcentagem de sementes germinadas que emergiram e a função de dose-resposta foi estimada utilizando um modelo logístico.

Para descrever o ciclo de vida das plantas daninhas, toma-se como variáveis do modelo as densidades do banco de sementes e plantas jovens denotadas como x_t e y_t , respectivamente. Com isso, a dinâmica populacional da planta daninha é descrita por (Jones e Cacho 2000):

$$y_t = x_t^g \delta x_t, \quad x_{t_0} = x_0 \quad (4.1)$$

$$y_t^a = (1 - \rho(u_t)) y_t \quad (4.2)$$

$$x_t^r = \exp[\gamma \ln y_t^a / (\mu + \varepsilon \ln y_t^a)] \quad (4.3)$$

$$x_t^n = \kappa x_t^r - \eta + \xi \quad (4.4)$$

$$x_{t+1} = x_t^n + (1 - \Psi)(1 - \delta)x_t \quad (4.5)$$

com variáveis e parâmetros definidos na Tabela 4.1. A propagação x_t^r foi restrita para zero quando $y_t^a < 0,5$ plantas por m^2 , pois (4.3) tende ao infinito quando y_t^a se aproxima de zero.

A estrutura do modelo (4.1)-(4.5) é baseada no ciclo de vida das plantas daninhas, sem considerar a competição entre a planta daninha e a cultura, em que a população inicial x_0 é o banco de sementes viável e com sementes não geminadas presentes em um campo de produção agrícola: (4.1) descreve as plantas emergentes provenientes do banco de sementes, (4.2) descreve a sobrevivência das plantas jovens emergentes determinada pela estratégia de manejo das plantas daninhas empregada durante cada iteração, (4.3) descreve a densidade de sementes resultantes da reprodução das plantas daninhas adultas, (4.4) descreve a proporção de sementes novas. Finalmente, (4.5) descreve as novas sementes produzidas que são adicionadas ao banco de sementes no final do ciclo de vida.

Tabela 4.1: Definição dos parâmetros e variáveis do modelo populacional de plantas daninhas

x_t	Densidade do banco de sementes no início do ano t (m^{-2})
y_t	Densidade de plantas jovens no ano t (m^{-2})
y_t^a	Densidade de plantas emergentes que chegam à fase adulta (m^{-2})
x_t^r	Densidade de sementes resultantes da reprodução da planta daninha (m^{-2})
x_t^n	Novas sementes adicionadas ao banco de sementes no ano t (m^{-2})
x_t^g	Porcentagem de sementes germinadas que emergiram (m^{-2})
δ	Taxa de germinação anual das sementes da planta daninha
u_t	Dose de herbicida aplicada no ano t (litro ha^{-1})
ρ	Taxa de mortalidade de plantas daninhas induzida pelo herbicida no ano t
ϕ, μ, ε	Coeficientes de regressão (Medd et al. 1995)
κ	Taxa de sobrevivência de novas sementes
η	Retirada de sementes na colheita (m^{-2})
ξ	Taxa de importação de sementes (vento, pássaros, etc)
Ψ	Taxa de mortalidade de sementes dormentes

4.2 Modelo de dose-resposta

Diversos autores têm utilizado e recomendado modelo de dose-resposta para determinar a suscetibilidade ou resistência de plantas daninhas aos herbicidas aplicados em diversas culturas (Streibig e Kudsk (1993), Lacerda e Filho (2004), Kim et al. (2006), Haage et al. (2007), Smith et al. (2008) and Merotto et al. (2009)). Esses autores sugerem o uso do modelo log-logístico, o qual apresenta inúmeras vantagens em relação a outros métodos de análise. A principal vantagem é a presença do parâmetro GR_{50} (*growth reduction*), o qual facilita a comparação do nível de resistência dos biótipos testados.

Seefeldt et al. (1995) sugeriram o modelo log-logístico como método mais adequado para análise da curva dose-resposta devido à presença do parâmetro GR_{50} na equação. O parâmetro GR_{50} , representa a dose do herbicida necessária para reduzir 50% do crescimento de uma população de plantas, normalmente calculada a partir do acúmulo de biomassa ou porcentagem de controle. Este parâmetro permite comparar o grau diferencial de suscetibilidade a herbicidas entre espécies resistentes e suscetíveis.

Na maioria das situações, são feitas comparações da atividade do herbicida, por exemplo, a ação seletiva do herbicida entre a cultura produzida e as plantas daninhas. A ação de diferentes herbicidas gerará funções diferentes de dose-resposta dependendo do princípio ativo do herbicida, genótipo da planta e/ou condições ambientais.

O modelo de dose-resposta usado para quantificar a sensibilidade da planta daninha, denotada por ρ , ao herbicida u é (Seefeldt et al. 1995):

$$\rho(u) = c + \frac{d - c}{1 + \exp[b(\ln(u) - \ln(GR_{50}))]}, \quad (4.6)$$

em que c é o limite inferior da curva que corresponde às respostas médias com doses altas de herbicidas, d é o limite superior da curva que corresponde à resposta média da planta testemunha, b é a declividade da curva em torno de GR_{50} e GR_{50} já definido.

Estes parâmetros sofrem alterações entre as diversas variedades da mesma planta por pequenas diferenças fisiológicas da planta. Dentre as principais diferenças fisiológicas que alteram a resposta da planta, está a resistência da planta à dose do herbicida aplicado.

4.3 Modelo de pressão seletiva

A pressão seletiva é a união de fatores que favorecem uma determinada população em detrimento de outra. O herbicida é uma forma de pressão seletiva, pois o biótipo resistente é favorecido e o biótipo suscetível é atacado. Outros fatores agem em conjunto ou independentemente do herbicida. Um exemplo de fator de pressão seletiva agindo em conjunto com o herbicida é a chuva, a qual diminui a concentração de herbicida na superfície do solo, favorecendo indivíduos já fixados, enquanto aqueles ainda em desenvolvimento são atacados pelo excesso de água e pelo herbicida simultaneamente. Como exemplo de fator que age independentemente do herbicida é a luminosidade, as plantas daninhas são perigosas para certas culturas apenas no início, pois neste momento competem por luminosidade com a cultura, após o crescimento o próprio tamanho da cultura gera um sombreamento do solo que torna o desenvolvimento da planta daninha difícil. A existência de áreas com acesso à luminosidade tornam as plantas daquela área mais favoráveis que as de outras áreas. Algo semelhante acontece com a fertilidade do solo.

Se há ausência de seleção, então não existe a evolução. As ocorrências de mutações acontecem de forma aleatória, mas o que as tornam sucessos evolucionários é a pressão seletiva sobre os indivíduos, eliminando aqueles que não possuam características favoráveis que os façam superar o limiar imposto. Este limiar pode ser qualquer fator

de degradação, como condições naturais ou artificiais, mudanças climáticas bruscas, toxidade ambiental, falta de nutrientes, doenças, entre outros (Britton 2003).

Considerando apenas as influências da pressão seletiva gerada pelo herbicida em condições climáticas e de solo ideais, pode-se definir as influências desta pressão seletiva sobre a distribuição genética de uma determinada população. São estudados apenas os casos de pressão seletiva ligados diretamente à evolução da resistência ao herbicida. Para isso, precisa-se definir as funções de frequência genética dos alelos dominantes e recessivos em face a pressão seletiva.

As funções de frequência genética dos alelos dominantes e recessivos em face a pressão seletiva são descritas seguindo os princípios descobertos por Fisher, Haldane e Wright (Britton 2003).

Seja a frequência genética no final da fase gamética p_t e q_t da geração t . Seja a razão $w_{AA} : w_{Aa} : w_{aa}$ definida como a probabilidade de sobrevivência da fase zigótica para a fase reprodutiva de várias razões genéticas. De acordo com Britton (2003), w_{aa} é normalmente igual a 1 e w_{AA} e w_{Aa} são os valores da seleção de genótipo **AA** e **Aa**, respectivamente. Com p_t^2 , $2p_tq_t$ e q_t^2 sendo a frequência genética. No início da fase zigótica a razão de genótipos **AA**, **Aa** e **aa** na fase reprodutiva é modificada para

$$w_{AA}p_t^2 : 2w_{Aa}p_tq_t : w_{aa}q_t^2 \quad (4.7)$$

e a frequência dos alelos **A** e **a** são agora as razões

$$w_{AA}p_t^2 + w_{Aa}p_tq_t : w_{Aa}p_tq_t + w_{aa}q_t^2. \quad (4.8)$$

Finalmente, a mudança da frequência do alelo **A** no final da fase gamética pode ser descrita por

$$p_{t+1} = \frac{w_{AA}p_t^2 + w_{Aa}p_tq_t}{w_{AA}p_t^2 + 2w_{Aa}p_tq_t + w_{aa}q_t^2}, \quad (4.9)$$

que pode ser reescrita na forma recursiva como

$$p_{t+1} = p_t + \sigma(p_t) \quad (4.10)$$

onde

$$\sigma(p_t) = p_tq_t \frac{(w_{AA} - w_{Aa})p_t + (w_{Aa} - w_{aa})q_t}{w_{AA}p_t^2 + 2w_{Aa}p_tq_t + w_{aa}q_t^2}$$

Tabela 4.2: Definição dos parâmetros e variáveis relacionados a frequência dos alelos

p_0	Frequência inicial do alelo dominante
p_t	Frequência do alelo dominante no ano t
q_t	Frequência do alelo recessivo ($1 - p_t$) no ano t
w_{AA}	Vantagem evolutiva do homozigoto resistente
w_{Aa}	Vantagem evolutiva do heterozigoto resistente/suscetível
w_{aa}	Vantagem evolutiva do homozigoto suscetível

com parâmetros definidos na Tabela 4.2. Essa é a equação matemática de Fisher-Haldane-Wright (FHW) que descreve a mudança da frequência genética no ano $t + 1$. Esta equação prevê o comportamento esperado de uma população que se reproduz sexuadamente com gerações distintas, é responsável pela evolução genética da resistência e dependendo da característica do biótipo da planta estudada, o alelo pode ter resistência dominante nuclear ou recessiva nuclear (Britton 2003).

A função $\sigma(p_t)$ representa o acréscimo esperado entre as gerações de indivíduos, ou seja, a evolução por pressão seletiva, definida pela diferença entre as vantagens evolutivas w_{AA} , w_{Aa} e w_{aa} . A razão entre as vantagens evolutivas obedece à seguinte relação:

$$(w_{AA}, w_{Aa}, w_{aa}) = \begin{cases} (1 + s, 1 + s, 1) & \text{se dominante} \\ (1 + s, 1, 1) & \text{se recessivo} \end{cases} \quad (4.11)$$

onde s é o coeficiente de pressão seletiva.

No caso do alelo ter resistência dominante nuclear, toma-se $(w_{AA}, w_{Aa}, w_{aa}) = (1 + s, 1 + s, 1)$. A equação FHW (4.10) torna-se:

$$p_{t+1} = p_t + sp_t q_t \frac{q_t}{1 + s(p_t^2 + 2p_t q_t)}. \quad (4.12)$$

O parâmetro s mede a resistência de seleção para o alelo p_t , sendo que $10^{-6} \leq s \leq 5 \cdot 10^{-1}$ (Britton 2003). Observa-se que $p = 0$ é um estado instável e $p = 1$ estável. O domínio do alelo dominante se inicia rapidamente, porém não se estabiliza em dominância completa na população.

No caso do alelo ter resistência recessiva nuclear, toma-se $(w_{AA}, w_{Aa}, w_{aa}) = (1 +$

$s, 1, 1)$. A equação FHW (4.10) torna-se:

$$p_{t+1} = p_t + sp_tq_t \frac{p_t}{1 - sp_t^2}. \quad (4.13)$$

Novamente, observa-se que $p = 0$ é um estado instável e $p = 1$ estável. Contudo, para o alelo recessivo existe um início lento, mas pode atingir domínio total da espécie.

As Figuras 4.1 e 4.2 apresentam soluções numéricas para as equações do alelo dominante (4.12) e recessivo (4.13) tomando $s = 0.002$ para fraca seleção e $s = 0.2$ para forte seleção. Observa-se que a principal diferença de comportamento encontrada mudando a pressão seletiva é a escala de tempo. Nota-se que o alelo dominante mesmo iniciando em valores ínfimos atinge rapidamente sucesso evolucionário, mas dificilmente é capaz de atingir dominância homozigótica na população. Enquanto o alelo recessivo necessita de um certo valor inicial para atingir o mesmo sucesso, porém, é capaz de atingir dominância homozigótica na população (Britton 2003).

Figura 4.1: Soluções numéricas para forte seleção para os alelos dominante e recessivo. Toma-se $s = 0.2$ para forte seleção.

Figura 4.2: Soluções numéricas para fraca seleção para os alelos dominante e recessivo. Toma-se $s = 0.002$ para fraca seleção.

Capítulo 5

Modelo populacional de plantas daninhas considerando a dinâmica da resistência

Para descrever o ciclo de vida da planta daninha usa-se um modelo dinâmico populacional baseado em Jones e Cacho (2000), o qual utiliza como forma de controle a aplicação de um único herbicida. Contudo, esta técnica de controle gera um alto custo no processo de produção de uma lavoura e apresenta algumas particularidades que devem ser observadas, como a utilização sem planejamento do herbicida, o que pode gerar resistência da planta, e os efeitos ambientais que o uso excessivo do herbicida causa.

Neste capítulo é proposto um modelo dinâmico populacional de plantas daninhas considerando a dinâmica da evolução da resistência a herbicidas. São utilizados conceitos de Mendel e do equilíbrio de Hardy-Weinberg para a modelagem do problema.

5.1 Modelo de densidade do banco de sementes

Considera-se o modelo dinâmico populacional de plantas daninhas (4.1)-(4.5) para as densidades do banco de sementes e de plantas jovens denotadas como x_t e y_t , respectivamente, descrito na Seção 4.1.

As equações (4.1)-(4.5) podem ser sintetizadas pela substituição para frente (y_t de

(4.1) em (4.2), então y_t^a em (4.3) e assim por diante), chegando na seguinte equação

$$x_{t+1} = g(x_t, u_t) \quad (5.1)$$

com

$$g(x_t, u_t) = (1 - \Psi)(1 - \delta)x_t + \kappa \exp \left(\frac{\gamma \ln((1 - \rho(u_t)) x^g \delta x_t)}{\mu + \varepsilon \ln((1 - \rho(u_t)) x^g \delta x_t)} \right) - \eta + \xi$$

onde x_{t+1} descreve a densidade do banco de sementes no ciclo de vida $t + 1$.

5.2 Modelo de dose-resposta

Para a compreensão da eficácia do herbicida em relação ao controle da planta daninha faz-se uso da função de dose-resposta descrita no Seção 4.2.

A relação entre a dose de herbicida e a resposta da planta é de fundamental importância para a compreensão da eficácia do herbicida e seu modo de ação. A função de dose-resposta tem como objetivo quantificar a sensibilidade da planta ao herbicida. Mudanças nessa sensibilidade alteram essa função. Plantas resistentes têm uma menor sensibilidade ao herbicida, portanto, sua função dose-resposta difere da função dose-resposta da planta suscetível da mesma espécie. Essa diferença na função dose-resposta é usada para detectar casos de resistência a herbicidas (Seefeldt et al. 1995, Moss 2010).

A comprovação científica dos níveis de resistência de espécies de plantas daninhas aos herbicidas pode ser feita através da construção de curva dose-resposta a partir de ensaios conduzidos em casa de vegetação. Este procedimento permite a interpretação dos resultados de forma objetiva e possibilita a comparação adequada do comportamento de uma espécie frente a um herbicida aplicado em diversas doses.

Com base em experimentos conduzidos em casa de vegetação, formulou-se um modelo para a dinâmica da resistência baseado em casos de detecção de biótipos resistentes para um herbicida via dose-resposta. As seguintes suposições são consideradas: (1) os parâmetros c em ambas as curvas de dose-resposta dos biótipos resistente (R) e suscetível (S) são próximos, (2) a inclinação da curva b é paralela para diferentes GR_{50} sob o mesmo mecanismo de resistência (Tind et al. 2009, Christoffoleti 2002).

A função de dose-resposta adotada é

$$\rho(u_t) = c_S + \frac{d_S - c_S}{1 + \exp[b_R(\ln(u_t) - \ln(GR_{50t}))]} \quad (5.2)$$

onde c_S indica a mortalidade mínima esperada e é usado o parâmetro da curva de dose-resposta do biótipo suscetível, d_S indica a mortalidade máxima esperada (Christoffoleti 2008) e é usado o parâmetro da curva de dose-resposta do biótipo suscetível para refletir a mortalidade máxima, b_R é tomado da curva de dose-resposta do biótipo resistente em torno do parâmetro GR_{50t} que é modelado como uma função de biótipos R e S como segue:

$$GR_{50t}(R_t) = R_t GR_{50R} + (1 - R_t) GR_{50S} \quad (5.3)$$

onde GR_{50R} e GR_{50S} corresponde à dose necessária para reduzir 50% da resposta da planta daninha resistente e suscetível, respectivamente, e R_t descreve o índice de resistência a herbicidas que a população de plantas daninhas adquirem no tempo t , a qual é obtida como uma função de frequência de alelos dada pela equação de Fisher-Haldane-Wright (FHW) que descreve a genética populacional (Britton 2003).

5.3 Modelo dinâmico da resistência de plantas daninhas

Para a maioria das plantas daninhas, o comportamento previsto pela equação FHW (Britton 2003) se mostra eficiente para representar espécies que possuem reprodução rápida, sexuada através do pólen gerando sementes, com gerações bem distintas uma das outras, com populações isoladas e de grande interação dentro da mesma população. Portanto, a equação FHW é usada para descrever a evolução genética da resistência.

5.3.1 Pressão seletiva para a frequência dos alelos dominante e recessivo

A função de frequência genética dos alelos dominante e recessivo em face a pressão seletiva, descrita na Seção 4.3, é reformulada para adicionar a dinâmica do banco de sementes na genética populacional.

Em (4.10) não é levada em consideração a dinâmica do banco de sementes na genética

populacional. Representa-se o banco de sementes da planta daninha como material genético que participa do processo de seleção. Nesse processo, as sementes dormentes não sofrem pressão de seleção, mas as plantas adultas participam do processo. Então, em (4.10), os fatores α_t e χ são adicionados para representar, respectivamente, a dinâmica do banco de sementes e o processo de autofecundação, quando a fecundação se dá entre gametas produzidos pelo mesmo indivíduo, e o processo de reprodução entre indivíduos diferentes. Portanto, (4.10) torna-se:

$$p_{t+1} = p_t + \alpha_t(x_t, x_t^n)(x_t, u_t)\chi\sigma(p_t), \quad (5.4)$$

em que $\alpha_t < 1$, $\chi > 1$, e

$$\alpha_t = \frac{x_t^n}{x_t}.$$

Com x_t^n e x_t dados por (4.4) e (4.5), respectivamente.

E ainda, reescrevendo (5.4), tem-se

$$p_{t+1} = v(x_t, p_t, u_t), \quad (5.5)$$

onde

$$v(x_t, p_t, u_t) = p_t + \alpha_t(x_t, x_t^n)\chi\sigma(p_t).$$

A razão entre as vantagens evolutivas em relação a pressão seletiva em (5.4) é dada por:

$$\begin{bmatrix} w_{AA} & w_{Aa} & w_{aa} \end{bmatrix}^T = Es + \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T, \quad (5.6)$$

onde s é o coeficiente de pressão seletiva para o frequência dos alelos dominante e recessivo e E é um vetor que define os valores das vantagens evolutivas dos genótipos **AA** e **Aa** dado por:

$$E = \begin{cases} (1 \ 1 \ 0)^T, & \text{se dominante,} \\ (1 \ 0 \ 0)^T, & \text{se recessivo.} \end{cases} \quad (5.7)$$

5.3.2 Genótipo resistente

A população inicial de plantas daninhas é um banco de sementes viável, com sementes não germinadas presente no campo agrícola. Neste banco de sementes, existem indivíduos suscetíveis (S) e resistentes (R) determinados pela frequência inicial do alelo

resistente.

O percentual do genótipo resistente R_t pode ser introduzido pelo conhecimento do fenótipo da planta. A proporção de novas sementes de cada genótipo (**AA**, **Aa**, **aa**) é determinada pela genética populacional.

São estudados os casos de alelos dominante e recessivo. No caso do alelo recessivo, o homozigoto **AA** (p_t^2) é responsável pela resistência. No caso do alelo dominante, o homozigoto **AA** (p_t^2) e o heterozigoto **Aa** ($2p_t(1 - p_t)$) são responsáveis pela resistência.

O modelo para o genótipo resistente segue o equilíbrio de Hardy-Weinberg e é formulado como:

$$R_t = \begin{cases} p_t^2 + 2p_t(1 - p_t), & \text{se dominante,} \\ p_t^2 & , \text{se recessivo.} \end{cases} \quad (5.8)$$

O modelo dinâmico da resistência com pressão de seleção considerando o banco de semente é dado por (5.4)-(5.8).

5.4 Modelo dinâmico para múltipla resistência

A maioria dos problemas de resistência a herbicidas, que envolve as plantas daninhas, apresentam múltipla resistência aos herbicidas. O fenômeno de múltipla resistência a herbicidas pode ser visto como a expressão de diferentes modos de ação do herbicida.

Segundo Diggle et al. (2003), a resistência múltipla é uma resistência completamente independente uma da outra na mesma espécie. As plantas daninhas podem apresentar resistência a dois mecanismos distintos de resistência e exibir resistência a diferentes classes de herbicidas (Powles e Preston 2011). As plantas daninhas que apresentam múltipla resistência a herbicidas tem uma rápida evolução na dinâmica da resistência, onde cada herbicida possui uma pressão seletiva diferente.

Maxwell et al. (1990), Diggle et al. (2003) e Gressel e Segel (1978) consideram a segregação da frequência dos alelos para usar diferentes modos de ação do herbicida no controle da infestação de plantas daninhas. Neste trabalho, não é considerada a segregação da frequência dos alelos no modelo populacional de plantas daninhas.

A dinâmica populacional de plantas daninhas e da resistência são, então, descritas por (5.1)-(5.3) e (5.4)-(5.8). Os parâmetros de dose-resposta são definidos de acordo

com o herbicida selecionado.

Capítulo 6

Problema de otimização do manejo de plantas daninhas

Muitos fatores podem influenciar e determinar o rendimento final de uma colheita, por exemplo, a forma como é feito o plantio (direta ou convencional), o clima da região onde se encontra a lavoura, a quantidade de chuvas na temporada, pestes, doenças, infestações por plantas daninhas, a maneira que será feita a colheita, entre outros.

Neste capítulo é definido o problema econômico de produção de uma lavoura, apresentada a formulação dos problemas de otimização do manejo de plantas daninhas considerando a aplicação de uma sequência de um único herbicida e a rotação de herbicidas. Com isso, busca-se reduzir o uso de herbicida, maximizar o lucro e retardar a dinâmica da evolução da resistência num período pré-determinado de tempo. Para a resolução numérica do problema de manejo de plantas daninhas, são utilizadas estratégias de programação não linear (NLP) e programação não linear inteira mista (MINLP). E, finalmente, apresentam-se os resultados de simulações numéricas.

6.1 Definindo o problema econômico

O problema econômico expresso pela tomada de decisão é determinado pelo nível de entrada dos fatores de produção, incluindo o controle das plantas daninhas, que maximize o lucro e minimize os impactos ambientais.

A produção da lavoura, denotada por Y , que é uma função da densidade de plantas

daninhas (x_t), da resistência da planta daninha (p_t), do controle da infestação (u_t) e outras variáveis (z) para incluir os fatores fixos de produção incluindo fatores ambientais, é representada da seguinte forma:

$$Y = h(x_t, p_t, u_t, z_t). \quad (6.1)$$

Esta função pode ser separada nas equações de rendimento de produção numa lavoura livre de plantas daninhas (Y_0), de perda de rendimento associada com a densidade, a frequência de alelos e o controle da planta daninha (Y_L) e a perda de rendimento associado aos efeitos tóxicos do herbicida (Y_p).

A produção da lavoura é, então, obtida como

$$Y = Y_0(1 - Y_L)(1 - Y_p). \quad (6.2)$$

Cousens (1985b) argumentou que a função que melhor descreve perda de rendimento como uma função de densidade de planta daninha é um hiperbolóide da seguinte forma:

$$Y_L = \frac{aD}{1 + \frac{a}{m}D} \quad (6.3)$$

onde a é o parâmetro que representa a perda de rendimento causada pelas planta daninha por m^2 , m é o parâmetro que estima a perda de rendimento máxima quando a densidade de plantas daninhas tende ao infinito (altas densidades de plantas daninhas) e D é uma função da densidade inicial da planta daninha e da proporção de plantas daninhas mortas pela aplicação do herbicida $\rho(u_t, R_t)$:

$$D = x_t(1 - \rho(u_t, R_t)), \quad 0 \leq \rho \leq 1$$

com $\rho(u_t, R_t)$ dado por (5.2).

A perda de rendimento associado com os efeitos tóxicos do herbicida foi estimado como (Pandey e Medd 1990)

$$Y_p = \varphi u_t$$

onde φ é um parâmetro de ajuste.

Então, a função lucro (π) é definida como

$$\pi(x_t, p_t, u_t) = P_y Y(x_t, p_t, u_t) - P_u u_t - P_R R_t - C \quad (6.4)$$

onde P_y é o preço de cada unidade do produto cultivado (R\$ tonelada⁻¹), P_u é o custo por cada unidade de controle (R\$ litro⁻¹), P_R é um fator de ajuste do efeito da resistência no lucro, C é a constante dos custos de aplicação do controle mais os custos de produção. A função lucro (6.4), com R_t dado por (5.8), é determinada não apenas pelo nível da variável de controle, mas também pela densidade inicial de plantas daninhas x_t e da frequência do alelo p_t . Portanto, o rendimento total para qualquer variação de u_t será especificado pelo valor inicial de x_t e p_t .

Portanto, o modelo econômico, dado por (6.4), maximiza os lucro e minimiza a resistência da planta daninha, para um nível inicial de infestação.

6.2 Modelo de otimização com aplicação da sequência de um único herbicida

O problema de controle de planta daninha é tratado como um problema de manejo de recursos (Kennedy 1986) e, para isso, necessita-se desenvolver um modelo dinâmico.

Para o estudo com problemas dinâmicos precisa-se definir de que forma a variável de estado irá evoluir com o tempo. Neste caso, toma-se como variável de estado o banco de sementes da planta daninha x_t e a frequência do alelo p_t , e variável de controle a função de dose-resposta $\rho(u_t, R_t)$. Sendo assim, é preciso definir uma equação que descreva a variação deste banco de sementes com o passar do tempo, definida como equação dinâmica. Para este caso, tratam-se as sementes da planta como um recurso renovável e o banco de sementes como o estoque deste recurso. Nos problemas dinâmicos esse estoque pode alterar, com o passar do tempo, a solução ótima do problema.

Com o tempo, o banco de sementes pode sofrer alterações no seu tamanho devido a diversos fatores, como a ação do controle aplicado, que acarreta num decréscimo do banco de sementes e, ao mesmo tempo, em um aumento no número de sementes resistentes, ou a reprodução da planta, que faz com que o banco de sementes cresça no ano seguinte. Essas alterações podem ser descritas em relação ao banco de sementes e a

frequência genética, dado por (5.1) e (5.5), respectivamente. Porém, considerando que GR_{50} é dado por (5.3) em função da resistência, dado por (5.8), para o caso do alelo dominante, obtêm-se as seguintes equações dinâmicas para o problema de manejo das plantas daninhas sob pressão seletiva:

$$g(x_t, p_t, u_t) = x_{t+1} \quad (6.5)$$

$$v(x_t, p_t, u_t) = p_{t+1} \quad (6.6)$$

com

$$\begin{aligned} g(x_t, p_t, u_t) &= (1 - \Psi)(1 - \delta)x_t + \kappa \exp^{\mu + \varepsilon \ln \left(\left(1 - \left(c + \frac{d-c}{1 + \exp[b(\ln(u_t) - \ln(GR_{50t}(R_t)))]} \right) \right)^{x_t^g \delta x_t} \right)} - \eta + \xi \\ v(x_t, p_t, u_t) &= p_t + \chi s p_t q_t \frac{q_t}{1 + s(p_t^2 + 2p_t q_t)} \frac{x_t^n}{x_t} \end{aligned}$$

com parâmetros definidos anteriormente.

No modelo dinâmico (6.5)-(6.6), a otimização do processo no período t influencia diretamente a otimização no período $t + 1$. Ou seja, quando se aplica uma determinada quantidade de herbicidas no primeiro período, esta quantidade irá afetar diretamente a solução ótima nos períodos seguintes.

O controle de plantas daninhas é tratado como um problema de manejo com retardo da resistência. Dessa forma, pretende-se determinar de que maneira, e em qual intensidade, o banco de sementes x_t e a frequência do alelo resistente p_t são alterados com a aplicação do herbicida u_t , visando, assim, reduzir o uso de herbicida e, consequentemente, maximizar o lucro num período pré-determinado de tempo.

O modelo de otimização que considera a aplicação da sequência de um único herbicida pode ser modelado como um problema de NLP. Então, o problema de NLP é formulado como:

$$\max_{u_t \in \Omega(t)} \sum_{t=0}^T \beta^t \pi(x_t, p_t, u_t) \quad (6.7)$$

sujeito a

$$x_{t+1} = g(x_t, p_t, u_t), \quad x(0) = x_0 \quad (6.8)$$

$$p_{t+1} = v(x_t, p_t, u_t), \quad p(0) = p_0 \quad (6.9)$$

$$\frac{10^{-6}}{s} \leq u(t) \leq \min \left\{ u_{max}, \frac{0,5}{s} \right\} \quad (6.10)$$

onde π é uma função suave dada por (6.4), g é a taxa de mudança no banco de sementes a partir da aplicação do herbicida dada por (6.5), v é a taxa de mudança na frequência dos alelos decorrente da pressão de seleção exercida pelo herbicida dada por (6.6), $\beta^t \in (0, 1)$ é o fator de desconto (Kennedy 1986), u_{max} é a dose máxima de herbicida permitida em campo pela legislação e $\Omega(t)$ é conjunto de valores admissíveis para u_t . A mudança das variáveis de estado de um período para o próximo estão representadas pelas equações do movimento (6.8) e (6.9).

A teoria de controle ótimo, descrita no Capítulo 3, pode ser usada para determinar a taxa anual de herbicida que maximize o funcional objetivo (6.7). Um componente importante desse tipo de problema são as variáveis de coestado, denotadas por μ_t^1 e μ_t^2 , semelhantes ao multiplicador de Lagrange. A forma como a variável de coestado é inserida no problema de controle ótimo é através da função Hamiltoniana. Para o problema de manejo de plantas daninhas, a função Hamiltoniana é dada por (Kennedy 1986):

$$H(\mu_{t+1}^1, \mu_{t+1}^2, x_t, p_t, u_t) = \pi(x_t, p_t, u_t) + \mu_{t+1}^1 g(x_t, p_t, u_t) + \mu_{t+1}^2 v(x_t, p_t, u_t). \quad (6.11)$$

A função Hamiltoniana H é o lucro obtido a partir de um determinado nível das variáveis de estado x_t e p_t e controle u_t mais o valor de alguma mudança no estoque da variável de estado, avaliada com as variáveis de coestado μ_{t+1}^1 e μ_{t+1}^2 . Quando g é multiplicada por μ_{t+1}^1 , esse produto é convertido em um valor monetário, e representa a taxa de mudança do valor econômico do banco de sementes correspondente à dose de herbicida aplicada, o mesmo ocorre quando v é multiplicada por μ_{t+1}^2 .

De acordo com Kennedy (1986), as condições de primeira ordem para um problema de manejo de recursos, dadas pelo princípio do máximo de Pontryagin, descrito na Seção

3.2.1, são:

$$\frac{\partial H}{\partial u_t} = P_y \frac{\partial Y}{\partial u_t} - P_u + \mu_{t+1}^1 \frac{\partial g}{\partial u_t} + \mu_{t+1}^2 \frac{\partial v}{\partial u_t} = 0 \quad (6.12)$$

$$\mu_{t+1}^1 = -\frac{\partial H}{\partial x_t} = -P_y \frac{\partial Y}{\partial x_t} - \mu_{t+1}^1 \frac{\partial g}{\partial x_t} \quad (6.13)$$

$$x_{t+1} = \frac{\partial H}{\partial \mu_{t+1}^1} = g(x_t, p_t, u_t) \quad (6.14)$$

$$\mu_{t+1}^2 = -\frac{\partial H}{\partial p_t} = -P_y \frac{\partial Y}{\partial p_t} - \mu_{t+1}^2 \frac{\partial v}{\partial p_t} \quad (6.15)$$

$$p_{t+1} = \frac{\partial H}{\partial \mu_{t+1}^2} = v(x_t, p_t, u_t) \quad (6.16)$$

em que (6.12) fornece a condição necessária para a maximização ou minimização do problema com relação a u_t , (6.13) e (6.15) correspondem às equações de coestado e (6.14) e (6.16) são conhecidas como a redeclaração das equações do movimento em relação ao banco de sementes e a frequência do alelo, respectivamente. O conjunto (6.12)-(6.16) permite determinar o processo ótimo, composto pelas variáveis de estado x_t^* e p_t^* , a variável de controle u_t^* e as variáveis de coestado relacionadas aos estados, μ_t^1 e μ_t^2 , respectivamente. As variáveis de estado dependem do estado inicial do sistema x_0 e p_0 . Nesse problema, onde o tempo final T é dado e os estados finais x_T e p_T são livres, as condições de transversalidade são dadas por $\mu_T^1 = 0$ e $\mu_T^2 = 0$ (Vinter 2000).

Dado que o problema (6.7)-(6.10) possui restrições sobre a variável de controle u_t na forma de limitantes inferiores e superiores, um método de programação não linear para variáveis restritas vai ser adotado. Assim, foi utilizado o método de programação não linear ASA descrito na Seção 3.3.1.

6.3 Modelo de otimização com rotação de herbicidas

Seja $i = 1, \dots, \ell$ o tipo de herbicida aplicado. Usando (5.1) e (5.5), o modelo dinâmico para a densidade de plantas daninhas e a frequência dos alelos para cada herbicida aplicado i são escritos em termos das funções g_i e $v_i \in \mathbb{R}$, respectivamente, como

$$g_i(x_t, p_t^i, u_t^i) = x_{t+1} \quad (6.17)$$

$$v_i(x_t, p_t^i, u_t^i) = p_{t+1}, \quad (6.18)$$

onde g_i representa a mudança da densidade do banco de sementes e v_i representa a mudança da frequência dos alelos.

Observe em (6.17)-(6.18) o caráter híbrido da dinâmica de evolução (Caines et al. 2006, Saikh e Caines 2003). O campo vetorial, que representa a velocidade de evolução da dinâmica, é escolhido a partir de um conjunto $(g_i \ v_i)^T$ onde cada elemento representa a evolução da densidade do banco de sementes e da frequência dos alelos para o herbicida i . Assim, a dinâmica de um campo de evolução $(g_i \ v_i)^T$ é feita pela escolha do tipo de herbicida i a ser aplicado.

Observa-se que para (5.1) e (5.5) o campo vetorial está dependendo de ambas as variáveis de estado, x_t e p_t , em oposição à previsão dos modelos onde o banco de sementes e a frequência dos alelos na população foram considerados separadamente. Aqui, modelam-se ambos, o comportamento do banco de sementes, assim como da frequência dos alelos na população de sementes e, portanto, a iteração entre as equações no sistema modelado são esperadas para acontecer. O modelo proposto captura essas iterações entre a dose-resposta e as funções de resistência analisadas.

O banco de sementes x_t , a frequência dos alelos p_t^i e a dose de herbicida u_t^i são tomadas como variáveis contínuas e as variáveis inteiras são dadas por λ_t^i , $i = 1, \dots, \ell$, as quais determinam qual herbicida será aplicado em cada período de tempo. Então, o problema MINLP é formulado como:

$$\max_{u_t^i, \lambda_t^i} \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{t=0}^T \lambda_t^i \beta^t \pi(x_t, p_t^i, u_t^i) \quad (6.19)$$

sujeito a

$$x_{t+1} = \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_t^i g_i(x_t, p_t^i, u_t^i), \quad x(0) = x_0 \quad (6.20)$$

$$p_{t+1}^i = v_i(x_t, p_t^i, u_t^i), \quad p^i(0) = p_0^i \quad (6.21)$$

$$\sum_{i=1}^{\ell} \lambda_t^i \frac{10^{-6}}{s^i} \leq \sum_{i=1}^{\ell} u_t^i \leq \sum_{i=1}^{\ell} \min \left\{ u_{max}^i, \frac{0.5}{s^i} \right\} \lambda_t^i \quad (6.22)$$

$$\sum_{i=1}^{\ell} \lambda_t^i = 1, \quad (6.23)$$

com $\lambda_t^i \in \{0, 1\}$, $i = 1, \dots, \ell$ e $t = 0, \dots, T$, π uma função suave (6.4), $\beta^t \in (0, 1)$ a taxa de desconto (Kennedy 1986).

Observe que o a variável de decisão λ_t^i é do tipo 0 – 1 enquanto que as variáveis x_t , p_t e u_t^i são contínuas. A (6.23) força a utilizar apenas um herbicida de cada vez durante cada período de tempo. Assim, o índice i , que indica qual o tipo de herbicida está sendo utilizado, pode ser considerado como uma variável de decisão inteira do problema.

A escolha de um tipo específico de herbicida significa que o campo correspondente $(g_i \ v_i)^T$ foi selecionado para a evolução da dinâmica (ver (6.20) e (6.21)).

Portando, é necessário introduzir o subproblema relaxado, em que todas variáveis são contínuas, λ_t^i passa a existir em todo o intervalo $[0, 1]$ com soma em i igual a 1.

Para resolver o problema de MINLP dado por (6.19)-(6.23) propõe-se um algoritmo que combina o método *branch and bound* usual (Wolsey 1998) com o algoritmo *active set algorithm* (ASA) (Hager e Zhang 2006). Este algoritmo é descrito na Seção 6.4.

Para usar o algoritmo proposto, o problema (6.19)-(6.23) é reformulado. Essa reformulação é via uma função de penalidade que contém informações da função custo (6.19) e das restrições (6.22) e (6.23). Portanto, o novo problema é estabelecido como segue:

$$\max_{u_t^i, \lambda_t^i} L_r(x_t, p_t^i, u_t^i, \lambda_t^i) \quad (6.24)$$

sujeito a

$$x_{t+1} = \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_t^i g_i(x_t, p_t^i, u_t^i), \ x(0) = x_0 \quad (6.25)$$

$$p_{t+1}^i = v_i(x_t, p_t^i, u_t^i), \ p^i(0) = p_0^i \quad (6.26)$$

$$\lambda_t^i \in \{0, 1\} \quad (6.27)$$

com

$$\begin{aligned} L_r(x_t, p_t^i, u_t^i, \lambda_t^i) = & \sum_{t=0}^T \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_t^i \beta^t \pi_i(x_t, p_t^i, u_t^i) - \frac{1}{r} \left(1 - \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_t^i \right)^2 \\ & - \frac{1}{2r} \left\{ \min \left[0, \sum_{i=1}^{\ell} \left(\lambda_t^i \frac{10^{-6}}{s^i} - u_t^i \right) \right] \right\}^2 \\ & - \frac{1}{2r} \left\{ \min \left[0, \left(u_t^i - \min \left(u_{max}^i, \frac{0,5}{s^i} \right) \lambda_t^i \right) \right] \right\}^2 \end{aligned}$$

onde $r > 0$ é o parâmetro de penalidade. São, desta forma, construídos problemas suces-

sivos sem restrições, que dependem de um parâmetro positivo r , cujas correspondentes soluções, convergirão para a solução do problema inicial.

6.4 Solução numérica

Um problema MINLP é um problema de programação matemática com variáveis contínuas e discretas e não linearidades no funcional objetivo e nas restrições. Um problema MINLP é uma aproximação natural para formular problemas onde é necessário otimizar simultaneamente variáveis contínuas e discretas.

Neste trabalho, está-se interessado no problema de programação não linear inteira mista (6.24)-(6.27) com variáveis do tipo 0–1. O funcional objetivo (6.24) é uma função não linear suave e geralmente não concava.

Para resolver o problema MINLP, usa-se enumeração implícita ou o método *branch and bound* (Wolsey 1998). Em cada estágio do método *branch and bound* é resolvido um subproblema relaxado. O subproblema relaxado é obtido relaxando a restrição $\lambda_t^i \in \{0, 1\}$ para:

$$0 \leq \lambda_t^i \leq 1. \quad (6.28)$$

A solução do correspondendo subproblema relaxado fornece os limitantes superiores do problema MINLP.

6.4.1 Aplicação do método *branch and bound*

Nesta subseção descreve-se o algoritmo *branch and bound*, apresentado na Seção 3.3.2, usado para resolver o problema de manejo de plantas daninhas da forma (6.24)-(6.27).

No algoritmo *branch and bound*, um nó é explorado em três diferentes situações, (1) se seu subproblema é infactível (o que pode ser checado trivialmente), (2) a solução ótima do subproblema relaxado satisfaz as restrições de integralidade e, portanto, ainda não existe necessidade de ramificar e (3) o valor ótimo de subproblema relaxado, que é um limitante superior do valor ótimo de seu subproblema (não relaxado), é pior ou igual ao valor da solução atual (Nemhauser e Wolsey 1988).

Considere que um nó $S_j, j = 0, \dots, N$ é selecionado para ser resolvido. O primeiro

passo é resolver a relaxação. Seja $S_j^*, j = 0, \dots, N$ o vetor solução do subproblema relaxado. A solução de cada subproblema de NLP fornece um limitante superior para os subproblemas nos nós descendentes da árvore. Esse processo continua até o limitante inferior exceder o limitante superior atual, o subproblema de NLP for infactível, ou a solução fornecer valores inteiros para as variáveis inteiras. A solução inteira (no nó da árvore) fornece os limitantes inferiores da solução ótima inteira.

Se o valor ótimo do subproblema relaxado é pior ou igual ao valor da solução atual, o nó é explorado. Esta aproximação garante somente que a solução ótima não será eliminada se todos os subproblemas relaxados são resolvidos por otimalidade, o que é somente fácil de computar no caso de problemas convexos. Este não é o caso do manejo de plantas daninhas que está sendo considerado. Para contornar este inconveniente, usa-se a estratégia de reinícios (*multistart*). Esta estratégia consiste em executar o algoritmo diversas vezes para resolver o mesmo problema, partindo de pontos distintos, uniformemente distribuídos sobre a região viável do problema, de forma a aumentar a chance de encontrar uma solução global.

No problema de manejo de plantas daninhas, cada nó é selecionado para ser resolvido usando a estratégia de busca em profundidade (King e Launchbury 1995). Quando um nó é ramificado, são criados dois filhos fixando uma variável de decisão binária em 0 (primeiro filho) e 1 (segundo filho). A seleção da variável cujo limitante será fixado segue a regra baseada no nível seguinte, ou seja, no primeiro nível do *branch and bound* o método fixa as variáveis de decisão do primeiro nível.

O Algoritmo 6.1 descreve o código principal usado para resolver o problema de MINLP e o Algoritmo 6.2 mostra a implementação do método *branch and bound* recursivo usado nas simulações numéricas.

Algoritmo 6.1: Pseudo-código para o problema MINLP

- 1 Aloque memória para nó ativo e melhor solução inteira (bestInt);
 - 2 Ajuste os valores dos limitantes para o nó ativo (inicializar a relaxação NLP);
 - 3 Inicialize nó ativo, bestInt = $-\infty$, nível árvore = 0;
 - 4 Execute Branch_and_Bound (nó ativo, nível árvore, bestInt);
 - 5 Salve a melhor solução inteira em um arquivo;
 - 6 Libere a memória.
-

Algoritmo 6.2: Subrotina Branch_and_Bound

Entrada: nó ativo, nível árvore
Saída: bestInt

- 1 Escolha m chute inicial para a estratégia de reinícios;
- 2 Faça nó ativo o nó pai;
- 3 **for** m initial starts **do**
- 4 Execute Subproblema relaxado para resolver o nó ativo;
- 5 **end**
- 6 Salve a melhor solução encontrada como fatherSolution;
- 7 /* Poda por otimalidade */
- 8 **if** fatherSolution é inteiro **then**
- 9 bestInt = fatherSolution;
- 10 **end**
- 11 **end**
- 12 /* Poda por limitantes */
- 13 **if** fatherSolution não é inteiro e fatherSolution $\leq$ bestInt **then**
- 14 bestInt = fatherSolution;
- 15 **end**
- 16 Ramifique o nó ativo e crie dois filhos como
 $son1 = \{\lambda_{tree\ level}^1 = 1, \lambda_{tree\ level}^2 = 0\}$ $son2 = \{\lambda_{tree\ level}^1 = 0, \lambda_{tree\ level}^2 = 1\}$;
- 17 Branch_and_Bound(son1, tree level+1, bestInt);
- 18 Branch_and_Bound(son2, tree level+1, bestInt);
- 19 **retorna** bestInt = melhor solução inteira.

6.4.2 Algoritmo ASA

O algoritmo *branch and bound* apresentado na Seção 6.4.1 foi implementado usando um problema de programação não linear para resolver o nó do subproblema relaxado. Na estratégia de NLP as variáveis de decisão são u_t^i e λ_t^i e as equações de estado tem u_t^i e λ_t^i como entradas. Então, um método de NLP foi usado para obter o controle ótimo u_t^* e λ_t^* .

Como o subproblema relaxado (6.19)-(6.23) e (6.28) apresenta restrições de caixa nas variáveis de controle, então, é utilizado o método ASA descrito na Seção 3.3.1.

No Algoritmo 6.3 descreve-se o subproblema relaxado para resolver o nó ativo usando o método ASA. Ressalta-se que o Algoritmo 6.3 é aplicado para problemas de variáveis restritas com limitantes inferiores e superiores. Para a implementação do subproblema relaxado precisa-se determinar os parâmetros de entrada do problema de manejo de plantas daninhas.

Os parâmetros de entrada do Algoritmo 6.3 são o funcional objetivo (6.24), as

funções de estado (6.25)-(6.26), o Jacobiano de $f = [g_i \ v_i]^T$ e as restrições de caixa (6.28). Os parâmetros de saída do subproblema relaxado são os controles ótimos u_t^* e λ_t^* com seus estado ótimos correspondentes x_t^* e p_t^* .

O Algoritmo 6.3 descreve um procedimento iterativo em que novos pontos u_{k+1} e λ_{k+1} são gerados a partir do ponto atual u_k e λ_k , baseado no método do gradiente, descrito na Seção 3.3.1.

Algoritmo 6.3: Subrotina do subproblema relaxado

Entrada: funcional objetivo L_r , funções de estado g_i e v_i , Jacobiano de $f = [g_i \ v_i]^T$, limitantes superior e inferior $0.005 \leq u_k^i \leq 2.5$ e $0 \leq \lambda_k^i \leq 1$

Saída: Solução ótima

- 1 Inicialize $k = 0$, n (número de anos), nx (número de variáveis de estado), nc (número de variáveis de controle) and ni (número de variáveis inteiras);
 - 2 Escolha a tolerância do erro $\epsilon \in [0, \infty)$;
 - 3 Escolha os valores iniciais $x_0, p_0^i > 0$, $u_0^i \in [0.005, 2.5]$ e $\lambda_0^i \in [0, 1]$;
 - 4 **while** $\|d^k(u_k^i, \lambda_k^i)\| > \epsilon$ **do**
 - 5 Execute o programa ASA disponível em Hager (2009);
 - 6 $u_{k+1}^i = u_k^i$ e $\lambda_{k+1}^i = \lambda_k^i$;
 - 7 $k = k + 1$;
 - 8 **end**
 - 9 Solução ótima = $[u_k^* \ \lambda_k^*]$;
 - 10 **retorna.**
-

Capítulo 7

Resultados de simulação

Neste capítulo é apresentado um estudo de caso da planta daninha *Bidens subalternans*, presente na cultura do milho, com aplicação de controle através da rotação de dois herbicidas. A planta daninha *Bidens subalternans* é uma planta altamente competitiva, com grande adaptação em sistemas agrícolas, o que se deve, em parte, à sua grande produção de sementes, aliada a mecanismos de dormência.

A *Bidens subalternans* apresenta alelo dominante com resistência nuclear (Tranel e Wright 2002). Esta espécie apresenta múltipla resistência a duas classes de herbicidas, a classe de herbicidas inibidores das enzimas acetolactato sintase (ALS) e a classe de herbicidas inibidores da fotossíntese II (FOTO II) (Gazziero et al. 2008, Karam 2011, Heap 2011).

Os valores dos parâmetros populacionais (Jones e Cacho 2000) e econômicos utilizados para a cultura do milho safra 2009/2010 (Broch e Pedroso 2009) são reportados na Tabela 7.1. Os valores dos parâmetros do modelo de dose-resposta usados foram determinados por experimentos em casa de vegetação, realizados pela Embrapa Milho e Sorgo localizada em Sete Lagoas - MG e são apresentados na Tabela 7.2.

A solução ótima da árvore de enumeração foi obtida com o método *branch and bound* e pela solução do problema de NLP com o método ASA (Hager e Zhang 2006).

Tabela 7.1: Parâmetros populacionais e econômicos utilizados nas simulações numéricas

Parâmetros populacionais	Valor
$\delta(\%)$	60
$\psi(\%)$	30
$\eta (m^{-2})$	0
$\xi (m^{-2})$	0
$\kappa(\%)$	30
$x^g(\%)$	80
γ	6.80
μ	2.00
ε	0.67
Parâmetros econômicos	
P_y (R\$ ton^{-1})	283.33
P_u^1 (R\$ $litro^{-1}$)	39.90
P_u^2 (R\$ $litro^{-1}$)	7.44
P_R	1.00
Y_0 (ton ha^{-1})	8.64
C (R\$ ha^{-1})	436.26
u_{max} (litro ha^{-1})	7.00
φ	$1.33 \cdot 10^{-2}$
a	$81.96 \cdot 10^{-2}$
m	$10.44 \cdot 10^{-3}$

Tabela 7.2: Parâmetros do modelo de dose-resposta para nicosulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i = 2$) usados no modelo proposto de resistência de plantas daninhas

Herbicide	b	c	d	GR_{50S}	GR_{50R}
$i = 1$	$-5.99 \cdot 10^{-1}$	$-9.17 \cdot 10^{-4}$	112.73	$1.25 \cdot 10^{-2}$	$21.73 \cdot 10^{-1}$
$i = 2$	-1.66	$-2.25 \cdot 10^{-3}$	101.49	$3.51 \cdot 10^{-1}$	$8.87 \cdot 10^{-1}$

7.1 Equilíbrio da população de plantas daninhas

Considere o modelo dinâmico que envolve a densidade do banco de sementes e a frequência dos alelos que descrevem a resistência aos herbicidas, (5.1) e (5.5), respectivamente. Fixando a dose $u_t = u$ e as condições iniciais, os pontos de equilíbrio para esse sistema são os pontos fixos (x^*, p^*) tal que $(x_t, p_t) = (g(x_t, p_t, u), v(x_t, p_t, u))$. Em outras palavras, os pontos fixos satisfazem

$$x_{t+1} = x_t \quad (7.1)$$

$$p_{t+1}^i = p_t^i. \quad (7.2)$$

Considerando que em (4.3) quando $y_t^a < 0.5$ (plantas por m^2) toma-se $x_t^r = 0$. Então, para $\eta = 0$ e $\xi = 0$ o modelo populacional torna-se o seguinte modelo linear

$$x_{t+1} = (1 - \Psi)(1 - \delta)x_t \quad (7.3)$$

$$p_{t+1}^i = p_t^i. \quad (7.4)$$

Como os autovalores são $\lambda_1 = (1 - \Psi)(1 - \delta) < 1$ e $\lambda_2 = 1$, o modelo linear (7.3)-(7.4) é marginalmente estável. A Tabela 7.3 mostra os pontos de equilíbrios para uma dose fixa de nicosulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i = 2$). Observa-se que o sistema apresenta um ponto de equilíbrio do tipo nó estável P_3 e um do tipo sela instável P_2 para ambos os herbicidas.

O plano de fase do modelo é ilustrado na Figura 7.1. Observe na Figura 7.1(a) que as curvas tendem ao ponto de equilíbrio do tipo nó estável (463, 1) ou sela instável (66, 1) mais rapidamente em caso de forte seleção. Para o caso de fraca seleção, na Figura 7.1(b) observa-se que em baixa pressão seletiva o sistema tende ao equilíbrio marginalmente estável (0, 0), apenas com alta pressão seletiva é que o sistema tende ao equilíbrio do tipo nó estável (312, 1) e do tipo sela instável (111, 1).

Tabela 7.3: Pontos de equilíbrio do modelo dinâmico usando dose fixa de nicosulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i = 2$)

Herbicida	Dose (litros ha^{-1})	P_1	P_2	P_3
$i = 1$	$517.25 \cdot 10^{-4}$	(0, 0)	(66, 1)	(463, 1)
$i = 2$	$188.96 \cdot 10^{-2}$	(0, 0)	(111, 1)	(312, 1)

O plano de fase é útil para definir a estratégia correta do manejo de planta daninha em termos da dose de herbicida que será aplicada. O plano de fase, também, indica que a frequência dos alelos não diminui mesmo se a população de plantas daninhas chegar a valores baixos, ou seja, a frequência dos alelos possui memória em relação a pressão seletiva.

Para mostrar que a escolha da dose afeta a dinâmica, resultados de simulação para 3 diferentes doses foram também testados. Se aplicar a dose de nicosulfuron $u = 918.25 \cdot 10^{-4}$ ($l \ ha^{-1}$), o modelo populacional se torna o modelo linear (7.3)-(7.4), por que a infestação de plantas daninhas é controlada. Se aplicar as doses de nicosulfuron $u = 717.25 \cdot 10^{-4}$ ($l \ ha^{-1}$) ou $u = 517.25 \cdot 10^{-4}$ ($l \ ha^{-1}$), a dinâmica é similar ao último

Figura 7.1: Plano de fase com dose fixa para diferentes condições iniciais (a) Nicosulfuron ($u = 517.25 \cdot 10^{-4}$ litros ha^{-1}) com $s = 0.2$ para forte seleção; (b) Atrazine ($u = 188.96 \cdot 10^{-2}$ litros ha^{-1}) com $s = 0.03$ para fraca seleção

caso apresentado, porém ocorre uma mudança nos pontos de equilíbrios.

7.2 Frequência genética

O modelo de frequência genética utilizado para descrever a resistência da planta daninhas é baseado nos princípios da genética populacional. Para analisar se este modelo está coerente com a teoria, comparou-se o modelo proposto para a resistência com o modelo genético de FHW, o qual foi tomado como base para o modelo formulado.

Então, a frequência genética usando o modelo FHW (4.10) é comparado com o modelo FHW (5.4) usando o banco de sementes (5.1) e dose-resposta (5.2) com (5.3) e (5.8). A Figura 7.2 ilustra a dinâmica da frequência dos alelos para o modelo (4.10) e o modelo (5.4) usando o banco de sementes com aplicação de nicosulfuron (Figura

7.2(a)) e com aplicação do herbicida atrazine (Figura 7.2(b)) com forte seleção para o alelo dominante. A dinâmica da frequência dos alelos são similares em ambos os modelos, o que significa que o modelo populacional de plantas daninhas proposto segue os princípios da genética populacional.

(a)

(b)

Figura 7.2: Frequência dos alelos (—) modelo FHW (5.4) usando o banco de sementes (5.1) e dose-resposta (5.2) com (5.3) e (5.8) e (---) modelo FHW (4.10) para a planta daninha *Bidens subalternans* com alelo dominante. (a) Aplicação de nicosulfuron ($i = 1$) com $s = 0.2$; (b) Aplicação de atrazine ($i = 2$) com $s = 0.2$.

7.3 Estratégia de controle ótimo

Nesta seção são avaliadas a dinâmica do banco de sementes e da evolução da resistência. A média de lucro do problema MINLP com rotação de dois herbicidas em uma aplicação anual é comparado com o problema NLP com a aplicação da sequência de um único herbicida e com o lucro de um sistema convencional de cultivo. O banco de sementes x_t^* e a frequência dos alelos p_t^* obtidos para os problemas MINLP e NLP foram simulados para um período de 10 anos, com condição inicial do banco de sementes de

Figura 7.3: Árvore de enumeração binária do método *branch and bound* com poda por limitante. Os nós da árvore $S_j, j = 0, \dots, 20$ descrevem a solução de cada subproblema relaxado. Para um horizonte de 4 anos de simulação, a estratégia de controle ótimo $(1, 0, 0, 1)$ é encontrada no nó S_{18} com lucro $L_r = 1609.33$.

500 sementes por m^2 e frequência inicial do alelo 0, 1. Esta frequência inicial indica que a população resistente está próxima de ser detectável agronomicamente. Os resultados foram obtidos utilizando a estratégia descrita na Seção 6.4.

Para ilustrar o uso do método *branch and bound*, a Figura 7.3 mostra uma árvore de enumeração binária obtida para 4 anos de simulação. Se o valor ótimo do subproblema relaxado no nó $S_j, j = 0, \dots, N$ é pior ou igual ao valor da solução atual, o nó $S_j, j = 0, \dots, N$ é podado, caso contrário o nó é explorado.

A estratégia de controle ótima obtida com o método *branch and bound* para um período de 10 anos é mostrada na Tabela 7.4. A partir dessa estratégia pode-se fazer a tomada de decisão sobre qual herbicida aplicar em cada período para obter um retorno financeiro significativo.

A Figura 7.4 mostra a dinâmica do banco de sementes e a Figura 7.5 a dinâmica da frequência do alelo resistente. No período simulado, o banco de sementes sofre um decréscimo com o passar do tempo, ou seja, a planta daninha atinge o menor risco possível para a plantação. A mudança do banco de sementes foi similar em ambas as estratégias de controle MINLP e NLP utilizadas. Porém na estratégia de controle MINLP o banco de sementes chega a valores superiores quando comparado com a estratégia NLP, mas a presença do banco de sementes não chega a afetar a lucratividade do produtor. E, ainda, a solução MINLP apresenta um significativo retardo na frequências dos alelos do biótipo resistente para ambos os herbicidas comparado com as soluções NLP. Esse

retardo na frequências dos alelos do biótipo resistente utilizando a estratégia MINLP se mostra um fator importante na minimização dos impactos ambientais causados pelo uso excessivo de herbicidas, pois a partir do momento que se tem um banco de sementes suscetível, a dose utilizada para o controle da infestação é reduzida e, com isso, tem-se um menor comprometimento ambiental.

Tabela 7.4: Estratégia de controle ótimo com retardo da resistência de plantas daninhas para um horizonte de 10 anos

ano	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
MINLP $i = 1$	0	1	0	0	0	0	1	1	0	1
MINLP $i = 2$	1	0	1	1	1	1	0	0	1	0

Figura 7.4: Banco de sementes ótimo com aplicação de nicosulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i = 2$) e estratégia ótima MINLP para um horizonte de 10 anos.

7.4 Impacto da resistência de plantas daninhas na solução

Considerando a resistência de plantas daninhas a herbicidas, comparou-se a solução dos problemas MINLP e NLP com um sistema convencional de cultivo. Em um sistema convencional de cultivo é aplicada a dose recomendada de herbicida em cada período de tempo. A média anual de lucro é apresentada na Figura 7.6, a qual indica que o resultado do MINLP é economicamente superior aos resultado do NLP e de um sistema convencional de cultivo. Observe que a média anual de lucro para a estratégia NLP mostrou-se satisfatória quando comparada ao lucro de um sistema convencional de cultivo, porém a resistência a herbicidas adquirida pelas plantas chega a percentuais

Figura 7.5: Frequência do alelo resistente (p_i^*) ótimo com aplicação de nicosulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i = 2$) e estratégia ótima MINLP para um horizonte de 10 anos.

elevados. Já com a estratégia MINLP, obtém-se uma média anual de lucro superior e, ainda, um significativo retardo na resistência das plantas daninhas.

Com isso, verifica-se que o uso da rotação de herbicida contribui para o aumento de produção de uma lavoura e, além disso, para a desaceleração na evolução da resistência da planta daninha a herbicidas, a partir do momento que se leva em consideração a diminuição da eficácia do herbicida.

Figura 7.6: Lucro médio anual para nicosulfuron ($i = 1$) e atrazine ($i = 2$) e estratégia de controle ótima MINLP comparado com um sistema convencional de cultivo para um horizonte de 10 anos.

Capítulo 8

Conclusões

Neste trabalho foi desenvolvido um modelo de otimização dinâmica que considera a resistência da população sob pressão seletiva imposta pelo uso do herbicida. Foi proposto um modelo de otimização de rotação de herbicidas para controlar a infestação de plantas daninhas, maximizando o retorno econômico, retardando a evolução da resistência das plantas daninhas e minimizando os impactos ambientais causado pelo uso excessivo de herbicidas.

Os resultados mostraram-se promissores indicando que a rotação de herbicidas como forma de controle da infestação é economicamente superior quando comparado a aplicação da sequência de um único herbicida e a um sistema de cultivo convencional. O banco de sementes é controlado, chegando a valores que não causam danos a plantação e a dinâmica dos genótipos resistentes é menor que a aplicação da sequência de um único herbicida.

Além disso, o modelo desenvolvido é útil para explicar a evolução da resistência a herbicidas e demonstrar que a frequência dos alelos na população é um ponto importante que deve ser levado em consideração para o manejo das plantas daninhas.

A implementação computacional do problema MINLP foi um ponto chave na resolução do problema de manejo de plantas daninhas. Para a implementação do problema MINLP, optou-se por utilizar um algoritmo baseado em *branch and bound* e que, em cada nó da árvore, resolve um problema de programação não linear (resultante da relaxação do subproblema do nó em questão) usando o método ASA, o qual é adequado para a resolução de problemas com restrições de caixa. A resolução do problema MINLP

encontra uma solução local para o problema relaxado. Para contornar isso, usou-se a estratégia de reinícios com um maior número de resoluções de subproblemas por nó. A utilização das estratégias de busca em profundidade e de cortes na árvore de busca foi útil para encontrar soluções factíveis mais rapidamente e reduzir o número de nós que precisam ser explorados na árvore de busca. Os resultados foram considerados bons e o método foi capaz de encontrar uma solução de melhor qualidade para o problema MINLP.

Portanto, a utilização de técnicas de programação não linear inteira mista foram úteis na busca de uma melhor solução para o problema de manejo de plantas daninhas. E, ainda, a rotação de herbicidas contribui para o aumento de produção de uma lavoura, visando tornar o processo de produção cada vez mais viável economicamente.

É importante salientar que ao otimizar o processo de aplicação de herbicidas numa determinada lavoura, uma melhor utilização do produto químico está em curso, o que gera benefícios ao meio ambiente.

Apêndice A

Implementação dos algoritmos

Nesta seção apresentam-se os algoritmos utilizados na Seção 6.4. O método ASA é usado para resolver as relaxações dos subproblemas do método *branch and bound*. O código foi escrito em linguagem de programação C++. Todas as simulações foram compiladas em um computador Intel core i5 2.27GHz com 3Gb de memória RAM e sistema operacional Windows 7.

A.1 *Branch and bound* com o método ASA para as relaxações

Considere um método do tipo *branch and bound* aplicado diretamente na resolução do problema (6.24)-(6.27). Neste caso, em cada nó da árvore do *branch and bound*, aparecem problemas de programação não linear inteira mista que são subproblemas do problema principal que se está interessado em resolver. Na etapa de avaliação do método *branch and bound*, como descrito na Seção 3.3.2, normalmente é necessário resolver relaxações desses subproblemas. Essas relaxações são obtidas através da remoção das restrições de integralidade das variáveis, de modo que tais relaxações tornam-se problemas de programação não linear padrão. O problema original, não relaxado, (6.24)-(6.27), pode ser reescrito como um problema de NLP com restrição de caixa:

$$\max_{u_t^i, \lambda_t^i} L_r(x_t, p_t^i, u_t^i, \lambda_t^i) \quad (\text{A.1})$$

sujeito a

$$x_{t+1} = \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_t^i g_i(x_t, p_t^i, u_t^i), \quad x(0) = x_0 \quad (\text{A.2})$$

$$p_{t+1}^i = v_i(x_t, p_t^i, u_t^i), \quad p^i(0) = p_0^i \quad (\text{A.3})$$

$$0 \leq \lambda_t^i \leq 1 \quad (\text{A.4})$$

onde (A.4) é a restrição de caixa. O problema (A.1)-(A.4) é um problema de programação não linear padrão, solucionado com o método ASA.

Como o método *branch and bound*, descrito na Seção 3.3.2, apóia-se no fato de que as relaxações em cada nó devem ser resolvidas de forma ótima, não se tem garantia de encontrar a solução global do problema usando esta abordagem, pois o método ASA nos fornece uma solução ótima local para cada um dos nós explorados. Então, algumas estratégias podem ser usadas para tentar melhorar a qualidade da solução encontrada.

O Código A.1 apresenta a rotina principal usada para resolver o problema MINLP, utilizando a linguagem de programação C++. Observe que primeiramente define-se as variáveis e o valor das condições iniciais para o problema e, em seguida, chama-se a subrotina do *branch and bound* para resolver o nó ativo.

Código A.1: Código principal do problema MINLP.

```

1  /* Código principal do problema MINLP */
2  int main(void)
3  {
4      n = 5;    /* número de anos */
5      nx = 4;   /* número de variáveis de estado */
6      nc = 4;   /* número de variáveis de controle */
7      ni = 2;   /* número de variáveis inteiras */
8      ci = 3;   /* número de valores iniciais aleatórios */
9      int i, j, k;
10     double fraiz;
11     state0 = (double*) malloc(nx*sizeof(double));
12     grad_tol = 1e-3; /* tolerância do erro */
13     node *noAtual;
14     /* Valor inicial para as variáveis de estado */
15     state0[0] = 500; /* Valor inicial para o banco de sementes */
16     state0[1] = 0.1; /* Valor inicial para a frequência do alelo i = 1 */
17     state0[2] = 0.1; /* Valor inicial para a frequência do alelo i = 2 */

```

```

18     state0[3] = 0;
19     node *raiz = AlocaMem(n, nx, nc); /* alocar memória */
20     /* Valor inicial para as variáveis de controle */
21     for(i = 0; i < n*nc; i++)
22     {
23         int auxi= (int)i/ni;
24         if(auxi%2==0){
25             raiz->control_lo[i] = 0.00005;
26             raiz->control_up[i] = 2.49;
27             raiz->control[i] = 2.48/ni;
28         }else{
29             raiz->control_lo[i] = 0;
30             raiz->control_up[i] = 1;
31             raiz->control[i] = (double) 1/ni;
32         }
33     }
34     double fbestint = BigN;
35     node *bestint = AlocaMem(n, nx, nc); /* alocar memória */
36     /* Chama a função branch and bound para o nó ativo */
37     branch(raiz, &fraiz, 0, &fbestint, bestint);
38     liberaNo(raiz);
39     free(state0);
40     return 0;
41 }

```

A rotina que chama a função *branch*, linha 37 do Código A.1, utiliza o método ASA para resolver cada um dos subproblemas. O Código A.2 descreve como é feita a chamada do método ASA dentro da função *branch*.

Código A.2: Chamada do método ASA na rotina do *branch and bound*

```

1  /* Executar o método ASA para as relaxações */
2  void branch(node* pai, double *f, int nivel, double *fbestint, node*
    bestint){
3      node *bfilho = AlocaMem(n, nx, nc);
4      node *filho = AlocaMem(n, nx, nc);
5      node *best = AlocaMem(n, nx, nc);
6      double fbfilho = M, ffilho, fbest = M;
7      /* Chamada do método ASA */
8      solver(grad_tol, n, nx, nc, pai->control, state0, pai->state, my_phi,
        my_dphi, my_f, my_fx, my_fu, pai->control_lo, pai->control_up);

```

```

9      CopySol(pai, best, n, nx, nc);
10 }

```

Como o método ASA é utilizado na resolução de cada nó da árvore de busca, é necessário definir as entradas e saídas do problema de manejo de plantas daninhas (A.1)-(A.4), como descrito no Algoritmo 6.3. Para avaliar o funcional objetivo L_r e o Jacobiano de $f = [g_i \ v_i]^T$, a fim de calcular o gradiente, deve-se definir e passar para o método ASA as entradas e saídas definidas no Código A.3.

Código A.3: Entradas e saídas do método ASA.

```

1  /* A fim de calcular o gradiente, o usuário deve definir:
2      1. void my_f(double *f, double *x, double *u, double time)
3          *x, *u, e time são entradas, *f é saída.
4      2. void my_dphi(double *dphi, double *x_f)
5          *x_f é entrada, *dphi é saída.
6      3. double my_phi(double *x_f)
7          *x_f é entrada, a saída é a avaliação de phi.
8      4. void my_fu(double *fu, double *x, double *u, double time)
9          *x, *u, e time são entradas, *fu é saída.
10     5. void my_fx(double *fx, double *x, double *u, double time)
11         *x, *u, e time são entradas, *fx é saída. */
12 int solver
13 (
14     double grad_tol,
15     int n,
16     int nx,
17     int nc,
18     double *control,
19     double *state_0,
20     double *state,
21     double (*phi)(double *),
22     void (*dphi)(double *, double *),
23     void (*f)(double *, double *, double *, int),
24     void (*fx)(double *, double *, double *, int),
25     void (*fu)(double *, double *, double *, int),
26     double *control_lo,
27     double *control_up
28 )

```

A.2 Estratégia de reinícios para o método ASA

Durante o processo de implementação, verificou-se que a solução do ASA é bastante sensível às condições iniciais. Então, para contornar este problema, usou-se a estratégias de reinícios (*multistart*) para permitir uma melhor aproximação da solução ótima.

A estratégia de reinícios consiste em resolver um mesmo problema diversas vezes, fornecendo ao algoritmo pontos iniciais distintos. Esses pontos iniciais estão distribuídos sobre toda a região viável do problema e espera-se, com isso, que o algoritmo seja capaz de encontrar soluções viáveis ou até mesmo a solução global do problema.

Considere um subproblema do método *branch and bound*. Sabe-se que o que diferencia esse subproblema de qualquer um de seus problemas filhos é apenas uma restrição de igualdade em umas das variáveis de decisão. Isso sugere que a solução da relaxação do subproblema pode estar próxima da solução da relaxação de um de seus problemas filhos. Sendo assim, um bom ponto inicial para um determinado subproblema pode ser o ponto dado pela solução da relaxação do seu problema pai.

Entretanto, o uso da estratégia de reinícios exige diversos pontos iniciais. Então, pode-se tomar como primeiro ponto inicial para um subproblema a solução da relaxação do seu problema pai e obter os demais de alguma outra forma.

Precisa-se definir uma forma de gerar esses pontos iniciais. Uma possibilidade é usar a função *rand* para a geração de pontos iniciais de forma aleatória. A função recebe um parâmetro $ci > 0$ que define quantos pontos iniciais serão gerados para resolver o mesmo subproblema. Dentre este conjunto de soluções encontradas escolhe-se a melhor solução para o presente subproblema. Com isso, aumenta a possibilidade de melhorar a qualidade da solução encontrada.

O Código A.4 ilustra a implementação da estratégia de reinícios utilizando a função *rand* presente no programa C++. Com isso, são geradas condições iniciais aleatórias para serem testadas no programa ASA e, em seguida, o programa retorna a melhor solução encontrada.

Código A.4: Chamada do método ASA com estratégia de reinícios.

```
1 /* Estratégia de reinícios para o método ASA usando a função rand*/  
2 void branch(node* pai, double *f, int nivel, double *fbestint, node*  
   bestint){
```

```

3     node *bfilho = AlocaMem(n, nx, nc);
4     node *filho = AlocaMem(n, nx, nc);
5     node *best = AlocaMem(n, nx, nc);
6     double fbfilho = M, ffilho, fbest = M;
7     for(j = 0; j < ci; j++){
8         for(i = 0; i < n*nc; i++){
9             int auxi = (int)i/ni;
10            if(auxi%2 == 0){
11                if(pai->control_lo[i] != 0.001)
12                    pai->control[i] = (rand()%(int)1000*(pai->control_up[i]-
13                        pai->control_lo[i]))/1000;
14            }else{
15                if(pai->control_lo[i] != pai->control_up[i])
16                    pai->control[i] = (rand()%(int)1000*(pai->control_up[i]-
17                        pai->control_lo[i]))/1000;
18            }
19        }
20        /* Chama o método ASA */
21        solver(grad_tol, n, nx, nc, pai->control, state0, pai->state,
22            my_phi, my_dphi, my_f, my_fx, my_fu, pai->control_lo, pai->
23            control_up);
24        CopySol(best, pai, n, nx, nc);
25        fbest = returnSolValue(); /* Retorna a melhor solução */
26    }
27 }

```

A.3 Estratégia de seleção do subproblema no método *branch and bound*

Para selecionar qual o próximo subproblema a ser resolvido até encontrar uma solução inteira, foi usada a estratégia de busca em profundidade.

A estratégia de busca em profundidade consiste em escolher o último subproblema gerado pelo algoritmo, tendo em mente uma lista de subproblemas a serem resolvidos. Essa estratégia é conhecida como “último a entrar, primeiro a sair” (*last in, first out* - LIFO) ou pilha e seu uso corresponde a fazer uma busca em profundidade na árvore. Note que quanto mais profundo na árvore um subproblema estiver localizado, mais

restrições nas variáveis apresentará. Com isso, espera-se encontrar uma solução viável e, conseqüentemente, rapidamente um limitante inferior, que será útil para cortar ramos subsequentes da árvore. Quando todos os nós tiverem sido exploradas, a busca anda para trás (*backtrack*) para explorar os nós anteriores. O processo continua até que todos os nós que são alcançáveis a partir do nó original forem explorados. Se todos os nós já forem descobertos, então, é o fim.

A maneira mais cômoda de escrever o algoritmo de busca em profundidade é a recursiva. A pilha de nós ativos (e, portanto, o ponteiro) não aparece explicitamente, é criada e administrada pelo mecanismo da recursividade.

No Código A.5 pode-se observar a chamada da função *branch* na análise de cada um dos filhos criados na árvore de busca. Dessa forma, pode-se entender como funciona a função *branch* na árvore de busca e o caráter recursivo do método.

Código A.5: Criação da árvore de busca através do mecanismo de recursão

```

1  /* Chamada principal do método Branch and bound */
2  void branch(node* pai, double *f, int nivel, double *fbestint, node*
    bestint){
3      /* Chama a função branch para cada nó filho */
4      branch(filho, &ffilho, nivel+1, fbestint, bestint);
5      if(ffilho < fbfilho){
6          fbfilho = ffilho;
7          CopySol(bfilho, filho, n, nx, nc);
8      }
9      *f = fbfilho;
10     CopySol(pai, bfilho, n, nx, nc);
11     liberaNo(filho);
12     liberaNo(bfilho);
13 }

```

A.4 Estratégia de cortes na árvore de busca

Existem três situações que permitem considerar um subproblema explorado e, portanto, eliminá-lo da árvore de busca. Primeiramente, se o subproblema não possui solução factível, pode ser descartado da busca, o que pode ser verificado trivialmente. Em seguida, se existir uma solução viável inteira, pode ser feita a poda por otimalidade.

E, finalmente, se o limitante superior do problema é pior ou igual ao valor da melhor solução viável até o momento, não há possibilidade de encontrar uma solução melhor do que a atual, e o subproblema pode ser descartado da busca.

Com base nessas situações, foram implementados os cortes na árvore de busca, com o objetivo de eliminar ramos que não precisam ser explorados e, com isso, diminuir a área de busca na árvore e o tempo de processamento computacional.

Para o problema de manejo de plantas daninhas, considera-se que o problema não apresente solução infactível. Então, foram implementados a poda por otimalidade e a poda por limitantes na busca da melhor solução. Para implementar os cortes na árvore, é necessário verificar se a solução não é inteira (Código A.6) para, então, fazer a análise da solução. Em seguida, foi implementado o Código A.7, que ilustra a poda por otimalidade, e o Código A.8, que exemplifica a poda por limitante.

Código A.6: Verificar solução inteira.

```

1  /* Verifica se a solução não é inteira */
2  unsigned char integral = 1;
3  for(i = 0; (i < n*nc) && (integral == 1); i++){
4      int auxi = i%nc;
5      if(auxi >= ni && pai->control[i] < 1 && pai->control[i] > 0){
6          integral = 0;
7      }
8  }
```

Código A.7: Poda por otimalidade.

```

1  /* Poda por otimalidade */
2  if(integral == 1){
3      double sol = fbest;
4      if(sol < *fbestint){
5          *fbestint = sol;
6          CopySol(bestint, pai, n, nx, nc);
7      }
8      *f = sol;
9      return;
10 }
```

Código A.8: Poda por limitantes.

```

1  /*Poda por limitante */
```

```

2  if(fbest >= *fbestint){
3      fprintf(fout,"Poda por limitante: %lf %lf\n", fbest, *fbestint);
4      fflush(fout);
5      *f = BigN;
6      return;
7  }

```

Na implementação dos algoritmos para o controle de plantas daninhas, toma-se as variáveis inteiras 0 e 1 como 0,000001 e 0,99999, respectivamente. Com isso, pode-se eliminar possíveis erros de indeterminação numérica, devido as não linearidades no funcional objetivo e nas restrições.

Referências Bibliográficas

ADJIMAN, C. S.; ANDROULAKIS, I. P. E FLOUDAS, C. A. (1997). Global optimization of MINLP problems in process synthesis and design, **Computers & Chemical Engineering** v.21, n.97, p.445–450.

AGUIRRE, L. A. (2004). **Introdução à Identificação de Sistemas, Técnicas Lineares e Não-Lineares Aplicadas a Sistemas Reais**, Editora UFMG, Belo Horizonte, MG.

AITKENHEAD, M. J.; DALGETTY, I. A.; MULLINS, C. E.; MCDONALD, A. J. S. E STRACHAN, N. J. C. (2003). Weed and crop discrimination using image analysis and artificial intelligence methods, **Computers and Electronics in Agriculture** v.39, n.3, p.157–171.

ALCHANATIS, V.; RIDEL, L.; HETZRONI, A. E YAROSLAVSLY, L. (2005). Weed detection in multi-spectral images of cotton fields, **Computers and Electronics in Agriculture** v.47, n.3, p.243–260.

ARENALES, M.; ARMENTANO, V.; MORABITO, R. E YANASSE, H. (2007). **Pesquisa Operacional**, Elsevier, Rio de Janeiro, RJ.

AULD, B. A. E TISDELL, C. A. (1987). Economic threshold and response to uncertainty in weed control, **Agricultural Systems** v.25, n.3, p.219–127.

BELLMAN, R. (1957). **Dymanic Programming**, Princeton University Press, Princeton, NJ.

BERTSEKAS, D. P. (1995). **Dynamic Programming and Optimal Control**, Athena Scientific, Belmont, MA.

- BERTSEKAS, D. P. (1999). **Nonlinear Programming. 2a ed.**, Athena Scientific, Belmont, MA.
- BIRGIN, E. G. E GENTIL, J. M. (2010). New and improved results for packing identical unitary radius circles within triangles, rectangles and strips, **Computers and Operations Research** v.37, n.7, p.1318 – 1327.
- BIRGIN, E. G. E MARTÍNEZ, J. M. (2002). Large-scale active-set box-constrained optimization method with spectral projected gradients, **Computational Optimization and Applications** v.23, n.1, p.101 – 125.
- BIRGIN, E. G.; MARTÍNEZ, J. M.; NISHIHARA, F. H. E RONCONI, D. P. (2006). Orthogonal packing of rectangular items within arbitrary convex regions by nonlinear optimization, **Computers and Operations Research** v.33, n.12, p.3535–3548.
- BIRGIN, E. G.; MARTÍNEZ, J. M. E RAYDAN, M. (2000). Nonmonotone spectral projected gradient methods on convex sets, **SIAM Journal on Optimization** v.10, n.4, p.1196 – 1211.
- BONAMI, P.; BIEGLER, L. T.; CONN, A. R.; CORNUÉJOLS, G.; GROSSMANN, I. E.; LAIRD, C. D.; LEE, J.; LODI, A.; MARGOT, F.; SAWAYA, N. E WÄCHTER, A. (2008). An algorithmic framework for convex mixed integer nonlinear programs, **Discrete Optimization** v.5, n.2, p.186–204.
- BRITTON, N. F. (2003). **Essential Mathematical Biology**, Springer Undergraduate Mathematics Series, London, UK.
- BROCH, D. L. E PEDROSO, R. S. (2009). Custo de produção da cultura do milho, Available at: <http://www.fundacaoms.org.br/request.php118>.
- BURN, A. J.; COAKER, T. E JEPSON, P. (1987). **Integrated Pest Management**, Academic Press, London.
- BYRD, R. H.; LU, P.; NOCEDAL, J. E ZHU, C. (1995). A limited memory algorithm for bound constrained optimization, **SIAM Journal on Scientific Computing** v.16, n.5, p.1190 – 1208.
- CACHO, O. J. (1998). Solving bioeconomic optimal control models numerically, **Bioeconomics Workshop Australian Agricultural and Resource Economics Society Conference**, New South Wales, Australia, pp. 13–26.

- CACHO, O. J. (1999). Dynamic models, externalities and sustainability in agriculture, **Workshop Paper Series in Agricultural and Resource Economics**, University of New England, pp. 1–9.
- CACHO, O. J.; WISE, R. M.; HESTER, S. M. E SINDEN, J. A. (2004). Weed invasions: To control or not control?, **Working Paper Series in Agricultural and Resource Economics**, University of New England, pp. 1–9.
- CAINES, P. E.; CLARKE, F. H.; LIU, X. E VINTER, R. B. (2006). A maximum principle for hybrid optimal control problems with pathwise state constraints, **45th IEEE Conference on Decision and Control**, San Diego, USA, pp. 4821–4825.
- CAMPO, J. R.; CHELA, R. S.; MORAES, C. R. C. E SILVA, G. N. (2006). Simulações da dinâmica populacional de plantas daninhas com aplicação de controle, **5º Congresso Temático de Dinâmica, Controle e Aplicações**, Guaratinguetá, SP, pp. 1–7.
- CAMPOS, J. R. (2005). **Uma abordagem para problemas de controle ótimo via métodos de runge-kutta e análise de erro**, Dissertação de Mestrado, Instituto de Biociência Letras e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista, São José do Rio Preto, SP.
- CESARI, L. (1983). **Optimisation Theory and Applications. Problems with Ordinary Differential Equations**, Springer-Verlag, Los Angeles, CA.
- CHELA, R. S. (2007). **Modelos de otimização dinâmico e estático para o controle de plantas daninhas**, Dissertação de Mestrado, Instituto de Biociência Letras e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista, São José do Rio Preto, SP.
- CHRISTOFFOLETI, P. J. (2002). Curvas de dose-resposta de biótipos resistente e suscetível da *Bidens pilosa* L. aos herbicidas inibidores da ALS, **Scientia Agricola** v.59, n.3, p.513–519.
- CHRISTOFFOLETI, P. J. (2008). **Aspectos de Resistência de Plantas Daninhas a Herbicidas**, 3 edn, Associação Brasileira de Ação à Resistência de Plantas Daninhas, Piracicaba, SP.
- CHRISTOFFOLETI, P. J.; FILHO, R. V. E SILVA, C. B. (1994a). Resistência de plantas daninhas aos herbicidas, **Planta Daninha** v.12, n.1, p.21–25.

CHRISTOFFOLETI, P. J.; FILHO, V. R. E SILVA, C. B. (1994b). Resistência de plantas daninhas aos herbicidas, **Planta Daninha** v.12, n.1, p.13–20.

CHRISTOFFOLETI, P. J.; OVEJERO, R. F. L. E CARVALHO, J. C. (2004). **Aspectos de Resistência de Plantas Daninhas a Herbicidas**, Associação Brasileira de Ação à Resistência de Plantas Daninhas, Campinas, SP.

COUSENS, R. (1985a). An empirical model relating crop yield to weed crop density and a statistical comparison with other models, **Journal of Agricultural Science** v.105, n.3, p.513–521.

COUSENS, R. (1985b). A simple model relating yield loss to weed density, **Annals of Applied Biology** v.107, n.2, p.239–252.

DIGGLE, A. J.; NEVE, P. B. E SMITH, F. P. (2003). Herbicides used in combination can reduce the probability of herbicide resistance in finite weed populations, **Weed Research** v.43, n.5, p.371–382.

DOYLE, C. J. (1991). Mathematical models in weed management, **Crop Protection** v.10, n.6, p.432–444.

DOYLE, C. J. (1997). A review of the use of models of weed control in integrated crop protection, **Agriculture Ecosystems Environment** v.64, n.2, p.165–172.

ECKSTEIN, J. (1994). Parallel branch and bound algorithms for general mixed integer programming on the cm-5, **SIAM Journal on Optimization** v.4, n.4, p.794–814.

FIRBANK, L. G. E WATKINSON, A. R. (1985). A model of interference within plant monocultures, **Journal of Theoretical Biology** v.116, n.2, p.291–311.

FLETCHER, R. E LEYFFER, S. (1998). Numerical experience with lower bounds for miqp branch and bound, **SIAM Journal on Optimization** v.8, n.2, p.604–616.

GAZZIERO, D. L. P.; SANTOS, A. M. B.; VOLL, E. E ADEGAS, F. S. (2008). Resistência de picão - preto (*Bidens subalternans*) ao herbicida atrazine, **Congresso Brasileiro da Ciência das Plantas Daninhas e Congresso de la Asociacón Latinoamericana de Malezas**, Ouro Preto, MG, pp. 1–7.

- GIANNELOS, N. F. E GEORGIADIS, M. C. (2001). A model for scheduling cutting operations in paper-converting processes, **Industrial and Engineering Chemistry Research** v.40, n.24, p.5752–5757.
- GONZALEZ-ANDUJAR, J. L. (1996). High control measures cannot produce extinction in weed populations, **Ecological Modelling** v.91, n.3, p.293–294.
- GRESSEL, J. (1991). **Herbicide Resistance in Weeds and Crops**, Oxford: Butterworth-Heinemann, England.
- GRESSEL, J. (2009). Evolving understanding of the evolution of herbicide resistance, **Pest Management Science** v.65, n.11, p.1164–1173.
- GRESSEL, J. (2011). Weed genomics advance: A commentary, **Journal of Agricultural Science** v.149, n.1, p.47–53.
- GRESSEL, J. E SEGEL, L. A. (1978). The paucity of plants evolving genetic resistance to herbicides: possible reasons and implications, **Journal of Theoretical Biology** v.75, n.3, p.349–371.
- GRESSEL, J. E SEGEL, L. A. (1990). **Managing Resistance to Agrochemicals: from Fundamental Research to Practical Strategies**, America Chemical Society, Washington.
- GRIESSE, R. E WALTHER, A. (2004). Evaluating gradients in optimal control: Continuous adjoints versus automatic differentiation, **Journal of Optimization Theory and Applications** v.122, n.1, p.63–86.
- GROSSMANN, I. E. E QUESADA, I. (1992). An lp/nlp based branch and bound algorithm for convex minlp optimization problems, **Computer & Chemical Engineering** v.16, n.1, p.937–947.
- HAAGE, I. R.; BASTIAANS, L.; KEMPENAR, C.; SMUTNY, V. E KROPFF, M. (2007). Are pre-spraying growing conditions a major determinant of herbicide efficacy, **Weed Research** v.47, n.5, p.1365 – 1380.
- HAGER, W. (2009). Source code for ASA-CG version 1.3, Available at: <http://www.math.ufl.edu/~hager/papers/Software>.

- HAGER, W. W. (2001). Runge-kutta methods in optimal control and the transformed adjoint system, **Numerische Mathematik** v.87, n.2, p.247–282.
- HAGER, W. W. E ZHANG, H. (2006). A new active set algorithm for box constrained optimization, **SIAM Journal on Optimization** v.17, n.2, p.526–557.
- HARPER, J. L. (1956). The evolution of weeds in relation to resistance to herbicides, **Third British Weed Control Conference**, Brighton, pp. 179–188.
- HEAP, I. (2011). The international survey of herbicide resistant weeds, Available at: <http://www.weedscience.com>.
- HOCK, S. M.; KNEZEVIC, S. Z. E MARTIN, A. R. (2006). Soybean row spacing and weed emergence time influence weed competitiveness and competitive indices, **Weed Science** v.54, n.1, p.38–46.
- HOLST, N.; RASMUSSEN, L. A. E BASTIAANS, L. (2007). Field weed population dynamics: a review of model approaches and applications., **Weed Research** v.47, n.1, p.1–14.
- JONES, R. (2005). Sustainability and integrated weed management in australian winter cropping systems: A bioeconomic analysis, **49th Annual Conference of the Australian Agricultural and Resource Economic Society**, Coffs Harbor, NSW, Australia, pp. 1–15.
- JONES, R. E CACHO, O. J. (2000). A dynamic optimisation model of weed control, **44th Annual Conference of the Australian Agricultural and Resource Economics**, Sydney, Australia, pp. 1–17.
- JONES, R.; CACHO, O. J. E SINDEN, J. (2006). The importance of seasonal variability and tactical responses to risk on estimating the economic benefits of integrated weed management, **Agricultural Economics** v.35, n.3, p.245–256.
- KARAM, D. (2011). Manejo de plantas daninhas resistentes na cultura do milho, **Plantio Direto** v.20, n.124, p.40–46.
- KENNEDY, J. O. S. (1986). **Dynamic Programming: Applications to Agriculture and Natural Resources**, Elsevier, New York, NY.

- KIM, D. S.; MARSHALL, E.; BRAIN, P. E CASELEY, J. (2006). Modelling the effects of sub-lethal doses of herbicide and nitrogen fertilizer on crop weed competition, **Weed Research** v.46, n.6, p.492–502.
- KING, D. J. E LAUNCHBURY, J. (1995). Structuring depth-first search algorithms in haskell, **22nd Symposium on Principles of Programming Languages**, San Francisco, CA, pp. 344–354.
- KOTANI, K.; KAKINAKA, M. E MATSUDA, H. (2009). Dynamic economic analysis on invasive species management: Some policy implications of catchability, **Mathematical Biosciences** v.220, n.1, p.1–14.
- KOTANI, K.; KAKINAKA, M. E MATSUDA, H. (2011). Optimal invasive species management under multiple uncertainties, **Mathematical Biosciences** v.233, n.1, p.32–46.
- LACERDA, A. L. C. (2003). **Fluxo de emergência e banco de sementes de plantas daninhas em sistemas de semeadura direta e convencional e curvas dose-resposta ao glyphosato**, PhD thesis, Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiros, Universidade de São Paulo, Piracicaba, SP.
- LACERDA, A. L. S. E FILHO, R. V. (2004). Curvas de dose-resposta em espécies de plantas daninhas com uso do herbicida glyphosate, **Bragantia** v.63, n.1, p.73–79.
- LAND, A. H. E DOIG, A. G. (1960). An automatic method of solving discrete programming problems, **Econometria** v.28, n.3, p.497–520.
- LIN, C. J. E MORÉ, J. J. (1999). Newton’s method for large bound-constrained optimization problems, **SIAM Journal on Optimization** v.9, n.4, p.1100–1127.
- LORENZI, H. (2000a). **Manual de Identificação e de Controle de Plantas Daninhas: Plantio Direto e Convencional**, Instituto Plantarum de Estudos da Flora Ltda, Nova Odessa, SP.
- LORENZI, H. (2000b). **Plantas Daninhas do Brasil: Terrestre, Aquáticas, Parasitas e Tóxicas**, Instituto Plantarum de Estudos da Flora, Nova Odessa, SP.
- LOTZ, L. A. P.; CLOTIER, D.; QUINTANILLA, C. F.; LEGERE, A.; LEMIUEX, C.; LUTMAN, P. J. W.; IGLESIAS, A. P.; SALONEN, J.; SATTIN, M.; STIGLIANI, L.

E TEI, F. (1996). Prediction of the competitive effects of weeds on crop yields based on the relative leaf area of weeds, **Weed Research** v.36, n.1, p.93–101.

MAXWELL, B. D.; ROUSH, M. L. E RADOSEVICH, S. R. (1990). Predicting the evolution and dynamics of herbicide resistance in weed populations, **Weed Technology** v.4, n.1, p.2–13.

MEDD, R.; NICOL, H. I. E COOK, A. (1995). Seed kill and its role in weed management system: A case study of seed production, seed banks and population growth of avena species (wild oats), **Ninth European Weed Research Society Symposium**, Vol. 2, Budapest, pp. 627–632.

MEROTTO, A. J.; JASIENIUK, M.; OSUNA, M.; FERRERO, F. V. A. E FICHER, A. (2009). Cross resistance to herbicides of five als inhibiting groups and sequencing of the als gene in cyperus difformis l., **Agricultural and Food Chemistry** v.57, n.4, p.1389–1398.

MORTIMER, A. M. (1987). The population ecology of weed - implications for integrated management, forecasting and conservation, **British Crop Protection Conference Weeds, British Crop Protection Council**, Farnham, UK, pp. 935–944.

MORTIMER, A. M.; MCMAHON, D. J.; MANLOVE, R. J. E PUTWAIN, P. (1980). The prediction of weed infestations and cost of differing control strategies, **British Crop Protection Conference Weeds, British Crop Protection Council**, Farnham, UK, pp. 415–422.

MOSS, S. (2010). Detecting herbicide resistance, Available at: [http://www.hracglobal.com/Publications/DetectingHerbicideResistance /tabid/229/Default.aspx](http://www.hracglobal.com/Publications/DetectingHerbicideResistance/tabid/229/Default.aspx).

NEMHAUSER, G. L. E WOLSEY, L. A. (1988). **Integer and Combinatorial Optimization**, Interscience Series in Discrete Mathematics and Optimization, Jonh Wiley & Sons, New York, NY.

NEVE, P. (2008). Simulation modelling to understand the evolution and management of glyphosate resistance in weeds, **Pest Management Science** v.64, n.4, p.392–401.

- NEVE, P.; NORSWORTHY, J. K.; SMITH, K. L. E ZELAYA, I. A. (2011). Modelling evolution and management of glyphosate resistance in *Amaranthus palmeri*, **Weed Research** v.51, n.1, p.99–112.
- ODOM, D. I. S.; CACHO, O. J.; SINDEN, J. A. E GRIFFITH, G. R. (2003). Policies for the management of weeds in natural ecosystems: the case of scotch broom (*Cytisus scoparius*, L.) in an australian national park, **Ecological Economics** v.44, n.1, p.119–135.
- PANDEY, S. E MEDD, R. (1990). Integration of seed and plant kill tactics for control of wild oats: An economic evaluation, **Agricultural Systems** v.34, n.1, p.65–76.
- PARK, S. E.; BENJAMIN, L. R. E WATKINSON, A. R. (2003). The theory an application of plant competition models: an agronomic perspective, **Annals of Botany** v.92, n.6, p.741–748.
- PONTRYAGIN, L. S.; BOLTYANSKII, V. H.; GAMKRELIDZE, R. V. E MISHCHENKO, E. F. (1965). **The Mathematical Theory of Optimal Processes**, John Wiley, New York, NY.
- POWLES, S. B. E PRESTON, C. (2011). Herbicide cross resistance and multiple resistance in plants, Available at: [http://www.hracglobal.com/Publications/HerbicideCrossResistanceandMultipleResistance /tabid/224/Default.aspx](http://www.hracglobal.com/Publications/HerbicideCrossResistanceandMultipleResistance/tabid/224/Default.aspx).
- RIZZARDI, M. A. (2002). Resistência de plantas daninhas aos herbicidas inibidores da acetolactato sintase, **Planta Daninha** v.20, n.1, p.149–158.
- SAIKH, M. S. E CAINES, P. E. (2003). On the optimal control of hybrid systems: optimization of switching times and combinatoric location schedules, **American Control Conference**, Denver, USA, pp. 2773–2778.
- SAKAI, K. (2001). **Nonlinear Dynamics and Chaos in Agricultural Systems**, Developments in Agricultural Systems, Elsevier, Amsterdam, Netherlands.
- SCHWARTZ, A. L. (1996). **Theory and implementation of numerical methods based on runge-kutta integration for solving optimal control problems**, Dissertação de Mestrado, University of California, Berkeley, CA.

- SEEFELDT, S. S.; JENSEN, J. E. E FUERST, E. P. (1995). Log-logistic analysis of herbicide dose-response relationships, **Weed Technology** v.9, n.1, p.218–227.
- SMITH, M.; TAKEUCHI, K.; ANDERSON, G.; WARE, G.; CLURE, H. M.; RAYBOURNE, R.; MYTLE, N. E DOYLE, M. P. (2008). Dose-response model for listeria monocytogenes-induced stillbirths in nonhuman primates, **Infection and Immunity** v.76, n.2, p.726–731.
- STREIBIG, J. C. E KUDSK, P. (1993). **Herbicide Bioassays**, CRC Press, Boca Raton, FL.
- THORNTON, S. T. E MARION, J. B. (2004). **Classical Dynamics of Particles and Systems. 5a ed.**, Thomson Brooks Cole, New York, NY.
- TIND, T.; MATHIESEN, T. J.; JENSEN, J. E.; RITZ, C. E STREIBIG, J. C. (2009). Using a selectivity index to evaluate logarithmic spraying in grass seed crops, **Pest Management Science** v.65, n.11, p.1257–1262.
- TRANEL, P. J. E WRIGHT, T. R. (2002). Resistance of weeds to ALS-inhibiting herbicides: what have we learned?, **Weed Science** v.50, n.6, p.700 – 712.
- VELINI, E. D. E KARAM, D. (2008). Importância do ensino da disciplina de plantas daninhas na formação dos profissionais da área agrícola, **Congresso Brasileiro da Ciência das Plantas Daninhas e Congresso de la Asociacón Latinoamericana de Malezas**, Ouro Preto, MG, pp. 27–46.
- VIDAL, R. A. E FLECK, N. G. (1997). Three weed species with confirmed resistance to herbicides in brazil, **37th Meeting of the Weed Science Society of America**, Orlando, USA, p. 100.
- VINTER, R. (2000). **Optimal Control**, Birkhäuser, New York, NY.
- WALLINGA, J.; GROENEVELD, R. M. W. E LOTZ, L. A. P. (1998). Measures that describe weed spatial pattern at different levels of resolution and their applications for patch spraying of weeds, **Weed Research** v.38, n.1, p.351–359.
- WEEDS, H. R. (2010). The international survey of herbicide resistant weeds, Available at: <http://www.weedscience.org/summary/MOASummary.asp>.

WOLSEY, L. A. (1998). **Integer Programming**, Interscience Series in Discrete Mathematics and Optimization, John Wiley & Sons, New York, NY.