

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

FELIPE AUGUSTO PAES DE GODOI

ESTUDO DE MODELOS FENOMENOLÓGICOS ANÔMALOS NOS PROCESSOS DE
TRANSFERÊNCIA DE CALOR E DE MASSA

UBERLÂNDIA – MG

2022

FELIPE AUGUSTO PAES DE GODOI

ESTUDO DE MODELOS FENOMENOLÓGICOS ANÔMALOS NOS PROCESSOS DE
TRANSFERÊNCIA DE CALOR E DE MASSA

Tese de Doutorado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Orientador: João Jorge Ribeiro Damasceno

Coorientador: Fran Sérgio Lobato

UBERLÂNDIA – MG

2022

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

G588
2022

Godoi, Felipe Augusto Paes de, 1991-
Estudo de modelos fenomenológicos anômalos nos
processos de transferência de calor e de massa [recurso
eletrônico] / Felipe Augusto Paes de Godoi. - 2022.

Orientador: João Jorge Ribeiro Damasceno.

Coorientador: Fran Sérgio Lobato.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Pós-graduação em Engenharia Química.

Modo de acesso: Internet.

Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2022.302>

Inclui bibliografia.

Inclui ilustrações.

1. Engenharia química. I. Damasceno, João Jorge
Ribeiro, 1957-, (Orient.). II. Lobato, Fran Sérgio, 1976-,
(Coorient.). III. Universidade Federal de Uberlândia.
Pós-graduação em Engenharia Química. IV. Título.

CDU: 66.0

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:
Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química
Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 1K, Sala 206 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902
Telefone: (34)3239-4249 - www.ppgeq.feq.ufu.br - secppgeq@feq.ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Química				
Defesa de:	Tese de Doutorado, 12/2022, PPGEQ				
Data:	29 de julho de 2022	Hora de início:	09:00	Hora de encerramento:	11:40
Matrícula do Discente:	11823EQU002				
Nome do Discente:	Felipe Augusto Paes de Godoi				
Título do Trabalho:	Estudo de modelos fenomenológicos anômalos nos processos de transferência de calor e de massa				
Área de concentração:	Desenvolvimento de Processos Químicos				
Linha de pesquisa:	Processos de Separação				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	Estudo de modelos fenomenológicos anômalos em processos de transferência de calor				

Reuniu-se por meio de webconferência, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, assim composta: Professores Doutores: Daniela Buske - PPGMM/UFPel; Fabiano Fortunato Teixeira dos Santos - IME/UFG; Fábio de Oliveira Arouca - PPGEQ/UFU; Ubirajara Coutinho Filho - PPGEQ/UFU; Fran Sérgio Lobato - FEQUI/UFU, coorientador e João Jorge Ribeiro Damasceno - PPGEQ/UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Prof. Dr. João Jorge Ribeiro Damasceno, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovado.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **João Jorge Ribeiro Damasceno, Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/07/2022, às 11:41, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Fran Sergio Lobato, Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/07/2022, às 11:41, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Fabio de Oliveira Arouca, Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/07/2022, às 11:41, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ubirajara Coutinho Filho, Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/07/2022, às 11:42, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Daniela Buske, Usuário Externo**, em 29/07/2022, às 11:42, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Fabiano Fortunato Teixeira dos Santos, Usuário Externo**, em 29/07/2022, às 11:42, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **3797703** e o código CRC **544CFFBF**.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, pois sem Ele não chegaria até aqui.

Agradeço aos meus pais, Carlos Roberto de Godoi (*in memoriam*) e Janete D'arc Paes de Godoi, e à minha irmã, Carla Veridiana Paes de Godoi, pelo apoio e suporte que sempre me forneceram.

Agradeço aos professores João Jorge Ribeiro Damasceno e Fran Sérgio Lobato, que forneceram todas as orientações necessárias para a realização dessa pesquisa. Além das orientações, o incentivo e a motivação fornecidos por ambos foram fundamentais durante esse caminho.

Agradeço aos professores do PPGEQ/UFU, que transmitiram conhecimentos que contribuíram muito com essa pesquisa.

Agradeço aos funcionários do PPGEQ/UFU, pela ajuda fornecida em diversos momentos.

Agradeço a todos os colegas do PPGEQ/UFU, com os quais tive uma convivência muito boa.

Agradeço aos membros da banca examinadora, pela disponibilidade em fazer parte desta banca de defesa.

Por fim, agradeço a todos que, de alguma forma, contribuíram para que essa pesquisa fosse realizada.

RESUMO

Tradicionalmente, as Leis de Fourier e Fick são utilizadas para a caracterização dos modelos de transferência de calor e massa, respectivamente. Apesar de produzirem bons resultados na grande maioria dos estudos de casos, há algumas situações em que estas leis não apresentam uma boa precisão. Isso é observado quando se têm escalas muito pequenas das variáveis espacial e temporal e os gradientes de temperatura e concentração são consideravelmente altos. Nesses casos verifica-se a ocorrência de fenômenos anômalos. Uma das estratégias que têm sido utilizadas para generalizar as duas leis corresponde ao uso de modelos compostos por derivadas de ordem não inteira. Neste trabalho considera-se um modelo que apresenta derivadas temporais de primeira e segunda ordem, um parâmetro de atraso no tempo e derivadas espaciais, sendo uma de primeira ordem e a outra de ordem fracionária. Para resolver o modelo foram propostas duas abordagens, o Método Pseudo-Espectral de Legendre e o Método das Diferenças Finitas Fracionário, considerando uma definição de derivada fracionária para cada abordagem. Ambos os métodos foram aplicados em problemas puramente matemáticos, para fins de validação, e em problemas de transferência de calor e de massa. Com o objetivo de estimar os parâmetros do modelo, um problema inverso de transferência de calor na pele utilizando dados experimentais sintéticos e três problemas inversos de transferência de massa empregando dados experimentais reais foram formulados e resolvidos considerando o algoritmo de Evolução Diferencial. Para garantir a consistência dimensional dos termos difusivos fracionários, um fator de correção de unidades foi proposto. De forma geral, as duas estratégias utilizadas na resolução dos problemas diretos demonstraram uma boa precisão quando comparadas as soluções aproximadas e analíticas. Do ponto de vista físico foi possível verificar a influência dos parâmetros do modelo nos perfis de temperatura e concentração obtidos. Os resultados obtidos na resolução de cada problema inverso estão qualitativamente de acordo com os apresentados na literatura especializada e indicam que o modelo hiperbólico fracionário espacial proposto é uma boa alternativa para descrever fenômenos anômalos de transferência de calor e de massa.

Palavras-chave: Fenômenos Anômalos. Transferência de Calor e de Massa. Modelo Hiperbólico Fracionário Espacial. Método Pseudo-Espectral de Legendre. Método das Diferenças Finitas Fracionário. Evolução Diferencial.

ABSTRACT

Traditionally, Fourier and Fick Laws are used for the characterization of heat and mass transfer models, respectively. Despite producing good results in many cases, there are some situations in which these laws do not have a good precision. This is observed when the scales of spatial and time variables are very low and the gradient of temperature and concentration are very high. In these cases, the anomalous phenomena is characterized. One of strategies that have been used to generalize both laws corresponds to use of models with non-integer order derivatives. In this work, one model that presents first and second order temporal derivatives, one time delay factor and spatial derivatives, being one with first order and other with fractional order, is considered. To solve the model, the Legendre Pseudo-Spectral Method and the Fractional Finite Difference Method were proposed. Each one considers a definition for fractional derivative. Both methods were applied in purely mathematic problems, for validation purposes, and heat and mass transfer problems. To estimate the parameters of the model, one inverse heat transfer problem in the skin using synthetic experimental data and three inverse mass transfer problems using real experimental data were formulated and solved by considering the Differential Evolution Algorithm. To guarantee the dimensional consistency of fractional diffusive terms, a correction factor was proposed. Both strategies used to solve direct problems demonstrated a good accuracy when approximate and exact solutions were compared. From the physical point of view, it was possible to verify the influence of model parameters on obtained temperature and concentration profiles. The obtained results considering all inverse problems are qualitatively coherent in relation with those presented in specialized literature and indicate that the proposed spatial fractional hyperbolic model configure a good alternative to describe the anomalous phenomena in heat and mass transfer.

Keywords: Anomalous Phenomena. Heat and Mass Transfer. Spatial Fractional Hyperbolic Model. Legendre Pseudo-Spectral Method. Fractional Finite Difference Method. Differential Evolution.

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Representação esquemática da estrutura do problema inverso proposto.....	80
Figura 4.1	Estruturação geral dos estudos de caso analisados nesta tese.....	83
Figura 4.2	Soluções analíticas e numéricas obtidas pelo MPEL para o primeiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.....	87
Figura 4.3	Erros residuais do MPEL para o primeiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.....	87
Figura 4.4	Soluções analíticas e numéricas obtidas pelo MDFF para o primeiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cem pontos de discretização nas direções de x e t	88
Figura 4.5	Erros residuais do MDFF para o primeiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cem pontos de discretização nas direções de x e t	88
Figura 4.6	Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL para o segundo estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.....	91
Figura 4.7	Erros residuais do MPEL para o segundo estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.....	91
Figura 4.8	Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFF para o segundo estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cem pontos de discretização nas direções de x e t	92
Figura 4.9	Erros residuais do MDFF para o segundo estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cem pontos de discretização nas direções de x e t	93
Figura 4.10	Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL para o terceiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.....	95
Figura 4.11	Erros residuais do MPEL para o terceiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.....	95
Figura 4.12	Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFF para o terceiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cem pontos	

	de discretização nas direções de x e t	96
Figura 4.13	Erros residuais do MDFFF para o terceiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cem pontos de discretização nas direções de x e t	97
Figura 4.14	Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL para o primeiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.....	99
Figura 4.15	Erros residuais do MPEL para o primeiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.....	99
Figura 4.16	Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFFF para o primeiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t	100
Figura 4.17	Erros residuais do MDFFF para o primeiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t	100
Figura 4.18	Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL para o segundo estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.....	102
Figura 4.19	Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFFF para o segundo estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t	103
Figura 4.20	Erros residuais do MPEL para o segundo estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.....	103
Figura 4.21	Erros residuais do MDFFF para o segundo estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t	104
Figura 4.22	Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL para o terceiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.....	106
Figura 4.23	Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFFF para o terceiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t	106
Figura 4.24	Erros residuais do MPEL para o terceiro estudo de caso hiperbólico	

	considerando diferentes números de pontos de colocação.....	107
Figura 4.25	Erros residuais do MDFF para o terceiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t	107
Figura 4.26	Perfis de temperatura adimensional obtidos pelas estratégias MPEL e MDFF para α igual a 2 e diferentes valores de γ	110
Figura 4.27	Influência da ordem fracionária nos perfis de temperatura adimensional para γ igual a 1,5 usando o MDFF.....	111
Figura 4.28	Influência do parâmetro τ nos perfis de temperatura adimensional para γ igual a 1,5 usando o MDFF.....	112
Figura 4.29	Representação esquemática da pele humana (TOLEDO; LOUREIRO, 2014).....	115
Figura 4.30	Perfis de temperatura nas direções de x (a) e de t (b) para o modelo parabólico com ordem inteira.....	118
Figura 4.31	Perfis de temperatura nas direções de x (a) e de t (b) considerando diferentes valores do parâmetro α para o modelo parabólico.....	119
Figura 4.32	Perfis de temperatura nas direções de x (a) e de t (b) considerando diferentes valores do parâmetro τ para o modelo hiperbólico com ordem inteira.....	120
Figura 4.33	Perfis de temperatura sintéticos nas direções de x (a) e de t (b) para o modelo hiperbólico fracionário.....	121
Figura 4.34	Perfis de concentração experimental e preditos por cada um dos modelos considerados no problema inverso anômalo A.....	126
Figura 4.35	Perfis de concentração experimentais e preditos por cada um dos modelos considerados no problema inverso anômalo B ((a) - Coluna de 20 cm e (b) - Coluna de 40 cm).....	130
Figura 4.36	Perfis de concentração experimentais e preditos por cada um dos modelos considerados no problema inverso anômalo C ((a) - Arenito e (b) - Granito).....	135

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Representação das estratégias do algoritmo de Evolução Diferencial (STORN; PRICE, 1995).....	61
Tabela 4.1	Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o primeiro estudo de caso fracionário, em termos do número de pontos de discretização e da ordem fracionária.....	85
Tabela 4.2	Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o segundo estudo de caso fracionário, em termos do número de pontos de discretização e da ordem fracionária.....	89
Tabela 4.3	Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o terceiro estudo de caso fracionário, em termos do número de pontos de discretização e da ordem fracionária.....	94
Tabela 4.4	Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o primeiro estudo de caso hiperbólico, em termos das malhas de discretização.....	98
Tabela 4.5	Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o segundo estudo de caso hiperbólico, em termos das malhas de discretização.....	101
Tabela 4.6	Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o terceiro estudo de caso hiperbólico, em termos das malhas de discretização.....	105
Tabela 4.7	Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o estudo de caso hiperbólico fracionário, em termos do número de pontos de discretização e de pontos de colocação.....	110
Tabela 4.8	Propriedades termo-físicas do tecido subcutâneo (TOLEDO; LOUREIRO, 2014).....	117
Tabela 4.9	Resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando diferentes níveis de ruído para o modelo hiperbólico fracionário.....	121
Tabela 4.10	Resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando diferentes modelos diferenciais para o problema inverso anômalo A.....	125
Tabela 4.11	Resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando diferentes modelos diferenciais para o problema inverso anômalo B.....	129
Tabela 4.12	Resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando diferentes modelos diferenciais para o problema inverso anômalo C.....	134

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CATC	Caminhadas Aleatórias com Tempos Contínuos
DE	<i>Differential Evolution</i>
EADHF	Equação de Advecção-Dispersão Hiperbólica Fracionária
EADPF	Equação de Advecção-Dispersão Parabólica Fracionária
EADPI	Equação de Advecção-Dispersão Parabólica Inteira
ED	Evolução Diferencial
FO	Função Objetivo
MDF	Método das Diferenças Finitas
MDFF	Método das Diferenças Finitas Fracionário
MPEL	Método Pseudo-Espectral de Legendre
NPC	Número de Pontos de Colocação
PL	Polinômio de Lagrange
TP	Tempo de Processamento

LISTA DE SÍMBOLOS

a_k	Parâmetro da Equação (2.10) [$\text{MLT}^{-3}\theta^{-2}$]
A_t	Área da seção transversal [L^2]
c_b	Calor específico do sangue [$\text{L}^2\text{T}^{-2}\theta^{-1}$]
c_t	Calor específico do tecido [$\text{L}^2\text{T}^{-2}\theta^{-1}$]
C	Concentração mássica [ML^{-3}]
C_A	Concentração mássica do componente A [ML^{-3}]
C^*	Concentração adimensional [-]
C^{exp}	Pontos experimentais de concentração [ML^{-3}]
C^{max}	Concentração adimensional máxima [-]
CR	Probabilidade de cruzamento [-]
D	Coefficiente de difusão [L^2T^{-1}]
D_0	Coefficiente de difusão inicial [L^2T^{-1}]
D_{AB}	Coefficiente de difusão [L^2T^{-1}]
$D_{\lambda a}$	Coefficiente de difusão anômala [L^2T^{-1}]
F	Fator de perturbação [-]
F_{ext}	Termo fonte [-]
g	Constante da Equação (2.59) [-]
J	Fluxo mássico difusivo [$\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$]
J_A	Fluxo mássico difusivo do componente A [$\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$]
J_m	Fluxo mássico difusivo [$\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$]
k	Condutividade térmica [$\text{MLT}^{-3}\theta^{-1}$]
k_0	Condutividade térmica na temperatura de referência [$\text{MLT}^{-3}\theta^{-1}$]
k_m	Fração mássica [-]
K	Coefficiente de dispersão [L^2T^{-1}]
K_1	Velocidade do transporte de massa [LT^{-1}]
K_2	Coefficiente de difusão [L^2T^{-1}]
K_3	Coefficiente de retenção para o processo de propagação [L^3T^{-1}]
K_4	Coefficiente de retenção para o processo de difusão [L^4T^{-1}]
K^*	Coefficiente de dispersão adimensional [-]
l_i	Comprimento dos passos na caminhada [L]
L	Comprimento total [L]

L	Comprimento da coluna [L]
L_e	Comprimento do elemento [L]
M	Número de pontos em que o domínio do tempo é dividido [-]
M_1, M_2	Quantidades de pontos experimentais conhecidos [-]
n	Número de saltos realizados pela partícula [-]
n_x	Número de pontos de discretização na direção de x [-]
n_t	Número de pontos de discretização na direção de t [-]
N	Número de pontos em que o domínio espacial é dividido [-]
N_p	Número de indivíduos da população [-]
p_p	Parâmetro de inserção [-]
P	Probabilidade de a partícula encontrar-se em uma determinada posição em um instante t [-]
P_b	Adimensional que relaciona a taxa média de perfusão sanguínea do tecido, o calor específico, o comprimento total e a condutividade térmica [-]
P^{exp}	Pontos experimentais sintéticos de temperatura [θ]
P^{sim}	Pontos simulados de temperatura [θ]
q	Fluxo de calor [MT^{-3}]
q_i, q_j	Taxas de transferência de calor por condução [ML^2T^{-3}]
q_m	Calor metabólico [$\text{ML}^{-1}\text{T}^{-3}$]
$R(t)$	Força estocástica que atua sobre a partícula [MLT^{-2}]
r^2	Deslocamento quadrático médio [L^2]
r_1, r_2, r_3, r_4, r_5	Índices aleatórios inteiros diferentes entre si e do índice i [-]
rand	Gerador de números aleatórios dentro do intervalo [-1 1] [-]
rand _{i}	Índice escolhido aleatoriamente [-]
rand _{j}	j -ésima avaliação de um gerador de números aleatórios uniforme com resultado entre 0 e 1 [-]
t	Tempo [T]
t	Tempo de exposição do concreto [T]
t_1, t_2	Instantes de tempo que definem a transição entre o valor mínimo e máximo de concentração [T]
t^*	Coordenada temporal adimensional [-]
T	Temperatura [θ]
$\langle T \rangle$	Tempo de espera médio [-]

T_0	Temperatura de referência [θ]
T_{amb}	Temperatura ambiente [θ]
T^{exp}	Pontos experimentais de temperatura [θ]
u	Variável dependente [ML^{-3} ou θ]
v	Velocidade média [LT^{-1}]
v	Velocidade da partícula [LT^{-1}]
v_C	Velocidade de propagação da onda de concentração [LT^{-1}]
v^*	Velocidade média adimensional [-]
w	Parâmetro proposto para corrigir o modelo dimensional fracionário [-]
w_b	Coefficiente de perfusão sanguínea [T^{-1}]
w_j	Função definida de acordo com a Equação (3.67) [-]
$w_{n,j}$	Pesos iniciais da quadratura de convolução [-]
W_b	Taxa de perfusão sanguínea [$ML^{-3}T^{-1}$]
x	Coordenada espacial [L]
x	Deslocamento da partícula [L]
x^*	Coordenada espacial adimensional [-]
x_j^*	j -ésimas posições espaciais em que a concentração adimensional é avaliada [L]

Letras gregas

α	Ordem fracionária [-]
β_c	Parâmetro da Equação (2.12) [$M^{-1}L^3$]
β_e	Parâmetro da Equação (2.13) [$M^{-1}L^3$]
β_t	Parâmetro da Equação (2.17) [-]
γ	Coordenada temporal adimensional [-]
Γ	Função Gama [-]
δ	Desvio padrão considerado para o experimento sintético [-]
$\delta(x-x')$	Função delta de Dirac [-]
θ	Temperatura adimensional [-]
θ_i, θ_j	Valores de temperatura nos nós [θ]
$\lambda(l)$	Função distribuição de probabilidade do comprimento dos saltos [-]
Λ	Amplitude da variável dependente em análise [θ]
ξ	Coordenada espacial adimensional [-]

Ξ	Somatório dos erros absolutos [-]
ρ_b	Densidade do sangue [ML ⁻³]
ρ_t	Densidade do tecido [ML ⁻³]
σ	Parâmetro auxiliar que corrige a unidade do termo diferencial fracionário [L]
σ^2	Variância do comprimento dos saltos [-]
τ	Fator de atraso no tempo [T]
τ_1, τ_2	Tempos de espera [T]
τ_C	Tempo de relaxação no gradiente de concentração [T]
τ_i	Tempo entre dois passos na caminhada [T]
τ_j	Tempo de relaxação no fluxo de massa [T]
τ_q	Tempo de relaxação térmica no fluxo de calor [T]
τ_T	Tempo de relaxação térmica no gradiente de temperatura [T]
τ^*	Parâmetro de atraso no tempo adimensional [-]
ϕ	Variável definida por Küntz e Lavallée (2001) [LT ^{-1/2}]
$\psi(l, \tau)$	Função densidade de probabilidade conjunta [-]
ψ_{FL}	Função distribuição de probabilidade no domínio de Fourier-Laplace [-]
ω	Probabilidade de transição
$\omega(\tau)$	Função distribuição do tempo de espera [-]
ω_k	Valores dos coeficientes da função de interpolação [-]

SUMÁRIO

RESUMO.....	iii
ABSTRACT	iv
LISTA DE FIGURAS.....	v
LISTA DE TABELAS.....	viii
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	ix
LISTA DE SÍMBOLOS	x
SUMÁRIO.....	xiv
1 INTRODUÇÃO	1
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	7
2.1 Leis Clássicas da Condução de Calor e Difusão de Massa	7
2.2 Fenômenos Anômalos.....	8
2.2.1 Modelos Anômalos que Apresentam Termos de Atraso.....	10
2.2.2 Modelos Anômalos que Apresentam Derivadas de Ordem Superior a Dois	12
2.2.3 Modelos Anômalos em que a Condutividade Térmica e o Coeficiente de Difusão não são Constantes	13
2.2.4 Modelos Anômalos que Apresentam Derivadas com Ordem Fracionária.....	15
2.2.5 Modelos Anômalos Representados por Equações Diferenciais Estocásticas	21
2.3 Métodos para a Resolução de Modelos Anômalos.....	24
2.3.1 Métodos Analíticos para a Resolução de Modelos Anômalos	25
2.3.2 Métodos Numéricos para a Resolução de Modelos Anômalos	30
2.4 Aproximação de Integrais e Derivadas Fracionárias.....	43
2.5 Consistência Dimensional para Modelos Diferenciais Fracionários.....	51
2.6 Problemas Inversos	52
2.6.1 Formulação Matemática do Problema de Otimização.....	54
2.6.2 Classificação dos Métodos para a Resolução do Problema de Otimização.....	55
2.6.3 Evolução Diferencial	58
3 METODOLOGIA.....	62
3.1 Métodos Numéricos Propostos para a Resolução do Modelo Diferencial Parcial Hiperbólico Fracionário de Interesse	64
3.1.1 Método Pseudo-Espectral de Legendre	64
3.1.2 Método Pseudo-Espectral de Legendre no Contexto Fracionário	67
3.1.3 Método das Diferenças Finitas	69

3.1.4 Método das Diferenças Finitas no Contexto Fracionário	75
3.2 Determinação de Parâmetros via Formulação e Resolução de Problemas Inversos..	79
3.3 Abordagem para Corrigir Dimensionalmente o Termo Difusivo em Modelos Diferenciais Fracionários	81
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	83
4.1 Equações Diferenciais Parciais Parabólicas Fracionárias no Espaço	84
4.1.1 Estudo de Caso 1.....	84
4.1.2 Estudo de Caso 2.....	89
4.1.3 Estudo de Caso 3.....	93
4.2 Equações Diferenciais Parciais Hiperbólicas com Ordem Inteira no Espaço	97
4.2.1 Estudo de Caso 1.....	97
4.2.2 Estudo de Caso 2.....	101
4.2.3 Estudo de Caso 3.....	104
4.3 Problema Hiperbólico Fracionário em Transferência de Calor em Tecidos	108
4.4 Formulação e Resolução de Problemas Inversos.....	112
4.4.1 Problema Inverso Sintético.....	115
4.4.2 Problema Inverso Anômalo A	122
4.4.3 Problema Inverso Anômalo B	127
4.4.4 Problema Inverso Anômalo C	131
4.5 Considerações Finais	136
5 CONCLUSÕES.....	137
5.1 Sugestões para Trabalhos Futuros.....	140
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	141

1 INTRODUÇÃO

O estudo dos mecanismos de transferência de calor e massa configura um tema de pesquisa relevante e atual, visto o grande número de aplicações que podem ser desenvolvidas. Dentre estas, podem-se citar: a transferência de calor e massa em colunas de destilação fracionada de petróleo, a condução de calor em tecidos, a produção de materiais de cobre e o resfriamento de reatores nucleares (HAYAT et al., 2017; SOHAIL et al., 2017).

Do ponto de vista físico, a grande maioria destas aplicações considera modelos que utilizam as tradicionais Leis de Fourier e Fick para descrever os mecanismos de transferência de calor e massa. Segundo a Lei de Fourier a relação entre o fluxo de calor e o gradiente de temperatura é linear (SMITH; DAIVIS; TODD, 2019). Processos relacionados à transferência de calor em equipamentos de segurança com proteção térmica e ao aquecimento e resfriamento de sólidos correspondem a alguns exemplos em que se têm obtido resultados precisos com a utilização da Lei de Fourier. Isso também tem ocorrido em boa parte dos processos que envolvem o escoamento de fluidos (CHRISTENSEN; NISSEN, 2015; LI; GE; LU, 2019).

Apesar de ser aplicada em muitos sistemas de engenharia, há alguns casos em que a Lei de Fourier não representa satisfatoriamente um modelo para a condução de calor. Processos em que isso ocorre são denominados fenômenos anômalos (FALCINI; GARRA; VOLLER, 2019). Quando a Lei de Fourier é utilizada considera-se que a velocidade de propagação do sinal térmico é infinita. Essa hipótese não é válida para problemas nos quais as temperaturas são extremamente baixas, os gradientes de temperatura são consideravelmente altos ou o tempo de duração do processo é muito pequeno (LIU; LI; LOU, 2019). Fenômenos anômalos no contexto da Lei de Fourier são observados, por exemplo, em estudos de caso que envolvem a fusão e a solidificação rápida de metais, o controle da temperatura de supercondutores, o comportamento térmico transiente de meios porosos e a transferência de calor em tecidos e nanomateriais (LIU et al., 2018; PENG et al., 2018).

Neste mesmo cenário, o conhecimento dos mecanismos de transferência de massa também é muito importante em diversas aplicações. Alguns exemplos correspondem a reações químicas que envolvem a catálise ambiental e ao projeto de reatores que produzem hidrocarbonetos a partir de metano (VANDEWALLE et al., 2019; CAO et al., 2021). Isso também é verificado no tratamento de efluentes e em processos de ozonização (LIU et al., 2018; YANG et al., 2021).

A Lei de Fick tem uma estrutura matemática análoga à estrutura apresentada pela Lei

de Fourier e é empregada para descrever a variação da massa de um componente de uma mistura no tempo e no espaço (SANTOS, 2019). Em muitos problemas, a difusão de massa pode ser bem descrita pelo uso dessa lei. Alguns exemplos consistem nas transferências de massa em alimentos e em solos porosos (XU et al., 2017). Em estudos de caso relacionados à absorção de água em matrizes poliméricas e à difusão de massa de solventes de baixa viscosidade em hidrocarbonetos viscosos, a Lei de Fick também apresenta uma boa precisão (KESHMIRI et al., 2019; IMOISILI; JEN, 2020).

Contudo, há casos nos quais não são obtidos bons resultados ao se aplicar a Lei de Fick. Isso pode ser observado, por exemplo, na difusão de espécies iônicas em supercondutores, de nêutrons em reatores nucleares e em processos de transferência de massa em meios microporosos. Fenômenos anômalos na Lei de Fick ocorrem em problemas nos quais o gradiente de concentração é muito alto, os meios apresentam alta heterogeneidade e as escalas de tempo envolvidas são muito pequenas (CHEN; LIU, 2003; BARBEIRO; FERREIRA; PINTO, 2011; RASMUSSEN; CIVAN, 2015; ZHOKH, 2019). A ocorrência de fenômenos anômalos na Lei de Fick justifica-se por esta implicar em uma velocidade infinita de propagação das partículas no meio, o que não ocorre para todas as situações práticas (QUIROZ et al., 2019).

Com o objetivo de obter generalizações da Lei de Fourier, a literatura especializada tem-se dedicado a diversos tipos de modelos. As equações de Cattaneo-Vernotte (1958) e de Tzou (1995) foram propostas com a finalidade de ampliar essa lei através da inclusão de termos de atraso no gradiente de temperatura e no fluxo de calor. Essas equações têm sido aplicadas com frequência em problemas anômalos que envolvem mudança de fase. Exemplos desse tipo de problema correspondem aos processos de solidificação rápida, de crioterapia para tratamento de tumores e de fusão de nanopartículas (SCHWARZWÄLDER; MYERS; HENNESSY, 2020). Outra maneira de generalizar a Lei de Fourier consiste na aplicação de modelos que apresentam derivadas com ordem fracionária. Com o uso desses modelos tem-se obtido resultados muito interessantes e promissores, por exemplo, em problemas anômalos relacionados ao aquecimento de filmes finos de metais através de laser e em aplicações que envolvem múltiplas camadas em tecidos (MOZAFARIFARD; MORTAZAVINEJAD; TOGHRAIE, 2020).

Novas abordagens também têm sido propostas para generalizar a Lei de Fick. Neste caso também se pode usar equações diferenciais com ordem fracionária, assim como ocorre na generalização da Lei de Fourier (GERASIMOV, 2021). A aplicação desse tipo de modelo pode ser observada em problemas anômalos de transferência de massa que envolvem meios

geológicos fraturados, o movimento de proteínas e sólidos amorfos (LI et al., 2020). Para generalizar a Lei de Fick, também se têm considerado modelos que apresentam derivadas de ordem superior a dois da concentração em relação à variável espacial (PARADISI et al., 2001). Problemas de transferência de massa nos quais se observa o fenômeno da retenção de partículas podem ser descritos com uma boa precisão por modelos desse tipo (BEVILACQUA, GALEÃO; COSTA, 2011a,b). Além disso, têm sido utilizadas equações nas quais se considera que o coeficiente de difusão é dependente do tempo e/ou da concentração. Estudos de caso que envolvem a transferência de massa em zeólitas e a absorção de água em calcário correspondem a alguns exemplos em que esse tipo de equação tem sido aplicado na descrição de fenômenos anômalos (LIMA; LOBATO; AROUCA, 2019; ZHOKH; STRIZHAK, 2019).

De forma a descrever fenômenos anômalos de transferência de calor e de massa, também têm sido utilizados modelos compostos por equações diferenciais estocásticas. Alguns destes correspondem ao modelo de caminhadas aleatórias com tempos contínuos, aos vãos e caminhadas de Lévy, à equação de Langevin generalizada e à equação mestra generalizada (SHLESINGER; ZASLAVSKY; KLAFTER, 1993; KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008; VISWANATHAN et al., 2011; MEROZ; SOKOLOV, 2015).

Embora a generalização das tradicionais leis seja extremamente interessante, a complexidade dos modelos oriundos da incorporação destas novas ideias faz com que estes se tornem muito mais difíceis de serem resolvidos, seja analiticamente ou numericamente (KHEYBARI; DARVISHI; HASHEMI, 2020). Assim, de forma geral, pode-se dizer que a resolução numérica de problemas que caracterizam fenômenos anômalos representa um grande desafio, visto que estes exigem o desenvolvimento ou aprimoramento de estratégias já existentes de forma a reduzir o custo computacional associado (GREER; BERTOZZI; SAPIRO, 2006). Além disso, também se deve ressaltar a dificuldade de obtenção de pontos experimentais para fins da determinação dos parâmetros adicionais presentes em modelos anômalos (LIU et al., 2017; SCHWARZWÄLDER; MYERS; HENNESSY, 2020).

No contexto analítico, observa-se o desenvolvimento de abordagens para a resolução de modelos anômalos. O método da transformada de Laplace tem sido utilizado para resolver problemas anômalos que envolvem a difusão de gases e a transferência de calor em sistemas biológicos (RASMUSSEN; CIVAN, 2015). O método da separação de variáveis tem sido aplicado com frequência na resolução de modelos anômalos de transferência de calor em aletas e em tecidos (KUNDU; LEE, 2013). Problemas anômalos de transferência de massa que envolvem a secagem em meios porosos também têm sido resolvidos por esse método

(GOU; CAI; ZHANG, 2005). Muitas soluções analíticas de modelos anômalos também têm sido obtidas através dos métodos da transformada de Fourier e das funções de Green (GHAZANFARIAN; SHOMALI; ABBASSI, 2015).

Os métodos analíticos empregados para a resolução de problemas anômalos apresentam algumas limitações, dentre as quais se podem citar: a alta complexidade da estrutura matemática e a necessidade de simplificação dos modelos (LIU; LI; ZHANG, 2020). Neste caso, pode-se chegar a situações em que estes não são capazes de representar a realidade. Como exemplo pode-se citar problemas anômalos de transferência de calor em tecidos (KENGNE; LAKHSSASSI, 2015). Muitas das soluções analíticas desses problemas são obtidas para o regime permanente ou em um domínio infinito. Além disso, muitos problemas anômalos envolvem geometrias complexas e equações não lineares. Em ambos os casos, as soluções analíticas são obtidas com muita dificuldade (RIVERA et al., 2010).

Devido às limitações apresentadas pelas soluções analíticas, muitos pesquisadores têm-se dedicado ao desenvolvimento ou aprimoramento de métodos numéricos para a resolução de modelos anômalos. Neste cenário, o método das diferenças finitas tem sido aplicado em problemas anômalos de transferência de calor em tecidos e de transferência de massa descritos por equações que apresentam termos fonte não lineares (SINGH; GUPTA; RAI, 2011; BU; XIAO; ZENG, 2017). O método dos volumes finitos tem sido utilizado com frequência em problemas anômalos, principalmente, em sistemas biológicos (KUMAR; RAI, 2017). Também se pode citar a aplicação do método da perturbação homotópica na resolução de modelos anômalos nesses sistemas. Outro exemplo de aplicação desse método corresponde a problemas anômalos de transferência de massa em catalisadores porosos. Aplicações considerando os métodos dos elementos de contorno e dos elementos finitos em modelos anômalos também podem ser encontradas (HOSSEINI; SLADEK; SLADEK, 2013).

Muitos estudos têm sido realizados com o objetivo de propor e resolver problemas de estimação de parâmetros de modelos que descrevem fenômenos anômalos. Isso pode ser observado em trabalhos que avaliam a transferência de calor em tecidos e materiais porosos (GHAZIZADEH; AZIMI; MAEREFAT, 2012; BRODIEK et al., 2019). A estimação de parâmetros também tem sido realizada no contexto anômalo em termos da transferência de massa em meios porosos e da absorção de água em diferentes materiais (FAN; JIANG; CHEN, 2016; LIMA; LOBATO; AROUCA, 2019). Para a resolução desses problemas inversos diferentes métodos podem ser empregados, dentre os quais se podem citar: os algoritmos de Evolução Diferencial e da Colônia de Formigas no contexto heurístico e dos Gradientes Conjugados no contexto clássico (BRODIEK et al., 2019; LIMA; LOBATO;

AROUCA, 2019; MATTOS, 2021).

Além disso, tem-se empregado diversos softwares na resolução de problemas anômalos. Neste contexto, as equações diferenciais com ordem fracionária que representam fenômenos anômalos de transferência de calor em tecidos e de transferência de massa em meios porosos têm sido resolvidas com o auxílio do software MATLAB[®] (DAMOR; KUMAR; SHUKLA, 2015; GHANMI; ABBAS, 2019; LIANG et al., 2019; HOBINY et al., 2020). Este também tem sido utilizado na simulação de modelos que apresentam termos de atraso no fluxo de calor e no gradiente de temperatura em tecidos e em aletas e de modelos nos quais se considera o coeficiente de difusão dependente do tempo, utilizados na descrição de fenômenos anômalos de difusão de vapor (KUMAR; RAI, 2016; XU et al., 2017; SINGH; KUMAR; RAI, 2018). Outro software frequentemente utilizado em problemas anômalos é o MATHEMATICA[®]. Modelos que apresentam derivadas de ordem fracionária e descrevem a transferência de massa em meios fraturados têm sido resolvidos com o uso desse software (FOMIN; CHUGUNOV; HASHIDA, 2011). Este também tem sido aplicado na resolução de equações nas quais se considera um coeficiente de difusão de massa dependente da concentração e de modelos que apresentam termos de atraso no fluxo de calor e no gradiente de temperatura (KHAIRY, 2011; ZHOKH; STRIZHAK, 2019). Também se podem encontrar aplicações usando o software COMSOL Multiphysics[®] na resolução de equações nas quais se encontram termos de atraso no fluxo de calor e no gradiente de temperatura, utilizadas na descrição da transferência de calor em diversos meios (RIVERA et al., 2010; PAUL; PAUL, 2018; RIETH; KOVÁCS; FÜLÖP, 2018). Em problemas anômalos que envolvem a transferência de calor em meios biológicos, equações diferenciais com ordem fracionária têm sido resolvidas numericamente com o uso do software MAPLE[®] (ABDULHUSSEIN; ODA, 2020; ROOHI; HEYDARI; AVAZZADEH, 2021). Este também tem sido utilizado na resolução de equações diferenciais de ordem fracionária que descrevem a transferência de massa e de equações que apresentam termos de atraso no fluxo de calor e no gradiente de temperatura (ZHANG; SHANG, 2015; KHEYBARI; DARVISHI; HASHEMI, 2020).

Conforme pode ser constatado, o conhecimento dos perfis de temperatura e de concentração em aplicações distintas configura um tema de grande importância nos dias atuais. Do ponto de vista matemático, a grande maioria destas aplicações ainda se restringe à resolução de modelos baseados nas tradicionais Leis de Fourier e de Fick. Assim, o estudo de modelos generalizados para as tradicionais leis de transporte configura um tema promissor, tanto do ponto de vista numérico quanto do ponto de vista experimental (GOUDARZI; AZIMI, 2019; ZHOKH, 2019).

Diante do que foi apresentado, a presente tese tem por objetivo principal avaliar um modelo hiperbólico diferencial parcial fracionário no espaço em relação à contribuição difusiva para a representação de fenômenos anômalos de transferência de calor e de massa. Como objetivos específicos citam-se:

- Estender o Método Pseudo-Espectral de Legendre e o Método das Diferenças Finitas para o contexto fracionário para resolver o modelo proposto (Equação de Advecção-Dispersão Hiperbólica Fracionária);
- Comparar os resultados obtidos por estas duas abordagens considerando estudos de caso que apresentam solução analítica e resultados reportados na literatura. Neste caso, também se objetiva avaliar a capacidade de ambas as metodologias propostas no que tange a resolução de modelos simplificados (modelos parabólicos com ordem inteira e fracionária);
- Avaliar a influência dos parâmetros deste modelo nos perfis obtidos;
- Propor uma estratégia para corrigir, dimensionalmente, os modelos fracionários considerados;
- Formular e resolver problemas inversos sintéticos e reais para estimar os parâmetros do modelo proposto, bem como dos modelos resultantes da simplificação desse modelo. Para essa finalidade o algoritmo de Evolução Diferencial é considerado como estratégia de otimização.

Este trabalho está estruturado como segue. No Capítulo 2 é apresentado o estado da arte no que tange a modelagem das transferências de calor e de massa, os métodos aplicados para a resolução de problemas anômalos, uma breve revisão sobre derivadas fracionárias e informações referentes às características e aos métodos de resolução de problemas inversos. O Capítulo 3 apresenta a descrição da metodologia utilizada na resolução dos modelos considerados e dos problemas inversos propostos. No Capítulo 4 são apresentados os resultados e a discussão dos mesmos. Finalmente, no último capítulo são apresentadas as conclusões deste trabalho e as sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo é dedicado a revisitar o estado da arte no que tange o escopo deste trabalho. Neste caso são apresentadas informações referentes aos modelos empregados para representar fenômenos anômalos de transferência de calor e de massa, aos métodos tradicionalmente usados para a resolução (analítica e numérica) desses modelos, uma breve revisão do cálculo fracionário e a formulação e resolução de problemas inversos, com destaque para a modelagem matemática e o algoritmo de Evolução Diferencial, técnica empregada para a resolução deste tipo de problema de otimização.

2.1 Leis Clássicas da Condução de Calor e Difusão de Massa

A transferência de calor é definida como o trânsito de energia térmica, que se deve à diferença de temperaturas no interior de um meio ou entre mais de um meio (INCROPERA et al., 2006). Esse processo pode ocorrer através dos mecanismos de condução, convecção e radiação. A condução ocorre em nível molecular e consiste na transferência de calor entre as partículas de um meio estacionário. No caso da convecção, a energia é transferida entre uma superfície e um fluido em movimento. Ao contrário dos processos anteriores, a transferência de calor por radiação não necessita de um meio material para ocorrer. A radiação consiste na energia emitida por uma matéria cuja temperatura é diferente de zero. Essa emissão de energia deve-se a mudanças ocorridas nas configurações eletrônicas dos átomos e moléculas constituintes da matéria (INCROPERA et al., 2006).

A equação mais utilizada para descrever a condução de calor corresponde à Lei de Fourier. Essa equação fenomenológica tem sido aplicada em diversos problemas de engenharia. Segundo essa equação, o fluxo de calor é diretamente proporcional ao gradiente de temperatura. De acordo com Bird, Stewart e Lightfoot (2002), a Lei de Fourier é dada pela Equação (2.1).

$$q = -k\nabla T, \quad (2.1)$$

em que q é o fluxo de calor, k é a condutividade térmica e T é a temperatura.

Já a transferência de massa consiste no trânsito de massa de um componente de uma mistura. Esse processo ocorre da região de maior para a de menor concentração do componente e se deve a um gradiente de concentração. A transferência de massa pode ocorrer de dois modos análogos à condução e à convecção de calor. A transferência de massa que ocorre de maneira semelhante à condução de calor corresponde à difusão de massa (INCROPERA et al., 2006).

Em grande parte dos problemas de engenharia, a difusão de massa é descrita pela Lei de Fick. Assim como a Lei de Fourier da condução de calor, essa equação também é fenomenológica. Segundo Welty et al. (2007), a Lei de Fick é dada pela Equação (2.2).

$$J_A = -D_{AB} \nabla C_A, \quad (2.2)$$

em que J_A é o fluxo mássico difusivo do componente A, D_{AB} é o coeficiente de difusão e C_A é a concentração mássica do componente A.

2.2 Fenômenos Anômalos

Tradicionalmente, os processos de condução de calor são descritos pela Lei de Fourier, principalmente em sistemas macroscópicos. O uso dessa lei implica em uma velocidade infinita de propagação do calor no meio. Porém, em muitos problemas de engenharia é necessário utilizar modelos que consideram um valor finito dessa velocidade. Esse é o caso, por exemplo, de estudos de caso referentes à transferência de calor em tecidos e em nanomateriais. Fenômenos em que a aplicação da Lei de Fourier não gera resultados razoáveis são denominados fenômenos anômalos (WANKHADE; KUNDU; DAS, 2018). Estes ocorrem, principalmente, em problemas nos quais o gradiente de temperatura é muito alto, as variáveis do espaço e do tempo encontram-se em uma escala nano ou micro e as temperaturas envolvidas são extremamente baixas (DANESHJOU et al., 2016).

Fenômenos anômalos também ocorrem em transferência de massa, devido ao fato da Lei de Fick também estar relacionada à hipótese de velocidade infinita de propagação. No que tange a transferência de massa, esses fenômenos são observados quando o gradiente de concentração é muito alto, os meios envolvidos são altamente heterogêneos e em problemas nos quais a variável temporal apresenta valores muito baixos (CHEN; LIU, 2003; BARBEIRO; FERREIRA; PINTO, 2011; ZHOKH, 2019). Nesses casos, a relação entre fluxo mássico difusivo e gradiente de concentração deixa de ser linear e se torna necessário adicionar termos referentes aos efeitos não lineares na Lei de Fick (FERREIRA; PENA; ROMANAZZI, 2016). Fenômenos anômalos para essa lei têm sido observados com frequência em meios porosos, já que a mesma não considera efeitos de memória e as restrições geométricas presentes na estrutura desses meios (QUIROZ et al., 2019). Também se tem verificado a ocorrência desses fenômenos na difusão de massa em células e no plasma (SULEIMAN et al., 2020).

Richardson (1926) observou uma baixa precisão da Lei de Fick para a difusão turbulenta na atmosfera. O autor considerou uma difusão relativa entre duas partículas

inicialmente próximas e verificou o aumento da difusividade relativa com o incremento da distância entre as partículas. Crank e Park (1951) observaram um comportamento anômalo da difusão em polímeros de alta massa molecular a partir da realização de experimentos de adsorção e dessorção. Styris e Tomizuka (1963) também realizaram experimentos para avaliar a difusão de zinco em cristais de cobre. Para valores baixos de distância de penetração, foi observado que o processo apresentou características anômalas. Brown, Chung e Matthews (1966) estudaram a transferência de calor em Hélio líquido e em alumina em baixas temperaturas. Os autores analisaram os perfis de temperatura obtidos experimentalmente e concluíram que, para ambos os materiais, o processo apresentou um comportamento anômalo. Nicholas (1966) observou a difusão anômala de impurezas de boro e fósforo em cristais de silício. Isso foi verificado para concentrações altas das impurezas. Ott et al. (1990) avaliaram a difusão de sondas fluorescentes em um sistema de micelas alongadas. Para baixas concentrações, os autores observaram um comportamento normal do processo. Para altos valores de concentração, foi verificada uma difusão anômala. Isso foi observado para tempos inferiores a um determinado valor.

Mitra et al. (1995) realizaram experimentos para estudar a transferência de calor em uma amostra de carne processada. A partir dos resultados os autores observaram uma diferença significativa entre os perfis de temperatura obtidos experimentalmente e os preditos pela Lei de Fourier. Davydov et al. (2001) estudaram a transferência de calor em tecidos musculares, onde foram observadas características anômalas. Küntz e Lavallée (2001) avaliaram dados experimentais da absorção de água em amostras de argila e calcário, presentes nos trabalhos de Carpenter et al. (1993), Pel et al. (1995) e Pel, Kopinga e Brocken (1996). Esses dados foram obtidos através da técnica de ressonância magnética nuclear. Os autores verificaram que, para ambos os materiais, o processo apresentou um comportamento anômalo. Roetzel, Putra e Das (2003) determinaram experimentalmente os perfis de temperatura de amostras de cinco materiais: esferas de cobre revestidas, sílica, alumina em pó, hidróxido de sódio em pó e carne processada. Os autores observaram um comportamento hiperbólico do processo para todos os materiais considerados.

Silva (2006) utilizou o método da ressonância magnética nuclear para avaliar a difusão de água em zeólitas. A partir dos experimentos realizados, o autor obteve perfis de concentração de água em função do comprimento de penetração no sólido e do tempo. Ao analisar esses perfis, o autor verificou que o processo apresentou características subdifusivas. Derec et al. (2010) estudaram a difusão de um ferrofluido em água. Inicialmente, foram realizados experimentos sem a presença de um campo magnético. Nesse caso, os autores

observaram um comportamento normal da difusão. Posteriormente, os experimentos foram realizados na presença de um campo magnético. Para esta condição experimental, foi verificada uma difusão anômala.

De acordo com Bevilacqua, Galeão e Costa (2011a), processos de difusão nos quais ocorre o fenômeno da retenção de partículas não podem ser descritos pela lei tradicional da difusão. Esse fenômeno foi observado por Atsumi (2002) para a difusão de hidrogênio em grafite, D'Angelo et al. (2003) no escoamento de fluidos não newtonianos em meios porosos e Muhammad (2004) para a difusão de contaminantes inorgânicos em bentonita. Ván et al. (2017) avaliaram a transferência de calor unidimensional em amostras de um capacitor, de calcário, de uma rocha e de uma espuma metálica. Nesse estudo foram realizados experimentos em que se produziram pulsos de calor sobre as amostras. Para os quatro materiais utilizados, os perfis de temperatura determinados experimentalmente mostraram-se distantes dos obtidos quando se considerou a Lei de Fourier. Fülöp et al. (2018) realizaram experimentos semelhantes aos efetuados por Ván et al. (2017). Utilizando amostras de basalto de três espessuras diferentes, os autores verificaram que o aumento da espessura das amostras ocasionou a elevação da diferença entre os perfis de temperatura obtidos e os preditos pela Lei de Fourier. Além disso, para as três amostras avaliadas foi verificada uma baixa precisão da lei tradicional da condução de calor.

Com o objetivo de descrever os fenômenos anômalos de maneira mais precisa, as Leis de Fourier e de Fick têm sido generalizadas a partir de diversos tipos de estratégias. Dentre estes, destacam-se: os modelos que apresentam derivadas de ordem fracionária, os compostos por derivadas de ordem superior a dois, os que apresentam termos de atraso no fluxo, de calor ou de massa, e no gradiente, de temperatura ou de concentração, e os em que se considera que o coeficiente de difusão depende do tempo e/ou da concentração, ou que a condutividade térmica é função do tempo e/ou da temperatura (PARADISI et al., 2001; ZHOKH; STRIZHAK, 2019; MOZAFARIFARD; MORTAZAVINEJAD; TOGHRAIE, 2020). Além destes modelos, equações estocásticas também têm sido utilizadas para descrever fenômenos anômalos (SHLESINGER; ZASLAVSKY; KLAFTER, 1993; KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008; VISWANATHAN et al., 2011; MEROZ; SOKOLOV, 2015).

2.2.1 Modelos Anômalos que Apresentam Termos de Atraso

O primeiro modelo para descrever fenômenos anômalos na Lei de Fourier foi proposto por Cattaneo (1958) e Vernotte (1958) e é conhecido como modelo da onda térmica ou modelo hiperbólico da condução de calor (BARMAN; RATH; BHATTACHARYA, 2021).

Esse modelo é dado pela Equação (2.3).

$$q(x, t + \tau_q) = -k\nabla T(x, t), \quad (2.3)$$

em que x é a coordenada espacial, t é o tempo e τ_q é o tempo de relaxação térmica no fluxo de calor.

A Equação (2.3) apresenta um termo de atraso, denominado tempo de relaxação térmica no fluxo de calor ou fator de atraso, que corresponde ao tempo necessário para que o fluxo de calor seja iniciado, após a imposição de um gradiente de temperatura, e, de certa maneira, consiste em uma medida da inércia térmica do meio. Segundo esta equação, depois da aplicação desse gradiente, o fluxo de calor não se inicia de maneira instantânea, como a lei de Fourier implica. Nesse caso, o fluxo de calor sofre um aumento gradual, que depende do valor do tempo de relaxação térmica. Esse parâmetro está relacionado com o intervalo entre duas colisões consecutivas que ocorrem entre elétrons e fônons (ORDÓÑEZ-MIRANDA; ALVARADO-GIL, 2009). Do ponto de vista físico, quanto maior o valor do tempo de relaxação térmica de um material, mais tempo as partículas deste levam para transferir o calor para as partículas vizinhas (SOHAIL et al., 2017).

Em materiais homogêneos, o fator de atraso apresenta um valor muito pequeno, entre 10^{-8} e 10^{-14} segundos, o que indica que nesses materiais pode-se descrever a condução de calor através da Lei de Fourier. Em problemas que envolvem a transferência de calor em outros meios, como, por exemplo, tecidos, trocadores iônicos e areia, o valor do tempo de relaxação térmica é mais considerável, da ordem de segundos (ROETZEL; PUTRA; DAS, 2003; GUPTA; SRIVASTAVA, 2019).

O modelo hiperbólico da condução de calor soluciona o problema da velocidade infinita de propagação do sinal térmico da Lei de Fourier, mas também apresenta algumas limitações. Dentre estas, destaca-se a sua baixa precisão em processos de transferência de calor muito rápidos. Isso se deve ao fato de o modelo não considerar os efeitos micro estruturais que ocorrem nesses processos (ZHUKOVSKY; SRIVASTAVA, 2017; GOUDARZI; AZIMI, 2019). Além disso, em alguns casos, o uso do modelo da onda térmica implica em valores negativos de entropia e energia térmica, os quais são fisicamente impossíveis (ASKARIZADEH; AHMADIKIA, 2014).

Com o objetivo de generalizar o modelo da onda térmica, Tzou (1995) propôs uma equação que contém um termo adicional de atraso no gradiente de temperatura. Essa equação é conhecida como modelo de duplo atraso da condução de calor, apresentado na Equação (2.4).

$$q(x, t + \tau_q) = -k \nabla T(x, t + \tau_T), \quad (2.4)$$

em que τ_T é o tempo de relaxação térmica no gradiente de temperatura.

Os valores dos termos de atraso no fluxo de calor e no gradiente de temperatura são fundamentais na precisão desse modelo (ELTEJAEI; BALAVAND; MOJRA, 2021). Apesar de ser muito abrangente, o modelo do duplo atraso da condução de calor não gera resultados satisfatórios em todas as situações. Isso ocorre em problemas nos quais o caminho livre médio das partículas carregadoras de energia, tais como os elétrons e fônons, encontra-se na mesma ordem de grandeza do comprimento característico do meio. Também se verifica uma baixa precisão do modelo do duplo atraso quando o tempo de relaxação das partículas carregadoras de energia é da mesma ordem de grandeza do tempo de duração do processo (GHAZANFARIAN; SHOMALI; ABBASSI, 2015; WANG; XU; WANG, 2018).

O primeiro modelo para generalizar a Lei de Fick foi proposto por Cattaneo (1958), através de uma equação análoga ao modelo hiperbólico da condução de calor (CARELLA; DORAO, 2010). Neste modelo, dado pela Equação (2.5), a velocidade de propagação da onda de concentração deixa de ser infinita, sendo esta descrita pela Equação (2.6).

$$J(x, t) + \tau_j \frac{\partial J(x, t)}{\partial t} = -D \frac{\partial C(x, t)}{\partial x}, \quad (2.5)$$

$$v_C = \sqrt{\frac{D}{\tau_j}}, \quad (2.6)$$

em que J é o fluxo mássico difusivo, D é o coeficiente de difusão, C é a concentração mássica, τ_j é o tempo de relaxação no fluxo de massa e v_C é a velocidade de propagação da onda de concentração.

Também se pode utilizar um modelo de duplo atraso para a difusão de massa, dado pela Equação (2.7), em que τ_C representa o tempo de relaxação no gradiente de concentração (WILMERS; BARGMANN, 2014).

$$J(x, t + \tau_j) = -D \nabla C(x, t + \tau_c). \quad (2.7)$$

2.2.2 Modelos Anômalos que Apresentam Derivadas de Ordem Superior a Dois

Em alguns casos, a Lei de Fick pode ser generalizada a partir da consideração de derivadas parciais de ordem maior que dois da concentração em relação às variáveis espaciais (ROUSSEL; ROUSSEL, 2004). Modelos com essas derivadas têm sido aplicados para descrever processos de retenção que ocorrem durante a difusão de partículas em alguns meios específicos (BEVILACQUA; GALEÃO; COSTA, 2011a). Para uma distribuição simétrica,

esse fenômeno pode ser descrito pela Equação (2.8).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = (1 - k_m)K_2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - k_m(1 - k_m)K_4 \frac{\partial^4 C}{\partial x^4}, \quad (2.8)$$

em que k_m é a fração mássica, K_2 é o coeficiente de difusão e K_4 o coeficiente de retenção para o processo de difusão.

A retenção de partículas também pode ocorrer em processos de propagação nos quais as partículas são transferidas para um sentido específico (BEVILACQUA; GALEÃO; COSTA, 2011b). Nesses casos, o fenômeno é descrito pela Equação (2.9).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -k_m K_1 \frac{\partial C}{\partial x} + k_m(1 - k_m)K_3 \frac{\partial^3 C}{\partial x^3}, \quad (2.9)$$

em que K_1 é a velocidade do transporte de massa e K_3 o coeficiente de retenção para o processo de propagação.

2.2.3 Modelos Anômalos em que a Condutividade Térmica e o Coeficiente de Difusão não são Constantes

A Lei de Fourier também pode ser generalizada ao se considerar que a condutividade térmica depende da temperatura. Essa dependência é observada, principalmente, quando as temperaturas são muito baixas. Geralmente, considera-se uma relação linear entre essas duas variáveis (KOVÁCS; ROGOLINO, 2020). Assim, a condutividade térmica pode ser determinada pela Equação (2.10).

$$k(T) = k_0 + a_k(T - T_0), \quad (2.10)$$

em que k_0 é a condutividade térmica na temperatura de referência, T_0 é a temperatura de referência e a_k é um parâmetro da equação.

A dependência entre condutividade térmica e temperatura também pode ser determinada através de métodos de estimação de parâmetros. Nesses casos, considera-se que a relação entre essas duas variáveis é descrita por um polinômio com coeficientes desconhecidos, que podem ser determinados por algum desses métodos (ZHOU; HU, 2019). Alguns autores também consideram que a condutividade térmica depende do tempo. Pode-se determinar essa dependência a partir da formulação e resolução de problemas inversos (HUSSEIN; LESNIC, 2015).

Outra forma de generalização da Lei de Fick consiste em considerar um coeficiente de difusão dependente da concentração. Nesse caso, tem-se a Equação (2.11). A dependência do coeficiente de difusão com a concentração pode ser representada por diversas expressões.

Dentre estas, destacam-se a relação linear e a relação exponencial entre essas variáveis (ZHOKH; STRIZHAK, 2019). Essas relações são descritas pelas Equações (2.12) e (2.13), respectivamente.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(C) \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (2.11)$$

$$D(C) = D_0 (1 + \beta_c C), \quad (2.12)$$

$$D(C) = D_0 \exp(1 + \beta_e C), \quad (2.13)$$

em que D é o coeficiente de difusão, C é a concentração mássica, D_0 é coeficiente de difusão inicial, β_c e β_e são parâmetros a serem determinados.

Küntz e Lavallée (2001) consideraram a Equação (2.11) para avaliar a difusão anômala de água em materiais porosos. Os autores definiram uma variável ϕ , dada pela Equação (2.14), e reescreveram a Equação (2.11), considerando essa variável. Dessa forma, foi obtida a Equação (2.15).

$$\phi = xt^{-0.5}, \quad (2.14)$$

$$\frac{\phi}{2} \frac{dC}{d\phi} + \frac{d}{d\phi} \left(D(C) \frac{dC}{d\phi} \right) = 0. \quad (2.15)$$

Küntz e Lavallée (2001) propuseram outra generalização da Lei de Fick, dada pela Equação (2.16).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(C) \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)^n \right). \quad (2.16)$$

Lockington, Parlange e Dux (1999) consideraram uma dependência exponencial entre o coeficiente de difusão e a concentração para estudar a difusão de água em concreto. Silva (2006) utilizou uma relação desse tipo entre ambas as variáveis para avaliar a difusão anômala em zeólita. Esse tipo de relação entre o coeficiente de difusão e a concentração também foi considerado por Lima, Lobato e Arouca (2019) na proposição e resolução de problemas inversos envolvendo difusão anômala.

Também se pode generalizar a Lei de Fick através da consideração de que o coeficiente de difusão depende do tempo. Isso tem sido utilizado, por exemplo, no estudo da difusão de cloretos em concretos (PETCHERDCHOO, 2013). Nesse caso, a relação entre coeficiente de difusão e tempo é dada pela Equação (2.17).

$$D(t) = \left(\frac{1}{t} \right)^{\beta_t}, \quad (2.17)$$

em que t é o tempo de exposição do concreto e β_t é um parâmetro determinado experimentalmente.

2.2.4 Modelos Anômalos que Apresentam Derivadas com Ordem Fracionária

O surgimento do cálculo fracionário data do dia 30 de setembro de 1695, em uma carta escrita por Leibniz para L'Hôpital, na qual o autor questionava se seria possível generalizar o significado das derivadas de ordem inteira para derivadas de ordem não inteira. Na resposta à carta, L'Hôpital levantou a possibilidade de se utilizar uma derivada de ordem igual a 1/2. Leibniz respondeu dizendo que isso poderia gerar um paradoxo, mas que no futuro poderiam ser tiradas conclusões úteis a partir desse paradoxo (MALINOWSKA; ODZIJEWICZ; TORRES, 2015).

Em 1697, Leibniz enviou cartas para J. Wallis e J. Bernoulli, nas quais sugeriu que uma derivada de ordem n , sendo n um valor não inteiro, poderia ser definida de acordo com a Equação (2.18) (ABBAS; BENCHOHRA; N'GUÉRÉKATA, 2012).

$$\frac{d^n e^{mx}}{dx^n} = m^n e^{mx}. \quad (2.18)$$

Em 1730, Euler sugeriu que a derivada de ordem não inteira de uma função que apresenta uma potência poderia ser dada pela Equação (2.19), em que Γ representa a função Gama, definida segundo a Equação (2.20). Assim, o autor obteve a expressão dada pela Equação (2.21) para a derivada de ordem 1/2 da função $f(x)=x$ (ABBAS; BENCHOHRA; N'GUÉRÉKATA, 2012).

$$\frac{d^n x^m}{dx^n} = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m-n+1)} x^{m-n}, \quad (2.19)$$

$$\Gamma(\xi) = \int_0^{\infty} t^{\xi-1} e^{-t} dt, \quad (2.20)$$

$$\frac{d^{\frac{1}{2}} x}{dx^{\frac{1}{2}}} = \sqrt{\frac{4x}{\pi}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} x^{\frac{1}{2}}. \quad (2.21)$$

Em 1812, Laplace propôs uma formulação para uma derivada de ordem fracionária em termos de uma integral (ORTIGUEIRA, 2013). O termo “derivada de ordem arbitrária” foi utilizado pela primeira vez no livro escrito por Lacroix (1819). O autor propôs a Equação (2.22) para a determinação da derivada de ordem n da função $f(x)=x^m$, sendo m um número inteiro positivo e n um número inteiro menor que m .

$$\frac{d^n x^m}{dx^n} = \frac{m!}{(m-n)!} x^{m-n}. \quad (2.22)$$

Substituindo o símbolo fatorial pela função Gama na Equação (2.22), o autor determinou a expressão dada pela Equação (2.23) para o cálculo da derivada de ordem α da função $f(x)=x^\beta$, sendo α e β números não inteiros. Usando a Equação (2.23), Lacroix obteve a expressão para a derivada de ordem 1/2 da função $f(x)=x$. A Equação (2.24) representa essa expressão.

$$\frac{d^\alpha x^\beta}{dx^\alpha} = \frac{\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(\beta-\alpha+1)} x^{\beta-\alpha}, \quad (2.23)$$

$$\frac{d^{\frac{1}{2}} x}{dx^{\frac{1}{2}}} = \frac{\Gamma(2)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} x^{\frac{1}{2}} = 2\sqrt{\frac{x}{\pi}}. \quad (2.24)$$

Fourier (1822) propôs a Equação (2.25) para representar uma função $f(x)$. A partir dessa equação, o autor obteve uma expressão para a derivada de ordem n da função, sendo n um valor não inteiro. Essa expressão é dada pela Equação (2.26).

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) dz \int_{-\infty}^{+\infty} \cos(px - pz) dp, \quad (2.25)$$

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) dz \int_{-\infty}^{+\infty} p^n \cos\left(px - pz + n \frac{\pi}{2}\right) dp. \quad (2.26)$$

Abel (1823) resolveu a Equação (2.27), presente no problema da tautócrona, e propôs que a solução dessa equação é definida pela Equação (2.28).

$$\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x \frac{g(u)}{(x-u)^{1-\alpha}} du = f(x), \quad 0 < \alpha < 1, \quad (2.27)$$

$$g(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_0^x \frac{f(u)}{(x-u)^\alpha} du. \quad (2.28)$$

Liouville (1832) foi o primeiro autor a apresentar uma teoria sobre derivadas fracionárias e definiu uma expressão para a derivada de ordem α da função exponencial, sendo α um número arbitrário. Essa expressão é dada pela Equação (2.29) e foi obtida a partir da extensão da derivada de ordem inteira dessa função (DEBNATH; BHATTA, 2006).

$$D^\alpha e^{ax} = \frac{d^\alpha e^{ax}}{dx^\alpha} = a^\alpha e^{ax}. \quad (2.29)$$

Considerando que uma função $f(x)$ pode ser representada por uma série de funções exponenciais, de acordo com a Equação (2.30), Liouville obteve a expressão dada pela

Equação (2.31) para a derivada de ordem arbitrária dessa função. Essa equação é conhecida como primeira expressão de Liouville para a derivada fracionária (DEBNATH; BHATTA, 2006).

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{a_n x}, \quad (2.30)$$

$$D^\alpha f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n a_n^\alpha e^{a_n x}. \quad (2.31)$$

A Equação (2.31) é válida para qualquer valor de α , porém somente pode ser aplicada para funções que apresentam a forma descrita pela Equação (2.30). Por isso, Liouville propôs outra definição para a derivada de ordem não inteira. Essa definição baseia-se na função Gama, foi obtida para a função $f(x)=x^{-\beta}$, sendo β maior que zero, e é dada pela Equação (2.32) (DEBNATH; BHATTA, 2006).

$$D^\alpha x^{-\beta} = (-1)^\alpha \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\beta)} x^{-\alpha-\beta}. \quad (2.32)$$

A Equação (2.32) é denominada segunda expressão de Liouville para a derivada fracionária e também não é válida para uma faixa muito ampla de funções. Para uma função constante, na qual β é equivalente a zero, tem-se que a derivada é nula, de acordo com a Equação (2.32), já que $\Gamma(0)=\infty$. Esse resultado difere do obtido pela expressão apresentada por Lacroix, pois substituindo $\beta=0$ na Equação (2.23), observa-se que a derivada não é nula. Por isso, alguns autores consideram que a derivada fracionária pode ser obtida pela expressão proposta por Lacroix e outros que a definição de Liouville é correta (DEBNATH; BHATTA, 2006).

A definição de integral fracionária de Riemann-Liouville é apresentada na Equação (2.33), na qual ${}_a D_x^{-\alpha}$ e ${}_a J_x^\alpha$ representam o operador integral de Riemann-Liouville. A definição de integral fracionária de Liouville é obtida fazendo-se $a=-\infty$ na Equação (2.33). Fazendo-se $a=0$ nessa equação, obtém-se a definição de integral fracionária de Riemann (HILFER, 2000).

$${}_a D_x^{-\alpha} f(x) = {}_a J_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} f(t) dt. \quad (2.33)$$

Desde o surgimento do cálculo fracionário, muitas definições de derivadas de ordem fracionária foram propostas. Dentre estas, destacam-se as definições de Riemann-Liouville, Grünwald-Letnikov e Caputo, representadas pelas Equações (2.34), (2.35) e (2.36), respectivamente. Nessas equações, n corresponde a um número inteiro (GOUDARZI; AZIMI, 2019).

$${}_{RL} D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau, \quad n-1 \leq \alpha < n, \quad (2.34)$$

$${}_{GL} D_t^\alpha f(t) = \lim_{h \rightarrow 0} h^{-\alpha} \sum_{k=0}^{\left[\frac{t-a}{h} \right]} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(t-kh), \quad (2.35)$$

$${}_{C} D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f^{(n)}(\tau) d\tau, \quad n-1 \leq \alpha < n. \quad (2.36)$$

A definição de derivada fracionária de Riemann-Liouville foi fundamental para o desenvolvimento do cálculo fracionário. Em problemas que apresentam essa derivada, são necessárias condições iniciais que incluem os valores limites da mesma em $t=0$. Esses valores não apresentam um significado físico muito claro. Por isso, essa definição de derivada fracionária tem sido utilizada com muito mais frequência em problemas de matemática pura do que em problemas de engenharia (GHAZIZADEH; MAEREFAT; AZIMI, 2010; KHEYBARI; DARVISHI; HASHEMI, 2020).

A definição de derivada fracionária de Grünwald–Letnikov é equivalente à de Riemann-Liouville para uma ampla gama de funções. Por isso, derivadas fracionárias de Riemann-Liouville podem ser aproximadas numericamente através da definição de Grünwald-Letnikov (GHAZIZADEH; MAEREFAT; AZIMI, 2010).

Em problemas nos quais as condições iniciais apresentam um significado físico claro, o uso de derivadas fracionárias de Caputo é muito interessante. Isso pode ser explicado pela semelhança entre as condições iniciais de equações que apresentam essas derivadas e as condições iniciais de equações diferenciais em que se encontram derivadas de ordem inteira de funções em $t=0$ (KHEYBARI; DARVISHI; HASHEMI, 2020).

Durante a maior parte do período após o surgimento do cálculo fracionário, este se desenvolveu e foi aplicado quase exclusivamente no contexto da matemática pura. Somente nas últimas três décadas, as derivadas e integrais de ordem fracionária começaram a ser utilizadas em outras áreas da ciência e da engenharia. Em muitas dessas áreas, esses tipos de derivadas e integrais têm-se mostrado mais adequados na descrição de fenômenos do que as derivadas e integrais de ordem inteira (LONGJIN; REN; QIU, 2010).

Em um trabalho de revisão bibliográfica, Sun et al. (2018) apresentam diferentes aplicações em que se tem utilizado o cálculo fracionário. Na física podem ser encontradas aplicações em problemas que envolvem a difusão anômala em meios complexos, a espectroscopia de impedância elétrica e a formação e dissolução de nanoprecipitados em ligas metálicas. Segundo os autores, também se tem utilizado o cálculo fracionário para descrever o

escoamento de fluidos viscoelásticos em microcanais, o transporte de gases em meios heterogêneos e o comportamento viscoelástico de nanoestruturas. No referido trabalho podem-se encontrar modelos constituídos por derivadas de ordem fracionária para o tratamento de tumores por hipertermia e análise da dinâmica do sistema nervoso. Ainda de acordo com Sun et al. (2018) os modelos fracionários também têm sido utilizados na economia, na estimação de parâmetros em problemas que envolvem supercapacitores e na descrição de propriedades dielétricas anômalas de alguns materiais e do comportamento termomecânico de polímeros amorfos.

Modelos que apresentam derivadas de ordem fracionária têm-se mostrado muito eficientes na descrição de fenômenos anômalos, principalmente, em problemas de condução de calor. Esses modelos diferenciam-se dos modelos contínuos, como o modelo hiperbólico e o modelo do duplo atraso da condução de calor, por apresentar uma natureza não local. Além disso, os modelos fracionários são capazes de descrever os efeitos de memória presentes no processo (KUMAR; RAI, 2017).

Compte e Metzler (1997) propuseram um modelo fracionário de condução de calor, dado pela Equação (2.37). Esse modelo apresenta uma derivada de ordem fracionária em relação ao tempo, definida segundo a definição de Riemann-Liouville.

$$q(x, t) + \tau_q^\alpha \frac{\partial^\alpha q(x, t)}{\partial t^\alpha} = -k\nabla T(x, t), \quad (2.37)$$

em que α é um número não inteiro, maior que 0 e menor que 1.

Eliminando-se o fluxo de calor da Equação (2.37), tem-se a Equação (2.38).

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \tau_q^\alpha \frac{\partial^{1+\alpha} T(x, t)}{\partial t^{1+\alpha}} = k\nabla^2 T(x, t). \quad (2.38)$$

Com o objetivo de generalizar o modelo hiperbólico da condução de calor, Ghazizadeh, Maerefat e Azimi (2010) aplicaram uma expansão em séries de Taylor fracionária. Assim, os autores obtiveram a Equação (2.39).

$$q(x, t + \tau_q) = q(x, t) + \frac{\tau_q^\alpha}{\Gamma(1 + \alpha)} \frac{\partial^\alpha q(x, t)}{\partial t^\alpha}, \quad (2.39)$$

em que Γ é a função Gama.

Segundo os autores, podem-se combinar os termos referentes à função Gama e ao tempo de relaxação. Substituindo o modelo de Cattaneo-Vernotte na equação anterior, tem-se o modelo hiperbólico fracionário da condução de calor, dado pela Equação (2.40). Eliminando-se o fluxo de calor, os autores obtiveram a Equação (2.41).

$$q(x, t) + \tau_q^\alpha \frac{\partial^\alpha q(x, t)}{\partial t^\alpha} = -k \nabla T(x, t), \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \tau_q^\alpha \frac{\partial^{1+\alpha} T(x, t)}{\partial t^{1+\alpha}} = k \nabla^2 T(x, t). \quad (2.41)$$

Como se observa, as equações fracionárias para a condução de calor são idênticas em relação aos termos das equações. Porém, estas consideram definições diferentes de derivada fracionária. No modelo proposto por Ghazizadeh, Maerefat e Azimi (2010), a derivada de ordem fracionária em relação ao tempo é definida de acordo com a definição de Caputo. Isso ocorre, porque com o uso dessa definição é possível aplicar as condições iniciais e de contorno de maneira mais prática do que quando se considera a definição de Riemann-Liouville.

Em problemas anômalos de difusão de massa, também têm sido aplicados modelos compostos por equações diferenciais de ordem fracionária. A Lei de Fick pode ser generalizada usando derivadas de ordem não inteira em relação ao tempo, ao espaço ou a ambas as variáveis independentes. Segundo Yu e Jiang (2013), a equação fracionária da Lei de Fick em relação ao tempo e ao espaço é dada pela Equação (2.42). Nesse caso, os autores consideraram a definição de derivada fracionária de Riemann-Liouville.

$$J_m(x, t) = -D_{\lambda\alpha} \frac{\partial^{1-\lambda}}{\partial t^{1-\lambda}} \left(\frac{\partial^{\alpha-1} C(x, t)}{\partial x^{\alpha-1}} \right), \quad 0 < \lambda \leq 1, \quad 1 < \alpha \leq 2, \quad (2.42)$$

em que J_m é o fluxo mássico difusivo e $D_{\lambda\alpha}$ é o coeficiente de difusão anômala.

A equação fracionária da Lei de Fick em relação ao tempo pode ser obtida igualando o valor de α a 2. Fazendo $\lambda=1$, obtém-se a equação fracionária da Lei de Fick em relação ao espaço (YU; JIANG, 2013). Assim, os modelos fracionários da Lei de Fick em relação ao tempo e ao espaço são dados, respectivamente, pelas Equações (2.43) e (2.44).

$$J_m(x, t) = -D_{\lambda\alpha} \frac{\partial^{1-\lambda}}{\partial t^{1-\lambda}} \left(\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right), \quad (2.43)$$

$$J_m(x, t) = -D_{\lambda\alpha} \frac{\partial^{\alpha-1} C(x, t)}{\partial x^{\alpha-1}}. \quad (2.44)$$

Zhokh (2019) também considerou um modelo fracionário da Lei de Fick em relação ao tempo, dado pela Equação (2.45). Nesse caso, o autor utilizou a definição de derivada fracionária de Caputo.

$$\frac{\partial^\alpha C}{\partial t^\alpha} = D_{\lambda\alpha} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (2.45)$$

2.2.5 Modelos Anômalos Representados por Equações Diferenciais Estocásticas

A difusão anômala é caracterizada por uma relação não linear entre o deslocamento quadrático médio das partículas e o tempo, ao contrário do que se verifica na difusão normal (VLAHOS et al., 2008). Para fenômenos anômalos, essa relação pode ser dada pela Equação (2.46).

$$\langle r^2(t) \rangle \propto t^\gamma, \quad (2.46)$$

em que $r^2(t)$ é o deslocamento quadrático médio.

Com base no valor de γ , o processo de difusão pode ser classificado em: subdifusão, difusão normal e superdifusão. A subdifusão caracteriza-se por um valor desse expoente inferior à unidade. Para processos de difusão normal, γ é equivalente a 1. Quando o valor de γ é superior à unidade, têm-se processos superdifusivos (VLAHOS et al., 2008).

Com o objetivo de descrever a difusão anômala, também têm sido utilizadas equações baseadas em conceitos da teoria estocástica. Dentre estas, destacam-se: o modelo de caminhadas aleatórias com tempos contínuos, os vôos e as caminhadas de Lévy, a equação de Langevin generalizada e a equação mestra generalizada (SHLESINGER; ZASLAVSKY; KLAFTER, 1993; KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008; VISWANATHAN et al., 2011; MEROZ; SOKOLOV, 2015).

O modelo de caminhadas aleatórias com tempos contínuos (CATC) foi proposto por Montroll e Weiss (1965). Nesse modelo, considera-se que o tempo entre dois passos na caminhada e o comprimento dos passos na caminhada, representados, respectivamente, por τ_i e l_i , seguem uma distribuição contínua. Quando os momentos de τ ou l são divergentes, observa-se a difusão anômala. A partícula realiza n saltos em um intervalo de tempo $(0, t)$ e se encontra na origem entre o tempo inicial e um determinado tempo t_1 . Nesse instante, ocorre um salto da partícula, cujo comprimento é representado por l_1 . Até que seja atingido um valor de tempo t_2 superior a t_1 , a partícula permanece nessa posição. No instante t_2 , ocorre um novo salto da partícula e esta atinge a posição l_1+l_2 . Dessa forma, são definidos os tempos de espera τ_1 e τ_2 , de acordo com as Equações (2.47) e (2.48).

$$\tau_1 = t_1, \quad (2.47)$$

$$\tau_2 = t_2 - t_1. \quad (2.48)$$

O deslocamento da partícula, após esta realizar n saltos, é dado pela Equação (2.49).

$$x = \sum_{i=1}^n l_i, \quad (2.49)$$

em que x é o deslocamento da partícula.

As funções distribuição de probabilidade do comprimento dos saltos e distribuição do tempo de espera, representadas, respectivamente, por $\lambda(l)$ e $\omega(\tau)$, são dadas pelas Equações (2.50) e (2.51).

$$\lambda(l) = \int_0^{\infty} \psi(l, \tau) d\tau, \quad (2.50)$$

$$\omega(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(l, \tau) dl, \quad (2.51)$$

em que $\psi(l, \tau)$ é a função densidade de probabilidade conjunta, que representa a probabilidade da partícula realizar um passo de comprimento l em um instante τ .

O tempo de espera médio e a variância do comprimento dos saltos, representados por $\langle T \rangle$ e σ^2 , respectivamente, podem ser determinados através das Equações (2.52) e (2.53).

$$\langle T \rangle = \int_0^{\infty} \omega(\tau) \tau dt, \quad (2.52)$$

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(l) l^2 dl. \quad (2.53)$$

A função distribuição de probabilidade no domínio de Fourier-Laplace é dada pela Equação (2.54), que pode ser utilizada para descrever processos subdifusivos e superdifusivos.

$$\psi_{FL}(k, s) = \frac{1 - \omega_L(s)}{s} \left[\frac{1}{1 - \omega_L(s) \lambda_F(k)} \right], \quad (2.54)$$

em que ψ_{FL} é a função distribuição de probabilidade no domínio de Fourier-Laplace, $\omega_L(s)$ é a transformada de Laplace da função $\omega(\tau)$ e $\lambda_F(k)$ é a transformada de Fourier da função $\lambda(l)$.

Quando se tem uma divergência no primeiro momento da função distribuição do tempo de espera, observa-se uma subdifusão. Quando essa divergência ocorre no segundo momento da função distribuição de probabilidade do comprimento dos saltos, são observados vôos de Lévy. Nesses processos, a função $\lambda(l)$ decai seguindo uma lei de potência (LIMA, 2013). Dessa forma, tem-se a Equação (2.55).

$$\lambda(l) \propto |l|^{-\mu}, \quad 1 < \mu \leq 3. \quad (2.55)$$

Além dos vôos, também existem as caminhadas de Lévy. Na prática, os vôos de Lévy não são aplicados diretamente em fenômenos físicos. Isso ocorre, pois em vôos de Lévy o desvio quadrático médio não depende do tempo, já que são considerados passos instantâneos

de duração nula. Isso se deve à dependência da velocidade e do tempo total de percurso da partícula em relação ao comprimento do passo e ao número de passos, quando são observados vãos de Lévy. No caso das caminhadas de Lévy, a velocidade da partícula apresenta um valor finito e não depende do tamanho do passo. Enquanto isso há uma proporcionalidade entre o tempo de percurso e a distância total percorrida. Com isso, verifica-se uma dependência superlinear do desvio quadrático médio em relação ao tempo. Isso caracteriza um comportamento anômalo da difusão (LIMA, 2013).

A generalização da equação de Langevin foi proposta por Mori (1965) e Kubo (1966) e também pode ser utilizada em estudos de sistemas com memória. Para o caso unidimensional, a equação de Langevin generalizada é dada pela Equação (2.56).

$$\frac{dv}{dt} = -\int_{t_0}^t \Gamma(t-t')v(t')dt' + R(t), \quad t > t_0, \quad (2.56)$$

em que v é a velocidade da partícula, $\Gamma(t)$ é a função memória e $R(t)$ é a força estocástica que atua sobre a partícula, não correlacionada com a velocidade inicial $v(t_0)$.

A função memória e a força estocástica que atua sobre a partícula satisfazem as relações dadas pelas Equações (2.57), (2.58) e (2.59).

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Gamma(t) = 0, \quad (2.57)$$

$$\langle R(t) \rangle = 0, \quad (2.58)$$

$$C(t-t') = \langle R(t')R(t) \rangle = g\Gamma(t-t'), \quad (2.59)$$

em que $C(t-t')$ são as correlações entre as forças estocásticas e g é uma constante.

Kannan e Bharucha-Reid (1972) formularam a equação de Langevin generalizada como uma equação integral dada pela Equação (2.60).

$$v(t, \omega) = v(t_0, \omega) + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \Gamma(s-u)v(u, \omega)duds + \int_{t_0}^t m(u, v(u, \omega))du + \int_{t_0}^t \sigma(u, v(u, \omega))dM(u, \omega), \quad (2.60)$$

em que $M(t, \omega)$ é um processo estocástico, considerado como uma martingale contínua.

O único processo estável que apresenta variância finita corresponde ao movimento Browniano. Por isso, pode-se considerar que a equação de Langevin generalizada é governada por processos α -estáveis de Lévy, cuja variância é infinita. Santos (2011) determinou a solução dessa equação para processos desse tipo e demonstrou que essa consideração é interessante. Ao incluir o fator de memória, a equação de Langevin generalizada pode ser utilizada na descrição de fenômenos anômalos (LIMA, 2013).

A equação mestra generalizada, também denominada equação mestra com memória, é

dada pela Equação (2.61). Essa equação é utilizada para descrever a evolução da probabilidade de uma partícula encontrar-se em uma determinada posição em um instante t , em processos não locais no tempo e no espaço. Estes são denominados processos não-Markovianos (VAN KAMPEN, 1998).

$$\frac{\partial P(i, t; i_1, t_1)}{\partial t} = \int_{t_1}^t \sum_{i'} [\omega_{i,i'}(t-t')P(i', t'|i_1, t_1) - \omega_{i',i}(t-t')P(i_1, t_1|i', t')] dt', \quad (2.61)$$

em que P é a probabilidade da partícula estar em uma determinada posição em um instante t e ω é uma probabilidade de transição.

2.3 Métodos para a Resolução de Modelos Anômalos

Cada modelo utilizado para descrever fenômenos anômalos apresenta características particulares. Além disso, há algumas dificuldades de resolução que todos esses modelos apresentam de maneira geral como, por exemplo, o alto custo computacional envolvido nesse procedimento. Em muitos casos, é muito difícil determinar os parâmetros desses modelos experimentalmente, o que também dificulta a análise física do problema (LIU et al., 2017). Também é importante enfatizar que os fenômenos anômalos podem apresentar dinâmicas muito diferentes entre si. Com isso, a determinação experimental dos parâmetros pode variar muito de um modelo para o outro (METZLER; JEON; CHERSTVY, 2016).

Na resolução de modelos que apresentam derivadas de ordem superior a dois, são encontradas dificuldades relacionadas à implementação das condições de contorno e, principalmente, ao passo no tempo. Nesses modelos, o passo no tempo encontra-se mais restrito do que em modelos que apresentam equações diferenciais de segunda ordem. Isso dificulta muito a resolução desses modelos através de métodos explícitos. A resolução de equações diferenciais de ordem maior que dois através de métodos implícitos também não é muito simples, pois nesses casos o uso de tais métodos envolve a inversão de sistemas compostos por muitas equações (GREER; BERTOZZI; SAPIRO, 2006).

No caso dos modelos compostos por equações que consideram que o coeficiente de difusão ou a condutividade térmica depende de variáveis como concentração, temperatura ou tempo, a principal dificuldade encontrada consiste na obtenção da solução analítica. Quando se consegue obter essa solução, isso é realizado de maneira muito complicada. Por isso, a maioria desses modelos é resolvida através de métodos numéricos (ZHOKH; STRIZHAK, 2019).

Os modelos com termos de atraso também apresentam alguns problemas de resolução.

A solução da equação de Cattaneo, por exemplo, em alguns casos, apresenta inconsistências do ponto de vista físico, principalmente, valores negativos de concentração (BRASIELLO et al., 2019). No caso do modelo hiperbólico de condução de calor, a solução apresenta oscilações nas regiões próximas a descontinuidades abruptas. Essa corresponde à principal dificuldade de resolução desse modelo (YMELI et al., 2019).

A principal dificuldade encontrada na resolução de modelos compostos por equações diferenciais de ordem fracionária corresponde ao alto custo computacional. Isso ocorre, porque esses modelos são caracterizados como modelos não locais (CHEN et al., 2017). Além disso, na prática, é muito difícil a determinação de soluções em forma fechada dessas equações. Por isso, muitos autores têm buscado obter soluções aproximadas mais precisas através de diversos métodos numéricos (KHEYBARI; DARVISHI; HASHEMI, 2020).

2.3.1 Métodos Analíticos para a Resolução de Modelos Anômalos

A obtenção de soluções analíticas é muito importante, já que estas representam de maneira mais adequada as características físicas dos modelos. Além disso, a precisão das soluções aproximadas, obtidas por métodos numéricos, pode ser verificada com base na comparação com as soluções exatas (KENGNE; LAKHSSASSI, 2015).

Muitos métodos analíticos têm sido aplicados na resolução de modelos que descrevem fenômenos anômalos. Dentre estes, destacam-se os métodos da transformada de Laplace e da separação de variáveis. Outros métodos de obtenção de soluções exatas utilizados nesses problemas consistem nos métodos da transformada de Fourier e das funções de Green (GHAZANFARIAN; SHOMALI; ABBASSI, 2015; RASMUSSEN; CIVAN, 2015).

No método da separação de variáveis, propõe-se uma solução na forma de um produto de funções exclusivas de cada variável independente da equação diferencial parcial. Com a aplicação desse método, obtém-se um sistema de equações diferenciais ordinárias, que podem ser resolvidas analiticamente por diversos métodos. O produto das soluções dessas equações diferenciais ordinárias corresponde à solução analítica da equação diferencial parcial (RICE; DO, 1995).

Gou, Cai e Zhang (2005) aplicaram o método da separação de variáveis em um problema de transferência de calor e de massa com características anômalas em um meio poroso. Os autores obtiveram soluções analíticas que apresentaram uma estrutura matemática relativamente simples. Moosaie (2009) utilizou o método da separação de variáveis para determinar a solução analítica da equação de Cattaneo-Vernotte para a condução de calor bidimensional em uma esfera oca. O autor considerou que o material era homogêneo e

isotrópico. Assim, foi desconsiderada a influência da temperatura nas propriedades térmicas do material. Devido a não homogeneidade das condições de contorno na direção radial, a solução do problema foi decomposta em duas partes, sendo uma correspondente à solução em estado estacionário e outra à solução em regime transiente. Lin (2013) determinou a solução analítica do problema de condução de calor unidimensional no tecido da pele, considerando o modelo tradicional, a equação de Cattaneo-Vernotte e o modelo de duplo atraso. Para obter as soluções analíticas dos dois modelos que apresentam termos de atraso, o autor utilizou o método da separação de variáveis.

De acordo com Boyce e Diprima (2006), a transformada de Laplace de uma função $f(t)$ é definida pela Equação (2.62), na qual s corresponde a uma variável complexa representada pela Equação (2.63).

$$L[f(t)] = F(s) = \int_0^{\infty} f(t) \exp(-st) dt, \quad (2.62)$$

$$s = a_s + b_s i, \quad (2.63)$$

em que a_s é a parte real da variável e b_s é a parte imaginária da variável.

Ao aplicar o método da transformada de Laplace em uma equação diferencial parcial, obtém-se uma equação diferencial ordinária, que pode ser resolvida por diversos métodos analíticos. Assim, é obtida a função $F(s)$. Para determinar a função $f(t)$, realiza-se a inversão da função $F(s)$ (BOYCE; DIPRIMA, 2006). A transformada de Laplace é um operador linear, o que dificulta sua aplicação em problemas não lineares. Apesar disso, esse método tem uma grande vantagem em relação a outros métodos analíticos de resolução de equações diferenciais parciais. Essa vantagem reside no fato desse método facilitar muito a resolução de equações simultâneas (RICE; DO, 1995).

Ghazanfarian e Abbassi (2009) avaliaram a condução de calor em uma placa fina, descrita pelo modelo de duplo atraso. Os autores utilizaram o método da transformada de Laplace para obter a solução analítica do modelo. O problema foi resolvido considerando uma nova condição de contorno, que foi proposta pelos autores e permitiu a consideração de saltos na temperatura. Os autores verificaram que o uso dessa nova condição de contorno permitiu que a condução de calor em escalas micro e nano fosse adequadamente descrita pelo modelo de duplo atraso. Fomin, Chugunov e Hashida (2011) utilizaram uma equação diferencial que apresenta uma derivada de ordem fracionária em relação ao tempo para descrever a transferência de massa unidimensional em meios fraturados. Para a resolução da equação, os autores aplicaram o método da transformada de Laplace. As simulações do modelo foram

realizadas no software MATHEMATICA[®]. Os autores observaram que a equação diferencial de ordem fracionária mostrou-se bastante precisa para a descrição do processo.

Rasmussen e Civan (2015) utilizaram um modelo baseado na equação de Cattaneo para descrever a difusão anômala de gases em um meio heterogêneo. Para obter a solução desse modelo, os autores aplicaram o método da transformada de Laplace. Zhang e Shang (2015) estudaram a condução de calor bidimensional em um meio semi-infinito, considerando coordenadas cilíndricas. Para descrever o processo, os autores consideraram o modelo hiperbólico, cuja solução exata foi obtida através do método da transformada de Laplace. A transformada inversa foi determinada com o auxílio do software MAPLE[®].

Liang e Chen (2018) utilizaram um modelo composto por uma derivada parcial de ordem não inteira em relação ao tempo para avaliar a difusão anômala em colóides de vidro de alta densidade. O modelo foi resolvido analiticamente pelo método da transformada de Laplace. Singh, Kumar e Rai (2018) consideraram o modelo hiperbólico para descrever a transferência de calor unidimensional em uma aleta. Os autores resolveram o modelo através do método da transformada de Laplace e obtiveram a transformada inversa com o uso do software MATLAB[®]. Hobiny et al. (2020) estudaram a transferência de calor no tecido da pele através de um modelo composto por uma equação diferencial parcial que apresenta uma derivada de ordem fracionária em relação ao tempo e um termo de atraso no fluxo de calor. Para obter a solução analítica do modelo, os autores aplicaram o método da transformada de Laplace usando o software MATLAB[®] para a obtenção da transformada inversa. Li et al. (2020) utilizaram um modelo composto por uma derivada de ordem não inteira em relação ao tempo no estudo da difusão anômala de poluentes em meios fraturados. A solução exata do modelo foi obtida através da aplicação do método da transformada de Laplace.

Segundo Serov (2017), a transformada de Fourier também é um operador integral linear. A transformada de Fourier de uma função $f(x)$ é definida de acordo com a Equação (2.64).

$$F[f(x)] = F(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-ix\xi) dx. \quad (2.64)$$

Ao aplicar o método da transformada de Fourier em equações diferenciais ou integrais, são obtidas equações algébricas. Realizando-se a inversão da solução dessas equações, pode-se determinar a solução analítica das equações originais. Por se tratar de um operador linear, esse método também é dificilmente aplicado em problemas não lineares (DEBNATH; BHATTA, 2006).

Antaki (1998) obteve a solução analítica do problema da condução de calor unidimensional em uma placa semi-infinita. O autor utilizou o modelo de duplo atraso para descrever o processo. A solução analítica do problema foi determinada através da aplicação do método da transformada de Fourier. Jabbar e Nimr (2003) avaliaram a condução de calor unidimensional em uma placa fina, considerando oscilações harmônicas de temperatura como condições de contorno. Os autores utilizaram o modelo de duplo atraso para descrever o processo e o método da transformada de Fourier para obter a solução analítica do problema. Os autores verificaram que é fundamental considerar os termos de atraso no fluxo de calor e no gradiente de temperatura, principalmente, quando a frequência de oscilação na condição de contorno é alta. Khairy (2011) aplicou o modelo de duplo atraso para avaliar a condução de calor unidimensional em uma placa fina. O autor resolveu o modelo analiticamente através do método da transformada de Fourier. Para realizar as simulações do modelo com diferentes condições do problema, o autor utilizou o software MATHEMATICA[®].

Quiroz et al. (2019) consideraram um modelo composto por uma derivada de ordem fracionária em relação ao tempo e um termo de atraso na descrição da difusão anômala de massa em partículas de catalisadores. Para obter a solução exata do modelo, os autores utilizaram o método da transformada de Fourier. Zhang e Yi (2019) estudaram o comportamento anômalo da difusão de massa em um sistema no qual ocorria uma reação química reversível. Os autores utilizaram o modelo de caminhadas aleatórias com tempos contínuos para descrever esse processo. A solução analítica do modelo considerado foi obtida pelo método da transformada de Fourier. Feng et al. (2021) avaliaram o uso de um modelo composto por uma derivada de ordem não inteira em relação ao tempo para descrever a subdifusão em meios heterogêneos. A partir da aplicação do método da transformada de Fourier, os autores obtiveram a solução exata do modelo.

Alguns autores como, por exemplo, Loureiro, Wrobel e Mansur (2012), aplicam o método das funções de Green para obter a solução analítica de problemas de condução de calor. Com o conhecimento da função de Green, podem-se utilizar equações integrais para determinar essa solução, considerando qualquer tipo de condição inicial ou de contorno. Apesar disso, não há muitas funções analíticas de Green em problemas que envolvem geometrias muito complexas. Isso limita a aplicação desse método nesses problemas.

Supondo que se tem uma equação diferencial parcial não homogênea dada pela Equação (2.65), na qual $f(x)$ representa a solução da equação, $g(x)$ uma função não homogênea e D_d o operador diferencial parcial, dado pela Equação (2.66).

$$D_d f(x) = g(x), \quad (2.65)$$

$$D_d = \sum a_m(x) \frac{\partial^{|m|}}{\partial x_1^{m_1} \dots \partial x_n^{m_n}}, \quad (2.66)$$

em que x são as variáveis independentes, representadas por x_1, x_2, \dots, x_n ; m são as ordens das derivadas da equação, representadas por m_1, m_2, \dots, m_n ; $a_m(x)$ são funções diferenciáveis.

De acordo com Braga (2006), a solução da Equação (2.65) pode ser obtida com o uso de uma função de Green, representada por $G(x, x')$. Para isso, propõe-se que essa solução pode ser dada pela Equação (2.67).

$$f(x) = \int G(x, x') g(x') dx'. \quad (2.67)$$

A função de Green $G(x, x')$ corresponde à solução da Equação (2.68), na qual $\delta(x-x')$ representa a função delta de Dirac, dada pela Equação (2.69).

$$D_d G(x, x') = \delta(x - x'), \quad (2.68)$$

$$\delta(x - x') = \begin{cases} 0, & x \neq x' \\ \infty, & x = x'. \end{cases} \quad (2.69)$$

Tang e Araki (1999) analisaram a condução de calor unidimensional em placas finitas expostas a pulsos curtos de laser. Os autores consideraram o modelo de duplo atraso para descrever o processo e obtiveram a solução analítica do problema aplicando o método das funções de Green. Khairy (2012) resolveu quatro problemas, sendo três unidimensionais e um bidimensional, de condução de calor, nos quais utilizou o modelo de duplo atraso. O autor obteve a solução exata dos problemas através do método das funções de Green. As soluções obtidas foram comparadas com as soluções dos mesmos problemas já existentes na literatura, as quais foram determinadas através de outros métodos. O autor verificou que as soluções obtidas pelo método das funções de Green apresentaram uma boa precisão.

Sheikh, Monte e Beck (2013) utilizaram o modelo hiperbólico na descrição da condução de calor unidimensional em placas finas de materiais dielétricos, que foram submetidas a um aquecimento rápido. Para obter a solução exata do problema, os autores utilizaram o método das funções de Green. Tavares et al. (2020) estudaram o comportamento anômalo de processos de adsorção e dessorção. Os autores consideraram a equação de Cattaneo e um modelo que apresenta uma derivada de ordem não inteira em relação ao tempo para descrever esses processos. Em ambos os casos, as soluções analíticas dos modelos foram obtidas pelo método das funções de Green. Lenzi et al. (2022) consideraram um modelo no qual o coeficiente de difusão depende da variável espacial em um estudo sobre a difusão

anômala em regime transiente em um meio heterogêneo. Os autores aplicaram o método das funções de Green e obtiveram a solução exata do modelo.

2.3.2 Métodos Numéricos para a Resolução de Modelos Anômalos

Como descrito anteriormente, obter a solução analítica de um problema é sempre a melhor alternativa. Todavia, na grande maioria dos casos não é possível obter uma solução analítica, o que implica no uso de abordagens para a obtenção de soluções aproximadas (LI et al., 2020). Isso se observa, por exemplo, em problemas anômalos de condução de calor em aletas (LIU; LI; ZHANG, 2020). Os métodos aproximados também são necessários para a resolução de modelos nos quais se considera que o coeficiente de difusão depende da concentração. Isso se deve ao fato da estrutura das soluções analíticas desses modelos não ser muito simples (JOANNÈS; MAZÉ; BUNSELL, 2014). Problemas anômalos descritos por modelos nos quais se considera o coeficiente de difusão dependente do tempo e/ou da concentração ou a condutividade térmica dependente do tempo e/ou da temperatura apresentam maior dificuldade de obtenção da solução analítica, devido às não linearidades dos modelos (KUMAR; SINGH; RAJEEV, 2020). Muitas das soluções analíticas de problemas anômalos são obtidas para geometrias relativamente simples. Isso ocorre, porque, à medida que se aumenta a complexidade das geometrias envolvidas, a dificuldade de determinação das soluções exatas também se eleva (RIVERA et al., 2010).

Os principais métodos numéricos utilizados para resolver modelos que apresentam derivadas de ordem fracionária correspondem aos métodos das diferenças finitas, dos elementos finitos e dos elementos de contorno (CARRER et al., 2021). Esses também são os métodos numéricos mais aplicados em modelos de transferência de massa nos quais se considera o coeficiente de difusão dependente do tempo (GUO; CHEN; GAO, 2012). A solução aproximada de modelos de condução de calor que apresentam termos de atraso no fluxo de calor e/ou no gradiente de temperatura pode ser obtida por diversos métodos. Dentre estes, destaca-se o método dos volumes finitos (GHAZANFARIAN; SHOMALI; ABBASSI, 2015). Outro método numérico utilizado na resolução de problemas anômalos corresponde ao método da perturbação homotópica, que tem sido aplicado, por exemplo, para resolver modelos que descrevem fenômenos anômalos de condução de calor em tecidos (KUMAR; RAI, 2017).

A aplicação do método das diferenças finitas ocorre em três etapas. A primeira corresponde à discretização dos domínios das variáveis independentes, que consiste na divisão desses domínios em subdomínios. A segunda etapa do procedimento corresponde à

aproximação das derivadas parciais através de expressões de diferenças finitas. A aplicação do método encerra-se com a substituição dessas expressões na equação diferencial e nas condições de contorno. Com isso, obtém-se um sistema de equações algébricas. A partir da resolução desse sistema, a solução da equação diferencial é obtida (PINTO; LAGE, 2001).

No método das diferenças finitas, geralmente, as expressões que aproximam as derivadas da equação são obtidas através de expansões em séries de Taylor. De acordo com Pinto e Lage (2001), dada uma função $y(x)$, os valores desta nos pontos x_{j+1} e x_{j-1} , sendo x_j um ponto arbitrário, são dados pelas Equações (2.70) e (2.71). Para uma malha uniforme, tem-se a Equação (2.72).

$$y(x_{j+1}) = y_{j+1} = y_j + \frac{dy}{dx}(x_{j+1} - x_j) + \frac{d^2y}{dx^2} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{2!} + \frac{d^3y}{dx^3} \frac{(x_{j+1} - x_j)^3}{3!} + \dots, \quad (2.70)$$

$$y(x_{j-1}) = y_{j-1} = y_j - \frac{dy}{dx}(x_j - x_{j-1}) + \frac{d^2y}{dx^2} \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{2!} - \frac{d^3y}{dx^3} \frac{(x_j - x_{j-1})^3}{3!} + \dots, \quad (2.71)$$

$$x_{j+1} - x_j = x_j - x_{j-1} = h. \quad (2.72)$$

Subtraindo a Equação (2.71) da Equação (2.70) e desconsiderando os termos referentes às derivadas de ordem superior a dois, encontra-se uma expressão para a derivada de primeira ordem. Essa expressão é denominada aproximação por diferença central da derivada e é dada pela Equação (2.73), na qual o termo $O(h^2)$ representa o erro de truncamento.

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_j} = \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2h} + O(h^2) \quad (2.73)$$

A derivada de primeira ordem da função $y(x)$ em relação a x pode ser obtida de maneira direta pelas Equações (2.70) e (2.71), truncando a série no segundo termo. Assim, têm-se as Equações (2.74) e (2.75), que representam a aproximação por diferença para frente e a aproximação por diferença para trás da derivada, respectivamente. Nessas equações, o termo $O(h)$ corresponde ao erro de truncamento.

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_j} = \frac{y_{j+1} - y_j}{h} + O(h), \quad (2.74)$$

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_j} = \frac{y_j - y_{j-1}}{h} + O(h). \quad (2.75)$$

Somando as Equações (2.70) e (2.71) e desconsiderando os termos referentes às derivadas de ordem superior a dois, obtém-se uma expressão para aproximar a derivada de

segunda ordem. Essa expressão é dada pela Equação (2.76) e denominada aproximação por diferenças centrais dessa derivada.

$$\left. \frac{d^2 y}{dx^2} \right|_{x_j} = \frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} + O(h^2) \quad (2.76)$$

As expressões apresentadas anteriormente são válidas para aproximar as derivadas de primeira e segunda ordem presentes em uma equação diferencial ordinária. No caso de equações diferenciais parciais, podem ser obtidas expressões semelhantes, a partir da realização de um procedimento análogo de discretização dos domínios das variáveis.

Considerando uma função $u(x,y,t)$ e um ponto arbitrário da malha de discretização, representado pela Equação (2.77), uma expressão para aproximar a derivada parcial de primeira ordem da função em relação a x é dada pela Equação (2.78).

$$u_{i,j}^n = u(x_i, y_j, t_n) \quad (2.77)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j}^n = \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n}{h} + O(h). \quad (2.78)$$

Uma das principais vantagens do método das diferenças finitas em relação a outras abordagens numéricas para a resolução de equações diferenciais parciais corresponde a sua formulação simples, o que facilita sua aplicação em problemas multidimensionais. Apesar disso, a utilização desse método em problemas que apresentam geometrias irregulares ou que envolvem condições de contorno complexas não é muito simples (ÖZİŞİK et al., 2017).

As expressões utilizadas em métodos numéricos de resolução de equações diferenciais que envolvem o tempo podem ser classificadas em: explícitas e implícitas. Nas expressões explícitas, os valores das variáveis dependentes são obtidos de maneira direta, a partir dos valores dessas variáveis no passo de tempo anterior, os quais são conhecidos. Nas expressões implícitas, os valores das variáveis dependentes são determinados em função do passo de tempo atual. Nesse caso, para se obter os valores das variáveis dependentes é necessária a resolução de um sistema de equações. Geralmente, os métodos que utilizam expressões implícitas apresentam um custo computacional maior do que os que aplicam expressões explícitas. Isso pode ser explicado pela necessidade de, em muitos casos, serem utilizados métodos iterativos para a resolução do sistema de equações. Por outro lado, os métodos nos quais se aplicam expressões explícitas também apresentam algumas limitações, principalmente relacionadas ao passo no tempo utilizado. Normalmente, é necessário utilizar passos muito pequenos no tempo, para que critérios de estabilidade sejam atendidos. Com isso, são necessários muitos passos no tempo para se obter a solução do problema. Além

disso, o valor crítico do passo no tempo é muito difícil de ser estimado, principalmente em problemas não lineares (SOARES, 2020).

Bevilacqua, Galeão e Costa (2011b) avaliaram a transferência de massa com retenção de partículas através de modelos compostos por derivadas de ordem superior a dois da concentração em relação à variável espacial. As soluções numéricas dos modelos foram obtidas através da aplicação do método das diferenças finitas. Petcherdchoo (2013) consideraram um coeficiente de difusão dependente do tempo para descrever a difusão de cloreto em concreto. A partir da utilização do método das diferenças finitas, os autores obtiveram a solução numérica do modelo considerado. Joannès, Mazé e Bunsell (2014) estudaram a absorção anômala de água em uma matriz polimérica, utilizando um modelo no qual se considera um coeficiente de difusão dependente da concentração. Para obter a solução do modelo, os autores aplicaram o método das diferenças finitas.

Damor, Kumar e Shukla (2015) utilizaram uma equação diferencial de ordem fracionária em relação ao tempo para descrever a transferência de calor no tecido da pele. Para obter a solução aproximada do modelo, os autores empregaram o método das diferenças finitas. Ferrás et al. (2015) avaliaram o uso de um modelo composto por uma derivada parcial de ordem fracionária em relação ao tempo para descrever a condução de calor em tecidos. Com a aplicação do método das diferenças finitas, os autores obtiveram a solução do modelo proposto. Os autores verificaram que a solução obtida mostrou-se estável e convergente. Wei, Chen e Hon (2016) estudaram a difusão unidimensional de partículas em meios porosos através de um modelo composto por derivadas de ordem fracionária em relação ao tempo e dois modelos que consideravam um coeficiente de difusão dependente da concentração. A resolução numérica dos modelos estudados foi realizada através do método das diferenças finitas.

Zhang, Chen e Li (2017) utilizaram o modelo hiperbólico para descrever a condução de calor tridimensional no tecido da pele. A solução aproximada do modelo foi obtida com a aplicação do método das diferenças finitas. Os autores utilizaram expressões explícitas de diferenças centrais para aproximar as derivadas parciais de segunda ordem em relação ao tempo e às variáveis espaciais. Para realizar as simulações do modelo, os autores utilizaram o software ANSYS[®]. Akula e Maniyeri (2020) avaliaram o uso do modelo baseado na Lei de Fourier e do modelo hiperbólico na descrição da condução de calor bidimensional em tecidos. Os autores observaram que, para tempos de relaxação pequenos, os resultados obtidos pelos dois modelos foram muito semelhantes, ao contrário do que foi observado para tempos de relaxação maiores. Para resolver o modelo hiperbólico, os autores utilizaram o método das

diferenças finitas. As derivadas parciais em relação ao tempo e às variáveis espaciais foram aproximadas por expressões de diferenças centrais e implícitas.

Assim como no método das diferenças finitas, a primeira etapa de aplicação do método dos volumes finitos consiste na discretização do domínio de cálculo, que, nesse caso, é dividido em volumes de controle, também denominados células. Esses volumes de controle são delimitados por superfícies denominadas faces. Os vértices dos volumes de controle também são chamados nós. Com a discretização da equação diferencial, são obtidas equações algébricas. A partir destas, determina-se o valor médio da variável dependente da equação diferencial em cada volume de controle. Esse valor médio é definido de acordo com a Equação (2.79) e corresponde ao valor da variável dependente no centro do volume de controle. Nessa equação, ϕ_0 representa o valor médio da variável dependente no volume de controle e V_0 corresponde ao volume do volume de controle (MAZUMDER, 2016).

$$\phi_0 = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \phi dV. \quad (2.79)$$

Considerando a equação diferencial ordinária dada pela Equação (2.80), e realizando a integração desta entre a face esquerda, representada por w , e a face direita, representada por e , de um volume de controle genérico, são obtidas as Equações (2.81) e (2.82). Nessas equações, S_i corresponde ao valor médio de S_ϕ no volume de controle i e Δx_i representa o tamanho desse volume de controle.

$$\frac{d}{dx} \left[\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right] = -S_\phi, \quad (2.80)$$

$$\int_w^e \frac{d}{dx} \left[\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right] dx = - \int_w^e S_\phi dx, \quad (2.81)$$

$$\left[\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right]_{e,i} - \left[\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right]_{w,i} = -S_i \Delta x_i. \quad (2.82)$$

A etapa seguinte do método dos volumes finitos corresponde à aproximação das derivadas da variável dependente nas duas faces em que se realiza a integração. Geralmente, essas aproximações são obtidas a partir de expansões em séries de Taylor, que, para a face direita, são dadas pelas Equações (2.83) e (2.84).

$$\phi_{i+1} = \phi_e + \frac{\Delta x}{2} \frac{d\phi}{dx} \Big|_e + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_e + \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^3 \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_e + \dots, \quad (2.83)$$

$$\phi_i = \phi_e - \frac{\Delta x}{2} \frac{d\phi}{dx} \Big|_e + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_e - \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^3 \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_e + \dots \quad (2.84)$$

Subtraindo a Equação (2.84) da Equação (2.83), obtém-se uma expressão para aproximar a derivada de primeira ordem da variável dependente em relação a x . Essa expressão é dada pela Equação (2.85).

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} - \frac{(\Delta x)^3}{24} \left. \frac{d^3\phi}{dx^3} \right|_e + \dots \quad (2.85)$$

Desprezando os termos referentes às derivadas de ordem maior ou igual a três da Equação (2.85) e substituindo essa equação e uma expressão análoga para a face esquerda do volume de controle na Equação (2.82), obtém-se a Equação (2.86).

$$\Gamma_{e,i} \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} - \Gamma_{w,i} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} = -S_i \Delta x. \quad (2.86)$$

Os valores de Γ nas faces do volume de controle podem ser determinados por interpolação. Esses valores podem ser obtidos através das Equações (2.87) e (2.88). Substituindo essas equações na Equação (2.86), obtém-se a Equação (2.89).

$$\Gamma_{e,i} = \frac{\Gamma_{i+1} + \Gamma_i}{2}, \quad (2.87)$$

$$\Gamma_{w,i} = \frac{\Gamma_i + \Gamma_{i-1}}{2}, \quad (2.88)$$

$$\left(\frac{\Gamma_{i+1} + \Gamma_i}{2\Delta x} + \frac{\Gamma_i + \Gamma_{i-1}}{2\Delta x} \right) \phi_i - \frac{\Gamma_{i+1} + \Gamma_i}{2\Delta x} \phi_{i+1} - \frac{\Gamma_i + \Gamma_{i-1}}{2\Delta x} \phi_{i-1} = S_i \Delta x. \quad (2.89)$$

Como, geralmente, tanto no método das diferenças finitas quanto no método dos volumes finitos, as expressões utilizadas para aproximar as derivadas presentes nas equações diferenciais são determinadas a partir de expansões em séries de Taylor, os erros nas soluções obtidas pelos dois métodos apresentam a mesma ordem de grandeza. Uma das principais vantagens do método dos volumes finitos corresponde ao fato da equação diferencial ser satisfeita em todo o domínio de cálculo, independentemente do tipo de condição de contorno do problema ou das características da malha utilizada. Além disso, por ser um método integral, o método dos volumes finitos apresenta uma maior facilidade de aplicação do que o método das diferenças finitas em problemas nos quais se observam descontinuidades nas propriedades dos materiais. Ao se aplicar o método dos volumes finitos, a conservação global da propriedade física descrita pela equação diferencial é garantida, ao contrário do que ocorre quando se utiliza o método das diferenças finitas (MAZUMDER, 2016).

Han (2016) aplicou o método dos volumes finitos na resolução do modelo hiperbólico da condução de calor bidimensional em meios heterogêneos. O autor considerou que a condutividade térmica do meio dependia da temperatura. Para verificar a precisão do método

utilizado, o autor aplicou o mesmo em um problema semelhante, no qual considerou um meio homogêneo e a condutividade térmica constante. O autor verificou que os resultados obtidos foram próximos às soluções analíticas desse problema e observou que a velocidade de propagação do sinal térmico foi influenciada de maneira significativa pela consideração de que a condutividade térmica do meio dependia da temperatura. Challansonnex, Casalinho e Perré (2019) estudaram a transferência anômala de massa em materiais de origem biológica. Os autores utilizaram um modelo que apresenta funções de memória, que foram determinadas experimentalmente. Esse modelo foi resolvido pelo método dos volumes finitos.

Goudarzi e Azimi (2019) avaliaram o uso de um modelo alternativo para a condução de calor unidimensional no tecido da pele. O modelo apresentava uma modificação do modelo hiperbólico de condução de calor, através da introdução de uma derivada parcial de ordem fracionária em relação ao tempo. Para resolver o modelo, os autores utilizaram o método dos volumes finitos. Eltejaei, Balavand e Mojra (2021) estudaram a condução de calor bidimensional no tecido do pulmão, considerando o modelo de Fourier, o modelo hiperbólico e o modelo de duplo atraso. Para obter a solução dos modelos, os autores aplicaram o método dos volumes finitos. Os autores realizaram experimentos nos quais foram aplicados fluxos de calor no tecido e a temperatura foi medida. Os parâmetros do modelo hiperbólico e do modelo de duplo atraso foram obtidos ajustando-se os dados experimentais aos respectivos modelos. Os autores realizaram a comparação entre os resultados obtidos e as soluções analíticas de problemas semelhantes ao estudado, com condições mais simples. Com base nisso, os autores verificaram que os resultados obtidos pela aplicação do método dos volumes finitos foram precisos. Fang, Zhang e Sun (2022) utilizaram um modelo composto por uma derivada de ordem não inteira em relação à variável espacial para estudar a superdifusão de massa em um meio heterogêneo. Para resolver o modelo considerado, os autores aplicaram o método dos volumes finitos.

Assim como nos métodos anteriores, a primeira etapa do método dos elementos finitos consiste na discretização do domínio de cálculo em subdomínios, que, nesse caso, são denominados elementos. Posteriormente, realiza-se a seleção das funções de interpolação, utilizadas para descrever como a variável dependente varia nos elementos. A terceira etapa do método corresponde à determinação das equações matriciais, a partir das quais as propriedades de cada elemento são representadas (LEWIS; NITHIARASU; SEETHARAMU, 2004). No caso da equação da condução de calor unidimensional descrita pela Lei de Fourier, representada pela Equação (2.90), a equação matricial para um elemento genérico é dada pela Equação (2.91).

$$q = -kA_t \frac{d\theta}{dx}, \quad (2.90)$$

$$\frac{kA_t}{L_e} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \theta_i \\ \theta_j \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} q_i \\ q_j \end{Bmatrix}, \quad (2.91)$$

em que k é a condutividade térmica, L_e é o comprimento do elemento, i e j são os nós que formam o elemento, θ_i e θ_j são os valores de temperatura nos nós, q_i e q_j são as taxas de transferência de calor por condução e A_t é a área da seção transversal.

A etapa seguinte consiste em combinar as equações matriciais de cada elemento, de forma a determinar a equação matricial global para o domínio completo do problema. Posteriormente, aplicam-se as condições de contorno do problema e o sistema de equações algébricas representado pela equação matricial global é resolvido. Dessa forma, obtém-se a solução aproximada do problema (LEWIS; NITHIARASU; SEETHARAMU, 2004).

Com o uso do método dos elementos finitos, problemas que envolvem geometrias muito complexas e múltiplas dimensões podem ser resolvidos com facilidade. Essa corresponde à principal vantagem desse método. Há duas maneiras de aumentar a precisão da solução obtida pelo método dos elementos finitos: a diminuição do tamanho dos elementos e o aumento do grau da função de interpolação utilizada. Essas duas estratégias podem ser combinadas, o que permite que sejam utilizadas funções de interpolação de graus diferentes para cada elemento. Isso garante uma maior flexibilidade ao método dos elementos finitos, em comparação com os métodos das diferenças finitas e dos volumes finitos. Apesar disso, o método dos elementos finitos apresenta algumas desvantagens. Dentre estas, destaca-se o fato desse método não ser capaz de garantir a conservação local e global da propriedade descrita pela equação diferencial, ao contrário do que ocorre quando se utiliza, por exemplo, o método dos volumes finitos (MAZUMDER, 2016).

Rivera et al. (2010) avaliaram o uso do modelo hiperbólico na descrição da transferência de calor em tecidos. Para obter a solução do modelo, os autores utilizaram o método dos elementos finitos e o software COMSOL Multiphysics®. Comparando a solução obtida com a solução analítica, os autores observaram uma diferença relativa menor que 5%, o que demonstrou uma boa precisão da solução obtida numericamente. Bevilacqua et al. (2013) estudaram a difusão anômala de massa com retenção de partículas através de um modelo composto por derivadas de ordem superior a dois da concentração em relação às variáveis espaciais. Para resolver o modelo, os autores aplicaram o método dos elementos finitos.

Wilmers e Bargmann (2014) estudaram a difusão tridimensional em polímeros amorfos, considerando o modelo tradicional e o modelo de duplo atraso. No modelo de duplo atraso, os autores consideraram uma dependência exponencial entre o coeficiente de difusão e a concentração. A resolução dos modelos foi realizada através da combinação de dois métodos. As derivadas parciais em relação às variáveis espaciais e em relação ao tempo foram discretizadas pelos métodos dos elementos finitos e das diferenças finitas, respectivamente. Comparando os resultados obtidos com dados experimentais presentes na literatura, os autores observaram que o modelo de duplo atraso em que se considerou a dependência do coeficiente de difusão com a concentração descreveu de maneira precisa a difusão anômala nos polímeros estudados.

Kumar e Rai (2016) avaliaram o uso do modelo de duplo atraso na descrição da transferência de calor em tecidos que apresentam mais de uma camada. Para a resolução do modelo, os autores utilizaram o método dos elementos finitos e o software MATLAB[®]. Os autores compararam a solução obtida com a solução analítica para um caso particular e observaram uma boa precisão da solução obtida pelo método numérico. Paul e Paul (2018) estudaram a transferência de calor em tecidos através do modelo de duplo atraso. Os autores aplicaram o método dos elementos finitos para obter a solução do modelo. O software utilizado para auxiliar a resolução do modelo foi o COMSOL Multiphysics[®]. Com o uso do modelo de duplo atraso, os autores foram capazes de observar o efeito de onda térmica causado pelos termos de atraso no fluxo de calor e no gradiente de temperatura. Os autores também verificaram que, nas condições de equilíbrio, o perfil de temperatura obtido pela aplicação do modelo de duplo atraso aproximou-se do obtido pelo uso do modelo tradicional.

Rieth, Kovács e Fülöp (2018) resolveram o modelo de duplo atraso da transferência de calor através dos métodos das diferenças finitas e dos elementos finitos. Para a resolução da equação pelo método dos elementos finitos, os autores utilizaram o software COMSOL Multiphysics[®]. Os autores verificaram que a solução obtida pelo método das diferenças finitas apresentou uma boa precisão em relação à solução analítica e convergiu rapidamente. No caso da solução obtida pelo método dos elementos finitos, esta não se mostrou muito precisa.

O método dos elementos de contorno é utilizado para resolver equações integrais de contorno, que são obtidas como uma alternativa para a resolução de equações diferenciais. A transformação de uma equação diferencial em uma equação integral no contorno do domínio do problema é realizada através da aplicação do teorema de Green. Com a solução obtida no contorno do problema, pode-se determinar a solução nos pontos internos do domínio do problema (MOHAN, 2002).

Considerando o problema de valor de contorno dado pela Equação (2.92) e pelas condições de contorno nas fronteiras S_1 e S_2 , representadas, respectivamente, pelas Equações (2.93) e (2.94).

$$\nabla^2 u = 0, \quad (2.92)$$

$$u = f_1, \quad (2.93)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = f_2. \quad (2.94)$$

De acordo com o teorema de Green, tem-se a Equação (2.95), na qual v representa uma função que é solução da Equação (2.96).

$$\int_V (u \nabla^2 v - v \nabla^2 u) dV = \int_S \left(u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \right) dS, \quad (2.95)$$

$$\nabla^2 v = 0. \quad (2.96)$$

Considerando um problema bidimensional, a função v pode ser escrita de acordo com a Equação (2.97), em que x_0 e y_0 representam as coordenadas de um ponto P do domínio do problema.

$$v = \ln \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}. \quad (2.97)$$

Como a função u também é uma solução da Equação (2.96), pode-se escrever a Equação (2.98).

$$\int_S \left(u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \right) dS = 0. \quad (2.98)$$

A função v apresenta uma singularidade no ponto (x_0, y_0) . Assim, pode-se avaliar a integral anterior, considerando um círculo de raio r_0 ao redor desse ponto. Dessa forma, tem-se a Equação (2.99). À medida que r_0 aproxima-se de zero, são obtidas as Equações (2.100) e (2.101).

$$\int_S \left(u \frac{\partial \ln r}{\partial n} - \ln r \frac{\partial u}{\partial n} \right) dS + \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \left(u \frac{\partial \ln r_0}{\partial n} - \ln r_0 \frac{\partial u}{\partial n} \right) r_0 d\theta = 0, \quad (2.99)$$

$$\lim_{r_0 \rightarrow 0} (r_0 \ln r_0) = 0, \quad (2.100)$$

$$\lim_{r_0 \rightarrow 0} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} u \frac{\partial \ln r_0}{\partial n} r_0 d\theta = -u(P)2\pi. \quad (2.101)$$

Assim, tem-se a Equação (2.102) para um ponto interno do domínio do problema. Considerando-se que o ponto P encontra-se em uma das fronteiras do domínio, é obtida a Equação (2.103).

$$u(P) = \frac{1}{2\pi} \int_S \left(u \frac{\partial \ln r}{\partial n} - \ln r \frac{\partial u}{\partial n} \right) dS, \quad (2.102)$$

$$u(P) = \frac{1}{\pi} \int_S \left(u \frac{\partial \ln r}{\partial n} - \ln r \frac{\partial u}{\partial n} \right) dS. \quad (2.103)$$

Substituindo as condições de contorno, obtém-se a equação integral de contorno do problema, dada pela Equação (2.104).

$$\pi u(P) = \int_{S_1} \left(f_1 \frac{\partial \ln r}{\partial n} - \ln r \frac{\partial u}{\partial n} \right) dS + \int_{S_2} \left(u \frac{\partial \ln r}{\partial n} - f_2 \ln r \right) dS. \quad (2.104)$$

Para a resolução da Equação (2.104), considera-se que a função u e sua derivada em relação às variáveis espaciais podem ser aproximadas por funções testes, que são conhecidas nos pontos internos do domínio. Ao substituir essas aproximações na equação integral de contorno, são obtidos os valores da função u e de suas derivadas no contorno. A partir desses valores, podem ser determinados os valores da função u e de suas derivadas nos pontos internos do domínio (FINLAYSON; BIEGLER; GROSSMANN, 2006).

Uma das principais vantagens do método dos elementos de contorno corresponde ao fato da discretização ser realizada apenas nas fronteiras do problema e não em todo o domínio, o que facilita a resolução numérica do problema. Em problemas que envolvem domínios infinitos, esse método é aplicado com mais facilidade do que outros métodos numéricos, como, por exemplo, o método dos elementos finitos. Com a aplicação do método dos elementos de contorno, as derivadas das variáveis dependentes envolvidas no problema são descritas com uma boa precisão. Outra vantagem do método dos elementos de contorno consiste na possibilidade de se avaliar a solução obtida e as derivadas dessa solução em todos os pontos do domínio em qualquer instante de tempo. Apesar disso, o método dos elementos de contorno apresenta algumas desvantagens. Dentre estas, destaca-se o fato de ser necessário conhecer a solução fundamental do problema para a aplicação do método. Com isso, a resolução de problemas não lineares e não homogêneos através do método dos elementos de contorno apresenta uma grande dificuldade. Além disso, quando se utiliza esse método são gerados sistemas de equações que, quando escritas na forma matricial, apresentam matrizes totalmente preenchidas e não simétricas, ao contrário do que ocorre, por exemplo, com a aplicação do método dos elementos finitos. Apesar disso, geralmente, essas matrizes apresentam dimensões menores quando se aplica o método dos elementos de contorno (KATSIKADELIS, 2016).

Guo, Chen e Gao (2012) utilizaram um método de elementos de contorno para

resolver um modelo de difusão de cloretos em estruturas de concreto, considerando um coeficiente de difusão dependente do tempo. A obtenção da equação correspondente ao método foi realizada com o uso de funções de Green como funções peso. A precisão do método utilizado foi verificada com a aplicação deste em três problemas de difusão de cloretos em placas de concreto, considerando diferentes tipos de dependência do coeficiente de difusão com o tempo. Os autores validaram o modelo utilizado com base em dados experimentais de concentração de cloretos em estruturas marinhas de concreto. Yao, Yao e Yu (2015) estudaram a transferência de calor bidimensional em regime transiente em um meio isotrópico. Os autores consideraram a equação de Cattaneo-Vernotte para descrever o processo. A solução do modelo foi obtida pelo método dos elementos de contorno.

Carrer et al. (2021) resolveram um modelo de difusão bidimensional composto por uma derivada parcial de ordem fracionária em relação ao tempo, utilizando um método de elementos de contorno. Para obter a equação correspondente ao método aplicado, os autores utilizaram como função peso a solução analítica do modelo tradicional da difusão em regime permanente. Os autores verificaram que o método utilizado produziu resultados precisos, inclusive para valores muito pequenos da ordem da derivada fracionária. Essa corresponde à principal vantagem do método, já que, segundo os autores, muitos métodos numéricos de resolução de modelos fracionários não apresentam resultados precisos quando se consideram valores muito baixos da ordem da derivada fracionária. Fahmy (2021) estudaram a transferência de calor em meios biológicos, considerando um modelo que apresenta termos de atraso no fluxo de calor e no gradiente de temperatura. Além desses termos, o modelo considerado pelos autores é composto por derivadas de ordem não inteira em relação à variável espacial e ao tempo. Para resolver o modelo, os autores aplicaram o método dos elementos de contorno.

Muitos métodos de perturbação podem ser utilizados para resolver problemas não lineares. Geralmente, esses métodos consideram a presença de um parâmetro muito pequeno na equação, o que restringe muito a aplicação desses métodos, já que a maior parte dos problemas não lineares não apresenta parâmetros tão pequenos. Além disso, para se determinar esses parâmetros devem ser utilizadas técnicas muito específicas. Se a determinação desses parâmetros não for muito precisa, os resultados obtidos para a solução dos problemas se tornam muito ruins. Dentre os métodos de perturbação, destaca-se o método da perturbação homotópica. Ao contrário dos métodos tradicionais de perturbação, a aplicação desse método não se baseia na existência de parâmetros pequenos nas equações, o que corresponde à principal vantagem do método (HE, 1999). Além disso, geralmente, é

necessário utilizar poucos termos para que a solução obtida tenha uma boa precisão (YILDIRIM; KOÇAK, 2009).

Considerando a equação diferencial não linear dada pela Equação (2.105) e as condições de contorno dadas pela Equação (2.106).

$$A_d(u) - f(r) = 0, r \in \Omega, \quad (2.105)$$

$$B_f\left(u, \frac{\partial u}{\partial n}\right) = 0, r \in \Gamma, \quad (2.106)$$

em que A_d é um operador diferencial, $f(r)$ é uma função analítica conhecida, B_f é um operador de fronteira, Ω é o domínio do problema e Γ é a fronteira do domínio do problema.

Considerando que o operador diferencial da Equação (2.105) apresenta uma parte linear, representada por L_d , e uma parte não linear, representada por N_d , tem-se a Equação (2.107).

$$L_d(u) + N_d(u) - f(r) = 0. \quad (2.107)$$

Usando a técnica da homotopia, pode-se definir uma função $v(r, p_p)$ que é solução da Equação (2.108). Nessa equação, p_p representa um parâmetro de inserção e u_0 a solução aproximada inicial da Equação (2.105). Considerando p_p equivalente a 0 e 1, têm-se as Equações (2.109) e (2.110), respectivamente.

$$H(v, p_p) = (1 - p_p)[L_d(v) - L_d(u_0)] + p_p[A_d(v) - f(r)] = 0, p_p \in [0, 1], \quad (2.108)$$

$$H(v, 0) = L_d(v) - L_d(u_0), \quad (2.109)$$

$$H(v, 1) = A_d(v) - f(r). \quad (2.110)$$

Quando o valor do parâmetro de inserção varia entre 0 e 1, a função $v(r, p_p)$ varia entre $u_0(r)$ e $u(r)$. De acordo com o método da perturbação homotópica, inicialmente se considera que o parâmetro p_p é pequeno, de forma que se pode escrever a solução da Equação (2.108) como uma série de potências em p_p , representada pela Equação (2.111). Aplicando o limite quando p_p tende a 1 nessa equação, pode-se obter a solução da Equação (2.105). Essa solução é expressa pela Equação (2.112) (HE, 1999).

$$v = v_0 + p_p v_1 + p_p^2 v_2 + \dots, \quad (2.111)$$

$$u = \lim_{p \rightarrow 1} v = v_0 + v_1 + v_2 + \dots \quad (2.112)$$

Li, Xu e Jiang (2009) descreveram a difusão em uma matriz polimérica através de um modelo em que a derivada parcial em relação ao tempo apresenta uma ordem fracionária. Os autores consideraram uma condição de contorno móvel e determinaram a solução aproximada

do modelo aplicando o método da perturbação homotópica. Os autores verificaram que os resultados obtidos foram muito próximos de resultados disponíveis na literatura, os quais foram determinados através da aplicação de outros métodos numéricos de resolução. Singh, Gupta e Rai (2011) utilizaram um modelo composto por uma derivada parcial de ordem fracionária em relação ao tempo e uma derivada parcial de ordem fracionária em relação à variável espacial para descrever a condução de calor em tecidos. As ordens das derivadas parciais em relação a cada variável eram diferentes entre si. Com a aplicação do método das diferenças finitas, os autores transformaram o modelo em um problema de valor inicial, que foi resolvido pelo método da perturbação homotópica.

2.4 Aproximação de Integrais e Derivadas Fracionárias

Odibat (2006) propôs uma expressão para aproximar integrais fracionárias cujas ordens são superiores a zero. Essa expressão consiste em uma modificação da regra dos trapézios de integração numérica. O autor dividiu um intervalo $[0, a]$ em k subintervalos $[x_j, x_{j+1}]$. Considerando que todos os subintervalos apresentavam o mesmo tamanho, dado por h , sendo $h=a/k$, e usando nós de integração representados por $x_j=jh$, com j variando entre 0 e k , o autor obteve a Equação (2.113).

$$\begin{aligned}
 {}_a J_x^\alpha f(x) = & \left[(k-1)^{\alpha+1} - (k-\alpha-1)k^\alpha \right] \frac{h^\alpha f(0)}{\Gamma(\alpha+2)} + \frac{h^\alpha f(a)}{\Gamma(\alpha+2)} + \\
 & + \sum_{j=1}^{k-1} \left[(k-j+1)^{\alpha+1} - 2(k-j)^{\alpha+1} + (k-j-1)^{\alpha+1} \right] \frac{h^\alpha f(x_j)}{\Gamma(\alpha+2)}. \quad (2.113)
 \end{aligned}$$

Odibat (2006) também propôs uma expressão para aproximar derivadas fracionárias de Caputo que apresentam ordens superiores a zero. Para obter essa expressão, o autor utilizou a regra dos trapézios modificada e considerou que essa derivada de ordem fracionária de uma função pode ser dada por uma soma ponderada da função e dos valores das derivadas de ordem inteira da mesma em pontos específicos. O autor realizou as mesmas considerações descritas para o caso anterior, em relação ao número de subintervalos, ao tamanho destes e à representação dos pontos. Assim, o autor obteve a Equação (2.114).

$${}_c D_t^\alpha f(t) = \frac{h^{n-\alpha}}{\Gamma(m+2-\alpha)} \left\{ \left[(k-1)^{n-\alpha+1} - (k-n+\alpha-1)k^{n-\alpha} \right] f^{(n)}(0) + f^{(n)}(a) + \sum_{j=1}^{k-1} \left[(k-j+1)^{n-\alpha+1} - 2(k-j)^{n-\alpha+1} + (k-j-1)^{n-\alpha+1} \right] f^{(n)}(x_j) \right\}. \quad (2.114)$$

Murio (2008) desenvolveu um método implícito de diferenças finitas para obter a solução da equação diferencial de ordem fracionária dada pela Equação (2.115). As condições inicial e de contorno dessa equação são dadas pelas Equações (2.116), (2.117) e (2.118). O

autor considerou que a variável espacial e a ordem da derivada fracionária encontravam-se no intervalo entre 0 e 1. Além disso, foi considerada a definição de Caputo para a derivada de ordem fracionária.

$$\frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (2.115)$$

$$u(x,0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (2.116)$$

$$u(0,t) = 0, \quad t > 0, \quad (2.117)$$

$$u(1,t) = 0, \quad t > 0. \quad (2.118)$$

O autor considerou que o domínio da variável espacial, dado por $[0,1]$, e o domínio do tempo, dado por $[0,T]$, poderiam ser divididos em pontos representados pelas Equações (2.119) e (2.120).

$$x_i = ih, \quad i = 0,1,2,\dots,X, \quad (2.119)$$

$$t_n = nk, \quad n = 0,1,2,\dots,M, \quad (2.120)$$

em que X e M são valores inteiros positivos, h é o tamanho da malha em relação à variável espacial e equivale a $1/X$, e k é o tamanho da malha em relação ao tempo e equivale a T/M .

Assim, os valores das funções u e f nos pontos da malha foram representados pelas Equações (2.121) e (2.122).

$$u_i^n = u(x_i, t_n), \quad (2.121)$$

$$f_i = f(x_i). \quad (2.122)$$

Para aproximar a derivada de ordem fracionária, o autor utilizou uma fórmula de quadratura simples. Dessa forma, foi obtida a Equação (2.123).

$$\frac{\partial^\alpha u(x_i, t_n)}{\partial t^\alpha} = {}_c D_t^{(\alpha)} u_i^n = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{1}{1-\alpha} \frac{1}{k^\alpha} \sum_{j=0}^n j^{1-\alpha} - (j-1)^{1-\alpha} (u_i^{n-j+1} - u_i^{n-j}). \quad (2.123)$$

Cai e Li (2020) apresentaram as principais estratégias presentes na literatura para avaliar integrais e derivadas de ordem fracionária. De acordo com os autores, os métodos de aproximação dessas derivadas e integrais podem ser divididos em: métodos baseados na interpolação polinomial, métodos baseados em quadraturas de convolução e métodos baseados na aproximação difusiva. Os métodos L1, L2 e L2C correspondem a alguns exemplos de métodos baseados na interpolação polinomial. Geralmente, a precisão destes depende da ordem da integral ou da derivada fracionária. Os métodos baseados em quadraturas de convolução apresentam uma precisão de ordem inteira. Os métodos baseados

na aproximação difusiva apresentam um custo computacional menor do que os outros dois tipos de métodos. Esses métodos são obtidos a partir da consideração de que as integrais fracionárias podem ser reformuladas como integrais infinitas de soluções de equações diferenciais de ordem inteira. Na descrição dos métodos apresentados, os autores consideraram uma função $f(x)$ em um intervalo $[a,b]$ dividido em N subintervalos $[x_j, x_{j+1}]$. Também se considerou que todos os subintervalos apresentavam o mesmo tamanho, dado por $h=(b-a)/N$, e que os pontos poderiam ser representados por $x_j=a+jh$, com j variando entre 0 e N .

Segundo os autores, a integral de ordem fracionária da função $f(x)$ no ponto x_j pode ser dada pela Equação (2.124).

$$\left[D_{a,x}^{-\alpha} f(x) \right]_{x=x_j} = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{\alpha-1} f(t) dt. \quad (2.124)$$

A ideia geral dos métodos baseados na interpolação polinomial consiste em aproximar a função $f(x)$ por uma função de interpolação, representada por $\tilde{f}(x)$, em cada subintervalo. Assim, obtém-se a Equação (2.125) para a determinação da integral de ordem fracionária α da função $f(x)$ no ponto x_j . Nessa equação, ω_k representa os valores dos respectivos coeficientes da função de interpolação. Essa equação corresponde à forma geral das expressões utilizadas para aproximar integrais fracionárias pelos métodos baseados na interpolação polinomial.

$$\left[D_{a,x}^{-\alpha} f(x) \right]_{x=x_j} = \sum_{k=0}^j \omega_k f(x_k), \quad 1 \leq j \leq N. \quad (2.125)$$

A regra dos trapézios modificada, proposta por Odibat (2006), pode ser obtida ao se considerar uma função de interpolação linear dada pela Equação (2.126).

$$\tilde{f}(x) = \frac{x_{k+1} - x}{x_{k+1} - x_k} f(x_k) + \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k} f(x_{k+1}), \quad x \in [x_k, x_{k+1}] \quad (2.126)$$

Também se pode obter uma regra de Simpson modificada para aproximar as integrais de ordem fracionária. Essa expressão é obtida ao se considerar a função de interpolação dada pela Equação (2.127) e o ponto $x_{k+1/2}$, representado pela Equação (2.128). Na Equação (2.127), $l_{k,i}(x)$ representam os polinômios de Lagrange definidos nos pontos da malha $\{x_{k+s}, s \in S\}$, sendo $S = \{0, 1/2, 1\}$. Esses polinômios são dados pela Equação (2.129).

$$\tilde{f}(x) = \sum_{i \in S} l_{k,i}(x) f(x_{k+i}), \quad x \in [x_k, x_{k+1}] \quad (2.127)$$

$$x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{x_k + x_{k+1}}{2}, \quad (2.128)$$

$$l_{k,i}(x) = \prod_{s \in S, s \neq i} \frac{x - x_{k+s}}{x_{k+i} - x_{k+s}}, \quad i \in S. \quad (2.129)$$

Dessa forma, obtém-se a expressão que aproxima a integral fracionária através da regra de Simpson modificada, que é dada pela Equação (2.130). Os coeficientes presentes no interior dos somatórios são dados pela Equação (2.131).

$$\left[D_{a,x}^{-\alpha} f(x) \right]_{x=x_j} = \frac{h^\alpha}{\Gamma(\alpha+3)} \left[\sum_{k=0}^j c_{k,j} f(x_k) + \sum_{k=0}^{j-1} \hat{c}_{k,j} f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) \right], \quad (2.130)$$

$$\begin{cases} \hat{c}_{k,j} = 4(\alpha+2) \left[(j-k)^{1+\alpha} + (j-k-1)^{1+\alpha} \right] - 8 \left[(j-k)^{2+\alpha} - (j-k-1)^{2+\alpha} \right], & 0 \leq k \leq j-1, \\ c_{0,j} = 4 \left[j^{2+\alpha} - (j-1)^{2+\alpha} \right] - (\alpha+2) \left[3j^{1+\alpha} + (j-1)^{1+\alpha} \right] + (\alpha+2)(\alpha+1)j^\alpha, \\ c_{k,j} = -(\alpha+2) \left[(j-k+1)^{1+\alpha} + (j-k-1)^{1+\alpha} + 6(j-k)^{1+\alpha} \right] + \\ + 4 \left[(j-k+1)^{2+\alpha} - (j-k-1)^{2+\alpha} \right], & 1 \leq k \leq j-1, \\ c_{j,j} = 2 - \alpha. \end{cases} \quad (2.131)$$

A aproximação de uma integral de ordem fracionária através do uso de quadraturas de convolução é dada pela Equação (2.132).

$$D_{0,x}^{-\alpha} f(x) = h^\alpha \sum_{j=0}^n \omega_{l,n-j} f(jh) + h^\alpha \sum_{j=0}^s w_{n,j} f(jh), \quad x = a + nh. \quad (2.132)$$

Nessa equação, $\omega_{l,j}$ representa os pesos da quadratura de convolução, sendo j maior ou igual a zero. O termo $w_{n,j}$ corresponde aos pesos iniciais da quadratura, sendo n maior ou igual a zero e j variando entre 0 e s , onde s representa um valor inteiro fixo menor ou igual a n . Nesse caso, os pesos da quadratura de convolução apresentam valores equivalentes aos respectivos coeficientes das expansões em séries de Taylor das funções geradoras correspondentes, as quais são dadas pela Equação (2.133).

$$W_l^{(\alpha)}(z) = \left[\sum_{k=1}^l \frac{1}{k} (1-z)^k \right]^\alpha = \sum_{j=0}^{\infty} \omega_{l,j} z^j, \quad |z| < 1. \quad (2.133)$$

Considerando $s=0$, obtém-se a expressão de Lubich, dada pela Equação (2.134), quando se tem $f(0)=0$.

$$D_{0,x}^{-\alpha} f(x) = h^\alpha \sum_{j=0}^n \omega_{l,n-j} f(jh), \quad x = a + nh. \quad (2.134)$$

De acordo com a aproximação difusiva, a integral de ordem fracionária pode ser avaliada através da solução de equações diferenciais de ordem inteira. Aplicando as relações expressas pelas Equações (2.135) e (2.136), pode-se reescrever a integral de ordem fracionária, cujo valor de α encontra-se entre 0 e 1, de acordo com a Equação (2.137).

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} \exp(-z) z^{\alpha-1} dz, \quad (2.135)$$

$$\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\alpha) = \frac{\pi}{\text{sen}(\pi\alpha)}, \quad (2.136)$$

$$D_{0,x}^{-\alpha} f(x) = \frac{\text{sen}(\pi\alpha)}{\pi} \int_0^x \int_0^{\infty} \exp(-z) \left(\frac{z}{x-t}\right)^{1-\alpha} \frac{dz}{z} f(t) dt. \quad (2.137)$$

Definindo a variável z através da Equação (2.138) e aplicando o Teorema de Fubini, obtém-se a Equação (2.139).

$$z = \omega^2(x-t), \quad \omega \geq 0, \quad (2.138)$$

$$D_{0,x}^{-\alpha} f(x) = \frac{2\text{sen}(\pi\alpha)}{\pi} \int_0^{\infty} \omega^{1-2\alpha} \left\{ \int_0^x \exp[-\omega^2(x-t)] f(t) dt \right\} d\omega. \quad (2.139)$$

Definindo uma função auxiliar representada pela Equação (2.140), pode ser obtida a Equação (2.141).

$$\phi(\omega, x) = \frac{2\text{sen}(\pi\alpha)}{\pi} \omega^{1-2\alpha} \int_0^x \exp[-\omega^2(x-t)] f(t) dt, \quad (2.140)$$

$$D_{0,x}^{-\alpha} f(x) = \int_0^{\infty} \phi(\omega, x) d\omega, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (2.141)$$

A função auxiliar é uma solução do problema descrito pelas Equações (2.142) e (2.143).

$$\frac{\partial \phi(\omega, x)}{\partial x} = \frac{2\text{sen}(\pi\alpha)}{\pi} \omega^{1-2\alpha} f(x) - \omega^2 \phi(\omega, x), \quad (2.142)$$

$$\phi(\omega, 0) = 0. \quad (2.143)$$

Assim, a avaliação da integral fracionária pode ser realizada em duas etapas. A primeira corresponde à resolução do problema descrito pelas Equações (2.142) e (2.143), enquanto a segunda etapa consiste na determinação da integral definida pela Equação (2.141), que pode ser obtida a partir de quadraturas adequadas.

Um dos principais métodos utilizados para a avaliação da derivada fracionária de Riemann-Liouville corresponde ao método conhecido como L1. De acordo com este, essa derivada fracionária pode ser determinada através da Equação (2.144), que é válida para valores de α entre 0 e 1.

$${}_{RL} D_{a,x}^{\alpha} f(x) = \frac{(x-a)^{\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} f(a) + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^x (x-t)^{-\alpha} f'(t) dt. \quad (2.144)$$

Considerando malhas uniformes e aproximando a derivada da função $f(x)$ pela Equação (2.145), em cada subintervalo $[x_k, x_{k+1}]$, obtém-se a Equação (2.146), que representa a aproximação da derivada fracionária de Caputo pelo método L1.

$$f'(x) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h}, \quad (2.145)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \left[{}_C D_{a,x}^\alpha f(x) \right]_{x=x_j} &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} dt = \\ &= \sum_{k=0}^{j-1} b_{j-k-1} [f(x_{k+1}) - f(x_k)] \quad 0 < \alpha < 1, \quad 1 \leq j \leq N, \\ b_k &= \frac{h^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} [(k+1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}] \quad 0 \leq k \leq j-1. \end{aligned} \right. \quad (2.146)$$

Considerando que o intervalo $[a, b]$ é dividido de forma que se obtém uma malha não uniforme, pode-se generalizar o método L1 para esse tipo de malha. De acordo com esse método, a derivada fracionária de Caputo é dada pela Equação (2.147).

$$\left[{}_C D_{a,x}^\alpha f(x) \right]_{x=\tilde{x}_j} = \sum_{k=0}^{j-1} \frac{1}{(\tilde{x}_{k+1} - \tilde{x}_k) \Gamma(2-\alpha)} [(\tilde{x}_j - \tilde{x}_k)^{1-\alpha} - (\tilde{x}_j - \tilde{x}_{k+1})^{1-\alpha}] [f(\tilde{x}_{k+1}) - f(\tilde{x}_k)] \quad (2.147)$$

Quando se tem uma malha não uniforme, na qual os pontos podem ser representados pela Equação (2.148), obtém-se a Equação (2.149).

$$\tilde{x}_0 = x_0, \quad \tilde{x}_j = x_{j-\frac{1}{2}} = \frac{x_j + x_{j-1}}{2}, \quad j = 1, 2, \dots, \quad (2.148)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \left[{}_C D_{a,x}^\alpha f(x) \right]_{x=\tilde{x}_{j+1}} &= b_0 f(\tilde{x}_{j+1}) - \sum_{k=1}^j (b_{j-k} - b_{j-k+1}) f(\tilde{x}_k) - B_j f(\tilde{x}_0), \\ b_k &= \frac{(k+1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha) h^\alpha}, \quad 0 \leq k \leq j, \\ B_j &= \frac{2 \left(j + \frac{1}{2} \right)^{1-\alpha} - 2 j^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha) h^\alpha}, \quad 0 \leq j \leq N. \end{aligned} \right. \quad (2.149)$$

Substituindo a relação dada pela Equação (2.150), pode-se obter a Equação (2.151), que representa a aproximação da derivada fracionária de Caputo pelo método L1 modificado.

$$f(\tilde{x}_k) = f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) = \frac{f(x_k) + f(x_{k-1})}{2}, \quad (2.150)$$

$$\left[{}_C D_{a,x}^\alpha f(x) \right]_{x=x_{j+\frac{1}{2}}} = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^j (b_{j-k} - b_{j-k+1}) [f(x_{k-1}) + f(x_k)] + \frac{b_0}{2} [f(x_{j+1}) + f(x_j)] + B_j f(x_0). \quad (2.151)$$

Quando se tem $a=0$ e o valor da ordem da derivada fracionária encontra-se entre 1 e 2, tem-se que a derivada fracionária de Caputo é dada pela Equação (2.152).

$$\left[{}_C D_{0,x}^\alpha f(x) \right]_{x=x_j} = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} t^{1-\alpha} f''(x_j - t) dt. \quad (2.152)$$

A derivada de segunda ordem em cada subintervalo $[x_k, x_{k+1}]$ pode ser aproximada por uma expressão de diferenças centrais, dada pela Equação (2.153). Dessa forma, obtém-se a Equação (2.154), que representa a expressão utilizada para avaliar a derivada fracionária de Caputo de acordo com o método L2.

$$f''(x_j - t) = \frac{f(x_j - x_{k+1}) - 2f(x_j - x_k) + f(x_j - x_{k-1}))}{h^2}, \quad (2.153)$$

$$\left[{}_C D_{0,x}^\alpha f(x) \right]_{x=x_j} = \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)h^\alpha} \sum_{k=-1}^j W_k f(x_{j-k}), \quad (2.154)$$

$$\begin{cases} W_{-1} = 1, \\ W_0 = 2^{2-\alpha} - 3, \\ W_k = \left[(k+2)^{2-\alpha} - 3(k+1)^{2-\alpha} + 3k^{2-\alpha} - (k-1)^{2-\alpha} \right], \quad 1 \leq k \leq j-2, \\ W_{j-1} = -2j^{2-\alpha} + 3(j-1)^{2-\alpha} - (j-2)^{2-\alpha}, \\ W_j = j^{2-\alpha} - (j-1)^{2-\alpha}. \end{cases}$$

A expressão utilizada para aproximar a derivada fracionária de Caputo segundo o método L2C é dada pela Equação (2.155). Essa equação é obtida ao se considerar que a derivada de segunda ordem em um subintervalo $[x_{k-1}, x_k]$ pode ser aproximada pela expressão apresentada na Equação (2.156).

$$\left\{ \begin{aligned} \left[{}_C D_{0,x}^\alpha f(x) \right]_{x=x_j} &= \frac{1}{2\Gamma(3-\alpha)h^\alpha} \sum_{k=-1}^{j+1} \hat{W}_k f(x_{j-k}), \\ \hat{W}_{-1} &= 1, \\ \hat{W}_0 &= 2^{2-\alpha} - 2, \\ \hat{W}_1 &= 3^{2-\alpha} - 2^{3-\alpha}, \\ \hat{W}_k &= \left[(k+2)^{2-\alpha} - 2(k+1)^{2-\alpha} + 2(k-1)^{2-\alpha} - (k-2)^{2-\alpha} \right] \quad 2 \leq k \leq j-2, \\ \hat{W}_{j-1} &= 2(j-2)^{2-\alpha} - j^{2-\alpha} - (j-3)^{2-\alpha}, \\ \hat{W}_j &= 2(j-1)^{2-\alpha} - j^{2-\alpha} - (j-2)^{2-\alpha}, \\ \hat{W}_{j+1} &= j^{2-\alpha} - (j-1)^{2-\alpha}, \end{aligned} \right. \quad (2.155)$$

$$f''(x_j - t) = \frac{f(x_j - x_{k+2}) - f(x_j - x_{k+1}) + f(x_j - x_{k-1}) - f(x_j - x_k)}{2h^2}. \quad (2.156)$$

Com o uso de polinômios de interpolação de graus maiores, são obtidas aproximações mais precisas das derivadas fracionárias. Aplicando as expansões em séries de Taylor das funções $f(x_{k+1})$, $f(x_k)$ e $f(x_{k-1})$ no ponto x , tem-se a Equação (2.157), que aproxima a derivada de primeira ordem.

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x_{k+1}) - f(x_{k-1})}{2h} + \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))}{h^2} (x - x_k) - \frac{f^{(3)}(x_k)}{3!} h^2 + \\ &+ \frac{f^{(3)}(x_k)}{2!} (x - x_k)^2. \end{aligned} \quad (2.157)$$

Assim, pode-se obter a aproximação de ordem equivalente a $(3-\alpha)$ para a derivada fracionária de Caputo, dada pela Equação (2.158). Nesse caso, tem-se que a ordem fracionária é maior que 0 e menor ou igual a 1.

$$\left\{ \begin{aligned} \left[{}_C D_{a,x}^\alpha f(x) \right]_{x=x_j} &= \frac{h^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \left\{ \omega_{1,j-k} [f(x_{k+1}) - f(x_{k-1})] + \right. \\ &\left. \omega_{2,j-k} [f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))] \right\}, \\ \omega_{1,j-k} &= \frac{2-\alpha}{2} \left[(j-k)^{1-\alpha} - (j-k-1)^{1-\alpha} \right], \\ \omega_{2,j-k} &= (j-k)^{2-\alpha} - (j-k-1)^{2-\alpha} - (2-\alpha)(j-k-1)^{1-\alpha}, \quad 0 \leq k \leq j-1, \quad 1 \leq j \leq N. \end{aligned} \right. \quad (2.158)$$

A avaliação da derivada fracionária de Riemann-Liouville pode ser obtida através de relações que envolvem a derivada fracionária de Caputo. Essas relações são expressas pelas Equações (2.159) e (2.160).

$${}_{RL} D_{a,x}^\alpha f(x) = {}_C D_{a,x}^\alpha f(x) + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{f^{(k)}(a)(x-a)^{k-\alpha}}{\Gamma(1+k-\alpha)}, \quad (2.159)$$

$${}_{RL}D_{x,b}^{\alpha}f(x) = {}_C D_{x,b}^{\alpha}f(x) + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^k f^{(k)}(b)(b-x)^{k-\alpha}}{\Gamma(1+k-\alpha)}. \quad (2.160)$$

2.5 Consistência Dimensional para Modelos Diferenciais Fracionários

O uso de modelos matemáticos baseados no cálculo fracionário para representar fenômenos da natureza pode resultar no aumento da precisão dos mesmos, especialmente em processos com efeito de memória (DAMOR; KUMAR; SHUKLA, 2013). Todavia, ao substituir uma ordem inteira por uma fracionária em um modelo físico, observa-se que o mesmo se torna dimensionalmente inconsistente. Para fins de aplicação considere o modelo de transferência de calor em tecidos fracionário no tempo e unidimensional (PENNES, 1948):

$$\rho_t c_t \frac{\partial^{\alpha} T}{\partial t^{\alpha}} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + W_b c_b (T_{amb} - T) + q_m, \quad t \geq 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad (2.161)$$

em que x e t representam as coordenadas espacial e temporal, respectivamente, T é a temperatura, ρ_t e c_t representam a densidade e o calor específico do tecido, respectivamente, k é a condutividade térmica, W_b é a taxa de perfusão sanguínea, c_b é o calor específico do sangue, T_{amb} é a temperatura ambiente e q_m é o calor metabólico.

Para α igual à unidade tem-se a seguinte análise dimensional:

$$\rho_t \quad c_t \quad \frac{\partial T}{\partial t} = k \quad \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + W_b \quad c_b \quad (T_{amb} - T) + q_m \quad (2.162)$$

$$\left[\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \right] \left[\frac{\text{J}}{\text{Kg}^{\circ}\text{C}} \right] \left[\frac{^{\circ}\text{C}}{\text{s}} \right] = \left[\frac{\text{J}}{\text{ms}^{\circ}\text{C}} \right] \left[\frac{^{\circ}\text{C}}{\text{m}^2} \right] + \left[\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3 \text{s}} \right] \left[\frac{\text{J}}{\text{Kg}^{\circ}\text{C}} \right] \left[^{\circ}\text{C} \right] + \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{s}} \right].$$

Do ponto de vista dimensional, o modelo com ordem inteira é consistente, visto que o lado esquerdo é igual ao direito e estes têm a mesma unidade, a saber, $[\text{J}/(\text{m}^3 \text{s})]$. Já o modelo com ordem fracionária igual a α resulta na seguinte análise dimensional:

$$\rho_t \quad c_t \quad \frac{\partial^{\alpha} T}{\partial t^{\alpha}} \neq k \quad \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + W_b \quad c_b \quad (T_{amb} - T) + q_m \quad (2.163)$$

$$\left[\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \right] \left[\frac{\text{J}}{\text{Kg}^{\circ}\text{C}} \right] \left[\frac{^{\circ}\text{C}}{\text{s}^{\alpha}} \right] \neq \left[\frac{\text{J}}{\text{ms}^{\circ}\text{C}} \right] \left[\frac{^{\circ}\text{C}}{\text{m}^2} \right] + \left[\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3 \text{s}} \right] \left[\frac{\text{J}}{\text{Kg}^{\circ}\text{C}} \right] \left[^{\circ}\text{C} \right] + \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{s}} \right].$$

Nesta análise percebe-se que o lado esquerdo tem unidade diferente da encontrada no lado direito, isto é, $[\text{J}/(\text{m}^3 \text{s}^{\alpha})]$ é diferente de $[\text{J}/(\text{m}^3 \text{s})]$ devido à presença da ordem fracionária. Assim, se o modelo diferencial fracionário representar um fenômeno físico, o mesmo deve ser corrigido do ponto de vista dimensional. Para essa finalidade, duas abordagens têm sido empregadas na literatura.

Uma dessas abordagens consiste na inserção de um parâmetro auxiliar, denominado fator de correção, no termo que apresenta a derivada de ordem não inteira do modelo. No caso do modelo dado pela Equação (2.161), a unidade deste parâmetro seria a mesma do tempo. Assim, a consistência dimensional do modelo seria garantida ao se multiplicar o lado esquerdo da equação por esse parâmetro elevado a $(\alpha-1)$. Essa abordagem foi utilizada por Lima, Lobato e Steffen Jr. (2021b) em um estudo no qual se considerou um modelo que apresenta ordem fracionária no tempo para avaliar sistemas massa-mola-amortecedor.

Lima, Lobato e Steffen Jr (2021a) utilizaram outra abordagem para corrigir dimensionalmente um modelo diferencial de ordem não inteira em relação ao tempo, que foi considerado para descrever um processo de fermentação. Nesse caso, a consistência dimensional do modelo foi atingida ao se modificar a unidade da propriedade que se encontra próxima ao termo fracionário. No modelo apresentado na Equação (2.161), por exemplo, de acordo com esta abordagem, poderiam ser modificadas as unidades da densidade, do calor específico ou de ambas as propriedades do tecido. Essa modificação das unidades das propriedades envolveria a inserção de α no interior das mesmas. Chang e Sun (2018) também aplicaram essa abordagem na correção dimensional de um modelo composto por derivadas temporais e espaciais de ordem fracionária. Os autores consideraram esse modelo em um estudo envolvendo a difusão de CO_2 em um meio poroso saturado com n-tetradecano líquido.

2.6 Problemas Inversos

Segundo Keller (1976) um problema é inverso de outro problema quando a formulação deste envolve o primeiro. De acordo com outra definição, um problema inverso consiste em determinar as causas quando os efeitos são conhecidos. Em um problema direto, por sua vez, as causas são conhecidas e se desejam identificar os efeitos (KERN, 2016).

Os problemas inversos apresentam algumas dificuldades, pois diferentes causas podem dar origem aos mesmos efeitos. Com isso, esses problemas apresentam diversas soluções. Para diferenciá-las, são necessárias informações adicionais. Além disso, para a resolução de um problema inverso, há a necessidade de um bom conhecimento do problema direto, o que implica na utilização de muitos conceitos matemáticos e físicos (KERN, 2016).

Os problemas inversos são caracterizados por serem problemas mal postos, ao contrário do que se verifica para problemas diretos. O conceito de problema bem posto foi definido por Hadamard (1923). De acordo com o autor, um problema é bem posto quando três condições são atendidas: existe solução, a solução é única e a dependência entre a solução e os dados de entrada é contínua. Geralmente, no mínimo uma dessas condições não é satisfeita

em problemas inversos (KERN, 2016).

A importância dos problemas inversos pode ser verificada em diversas áreas da ciência e da engenharia. Esses problemas têm sido aplicados, por exemplo, na determinação de permeabilidades de reservatórios de petróleo e de constantes de reações químicas (KERN, 2016). A utilização de problemas inversos também é observada no estudo da combustão no interior de fornos, na estimação da condutividade térmica e do coeficiente de difusão de materiais e na identificação de alterações em tecidos biológicos (NETO; NETO, 2013).

Dentre os problemas inversos utilizados na engenharia, destacam-se os problemas de estimação de parâmetros, que têm sido aplicados com frequência no estudo de fenômenos anômalos. Ghazizadeh, Azimi e Maerefat (2012) consideraram um modelo composto por uma derivada de ordem fracionária da temperatura em relação ao tempo para descrever a transferência de calor em carne processada. Utilizando o método de Levenberg–Marquardt, os autores resolveram um problema inverso e estimaram os parâmetros do modelo. Fan, Jiang e Chen (2016) aplicaram o método Bayesiano para estimar os parâmetros de um modelo que apresenta uma derivada de ordem não inteira da concentração em relação ao tempo. Os autores utilizaram esse modelo para descrever a difusão anômala em meios porosos. Liu, Chen e Cheng (2016) estudaram a transferência de calor em carne processada, considerando o modelo de duplo atraso. A partir da aplicação do método dos Mínimos Quadrados, os parâmetros do modelo foram estimados. Silva (2016) obteve soluções de um problema de estimação de parâmetros dos modelos propostos por Bevilacqua, Galeão e Costa (2011a,b) para a difusão anômala. As soluções foram obtidas pelos algoritmos de Evolução Diferencial, de Colisão de Partículas e de Otimização baseada em Relâmpagos.

Brociek et al. (2019) avaliaram a precisão de três modelos fracionários para descrever a transferência de calor em alumínio poroso. Foram consideradas duas definições diferentes de derivada fracionária. Inicialmente, utilizou-se um modelo composto por uma derivada de ordem não inteira somente em relação ao tempo. Posteriormente, foi considerada uma derivada fracionária apenas em relação à variável espacial. Por fim, os autores consideraram derivadas de ordem não inteira em relação às duas variáveis independentes. A partir da aplicação do método da Colônia de Formigas, os autores resolveram problemas inversos e estimaram os parâmetros dos três modelos utilizados. Lima, Lobato e Arouca (2019) formularam dois problemas inversos envolvendo a difusão anômala em dois materiais. Ambos os problemas foram resolvidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial. A partir da resolução dos problemas inversos, os autores estimaram os parâmetros de um modelo empírico e de um modelo fenomenológico.

Yu e Jiang (2019) aplicaram o método dos Gradientes Conjugados para estimar os parâmetros de um modelo que apresenta derivadas de ordem não inteira da temperatura em relação ao tempo. Esse modelo foi utilizado na descrição da transferência de calor em um tecido esférico composto por duas camadas. Mattos (2021) resolveu um problema de estimação de parâmetros referente aos modelos de difusão anômala de Bevilacqua, Galeão e Costa (2011a,b). Para a resolução do problema, o autor utilizou os algoritmos de Evolução Diferencial, de Luus-Jaakola Modificado e Firefly.

2.6.1 Formulação Matemática do Problema de Otimização

Um problema de otimização apresenta três características: a função objetivo, as variáveis de projeto e as restrições. A função objetivo envolve as variáveis de projeto e corresponde ao critério em relação ao qual o sistema é otimizado. A natureza do problema influencia consideravelmente a escolha da função objetivo. As variáveis de projeto, também denominadas variáveis de decisão, consistem no conjunto de quantidades que definem um sistema e que não apresentam valores fixos (RAO, 2009). Os valores da função objetivo podem ser modificados através da variação dessas variáveis (VANDERPLAATS, 1999). As restrições correspondem aos requisitos que as variáveis de projeto devem atender (RAO, 2009). Assim como a função objetivo, as restrições também são funções das variáveis de projeto. Essas funções são responsáveis pela delimitação das regiões do espaço de projeto (VANDERPLAATS, 1999).

A descrição matemática do problema de otimização é dada pelas Equações (2.164) e (2.165). O vetor x é definido de acordo com a Equação (2.166) (BHATTI, 2000).

$$\min f(x). \quad (2.164)$$

$$\begin{cases} g_i(x) \leq 0, & i = 1, 2, \dots, m \\ h_i(x) = 0, & i = 1, 2, \dots, p \\ x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, & i = 1, 2, \dots, n. \end{cases} \quad (2.165)$$

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, \quad (2.166)$$

em que $f(x)$ é a função objetivo, x é o vetor das variáveis de projeto, $g_i(x)$ são as restrições de desigualdade, $h_i(x)$ são as restrições de igualdade, x_i^L e x_i^U são as fronteiras do problema.

Em algumas situações, há a necessidade de minimizar ou maximizar mais de uma função objetivo. Nesses casos, tem-se um problema de otimização multi-objetivo. A descrição matemática desse problema é dada pelas Equações (2.167) e (2.168) (DEB, 2001).

$$\min f_m(x), \quad m = 1, 2, \dots, M. \quad (2.167)$$

$$\begin{cases} g_j(x) \leq 0, & j = 1, 2, \dots, J \\ h_k(x) = 0, & k = 1, 2, \dots, K \\ x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, & i = 1, 2, \dots, n. \end{cases} \quad (2.168)$$

2.6.2 Classificação dos Métodos para a Resolução do Problema de Otimização

Na literatura, há diversos métodos para a resolução de problemas de otimização. O uso de um método de resolução adequado é fundamental para que seja garantida a obtenção das soluções ótimas. Muitos fatores influenciam a seleção do método de resolução de problemas de otimização. Dentre estes, destacam-se: o tipo de problema, a natureza do método, a qualidade desejada das soluções, o tempo e os recursos computacionais disponíveis (KOZIEL; YANG, 2011).

De maneira geral, os métodos de resolução de problemas de otimização podem ser classificados em: métodos determinísticos, também denominados clássicos, e métodos heurísticos, também conhecidos como estocásticos, probabilísticos ou não determinísticos (RANGAIAH, 2010). Nos métodos determinísticos, é gerada uma sequência determinística de pontos na região de busca, através da utilização de propriedades analíticas do problema de otimização. Essa sequência de pontos converge para um ótimo global (RANGAIAH, 2010). Para a aplicação desses métodos, considera-se que a função objetivo e as restrições são funções contínuas (ZHANG; BONILLA-PETRICIOLET; RANGAIAH, 2011).

Podem-se classificar os métodos clássicos em: métodos diretos e métodos indiretos. Os métodos diretos caracterizam-se por utilizar apenas a função objetivo e as restrições no processo de busca. Nos métodos indiretos, são utilizadas as derivadas de primeira e/ou segunda ordem da função objetivo e/ou das restrições. Por isso, a convergência dos métodos indiretos ocorre mais rapidamente do que a dos métodos diretos. Os dois tipos de métodos clássicos apresentam dificuldades em comum. Uma destas corresponde à dependência da convergência em relação à solução inicial escolhida. Além disso, esses métodos não apresentam uma boa eficiência em problemas nos quais a região de busca é discreta (DEB, 2001). Em muitas aplicações práticas, as funções objetivo de problemas de otimização não são contínuas. Isso limita a aplicabilidade dos métodos clássicos (RAO, 2009).

Um exemplo de método clássico indireto corresponde ao método de Newton, que representa um dos métodos utilizados com mais frequência em problemas de otimização. Um dos fatores que mais influenciam a eficiência desse método consiste na escolha do tamanho do passo. Quando esse valor é muito pequeno, a convergência para o ótimo local é muito lenta. Por outro lado, um valor muito grande do tamanho do passo pode implicar na

divergência do método. O método dos Gradientes Conjugados também consiste em um método clássico indireto. Esse método foi utilizado pela primeira vez por Hestenes e Stiefel (1952) e é um dos métodos mais aplicados em problemas de otimização (KOZIEL; YANG, 2011).

Alguns exemplos de métodos clássicos diretos consistem nos métodos de Hooke-Jeeves e da Região de Confiança. Quando o método de Hooke-Jeeves é aplicado, são consideradas as iterações anteriores para a obtenção de uma nova direção de busca, ao contrário do que ocorre quando se utiliza o método de Newton. Com isso, a convergência é atingida mais rapidamente. Muitos problemas de otimização têm sido resolvidos pelo método da Região de Confiança, no qual são utilizadas expansões em séries de Taylor para aproximar a função objetivo. Para avaliar a qualidade da aproximação, pode-se calcular a razão entre a diminuição real e a diminuição predita da função objetivo. Quanto mais próximo da unidade é o valor dessa razão, maior é a qualidade da aproximação (KOZIEL; YANG, 2011).

Os métodos heurísticos caracterizam-se pela busca do ótimo global ser baseada em sequências aleatórias e pela utilização de elementos probabilísticos. Esses métodos são utilizados na manipulação de uma solução única ou de um conjunto de soluções em cada iteração ou avaliação da função objetivo. Uma desvantagem dos métodos heurísticos corresponde ao fato da otimalidade global não ser garantida. Apesar disso, esses métodos apresentam algumas vantagens. Dentre estas, destaca-se a menor quantidade de hipóteses necessárias em relação às características do problema (ZHANG; BONILLA-PETRICIOLET; RANGAIAH, 2011).

Podem-se classificar os métodos heurísticos em: métodos de busca aleatória, métodos evolutivos e métodos de inteligência de enxame. Alguns exemplos de métodos de busca aleatória correspondem aos métodos da Busca Aleatória Pura, do Recozimento Simulado e da Busca Tabu. Os Algoritmos Genéticos e de Evolução Diferencial consistem em métodos evolutivos. Os métodos de inteligência de enxame podem ser exemplificados pelos métodos da Colônia de Formigas e do Enxame de Partículas. Também há métodos que não se encontram em nenhum dos três tipos de métodos apresentados anteriormente. Os métodos da Busca Harmônica e do Tunelamento Aleatório são alguns exemplos (RANGAIAH, 2010).

O método mais simples de busca aleatória corresponde ao método da Busca Aleatória Pura. Brooks (1958) foi o primeiro autor a definir esse método. Com a aplicação do método da Busca Aleatória Pura, obtém-se uma sequência de pontos distribuídos de maneira uniforme na região viável. Enquanto isso se observa o melhor ponto encontrado até o momento atual (ZHANG; BONILLA-PETRICIOLET; RANGAIAH, 2011).

O método do Recozimento Simulado foi desenvolvido por Kirkpatrick, Gelatt e Vecchi (1983), através de uma analogia com o processo de recozimento de metais, o qual apresenta duas etapas. A primeira corresponde ao aquecimento do metal até este atingir o estado fundido. Posteriormente, realiza-se o resfriamento de maneira lenta até que o metal retorne para o estado sólido. Com isso, o equilíbrio térmico é atingido com o mínimo de energia. No método do Recozimento Simulado, além do ponto com o melhor valor, aceitam-se pontos com valores ruins com uma determinada probabilidade. Essa probabilidade diminui à medida que o processo de busca avança (ZHANG; BONILLA-PETRICIOLET; RANGAIAH, 2011).

No método da Busca Tabu, os pontos encontrados não são avaliados novamente. Esse método foi proposto por Glover (1989). A primeira etapa da aplicação do método consiste na avaliação de um conjunto de soluções escolhidas, as quais são armazenadas em uma lista. Posteriormente, realiza-se a comparação entre a nova solução obtida e as soluções inicialmente escolhidas (ZHANG; BONILLA-PETRICIOLET; RANGAIAH, 2011).

O método dos Algoritmos Genéticos foi desenvolvido por Holland (1975). Esse método realiza uma analogia com o processo de evolução que ocorre na natureza. A primeira etapa do método consiste em inicializar uma população de soluções de teste, que são produzidas de maneira aleatória no interior da região viável. Posteriormente, realiza-se a avaliação da função objetivo dessas soluções e estas são submetidas aos processos de reprodução, cruzamento e mutação. Com a realização desses três processos, cria-se uma nova população, que é submetida aos mesmos procedimentos até o critério de parada ser atingido (ZHANG; BONILLA-PETRICIOLET; RANGAIAH, 2011).

Storn e Price (1995) propuseram o algoritmo de Evolução Diferencial. Esse algoritmo baseia-se na ideia de adicionar a diferença entre dois indivíduos a um terceiro indivíduo, de forma a produzir um novo indivíduo. As etapas de aplicação do algoritmo de Evolução Diferencial são semelhantes às do método dos Algoritmos Genéticos. Apesar disso, quando se utiliza o algoritmo de Evolução Diferencial, o processo de busca é guiado pela mutação, enquanto no caso do método dos Algoritmos Genéticos, o cruzamento é responsável por guiar esse processo (ZHANG; BONILLA-PETRICIOLET; RANGAIAH, 2011).

O método da Colônia de Formigas foi desenvolvido por Dorigo, Maniezzo e Colorni (1996) e imita o comportamento do forrageamento de colônias reais de formigas. Nesse método, formigas artificiais depositam feromônio, de forma a construir caminhos que são seguidos pelas demais formigas presentes na colônia. Dessa forma, há uma cooperação entre as formigas na busca de soluções de qualidade. O método da Colônia de Formigas apresenta

duas etapas. A primeira corresponde ao movimento das formigas para regiões vizinhas viáveis. Nessa etapa, ocorre o armazenamento das informações coletadas nos caminhos de feromônio. A segunda etapa consiste na evaporação de feromônio, o que implica em um efeito menor dos valores de feromônio nas gerações posteriores do que nas anteriores. Com base nessa informação, são tomadas as decisões das formigas, que seguem uma distribuição de probabilidade. Para a determinação dessa distribuição, são utilizados os valores relativos de feromônio correspondentes aos resultados possíveis das variáveis de projeto (ZHANG; BONILLA-PETRICIOLET; RANGAIAH, 2011).

Kennedy e Eberhart (1995) desenvolveram o método do Enxame de Partículas. Nesse método, o ótimo global é encontrado a partir da utilização do comportamento social de um sistema biológico, tais como um bando de pássaros ou um cardume de peixes. As partículas presentes no enxame movimentam-se em uma determinada velocidade, de uma posição inicial para uma nova posição. Essas partículas correspondem a possíveis soluções na região de busca. Inicialmente, produz-se de maneira aleatória uma população de partículas na região de busca. Posteriormente, é realizado um ajuste do movimento de cada indivíduo, com base na melhor posição individual e global das partículas, no enxame como um todo, em cada passo de tempo. Dessa forma, obtém-se o ótimo global (ZHANG; BONILLA-PETRICIOLET; RANGAIAH, 2011).

2.6.3 Evolução Diferencial

O algoritmo de Evolução Diferencial apresenta algumas vantagens. Dentre estas, destaca-se a sua maior simplicidade de implementação em comparação com outros métodos evolutivos. Além disso, esse algoritmo apresenta uma quantidade pequena de parâmetros de controle e há um bom conhecimento sobre o efeito desses parâmetros na eficiência do algoritmo (DAS; SUGANTHAN, 2011). O algoritmo de Evolução Diferencial apresenta uma boa eficiência em uma grande variedade de problemas, inclusive aqueles que envolvem funções objetivo que são não diferenciáveis, não lineares ou multimodais. Outra característica importante desse algoritmo corresponde às boas propriedades de convergência (STORN; PRICE, 1997).

No algoritmo de Evolução Diferencial considera-se uma população composta por N_p vetores. Essa quantidade de vetores mantém-se constante durante o processo de otimização. A escolha da população inicial é realizada de maneira aleatória e, geralmente, segue uma distribuição de probabilidade uniforme. A partir da adição da diferença ponderada entre dois vetores a um terceiro vetor, é criado um novo vetor, conhecido como vetor modificado. Esse

processo é denominado mutação. Posteriormente, ocorre o processo denominado cruzamento, no qual se realiza uma mistura entre os parâmetros do vetor modificado e de um vetor pré-determinado, conhecido como vetor alvo. Dessa forma, ocorre a geração de um vetor denominado vetor tentativa. A etapa seguinte do algoritmo corresponde à seleção, em que se comparam os valores da função objetivo do vetor tentativa e do vetor alvo. A última etapa de aplicação do algoritmo consiste na utilização de um critério de parada (STORN; PRICE, 1997).

A Equação (2.169) descreve o processo de mutação (STORN; PRICE, 1997).

$$v_i^{G+1} = x_{r_1}^G + F(x_{r_2}^G - x_{r_3}^G) \quad i=1,2,3,\dots,N_p, \quad (2.169)$$

em que v_i^{G+1} é o vetor modificado, x_i^G é o vetor alvo, r_1 , r_2 e r_3 são índices aleatórios inteiros diferentes entre si e do índice i e F é o fator de perturbação. Os índices r_1 , r_2 e r_3 encontram-se no intervalo entre 1 e N_p . O valor do fator de perturbação é positivo, real, constante e pertence ao intervalo compreendido entre 0 e 2.

O vetor tentativa pode ser representado pela Equação (2.170) (STORN; PRICE, 1997).

$$u_i^{G+1} = (u_{1i}^{G+1}, u_{2i}^{G+1}, \dots, u_{ni}^{G+1}) \quad (2.170)$$

em que u_i^{G+1} é o vetor tentativa e n é o número de componentes do vetor.

As componentes do vetor tentativa são definidas de acordo com a Equação (2.171) (STORN; PRICE, 1997).

$$u_{ji}^{G+1} = \begin{cases} v_{ji}^{G+1}, & \text{se } rand_j \leq CR \text{ ou } j = rand_i, \\ x_{ji}^G, & \text{se } rand_j > CR \text{ ou } j \neq rand_i, \\ j = 1, 2, \dots, n, \end{cases} \quad (2.171)$$

em que $rand_j$ é a j -ésima avaliação de um gerador de números aleatórios uniforme com resultado entre 0 e 1, CR é a probabilidade de cruzamento, cujo valor também se encontra no intervalo entre 0 e 1, e $rand_i$ é um índice escolhido aleatoriamente, que se encontra no intervalo entre 1 e n .

Caso alguma componente do vetor tentativa não se encontre dentro da região de busca, pode-se utilizar uma regra de reparo, de acordo com a Equação (2.172) (OLIVEIRA, 2006).

$$u_{ji} = \begin{cases} x_i^{\text{inf}}, & \text{se } u_{ji} < x_i^{\text{inf}}, \\ x_i^{\text{sup}}, & \text{se } u_{ji} > x_i^{\text{sup}}, \end{cases} \quad (2.172)$$

em que x_i^{inf} e x_i^{sup} são as fronteiras do problema.

Se o valor da função objetivo do vetor tentativa é inferior ao do vetor alvo, o vetor tentativa corresponde ao vetor alvo da geração seguinte. Caso contrário, o vetor alvo continua

sendo o utilizado anteriormente. As etapas de aplicação do algoritmo são repetidas até a obtenção do ótimo ou que o critério de parada seja atingido (PRICE; STORN; LAMPINEN, 2005).

A eficiência do algoritmo de Evolução Diferencial depende dos três parâmetros do algoritmo, que consistem no tamanho da população, no fator de perturbação e na probabilidade de cruzamento. Com o aumento do tamanho da população, há uma maior garantia de que o ótimo global seja encontrado. Apesar disso, o incremento desse parâmetro implica em uma convergência mais lenta. Geralmente, recomenda-se que o valor de N_p esteja entre 5 e 20 vezes o número de variáveis de projeto. Quanto maior o valor do fator de perturbação, maior é a probabilidade de obtenção do ótimo global. Porém, isso também aumenta o custo computacional. O valor recomendado de F , normalmente, encontra-se entre 0,2 e 2. Para boa parte dos problemas, um valor do fator de perturbação próximo a 0,8 é considerado bom. O efeito da probabilidade de cruzamento na eficiência do algoritmo de Evolução Diferencial é inferior ao efeito do fator de perturbação. Por isso, geralmente, valores baixos, próximos a 0,1, e altos, próximos a 0,9, de CR implicam em desempenhos semelhantes do algoritmo (RANGAIAH; SHARMA, 2017).

Com base no vetor a ser modificado, na quantidade de diferenças ponderadas utilizadas e no esquema de cruzamento considerado, podem-se classificar diferentes estratégias do algoritmo de Evolução Diferencial. Para isso, considera-se a notação definida por Storn e Price (1995), segundo a qual essas estratégias podem ser escritas como DE/x/y/z. Nessa notação, a sigla DE representa as letras iniciais do algoritmo utilizado (*Differential Evolution*) e x é o vetor a ser modificado, que pode ser denotado “rand”, caso seja um vetor escolhido aleatoriamente, ou “best”, se este corresponde ao vetor para o qual o valor da função objetivo é o menor dentre todos os vetores que compõem a população. A quantidade de diferenças ponderadas utilizadas é representada por y. O esquema de cruzamento considerado é representado por z. Se o esquema de cruzamento é binomial, z é denotado “bin”. Quando o esquema de cruzamento é exponencial, z é denotado “exp”. A Tabela 2.1 apresenta a representação das estratégias do algoritmo de Evolução Diferencial. Nessa tabela, r_1, r_2, r_3, r_4 e r_5 são índices aleatórios que apresentam valores diferentes entre si e de i . O vetor x_{old} é um vetor da geração anterior, escolhido aleatoriamente (OLIVEIRA, 2006).

O algoritmo de Evolução Diferencial pode ser resumido de acordo com as seguintes etapas (OLIVEIRA, 2006):

- Definir os valores do fator de perturbação e da probabilidade de cruzamento, e

- escolher a estratégia utilizada;
- Gerar uma população inicial aleatória;
 - Selecionar um vetor aleatório ou utilizar o melhor vetor, representado por x_{best} , como o vetor alvo;
 - Escolher três ou cinco vetores aleatórios diferentes entre si, dependendo da estratégia, e gerar o vetor modificado, a partir do processo de mutação;
 - Gerar o vetor tentativa, através do processo de cruzamento;
 - Realizar o processo de seleção e analisar os valores da função objetivo do vetor tentativa e do vetor alvo;
 - Caso o critério de parada seja satisfeito ou o ótimo seja obtido, finalizar o algoritmo. Caso contrário, seguir para a próxima geração e retornar à etapa de escolha de um vetor aleatório ou do melhor vetor.

Tabela 2.1 - Representação das estratégias do algoritmo de Evolução Diferencial (STORN; PRICE, 1995).

Estratégia	Representação	Notação
1	$v_i^{G+1} = x_{best}^G + F(x_{r_2}^G - x_{r_3}^G)$	DE/best/1/exp
2	$v_i^{G+1} = x_{r_1}^G + F(x_{r_2}^G - x_{r_3}^G)$	DE/rand/1/exp
3	$v_i^{G+1} = x_{old}^G + F(x_{best}^G - x_{old}^G) + F(x_{r_3}^G - x_{r_5}^G)$	DE/rand-to-best/2/exp
4	$v_i^{G+1} = x_{best}^G + F(x_{r_1}^G - x_{r_2}^G) + F(x_{r_3}^G - x_{r_5}^G)$	DE/best/2/exp
5	$v_i^{G+1} = x_{r_1}^G + F(x_{r_4}^G - x_{r_2}^G) + F(x_{r_3}^G - x_{r_5}^G)$	DE/rand/2/exp
6	$v_i^{G+1} = x_{best}^G + F(x_{r_2}^G - x_{r_3}^G)$	DE/best/1/bin
7	$v_i^{G+1} = x_{r_1}^G + F(x_{r_2}^G - x_{r_3}^G)$	DE/rand/1/bin
8	$v_i^{G+1} = x_{old}^G + F(x_{best}^G - x_{old}^G) + F(x_{r_3}^G - x_{r_5}^G)$	DE/rand-to-best/2/bin
9	$v_i^{G+1} = x_{best}^G + F(x_{r_1}^G - x_{r_2}^G) + F(x_{r_3}^G - x_{r_5}^G)$	DE/best/2/bin
10	$v_i^{G+1} = x_{r_1}^G + F(x_{r_4}^G - x_{r_2}^G) + F(x_{r_3}^G - x_{r_5}^G)$	DE/rand/2/bin

Este capítulo teve por objetivo apresentar conceitos importantes para o bom entendimento dos problemas a serem abordados neste trabalho. De forma geral, pode-se observar que existem várias vertentes para a caracterização dos fenômenos anômalos, sendo cada uma pertinente para uma dada aplicação. No próximo capítulo será apresentada a metodologia proposta para resolver os problemas alvo desta tese e para a estimação dos parâmetros do modelo considerado.

3 METODOLOGIA

Como descrito anteriormente, o estudo dos diferentes fenômenos encontrados na natureza não é uma tarefa fácil, visto que estes são inerentemente não lineares, o que na prática implica em modelos fenomenológicos com grande complexidade. Como exemplo, pode-se citar o processo de difusão (SILVA, 2006). Em nível macroscópico, o comportamento coletivo das partículas apresenta regularidade, sendo o mesmo representado pela clássica Lei de Fick (PEDRON, 2003). Todavia, em nível microscópico, esta abordagem pode não ser suficiente para representar outros fenômenos que podem ocorrer paralelamente à difusão usual, tais como os fenômenos de atraso de tempo, de retenção de partículas e de aceleração do processo difusivo (SILVA, 2016). Estes fenômenos secundários levam a um processo denominado difusão anômala, no qual o deslocamento quadrático médio não é função linear do tempo, diferentemente do que ocorre no processo tradicional de difusão (PEL, 1995; PEL et al., 1995; PEL; KOPINGA; BROCKEN, 1996).

Matematicamente, o fenômeno anômalo tem sido representado, basicamente, por cinco diferentes abordagens, a saber, uma puramente empírica, uma fundamentada nas tradicionais equações diferenciais parciais em que os termos de transporte são funções das variáveis dependentes (concentração, temperatura, entre outras), por meio de equações diferenciais com derivadas fracionárias, usando equações diferenciais parciais com ordem superior a dois e considerando equações estocásticas (LIMA; LOBATO; AROUCA, 2019; SHLESINGER; ZASLAVSKY; KLAFTER, 1993; KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008; VISWANATHAN et al., 2011; MEROZ; SOKOLOV, 2015).

Especificamente em relação a derivadas fracionárias, estas apresentam natureza não local em comparação com o comportamento local de derivadas inteiras (PODLUBNY, 1999). Tal característica pode ser atrativa para fins da representação dos estudos de caso em que, por exemplo, as Leis de Fick e Fourier não conseguem descrever com exatidão o comportamento de transporte relacionado, conforme apontado por Kumar, Kumar e Rai (2015).

Neste contexto, como um dos objetivos deste trabalho é a representação do fenômeno de transferência de calor em sólidos, considera-se que o termo de condução é representado pela Lei de Fourier com a introdução de um termo de atraso no tempo (CATTANEO, 1958; VERNOTTE, 1958):

$$q(x,t) + \tau \frac{\partial q(x,t)}{\partial t} = -k \nabla T(x,t), \quad (3.1)$$

em que T é a temperatura, t ($t \geq 0$) é o tempo, x ($0 \leq x \leq 1$) é a coordenada espacial, q é o fluxo de calor, k é a condutividade térmica e τ é denominado de fator de atraso no tempo, responsável por capturar as respostas de micro-escala no tempo.

Como também se pretende avaliar a transferência anômala de massa, é considerada uma equação análoga à Equação (3.1), com o objetivo de generalizar a Lei de Fick, conforme a Equação (3.2).

$$J(x,t) + \tau_j \frac{\partial J(x,t)}{\partial t} = -D \nabla C(x,t), \quad (3.2)$$

em que J é o fluxo mássico difusivo, D é o coeficiente de difusão, C é a concentração mássica e τ_j é o tempo de relaxação no fluxo de massa, termo análogo ao fator de atraso no tempo presente na Equação (3.1).

Na prática, se os parâmetros τ e τ_j forem iguais a zero, as Equações (3.1) e (3.2) se reduzem às tradicionais Leis de Fourier e de Fick, respectivamente. Cabe destacar que o uso das equações clássicas implica em uma velocidade de propagação infinita não física em termos da perturbação do sistema em análise (KUMAR; KUMAR; RAI, 2015). Assim, para generalizar o comportamento observado nas Leis de Fourier e de Fick, Cattaneo (1958) e Vernotte (1958) propuseram a inclusão do fator de atraso no tempo.

A partir do que foi apresentado, o modelo fenomenológico abordado nesta tese consiste de uma equação diferencial parcial hiperbólica unidimensional com ordem inteira no tempo (em termos das derivadas primeira e segunda) e com duas derivadas espaciais, sendo uma de primeira ordem e uma com ordem fracionária (resultante da generalização das Leis de Fourier e de Fick). Tal modelo é proposto para representar fenômenos de transferência de calor e de massa transientes unidimensionais, sendo representado matematicamente como:

$$Q_1 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} + Q_2 \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + Q_3 \frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial x^\alpha} + Q_4 \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} + Q_5 u(x,t) + Q_6 = 0, \quad (3.3)$$

em que x e t são as variáveis independentes, u é a variável dependente, α ($1 < \alpha \leq 2$) é a ordem fracionária e Q_i ($i=1, \dots, 6$) representa os coeficientes que ponderam cada um dos termos do modelo apresentado, ou seja, estes definem as características do modelo que serão avaliadas. Genericamente, as condições iniciais e de contorno para o referido modelo são definidas como:

$$u(x,t) = f(x), \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq 1, \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = g(x), \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq 1, \quad (3.5)$$

$$\beta_1 u(x,t) + \beta_2 \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = \beta_3, \quad x = 0, \quad t \geq 0, \quad (3.6)$$

$$\beta_4 u(x,t) + \beta_5 \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = \beta_6, \quad x = 1, \quad t \geq 0, \quad (3.7)$$

em que $f(x)$ e $g(x)$ são funções que definem as condições iniciais e β_i ($i=1, \dots, 6$) são constantes que definem o tipo de condição de contorno considerada.

É importante ressaltar que o modelo apresentado tem uma derivada de ordem não inteira em relação ao termo espacial difusivo. Enfatiza-se que termos fracionários nas derivadas temporais também poderiam ser considerados (WANG et al., 2021). Todavia, ao considerar um modelo com inúmeras contribuições fracionárias deve-se avaliar o real efeito físico da presença de tais derivadas nos perfis obtidos. Também seria possível considerar uma derivada de ordem não inteira em substituição à derivada espacial de primeira ordem. Porém, o termo relacionado a essa derivada não é proveniente da generalização da lei de formação (de Fourier ou de Fick), ao contrário do que ocorre com o termo referente à derivada de segunda ordem em relação ao espaço. Por isso, apenas a contribuição fracionária que substitui a derivada espacial de segunda ordem é considerada nesta contribuição.

Finalmente, destaca-se que no modelo considerado observa-se a presença de um termo que apresenta uma derivada parcial de segunda ordem da variável dependente em relação ao tempo. Esse termo indica que a perturbação do sistema em análise propaga-se como uma onda que possui velocidade finita, ao contrário do que as leis tradicionais implicam (ORDÓÑEZ-MIRANDA; ALVARADO-GIL, 2009).

3.1 Métodos Numéricos Propostos para a Resolução do Modelo Diferencial Parcial Hiperbólico Fracionário de Interesse

Para que os perfis referentes ao modelo descrito anteriormente possam ser analisados do ponto de vista físico, bem como a influência dos parâmetros possa ser avaliada, os mesmos devem ser obtidos. Para essa finalidade, a seguir são apresentadas duas abordagens propostas para a resolução do modelo descrito, a saber, o Método Pseudo-Espectral de Legendre e o Método das Diferenças Finitas Fracionário.

3.1.1 Método Pseudo-Espectral de Legendre

O Método Pseudo-Espectral de Legendre (MPEL) é uma abordagem tradicionalmente usada para resolver problemas de valor de contorno em que todas as derivadas possuem ordem inteira. Em linhas gerais, essa abordagem é baseada na definição de uma função de

aproximação, geralmente uma função polinomial, que pode ser escolhida de acordo com suas propriedades particulares e que a tornam adequada para a análise de determinados tipos de problemas (ESMAEILI; SHAMSI; LUCHKO, 2011). Após a escolha da aproximação polinomial, a solução numérica é avaliada considerando um determinado número de pontos dentro do domínio de interesse (Número de Pontos de Colocação - NPC) (VILLADSEN; STEWART, 1967). Assim, a equação original deve satisfazer a função de aproximação nos pontos considerados, bem como nas condições iniciais e de contorno.

Para obter a solução do modelo diferencial apresentado, é necessário definir uma função de aproximação. Neste caso, para aplicar o MPEL será considerado o polinômio de Lagrange (PL). É importante mencionar que esta escolha deve-se à redução do custo computacional associado à aproximação numérica das derivadas em comparação com outras aproximações (VILLADSEN; STEWART, 1967; VILLADSEN; MICHELSEN, 1978).

Considerando o conjunto de pontos de dados $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots, (X_{NPC+1}, Y_{NPC+1})$, define-se uma fórmula de interpolação que passa por esses pontos (um polinômio de interpolação de NPC -ésimo grau), dada como:

$$Y_{NPC}(X) = \sum_{i=1}^{NPC+1} Y_i l_i(X), \quad (3.8)$$

em que $l_i(X)$ é o polinômio de interpolação de Lagrange definido como:

$$l_i(X) = \prod_{j=1, j \neq i}^{NPC+1} \frac{X - X_j}{X_i - X_j}. \quad (3.9)$$

Se o subscrito i é igual a j , $l_i(X)$ é igual a 1. Caso contrário, $l_i(X)$ é igual a 0. Como essa aproximação é uma função contínua, ela pode ser diferenciada e integrada. Assim, a primeira e a segunda derivadas para uma raiz específica X_j podem ser expressas, respectivamente, como:

$$\frac{dY_{NPC}(X_j)}{dX} = \sum_{i=1}^{NPC+1} Y_i \frac{dl_i(X_j)}{dX}, \quad j = 1, \dots, NPC + 1, \quad (3.10)$$

$$\frac{d^2Y_{NPC}(X_j)}{dX^2} = \sum_{i=1}^{NPC+1} Y_i \frac{d^2l_i(X_j)}{dX^2}, \quad j = 1, \dots, NPC + 1. \quad (3.11)$$

Como o problema original possui duas variáveis independentes, a aproximação polinomial para a variável dependente é definida como:

$$u(x, t) = \sum_{i=1}^{NPC} l_i(x) \phi_i(t), \quad (3.12)$$

em que ϕ_i ($i=1, \dots, NPC+1$) são os coeficientes que devem ser encontrados.

Substituindo essas aproximações no modelo original, as expressões residuais para a variável dependente podem ser calculadas. Esses resíduos devem ser minimizados para cada raiz do polinômio ortogonal calculado. Assim, para cada i -ésima raiz, uma equação diferencial em relação a ϕ é definida. O sistema formado por todas as equações é resolvido por meio de uma estratégia específica.

Finalmente, para a aplicação da aproximação polinomial considerada, faz-se necessário avaliar a mesma nos pontos de colocação, os quais são definidos de acordo com a função ortogonal escolhida (VILLADSEN; STEWART, 1967; VILLADSEN; MICHELSEN, 1978). No caso da aproximação espectral de Legendre, considere $L_N(\eta)$ como sendo o polinômio de Legendre de N -ésima ordem em função da variável independente η , definido como (BECERRA; GALVÃO, 2010):

$$L_N(\eta) = \frac{1}{2^N N!} \frac{d^N (\eta^2 - 1)^N}{d\eta^N}. \quad (3.13)$$

Assim, definindo-se a ordem N , pode-se obter o respectivo polinômio. Por exemplo, os polinômios para N iguais a 0, 1, 2 e 3 são descritos, respectivamente, como:

$$L_0(\eta) = 1, \quad (3.14)$$

$$L_1(\eta) = \eta, \quad (3.15)$$

$$L_2(\eta) = \frac{1}{2}(3\eta^2 - 1), \quad (3.16)$$

$$L_3(\eta) = \frac{1}{2}(5\eta^3 - 3\eta). \quad (3.17)$$

Neste caso, os nós (pontos de colocação) de Legendre-Gauss-Lobatto associados ao polinômio $L_N(\eta)$ são definidos como $[-1 \ \eta_i \ 1]$ ($i=1, 2, \dots, N-1$), em que η_i correspondem às raízes da derivada de $L_N(\eta)$ com relação a η .

Apesar das funções de base empregadas serem polinômios de Lagrange, utilizam-se os pontos de colocação de Legendre-Gauss-Lobatto. Por isso, define-se a aproximação como Pseudo-Espectral de Legendre. Além disso, enfatiza-se que a principal vantagem associada ao uso deste tipo de abordagem é a redução do erro ao se comparar com estratégias em que são considerados pontos igualmente espaçados, bem como a redução do sistema de equações que deve ser resolvido (VILLADSEN; STEWART, 1967; VILLADSEN; MICHELSEN, 1978). Cabe ressaltar que quando se utiliza uma aproximação polinomial em que se consideram pontos igualmente espaçados, pode ocorrer o denominado fenômeno de Runge, que se caracteriza pelo aumento exponencial dos erros. Por outro lado, quando são utilizados pontos de colocação, os erros diminuem exponencialmente (BECERRA; GALVÃO, 2010).

Em resumo, o MPEL empregado para resolver equações diferenciais de ordem inteira é descrito como:

- Definir os parâmetros de entrada: características do modelo matemático de interesse, condições iniciais e de contorno, ordem ($N=NPC$) de aproximação (o polinômio possui coeficientes $NPC+1$) e polinômio ortogonal usado para gerar os pontos de colocação;
- Calcular os pontos de colocação (raízes do polinômio ortogonal);
- Gerar o polinômio ortogonal de Lagrange considerando os pontos de colocação computados anteriormente. Nesse caso, a solução é aproximada pela Equação (3.12). O número de coeficientes desconhecidos é reduzido considerando a avaliação das condições iniciais e de contorno;
- O modelo resultante (equação residual) é resolvido usando uma estratégia numérica particular. Por se tratar de um sistema de equações diferenciais ordinárias no tempo, o mesmo é integrado considerando o Método de Runge-Kutta-Fehlberg (FEHLBERG, 1968);
- Verificar se a solução obtida é sensível com relação ao aumento do grau de aproximação.

Conforme abordado por Villadsen e Michelsen (1978), a qualidade do resultado obtido depende da função de aproximação considerada e do número de pontos de colocação. Assim, aumentar o número de pontos de colocação não significa, necessariamente, melhorar os resultados obtidos.

3.1.2 Método Pseudo-Espectral de Legendre no Contexto Fracionário

Na seção anterior foi revisitado o MPEL para resolver equações diferenciais de ordem inteira. Como o objetivo desta tese é avaliar modelos hiperbólicos fracionários no espaço, a presente seção trata da extensão desta abordagem para o contexto fracionário. Para esta finalidade, o termo que contém a ordem fracionária no espaço deve ser avaliado a partir da definição de derivada fracionária, conforme descrito no Capítulo 2. Assim, considere a derivada de Caputo (CAPUTO; MAINARDI, 1971) para representar o operador fracionário, isto é:

$$\frac{\partial^\alpha u(x, t_j)}{\partial x^\alpha} = \sum_{j=1}^{NPC+1} \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^x (x-\gamma)^{n-\alpha-1} l^n(\gamma) \phi_j(t) d\gamma, \quad j = 1, \dots, NPC + 1, \quad (3.18)$$

em que $n=[\alpha]+1$ e $[\alpha]$ é um operador que representa a parte inteira de α .

A informação contida na Equação (3.18) é substituída no modelo original, permitindo que o modelo fracionário-espacial hiperbólico possa ser avaliado e, conseqüentemente, a solução aproximada possa ser obtida.

É importante mencionar que a escolha deste tipo de derivada fracionária deve-se ao efeito de memória por meio de uma convolução entre a derivada de ordem inteira e uma potência do tempo. Neste caso, as condições iniciais para as equações diferenciais fracionárias podem ser tratadas por analogia com o caso clássico (derivada ordinária) (AGUILAR et al., 2012).

Assim, com base na descrição apresentada para a ordem inteira, o MPEL proposto nesta tese para resolver uma equação diferencial com ordem fracionária no espaço pode ser resumido da seguinte forma:

- Definir os parâmetros de entrada: modelagem matemática do problema de interesse (ordem fracionária, parâmetros do modelo, condições iniciais e de contorno), ordem (NPC) de aproximação (o polinômio tem coeficientes $NPC+1$) e polinômio ortogonal usado para gerar os pontos de colocação;
- Calcular os pontos de colocação (raízes do polinômio ortogonal);
- Gerar o polinômio ortogonal de Lagrange considerando os pontos de colocação computados anteriormente. O número de coeficientes desconhecidos pode ser reduzido via atendimento das condições que caracterizam o problema em análise;
- Substituir a função de aproximação considerando a contribuição fracionária no modelo original, bem como avaliar a mesma considerando os pontos de colocação computados;
- O modelo resultante (equação residual) é resolvido usando uma estratégia numérica particular. Por se tratar de um sistema de equações diferenciais ordinárias no tempo, o mesmo é integrado considerando o Método de Runge-Kutta-Fehlberg (FEHLBERG, 1968);
- Verificar se a solução obtida é sensível com relação ao aumento do grau de aproximação.

Esta modificação no MPEL original permite resolver uma equação diferencial parcial hiperbólica com contribuição fracionária (ou inteira se assim for desejado) no espaço. Neste caso, preservam-se as principais características da estratégia original com ordem inteira. É

importante frisar que, para o problema em análise, um novo parâmetro deve ser analisado durante a etapa de simulação, a saber, a ordem fracionária (parâmetro α). Finalmente, é importante enfatizar dois aspectos. O primeiro diz respeito à resolução do modelo hiperbólico no tempo. A abordagem proposta foi desenvolvida para um modelo com derivada primeira no tempo. Neste caso, esta metodologia é válida, visto que o modelo hiperbólico apresentado pode ser facilmente convertido em um sistema com duas equações diferenciais de primeira ordem no tempo (ou pode ser integrado diretamente considerando um sistema diferencial de segunda ordem no tempo). Assim, a metodologia proposta pode ser aplicada sem a perda de generalidade no que tange o modelo considerado. O segundo aspecto diz respeito à faixa considerada para a coordenada espacial, a saber, $-1 \leq x \leq 1$, devido ao tipo de polinômio ortogonal utilizado pelo MPEL. Este tipo de faixa é interessante para problemas que apresentam simetria em relação à coordenada espacial. Para o caso do modelo apresentado no início deste capítulo, cujo domínio foi definido como sendo $0 \leq x \leq 1$, o mesmo pode ser facilmente convertido em $-1 \leq x \leq 1$, a partir de uma mudança de variável, de modo que a abordagem proposta pode ser aplicada a estudos de caso com outras faixas no que tange a coordenada espacial, sem qualquer tipo de dificuldade.

3.1.3 Método das Diferenças Finitas

O tradicional Método das Diferenças Finitas (MDF) consiste em aproximar as derivadas presentes em uma equação diferencial através da substituição das mesmas por relações obtidas considerando a avaliação da série de Taylor em determinados pontos de referência e truncando os termos para as derivadas de interesse. Neste caso, para apresentar a abordagem proposta, seja o modelo descrito pelas Equações (3.3)-(3.7) e novamente definido como:

$$Q_1 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} + Q_2 \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + Q_3 \frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial x^\alpha} + Q_4 \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} + Q_5 u(x,t) + Q_6 = 0, \quad (3.19)$$

em que x e t são as variáveis independentes, u é a variável dependente, α ($1 < \alpha \leq 2$) é a ordem fracionária e Q_i ($i=1, \dots, 6$) representa os coeficientes que ponderam cada um dos termos do modelo apresentado, ou seja, estes definem as características do modelo que serão avaliadas. As condições iniciais e de contorno para o referido modelo são definidas como:

$$u(x,t) = f(x), \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq 1, \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = g(x), \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq 1, \quad (3.21)$$

$$\beta_1 u(x,t) + \beta_2 \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = \beta_3, \quad x = 0, \quad t \geq 0, \quad (3.22)$$

$$\beta_4 u(x,t) + \beta_5 \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = \beta_6, \quad x = 1, \quad t \geq 0, \quad (3.23)$$

em que $f(x)$ e $g(x)$ são funções que definem as condições iniciais e β_i ($i=1, \dots, 6$) são constantes que definem o tipo de condição de contorno considerada.

Os pontos em que são determinados os valores da variável dependente apresentam coordenadas x_i e t_k , definidas de acordo com as Equações (3.24) e (3.25). Os termos Δx e Δt são determinados pelas Equações (3.26) e (3.27), em que N corresponde ao número de pontos em que o domínio espacial é dividido e M ao número de pontos em que o domínio do tempo é dividido (PINTO; LAGE, 2001).

$$x_i = i\Delta x, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (3.24)$$

$$t_k = k\Delta t, \quad k = 0, 1, 2, \dots, M, \quad (3.25)$$

$$\Delta x = \frac{1}{N}, \quad (3.26)$$

$$\Delta t = \frac{t_{final}}{M}. \quad (3.27)$$

Inicialmente, é apresentada a abordagem para a avaliação de uma equação hiperbólica com derivada espacial em que a ordem é inteira (α é igual a 2 na Equação (3.19)) e denominada aqui por MDF. Posteriormente, apresenta-se a abordagem proposta para resolver o problema fracionário espacial e denominada aqui por Método das Diferenças Finitas Fracionário (MDFF). Para resolver o problema hiperbólico com ordem inteira, podem-se utilizar duas estratégias, a saber, a discretização direta do modelo, considerando uma aproximação de segunda ordem temporal, ou a redução da ordem do modelo em relação ao tempo, através da mudança de variável. Neste trabalho, considera-se a primeira opção. Assim, sejam as aproximações de derivadas temporais e espaciais para o problema hiperbólico com ordem inteira ($\alpha=2$) (PINTO; LAGE, 2001):

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_i^k = \frac{u_i^k - u_i^{k-1}}{\Delta t}, \quad (3.28)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|_i^k = \frac{u_i^k - 2u_i^{k-1} + u_i^{k-2}}{(\Delta t)^2}, \quad (3.29)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i^k = \frac{u_{i+1}^k - u_{i-1}^k}{2\Delta x}, \quad (3.30)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i^k = \frac{u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k}{(\Delta x)^2}. \quad (3.31)$$

Substituindo essas aproximações na equação diferencial parcial, tem-se que:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{Q_3}{(\Delta x)^2} + \frac{Q_4}{2\Delta x} \right] u_{i+1}^k + \left[\frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5 \right] u_i^k + \left[\frac{Q_3}{(\Delta x)^2} - \frac{Q_4}{2\Delta x} \right] u_{i-1}^k = \\ & = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_i^{k-1} - \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} u_i^{k-2} - Q_6. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Pela condição de contorno em $x=0$, pode-se escrever a seguinte equação:

$$\beta_1 u_0^k + \beta_2 \frac{u_1^k - u_{-1}^k}{2\Delta x} = \beta_3. \quad (3.33)$$

Assim, é obtida a seguinte equação para u_{-1}^k :

$$u_{-1}^k = u_1^k + \frac{2\Delta x \beta_1}{\beta_2} u_0^k - \frac{2\Delta x \beta_3}{\beta_2}. \quad (3.34)$$

Substituindo essa expressão na Equação (3.32), obtém-se a seguinte equação de discretização para $i=0$:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5 + \frac{2\beta_1 Q_3}{\beta_2 \Delta x} - \frac{\beta_1 Q_4}{\beta_2} \right] u_0^k + \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} u_1^k = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_0^{k-1} + \\ & - \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} u_0^{k-2} + \frac{2\beta_3 Q_3}{\beta_2 \Delta x} - \frac{\beta_3 Q_4}{\beta_2} - Q_6. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Pela condição de contorno em $x=1$, tem-se que:

$$\beta_4 u_N^k + \beta_5 \frac{u_{N+1}^k - u_{N-1}^k}{2\Delta x} = \beta_6. \quad (3.36)$$

Logo, obtém-se a seguinte expressão:

$$u_{N+1}^k = u_{N-1}^k - \frac{2\Delta x \beta_4}{\beta_5} u_N^k + \frac{2\Delta x \beta_6}{\beta_5}. \quad (3.37)$$

Substituindo essa expressão na Equação (3.32), obtém-se a seguinte equação de discretização para $i=N$:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5 - \frac{2\beta_4 Q_3}{\beta_5 \Delta x} - \frac{\beta_4 Q_4}{\beta_5} \right] u_N^k + \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} u_{N-1}^k = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_N^{k-1} + \\ & - \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} u_N^{k-2} - \frac{2\beta_6 Q_3}{\beta_5 \Delta x} - \frac{\beta_6 Q_4}{\beta_5} - Q_6. \end{aligned} \quad (3.38)$$

De acordo com a primeira condição inicial, tem-se que:

$$u_i^0 = f(x). \quad (3.39)$$

As Equações (3.32), (3.35) e (3.38) são válidas para valores de k entre zero e M . Porém, fisicamente não existem valores de u_i^{-1} . Logo, é necessária a utilização da segunda condição inicial para se obter as equações de discretização para k equivalente a um. Dessa forma, tem-se que:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_i^{k=0} = \frac{u_i^1 - u_i^{-1}}{2\Delta t} = g(x). \quad (3.40)$$

Logo, obtém-se a seguinte expressão para u_i^{-1} :

$$u_i^{-1} = u_i^1 - 2g(x)\Delta t. \quad (3.41)$$

Fazendo $k=1$ e substituindo a relação entre u_i^1 e u_i^{-1} nas Equações (3.32), (3.35) e (3.38), são obtidas as equações de discretização para o primeiro passo no tempo.

$$\begin{aligned} & \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5 + \frac{2\beta_1 Q_3}{\beta_2 \Delta x} - \frac{\beta_1 Q_4}{\beta_2} \right] u_0^1 + \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} u_1^1 = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_0^0 + \\ & + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} + \frac{2\beta_3 Q_3}{\beta_2 \Delta x} - \frac{\beta_3 Q_4}{\beta_2} - Q_6, \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} & \left[\frac{Q_3}{(\Delta x)^2} + \frac{Q_4}{2\Delta x} \right] u_{i+1}^1 + \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5 \right] u_i^1 + \left[\frac{Q_3}{(\Delta x)^2} - \frac{Q_4}{2\Delta x} \right] u_{i-1}^1 = \\ & = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_i^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - Q_6, \end{aligned} \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} & \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5 - \frac{2\beta_4 Q_3}{\beta_5 \Delta x} - \frac{\beta_4 Q_4}{\beta_5} \right] u_N^1 + \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} u_{N-1}^1 = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_N^0 + \\ & + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - \frac{2\beta_6 Q_3}{\beta_5 \Delta x} - \frac{\beta_6 Q_4}{\beta_5} - Q_6. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Assim, são obtidos dois sistemas de equações para a determinação dos valores da variável dependente. Um sistema é composto pelas equações de discretização para k igual a um e outro pelas equações de discretização para os demais valores de k . Esses sistemas de equações podem ser escritos na forma matricial:

$$A u_i^k = B. \quad (3.45)$$

Na Equação (3.45), A representa a matriz de coeficientes, u_i^k o vetor de incógnitas e B o vetor dos termos não homogêneos. Para o primeiro passo no tempo, os termos presentes nessa equação são dados por:

$$A = \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b' & a' & b'' & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b' & a' & b'' & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & b' & a' & b'' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & b & a'' \end{bmatrix}, \quad (3.46)$$

$$u_i^k = \begin{bmatrix} u_0^1 \\ u_1^1 \\ u_2^1 \\ \vdots \\ u_{N-1}^1 \\ u_N^1 \end{bmatrix}, \quad (3.47)$$

$$B = \begin{bmatrix} du_0^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} + \frac{2\beta_3 Q_3}{\beta_2 \Delta x} - \frac{\beta_3 Q_4}{\beta_2} - Q_6 \\ du_1^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - Q_6 \\ du_2^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - Q_6 \\ \vdots \\ du_{N-1}^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - Q_6 \\ du_N^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - \frac{2\beta_6 Q_3}{\beta_5 \Delta x} - \frac{\beta_6 Q_4}{\beta_5} - Q_6 \end{bmatrix}. \quad (3.48)$$

Para os demais passos no tempo, a matriz A e os vetores u_i^k e B são dados por:

$$A = \begin{bmatrix} c & b & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b' & c' & b'' & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b' & c' & b'' & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & b' & c' & b'' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & b & c'' \end{bmatrix}, \quad (3.49)$$

$$u_i^k = \begin{bmatrix} u_0^k \\ u_1^k \\ u_2^k \\ \vdots \\ u_{N-1}^k \\ u_N^k \end{bmatrix}, \quad (3.50)$$

$$B = \begin{bmatrix} du_0^{k-1} + eu_0^{k-2} + \frac{2\beta_3 Q_3}{\beta_2 \Delta x} - \frac{\beta_3 Q_4}{\beta_2} - Q_6 \\ du_1^{k-1} + eu_1^{k-2} - Q_6 \\ du_2^{k-1} + eu_2^{k-2} - Q_6 \\ \vdots \\ du_{N-1}^{k-1} + eu_{N-1}^{k-2} - Q_6 \\ du_N^{k-1} + eu_N^{k-2} - \frac{2\beta_6 Q_3}{\beta_5 \Delta x} - \frac{\beta_6 Q_4}{\beta_5} - Q_6 \end{bmatrix}. \quad (3.51)$$

Nas equações que definem a matriz A e os vetores u_i^k e B , tem-se que:

$$a = \frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5 + \frac{2\beta_1 Q_3}{\beta_2 \Delta x} - \frac{\beta_1 Q_4}{\beta_2}, \quad (3.52)$$

$$a' = \frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5, \quad (3.53)$$

$$a'' = \frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5 - \frac{2\beta_4 Q_3}{\beta_5 \Delta x} - \frac{\beta_4 Q_4}{\beta_5}, \quad (3.54)$$

$$b = \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2}, \quad (3.55)$$

$$b' = \frac{Q_3}{(\Delta x)^2} - \frac{Q_4}{2\Delta x}, \quad (3.56)$$

$$b'' = \frac{Q_3}{(\Delta x)^2} + \frac{Q_4}{2\Delta x}, \quad (3.57)$$

$$c = \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5 + \frac{2\beta_1 Q_3}{\beta_2 \Delta x} - \frac{\beta_1 Q_4}{\beta_2}, \quad (3.58)$$

$$c' = \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5, \quad (3.59)$$

$$c'' = \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} - \frac{2Q_3}{(\Delta x)^2} + Q_5 - \frac{2\beta_4 Q_3}{\beta_5 \Delta x} - \frac{\beta_4 Q_4}{\beta_5}, \quad (3.60)$$

$$d = \frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t}, \quad (3.61)$$

$$e = -\frac{Q_1}{(\Delta t)^2}. \quad (3.62)$$

O sistema linear descrito apresenta uma característica particular, a saber, o mesmo é tri-diagonal. Neste caso, tem-se uma matriz quadrada onde apenas os elementos da diagonal principal e os que estão acima e abaixo dela são não nulos. Para este tipo de estrutura, é um desperdício computacional armazenar os zeros presentes nesta matriz, já que eles nunca serão utilizados para a solução do sistema. Em resumo, para resolver problemas com esta

característica considera-se o algoritmo de Thomas (THOMAS, 1949), o qual requer um custo computacional bem inferior aos tradicionais métodos de eliminação, além de ser uma técnica analítica e não numérica.

3.1.4 Método das Diferenças Finitas no Contexto Fracionário

Após ser apresentado o MDF para o termo difusivo com ordem inteira, nesta seção é apresentada a extensão deste método para o contexto fracionário. Para essa finalidade considera-se a contribuição fracionária no espaço representada pela derivada fracionária de Grünwald-Letnikov e as expressões tradicionais para aproximar as derivadas parciais com ordem inteira presentes na Equação (3.19) (PINTO; LAGE, 2001; SOUSA, 2012):

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|_i^k = \frac{u_i^k - 2u_i^{k-1} + u_i^{k-2}}{(\Delta t)^2}, \quad (3.63)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_i^k = \frac{u_i^k - u_i^{k-1}}{\Delta t}, \quad (3.64)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i^k = \frac{u_{i+1}^k - u_{i-1}^k}{2\Delta x}, \quad (3.65)$$

$$\left. \frac{\partial^\alpha u}{\partial x^\alpha} \right|_i^k = \frac{1}{(\Delta x)^\alpha} \sum_{j=0}^i w_j u_{i+1-j}^k. \quad (3.66)$$

Na Equação (3.66), w_j corresponde a uma função cujo valor é igual à unidade para j equivalente a zero. Para os demais valores de j o valor dessa função é determinado através de uma relação de recorrência, dada pela Equação (3.67).

$$w_j = \left(1 - \frac{\alpha + 1}{j}\right) w_{j-1}. \quad (3.67)$$

Substituindo essas aproximações na equação diferencial parcial, obtém-se a Equação (3.68). O termo f é dado pela Equação (3.69).

$$\left[f + \frac{\mathcal{Q}_4}{2\Delta x} \right] u_{i+1}^k + \left[\frac{\mathcal{Q}_1}{(\Delta t)^2} + \frac{\mathcal{Q}_2}{\Delta t} + \mathcal{Q}_5 \right] u_i^k - \frac{\mathcal{Q}_4}{2\Delta x} u_{i-1}^k + f \sum_{j=1}^i w_j u_{i+1-j}^k = \left[\frac{2\mathcal{Q}_1}{(\Delta t)^2} + \frac{\mathcal{Q}_2}{\Delta t} \right] u_i^{k-1} + \left[-\frac{\mathcal{Q}_1}{(\Delta t)^2} u_i^{k-2} - \mathcal{Q}_6 \right] \quad (3.68)$$

$$f = \frac{\mathcal{Q}_3}{(\Delta x)^\alpha}. \quad (3.69)$$

Segundo a condição de contorno em $x=0$, tem-se que:

$$\beta_1 u_0^k + \beta_2 \frac{u_1^k - u_{-1}^k}{2\Delta x} = \beta_3. \quad (3.70)$$

Logo, obtém-se a seguinte equação para u_{-1}^k :

$$u_{-1}^k = u_1^k + \frac{2\Delta x \beta_1}{\beta_2} u_0^k - \frac{2\Delta x \beta_3}{\beta_2}. \quad (3.71)$$

Fazendo-se $i=0$ na Equação (3.68), tem-se que:

$$\left[\frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5 - \frac{\beta_1 Q_4}{\beta_2} \right] u_0^k + f u_1^k = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_0^{k-1} - \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} u_0^{k-2} - \frac{\beta_3 Q_4}{\beta_2} - Q_6. \quad (3.72)$$

De acordo com condição de contorno em $x=1$, tem-se que:

$$\beta_4 u_N^k + \beta_5 \frac{u_{N+1}^k - u_{N-1}^k}{2\Delta x} = \beta_6. \quad (3.73)$$

Assim, pode ser obtida a seguinte expressão:

$$u_{N+1}^k = u_{N-1}^k - \frac{2\Delta x \beta_4}{\beta_5} u_N^k + \frac{2\Delta x \beta_6}{\beta_5}. \quad (3.74)$$

Substituindo essa expressão na Equação (3.68), obtém-se a seguinte equação de discretização para $i=N$:

$$f u_{N-1}^k + \left[\frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5 - \frac{2\Delta x f \beta_4}{\beta_5} - \frac{\beta_4 Q_4}{\beta_5} \right] u_N^k + f \sum_{j=1}^N w_j u_{N+1-j}^k = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_N^{k-1} + \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} u_N^{k-2} - \frac{2\Delta x f \beta_6}{\beta_5} - \frac{\beta_6 Q_4}{\beta_5} - Q_6. \quad (3.75)$$

Segundo a primeira condição inicial, tem-se que:

$$u_i^0 = f(x). \quad (3.76)$$

Neste caso, também há a necessidade da aplicação da segunda condição inicial, para que sejam obtidas as equações de discretização para o primeiro passo no tempo. Dessa forma, tem-se que:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_i^{k=0} = \frac{u_i^1 - u_i^{-1}}{2\Delta t} = g(x). \quad (3.77)$$

Logo, obtém-se a seguinte expressão para u_i^{-1} :

$$u_i^{-1} = u_i^1 - 2g(x)\Delta t. \quad (3.78)$$

Igualando k à unidade e realizando a substituição dessa relação nas Equações (3.68), (3.72) e (3.75), obtém-se as equações de discretização para o primeiro passo no tempo.

$$\left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5 - \frac{\beta_1 Q_4}{\beta_2} \right] u_0^1 + f u_1^1 = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_0^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - \frac{\beta_3 Q_4}{\beta_2} - Q_6, \quad (3.79)$$

$$\left[f + \frac{Q_4}{2\Delta x} \right] u_{i+1}^1 + \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5 \right] u_i^1 - \frac{Q_4}{2\Delta x} u_{i-1}^1 + f \sum_{j=1}^i w_j u_{i+1-j}^1 = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_i^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - Q_6, \quad (3.80)$$

$$f u_{N-1}^1 + \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5 - \frac{2\Delta x f \beta_4}{\beta_5} - \frac{\beta_4 Q_4}{\beta_5} \right] u_N^1 + f \sum_{j=1}^N w_j u_{N+1-j}^1 = \left[\frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} \right] u_N^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - \frac{2\Delta x f \beta_6}{\beta_5} - \frac{\beta_6 Q_4}{\beta_5} - Q_6. \quad (3.81)$$

Os valores da variável dependente também são determinados por dois sistemas de equações diferentes, sendo um sistema válido para k igual a um e outro para os demais valores de k . Esses sistemas de equações também podem ser escritos na forma matricial:

$$A u_i^k = B. \quad (3.82)$$

Nesse caso, como há um somatório nas equações de discretização, os elementos da matriz A são diferentes do caso em que se considera a ordem inteira da derivada da variável dependente em relação à variável espacial. A seguir são apresentados os termos que compõem os dois sistemas de equações, considerando que N equivale a 6.

Para o primeiro passo no tempo, a matriz A e os vetores u_i^k e B são dados por:

$$A = \begin{bmatrix} g & f & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ m & g' + f w_1 & l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m + f w_2 & g' + f w_1 & l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f w_3 & m + f w_2 & g' + f w_1 & l & 0 & 0 \\ 0 & f w_4 & f w_3 & m + f w_2 & g' + f w_1 & l & 0 \\ 0 & f w_5 & f w_4 & f w_3 & m + f w_2 & g' + f w_1 & l \\ 0 & f w_6 & f w_5 & f w_4 & f w_3 & f + f w_2 & g'' + f w_1 \end{bmatrix}, \quad (3.83)$$

$$u_i^k = \begin{bmatrix} u_0^1 \\ u_1^1 \\ u_2^1 \\ u_3^1 \\ u_4^1 \\ u_5^1 \\ u_6^1 \end{bmatrix}, \quad (3.84)$$

$$B = \begin{bmatrix} du_0^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - \frac{\beta_3 Q_4}{\beta_2} - Q_6 \\ du_1^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - Q_6 \\ du_2^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - Q_6 \\ du_3^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - Q_6 \\ du_4^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - Q_6 \\ du_5^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - Q_6 \\ du_6^0 + \frac{2g(x)Q_1}{\Delta t} - \frac{2\Delta x f \beta_6}{\beta_5} - \frac{\beta_6 Q_4}{\beta_5} - Q_6 \end{bmatrix}. \quad (3.85)$$

Para os demais passos no tempo, os termos presentes na Equação (3.82) são dados por:

$$A = \begin{bmatrix} p & f & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ m & p' + fw_1 & l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m + fw_2 & p' + fw_1 & l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & fw_3 & m + fw_2 & p' + fw_1 & l & 0 & 0 \\ 0 & fw_4 & fw_3 & m + fw_2 & p' + fw_1 & l & 0 \\ 0 & fw_5 & fw_4 & fw_3 & m + fw_2 & p' + fw_1 & l \\ 0 & fw_6 & fw_5 & fw_4 & fw_3 & f + fw_2 & p'' + fw_1 \end{bmatrix}, \quad (3.86)$$

$$u_i^k = \begin{bmatrix} u_0^k \\ u_1^k \\ u_2^k \\ u_3^k \\ u_4^k \\ u_5^k \\ u_6^k \end{bmatrix}, \quad (3.87)$$

$$B = \begin{bmatrix} du_0^{k-1} + eu_0^{k-2} - \frac{\beta_3 Q_4}{\beta_2} - Q_6 \\ du_1^{k-1} + eu_1^{k-2} - Q_6 \\ du_2^{k-1} + eu_2^{k-2} - Q_6 \\ du_3^{k-1} + eu_3^{k-2} - Q_6 \\ du_4^{k-1} + eu_4^{k-2} - Q_6 \\ du_5^{k-1} + eu_5^{k-2} - Q_6 \\ du_6^{k-1} + eu_6^{k-2} - \frac{2\Delta x f \beta_6}{\beta_5} - \frac{\beta_6 Q_4}{\beta_5} - Q_6 \end{bmatrix}. \quad (3.88)$$

Os termos presentes nas equações que definem as matrizes A e os vetores u_i^k e B são dados pelas Equações (3.89) a (3.98).

$$g = \frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5 - \frac{\beta_1 Q_4}{\beta_2}, \quad (3.89)$$

$$g' = \frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5, \quad (3.90)$$

$$g'' = \frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5 - \frac{2\Delta x f \beta_4}{\beta_5} - \frac{\beta_4 Q_4}{\beta_5}, \quad (3.91)$$

$$l = f + \frac{Q_4}{2\Delta x}, \quad (3.92)$$

$$m = -\frac{Q_4}{2\Delta x}, \quad (3.93)$$

$$p = \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5 - \frac{\beta_1 Q_4}{\beta_2}, \quad (3.94)$$

$$p' = \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5, \quad (3.95)$$

$$p'' = \frac{Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t} + Q_5 - \frac{2\Delta x f \beta_4}{\beta_5} - \frac{\beta_4 Q_4}{\beta_5}, \quad (3.96)$$

$$d = \frac{2Q_1}{(\Delta t)^2} + \frac{Q_2}{\Delta t}, \quad (3.97)$$

$$e = -\frac{Q_1}{(\Delta t)^2}. \quad (3.98)$$

Neste caso, diferentemente do modelo discretizado com derivada inteira, aqui se tem um sistema de equações lineares que não é tri-diagonal. Assim, o mesmo é resolvido considerando o Método da Decomposição LU (CAMPOS FILHO, 2018).

3.2 Determinação de Parâmetros via Formulação e Resolução de Problemas Inversos

Um dos objetivos deste trabalho é a determinação dos parâmetros do modelo diferencial parcial hiperbólico fracionário espacial. Para esta finalidade é necessário formular e resolver o denominado problema inverso. Em linhas gerais, neste tipo de problema deseja-se minimizar um funcional denominado de função objetivo, que é definida como sendo o somatório da diferença entre os pontos experimentais e preditos pelo modelo proposto. Assim, o problema inverso é sujeito ao modelo, bem como às restrições laterais que definem o domínio de cada variável de projeto que se deseja encontrar. Após definir o problema deve-se empregar um otimizador, que neste caso será o algoritmo de Evolução Diferencial, para a obtenção dos parâmetros via minimização da função objetivo. Cabe enfatizar que a escolha

deste algoritmo de otimização deve-se ao sucesso e número de aplicações desta estratégia em problemas em diferentes campos da ciência, o que demonstra a sua confiabilidade e robustez.

O procedimento geral é apresentado no fluxograma a seguir e descrito de acordo com os seguintes passos.

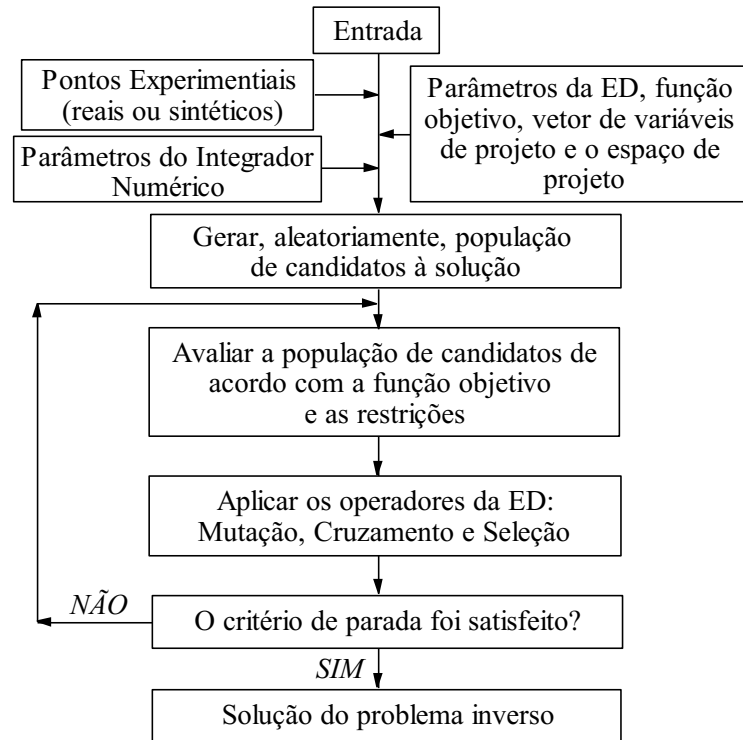


Figura 3.1 - Representação esquemática da estrutura do problema inverso proposto.

1º Passo: Definir os parâmetros de entrada do modelo (informações que são conhecidas, tais como tipo de modelo diferencial parcial (inteiro ou fracionário), condições inicial e de contorno, parâmetros termo-físicos conhecidos, geometria, entre outros); do método numérico para a integração do modelo matemático (número de pontos de discretização nas direções temporal e espacial e solver usado para resolver o problema discretizado); do algoritmo de Evolução Diferencial (vetor de variáveis de projeto, espaço de projeto (domínio de cada variável de projeto), tamanho da população, probabilidade de cruzamento, taxa de perturbação, número de gerações e estratégia) e os pontos experimentais (reais ou sintéticos);

2º Passo: Gerar, a partir dos limites estabelecidos para cada variável de projeto e do número de indivíduos, uma população inicial de forma aleatória;

3º Passo: Aplicar os operadores de mutação e de cruzamento do algoritmo de Evolução Diferencial, de forma a gerar uma nova população com candidatos em potencial a solução do problema de otimização;

4º Passo: Avaliar, para cada novo candidato gerado, a função objetivo;

5º Passo: Aplicar o operador de seleção do algoritmo de Evolução Diferencial para obter a população corrente. Esta, geralmente, é formada por candidatos pertencentes às duas populações (corrente e a gerada pela aplicação dos operadores);

6º Passo: Se o critério de parada adotado for satisfeito, apresentar os parâmetros estimados, o valor da função objetivo e o custo computacional (tempo de processamento e número de chamadas da função objetivo). Caso contrário, voltar para o terceiro passo. Geralmente, o critério de parada utilizado é o número máximo de gerações, definido pelo usuário.

É importante ressaltar que nem sempre existem pontos experimentais à disposição. Neste caso, podem-se gerar pontos "experimentais" denominados de sintéticos para a formulação do problema inverso. Estes consistem da associação entre os resultados obtidos via simulação do modelo (considerando que todas as informações necessárias para a simulação são conhecidas) e um ruído (para representar os erros que são inerentes em todo procedimento experimental real). De forma geral, o ruído é definido como sendo o produto entre o desvio padrão esperado para o experimento e um aleatório compreendido entre -1 e 1.

3.3 Abordagem para Corrigir Dimensionalmente o Termo Difusivo em Modelos Diferenciais Fracionários

Como mencionado e discutido no capítulo anterior, os modelos fenomenológicos fracionários não são dimensionalmente consistentes. Neste cenário, faz-se necessário corrigir os termos diferenciais para que estes modelos sejam válidos do ponto de vista dimensional. No presente trabalho é considerada a metodologia empregada por Lima, Lobato e Steffen Jr (2021b) para a correção do operador temporal. Como o modelo proposto neste trabalho é fracionário no espaço, a abordagem apresentada por Lima, Lobato e Steffen Jr (2021b) é adaptada para o operador espacial.

Do ponto de vista físico, o operador derivativo espacial inteiro d^2/dx^2 tem dimensão [espaço⁻²]. Já o operador derivativo espacial fracionário d^α/dx^α ($1 < \alpha \leq 2$) tem dimensão [espaço^{- α}]. Neste caso, para corrigir este termo diferencial um parâmetro auxiliar σ é introduzido no operador difusivo fracionário como segue:

$$\frac{d^2}{dx^2} \rightarrow \frac{1}{\sigma^{2-\alpha}} \frac{d^\alpha}{dx^\alpha}, \quad 1 < \alpha \leq 2, \quad (3.99)$$

em que σ é um parâmetro auxiliar.

Assim, se α for igual a 2, esse operador fracionário torna-se um operador de ordem inteira. Além disso, como o parâmetro σ tem unidade de espaço, o fator $\sigma^{-(2-\alpha)}$ corrige a unidade do termo diferencial fracionário, de forma que o mesmo sempre terá a unidade do operador d^2/dx^2 , garantindo a consistência dimensional do modelo físico. Finalmente, para que o parâmetro σ não influencie os perfis, visto que este é apenas um fator de correção, o mesmo pode ser considerado como sendo sempre igual à unidade.

No próximo capítulo, as metodologias propostas são testadas a uma série de estudos de caso que possuem solução analítica, de forma a avaliar a qualidade da solução encontrada em função dos parâmetros considerados em cada abordagem. Além disso, também são formulados e resolvidos problemas inversos considerando pontos experimentais e sintéticos para a determinação dos parâmetros em problemas diferenciais hiperbólicos fracionários no espaço.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O presente capítulo tem como objetivos: *i*) apresentar os resultados obtidos considerando as metodologias propostas, a saber, o Método Pseudo-Espectral de Legendre (MPEL) e o Método das Diferenças Finitas Fracionário (MDFF), em uma série de estudos de caso que apresentam solução analítica conhecida; *ii*) avaliar a influência do número de pontos de colocação (NPC), de discretização nas direções de x (n_x) e de t (n_t), da ordem fracionária (α) e do fator de atraso no tempo (τ) no valor do somatório dos erros absolutos (Ξ) computados em relação às respectivas soluções analíticas; e *iii*) formular e resolver problemas inversos considerando pontos experimentais sintéticos e reais utilizando modelos diferenciais parabólicos e hiperbólicos.

De forma geral, os estudos de caso analisados nesta tese podem ser agrupados em duas classes, a saber, a de simulação e a de problemas inversos, conforme ilustrado no fluxograma a seguir. Nesta figura também é possível observar os tipos de modelos matemáticos considerados para fins de avaliação do MPEL e do MDFF.

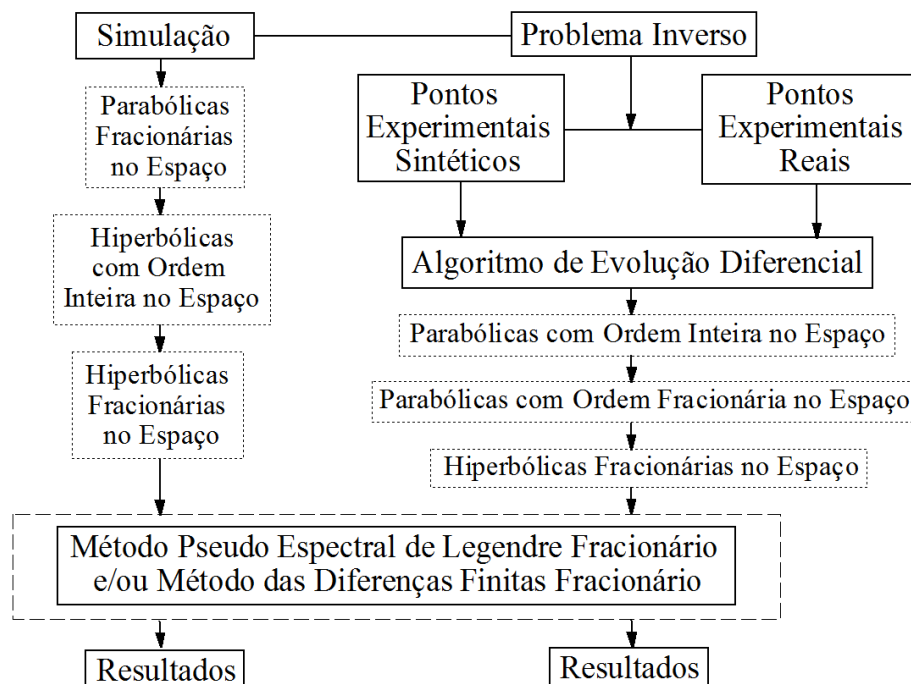


Figura 4.1 - Estruturação geral dos estudos de caso analisados nesta tese.

Os itens *i* e *ii* apresentados no início do capítulo consistem na resolução de problemas diretos, visto que todas as informações necessárias para a simulação são conhecidas. Assim, para o bom entendimento dos resultados apresentados nas seções de 4.1 a 4.3 faz-se necessário destacar as seguintes informações:

- Para a simulação de cada estudo de caso consideram-se 100 pontos interpolados e igualmente espaçados, de forma que o erro possa ser computado;
- O tempo de processamento (TP) é estimado utilizando um computador Notebook Intel Core i5-6200 com 8 GB de memória. É importante destacar que os valores apresentados de TP são valores médios;
- Cada uma das abordagens propostas é implementada em uma linguagem de programação diferente, a saber, o MPEL no Maple 2013 e o MDFF no Scilab 6. Isto se deve às características particulares de cada linguagem de programação, facilitando a implementação de cada uma das rotinas em uma dada plataforma do que em outra;
- Conforme descrito anteriormente, os sistemas de equações diferenciais resultantes da aplicação do MPEL tradicional e do MPEL estendido para o contexto fracionário são resolvidos considerando o Método de Runge-Kutta-Fehlberg (FEHLBERG, 1968), empregando n_t pontos de discretização no tempo, bem como NPC pontos de colocação. Os sistemas de equações algébricas obtidos pela aplicação do MDFF para os problemas nos quais α equivale a 2 são resolvidos considerando o algoritmo de Thomas (THOMAS, 1949). No caso dos problemas em que o valor de α não é inteiro, para a resolução dos sistemas resultantes da aplicação do MDFF considera-se o Método da Decomposição LU (CAMPOS FILHO, 2018);
- Com o objetivo de avaliar cada uma das abordagens, problemas puramente fracionários e puramente hiperbólicos são considerados separadamente. Assim, pode-se verificar se a metodologia proposta é capaz de resolver problemas particulares em relação ao modelo diferencial parcial hiperbólico fracionário;
- Por fim, é estudado um problema hiperbólico fracionário para fins de aplicação do MPEL e do MDFF em um estudo de caso de interesse nesta contribuição.

4.1 Equações Diferenciais Parciais Parabólicas Fracionárias no Espaço

Nesta seção, são apresentados os resultados obtidos considerando problemas fracionários na coordenada espacial e a metodologia proposta.

4.1.1 Estudo de Caso 1

Considere a seguinte equação diferencial parcial fracionária proposta e estudada por Salehi, Darvishi e Schiesser (2018):

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{24x^\alpha}{\Gamma(5+\alpha)} \frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial x^\alpha} - 2u(x,t), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0, \quad (4.1)$$

em que u é a variável dependente e x e t representam as variáveis independentes espacial e temporal, respectivamente. Neste caso, são consideradas as condições inicial e de contorno dadas pelas Equações (4.2), (4.3) e (4.4). A solução analítica é apresentada na Equação (4.5).

$$u(x,0) = x^{4+\alpha}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (4.2)$$

$$u(0,t) = 0, \quad t > 0, \quad (4.3)$$

$$u(1,t) = e^{-t}, \quad t > 0, \quad (4.4)$$

$$u(x,t) = e^{-t} x^{4+\alpha}. \quad (4.5)$$

A Tabela 4.1 apresenta o somatório do erro absoluto (Ξ) e o tempo de processamento (TP) obtidos pelas metodologias propostas para o primeiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores de α e malhas distintas, sendo as soluções analíticas e numéricas avaliadas em t igual à unidade.

Tabela 4.1 - Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o primeiro estudo de caso fracionário, em termos do número de pontos de discretização e da ordem fracionária.

Método Pseudo-Espectral de Legendre						
$NPC \times n_t$	$\alpha = 1,25$	$\alpha = 1,5$	$\alpha = 1,75$	$\alpha = 1,95$	$\alpha = 2$	TP (s)
2×100	$2,466 \times 10^{-2}$	$1,715 \times 10^{-2}$	$6,058 \times 10^{-3}$	$8,845 \times 10^{-3}$	$1,154 \times 10^{-2}$	0,213
3×100	$4,933 \times 10^{-3}$	$3,713 \times 10^{-3}$	$3,224 \times 10^{-3}$	$5,219 \times 10^{-3}$	$5,824 \times 10^{-3}$	0,259
4×100	$1,611 \times 10^{-4}$	$2,501 \times 10^{-4}$	$3,465 \times 10^{-4}$	$3,628 \times 10^{-4}$	$3,575 \times 10^{-4}$	0,384
5×100	$1,418 \times 10^{-5}$	$1,481 \times 10^{-5}$	$9,134 \times 10^{-6}$	$8,456 \times 10^{-7}$	$4,647 \times 10^{-7}$	1,247
6×100	$4,32 \times 10^{-6}$	$3,085 \times 10^{-6}$	$2,016 \times 10^{-6}$	$2,273 \times 10^{-6}$	$1,498 \times 10^{-6}$	22,015
Método das Diferenças Finitas Fracionário						
$n_x \times n_t$	$\alpha = 1,25$	$\alpha = 1,5$	$\alpha = 1,75$	$\alpha = 1,95$	$\alpha = 2$	TP (s)
50×50	$1,323 \times 10^{-3}$	$8,946 \times 10^{-4}$	$6,419 \times 10^{-4}$	$5,472 \times 10^{-4}$	$5,305 \times 10^{-4}$	2,575
50×100	$1,271 \times 10^{-3}$	$7,777 \times 10^{-4}$	$4,34 \times 10^{-4}$	$2,786 \times 10^{-4}$	$2,653 \times 10^{-4}$	4,376
100×50	$4,145 \times 10^{-4}$	$3,457 \times 10^{-4}$	$2,991 \times 10^{-4}$	$2,71 \times 10^{-4}$	$2,658 \times 10^{-4}$	6,927
100×100	$3,31 \times 10^{-4}$	$2,226 \times 10^{-4}$	$1,603 \times 10^{-4}$	$1,365 \times 10^{-4}$	$1,325 \times 10^{-4}$	11,886
150×150	$1,472 \times 10^{-4}$	$9,88 \times 10^{-5}$	$7,13 \times 10^{-5}$	$6,06 \times 10^{-5}$	$5,88 \times 10^{-5}$	30,187

Nesta tabela pode-se observar que os erros obtidos pelo MPEL são maiores do que os estimados pelo MDFF, quando se consideram dois e três pontos de colocação. Para NPC igual a 4, o MPEL implica em erros de mesma ordem de grandeza que o MDFF, quando são utilizados cem pontos de discretização na direção de x e cinquenta pontos de discretização na direção de t . Quando se consideram cinco e seis pontos de colocação, verifica-se o comportamento contrário do observado para as duas primeiras quantidades de pontos de colocação. Neste caso, são obtidos os menores valores dos erros absolutos.

Observa-se que, para os três primeiros valores de ordem fracionária, à medida que o valor de NPC aumenta, os erros gerados pelo MPEL diminuem. Quando se eleva a quantidade de pontos de colocação de cinco para seis e para as ordens fracionárias iguais a 1,95 e 2, pode-se verificar o aumento dos erros. Isso pode estar relacionado à precisão dos resultados interpolados para o cálculo do erro. Verifica-se a elevação do tempo de processamento à medida que o número de pontos de colocação aumenta, conforme era esperado, visto que a dimensão do sistema a ser integrado eleva-se.

No caso do MDFF, pode ser observado que o aumento da quantidade de pontos de discretização nas duas direções causa a elevação do tempo de processamento e a diminuição dos erros absolutos. Esse resultado também está de acordo com o esperado. Verifica-se que os tempos de processamento são significativamente menores quando se utiliza o MPEL.

Salehi, Darvishi e Schiesser (2018) utilizaram o Método das Linhas e Splines para resolver este estudo de caso. O somatório dos erros absolutos obtido por esse método encontra-se na ordem de 10^{-5} . Assim, pode-se dizer que, para o MDFF, quando se consideram cento e cinquenta pontos de discretização nas direções de x e t , são obtidos resultados tão precisos quanto os obtidos por estes autores para α entre 1,5 e 2. Observa-se que quando são considerados cinco e seis pontos de colocação os resultados obtidos pelo MPEL apresentam uma qualidade maior do que os gerados pelo método utilizado por Salehi, Darvishi e Schiesser (2018). No referido trabalho, não é apresentado o tempo de processamento do método, sendo impossível comparar com os estimados nesta tese.

A Figura 4.2 apresenta as soluções analíticas e numéricas considerando o MPEL para cinco pontos de colocação, o tempo final igual a um e diferentes valores da ordem fracionária. Nesta figura pode-se observar que os valores da variável dependente aumentam à medida que o valor da ordem fracionária diminui. Verifica-se uma grande proximidade entre as curvas correspondentes às soluções obtidas para os valores da ordem fracionária equivalentes a 1,95 e 2. Isso demonstra, para este estudo de caso, que o valor de α não tem grande influência nos perfis obtidos para esses dois valores da ordem não inteira. Pode-se verificar que, para todos os valores da ordem fracionária, as soluções numéricas são muito próximas das respectivas soluções analíticas, para a quantidade utilizada de pontos de colocação. Portanto, é possível concluir que, para esse valor de NPC , o MPEL apresenta uma boa precisão.

Na Figura 4.3 são apresentados os erros residuais, dados pelos módulos das diferenças entre os valores calculados pelo método e os valores exatos da variável dependente, do MPEL para este estudo de caso, considerando t igual à unidade, diferentes valores da ordem fracionária e cinco pontos de colocação. Nesta figura observa-se que não há uma tendência

em relação à influência do valor da ordem fracionária nos erros residuais. Verificam-se valores pequenos dos erros residuais para todos os valores de α considerados. Isso demonstra uma boa precisão do MPEL, conforme observado na Figura 4.2.

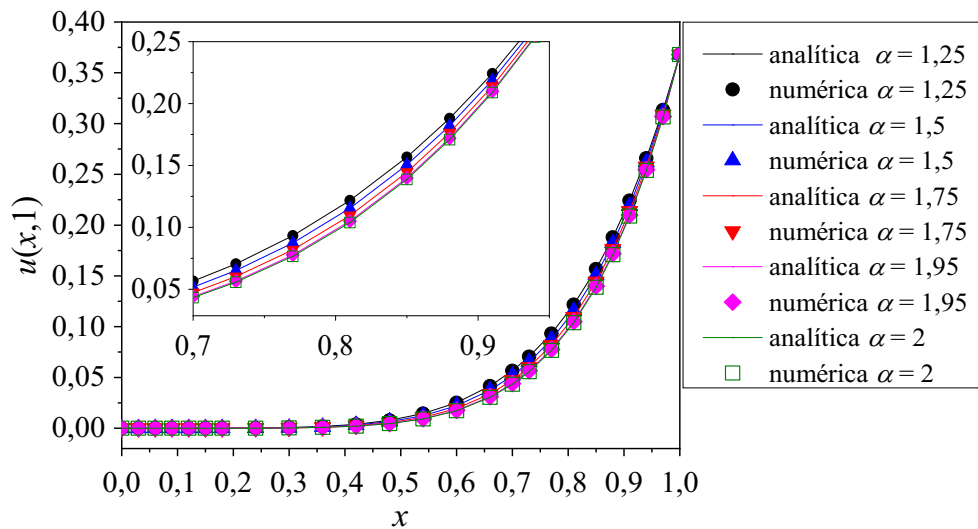


Figura 4.2 - Soluções analíticas e numéricas obtidas pelo MPEL para o primeiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.

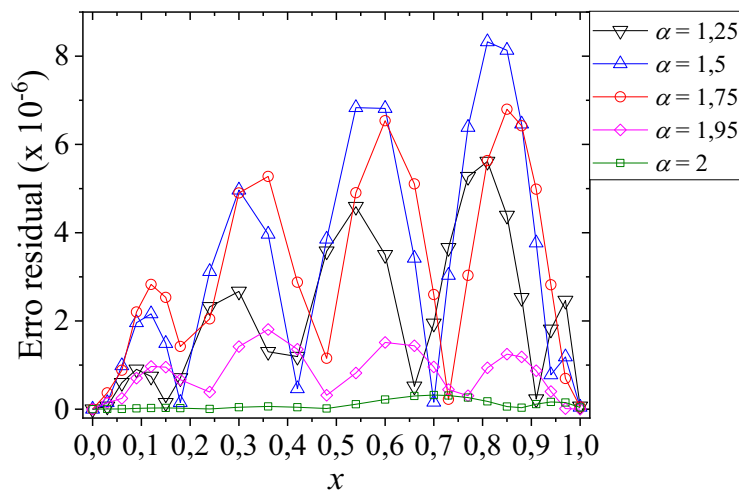


Figura 4.3 - Erros residuais do MPEL para o primeiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.

A Figura 4.4 apresenta as soluções analíticas e numéricas considerando o MDFF, com pontos de discretização nas direções de x e de t , diferentes valores da ordem fracionária e o tempo final igual à unidade. Assim como na Figura 4.2, na Figura 4.4 verifica-se que o aumento da ordem fracionária implica na diminuição do valor da variável dependente. Também pode ser observada uma sobreposição das curvas correspondentes às soluções obtidas para os valores da ordem fracionária equivalentes a 1,95 e 2, além de uma boa

proximidade entre as soluções numéricas e analíticas. Isso indica uma boa precisão do MDFFF para esse estudo de caso.

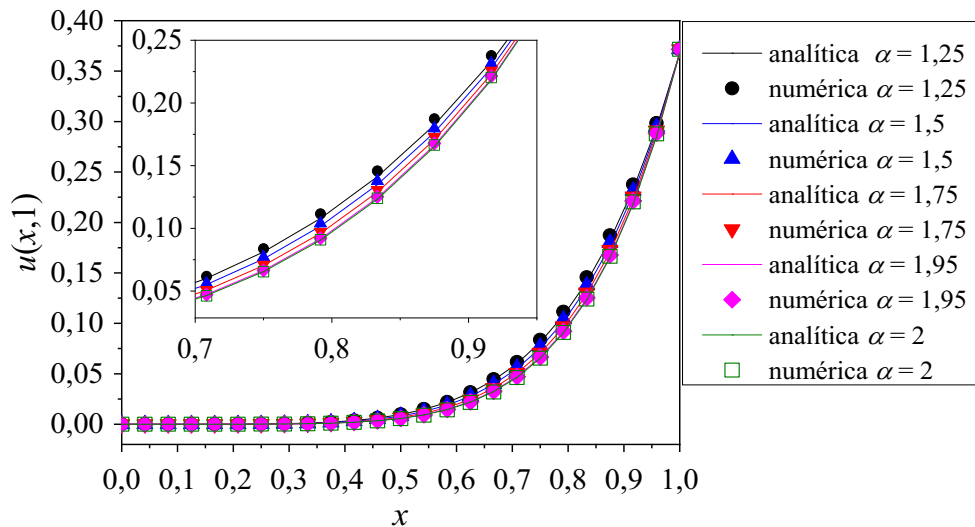


Figura 4.4 - Soluções analíticas e numéricas obtidas pelo MDFFF para o primeiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e com pontos de discretização nas direções de x e t .

A Figura 4.5 apresenta os erros residuais do MDFFF, considerando diferentes valores de α , o tempo equivalente a um e cem pontos de discretização nas direções de x e t . Nesta figura são observados valores maiores dos erros residuais para os menores valores da ordem fracionária. De maneira geral, verifica-se o aumento dos erros com o incremento do valor de x . Apesar disso, pode-se considerar que os valores dos erros residuais obtidos indicam boa precisão do método.

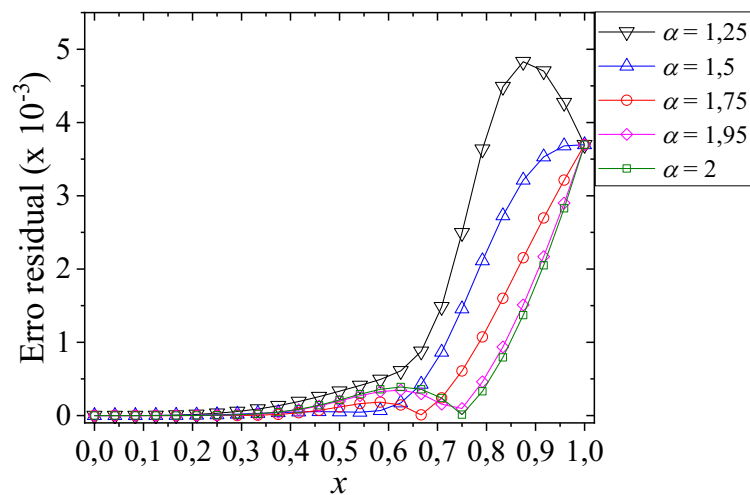


Figura 4.5 - Erros residuais do MDFFF para o primeiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e com pontos de discretização nas direções de x e t .

4.1.2 Estudo de Caso 2

A segunda aplicação considera uma equação diferencial parcial fracionária com condição de contorno do tipo Neumann (SALEHI; DARVISHI; SCHIESSER, 2018):

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \Gamma(4-\alpha)x^\alpha \frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial x^\alpha} + e^{-t}x^2(7x+2\alpha-7), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0, \quad (4.6)$$

em que u é a variável dependente e x e t representam as variáveis independentes espacial e temporal, respectivamente. Para esta aplicação, consideram-se as seguintes condições inicial e de contorno apresentadas nas Equações (4.7), (4.8) e (4.9). Na Equação (4.10), observa-se a solução analítica.

$$u(x,0) = x^2 - x^3, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (4.7)$$

$$u(0,t) = 0, \quad t > 0, \quad (4.8)$$

$$u(1,t) = 0, \quad t > 0, \quad (4.9)$$

$$u(x,t) = (x^2 - x^3)e^{-t}. \quad (4.10)$$

Na Tabela 4.2 são apresentados o somatório do erro absoluto (Ξ) e o tempo de processamento (TP) obtidos pelas metodologias propostas para o segundo estudo de caso considerando diferentes quantidades de pontos de discretização e valores da ordem fracionária. As soluções analítica e numéricas também são avaliadas para o tempo equivalente à unidade.

Tabela 4.2 - Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o segundo estudo de caso fracionário, em termos do número de pontos de discretização e da ordem fracionária.

Método Pseudo-Espectral de Legendre						
$NPC \times n_t$	$\alpha = 1,25$	$\alpha = 1,5$	$\alpha = 1,75$	$\alpha = 1,95$	$\alpha = 2$	TP (s)
2×100	$3,596 \times 10^{-7}$	$1,335 \times 10^{-7}$	$3,028 \times 10^{-7}$	$1,753 \times 10^{-7}$	$1,544 \times 10^{-7}$	0,261
3×100	$8,826 \times 10^{-7}$	$7,982 \times 10^{-8}$	$4,627 \times 10^{-7}$	$6,4 \times 10^{-7}$	$3,388 \times 10^{-7}$	0,322
4×100	$3,49 \times 10^{-7}$	$9,254 \times 10^{-7}$	$3,647 \times 10^{-7}$	$6,746 \times 10^{-8}$	$5,93 \times 10^{-8}$	0,421
5×100	$9,435 \times 10^{-7}$	$2,366 \times 10^{-7}$	$8,868 \times 10^{-8}$	$8,751 \times 10^{-8}$	$4,445 \times 10^{-8}$	1,228
6×100	$2,187 \times 10^{-6}$	$6,926 \times 10^{-7}$	$2,81 \times 10^{-7}$	$1,56 \times 10^{-7}$	$9,793 \times 10^{-8}$	15,290
Método das Diferenças Finitas Fracionário						
$n_x \times n_t$	$\alpha = 1,25$	$\alpha = 1,5$	$\alpha = 1,75$	$\alpha = 1,95$	$\alpha = 2$	TP (s)
50×50	$9,374 \times 10^{-4}$	$3,785 \times 10^{-4}$	$1,357 \times 10^{-4}$	$2,268 \times 10^{-4}$	$2,657 \times 10^{-4}$	2,617
50×100	$1,065 \times 10^{-3}$	$5,061 \times 10^{-4}$	$1,355 \times 10^{-4}$	$9,54 \times 10^{-5}$	$1,326 \times 10^{-4}$	4,464
100×50	$1,787 \times 10^{-4}$	$8,36 \times 10^{-5}$	$8,83 \times 10^{-5}$	$1,234 \times 10^{-4}$	$1,329 \times 10^{-4}$	6,624
100×100	$2,374 \times 10^{-4}$	$9,54 \times 10^{-5}$	$3,37 \times 10^{-5}$	$5,66 \times 10^{-5}$	$6,63 \times 10^{-5}$	10,811
150×150	$1,06 \times 10^{-4}$	$4,25 \times 10^{-5}$	$1,5 \times 10^{-5}$	$2,51 \times 10^{-5}$	$2,95 \times 10^{-5}$	30,241

Nesta tabela verificam-se erros menores quando se aplica o MPEL do que quando se utiliza o MDFF. Isso é observado para todos os valores de NPC . Logo, pode-se dizer que,

para esta aplicação, o MPEL é mais preciso do que o MDFF. Pode-se verificar que não há uma tendência em relação ao efeito da quantidade de pontos de colocação nos valores dos erros gerados pelo MPEL. Isso demonstra que, para este caso, a qualidade dos resultados obtidos não é influenciada pelo valor de NPC . Já o tempo de processamento aumenta à medida que se eleva a quantidade de pontos de colocação, o que está de acordo com o esperado.

Para o MDFF, verifica-se que os erros absolutos diminuem à medida que as quantidades de pontos de discretização nas duas direções aumentam. Além disso, o aumento do número de pontos da malha implica na elevação no tempo de processamento do método. Neste estudo de caso, também se verifica que a aplicação do MPEL demanda tempos de processamento consideravelmente inferiores aos exigidos pelo MDFF. Observa-se também uma mudança significativa dos erros absolutos obtidos para diferentes valores da ordem fracionária. Porém, não se verifica nenhuma tendência em relação ao efeito desse parâmetro no comportamento da qualidade dos resultados obtidos por ambos os métodos.

Salehi, Darvishi e Schiesser (2018) também resolveram esse problema pelo Método das Linhas e Splines. Nesse caso, o método utilizado pelos autores apresenta um somatório dos erros absolutos na ordem de 10^{-6} , quando o valor da ordem fracionária é equivalente a 1,5. Com base nos resultados apresentados na Tabela 4.2, observa-se que os somatórios dos erros absolutos obtidos pelo MDFF, para todas as malhas avaliadas e este valor de α , encontram-se em uma ordem de grandeza superior a 10^{-6} . Logo, pode-se dizer que, para o segundo estudo de caso fracionário, o MDFF é um pouco menos preciso do que o Método das Linhas e Splines. Por outro lado, verifica-se que, para o valor da ordem fracionária igual a 1,5, os somatórios dos erros absolutos gerados pelo MPEL encontram-se na ordem de 10^{-7} a 10^{-8} , para todas as quantidades de pontos de colocação consideradas. Portanto, pode-se dizer que, para esse estudo de caso, o MPEL apresenta uma precisão maior do que o método aplicado pelos autores. Para o segundo estudo de caso fracionário, também não se apresentam dados referentes ao tempo de processamento do método utilizado por Salehi, Darvishi e Schiesser (2018). Isso impede que os tempos de processamento do MPEL e do MDFF sejam comparados com o do método empregado pelos autores.

Na Figura 4.6 são apresentadas as soluções analítica e numéricas considerando o MPEL, cinco pontos de colocação, t igual à unidade e diferentes valores de α . Nesta figura pode-se observar que, para essa quantidade de pontos de colocação, as soluções numéricas para todos os valores da ordem fracionária sobrepõem-se. Isso se deve ao fato dos erros absolutos obtidos pelo método apresentarem valores muito pequenos. Também se verifica

uma grande proximidade entre as soluções numéricas e a solução analítica. Assim, demonstra-se uma boa precisão do método para esse estudo de caso.

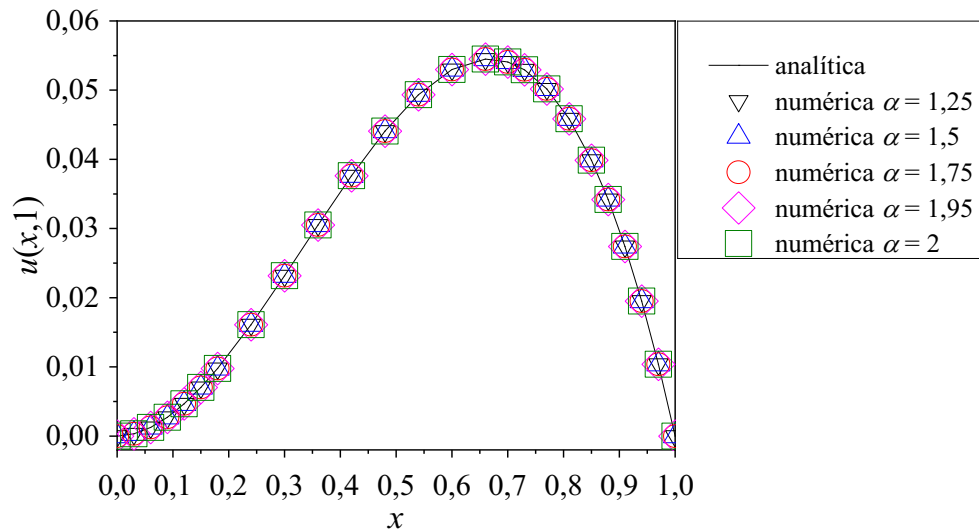


Figura 4.6 - Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL para o segundo estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.

A Figura 4.7 apresenta os erros residuais do MPEL, considerando NPC igual a 5, diferentes valores da ordem fracionária e o tempo equivalente a um.

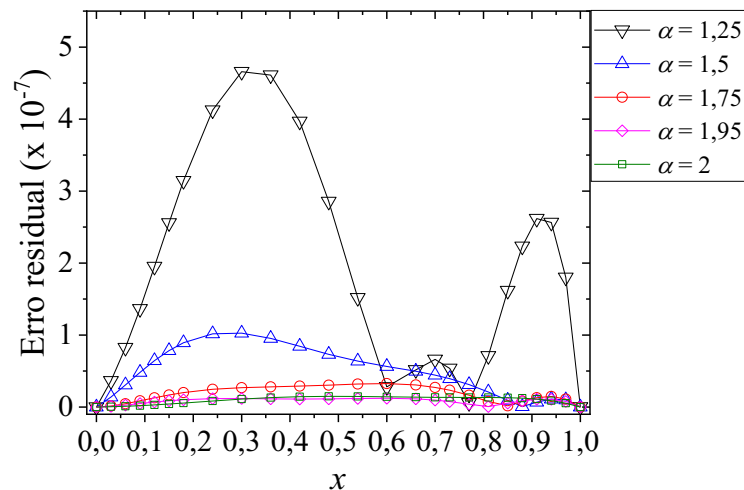


Figura 4.7 - Erros residuais do MPEL para o segundo estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.

Assim como no estudo de caso anterior, na Figura 4.7 observa-se que os erros residuais obtidos são pequenos, o que demonstra que as soluções numéricas são próximas à solução analítica. Nesse caso, de maneira geral, observam-se erros menores à medida que o valor de x aumenta.

Na Figura 4.8 apresentam-se as soluções analítica e numéricas considerando o MDFF, com pontos de discretização nas direções de x e de t , diferentes valores de α e t equivalente à unidade.

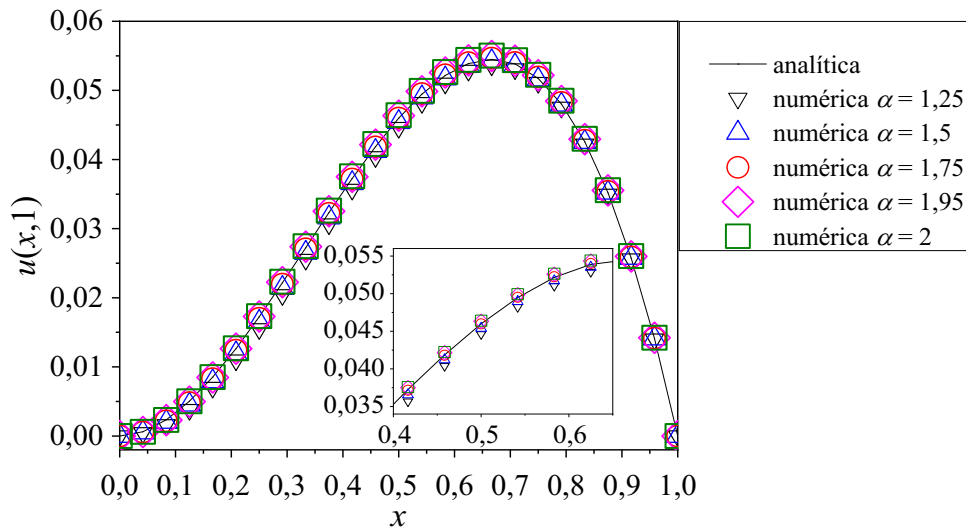


Figura 4.8 - Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFF para o segundo estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e com pontos de discretização nas direções de x e t .

Nesta figura pode-se verificar que as curvas correspondentes às soluções obtidas para os valores de α iguais a 1,75, 1,95 e 2 sobrepõem-se. Isso demonstra uma grande semelhança entre os valores da variável dependente obtidos para esses três valores da ordem fracionária. Observa-se que as soluções numéricas para os valores da ordem fracionária equivalentes a 1,25 e 1,5 são um pouco mais distantes da solução exata. Isso indica que para esses dois valores da ordem fracionária o MDFF é um pouco menos preciso.

Na Figura 4.9 são apresentados os erros residuais do MDFF, considerando n_x e n_t iguais a 100, t equivalente à unidade e diferentes valores da ordem fracionária. Nesta figura observa-se que os maiores valores dos erros residuais são obtidos para α igual a 1,25. Isso demonstra uma maior distância entre a solução numérica obtida para esse valor da ordem fracionária e a solução analítica, o que corrobora com o verificado na Figura 4.8.

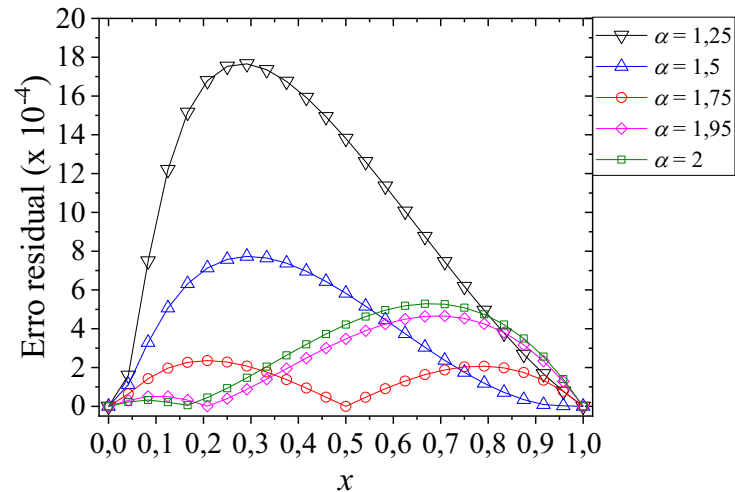


Figura 4.9 - Erros residuais do MDFF para o segundo estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e com pontos de discretização nas direções de x e t .

4.1.3 Estudo de Caso 3

Na última aplicação desta seção considera-se uma equação diferencial parcial fracionária com termo fonte não linear (SALEHI; DARVISHI; SCHIESSER, 2018):

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = (\Gamma(3-\alpha)x^{2+\alpha}t) \frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial x^\alpha} + (x^2 - 2u^2(x,t)), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0, \quad (4.11)$$

em que u é a variável dependente e x e t representam as variáveis independentes espacial e temporal, respectivamente. Para este estudo de caso, são consideradas as condições inicial e de contorno dadas pelas Equações (4.12), (4.13) e (4.14). A Equação (4.15) apresenta a solução exata.

$$u(x,0) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (4.12)$$

$$u(0,t) + \frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0, \quad (4.13)$$

$$u(1,t) + e^{-t} \frac{\partial u(1,t)}{\partial x} = t(1 + 2e^{-t}), \quad t > 0, \quad (4.14)$$

$$u(x,t) = x^2 t. \quad (4.15)$$

A Tabela 4.3 apresenta o somatório do erro absoluto (Ξ) e o tempo de processamento (TP) obtidos pelo MPEL e pelo MDFF para o terceiro estudo de caso fracionário, considerando diferentes valores de α e números de pontos de discretização. A avaliação da solução analítica e das soluções numéricas é realizada para t igual à unidade. Nesta tabela observam-se valores inferiores dos erros obtidos pelo MPEL em comparação com os gerados pelo MDFF, para todas as quantidades consideradas de pontos de colocação, indicando a superioridade do primeiro método. De maneira geral, para este estudo de caso, o aumento do

número de pontos de colocação resulta na elevação dos erros absolutos encontrados pelo MPEL. Esse resultado, diferente do esperado, pode estar relacionado com a qualidade da interpolação realizada para fins de obtenção desses valores. Apesar disso, considera-se que um resultado da ordem de 10^{-7} é bem interessante e condizente com uma boa aproximação numérica. Como esperado, o tempo de processamento é incrementado à medida que a quantidade de pontos de colocação é elevada.

Em relação ao MDFF, observa-se que quanto maior a quantidade de pontos de discretização nas direções de x e t , mais preciso é o método e maior é o tempo de processamento exigido. Além disso, verifica-se que os tempos de processamento do MPEL são significativamente inferiores aos requeridos pelo MDFF.

Nessa aplicação pode-se verificar uma influência menor do valor da ordem fracionária nos erros absolutos de cada método em relação aos dois primeiros estudos de caso anteriores.

Tabela 4.3 - Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o terceiro estudo de caso fracionário, em termos do número de pontos de discretização e da ordem fracionária.

Método Pseudo-Espectral de Legendre						
$NPC \times n_t$	$\alpha = 1,25$	$\alpha = 1,5$	$\alpha = 1,75$	$\alpha = 1,95$	$\alpha = 2$	TP (s)
2×100	$4,26 \times 10^{-9}$	$9,77 \times 10^{-9}$	$1,632 \times 10^{-8}$	$9,7 \times 10^{-9}$	$3,031 \times 10^{-8}$	0,212
3×100	$1,075 \times 10^{-8}$	$6,87 \times 10^{-9}$	$9,496 \times 10^{-8}$	$1,017 \times 10^{-8}$	$4,357 \times 10^{-8}$	0,315
4×100	$7,645 \times 10^{-8}$	$8,824 \times 10^{-8}$	$8,804 \times 10^{-8}$	$2,624 \times 10^{-8}$	$2,254 \times 10^{-8}$	0,415
5×100	$1,638 \times 10^{-7}$	$1,275 \times 10^{-7}$	$1,791 \times 10^{-7}$	$1,82 \times 10^{-7}$	$2,715 \times 10^{-7}$	0,968
6×100	$4,724 \times 10^{-6}$	$5,633 \times 10^{-6}$	$4,192 \times 10^{-6}$	$5,196 \times 10^{-6}$	$6,506 \times 10^{-6}$	22,934
Método das Diferenças Finitas Fracionário						
$n_x \times n_t$	$\alpha = 1,25$	$\alpha = 1,5$	$\alpha = 1,75$	$\alpha = 1,95$	$\alpha = 2$	TP (s)
50×50	$2,269 \times 10^{-3}$	$2,378 \times 10^{-3}$	$2,514 \times 10^{-3}$	$2,607 \times 10^{-3}$	$2,627 \times 10^{-3}$	2,934
50×100	$1,108 \times 10^{-3}$	$1,166 \times 10^{-3}$	$1,254 \times 10^{-3}$	$1,307 \times 10^{-3}$	$1,317 \times 10^{-3}$	4,983
100×50	$1,168 \times 10^{-3}$	$1,204 \times 10^{-3}$	$1,261 \times 10^{-3}$	$1,304 \times 10^{-3}$	$1,314 \times 10^{-3}$	7,381
100×100	$5,743 \times 10^{-4}$	$5,978 \times 10^{-4}$	$6,307 \times 10^{-4}$	$6,537 \times 10^{-4}$	$6,587 \times 10^{-4}$	11,816
150×150	$2,564 \times 10^{-4}$	$2,662 \times 10^{-4}$	$2,806 \times 10^{-4}$	$2,908 \times 10^{-4}$	$2,93 \times 10^{-4}$	30,365

Com relação aos resultados reportados por Salehi, Darvishi e Schiesser (2018), usando o Método das Linhas e Splines, o somatório dos erros absolutos é da ordem de 10^{-7} para α igual a 1,5. Como observado na Tabela 4.3, os somatórios dos erros absolutos gerados pelo MDFF, para todos os valores considerados de n_x e n_t , é maior do que esse valor. Isso indica que, para a terceira aplicação fracionária, a precisão do MDFF é um pouco inferior à do Método das Linhas e Splines. Isso também pode ser verificado para o MPEL quando são empregados seis pontos de colocação. Porém, para os demais valores de NPC , o MPEL apresenta erros que se encontram na ordem de 10^{-7} a 10^{-9} . Logo, pode-se concluir que a aplicação do MPEL, para este problema, gera resultados de qualidade superior aos reportados por Salehi, Darvishi e Schiesser (2018). Assim como nos casos anteriores, não é possível

realizar uma comparação dos resultados obtidos por estes autores em termos do tempo de processamento com as metodologias propostas.

A Figura 4.10 apresenta as soluções exata e numéricas obtidas pela aplicação do MPEL, considerando cinco pontos de colocação, o tempo equivalente a um e diferentes valores da ordem fracionária.

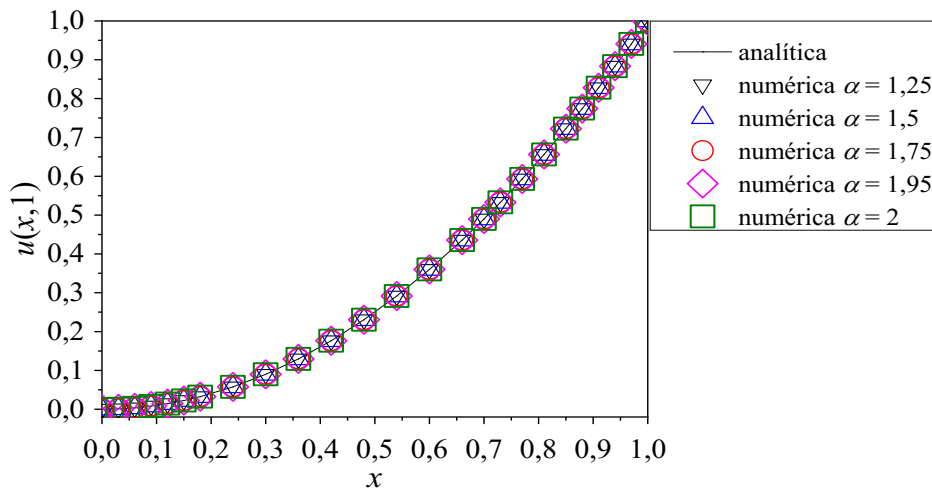


Figura 4.10 - Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL para o terceiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.

Na Figura 4.10 observa-se uma sobreposição entre as soluções numéricas determinadas para todos os valores considerados da ordem fracionária, o que corrobora com os valores apresentados na Tabela 4.3.

Na Figura 4.11 são apresentados os erros residuais do MPEL, considerando diferentes valores de α , cinco pontos de colocação e t igual a um.

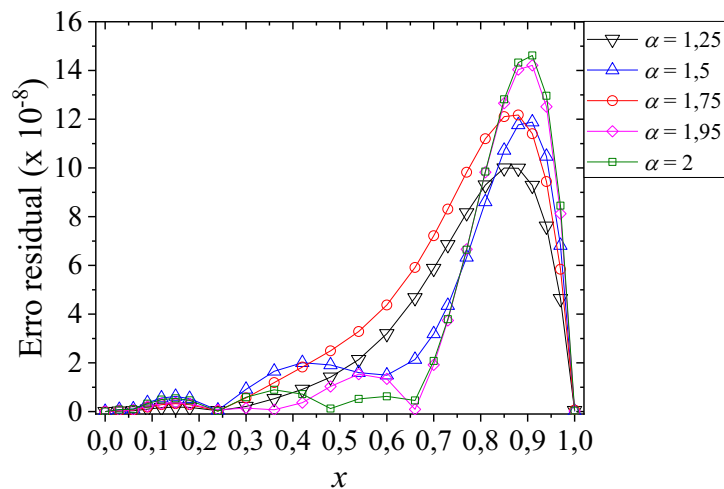


Figura 4.11 - Erros residuais do MPEL para o terceiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cinco pontos de colocação.

Nesta figura verifica-se que os erros residuais aumentam com o valor de x até atingirem os valores máximos, que são observados, aproximadamente, na região entre x igual a 0,85 e x igual a 0,9. Após os valores máximos dos erros serem atingidos, os mesmos diminuem com o incremento do valor de x . Nesse caso também são observados erros residuais pequenos, o que demonstra a proximidade entre as soluções numéricas e a solução exata.

Na Figura 4.12 são apresentadas as soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFF considerando cem pontos de discretização nas direções de x e de t , diferentes valores da ordem fracionária e o tempo equivalente a um.

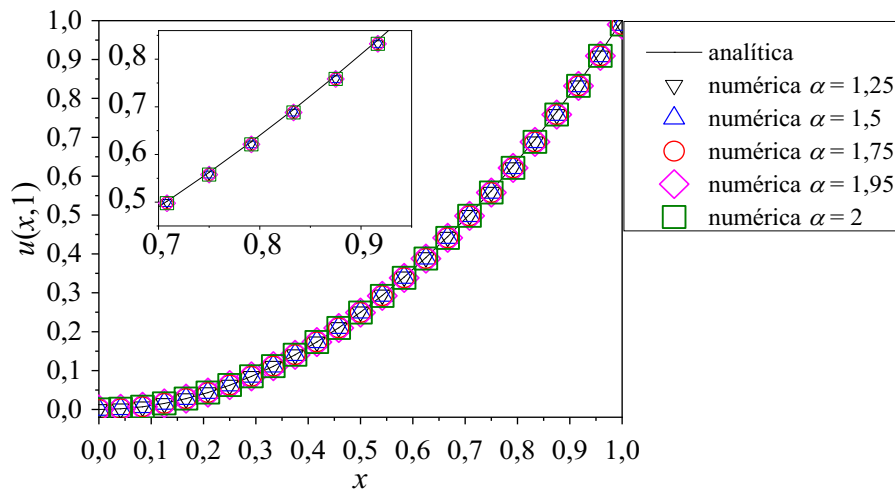


Figura 4.12 - Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFF para o terceiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cem pontos de discretização nas direções de x e t .

Nesta figura pode-se observar uma sobreposição entre as soluções numéricas obtidas para os valores de α entre 1,5 e 2. Isso se justifica pelos erros absolutos obtidos para cada um desses valores da ordem fracionária. Quando se considera α equivalente a 1,25, verifica-se uma distância um pouco maior entre a solução numérica e a solução exata. Isso indica que, para esse valor da ordem não inteira, o MDFF apresenta uma precisão um pouco menor do que para os outros valores considerados da ordem fracionária.

A Figura 4.13 apresenta os erros residuais do MDFF, considerando cem pontos de discretização nas direções de x e t , diferentes valores da ordem fracionária e o tempo equivalente à unidade. Nesta figura observa-se que o aumento do valor de x implica no incremento dos erros residuais obtidos.

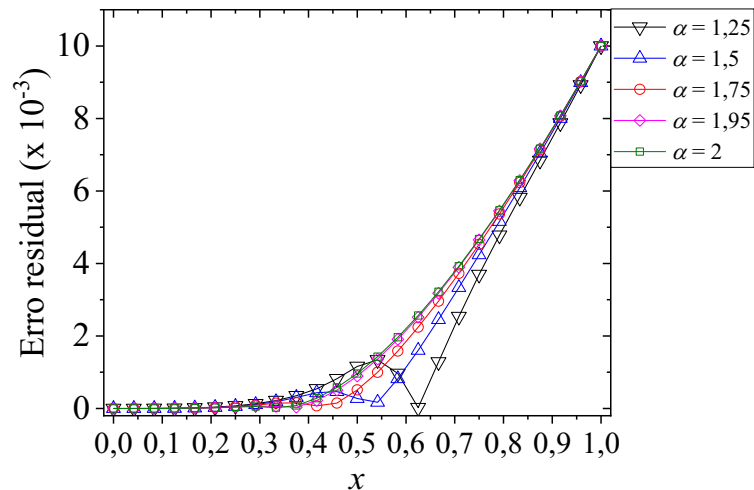


Figura 4.13 - Erros residuais do MDFD para o terceiro estudo de caso fracionário considerando diferentes valores para α e cem pontos de discretização nas direções de x e t .

4.2 Equações Diferenciais Parciais Hiperbólicas com Ordem Inteira no Espaço

Nesta seção, apresentam-se os resultados considerando problemas hiperbólicos com ordem diferencial inteira no espaço para avaliar a qualidade das soluções obtidas pela metodologia proposta para problemas fracionários.

4.2.1 Estudo de Caso 1

A primeira equação diferencial parcial hiperbólica analisada corresponde ao denominado problema linear de Cauchy, que foi proposta e estudada por Mirzaee e Bimesl (2013) e é definida como:

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0, \quad (4.16)$$

em que u é a variável dependente e x e t representam as variáveis independentes espacial e temporal, respectivamente. Neste caso são consideradas as condições iniciais e de contorno apresentadas nas Equações (4.17), (4.18), (4.19) e (4.20). A solução analítica é dada pela Equação (4.21).

$$u(x,0) = x, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial u(x,0)}{\partial t} = 2, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (4.18)$$

$$u(0,t) = 2t, \quad t > 0, \quad (4.19)$$

$$u(1,t) = 2t + 1, \quad t > 0, \quad (4.20)$$

$$u(x,t) = 2t + x. \quad (4.21)$$

Na Tabela 4.4 são apresentados os resultados obtidos pelas metodologias propostas para o primeiro estudo de caso hiperbólico, considerando diferentes valores de NPC , n_x e n_t . A solução exata e as soluções numéricas são avaliadas no tempo equivalente a um.

Tabela 4.4 - Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o primeiro estudo de caso hiperbólico, em termos das malhas de discretização.

Método Pseudo-Espectral de Legendre					
$NPC \times n_t$	2×100	3×100	4×100	5×100	6×100
Ξ	$6,32 \times 10^{-8}$	$1,342 \times 10^{-7}$	$3,723 \times 10^{-7}$	$3,839 \times 10^{-6}$	$3,704 \times 10^{-5}$
TP (s)	0,172	0,344	0,453	1,25	15,969
Método das Diferenças Finitas Fracionário					
$n_x \times n_t$	50×50	50×100	100×50	100×100	150×150
Ξ	$1,94 \times 10^{-14}$	$6,349 \times 10^{-14}$	$1,111 \times 10^{-13}$	$1,352 \times 10^{-13}$	$2,345 \times 10^{-13}$
TP (s)	7,135	8,656	10,824	11,746	12,066

Nesta tabela pode-se verificar que, com a aplicação do MPEL, são obtidos erros superiores aos encontrados pelo MDFF, independentemente do número de pontos de colocação considerados. Assim, pode-se dizer que, para este estudo de caso, a precisão do MDFF é maior do que a do MPEL. Observa-se o aumento dos erros gerados pelo MPEL com a elevação do valor de NPC . Esse resultado não era esperado e, provavelmente, se deve ao comportamento linear da solução, isto é, quanto maior for o número de pontos de colocação, maior é a ordem do polinômio utilizado para aproximar uma equação de reta. Em relação ao tempo de processamento, quanto maior o valor de NPC , maior é o seu valor, sendo observados menores tempos para o MPEL do que para o MDFF, exceto quando se utilizam seis pontos de colocação e uma malha composta por cento e cinquenta pontos de discretização nas direções de x e t .

Em relação ao MDFF observa-se que a elevação da quantidade de pontos de discretização nas direções de x e t implica em uma pequena variação no valor dos erros absolutos e no aumento do tempo de processamento. Porém, na prática é possível desconsiderar essa variação dos erros absolutos, já que estes se encontram em uma ordem de grandeza entre 10^{-13} e 10^{-14} , isto é, são praticamente nulos.

Mirzaee e Bimesl (2013) utilizaram um método baseado nos polinômios de Euler para resolver esse problema hiperbólico. Para esse estudo de caso, os autores não apresentam os erros absolutos e o tempo de processamento do método utilizado, fazendo com que a comparação dos resultados obtidos pelo MPEL e pelo MDFF com o método empregado pelos autores não possa ser realizada.

Na Figura 4.14 são apresentadas as soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL, considerando diferentes valores de NPC e o tempo igual à unidade.

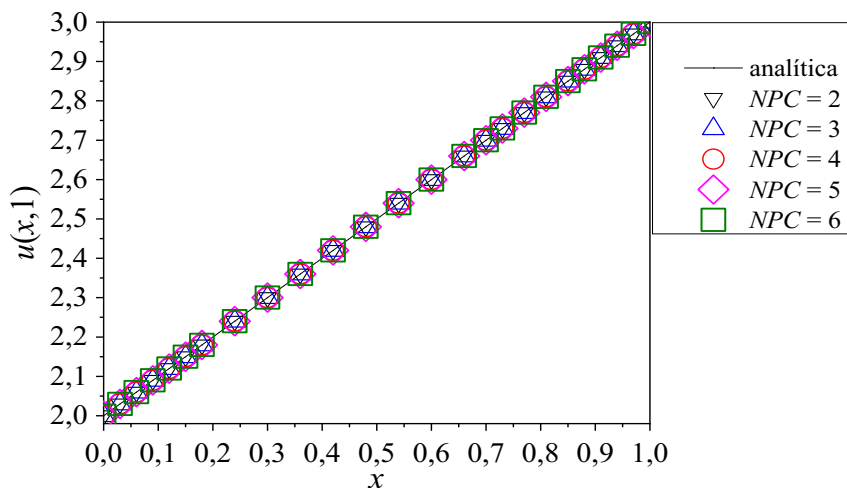


Figura 4.14 - Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL para o primeiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.

Nesta figura verifica-se que as soluções numéricas para todas as configurações utilizadas sobrepõem-se e são muito próximas da solução exata. Isso demonstra uma boa aderência das soluções aproximadas com relação à analítica.

A Figura 4.15 apresenta os erros residuais do MPEL, considerando t igual a um e diferentes números de pontos de colocação.

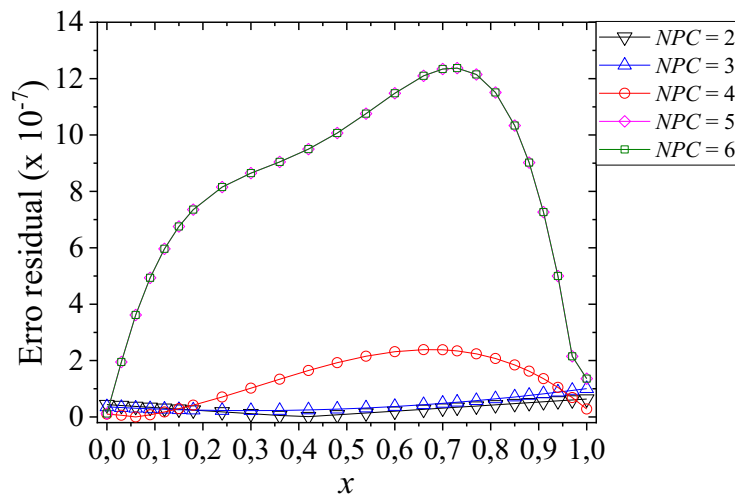


Figura 4.15 - Erros residuais do MPEL para o primeiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.

Nesta figura verificam-se erros residuais maiores à medida que o valor de NPC aumenta, o que se deve ao fato do perfil analítico ser uma equação de reta e está de acordo com a Tabela 4.4. Os valores dos erros residuais são pequenos. Isso demonstra a proximidade entre as soluções obtidas pelo método e a solução analítica.

Na Figura 4.16 são apresentadas as soluções analítica e numéricas via aplicação do MDFD para diferentes valores de pontos de discretização nas direções de x e t e o tempo

equivalente à unidade. Nesta figura, não se observa a influência da quantidade de pontos de discretização na qualidade dos resultados obtidos por este método, já que há uma sobreposição entre os perfis obtidos para todas as malhas avaliadas. Portanto, pode-se concluir que, para esse estudo de caso, o MDFF apresenta uma boa precisão.

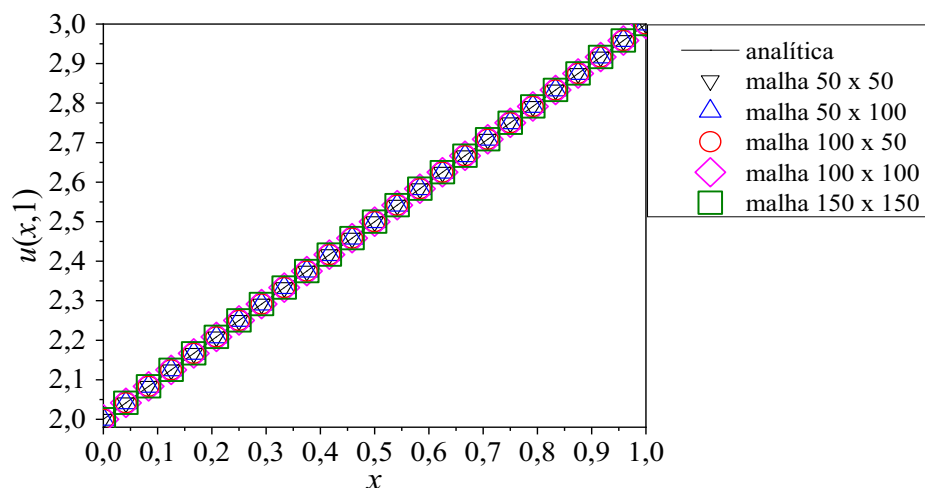


Figura 4.16 - Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFF para o primeiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t .

Na Figura 4.17 são apresentados os erros residuais do MDFF, considerando o tempo igual a um e diferentes valores de n_x e n_t .

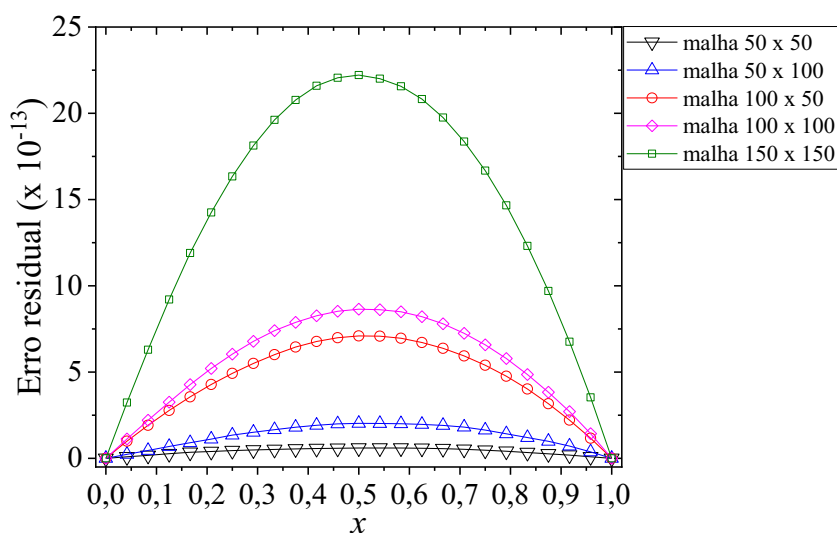


Figura 4.17 - Erros residuais do MDFF para o primeiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t .

Nesta figura verificam-se erros residuais muito pequenos para todas as configurações de malha consideradas. Isso indica que as soluções numéricas são próximas à solução exata, o que está de acordo com o observado na figura anterior.

4.2.2 Estudo de Caso 2

O segundo estudo de caso considera a seguinte equação diferencial parcial hiperbólica (YANG; LIU; BAI, 2006; MIRZAEI; BIMESL, 2013):

$$2 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x \partial t} + 1, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0, \quad (4.22)$$

em que u é a variável dependente e x e t representam as variáveis independentes espacial e temporal, respectivamente. Nesta aplicação, consideram-se as condições iniciais e de contorno dadas pelas Equações (4.23), (4.24), (4.25) e (4.26). A Equação (4.27) apresenta a solução exata.

$$u(x,0) = x, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial u(x,0)}{\partial t} = x, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (4.24)$$

$$u(0,t) = 0,5t^2, \quad t > 0, \quad (4.25)$$

$$u(1,t) = 1 + t + 0,5t^2, \quad t > 0, \quad (4.26)$$

$$u(x,t) = x + xt + 0,5t^2. \quad (4.27)$$

A Tabela 4.5 apresenta os resultados obtidos pelo MPEL e pelo MDFF para esta aplicação considerando diferentes números de pontos de discretização, sendo as soluções analítica e numéricas avaliadas em t igual à unidade.

Tabela 4.5 - Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o segundo estudo de caso hiperbólico, em termos das malhas de discretização.

Método Pseudo-Espectral de Legendre					
$NPC \times n_t$	2×100	3×100	4×100	5×100	6×100
Ξ	$1,437 \times 10^{-7}$	$5,26 \times 10^{-8}$	$2,278 \times 10^{-7}$	$2,736 \times 10^{-6}$	$2,272 \times 10^{-5}$
TP (s)	0,344	0,359	0,396	1,219	13,657
Método das Diferenças Finitas Fracionário					
$n_x \times n_t$	50×50	50×100	100×50	100×100	150×150
Ξ	$3,187 \times 10^{-14}$	$2,397 \times 10^{-14}$	$4,065 \times 10^{-14}$	$5,182 \times 10^{-14}$	$1,068 \times 10^{-14}$
TP (s)	3,984	4,617	6,057	8,582	9,938

Nesta tabela podem ser observados maiores erros absolutos para o MPEL em comparação com os obtidos pelo MDFF. Também se constata a elevação dos erros à medida que a quantidade de pontos de colocação aumenta. Provavelmente, tal resultado também está associado à tentativa de aproximar uma equação de reta por um polinômio com grau equivalente a NPC . Assim, para esta aplicação, a qualidade dos resultados obtidos pelo MPEL é inferior à dos gerados pelo MDFF. Todavia, isto de forma alguma inviabiliza a aplicação do MPEL neste tipo de problema, visto que os resultados são coerentes com os reportados por

Mirzaee e Bimesl (2013) via aplicação do Método da Matriz de Euler. Em termos do tempo de processamento, observa-se que o mesmo aumenta com o incremento no valor de NPC . Além disso, constata-se que o MPEL requer tempos de processamento significativamente menores do que os exigidos pelo MDFF, exceto para seis pontos de colocação e a malha composta por cento e cinquenta pontos de discretização nas direções de x e t .

Em relação aos erros obtidos pelo MDFF, é possível observar que os mesmos inicialmente diminuem, posteriormente aumentam e, por fim, voltam a diminuir com o aumento do número de pontos de discretização nas direções de x e t . Contudo, assim como ocorre no primeiro estudo de caso, verifica-se que esses erros são praticamente iguais a zero, já que a ordem de grandeza dos mesmos é equivalente a 10^{-14} .

As Figuras 4.18 e 4.19 apresentam as soluções analítica e numéricas obtidas via aplicação do MPEL e do MDFF, respectivamente, para diferentes configurações de malha. De forma geral, nas duas figuras pode-se observar uma boa concordância entre os valores reais e preditos por cada uma das abordagens propostas.

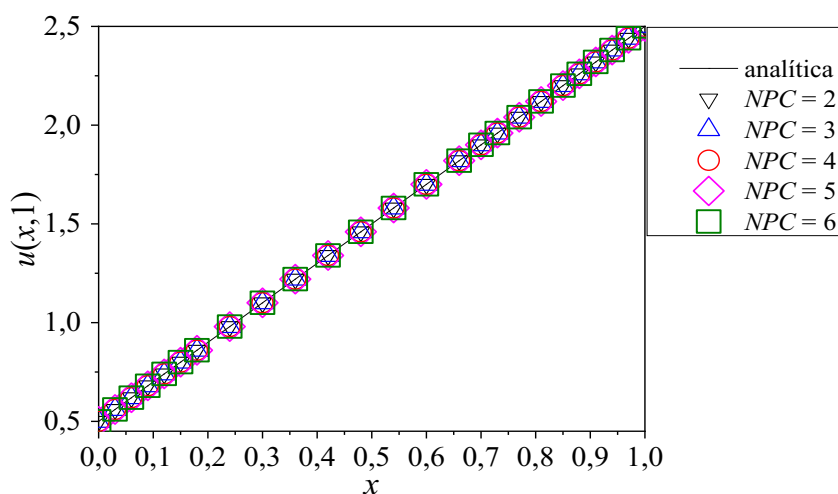


Figura 4.18 - Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL para o segundo estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.

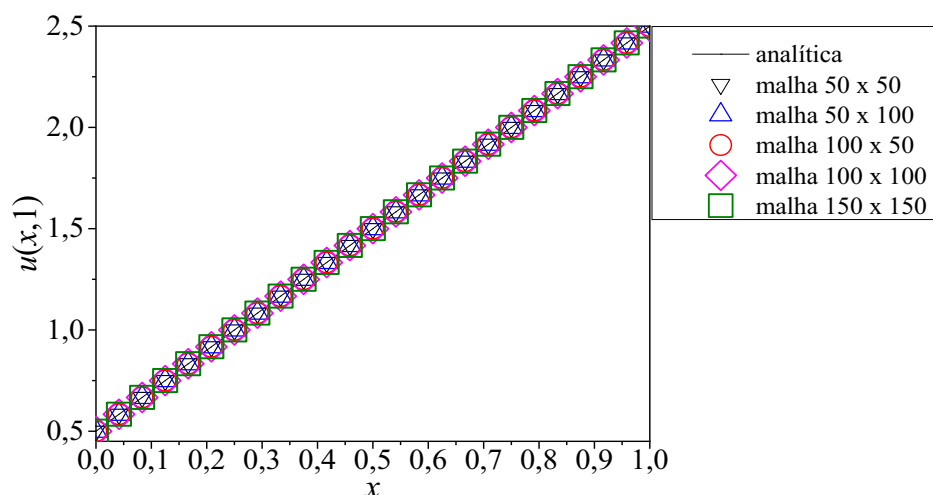


Figura 4.19 - Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFD para o segundo estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t .

Nas Figuras 4.20 e 4.21 são apresentados os erros residuais do MPEL e do MDFD, respectivamente, para diferentes valores de NPC , n_x e n_t .

Na Figura 4.20 observa-se que, assim como ocorre no estudo de caso anterior, o incremento do valor de NPC implica no aumento dos erros residuais do MPEL, o que corrobora com o verificado na Tabela 4.5. Nesse caso também são verificados erros residuais baixos, o que indica uma boa precisão do método. Já na Figura 4.21 também se observam valores muito baixos dos erros residuais. Isso demonstra a proximidade entre as soluções obtidas pelo MDFD e a solução exata.

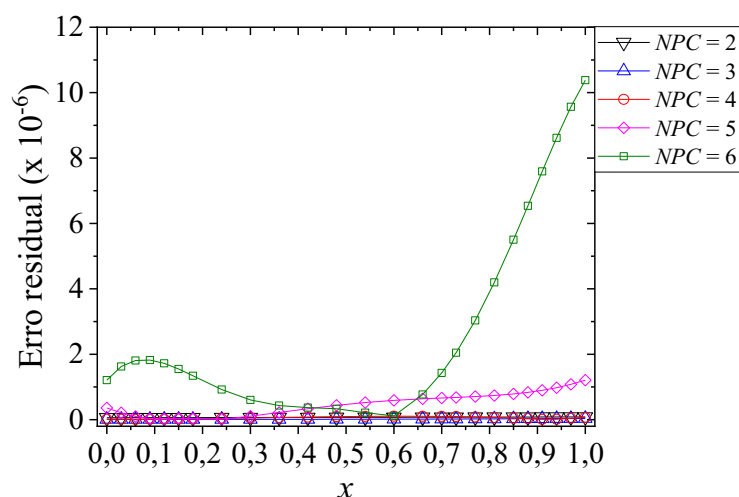


Figura 4.20 - Erros residuais do MPEL para o segundo estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.

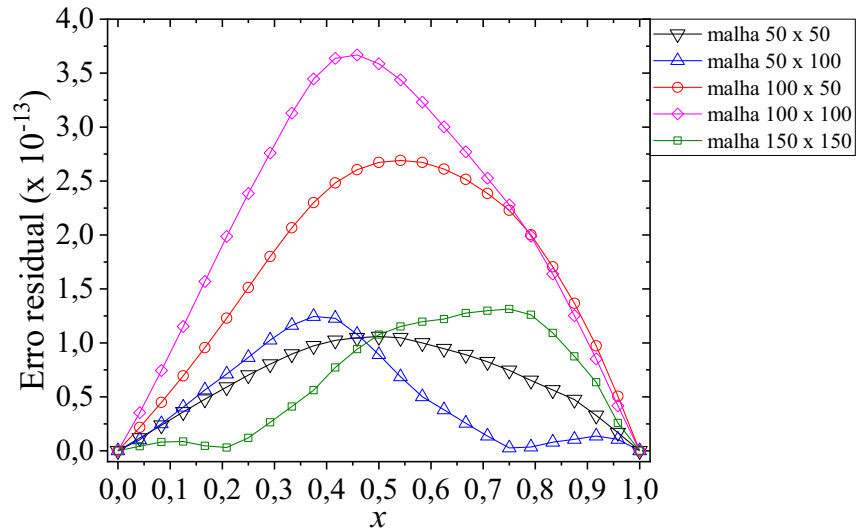


Figura 4.21 - Erros residuais do MDFFF para o segundo estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t .

4.2.3 Estudo de Caso 3

A última aplicação hiperbólica foi estudada por Yousefi (2010) e Mirzaee e Bimesl (2013) e é descrita como:

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} + 4 \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} - 2u(x,t), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0, \quad (4.28)$$

em que u é a variável dependente e x e t representam as variáveis independentes espacial e temporal, respectivamente. Para avaliar este estudo de caso, são consideradas as condições iniciais e de contorno apresentadas nas Equações (4.29), (4.30), (4.31) e (4.32). A solução analítica é dada pela Equação (4.33).

$$u(x,0) = \text{sen}(x), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial u(x,0)}{\partial t} = -\text{sen}(x), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (4.30)$$

$$u(0,t) = 0, \quad t > 0, \quad (4.31)$$

$$u(1,t) = e^{-t} \text{sen}(1), \quad t > 0, \quad (4.32)$$

$$u(x,t) = e^{-t} \text{sen}(x). \quad (4.33)$$

Na Tabela 4.6 apresentam-se os resultados obtidos pelas abordagens propostas para o terceiro estudo de caso hiperbólico, considerando diferentes configurações de malha. As soluções exata e numéricas são avaliadas no tempo equivalente à unidade. Nesta tabela pode-se verificar que os erros absolutos obtidos pelo MPEL são inferiores aos encontrados pelo MDFFF, exceto quando se utilizam dois pontos de colocação. Assim, para esse estudo de caso,

o MPEL é mais preciso do que o MDFF, quando se consideram de três a seis pontos de colocação.

Também é possível observar a diminuição dos erros absolutos do MPEL com o aumento de NPC . Esse resultado, diferentemente dos observados para os estudos de caso anteriores, é mais condizente com o esperado, visto que o perfil analítico não é uma equação de reta. Em relação ao tempo de processamento, pode-se verificar o seu aumento à medida que o valor de NPC também se eleva.

Observam-se valores consideravelmente menores de tempo de processamento do MPEL em comparação com o MDFF, exceto quando se consideram seis pontos de colocação e a malha composta por cento e cinquenta pontos de discretização nas direções de x e t . Já para o MDFF observam-se menores valores de erros absolutos à medida que as quantidades de pontos de discretização nas duas direções aumentam. O aumento do número de pontos da malha também eleva o tempo de processamento do método.

Tabela 4.6 - Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o terceiro estudo de caso hiperbólico, em termos das malhas de discretização.

Método Pseudo-Espectral de Legendre					
$NPC \times n_t$	2×100	3×100	4×100	5×100	6×100
Ξ	$1,251 \times 10^{-3}$	$2,791 \times 10^{-5}$	$1,027 \times 10^{-6}$	$9,344 \times 10^{-7}$	$5,829 \times 10^{-6}$
TP (s)	0,266	0,422	0,453	1,328	15,375
Método das Diferenças Finitas Fracionário					
$n_x \times n_t$	50×50	50×100	100×50	100×100	150×150
Ξ	$4,32 \times 10^{-4}$	$2,148 \times 10^{-4}$	$2,23 \times 10^{-4}$	$1,118 \times 10^{-4}$	$5,03 \times 10^{-5}$
TP (s)	5,660	6,549	8,035	9,613	11,061

Em relação ao valor reportado por Mirzaee e Bimesl (2013), usando o Método da Matriz de Euler, os resultados obtidos pelas abordagens propostas são, no mínimo, equivalentes, visto que os somatórios dos erros absolutos são da ordem de 10^{-4} .

Nas Figuras 4.22 e 4.23 são apresentadas as soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL e pelo MDFF, respectivamente, para diferentes valores de NPC , n_x e n_t .

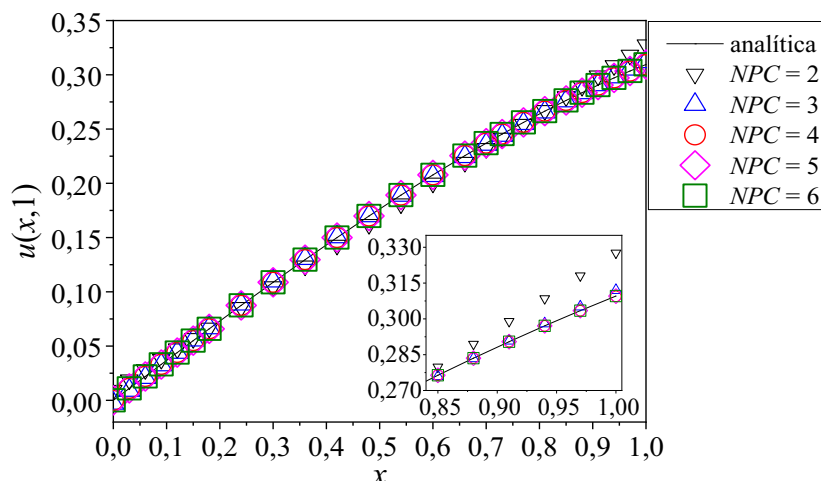


Figura 4.22 - Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MPEL para o terceiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.

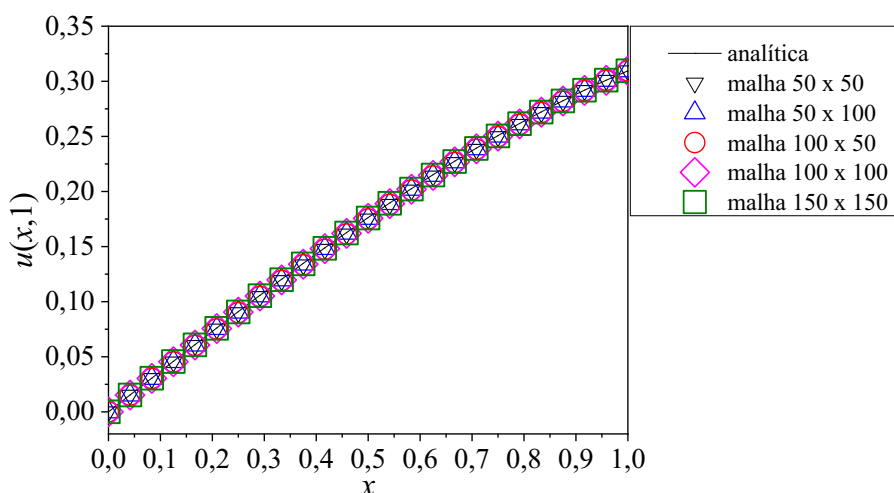


Figura 4.23 - Soluções analítica e numéricas obtidas pelo MDFF para o terceiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t .

Na Figura 4.22 observa-se uma sobreposição das soluções numéricas obtidas para três, quatro, cinco e seis pontos de colocação. Isso ocorre, pois os valores dos erros absolutos obtidos por esse método para esses valores de NPC são muito pequenos. Apesar disso, verifica-se uma distância maior entre a solução numérica obtida para dois pontos de colocação e a solução analítica do que a observada entre as soluções obtidas para as demais quantidades de pontos de colocação e a solução exata. Isso demonstra que para NPC igual a 2 o MPEL não é tão preciso. Por outro lado, para três, quatro, cinco e seis pontos de colocação, esse método apresenta uma boa precisão, para esse estudo de caso. Já na Figura 4.23 não é possível verificar uma diferença significativa entre os resultados analítico e numéricos para cada malha avaliada, o que demonstra uma boa qualidade dos perfis encontrados pelo MDFF.

As Figuras 4.24 e 4.25 apresentam os erros residuais do MPEL e do MDFF, para diferentes configurações de malha.

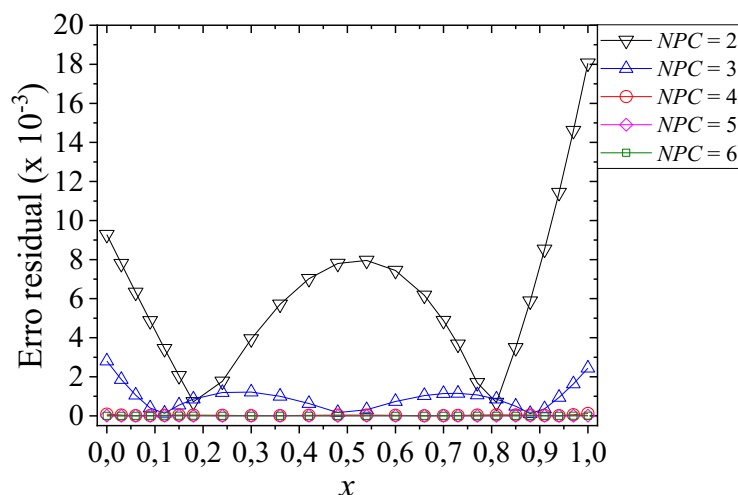


Figura 4.24 - Erros residuais do MPEL para o terceiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de colocação.

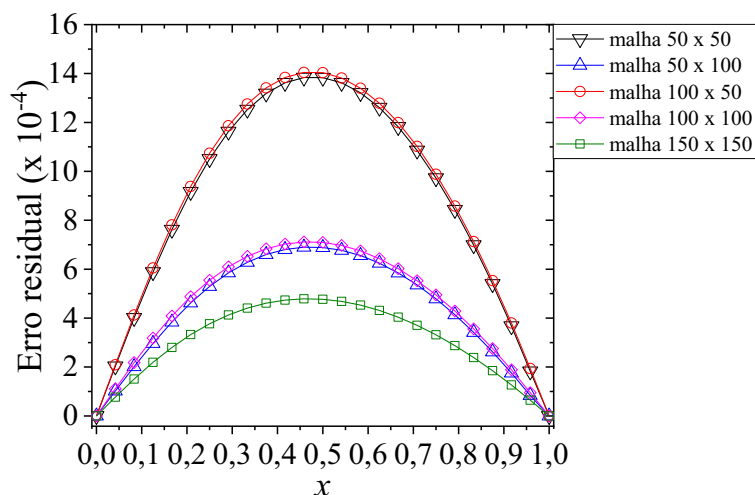


Figura 4.25 - Erros residuais do MDFF para o terceiro estudo de caso hiperbólico considerando diferentes números de pontos de discretização nas direções de x e t .

Na Figura 4.24 verificam-se erros residuais menores à medida que o número de pontos de colocação aumenta, o que está de acordo com a Tabela 4.6. Para NPC igual a 2 observam-se erros residuais mais significativos do que para os demais valores de NPC , o que demonstra o observado na Figura 4.22. Já na Figura 4.25, assim como ocorre nos dois estudos de caso anteriores, verificam-se valores de erros residuais que indicam uma boa precisão do MDFF para todos os valores de n_x e n_t considerados.

4.3 Problema Hiperbólico Fracionário em Transferência de Calor em Tecidos

Até o presente momento foram avaliados dois tipos de modelos diferenciais, a saber, um parabólico fracionário e o outro hiperbólico com ordem inteira. Para essa finalidade foram propostos o MPEL no contexto fracionário, em que foi utilizada a definição de Caputo para aproximar a derivada fracionária, e o MDFF, no qual se considerou a aproximação de Grünwald-Letnikov para avaliar os termos de ordem não inteira.

Conforme apresentado anteriormente, o objetivo desta tese é resolver um modelo diferencial hiperbólico fracionário no espaço, considerado para representar fenômenos anômalos em sistemas físicos. Assim, nesta seção, ambas as abordagens propostas são empregadas para resolver um modelo diferencial hiperbólico fracionário no espaço utilizado para descrever a transferência de calor em tecidos, bem como avaliar a influência da ordem fracionária e do parâmetro responsável por quantificar o fator de atraso no tempo.

Para fins de aplicação, considere o modelo do fluxo de calor por condução de Cattaneo no contexto unidimensional:

$$\left(1 + \tau \frac{\partial}{\partial t}\right) q(x, t) = -k \frac{\partial T(x, t)}{\partial x}, \quad 0 \leq x \leq L, \quad t \geq 0, \quad (4.34)$$

em que T é a temperatura, x e t representam as coordenadas espacial e temporal, respectivamente, q é o fluxo de calor, τ é o fator de atraso no tempo, k é a condutividade térmica e L é o limite superior para a variável espacial, que corresponde ao comprimento total. Ressalta-se que, quando τ tende a zero, a tradicional Lei de condução de calor de Fourier é obtida.

Neste contexto, considere a transferência de calor em um tecido descrita pela tradicional equação de bio-aquecimento de Pennes, em que as contribuições referentes à perfusão sanguínea e à geração de calor metabólico em um tecido biológico são consideradas (PENNES, 1948). O problema estudado nesta aplicação considera o seguinte modelo hiperbólico fracionário e adimensionalizado (WANG et al., 2021):

$$\tau \frac{\partial^2 \theta(\xi, \gamma)}{\partial \gamma^2} + (1 + \tau P_b) \frac{\partial \theta(\xi, \gamma)}{\partial \gamma} = w^{2-\alpha} \frac{\partial^\alpha \theta(\xi, \gamma)}{\partial \xi^\alpha} - P_b \theta(\xi, \gamma) + F_{ext}, \quad 0 \leq \xi \leq 1, \quad \gamma \geq 0, \quad (4.35)$$

em que θ é a temperatura adimensional, ξ e γ representam as coordenadas espacial e temporal adimensionais, respectivamente, P_b é um adimensional que relaciona a taxa média de perfusão sanguínea do tecido, o calor específico, o comprimento total e a condutividade térmica, w é um parâmetro proposto para corrigir o modelo dimensional fracionário (com ordem α), de forma que o mesmo seja dimensionalmente coerente. Finalmente, F_{ext} é o termo fonte.

Conforme proposto por Wang et al. (2021), são consideradas as seguintes condições iniciais e de contorno:

$$\theta(\xi, 0) = 0, \quad 0 \leq \xi \leq 1, \quad (4.36)$$

$$\frac{\partial \theta(\xi, 0)}{\partial \gamma} = 0, \quad 0 \leq \xi \leq 1, \quad (4.37)$$

$$\theta(0, \gamma) = 0, \quad \gamma > 0, \quad (4.38)$$

$$\theta(1, \gamma) = 0, \quad \gamma > 0, \quad (4.39)$$

sendo F_{ext} igual a:

$$F_{ext} = \xi^2 (1 - \xi)^2 \left[3\gamma^2 + P_b \gamma^3 + \tau \frac{3\Gamma(3)}{\Gamma(2)} \gamma + P_b \tau \frac{\Gamma(4)}{\Gamma(3)} \gamma^2 \right] + \frac{w^{2-\alpha}}{2 \cos(0,5\alpha\pi)} \gamma^3 \left[\frac{\Gamma(3)}{\Gamma(3-\alpha)} (\xi^{2-\alpha} + (1-\xi)^{2-\alpha}) - \frac{2\Gamma(4)}{\Gamma(4-\alpha)} (\xi^{3-\alpha} + (1-\xi)^{3-\alpha}) + \frac{\Gamma(5)}{\Gamma(5-\alpha)} (\xi^{4-\alpha} + (1-\xi)^{4-\alpha}) \right]. \quad (4.40)$$

Para α igual a 2; τ igual a 0,1; P_b igual a 1 e w igual a 1,1; a solução analítica é dada pela Equação (4.41).

$$\theta(\xi, \gamma) = \xi^2 (1 - \xi)^2 \gamma^3. \quad (4.41)$$

É importante ressaltar que, se o parâmetro τ for igual a zero, o modelo hiperbólico torna-se parabólico. Além disso, cabe enfatizar que este tipo de modelo tem sido empregado com sucesso para a modelagem de fenômenos anômalos de difusão (KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008; FENG et al., 2021).

A Tabela 4.7 apresenta os resultados obtidos pelas metodologias propostas para o estudo de caso hiperbólico fracionário, considerando a ordem fracionária equivalente a 2 e diferentes configurações de malha.

Tabela 4.7 - Resultados obtidos pelas metodologias propostas considerando o estudo de caso hiperbólico fracionário, em termos do número de pontos de discretização e de pontos de colocação.

Método Pseudo Espectral de Legendre				
$NPC \times n_t$	$\gamma=0,5$	$\gamma=1,0$	$\gamma=1,5$	TP (s)
2×100	$3,2904 \times 10^{-3a}$	$3,8315 \times 10^{-2}$	$1,4375 \times 10^{-1}$	0,031
3×100	$3,3704 \times 10^{-10}$	$3,8232 \times 10^{-10}$	$1,3843 \times 10^{-9}$	0,047
4×100	$3,0234 \times 10^{-10}$	$3,1914 \times 10^{-10}$	$1,1445 \times 10^{-9}$	0,053
5×100	$2,1746 \times 10^{-10}$	$2,3584 \times 10^{-10}$	$2,5101 \times 10^{-10}$	0,281
Método das Diferenças Finitas Fracionário				
$n_x \times n_t$	$\gamma=0,5$	$\gamma=1,0$	$\gamma=1,5$	TP (s)
25×25	$3,7505 \times 10^{-4}$	$8,3754 \times 10^{-4}$	$1,5948 \times 10^{-3}$	0,216
50×50	$8,9443 \times 10^{-5}$	$1,8474 \times 10^{-4}$	$3,2442 \times 10^{-4}$	0,577
100×100	$2,2844 \times 10^{-5}$	$4,8558 \times 10^{-5}$	$9,0954 \times 10^{-5}$	3,149
150×150	$1,0654 \times 10^{-5}$	$2,7344 \times 10^{-5}$	$6,1843 \times 10^{-5}$	8,939

^aSomatório do Erro Absoluto (Ξ) no ponto γ .

A Figura 4.26 apresenta os perfis de temperatura adimensional considerando o MPEL ($NPC=5$) e o MDFF ($n_x=n_t=100$), α igual a 2 e diferentes valores de γ ([0,5 1 1,5]).

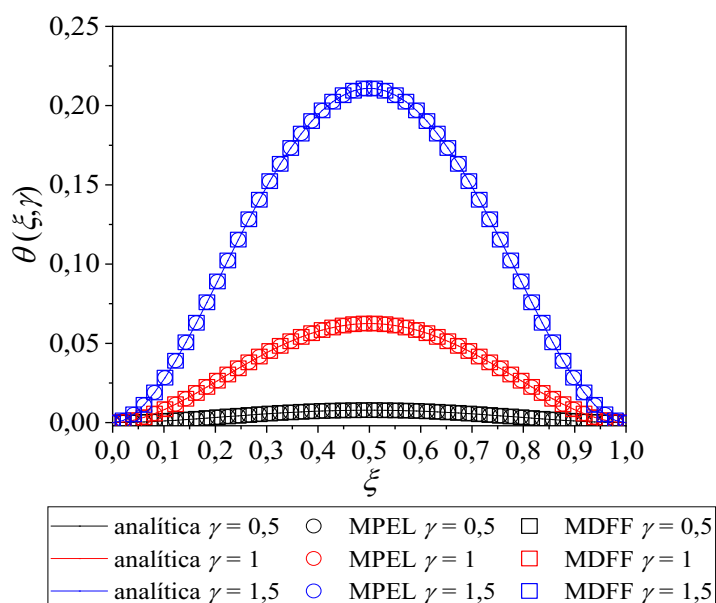


Figura 4.26 - Perfis de temperatura adimensional obtidos pelas estratégias MPEL e MDFF para α igual a 2 e diferentes valores de γ .

Nesta figura pode-se observar que, para os números de pontos de colocação e de pontos de discretização utilizados, os dois métodos apresentam uma boa precisão, conforme constatado para os três valores de tempo adimensional avaliados. Também é possível verificar que, com o aumento no valor do tempo adimensional, ocorre uma elevação na temperatura adimensional do tecido, o que está de acordo com o esperado fisicamente. Pode-se observar que os valores máximos de temperatura adimensional são atingidos na metade do domínio

especial, em $\xi=0,5$. Isso demonstra a simetria do problema em questão, conforme as condições de contorno definidas.

Na Figura 4.27 é apresentada a influência da ordem fracionária no perfil de temperatura adimensional, considerando γ igual a 1,5 e o MDFD ($n_x=n_t=100$).

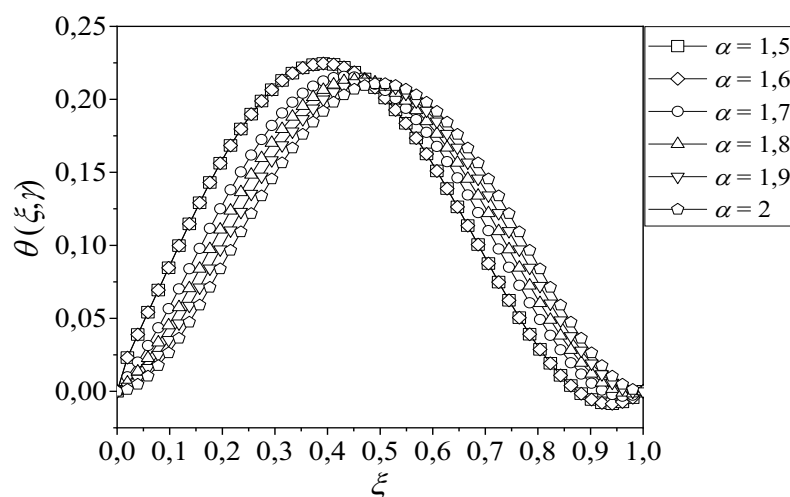


Figura 4.27 - Influência da ordem fracionária nos perfis de temperatura adimensional para γ igual a 1,5 usando o MDFD.

Nesta figura verifica-se que a temperatura adimensional varia significativamente com a mudança do valor de α . Isso demonstra a grande importância que a heterogeneidade espacial do tecido apresenta sobre o perfil de temperatura adimensional, bem como a importância de se conhecer o valor deste parâmetro para uma aplicação em particular. Observa-se que os perfis de temperatura adimensional obtidos para as ordens fracionárias equivalentes a 1,5 e 1,6 são muito próximos. Conforme esperado, quando o valor de α aproxima-se de 2, o perfil de temperatura adimensional torna-se mais próximo do obtido quando se considera a tradicional Lei de Fourier. Pode-se verificar que, com o aumento da ordem fracionária, a temperatura adimensional máxima do tecido diminui. Também se verifica que, quanto menor o valor da ordem fracionária, maior a ocorrência de valores negativos para o adimensional de temperatura e menos simétrico é o perfil em relação à coordenada espacial adimensional. Do ponto de vista físico, não se esperam valores de temperatura inferiores a zero. Porém, matematicamente isso pode ocorrer para essa aplicação, já que se trata de um adimensional, cujo valor depende da temperatura de referência utilizada para adimensionalizar a variável.

A Figura 4.28 apresenta a influência do parâmetro τ na temperatura adimensional, considerando γ igual a 1,5, α igual a 2 e o MDFD ($n_x=n_t=100$).

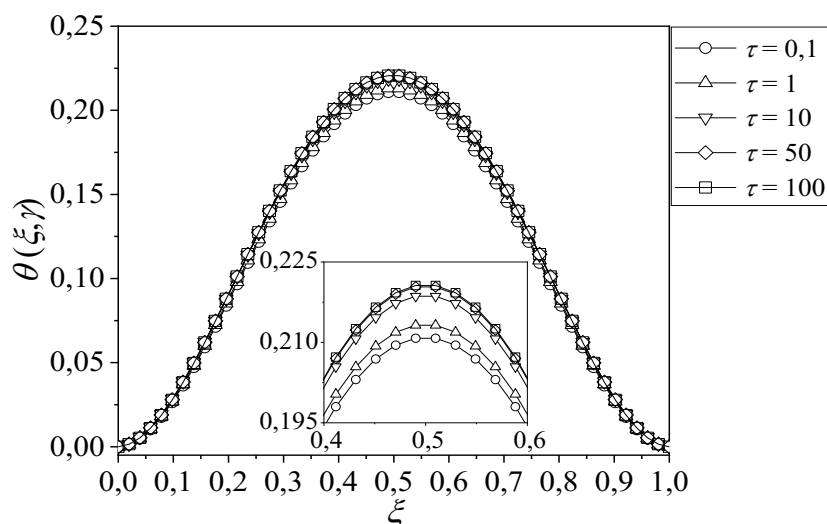


Figura 4.28 - Influência do parâmetro τ nos perfis de temperatura adimensional para γ igual a 1,5 usando o MDFF.

Observa-se nesta figura a simetria em relação à coordenada espacial, pois, independentemente do valor de τ , a maior temperatura adimensional é observada em $\zeta=0,5$. Também se verifica que as temperaturas adimensionais obtidas aumentam com o incremento no valor de τ . Por isso, também se observam maiores valores de temperaturas adimensionais máximas do tecido à medida que o valor desse parâmetro aumenta. Quanto menor o valor de τ , mais o perfil de temperatura adimensional aproxima-se do obtido pelo modelo tradicional de transferência de calor, baseado na Lei de Fourier, quando se tem a ordem fracionária equivalente a 2. Qualitativamente, os valores obtidos com a aplicação do MDFF são condizentes com os reportados por Wang et. al (2021).

É importante destacar que, do ponto de vista matemático, a variação dos parâmetros deste modelo hiperbólico fracionário permite representar o aumento do número de graus de liberdade do processo em questão, isto é, pode-se melhorar a aderência entre os pontos experimentais e os preditos por um modelo apenas alterando os valores de α e τ . Assim, para problemas em que se observa um comportamento diferente do habitual, como em processos anômalos, pode-se empregar o conhecimento sobre tais parâmetros para melhorar a qualidade do modelo utilizado para representar tais fenômenos, sem ter que, necessariamente, sugerir novas hipóteses para a elaboração de um modelo físico.

4.4 Formulação e Resolução de Problemas Inversos

Conforme descrito no início deste capítulo, o item *iii* consiste em formular e resolver problemas inversos empregando pontos experimentais sintéticos e reais. Para essa finalidade considera-se o modelo diferencial hiperbólico fracionário, bem como um parabólico com

ordem inteira e um parabólico com ordem fracionária. Cabe destacar que estes dois últimos são versões simplificadas do modelo hiperbólico original e considerados nesta contribuição para fins de comparação.

Para os resultados apresentados a partir desta seção faz-se necessário destacar os seguintes pontos:

- O tempo de processamento (TP) será estimado usando um computador Notebook Intel Core i5-6200 com 8 GB de memória. Destaca-se que os valores apresentados de TP são os valores médios;
- Para a avaliação do problema direto em cada problema inverso é considerado como integrador o MDFFF proposto, sendo o sistema linear resultante desta abordagem resolvido considerando o Método da Decomposição LU (CAMPOS FILHO, 2018). Neste caso, é importante destacar que se optou por esta abordagem pelos resultados obtidos com a simulação dos problemas diretos;
- As condições iniciais e de contorno consideradas em cada aplicação são definidas conforme a literatura especializada consultada;
- Para a simulação de cada estudo de caso são considerados 100 pontos nas direções das variáveis espacial e temporal. Esses parâmetros foram escolhidos a partir de simulações preliminares, de forma que a solução encontrada não fosse dependente de um maior nível de refinamento;
- Para o problema inverso sintético é considerada a equação de energia hiperbólica fracionária. Já para os problemas inversos considerando pontos experimentais reais são empregados três modelos de transferência de massa, a saber, a Equação de Advecção-Dispersão Parabólica Inteira (EADPI) - com ordem inteira e parâmetro de atraso no tempo nulo; a Equação de Advecção-Dispersão Parabólica Fracionária (EADPF) - com ordem fracionária e parâmetro de atraso no tempo nulo; e a Equação de Advecção-Dispersão Hiperbólica Fracionária (EADHF) - com ordem não inteira e parâmetro de atraso no tempo diferente de zero. Cabe destacar que o modelo de advecção-dispersão foi empregado a partir dos resultados apresentados na literatura especializada e, neste caso, a equação diferencial parcial hiperbólica fracionária no espaço empregada nesta tese contempla as características deste modelo;
- Em cada problema inverso proposto os pontos experimentais (sintéticos ou reais) são definidos conforme a literatura especializada consultada. No caso dos pontos experimentais reais, os mesmos foram extraídos de trabalhos publicados na literatura

via execução do software *Digitizer*[®], isto é, a partir de gráficos os pontos são capturados de forma que estes possam ser utilizados para a formulação da função objetivo em cada problema inverso;

- A função objetivo empregada em cada estudo de caso é definida como sendo o somatório da diferença entre os pontos experimentais e os preditos por cada modelo. Sendo assim, para cada aplicação, a função objetivo é função da localização e dos pontos experimentais disponíveis;
- O espaço de projeto proposto em cada aplicação é definido a partir da literatura especializada consultada;
- Para a resolução dos problemas inversos, considera-se o algoritmo de Evolução Diferencial e os seguintes parâmetros: tamanho da população igual a 25, número de gerações equivalente a 100, probabilidade de cruzamento e taxa de perturbação iguais a 0,8 e a estratégia número 7 (Storn e Price, 1995). Com este conjunto de parâmetros é necessário avaliar cada candidato $25+25 \times 100$ vezes. Cabe ressaltar que, para a obtenção dos valores médios e dos desvios padrão, cada problema inverso é resolvido 20 vezes considerando execuções independentes. É importante destacar que estes parâmetros foram escolhidos a partir de simulações preliminares;
- Para corrigir as unidades nos modelos fenomenológicos fracionários, a metodologia apresentada na seção 3.3 do capítulo anterior é utilizada. Neste caso, o operador difusivo fracionário é representado como:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \frac{1}{\sigma^{(2-\alpha)}} \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha}, \quad 1 < \alpha \leq 2, \quad (4.42)$$

em que σ é o parâmetro introduzido para corrigir a dimensão do termo fracionário. Com esta substituição garante-se que o operador difusivo fracionário sempre será dimensionalmente coerente. Para que o parâmetro σ não interfira, quantitativamente, nos perfis simulados, este é definido como sendo igual à unidade;

- Finalmente, cabe ressaltar que a única contribuição fracionária nos modelos estudados é no termo difusivo devido à generalização das Leis de Fourier e Fick, conforme destacado anteriormente. Assim, apesar de ser possível representar outros termos diferenciais por ordens não inteiras, neste trabalho apenas o termo difusivo é considerado como fracionário nos modelos parabólicos e hiperbólicos analisados.

4.4.1 Problema Inverso Sintético

Para validar a metodologia proposta e apresentada no capítulo anterior para a resolução de problemas inversos, nesta seção considera-se um problema inverso sintético, em que os pontos experimentais são gerados a partir do modelo de simulação. Assim, como o vetor de variáveis de projeto é conhecido, pode-se avaliar a robustez do algoritmo de Evolução Diferencial associado ao modelo diferencial hiperbólico parcial fracionário no espaço considerado.

Dentre as inúmeras aplicações que podem ser desenvolvidas com o tradicional modelo de transferência de calor, pode-se destacar o seu emprego na quantificação de queimaduras (TOLEDO; LOUREIRO, 2014). Neste caso, a partir da integração do modelo diferencial é possível mensurar o nível de queimadura na pele humana via avaliação do dano térmico (XU; LU, 2011; OLIVEIRA; STRÖHER; STRÖHER, 2016).

De forma simplificada, a pele humana pode ser subdividida em três camadas, a saber, a epiderme, a derme e a hipoderme (subcutâneo) (ver a Figura 4.29), sendo a mesma capaz de suportar temperaturas de aproximadamente 44°C sem sofrer nenhum tipo de lesão ou dano (XU; LU, 2011).

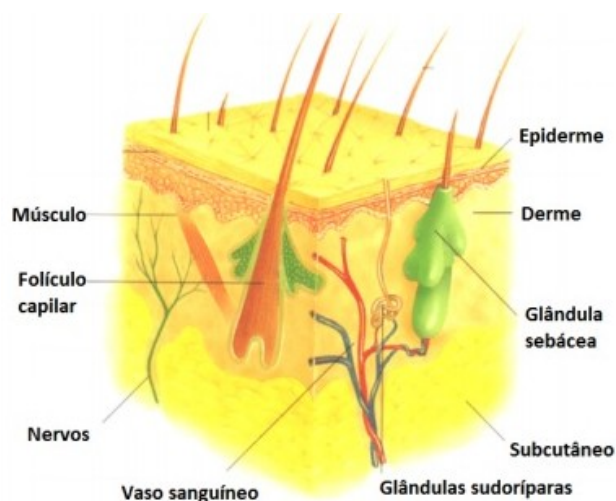


Figura 4.29 - Representação esquemática da pele humana (TOLEDO; LOUREIRO, 2014).

A presença de uma fonte externa de calor sobre o tecido gera mudanças em sua fisiologia, tais como o aumento na perfusão sanguínea, na permeabilidade vascular e na atividade metabólica (CONCEIÇÃO, 2014). O fluxo sanguíneo é o parâmetro que mais interfere no fenômeno da transferência de calor, visto que o escoamento de sangue pelo sistema vascular é um dos principais veículos pelos quais o calor é dissipado dos tecidos.

Dessa forma, quanto maior a vazão de sangue maior é a dispersão de calor gerado e, consequentemente, menor o dano ao tecido atingido (CONCEIÇÃO, 2014).

Os modelos matemáticos empregados para a descrição do processo de transferência de calor em tecidos têm sido estudados desde meados do século XIX. Desde então, muitas representações matemáticas têm sido propostas para descrever a complexa interação entre o sistema vascular e os tecidos (ZHU, 2009). Dentre estes modelos, o mais empregado foi proposto por Harry H. Pennes em 1948. Este modelo considera termos relacionados com o metabolismo e o fluxo sanguíneo.

Matematicamente, o modelo proposto por Pennes (1948) no contexto hiperbólico fracionário-espaçial unidimensional sem os termos de geração de calor metabólico e calor gerado é dado pela Equação (4.43).

$$\tau \rho_t c_t \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + (\rho_t c_t + \tau \rho_b c_b w_b) \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_b c_b w_b (T - T_{amb}) = k \frac{\partial^\alpha T}{\partial x^\alpha}, \quad t > 0 \text{ e } 0 \leq x \leq L, \quad (4.43)$$

em que x é a coordenada espacial, com comprimento total equivalente a L , t é a coordenada temporal, T é a temperatura, k é a condutividade térmica, c_t e c_b representam o calor específico do tecido e do sangue, respectivamente, ρ_t e ρ_b representam a densidade do tecido e do sangue, respectivamente, w_b é o coeficiente de perfusão sanguínea, T_{amb} é a temperatura ambiente, que representa a temperatura do sangue abaixo da camada subcutânea, τ é o parâmetro de atraso no tempo e α é a ordem do modelo ($1 < \alpha \leq 2$). Ressalta-se que se τ for igual a zero tem-se um modelo parabólico. Caso contrário, tem-se o modelo hiperbólico. Além disso, se α é inteiro tem-se um modelo diferencial parcial com ordem inteira em relação à variável espacial. Caso contrário, tem-se um modelo diferencial parcial com ordem fracionária.

Para simular a fonte de calor na pele, considera-se que em x igual a zero a temperatura é equivalente a 60°C . Em $x=L$ tem-se a condição de fluxo de calor nulo. Inicialmente, é considerado que o sistema encontra-se à temperatura de 37°C e que o fluxo de calor é nulo. Matematicamente, tais condições são definidas pelas Equações (4.44), (4.45), (4.46) e (4.47).

$$T(t,0) = 60^\circ\text{C}, \quad t > 0 \text{ e } x = 0, \quad (4.44)$$

$$\frac{\partial T(t,L)}{\partial x} = 0, \quad t > 0 \text{ e } x = L, \quad (4.45)$$

$$T(0,x) = 37^\circ\text{C}, \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq L, \quad (4.46)$$

$$\frac{\partial T(0,x)}{\partial t} = 0, \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq L. \quad (4.47)$$

Para fins de aplicação, considera-se que a pele é constituída apenas pelo tecido subcutâneo, cujas propriedades termo-físicas são apresentadas na Tabela 4.8 (TOLEDO; LOUREIRO, 2014).

Tabela 4.8 - Propriedades termo-físicas do tecido subcutâneo (TOLEDO; LOUREIRO, 2014).

Propriedade	Unidade	Valor
L	mm	10,00
ρ_t	g/mm^3	$1,0 \times 10^{-3}$
c_t	$\text{J/g}^\circ\text{C}$	2,50
k	$\text{W/mm}^\circ\text{C}$	$2,1 \times 10^{-4}$
c_b	$\text{J/g}^\circ\text{C}$	3,77
$w_b \rho_b$	1/s	$1,32 \times 10^{-3}$

Conforme comentado anteriormente, para corrigir a unidade do termo difusivo, considera-se a inclusão do fator $1/(\sigma^{(2-\alpha)})$ na Equação (4.43), isto é:

$$\tau \rho_t c_t \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + (\rho_t c_t + \tau \rho_b c_b w_b) \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_b c_b w_b (T - T_{amb}) = \frac{1}{\sigma^{(2-\alpha)}} k \frac{\partial^\alpha T}{\partial x^\alpha}, \quad t > 0 \text{ e } 0 \leq x \leq L, \quad (4.48)$$

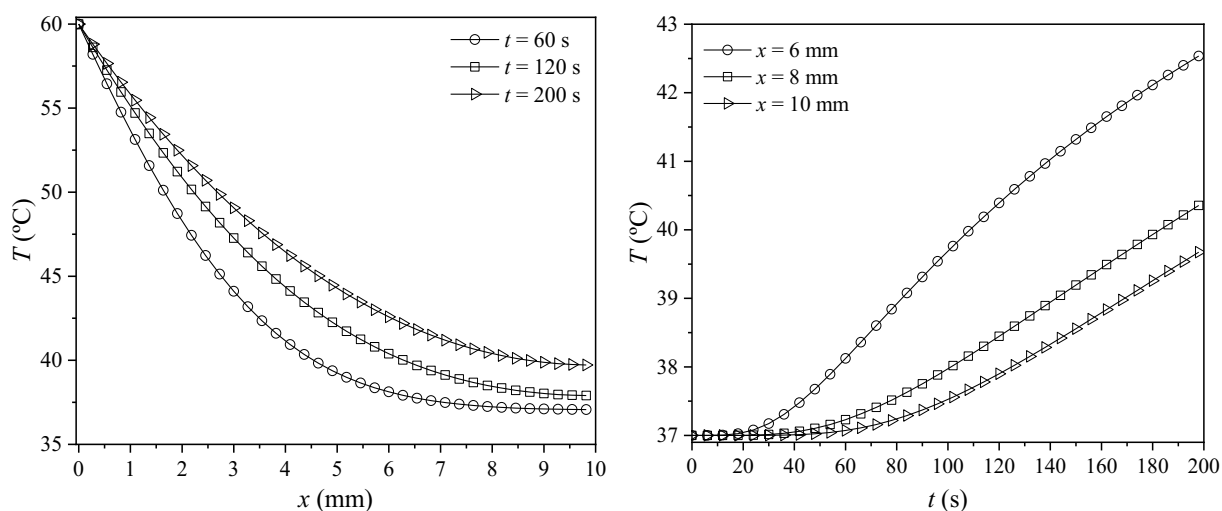
em que σ é o parâmetro introduzido para corrigir a dimensão do termo fracionário e definido como sendo igual à unidade para que o mesmo não interfira, quantitativamente, nos perfis simulados.

A seguir apresentam-se alguns estudos de caso para fins da avaliação da influência do parâmetro τ e da ordem α nos perfis obtidos, bem como da formulação e resolução de um problema inverso considerando pontos experimentais sintéticos com o objetivo de se obter os valores de τ e α , usando o algoritmo de Evolução Diferencial (ED).

- Estudo de Caso A: Problema Direto para o Modelo Parabólico com Ordem Inteira

A Figura 4.30(a) apresenta o perfil de temperatura em função da variável espacial para os tempos de simulação equivalentes a 60, 120 e 200 s, considerando-se o problema direto para o modelo parabólico que apresenta ordem inteira. Nesta figura observa-se que, para uma posição fixa, a temperatura aumenta à medida que o tempo eleva-se. Isso está de acordo com o esperado, já que, com o incremento do tempo, o efeito da fonte de calor torna-se mais significativo.

Na Figura 4.30(b) é apresentado o perfil de temperatura em função do tempo para as posições iguais a 6, 8 e 10 mm. Nesta figura podem-se verificar maiores temperaturas à medida que o valor da variável espacial diminui. Também se esperava esse resultado, pois quanto menor o valor de x maior é a proximidade em relação à fonte de calor.



(a) Temperatura versus distância para t iguais a 60, 120 e 200 s. (b) Temperatura versus tempo para x iguais a 6, 8 e 10 mm.

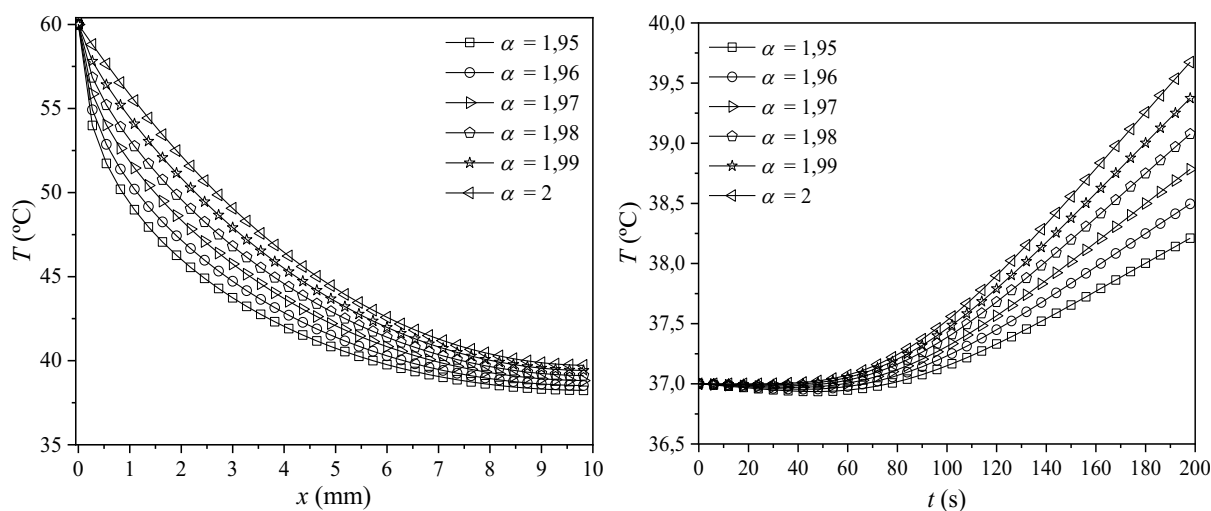
Figura 4.30 - Perfis de temperatura nas direções de x (a) e de t (b) para o modelo parabólico com ordem inteira.

- Estudo de Caso B: Influência do Parâmetro α nos Perfis de Temperatura no Modelo Parabólico

Para avaliar o efeito da ordem fracionária no modelo parabólico, no qual o parâmetro de atraso no tempo é nulo, são considerados valores de α equivalentes a 1,95, 1,96, 1,97, 1,98, 1,99 e 2.

Na Figura 4.31(a) apresenta-se o perfil de temperatura em função da variável espacial para os diferentes valores da ordem não inteira e o tempo de simulação igual a 200 s. A Figura 4.31(b) apresenta o perfil de temperatura em função do tempo para os valores considerados de α e a posição equivalente a 10 mm. Esses valores referentes às coordenadas espacial e temporal foram escolhidos por representarem a profundidade limite da camada da pele e o maior tempo considerado nas simulações.

Em ambas as figuras pode-se observar uma variação significativa do perfil de temperatura à medida que o valor do parâmetro α é modificado. Com base nesse resultado, é possível verificar que o mecanismo em que ocorre a transferência de calor na pele é significativamente influenciado pela heterogeneidade espacial do meio. Além disso, é demonstrado que o conhecimento do valor da ordem não inteira nesta aplicação é muito importante. Conforme esperado, pode-se verificar uma maior proximidade entre os perfis obtidos e os que se obtêm ao se utilizar a Lei de Fourier à medida que o valor de α aproxima-se de 2. Em ambas as figuras observa-se que o aumento da ordem não inteira implica em maiores valores de temperatura.

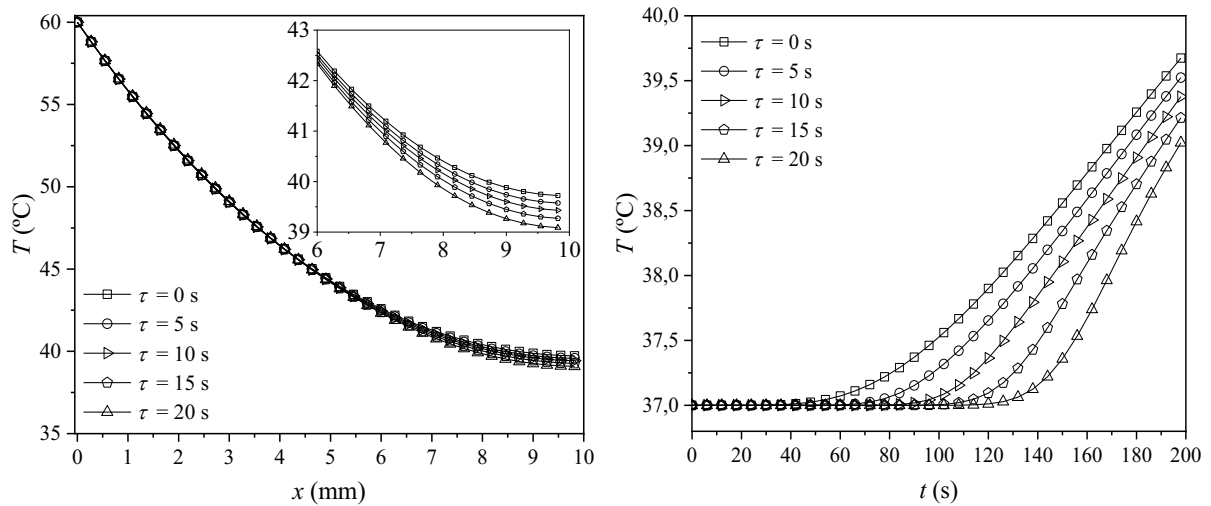


(a) Temperatura versus distância para t igual 200 s e diferentes valores de α . (b) Temperatura versus tempo para x igual a 10 mm e diferentes valores de α .

Figura 4.31 - Perfis de temperatura nas direções de x (a) e de t (b) considerando diferentes valores do parâmetro α para o modelo parabólico.

- Estudo de Caso C: Influência do Parâmetro τ nos Perfis de Temperatura no Modelo Hiperbólico com Ordem Inteira

Na Figura 4.32 observa-se o efeito do parâmetro de atraso no tempo no modelo hiperbólico com ordem inteira considerando τ iguais a 0, 5, 10, 15 e 20 s. A Figura 4.32(a) apresenta o perfil de temperatura em função da variável espacial para o tempo igual a 200 s e os diferentes valores do parâmetro de atraso no tempo. Nesta figura até, aproximadamente, a posição equivalente a 6 mm não se observa uma diferença muito significativa entre os perfis obtidos. Por outro lado, na região entre $x=6$ mm e $x=10$ mm verifica-se uma variação maior dos valores de temperatura. Visualmente, isso não é muito perceptível devido à escala do eixo das ordenadas. Porém, a aplicação de um zoom nessa região permite que seja observada essa diferença. Já na Figura 4.32(b) é apresentado o perfil de temperatura em função do tempo para $x=10$ mm. Nesse caso, como a escala do eixo das ordenadas é menor do que na Figura 4.32(a), pode-se visualizar com mais clareza o efeito do parâmetro τ nos perfis de temperatura obtidos. Além disso, estas duas figuras mostram o aumento da temperatura à medida que se reduz o valor do parâmetro de atraso no tempo. Isso demonstra que a velocidade de propagação do sinal térmico é maior. Logo, a transferência de calor ocorre mais rapidamente conforme o valor de τ é reduzido. A diminuição deste parâmetro também faz com que os perfis de temperatura sejam mais próximos daqueles que são obtidos quando se considera o modelo tradicional de transferência de calor.



(a) Temperatura versus distância para t igual 200 s e diferentes valores de τ . (b) Temperatura versus tempo para x igual a 10 mm e diferentes valores de τ .

Figura 4.32 - Perfis de temperatura nas direções de x (a) e de t (b) considerando diferentes valores do parâmetro τ para o modelo hiperbólico com ordem inteira.

- Estudo de Caso D: Formulação de um Problema Inverso Considerando o Modelo Hiperbólico Fracionário

Com o objetivo de realizar a estimação dos parâmetros do modelo hiperbólico fracionário, propõe-se um problema inverso cuja função objetivo é dada pelo somatório da diferença entre os pontos experimentais sintéticos e os preditos pelo modelo para x igual a 10 mm e t igual a 200 s, sendo α e τ equivalentes a 1,95 e 20 s, respectivamente. Matematicamente, este problema pode ser formulado de acordo com a Equação (4.49).

$$\min_{\alpha, \tau} FO = \sum_{i=1}^{M_1} \frac{(T_{200,i}^{\text{exp}} - T(200, x_i))^2}{\max(T^{\text{exp}}(200, x))^2} + \sum_{j=1}^{M_2} \frac{(T_{j,10}^{\text{exp}} - T(t_j, 10))^2}{\max(T^{\text{exp}}(t, 10))^2}, \quad (4.49)$$

em que FO é a função objetivo, M_1 e M_2 representam as quantidades de pontos experimentais conhecidos, T^{exp} e $T(t, x)$ representam os pontos experimentais e simulados pelo modelo proposto, respectivamente.

O problema inverso deve satisfazer os perfis obtidos via integração do modelo diferencial fracionário, bem como os limites laterais para cada variável de projeto, a saber, $1,9 \leq \alpha \leq 2$ e $10 \text{ s} \leq \tau \leq 30 \text{ s}$.

Como não se conhecem os pontos experimentais, são gerados pontos sintéticos, conforme a Equação (4.50).

$$P^{\text{exp}} = P^{\text{sim}} + \delta \times \text{rand} \times \Lambda, \quad (4.50)$$

em que P^{exp} e P^{sim} representam os pontos experimentais sintéticos e os pontos simulados, respectivamente, δ é o desvio padrão considerado para o experimento sintético, Λ é amplitude

da variável dependente em análise, dada pela diferença entre o maior e o menor valor observado, e rand é um gerador de números aleatórios dentro do intervalo $[-1, 1]$.

Para fins de aplicação, são considerados três valores para o desvio padrão, a saber, 0%, 5% e 10%. Quando se tem um valor nulo de δ , não existem perturbações no modelo, ou seja, P^{exp} e P^{sim} são idênticos.

Na Figura 4.33 são apresentados os perfis de temperatura em função da distância e do tempo para α igual a 1,95, τ igual a 20 s, M_1 e M_2 iguais a 50 e diferentes valores de δ considerados na formulação do problema inverso. Nesta figura pode-se observar que, como era esperado, quanto maior o valor do parâmetro δ maior é a perturbação associada.

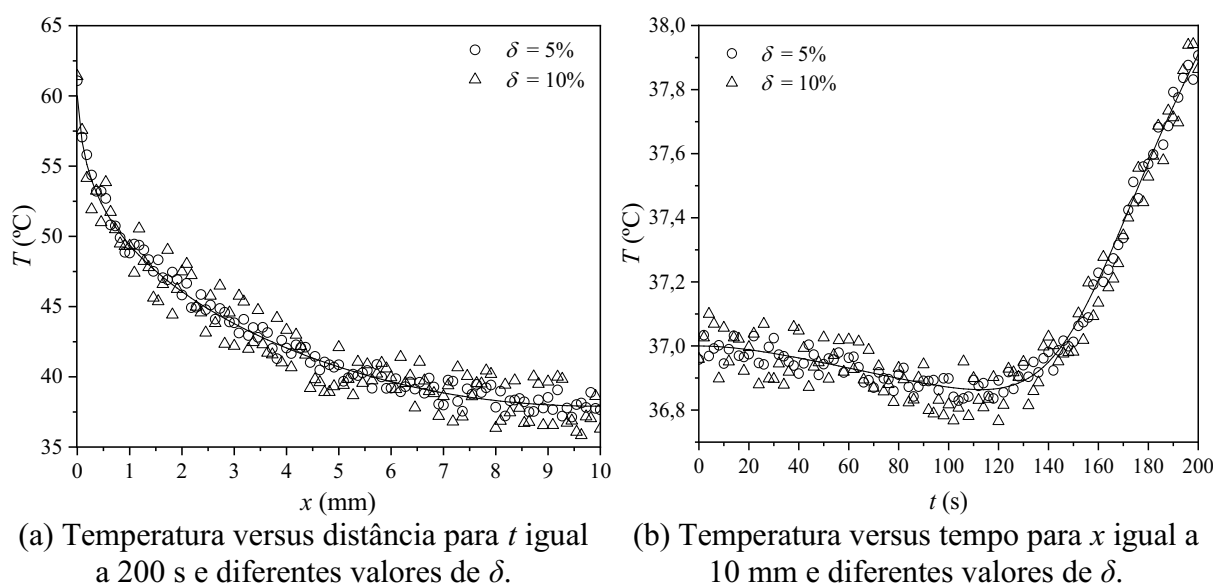


Figura 4.33 - Perfis de temperatura sintéticos nas direções de x (a) e de t (b) para o modelo hiperbólico fracionário.

A Tabela 4.9 apresenta os resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial e os diferentes conjuntos de dados experimentais sintéticos.

Tabela 4.9 - Resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando diferentes níveis de ruído para o modelo hiperbólico fracionário.

Ruído	α	τ (s)	FO	TP^c (min)
0%	1,9500 ^a	19,9999	$9,0000 \times 10^{-15}$	31,03
	$1,2017 \times 10^{-10b}$	$4,1502 \times 10^{-7}$	$1,9159 \times 10^{-17}$	
5%	1,9511	20,3835	$9,3887 \times 10^{-3}$	35,79
	$3,6902 \times 10^{-9}$	$8,4887 \times 10^{-6}$	$8,8906 \times 10^{-15}$	
10%	1,9488	20,2303	$5,4747 \times 10^{-2}$	37,26
	$1,7867 \times 10^{-9}$	$2,4453 \times 10^{-6}$	$7,9376 \times 10^{-16}$	

^aMelhor valor, ^bdesvio padrão e ^cvalor médio requerido em cada execução do algoritmo de ED.

Nesta tabela pode-se observar uma variação significativa entre o melhor valor obtido da função objetivo para os dados experimentais sem ruído e o melhor valor da mesma para os dados experimentais que apresentam ruído de 5%. Também se verifica um maior valor para FO quando o ruído equivale a 10%. Isso demonstra que, como esperado, o melhor valor obtido da função objetivo aumenta à medida que o ruído é incrementado. Para os três níveis de ruído avaliados, observam-se valores baixos dos desvios padrão dos parâmetros do modelo e da função objetivo. Isso indica que o algoritmo está sempre convergindo para a melhor solução. Além disso, verifica-se que, para os dados experimentais sem ruído, o melhor valor obtido da função objetivo é praticamente nulo, pois se encontra na ordem de 10^{-15} , e os valores de α e τ obtidos pelo algoritmo são muito próximos aos que foram utilizados para a obtenção dos pontos simulados. Esses resultados demonstram que o algoritmo de Evolução Diferencial foi eficiente para encontrar a solução do problema inverso proposto.

Finalmente, ressalta-se que a formulação e a resolução deste problema inverso sintético permitiram validar a metodologia proposta, isto é, ficou demonstrada a qualidade do algoritmo de Evolução Diferencial. A seguir são apresentados os resultados obtidos com a formulação e resolução de problemas inversos considerando pontos experimentais reais disponíveis na literatura especializada.

4.4.2 Problema Inverso Anômalo A

A estimação de parâmetros presentes em modelos anômalos é de fundamental importância para a sua caracterização. Os modelos avaliados nesta tese apresentam, em geral, dois parâmetros, a saber, o fator de atraso no tempo (τ) e a ordem fracionária da derivada espacial (α). Ambos os parâmetros são provenientes da aplicação de generalizações das Leis de Fourier e Fick, nas quais se considera a equação de Cattaneo, em que se encontra o fator de atraso no tempo. Também é considerada uma derivada de ordem não inteira em relação à variável espacial somente no termo difusivo. Os valores dos dois parâmetros dos modelos estudados podem ser utilizados no entendimento dos mecanismos em que ocorrem as transferências de calor e massa nos problemas considerados.

Nesta primeira aplicação consideram-se os experimentos realizados por Zhao et al. (2016) para determinar a difusividade de CO_2 em um meio poroso saturado com n-tetradecano líquido usando a técnica de imagem por ressonância magnética. O recipiente em que se encontrava a amostra consistia em um tubo de vidro que foi preenchido com esferas de vidro. O gás presente em um cilindro de aço inoxidável era injetado no meio poroso até que o equilíbrio do sistema fosse atingido, condição em que o experimento era finalizado. O gás e a

fase líquida foram mantidos a temperaturas constantes iguais a 20 °C e 30 °C, respectivamente, e a pressão foi variada de 2000 kPa a 5000 kPa.

Chang e Sun (2018) propuseram, a partir dos experimentos realizados por Zhao et al. (2016), problemas inversos considerando a tradicional equação de advecção-dispersão no contexto fracionário e ordens não inteiras no tempo e no espaço para fins da estimação da velocidade média, do coeficiente de dispersão do processo e das respectivas ordens fracionárias.

Para fins de aplicação da metodologia proposta, nesta seção são formulados e resolvidos três problemas inversos considerando pontos experimentais reais e diferentes modelos fenomenológicos. O primeiro modelo descreve o fenômeno de transferência de massa via a equação de advecção-dispersão com ordem inteira e fator de atraso no tempo nulo (modelo parabólico). O segundo modelo faz uso da equação de advecção-dispersão com ordem fracionária e fator de atraso no tempo nulo (modelo parabólico). O terceiro modelo considera a equação de advecção-dispersão com ordem não inteira e fator de atraso no tempo diferente de zero (modelo hiperbólico). Cabe ressaltar que o modelo hiperbólico é uma generalização da equação tradicional de advecção-dispersão com ordem inteira. Conforme apresentado por Gomez et al. (2010), o modelo hiperbólico surge da teoria da difusão hiperbólica, ou seja, da generalização da tradicional Lei de Fick via a abordagem proposta por Cattaneo (1958).

Assim, considere a Equação de Advecção-Dispersão Hiperbólica Fracionária (EADHF):

$$\tau \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{1}{\sigma^{(2-\alpha)}} K \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha}, \quad t > 0, \quad 0 \leq x \leq L \quad \text{e} \quad 1 < \alpha \leq 2, \quad (4.51)$$

em que t e x representam as coordenadas temporal e espacial, respectivamente, C é a concentração, τ é o parâmetro de atraso no tempo, α é a ordem fracionária referente ao termo difusivo, v é a velocidade média, K é o coeficiente de dispersão e σ é o parâmetro introduzido para corrigir a dimensão do termo fracionário e considerado como sendo igual à unidade. Neste modelo, as condições inicial e de contorno, definidas por Chang e Sun (2018) para o problema parabólico, são dadas pelas Equações (4.52), (4.53) e (4.54).

$$C(0, x) = 0, \quad t = 0 \quad \text{e} \quad 0 \leq x \leq L, \quad (4.52)$$

$$C(t, 0) = \begin{cases} 1, & 0 < t \leq 10 \\ 0, & t > 10 \end{cases}, \quad t > 0 \quad \text{e} \quad x = 0, \quad (4.53)$$

$$\frac{\partial C(t, L)}{\partial x} = 0, \quad t > 0 \quad \text{e} \quad x = L. \quad (4.54)$$

Em resumo, para formular cada problema inverso consideram-se os seguintes modelos, cujas características são descritas como segue:

- Equação de Advecção-Dispersão Parabólica Inteira (EADPI). Neste modelo, a ordem é inteira ($\alpha=2$) e o parâmetro de atraso no tempo (τ) é igual a 0 na EADHF. Assim, deseja-se obter a velocidade média (v) e o coeficiente de dispersão (K). Para essa finalidade consideram-se os seguintes espaços de projeto (CHANG; SUN, 2018): $0,001 \text{ mm/min} \leq v \leq 0,006 \text{ mm/min}$ e $0,001 \text{ mm}^2/\text{min} \leq K \leq 0,050 \text{ mm}^2/\text{min}$.
- Equação de Advecção-Dispersão Parabólica Fracionária (EADPF). Neste modelo, considera-se que a ordem fracionária (α) é diferente de 2. Assim, neste problema inverso deseja-se estimar, além de v e K , a ordem não inteira (α), sabendo que o parâmetro τ é nulo. Assim, são definidos os seguintes espaços de projeto (CHANG; SUN, 2018): $0,001 \text{ mm/min} \leq v \leq 0,006 \text{ mm/min}$, $0,001 \text{ mm}^2/\text{min} \leq K \leq 0,050 \text{ mm}^2/\text{min}$ e $1,5 \leq \alpha \leq 2$. Cabe enfatizar que o termo fracionário foi inserido apenas na contribuição difusiva, já que se pretende avaliar a generalização da tradicional Lei de Fick usando a abordagem proposta por Cattaneo (1958).
- O terceiro problema inverso consiste no uso da EADHF sem qualquer simplificação, ou seja, deseja-se estimar v , K , α e τ . Assim, são definidos os seguintes limites (CHANG; SUN, 2018): $0,001 \text{ mm/min} \leq v \leq 0,006 \text{ mm/min}$, $0,001 \text{ mm}^2/\text{min} \leq K \leq 0,050 \text{ mm}^2/\text{min}$ e $1,5 \leq \alpha \leq 2$. Os limites referentes ao parâmetro de atraso no tempo foram determinados, após execuções preliminares, como sendo iguais a $0 \leq \tau \leq 1 \text{ min}$. Cabe ressaltar que, para o modelo hiperbólico, é necessário definir uma nova condição para a concentração no tempo igual a zero. Neste caso, como foi definido que $C(0,x)$ é equivalente a zero, pode-se dizer que a derivada de $C(0,x)$ em relação a t é nula. Assim, tem-se a condição inicial dada pela Equação (4.55). Além disso, conforme apresentado para o modelo anterior, o termo fracionário foi inserido apenas na contribuição difusiva.

$$\frac{\partial C(0,x)}{\partial t} = 0, \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq L. \quad (4.55)$$

Uma vez especificado o vetor de variáveis de projeto em cada problema inverso, o mesmo é determinado via aplicação do algoritmo de Evolução Diferencial. Para essa finalidade a função objetivo (FO) é definida como sendo o somatório da diferença entre os pontos experimentais e os preditos por cada modelo, para t igual a 192 min e $0 \leq x \leq L$ (16,5

mm), ponderado pelo maior valor experimental observado. Matematicamente, FO é descrita como:

$$\min FO = \sum_{i=1}^{M_1} \frac{(C_{192,i}^{\text{exp}} - C(192, x_i))^2}{\max(C^{\text{exp}}(192, x))^2}, \quad (4.56)$$

em que M_1 representa a quantidade de pontos experimentais conhecidos, C^{exp} e $C(t, x)$ representam os pontos experimentais e simulados pelo modelo proposto, respectivamente. O operador max representa o máximo valor experimental observado. Os pontos experimentais considerados neste trabalho foram extraídos do trabalho de Zhao et al. (2016).

Na Tabela 4.10 são apresentados os resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando diferentes modelos diferenciais para o problema inverso anômalo A.

Tabela 4.10 - Resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando diferentes modelos diferenciais para o problema inverso anômalo A.

Modelo	α	τ (min)	v (mm/min)	K (mm ² /min)	FO	TP ^c (min)
EADPI	-	-	0,0010	0,0337	0,5053	18,47
	-	-	$0,3905 \times 10^{-8}$	$0,5435 \times 10^{-9}$	$0,2543 \times 10^{-12}$	
EADPF	1,8332 ^a	-	0,0060	0,0282	0,2942	18,46
	$0,7225 \times 10^{-5b}$	-	0,0009	0,0570	0,0019	
EADHF	1,7513	0,1575	0,0017	0,0324	0,1850	18,53
	0,0396	0,0433	0,0002	0,0053	0,0180	

^aMelhor valor, ^bdesvio padrão e ^cvalor médio requerido em cada execução do algoritmo de Evolução Diferencial.

Nesta tabela verifica-se a diminuição do valor da função objetivo à medida que o número de variáveis de projeto aumenta, isto é, o modelo EADHF é o que apresentou o melhor valor para a função objetivo. Este resultado era esperado, já que a elevação do número de variáveis de projeto e, conseqüentemente, do número de graus de liberdade, aumenta a capacidade de aderência do modelo em relação aos pontos experimentais.

Como se pode observar, a velocidade média predita pela equação tradicional de advecção-dispersão é inferior à encontrada pela EADPF. Isso pode ser explicado pela existência de caminhos preferenciais nos quais as partículas movimentam-se mais rapidamente, o que caracteriza um processo superdifusivo. As características não locais desse processo podem ser capturadas pelo termo de ordem fracionária em relação à variável espacial. Por outro lado, verifica-se uma redução da velocidade média quando se considera a equação de advecção-dispersão hiperbólica fracionária. Pode-se justificar esse resultado pela ocorrência de um processo subdifusivo, que se deve ao preenchimento de alguns poros do

meio por partículas de gás. Esse processo diminui a velocidade das partículas. A razão entre a velocidade média e o coeficiente de dispersão obtidos para os três modelos avaliados apresenta valores baixos. Isso demonstra que nos três casos o fenômeno dominante corresponde à dispersão, o que permite que ambos os parâmetros sejam considerados constantes.

Na Figura 4.34 são apresentados os perfis de concentração experimental e preditos por cada um dos modelos considerados para t igual a 192 min em função da variável espacial.

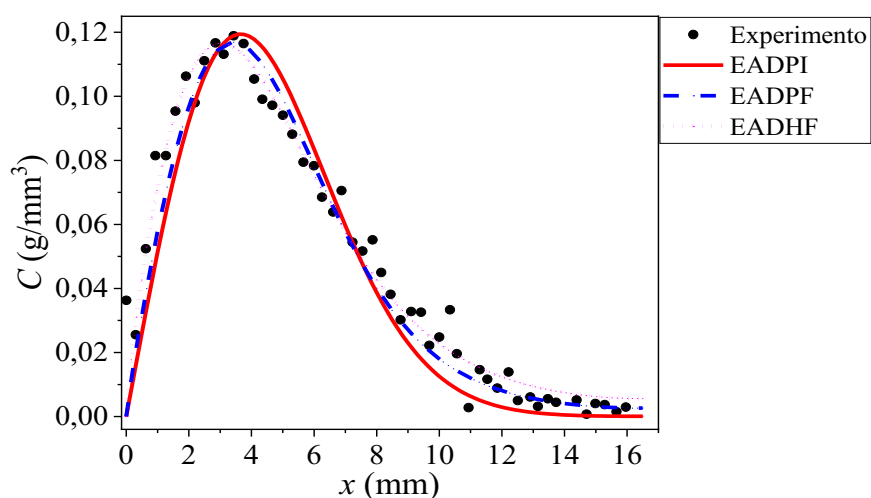


Figura 4.34 - Perfis de concentração experimental e preditos por cada um dos modelos considerados no problema inverso anômalo A.

Nesta figura observa-se que a concentração aumenta até atingir o valor máximo. Posteriormente, a concentração diminui com o incremento do valor da variável espacial. Também se verifica que a posição na qual ocorre o valor máximo de concentração diminui à medida que a quantidade de parâmetros do modelo aumenta. Além disso, pode ser observado que a precisão da equação de advecção-dispersão hiperbólica fracionária é superior à das demais equações consideradas. Isso está de acordo com os valores de FO apresentados na Tabela 4.10.

Chang e Sun (2018) empregaram os dados experimentais considerados neste estudo de caso para resolver problemas inversos. Porém, o modelo utilizado pelos autores apresenta derivadas de ordem não inteira em relação às duas variáveis independentes. Além disso, o referido modelo não apresenta o parâmetro de atraso no tempo. Os autores obtiveram uma velocidade média igual a 0,01 mm/min e um coeficiente de dispersão equivalente a 0,086 mm^{1,85}/min^{0,77}. Os valores das ordens não inteiras obtidos pelos autores foram equivalentes a 0,77 para a derivada temporal e 1,85 para a derivada espacial. Como o modelo considerado por Chang e Sun (2018) apresenta diferenças em relação aos modelos utilizados nesta seção,

não é possível realizar uma comparação quantitativa entre os resultados obtidos. Apesar disso, podem-se comparar os resultados de maneira qualitativa, pois os perfis de concentração obtidos demonstram que os modelos que apresentam uma maior quantidade de parâmetros são mais precisos do que o modelo tradicional de advecção-dispersão, o que também é verificado no trabalho de Chang e Sun (2018). Além disso, os autores também obtiveram uma velocidade média menor quando se considerou a equação tradicional de advecção-dispersão, em comparação com a velocidade média encontrada para o modelo que apresentava derivadas de ordem fracionária em relação às variáveis temporal e espacial.

4.4.3 Problema Inverso Anômalo B

Assim como na seção anterior, nesta também são formulados e resolvidos três problemas inversos considerando os modelos EADPI (Equação de Advecção-Dispersão Parabólica Inteira), EADPF (Equação de Advecção-Dispersão Parabólica Fracionária) e EADHF (Equação de Advecção-Dispersão Hiperbólica Fracionária). Neste caso, são empregados os pontos experimentais obtidos por Bromly e Hinz (2004). Para esta aplicação o objetivo é estimar a velocidade média, o coeficiente de dispersão, os intervalos de tempo em que a concentração máxima é considerada, a ordem fracionária e o parâmetro de atraso no tempo para colunas com comprimentos diferentes.

Fisicamente, Bromly e Hinz (2004) determinaram experimentalmente a concentração do corante azul brilhante FCF em função do tempo e da posição em colunas preenchidas com areia. Os autores utilizaram três colunas de mesmo diâmetro interno, equivalente a 11 cm, e diferentes comprimentos, iguais a 10, 20 e 40 cm. Na parte superior das colunas, introduzia-se água e o corante azul brilhante FCF era injetado por uma seringa na região central do topo das colunas. Foram consideradas duas quantidades diferentes de água na realização dos experimentos.

Os pontos experimentais obtidos por Bromly e Hinz (2004) encontram-se na forma adimensionalizada para a concentração. Assim, considera-se o modelo EADHF a seguir no contexto normalizado (para a concentração):

$$\tau \frac{\partial^2 C^*}{\partial t^2} + \frac{\partial C^*}{\partial t} = -v \frac{\partial C^*}{\partial x} + \frac{1}{\sigma^{(2-\alpha)}} K \frac{\partial^\alpha C^*}{\partial x^\alpha}, \quad t > 0, \quad 0 \leq x \leq L \quad \text{e} \quad 1 < \alpha \leq 2, \quad (4.57)$$

em que C^* é a concentração adimensional, L é o comprimento da coluna e σ é o parâmetro introduzido para corrigir a dimensão do termo fracionário e considerado como sendo igual à unidade. Cabe ressaltar que o termo fracionário foi inserido apenas na contribuição difusiva,

já que se pretende avaliar a generalização da tradicional Lei de Fick usando a abordagem proposta por Cattaneo (1958).

Neste caso, consideram-se as condições inicial e de contorno apresentadas nas Equações (4.58), (4.59) e (4.60), para o modelo parabólico, as quais foram definidas por Bromly e Hinz (2004).

$$C^*(0, x) = 0, \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq L, \quad (4.58)$$

$$C^*(t, 0) = \begin{cases} 0, & \text{se } t \leq t_1 \\ C^{\max}, & \text{se } t_1 < t \leq t_2, \quad t > 0 \text{ e } x = 0, \\ 0, & \text{se } t > t_2 \end{cases} \quad (4.59)$$

$$\frac{\partial C^*(t, L)}{\partial x} = 0, \quad t > 0 \text{ e } x = L, \quad (4.60)$$

em que t_1 e t_2 representam os instantes de tempo que definem a transição entre o valor mínimo e o máximo (C^{\max}) da concentração adimensional.

As seguintes informações são consideradas na formulação de cada problema inverso:

- EADPI: modelo em que o parâmetro de atraso no tempo (τ) é nulo e α é equivalente a 2 na EADHF. Para este problema deseja-se estimar a velocidade média (v), o coeficiente de dispersão (K), a concentração máxima (C^{\max}) e os instantes de tempo (t_1 e t_2). Os espaços de projeto para este problema inverso são definidos como sendo: $0,01 \text{ cm/min} \leq v \leq 5 \text{ cm/min}$; $0,0001 \text{ cm}^2/\text{min} \leq K \leq 5 \text{ cm}^2/\text{min}$; $50 \text{ min} \leq t_1 \leq 150 \text{ min}$; $50 \text{ min} \leq t_2 \leq 300 \text{ min}$ e $0,001 \leq C^{\max} \leq 0,05$.
- EADPF: modelo no qual α apresenta um valor não inteiro e o parâmetro de atraso no tempo (τ) é igual a zero na EADHF. Nesse caso, deseja-se estimar, além dos valores de v , K , C^{\max} , t_1 e t_2 , a ordem fracionária (α), considerando os seguintes espaços de projeto: $0,01 \text{ cm/min} \leq v \leq 5 \text{ cm/min}$; $0,0001 \text{ cm}^2/\text{min} \leq K \leq 5 \text{ cm}^2/\text{min}$; $50 \text{ min} \leq t_1 \leq 150 \text{ min}$; $50 \text{ min} \leq t_2 \leq 300 \text{ min}$; $0,001 \leq C^{\max} \leq 0,05$ e $1,2 \leq \alpha \leq 2$.
- EADHF: modelo em que se deseja estimar v , K , C^{\max} , t_1 , t_2 , α e τ . Para essa finalidade os seguintes espaços de projeto são definidos: $0,01 \text{ cm/min} \leq v \leq 5 \text{ cm/min}$; $0,0001 \text{ cm}^2/\text{min} \leq K \leq 5 \text{ cm}^2/\text{min}$; $50 \text{ min} \leq t_1 \leq 150 \text{ min}$; $50 \text{ min} \leq t_2 \leq 300 \text{ min}$; $0,001 \leq C^{\max} \leq 0,05$ e $1,2 \leq \alpha \leq 2$ e $0 \leq \tau \leq 10 \text{ min}$. Para avaliar esse modelo, é necessária a definição de uma nova condição para a concentração em t igual a zero. Como $C^*(0, x)$ é nula, pode-se dizer que a derivada de $C^*(0, x)$ em relação ao tempo equivale a zero. Assim, tem-se a seguinte condição adicional para a integração do modelo hiperbólico:

$$\frac{\partial C^*(0, x)}{\partial t} = 0, \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq L. \quad (4.61)$$

Para a resolução de cada problema inverso usando o algoritmo de Evolução Diferencial é necessário formular a função objetivo (FO) para cada coluna considerada. Nesse caso, define-se a FO como sendo o somatório da diferença entre os pontos experimentais e os preditos por cada modelo em $x=10$ cm para o tempo de operação de cada experimento, ponderado pelo maior valor experimental observado. Assim, descreve-se FO como:

$$\min FO = \sum_{i=1}^{M_1} \frac{(C_{i,10}^{\text{exp}} - C^*(t,10))^2}{\max(C^{*\text{exp}}(t,10))^2}, \quad (4.62)$$

em que M_1 representa a quantidade de pontos experimentais conhecidos. $C^{*\text{exp}}$ e $C^*(t,x)$ representam os pontos experimentais e simulados pelo modelo proposto, respectivamente. O operador max representa o máximo valor experimental observado.

A Tabela 4.11 apresenta os resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando diferentes modelos diferenciais para o problema inverso anômalo B.

Tabela 4.11 - Resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando diferentes modelos diferenciais para o problema inverso anômalo B.

$L=20$ cm									
Modelo	α	τ (min)	v (cm/min)	K (cm ² /min)	t_1 (min)	t_2 (min)	C^{max}	FO	TP ^c (min)
EADPI	-	-	0,1743 ^a	1,3647	54,4623	86,9025	0,0226	0,0993	21,2
	-	-	0,0022 ^b	0,0989	3,4545	5,4545	0,0008	0,0001	
EADPF	1,9511	-	0,2221	1,4473	55,6693	90,1289	0,0235	0,0661	22,2
	0,0452	-	0,0089	0,0341	5,4445	3,4545	0,0024	0,0011	
EADHF	1,9920	0,0563	0,0803	1,8098	53,1536	92,2189	0,0255	0,0530	23,5
	0,0023	0,0083	0,0124	0,0879	3,4121	3,9898	0,0011	0,0003	
$L=40$ cm									
Modelo	α	τ (min)	v (cm/min)	K (cm ² /min)	t_1 (min)	t_2 (min)	C^{max}	FO	TP (min)
EADPI	-	-	0,0961	0,7813	123,1061	170,5664	0,0132	0,0835	23,5
	-	-	0,0011	0,0341	2,5176	5,7876	0,0003	0,0001	
EADPF	1,7323 ^a	-	0,1226	0,9880	127,2797	183,2759	0,0123	0,0827	23,3
	0,0343 ^b	-	0,0033	0,0165	3,9898	4,6776	0,0003	0,0033	
EADHF	1,8360	0,7497	0,1051	1,0278	124,7268	181,0249	0,0125	0,0564	23,3
	0,0015	0,0043	0,0045	0,0676	1,7566	6,7756	0,0006	0,0011	

^aMelhor valor, ^bdesvio padrão e ^cvalor médio requerido em cada execução do algoritmo de Evolução Diferencial.

Nesta tabela pode-se observar o aumento da precisão dos modelos à medida que se eleva a quantidade de variáveis de projeto. Isso é demonstrado pela redução do valor da função objetivo, conforme era esperado. Observam-se valores de α mais próximos de 2 quando se considera a coluna de 20 cm. Isso indica que nessa coluna o efeito da heterogeneidade espacial do meio é menor do que na coluna de 40 cm. Verifica-se um valor

superior do parâmetro de atraso no tempo para a coluna maior. Isso demonstra que nessa coluna as partículas de corante levam mais tempo para se difundir do que na coluna menor.

Além disso, também se podem observar valores maiores de velocidade média quando se utiliza o modelo EADPF do que quando se considera a equação tradicional de advecção-dispersão. Isso se deve à presença de caminhos preferenciais no meio. Quando se utiliza o modelo EADHF os valores de v diminuem. Isso pode estar relacionado com a existência de zonas mortas no meio, o que causa um fenômeno subdifusivo. Para ambas as colunas e os três modelos considerados, verificam-se valores baixos da razão entre a velocidade média e o coeficiente de dispersão. Isso indica que em todos os casos a dispersão é mais considerável do que a advecção. Observam-se valores de coeficiente de dispersão maiores para a coluna de 20 cm. Isso demonstra que nessa coluna a dispersão é mais significativa do que na coluna maior. Verifica-se que a duração da transição entre os valores mínimo e máximo de concentração é maior para a coluna de 40 cm. Além disso, observam-se valores maiores da duração dessa transição à medida que o número de variáveis de projeto aumenta. Também se verifica que as concentrações máximas obtidas são maiores na coluna de 20 cm.

A Figura 4.35 apresenta os perfis experimentais e preditos por cada modelo para as colunas de 20 e 40 cm e $x=10$ cm em função do tempo.

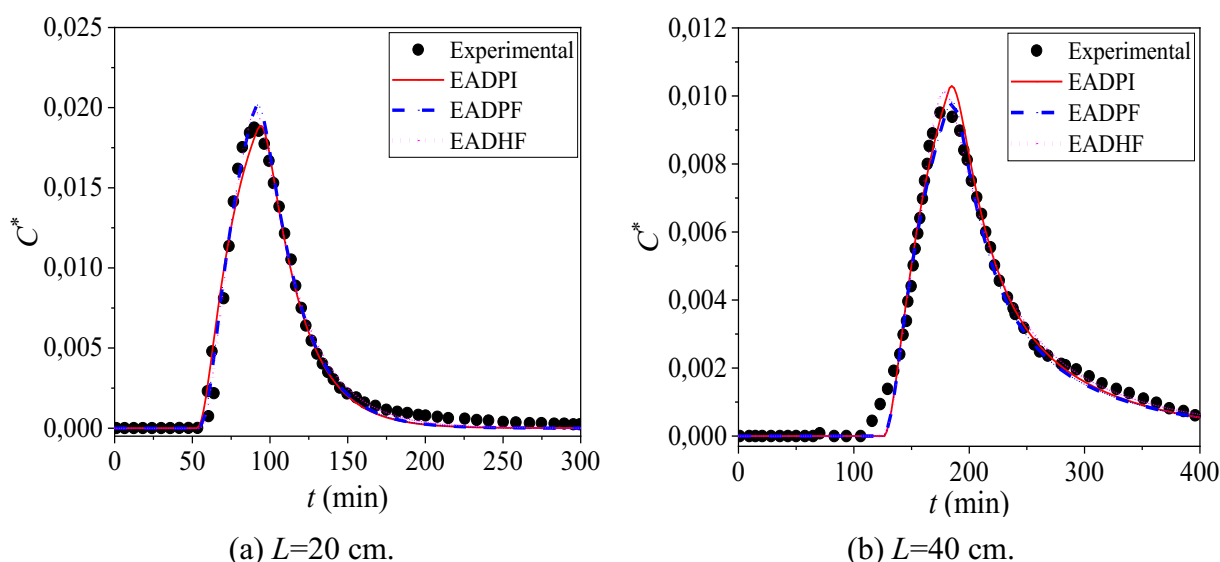


Figura 4.35 - Perfis de concentração experimentais e preditos por cada um dos modelos considerados no problema inverso anômalo B ((a) - Coluna de 20 cm e (b) - Coluna de 40 cm).

De maneira geral, na Figura 4.35 observa-se que para as duas colunas o modelo EADHF apresenta uma precisão maior do que os outros dois modelos, conforme indicado pelos resultados da Tabela 4.11. Também se verifica que quando se considera a equação

tradicional de advecção-dispersão os tempos em que a concentração atinge o valor máximo são superiores aos determinados experimentalmente. Isso demonstra a ocorrência de fenômenos anômalos na transferência de massa e indica que há diferentes escalas de tempo envolvidas nesse processo, o que está de acordo com o que foi verificado de maneira experimental por Haggerty et al. (2004). Por outro lado, observa-se que quando se utiliza o modelo EADHF a concentração máxima é atingida em tempos mais próximos dos observados experimentalmente. Verifica-se que até um determinado instante a concentração é nula. Após esse instante, observa-se o aumento da concentração até que esta atinge o valor máximo. Posteriormente, a concentração volta a diminuir e tende a se anular novamente. Isso está de acordo com as condições do problema.

Bromly e Hinz (2004) consideraram quatro modelos para descrever o problema estudado nesta seção. Esses modelos correspondem à equação tradicional de advecção-dispersão, ao modelo de caminhadas aleatórias com tempos contínuos, ao modelo móvel-fixo de taxa única e ao modelo estocástico-convectivo. Assim como observado neste trabalho, os autores também verificaram uma baixa precisão da equação tradicional de advecção-dispersão e o aumento da qualidade do ajuste dos modelos aos dados experimentais à medida que o número de parâmetros aumenta. Além disso, os perfis preditos pelos modelos considerados pelos autores são semelhantes aos obtidos pelos modelos utilizados neste trabalho. Assim, apesar de não ser possível comparar de maneira quantitativa os resultados obtidos, já que se trata de modelos diferentes, pode-se dizer que qualitativamente os resultados estão de acordo com os apresentados por Bromly e Hinz (2004).

4.4.4 Problema Inverso Anômalo C

Nesta última aplicação também são formulados e resolvidos três problemas inversos considerando os dois materiais estudados por Nowamooz et al. (2013), a saber, o arenito e o granito. Nesta análise, são considerados os modelos EADPI (Equação de Advecção-Dispersão Parabólica Inteira), EADPF (Equação de Advecção-Dispersão Parabólica Fracionária) e EADHF (Equação de Advecção-Dispersão Hiperbólica Fracionária). Nesse caso, o objetivo corresponde à estimação da velocidade média, do coeficiente de dispersão, da ordem fracionária e do parâmetro de atraso no tempo para cada material.

Nowamooz et al. (2013) realizaram experimentos a partir dos quais se determinou a concentração de uma solução aquosa de azul de metileno durante o escoamento desta em fraturas de arenito e granito, que foram preenchidas inicialmente com água e posteriormente com a solução. Na seção de entrada das fraturas foi conectado um reservatório. Após este ser

preenchido com a solução, iniciou-se a injeção da mesma no interior das fraturas a vazões constantes. A partir do processamento de imagens registradas durante os experimentos e da Lei da atenuação de Beer-Lambert, os autores determinaram a concentração na saída das fraturas e em diferentes posições.

Para a formulação de cada problema inverso considerando os modelos EADPI, EADPF e EADHF, são utilizados os pontos experimentais obtidos por Nowamooz et al. (2013). Estes são apresentados na forma normalizada, o que implica que os modelos devem ser considerados neste contexto. Para essa finalidade, considera-se o modelo EADHF a seguir no contexto normalizado:

$$\tau^* \frac{\partial^2 C^*}{\partial t^{*2}} + \frac{\partial C^*}{\partial t^*} = -v^* \frac{\partial C^*}{\partial x^*} + K^* \frac{\partial^\alpha C^*}{\partial x^{*\alpha}}, \quad t^* > 0, \quad 0 \leq x^* \leq 1 \text{ e } 1 < \alpha \leq 2, \quad (4.63)$$

em que t^* e x^* representam as coordenadas temporal e espacial adimensionalizadas, respectivamente, C^* é a concentração adimensional, τ^* é o parâmetro de atraso no tempo adimensional, α é a ordem fracionária referente ao termo difusivo, v^* é a velocidade média adimensional e K^* é o coeficiente de dispersão adimensional.

Neste modelo, consideram-se as condições inicial e de contorno dadas pelas Equações (4.64), (4.65) e (4.66), para o problema parabólico, definidas por Nowamooz et al. (2013).

$$C^*(0, x^*) = 0, \quad t^* = 0 \text{ e } 0 \leq x^* \leq 1, \quad (4.64)$$

$$C^*(t^*, 0) = 1, \quad t^* > 0 \text{ e } x^* = 0, \quad (4.65)$$

$$\frac{\partial C^*(t^*, 1)}{\partial x^*} = 0, \quad t^* > 0 \text{ e } x^* = 1. \quad (4.66)$$

É importante destacar que neste trabalho não são apresentados os valores de referência utilizados para adimensionalizar a concentração, o espaço e o tempo, bem como as relações resultantes de cada manipulação algébrica. Tais valores podem ser obtidos considerando o trabalho de Nowamooz et al. (2013).

Para formular cada problema inverso são considerados os seguintes modelos:

- EADPI: modelo no qual se considera a ordem inteira ($\alpha=2$) e o parâmetro de atraso no tempo (τ^*) nulo na EADHF. Nesse caso deseja-se estimar a velocidade média (v^*) e o coeficiente de dispersão (K^*), ambos no contexto adimensional. Os espaços de projeto são definidos como sendo: $0,01 \leq v^* \leq 5$ e $0,0001 \leq K^* \leq 5$.
- EADPF: modelo em que a ordem fracionária (α) é diferente de 2 e o parâmetro de atraso no tempo (τ^*) equivale a zero na EADHF. Para este problema inverso deseja-se

estimar, além de v^* e K^* , a ordem fracionária (α). Consideram-se os seguintes espaços de projeto: $0,01 \leq v^* \leq 5$; $0,0001 \leq K^* \leq 5$ e $1,2 \leq \alpha \leq 2$.

- EADHF: nesse caso deseja-se estimar v^* , K^* , α e τ^* , considerando os seguintes espaços de projeto: $0,01 \leq v^* \leq 5$; $0,0001 \leq K^* \leq 5$; $1,2 \leq \alpha \leq 2$ e $0 \leq \tau^* \leq 1$. Necessita-se de uma nova condição para a concentração no tempo equivalente a zero, para que o modelo hiperbólico seja avaliado. Essa condição é dada pela Equação (4.67) e se justifica pelo fato de $C^*(0, x^*)$ ser nula.

$$\frac{\partial C^*(0, x^*)}{\partial t^*} = 0, \quad t^* = 0 \quad \text{e} \quad 0 \leq x^* \leq 1. \quad (4.67)$$

Para resolver os problemas inversos pelo algoritmo de Evolução Diferencial é necessária a formulação da função objetivo (FO) para cada material considerado. Nessa aplicação, a FO é definida como sendo o somatório da diferença entre os pontos experimentais e os preditos por cada modelo em quatro posições espaciais para $0 \leq t^* \leq 4$, ponderado pelo maior valor experimental observado. Assim, a FO é descrita como:

$$\min FO = \sum_{j=1}^4 \sum_{i=1}^{M_1} \frac{(C_{i,x_j^*}^{*\text{exp}} - C^*(t^*, x_j^*))^2}{\max(C^{*\text{exp}}(t^*, x_j^*))^2}, \quad (4.68)$$

em que M_1 representa a quantidades de pontos experimentais conhecidos. $C^{*\text{exp}}$ e $C^*(t^*, x^*)$ representam os pontos experimentais e simulados pelo modelo proposto, respectivamente. O operador max representa o máximo valor experimental observado. Para cada material, x_j^* representam as j -ésimas posições espaciais em que a concentração adimensional é avaliada. Assim, para o arenito x_j^* corresponde às posições adimensionais [0,25 0,45 0,6 0,8]. Já para o granito x_j^* corresponde às posições adimensionais [0,2 0,4 0,6 0,8]. Os pontos experimentais utilizados foram extraídos do trabalho de Nowamooz et al. (2013).

Na Tabela 4.12 apresentam-se os resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando os três modelos diferenciais avaliados para o problema inverso anômalo C. Nesta tabela observa-se que o valor da função objetivo diminui com a elevação da quantidade de variáveis de projeto, conforme era esperado, já que quanto maior o número de parâmetros de um modelo, maior a tendência de que este se ajuste aos pontos experimentais. Verificam-se valores baixos dos desvios padrão dos parâmetros dos modelos e da função objetivo, o que demonstra a convergência do algoritmo de Evolução Diferencial. Pode-se observar que os valores de FO são um pouco menores quando se consideram os problemas inversos formulados para o arenito. Isso indica que os modelos avaliados são um pouco mais precisos para descrever a transferência de massa nesse material do que no granito.

Tabela 4.12 - Resultados obtidos pelo algoritmo de Evolução Diferencial considerando diferentes modelos diferenciais para o problema inverso anômalo C.

Arenito						
Modelo	α	τ^*	ν^*	K^*	FO	TP ^c (min)
EADPI	-	-	0,0627	0,9944	0,2018	18,5
	-	-	$1,2245 \times 10^{-7}$	$2,3343 \times 10^{-6}$	$1,7676 \times 10^{-6}$	
EADPF	1,9864 ^a	-	0,0566	1,0381	0,1711	18,9
	$1,2325 \times 10^{-5b}$	-	$2,3433 \times 10^{-6}$	$3,4454 \times 10^{-6}$	$1,3434 \times 10^{-7}$	
EADHF	1,9918	0,1014	1,0166	0,0246	0,1578	19,2
	$1,2323 \times 10^{-5}$	$4,5454 \times 10^{-7}$	$3,4545 \times 10^{-9}$	$1,9545 \times 10^{-8}$	$1,2934 \times 10^{-7}$	
Granito						
Modelo	α	τ^*	ν^*	K^*	FO	TP ^c (min)
EADPI	-	-	0,0714	0,7554	0,3289	17,8
	-	-	$1,6777 \times 10^{-7}$	$1,5980 \times 10^{-8}$	$1,5543 \times 10^{-9}$	
EADPF	1,9710 ^a	-	0,0561	0,8504	0,2011	17,8
	$3,5545 \times 10^{-8b}$	-	$2,3433 \times 10^{-7}$	$4,5544 \times 10^{-7}$	$2,4343 \times 10^{-9}$	
EADHF	1,9767	0,0820	0,8389	0,0195	0,1878	18,2
	$6,5766 \times 10^{-9}$	$2,5543 \times 10^{-8}$	$2,3434 \times 10^{-8}$	$4,5656 \times 10^{-8}$	$6,7654 \times 10^{-9}$	

^aMelhor valor, ^bdesvio padrão e ^cvalor médio requerido em cada execução do algoritmo de Evolução Diferencial.

Além disso, na Tabela 4.12 verifica-se que os valores de α obtidos para o arenito são mais próximos de 2 do que os encontrados para o granito. Isso indica que o granito é mais heterogêneo espacialmente, o que foi verificado de maneira experimental por Nowamooz et al. (2013). Também se observa um valor maior do fator de atraso no tempo para o arenito. Isso indica que nesse material as partículas necessitam de um intervalo de tempo maior para se difundir de um ponto para outro do que no granito.

Para ambos os materiais observa-se que as velocidades médias obtidas quando se considera a EADPF são inferiores às encontradas com a aplicação da EADPI. Pode-se relacionar esse resultado com a retenção de partículas que ocorre em zonas mortas presentes no meio, caracterizando um processo subdifusivo. Quando se utiliza a EADHF, os valores obtidos de ν^* são significativamente superiores aos encontrados para as duas equações anteriores. Verifica-se que a difusão é mais considerável no arenito, já que para esse material são obtidos valores maiores de coeficiente de dispersão do que para o granito. Pode-se observar que quando se utilizam as duas equações que não apresentam o fator de atraso no tempo, a razão entre velocidade média e coeficiente de dispersão apresenta valores pequenos, o que indica que nesses casos a dispersão é o fenômeno predominante. Já para a equação em que τ^* não é nulo verifica-se que o valor dessa razão é significativamente maior. Isso demonstra que nesse caso o fenômeno predominante corresponde à advecção.

Na Figura 4.36 são apresentados os perfis de concentração experimentais e preditos por cada modelo para os materiais considerados em diferentes posições para $0 \leq t^* \leq 4$.

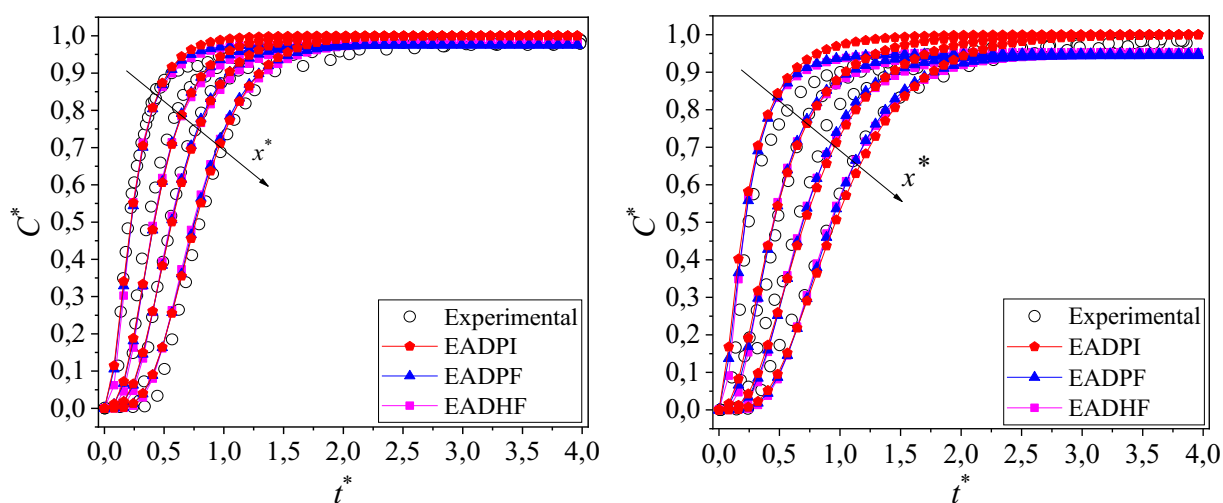
(a) Arenito ($x^*=[0,25\ 0,45\ 0,6\ 0,8]$).(b) Granito ($x^*=[0,2\ 0,4\ 0,6\ 0,8]$).

Figura 4.36 - Perfis de concentração experimentais e preditos por cada um dos modelos considerados no problema inverso anômalo C ((a) - Arenito e (b) - Granito).

Na Figura 4.36 observa-se que os perfis preditos pela EADHF são os mais próximos dos perfis obtidos experimentalmente. Também se verifica que os perfis preditos pelos modelos considerados ajustam-se um pouco melhor aos dados experimentais obtidos para o arenito do que para o granito. Esses resultados estão de acordo com os apresentados na Tabela 4.12.

Além disso, também se observa que para o mesmo valor de tempo adimensional as concentrações são maiores à medida que o valor da coordenada espacial adimensional diminui. Isso está de acordo com o esperado, já que a injeção da solução aquosa no interior das fraturas ocorre na entrada das mesmas, em $x^*=0$. Já o aumento da concentração com a elevação do tempo ocorre até a saturação total das fraturas, condição em que a concentração adimensional é equivalente à unidade. Observa-se que a saturação completa da fratura de granito ocorre em tempos superiores à da fratura de arenito. Isso se deve a maior presença de caminhos preferenciais no granito, já que este é um material mais heterogêneo do que o arenito.

Nowamooz et al. (2013) utilizaram a equação tradicional de advecção-dispersão, o modelo de meio estratificado e o modelo de caminhadas aleatórias com tempos contínuos para representar o problema avaliado nesta aplicação. Como os modelos estudados pelos autores são diferentes dos considerados nesta seção, não há a possibilidade de se comparar quantitativamente os resultados obtidos. Os autores também verificaram que o modelo tradicional não gerou resultados muito razoáveis e que os modelos compostos por mais parâmetros apresentaram maiores qualidades de ajuste aos pontos experimentais. Além disso,

os perfis preditos pelos modelos avaliados por Nowamooz et al. (2013) apresentam comportamentos semelhantes aos observados na Figura 4.36. Assim, é possível concluir que do ponto de vista qualitativo os resultados obtidos estão de acordo com os presentes no referido trabalho.

4.5 Considerações Finais

Neste capítulo foram aplicadas as duas metodologias propostas, o MPEL e o MDFF, na resolução de problemas diretos que envolvem aplicações hiperbólicas e fracionárias. Ambas as metodologias demonstraram uma boa precisão, já que, de maneira geral, observaram-se soluções numéricas próximas às analíticas e valores baixos para os erros absolutos obtidos. Além disso, foram formulados e resolvidos problemas inversos, com o objetivo de estimar os parâmetros de modelos diferenciais hiperbólicos e parabólicos. Para a resolução desses problemas, considerou-se o algoritmo de Evolução Diferencial, o qual apresentou uma boa capacidade de predição, haja vista a qualidade dos resultados obtidos.

De maneira geral, os resultados apresentados neste capítulo indicam que os modelos hiperbólicos fracionários na variável espacial representam uma boa alternativa para descrever fenômenos anômalos nos estudos de caso avaliados quando comparados com versões simplificadas.

5 CONCLUSÕES

Como destacado anteriormente, o principal objetivo desta tese foi propor e avaliar um modelo diferencial parcial hiperbólico fracionário no espaço em relação ao termo difusivo, empregado para descrever os fenômenos anômalos de transferência de calor e de massa em sistemas de engenharia. Para essa finalidade o modelo proposto é uma equação de advecção-dispersão hiperbólica fracionária, isto é, apresenta duas derivadas temporais, sendo uma de primeira e outra de segunda ordem, um parâmetro de atraso no tempo, uma derivada espacial de primeira ordem e uma derivada espacial de ordem fracionária. Esta equação é resultado das generalizações das Leis de Fourier e Fick via equação de Cattaneo (1958). É importante destacar que a escolha por um modelo hiperbólico deve-se ao fato deste garantir uma propagação de pulso de velocidade finita, enquanto uma velocidade infinita é obtida com os tradicionais modelos baseados nas Leis de Fourier e Fick (BEVILACQUA, GALEÃO; COSTA, 2011a,b; BEVILACQUA et al., 2013). Além disso, do ponto de vista matemático, a escolha pelo modelo hiperbólico também pode ser justificada pelo aumento do número de variáveis de projeto que devem ser estimadas no problema inverso. Este aumento naturalmente implica na maior capacidade do modelo ajustar-se aos pontos experimentais. Finalmente, destaca-se que o modelo hiperbólico fracionário pode ser simplificado de forma a se transformar em um parabólico com ordem inteira ou fracionária.

Para a resolução desses modelos (hiperbólico fracionário e parabólico com ordens inteira e fracionária) dois tradicionais métodos utilizados para a resolução de equações diferenciais parciais com ordem inteira foram estendidos para o contexto fracionário. O primeiro é o Método Pseudo-Espectral de Legendre (MPEL) e o segundo é o Método das Diferenças Finitas, que, após a extensão para o contexto fracionário, foi denominado Método das Diferenças Finitas Fracionário (MDFF). Neste caso, o MPEL faz uso da definição de derivada fracionária de Caputo e o MDFF da definição de derivada fracionária de Grünwald-Letnikov.

Ambos os métodos foram utilizados para resolver problemas que apresentam solução analítica, de forma a validar as abordagens propostas, e, posteriormente, foram aplicados na resolução de problemas diretos de transferência de calor. Com o objetivo de estimar os parâmetros do modelo hiperbólico proposto (ordem fracionária e parâmetro de atraso no tempo), formularam-se problemas inversos considerando pontos experimentais reais de transferência de massa em meios porosos. Para resolver cada problema inverso foi utilizado o algoritmo de Evolução Diferencial.

Com base na metodologia e nos resultados obtidos é possível concluir que:

- Nesta tese foi considerada a abordagem proposta por Cattaneo (1958) para generalizar as Leis de Fourier e de Fick. Por isso, os modelos utilizados apresentam termos de ordem não inteira somente na contribuição difusiva. Todavia, nada impede de considerar outras contribuições fracionárias no modelo hiperbólico, como por exemplos nas contribuições temporais e de derivada primeira no espaço. Entretanto, ressalta-se que esta generalização não foi objeto de estudo neste trabalho.
- De forma geral, com base nos resultados obtidos pode-se dizer que os modelos hiperbólicos fracionários espaciais descrevem com boa precisão os fenômenos anômalos de transferência de calor e de massa em comparação com outros tipos de modelos (parabólico com ordens inteira e fracionária). Na prática, isso significa que o MPEL e o MDFF são capazes de resolver o problema hiperbólico fracionário no espaço, bem como problemas resultantes da simplificação do mesmo, isto é, um modelo parabólico com ordens inteira e fracionária. Isso representa uma boa vantagem destas metodologias em relação a estratégias propostas na literatura, em que apenas um tipo particular de modelo pode ser resolvido.
- Em relação ao aumento do número de pontos de colocação no MPEL e do número de pontos de discretização no MDFF constata-se, como esperado, que o aumento do valor destes parâmetros implica no aumento da dimensão do sistema a ser resolvido e, conseqüentemente, no incremento do tempo de processamento. Neste caso, deve-se balancear o binômio nível de refinamento e precisão, de forma que soluções precisas e com bom custo computacional possam ser encontradas.
- Na simulação dos problemas diferenciais matemáticos o MPEL gerou resultados com uma boa qualidade com poucos pontos de colocação, o que configura a sua principal vantagem. Todavia, ressalta-se que esta abordagem apresenta dificuldades para problemas em que o tempo de integração é muito alto, isto é, a propagação dos erros para tempos elevados pelo fato da malha de discretização não ser muito refinada. Resultados similares podem ser observados com a aplicação do MDFF para diferentes configurações de malha. Para esta abordagem, conforme observado não existiu limitação no que tange o tempo de integração. Em se tratando do tipo de definição de derivada utilizada considera-se que cada metodologia foi capaz de obter resultados com boa precisão em relação à solução analítica, isto é, independentemente do tipo de derivada os resultados apresentam boa precisão.

- Para os problemas de transferência de calor e de massa foi possível observar a influência dos parâmetros nos perfis obtidos. No caso das aplicações puramente matemáticas, o efeito da ordem não inteira não pôde ser avaliado do ponto de vista físico, porém foram verificadas variações nos perfis obtidos à medida que o valor da ordem fracionária foi modificado.
- Os resultados obtidos com a formulação e resolução de cada problema inverso considerando o algoritmo de Evolução Diferencial associado com o Método das Diferenças Finitas Fracionário implicaram em parâmetros cujos perfis simulados estão em concordância com os experimentais. Nos problemas inversos em que foram utilizados dados experimentais reais, observou-se a redução do valor da função objetivo com o aumento da quantidade de variáveis de projeto, o que está de acordo com esperado, isto é, quanto maior o número de variáveis de projeto, melhor tende a ser a aderência entre o perfil simulado e o experimental. Além disso, de maneira geral, foram encontrados valores de desvios padrão dos parâmetros e da função objetivo que demonstram que o algoritmo de Evolução Diferencial sempre tendeu a convergir para a mesma solução, o que demonstra robustez da referida técnica de otimização.
- Quantitativamente não foi possível comparar os resultados obtidos nesta tese com aqueles apresentados em outros trabalhos, visto que os modelos considerados são matematicamente diferentes. Além disso, cabe destacar que os pontos experimentais reais considerados em cada problema inverso foram extraídos usando um software, o que, naturalmente, também dificulta a comparação com resultados apresentados na literatura. Neste caso, para fins de comparação o modelo hiperbólico fracionário foi simplificado de modo que duas versões foram obtidas, a saber, um modelo parabólico com ordem inteira e um modelo parabólico com ordem fracionária. A partir das análises realizadas foi possível concluir que o modelo hiperbólico fracionário foi o que apresentou os melhores resultados. Do ponto de vista matemático, este melhor desempenho do modelo hiperbólico fracionário deve-se ao maior número de variáveis de projeto deste modelo em relação aos outros, visto que quanto maior o número de graus de liberdade, menor é, a priori, o valor do resíduo (função objetivo) no problema inverso.
- A partir da resolução de problemas inversos foi possível relacionar os parâmetros de cada modelo com o problema físico. O valor da ordem não inteira indica o grau de heterogeneidade espacial do meio, enquanto o valor do parâmetro de atraso no tempo

está relacionado com o tempo que as partículas levam para se difundir de um ponto para outro, no caso de problemas de transferência de massa. Com base nos valores dos parâmetros podem ser realizadas inferências sobre os mecanismos envolvidos nas transferências de calor e de massa. Por exemplo, nos problemas inversos de transferência de massa, os valores obtidos de velocidade média e de coeficiente de dispersão podem ser utilizados para verificar se, em cada caso, o processo é predominantemente advectivo ou difusivo.

- Em relação ao fator de correção de unidades considerado nesta tese pode-se dizer que o mesmo atendeu o objetivo, isto é, garantir a consistência dimensional do modelo fenomenológico sem interferir nos perfis obtidos. Este ponto é de grande importância, visto que em vários trabalhos publicados os autores não se preocuparam com o balanço de unidades do modelo, o que na prática implica na impossibilidade de utilização do mesmo.
- Finalmente, enfatiza-se que a opção de trabalhar com duas definições de derivadas fracionárias (o MPEL faz uso da definição de derivada fracionária de Caputo e o MDFF faz uso da definição de derivada fracionária de Grünwald-Letnikov) mostrou-se interessante, já que cada uma dessas definições apresenta características particulares. Todavia, para as aplicações desenvolvidas nesta tese considera-se que não houve influência significativa do tipo de derivada nos resultados obtidos.

5.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

A seguir apresentam-se algumas sugestões para trabalhos futuros:

- Realizar a extensão de outros métodos tradicionais para o contexto fracionário e os utilizar na resolução dos problemas diretos presentes nesta tese, avaliando a qualidade dos resultados obtidos. Também estender para modelos bi e tri-dimensionais;
- Formular e resolver problemas inversos de difusão anômala representados por modelos diferenciais de ordem fracionária no contexto da transferência de calor considerando dados experimentais reais;
- Avaliar a aplicabilidade de métodos diferenciais fracionários estocásticos para a solução dos problemas inversos;
- Utilizar modelos hiperbólicos fracionários, análogos aos considerados nesta tese, para descrever a difusão anômala de massa em meios nos quais ocorrem, além da advecção e da dispersão, reações químicas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABBAS, S.; BENCHOHRA, M.; N'GUÉRÉKATA, G. M. **Topics in Fractional Differential Equations**. 1. ed. New York: Springer, 2012.

ABDULHUSSEIN, A. M.; ODA, H. The numerical solution of time-space fractional bioheat equation by using fractional quadratic spline methods. **AIP Conference Proceedings**, v. 2235, n. 1, p. 1-9, 2020. <https://doi.org/10.1063/5.0007692>.

ABEL, N. H. Opløsning af et par opgaver ved hjælp af bestemte integraler, **Magazin for Naturvidenskaberne**, v. 1, p. 55-68, 1823.

AGUILAR, J. F. G.; GARCÍA, J. J. R.; ALVARADO, J. J. B.; FRAGA, T. C.; CABRERA, R. G. Fractional mechanical oscillators. **Revista Mexicana de Física**, v. 58, n. 4, p. 348-352, 2012.

AKULA, S. C.; MANIYERI, R. Numerical simulation of bioheat transfer: a comparative study on hyperbolic and parabolic heat conduction. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 42, n. 1, p. 1-13, 2020. <https://doi.org/10.1007/s40430-019-2132-x>.

ANTAKI, P. J. Solution for non-Fourier dual phase lag heat conduction in a semi-infinite slab with surface heat flux. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 41, n. 14, p. 2253-2258, 1998. [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(97\)00283-4](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(97)00283-4).

ASKARIZADEH, H.; AHMADIKIA, H. Analytical analysis of the dual-phase-lag model of bioheat transfer equation during transient heating of skin tissue. **Heat and Mass Transfer**, v. 50, n. 12, p. 1673-1684, 2014. <https://doi.org/10.1007/s00231-014-1373-6>.

ATSUMI, H. Hydrogen bulk retention in graphite and kinetics of diffusion. **Journal of Nuclear Materials**, v. 307-311, p. 1466-1470, 2002. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)01069-3](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)01069-3).

BARBEIRO, S.; FERREIRA, J. A.; PINTO, L. H1- second order convergent estimates for non-Fickian models. **Applied Numerical Mathematics**, v. 61, n. 2, p. 201-215, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2010.09.005>.

BARMAN, C.; RATH, P.; BHATTACHARYA, A. A non-Fourier bioheat transfer model for cryosurgery of tumor tissue with minimum collateral damage. **Computer Methods and Programs in Biomedicine**, v. 200, p. 105857, p. 1-14, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cmpb.2020.105857>.

BECERRA, V. M.; GALVÃO, R. K. H. Um tutorial sobre métodos pseudo-espectrais para controle ótimo computacional. **Revista Controle & Automação**, v. 21, n. 3, p. 224-244, 2010. <https://doi.org/10.1590/S0103-17592010000300002>.

BEVILACQUA, L.; GALEÃO, A. C. N. R.; COSTA, F. P. A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion processes. **Anais da Academia Brasileira de Ciências**, v. 83, n. 4, p. 1443-1464, 2011. a. <https://doi.org/10.1590/S0001-37652011005000033>.

BEVILACQUA, L.; GALEÃO, A. C. N. R.; COSTA, F. P. On the significance of higher order differential terms in diffusion processes. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 33, n. 2, p. 166–175, 2011. b. <https://doi.org/10.1590/S1678-58782011000200007>.

BEVILACQUA, L.; GALEÃO, A. C. N. R.; SIMAS, J. G.; DOCE, A. P. R. A new theory for anomalous diffusion with a bimodal flux distribution. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 35, n. 4, p. 431–440, 2013. <https://doi.org/10.1007/s40430-013-0041-y>.

BHATTI, M. A. **Practical optimization methods with Mathematica® applications**. 1. ed.: Springer, 2000.

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. **Transport phenomena**. 2. ed: John Wiley & Sons, 2002.

BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. **Equações Diferenciais Elementares e Problemas de valores de contorno**. 8. ed.: LTC, 2006.

BRAGA, C. L. R. **Notas de Física Matemática: Equações Diferenciais, Funções de Green e Distribuições**. 1. ed.: Livraria da Física, 2006.

BRASIELLO, A.; ADROVER, A.; CRESCITELLI, S.; GIONA, M. Mass transport in polymers through the theory of stochastic processes possessing finite propagation velocity. **Chemical Engineering Transactions**, v. 74, p. 985-990, 2019.

BRODIEK, R.; SŁOTA, D.; KRÓL, M.; MATULA, G.; KWAŚNY, W. Comparison of mathematical models with fractional derivative for the heat conduction inverse problem based on the measurements of temperature in porous aluminum. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 143, p. 1–14, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118440>.

BROMLY, M.; HINZ, C. Non-fickian transport in homogeneous unsaturated repacked sand. **Water Resources Research**, v. 40, n. 7, p. 1-12, 2004. <https://doi.org/10.1029/2003WR002579>.

BROOKS, S. H. A discussion of random methods for seeking maxima. **Operations Research**, v. 6, n. 2, p. 244–251, 1958. <https://doi.org/10.1287/opre.6.2.244>.

BROWN, J. B.; CHUNG, D. Y.; MATTHEWS, P. W. Heat pulses at low temperatures. **Physics Letters**, v. 21, n. 3, p. 241–243, 1966. [https://doi.org/10.1016/0031-9163\(66\)90794-3](https://doi.org/10.1016/0031-9163(66)90794-3).

BU, W.; XIAO, A.; ZENG, W. Finite difference/finite element methods for distributed-order time fractional diffusion equations. **Journal of Scientific Computing**, v. 72, n. 1, p. 422–441, 2017. <https://doi.org/10.1007/s10915-017-0360-8>.

CAI, M.; LI, C. Numerical approaches to fractional integrals and derivatives: A review. **Mathematics**, v. 8, n. 1, p. 1-53, 2020. <https://doi.org/10.3390/math8010043>.

CAMPOS FILHO, F. F. **Algoritmos Numéricos: Uma Abordagem Moderna de Cálculo Numérico**. 3. ed.: LTC, 2018.

CAO, K.; DAI, X.; WU, Z.; WENG, X. Unveiling the importance of reactant mass transfer in environmental catalysis: taking catalytic chlorobenzene oxidation as an example. **Chinese Chemical Letters**, v. 32, n. 3, p. 1206–1209, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.ccllet.2020.09.001>.

CAPUTO, M.; MAINARDI, F. A new dissipation model based on memory mechanism. **Pure and Applied Geophysics**, v. 91, n. 1, p. 134–147, 1971. <https://doi.org/10.1007/BF00879562>.

CARELLA, A. R.; DORAO, C. A. Solution of a Cattaneo-Maxwell diffusion model using a Spectral element least-squares method. **Journal of Natural Gas Science and Engineering**, v. 2, n. 5, p. 253–258, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2010.08.001>.

CARPENTER, T. A.; DAVIES, E. S.; HALL, C.; HALL, L. D.; HOFF, W. D.; WILSON, M. A. Capillary water migration in rock: process and material properties examined by NMR imaging. **Materials and Structures**, v. 26, n. 5, p. 286–292, 1993. <https://doi.org/10.1007/BF02472950>.

CARRER, J. A. M.; SOLHEID, B. S.; TREVELYAN, J.; SEAID, M. A boundary element method formulation based on the Caputo derivative for the solution of the anomalous diffusion problem. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, v. 122, p. 132–144, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2020.10.017>.

CATTANEO, C. Sur une forme de l'équation de la Chaleur éliminant le paradoxe d'une propagation instantanée',” **Comptes Rendus de l'Académie des Sciences**, v. 247, p. 431–433, 1958.

CHALLANSONNEX, A.; CASALINHO, J.; PERRÉ, P. Non-Fickian diffusion in biosourced materials: Experimental determination of the memory function using minute samples. **Construction and Building Materials**, v. 224, p. 560–571, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2019.07.013>.

CHANG, AL.; SUN, HG. Time-space fractional derivative models for CO₂ transport in heterogeneous media. **Fractional Calculus and Applied Analysis**, v. 21, n. 1, p. 151–173, 2018. <https://doi.org/10.1515/fca-2018-0010>.

CHEN, H. T.; LIU, K. C. Analysis of non-Fickian diffusion problems in a composite medium. **Computer Physics Communications**, v. 150, p. 31–42, 2003. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(02\)00679-3](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(02)00679-3).

CHEN, W.; WANG, F.; ZHENG, B.; CAI, W. Non-Euclidean distance fundamental solution of Hausdorff derivative partial differential equations. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, v. 84, p. 213–219, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2017.09.003>.

CHRISTENSEN, M. G.; NISSEN, J. A. Simplified equations for transient heat transfer problems at low Fourier numbers. **Applied Thermal Engineering**, v. 76, p. 382–390, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2014.11.011>.

COMPTE, A.; METZLER, R. The generalized Cattaneo equation for the description of anomalous transport processes. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 30, n. 21, p. 7277-7289, 1997. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/30/21/006>.

CONCEIÇÃO, D. S. **Análise computacional da distribuição do campo de temperatura na região cervical ao redor da tireóide com e sem a presença de um tumor**. 2014. Projeto de Graduação, Engenharia Mecânica da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro. 2014.

CRANK, J.; PARK, G. S. Diffusion in high polymers: some anomalies and their significance. **Transactions of the Faraday Society**, v. 47, n. 1072, p. 1072–1084, 1951. <https://doi.org/10.1039/tf9514701072>.

DAMOR, R. S.; KUMAR, S.; SHUKLA, A. K. Numerical solution of fractional bioheat equation with constant and sinusoidal heat flux condition on skin tissue. **American Journal of Mathematical Analysis**, v. 1, n. 2, p. 20–24, 2013.

DAMOR, R. S.; KUMAR, S.; SHUKLA, A. K. Parametric study of fractional bioheat equation in skin tissue with sinusoidal heat flux. **Fractional Differential Calculus**, v. 5, n. 1, p. 43-53, 2015. <https://doi.org/10.7153/fdc-05-04>.

DANESHJOU, K.; BAKHTIARI, M.; PARSANIA, H.; FAKOOR, M. Non-Fourier heat conduction analysis of infinite 2D orthotropic FG hollow cylinders subjected to time-dependent heat source. **Applied Thermal Engineering**, v. 98, p. 582-590, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.12.106>.

D'ANGELO, M. V.; FONTANA, E.; CHERTCOFF, R.; ROSEN, M. Retention phenomena in non-Newtonian fluids flow. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 327, p. 44–48, 2003. [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(03\)00436-9](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(03)00436-9).

DAS, S.; SUGANTHAN, P. N. Differential evolution: a survey of the state-of-the-art. **IEEE Transactions on Evolutionary Computation**, v. 15, n. 1, p. 4–31, 2011. <https://doi.org/10.1109/TEVC.2010.2059031>.

DAVYDOV, E. V.; LUBASHEVSKY, I. A.; MILYAEV, V. A.; MUSIN, R. F. **Nondiffusive heat transfer in muscle tissue. Preliminary results**, 2001. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0102006>.

DEB, K. **Multi-objective optimization using evolutionary algorithms**. 1. ed.: John Wiley & Sons, 2001.

DEBNATH, L.; BHATTA, D. **Integral Transforms and Their Applications**. 2. ed.: Chapman and Hall/CRC, 2006.

DEREC, C.; SMERLAK, M.; SERVAIS, J.; BACRI, J. C. Anomalous diffusion in microchannel under magnetic field. **Physics Procedia**, v. 9, n. 2, p. 109–112, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2010.11.026>.

DORIGO, M.; MANIEZZO, V.; COLORNI, A. Ant system: optimization by a colony of cooperating agents. **IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B:**

Cybernetics, v. 26, n. 1, p. 29–41, 1996. <https://doi.org/10.1109/3477.484436>.

ELTEJAEI, I.; BALAVAND, M.; MOJRA, A. Numerical analysis of non-Fourier thermal response of lung tissue based on experimental data with application in laser therapy. **Computer Methods and Programs in Biomedicine**, v. 199, 105905, p. 1-11, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cmpb.2020.105905>.

ESMAEILI, S.; SHAMSI, M.; LUCHKO, Y. Numerical solution of fractional differential equations with a collocation method based on Müntz polynomials. **Computers and Mathematics with Applications**, v. 62, n. 3, p. 918-929, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2011.04.023>.

FAHMY, M. A. A new boundary element algorithm for a general solution of nonlinear space-time fractional dual-phase-lag bio-heat transfer problems during electromagnetic radiation. **Case Studies in Thermal Engineering**, v. 25, p. 1–19, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.csite.2021.100918>.

FALCINI, F.; GARRA, R.; VOLLER, V. Modeling anomalous heat diffusion: comparing fractional derivative and non-linear diffusivity treatments. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 137, p. 584-588, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2018.11.016>.

FAN, W.; JIANG, X.; CHEN, S. Parameter estimation for the fractional fractal diffusion model based on its numerical solution. **Computers and Mathematics with Applications**, v. 71, n. 2, p. 642–651, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2015.12.030>.

FANG, Z. W.; ZHANG, J. L.; SUN, H. W. A fast finite volume method for spatial fractional diffusion equations on nonuniform meshes. **Computers and Mathematics with Applications**, v. 108, p. 175–184, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2022.01.015>.

FEHLBERG, E. **Classical Fifth-, Sixth-, Seventh-, and Eighth-Order Runge-Kutta Formulas with Stepsize Control**. NASA Technical Report 287, 1968.

FENG, L.; TURNER, I.; PERRÉ, P.; BURRAGE, K. An investigation of nonlinear time-fractional anomalous diffusion models for simulating transport processes in heterogeneous binary media. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, v. 92, 105454, p. 1-22, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2020.105454>.

FERRÁS, L. L.; FORD, N. J.; MORGADO, M. L.; NÓBREGA, J. M.; REBELO, M. S. Fractional Pennes' bioheat equation: theoretical and numerical studies. **Fractional Calculus and Applied Analysis**, v. 18, n. 4, p. 1080-1106, 2015. <https://doi.org/10.1515/fca-2015-0062>.

FERREIRA, J. A.; PENA, G.; ROMANAZZI, G. Anomalous diffusion in porous media. **Applied Mathematical Modelling**, v. 40, n. 3, p. 1850-1862, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2015.09.034>.

FINLAYSON, B. A.; BIEGLER, L. T.; GROSSMANN, I. E. Mathematics in Chemical Engineering. *In: Ullmann's Encyclopedia Of Industrial Chemistry*. 1. ed.: Wiley-VCH, 2006. https://doi.org/10.1002/14356007.b01_01.pub2.

FOMIN, S. A.; CHUGUNOV, V. A.; HASHIDA, T. Non-Fickian mass transport in fractured porous media. **Advances in Water Resources**, v. 34, n. 2, p. 205-214, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2010.11.002>.

FOURIER, J. B. J. **Théorie Analytique de la Chaleur**. 1. ed.: F. Didot, 1822.

FÜLÖP, T.; KOVÁCS, R.; LOVAS, Á.; RIETH, Á.; FODOR, T.; SZÜCS, M.; VÁN, P.; GRÓF, G. Emergence of non-Fourier hierarchies. **Entropy**, v. 20, n. 11, p. 1–13, 2018. <https://doi.org/10.3390/e20110832>.

GERASIMOV, D. N. The Nernst–Einstein equation for an anomalous diffusion at short spatial scales. **Physica D**, v. 419, 132851, p. 1-6, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.physd.2021.132851>.

GHANMI, A.; ABBAS, I. A. An analytical study on the fractional transient heating within the skin tissue during the thermal therapy. **Journal of Thermal Biology**, v. 82, p. 229-233, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.jtherbio.2019.04.003>.

GHAZANFARIAN, J.; ABBASSI, A. Effect of boundary phonon scattering on dual-phase-lag model to simulate micro- and nano-scale heat conduction. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 52, n. 15, p. 3706-3711, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2009.01.046>.

GHAZANFARIAN, J.; SHOMALI, Z.; ABBASSI, A. Macro- to nanoscale heat and mass transfer: the lagging behavior. **International Journal of Thermophysics**, v. 36, n. 7, p. 1416-1467, 2015. <https://doi.org/10.1007/s10765-015-1913-4>.

GHAZIZADEH, H. R.; AZIMI, A.; MAEREFAT, M. An inverse problem to estimate relaxation parameter and order of fractionality in fractional single-phase-lag heat equation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 55, n. 7–8, p. 2095–2101, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.12.012>.

GHAZIZADEH, H. R.; MAEREFAT, M.; AZIMI, A. Explicit and implicit finite difference schemes for fractional Cattaneo equation. **Journal of Computational Physics**, v. 229, n. 19, p. 7042-7057, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.05.039>.

GLOVER, F. Tabu search: part I. **ORSA Journal on computing**, v. 1, n. 3, p. 190–206, 1989. <https://doi.org/10.1287/ijoc.1.3.190>.

GOMEZ, H.; COLOMINAS, I.; NAVARRINA, F.; PARÍS, J.; CASTELEIRO, M. A hyperbolic theory for advection-diffusion problems: mathematical foundations and numerical modeling. **Archives of Computational Methods in Engineering**, v. 17, n. 2, p. 191–211, 2010. <https://doi.org/10.1007/s11831-010-9042-5>.

GOU, C.; CAI, R.; ZHANG, N. Explicit analytical solutions of transport equations considering non-Fourier and non-Fick effects in porous media. **Progress in Natural Science**, v. 15, n. 6, p. 545–549, 2005.

GOUDARZI, P.; AZIMI, A. Numerical simulation of fractional non-Fourier heat conduction in skin tissue. **Journal of Thermal Biology**, v. 84, p. 274-284, 2019.

<https://doi.org/10.1016/j.jtherbio.2019.05.021>.

GREER, J. B.; BERTOZZI, A. L.; SAPIRO, G. Fourth order partial differential equations on general geometries. **Journal of Computational Physics**, v. 216, n. 1, p. 216-246, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.11.031>.

GUO, L.; CHEN, T.; GAO, X. W. Transient meshless boundary element method for prediction of chloride diffusion in concrete with time dependent nonlinear coefficients. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, v. 36, n. 2, p. 104-111, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2011.08.005>.

GUPTA, P.; SRIVASTAVA, A. Non-Fourier transient thermal analysis of biological tissue phantoms subjected to high intensity focused ultrasound. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 136, p. 1052-1063, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.03.014>.

HADAMARD, J. **Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations**. New Haven Yale University Press, 1923.

HAGGERTY, R.; HARVEY, C. F.; VON SCHWERIN, C. F.; MEIGS, L. C. What controls the apparent timescale of solute mass transfer in aquifers and soils? A comparison of experimental results. **Water Resources Research**, v. 40, n. 1, p. 1-13, 2004. <https://doi.org/10.1029/2002WR001716>.

HAN, S. Finite volume solution of 2-D hyperbolic conduction in a heterogeneous medium. **Numerical Heat Transfer; Part A: Applications**, v. 70, n. 7, p. 723-737, 2016. <https://doi.org/10.1080/10407782.2016.1193347>.

HAYAT, T.; ZUBAIR, M.; WAQAS, M.; ALSAEDI, A.; AYUB, M. On doubly stratified chemically reactive flow of Powell–Eyring liquid subject to non-Fourier heat flux theory. **Results in Physics**, v. 7, p. 99-106, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2016.12.003>.

HE, J. H. Homotopy perturbation technique. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 178, n. 3, p. 257-262, 1999. [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(99\)00018-3](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(99)00018-3).

HESTENES, M. R.; STIEFEL, E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. **Journal of Research of the National Bureau of Standards**, v. 49, n. 6, p. 409–436, 1952. <https://doi.org/10.6028/jres.049.044>.

HILFER, R. **Applications of Fractional Calculus in Physics**. 1. ed.: Wspc, 2000.

HOBINY, A.; ALZHRANI, F.; ABBAS, I.; MARIN, M. The effect of fractional time derivative of bioheat model in skin tissue induced to laser irradiation. **Symmetry**, v. 12, n. 4, p. 1-10, 2020. <https://doi.org/10.3390/sym12040602>.

HOLLAND, J. R. **Adaptation in natural and artificial systems: an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence**. 1.ed.: University of Michigan Press, 1975.

HOSSEINI, S. M.; SLADEK, J.; SLADEK, V. Application of meshless local integral

equations to two dimensional analysis of coupled non-Fick diffusion-elasticity. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, v. 37, n. 3, p. 603-615, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2013.01.010>.

HUSSEIN, M. S.; LESNIC, D. Identification of the time-dependent conductivity of an inhomogeneous diffusive material. **Applied Mathematics and Computation**, v. 269, p. 35-58, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2015.07.039>.

IMOISILI, P. E.; JEN, T. C. Mechanical and water absorption behaviour of potassium permanganate (KMnO₄) treated plantain (*Musa Paradisiacal*) fibre/epoxy bio-composites. **Journal of Materials Research and Technology**, v. 9, n. 4, p. 8705–8713, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2020.05.121>.

INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P.; BERGMAN, T. L.; LAVINE, A. S. **Fundamentals of Heat and Mass Transfer**. 6. ed.: John Wiley & Sons, 2006.

JABBAR, N. M. A.; NIMR, M. A. A. The dual-phase-lag heat conduction model in thin slab under fluctuating thermal disturbance. **Heat Transfer Engineering**, v. 24, n. 5, p. 47-54, 2003. <https://doi.org/10.1080/01457630304052>.

JOANNÈS, S.; MAZÉ, L.; BUNSELL, A. R. A concentration-dependent diffusion coefficient model for water sorption in composite. **Composite Structures**, v. 108, n. 1, p. 111-118, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2013.09.007>.

KATSIKADELIS, J. T. **The Boundary Element Method for Engineers and Scientists, Second Edition: Theory and Applications**. 2. ed.: Academic Press, 2016.

KELLER, J. B. Inverse problems. **The American Mathematical Monthly**, v. 83, n. 2, p. 107–118, 1976. <https://doi.org/10.1080/00029890.1976.11994053>.

KENGNE, E.; LAKHSSASSI, A. Bioheat transfer problem for one-dimensional spherical biological tissues. **Mathematical Biosciences**, v. 269, p. 1-9, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.mbs.2015.08.012>.

KENNEDY, J.; EBERHART, R. Particle swarm optimization. *In: Proceedings of the IEEE International Conference On Neural Networks*, v. 4, p. 1942–1948, 1995.

KERN, M. **Numerical methods for inverse problems**. 1. ed.: Wiley-ISTE, 2016.

KESHMIRI, K.; POURMOHAMMADBAGHER, M.; HUANG, H.; NAZEMIFARD, N. Microfluidics to determine the diffusive mass transfer of a low viscosity solvent into a high viscosity hydrocarbon. **Fuel**, v. 235, p. 1327–1336, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.08.108>.

KHAIRY, R. A. Green's function solution for the dual-phase-lag heat equation. **Applied Mathematics**, v. 3, n. 10, p. 1170-1178, 2012. <https://doi.org/10.4236/am.2012.310171>.

KHAIRY, R. T. A. Thermal wave propagation in a finite medium irradiated by a heat source with Gaussian distribution in both the temporal and spatial domain. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 50, n. 8, p. 1369-1373, 2011.

<https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2011.03.002>.

KHEYBARI, S.; DARVISHI, M. T.; HASHEMI, M. S. A semi-analytical approach to Caputo type time-fractional modified anomalous sub-diffusion equations. **Applied Numerical Mathematics**, v. 158, p. 103-122, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2020.07.023>.

KIRKPATRICK, S.; GELATT, C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by simulated annealing. **Science**, v. 220, n. 4598, p. 671–680, 1983. <https://doi.org/10.1126/science.220.4598.671>.

KLAGES, R.; RADONS, G.; SOKOLOV, I. M. **Anomalous Transport: Foundations and Applications**. 1. ed. Wiley-VCH, 2008.

KOVÁCS, R.; ROGOLINO, P. Numerical treatment of nonlinear Fourier and Maxwell-Cattaneo-Vernotte heat transport equations. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 150, 119281, p. 1-7, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.119281>.

KOZIEL, S.; YANG, X. **Computational optimization, methods and algorithms**. 1. ed.: Springer, 2011.

KUBO, R. The fluctuation-dissipation theorem. **Reports on Progress in Physics**, v. 29, n. 1, p. 255-284, 1966. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/29/1/306>.

KUMAR, A.; SINGH, A. K.; RAJEEV. A Stefan problem with temperature and time dependent thermal conductivity. **Journal of King Saud University - Science**, v. 32, n. 1, p. 97-101, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.jksus.2018.03.005>.

KUMAR, D.; RAI, K. N. A study on thermal damage during hyperthermia treatment based on DPL model for multilayer tissues using finite element Legendre wavelet Galerkin approach. **Journal of Thermal Biology**, v. 62, p. 170-180, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.jtherbio.2016.06.020>.

KUMAR, P.; KUMAR, D.; RAI, K. N. A mathematical model for hyperbolic space-fractional bioheat transfer during thermal therapy. **Procedia Engineering**, v. 127, p. 56-62, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2015.11.329>.

KUMAR, P.; RAI, K. N. Fractional modeling of hyperbolic bioheat transfer equation during thermal therapy. **Journal of Mechanics in Medicine and Biology**, v. 17, n. 3, p. 1-19, 2017. <https://doi.org/10.1142/S0219519417500580>.

KUNDU, B.; LEE, K. S. A non-Fourier analysis for transmitting heat in fins with internal heat generation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 64, p. 1153-1162, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2013.05.057>.

KÜNTZ, M.; LAVALLÉE, P. Experimental evidence and theoretical analysis of anomalous diffusion during water infiltration in porous building materials. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 34, n. 16, p. 2547–2554, 2001. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/34/16/322>.

LACROIX, S. F. **Traité du calcul différentiel et du calcul intégral**. 2. ed.: Courcier, 1819.

LENZI, M. K.; LENZI, E. K.; GUILHERME, L. M. S.; EVANGELISTA, L. R.; RIBEIRO, H. V. Transient anomalous diffusion in heterogeneous media with stochastic resetting. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 588, p. 1–8, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2021.126560>.

LEWIS, R. W.; NITHIARASU, P.; SEETHARAMU, K. N. **Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow**. 1. ed.: John Wiley & Sons, 2004.

LI, X.; XU, M.; JIANG, X. Homotopy perturbation method to time-fractional diffusion equation with a moving boundary condition. **Applied Mathematics and Computation**, v. 208, n. 2, p. 434-439, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2008.12.023>.

LI, X.; ZHANG, Y.; REEVES, D. M.; ZHENG, C. Fractional-derivative models for non-Fickian transport in a single fracture and its extension. **Journal of Hydrology**, v. 590, 125396, p. 1-16, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.125396>.

LI, Z.; GE, X.; LU, R. Analysis of heat transfer performance of thermal suit based on Fourier law. **Chinese Control and Decision Conference, 2019**, p. 1219-1222, 2019. <https://doi.org/10.1109/CCDC.2019.8832850>.

LIANG, Y.; CHEN, W. A non-local structural derivative model for characterization of ultraslow diffusion in dense colloids. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, v. 56, p. 131–137, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2017.07.027>.

LIANG, Y.; CHEN, W.; XU, W.; SUN, H. G. Distributed order Hausdorff derivative diffusion model to characterize non-Fickian diffusion in porous media. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, v. 70, n. 8, p. 384–393, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2018.10.010>.

LIMA, G. M. B. **Processos aleatórios não-Markovianos: perfis de memória**. 2013. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2013.

LIMA, J. V. C. F.; LOBATO, F. S.; STEFFEN JR., V. Solution of fractional optimal control problems by using orthogonal collocation and multi-objective optimization stochastic fractal search. **Advances in Computational Intelligence**, v. 1, n. 4, p. 1–15, 2021. a. <https://doi.org/10.1007/s43674-021-00003-x>.

LIMA, J. V. C. F.; LOBATO, F. S.; STEFFEN JR., V. Solution of mass-spring-damper fractional systems using Caputo derivative and orthogonal collocation. **Engineering Computations**, v. 5, n. 1, p. 1–19, 2021. b.

LIMA, W. J.; LOBATO, F. S.; AROUCA, F. O. Solution of inverse anomalous diffusion problems using empirical and phenomenological models. **Heat and Mass Transfer**, v. 55, n. 11, p. 3053-3063, 2019. <https://doi.org/10.1007/s00231-019-02642-w>.

LIN, S. M. Analytical solutions of bio-heat conduction on skin in Fourier and non-Fourier models. **Journal of Mechanics in Medicine and Biology**, v. 13, n. 4, p. 1-18, 2013. <https://doi.org/10.1142/S0219519413500632>.

LIOUVILLE, J. Mémoire sur le calcul des différentielles à indices quelconques. **Journal de l'École Polytechnique**, v. 13, p. 71-162, 1832.

LIU, K. C.; CHEN, H. T.; CHENG, P. J. Inverse investigation of non-Fourier heat conduction in tissue. **Journal of Thermal Biology**, v. 62, p. 123–128, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.jtherbio.2016.07.002>.

LIU, X. F.; CHANG, D. M.; WANG, B. L.; CAI, L. R. Effect of temperature-dependency of material properties on thermal shock fracture of solids associated with non-Fourier heat conduction. **Theoretical and Applied Fracture Mechanics**, v. 93, p. 195-201, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2017.08.002>.

LIU, X.; SUN, H. G.; LAZAREVIC, M. P.; FU, Z. A variable-order fractal derivative model for anomalous diffusion. **Thermal Science**, v. 21, p. 51-59, 2017.

LIU, Y.; LI, C.; LACKNER, S.; WAGNER, M.; HORN, H. The role of interactions of effective biofilm surface area and mass transfer in nitrogen removal efficiency of an integrated fixed-film activated sludge system. **Chemical Engineering Journal**, v. 350, p. 992–999, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.06.053>.

LIU, Y.; LI, L.; LOU, Q. A hyperbolic lattice Boltzmann method for simulating non-Fourier heat conduction. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 131, p. 772-780, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.11.110>.

LIU, Y.; LI, L.; ZHANG, Y. Numerical simulation of non-Fourier heat conduction in fins by lattice Boltzmann method. **Applied Thermal Engineering**, v. 166, 114670, p. 1-6, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2019.114670>.

LOCKINGTON, D.; PARLANGE, J. Y.; DUX, P. Sorptivity and the estimation of water penetration into unsaturated concrete. **Materials and Structures**, v. 32, n. 5, p. 342–347, 1999. <https://doi.org/10.1007/BF02479625>.

LONGJIN, L.; REN, F. Y.; QIU, W. Y. The application of fractional derivatives in stochastic models driven by fractional Brownian motion. **Physica A**, v. 389, n. 21, p. 4809-4818, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2010.06.016>.

LOUREIRO, F. S.; WROBEL, L. C.; MANSUR, W. J. Solution of hyperbolic bioheat transfer problems by numerical Green's functions: The ExGA-linear θ method. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 34, n. 4, p. 459-468, 2012. <https://doi.org/10.1590/S1678-58782012000400006>.

MALINOWSKA, A. B.; ODZIJEWICZ, T.; TORRES, D. F. M. **Advanced Methods in the Fractional Calculus of Variations**. 1. ed.: Springer, 2015.

MATTOS, S. C. X. **Solução de problemas inversos do modelo Bevilacqua-Galeão de difusão anômala com dependência espacial**. 2021. Dissertação de Mestrado, Centro de Tecnologia e Ciências: Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo. 2021.

MAZUMDER, S. **Numerical Methods for Partial Differential Equations: Finite**

Difference and Finite Volume Methods. 1. ed. : Academic Press, 2016.

MEROZ, Y.; SOKOLOV, I. M. A toolbox for determining subdiffusive mechanisms. **Physics Reports**, v. 573, p. 1–29, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2015.01.002>.

METZLER, R.; JEON, J. H.; CHERSTVY, A. G. Non-Brownian diffusion in lipid membranes: experiments and simulations. **Biochimica et Biophysica Acta - Biomembranes**, v. 1858, n. 10, p. 2451-2467, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.bbamem.2016.01.022>.

MIRZAEI, F.; BIMESL, S. A new approach to numerical solution of second-order linear hyperbolic partial differential equations arising from physics and engineering. **Results in Physics**, v. 3, p. 241-247, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2013.10.002>.

MITRA, K.; KUMAR, S.; VEDAVARZ, A.; MOALLEMI, M. K. Experimental evidence of hyperbolic heat conduction in processed meat. **Journal of Heat Transfer**, v. 117, n. 3, p. 568–573, 1995. <https://doi.org/10.1115/1.2822615>.

MOHAN, R. R. **Finite Element and Boundary Element Applications in Quantum Mechanics.** 1. ed.: Oxford University Press, 2002.

MONTROLL, E. W.; WEISS, G. H. Random walks on lattices. II. **Journal of Mathematical Physics**, v. 6, n. 2, p. 167–181, 1965. <https://doi.org/10.1063/1.1704269>.

MOOSAIE, A. Axisymmetric non-Fourier temperature field in a hollow sphere. **Archive of Applied Mechanics**, v. 79, n. 8, p. 679-694, 2009. <https://doi.org/10.1007/s00419-008-0245-2>.

MORI, H. Transport, collective motion, and brownian motion. **Progress of Theoretical Physics**, v. 33, n. 3, p. 423–455, 1965. <https://doi.org/10.1143/PTP.33.423>.

MOZAFARIFARD, M.; MORTAZAVINEJAD, S. M.; TOGHRAIE, D. Numerical simulation of fractional non-Fourier heat transfer in thin metal films under short-pulse laser. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 115, 104607, p. 1-9, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2020.104607>.

MUHAMMAD, N. **Hydraulic, diffusion, and retention characteristics of inorganic chemicals in bentonite.** 2004. Tese de Doutorado, University of South Florida, 2004.

MURIO, D. A. Implicit finite difference approximation for time fractional diffusion equations. **Computers and Mathematics with Applications**, v. 56, n. 4, p. 1138-1145, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2008.02.015>.

NETO, F. D. M.; NETO, A. J. S. **An introduction to inverse problems with applications.** 1. ed.: Springer, 2013.

NICHOLAS, K. H. Studies of anomalous diffusion of impurities in silicon. **Solid State Electronics**, v. 9, n. 1, p. 35–47, 1966. [https://doi.org/10.1016/0038-1101\(66\)90023-2](https://doi.org/10.1016/0038-1101(66)90023-2).

NOWAMOOZ, A.; RADILLA, G.; FOURAR, M.; BERKOWITZ, B. Non-fickian transport in transparent replicas of rough-walled rock fractures. **Transport in Porous Media**, v. 98, n.

3, p. 651–682, 2013. <https://doi.org/10.1007/s11242-013-0165-7>.

ODIBAT, Z. Approximations of fractional integrals and Caputo fractional derivatives. **Applied Mathematics and Computation**, v. 178, n. 2, p. 527-533, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2005.11.072>.

OLIVEIRA, G. S.; STRÖHER, G. L.; STRÖHER, G. R. Simulação numérica do grau de queimadura da pele humana via modelo unidimensional hiperbólico. *In: Anais do XXI Congresso Brasileiro De Engenharia Química*, p. 1–8, 2016.

OLIVEIRA, G. T. S. **Estudo e aplicações da evolução diferencial**. 2006. Dissertação de Mestrado, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, 2006.

ORDÓÑEZ-MIRANDA, J.; ALVARADO-GIL, J. J. Thermal wave oscillations and thermal relaxation time determination in a hyperbolic heat transport model. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 48, n. 11, p. 2053–2062, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2009.03.008>.

ORTIGUEIRA, M. D. **Fractional Calculus for Scientists and Engineers**. 1. ed.: Springer, 2013.

OTT, A.; BOUCHAUD, J. P.; LANGEVIN, D.; URBACH, W. Anomalous diffusion in “living polymers”: a genuine Levy flight? **Physical Review Letters**, v. 65, n. 17, p. 2201–2204, 1990. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.2201>.

ÖZİŞİK, M. N.; ORLANDE, H. R. B.; COLAÇO, M. J.; COTTA, R. M. **Finite Difference Methods in Heat Transfer**. 2. ed.: CRC Press, 2017.

PARADISI, P.; CESARI, R.; MAINARDI, F.; MAURIZI, A.; TAMPIERI, F. A generalized Fick’s law to describe non-local transport effects. **Physics and Chemistry of the Earth, Part B: Hydrology, Oceans and Atmosphere**, v. 26, n. 4, p. 275-279, 2001. [https://doi.org/10.1016/S1464-1909\(01\)00006-5](https://doi.org/10.1016/S1464-1909(01)00006-5).

PAUL, A.; PAUL, A. Computational study of photo-thermal ablation of large blood vessel embedded tumor using localized injection of gold nanoshells. **Journal of Thermal Biology**, v. 78, p. 329-342, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.jtherbio.2018.10.021>.

PEDRON, I. T. **Estudos em difusão anômala**. 2003. Tese de Doutorado, Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2003.

PEL, L. **Moisture Transport in Porous Building Materials**. 1995. Tese de Doutorado, Eindhoven Technical University, Netherlands. 1995.

PEL, L.; KOPINGA, K.; BERTRAM, G.; LANG, G. Water absorption in a fired-clay brick observed by NMR scanning. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 28, n. 4, p. 675-680, 1995. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/28/4/009>.

PEL, L.; KOPINGA, K.; BROCKEN, H. Moisture transport in porous building materials. **Heron**, v. 41, n. 2, p. 95-105, 1996.

PENG, Y.; ZHANG, X. Y.; XIE, Y. J.; LI, X. F. Transient hygrothermoelastic response in a cylinder considering non-Fourier hyperbolic heat-moisture coupling. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 126, p. 1094-1103, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.05.084>.

PENNES, H. H. Analysis of tissue and arterial blood temperatures in the resting human forearm. **Journal of Applied Physiology**, v. 1, n. 2, p. 93-122, 1948. <https://doi.org/10.1152/jappl.1948.1.2.93>.

PETCHERDCHOO, A. Time dependent models of apparent diffusion coefficient and surface chloride for chloride transport in fly ash concrete. **Construction and Building Materials**, v. 38, p. 497-507, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2012.08.041>.

PINTO, J. C.; LAGE, P. L. C. **Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química**. E-Papers, 2001.

PODLUBNY, I. **Fractional Differential Equations**. Academic Press, 1999.

PRICE, K. V.; STORN, R. M.; LAMPINEN, J. A. **Differential evolution: a practical approach to global optimization**. 1. ed.: Springer, 2005.

QUIROZ, F. C.; AGUIRRE, A. H.; CABRERA, M. A. M; MARTÍNEZ, E. H. Dynamic analysis of the anomalous diffusion in catalyst particles considering chemical reactions with non-linear kinetics. **Fuel**, v. 242, p. 35-40, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.01.017>.

RANGAIAH, G. P. **Stochastic global optimization: techniques and applications in chemical engineering**. 1. ed.: World Scientific, 2010.

RANGAIAH, G. P.; SHARMA, S. **Differential evolution in chemical engineering: developments and applications**. 1. ed.: World Scientific, 2017.

RAO, S. S. **Engineering optimization: theory and practice**. 4. ed.: John Wiley & Sons, 2009.

RASMUSSEN, M. L.; CIVAN, F. Analytical modeling of non-Fickian wave-diffusion of gas in heterogeneous media. **Applied Mathematical Modelling**, v. 39, n. 2, p. 862-880, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2014.07.009>.

RICE, R. G.; DO, D. D. **Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers**. 1. ed.: John Wiley & Sons, 1995.

RICHARDSON, L. F. Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph. **Proceedings of the Royal Society A**, v. 110, n. 756, p. 709-737, 1926. <https://doi.org/10.1098/rspa.1926.0043>.

RIETH, A.; KOVÁCS, R.; FÜLÖP, T. Implicit numerical schemes for generalized heat conduction equations. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 126, p. 1177-1182, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.06.067>.

RIVERA, M. J.; MOLINA, J. A. L.; TRUJILLO, M.; GARCÍA, V. R.; BERJANO, E. J.

Analytical validation of COMSOL multiphysics for theoretical models of radiofrequency ablation including the hyperbolic bioheat transfer equation. *In: Proceedings of Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, p. 3214-3217, 2010. <https://doi.org/10.1109/IEMBS.2010.5627405>.

ROETZEL, W.; PUTRA, N.; DAS, S. K. Experiment and analysis for non-Fourier conduction in materials with non-homogeneous inner structure. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 42, n. 6, p. 541–552, 2003. [https://doi.org/10.1016/S1290-0729\(03\)00020-6](https://doi.org/10.1016/S1290-0729(03)00020-6).

ROOHI, R.; HEYDARI, M. H.; AVAZZADEH, Z. Optimal control of hyperthermia thermal damage based on tumor configuration. **Results in Physics**, v. 23, 103992, p. 1-8, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2021.103992>.

ROUSSEL, C. J.; ROUSSEL, M. R. Reaction-diffusion models of development with state-dependent chemical diffusion coefficients. **Progress in Biophysics and Molecular Biology**, v. 86, n. 1, p. 113-160, 2004. <https://doi.org/10.1016/j.pbiomolbio.2004.03.001>.

SALEHI, Y.; DARVISHI, M. T.; SCHIESSER, W. E. Numerical solution of space fractional diffusion equation by the method of lines and splines. **Applied Mathematics and Computation**, v. 336, p. 465-480, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2018.04.053>.

SANTOS, F. F. T. **Classes de soluções para a equação de Langevin generalizada**. 2011. Tese de Doutorado, Departamento de Matemática, Universidade de Brasília, Brasília, 2011.

SANTOS, M. A. F. D. Analytic approaches of the anomalous diffusion: a review. **Chaos, Solitons and Fractals**, v. 124, p. 86-96, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2019.04.039>.

SATO, Y.; KLAGES, R. Anomalous diffusion in random dynamical systems. **Physical Review Letters**, v. 122, n. 17, p. 1–5, 2019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.174101>.

SCHWARZWÄLDER, M. C.; MYERS, T. G.; HENNESSY, M. G. The one-dimensional Stefan problem with non-Fourier heat conduction. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 150, 106210, p. 1-11, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2019.106210>.

SEROV, V. **Fourier Series, Fourier Transform and Their Applications to Mathematical Physics**. 1. ed.: Springer, 2017.

SHEIKH, A. H.; MONTE, F. D.; BECK, J. V. Temperature solutions in thin films using thermal wave Green's function solution equation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 62, p. 78-86, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2013.02.036>.

SHLESINGER, M. F.; ZASLAVSKY, G. M.; KLAFTER, J. Strange kinetics. **Nature**, v. 363, n. 6424, p. 31–37, 1993. <https://doi.org/10.1038/363031a0>.

SILVA, D. V. **Transporte difusivo de líquidos em meios porosos - difusão anômala em zeólita consolidada**. 2006. Dissertação de Mestrado, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2006.

SILVA, L. G. **Problemas diretos e inversos em processos de difusão anômala**. 2016. Tese de Doutorado, Centro de Tecnologia e Ciências: Instituto Politécnico, Universidade do Estado

do Rio de Janeiro, Nova Friburgo. 2016.

SINGH, J.; GUPTA, P. K.; RAI, K. N. Solution of fractional bioheat equations by finite difference method and HPM. **Mathematical and Computer Modelling**, v. 54, n. 9-10, p. 2316-2325, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.mcm.2011.05.040>.

SINGH, S.; KUMAR, D.; RAI, K. N. Analytical solution of Fourier and non-Fourier heat transfer in longitudinal fin with internal heat generation and periodic boundary condition. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 125, p. 166-175, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2017.11.029>.

SMITH, E. R.; DAIVIS, P. J.; TODD, B. D. Measuring heat flux beyond Fourier's law. **Journal of Chemical Physics**, v. 150, n. 6, 064103, p. 1-16, 2019. <https://doi.org/10.1063/1.5079993>.

SOARES, D. Nonlinear analysis of non-Fourier heat conduction problems by a locally stabilized explicit approach. **Advances in Engineering Software**, v. 139, 102735, p. 1-15, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2019.102735>.

SOHAIL, A.; KHAN, W. A.; KHAN, M.; SHAH, S. I. A. Consequences of non-Fourier's heat conduction relation and chemical processes for viscoelastic liquid. **Results in Physics**, v. 7, p. 3281-3286, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2017.08.051>.

SOUSA, E. How to approximate the fractional derivative of order $1 < \alpha \leq 2$. **International Journal of Bifurcation and Chaos**, v. 22, n. 4, p. 1-13, 2012. <https://doi.org/10.1142/S0218127412500757>.

STORN, R.; PRICE, K. Differential Evolution: a simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces. **International Computer Science Institute**, v. 12, p. 1-16, 1995.

STORN, R.; PRICE, K. Differential Evolution: a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. **Journal of Global Optimization**, v. 11, p. 341-359, 1997. <https://doi.org/10.1023/A:1008202821328>.

STYRIS, D. L.; TOMIZUKA, C. T. Anomalous diffusion rate for small penetration distance in copper. **Journal of Applied Physics**, v. 34, n. 4, p. 1001-1002, 1963. <https://doi.org/10.1063/1.1729346>.

SULEIMAN, K.; LIU, C.; ZHANG, X.; WANG, E.; MA, L.; ZHENG, L. Anomalous diffusion on Archimedean spiral structure with Cattaneo flux model. **Journal of Molecular Liquids**, v. 319, 114256, p. 1-8, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114256>.

SUN, H. G.; ZHANG, Y.; BALEANU, D.; CHEN, W.; CHEN, Y. Q. A new collection of real world applications of fractional calculus in science and engineering. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, v. 64, p. 213-231, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2018.04.019>.

TANG, D. W.; ARAKI, N. Wavy, wavelike, diffusive thermal responses of finite rigid slabs to high-speed heating of laser-pulses. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.

42, n. 5, p. 855-860, 1999. [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(98\)00244-0](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(98)00244-0).

TAVARES, F. W.; NDIAYE, P. M.; LENZI, E. K.; EVANGELISTA, L. R.; RIBEIRO, H. V.; ZOLA, R. S. Anomalous diffusion and sorption-desorption process in complex fluid systems. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, v. 90, p. 1–10, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2020.105411>.

THOMAS, L. H. **Elliptic problems in linear difference equations over a network**. Columbia University, New York, 1949.

TOLEDO, L. F.; LOUREIRO, F. S. Problemas de biotransferência de calor: simulações numéricas de queimaduras de pele. *In: Anais do XI Simpósio De Mecânica Computacional /II Encontro Mineiro De Modelagem Computacional*, p. 1–11, 2014.

TZOU, D. Y. A unified field approach for heat conduction from macro- to micro-scales. **Journal of Heat Transfer**, v. 117, n. 1, p. 8-16, 1995. <https://doi.org/10.1115/1.2822329>.

VÁN, P.; BEREZOVSKI, A.; FÜLÖP, T.; GRÓF, G.; KOVÁCS, R.; LOVAS; VERHÁS, J. Guyer-Krumhansl-type heat conduction at room temperature. **Europhysics Letters**, v. 118, n. 5, p. 1–4, 2017. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/118/50005>.

VANDERPLAATS, G. N. **Numerical optimization techniques for engineering design**. 3. ed.: Vanderplaats Research and Development, Inc, 1999.

VANDEWALLE, L. A.; VAN DE VIJVER, R.; VAN GEEM, K. M.; MARIN, G. B. The role of mass and heat transfer in the design of novel reactors for oxidative coupling of methane. **Chemical Engineering Science**, v. 198, p. 268–289, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.09.022>.

VAN KAMPEN, N. G. Remarks on non-Markov processes. **Brazilian Journal of Physics**, v. 28, n. 2, p. 90–96, 1998. <https://doi.org/10.1590/S0103-97331998000200003>.

VERNOTTE, P. Les paradoxes de la theorie continue de l'equation de la chaleur. **Comptes Rendus**, v. 246, p. 3154-3155, 1958.

VILLADSEN, J.; MICHELSEN, M. L. **Solution of differential equation models by polynomial approximation**. 1.ed.: Prentice-Hall, 1978.

VILLADSEN, J. V.; STEWART, W. E. Solution of boundary-value problems by orthogonal collocation. **Chemical Engineering Science**, v. 22, n. 11, p. 1483-1501, 1967. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(67\)80074-5](https://doi.org/10.1016/0009-2509(67)80074-5).

VISWANATHAN, G. M.; LUZ, M. G. E.; RAPOSO, E. P.; STANLEY, H. E. **The Physics of Foraging: An Introduction to Random Searches and Biological Encounters**. 1. ed.: Cambridge University Press, 2011. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511902680>.

VLAHOS, L.; ISLIKER, H.; KOMINIS, Y.; HIZANIDIS, K. **Normal and anomalous diffusion: a tutorial**. 2008. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/0805.0419>.

WANG, L.; XU, J.; WANG, J. A peridynamic framework and simulation of non-Fourier and

nonlocal heat conduction. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 118, p. 1284-1292, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.11.074>.

WANG, X.; QI, H.; YANG, X.; XU, H. Analysis of the time-space fractional bioheat transfer equation for biological tissues during laser irradiation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 177, p. 121555, p. 1-15, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121555>.

WANKHADE, P. A.; KUNDU, B.; DAS, R. Establishment of non-Fourier heat conduction model for an accurate transient thermal response in wet fins. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 126, p. 911-923, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.05.094>.

WEI, S.; CHEN, W.; HON, Y. C. Characterizing time dependent anomalous diffusion process: A survey on fractional derivative and nonlinear models. **Physica A**, v. 462, p. 1244-1251, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2016.06.145>.

WELTY, J. R.; WICKS, C. E.; WILSON, R. E.; RORRER, G. L. **Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer**. 5. ed.: John Wiley & Sons, 2007.

WILMERS, J.; BARGMANN, S. Simulation of non-classical diffusion in polymers. **Heat and Mass Transfer**, v. 50, n. 11, p. 1543-1552, 2014. <https://doi.org/10.1007/s00231-014-1365-6>.

XU, F.; LU, T. **Introduction to skin biothermomechanics and thermal pain**. 1. ed.: Springer, 2011.

XU, H.; ZHOU, J.; DONG, Q.; TAN, Y. Characterization of moisture vapor diffusion in fine aggregate mixtures using Fickian and non-Fickian models. **Materials & Design**, v. 124, p. 108-120, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.03.076>.

YANG, X.; LIU, Y.; BAI, S. A numerical solution of second-order linear partial differential equations by differential transform. **Applied Mathematics and Computation**, v. 173, n. 2, p. 792-802, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2005.04.015>.

YANG, X.; LIU, Z.; MANHAEGHE, D.; YANG, Y.; HOGIE, J.; DEMEESTERE, K.; VAN HULLE, S. W. H. Intensified ozonation in packed bubble columns for water treatment: focus on mass transfer and humic acids removal. **Chemosphere**, v. 283, p. 131217, p. 1-10, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.131217>.

YAO, W. A.; YAO, H. X.; YU, B. Radial integration BEM for solving non-Fourier heat conduction problems. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, v. 60, p. 18-26, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2015.04.002>.

YILDIRIM, A.; KOÇAK, H. Homotopy perturbation method for solving the space-time fractional advection-dispersion equation. **Advances in Water Resources**, v. 32, n. 12, p. 1711-1716, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2009.09.003>.

YMELI, G. L.; KAMDEM, H. T. T.; TCHINDA, R.; LAZARD, M. Analytical layered solution of radiation and non-Fourier conduction problems in optically complex media.

International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 145, 118712, p. 1-14, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118712>.

YOUSEFI, S. A. Legendre multiwavelet Galerkin method for solving the hyperbolic telegraph equation. **Numerical Methods for Partial Differential Equations**, v. 26, n. 3, p. 535-543, 2010. <https://doi.org/10.1002/num.20445>.

YU, B.; JIANG, X. A fractional anomalous diffusion model and numerical simulation for sodium ion transport in the intestinal wall. **Advances in Mathematical Physics**, v. 2013, p. 1-8, 2013. <https://doi.org/10.1155/2013/479634>.

YU, B.; JIANG, X. Temperature prediction by a fractional heat conduction model for the bi-layered spherical tissue in the hyperthermia experiment. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 145, 105990, p. 1-7, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2019.105990>.

ZHANG, H.; BONILLA-PETRICIOLET, A.; RANGAIAH, G. P. A Review on global optimization methods for phase equilibrium modeling and calculations. **The Open Thermodynamics Journal**, v. 5, n. 1, p. 71-92, 2011. <https://doi.org/10.2174/1874396X01105010071>.

ZHANG, L.; SHANG, X. Analytical solution to non-Fourier heat conduction as a laser beam irradiating on local surface of a semi-infinite medium. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 85, p. 772-780, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.02.024>.

ZHANG, W. B.; YI, M. Reaction-anomalous diffusion processes for $A+B\rightleftharpoons C$. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 527, 121347, p. 1-10, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.121347>.

ZHANG, Y.; CHEN, B.; LI, D. Non-Fourier effect of laser-mediated thermal behaviors in bio-tissues: a numerical study by the dual-phase-lag model. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 108, p. 1428-1438, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.01.010>.

ZHAO, Y.; CHEN, J.; YANG, M.; LIU, Y.; SONG, Y. A rapid method for the measurement and estimation of CO₂ diffusivity in liquid hydrocarbon-saturated porous media using MRI. **Magnetic Resonance Imaging**, v. 34, n. 4, p. 437-441, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.mri.2015.12.024>.

ZHOKH, A. Size-controlled non-Fickian diffusion in a combined micro- and mesoporous material. **Chemical Physics**, v. 520, p. 27-31, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2018.12.013>.

ZHOKH, A.; STRIZHAK, P. Crossover between Fickian and non-Fickian diffusion in a system with hierarchy. **Microporous and Mesoporous Materials**, v. 282, p. 22-28, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2019.03.016>.

ZHOU, Y.; HU, X. X. Two methods for estimation of temperature-dependent thermal conductivity based on constant element approximation. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 135, p. 104-116, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2018.09.008>.

ZHU, L. Heat transfer applications in biological systems. *In: Biomedical engineering and design handbook*. McGraw-Hill, 2009.

ZHUKOVSKY, K. V.; SRIVASTAVA, H. M. Analytical solutions for heat diffusion beyond Fourier law. **Applied Mathematics and Computation**, v. 293, p. 423-437, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2016.08.038>.