



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Centro de Tecnologia e Ciências
Instituto Politécnico

Sullivan Carlos Xavier Mattos

**Solução de Problemas Inversos do modelo Bevilacqua-Galeão de
difusão anômala com dependência espacial**

Nova Friburgo

2021

Sullivan Carlos Xavier Mattos

**Solução de Problemas Inversos do modelo Bevilacqua-Galeão de difusão
anômala com dependência espacial**



Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Dr. Antônio José da Silva Neto

Orientador: Prof. Dr. Jader Lugon Junior

Nova Friburgo

2021

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ/REDE SIRIUS/BIBLIOTECA CTC/E

M444 Mattos, Sullivan Carlos Xavier.

Solução de Problemas Inversos do modelo Bevilacqua-Galeão de difusão anômala com dependência espacial / Sullivan Carlos Xavier Mattos. – 2021.

121 f. : il.

Orientadores: Antônio José da Silva Neto e Jader Lugon Junior.
Dissertação (mestrado) - Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Difusão – Modelos matemáticos – Teses. 2. Problemas inversos (Equações diferenciais) - Teses. 3. Estimativa de parâmetros - Teses. 4. Diferenças finitas – Teses. I. Silva Neto, Antônio José da. II. Lugon Junior, Jader. III. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. IV. Título.

CDU 519.217.4

Bibliotecária Cleide Sancho CRB7/5843

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta dissertação, desde que citada a fonte.

Sullivan Carlos Xavier Mattos
Assinatura

07/11/2021
Data

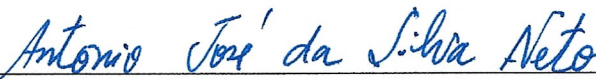
Sulivan Carlos Xavier Mattos

**Solução de Problemas Inversos do modelo Bevilacqua-Galeão de
difusão anômala com dependência espacial**

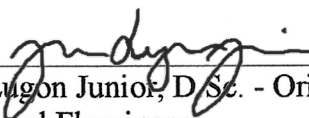
Dissertação apresentada como requisito parcial para
obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-
Graduação em Modelagem Computacional do Instituto
Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de
Janeiro.

Aprovado em 9 de agosto de 2021.

Banca examinadora:



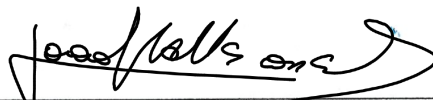
Prof. Antônio José da Silva Neto, Ph.D. – Orientador
Instituto Politécnico – UERJ



Prof. Jader Ligon Junior, D.Sc. - Orientador
Instituto Federal Fluminense



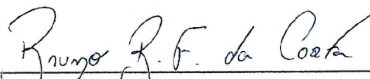
Prof. Diego Campos Knupp, D.Sc.
Instituto Politécnico – UERJ



Prof. João Flávio Vieira de Vasconcellos, D.Eng.Mec.
Instituto Politécnico – UERJ



Prof. Wagner Rambaldi Telles, D.Sc.
Universidade Federal Fluminense



Prof. Bruno Barzellay Ferreira da Costa, D.Sc.
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Nova Friburgo

2021

DEDICATÓRIA

A Deus e a minha querida família.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, por ter soprado em minhas narinas dando-me vida e saúde.

A minha amada esposa Ana Paula, pelo amor, carinho, companherismo e por incentivar-me diariamente nessa caminhada.

Aos meus queridos pais, pelo carinho, pelas orações, pela dedicação incessante, me fazendo acreditar que os sonhos são possíveis.

Ao meu querido filho Bento Xavier, pelos sorrisos e brincadeiras que faziam meus dias mais leves e felizes.

Aos queridos amigos e colegas do programa em Modelagem Computacional da UERJ com quem tive o prazer de conviver, estando sempre disponíveis quando eu precisei de algum apoio.

Aos meus orientadores, Antônio José da Silva Neto e Jader Lugon Junior, pelos ensinamentos, sugestões, dedicação e acompanhamento durante todo desenvolvimento deste trabalho.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

Antes eu te conhecia só por ouvir falar, mas agora eu te vejo com os meus próprios olhos.

Jó 42:5

RESUMO

MATTOS, Sulivan Carlos Xavier. *Solução de Problemas Inversos do modelo Bevilacqua-Galeão de difusão anômala com dependência espacial*. 2021. 121 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2021.

O principal objetivo desta dissertação é a formulação e solução do problema direto e inverso para o modelo Bevilacqua-Galeão (BG) de difusão anômala. Para solução de ambos os problemas foi utilizado uma variação espacial para alguns parâmetros do modelo. Considerou-se a fração de substância livre, ou seja, a fração de substância disponível para difusão e também o parâmetro denominado coeficiente de reatividade, com variação espacial. Em relação ao problema direto, foi apresentada uma solução unidimensional para o modelo usando o Método de Diferenças Finitas, procurando evidenciar a diferença no perfil de concentração entre as soluções, comparando os resultados do modelo quando usados parâmetros variáveis e constantes. Um problema inverso para estimação dos parâmetros, com variação espacial, foi formulado e solucionado empregando os métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado (LJM), Evolução Diferencial (DE) e Firefly (FA). Foi realizada uma análise de sensibilidade referente a cada um dos parâmetros, cuja finalidade foi identificar condições experimentais ótimas para viabilizar a solução do problema inverso. Por meio dos resultados obtidos em cada caso, pode-se verificar que a variação espacial dos parâmetros afetam diretamente a velocidade da difusão. Em relação a estimativa desses parâmetros, observou-se a eficiência de cada método utilizado, principalmente quando os dados experimentais estavam sem ruídos. Novas formulações propostas por Bevilacqua também foram tratadas neste trabalho.

Palavras-chave: Difusão Anômala. Método de Diferenças Finitas. Problemas Inversos.

ABSTRACT

MATTOS, Sulivan Carlos Xavier. *Inverse Problem Solving of the Bevilacqua-Galeão Anomalous Diffusion Model with Spatial Dependence*. 2021. 121 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2021.

The main objective of this dissertation is the formulation and solution of the direct and inverse problem for the anomalous diffusion bi-flux model proposed by Bevilacqua and Galeão. To solve both problems, a spatial variation for some model parameters was used. It was considered the free substances, that is, the fraction of available substance for the diffusion and also the parameter known as reactivity coefficient, with spatial variation. In relation to the direct problem, it was presented a monodimensional solution to the model using the Finite Difference Method, seeking to evidence the difference in the concentration profile of the solutions, comparing to the model results using variable and constant parameters. An inverse problem for parameters estimation, with spatial variation, was formulated and solved employing the Modified Luus-Jaakola (MLJ), Differential Evolution (DE) and Firefly (FF) stochastic methods. A sensitivity analyses was performed for each of the parameters, whose purpose was to identify optimal experimental conditions to enable the solution of the inverse problem. Through the results obtained in each case, it is possible to verify that the spatial variation of parameters directly affects the diffusion velocity. In relation to estimation of these parameters, the efficiency of each method used was observed, especially when the experimental data were noiseless. New formulations proposed by Bevilacqua were also discussed in this work

Keywords: Anomalous Diffusion. Finite Difference Method. Inverse Problems.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	- Distribuição simétrica com retenção	43
Figura 2	- Comparação do perfil de concentração para a difusão entre β constante e β variável - Caso 1a.	59
Figura 3	- Comparação do perfil de concentração nos instantes 4 e 10 - Caso 1a.	60
Figura 4	- Comparação do perfil de concentração para a difusão no centro da malha e com a Difusão de Fick - Caso 1a.	60
Figura 5	- Comparação do perfil de concentração para a difusão entre β constante e β variável - Caso 1b.	61
Figura 6	- Comparação do perfil de concentração nos instantes 4 e 10 - Caso 1b.	61
Figura 7	- Comparação do perfil de concentração para a difusão no centro da malha e com a Difusão de Fick - Caso 1b.	61
Figura 8	- Comparação do perfil de concentração para a difusão entre β constante e β variável - Caso 1c.	62
Figura 9	- Comparação do perfil de concentração nos instantes 3 e 5 - Caso 1c.	63
Figura 10	- Comparação do perfil de concentração para a difusão no centro da malha e com a Difusão de Fick - Caso 1c.	63
Figura 11	- Comparação do perfil de concentração para a difusão entre k_4 constante e k_4 variável - Caso 2a.	64
Figura 12	- Comparação do perfil de concentração nos instantes 3 e 7 - Caso 2a.	64
Figura 13	- Comparação do perfil de concentração para a difusão no centro da malha - Caso 2a.	65
Figura 14	- Comparação do perfil de concentração para a difusão entre k_4 constante e k_4 variável - Caso 2b.	65
Figura 15	- Comparação do perfil de concentração nos instantes 1 e 2 - Caso 2b.	66
Figura 16	- Comparação do perfil de concentração para a difusão no centro da malha - Caso 2b.	66
Figura 17	- Coeficientes de sensibilidades normalizados ao longo do espaço e do tempo - Caso 1a.	68
Figura 18	- Evolução das estimativas para o parâmetro a usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 1a.	69
Figura 19	- Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro a - Caso 1a.	70
Figura 20	- Evolução das estimativas para o parâmetro b usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 1a.	71
Figura 21	- Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro b - Caso 1a.	71

Figura 22 - Curva da função $\beta(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1a.	72
Figura 23 - Erro absoluto para a função $\beta(x)$ - Caso 1a.	72
Figura 24 - Curva de concentração $\phi(x, t)$ no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1a.	73
Figura 25 - Erro absoluto no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1a.	73
Figura 26 - Coeficientes de sensibilidades normalizados ao longo do espaço e do tempo - Caso 1b.	74
Figura 27 - Evolução das estimativas para o parâmetro a usando os métodos LJM, ED e FA - Caso 1b.	76
Figura 28 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro a - Caso 1b.	76
Figura 29 - Evolução das estimativas para o parâmetro b usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 1b.	78
Figura 30 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro b - Caso 1b.	78
Figura 31 - Curva da função $\beta(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1b.	79
Figura 32 - Erro absoluto para a função $\beta(x)$ - Caso 1b.	79
Figura 33 - Curva de concentração $\phi(x, t)$ no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1b.	80
Figura 34 - Erro absoluto no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1b.	80
Figura 35 - Coeficientes de sensibilidades normalizados ao longo do espaço e do tempo - Caso 1c.	81
Figura 36 - Evolução das estimativas para o parâmetro a usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 1c.	83
Figura 37 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro a - Caso 1c.	83
Figura 38 - Evolução das estimativas para o parâmetro b usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 1c.	85
Figura 39 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro b - Caso 1c.	85
Figura 40 - Curva da função $\beta(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1c.	86
Figura 41 - Erro absoluto para a função $\beta(x)$ - Caso 1c.	86
Figura 42 - Curva de concentração $\phi(x, t)$ no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1c.	87
Figura 43 - Erro absoluto no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1c.	87

Figura 44 - Coeficientes de sensibilidades normalizados ao longo do espaço e do tempo - Caso 2a.	88
Figura 45 - Evolução das estimativas para o parâmetro a usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 2a.	90
Figura 46 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro a - Caso 2a.	90
Figura 47 - Evolução das estimativas para o parâmetro b usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 2a.	92
Figura 48 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro b - Caso 2a.	92
Figura 49 - Curva da função $k_4(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2a.	93
Figura 50 - Erro absoluto para a função $k_4(x)$ - Caso 2a.	93
Figura 51 - Curva de concentração $\phi(x, t)$ no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2a.	94
Figura 52 - Erro absoluto no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2a.	94
Figura 53 - Coeficientes de sensibilidades normalizados ao longo do espaço e do tempo - Caso 2b.	95
Figura 54 - Evolução das estimativas para o parâmetro a usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 2b.	97
Figura 55 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro a - Caso 2b.	97
Figura 56 - Evolução das estimativas para o parâmetro b usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 2b.	99
Figura 57 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro b - Caso 2b.	99
Figura 58 - Curva da função $k_4(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2b.	100
Figura 59 - Erro absoluto para a função $k_4(x)$ - Caso 2b.	100
Figura 60 - Curva de concentração $\phi(x, t)$ no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2b.	101
Figura 61 - Erro absoluto no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2b.	101
Figura 62 - Perfil de concentração para a difusão referente ao caso 3a - Problema 1	106
Figura 63 - Perfil de concentração para a difusão referente ao caso 3b - Problema 1	107
Figura 64 - Perfil de concentração para a difusão referente ao caso 3c - Problema 1	108
Figura 65 - Curva de concentração ao longo do domínio referente ao caso 4a - Problema 2	109
Figura 66 - Curva de concentração ao longo do tempo referente ao caso 4a - Problema 2	109

Figura 67 - Curva de concentração ao longo do domínio referente ao caso 4b - Problema 2	110
Figura 68 - Curva de concentração ao longo do tempo referente ao caso 4b - Problema 2	110
Figura 69 - Curva de concentração ao longo do domínio referente ao caso 4c - Problema 2	111
Figura 70 - Curva de concentração ao longo do tempo referente ao caso 4c - Problema 2	111
Figura 71 - Curva de concentração ao longo do domínio referente ao caso 4d - Problema 2	112
Figura 72 - Curva de concentração ao longo do tempo referente ao caso 4d - Problema 2	112
Figura 73 - Curva de concentração ao longo do domínio referente ao caso 4e - Problema 2	113
Figura 74 - Curva de concentração ao longo do tempo referente ao caso 4e - Problema 2	113

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Condições de Contorno - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão de difusão anômala	23
Tabela 2 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Coeficientes Constantes	33
Tabela 3 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Coeficientes Constantes	34
Tabela 4 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Coeficientes Constantes	35
Tabela 5 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Coeficientes Variáveis	36
Tabela 6 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Coeficientes Variáveis	37
Tabela 7 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Distribuição Assimétrica	38
Tabela 8 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Problema Inverso	39
Tabela 9 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Problema Inverso	40
Tabela 10 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Bidimensional	41
Tabela 11 - Condições de Contorno - Casos 1 e 2	44
Tabela 12 - Valores atribuídos aos parâmetros para solução do Problema Direto - Caso 1	58
Tabela 13 - Valores atribuídos aos parâmetros para solução do Problema Direto - Caso 2	58
Tabela 14 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1a.	68
Tabela 15 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1a.	69
Tabela 16 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1a.	70
Tabela 17 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1a.	71
Tabela 18 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ e $\vec{Z} = \{b\}$ - Caso 1a.	72
Tabela 19 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1b.	75
Tabela 20 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1b.	76
Tabela 21 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1b.	77
Tabela 22 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1b.	77
Tabela 23 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ e $\vec{Z} = \{b\}$ - Caso 1b.	78
Tabela 24 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1c.	82
Tabela 25 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1c.	82
Tabela 26 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1c.	84
Tabela 27 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1c.	84
Tabela 28 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ e $\vec{Z} = \{b\}$ - Caso 1c.	85
Tabela 29 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados sem ruídos - Caso 2a.	89
Tabela 30 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 2a.	89
Tabela 31 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados sem ruídos - Caso 2a.	91
Tabela 32 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 2a.	91
Tabela 33 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ e $\vec{Z} = \{b\}$ - Caso 2a.	92

Tabela 34 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados sem ruídos - Caso 2b.	96
Tabela 35 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 2b.	97
Tabela 36 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados sem ruídos - Caso 2b.	98
Tabela 37 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 2b.	98
Tabela 38 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ e $\vec{Z} = \{b\}$ - Caso 2b.	99
Tabela 39 - Condições de contorno referente ao caso 3a - Problema 1	106
Tabela 40 - Condições de contorno referente ao caso 3b - Problema 1	106
Tabela 41 - Condições de contorno referente ao caso 3c - Problema 1	107
Tabela 42 - Condições de contorno - Problema 2	108
Tabela 43 - Valores para os parâmetros p_1 e p_2	108

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ED	Evolução Diferencial
FA	Firefly
GITT	Técnica da Transformada Integral Generalizada
LJM	Luus-Jaakola Modificado
MDF	Método de Diferenças Finitas
MEF	Método de Elementos Finitos
MVF	Método de Volumes Finitos

LISTA DE SÍMBOLOS

x	coordenada espacial
t	tempo
k_2	coeficiente de difusão
k_4	coeficiente de reatividade
β	fração de substância disponível para difusão
h	intervalo na malha na direção x
Δt	tamanho do passo de tempo
\vec{Z}	vetor de parâmetros
L	comprimento espacial
N_d	número de dados experimentais
$\phi(x, t)$	concentração de partículas
$\phi(x, t)^{exp}$	dados experimentais sintéticos
$\phi(x, t)^{calc}$	dados calculados pelo modelo
$Q(\vec{Z})$	função objetivo
g	termo fonte
c	parâmetro para condição de contorno
θ	parâmetro para condição inicial
p_0	parâmetro para condição inicial
τ_0	parâmetro para função β
σ	parâmetro para condição inicial
v	velocidade no termo advectivo
k_1	fator de escala
k_3	fator de escala
γ	parâmetro da função β
ϕ_0	parâmetro da função β
w_1	coeficiente do fluxo primário
w_2	coeficiente do fluxo secundário
L_0	fator de escala
L_1	fator de escala
T_0	fator de escala
A_2	coeficiente da equação diferencial
A_{22}	coeficiente da equação diferencial
A_4	coeficiente da equação diferencial
A_{44}	coeficiente da equação diferencial
a_{i-2}	coeficiente da equação diferencial
a_{i-1}	coeficiente da equação diferencial

a_i	coeficiente da equação diferencial
a_{i+1}	coeficiente da equação diferencial
a_{i+2}	coeficiente da equação diferencial
w_{10}	coeficiente da equação de contorno
w_{11}	coeficiente da equação de contorno
w_{12}	coeficiente da equação de contorno
w_{20}	coeficiente da equação de contorno
w_{21}	coeficiente da equação de contorno
w_{22}	coeficiente da equação de contorno
f_1	coeficiente da equação de contorno
f_2	coeficiente da equação de contorno
X	coeficiente de sensibilidade
a	coeficiente das funções β e k_4
b	coeficiente das funções β e k_4
λ	parâmetro característico
A	coeficiente da equação diferencial
A_1	coeficiente da equação diferencial
A_3	coeficiente da equação diferencial

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	19
1	MODELO BEVILACQUA-GALEÃO (BG) DE DIFUSÃO ANÔ- MALA	22
1.1	Modelo Bevilacqua-Galeão (BG) - Problema Direto	22
1.1.1	<u>Modelo com parâmetros constantes</u>	22
1.1.2	<u>Modelo com parâmetros variáveis</u>	26
1.1.3	<u>Modelo com fluxo de distribuição assimétrica</u>	29
1.1.4	<u>Modelo bidimensional</u>	30
1.2	Modelo Bevilacqua-Galeão (BG) - Problema Inverso	31
2	FORMULAÇÃO E SOLUÇÃO PARA O MODELO BEVILACQUA- GALEÃO (BG) - PROBLEMA DIRETO	42
2.1	Formulação matemática	42
2.2	Solução pelo Método de Diferenças Finitas	44
2.2.1	<u>Discretização para os nós internos usando o Método de Diferenças Finitas</u>	45
2.2.2	<u>Discretização para o contorno usando o Método de Diferenças Finitas</u>	47
3	FORMULAÇÃO E SOLUÇÃO PARA O MODELO BEVILACQUA- GALEÃO (BG) - PROBLEMA INVERSO	50
3.1	Descrição do Problema Inverso	50
3.2	Solução para o Problema Inverso utilizando Métodos Estocásticos	51
3.2.1	<u>Método Luus-Jaakola Modificado</u>	52
3.2.2	<u>Método Evolução Diferencial</u>	53
3.2.3	<u>Método Firefly</u>	55
3.3	Análise de Sensibilidade	56
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	58
4.1	Resultados para o Problema Direto	58
4.1.1	<u>Caso 1 - Fração de substância livre com variação espacial</u>	59
4.1.2	<u>Caso 2 - Coeficiente de reatividade com variação espacial</u>	63
4.2	Resultados para o Problema Inverso	66
4.2.1	<u>Caso 1 - Fração de substância livre com variação espacial</u>	67
4.2.2	<u>Caso 2 - Coeficiente de reatividade com variação espacial</u>	87
5	NOVAS FORMULAÇÕES	102
5.1	Discretização para os nós internos usando o Método de Diferen- ças Finitas	102
5.1.1	<u>Problema 1</u>	102
5.1.2	<u>Problema 2</u>	104
5.2	Resultados Numéricos - Problema 1	105

5.3	Resultados numéricos - Problema 2	107
	CONCLUSÕES	114
	REFERÊNCIAS	115

INTRODUÇÃO

Motivação

A difusão é um fenômeno comum na natureza e aparece em diversas formas, por exemplo, a difusão de elétrons em um campo elétrico, conhecida como a lei de Ohm. Outros fenômenos difusivos também podem ser observados na natureza, como a difusão do calor por meio de uma superfície ou mesmo na dispersão da população de uma determinada espécie. Fick, por sua vez estudava a dinâmica dos gases através de uma membrana líquida e, em 1885, introduziu a famosa lei que ficou conhecida como lei de difusão de Fick. Existe um interesse científico e tecnológico para o entendimento desses sistemas difusivos por abrangerem áreas como, por exemplo, biologia, quando estuda a dispersão de células cancerígenas no organismo ou mesmo em transporte de contaminantes em solos e rios.

De acordo com Carslaw (2015), a lei de Fick modela não somente a dinâmica dos gases mas também uma grande quantidade de fenômenos de transporte de partículas. A validade para a lei de Fick está na hipótese de que as partículas se movimentam livremente e de forma aleatória em um dado meio físico, permitindo o deslocamento ao longo da matéria que as contém.

Existem vários trabalhos na literatura sobre sistemas de difusão que não seguem o modelo proposto por Fick. Tais fenômenos são denominados de difusão anômala. Alguns autores realizam ajustes na equação diferencial de segunda ordem com a finalidade de simular um atraso na difusão com relação à teoria clássica. Atsumi (2002) para gerar um retardo na difusão, propôs incluir sumidouros e fontes na equação. D' Angelo et al. (2003) ajustaram o coeficiente de difusão a partir das medidas experimentais de um determinado problema.

Pode-se citar também Sancho et al. (2004) que apresentaram um estudo numérico da difusão de partículas em uma superfície sólida, no qual o movimento das partículas foi modelado por uma equação de Langevin subamortecida com ruído térmico comum. Jiang e Xu (2006) apresentaram uma análise teórica da difusão anômala fracionada causada por uma fonte pontual instantânea em meios fractais desordenados. Xiao et al. (2015) estudaram o transporte de drogas biologicamente ativas no cérebro e identificaram que o espaço extracelular é o principal caminho para o transporte dessas substâncias. Existe uma hipótese de que obstáculos para difusão dessas substâncias tenham origem na presença de microdomínios de espaço morto que podem reter transitoriamente moléculas em difusão.

Todos os trabalhos citados anteriormente mostram a importância de um modelo capaz de representar não só fenômenos puramente difusivos, mas também fenômenos

anômalos com atraso. Bevilacqua et al. (2011a, 2011b, 2013) apresentaram uma nova abordagem para o processo de difusão de partículas considerando efeitos de retenção. Nesta nova teoria, os pesquisadores consideram que as partículas se movimentam em dois subconjuntos distintos de energia. O primeiro subconjunto segue a lei clássica proposta por Fick e o segundo subconjunto segue uma nova lei de fluxo.

Objetivos Gerais

Como será visto no primeiro capítulo desta dissertação, alguns trabalhos foram publicados na área de difusão anômala, referentes ao modelo proposto por Bevilacqua e Galeão. Em geral, esses trabalhos tratam da formulação matemática e solução do modelo, conhecido como problema direto. Apresentando diferentes métodos e técnicas para soluções numéricas ou híbridas dessas equações.

A formulação e solução do problema inverso para o modelo Bevilacqua-Galeão (BG) foi pouco discutida na literatura, devido a sua recente proposição. Neste sentido, o presente trabalho se dedica em avançar na solução para o problema inverso, visando estimar a fração de substância livre, ou seja, o parâmetro $\beta(x)$, assim como estimar o coeficiente de reatividade, denotado por $k_4(x)$, ambos variando ao longo do domínio.

Será apresentada também uma análise de sensibilidade para cada parâmetro do modelo, seguido de suas estimativas. A solução do problema inverso será feita por meio da otimização de um funcional utilizando os métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado, Evolução Diferencial e Firefly.

Novas formulações foram propostas pelo professor Luiz Bevilacqua e alguns resultados numéricos para o problema direto, referente a essas novas equações, também serão apresentadas.

Objetivos Específicos

Visando alcançar o objetivo principal desse trabalho, foram definidos os seguintes objetivos específicos:

- obter soluções para o modelo Bevilacqua-Galeão (BG) unidimensional utilizando o Método de Diferenças Finitas, considerando os parâmetros com dependência espacial;
- obter a análise de sensibilidade para cada parâmetro do modelo;
- verificar a eficiência dos métodos Luus-Jaakola Modificado, Evolução Diferencial e Firefly para estimar os parâmetros $\beta(x)$ e $k_4(x)$;

- resolver o problema direto referente às novas formulações apresentadas pelo professor Luiz Bevilacqua.

Organização dos Capítulos

No primeiro capítulo é realizado um mapeamento dos trabalhos publicados sobre o modelo Bevilacqua-Galeão (BG) de difusão anômala proposto em 2011. Nele são apresentadas as equações diferenciais parciais usadas, assim como as condições iniciais, de contorno e também as equações para os parâmetros variáveis. Ao final do capítulo encontram-se tabelas que visam orientar o leitor com relação às equações utilizadas em cada trabalho que fez parte do mapeamento.

O capítulo 2 apresenta a formulação e solução para o problema direto referente ao modelo Bevilacqua-Galeão de difusão anômala. São apresentadas as hipóteses que permitiram aos autores propor uma equação de quarta ordem para o fenômeno difusivo. É mostrada a solução do modelo, usando o Método de Diferenças Finitas, considerando os parâmetros β e k_4 variando ao longo do domínio.

No terceiro capítulo é apresentada a formulação e solução para o problema inverso. O problema é formulado implicitamente como um problema de otimização, em que três métodos estocásticos são utilizados para a minimização de um funcional. Uma análise de sensibilidade dos parâmetros do modelo também é feita, algo muito importante na solução do problema inverso.

O capítulo 4 apresenta os resultados e discussões para o problema direto, assim como para o problema inverso, apresentando em tabelas as estimativas dos parâmetros do modelo para cada um dos métodos utilizados. Para a organização do capítulo, o mesmo está dividido em duas subseções para tratar cada um dos dois casos.

No capítulo 5 são apresentadas novas formulações sugeridas pelo professor Luiz Bevilacqua e alguns resultados numéricos são apontados.

Finalmente, são apresentadas as conclusões do trabalho até o momento e as perspectivas para trabalhos futuros.

1 MODELO BEVILACQUA-GALEÃO (BG) DE DIFUSÃO ANÔMALA

Existe na literatura um número considerável de trabalhos relacionados ao modelo Bevilacqua-Galeão (BG) de difusão anômala proposto por Bevilacqua et al. (2011a,b). Neste levantamento verificou-se dissertações, teses, capítulo de livro e artigos sobre o assunto, dentre eles pode-se citar Bevilacqua et al. (2013), (2016), Jiang et al. (2018), Silva et al. (2014), (2018), Lugon Jr. et al. (2018), (2020), Marinho et al. (2019), Vasconcellos et al. (2017), Simas (2013), entre outros.

O objetivo deste capítulo é fazer um mapeamento desses trabalhos apresentando as equações tratadas, as condições iniciais utilizadas, as condições de contorno, bem como os métodos utilizados na solução dos problemas direto e inverso. Vale ressaltar que o modelo proposto pelos autores em Bevilacqua et al. (2011a,b) está completando 10 anos. Isso significa que o tema é bem recente para ciência podendo ainda ser bastante explorado.

É importante salientar que diferentes métodos numéricos e híbridos foram utilizados para a solução da equação diferencial parcial que modela o fenômeno de difusão anômala. Nos trabalhos de Bevilacqua et al. (2013, 2016), Jiang et al. (2018) e Simas (2013) foi utilizado para a solução do modelo o Método de Elementos Finitos. Vasconcellos et al. (2017) e Marinho et al. (2019) usaram o Método de Volumes Finitos. Marinho et al. (2019) e Marinho (2019) usaram a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) e nos demais trabalhos foi utilizado o Método de Diferenças Finitas.

No final deste capítulo estão disponíveis algumas tabelas que visam orientar o leitor com relação às equações tratadas em cada trabalho, assim como as condições iniciais e de contorno utilizadas.

1.1 Modelo Bevilacqua-Galeão (BG) - Problema Direto

1.1.1 Modelo com parâmetros constantes

No trabalho de Bevilacqua et al. (2013) foram apresentados resultados para a equação diferencial Eq.(1), em uma dimensão, considerando os coeficientes β , k_2 e k_4 constantes:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \beta k_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \beta(1 - \beta)k_4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \quad (1)$$

no qual β é a fração de substância disponível para difusão, k_2 é o coeficiente de difusão, k_4 é o coeficiente de reatividade, x é a coordenada espacial, t o tempo e ϕ é a função con-

centração. Para a solução da Eq.(1), foram utilizadas as condições de contorno referentes aos casos (a), (b) e (c) da Tabela 1. Nesta Tabela 1 estão listadas todas as condições de contorno encontradas na literatura.

Tabela 1 - Condições de Contorno - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão de difusão anômala

	Lado esquerdo (x=0)	Lado direito (x=L)
Caso a	$\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial^3\phi(x,t)}{\partial x^3} = 0$	$\phi(x,t) = 0$ $\frac{\partial^2\phi(x,t)}{\partial x^2} = 0$
Caso b	$\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial^3\phi(x,t)}{\partial x^3} = 0$	$\frac{\partial^2\phi(x,t)}{\partial x^2} = c^{-2}\phi$ $\frac{\partial^3\phi(x,t)}{\partial x^3} = c^{-2}\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x}$
Caso c	$\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial^3\phi(x,t)}{\partial x^3} = 0$	$\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial^3\phi(x,t)}{\partial x^3} = 0$
Caso d	$\phi(x,t) = 0$ $\frac{\partial^2\phi(x,t)}{\partial x^2} = 0$	$\phi(x,t) = 0$ $\frac{\partial^2\phi(x,t)}{\partial x^2} = 0$
Caso e	$\phi(x,t) = 1$ $\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x} = 0$	$\phi(x,t) = 1$ $\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x} = 0$
Caso f	$\phi(x,t) = 0$ $\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x} = 0$	$\phi(x,t) = 0$ $\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x} = 0$
Caso g	$\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial^2\phi(x,t)}{\partial x^2} = 0$	$\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial^2\phi(x,t)}{\partial x^2} = 0$
Caso h	$\nabla\phi(x) = 0$ $\nabla^2(\beta\nabla\phi(x)) = 0$	$\nabla\phi(x) = 0$ $\nabla^2(\beta\nabla\phi(x)) = 0$
Caso i	$\nabla\phi(y) = 0$ $\nabla^2(\beta\nabla\phi(y)) = 0$	$\nabla\phi(y) = 0$ $\nabla^2(\beta\nabla\phi(y)) = 0$

Fonte: O autor, 2021

Neste trabalho, a Eq.(1) foi resolvida para três casos testes distintos e, para isso, foram consideradas as condições iniciais dadas pelas Eq.(2-4).

$$\phi(x, 0) = p_0 \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) \quad (2)$$

$$\phi(x, 0) = p_0 \cosh\left(\frac{x}{a}\right) \quad (3)$$

$$\phi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi\theta^2}} e^{-\frac{x^2}{\theta^2}} \quad (4)$$

O estudo realizado por Jiang et al. (2018) apresentou uma solução para a Eq.(1) considerando os parâmetros β , k_2 e k_4 constantes, utilizando como condição de contorno o caso (c) apresentado na Tabela 1. A condição inicial usada foi dada pela equação a seguir:

$$\phi(x, 0) = \begin{cases} e^{(-10x^2)} & \text{se } e^{(-10x^2)} \geq 0, 1 \\ 0, 1 & \text{se } x = e^{(-10x^2)} < 0, 1 \end{cases} \quad (5)$$

Silva et al. (2014) utilizaram os parâmetros constantes para a solução da Eq.(1), com as seguintes condições iniciais:

$$\phi(x, 0) = \text{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) \quad (6)$$

$$\phi(x, 0) = \text{sen}^{100} \left(\frac{\pi x}{L} \right) + 1 \quad (7)$$

e com as condições de contorno conforme apresentadas na Tabela 1, referentes aos casos (d) e (f).

Silva (2013), em sua dissertação, resolveu o problema direto utilizando duas condições iniciais, uma delas já foi apresentada pela Eq.(6) e a outra é representada pela seguinte equação:

$$\phi(x, 0) = 2\text{sen}^{100} \left(\frac{\pi x}{L} \right) + 1 \quad (8)$$

com as condições de contorno iguais aos casos (d) e (f), conforme apresentados na Tabela 1.

Em sua tese, Silva (2016) realizou um estudo numérico referente ao modelo de difusão anômala considerando uma distribuição simétrica, modelado pela Eq.(1). Neste mesmo trabalho foi desenvolvida uma solução para o modelo de difusão anômala considerando um fluxo com distribuição assimétrica e, por fim, foi investigado o modelo de fenômenos de transportes anômalos propostos em Bevilacqua et al. (2011a, 2011b). As equações referentes ao fluxo de distribuição assimétrica e de fenômenos de transporte anômalos serão apresentados posteriormente ainda neste capítulo. Foi realizada a solução para a Eq.(1) com a condição inicial dada pela Eq.(7) e condição de contorno (e) da Tabela 1.

No estudo realizado por Lugon Jr. et al. (2018) foi avaliado o segundo momento em

modelos de difusão anômala, utilizando o Deslocamento Quadrático Médio (MSD) com auxílio do software Wolfram Mathematica. Verificou-se neste trabalho que, dependendo dos parâmetros usados, ou do tempo considerado, o comportamento do fluxo pode ser superdifusivo ou subdifusivo. Os autores solucionaram a Eq.(1) aplicando a seguinte condição inicial:

$$\phi(x, t) |_{t=0} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (9)$$

com condição de contorno conforme apresentado na Tabela 1, referente ao caso (c).

Alguns trabalhos empregam as mesmas condições iniciais e de contorno para resolver o modelo de difusão anômala. Pode-se citar Silva et al. (2014a, 2014b, 2018), Silva (2013) e Simas (2013) que resolveram a Eq.(1) aplicando a condição inicial dada pela Eq.(8) com a condição de contorno referente ao caso (e) da Tabela 1.

Nos trabalhos de Lugon Jr. et al. (2018c, 2020c) foram adicionados um termo advectivo ao modelo proposto por Bevilacqua e Galeão para o fenômeno de difusão anômala, conforme Eq.(10).

$$\frac{\partial\phi(x, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial\phi}{\partial x} + k_2 \left[\frac{\partial\beta}{\partial x} \frac{\partial\phi(x, t)}{\partial x} + \beta \frac{\partial^2\phi(x, t)}{\partial x^2} \right] - k_4 \left[(1 - 2\beta) \frac{\partial\beta}{\partial x} \frac{\partial^3\phi(x, t)}{\partial x^3} \right] - k_4 \left[\beta(1 - \beta) \frac{\partial^4\phi(x, t)}{\partial x^4} \right] \quad (10)$$

Nestes trabalhos os parâmetros do modelo foram considerados constantes, as condições iniciais empregadas foram dadas pelas Eq.(6) e (7) com as condições de contorno representadas pelos casos (d) e (e) da Tabela 1.

Em sua dissertação, Marinho (2014) buscou uma solução numérica para equação de difusão anômala com distribuição de fluxo bimodal em regime estacionário. Ou seja, o termo dependente do tempo foi desconsiderado na Eq.(1), sendo assim, a equação passou a ter a seguinte forma:

$$\Gamma_{22} \frac{d^2\phi}{dx^2} - \Gamma_{44} \frac{d^4\phi}{dx^4} + B(x) = 0 \quad (11)$$

no qual $\Gamma_{22} = \beta k_2$ e $\Gamma_{44} = \beta(1 - \beta)k_4$.

Marinho (2019), em sua tese, resolveu as Eqs.(12) e (13) usando as Transformações Integrais para gerar benchmark para soluções numéricas, além da estimativa de termo fonte

com dependência espacial.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \beta k_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \beta(1 - \beta)k_4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + g(x, t) \quad (12)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \beta k_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \beta(1 - \beta)k_4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} - v \frac{\partial \phi}{\partial x} + g(x, t) \quad (13)$$

Para a solução das equações acima foram usadas as seguintes condições iniciais:

$$\phi(x, 0) = \text{sen}(\pi x)^4 + 1 \quad (14)$$

$$\phi(x, 0) = \text{sen}(\pi x) + 1 \quad (15)$$

aplicando, como condições de contorno, os casos (e) e (f) da Tabela 1.

1.1.2 Modelo com parâmetros variáveis

No estudo sobre difusão com retenção realizado por Bevilacqua et al. (2016), foi desenvolvida uma solução para a Eq.(16), no qual os parâmetros do modelo foram considerados variáveis, ou seja, β variando em função de t e o parâmetro k_4 variando em função do espaço. Sendo assim, a Eq.(1) precisou ser revista e passou a ter a seguinte forma:

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\beta k_2 \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\beta(1 - \beta)k_4 \frac{\partial^3 \phi(x, t)}{\partial x^3} \right] \quad (16)$$

Para a solução da equação acima foram considerados dois casos teste empregando as seguintes condições iniciais:

$$\phi(x, 0) = 0,25(1 + \cos(\pi x)) \quad (17)$$

$$\phi(x, 0) = 0,25(2 - \cos(\pi x)) \quad (18)$$

No primeiro caso foi aplicada a seguinte equação para representar $\beta(t)$:

$$\beta(t) = e^{\left(\frac{-t}{\tau_0}\right)^2} \quad (19)$$

No segundo caso foram usadas as seguintes equações para $k_4(x)$ e $\beta(t)$:

$$k_4(x) = \begin{cases} 0,008 & \text{se } -1 < x < 0 \\ 0,0008 + 80x & \text{se } 0 < x < 1 \end{cases} \quad (20)$$

$$\beta(t) = e^{\left(\frac{-\tau_0^2}{t^2}\right)} \quad (21)$$

As condições de contorno utilizadas neste artigo são referentes ao caso (c) da Tabela 1.

Jiang et al. (2018) resolveram a Eq.(16) considerando o parâmetro k_2 constante, k_4 variando no espaço e β variando em função de k_4 de acordo com as seguintes equações:

$$k_4(x) = 0,5e^{(-20(x-0,5)^2)} \quad (22)$$

$$\beta(k_4) = 1 - \frac{2k_4}{3(k_4)_0} \quad (23)$$

A condição inicial para o problema é dada pela Eq.(17) e a condição de contorno usada refere-se ao caso (c) da Tabela 1.

Em determinados casos específicos, a recente formulação de difusão proposta por Bevilacqua e Galeão apresentou valores negativos para a variável observada, no qual apenas valores positivos teriam o significado físico correto. Lugon Jr. et al. (2018a, 2018b, 2020, 2020a, 2020b) buscaram contribuir para melhorar o entendimento destas situações propondo uma variação nos valores do coeficiente β em função da variável observada. Tais estudos apresentam uma solução para a equação diferencial a seguir:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = k_2 \left[\frac{\partial \beta}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \beta \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right] - k_4 \left[(1 - 2\beta) \frac{\partial \beta}{\partial x} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + \beta(1 - \beta) \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right] \quad (24)$$

A função β variou em relação a ϕ de acordo com a seguinte equação:

$$\beta(\phi) = \beta_{max} - \frac{\beta_{max} - \beta_{min}}{1 + e^{-\gamma(\phi - \phi_0)}} \quad (25)$$

Em Lugon Jr. et al. (2020) o problema foi resolvido empregando como condição inicial a Eq.(9) e como condição de contorno o caso (g) da Tabela 1.

Já em Lugon Jr. et al. (2018a) foi aplicada como condição de contorno o caso (f) da Tabela 1 e utilizou-se como condição inicial a seguinte equação:

$$\phi(x, t) |_{t=0} = \left[\text{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) \right]^{100} \quad (26)$$

Lugon Jr. et al. (2020a, 2020b) resolveram a Eq.(24) considerando como condições iniciais as Eqs.(9) e (26) e condições de contorno os casos (d) e (g) da Tabela 1.

O termo de advecção foi novamente incorporado ao modelo de difusão anômala no trabalho de Lugon Jr. et al.(2018b), porém com β variando em função de ϕ conforme a Eq.(25). A equação diferencial parcial com termo de advecção, Eq.(10), já foi apresentada neste capítulo e tratada nos trabalhos de Lugon Jr. et al. (2018c, 2020c). Para solução da Eq.(10) foram utilizadas como condições iniciais as Eq.(6) e (26) e como condições de contorno os casos (d) e (f) referentes a Tabela 1.

Mattos et al.(2020, 2020a) resolveram a equação que modela o fenômeno de difusão anômala considerando a variação espacial da fração de substância livre, ou seja, da fração de substância disponível para difusão, representada como β . Buscou-se evidenciar a diferença no perfil de concentração das soluções ao comparar os resultados do modelo com β variável e β constante. Para isso foram apresentados diferentes de casos teste cuja solução numérica foi feita usando o Método de Diferenças Finitas.

Como β está variando no espaço, a Eq.(1) precisou ser revista tomando a seguinte forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = k_2 \left[\frac{\partial \beta}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \beta \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right] - \left[\left(\frac{\partial k_4}{\partial x} \beta (1 - \beta) + k_4 (1 - 2\beta) \frac{\partial \beta}{\partial x} \right) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + (k_4 \beta (1 - \beta)) \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right] \quad (27)$$

Aplicou-se como condição inicial a seguinte equação:

$$\phi(x, t) = 0,5(1 + \cos(\pi(x - 1))), \text{ com } 0 < x < L, \text{ para } t = 0 \quad (28)$$

A função β varia com relação à coordenada x da seguinte maneira:

$$\beta(x) = \log(x + 1) \quad (29)$$

e como condição de contorno foi utilizado o caso (f) da Tabela 1.

1.1.3 Modelo com fluxo de distribuição assimétrica

Silva et al.(2015) e Silva (2016) publicaram alguns resultados numéricos sobre difusão anômala considerando um fluxo com distribuição assimétrica, ou seja, o conteúdo em uma determinada célula irá migrar para as células vizinhas de forma assimétrica e que não exista retenção, conforme suposto em Bevilacqua et al. (2011b). Desta forma, tem-se então a seguinte equação que modela tal fenômeno:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = k_2(1 - \beta^2) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - k_1 \beta \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (30)$$

no qual $-1 \leq \beta \leq 1$. Para $\beta = 0$ o problema é reduzido à formulação clássica de difusão.

Para a solução da equação acima considerou-se os parâmetros do modelo constantes e foi utilizado como condição inicial a seguinte equação:

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } 2 < x < 4 \\ 0 & \text{se } x < 2 \\ 0 & \text{se } x > 4 \end{cases} \quad (31)$$

A condição de contorno foi dada pela seguinte equação:

$$\phi(0, t) = \phi(10, t) = 0 \quad (32)$$

Ainda em Bevilacqua et al. (2011b) foi proposta uma lei de distribuição que combina retenção com transferência de conteúdo para uma única célula localizada à direita ou à esquerda. Ou seja, a fração excedente do conteúdo de uma dada célula n , deixada após a retenção, é transferida para a célula $n + 1$ ou para a célula $n - 1$. Isso significa que o movimento tem uma direção preferencial. O modelo matemático que traduz esse

fenômeno é dado pela seguinte equação:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = k_3 \beta (1 - \beta) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \beta k_1 \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (33)$$

A solução para esta equação acima foi desenvolvida por Silva (2016) em sua tese, utilizando a condição inicial dada pela Eq.(7) e condição de contorno pela Tabela 1, referente ao caso (f).

1.1.4 Modelo bidimensional

Em alguns trabalhos foram desenvolvidas soluções para o modelo Bevilacqua-Galeão de difusão anômala em duas dimensões. Pode-se citar o trabalho desenvolvido por Jiang et al. (2018) que, entre outros resultados, apresentou a solução para a equação abaixo:

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = \nabla(\beta k_2 \nabla \phi) - \nabla((1 - \beta)k_4(\nabla(\beta \phi))) \quad (34)$$

Vale ressaltar que neste trabalho o parâmetro k_4 variou em função das coordenadas espaciais x e y , conforme equação abaixo:

$$k_4(x, y) = 5e^{(-20x^2 - 20y^2)} \quad (35)$$

As condições de contorno usadas neste artigo são dadas na Tabela 1, referente aos casos (h) e (i). A solução para a Eq.(34) foi realizada aplicando a seguinte condição inicial:

$$\phi(x, y, 0) = e^{-10x^2 - 10y^2} \quad (36)$$

Outros trabalhos que também apresentaram a solução para o modelo bidimensional foram Marinho et al. (2019) e Marinho (2019), que resolveram a equação diferencial abaixo com termo fonte e parâmetros constantes.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \beta k_2 \nabla^2 \phi - \beta(1 - \beta)k_4 \nabla^4 \phi + g(x, t) \quad (37)$$

Em Marinho et al. (2019), empregou-se como condição inicial a equação a seguir:

$$\phi(x, y, 0) = \text{sen}(k\pi x)\text{sen}(k\pi y) \quad (38)$$

Marinho (2019), em sua tese, resolveu a equação diferencial dada pela Eq.(37) utilizando as seguintes condições iniciais:

$$\phi(x, y, 0) = \text{sen}(\pi x)^2 \text{sen}(\pi y)^2 + 1 \quad (39)$$

$$\phi(x, y, 0) = \text{sen}(\pi x)\text{sen}(\pi y) \quad (40)$$

com condições de contorno conforme apresentada na Tabela 1, referente aos casos (e) e (g).

1.2 Modelo Bevilacqua-Galeão (BG) - Problema Inverso

Nos trabalhos de Silva et al. (2014, 2014a) realizou-se a solução do problema inverso em que o objetivo era estimar os parâmetros β , k_2 e k_4 do modelo de difusão anômala. O problema inverso foi resolvido usando o procedimento de máxima verossimilhança, que resulta numa função objetivo a ser minimizada por meio dos métodos Evolução Diferencial e o Algoritmo de Colisão de Partículas. Foi usada também a Inferência Bayesiana utilizando o método de Monte Carlo com Cadeias de Markov.

Para estimar os parâmetros γ , ϕ_0 e k_4 , Lugon Jr. et al. (2020) usaram o método de Recozimento Simulado. A estratégia adotada neste artigo se mostrou eficiente para estimar tais parâmetros, mesmo após os dados experimentais terem sido corrompidos com um ruído aleatório que adicionou 5% de imprecisão nos dados utilizados neste experimento.

Em Silva et al. (2014b) foi utilizada novamente a abordagem de máxima verossimilhança com o problema de minimização resolvido por meio do método de Levenberg-Marquardt. A estimativa dos intervalos de confiança foi realizada por meio da análise de Monte Carlo e os parâmetros estimados foram β e k_4 .

O Algoritmo de Otimização de Relâmpago (LOA) é uma heurística que faz analogia a um fenômeno natural e foi utilizado por Silva et al. (2018) para estimar novamente os parâmetros β , k_2 e k_4 do modelo de difusão com retenção. Neste trabalho foi aplicada uma solução em duas etapas visto a impossibilidade de se estimar os três parâmetros simultaneamente.

Silva (2013), em sua dissertação, resolveu o problema inverso utilizando métodos determinísticos e estocásticos. Para o método determinístico foi utilizado o Levenberg-Marquardt e para o método estocástico foram utilizados o Algoritmo de Colisão de Partículas (PCA) - *Particle Collision Algorithm* e Evolução Diferencial (DE) - *Differential Evolution*. As variáveis β , k_2 e k_4 foram estimadas separadamente, duas a duas e por fim as três foram estimadas juntas.

Silva (2016), em sua tese, realizou uma solução para o problema inverso utilizando os seguintes métodos estocásticos: PCA, DE, Algoritmo de Otimização Relâmpago (LOA) *Lighthouse Optimization Algorithm* e a abordagem Bayesiana empregando o Método de Monte Carlo com Cadeias de Markov. Para a distribuição simétrica foram estimados os parâmetros convencionais do modelo β , k_2 e k_4 , já para a distribuição assimétrica foram estimados os parâmetros k , k_1 e k_3 e para o modelo de fenômeno de transportes anômalos foram estimados os parâmetros ω_1 e ω_2 .

Outros métodos foram utilizados por Mattos et al. (2020a) para estimar os parâmetros do modelo. Neste trabalho β variou em função do espaço e para estimar $\beta(x)$ foi aplicado, além do método DE, os métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado e Firefly.

Marinho (2019), em sua tese, resolveu o problema inverso de reconstrução de termos fonte com variação espacial e temporal por meio de uma abordagem Bayesiana usando o Método de Monte Carlo com Cadeias de Markov.

Tabela 2 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Coeficientes Constantes

C. I. / Eq.		Equações Diferenciais Parciais				
		Eq. (1)	Eq. (10)	Eq. (12)	Eq. (13)	Eq. (16)
C. I.	Eq. (2)	Bevilacqua et al. (2013) C. C. Caso a P. D. Elementos Finitos	-	-	-	-
	Eq. (3)	Bevilacqua et al. (2013) C. C. Caso b P. D. Elementos Finitos	-	-	-	-
	Eq. (4)	Bevilacqua et al. (2013) C. C. Caso c P. D. Elementos Finitos	-	-	-	-
	Eq. (5)	Jiang et al. (2018) C. C. Caso c P. D. Elementos Finitos	-	-	-	-
	Eq. (6)	Silva et al. (2014) C. C. Caso d P. D. Diferenças Finitas	Lugon Jr. et al. (2018c) C. C. Caso d P. D. Diferenças Finitas	-	-	-
		Silva (2013) C. C. Caso d P. D. Diferenças Finitas	Lugon Jr. et al. (2018c) C. C. Caso e P. D. Diferenças Finitas	-	-	-
-		Lugon Jr. et al. (2020c) C. C. Caso e P. D. Diferenças Finitas	-	-	-	

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 3 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Coeficientes Constantes

C. I. / Eq.		Equações Diferenciais Parciais				
		Eq. (1)	Eq. (10)	Eq. (12)	Eq. (13)	Eq. (16)
C. I.	Eq. (7)	Silva et al. (2014) C. C. Caso f P. D. Elementos Finitos	Lugon Jr. et al. (2020c) C. C. Caso e P. D. Elementos Finitos	-	-	-
		Silva (2016) C. C. Caso e P. D. Elementos Finitos	-	-	-	-
	Eq. (8)	Silva (2013) C. C. Caso f P. D. Elementos Finitos	-	-	-	-
		Silva et al. (2014a) C. C. Caso e P. D. Elementos Finitos	-	-	-	-
		Silva et al. (2014b) C. C. Caso e P. D. Diferenças Finitas	-	-	-	-
		Silva (2018) C. C. Caso e P. D. Diferenças Finitas	-	-	-	-
		Simas (2013) C. C. Caso e P. D. Elementos Finitos	-	-	-	-

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 4 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Coeficientes Constantes

C. I. / Eq.		Equações Diferenciais Parciais				
		Eq. (1)	Eq. (10)	Eq. (12)	Eq. (13)	Eq. (16)
C. I.	Eq. (9)	Lugon Jr. et al. (2018) C. C. Caso c P. D. Diferenças Finitas	-	-	-	-
	Eq. (14)	-	-	Marinho (2019) C. C. Caso e P. D. GITT e Volumes Finitos	-	-
	Eq. (15)	-	-	-	Marinho (2019) C. C. Caso e P. D. GITT e Volumes Finitos	-
	Eq. (17)	-	-	-	-	-

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 5 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Coeficientes Variáveis

		Equações Diferenciais Parciais				
C. I. / Eq.		Eq. (10)	Eq. (16)	Eq. (24)	Eq. (27)	Eq. (32)
C. I.	Eq. (6)	Lugon Jr. et al. (2018b) C. C. Caso d $\beta(\phi)$ - Eq.(25) P. D. Diferenças Finitas	-	-	-	-
	Eq. (9)	-	-	Lugon Jr. et al. (2020) C. C. Caso g $\beta(\phi)$ - Eq.(25) P. D. Diferenças Finitas	-	-
		-	-	Lugon Jr. et al. (2020a) C. C. Caso d $\beta(\phi)$ - Eq.(25) P. D. Diferenças Finitas	-	-
	Eq. (17)	-	Bevilacqua et al. (2016) C. C. Caso c $\beta(t)$ - Eq.(19) P. D. Elementos Finitos	-	-	-
		-	Jiang et al. (2018) C. C. Caso c $k_4(x)$ e $\beta(k_4)$ - Eq.(22) e Eq.(23) P. D. Elementos Finitos	-	-	-
	Eq. (18)	-	Bevilacqua et al. (2016) C. C. Caso c $k_4(x)$ e $\beta(t)$ - Eq.(20) e Eq.(21) P. D. Elementos Finitos	-	-	-

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 6 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Coeficientes Variáveis

C. I. / Eq.		Equações Diferenciais Parciais				
		Eq. (10)	Eq. (16)	Eq. (24)	Eq. (27)	Eq. (32)
C. I.	Eq. (26)	Lugon Jr. et al. (2018b) C. C. Caso f $\beta(\phi)$ - Eq.(25) P. D. Diferenças Finitas	-	Lugon Jr. et al. (2018a) C. C. Caso f $\beta(\phi)$ - Eq.(25) P. D. Diferenças Finitas	-	-
		-	-	Lugon Jr. et al. (2020b) C. C. Caso g $\beta(\phi)$ - Eq.(25) P. D. Diferenças Finitas	-	-
	Eq. (28)	-	-	-	Mattos et al. (2020) C. C. Caso f $\beta(x)$ - Eq.(29) P. D. Diferenças Finitas	-
		-	-	-	Mattos et al. (2020a) C. C. Caso f $\beta(x)$ - Eq.(29) P. D. Diferenças Finitas	-
	Eq. (33)	-	-	-	-	-
		-	-	-	-	-

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 7 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Distribuição Assimétrica

C. I. / Eq.		Equações Diferenciais Parciais	
		Eq. (30)	Eq. (33)
C. I.	Eq. (31)	Silva et al. (2015) C. C. Eq. (32) P. D. Diferenças Finitas	-
	Eq. (7)	Silva (2016) C. C. Caso f P. D. Diferenças Finitas	Silva (2016) C. C. Caso f P. D. Diferenças Finitas

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 8 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Problema Inverso

		Equações Diferenciais Parciais					
C. I. / Eq.		Eq. (1)	Eq. (12)	Eq. (13)	Eq. (26)	Eq. (29)	Eq. (34)
C. I.	Eq. (6)	Silva et al. (2014) C. C. Caso d P. Estimados (β , k_2 e k_4) ED, PCA e Inferência Bayesiana	-	-	-	-	-
		Silva (2013) C. C. Caso d P. Estimados (β , k_2 e k_4) LM, PCA e DE	-	-	-	-	-
	Eq. (7)	Silva (2016) C. C. Caso e P. Estimados (β , k_2 e k_4) PCA, DE, LOA e Inferência Bayesiana	-	-	-	-	Silva (2016) C. C. Caso f P. Estimados (k , k_1 e k_3) PCA, DE, LOA e Inferência Bayesiana
	Eq. (8)	Silva et al. (2014a) C. C. Caso e P. Estimados (β , k_2 e k_4) PCA, DE e Inferência Bayesiana	-	-	-	-	-
		Silva et al. (2014b) C. C. Caso e P. Estimados (β e k_4) LM	-	-	-	-	-
		Silva et al. (2018) C. C. Caso e P. Estimados (β , k_2 e k_4) LOA	-	-	-	-	-

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 9 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Problema Inverso

C. I. / Eq.		Equações Diferenciais Parciais					
		Eq. (1)	Eq. (12)	Eq. (13)	Eq. (26)	Eq. (29)	Eq. (34)
C. I.	Eq. (8)	Silva (2013) C. C. Caso e (β , k_2 e k_4) LM, PCA e DE	-	-	-	-	-
	Eq. (9)	Silva et al. (2018) C. C. Caso c (β , k_2 e k_4) LOA	-	-	Lugon Jr. et al. (2020) C. C. Caso g (γ , ϕ_0 e k_4) Recozimento Simulado	-	-
	Eq. (14)	-	Marinho (2019) C. C. Caso e (Termos Fonte) Inferência Bayesiana	-	-	-	-
	Eq. (15)	-	-	Marinho (2019) C. C. Caso e (Termos Fonte) Inferência Bayesiana	-	-	-
	Eq. (30)	-	-	-	-	Mattos et al. (2020a) C. C. Caso f ($\beta(x)$) DE, LJM e FA	-

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 10 - Mapeamento do modelo Bevilacqua-Galeão - Bidimensional

C. I. / Eq.		Equações Diferenciais Parciais	
		Eq. (34)	Eq. (37)
C. I.	Eq. (36)	Jiang et al. (2018) C. C. Caso h $k_4(x, y)$ - Eq.(35) P. D. Elementos Finitos	-
		Jiang et al. (2018) C. C. Caso i $k_4(x, y)$ - Eq.(35) P. D. Elementos Finitos	-
	Eq. (38)	-	Marinho et al. (2019) C. C. Eq.(43) e Eq.(44) P. D. GITT e Volumes Finitos
	Eq. (39)	-	Marinho (2019) C. C. Caso e P. D. GITT e Volumes Finitos
	Eq. (40)	-	Marinho (2019) C. C. Caso g P. D. GITT e Volumes Finitos

Fonte: O autor, 2021.

2 FORMULAÇÃO E SOLUÇÃO PARA O MODELO BEVILACQUA-GALEÃO (BG) - PROBLEMA DIRETO

A finalidade deste capítulo é apresentar a formulação e a solução do problema direto para o modelo Bevilacqua-Galeão (BG) de difusão anômala com distribuição simétrica, proposto por Bevilacqua et al. (2011a, 2011b, 2013). Para solução das equações usou-se o Método de Diferenças Finitas fazendo primeiro a discretização para os nós internos da malha e depois foram tratadas as equações para o contorno.

De acordo com Marinho (2019) as equações de difusão anômala geralmente não possuem soluções analíticas, sendo necessário para sua solução o uso de métodos numéricos ou híbridos. Junto ao Método de Diferenças Finitas (MDF), os métodos numéricos mais empregados para solução de equações diferenciais são: Método de Volumes Finitos (MVF) e o Método de Elementos Finitos (MEF). Ambos possuem em comum a discretização do domínio transformando a equação diferencial em um problema discreto com um número finito de variáveis.

2.1 Formulação matemática

De acordo com Bevilacqua et al.(2013), a difusão de partículas modelado pela lei de Fick com coeficiente de difusão constante, é apenas satisfatório para processos físico-químicos muito simples.

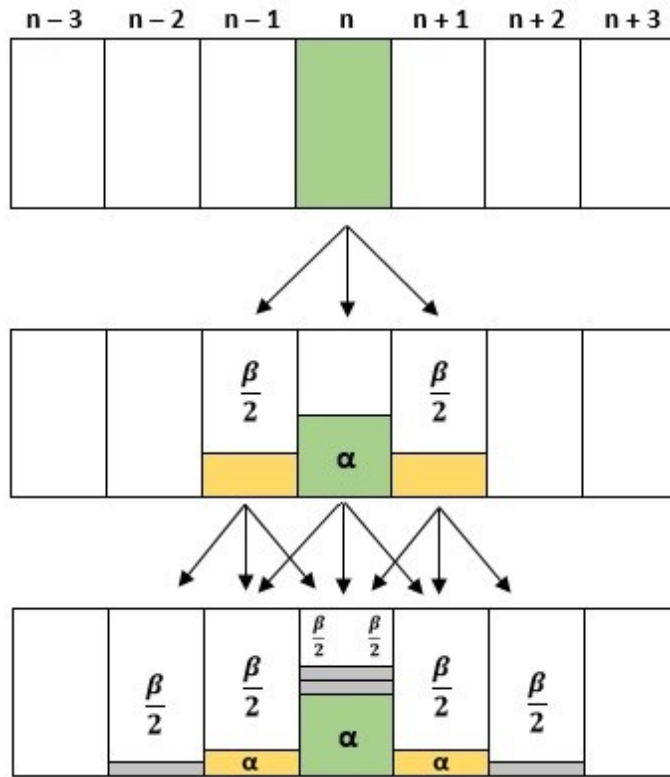
Equações fracionárias foram propostas por Kurzynski et al. (1998), Mainardi et al. (1996) e Scherer et al. (2008), para representar os fenômenos de difusão que apresentavam algum tipo de anomalia, como atraso, por exemplo.

Bevilacqua et al. (2011a, 2011b, 2013) apresentaram uma nova abordagem para o processo de difusão de partículas considerando efeitos de retenção. Nesta nova teoria os pesquisadores consideram que as partículas se movimentam em dois subconjuntos distintos de energia. O primeiro subconjunto segue a lei clássica proposta por Fick e o segundo subconjunto segue uma nova lei de fluxo. Nesta nova abordagem um termo diferencial de quarta ordem é introduzido.

A teoria foi fundamentada levando-se em consideração a dinâmica de populações, em que uma espécie invasora explora uma determinada região com a finalidade de colonizar o território conquistado. De acordo com Bevilacqua et al. (2013), na Figura 1 é representado o processo de transferência das espécies entre uma célula e outra. Uma quantidade β das espécies contidas na célula n é simetricamente distribuída para as células vizinhas $n + 1$ e $n - 1$. Cada célula possuirá então $\beta/2$ da população inicialmente contida na célula n . Parte da população $\alpha = (1 - \beta)$ fica retido temporariamente na célula

n .

Figura 1 - Distribuição simétrica com retenção



Fonte: Adaptado de Bevilacqua e Galeão 2011b

A regra acima pode ser algebricamente traduzida pelas seguintes equações:

$$\phi_n^t = (1 - \beta)\phi_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta\phi_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta\phi_{n+1}^{t-1} \quad (41)$$

$$\phi_n^t = (1 - \beta)\phi_n^t + \frac{1}{2}\beta\phi_{n-1}^t + \frac{1}{2}\beta\phi_{n+1}^t \quad (42)$$

Reorganizando as Eq.(41) e (42) e usando a seguinte igualdade $\delta\phi_n^{t+1} = \phi_n^{t+1} - \phi_n^t$ chega-se a seguinte expressão:

$$\frac{\Delta\phi_n^{t+\Delta t}}{\Delta t} = \beta \left\{ \frac{1}{2} \frac{L_0^2}{T_0} \frac{\Delta^2\phi_n}{\Delta x^2} + \frac{O(\Delta x^2)}{\Delta x^2} - (1 - \beta) \frac{1}{4} \frac{L_1^4}{T_0} \frac{\Delta^4\phi_n}{\Delta x^4} \right\}^{t-\Delta t} \quad (43)$$

Denominando $k_2 = L_0^2/2T_0$ e $k_4 = L_1^4/4T_0$ e tomando os limites $\Delta x \rightarrow 0$ e $\Delta t \rightarrow 0$

se obtém a seguinte equação:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \beta k_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \beta(1 - \beta)k_4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \quad (44)$$

A equação acima é o modelo proposto pelos autores para o fenômeno de difusão em uma dimensão.

Um dos objetivos desse trabalho é tratar a Eq.(44) com os parâmetros β e k_4 variando no espaço. Logo, a equação acima passa ter a seguinte forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = k_2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\beta \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(k_4 \beta (1 - \beta) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right) \quad (45)$$

Utilizando a regra da cadeia, temos:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = k_2 \left(\frac{\partial \beta}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \beta \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) - \left(\left(\frac{\partial k_4}{\partial x} \beta (1 - \beta) + k_4 (1 - 2\beta) \frac{\partial \beta}{\partial x} \right) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + (k_4 \beta (1 - \beta)) \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right) \quad (46)$$

Para a solução da Eq.(46) foi empregada a seguinte condição inicial:

$$\phi(x, t) = 0,5(1 + \cos(\pi(x - 1))), \text{ com } 0 < x < 2, \text{ para } t = 0 \quad (47)$$

com as seguintes condições de contorno:

Tabela 11 - Condições de Contorno - Casos 1 e 2

	Lado esquerdo (x=0)	Lado direito (x=2)
C.C.1	$\phi(x) = 0$	$\phi(x) = 0$
C.C.2	$\frac{\partial \phi(x)}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi(x)}{\partial x} = 0$

Fonte: O autor, 2021.

2.2 Solução pelo Método de Diferenças Finitas

A discretização matemática usando o Método de Diferenças Finitas consiste na troca dos termos diferenciais da equação por aproximações utilizando as expansões em séries de Taylor, reduzindo a equação diferencial em um sistema de equações lineares.

Lugon Jr. et al. (2020c) afirmam que a solução para a equação de difusão de Fick

usando o Método de Diferenças Finitas já está legitimada e provavelmente é o método numérico mais empregado para esse tipo de situação. Porém, esta afirmação não pode ser feita quando um termo com uma derivada de quarta ordem aparece na equação. Os autores garantem que os modelos usados para fenômenos de transporte raramente usam derivadas dessa ordem.

2.2.1 Discretização para os nós internos usando o Método de Diferenças Finitas

Para solução da Eq.(46) por meio do Método de Diferenças Finitas foi utilizado uma divisão no domínio em N pontos, ou seja, foram gerados então $N - 1$ intervalos igualmente espaçados, denominados h . As discretizações para os nós internos serão feitas nessa subseção, e na próxima, será feita a discretização para o contorno. Como as equações tratadas nessa dissertação são de quarta ordem, a solução das mesmas demandam quatro condições de contorno.

Para esta dissertação foram utilizadas as seguintes aproximações para as derivadas parciais que aparecem no modelo:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{x_i, t+\Delta t} \cong \frac{\phi_i^{t+\Delta t} - \phi_i^t}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (48)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{x_i} \cong \frac{\phi_{i-2}^n - 8\phi_{i-1}^n + 8\phi_{i+1}^n - \phi_{i+2}^n}{12h} + O(h^4) \quad (49)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{x_i} \cong \frac{-\phi_{i-2}^n + 16\phi_{i-1}^n - 30\phi_i^n + 16\phi_{i+1}^n - \phi_{i+2}^n}{12h^2} + O(h^4) \quad (50)$$

$$\left. \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right|_{x_i} \cong \frac{-\phi_{i-2}^n + 2\phi_{i-1}^n - 2\phi_{i+1}^n + \phi_{i+2}^n}{2h^3} + O(h^2) \quad (51)$$

$$\left. \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right|_{x_i} \cong \frac{\phi_{i-2}^n - 4\phi_{i-1}^n + 6\phi_i^n - 4\phi_{i+1}^n + \phi_{i+2}^n}{h^4} + O(h^2) \quad (52)$$

no qual h é o espaçamento entre os pontos da malha igualmente espaçados e x_i é a coordenada do i -ésimo nó.

Como dito anteriormente, um dos objetivos desta dissertação é a solução do pro-

blema inverso referente ao modelo Bevilacqua-Galeão de difusão anômala. Ou seja, será realizada a estimativa dos parâmetros para as funções $\beta(x)$ e $k_4(x)$ e, para isso, é necessária a solução da Eq.(46).

Sendo assim, pode-se reescrever a Eq.(46) da seguinte maneira:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = A_2 \frac{\partial \phi}{\partial x} + A_{22} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + A_4 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + A_{44} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \quad (53)$$

em que

$$A_2 = k_2 \frac{\partial \beta}{\partial x} \quad (54)$$

$$A_{22} = k_2 \beta \quad (55)$$

$$A_4 = -\frac{\partial k_4}{\partial x} \beta (1 - \beta) - k_4 (1 - 2\beta) \frac{\partial \beta}{\partial x} \quad (56)$$

$$A_{44} = -k_4 \beta (1 - \beta) \quad (57)$$

Para esta dissertação foi empregada a formulação implícita pelo fato de ser incondicionalmente estável. A interpolação no tempo adotada foi $\phi^n = \phi^{t+\Delta t}$.

Trocando os termos diferenciais que aparecem na Eq.(53) pelas aproximações da série de Taylor dadas pelas Eqs.(48-52) e após algumas manipulações algébricas, chega-se a seguinte equação discretizada para os nós internos:

$$a_{i-2} \phi_{i-2}^{t+\Delta t} + a_{i-1} \phi_{i-1}^{t+\Delta t} + a_i \phi_i^{t+\Delta t} + a_{i+1} \phi_{i+1}^{t+\Delta t} + a_{i+2} \phi_{i+2}^{t+\Delta t} = S_i \quad (58)$$

em que

$$a_{i-2} = -A_2 h^3 \Delta t + A_{22} h^2 \Delta t + 6A_4 h \Delta t - 12A_{44} \Delta t \quad (59)$$

$$a_{i-1} = 8A_2h^3\Delta t - 16A_{22}h^2\Delta t - 12A_4h\Delta t + 48A_{44}\Delta t \quad (60)$$

$$a_i = 12h^4 + 30A_{22}h^2\Delta t - 72A_{44}\Delta t \quad (61)$$

$$a_{i+1} = -8A_2h^3\Delta t - 16A_{22}h^2\Delta t + 12A_4h\Delta t + 48A_{44}\Delta t \quad (62)$$

$$a_{i+2} = A_2h^3\Delta t + A_{22}h^2\Delta t - 6A_4h\Delta t - 12A_{44}\Delta t \quad (63)$$

$$S_i = 12\Delta t^4\phi_i^t \quad (64)$$

Na Eq.(58), fazendo $i = 3, 4, \dots, N-2$ são geradas $N-4$ equações. Como o domínio foi dividido em N nós, para a solução do sistema linear são necessárias ainda mais quatro equações, visto que no sistema linear existem N incógnitas. Essas equações serão dadas pelas condições de contorno.

2.2.2 Discretização para o contorno usando o Método de Diferenças Finitas

Para fazer a discretização dos nós de contorno foi usada a mesma metodologia vista em Lugon Jr. et al. (2020c). Ou seja, novas expansões em séries de Taylor foram feitas para os dois primeiros nós usando diferenças progressivas. Essas expansões também foram feitas para os dois últimos nós da malha empregando diferenças regressivas.

Dessa forma, se obteve as seguintes expressões para as derivadas de primeira e segunda ordem:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{x_1} = -\frac{25\phi_1}{12h} + \frac{4\phi_2}{h} - \frac{3\phi_3}{h} + \frac{4\phi_4}{3h} - \frac{\phi_5}{4h} \quad (65)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{x_1} = \frac{35\phi_1}{12h^2} - \frac{26\phi_2}{3h^2} + \frac{19\phi_3}{2h^2} - \frac{14\phi_4}{3h^2} + \frac{11\phi_5}{12h^2} \quad (66)$$

Como o modelo de difusão apresentado por Bevilacqua e Galeão possui uma derivada de quarta ordem, é necessário definir quatro condições de contorno. Para definir a primeira condição de contorno em $x = 0$, foi utilizada a seguinte equação:

$$w_{10}\phi(x = 0, t + \Delta t) + w_{11} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{x=0, t+\Delta t} + w_{12} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{x=0, t+\Delta t} = f_1(x = 0, t + \Delta t) \quad (67)$$

em que w_{10} , w_{11} , w_{12} e f_1 são valores previamente conhecidos. Por exemplo, se a condição de contorno em $x = 0$ indicar que a derivada primeira é igual a zero, então $w_{10} = 0$, $w_{11} = 1$, $w_{12} = 0$ e $f_1(x = 0, t + \Delta t) = 0$.

Usando as expansões em série de Taylor dadas pelas Eq.(65) e (66) na Eq.(67), e após algumas manipulações algébricas, tem-se a equação para o primeiro nó do domínio:

$$\begin{aligned} \left(w_{10} - \frac{25}{12h}w_{11} + \frac{35}{12h^2}w_{12} \right) \phi_1^{t+\Delta t} &= \left(-\frac{4}{h}w_{11} + \frac{26}{3h^2}w_{12} \right) \phi_2^{t+\Delta t} + \left(\frac{3}{h}w_{11} - \frac{19}{2h^2}w_{12} \right) \phi_3^{t+\Delta t} \\ &+ \left(-\frac{4}{3h}w_{11} + \frac{14}{3h^2}w_{12} \right) \phi_4^{t+\Delta t} + \left(\frac{1}{4h}w_{11} - \frac{11}{12h^2}w_{12} \right) \phi_5^{t+\Delta t} \end{aligned} \quad (68)$$

De forma semelhante ao que foi feito para a primeira condição de contorno, a segunda condição em $x = 0$ terá a seguinte equação:

$$w_{20}\phi(x = 0, t + \Delta t) + w_{21} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{x=0, t+\Delta t} + w_{22} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{x=0, t+\Delta t} = f_2(x = 0, t + \Delta t) \quad (69)$$

em que w_{20} , w_{21} , w_{22} e f_2 são valores previamente conhecidos. Usando as expansões em série de Taylor empregando os cinco primeiros nós do domínio dadas pelas Eq.(65) e (66) na Eq.(69), e após algumas manipulações algébricas, tem-se a equação para o segundo nó do domínio:

$$\begin{aligned} \left(\frac{4}{h}w_{21} - \frac{26}{3h^2}w_{22} \right) \phi_2^{t+\Delta t} &= \left(-w_{20} + \frac{25}{12h}w_{21} - \frac{35}{12h^2}w_{22} \right) \phi_1^{t+\Delta t} + \left(\frac{3}{h}w_{21} - \frac{19}{2h^2}w_{22} \right) \phi_3^{t+\Delta t} \\ &+ \left(-\frac{4}{3h}w_{21} + \frac{14}{3h^2}w_{22} \right) \phi_4^{t+\Delta t} + \left(\frac{1}{4h}w_{21} - \frac{11}{12h^2}w_{22} \right) \phi_5^{t+\Delta t} \end{aligned} \quad (70)$$

Para informar as condições de contorno em $x = L$ foi adotado o mesmo procedi-

mento para o contorno em $x = 0$, ou seja, foi usada a seguinte equação:

$$e_{10}\phi(x = L, t + \Delta t) + e_{11} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{x=L, t+\Delta t} + e_{12} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{x=L, t+\Delta t} = f_3(x = L, t + \Delta t) \quad (71)$$

em que e_{10} , e_{11} , e_{12} e f_3 são valores previamente conhecidos. Usando as expansões em série de Taylor empregando os cinco últimos nós do domínio dada pelas Eq.(65) e (66) na Eq.(71), e após algumas manipulações algébricas, temos a equação para o último nó do domínio:

$$\begin{aligned} \left(e_{10} + \frac{25}{12h}e_{11} + \frac{35}{12h^2}e_{12} \right) \phi_N^{t+\Delta t} &= \left(\frac{4}{h}e_{11} + \frac{26}{3h^2}e_{12} \right) \phi_{N-1}^{t+\Delta t} + \left(-\frac{3}{h}e_{11} - \frac{19}{2h^2}e_{12} \right) \phi_{N-2}^{t+\Delta t} \\ &+ \left(\frac{4}{3h}e_{11} + \frac{14}{3h^2}e_{12} \right) \phi_{N-3}^{t+\Delta t} + \left(-\frac{1}{4h}e_{11} - \frac{11}{12h^2}e_{12} \right) \phi_{N-4}^{t+\Delta t} \end{aligned} \quad (72)$$

De forma semelhante ao que foi feito para a primeira condição de contorno, a segunda condição em $x = 2$ terá a seguinte equação:

$$e_{20}\phi(x = L, t + \Delta t) + e_{21} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{x=L, t+\Delta t} + e_{22} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{x=L, t+\Delta t} = f_4(x = L, t + \Delta t) \quad (73)$$

em que e_{20} , e_{21} , e_{22} e f_4 são valores previamente conhecidos. Usando as expansões em série de Taylor empregando os cinco últimos nós do domínio dada pelas Eq.(65) e (66) na Eq.(73), e após algumas manipulações algébricas, temos a equação para o penúltimo nó do domínio:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{4}{h}e_{21} - \frac{26}{3h^2}e_{22} \right) \phi_{N-1}^{t+\Delta t} &= \left(-e_{20} - \frac{25}{12h}e_{21} - \frac{35}{12h^2}e_{22} \right) \phi_N^{t+\Delta t} + \left(-\frac{3}{h}e_{21} - \frac{19}{2h^2}e_{22} \right) \phi_{N-2}^{t+\Delta t} \\ &+ \left(\frac{4}{3h}e_{21} + \frac{14}{3h^2}e_{22} \right) \phi_{N-3}^{t+\Delta t} + \left(-\frac{1}{4h}e_{21} - \frac{11}{12h^2}e_{22} \right) \phi_{N-4}^{t+\Delta t} \end{aligned} \quad (74)$$

3 FORMULAÇÃO E SOLUÇÃO PARA O MODELO BEVILACQUA-GALEÃO (BG) - PROBLEMA INVERSO

Um dos objetivos dessa dissertação é a formulação e solução do problema inverso referente ao modelo Bevilacqua-Galeão (BG) para estimativa da fração de substância livre, ou seja, da fração de substância disponível para difusão, representada como $\beta(x)$ e também para estimação de $k_4(x)$ denominado coeficiente de reatividade. É apresentada também uma ferramenta muito importante para esta abordagem, a análise de sensibilidade.

No capítulo anterior foi abordado o Método de Diferenças Finitas para a solução do problema direto referente ao modelo Bevilacqua-Galeão (BG). Neste capítulo será utilizada uma formulação implícita para o problema inverso por meio da minimização de um funcional usando os métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado (LJM), Evolução Diferencial (DE) e o Firefly (FA). A descrição de cada método será apresentada nas seções a seguir.

3.1 Descrição do Problema Inverso

Visando entender o comportamento de um determinado sistema para diferentes condições é que se realiza a estimativa dos parâmetros de um modelo teórico, que são ajustados comparando com os dados experimentais. Essa busca do ajuste dos parâmetros de um modelo é denominada problema inverso.

Conhecer *a priori* todos os parâmetros de um determinado modelo nem sempre é possível e sem o conhecimento da relação entre essas variáveis fica inviável usar o modelo matemático para cálculos numéricos. Porém, utilizando algumas técnicas é possível estimar tais parâmetros ajustando aos dados experimentais conhecidos.

Ozisik et al. (2000) destaca a importância da abordagem inversa como ferramenta computacional para estimativa de parâmetros com propriedades termo físicas, químicas, mecânicas, condições de contorno e iniciais.

Em geral, os problemas de estimação de parâmetros levam a minimização de um funcional que compara os dados experimentais com os dados obtidos pelos modelos teóricos. Sendo assim, o emprego de métodos determinísticos, métodos estocásticos e/ou métodos híbridos para a minimização da função objetivo passa a ser o foco para a solução desses problemas, afirma Silva et al. (2009).

Para estimar os parâmetros do modelo de difusão proposto por Bevilacqua e Galeão, Lugon Jr. et al. (2020) usaram o método de Recozimento Simulado. A estratégia adotada neste artigo se mostrou eficiente para estimar tais parâmetros, mesmo após os dados experimentais terem sido corrompidos com um ruído aleatório que adicionou 5%

de imprecisão nos dados utilizados neste experimento.

Em Silva et al. (2014b) foi utilizado a abordagem de máxima verossimilhança com o problema de minimização resolvido por meio do método Levenberg-Marquardt. A estimativa dos intervalos de confiança foi realizada através da análise de Monte Carlo e os parâmetros estimados foram β e k_4 .

3.2 Solução para o Problema Inverso utilizando Métodos Estocásticos

Em geral os problemas inversos são formulados e solucionados por meio da minimização de um funcional que calcula a soma dos resíduos quadrados entre os dados experimentais de uma variável observada e dos valores calculados a partir do modelo que a descreve.

Considere um fenômeno de difusão anômala descrito pela Eq.(46), em que as funções $\beta(x)$ e $k_4(x)$ são desconhecidos, mas que existam valores experimentais para uma determinada variável observada $\phi(x, t)$. Neste caso o objetivo é determinar os valores de $\beta(x)$ e $k_4(x)$ representados pelo vetor $\vec{Z} = \{\beta(x), k_4(x)\}$ tal que o funcional $Q(\vec{Z})$ dado pela Eq.(75) seja o menor possível.

$$Q(\vec{Z}) = \sum_{i=1}^{N_d} [\phi(x, t)_i^{calc}(\vec{Z}) - \phi(x, t)_i^{exp}(\vec{Z})]^2 \quad (75)$$

No qual N_d é o número de dados experimentais disponíveis, $\phi(x, t)_i^{calc}$ é o valor calculado da variável ϕ usando a Eq.(46), $\phi(x, t)_i^{exp}$ é o valor da variável observável de forma experimental. Essa formulação é conhecida como formulação implícita, pois as incógnitas do problema não aparecem explicitamente na Eq.(75).

Como dados experimentais reais para o modelo de difusão anômala não estão disponíveis na literatura, dados experimentais sintéticos foram gerados por meio da solução da Eq.(46). Após a realização de uma análise de sensibilidade dos parâmetros, cuja finalidade foi identificar condições experimentais ótimas para viabilizar a solução do problema inverso, o problema de estimação da função $\beta(x)$ e $k_4(x)$ foi então formulado como problema inverso e solucionado empregando os métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado (LJM), Evolução Diferencial (DE) e o Firefly (FA).

Ruídos foram adicionados aos dados experimentais sintéticos calculados por meio de uma distribuição normal com média zero e desvio padrão constante, conforme a seguinte equação:

$$\phi(x, t)_i^{exp} = \phi(x, t)_i^{exato} + \varepsilon_i \quad (76)$$

Onde ε_i é uma amostra de distribuição normal. Nas próximas subseções será realizada a descrição de cada um dos métodos estocásticos usados neste trabalho.

3.2.1 Método Luus-Jaakola Modificado

O algoritmo de Luus-Jaakola foi proposto em 1973 e leva o nome dos seus autores. Esse algoritmo visa a solução de problemas de otimização relacionados a engenharia e a química conforme Luus et al. (1973, 1999).

De acordo com Silva Neto (2012), Luus-Jakola é um método estocástico para problemas de otimização baseado na exploração aleatória de um domínio de busca, com objetivo de encontrar o ponto que maximiza ou minimiza a função objetivo. O domínio de busca inicial é o domínio de cada variável do problema e a cada iteração reduz-se o tamanho do espaço de busca.

Conforme a afirmação de Liao et al. (2005), a ideia central do método de Luus-Jaakola é muito simples: soluções são selecionadas em uma região de busca que é reduzida ao longo do procedimento iterativo.

Esforços no sentido de melhorar o desempenho do algoritmo Luus-Jaakola tem ganhado atenção nos últimos anos. De acordo com Luus et al. (1999), na primeira versão do algoritmo a solução ótima era atualizada após a primeira contração no espaço de busca. O próprio autor propôs uma modificação no método fazendo com que a solução ótima fosse atualizada imediatamente após uma solução melhor ter sido encontrada.

Knupp et al. (2009a, 2009b) usou uma variação do método, denominada Luus-Jaakola Modificado. A ideia da modificação no método é substituir imediatamente a solução assim que uma solução melhor fosse encontrada.

Lobato et al. (2008) usaram a variante do método para estimativa do parâmetros cinéticos em processo de fermentação batelada alimentada.

A seguir é apresentado um algoritmo para o método de Luus-Jaakola Modificado proposto em Knupp et al. (2009a, 2009b).

1. Obtenha os dados experimentais ϕ_i , $i = 1, 2, \dots, N_d$.
2. Inicie os contadores $k = 1$ (*loop* externo) e $n = 1$ (*loop* interno). Defina um domínio de busca inicial Ω^0 , escolha o número de *loops* externos n_{ext} e internos n_{int} , escolha um coeficiente de contração ϵ e gere uma estimativa inicial \vec{Z}' , aleatória ou não, dentro de um domínio de busca.
3. Caso $k > n_{ext}$, encerre o LJM. Caso contrário gere uma nova estimativa da seguinte

forma:

$$\vec{Z} = \vec{Z}' + \Psi\Omega^{k-1} \quad (77)$$

em que Ψ é uma matriz diagonal de números aleatórios entre -0,5 e 0,5, sendo a mesma gerada com novos números aleatórios a cada vez que é utilizada. Se o valor da função objetivo $Q(\vec{Z})$ para a nova estimativa \vec{Z} for menor que o valor da função objetivo para a estimativa \vec{Z}' , então o valor de \vec{Z} é atribuído a \vec{Z}'

4. Se $l < n_{int}$ faça $l = l + 1$ e volte ao passo 3.
5. Faça $l = 1$ e $k = k + 1$. Defina uma novo domínio de busca, Ω^k , da seguinte forma:

$$\Omega^k = (1 - \epsilon)\Omega^k \quad (78)$$

e retorne ao passo 3.

3.2.2 Método Evolução Diferencial

Com o objetivo de melhorar o desempenho do Algoritmo Recozimento Genético - *Genetic Annealing Algorithm*, foi criado o Algoritmo de Evolução Diferencial por Storn e Price (1995, 1997). Segundo Lobato et al. (2009a) o algoritmo vizava estimar os parâmetros do polinômio de Chebychev.

De acordo com Silva Neto (2012) o método estocástico Evolução Diferencial é baseado na realização de operações entre vetores na qual é realizada uma diferença ponderada entre dois vetores, denominados indivíduos, adicionado a um terceiro indivíduo. Essas operações levam à geração de novos candidatos potenciais para a solução do problema de otimização. O método possui as seguintes operações: inicialização da população, mutação, cruzamento e seleção.

A inicialização da população com N_{pop} indivíduos ocorre de forma aleatória a partir da equação abaixo:

$$Z_{ij} = Z_{i,L} + r_{ij}(Z_{i,U} + Z_{i,L}), i = 1, 2, \dots, N_{pop} \text{ e } j = 1, 2, \dots, N_i. \quad (79)$$

em que $Z_{i,L}$ e $Z_{i,U}$ são respectivamente os limites inferiores e superiores da j-ésima variável, r_{ij} é um número aleatório no intervalo $[0, 1]$ e N_i é o número total de incógnitas.

Depois que a população inicial é gerada, o método DE realiza operações de mutação para gerar uma nova população com o mesmo número N_{pop} de indivíduos a partir da seguinte equação:

$$Z_{l,novo} = Z_{l1} + t_p(Z_{l2} - Z_{l3}), \quad l = 1, 2, \dots, N_{pop}. \quad (80)$$

nos quais Z_{l1} , Z_{l2} e Z_{l3} são vetores obtidos de forma aleatória na população e t_p uma taxa de perturbação para controlar a relevância do vetor diferença.

Para complementar a operação de mutação, o método realiza uma operação de cruzamento, no qual o indivíduo $Z_{l,novo}$ pode ser ou não aceito na população de acordo com:

$$Z_l = \begin{cases} Z_{l,novo}, & \text{se } r_l < p_c \\ Z_{l1}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (81)$$

em que p_c é a probabilidade de cruzamento definida *a priori*. Se o número aleatório r_l for menor que p_c o novo candidato $Z_{l,novo}$ é aceito, caso contrário é mantido na população atual.

É empregado então o operador de seleção, ou seja, se o indivíduo $Z_{l,novo}$ apresenta um valor menor do que o vetor Z_{l1} para a função objetivo, ele o substitui na próxima geração, ou seja:

$$Z_l^{k+1} = \begin{cases} Z_{l,novo}, & \text{se } Q(Z_{l,novo}) < Q(Z_{l1}) \\ Z_{l1}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (82)$$

Uma vez completado este ciclo de atualização da população a ser considerada na geração seguinte, todo o processo descrito nesta seção é repetido até que um critério de parada seja satisfeito. O critério de parada mais usual consiste no estabelecimento prévio do número de gerações N_{ger} que será utilizado.

Será apresentado a seguir um algoritmo para o método de Evolução Diferencial segundo Lobato et al. (2009, 2011):

1. Obtenha os dados experimentais ϕ_i , $i = 1, 2, \dots, N_d$.
2. Faça o contador de iterações $k = 0$, escolha o tamanho da população N_{pop} e gere a população inicial com a Eq.(79). Escolha também a probabilidade de cruzamento p_c e o número de gerações N_{ger} .
3. Aplique o operador de mutação e recombinação empregando as Eq.(80) e (81).

4. Aplique o operador de seleção Eq.(82) para gerar uma nova população.
5. Faça $k = k + 1$. Se $k < N_{ger}$ volte ao passo 3.

3.2.3 Método Firefly

Baseado no comportamento social dos vaga-lumes, o Algoritmo Colônia de Vaga-lumes (FA) - *Firefly Colony Algorithm*, desenvolvido por Yang em (Yang,2008), gera uma população de candidatos a solução de um problema de otimização de forma aleatória. O método fundamenta-se na bio-luminescência dos vaga-lumes, em que os menos luminosos se movimentam em direção aos que possuem mais luminosidade.

Considera-se que todos os vaga-lumes podem ser atraídos e, deste modo, o vaga-lume que representa o melhor valor da função objetivo emite uma luminescência mais intensa, atraindo os demais a depender da distância entre os indivíduos e da absorção de luz pelo meio (Yang, 2008).

Para o desenvolvimento de um algoritmo de otimização, Yang (2008) enumerou as seguintes hipóteses:

- os vaga-lumes não possuem sexo, o que possibilita a interação entre todos os vaga-lumes, apesar do objetivo do acasalamento;
- a atratividade é proporcional ao brilho emitido e decai conforme aumenta a distância entre os vagalumes, regra baseada em observação do comportamento animal;
- o brilho emitido por um vagalume é determinado pela sua avaliação frente ao objetivo (isto é, quanto melhor avaliado, mais brilhante);
- a atratividade de um vagalume é determinada pela intensidade da luz emitida;
- a determinação da intensidade emitida é em função de sua avaliação.

A movimentação dos vagalumes ocorre na direção do vagalume que possui uma luminosidade mais intensa levando-se em consideração a absorção da luz pelo meio γ e também a distância euclidiana r entre os indivíduos. A intensidade na luminosidade depende exclusivamente do valor da função objetivo e vale ressaltar também que a luminosidade emitida pelos vagalumes é inversamente proporcional a distância. Desta forma a atração entre os vagalumes é dada pela seguinte expressão abaixo:

$$B = B_0 e^{-\gamma r^2} \tag{83}$$

Assim, todo vagalume é atraído pelo indivíduo mais brilhante e esta movimentação é feita por meio da seguinte equação:

$$x_{i+1} = x_i + B_0 e^{-\gamma r^2} (x_j - x_i) + \alpha (\text{rand} - 0, 5) \quad (84)$$

No qual x_j é o vagalume mais brilhante, α é um parâmetro de aleatoriedade e o rand é um gerador também aleatório de números dentro do intervalo $[0, 1]$.

É apresentado a seguir um algoritmo para o método Firefly (FA).

1. Obtenha os dados experimentais ϕ_i , $i = 1, 2, \dots, N_d$.
2. Faça um contador de iterações $k = 0$, escolha o número total de gerações N_{ger} e gere de forma aleatória a primeira geração dos vagalumes. Defina os parâmetros γ , B_0 e α .
3. Calcule a intensidade de cada vagalume de $j = 1$ até o número máximo de vagalumes e calcule sua atratividade utilizando a Eq.(83). Mova os vagalumes j em direção aos vagalumes mais brilhantes usando a Eq.(84).
4. Verifique se os vagalumes estão dentro dos limites.
5. Faça $k = k + 1$. Se $k < N_{ger}$ volte ao passo 3.

3.3 Análise de Sensibilidade

Segundo Silva (2016) a acurácia da solução dos problemas inversos está diretamente ligada aos dados experimentais sintéticos ou reais. Ou seja, esses dados afetam diretamente na solução desses tipos de problema. O objetivo da análise de sensibilidade é a determinação de um conjunto ótimo de dados experimentais cujo o modelo matemático apresente maior sensibilidade aos parâmetros a serem estimados.

Sendo assim, para solução do problema inverso é imprescindível que seja realizada uma análise de sensibilidade de cada parâmetro que compõe o modelo, pois a mesma auxilia na interpretação dos resultados obtidos bem como na escolha dos dados experimentais que possuem melhor qualidade.

Para essa dissertação usou-se a Eq.(85) para calcular os coeficientes de sensibilidade de cada parâmetro que aparece no modelo Bevilacqua-Galeão (BG) de difusão anômala.

$$X_{Z_l}^j = Z_l \bar{X}_{Z_l}^j = Z_l \frac{\partial p_j^{calc}}{\partial Z_l}, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad \text{e} \quad l = 1, 2, \dots, M \quad (85)$$

em que \vec{Z}_l é o vetor de incógnitas contendo os parâmetros que se deseja estimar e M o número de incógnitas.

É importante ressaltar que, quanto maior for o coeficiente de sensibilidade de um determinado parâmetro, melhor será a sua estimativa.

No capítulo 4 dessa dissertação é apresentado os resultados para dois casos referentes aos problemas inversos. Para cada caso apresenta-se as curvas referentes aos coeficientes de sensibilidade de cada parâmetro do modelo. Os coeficientes de sensibilidade da Eq.(85) foram aproximadas por diferenças finitas centradas, usando a Eq.(86) abaixo:

$$X_{Z_l}^j \approx Z_l \frac{(p_{calc}(Z_l) + \varepsilon) - (p_{calc}(Z_l) - \varepsilon)}{2\varepsilon}, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad \text{e } l = 1, 2, \dots, M \quad (86)$$

no qual ε representa uma pequena variação no valor do parâmetro.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O objetivo desse capítulo é apresentar os resultados numéricos para o problema direto e também para o problema inverso referente ao modelo Bevilacqua-Galeão (BG), formulado pela Eq.(46). Para a organização desses resultados, dois casos foram simulados.

Em todos os casos comparou-se os efeitos da difusão entre os parâmetros variáveis e os parâmetros constantes usados como valor de referência. Buscou-se evidenciar a diferença no perfil de concentração entre as soluções do modelo usando $\beta(x)$ e $k_4(x)$ variáveis e β e k_4 constantes.

Na Tabela 12 são apresentadas as funções usadas para β variável, considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $k_4 = 10^{-5}$ usados nos casos 1a, 1b e 1c. Na Tabela 13 são apresentadas as funções usadas para o parâmetro k_4 variável, considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $\beta = 0,5$ para os casos 2a e 2b.

Para a solução do problema direto foi utilizado o método de Diferenças Finitas com uma malha computacional de 500 nós e um intervalo de tempo $\Delta t = 10^{-3}$ para todos os casos testes. A solução numérica aproximada para o modelo foi obtida pelo código AdivDif4_xt programado em linguagem R.

Tabela 12 - Valores atribuídos aos parâmetros para solução do Problema Direto - Caso 1

	β variável
Caso 1a	$\log(x + 1)$
Caso 1b	$0,45e^{-1,5x} + 0,5$
Caso 1c	$0,45\log(45x + 1)$

Fonte: O autor, 2021

Tabela 13 - Valores atribuídos aos parâmetros para solução do Problema Direto - Caso 2

	k_4 variável
Caso 2a	$0,02\log(x + 1)$
Caso 2b	$0,4e^{-1,8x}$

Fonte: O autor, 2021

4.1 Resultados para o Problema Direto

Nesta seção é apresentada uma solução para Eq.(46) usando as condições de contorno apresentados na Tabela 11, juntamente com a condição inicial dada pela Eq. (47).

4.1.1 Caso 1 - Fração de substância livre com variação espacial

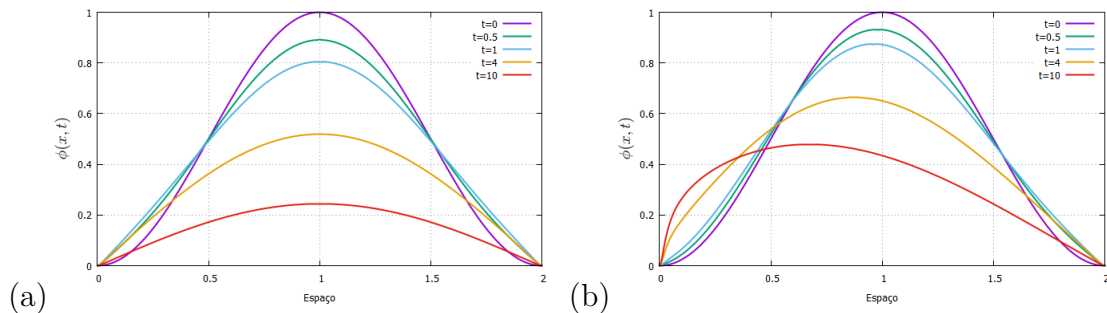
Caso 1a

Foi realizada uma comparação entre as soluções considerando $\beta(x)$ variável e β constante, que nesse caso 1a assumiu um valor de referência de 0,5.

Antes de qualquer análise é importante observar que a função escolhida para representar β , neste caso 1a, é uma curva crescente, que se aproxima do valor de referência 0,5, porém em toda região do espaço a função β é menor que o valor mencionado.

Pode-se observar na Figura 2-a que as curvas de concentração para β constante, ou seja, valor de referência, são simétricas, o que não ocorre quando o parâmetro é variável Figura 2-b. Como a função $\beta(x)$, que representa a fração de partículas capazes de se difundir, está variando no espaço é natural que as curvas de concentração sofram alterações dependendo da região no qual está ocorrendo o fenômeno de difusão. Trabalhos anteriores indicam que, quanto maior o valor do parâmetro β , mais rápido a difusão acontece e, por isso, a curva de concentração do lado direito do espaço é menor. Ao contrário do que ocorre do lado esquerdo, onde os valores de β são menores e, conseqüentemente, a difusão acontece de forma mais lenta.

Figura 2 - Comparação do perfil de concentração para a difusão entre β constante e β variável - Caso 1a.

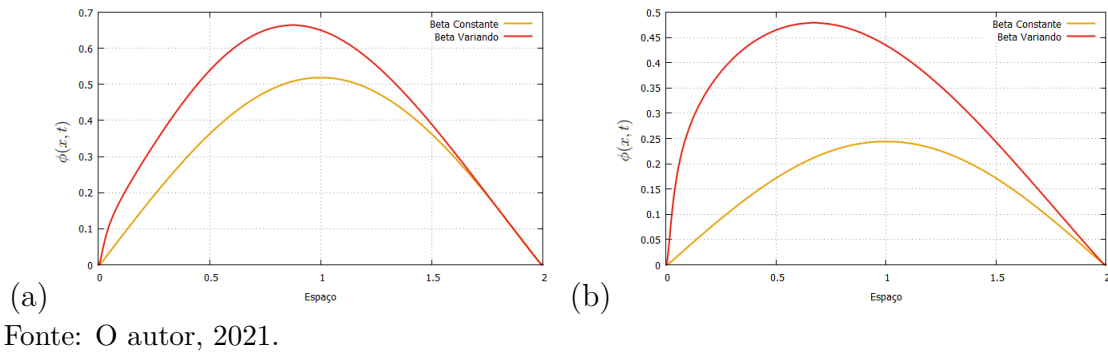


Fonte: O autor, 2021.

Foram comparadas as curvas de concentração no instante 4, Figura 3-a e no instante 10, Figura 3-b. Pode-se observar que a difusão acontece mais rápido para β constante uma vez que β variável é menor em todo espaço de observação. Na Figura 4-a são apresentadas a concentração no centro da malha ao longo do tempo para os dois casos, β constante e variável no espaço. Observa-se, mais uma vez, que a concentração nessa região ao longo do tempo é menor para valores de β constante.

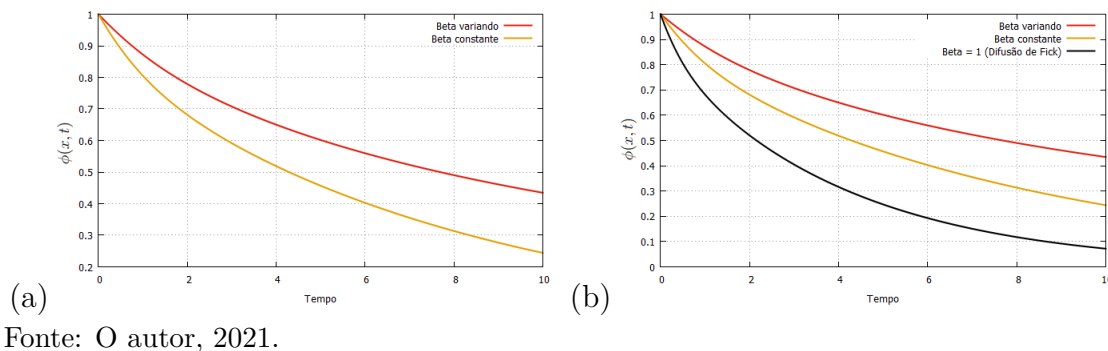
Na Figura 4-b é apresentada a comparação entre a difusão referente ao caso 1a e a difusão clássica, em que $\beta = 1$, conhecida como difusão de Fick, a fim de verificar se houve retenção ou aceleração no processo difusivo do sistema. Observa-se que houve retenção na difusão para ambos os casos, β constante e β variável no espaço, comparados

Figura 3 - Comparação do perfil de concentração nos instantes 4 e 10 - Caso 1a.



com a difusão clássica de Fick. Essa afirmação pode ser feita após a análise da figura 4-b, no qual é possível observar que a concentração da difusão clássica é menor no centro da malha em todo instante de observação.

Figura 4 - Comparação do perfil de concentração para a difusão no centro da malha e com a Difusão de Fick - Caso 1a.



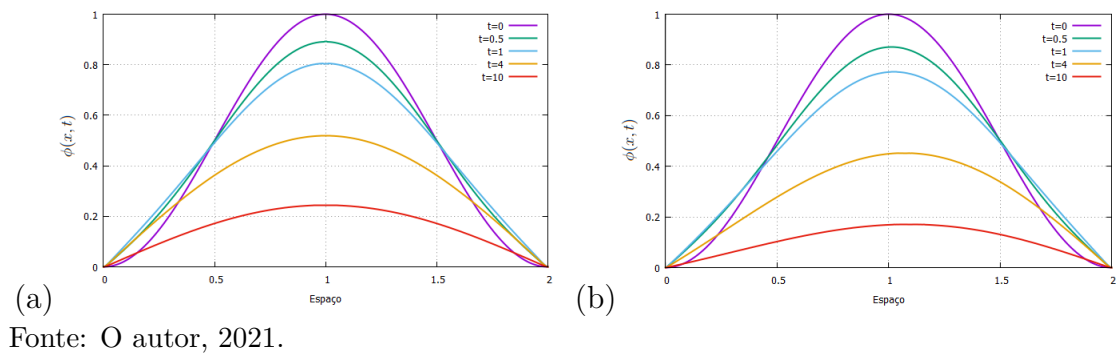
Caso 1b

Foi realizada uma comparação entre as soluções considerando $\beta(x)$ variável e β constante, que nesse caso 1b assumiu um valor de referência 0,5.

Antes de qualquer análise é importante observar que a função escolhida para representar β , neste caso 1b, é uma curva decrescente, que se aproxima do valor de referência 0,5, porém em toda região do espaço a função β é maior que o valor mencionado.

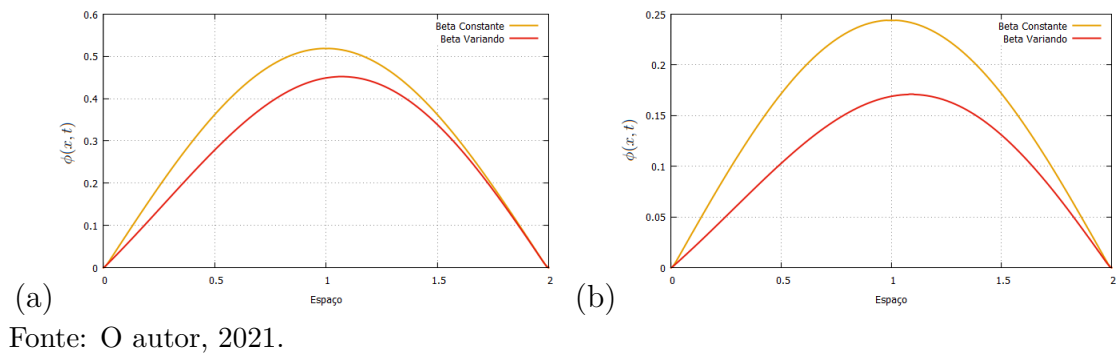
Pode-se observar na Figura 5-a que as curvas para β constante, ou seja, para o valor de referência continuam simétricas em relação ao eixo vertical o que não ocorre quando o parâmetro é variável (Figura 5-b). Como a função β , que representa a fração de partículas capazes de se difundir, está variando no espaço, é natural que as curvas de concentração sofram alterações dependendo da região em que está ocorrendo o fenômeno de difusão. Pode-se observar que a curva de concentração no lado direito do espaço é maior, ao contrário do que ocorre do lado esquerdo, onde os valores de β são maiores e, consequentemente, a difusão acontece de forma mais rápida.

Figura 5 - Comparação do perfil de concentração para a difusão entre β constante e β variável - Caso 1b.



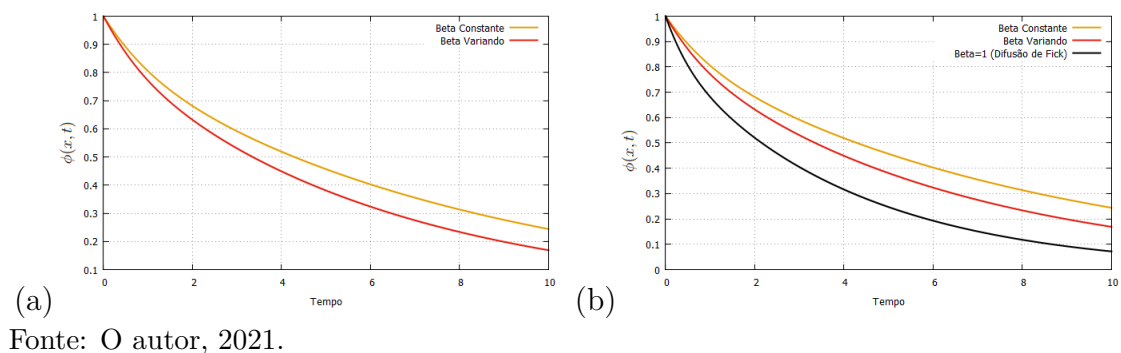
Na Figura 6 estão sendo comparadas as curvas de concentração no instante 4 (a) e no instante 10 (b). Pode-se observar que a difusão acontece mais rápido para β variável uma vez que β constante é menor em todo espaço de observação.

Figura 6 - Comparação do perfil de concentração nos instantes 4 e 10 - Caso 1b.



Na Figura 7-a são apresentadas a concentração no centro da malha ao longo do tempo para os dois casos, β constante e variável no espaço.

Figura 7 - Comparação do perfil de concentração para a difusão no centro da malha e com a Difusão de Fick - Caso 1b.



Observa-se mais uma vez que a concentração nessa região, ao longo do tempo, é menor para valores de β variável. Na Figura 7-b é apresentada a comparação entre a difusão referente ao caso 1b e a difusão clássica, em que $\beta = 1$, conhecida como difusão de Fick, a fim de verificar se houve retenção ou aceleração no processo difusivo do sistema. Observou-se que houve retenção na difusão para ambos os casos, β constante e β variável no espaço, comparados com a difusão clássica de Fick.

Essa afirmação pode ser feita após a análise da Figura 7-b no qual é possível observar que a concentração da difusão clássica é menor no centro da malha em todo instante de observação.

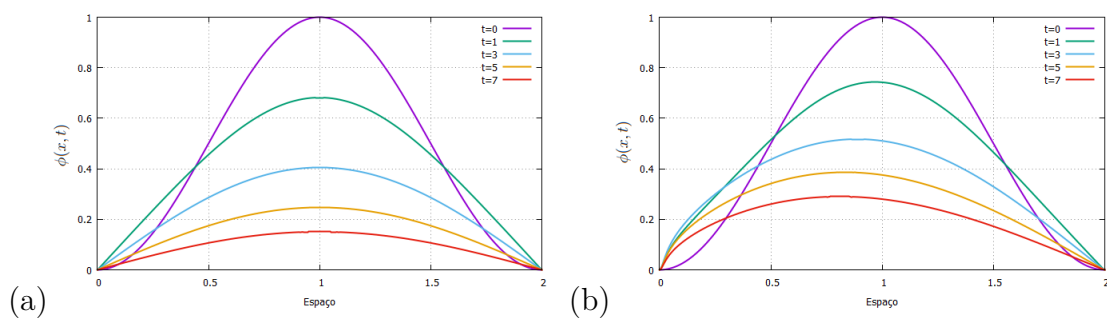
Caso 1c

Foi realizada uma comparação entre as soluções considerando $\beta(x)$ variável e β constante, que nesse caso 1c assumiu um valor de referência de 1.

Antes de qualquer análise é importante observar que a função escolhida para representar β , neste caso 1c, é uma curva crescente, que se aproxima do valor de referência 1, porém, em toda região do espaço, a função β é menor que o valor mencionado.

Pode-se observar na Figura 8-a que as curvas de concentração para β constante, continuam simétricas em relação ao eixo vertical, o que não ocorre quando o parâmetro é variável conforme Figura 8-b. Como a função β , que representa a fração de partículas capazes de se difundir, está variando no espaço, é natural que as curvas de concentração sofram alterações dependendo da região em que está ocorrendo o fenômeno difusivo. Pode-se observar que a curva de concentração no lado direito do espaço é levemente menor, ao contrário do que ocorre do lado esquerdo, onde os valores de β são menores, e consequentemente, a difusão acontece de forma mais lenta.

Figura 8 - Comparação do perfil de concentração para a difusão entre β constante e β variável - Caso 1c.

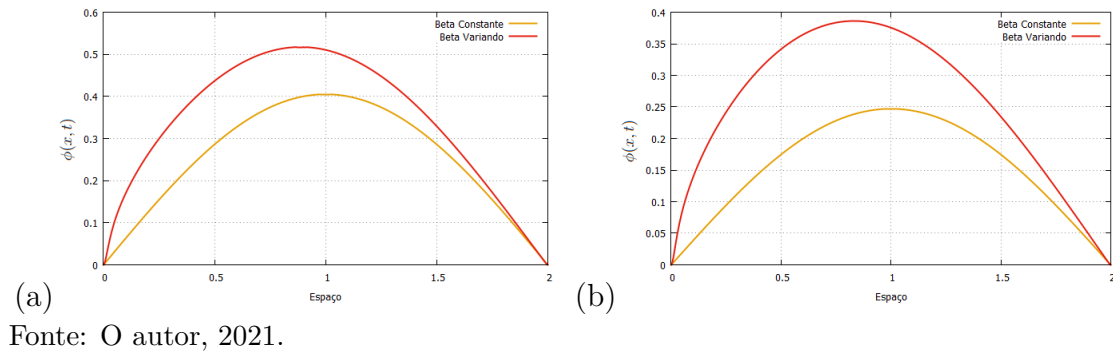


Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 9 estão sendo comparadas as curvas de concentração no instante 3 (a) e no instante 5 (b). Pode-se observar que a difusão acontece mais rápido para β constante uma vez que β variável é menor em todo espaço de observação.

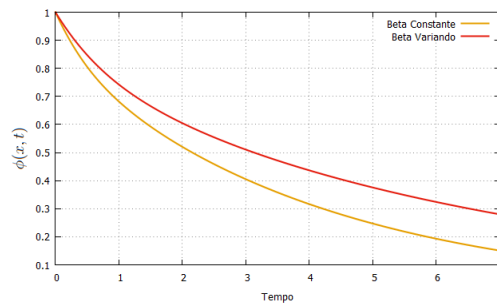
Na Figura 10 são apresentadas a concentração no centro da malha ao longo do

Figura 9 - Comparação do perfil de concentração nos instantes 3 e 5 - Caso 1c.



tempo para os dois casos, β constante e variável no espaço. Observa-se, mais uma vez, que a concentração nessa região ao longo do tempo é menor para valores de β constantes.

Figura 10 - Comparação do perfil de concentração para a difusão no centro da malha e com a Difusão de Fick - Caso 1c.



4.1.2 Caso 2 - Coeficiente de reatividade com variação espacial

Caso 2a

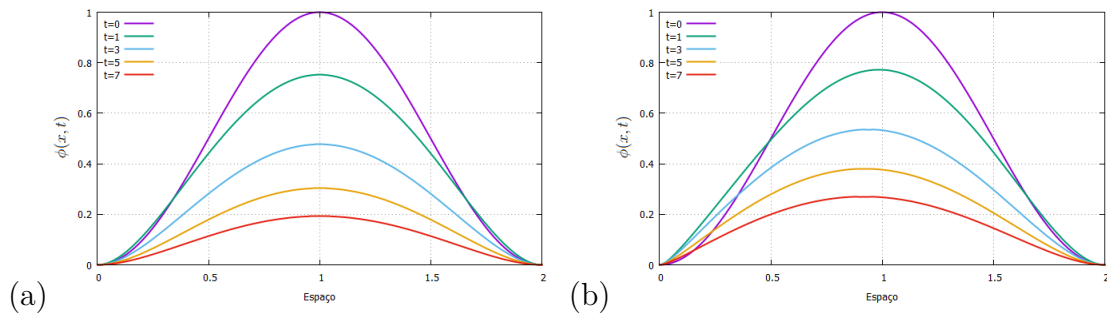
Foi realizada uma comparação entre as soluções considerando $k_4(x)$ variável e k_4 constante, que nesse caso 2a assumiu um valor de referência de 0,01.

Antes de qualquer análise é importante observar que a função escolhida para representar o parâmetro $k_4(x)$, neste caso 2a, é uma curva crescente, que se aproxima do valor de referência 0,01, porém, em toda região do espaço, a função β é menor que o valor mencionado.

Pode-se observar, na Figura 11-a, que as curvas de difusão considerando k_4 constante, permanecem simétricas em relação ao eixo vertical, o que não ocorre quando o parâmetro é variável, conforme Figura 11-b. Como a função $k_4(x)$, que é o coeficiente de reatividade, está variando no espaço, é natural que as curvas de concentração sofram

alterações dependendo da região em que está ocorrendo o fenômeno de difusão. Pode-se observar que a curva de concentração no lado direito do espaço é menor, ao contrário do que ocorre do lado esquerdo, onde os valores de k_4 são menores e, conseqüentemente, a difusão acontece de forma mais lenta.

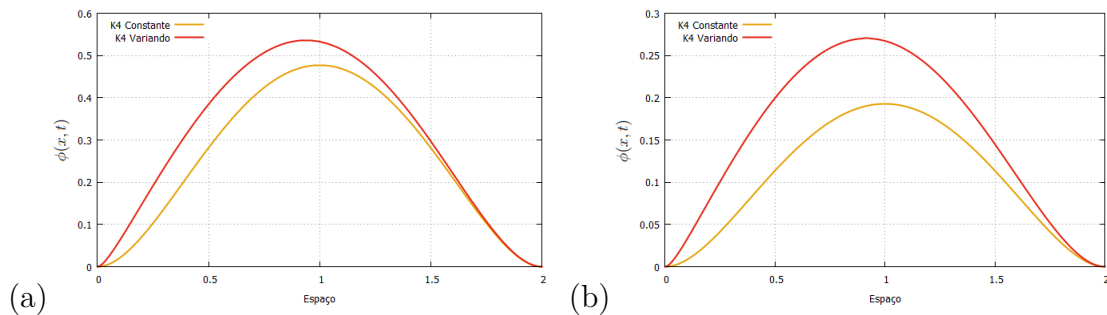
Figura 11 - Comparação do perfil de concentração para a difusão entre k_4 constante e k_4 variável - Caso 2a.



Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 12 estão sendo comparadas as curvas de concentração no instante 3 (a) e no instante 7 (b). Pode-se observar que a difusão acontece mais rápido para k_4 constante uma vez que k_4 variável é menor em todo espaço de observação.

Figura 12 - Comparação do perfil de concentração nos instantes 3 e 7 - Caso 2a.



Fonte: O autor, 2021.

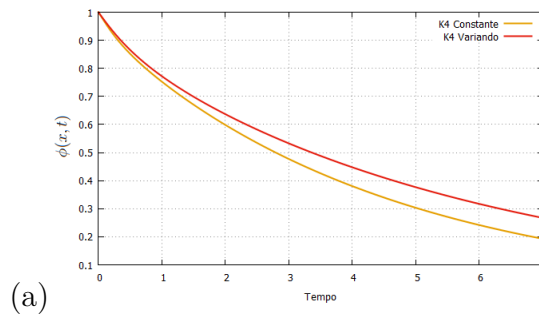
Na Figura 13 são apresentadas a concentração no centro da malha ao longo do tempo para os dois casos, k_4 constante e variável no espaço. Observa-se mais uma vez que a concentração nessa região ao longo do tempo é menor para valores de k_4 constante.

Caso 2b

Foi realizada uma comparação entre as soluções considerando $k_4(x)$ variável e k_4 constante, que nesse caso 2b também assumiu um valor de referência de 0,01.

Antes de qualquer análise é importante observar que a função escolhida para representar o parâmetro $k_4(x)$, neste caso 2b, é uma curva decrescente, que se aproxima do valor de referência 0,01, porém em toda região do espaço a função β é maior que o valor mencionado.

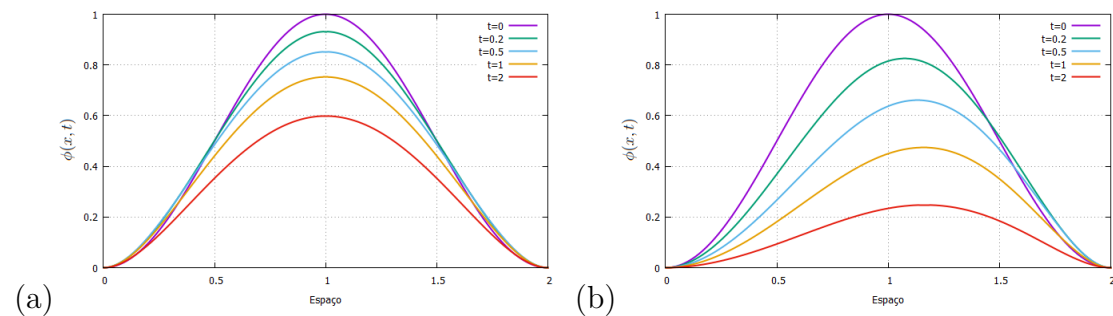
Figura 13 - Comparação do perfil de concentração para a difusão no centro da malha - Caso 2a.



(a)
Fonte: O autor, 2021.

Pode-se observar, na Figura 14-a, que as curvas de difusão considerando k_4 constante, permanecem simétricas em relação ao eixo vertical, o que não ocorre quando o parâmetro é variável Figura 14-b.

Figura 14 - Comparação do perfil de concentração para a difusão entre k_4 constante e k_4 variável - Caso 2b.



(a)
Fonte: O autor, 2021.

Como a função $k_4(x)$, que é o coeficiente de reatividade, está variando no espaço é natural que as curvas de concentração sofram alterações dependendo da região em que está ocorrendo o fenômeno de difusão. Pode-se observar que a curva de concentração no lado direito do espaço é maior em comparação ao lado esquerdo, onde os valores de k_4 são maiores e, conseqüentemente, a difusão acontece de forma mais rápida.

Na Figura 15 estão sendo comparadas as curvas de concentração no instante 1 (a) e no instante 2 (b). Pode-se observar que a difusão acontece mais rápida para k_4 constante uma vez que k_4 variável é menor em todo espaço de observação.

Na Figura 16 são apresentadas a concentração no centro da malha ao longo do tempo para os dois casos, k_4 constante e variável no espaço. Observa-se mais uma vez que a concentração nessa região ao longo do tempo é menor para valores de k_4 constante.

Figura 15 - Comparação do perfil de concentração nos instantes 1 e 2 - Caso 2b.

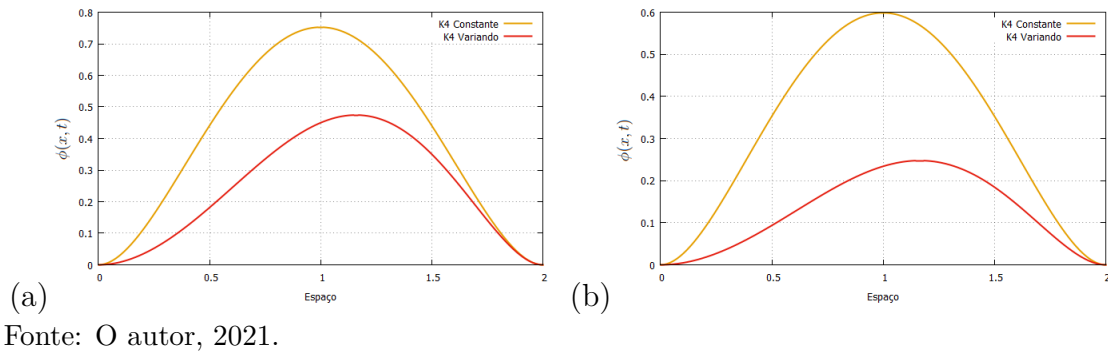
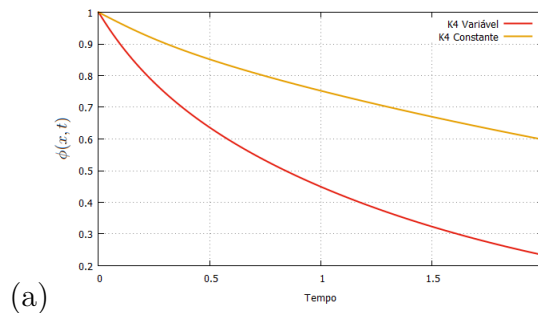


Figura 16 - Comparação do perfil de concentração para a difusão no centro da malha - Caso 2b.



4.2 Resultados para o Problema Inverso

Como foi dito anteriormente, o objetivo desta dissertação é estimar os parâmetros a e b que constituem as funções $\beta(x)$ (Caso 1a, Caso 1b e Caso 1c) e $k_4(x)$ (Caso 2a e Caso 2b), representados pelos vetores $\vec{Z} = \{\beta\}$ e $\vec{Z} = \{k_4\}$, tal que o funcional $Q(\vec{Z})$, dado pela Eq.(75), seja o menor possível. Ou seja, o vetor de incógnitas passa a ser $\vec{Z} = \{a, b\}$, nos quais a e b são os parâmetros das funções $\beta(x)$ e $k_4(x)$.

Em todos os casos apresentados nesse trabalho foram utilizados os seguintes parâmetros: No método (LJM) foram utilizados 10 iterações para o laço externo e 10 para o laço interno e também um parâmetro para contração do espaço de 0,5. Já para o método Evolução Diferencial (ED) foram utilizados uma população de 10 indivíduos e um total de 10 gerações, com uma taxa de perturbação de 0,5 e uma probabilidade de cruzamento de 0,8. Para o método Firefly (FA) também foram utilizados uma população de 10 vagalumes com 10 gerações, com um coeficiente de absorção luminosa de de 0,8. Esses parâmetros foram utilizados para gerar todos os resultados apresentados a seguir.

4.2.1 Caso 1 - Fração de substância livre com variação espacial

Caso 1a

Um dos objetivos desta dissertação é estimar os parâmetros a e b da função $\beta(x)$, conforme Eq.(87). Para esse caso 1a serão adotados os seguintes valores para cada um dos parâmetros do modelo de difusão anômala: parâmetro $a = 1$, parâmetro $b = 1$, $k_2 = 10^{-1}$ e $k_4 = 10^{-5}$, ou seja, $\vec{Z}_{exato} = \{1; 1; 10^{-1}; 10^{-5}\}$. Será apresentado a seguir a análise de sensibilidade para os parâmetros do modelo ao longo do espaço e do tempo estudados.

Vale ressaltar que a função β usada para esse caso é dada pela seguinte equação:

$$\beta(x) = a \log(bx + 1) \tag{87}$$

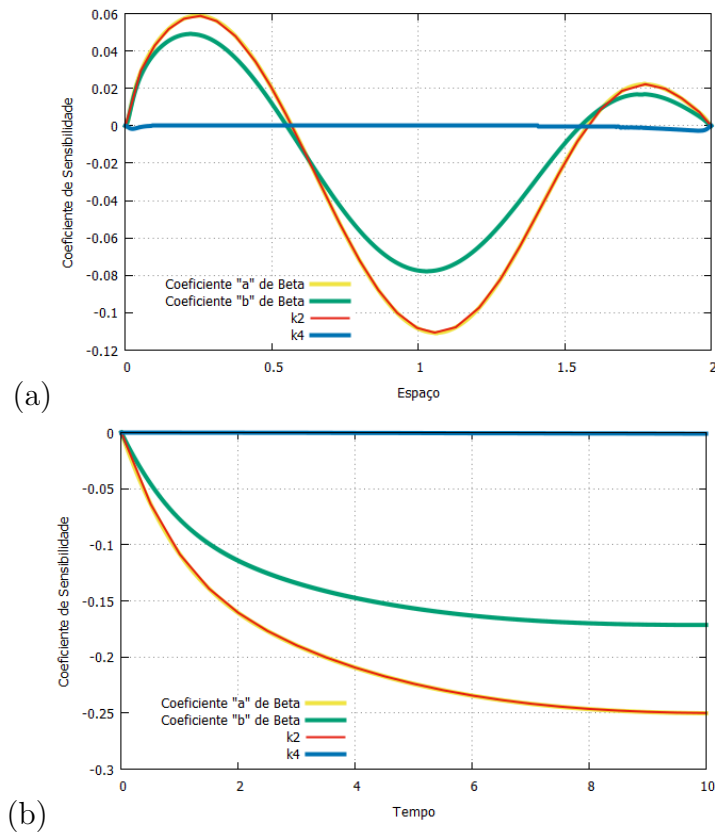
Percebe-se, por meio da Figura 17-a, que alguns desses parâmetros possuem boa sensibilidade ao modelo de difusão anômala proposto por Bevilacqua e Galeão, ao longo do espaço, principalmente próximo a região do centro da malha em $x = 1$. Pode-se observar pela mesma Figura 17-a que a variável $\phi(x, t)$ é pouco sensível ao parâmetro k_4 , fazendo com que os métodos de otimização tenham dificuldades para estimá-lo. Para a solução deste caso adotou-se então o sensor na posição central da malha.

Na Figura 17-b está sendo apresentado os coeficientes de sensibilidade dos parâmetros ao transcorrer $t = 10$, com o sensor no centro da malha, em $x = 1$. Pode-se observar que as curvas de sensibilidade do parâmetro a e do parâmetro k_2 são praticamente idênticas, isso significa que eles possuem uma dependência linear e dificilmente poderiam ser estimados juntos. A curva para o parâmetro k_4 é muito próximo de zero ao longo do tempo, ou seja, o modelo de difusão anômala é pouco sensível a este parâmetro e dificilmente será estimado com acurácia.

A seguir serão apresentados os resultados do problema inverso para o caso 1a mostrando o desempenho dos métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado (LJM), Evolução Diferencial (ED) e Firefly (FA). Foi estimado o parâmetro a da função $\beta(x)$ com dados experimentais sem ruído e depois com um ruído de até 5%. Na Tabela 14 foram apresentadas as estimativas para o parâmetro a no intervalo de busca $[10^{-5}, 2]$ considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $k_4 = 10^{-5}$, empregando dados experimentais sem ruído.

Na Tabela 15 foram apresentadas as estimativas para o parâmetro a no intervalo de busca $[10^{-5}, 2]$ considerando os mesmos valores para os parâmetros k_2 e k_4 , empregando dados experimentais com ruído de até 5%. Percebe-se a perda de precisão na estimativa do parâmetro quando um ruído é adicionado aos dados experimentais, ao contrário dos resultados com dados experimentais sem ruído. As estimativas do método Evolução Diferencial (ED) para este parâmetro foram as que melhor se aproximaram do valor exato, com erro relativo próximo a 0,19%, diferente do Firefly (FA), em que o erro relativo ficou

Figura 17 - Coeficientes de sensibilidades normalizados ao longo do espaço e do tempo -
Caso 1a.



Fonte: O autor, 2021.

Tabela 14 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1a.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	1,016403	$2,7791 \cdot 10^{-4}$	1,065404	$2,7866 \cdot 10^{-3}$	0,951213	$2,4540 \cdot 10^{-3}$
2	0,996542	$6,3555 \cdot 10^{-6}$	1,065404	$2,7866 \cdot 10^{-3}$	0,999889	$9,9824 \cdot 10^{-6}$
3	0,996542	$6,3555 \cdot 10^{-6}$	1,019173	$1,6787 \cdot 10^{-4}$	0,997886	$5,3028 \cdot 10^{-6}$
4	0,996542	$6,3555 \cdot 10^{-6}$	1,003649	$1,1489 \cdot 10^{-4}$	0,997557	$5,2367 \cdot 10^{-6}$
5	0,999012	$9,9867 \cdot 10^{-7}$	1,003649	$1,1489 \cdot 10^{-4}$	0,997560	$5,2367 \cdot 10^{-6}$
6	1,000360	$8,8749 \cdot 10^{-8}$	1,003649	$1,1489 \cdot 10^{-4}$	0,997560	$5,2367 \cdot 10^{-6}$
7	1,000301	$5,8576 \cdot 10^{-8}$	1,010916	$8,4784 \cdot 10^{-5}$	0,997560	$5,2367 \cdot 10^{-6}$
8	0,999920	$1,9065 \cdot 10^{-8}$	1,010916	$8,4784 \cdot 10^{-5}$	0,997560	$5,2367 \cdot 10^{-6}$
9	0,999969	$9,2535 \cdot 10^{-9}$	1,000943	$1,9254 \cdot 10^{-6}$	0,997560	$5,2367 \cdot 10^{-6}$
10	0,999969	$9,2535 \cdot 10^{-9}$	1,000943	$1,9254 \cdot 10^{-6}$	0,997560	$5,2367 \cdot 10^{-6}$
Erro	0,0031%	-	0,0943%	-	0,2439%	-

Fonte: O autor, 2021.

próximo de 2%.

A evolução dos métodos para a estimativa do vetor $\vec{Z} = \{a\}$ com dados sem e com

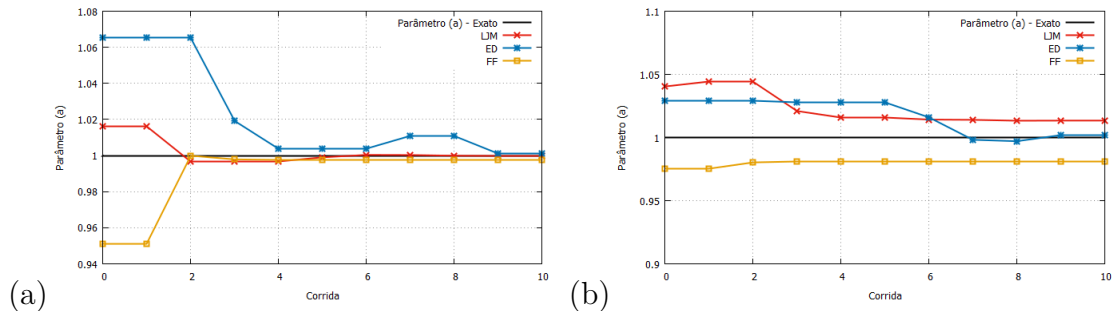
Tabela 15 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1a.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	1,040421	$2,5832 \cdot 10^{-2}$	1,028807	$2,88892 \cdot 10^{-2}$	0,975453	$2,7258 \cdot 10^{-2}$
2	1,040421	$2,5832 \cdot 10^{-2}$	1,028807	$2,88892 \cdot 10^{-2}$	0,980299	$2,7192 \cdot 10^{-2}$
3	1,020946	$2,5417 \cdot 10^{-2}$	1,027633	$2,8355 \cdot 10^{-2}$	0,980727	$2,7187 \cdot 10^{-2}$
4	1,015750	$2,5390 \cdot 10^{-2}$	1,027633	$2,8355 \cdot 10^{-2}$	0,980727	$2,7187 \cdot 10^{-2}$
5	1,015750	$2,5390 \cdot 10^{-2}$	1,027633	$2,8355 \cdot 10^{-2}$	0,980727	$2,7187 \cdot 10^{-2}$
6	1,014202	$2,5387 \cdot 10^{-2}$	1,015964	$2,8014 \cdot 10^{-2}$	0,980727	$2,7187 \cdot 10^{-2}$
7	1,013984	$2,5386 \cdot 10^{-2}$	0,998190	$2,7969 \cdot 10^{-2}$	0,980727	$2,7187 \cdot 10^{-2}$
8	1,013277	$2,5386 \cdot 10^{-2}$	0,997052	$2,7968 \cdot 10^{-2}$	0,980727	$2,7187 \cdot 10^{-2}$
9	1,013387	$2,5386 \cdot 10^{-2}$	1,001953	$2,7922 \cdot 10^{-2}$	0,980727	$2,7187 \cdot 10^{-2}$
10	1,013422	$2,5386 \cdot 10^{-2}$	1,001953	$2,7922 \cdot 10^{-2}$	0,980727	$2,7187 \cdot 10^{-2}$
Erro	1,3422%	-	0,1954%	-	1,9272%	-

Fonte: O autor, 2021.

ruído de até 5% estão apresentados na Figura 18-a e 18-b. A evolução dos métodos com relação a otimização da função objetivo $Q(\vec{Z})$ para dados experimentais sem ruído e com ruído de até 5% estão apresentados nas Figuras 19-a e 19-b respectivamente.

Figura 18 - Evolução das estimativas para o parâmetro a usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 1a.

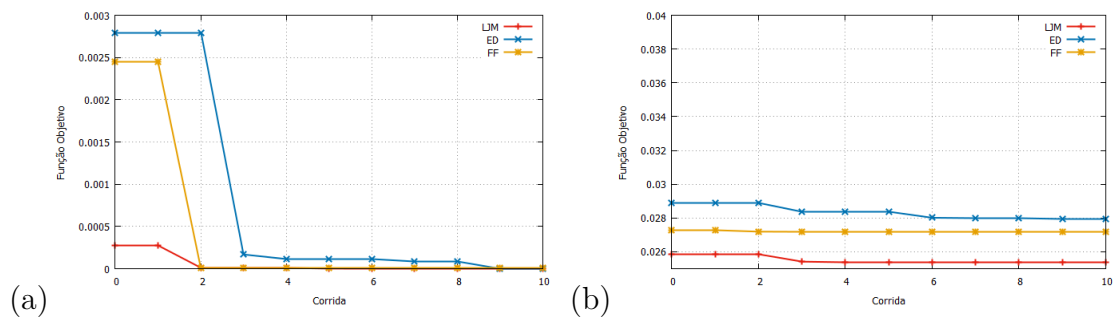


Fonte: O autor, 2021.

Agora serão apresentados os resultados dos métodos para estimar o parâmetro b da função β com dados experimentais sem ruído e depois com um ruído de até 5%. A busca para o parâmetro b será feita no intervalo $[10^{-5}, 2]$ considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $k_4 = 10^{-5}$. Os resultados da Tabela 16 estão com dados experimentais sem ruído.

Na Tabela 17 são apresentadas as estimativas para o parâmetro b no mesmo intervalo de busca considerando os mesmos valores para os parâmetros k_2 e k_4 , empregando dados experimentais com ruído de até 5%. Percebe-se novamente a perda de precisão na estimativa dos parâmetros quando um ruído de até 5% é adicionado aos dados experimentais, ao contrário dos resultados com dados experimentais sem ruído. As estimativas do

Figura 19 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro a - Caso 1a.



Fonte: O autor, 2021.

Tabela 16 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1a.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	0,842328	0,016712	1,007620	0,010981	0,962085	0,008437
2	0,960103	0,002063	0,914696	0,006126	0,921873	0,005537
3	1,000930	0,000231	0,991619	0,000161	0,990500	0,000654
4	0,998671	$1,0060 \cdot 10^{-5}$	1,008111	0,000144	1,000166	$2,6572 \cdot 10^{-6}$
5	1,001440	$5,5434 \cdot 10^{-6}$	0,995742	$1,8638 \cdot 10^{-5}$	1,001356	$1,9458 \cdot 10^{-6}$
6	0,999244	$2,2064 \cdot 10^{-6}$	0,995742	$1,8638 \cdot 10^{-5}$	1,001354	$1,9433 \cdot 10^{-6}$
7	0,999305	$1,5085 \cdot 10^{-7}$	0,995742	$1,8638 \cdot 10^{-5}$	1,001354	$1,9433 \cdot 10^{-6}$
8	0,999921	$5,6426 \cdot 10^{-8}$	1,001836	$4,3174 \cdot 10^{-6}$	1,001354	$1,9433 \cdot 10^{-6}$
9	0,999921	$5,6426 \cdot 10^{-8}$	1,001049	$3,6783 \cdot 10^{-6}$	1,001354	$1,9433 \cdot 10^{-6}$
10	0,999729	$2,3808 \cdot 10^{-8}$	1,001500	$3,6394 \cdot 10^{-6}$	1,001354	$1,9433 \cdot 10^{-6}$
Erro	0,0270%	-	0,1501%	-	0,1354%	-

Fonte: O autor, 2021.

método Firefly (FA) para este parâmetro foram as que melhor se aproximaram do valor exato, com erro relativo próximo a 0,11%, diferente do Luus-Jaakola Modificado (LJM) em que o erro relativo ficou próximo de 2,64%.

A evolução dos métodos para a estimativa do vetor $\vec{Z} = \{b\}$ com dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 20-a e 20-b. Para a evolução dos métodos com relação a otimização da função objetivo $Q(\vec{Z})$ para dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados pelas Figuras 21-a e 21-b.

Na Tabela 18 é mostrado, de forma resumida, a melhor estimativa para cada um dos métodos usados com relação a cada um dos parâmetros da função $\beta(x)$.

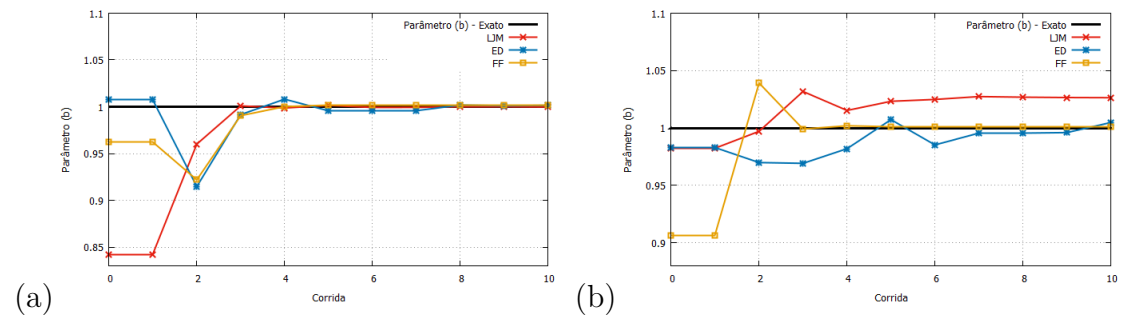
Na Figura 22-a é apresentada a curva exata da função $\beta(x)$ usada para este caso 1a, juntamente com as curvas estimadas por cada um dos métodos. Pode-se observar que quando os dados experimentais estão sem ruídos as curvas da função $\beta(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados são praticamente idênticos. Quando é acrescentado um ruído

Tabela 17 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1a.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	0,982036	0,035057	0,983317	0,028223	0,906563	0,028396
2	0,997135	0,028144	0,969912	0,027492	1,039201	0,024384
3	1,031796	0,025780	0,969266	0,024306	0,999130	0,023546
4	1,015321	0,024503	0,982001	0,023277	1,001960	0,023543
5	1,023265	0,024459	1,007306	0,022326	1,001073	0,023541
6	1,024887	0,024413	0,985292	0,022121	1,001086	0,023541
7	1,027379	0,024411	0,995788	0,022060	1,001102	0,023541
8	1,026849	0,024411	0,995788	0,022060	1,001101	0,023541
9	1,026552	0,024411	0,996011	0,022047	1,001101	0,023541
10	1,026427	0,024411	1,004804	0,021987	1,001101	0,023541
Erro	2,6427%	-	0,4804%	-	0,1101%	-

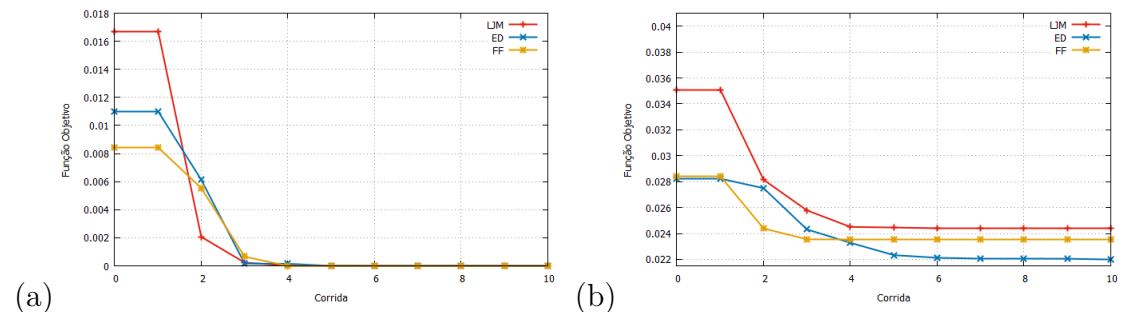
Fonte: O autor, 2021.

Figura 20 - Evolução das estimativas para o parâmetro b usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 1a.



Fonte: O autor, 2021.

Figura 21 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro b - Caso 1a.



Fonte: O autor, 2021.

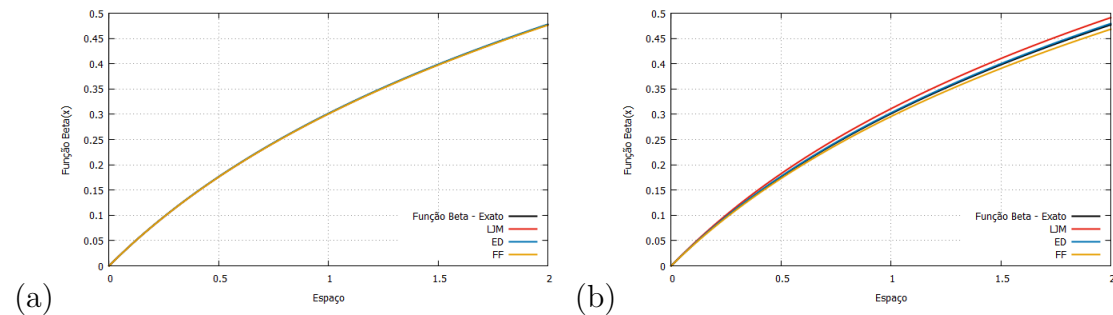
nos dados experimentais com até 5% a função $\beta(x)$ estimada pelos métodos Luus-Jaakola Modificado e Firefly se distanciam um pouco da curva exata, como pode ser visto da

Tabela 18 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ e $\vec{Z} = \{b\}$ - Caso 1a.

Métodos	Dados com 0% de ruído	Dados com 5% de ruído
LJM	$a = 0,999969$	$a = 1,013422$
ED	$a = 1,000943$	$a = 1,001953$
FA	$a = 0,997560$	$a = 0,980727$
LJM	$b = 0,999729$	$b = 1,026427$
ED	$b = 1,001500$	$b = 1,004804$
FA	$b = 1,001354$	$b = 1,001101$

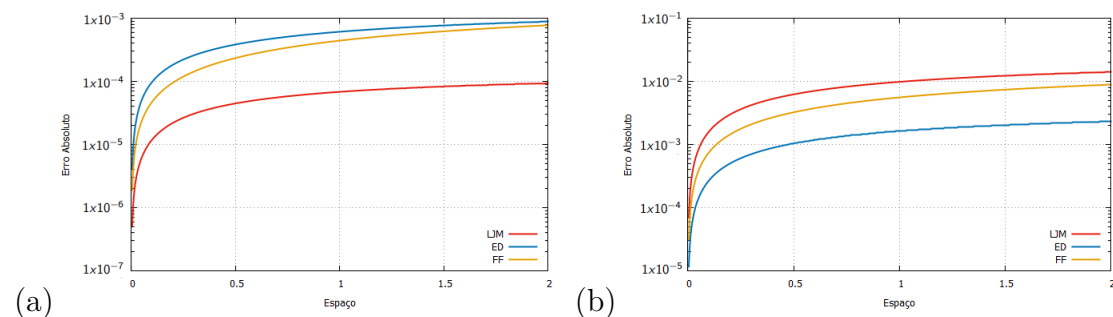
Fonte: O autor, 2021.

Figura 22-b.

Figura 22 - Curva da função $\beta(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1a.

Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 23 é apresentado o erro absoluto referente a curva da função $\beta(x)$ para cada método. Pode-se observar na Figura 23-a nos quais os dados experimentais estão sem ruídos que as curvas referente ao erro são menores quando comparados com as curvas em que os dados experimentais estão com ruído de até 5%, Figura 23-b.

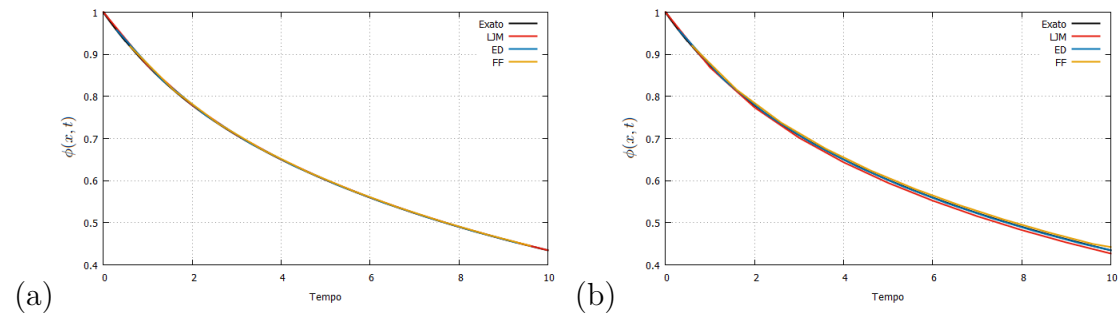
Figura 23 - Erro absoluto para a função $\beta(x)$ - Caso 1a.

Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 24 são apresentados os gráficos da concentração da variável observada $\phi(x, t)$, no centro da malha, ao longo dos 10 primeiros instantes, referentes aos parâme-

tros exatos em comparação com os parâmetros estimados pelos métodos utilizados nessa dissertação, conforme Tabela 18. Na Figura 24-a os dados estão sem ruídos e na Figura 24-b os dados estão com ruídos de até 5%, percebe-se que quando o ruído é acrescentado as curvas perdem um pouco a acurácia.

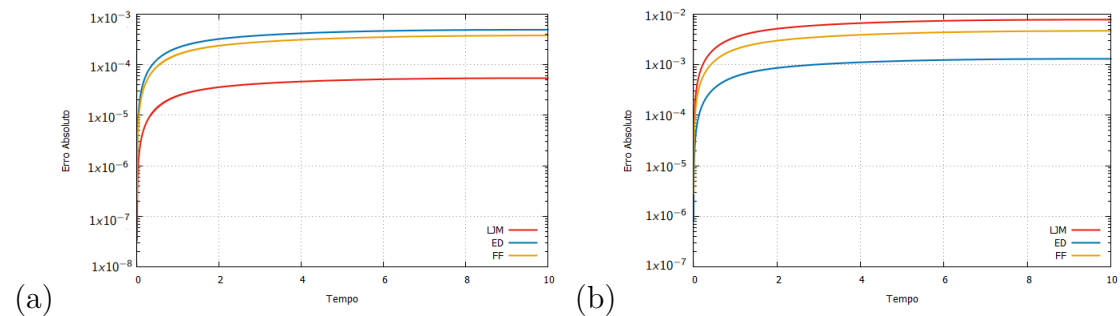
Figura 24 - Curva de concentração $\phi(x, t)$ no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1a.



Fonte: O autor, 2021.

Os gráficos representando o erro absoluto da solução, em um ponto no centro do domínio ao longo do instante de tempo, usando os parâmetros exatos e os parâmetros estimados referente a este caso 1a, são vistos na Figura 25. Na Figura 25-a os dados experimentais estão sem ruído e na Figura 25-b os dados experimentais estão com 5% de ruído.

Figura 25 - Erro absoluto no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1a.



Fonte: O autor, 2021.

Caso 1b

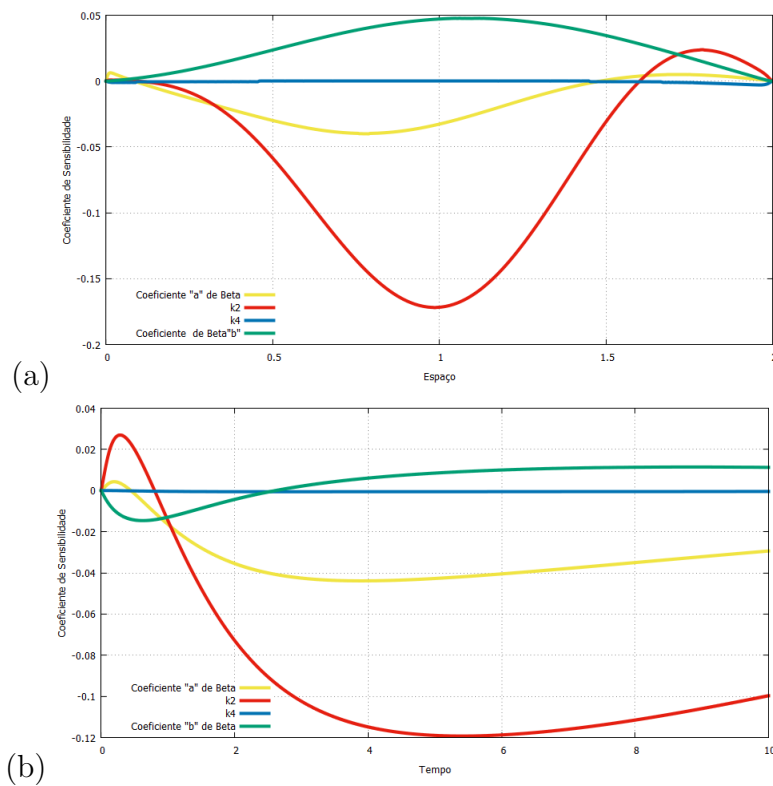
Um dos objetivos desta dissertação é estimar os parâmetros a e b da função $\beta(x)$ dada pela Eq.(88). Para esse caso 1b serão adotados os seguintes valores para cada um dos parâmetros do modelo de difusão anômala: parâmetro $a = 0,45$, parâmetro $b = 1,5$, $k_2 = 10^{-1}$ e $k_4 = 10^{-5}$, ou seja, $\vec{Z}_{exato} = \{0,45; 1,5; 10^{-1}; 10^{-5}\}$. Apresenta-se a seguir a análise de sensibilidade para os parâmetros do modelo ao longo do espaço e do tempo estudados.

A função β usada para esse caso será dada pela seguinte equação:

$$\beta(x) = ae^{-bx} + 0,5 \quad (88)$$

Percebe-se, por meio da Figura 26-a, que alguns desses parâmetros possuem boa sensibilidade ao modelo de difusão anômala proposto por Bevilacqua e Galeão, ao longo do espaço, principalmente próximo a região do centro da malha, em $x = 1$.

Figura 26 - Coeficientes de sensibilidades normalizados ao longo do espaço e do tempo - Caso 1b.



Fonte: O autor, 2021.

Pode-se observar pela mesma Figura 26-a que a variável $\phi(x, t)$ é pouco sensível ao parâmetro k_4 , fazendo com que os métodos de otimização tenham dificuldades para estimá-lo. Para a solução deste caso adotou-se então o sensor na posição central da malha.

Na Figura 26-b está sendo apresentado os coeficientes de sensibilidade dos parâmetros ao longo dos 10 primeiros instantes, com o sensor no centro da malha, em $x = 1$. Pode-se observar que a curva de sensibilidade do parâmetro a de β é bem maior em comparação com a curva referente ao parâmetro b de β , isso significa que os métodos poderão ter mais dificuldades para estimar o parâmetro b . A curva para o parâmetro k_4 é muito próximo de zero ao longo do tempo, ou seja, o modelo de difusão anômala é pouco sensível a este parâmetro e dificilmente será estimado com acurácia.

A seguir são apresentados os resultados do problema inverso para o caso 1b mostrando o desempenho dos métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado (LJM), Evolução Diferencial (ED) e Firefly (FA). Será estimado o parâmetro a da função $\beta(x)$ com dados experimentais sem ruído e depois com um ruído de até 5%. Na Tabela 19 são apresentados as estimativas para o parâmetro a no intervalo de busca $[10^{-5}, 1]$ considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $k_4 = 10^{-5}$, empregando dados experimentais sem ruído.

Tabela 19 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1b.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	0,436438	0,000544	0,442527	$9,8055 \cdot 10^{-5}$	0,445865	0,000385
2	0,460099	$8,2488 \cdot 10^{-5}$	0,439218	$7,3174 \cdot 10^{-5}$	0,460196	0,000112
3	0,456626	$5,2699 \cdot 10^{-5}$	0,447705	$3,4924 \cdot 10^{-6}$	0,449684	$9,5207 \cdot 10^{-8}$
4	0,448954	$1,1380 \cdot 10^{-6}$	0,447705	$3,4924 \cdot 10^{-6}$	0,450202	$4,9811 \cdot 10^{-8}$
5	0,449271	$2,5499 \cdot 10^{-7}$	0,447790	$3,4668 \cdot 10^{-6}$	0,450186	$3,9211 \cdot 10^{-8}$
6	0,449658	$1,5398 \cdot 10^{-7}$	0,451084	$2,3930 \cdot 10^{-6}$	0,450185	$3,9211 \cdot 10^{-8}$
7	0,449989	$1,2832 \cdot 10^{-7}$	0,450109	$5,7201 \cdot 10^{-7}$	0,450185	$3,9211 \cdot 10^{-8}$
8	0,450050	$9,4034 \cdot 10^{-9}$	0,449808	$3,6098 \cdot 10^{-7}$	0,450185	$3,9211 \cdot 10^{-8}$
9	0,449964	$7,9290 \cdot 10^{-10}$	0,449656	$2,0637 \cdot 10^{-7}$	0,450185	$3,9211 \cdot 10^{-8}$
10	0,449991	$1,7098 \cdot 10^{-10}$	0,449628	$2,0581 \cdot 10^{-7}$	0,450185	$3,9211 \cdot 10^{-8}$
Erro	0,0018%	-	0,0826%	-	0,0412%	-

Fonte: O autor, 2021.

Na Tabela 20 são apresentadas as estimativas para o parâmetro a no intervalo de busca $[10^{-5}, 1]$ considerando os mesmos valores para os parâmetros k_2 e k_4 , empregando dados experimentais com ruído de até 5%. Percebe-se a perda de precisão na estimativa dos parâmetros quando um ruído de até 5% é adicionado aos dados experimentais, ao contrário dos resultados com dados experimentais sem ruído. As estimativas do método Evolução Diferencial (ED) para este parâmetro foram as que melhor se aproximaram do valor exato, com erro relativo próximo a 0,15%, diferente do Luus-Jaakola Modificado (LJM), em que o erro relativo ficou próximo de 2,1%.

A evolução dos métodos para a estimativa do vetor $\vec{Z} = \{a\}$ com dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 27-a e 27-b. Já a evolução dos métodos com relação a otimização da função objetivo $Q(\vec{Z})$ para dados experimentais sem ruído e com ruído de até 5% são apresentadas nas Figuras 28-a e 28-b respectivamente.

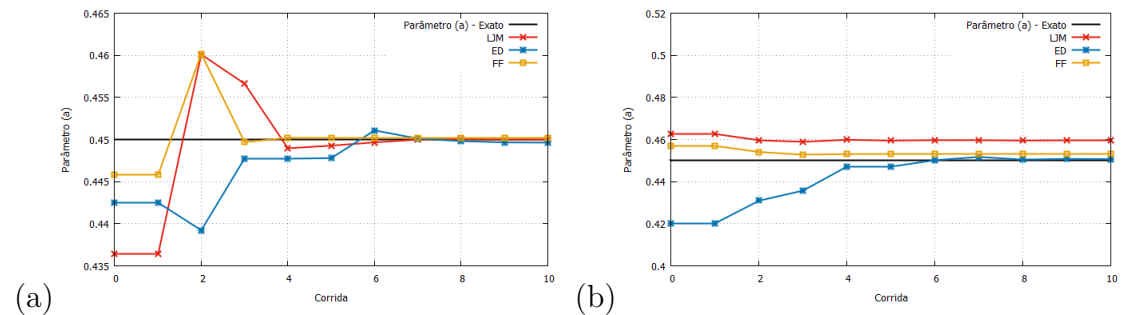
Nas Tabelas 21 e 22 são apresentados os resultados dos métodos para estimar o parâmetro b da função β com dados experimentais sem ruído e depois com um ruído de até 5%. A busca para o parâmetro b será feita no intervalo $[10^{-5}, 3]$ considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $k_4 = 10^{-5}$. Os resultados apresentados na Tabela 21 estão com dados experimentais sem ruído.

Tabela 20 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1b.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	0,462567	0,023198	0,420075	0,022570	0,457100	0,024438
2	0,459614	0,023183	0,430945	0,022216	0,454055	0,024376
3	0,458913	0,023182	0,435725	0,022198	0,452819	0,024370
4	0,459858	0,023178	0,447236	0,022150	0,453054	0,024370
5	0,459493	0,023178	0,447236	0,022150	0,453250	0,024370
6	0,459697	0,023178	0,450190	0,022082	0,453250	0,024370
7	0,459675	0,023178	0,451726	0,022080	0,453242	0,024370
8	0,459498	0,023178	0,450459	0,022079	0,453243	0,024370
9	0,459534	0,023178	0,450783	0,022079	0,453243	0,024370
10	0,459531	0,023178	0,450678	0,022078	0,453243	0,024370
Erro	2,1180%	-	0,1506%	-	0,7206%	-

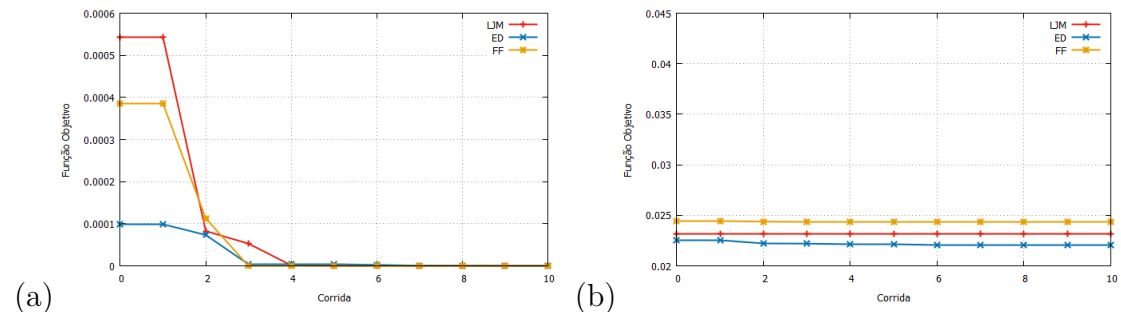
Fonte: O autor, 2021.

Figura 27 - Evolução das estimativas para o parâmetro a usando os métodos LJM, ED e FA - Caso 1b.



Fonte: O autor, 2021.

Figura 28 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro a - Caso 1b.



Fonte: O autor, 2021.

Na Tabela 22 são apresentadas as estimativas para o parâmetro (b) no mesmo intervalo de busca considerando os mesmos valores para os parâmetros k_2 e k_4 , empregando

Tabela 21 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1b.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	1,459937	0,000804	1,412404	0,000692	1,454297	0,000548
2	1,476973	0,000367	1,499240	$3,9874 \cdot 10^{-5}$	1,490823	$5,0602 \cdot 10^{-5}$
3	1,494586	$4,5876 \cdot 10^{-5}$	1,499337	$3,9848 \cdot 10^{-5}$	1,493221	$4,0503 \cdot 10^{-5}$
4	1,503147	$4,7145 \cdot 10^{-6}$	1,486154	$2,4222 \cdot 10^{-5}$	1,502723	$8,6391 \cdot 10^{-7}$
5	1,500687	$3,4477 \cdot 10^{-6}$	1,490647	$1,8727 \cdot 10^{-5}$	1,502899	$8,5220 \cdot 10^{-7}$
6	1,497740	$9,8461 \cdot 10^{-7}$	1,495983	$9,4983 \cdot 10^{-7}$	1,502471	$8,1802 \cdot 10^{-7}$
7	1,499854	$4,6138 \cdot 10^{-8}$	1,495983	$9,4983 \cdot 10^{-7}$	1,502470	$8,1802 \cdot 10^{-7}$
8	1,499692	$2,4022 \cdot 10^{-8}$	1,496986	$6,5014 \cdot 10^{-7}$	1,502467	$8,1802 \cdot 10^{-7}$
9	1,499927	$3,3926 \cdot 10^{-9}$	1,497195	$6,0037 \cdot 10^{-7}$	1,502467	$8,1802 \cdot 10^{-7}$
10	1,500069	$2,1802 \cdot 10^{-9}$	1,497357	$5,8230 \cdot 10^{-7}$	1,502467	$8,1802 \cdot 10^{-7}$
Erro	0,0046%	-	0,1761%	-	0,1644%	-

Fonte: O autor, 2021.

dados experimentais com ruído de até 5%. Percebe-se novamente a perda de precisão na estimativa dos parâmetros quando um ruído de até 5% é adicionado aos dados experimentais, ao contrário dos resultados com dados experimentais sem ruído. As estimativas do método Evolução Diferencial (ED) para este parâmetro foram as que melhor se aproximaram do valor exato, com erro relativo próximo a 0,7%, diferente dos métodos Luus-Jaakola Modificado (LJM) e Firefly (FA) em que os erros relativos ficaram próximos de 2,7%.

Tabela 22 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1b.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	1,712633	0,026426	1,425323	0,026753	1,712633	0,025859
2	1,546689	0,026305	1,505283	0,025270	1,546689	0,022643
3	1,526337	0,025395	1,519552	0,025264	1,526337	0,022131
4	1,549047	0,025367	1,515984	0,025255	1,549047	0,021978
5	1,542331	0,025362	1,605265	0,025164	1,542331	0,021978
6	1,544156	0,025361	1,512435	0,024801	1,544156	0,021978
7	1,541454	0,025360	1,514976	0,024743	1,541454	0,021978
8	1,540553	0,025360	1,519146	0,024741	1,540553	0,021978
9	1,540817	0,025360	1,519146	0,024741	1,540817	0,021978
10	1,541542	0,025360	1,517634	0,024741	1,541542	0,021978
Erro	2,7695%	-	0,7043%	-	2,7695%	-

Fonte: O autor, 2021.

A evolução dos métodos para a estimativa do vetor $\vec{Z} = \{b\}$ com dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 29-a e 29-b. Já a evolução dos métodos

com relação a otimização da função objetivo $Q(\vec{Z})$ para dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 30-a e 30-b, respectivamente.

Figura 29 - Evolução das estimativas para o parâmetro b usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 1b.

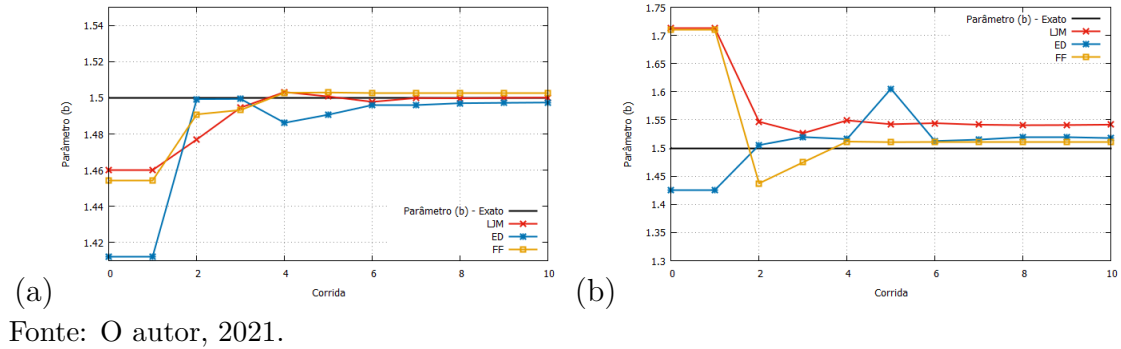
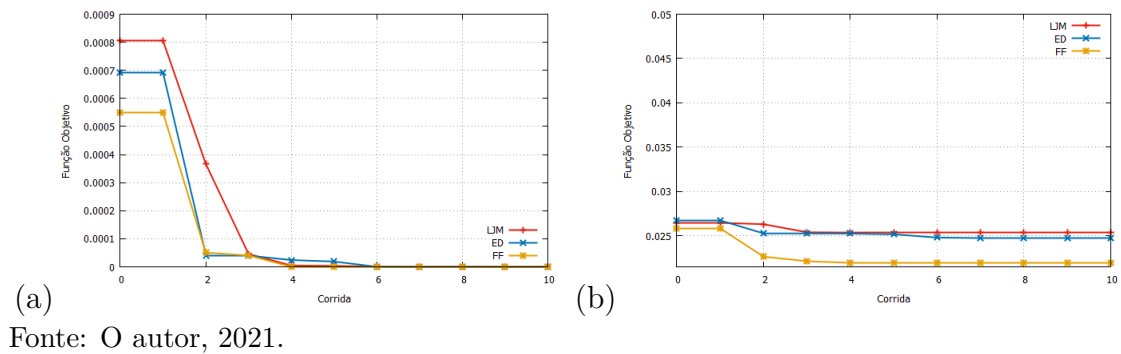


Figura 30 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro b - Caso 1b.



Na Tabela 23 é mostrado, de forma resumida, a melhor estimativa para cada um dos métodos usados com relação a cada um dos parâmetros da função $\beta(x)$.

Tabela 23 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ e $\vec{Z} = \{b\}$ - Caso 1b.

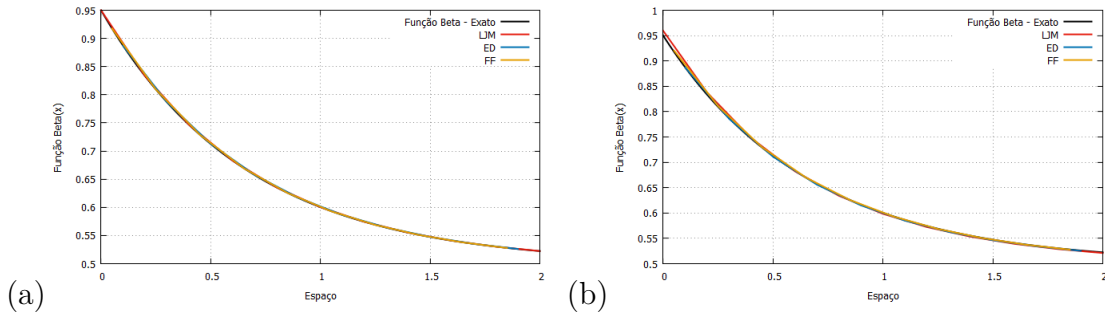
Métodos	Dados com 0% de ruído	Dados com 5% de ruído
LJM	$a = 0,449991$	$a = 0,459531$
ED	$a = 0,449628$	$a = 0,450678$
FA	$a = 0,450185$	$a = 0,453243$
LJM	$b = 1,500069$	$b = 1,541542$
ED	$b = 1,497357$	$b = 1,517634$
FA	$b = 1,502467$	$b = 1,541542$

Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 31-a é apresentada a curva exata da função $\beta(x)$ usada para este caso 1b, juntamente com as curvas estimadas por cada um dos métodos. Pode-se observar

que quando os dados experimentais estão sem ruídos as curvas da função $\beta(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados são praticamente idênticas. Quando é acrescido um ruído nos dados experimentais com até 5%, a função $\beta(x)$ estimada pelos métodos continua bem próxima da curva exata, como pode ser visto da Figura 31-b.

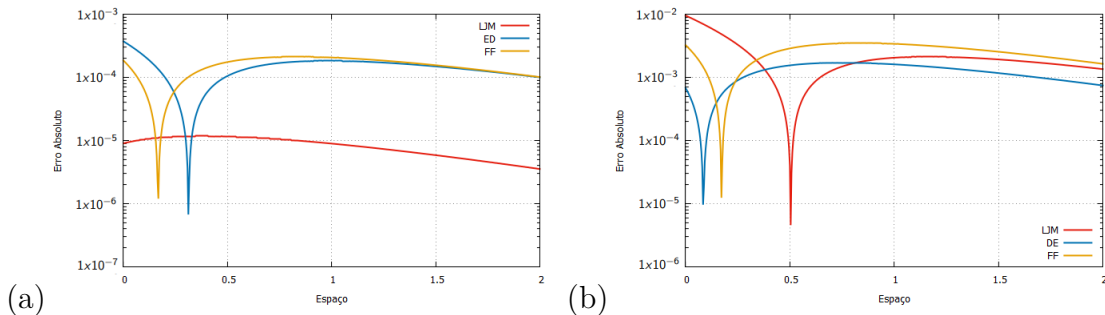
Figura 31 - Curva da função $\beta(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1b.



Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 32 é apresentado o erro absoluto referente a curva da função $\beta(x)$ para cada método. Pode-se observar na Figura 32-a, nos quais os dados experimentais estão sem ruídos, que as curvas referente ao erro são menores quando comparados com as curvas em que os dados experimentais estão com ruído de até 5%, Figura 32-b.

Figura 32 - Erro absoluto para a função $\beta(x)$ - Caso 1b.



Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 33 são apresentados os gráficos da concentração da variável observada $\phi(x, t)$ no centro da malha ao longo dos 10 primeiros instantes de tempo. Os parâmetros exatos a e b são comparados com os parâmetros estimados pelos métodos utilizados nessa dissertação, conforme Tabela 23. Percebe-se que mesmo com um ruído de até 5% acrescentado aos dados experimentais as curvas permanecem com boa acurácia.

Os gráficos representando o erro absoluto da solução, em um ponto no centro do domínio ao longo do instante de tempo, usando os parâmetros exatos e os parâmetros estimados referente a este caso 1b, são vistos na Figura 34. Na Figura 34-a os dados experimentais estão sem ruído e na Figura 34-b os dados experimentais estão com 5% de ruído.

Figura 33 - Curva de concentração $\phi(x, t)$ no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1b.

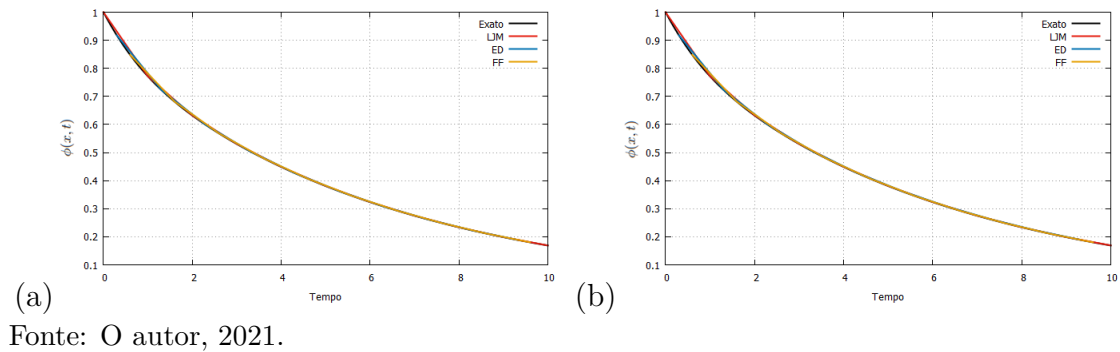
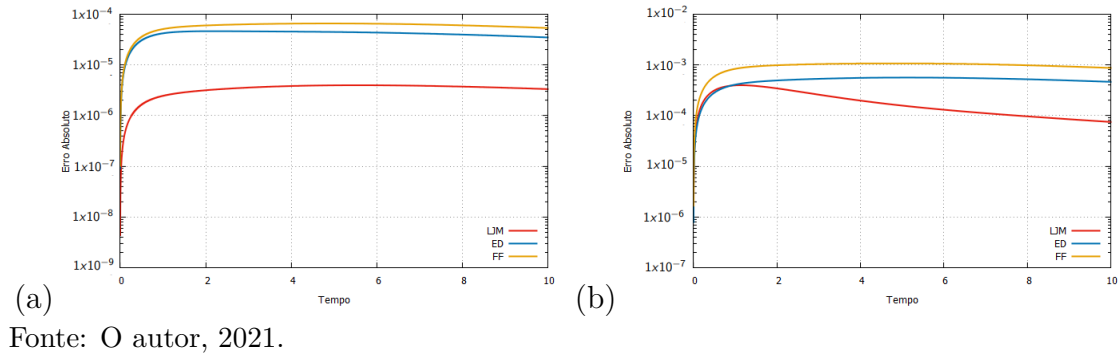


Figura 34 - Erro absoluto no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1b.



Caso 1c

Um dos objetivos desta dissertação é estimar os parâmetros a e b da função $\beta(x)$ dada pela Eq.(89). Para esse caso 1c serão adotados os seguintes valores para cada um dos parâmetros do modelo de difusão anômala: parâmetro $a = 0,45$, parâmetro $b = 45$, $k_2 = 10^{-1}$ e $k_4 = 10^{-5}$, ou seja, $\vec{Z}_{exato} = \{0,45; 45; 10^{-1}; 10^{-5}\}$. A seguir, apresenta-se a análise de sensibilidade para os parâmetros do modelo ao longo do espaço e do tempo estudados.

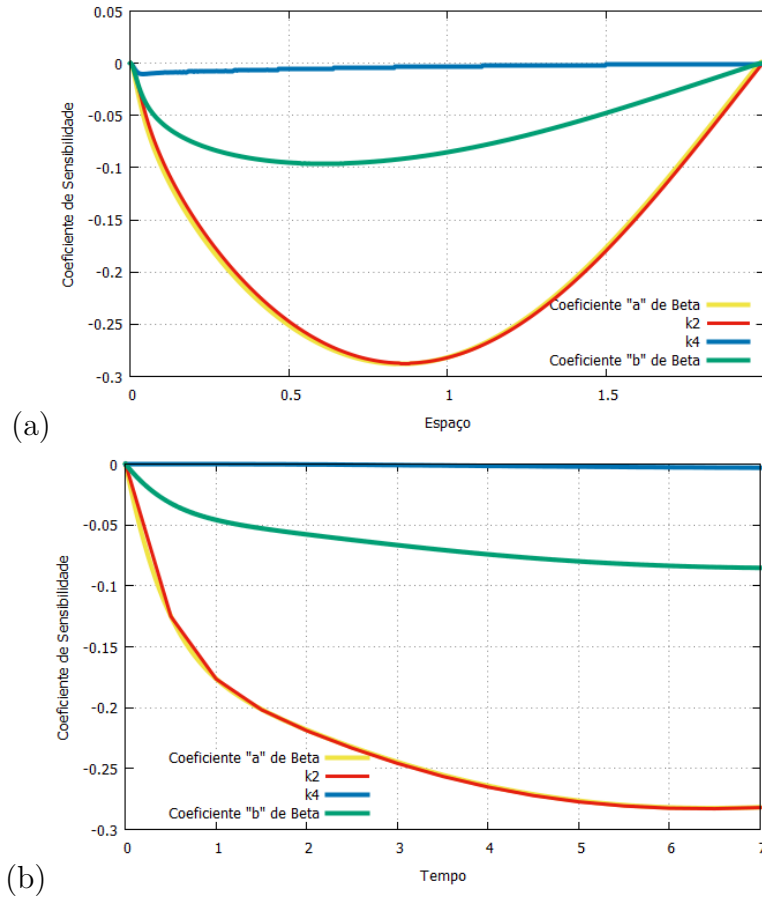
A função β usada para esse caso será dada pela seguinte equação:

$$\beta(x) = a \log(bx + 1) \quad (89)$$

Percebe-se, por meio da Figura 35-a, que alguns desses parâmetros possuem boa sensibilidade ao modelo de difusão anômala proposto por Bevilacqua e Galeão, ao longo do espaço, principalmente próximo a região do centro da malha em $x = 1$. Pode-se observar pela mesma Figura 35-a que a variável $\phi(x, t)$ é pouco sensível ao parâmetro k_4 , fazendo com que os métodos de otimização tenham dificuldades para estimá-lo. Para a solução

deste caso adotou-se então o sensor na posição central da malha.

Figura 35 - Coeficientes de sensibilidades normalizados ao longo do espaço e do tempo - Caso 1c.



Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 35-b está sendo apresentado os coeficientes de sensibilidade dos parâmetros ao longo dos 7 primeiros instantes de tempo com o sensor no centro da malha, em $x = 1$. Pode-se observar que as curvas de sensibilidade dos parâmetros (a) e k_2 são bem próximas, isso significa que esses parâmetros possuem uma dependência linear e dificilmente poderiam ser estimados juntos. A curva para o parâmetro k_4 é muito próximo de zero ao longo do tempo, ou seja, o modelo de difusão anômala é pouco sensível a este parâmetro e dificilmente será estimado com acurácia.

A seguir serão apresentados os resultados do problema inverso para o caso 1c mostrando o desempenho dos métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado (LJM), Evolução Diferencial (ED) e Firefly (FA). Será estimado o parâmetro (a) da função $\beta(x)$ com dados experimentais sem ruído e depois com um ruído de até 5%. Na Tabela 24 são apresentadas as estimativas para o parâmetro (a) no intervalo de busca $[10^{-5}, 1]$ considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $k_4 = 10^{-5}$, empregando dados experimentais sem ruído.

Na Tabela 25 são apresentadas as estimativas para o parâmetro a no intervalo de

Tabela 24 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1c.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	0,433495	0,007670	0,446128	0,000948	0,454257	0,009035
2	0,449476	$9,3444 \cdot 10^{-5}$	0,448798	0,000420	0,451704	0,000806
3	0,449674	$2,0272 \cdot 10^{-5}$	0,450826	0,000305	0,448938	$2,5477 \cdot 10^{-5}$
4	0,450016	$1,4191 \cdot 10^{-5}$	0,448427	$6,9643 \cdot 10^{-5}$	0,449914	$4,2879 \cdot 10^{-6}$
5	0,449476	$5,1951 \cdot 10^{-6}$	0,450086	$1,2306 \cdot 10^{-5}$	0,449944	$3,6153 \cdot 10^{-6}$
6	0,449639	$4,7016 \cdot 10^{-6}$	0,450086	$1,2306 \cdot 10^{-5}$	0,449928	$3,6048 \cdot 10^{-6}$
7	0,450001	$5,9394 \cdot 10^{-8}$	0,450978	$1,1108 \cdot 10^{-5}$	0,449928	$3,6048 \cdot 10^{-6}$
8	0,450014	$3,6807 \cdot 10^{-8}$	0,450666	$1,0070 \cdot 10^{-5}$	0,449928	$3,6048 \cdot 10^{-6}$
9	0,449987	$6,6676 \cdot 10^{-9}$	0,4500613	$1,6526 \cdot 10^{-6}$	0,449928	$3,6048 \cdot 10^{-6}$
10	0,449981	$6,3098 \cdot 10^{-9}$	0,4500613	$1,6526 \cdot 10^{-6}$	0,449928	$3,6048 \cdot 10^{-6}$
Erro	0,0040%	-	0,0136%	-	0,0159%	-

Fonte: O autor, 2021.

busca $[10^{-5}, 1]$ considerando os mesmos valores para os parâmetros k_2 e k_4 , empregando dados experimentais com ruído de até 5%. Percebe-se pouca perda de precisão na estimativa dos parâmetros quando um ruído de até 5% é adicionado aos dados experimentais, ficando próximos dos resultados com dados experimentais sem ruído. As estimativas do método Evolução Diferencial (ED) para este parâmetro foram as que melhor se aproximaram do valor exato, com erro relativo próximo a 0,02%, diferente dos métodos Luus-Jaakola Modificado (LJM) e Firefly (FA), nos quais os erros relativos ficaram próximos de 0,47%.

Tabela 25 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1c.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	0,456697	0,027184	0,451037	0,021662	0,460011	0,022265
2	0,449540	0,024474	0,451037	0,021662	0,460694	0,022244
3	0,447223	0,024337	0,451037	0,021662	0,452564	0,020901
4	0,447628	0,024318	0,451294	0,021658	0,451908	0,020892
5	0,447725	0,024316	0,449798	0,021269	0,452065	0,020891
6	0,447892	0,024313	0,449419	0,021268	0,452083	0,020891
7	0,448004	0,024313	0,448913	0,021255	0,452079	0,020891
8	0,447996	0,024313	0,448961	0,021254	0,452079	0,020891
9	0,447932	0,024313	0,449701	0,021194	0,452079	0,020891
10	0,447914	0,024313	0,450110	0,021178	0,452079	0,020891
Erro	0,4635%	-	0,0246%	-	0,4620%	-

Fonte: O autor, 2021.

A evolução dos métodos para a estimativa do vetor $\vec{Z} = \{a\}$ com dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 36-a e 36-b, respectivamente. Já a evolução dos métodos com relação a otimização da função objetivo $Q(\vec{Z})$ para dados experimentais sem ruído e com ruído de até 5% são apresentadas nas Figuras 37-a e 37-b.

Figura 36 - Evolução das estimativas para o parâmetro a usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 1c.

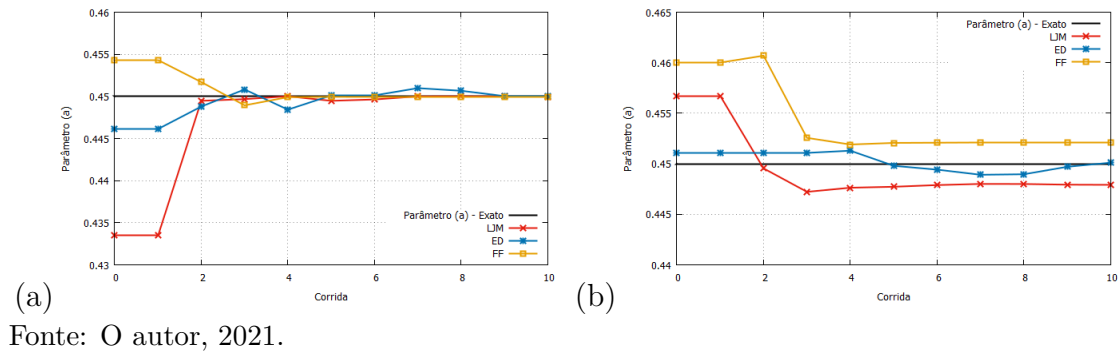
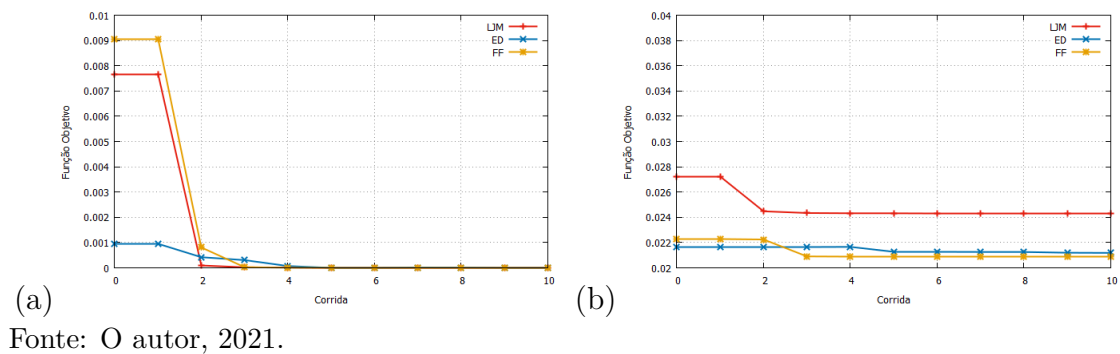


Figura 37 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro a - Caso 1c.



São apresentados os resultados dos métodos para estimar o parâmetro b da função β com dados experimentais sem ruído e depois com um ruído de até 5%. A busca para o parâmetro (b) será feita no intervalo $[10^{-5}, 100]$ considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $k_4 = 10^{-5}$. Os resultados da Tabela 26 estão com dados experimentais sem ruído e já pode-se destacar a dificuldade do método Firefly (FA) em estimar o parâmetro em comparação aos outros métodos.

Na Tabela 27 são apresentadas as estimativas para o parâmetro b no mesmo intervalo de busca considerando os mesmos valores para os parâmetros k_2 e k_4 , empregando dados experimentais com ruído de até 5%. Percebe-se novamente a perda de precisão na estimativa dos parâmetros quando um ruído de até 5% é adicionado aos dados experimentais, ao contrário dos resultados com dados experimentais sem ruído. As estimativas do método Luus-Jaakola Modificado (LJM) para este parâmetro foram as que melhor

Tabela 26 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados sem ruídos - Caso 1c.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	43,76449	0,000454	44,92502	$6,4127 \cdot 10^{-5}$	45,56585	0,000134
2	45,56876	$6,2071 \cdot 10^{-5}$	44,92502	$6,4127 \cdot 10^{-5}$	45,56585	0,000134
3	44,77380	$1,7633 \cdot 10^{-5}$	45,35071	$1,7501 \cdot 10^{-5}$	45,56585	0,000134
4	44,89539	$2,6871 \cdot 10^{-6}$	45,32031	$1,7149 \cdot 10^{-5}$	45,56585	0,000134
5	45,00694	$7,5363 \cdot 10^{-7}$	45,27485	$1,5240 \cdot 10^{-5}$	45,56585	0,000134
6	44,98295	$3,7466 \cdot 10^{-8}$	45,19121	$1,4367 \cdot 10^{-5}$	45,56585	0,000134
7	45,00659	$2,4688 \cdot 10^{-8}$	45,10630	$6,3434 \cdot 10^{-6}$	45,56585	0,000134
8	45,00674	$7,3882 \cdot 10^{-9}$	44,88454	$1,4409 \cdot 10^{-6}$	45,56585	0,000134
9	45,00146	$3,8376 \cdot 10^{-9}$	44,92837	$1,4203 \cdot 10^{-6}$	45,56585	0,000134
10	44,99987	$9,8408 \cdot 10^{-10}$	44,90769	$1,3234 \cdot 10^{-6}$	45,56585	0,000134
Erro	0,0002%	-	0,2051%	-	1,2574%	-

Fonte: O autor, 2021.

se aproximaram do valor exato, com erro relativo próximo a 0,69%, diferente do Firefly (FA) em que o erro relativo ficou próximo de 6,3%, nota-se que as estimativas para esse método não evoluíram com o avanço das gerações.

Tabela 27 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 1c.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	45,92301	0,022117	44,45155	0,024147	42,13255	0,020467
2	45,84311	0,021855	46,11276	0,024028	42,17025	0,020449
3	45,19019	0,021834	45,17339	0,023856	42,17025	0,020449
4	45,23264	0,021828	45,32070	0,023854	42,17025	0,020449
5	45,32114	0,021826	45,37120	0,023853	42,17025	0,020449
6	45,33865	0,021826	45,48937	0,023847	42,17025	0,020449
7	45,30859	0,021826	45,49074	0,023846	42,17025	0,020449
8	45,29814	0,021826	45,39812	0,023843	42,17025	0,020449
9	45,31080	0,021826	45,39410	0,023843	42,17025	0,020449
10	45,30906	0,021826	45,39410	0,023843	42,17025	0,020449
Erro	0,6868%	-	0,8757%	-	6,2883%	-

Fonte: O autor, 2021.

A evolução dos métodos para a estimativa do vetor $\vec{Z} = \{b\}$ com dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 38-a e 38-b, respectivamente. Para a evolução dos métodos com relação a otimização da função objetivo $Q(\vec{Z})$ para dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 39- e 39-b.

Na Tabela 28 mostra, de forma resumida, a melhor estimativa para cada um dos

Figura 38 - Evolução das estimativas para o parâmetro b usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 1c.

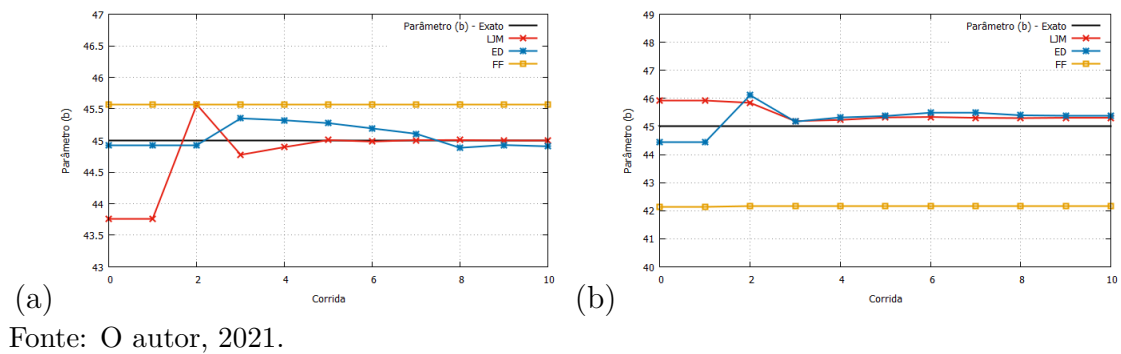
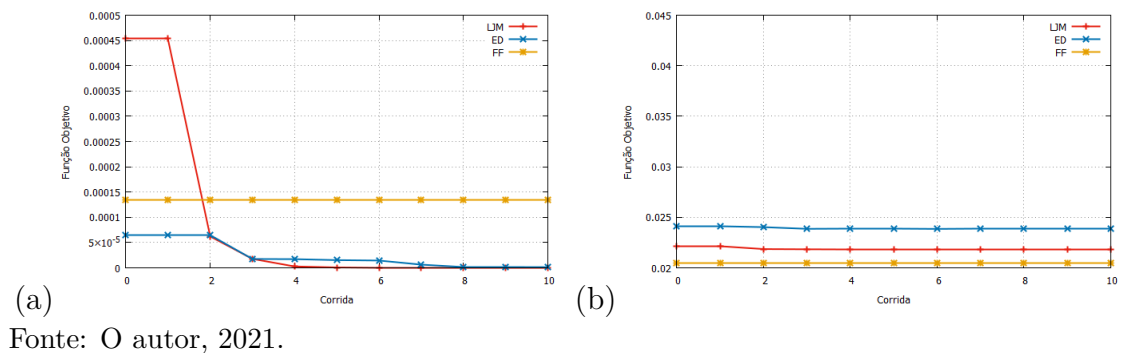


Figura 39 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro b - Caso 1c.



métodos usados com relação a cada um dos parâmetros da função $\beta(x)$.

Tabela 28 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ e $\vec{Z} = \{b\}$ - Caso 1c.

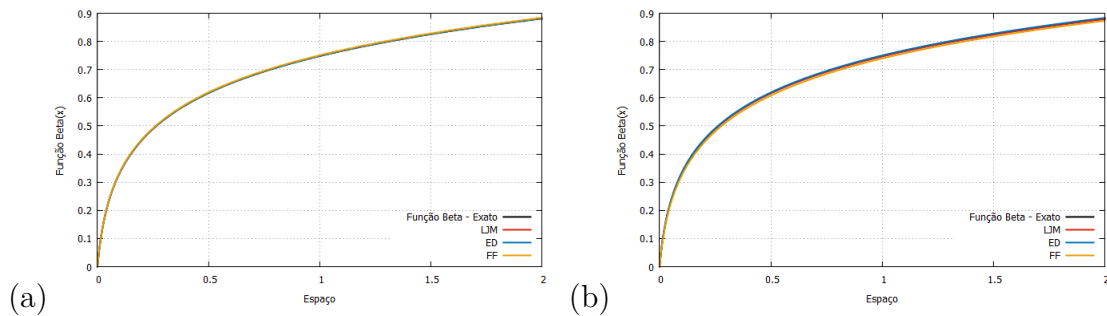
Métodos	Dados com 0% de ruído	Dados com 5% de ruído
LJM	$a = 0,449981$	$a = 0,447914$
ED	$a = 0,450061$	$a = 0,450110$
FA	$a = 0,449928$	$a = 0,452079$
LJM	$b = 44,99987$	$b = 45,30906$
ED	$b = 44,90769$	$b = 45,39410$
FA	$b = 45,56585$	$b = 42,17025$

Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 40-a é apresentada a curva exata da função $\beta(x)$ usada para este caso 1c, juntamente com as curvas estimadas por cada um dos métodos. Pode-se observar que quando os dados experimentais estão sem ruídos as curvas da função $\beta(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados são praticamente idênticas. Quando é acrescido um ruído nos dados experimentais com até 5% a função $\beta(x)$ estimada continua com boa aproximação da curva exata, mesmo com a dificuldade do método Firefly (FA) em estimar

os parâmetros da função, como pode-se ver na Figura 40-b.

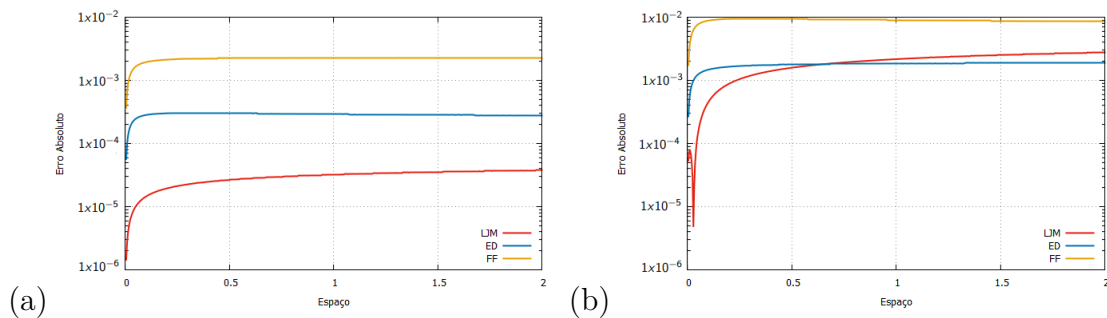
Figura 40 - Curva da função $\beta(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1c.



Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 41 é apresentado o erro absoluto referente a curva da função $\beta(x)$ para cada método. Pode-se observar na Figura 41-a, nos quais os dados experimentais estão sem ruídos, que as curvas referente ao erro são menores quando comparados com as curvas em que os dados experimentais estão com ruído de até 5%, Figura 41-b.

Figura 41 - Erro absoluto para a função $\beta(x)$ - Caso 1c.



Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 42 são apresentados os gráficos da concentração da variável observada $\phi(x, t)$ no centro da malha ao longo dos 7 primeiros instantes de tempo, nos quais os parâmetros exatos são comparados com os parâmetros estimados pelos métodos utilizados nessa dissertação, conforme Tabela 28. Na Figura 42-a os dados estão sem ruídos e na Figura 42-b os dados estão com ruídos de até 5%, percebe-se boa acurácia em ambos os casos.

Os gráficos representando o erro absoluto da solução, em um ponto no centro do domínio ao longo do instante de tempo, usando os parâmetros exatos e os parâmetros estimados referente a este caso 1c, são vistos na Figura 43. Na Figura 43-a os dados experimentais estão sem ruído e na Figura 43-b os dados experimentais estão com 5% de ruído.

Figura 42 - Curva de concentração $\phi(x, t)$ no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1c.

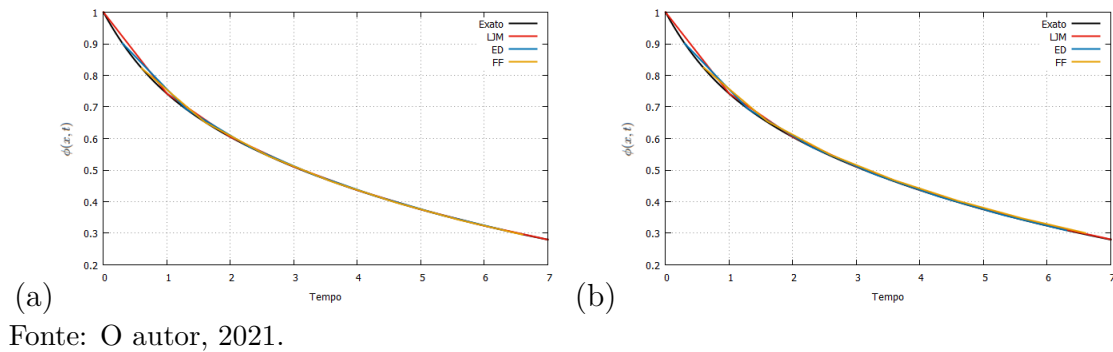
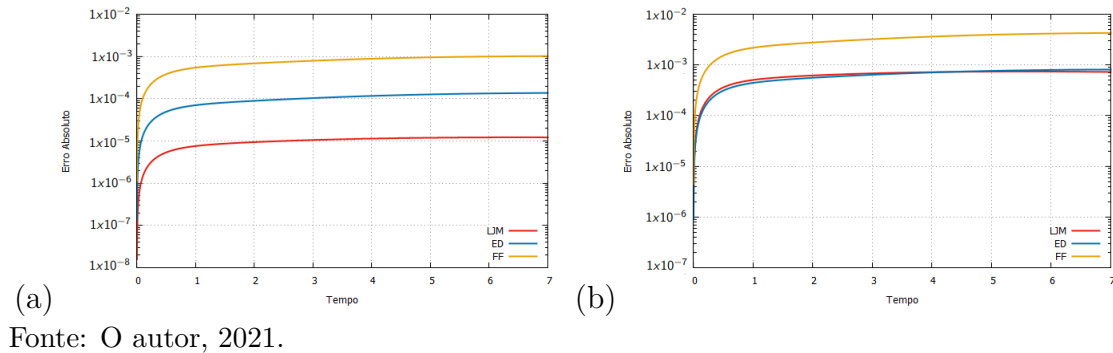


Figura 43 - Erro absoluto no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 1c.



4.2.2 Caso 2 - Coeficiente de reatividade com variação espacial

Caso 2a

Um dos objetivos desta dissertação é estimar os parâmetros a e b da função $k_4(x)$ dada pela Eq.(90). Para esse caso 2a são adotados os seguintes valores para cada um dos parâmetros do modelo de difusão anômala: parâmetro $a = 0,02$, parâmetro $b = 1$, $k_2 = 10^{-1}$ e $\beta = 0,5$, ou seja, $\vec{Z}_{exato} = \{0,02; 1; 10^{-1}; 0,5\}$. É apresentado a seguir a análise de sensibilidade para os parâmetros do modelo ao longo do espaço e do tempo estudados.

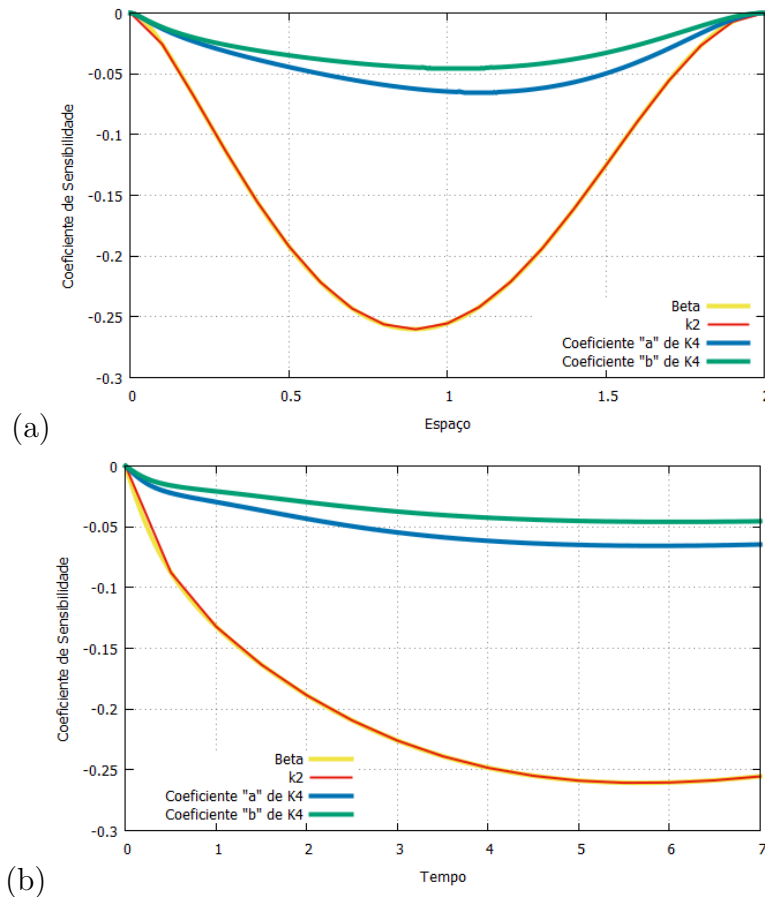
A função k_4 usada para esse caso será dada pela seguinte equação:

$$k_4(x) = a \log(bx + 1) \quad (90)$$

Percebe-se, por meio da Figura 44-a, que todos parâmetros possuem boa sensibilidade ao modelo de difusão anômala proposto por Bevilacqua e Galeão, ao longo do espaço, principalmente próximo a região do centro da malha em $x = 1$. Pode-se observar

pela mesma Figura 44-a que a variável $\phi(x, t)$ é menos sensível ao parâmetro k_4 , fazendo com que os métodos de otimização tenham um pouco mais de dificuldades para estimá-lo. Para a solução deste caso adotou-se então o sensor na posição central da malha.

Figura 44 - Coeficientes de sensibilidades normalizados ao longo do espaço e do tempo - Caso 2a.



Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 44-b está sendo apresentado os coeficientes de sensibilidade dos parâmetros ao longo dos 7 primeiros instantes de tempo com o sensor no centro da malha, em $x = 1$. Pode-se observar que as curvas de sensibilidade dos parâmetros β e k_2 são bem próximas, isso significa que esses parâmetros possuem uma dependência linear e dificilmente poderiam ser estimados juntos. A curva de sensibilidade para os parâmetros a e b da função k_4 é bem menor ao longo do tempo se comparado aos outros parâmetros, ou seja, o modelo de difusão anômala é pouco sensível a estes parâmetros e possivelmente os métodos de otimização terão dificuldade em estimá-los com acurácia.

A seguir serão apresentados os resultados do problema inverso para o caso 2a mostrando o desempenho dos métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado (LJM), Evolução Diferencial (ED) e Firefly (FA). Será estimado o parâmetro (a) da função $k_4(x)$ com dados experimentais sem ruído e depois com um ruído de até 5%. Na Tabela 29 são apresen-

Tabela 29 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados sem ruídos - Caso 2a.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	0,066775	0,905788	0,021189	0,000336	0,045497	0,116077
2	0,005440	0,044629	0,020511	$4,7319 \cdot 10^{-5}$	0,011242	0,020242
3	0,016086	0,010257	0,020255	$2,0989 \cdot 10^{-5}$	0,020318	$8,8753 \cdot 10^{-5}$
4	0,020574	0,000894	0,020165	$1,3269 \cdot 10^{-5}$	0,020286	$8,4768 \cdot 10^{-5}$
5	0,019592	0,000155	0,019894	$5,6407 \cdot 10^{-6}$	0,020291	$8,47301 \cdot 10^{-5}$
6	0,020089	0,000151	0,020022	$2,1030 \cdot 10^{-6}$	0,020291	$8,47301 \cdot 10^{-5}$
7	0,020149	$3,2228 \cdot 10^{-5}$	0,020036	$1,6789 \cdot 10^{-6}$	0,020291	$8,47301 \cdot 10^{-5}$
8	0,020053	$9,0000 \cdot 10^{-6}$	0,019997	$1,1601 \cdot 10^{-6}$	0,020291	$8,47301 \cdot 10^{-5}$
9	0,020028	$5,8949 \cdot 10^{-7}$	0,019965	$2,9199 \cdot 10^{-7}$	0,020291	$8,47301 \cdot 10^{-5}$
10	0,020018	$3,7535 \cdot 10^{-7}$	0,019968	$2,6938 \cdot 10^{-7}$	0,020291	$8,47301 \cdot 10^{-5}$
Erro	0,0913%	-	0,1588%	-	1,4576%	-

Fonte: O autor, 2021.

tados as estimativas para o parâmetro a no intervalo de busca $[10^{-8}, 0,04]$ considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $\beta = 0,5$, empregando dados experimentais sem ruído.

Na Tabela 30 são apresentadas as estimativas para o parâmetro a no mesmo intervalo de busca e considerando os mesmos valores para os parâmetros k_2 e β da Tabela 29, empregando dados experimentais com ruído de até 5%.

Tabela 30 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 2a.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	0,004112	0,069040	0,020165	0,024107	0,043575	0,120373
2	0,016000	0,050006	0,018327	0,023264	0,014276	0,047892
3	0,023063	0,042264	0,019170	0,022902	0,021625	0,025113
4	0,015334	0,026356	0,019170	0,022902	0,021927	0,025077
5	0,019077	0,021107	0,019502	0,022849	0,021931	0,025073
6	0,019531	0,020852	0,019484	0,022848	0,021919	0,025073
7	0,020332	0,020695	0,019484	0,022848	0,021919	0,025073
8	0,020332	0,020695	0,019690	0,022818	0,021919	0,025073
9	0,020373	0,020686	0,019644	0,022818	0,021919	0,025073
10	0,020422	0,020683	0,019570	0,022814	0,021919	0,025073
Erro	2,1116%	-	2,1465%	-	9,5978%	-

Fonte: O autor, 2021.

Percebe-se uma considerável perda de precisão na estimativa dos parâmetros quando um ruído de até 5% é adicionado aos dados experimentais, ficando distantes dos resultados com dados experimentais sem ruído. As estimativas do método Evolução Diferencial

(ED) e Luus-Jaakola Modificado (LJM) para este parâmetro foram as que melhor se aproximaram do valor exato, com erro relativo próximo a 2,1%, diferente do método Firefly (FA) nos quais os erros relativos ficaram próximos de 9,6%, conforme Tabela 30.

A evolução dos métodos para a estimativa do vetor $\vec{Z} = \{a\}$ com dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentadas nas Figuras 45-a e 45-b. Já a evolução dos métodos com relação a otimização da função objetivo $Q(\vec{Z})$ para dados experimentais sem ruído e com ruído de até 5% são apresentadas nas Figura 46-a e 46-b, respectivamnete.

Figura 45 - Evolução das estimativas para o parâmetro a usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 2a.

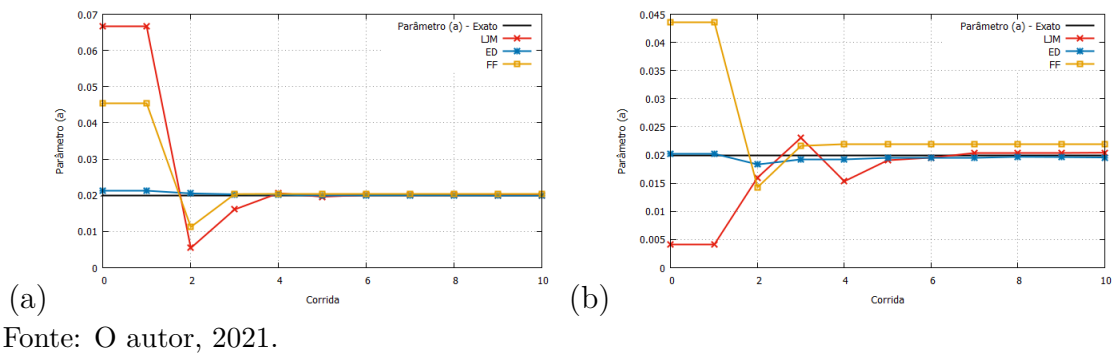
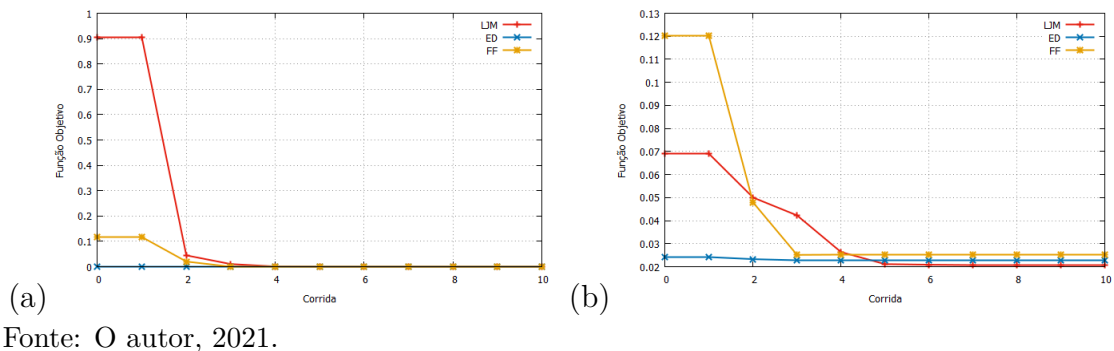


Figura 46 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro a - Caso 2a.



Agora serão apresentados os resultados dos métodos para estimar o parâmetro b da função k_4 com dados experimentais sem ruído e depois com um ruído de até 5%. A busca para o parâmetro b será feita no intervalo $[10^{-5}, 2]$ considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $\beta = 0,5$. Os resultados da Tabela 31 estão com dados experimentais sem ruído e já pode-se destacar a eficiência do método Luus-Jaakola Modificado (LJM) em estimar o parâmetro em comparação aos outros métodos.

Na Tabela 32 são apresentados as estimativas para o parâmetro b no mesmo intervalo de busca considerando os mesmos valores para os parâmetros k_2 e β , empregando dados experimentais com ruído de até 5%. Percebe-se novamente a perda de precisão na

Tabela 31 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados sem ruídos - Caso 2a.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	1,097173	0,000261	0,972830	$2,4248 \cdot 10^{-5}$	1,012407	$1,1335 \cdot 10^{-5}$
2	1,021933	$5,3559 \cdot 10^{-5}$	0,972830	$2,4248 \cdot 10^{-5}$	1,006887	$1,1137 \cdot 10^{-5}$
3	1,008637	$2,8414 \cdot 10^{-6}$	0,977715	$2,1101 \cdot 10^{-5}$	1,005742	$8,4333 \cdot 10^{-6}$
4	0,999592	$6,3412 \cdot 10^{-7}$	0,977715	$2,1101 \cdot 10^{-5}$	1,005698	$8,4328 \cdot 10^{-6}$
5	1,000149	$2,8436 \cdot 10^{-7}$	0,992110	$4,2825 \cdot 10^{-6}$	1,005675	$8,4328 \cdot 10^{-6}$
6	0,998959	$4,3993 \cdot 10^{-8}$	1,001649	$3,4817 \cdot 10^{-7}$	1,005675	$8,4328 \cdot 10^{-6}$
7	0,999529	$1,4233 \cdot 10^{-8}$	1,001649	$3,4817 \cdot 10^{-7}$	1,005676	$8,4328 \cdot 10^{-6}$
8	0,999730	$9,3021 \cdot 10^{-9}$	1,001185	$2,0092 \cdot 10^{-7}$	1,005676	$8,4328 \cdot 10^{-6}$
9	1,000095	$4,8146 \cdot 10^{-9}$	1,001605	$1,9694 \cdot 10^{-7}$	1,005676	$8,4328 \cdot 10^{-6}$
10	0,999994	$6,5265 \cdot 10^{-11}$	1,001476	$1,9006 \cdot 10^{-7}$	1,005676	$8,4328 \cdot 10^{-6}$
Erro	0,0005%	-	0,1476%	-	0,5676%	-

Fonte: O autor, 2021.

estimativa dos parâmetros quando um ruído de até 5% é adicionado aos dados experimentais, ao contrário dos resultados com dados experimentais sem ruído. As estimativas do método Firefly (FA) para este parâmetro foram as que melhor se aproximaram do valor exato, com erro relativo próximo a 0,67%, diferente do Luus-Jaakola Modificado (LJM) e do Evolução Diferencial (DE), em que o erro relativo ficou próximo de 5%.

Tabela 32 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 2a.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	1,047366	0,025272	0,966112	0,019680	1,151816	0,021850
2	0,969176	0,024785	0,962703	0,019678	1,016080	0,020997
3	0,963899	0,024771	0,962703	0,019678	1,004152	0,020988
4	0,954755	0,024766	0,960097	0,019675	1,006665	0,020987
5	0,955701	0,024765	0,954198	0,019671	1,006663	0,020987
6	0,953250	0,024765	0,953504	0,019671	1,006663	0,020987
7	0,955706	0,024765	0,953504	0,019671	1,006664	0,020987
8	0,956371	0,024765	0,952234	0,019671	1,006664	0,020987
9	0,955836	0,024765	0,951623	0,019671	1,006664	0,020987
10	0,955947	0,024765	0,951282	0,019671	1,006664	0,020987
Erro	4,4052%	-	4,8717%	-	0,6664%	-

Fonte: O autor, 2021.

A evolução dos métodos para a estimativa do vetor $\vec{Z} = \{b\}$ com dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentadas nas Figuras 47-a e 47-b. Para a evolução dos métodos com relação a otimização da função objetivo $Q(\vec{Z})$ com dados sem ruído e com

ruído de até 5% são apresentadas nas Figuras 48-a e 48-b, respectivamente.

Figura 47 - Evolução das estimativas para o parâmetro b usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 2a.

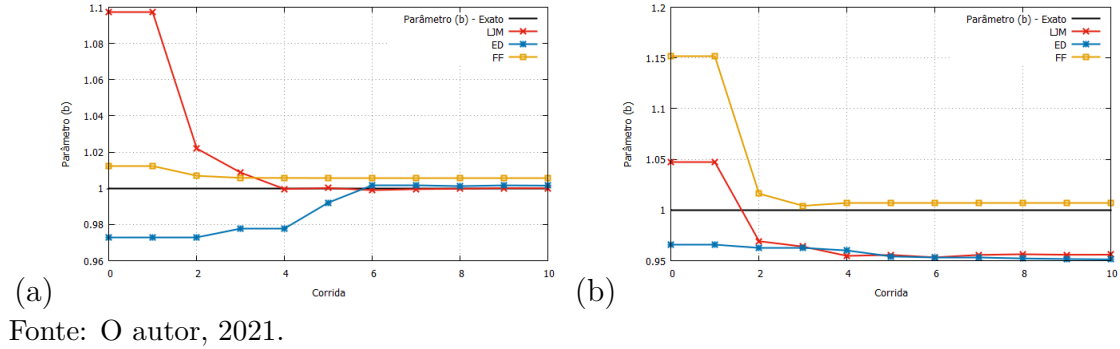
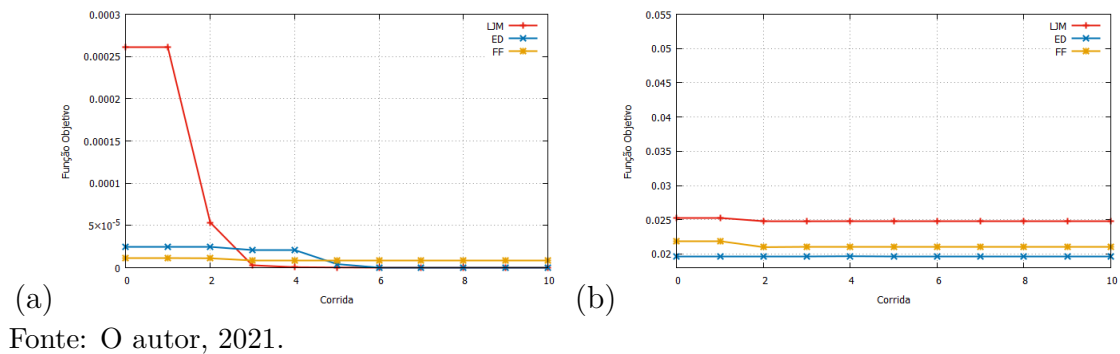


Figura 48 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro b - Caso 2a.



Na Tabela 33 é mostrado, de forma resumida, a melhor estimativa para cada um dos métodos usados com relação a cada um dos parâmetros da função $k_4(x)$.

Tabela 33 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ e $\vec{Z} = \{b\}$ - Caso 2a.

Métodos	Dados com 0% de ruído	Dados com 5% de ruído
LJM	$a = 0,020018$	$a = 0,020422$
ED	$a = 0,019968$	$a = 0,019570$
FA	$a = 0,020291$	$a = 0,021919$
LJM	$b = 0,999994$	$b = 0,955947$
ED	$b = 1,001476$	$b = 0,951282$
FA	$b = 1,005676$	$b = 1,006664$

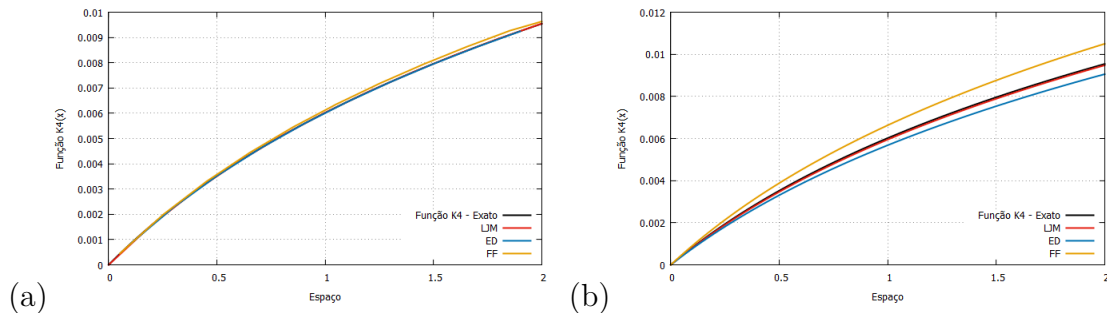
Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 49-a é apresentada a curva exata da função $k_4(x)$ usada para este caso 2a, juntamente com as curvas estimadas por cada um dos métodos. Pode-se observar

que quando os dados experimentais estão sem ruídos as curvas da função $k_4(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados são bem próximas.

Quando é acrescentado um ruído nos dados experimentais com até 5% de ruído, a função $k_4(x)$ estimada perde bastante a acurácia ficando um pouco distante da curva exata. Isso ocorre com os métodos Evolução Diferencial (DE) e Firefly (FA) como pode-se ver na Figura 49-b.

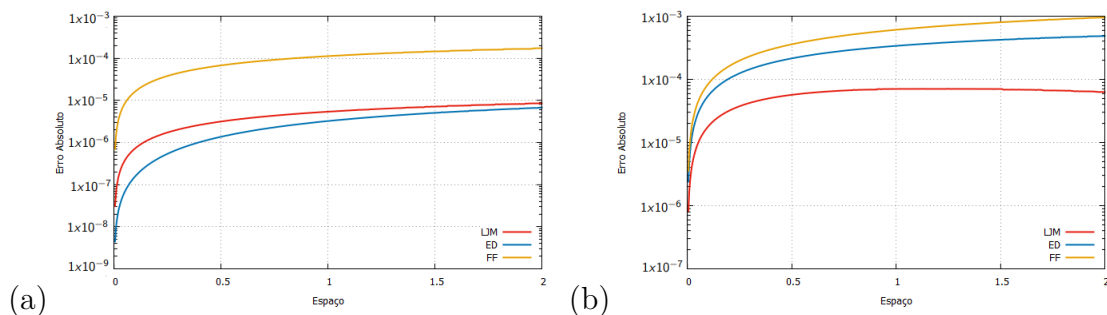
Figura 49 - Curva da função $k_4(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2a.



(a) Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 50 é apresentado o erro absoluto referente a curva da função $k_4(x)$ para cada método. Pode-se observar na Figura 50-a nos quais os dados experimentais estão sem ruídos que as curvas referente ao erro são menores quando comparados com as curvas em que os dados experimentais estão com ruído de até 5%, Figura 50-b.

Figura 50 - Erro absoluto para a função $k_4(x)$ - Caso 2a.



(a) Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 51 são apresentados os gráficos da concentração da variável observada $\phi(x, t)$ no centro da malha ao longo dos 7 primeiros instantes de tempo. Os parâmetros exatos são comparados com os parâmetros estimados pelos métodos utilizados nessa dissertação, conforme Tabela 33.

Na Figura 51-a os dados estão sem ruídos e na Figura 51-b os dados estão com ruídos de até 5%, percebe-se boa acurácia em ambos os casos.

Os gráficos representando o erro absoluto da solução, em um ponto no centro do domínio ao longo do instante de tempo, usando os parâmetros exatos e os parâmetros

Figura 51 - Curva de concentração $\phi(x, t)$ no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2a.

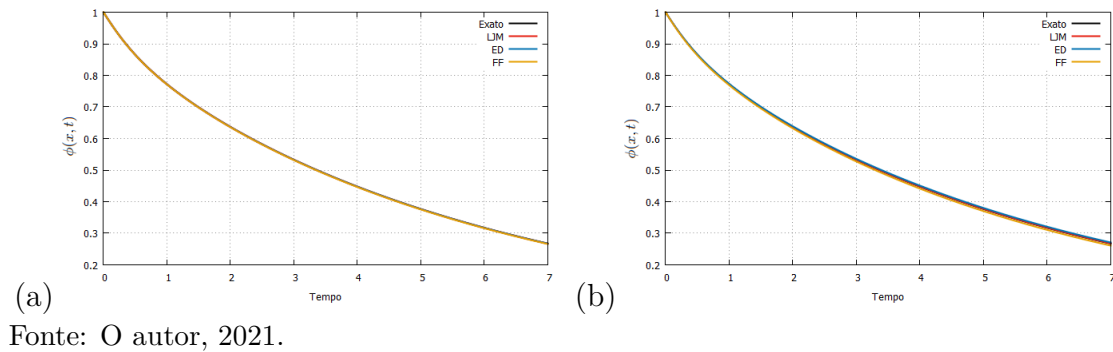
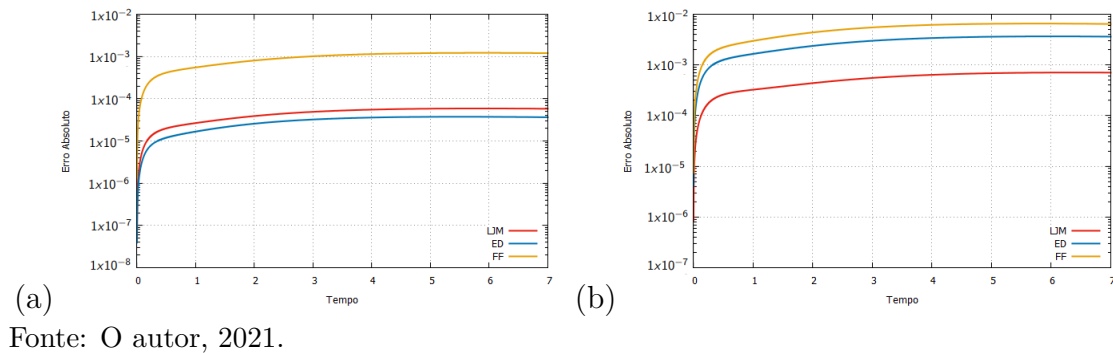


Figura 52 - Erro absoluto no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2a.



estimados referente a este caso 2a, são vistos na Figura 52. Na Figura 52-a os dados experimentais estão sem ruído e na Figura 52-b os dados experimentais estão com 5% de ruído.

Caso 2b

Um dos objetivos desta dissertação é estimar os parâmetros a e b da função $k_4(x)$ conforme Eq.(91). Para esse caso 2b é adotado os seguintes valores para cada um dos parâmetros do modelo de difusão anômala: parâmetro $a = 0,4$, parâmetro $b = 1,8$, $k_2 = 10^{-1}$ e $\beta = 0,5$, ou seja, $\vec{Z}_{exato} = \{0,4; 1,8; 10^{-1}; 0,5\}$. A seguir é apresentado a análise de sensibilidade para os parâmetros do modelo ao longo do espaço e do tempo estudados.

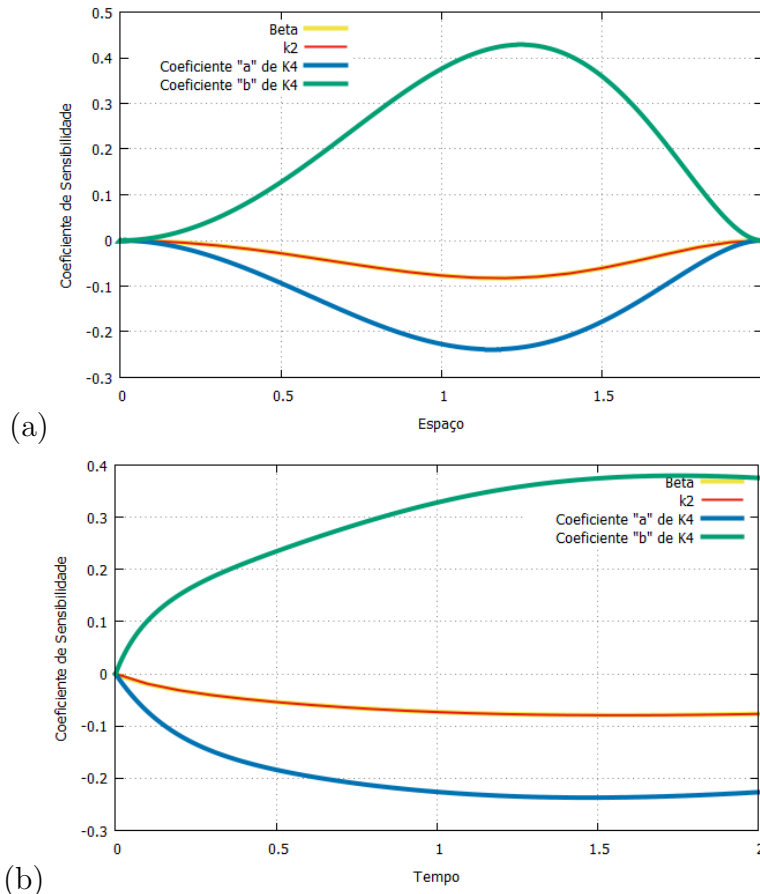
A função k_4 usada para esse caso será dada pela seguinte equação:

$$k_4(x) = ae^{-bx} \quad (91)$$

Percebe-se, por meio da Figura 53-a, que todos parâmetros possuem boa sensibilidade ao modelo de difusão anômala proposto por Bevilacqua e Galeão, ao longo do

espaço, principalmente próximo a região do centro da malha em $x = 1$. Pode-se observar pela mesma Figura 53-a que a variável $\phi(x, t)$ é menos sensível aos parâmetros k_2 e β , fazendo com que os métodos de otimização tenham um pouco mais de dificuldades para estimá-los. Para a solução deste caso adotou-se então o sensor na posição central do domínio.

Figura 53 - Coeficientes de sensibilidades normalizados ao longo do espaço e do tempo - Caso 2b.



Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 53-b são apresentados os coeficientes de sensibilidade dos parâmetros ao longo dos 2 primeiros instantes de tempo, com o sensor no centro do domínio, em $x = 1$. Pode-se observar que as curvas de sensibilidade dos parâmetros β e k_2 são bem próximas, isso significa que esses parâmetros possuem uma dependência linear e dificilmente poderiam ser estimados juntos. As curvas de sensibilidade para o parâmetro k_4 são bem maiores ao longo do tempo se comparado aos outros parâmetros, ou seja, o modelo de difusão anômala é muito sensível a estes parâmetros e possivelmente os métodos de otimização não terão dificuldade em estimá-los com precisão.

A seguir são apresentados os resultados do problema inverso para o caso 2b mostrando o desempenho dos métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado (LJM), Evolução

Diferencial (ED) e Firefly (FA). Será estimado o parâmetro (a) da função $k_4(x)$ com dados experimentais sem ruído e depois com um ruído de até 5%. Na Tabela 34 são apresentados as estimativas para o parâmetro (a) no intervalo de busca $[10^{-8}, 0,8]$ considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $\beta = 0,5$, empregando dados experimentais sem ruído.

Tabela 34 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados sem ruídos - Caso 2b.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	0,393310	0,042545	0,395446	0,004632	0,411417	0,061372
2	0,408461	0,014436	0,399771	0,002715	0,400352	0,002297
3	0,399641	0,001287	0,399771	0,002715	0,402429	0,001940
4	0,401282	$6,8186 \cdot 10^{-5}$	0,400395	0,002584	0,402188	0,001911
5	0,400690	$6,3560 \cdot 10^{-5}$	0,398061	0,000106	0,402188	0,001911
6	0,399771	$1,0268 \cdot 10^{-5}$	0,398061	0,000106	0,402188	0,001911
7	0,400265	$2,1276 \cdot 10^{-6}$	0,398615	$9,0335 \cdot 10^{-5}$	0,402188	0,001911
8	0,400112	$6,8526 \cdot 10^{-7}$	0,399428	$5,6209 \cdot 10^{-5}$	0,402188	0,001911
9	0,399977	$2,7933 \cdot 10^{-8}$	0,400349	$4,2224 \cdot 10^{-6}$	0,402188	0,001911
10	0,399997	$1,0792 \cdot 10^{-8}$	0,400330	$4,2021 \cdot 10^{-6}$	0,402188	0,001911
Erro	0,0005%	-	0,0826%	-	0,5470%	-

Fonte: O autor, 2021.

Na Tabela 35 são apresentados as estimativas para o parâmetro (a) no mesmo intervalo de busca e considerando os mesmos valores para os parâmetros k_2 e β da Tabela 34, empregando dados experimentais com ruído de até 5%. Percebe-se pouca perda de precisão na estimativa dos parâmetros quando um ruído de até 5% é adicionado aos dados experimentais, ficando próximos dos resultados com dados experimentais sem ruído. As estimativas do método Luus-Jaakola Modificado (LJM) para este parâmetro foram as que melhor se aproximaram do valor exato, com erro relativo próximo a 0,21%, diferente do método Firefly (FA) nos quais os erros relativos ficaram próximos de 1,05%.

A evolução dos métodos para a estimativa do vetor $\vec{Z} = \{a\}$ com dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 54-a e 54-b. Já a evolução dos métodos com relação a otimização da função objetivo $Q(\vec{Z})$ para dados experimentais sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 55-a e 55-b respectivamente.

Agora são apresentados os resultados dos métodos para estimar o parâmetro (b) da função k_4 com dados experimentais sem ruído e depois com um ruído de até 5%. A busca para o parâmetro (b) será feita no intervalo $[10^{-5}, 4]$ considerando $k_2 = 10^{-1}$ e $\beta = 0,5$. Os resultados da Tabela 36 estão com dados experimentais sem ruído e já pode-se destacar a eficiência dos métodos Luus-Jaakola Modificado (LJM) e Evolução Diferencial (DE) em estimar o parâmetro com um erro relativo próximo de 0,003%.

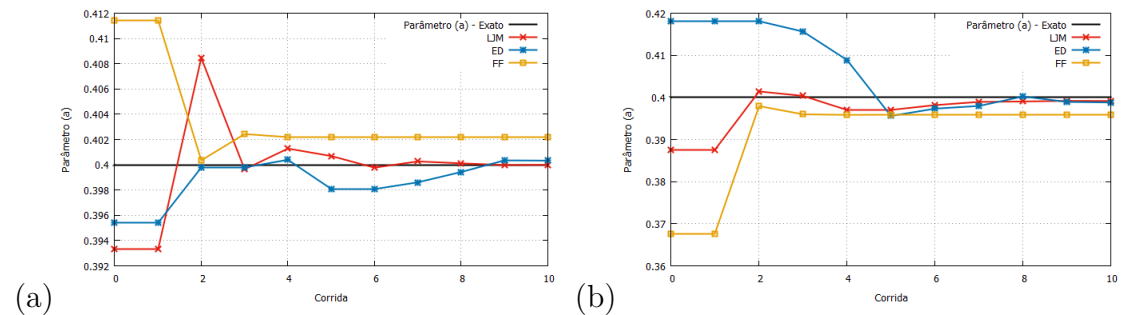
Na Tabela 37 são apresentados as estimativas para o parâmetro (b) no mesmo intervalo de busca considerando os mesmos valores para os parâmetros k_2 e k_4 , empregando

Tabela 35 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 2b.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	0,387499	0,033953	0,418166	0,029049	0,367670	0,084637
2	0,401408	0,027327	0,418166	0,029049	0,397923	0,025718
3	0,400357	0,021616	0,415635	0,026643	0,395978	0,024992
4	0,397028	0,021261	0,408886	0,023845	0,395844	0,024983
5	0,397028	0,021261	0,395603	0,021840	0,395828	0,024983
6	0,398168	0,021193	0,397329	0,021800	0,395828	0,024983
7	0,398935	0,021143	0,397966	0,021430	0,395828	0,024983
8	0,399030	0,021125	0,400216	0,020766	0,395828	0,024983
9	0,399183	0,021123	0,398929	0,020755	0,395828	0,024983
10	0,399155	0,021123	0,398787	0,020655	0,395828	0,024983
Erro	0,2110%	-	0,3030%	-	1,0429%	-

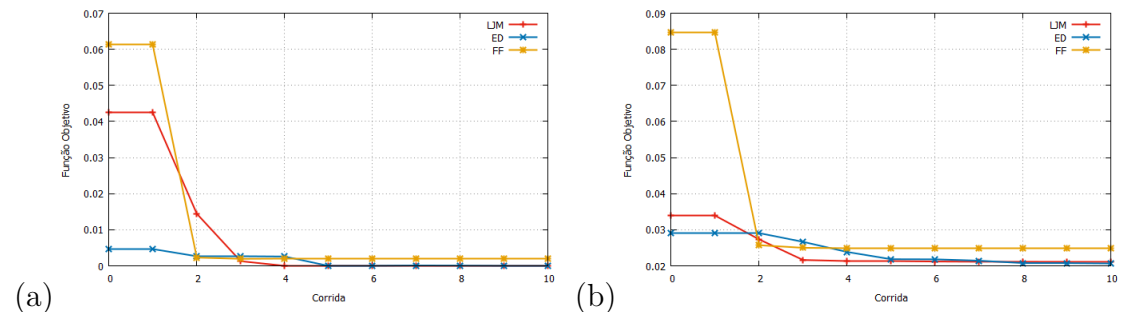
Fonte: O autor, 2021.

Figura 54 - Evolução das estimativas para o parâmetro a usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 2b.



Fonte: O autor, 2021.

Figura 55 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro a - Caso 2b.



Fonte: O autor, 2021.

dados experimentais com ruído de até 5%. Percebe-se novamente a perda de precisão na estimativa dos parâmetros quando um ruído de até 5% é adicionado aos dados experi-

Tabela 36 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados sem ruídos - Caso 2b.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	2,027545	0,246544	1,816362	0,016143	1,794097	0,074734
2	1,797558	0,006805	1,816362	0,016143	1,851714	0,050014
3	1,809729	0,000940	1,773645	0,002624	1,811687	0,000599
4	1,803621	0,000654	1,796572	0,000563	1,802472	0,000122
5	1,790899	0,000236	1,796572	0,000563	1,803838	0,000100
6	1,800109	$1,6075 \cdot 10^{-5}$	1,796400	0,000558	1,803734	0,000100
7	1,798869	$1,0349 \cdot 10^{-5}$	1,795138	0,000457	1,803737	0,000100
8	1,799694	$9,0277 \cdot 10^{-7}$	1,798565	0,000107	1,803737	0,000100
9	1,799638	$6,6676 \cdot 10^{-7}$	1,800192	$6,2960 \cdot 10^{-5}$	1,803737	0,000100
10	1,799944	$6,0720 \cdot 10^{-8}$	1,799948	$6,0883 \cdot 10^{-5}$	1,803737	0,000100
Erro	0,0030%	-	0,0028%	-	0,2076%	-

Fonte: O autor, 2021.

mentais, ao contrário dos resultados com dados experimentais sem ruído. As estimativas do método Luus-Jaakola Modificado (LJM) para este parâmetro foram as que melhor se aproximaram do valor exato, com erro relativo próximo a 0,07%, diferente do Firefly (FA) e do Evolução Diferencial (DE) nos quais os erros relativos ficaram próximos de 0,52%.

Tabela 37 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{b\}$ - Dados com até 5% de ruído - Caso 2b.

Execução	LJM	$Q(\vec{Z})$	ED	$Q(\vec{Z})$	FA	$Q(\vec{Z})$
1	1,900305	0,077256	1,856260	0,058103	1,793130	0,147931
2	1,809083	0,022661	1,868664	0,049257	1,849421	0,033331
3	1,800121	0,022495	1,853413	0,038921	1,812372	0,021942
4	1,799243	0,022483	1,774573	0,028538	1,808358	0,021842
5	1,803100	0,022470	1,789414	0,024933	1,809213	0,021840
6	1,803100	0,022470	1,791907	0,024598	1,809188	0,021840
7	1,800633	0,022462	1,811771	0,023431	1,809188	0,021840
8	1,801112	0,022461	1,811538	0,023419	1,809188	0,021840
9	1,801418	0,022458	1,809271	0,023216	1,809188	0,021840
10	1,801181	0,022458	1,809271	0,023216	1,809188	0,021840
Erro	0,0656%	-	0,5150%	-	0,5104%	-

Fonte: O autor, 2021.

A evolução dos métodos para a estimativa do vetor $\vec{Z} = \{b\}$ com dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 56-a e 56-b. Para a evolução dos métodos com relação a otimização da função objetivo $Q(\vec{Z})$ para dados sem ruído e com ruído de até 5% são apresentados nas Figuras 57-a e 57-b respectivamente.

Figura 56 - Evolução das estimativas para o parâmetro b usando os métodos (LJM), (ED) e (FA) - Caso 2b.

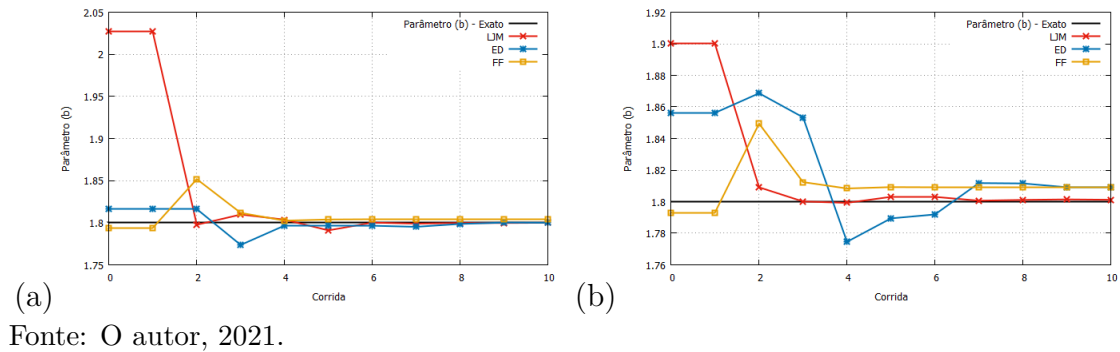
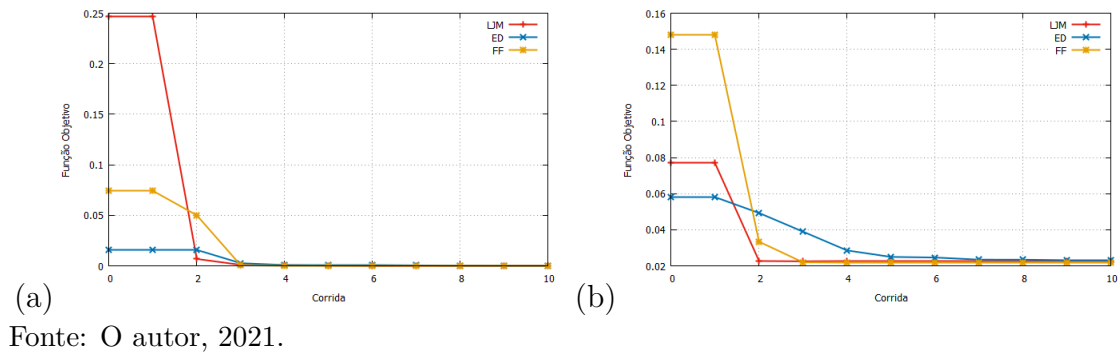


Figura 57 - Evolução da função objetivo $Q(\vec{Z})$ em relação ao parâmetro b - Caso 2b.



Na Tabela 38 é mostrado, de forma resumida, a melhor estimativa para cada um dos métodos usados com relação a cada um dos parâmetros da função $k_4(x)$.

Tabela 38 - Estimativa para o vetor $\vec{Z} = \{a\}$ e $\vec{Z} = \{b\}$ - Caso 2b.

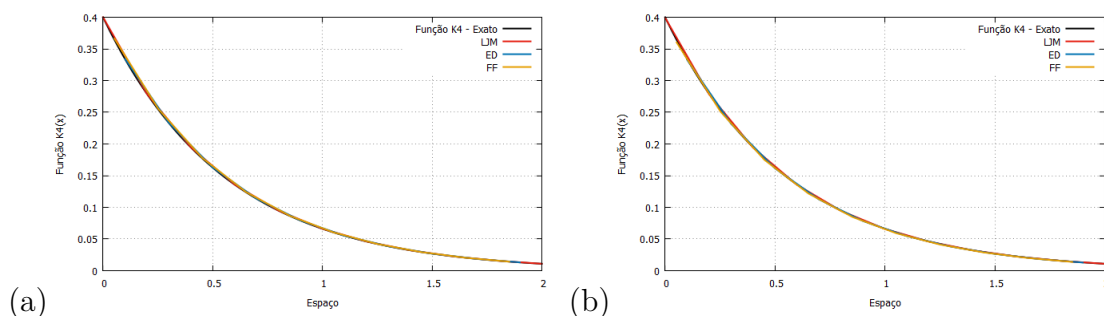
Métodos	Dados com 0% de ruído	Dados com 5% de ruído
LJM	$a = 0,399997$	$a = 0,399155$
ED	$a = 0,400330$	$a = 0,398787$
FA	$a = 0,402188$	$a = 0,395828$
LJM	$b = 1,799944$	$b = 1,801181$
ED	$b = 1,799948$	$b = 1,809271$
FA	$b = 1,803737$	$b = 1,809188$

Fonte: O autor, 2021.

Na Figura 58-a é apresentada a curva exata da função $k_4(x)$ usada para este caso 2b, juntamente com as curvas estimadas por cada um dos métodos. Pode-se observar que quando os dados experimentais estão sem ruídos as curvas da função $k_4(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados são bem próximas. Quando é acrescentado um ruído nos dados experimentais com até 5% de ruído, a função $k_4(x)$ estimada não perde a acurácia

ficando bem próximo da curva exata, como pode-se ver na Figura 58-b.

Figura 58 - Curva da função $k_4(x)$ usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2b.

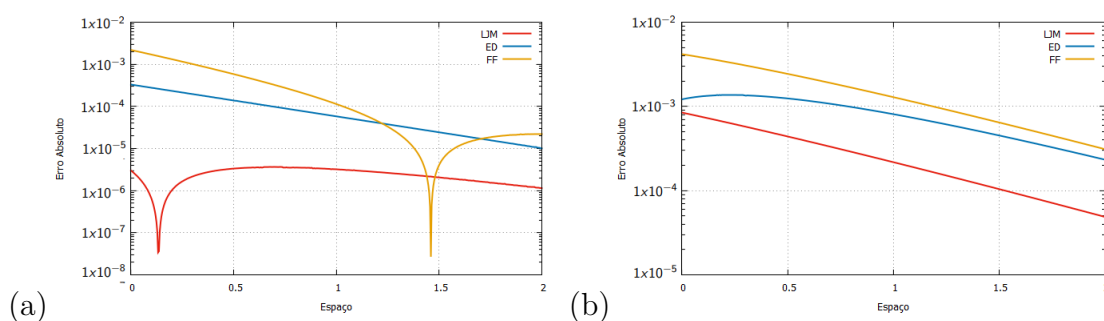


(a) Fonte: O autor, 2021.

(b)

Na Figura 59 é apresentado o erro absoluto referente a curva da função $k_4(x)$ para cada método. Pode-se observar na Figura 59-a em que os dados experimentais estão sem ruídos que as curvas referente ao erro são menores quando comparados com as curvas nos quais os dados experimentais estão com ruído de até 5%, Figura 59-b.

Figura 59 - Erro absoluto para a função $k_4(x)$ - Caso 2b.



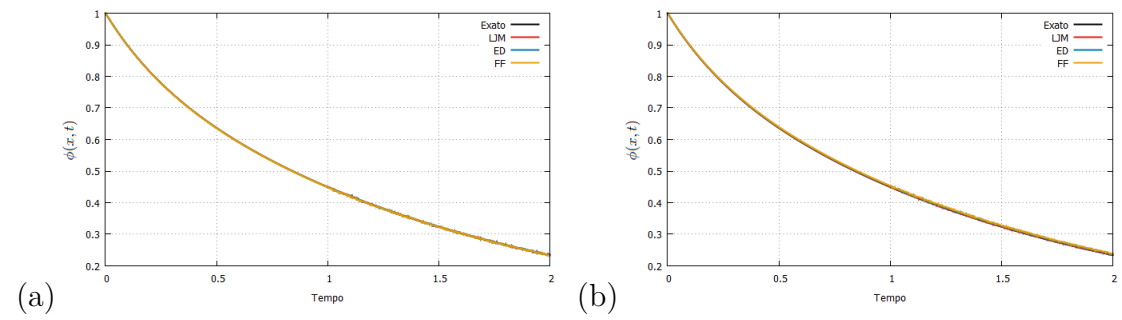
(a) Fonte: O autor, 2021.

(b)

Na Figura 60 são apresentados os gráficos da concentração da variável observada $\phi(x, t)$, no centro do domínio, ao longo dos 2 primeiros instantes de tempo, comparando os parâmetros exatos com os parâmetros estimados pelos métodos utilizados nessa dissertação, conforme Tabela 38. Na Figura 60-a os dados estão sem ruídos e na Figura 60-b os dados estão com ruídos de até 5%, percebe-se boa acurácia em ambos os casos.

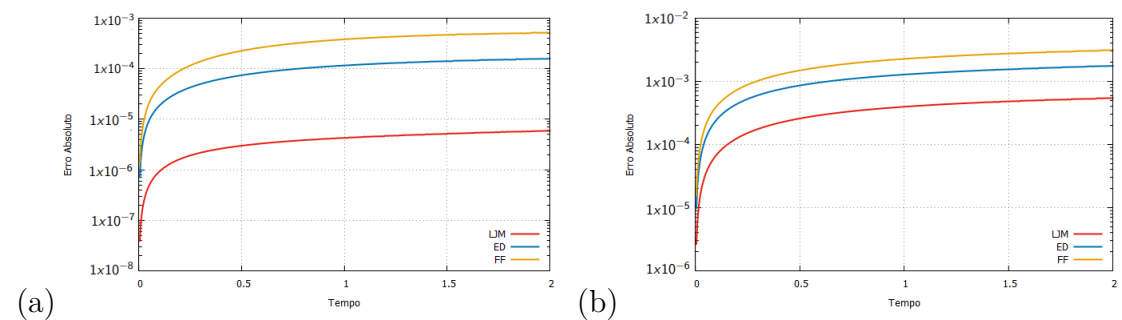
Os gráficos representando o erro absoluto da solução, em um ponto no centro do domínio ao longo do instante de tempo, usando os parâmetros exatos e os parâmetros estimados referente a este caso 2b, são vistos na Figura 61. Na Figura 61-a os dados experimentais estão sem ruído e na Figura 62-b os dados experimentais estão com 5% de ruído.

Figura 60 - Curva de concentração $\phi(x, t)$ no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2b.



Fonte: O autor, 2021.

Figura 61 - Erro absoluto no centro da malha usando os parâmetros exatos e estimados - Caso 2b.



Fonte: O autor, 2021.

5 NOVAS FORMULAÇÕES

O presente capítulo tem como objetivo realizar uma investigação do comportamento de duas novas equações que foram propostas pelo professor Luiz Bevilacqua. Para a solução dessas novas equações foram utilizados o Método de Diferenças Finitas com uma malha computacional de 500 nós e um intervalo de tempo $\Delta t = 10^{-3}$ para todos os casos testes. A solução numérica aproximada para o modelo foi obtida pelo código AdivDif4_xt programado em linguagem R.

Para uma melhor organização deste capítulo foi feita a solução dessas equações separadamente, denotando-se Problema 1 e Problema 2. Para o Problema 1 foram apresentados resultados referentes a três casos distintos (caso 3a, caso 3b e caso 3c) e para o Problema 2 foram apresentados resultados numéricos para cinco casos diferentes (caso 4a, caso 4b, caso 4c, caso 4d e caso 4e). Os casos 3a, 3b e 3c diferenciam-se pelas condições de contorno e iniciais, já os casos 4a, 4b, 4c, 4d e 4e se diferenciam pelos diferentes valores de p_1 e p_2 que aparecem na equação.

Nas seções seguintes foram realizados a discretização matemática para os nós internos da malha utilizando o Método de Diferenças Finitas.

5.1 Discretização para os nós internos usando o Método de Diferenças Finitas

5.1.1 Problema 1

Nesta subsecção são apresentadas as discretizações para os nós internos referente a Eq.(92).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = A \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - A \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{x^2 + 3} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right) - \lambda \phi \quad (92)$$

Reescrevendo-a, tem-se:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = A \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - A \frac{\partial}{\partial x} \left(B(x) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right) - \lambda \phi \quad (93)$$

em que $A = 1$, $\lambda = 0, 5$, e:

$$B(x) = \frac{1}{x^2 + 3} \quad (94)$$

Usando a regra da cadeia tem-se a seguinte equação:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \left(\frac{\partial B(x)}{\partial x} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + B(x) \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right) - \lambda \phi \quad (95)$$

Usando a seguinte notação:

$$A_1 = -\frac{\partial B(x)}{\partial x} \quad (96)$$

$$A_3 = -B(x) \quad (97)$$

a Eq.(95) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + A_1 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + A_3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} - \lambda \phi \quad (98)$$

Trocando os termos diferenciais da Eq.(98) pelo conjunto de Eq.(48-52) chega-se a equação discretizada para os nós internos dada da seguinte maneira:

$$a_{i-2} \phi_{i-2}^{t+\Delta t} + a_{i-1} \phi_{i-1}^{t+\Delta t} + a_i \phi_i^{t+\Delta t} + a_{i+1} \phi_{i+1}^{t+\Delta t} + a_{i+2} \phi_{i+2}^{t+\Delta t} = S_i \quad (99)$$

em que

$$a_{i-2} = h^2 \Delta t + 6A_1 h \Delta t - 12A_3 \Delta t \quad (100)$$

$$a_{i-1} = -16h^2 \Delta t - 12A_1 h \Delta t + 48A_3 \Delta t \quad (101)$$

$$a_i = 12h^4 + 30h^2 \Delta t - 72A_3 \Delta t \quad (102)$$

$$a_{i+1} = -16h^2 \Delta t + 12A_1 h \Delta t + 48A_3 \Delta t \quad (103)$$

$$a_{i+2} = h^2 \Delta t - 6A_1 h \Delta t - 12A_3 \Delta t \quad (104)$$

$$S_i = 12h^4 \phi_i^t (-\lambda \Delta t + 1) \quad (105)$$

Na Eq.(99), fazendo $i = 3, 4, \dots, N - 2$ são geradas $N - 4$ equações que satisfazem aos nós internos. Como o domínio foi dividido em N nós, para a solução do sistema linear são necessárias ainda mais quatro equações, visto que no sistema linear existem N incógnitas. As quatro equações usadas para o contorno são as mesmas equações descritas pelas Eq.(68), Eq.(70), Eq.(72) e Eq.(74).

5.1.2 Problema 2

Nesta subsecção foram apresentadas as discretizações para os nós internos referente a Eq.(106).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = p_1 k_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + k_4 p_2 (p_1 \ln(p_1)) \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} - \lambda \phi \quad (106)$$

Vale ressaltar que os parâmetros que aparecem nesta equação são todos constantes, em que $p_1 + p_2 = 1$, $0 \leq p_1 \leq 1$, $0 \leq p_2 \leq 1$, $k_2 = 0,001$ e $\lambda = 0,001$.

Denota-se como $B_1 = p_1 k_2$ e $B_2 = k_4 p_2 (p_1 \ln(p_1))$, sendo assim, a Eq.(106) pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = B_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + B_2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} - \lambda \phi \quad (107)$$

Trocando os termos diferenciais da Eq.(107) pelo conjunto de Eq.(48-52) chega-se a equação discretizada para os nós internos dada da seguinte maneira:

$$a_{i-2} \phi_{i-2}^{t+\Delta t} + a_{i-1} \phi_{i-1}^{t+\Delta t} + a_i \phi_i^{t+\Delta t} + a_{i+1} \phi_{i+1}^{t+\Delta t} + a_{i+2} \phi_{i+2}^{t+\Delta t} = S_i \quad (108)$$

no qual

$$a_{i-2} = B_1 h^2 \Delta t - 12B_2 \Delta t \quad (109)$$

$$a_{i-1} = -16B_1h^2\Delta t + 48B_2\Delta t \quad (110)$$

$$a_i = 12h^4 + 30B_1h^2\Delta t - 72B_2\Delta t \quad (111)$$

$$a_{i+1} = -16B_1h^2\Delta t + 48B_2\Delta t \quad (112)$$

$$a_{i+2} = B_1h^2\Delta t - 12B_2\Delta t \quad (113)$$

$$S_i = 12h^4\phi_i^t(-\lambda\Delta t + 1) \quad (114)$$

Na Eq.(108), fazendo $i = 3, 4, \dots, N - 2$ são geradas $N - 4$ equações que satisfazem aos nós internos. Como o domínio foi dividido em N nós, para a solução do sistema linear são necessárias ainda mais quatro equações, visto que no sistema linear existem N incógnitas. As quatro equações usadas para o contorno são as mesmas equações descritas pelas Eq.(68), Eq.(70), Eq.(72) e Eq.(74).

5.2 Resultados Numéricos - Problema 1

Caso 3a

Para solução numérica referente ao caso 3a foi utilizada a Eq.(115) como condição inicial e as equações presentes na Tabela 39 como condições de contorno.

$$\phi(x, t) = 0, 1e^{x^2}, \text{ com } 0 < x < 1, \text{ para } t = 0 \quad (115)$$

Pode-se observar na Figura 62-a a variação no perfil de concentração ao longo do domínio para alguns instantes de tempo. Inicialmente a concentração do lado esquerdo, próximo a $x = 0$ do domínio é bem menor em comparação ao lado direito, próximo de $x = 1$. Porém, com a evolução temporal do sistema, a difusão acontece e a concentração da matéria fica igualmente distribuída em todo domínio. Na Figura 62-b foi mostrado a

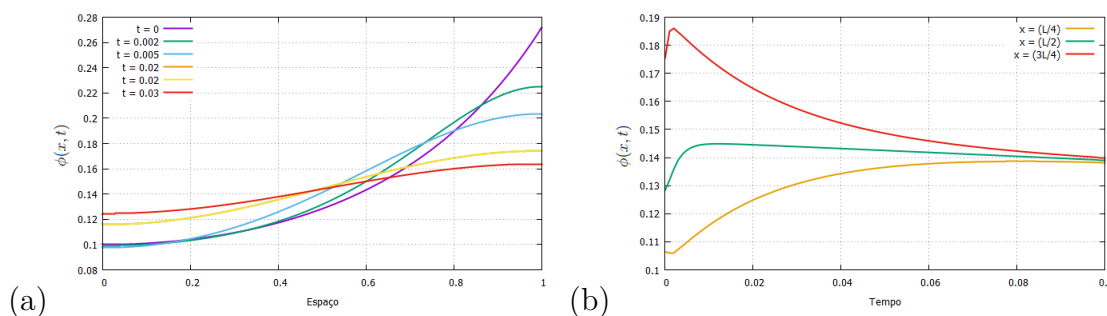
Tabela 39 - Condições de contorno referente ao caso 3a - Problema 1

	Lado esquerdo (x=0)	Lado direito (x=1)
C.C.1	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$
C.C.2	$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0$	$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0$

Fonte: O autor, 2021.

concentração em alguns pontos específicos do domínio ao longo do tempo.

Figura 62 - Perfil de concentração para a difusão referente ao caso 3a - Problema 1



Fonte: O autor, 2021.

Caso 3b

Para solução numérica referente ao caso 3b foi utilizada a Eq.(116) como condição inicial e as equações presentes na Tabela 40 como condições de contorno.

$$\phi(x, t) = 0,5(1 + \cos(\pi(x - 1))), \text{ com } 0 < x < 2, \text{ para } t = 0 \quad (116)$$

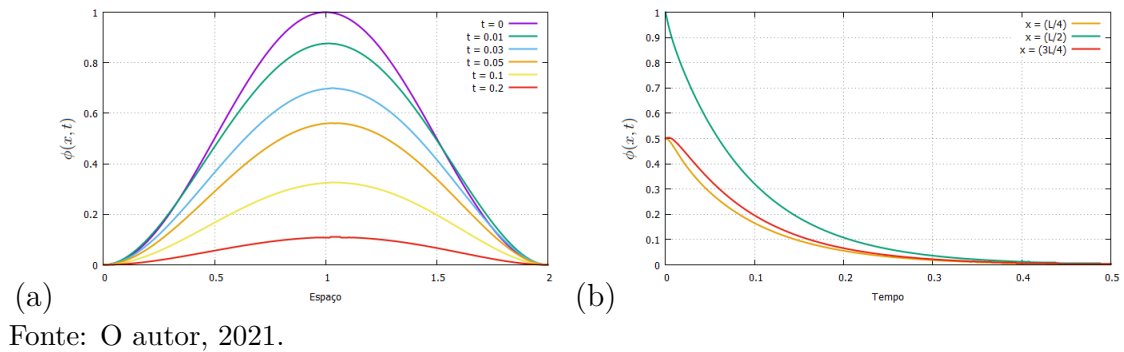
Tabela 40 - Condições de contorno referente ao caso 3b - Problema 1

	Lado esquerdo (x=0)	Lado direito (x=2)
C.C.1	$\phi(x, t) = 0$	$\phi(x, t) = 0$
C.C.2	$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} = 0$

Fonte: O autor, 2021.

Pode-se observar na Figura 63-a a variação no perfil de concentração ao longo do domínio para alguns instantes de tempo. A difusão do lado esquerdo, próximo de $x = 0$ acontece levemente mais rápida quando comparada com o lado direito, próximo a $x = 1$. Na Figura 63-b é apresentada a concentração ao longo do tempo em alguns pontos específicos do domínio. Observando essa figura, verifica-se que a curva de concentração em $x = L/4$ é menor quando comparado a $x = 3L/4$.

Figura 63 - Perfil de concentração para a difusão referente ao caso 3b - Problema 1



Caso 3c

Para solução numérica referente ao caso 3c foi utilizada a Eq.(117) como condição inicial e as equações presentes na Tabela 41 como condições de contorno.

$$\phi(x, t) = 0,5(1 + \cos(\pi(x - 1))), \text{ com } 0 < x < 2, \text{ para } t = 0 \quad (117)$$

Tabela 41 - Condições de contorno referente ao caso 3c - Problema 1

	Lado esquerdo (x=0)	Lado direito (x=2)
C.C.1	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$
C.C.2	$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0$	$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0$

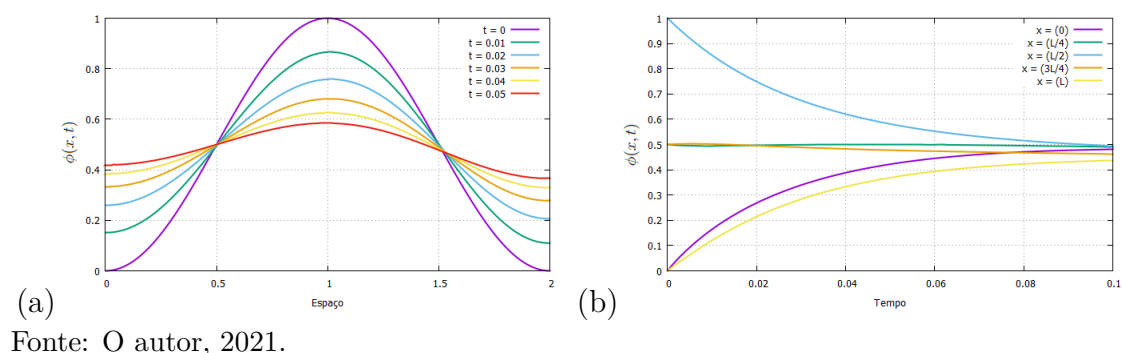
Fonte: O autor, 2021.

Pode-se observar na Figura 64-a a variação no perfil de concentração ao longo do domínio para alguns instantes de tempo. A difusão do lado esquerdo, próximo de $x = 0$ acontece levemente mais lenta comparada com o lado direito, próximo a $x = 2$. Na Figura 64-b é apresentada a concentração ao longo do tempo em alguns pontos específicos do domínio. Observando essa figura verifica-se que a curva de concentração em $x = 0$ é maior quando comparado a $x = L$.

5.3 Resultados numéricos - Problema 2

Para a solução numérica referente ao Problema 2 foi utilizada como condição inicial a Eq.(118) junto com as condições de contorno dadas pela Tabela 42. Todos os cinco casos

Figura 64 - Perfil de concentração para a difusão referente ao caso 3c - Problema 1



apresentados usaram as condições citadas acima.

$$\phi(x, t) = 0,5(1 + \cos(\pi(x - 1))), \text{ com } 0 < x < 2, \text{ para } t = 0 \quad (118)$$

Tabela 42 - Condições de contorno - Problema 2

	Lado esquerdo (x=0)	Lado direito (x=2)
C.C.1	$\phi(x, t) = 0$	$\phi(x, t) = 0$
C.C.2	$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} = 0$

Fonte: O autor, 2021.

Na Tabela 43 foram apresentados os valores de p_1 e p_2 utilizados em cada um dos cinco casos estudados.

Tabela 43 - Valores para os parâmetros p_1 e p_2

	p_1	p_2
Caso 4a	0,99	0,01
Caso 4b	0,8	0,2
Caso 4c	0,5	0,5
Caso 4d	0,2	0,8
Caso 4e	0,01	0,99

Fonte: O autor, 2021

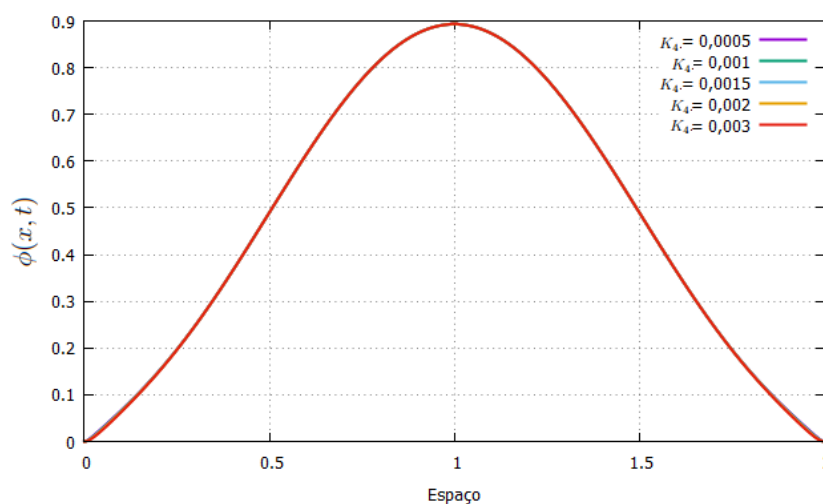
Caso 4a

Na Figura 65 é apresentado o perfil de concentração ao longo do espaço variando o parâmetro k_4 no instante $t = 20$. Pode-se observar nesse caso 4a que as curvas de concentração estão muito próximas mesmo com a variação do parâmetro k_4 .

Na Figura 66 tem-se uma comparação entre as curvas de concentração ao longo dos 100 primeiros instantes de tempo em um ponto no centro do domínio, variando o parâmetro k_4 . Novamente pode-se observar que as curvas estão muito próximas uma das outras.

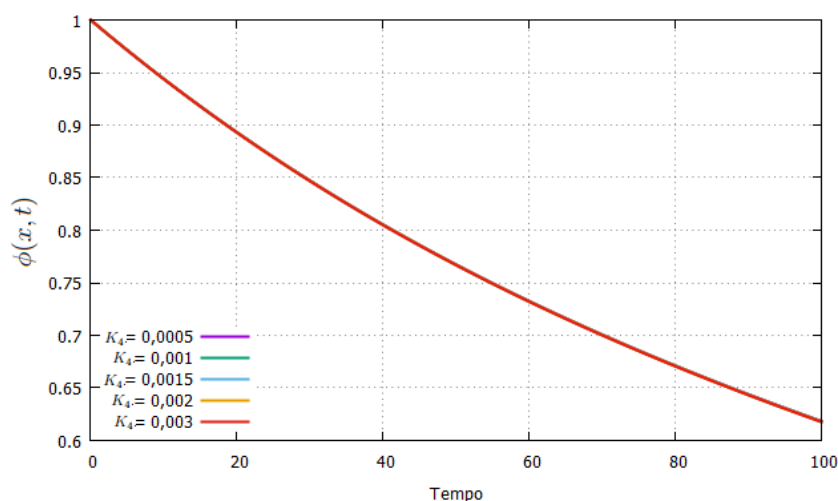
Netes casos, pode-se observar que a variação do parâmetro k_4 pouco influenciou no perfil de concetração.

Figura 65 - Curva de concentração ao longo do domínio referente ao caso 4a - Problema 2



Fonte: O autor, 2021

Figura 66 - Curva de concentração ao longo do tempo referente ao caso 4a - Problema 2



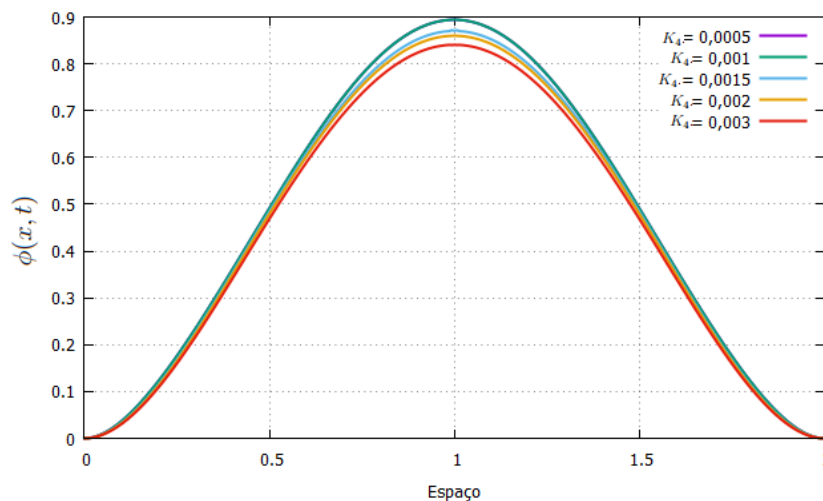
Fonte: O autor, 2021

Caso 4b

Na Figura 67 é apresentado o perfil de concentração ao longo do espaço variando o parâmetro k_4 no instante $t = 20$. Pode-se observar nesse caso 4b que as curvas de

concentração não estão tão próximas como no caso 4a. Quanto maior o valor do parâmetro k_4 menor é a curva de concentração de massa naquele instante observado.

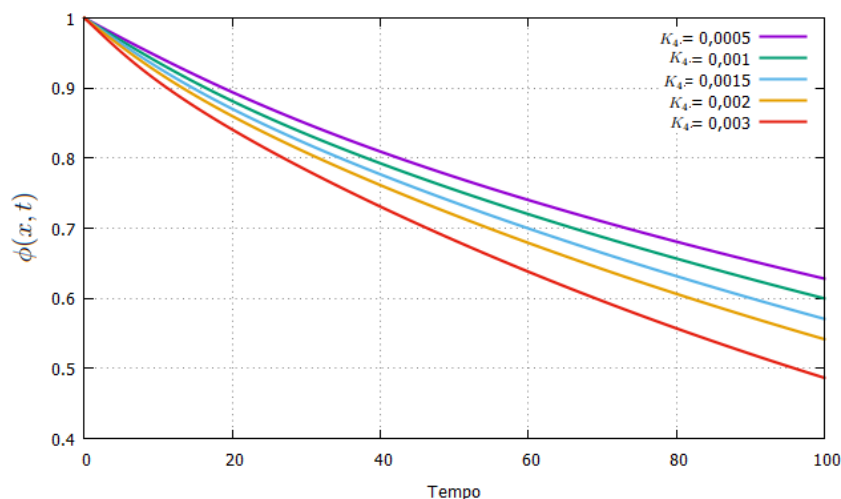
Figura 67 - Curva de concentração ao longo do domínio referente ao caso 4b - Problema 2



Fonte: O autor, 2021

Na Figura 68 tem-se uma comparação entre as curvas de concentração ao longo dos 100 primeiros instantes de tempo em um ponto no centro do domínio, variando o parâmetro k_4 . Novamente pode-se observar que as curvas de concentração dependem do valor do parâmetro k_4 .

Figura 68 - Curva de concentração ao longo do tempo referente ao caso 4b - Problema 2



Fonte: O autor, 2021

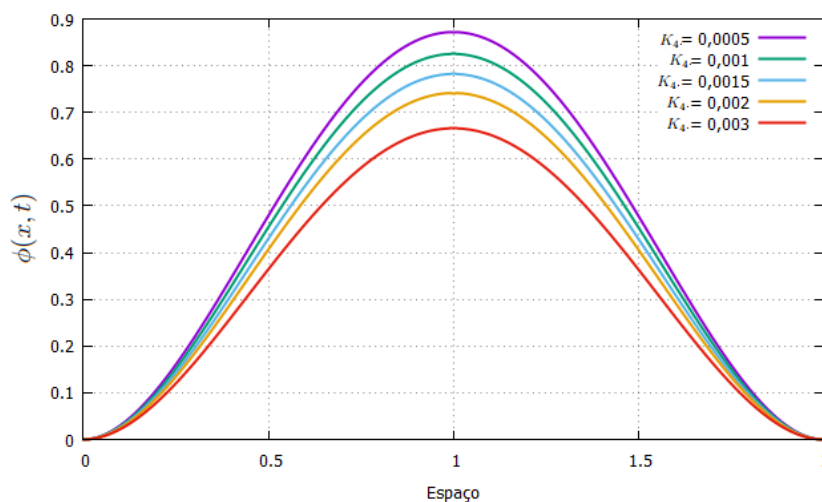
Caso 4c

Na Figura 69 é apresentado o perfil de concentração ao longo do espaço variando o parâmetro k_4 no instante $t = 20$. Pode-se observar nesse caso 4c que as curvas de

concentração não estão tão próximas como no caso 4a. Quanto maior o valor do parâmetro k_4 menor é a curva de concentração de massa naquele instante observado.

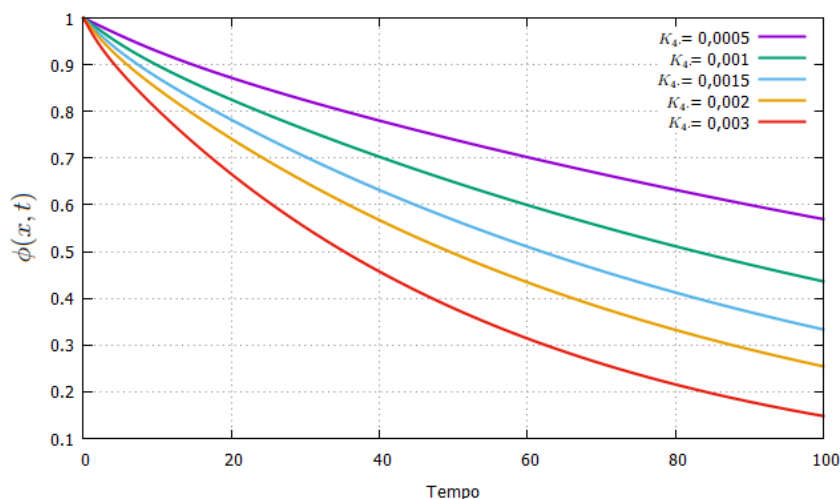
Na Figura 70 tem-se uma comparação entre as curvas de concentração ao longo dos 100 primeiros instantes de tempo em um ponto no centro do domínio, variando o parâmetro k_4 . Novamente pode-se observar que as curvas de concentração dependem do valor do parâmetro k_4 .

Figura 69 - Curva de concentração ao longo do domínio referente ao caso 4c - Problema 2



Fonte: O autor, 2021

Figura 70 - Curva de concentração ao longo do tempo referente ao caso 4c - Problema 2



Fonte: O autor, 2021

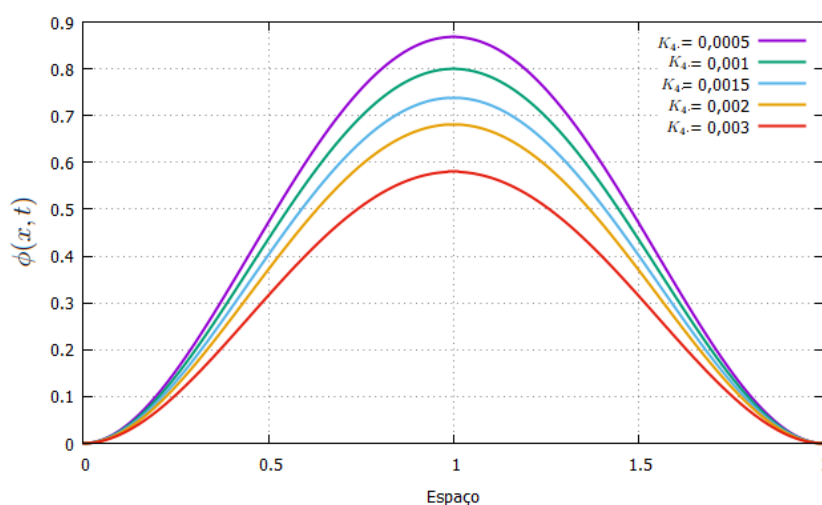
Caso 4d

Na Figura 71 é apresentado o perfil de concentração ao longo do espaço variando o parâmetro k_4 no instante $t = 20$. Pode-se observar nesse caso 4d que as curvas de

concentração não estão tão próximas como no caso 4a. Percebe-se que quanto maior o valor do parâmetro k_4 menor é a curva de concentração de massa naquele instante observado, ou seja, quanto maior o valor de k_4 mais rápido ocorre a difusão.

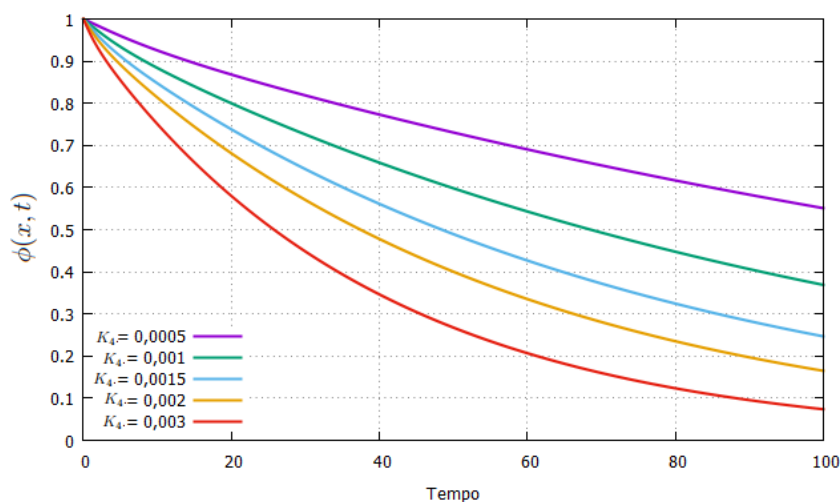
Na Figura 72 tem-se uma comparação entre as curvas de concentração ao longo dos 100 primeiros instantes de tempo em um ponto no centro do domínio, variando o parâmetro k_4 . Novamente pode-se observar que as curvas de concentração dependem do valor do parâmetro k_4 , ou seja, quanto maior o valor de k_4 menor é a curva de concentração e, conseqüentemente, mais rápido ocorre a difusão.

Figura 71 - Curva de concentração ao longo do domínio referente ao caso 4d - Problema 2



Fonte: O autor, 2021

Figura 72 - Curva de concentração ao longo do tempo referente ao caso 4d - Problema 2



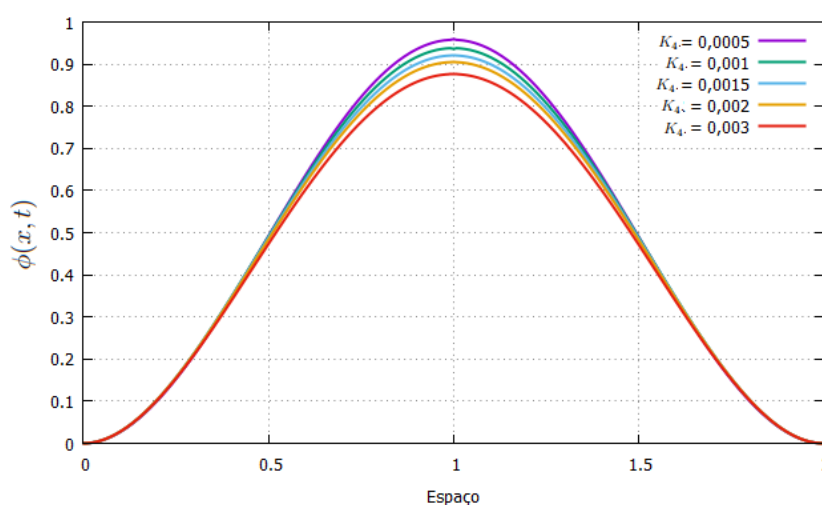
Fonte: O autor, 2021

Caso 4e

Na Figura 73 é apresentado o perfil de concentração ao longo do espaço variando o parâmetro k_4 no instante $t = 20$. Pode-se observar nesse caso 4e que as curvas de concentração não estão tão próximas como no caso 4a. Quanto maior o valor do parâmetro k_4 menor é a curva de concentração de massa naquele instante observado.

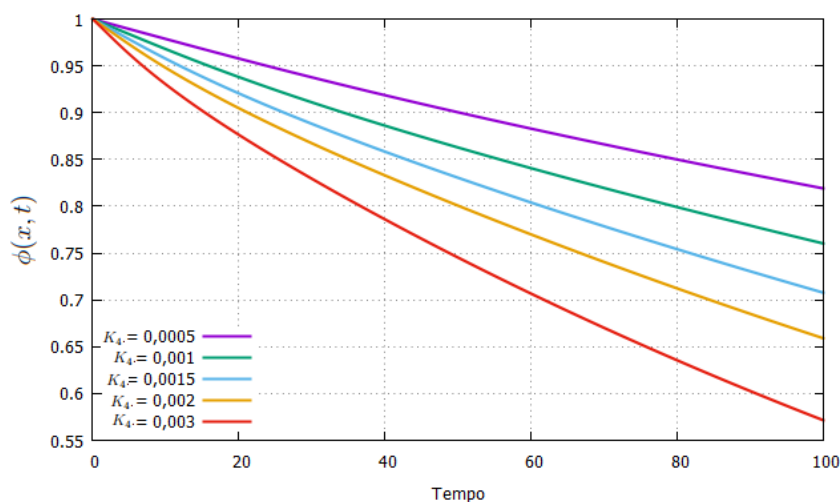
Na Figura 74 tem-se uma comparação entre as curvas de concentração ao longo dos 100 primeiros instantes de tempo em um ponto no centro do domínio, variando o parâmetro k_4 . Novamente pode-se observar que as curvas de concentração dependem do valor do parâmetro k_4 .

Figura 73 - Curva de concentração ao longo do domínio referente ao caso 4e - Problema 2



Fonte: O autor, 2021

Figura 74 - Curva de concentração ao longo do tempo referente ao caso 4e - Problema 2



Fonte: O autor, 2021

CONCLUSÕES

Nesta dissertação são apresentadas soluções para o problema direto e inverso referente ao modelo Bevilacqua-Galeão (BG) de difusão anômala com parâmetros variáveis.

Para solução do problema direto foi utilizado o Método de Diferenças Finitas. Vale ressaltar que os parâmetros $\beta(x)$ e $k_4(x)$ variavam ao longo do domínio.

Por meio dos resultados obtidos nos casos apresentados pode-se verificar a influência que os parâmetros $\beta(x)$ e $k_4(x)$ trouxeram a curva de concentração em um processo difusivo. Como os valores referentes aos parâmetros são variáveis, isso permite que em determinada região do espaço a difusão ocorra de forma mais lenta e em outra região ocorra de forma mais rápida.

Para a solução do problema inverso foram utilizados os métodos estocásticos Luus-Jaakola Modificado, Evolução Diferencial e Firefly. Antes de realizar a estimativa dos parâmetros $\beta(x)$ e $k_4(x)$ foi realizada uma análise de sensibilidade referente a cada coeficiente. Com a análise de sensibilidade foi possível a escolha de dados experimentais ótimos, importante para a solução do problema inverso.

Na estimativa dos parâmetros, observou-se a eficiência de cada método utilizado, principalmente quando os dados experimentais sintéticos não estavam contaminados com ruído. Quando o ruído de até 5% foi acrescido nos dados experimentais os métodos apresentaram uma perda de acurácia na estimativa dos parâmetros. Vale ressaltar o caso 2a em que o método Firefly apresentou uma dificuldade em estimar o parâmetro (a) de $k_4(x)$. O erro relativo comparado com o parâmetro exato chegou a, aproximadamente, 9,6%, diferente dos outros métodos que apresentaram erro relativo próximo a 2,2% para o mesmo parâmetro. Acredita-se que a dificuldade do método Firefly na estimação deste parâmetro seja algo peculiar ao método ou mesmo pela baixa sensibilidade do parâmetro estimado.

Sugere-se para trabalhos futuros a solução do problema direto bidimensional para o modelo Bevilacqua-Galeão (BG) usando o Método de Diferenças Finitas, assim como a solução com novas equações referentes aos parâmetros $\beta(x)$ e $k_4(x)$. Com relação ao problema inverso, sugere-se a solução utilizando estratégias híbridas entre os métodos estocásticos e determinísticos com a finalidade de minimizar o custo computacional. Apresentar também a solução do problema inverso para as novas formulações propostas por Bevilacqua.

REFERÊNCIAS

- ATSUMI, H. Hydrogen bulk retention in graphite and kinetics of diffusion. *J Nuc Mat* 307/311, pp. 1466-1470, 2002.
- BEVILACQUA, L., GALEAO, A. C. N. R., e COSTA, F. P., A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion process. *An Acad Bras Cienc*, 83:1443–1464, 2011a.
- BEVILACQUA, L., GALEAO, A. C. N. R., e COSTA, F. P., On the significance of higher order differential terms in diffusion process. *J. Brazilian Soc. Mech Sci Eng.* 33:166-175, 2011b.
- BEVILACQUA, L., GALEAO, A. C. N. R., SIMAS, J. G., e DOCE, A. P. R, A new theory for anomalous diffusion with a bimodal flux distribution. *J. Brazilian Soc. Mech. Sci. Eng.* 35:431-440, 2013.
- BEVILACQUA, L., JIANG, M., SILVA NETO, A. J. e GALEÃO, A. C. N. R., An Evolutionary Model of Bi-Flux Diffusion Processes. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 38:1421-1432, 2016.
- CARSLAW, H.S., Introduction to the Mathematical Theory of the Conduction of Heat in Solids, *Scholar's Choice Edition*, 2015.
- D'ANGELO, M. V., FONTANA, E., CHERTCOFF, R., e ROSEN, M., Retention phenomena in non-Newtonian fluid flows. *Physics A* 327, pp. 44-48, 2003.
- JIANG, M., BEVILACQUA, L., GALEÃO, L. A. C. N. R., SILVA NETO, A. J., e ZHU, J. Bi-Flux theory applied to the dispersion of particles in anisotropic substratum. *Applied Mathematical Modeling* 64, pp 121-134 (2018).
- JIANG, X. Y., XU, M. Y. Analysis of fractional anomalous diffusion caused by an instantaneous point source in disordered fractal media. *Int. J. Non-linear Mechanics.*, v. 41, p. 156-165, 2006.
- KNUPP, D. C., SILVA NETO, A. J. e SACCO, W. F., Radiative properties estimation with the Luus-Jaakola and the Particle Collision Algorithm. *Computer Modeling in Engineering Sciences*, Vol. 54, No. 2, pp. 121-145, 2009a.

- KNUPP, D. C., SILVA NETO, A. J. e SACCO, W. F., Radiative properties estimation in two-layer participating media with the Luus-Jaakola method. *Proceedings 20th International Congress of Mechanical Engineering*, Gramado, 2009b.
- KNUPP, D. C., SACCO, W. F., SILVA NETO, A. J. Método de Luus-Jaakola. In: Silva Neto, A. J., Becceneri, J. C., Velho, A. F. C. (Org.). *Inteligência Computacional Aplicada a Problemas Inversos em Transferência Radiativa*. 1ed. Rio de Janeiro: *EdUERJ*, p. 203-211, (2016).
- KURZYNSKI, M., PALACZ, K., CHELMINIAK, P. Time course of reactions controlled and gated by intramolecular dynamics of proteins: Predictions of the model of random walk on fractal lattices. *Proc Natl Acad Sci USA* 95((n. 20)):11685–11690 Biophysics (1998).
- LIAO, B., LUUS, R. Comparison of the Luus–Jaakola optimization procedure and the genetic algorithm. *Engineering Optimization*, 37(4), 381–396, (2005).
doi:10.1080/03052150512331328312.
- LOBATO, F. S., STEFFEN, Jr., V. e SILVA NETO, A. J., Adaptive differential evolution based on the concept of population diversity applied to simultaneous estimation of radiation phase function, albedo and optical thickness, *Proceedings 20th International Congress of Mechanical Engineering*, Gramado, (2009).
- LOBATO, F. S., STEFFEN, Jr., V. e SILVA NETO, A. J., Evolução Diferencial (Differential Evolution), em *Técnicas de Inteligência Computacional Inspiradas na Natureza – Aplicações em Problemas Inversos em Transferência Radiativa (Ed.)*, SBMAC, São Carlos, Capítulo 10, pp. 91-100, 2009a.
- LOBATO, F. S., STEFFEN, Jr., V. e SILVA NETO, A. J., Resolução de Problemas Inversos em Processos Difusivos e Transferência Radiativa usando o Algoritmo de Evolução Diferencial, em *computação Evolucionária em Problemas de Engenharia(Ed.) Omnipax Editora Ltda*, Capítulo 9, PP. 173-195, 2011.
- LUGON Jr., J., MARINHO, G. M., BEVILACQUA, L., KNUPP, D. C., SILVA NETO, A. J., Avaliação do segundo momento em modelos de difusão clássica e bi-fluxo. In: XXI Encontro Nacional de Modelagem Computacional - ENMC. Búzios – RJ, 2018.
- LUGON JR., J., RODRIGUES, P. P. G. W., BEVILACQUA, L., KNUPP, D. C.,

- VASCONCELLOS, J. F. V., SILVA NETO, A. J., Estudo do coeficiente de difusão secundária em problema de difusão anômala. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, v. 6, n. 2, 2018a.
- LUGON JR., J., VASCONCELLOS, J. F. V., BEVILACQUA, L., SILVA NETO, A. J., Desenvolvimento de solução para o problema unidimensional de advecção e difusão bi-fluxo. In: III Seminário Internacional de Estatística com R. Niterói – RJ, 2018b.
- LUGON JR., J., RODRIGUES, P. P. G. W., BEVILACQUA, L., KNUPP, D. C., VASCONCELLOS, J. F. V., SILVA NETO, A. J. Solução numérica de um problema de advecção e difusão anômala unidimensional. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, v. 6, n. 2, 2018c.
- LUGON Jr., J., BEVILACQUA, L., SILVA NETO, A. J., Direct and Inverse Problems for a Fourth Order Anomalous Diffusion Model. *Defect and Diffusion Forum*, v. 399, p. 55-64, 2020.
- LUGON JR., J., VASCONCELLOS, J. F. V., MARINHO, G. M., BEVILACQUA, L., KNUPP, D. C., SILVA NETO, A. J., Solution of fourth order diffusion equations and analysis using the second moment. *Defect and Diffusion Forum*, v. 399, p. 10-20, 2020a.
- LUGON JR., J., RODRIGUES, P. P. G. W., MARINHO, G. M., BEVILACQUA, L., KNUPP, D. C., VASCONCELLOS, J. F. V., SILVA NETO, A. J., Estudo do coeficiente de difusão secundária em problema de difusão com fluxo bimodal. *Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, 21 n. 2, p. 229-248, 2020b.
- LUGON JR., J., RODRIGUES, P. P. G. W., MARINHO, G. M., BEVILACQUA, L., KNUPP, D. C., VASCONCELLOS, J. F. V., SILVA NETO, A. J., Análise do problema de advecção e difusão bimodal unidimensional. *Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, 21 n. 2, p. 287-298, 2020c.
- LUUS, R., JAAKOLA, T. H. I., Optimization by direct search and systematic reduction of the size of search region, *AIChE Journal*, 19, 760-766, (1973).
- LUUS, R., HENNESSY, D. Optimization of fed-batch reactors by the Luus-Jaakola optimization procedure. *Industrial Engineering Chemical Research*, 38, 1948-1955, (1999).
- MAINARDI, F. The fundamental solutions for fractional diffusive-wave equation. *Appl*

Math Lett 9((n. 6)):23–28, (1996).

MARINHO, G. M. *Análise numérica do problema de difusão anômala unidimensional*. 86 p. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) — Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional, Universidade do Estado do Rio de Janeiro/Instituto Politécnico do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2014.

MARINHO, G. M., KNUPP, D. C., VASCONCELLOS, J. F. V., Uma comparação entre o método de volumes finitos e a técnica da transformada integral generalizada para a solução de uma equação de difusão bidimensional. *Revista Mundi Engenharia, Tecnologia e Gestão, Paranaguá PR*, vol. 4, n. 3, 2019.

MARINHO, G. M. *Análise direta e inversa de um modelo de difusão anômala bi-fluxo com termos fonte com variação espacial e temporal*. 148. p. Tese (Mestrado em Modelagem Computacional) — Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional, Universidade do Estado do Rio de Janeiro/Instituto Politécnico do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2019.

MATTOS, S. C. X., LUGON JR, J., SILVA NETO, A.J.S., BEVILACQUA, L. Estudo do Modelo de Difusão Anômala de Quarta Ordem com Variação Espacial na Fração de Substância Livre - Parte I: Problema Direto. In: XXIII Encontro Nacional de Modelagem Computacional e XI Encontro de Ciências e Tecnologia de Materiais, 2020, Palmas - Tocantins. Anais do XXIII Encontro Nacional de Modelagem Computacional e XI Encontro de Ciências e Tecnologia de Materiais, 2020.

MATTOS, S. C. X., LUGON JR, J., SILVA NETO, A.J.S., BEVILACQUA, L. Estudo do Modelo de Difusão Anômala de Quarta Ordem com Variação Espacial na Fração de Substância Livre - Parte II: Problema Inverso. In: XXIII Encontro Nacional de Modelagem Computacional e XI Encontro de Ciências e Tecnologia de Materiais, 2020, Palmas - Tocantins. Anais do XXIII Encontro Nacional de Modelagem Computacional e XI Encontro de Ciências e Tecnologia de Materiais, 2020a.

OZISIK, M. N.; ORLANDE, H. R. B. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and applications*. 1. ed. New York: Taylor Francis, 2000.

SANCHO, J. M., LACASTA, A. M., LINDENBERG, K., SOKOLOV, I. M., ROMERO, A. H. Diffusion on a solid surface: Anomalous is normal. *Phys. Rev. Lett.*, v.92, p. 250601, 2004.

SCHERER, R., KALLA, S. L., BOYADJIEV, L., AL-SAGABI, B. Numerical treatment of fractional heat equations. *Appl Numer Math* 58(8):1212–1223, (2008).

SILVA, L. G. *Problemas inversos em problemas de difusão com retenção*. 160. p. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) — Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional, Universidade do Estado do Rio de Janeiro/Instituto Politécnico do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2013.

SILVA, L. G., KNUPP, D. C., BEVILACQUA, L., GALEÃO, L. A. C. N. R., e SILVA NETO, A. J. Formulação e solução de um problema inverso de difusão anômala com técnicas estocástica. *Ciência e Natura*, vol. 36, pp 82-96, 2014.

SILVA, L. G., KNUPP, D. C., BEVILACQUA, L., GALEÃO, A. C. N. R. e SILVA NETO, A. J., Aplicação dos Métodos Evolução Diferencial e Algoritmo de Colisão de Partículas na Estimativa de Parâmetros do Modelo de Difusão Anômala. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, v. 2, n. 1, 2014a.

SILVA, L.G., KNUPP, D.C., BEVILACQUA, L., GALEÃO, A.C.N.R., SILVA NETO, A.J.. Inverse problem in anomalous diffusion with uncertainty propagation. *Computer Assisted Methods in Engineering and Science*, 21: 245-255, 2014b. URL <http://comes.ippt.gov.pl/index.php/comes/article/view/43>,

SILVA, L. G., KNUPP, D. C., SILVA NETO, A.J.S., CÂMARA, L. D. T., BEVILACQUA, L., GALEÃO, A. C. N. R., SANTIAGO, O. L. Uma Versão Modificada do Método Evolução Diferencial para Estimativa de Parâmetros do Modelo de Difusão Anômala Assimétrica. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, v. 3, n. 1, 2015.

SILVA, L. G. *Problemas diretos e inversos em processos de difusão anômala*. 110. p. Tese (Mestrado em Modelagem Computacional) — Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional, Universidade do Estado do Rio de Janeiro/Instituto Politécnico do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2016.

SILVA, L.G., KNUPP, D.C., BEVILACQUA, L., GALEÃO, A.C.N.R., SILVA NETO, A.J.. Inverse Problem of an Anomalous Diffusion Model Employing Lightning Optimization Algorithm, in: G. M. Platt, X. – S. Yang, A. J. Silva Neto. *Computational Intelligence, Optimization and Inverse Problems with Applications in Engineering*, Springer Nature, Switzerland, pp. 185-200. 2018.

SILVA NETO, A. J., MOURA NETO. *Problemas Inversos: Conceitos Fundamentais e Aplicações*. Rio de Janeiro: EdUERJ, (2005).

SILVA NETO, A. J.; BECCENERI, J. C. Técnicas de inteligência computacional inspiradas na natureza: Aplicação em problemas inversos em transferência radiativa. *São Carlos: SBMAC*, 122 p. Notas em Matemática aplicada; v.41, 2009.

SILVA NETO, A. J. *Problemas Diretos e Inversos em Transferência Radiativa e Processos Difusivos*, (Tese de Concurso Professor Titular). Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico, (2012).

SILVA NETO, A. J., BECCENERI, J. C., VELHO, A. F. C. (Org). *Inteligência Computacional Aplicada a Problemas Inversos em Transferência Radiativa*. UERJ: Rio de Janeiro, (2016).

SIMAS, J. G. *Modelagem Computacional do Problema de Difusão com Retenção*. 110 p. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) — Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional, Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis, 2013.

STORN, R. e PRICE, K., Differential Evolution: a simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces, *International Computer Science Institute*, Technical Report TR-95-012, pp. 1 - 15, 1995.

STORN, R. e PRICE, K., Differential Evolution: a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces, *Journal of Global Optimization*, Vol. 11, pp. 341-359, 1997.

VASCONCELLOS, J., MARINHO, G., ZANI, J. Análise numérica da equação da difusão anômala com fluxo bimodal. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, v. 33, n. 3-4, p. 242–249, 7 2017. ISSN 02131315. Disponível em: <https://www.scipedia.com/public/Vasconcellos_et_al_2016a> .

XIAO, F., HRABE, J., HRABETOVA, S. Anomalous Extracellular Diffusion in Rat Cerebellum. *Biophysical Journal*, 108(9), 2384–2395. doi:10.1016/j.bpj.2015.02.034, 2015.

YANG, X. S., *Nature-Inspired Metaheuristic Algorithms*. United Kingdom: Luniver

Press, ISBN 1905986106, 9781905986101, 2008.