



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**



**ESTUDO DO FENÔMENO DE DIFUSÃO ANÔMALA EM SISTEMAS
DE ENGENHARIA**

LUCAS CAMARGOS BORGES

UBERLÂNDIA - MG

2017



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**



ESTUDO DO FENÔMENO DE DIFUSÃO ANÔMALA EM SISTEMAS DE ENGENHARIA

LUCAS CAMARGOS BORGES

Monografia de graduação apresentada à
Universidade Federal de Uberlândia como parte
dos requisitos necessários para a aprovação na
disciplina de Trabalho de Conclusão de Curso
do curso de Engenharia Química.

UBERLÂNDIA - MG

2017

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA MONOGRAFIA DA DISCIPLINA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO DE LUCAS CAMARGOS BORGES
APRESENTADA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA, EM 07/12/2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Fábio de Oliveira Arouca
Orientador (FEQ/UFU)

Prof. Fran Sérgio Lobato
Orientador (FEQ/UFU)

Enga. MSc. Nara Brandão Costa Santos
PPGEQ/UFU

Prof. William Junio Lima
PPGMO/UFG

À minha família e aos meus amigos

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço à Deus por todas as bênçãos que ele proporcionou em minha vida. Por todas as portas que foram abertas e obstáculos que foram vencidos que me permitiram chegar aonde cheguei.

Agradeço aos meus pais por todo amor e carinho a mim dedicados, por estarem sempre ao meu lado comemorando em minhas vitórias e consolando-me em minhas derrotas, ajudando-me a extrair o máximo aprendizado em cada situação. Graças a incrível educação que eles me proporcionaram, que eu pude construir um caminho sólido para realizar meus sonhos. O esforço árduo e dedicação constante que eles sempre demonstraram que me possibilitaram estudar em uma instituição reconhecida e prestigiada em todo o país.

Agradeço aos meus orientadores Fábio de Oliveira Arouca e Fran Sérgio Lobato por terem confiado a mim um tema desafiador que me permitiu aprofundar o meu conhecimento em diferentes áreas, além de permitir que tivesse uma experiência gratificante ao redigir este trabalho. Agradeço a ambos por toda a tutela e disponibilidade em todas as etapas deste projeto, sempre me auxiliando e me guiando na direção correta. Ao professor Fábio Arouca, ainda deixo meu agradecimento por ter me acompanhado desde o meu primeiro ano de graduação na realização de uma atividade de iniciação científica.

Aos professores doutores Antônio José da Silva Neto, do Instituto Politécnico da UERJ, e Luiz Bevilacqua, da COPPE/UFRJ, agradeço por seus comentários pertinentes e auxílio no desenvolvimento do trabalho.

Deixo meus agradecimentos aos doutores em Engenharia Química Aline Marques Moraes Arouca e Deivid Marques Nunes, com os quais tive a oportunidade de trabalhar durante minha iniciação científica.

Por fim, mas não menos importante, agradeço a todas as amigas que pude construir em Uberlândia, que foram fundamentais para tornar mais fácil minha adaptação em uma nova cidade e com os quais pude compartilhar momentos únicos.

*Eu não temeria um grupo de leões
conduzido por uma ovelha, mas eu
sempre temeria um rebanho de ovelhas
conduzido por um leão.*

Alexandre, o Grande

RESUMO

Nos últimos anos, inúmeros esforços têm sido dedicados ao entendimento de determinados fenômenos que não seguem perfeitamente teorias clássicas apresentadas na literatura. Dentre estas, o processo de difusão de partículas, que pode ser modelado matematicamente pela lei de Fick, pode não ser capaz de representar fenômenos que ocorrem na natureza. Entre estes pode-se citar fenômenos de atraso de tempo e efeitos de retenção, que ocorrem devido à adsorção, ao aprisionamento mecânico, às reações químicas e às interações mecânicas com o meio de suporte. Em geral, a literatura especializada lida com estes casos através da inclusão de efeitos de retenção na equação da difusão através de derivadas fracionárias; via modelagem do coeficiente de difusão variante com o tempo e/ou com a concentração ou a partir de uma abordagem discreta em dinâmica de população. Diante do que foi exposto, a presente contribuição tem por objetivo realizar uma revisão sobre os fenômenos de difusão anômala em sistemas de engenharia. Dessa forma, um estudo sobre o modelo proposto por BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b) foi realizado, no qual buscou-se avaliar a influência dos parâmetros do modelo sobre o processo, utilizando o Método das Linhas como metodologia numérica alternativa para a resolução do problema. O processo de difusão anômala foi analisado considerando uma distribuição simétrica e assimétrica, no qual os modelos foram estudados separadamente e cada parâmetro teve sua influência detalhada. Os resultados indicaram que a metodologia adotada obteve resultados satisfatórios e pode-se notar que o processo anômalo de difusão apresenta um atraso em relação ao tempo quando comparado ao processo clássico.

Palavras-chave: Difusão Anômala, Método das Linhas, Modelagem Matemática, Análise de Sensibilidade.

ABSTRACT

In last years, numerous efforts have been devoted to the understanding of certain phenomena that do not perfectly follow classical theories presented in the literature. Among these, the particle diffusion process, which can be mathematically modeled by Fick's law, may not be able to represent some phenomena occurring in nature. These include phenomena of time delay and retention effects, which occur due to adsorption, mechanical entrapment, chemical reactions and mechanical interactions with the support medium. In general, the literature deals with these cases through the inclusion of retention effects in the diffusion equation through fractional derivatives; or via modeling of the diffusion coefficient variant with time and/or concentration or from a discrete approach in population dynamics. In view of the foregoing, the present contribution aims to review the phenomena of anomalous diffusion in engineering systems. Thus, a study on the model proposed by BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b) was done, which it was evaluated the influence of the parameters of the model on the process, using the Method of Lines as alternative numerical methodology to solve the problem. The anomalous diffusion process was analyzed considering a symmetrical and asymmetric distribution, then these models were studied separately and each parameter had its influence detailed. The results indicated that the adopted methodology obtained satisfactory results and it can be observed that the anomalous diffusion process presents a delay in relation to the time when compared to the classic process.

Keywords: Anomalous Diffusion, Method of Lines, Mathematical Modeling, Sensitivity Analysis.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Representação esquemática do processo de difusão anômala com distribuição simétrica (BEVILACQUA et al. 2011a).	21
Figura 2: Estratégia geral do método das linhas (COLNAGO, 2012).	28
Figura 3: Caso 1 ($\beta=0,2$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-8}$), A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.	34
Figura 4: Caso 2 ($\beta=0,8$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-8}$), A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.	34
Figura 5: Caso 3 ($\beta=0,5$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-6}$), A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.	34
Figura 6: Caso 4 ($\beta=0,9$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-6}$), A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.	34
Figura 7: Caso 5 ($\beta=0,5$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-8}$), A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.	34
Figura 8: Caso 6 ($\beta=0,2$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-6}$), A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.	34
Figura 9: Caso 1 ($\lambda=0,2$; $k_1=10^{-2}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$), A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.	36
Figura 10: Caso 2 ($\lambda=0,5$; $k_1=10^{-2}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$), A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica. ...	36
Figura 11: Caso 3 ($\lambda=0,8$; $k_1=10^{-2}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$), A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica. ...	36
Figura 12: Caso 4 ($\lambda=0,9$; $k_1=10^{-4}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$), A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica. ..	36
Figura 13: Caso 5 ($\lambda=0,9$; $k_1=10^{-3}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$), A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica. ...	36
Figura 14: Caso 6 ($\lambda=0,9$; $k_1=10^{-2}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$), A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica. ..	36

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Estudos de caso para a avaliação do modelo de difusão anômala simétrica com retenção de partículas.	30
Tabela 2: Estudos de caso para a avaliação do modelo de difusão anômala assimétrica sem retenção de partículas.	32

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

ML	Métodos das Linhas
EDO	Equação Diferencial Ordinária
EDP	Equação Diferencial Parcial
α	Fração de partículas retidas
β	Fração de partículas difundidas
Δx	Diferencial referente a variável espaço
η	Parâmetro da Equação 4
λ	Parâmetro do processo difusivo assimétrico
$D_t^{1-\gamma}$	Derivada de Riemann-Liouville
D	Coeficiente de difusão (Equação 1)
$\vec{J}$	Fluxo de partículas
k_1	Coeficiente do modelo assimétrico
k_2	Coeficiente de difusão do modelo simétrico
k_3	Coeficiente de difusão do modelo assimétrico
k_4	Coeficiente de retenção de partículas
K_γ	Coeficiente de difusão (Equação 5)
K_μ	Coeficiente de difusão (Equação 6)
L	Comprimento espacial
L_0	Fator de escala (comprimento)
L_1	Fator de escala (comprimento)
m	Fator de escala
n	Índice de contagem de células
N	Número de pontos de discretização
p	Concentração de partículas
t	Tempo
T_0	Fator de escala de tempo
x	Posição

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	13
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	16
2.1 Difusão Tradicional	16
2.2 Difusão Anômala	17
3 MODELAGEM MATEMÁTICA	21
3.1 Distribuição Simétrica com Retenção de Partículas	21
3.2 Distribuição Assimétrica sem Retenção	24
4 METODOLOGIA	28
4.1 Distribuição Simétrica com Retenção de Partículas	28
4.2 Distribuição Assimétrica sem Retenção	31
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	33
5.1 Difusão Simétrica com Retenção de Partículas	33
5.2 Difusão Assimétrica sem Retenção	35
6 CONCLUSÃO	38
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	39

1 INTRODUÇÃO

Diante dos avanços tecnológicos dos últimos anos, o modo como o homem enxerga e estuda os eventos que ocorrem na natureza mudaram profundamente. As novas tecnologias permitiram o desenvolvimento de ferramentas cada vez mais sofisticadas que possibilitaram um maior nível de detalhamento dos objetos de estudo, o que contribui para solucionar questões antes não resolvidas ou propor uma nova abordagem para fenômenos que antes eram explicados por meio de metodologias simplificadoras.

Neste cenário, novos estudos são constantemente desenvolvidos a fim de possibilitar a formulação de modelos mais complexos e com maior correspondência com a realidade. Assim, fenômenos de diversas áreas do conhecimento, que outrora eram negligenciados ou desprezados em determinadas situações, podem, agora, ser melhor avaliados, tornando-se o foco de novos estudos.

Dentre estas áreas, destaca-se o estudo dos sistemas de engenharia, em que se pode citar os fenômenos de transporte, que possuem imensa importância no estudo da difusão de poluentes no ar, na hidráulica, na projeção de equipamentos, na análise de viabilidade e otimização de processos produtivos, entre outros. Nesta área, o desenvolvimento de novas abordagens tem como objetivo aprimorar a correspondência entre os fenômenos observados sob a perspectiva da mecânica do contínuo e aqueles observados sob a perspectiva da micromecânica (BEVILACQUA *et al.*, 2011b).

Os fenômenos de transporte são divididos em três grandes grupos, a saber, os mecanismos de transmissão de quantidade de movimento; energia (Lei de Fourier) e massa (Lei de Fick). Dentre estes fenômenos, o estudo do processo de difusão merece destaque, visto sua imensa aplicabilidade em engenharia, além de sua importância na modelagem de problemas envolvendo áreas da química, física e biologia. Na engenharia química destaca-se sua aplicação no projeto de reatores químicos e de catalisadores; na transformação das propriedades do aço, através da adição de outros elementos químicos; na aplicação de dopantes durante a produção de semicondutores e na sinterização para a produção de materiais sólidos.

A difusão é um processo caracterizado por levar um sistema a uma condição de equilíbrio, atuando no transporte de partículas de um meio mais concentrado para um menos concentrado, ou seja, a favor do gradiente de concentração. Neste processo, cada elemento dentro de um conjunto (massa, momento linear ou energia) desempenha uma trajetória aleatória, conhecida como movimento *browniano*, e como resultado todo o conjunto se difunde.

Em nível macroscópico o comportamento coletivo das partículas apresenta regularidade e segue modelos matemáticos há muito já definidos, como a clássica Lei de Fick (PEDRON, 2003).

No entanto, esta abordagem clássica pode não ser capaz de descrever outros processos que ocorrem paralelamente ao processo difusivo, em que, em nível macroscópico, efeitos de atraso de tempo, de retenção de partículas e de aceleração do processo difusivo são observados. Estes efeitos são resultantes de processos de adsorção, aprisionamento mecânico, reações químicas e interações mecânicas com o meio de suporte (SILVA, 2016)

Assim, diante do anseio por modelos com cada vez mais correspondência com a realidade, os efeitos destes fenômenos secundários devem ser adicionados, levando ao estudo do processo de difusão anômala, no qual o deslocamento quadrático médio não é função linear do tempo, diferentemente do processo tradicional de difusão, no qual essa relação é linear (PEDRON, 2003).

Experimentalmente, o fenômeno da difusão anômala foi observado por DEREC *et al.* (2010). No experimento realizado, estes autores analisaram a difusão de ferrofluido em água escoando num micro canal e notaram que o processo segue a abordagem clássica. Porém, ao adicionar o efeito de um campo magnético a teoria usual não mais descrevia satisfatoriamente o processo.

O conhecimento do processo de difusão anômala e sua predição desempenha um importante papel no estudo do crescimento de superfícies (SPOHN, 1993), transporte de um fluido através de um meio poroso, análise do histograma obtido a partir das batidas do coração de um indivíduo saudável (PENG *et al.*, 1993) micelas dissolvidas em água salgada (OTT *et al.*, 1990; BOUCHAUD *et al.*, 1991), no transporte caótico de um fluido em um fluxo laminar de uma mistura de glicerol e água em um cilindro rodando rapidamente (SOLOMON, 1993), na difusão através de uma superfície líquida, difusão em plasma e difusão em fractais.

A simulação do processo de difusão anômala tem sido abordada na literatura através de equações envolvendo derivadas fracionárias, objetivando avaliar os efeitos de atraso de tempo, retenção e aceleração (METZELER, 2000); ou considerando que o coeficiente de difusão é uma função do tempo e/ou concentração (WU e BERLAND, 2008). Além destes, uma nova metodologia surgiu através de uma abordagem discreta em dinâmica de população, em que os pesquisadores BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b) propuseram um modelo a partir da definição de novos parâmetros (coeficiente de retenção e fração de partículas capazes de se difundir) e da inserção de termos com derivadas de ordem superior.

Portanto, visto a vasta aplicabilidade e importância do tema abordado, a presente contribuição tem por objetivo realizar uma revisão sobre os fenômenos de difusão anômala em

sistemas de engenharia. Neste sentido, o modelo proposto por BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b) foi escolhido para ser estudado neste trabalho devido esta ser uma contribuição recente e foco de estudos contemporâneos. Assim, uma metodologia numérica alternativa foi proposta para a resolução deste modelo matemático, a saber, o Método das Linhas, e foi feita a análise de sensibilidade dos novos parâmetros adicionados por estes pesquisadores para descrever o processo com o objetivo de avaliar a influência individual de cada um.

Este Trabalho de Conclusão de Curso está estruturado como segue. O próximo capítulo apresenta um comparativo entre a difusão tradicional e anômala. Em Modelagem Matemática, é apresentado o desenvolvimento matemático do modelo de BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b). No capítulo de Metodologia é exposto o Método das Linhas. Em seguida, os resultados da simulação do processo e a análise de sensibilidade dos parâmetros são abordados e comentados no capítulo de Resultados e Discussão. E, por fim, são apresentadas as conclusões deste trabalho.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Visto a usual abordagem do processo de difusão segundo uma visão contínua, em que se chega a uma equação simplificadora que não considera efeitos simultâneos ao processo, e a abordagem anômala através de um processo difusivo com maior correspondência com a micromecânica, busca-se, neste capítulo, fazer uma comparação entre os dois processos, ressaltando as particularidade e diferenças entre ambos.

Para o caso anômalo, algumas metodologias difundidas na literatura para a resolução numérica do problema são apresentadas, com destaque para o estudo de BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b), do qual este trabalho buscou fazer uma revisão.

2.1 DIFUSÃO TRADICIONAL

Tradicionalmente o processo de difusão é estudado na engenharia e áreas afins através de aplicações da Lei de Fick (Equação 1). Esta abordagem é fruto dos trabalhos desenvolvidos pelo médico e fisiologista alemão Adolf Fick (1829-1901) que propôs um modelo para a difusão de um soluto em um solvente semelhante aos modelos para a condução de calor, de Fourier, e para a condução de eletricidade, de Ohm, o que evidenciou que uma mesma ótica de estudo pode ser comum a vários processos.

$$\vec{J} = -D\nabla p \quad (1)$$

Na Equação 1, o vetor $\vec{J}$ representa a quantidade de substância que atravessa uma unidade de área normal à direção de escoamento por unidade de tempo, ou seja, o fluxo de partículas. O termo p representa a concentração do elemento que se difunde. E, por fim, D é o coeficiente de difusão ou difusividade, que indica o quão rápido o elemento se difunde. Destaca-se ainda que a direção do vetor fluxo é oposta ao sentido de crescimento da concentração, expressa pelo vetor gradiente (PEDRON, 2003).

O coeficiente de difusão é uma função das propriedades do meio, assim varia segundo a relação entre o soluto e solvente e também com temperatura e pressão. Além disso, possui maior valor numérico para difusão em gases, seguido de líquidos e sólidos. Ele pode ser abordado na literatura segundo dois casos. O caso isotrópico, no qual D é um número real positivo ou o caso anisotrópico, no qual esta propriedade varia com a posição (PEDRON, 2003). Neste trabalho, apenas o caso isotrópico foi considerado.

Considerando a equação da continuidade, para uma substância que não é difundida nem absorvida, temos a Equação 2:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} \quad (2)$$

Substituindo a Equação 1 em 2, obtém-se a Equação 3, que ao longo deste trabalho é chamada de Equação Clássica da Difusão:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \nabla^2 p \quad (3)$$

Na equação acima, ressalta-se que a concentração de partículas é uma função do tempo e da posição, expressa no vetor gradiente, e destaca-se a presença de apenas um parâmetro, o coeficiente de difusão. Além disso, no processo tradicional de difusão, o deslocamento quadrático médio de uma partícula é uma função linear do tempo. Observação, esta, importante para a distinção entre os dois processos.

A solução da Equação 3 pode ser realizada através da aplicação da Transformada de Fourier ou via *ansatz* (proposição inicial de uma ferramenta para a resolução de um problema que depois é verificada com os resultados), propondo uma solução gaussiana genérica (PEDRON, 2003).

2.2 DIFUSÃO ANÔMALA

Apesar da vasta aplicabilidade da Lei de Fick para a descrição de problemas de difusão, sua aplicabilidade em certas situações tem se mostrado insatisfatória, pelo fato de que esta equação resulta de uma análise macroscópica do processo. Por outro lado, estudos recentes mostram que uma descrição partindo da micromecânica pode conduzir a modelos mais relacionados à realidade.

Estes desvios na idealidade do processo difusivo são resultantes de efeitos de atraso de tempo, retenção de partículas e aceleração do processo difusivo, como mencionadas anteriormente. Tais desvios levam a uma não linearidade do descolamento quadrático médio (DQM) com relação a variável independente tempo.

Essa não linearidade leva a um comportamento que se distancia da distribuição de Gauss, perceptível no modelo usual. Este desvio ainda pode ser utilizado para classificar o processo anômalo como superdifusão ou subdifusão, para situações em que o deslocamento quadrático médio cresce mais rapidamente ou lentamente que a distribuição de Gauss,

respectivamente (RAMOS, 2016). Esse comportamento pode ser melhor detalhado através da análise da Equação 4:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \propto t^\eta, \quad (4)$$

em que, o Δx representa o deslocamento quadrático médio. Assim, para $\eta > 1$ temos o processo superdifusivo, para $\eta < 1$, um processo subdifusivo e $\eta = 1$ representa o processo de difusão tradicional (PEDRON, 2003). Os problemas superdifusivos podem ser observados no estudo de difusão em fluidos girantes bidimensionais (SOLOMON *et al.*, 1993; WEEKS e SWINNEY, 1998), de movimentos bacterianos (NOSSAL, 1983) e de transportes em plasma turbulento (BALESCU, 1995). Já o processo subdifusivo é encontrado, por exemplo, no transporte de portadores de carga em semicondutores amorfos (SCHER e MONTROLL, 1975; ZUMOFEN *et al.*, 1990), no transporte em geometrias fractais (HAYLIN *et al.*, 1985; PORTO *et al.*, 1997) e na dinâmica de uma conta em uma rede polimérica (AMBLARD *et al.*, 1996; BARKAI e KLAFTER, 1998).

Usualmente, o processo anômalo é abordado na literatura através de equações envolvendo derivadas fracionárias, como foi feito nos trabalhos de HILFER (2000), GONÇALVES *et al.* (2005), KLAFTER *et al.* (1996), e METZELER (2000), por exemplo, via Equação 5:

$$\frac{\partial}{\partial x} p(x, t) = D_t^{1-\gamma} \left(K_\gamma \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x, t) \right), \quad (5)$$

em que, $D_t^{1-\gamma} (\dots)$ é a derivada de Riemann-Liouville, K_γ representa o coeficiente de difusão, p é a concentração de partículas, x é a variável espacial e t , o tempo.

Outro tipo de equação fracionária utilizada para descrever o processo, estudada no trabalho de PRATO e TSALLIS (1999), por exemplo, é a Equação 6:

$$\frac{\partial}{\partial x} p(x, t) = K_\mu \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} p(x, t), \quad (6)$$

em que, K_μ representa o coeficiente de difusão. A Equação 6 tem como solução a distribuição de Lévy, caracterizada pela Equação 7:

$$L_\mu(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx - K_\mu |k|^\mu t} \quad (7)$$

Com relação a estas duas abordagens fracionárias, GONÇALVES *et al.* (2005) escreveram que processos difusivos anômalos com dinâmica descrita pela Equação 5 têm suas

soluções associadas a uma distribuição de Boltzmann-Gibbs, enquanto que pela Equação 6 têm suas soluções relacionadas com a distribuição que emerge de termo-estatística não extensiva.

Outra abordagem para a difusão anômala foi estudada por WU e BERLAND (2008), que modelaram o coeficiente de difusão variando arbitrariamente com tempo e/ou com a concentração. Estes pesquisadores buscaram esclarecer as bases matemáticas para modelos de montagem de difusão anômala e o significado físico dos parâmetros de montagem.

Além destes trabalhos, uma recente contribuição para o estudo da difusão anômala foi proposta por BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b), na qual, partindo de uma análise discreta em dinâmica de população, estes consideraram um novo parâmetro que pudesse representar os efeitos de retenção de partículas, o que resultou em uma equação com termo diferencial de quarta ordem. Esta abordagem já foi estudada em uma série de trabalhos, a citar KNUP *et al.* (2014), MAOSHENG (2017), SILVA (2016), e RAMOS (2016). Para a solução deste modelo, foi explorada na literatura tanto a resolução via ótica de problemas diretos quanto inversos.

Nesta presente contribuição, o foco foi dado ao modelo de BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b), partindo-se da demonstração matemática para o problema difusivo unidirecional, com distribuição simétrica, representado pela Equação 8, e assimétrica, Equação 9, do conteúdo de uma célula genérica, que será melhor descrito no capítulo seguinte:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta k_2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \beta(1 - \beta)k_4 \frac{\partial^4 p}{\partial x^4}, \quad (8)$$

em que, β é a fração de partículas que sofrem difusão, k_2 é o coeficiente de difusão e k_4 é o coeficiente de retenção de partículas. Já para o processo assimétrico:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = k_3(1 - \lambda^2) \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - k_1 \lambda \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (9)$$

em que, λ é um parâmetro do modelo assimétrico, k_3 é o coeficiente de difusão e k_1 é um coeficiente modelo assimétrico.

Dado que estes dois modelos são compostos por equações diferenciais parciais e sua solução analítica é trabalhosa, o Método das Linhas (ML) foi escolhido como metodologia numérica para a resolução do problema. O ML, conhecido como um método de semi-discretização, faz uma aproximação da solução da equação diferencial parcial (EDP) dependente do tempo. A sua ideia básica é substituir as derivadas espaciais da EDP por aproximações algébricas. Como este processo é feito para apenas uma das variáveis independentes, o resultado é um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) na variável temporal que representam a EDP original. Feito isso, pode-se aplicar qualquer algoritmo de

integração para EDO de valor inicial para calcular uma aproximação numérica para a solução da EDP. Assim, umas das características deste método é a utilização dos atuais e bem estabelecidos métodos numéricos para EDOs (COLNAGO, 2012)

COLNAGO (2012) resumiu ainda uma série de propriedades deste método que justificam o seu uso, a citar:

- Método eficiente para a resolução de equações não lineares;
- Eficiência computacional devido a formulação de um algoritmo simples e compacto, que produz resultados precisos com menor esforço e tempo computacional;
- Estabilidade numérica.

Neste trabalho, para a resolução do sistema de EDOs formado pela aplicação do método das linhas, foi escolhida a estratégia de Runge-Kutta de quarta ordem. Este método é provavelmente um dos métodos mais populares e utilizados para obter soluções aproximadas de valor inicial. Ele consiste em comparar um polinômio de Taylor apropriado para eliminar o cálculo das derivadas, fazendo-se várias avaliações da função em cada passo (STERZA e BRANDI, 2016). O método de Runge-Kutta pode ser entendido como um aperfeiçoamento do método de Euler, com uma melhor estimativa da derivada da função (VALLE, 2012).

As estratégias adotadas para resolução do modelo de BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b) serão apresentadas no capítulo de Metodologia. No próximo capítulo, Modelagem Matemática, é introduzido e apresentado desenvolvimento matemático do modelo destes pesquisadores, como comentado anteriormente.

3 MODELAGEM MATEMÁTICA

Este capítulo dedica-se à apresentação do desenvolvimento matemático do modelo proposto por BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b) para a simulação de problemas difusivos com retenção de partículas, considerando-se um fluxo unidirecional de partículas em uma célula genérica. Como comentado anteriormente, este modelo é fruto de uma abordagem discreta em dinâmica de população

Dois casos foram considerados neste trabalho. O primeiro, refere-se à distribuição simétrica do conteúdo de uma célula com retenção de partículas, ou seja, não há distinção entre os fluxos difusivos para a direita ou esquerda do ponto de partida do processo. Já o segundo caso, representa uma distribuição assimétrica sem retenção de partículas, em que, ao acaso, um dos dois sentidos será preferido.

3.1 Distribuição Simétrica com Retenção de Partículas

Para o desenvolvimento deste modelo foi definido o parâmetro β , o qual indica a fração de partículas capazes de sofrer difusão, de forma que a fração de partículas que são retidas foi definida como α . Assim, tem-se a Equação 10:

$$\alpha + \beta = 1 \quad (10)$$

A definição destes parâmetros pode ser melhor entendida pela análise da Figura 1, que mostra a distribuição simétrica do conteúdo de uma célula genérica, n . Nesta figura, observa-se que uma parcela do conteúdo fica retida, sem sofrer difusão, α , e que a mesma quantidade de conteúdo é difundida para as células da esquerda, $n-1$, e para as células da direita, $n+1$, isto é, $0,5\beta p_n$ para cada uma.

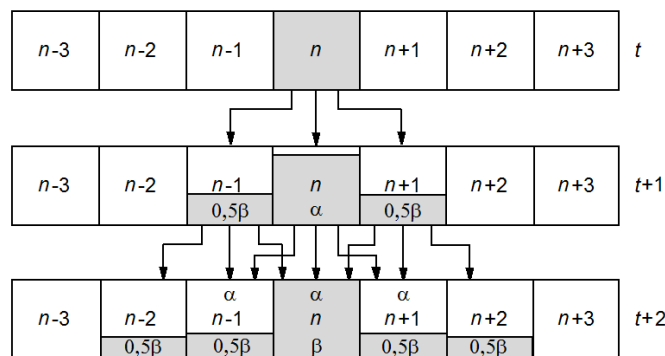


Figura 1: Representação esquemática do processo de difusão anômala com distribuição simétrica (BEVILACQUA et al. 2011a).

Segundo a Figura 1, o conteúdo da célula genérica n em dois intervalos de tempos seguidos, t e $t+1$, pode ser expresso pelas Equações 11 e 12:

$$p_n^t = (1 - \beta)p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n+1}^{t-1} \quad (11)$$

$$p_n^{t+1} = (1 - \beta)p_n^t + \frac{1}{2}\beta p_{n-1}^t + \frac{1}{2}\beta p_{n+1}^t \quad (12)$$

Expressando o conteúdo da célula n em $t+1$, como uma função do tempo do tempo $t-1$ obtêm-se a Equação 13:

$$\begin{aligned} p_n^{t+1} = (1 - \beta) & \left[(1 - \beta)p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n+1}^{t-1} \right] \\ & + \frac{1}{2}\beta \left[(1 - \beta)p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n-2}^{t-1} \right] \\ & + \frac{1}{2}\beta \left[(1 - \beta)p_{n+1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n+2}^{t-1} \right] \end{aligned} \quad (13)$$

Agrupando os termos semelhantes da Equação 13, chega-se a Equação 14:

$$\begin{aligned} p_n^{t+1} = & \frac{1}{4}\beta^2 p_{n-2}^{t-1} + \frac{1}{2}(1 - \beta)\beta p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}(1 - \beta)\beta p_{n+1}^{t-1} + (1 - \beta)^2 p_n^{t-1} + \frac{1}{4}\beta^2 p_n^{t-1} \\ & + \frac{1}{4}\beta^2 p_n^{t-1} + \frac{1}{2}(1 - \beta)\beta p_{n+1}^{t-1} + \frac{1}{2}(1 - \beta)\beta p_{n+1}^{t-1} + \frac{1}{4}\beta^2 p_{n+2}^{t-1} \\ p_n^{t+1} = & (1 - \beta)^2 p_n^{t-1} + (1 - \beta)\beta [p_{n-1}^{t-1} + p_{n+1}^{t-1}] + \frac{1}{4}\beta^2 [p_{n-2}^{t-1} + 2p_n^{t-1} + p_{n+2}^{t-1}] \end{aligned} \quad (14)$$

Aplicando a diferença entre as Equações 14 e 11 e manipulando os termos, obtêm-se a Equação 15:

$$\begin{aligned} p_n^{t+1} - p_n^t = & (1 - \beta)^2 p_n^{t-1} + (1 - \beta)\beta [p_{n-1}^{t-1} + p_{n+1}^{t-1}] + \frac{1}{4}\beta^2 [p_{n-2}^{t-1} + 2p_n^{t-1} + p_{n+2}^{t-1}] \\ & - (1 - \beta)p_n^{t-1} - \frac{1}{2}\beta p_{n-1}^{t-1} - \frac{1}{2}\beta p_{n+1}^{t-1} \\ p_n^{t+1} - p_n^t = & \beta \left[\frac{1}{2}p_{n-1}^{t-1} - p_n^{t-1} + \frac{1}{2}p_{n+1}^{t-1} + \frac{1}{4}\beta (p_{n-2}^{t-1} - 4p_{n-1}^{t-1} + 6p_n^{t-1} - 4p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1}) \right] \\ p_n^{t+1} - p_n^t = & \frac{1}{4}\beta [2p_{n-1}^{t-1} - 4p_n^{t-1} + 2p_{n+1}^{t-1}] + \frac{1}{4}\beta^2 [p_{n-1}^{t-1} - 4p_{n-1}^{t-1} + 6p_n^{t-1} - 4p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1}] \\ & + \frac{1}{4}\beta \{ p_{n-2}^{t-1} - p_{n-2}^{t-1} + 2p_{n-1}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} + 2p_n^{t-1} - 2p_n^{t-1} + 2p_{n+1}^{t-1} - 2p_{n+1}^{t-1} \\ & + p_{n+2}^{t-1} - p_{n+2}^{t-1} \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_n^{t+1} - p_n^t &= \frac{1}{4}\beta[(p_{n-2}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} + p_n^{t-1}) + (p_n^{t-1} - 2p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1})] \\
&\quad + \frac{1}{4}\beta(1-\beta)[-p_{n-2}^{t-1} + 4p_{n-1}^{t-1} - 6p_n^{t-1} + 4p_{n+1}^{t-1} - p_{n+2}^{t-1}]
\end{aligned} \tag{15}$$

Adotando as seguintes definições (Equação 16 a 18):

$$\Delta_t p_n^t = p_n^{t+1} - p_n^t \tag{16}$$

$$\Delta_x^2 p_{n-1}^{t-1} = p_{n-2}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} + p_n^{t-1} \tag{17}$$

$$\Delta_x^4 p_n^{t-1} = p_{n-2}^{t-1} - 4p_{n-1}^{t-1} + 6p_n^{t-1} - 4p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1} \tag{18}$$

Substituindo-se as Equações 16, 17 e 18 em 15, obtém-se a Equação 19:

$$\Delta_t p_n^t = \beta \left\{ \frac{1}{4}(\Delta_x^2 p_{n-1}^{t-1} + \Delta_x^2 p_{n+1}^{t-1}) - \frac{1}{4}\beta(1-\beta)\Delta_x^4 p_n^{t-1} \right\} \tag{19}$$

Na equação acima, o termo $(\Delta_x^2 p_{n-1}^{t-1} + \Delta_x^2 p_{n+1}^{t-1})$ pode ser expresso como uma diferença no conteúdo de três células consecutivas e os termos faltosos dessa consideração podem ser escritos como $O(\Delta x)^3$, assim a Equação 19 se torna a Equação 20:

$$\Delta_t p_n^t = \beta \left\{ \frac{1}{2}[\Delta_x^2 p_n^{t-1} + O(\Delta x)^3] - \frac{1}{4}\beta(1-\beta)\Delta_x^4 p_n^{t-1} \right\} \tag{20}$$

A Equação 20 pode ser reescrita em termos das taxas apropriadas e o resultado é a Equação 21:

$$\frac{\Delta_t p_n^t}{\Delta t} \Delta t = \beta \left\{ (\Delta x)^2 \left[\frac{1}{2} \frac{\Delta_x^2 p_n^{t-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{O(\Delta x)^3}{(\Delta x)^2} \right] - \frac{1}{4} (\Delta x)^4 \beta(1-\beta) \frac{\Delta_x^4 p_n^{t-1}}{(\Delta x)^4} \right\} \tag{21}$$

Os fatores de escala podem ser definidos pelas Equações 22 e 23:

$$\Delta x = \frac{L_0}{m} = \frac{L_1}{\sqrt{m}} \tag{22}$$

$$\Delta t = \frac{T_0}{m^2} \tag{23}$$

Substituindo-se as Equações 22 e 23 na Equação 21 e definindo os coeficientes $k_2 = \frac{1}{2} \frac{L_0^2}{T_0}$ e $k_4 = \frac{1}{4} \frac{L_1^4}{T_0}$, obtém-se a Equação 24:

$$\frac{\Delta_t p_n^t}{\Delta t} \Delta t = \beta \left\{ k_2 \left[\frac{\Delta_x^2 p_n^{t-1}}{(\Delta x)^2} + 2 \frac{O(\Delta x)^3}{(\Delta x)^2} \right] - (1-\beta)k_4 \frac{\Delta_x^4 p_n^{t-1}}{(\Delta x)^4} \right\} \tag{24}$$

Assumindo-se que p é uma função de x e t e aplicando o limite $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$ chega-se a equação diferencial transiente de quarta ordem, Equação 8, apresentada anteriormente, proposta por BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b):

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta k_2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \beta(1 - \beta)k_4 \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \quad (8)$$

Nesta equação tem-se o coeficiente de difusão, k_2 , o coeficiente de retenção de partículas, k_4 , e a fração de partículas capazes de se difundirem, β .

Conforme mencionado por BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b), se $\beta=1$, tem-se um problema de difusão clássica. Se $\beta=0$, tem-se um problema estacionário, definido como retenção pura. Por outro lado, se $0 < \beta < 1$, tem-se um problema de difusão com retenção, representado pela presença do termo diferencial de quarta ordem.

3.2 Distribuição Assimétrica sem Retenção

Para este caso, assume-se que o conteúdo de uma célula pode migrar para a sua vizinhança segundo uma regra não simétrica. Neste caso, é esperada a presença de um termo de transporte, representando a difusão com advecção (SILVA, 2016).

A partir de uma análise em dinâmica de população, o conteúdo de uma célula pode ser escrito segundo as Equações 25 e 26:

$$p_n^t = \frac{1}{2}(1 + \lambda)p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}(1 - \lambda)p_{n+1}^{t-1} \quad (25)$$

$$p_n^{t+1} = \frac{1}{2}(1 + \lambda)p_{n-1}^t + \frac{1}{2}(1 - \lambda)p_{n+1}^t, \quad (26)$$

em que $-1 \leq \lambda \leq 1$. Para $\lambda=0$, o problema se reduz a difusão clássica e para $\lambda=\pm 1$ a propagação prevalece para a esquerda ou para a direita, ou seja, o parâmetro λ indica qual o sentido de migração das partículas. Nestas equações não há mais o termo de retenção de partículas e, assim, todo o conteúdo pode ser distribuído, assimetricamente.

O lado direito da Equação 26 pode ser escrito com respeito ao instante de tempo $t-1$, como feito para o modelo com simetria e retenção, e resulta na Equação 27:

$$p_n^{t+1} = \frac{1}{4}\{(1 + \lambda)[(1 + \lambda)p_{n-2}^{t-1} + (1 - \lambda)p_n^{t-1}] + (1 - \lambda)[(1 + \lambda)p_n^{t-1} + (1 - \lambda)p_{n+2}^{t-1}]\}$$

$$p_n^{t+1} = \frac{1}{4}\{(1 + \lambda)^2 p_{n-2}^{t-1} + 2(1 - \lambda^2)p_n^{t-1} + (1 - \lambda)^2 p_{n+2}^{t-1}\} \quad (27)$$

Pela diferença entre as Equações 27 e 25, tem-se a Equação 28:

$$\begin{aligned}
p_n^{t+1} - p_n^t &= \frac{1}{4} \{ (1 + \lambda)^2 p_{n-2}^{t-1} + 2(1 - \lambda^2) p_n^{t-1} + (1 - \lambda)^2 p_{n+2}^{t-1} \} \\
&\quad - \left\{ \frac{1}{2} (1 + \lambda) p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2} (1 - \lambda) p_{n+1}^{t-1} \right\} \\
p_n^{t+1} - p_n^t &= \frac{1}{4} \{ (1 + \lambda)^2 p_{n-2}^{t-1} - 2(1 + \lambda) p_{n-1}^{t-1} + 2(1 - \lambda^2) p_n^{t-1} - 2(1 - \lambda) p_{n+1}^{t-1} + (1 - \lambda)^2 p_{n+2}^{t-1} \} \\
p_n^{t+1} - p_n^t &= \frac{1}{4} \{ (1 + \lambda)^2 p_{n-2}^{t-1} - 2(1 + \lambda) p_{n-1}^{t-1} + 2(1 - \lambda^2) p_n^{t-1} - 2(1 - \lambda) p_{n+1}^{t-1} \\
&\quad + (1 - \lambda)^2 p_{n+2}^{t-1} \} + \frac{1}{4} (1 - \lambda^2) [p_{n-2}^{t-1} - p_{n-1}^{t-1} + 2p_{n-1}^{t-1} - 2p_{n+1}^{t-1} + 2p_{n+1}^{t-1} \\
&\quad - 2p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1} - p_{n+2}^{t-1}] \\
p_n^{t+1} - p_n^t &= \frac{1}{4} (1 - \lambda^2) [(p_{n-2}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} + p_n^{t-1}) + (p_n^{t-1} - 2p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1})] \\
&\quad - \frac{1}{4} (1 - \lambda^2) [p_{n-2}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} - 2p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1}] + \frac{1}{4} \{ (1 + \lambda)^2 p_{n-2}^{t-1} \\
&\quad - 2(1 + \lambda) p_{n-1}^{t-1} - 2(1 - \lambda) p_{n+1}^{t-1} + (1 - \lambda)^2 p_{n+2}^{t-1} \}
\end{aligned} \tag{28}$$

Na Equação 28, o primeiro termo entre colchetes do lado direito pode ser escrito como uma diferença no conteúdo de três células consecutivas e os termos faltosos dessa aproximação podem ser escritos como $O(\Delta x)^3$, assim como feito para o desenvolvimento do modelo simétrico. Desta forma, tem-se a Equação 29:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{4} (1 - \lambda^2) [(p_{n-2}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} + p_n^{t-1}) + (p_n^{t-1} - 2p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1})] \\
&= \frac{1}{2} (1 - \lambda^2) \Delta^2 p_n^{t-1} + O(\Delta x)^3
\end{aligned} \tag{29}$$

Assim, substituindo a Equação 29 na Equação 28 e rearranjando-a para que fique mais simples, obtém-se a Equação 30:

$$\begin{aligned}
p_n^{t+1} - p_n^t &= \frac{1}{2} (1 - \lambda^2) \Delta^2 p_n^{t-1} + O(\Delta x)^3 - \frac{1}{4} [p_{n-2}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} - 2p_{n+1}^{t-1} \\
&\quad + p_{n+2}^{t-1} - \lambda^2 (p_{n-2}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} - 2p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1})] + \frac{1}{4} [(1 + 2\lambda + \lambda^2) p_{n-2}^{t-1} \\
&\quad - (2 + 2\lambda) p_{n-1}^{t-1} - (2 - 2\lambda) p_{n+1}^{t-1} + (1 - 2\lambda + \lambda^2) p_{n+2}^{t-1}] \\
p_n^{t+1} - p_n^t &= \frac{1}{2} (1 - \lambda^2) \Delta^2 p_n^{t-1} + O(\Delta x)^3 + \frac{1}{4} [\lambda^2 (p_{n-2}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} \\
&\quad - 2p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1})] + \frac{1}{4} [(2\lambda + \lambda^2) p_{n-2}^{t-1} - 2\lambda p_{n-1}^{t-1} + 2\lambda p_{n+1}^{t-1} + (-2\lambda \\
&\quad + \lambda^2) p_{n+2}^{t-1}]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_n^{t+1} - p_n^t &= \frac{1}{2}(1 - \lambda^2)\Delta^2 p_n^{t-1} + O(\Delta x)^3 + \frac{1}{4}\beta[-2\lambda(p_{n-1}^{t-1} - p_{n-2}^{t-1}) \\
&\quad + 2\lambda(p_{n+2}^{t-1} - p_{n+1}^{t-1}) - 2(p_{n-1}^{t-1} - p_{n-2}^{t-1}) - 2(p_{n+2}^{t-1} - p_{n+1}^{t-1})] \\
p_n^{t+1} - p_n^t &= \frac{1}{2}(1 - \lambda^2)\Delta^2 p_n^{t-1} + O(\Delta x)^3 + \frac{1}{2}\lambda[-(1 + \lambda)(p_{n-1}^{t-1} \\
&\quad - p_{n-2}^{t-1}) + (-1 + \lambda)(p_{n+2}^{t-1} - p_{n+1}^{t-1})]
\end{aligned} \tag{30}$$

O termo entre colchetes da Equação 30 pode ser aproximado através da Equação 31:

$$\frac{1}{2}\lambda[-(1 + \lambda)(p_{n-1}^{t-1} - p_{n-2}^{t-1}) + (-1 + \lambda)(p_{n+2}^{t-1} - p_{n+1}^{t-1})] = -\lambda\Delta p_n^{t-1} + O(\Delta x)^2 \tag{31}$$

Assim, a Equação 30 pode ser escrita como apresentado na Equação 32:

$$p_n^{t+1} - p_n^t = \frac{1}{2}(1 - \lambda^2)\Delta^2 p_n^{t-1} + O(\Delta x)^3 - \lambda\Delta p_n^{t-1} + O(\Delta x)^2 \tag{32}$$

Pode-se definir os termos do lado esquerdo da Equação 32 como uma diferença de primeira ordem do conteúdo de uma célula com respeito a variável tempo como $\Delta_t p_n^t$, através da Equação 33:

$$p_n^{t+1} - p_n^t = \Delta_t p_n^t \tag{33}$$

A Equação 32 pode ser expressa em termos das taxas apropriadas o que resulta na Equação 34:

$$\frac{\Delta_t p_n^t}{\Delta_t} \Delta_t = \Delta x^2 \left\{ \frac{(1 - \lambda^2)}{2} \frac{\Delta^2 p_n^{t-1}}{\Delta x^2} + \frac{O(\Delta x)^3}{\Delta x^2} \right\} - \Delta x \left\{ \lambda \frac{\Delta p_n^{t-1}}{\Delta x} + \frac{O(\Delta x)^2}{\Delta x} \right\} \tag{34}$$

Os fatores de escala do modelo podem ser definidos pelas Equação 35 a 37:

$$\Delta x = \frac{L_0}{m} = \frac{L_1}{\sqrt{m}} \tag{35}$$

$$\Delta t = \frac{T_0}{m^2} \tag{36}$$

$$\frac{\Delta x^2}{\Delta t} = \frac{L_0^2}{T_0} \tag{37}$$

Os coeficientes podem ser definidos como $k_3 = \frac{1}{2} \frac{L_0^2}{T_0}$ e $k_1 = \frac{\Delta x}{\Delta t}$, assim, obtém-se a

Equação 38:

$$\frac{\Delta_t p_n^t}{\Delta_t} = k_3 \left\{ (1 - \lambda^2) \frac{\Delta^2 p_n^{t-1}}{\Delta x^2} + 2 \frac{O(\Delta x)^3}{\Delta x^2} \right\} - k_1 \left\{ \lambda \frac{\Delta p_n^{t-1}}{\Delta x} + \frac{O(\Delta x)^2}{\Delta x} \right\} \tag{38}$$

Observa-se que o coeficiente k_3 possui a mesma forma do coeficiente k_2 do modelo simétrico, ou seja, ambos representam o coeficiente de difusão. No entanto, a fim de diferenciar os dois modelos, uma nomenclatura diferente foi utilizada.

Assumindo que p é uma função de x e t e aplicando o limite quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$, obtém-se a Equação 9, apresentada anteriormente:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = k_3(1 - \lambda^2) \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - k_1 \lambda \frac{\partial p}{\partial x} \quad (9)$$

Esta equação é uma reprodução da formulação de difusão-advecção (SILVA, 2016). Para $\lambda = \pm 1$ a propagação prevalece para a direita ou esquerda e para $\lambda = 0$ a difusão simétrica domina e caracteriza um problema de difusão clássica (BEVILACQUA *et al.*, 2011a).

4 METODOLOGIA

Conforme descrito anteriormente, desejou-se avaliar a influência dos parâmetros do modelo proposto por BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b). Para essa finalidade, o modelo descrito por uma equação diferencial parcial deve ser resolvido. Assim, foi considerado o Método das Linhas (ML) como ferramenta numérica para a resolução do modelo que representa o fenômeno de difusão anômala. A Figura 2 traz uma representação da estratégia de resolução do ML. Basicamente, esse método numérico consiste na transformação da equação diferencial parcial original em um sistema de equações diferenciais ordinárias através da discretização de apenas uma das variáveis independentes (geralmente a variável espacial) do modelo original.



Figura 2: Estratégia geral do método das linhas (COLNAGO, 2012).

Os passos empregados na solução dos modelos simétricos com retenção e assimétrico sem retenção serão apresentados separadamente.

4.1 Distribuição Simétrica com Retenção de Partículas

Para a aplicação desta metodologia, primeiramente as derivadas parciais em relação à variável independente espacial do modelo simétrico (Equação 8) foram aproximadas utilizando as fórmulas de diferenças finitas.

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta k_2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \beta(1 - \beta) k_4 \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \quad (8)$$

Para essa finalidade, considerou-se as seguintes aproximações (Equações 39 e 40) para os termos de derivadas segunda e quarta (SILVA, 2016):

$$\frac{\partial^2 p_i}{\partial x^2} = \frac{p_{i-1} - 2p_i + p_{i+1}}{\Delta x^2} \quad (39)$$

$$\frac{\partial^4 p_i}{\partial x^4} = \frac{p_{i-2} - 4p_{i-1} + 6p_i - 4p_{i+1} + p_{i+2}}{\Delta x^4} \quad (40)$$

Ao substituir as Equações 39 e 40 na Equação 8, obteve-se a Equação 41:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta k_2 \left(\frac{p_{i-1} - 2p_i + p_{i+1}}{\Delta x^2} \right) - \beta(1 - \beta) k_4 \left(\frac{p_{i-2} - 4p_{i-1} + 6p_i - 4p_{i+1} + p_{i+2}}{\Delta x^4} \right), \quad (41)$$

em que Δx é o incremento (tamanho do passo de integração), definido como sendo $(x_N - x_0)/(N - 1)$, e x_0 e x_N representam os limites inferior e superior para a variável x , e N é o número de pontos considerados na discretização.

Neste caso, a equação diferencial parcial original foi transformada em um sistema com N equações diferenciais ordinárias ($i=0, 1, 2, \dots, N-1, N$) em que a única variável independente é o tempo. Assim, o ML consiste em, definido o domínio de discretização, acompanhar a evolução destes pontos ao longo do tempo (sensores numéricos).

Para fins de aplicação da metodologia proposta, foram consideradas as condições (Equações 42 a 44) definidas por SILVA (2016) ($0 \leq t \leq 40$ [T]):

$$p(0, t) = 1, \quad p(L = 1, t) = 1, \quad t > 0 \quad (42)$$

$$\left. \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \right|_{x=L=1} = 0, \quad t > 0 \quad (43)$$

$$p(x, 0) = 2 \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + 1, \quad 0 \leq x \leq L \quad (44)$$

Ao analisar a Equação 41 percebe-se que, quando $i=0$ (início do domínio de integração), são necessárias informações de p nos pontos -1 e -2. Analogamente, também são necessárias informações de p nos pontos $N+1$ e $N+2$ ($i=N$). Em termos práticos, ao invés de integrar o sistema de $i=0$ até $i=N$ e ter que trabalhar com pontos fictícios, pode-se integrar o sistema de $i=2$ até $i=N-2$. Desta forma, as informações requeridas nestes pontos são determinadas a partir das condições de contorno. Por exemplo, para a Equação 42, tem-se de forma direta que $p_0=1$ e $p_N=1$. Partindo desta análise, ainda são necessárias duas condições para p_1 e p_{N-1} . Estas são determinadas a partir das condições de contorno definidas pela Equação 43. Para essa finalidade, faz-se necessário a obtenção da informação de uma relação entre as variáveis p_0 , p_1 e p_2 , para $i=0$, bem como de uma relação entre as variáveis p_{N-2} , p_{N-1} e p_N , para $i=N$.

Pela condição de contorno definida pela Equação 43, foi proposta a Equação 45 para a aproximação da primeira derivada no ponto genérico i , chamada de diferença aproximada progressiva de três pontos, e que relaciona os pontos i , $i + 1$ e $i + 2$.

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = \frac{-p_{i+2} + 4p_{i+1} - 3p_i}{2(\Delta x)} \quad (45)$$

Ao aplicar a condição de contorno (Equação 43) para o ponto $i=0$ obteve-se a Equação 46 e 47:

$$\frac{\partial p_0}{\partial t} = 0 \Rightarrow \frac{-p_2 + 4p_1 - 3p_0}{2(\Delta x)} = 0 \quad (46)$$

$$-p_2 + 4p_1 - 3p_0 = 0 \Rightarrow p_1 = \frac{1}{4}(p_2 + 3p_0) \quad (47)$$

Assim, foi possível escrever p_1 como função de p_2 e de p_0 . De forma análoga, pôde-se avaliar o valor de p_{N-1} em função dos pontos p_N e p_{N-2} através da Equação 48:

$$p_{N-1} = \frac{1}{4}(p_{N-2} + 3p_N) \quad (48)$$

O sistema de equações diferenciais ordinárias a ser resolvido tem condição inicial definida pela Equação 44. Para sua resolução, foi empregado o Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem, visto sua capacidade de oferecer boas aproximações para a derivada da função. O número de pontos considerados nas simulações foi igual a 100. Cabe ressaltar que esse número foi definido a partir de simulações preliminares que constatarem a independência dos perfis obtidos com o aumento do mesmo.

Os valores utilizados para os parâmetros do modelo de difusão simétrica com retenção de partículas (Equação 23) foram obtidos a partir dos quatro estudos de casos presentes no trabalho de SILVA (2016) e de mais dois casos (Casos 5 e 6), escolhidos a fim de tornar a análise mais abrangente. Estes valores estão presentes na Tabela 1:

Tabela 1: Estudos de caso para a avaliação do modelo de difusão anômala simétrica com retenção de partículas.

Caso	β	k_2	k_4
1	0,2	10^{-3}	10^{-8}
2	0,8	10^{-3}	10^{-8}
3	0,5	10^{-3}	10^{-6}
4	0,9	10^{-3}	10^{-6}
5	0,5	10^{-3}	10^{-8}
6	0,2	10^{-3}	10^{-6}

Apresentada a metodologia adotada para a resolução do modelo, os resultados da simulação de cada caso serão abordados no próximo capítulo.

4.2 Distribuição Assimétrica sem Retenção

Considerando-se o modelo descrito pela Equação 9, que representa o processo difusivo com distribuição assimétrica de conteúdo, o primeiro passo para a sua resolução foi a aproximação das derivadas parciais em relação a variável espacial.

$$\frac{\partial p}{\partial t} = k_3(1 - \lambda^2) \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - k_1 \lambda \frac{\partial p}{\partial x} \quad (9)$$

Assim, as aproximações representadas pelas Equações 49 e 50 foram utilizadas:

$$\frac{\partial p_i}{\partial x} = \frac{p_{i+1} - p_{i-1}}{2\Delta x} \quad (49)$$

$$\frac{\partial^2 p_i}{\partial x^2} = \frac{p_{i-1} - 2p_i + p_{i+1}}{\Delta x^2} \quad (50)$$

Ao substituir as Equações 49 e 50 na Equação 9, obteve-se a Equação 51:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = k_3(1 - \lambda^2) \left(\frac{p_{i-1} - 2p_i + p_{i+1}}{\Delta x^2} \right) - k_1 \lambda \left(\frac{p_{i+1} - p_{i-1}}{2\Delta x} \right), \quad (51)$$

em que Δx é o incremento (tamanho do passo de integração), definido como sendo $(x_N - x_0)/(N - 1)$, e x_0 e x_N representam os limites inferior e superior para a variável x , e N é o número de pontos considerados na discretização.

Para fins de aplicação da metodologia proposta, foram consideradas as condições (Equações 52 e 53) definidas por SILVA (2016) ($0 \leq t \leq 2000$ [T]):

$$p(0, t) = p(10, t) = 0, \quad t > 0 \quad (52)$$

$$p(x, 0) = 2 \sin \left(\frac{\pi x}{L} \right) + 1, \quad 0 \leq x \leq L \quad (53)$$

Pela análise da Equação 51 pôde-se perceber que, quando $i=0$, é necessário informação de p no ponto -1 e quando $i=N$ é necessário informação de p no ponto $N+1$. Assim, como feito no caso anterior, ao invés de integrar o sistema de $i=0$ até $i=N$, integrou-se de $i=1$ até $i=N-1$. Neste caso, as informações requeridas nestes pontos são determinadas a partir das condições de contorno. Pela a Equação 52, tem-se de forma direta que $p_0=0$ e $p_N=0$.

Assim, o sistema de equações diferenciais ordinárias a ser resolvido tem condição inicial definida pela Equação 53, igual ao caso simétrico e, novamente, o método de Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem foi empregado a fim de resolver o sistema de EDOs e foram considerados 1000 pontos na discretização, assim como adotado no trabalho de SILVA (2016).

Os valores utilizados para os parâmetros do modelo de difusão simétrica com retenção foram baseados na faixa de valores do trabalho de SILVA (2016) e novamente foram acrescentados novos casos a fim de tornar mais abrangente a análise. Estes valores podem ser vistos na Tabela 2:

Tabela 2: Estudos de caso para a avaliação do modelo de difusão anômala assimétrica sem retenção de partículas.

Caso	λ	k_1	k_3
1	0,2	10^{-2}	5×10^{-3}
2	0,5	10^{-2}	5×10^{-3}
3	0,8	10^{-2}	5×10^{-3}
4	0,9	10^{-4}	5×10^{-3}
5	0,9	10^{-3}	5×10^{-3}
6	0,9	10^{-2}	5×10^{-3}

Apresentada a metodologia adotada para a resolução do modelo, os resultados da simulação de cada caso serão abordados no próximo capítulo.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Apresentado o desenvolvimento matemático dos modelos de BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b) e descrito o método das linhas, como metodologia numérica alternativa adotada neste trabalho, os dois processos difusivos, simétrico e assimétrico, foram simulados considerando diferentes combinações de valores para os parâmetros dos modelos. A partir dos resultados obtidos, uma análise de sensibilidade dos parâmetros foi feita a fim de verificar a influência individual de cada um deles sobre o processo.

5.1 Difusão Simétrica com Retenção de Partículas

Definidas as condições utilizadas para a simulação do processo de difusão anômala simétrica com retenção de partículas, os resultados obtidos para cada caso são apresentados nas Figuras 3 a 8, respectivamente. Nestes gráficos, foram gerados os perfis de concentração de partículas (eixo vertical) em função da posição (eixo horizontal) para diferentes valores de tempos ($t=0, 10, 20, 32$ e 40 [T]), a fim de acompanhar a evolução do processo anômala e tradicional, comparando ambos.

A análise das figuras permite perceber as diferenças entre os perfis considerando a difusão clássica e a difusão anômala. Vale ressaltar que os perfis difusivos do processo clássico são iguais para todas as simulações, pois este processo é descrito pela Equação 3, que independe dos valores dos parâmetros β e k_4 , variando apenas com o coeficiente de difusão, k_2 , que foi mantido constante em todos os casos.

Destaca-se que a análise de sensibilidade não foi feita para avaliar a influência de k_2 pelo fato dele representar o coeficiente de difusão, o qual já foi estudado em trabalhos anteriores. Este coeficiente representa a facilidade com que cada soluto em particular pode se mover em um determinado solvente, sendo função da temperatura, pressão, tamanho e forma do soluto e viscosidade do solvente. Assim, o foco deste trabalho recaiu sobre o estudo dos novos parâmetros propostos por BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b).

Pela observação das figuras, percebeu-se que quanto menor o valor do parâmetro β (percentual de partículas que se difundem), maiores são as diferenças entre os dois perfis. Por outro lado, quanto maior este parâmetro, mais próximo o mesmo está da unidade, menor é a contribuição do termo de quarta ordem no modelo e mais próximo são os dois processos.

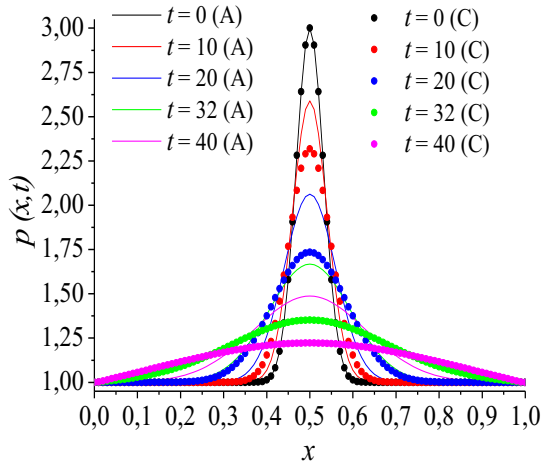


Figura 3: Caso 1 ($\beta=0,2$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-8}$),
A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

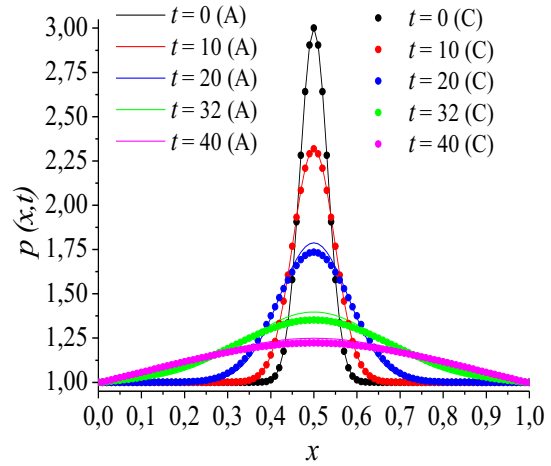


Figura 4: Caso 2 ($\beta=0,8$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-8}$),
A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

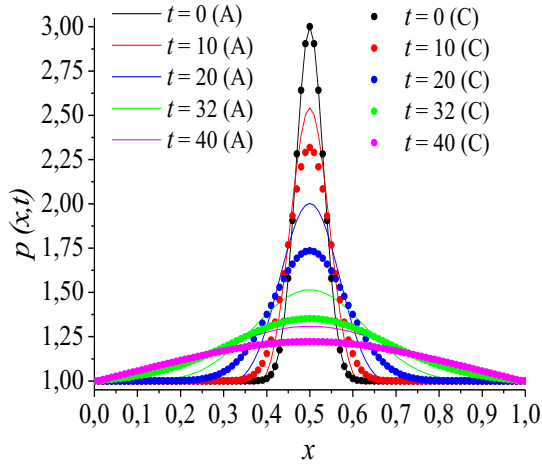


Figura 5: Caso 3 ($\beta=0,5$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-6}$),
A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

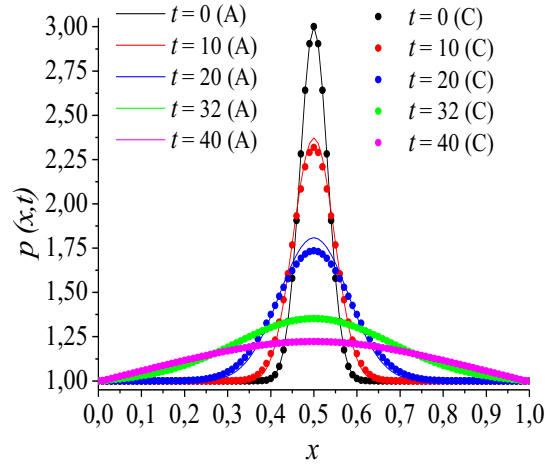


Figura 6: Caso 4 ($\beta=0,9$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-6}$),
A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

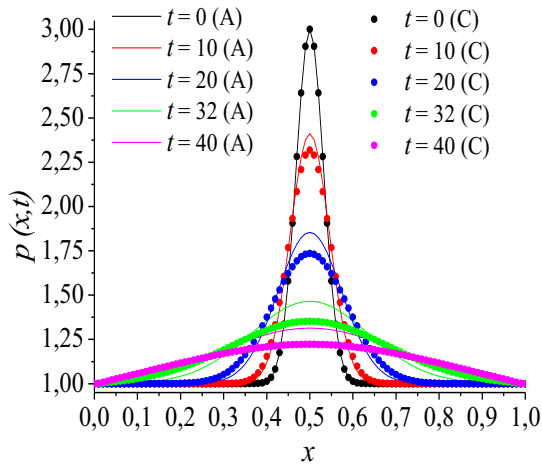


Figura 7: Caso 5 ($\beta=0,5$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-8}$),
A-Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

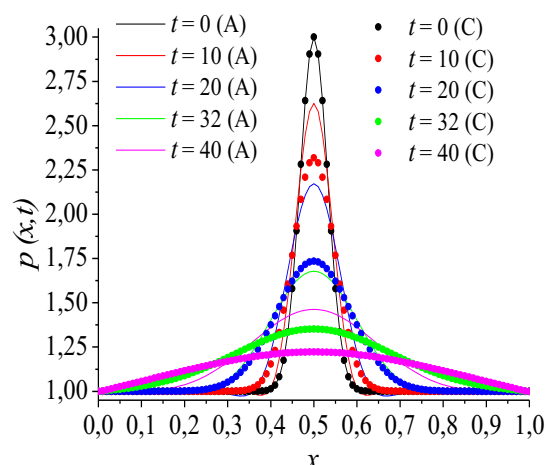


Figura 8: Caso 6 ($\beta=0,2$; $k_2=10^{-3}$; $k_4=10^{-6}$),
A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

Fisicamente, percebeu-se que ambos os modelos (clássico e anômalo), com o decorrer do tempo, apresentam o espalhamento de partículas nos dois sentidos (modelo simétrico). Todavia, o modelo de difusão anômala apresentou um atraso no tempo em relação à difusão clássica, isto é, o processo de difusão anômala ocorreu de forma mais lenta que o processo tradicional. Isto pôde ser percebido comparando os picos das curvas para o mesmo instante de tempo, em que o processo anômalo possuía uma concentração de partículas maior, ou no mínimo igual, comparado ao processo clássico, mostrando que o primeiro é mais lento.

A influência do parâmetro k_4 pode ser analisada através da comparação entre os pares de casos 1 e 6 e casos 3 e 5. Observa-se que os menores valores de k_4 (da ordem de 10^{-8}) conduziram a perfis anômalos mais próximos do perfil clássico, principalmente no par de caso 3 e 5, que possui um β maior. Essa maior proximidade mostra que altos valores deste coeficiente levam a atrasos no processo. Além disso, destaca-se que as maiores diferenças entre os processos puderam ser observadas para as curvas de 10 e 20 unidades de tempo e que para tempos maiores, a diferença não foi tão acentuada, indicando que para os instantes finais do processo, o aumento ou a diminuição do valor deste parâmetro não afeta consideravelmente o processo.

5.2 Difusão Assimétrica sem Retenção

Da mesma forma que no caso simétrico, definidas as condições utilizadas para a simulação do processo de difusão anômala assimétrica sem retenção de partículas, os resultados obtidos para cada caso são apresentados nas Figuras 9 a 14, respectivamente. Nestes gráficos, foram gerados os perfis de concentração de partículas (eixo vertical) em função da posição (eixo horizontal) para diferentes valores de tempos ($t=0, 10, 200, 500, 1000$ e 2000 [T]), a fim de acompanhar a evolução do processo anômala e tradicional, comparando ambos.

Novamente, a análise de sensibilidade recaiu sobre a influência dos novos parâmetros adicionados ao modelo clássico de difusão. Assim, para o caso assimétrico, estudou-se o efeito dos parâmetros λ e k_1 . O parâmetro k_3 , como apresentado anteriormente, representa o coeficiente de difusão, já estudado em outros trabalhos, e que nestas simulações foi mantido constante.

Pelas figuras, observa-se que o processo clássico ocorreu de forma simétrica em todos os casos, ou seja, sem preferência pelo lado direito como no processo anômalo assimétrico, o que era esperado. Esta preferência pelo lado direito deve-se ao uso de apenas valores positivos para λ , na faixa entre zero e um.

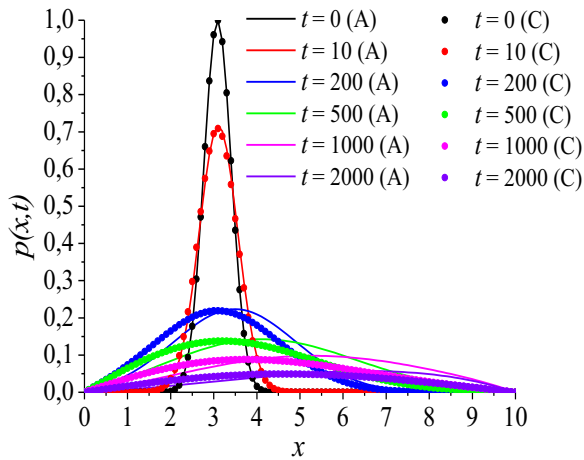


Figura 9: Caso 1 ($\lambda=0,2$; $k_1=10^{-2}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$),
A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

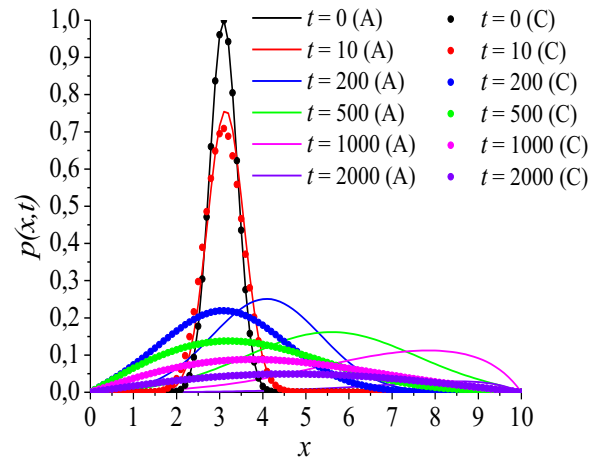


Figura 10: Caso 2 ($\lambda=0,5$; $k_1=10^{-2}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$),
A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

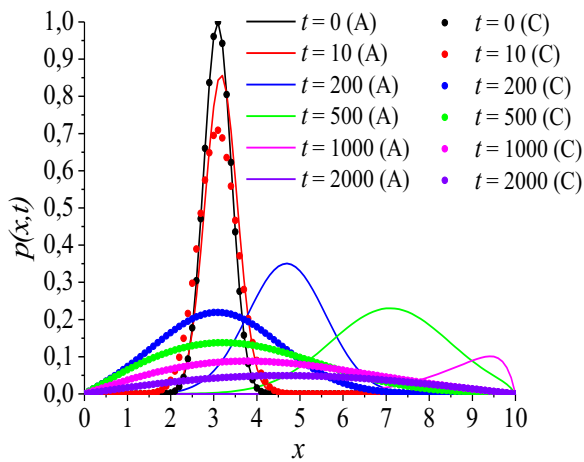


Figura 11: Caso 3 ($\lambda=0,8$; $k_1=10^{-2}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$),
A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

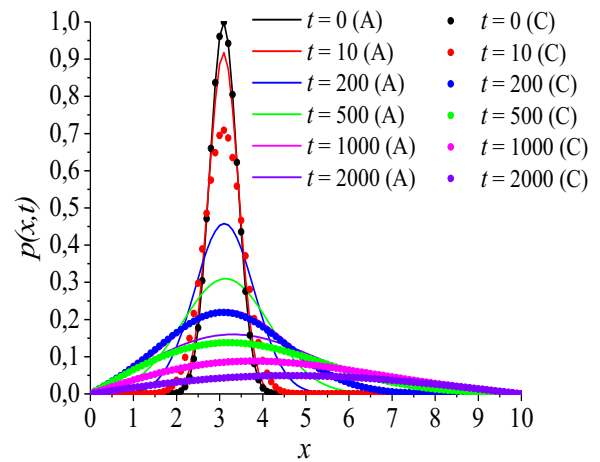


Figura 12: Caso 4 ($\lambda=0,9$; $k_1=10^{-4}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$),
A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

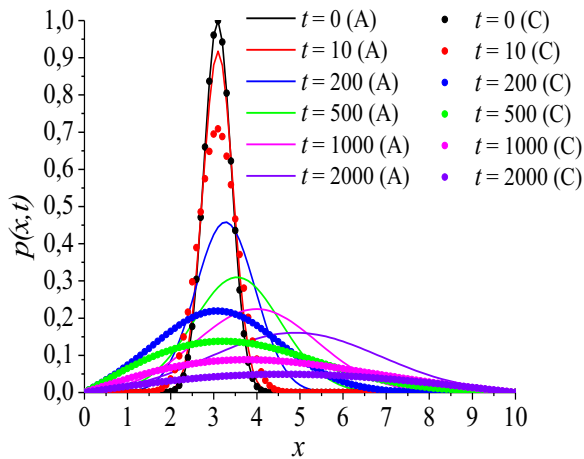


Figura 13: Caso 5 ($\lambda=0,9$; $k_1=10^{-3}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$),
A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

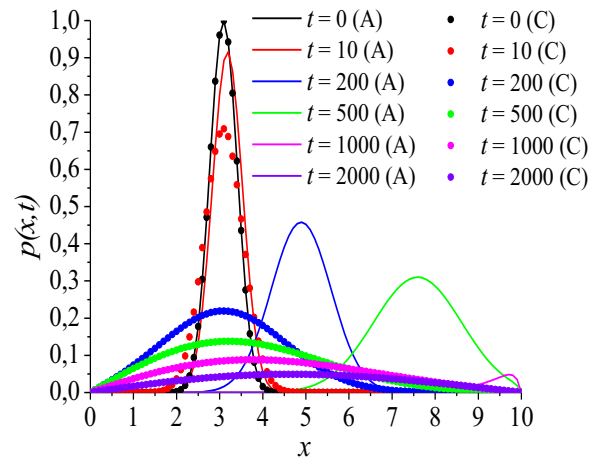


Figura 14: Caso 6 ($\lambda=0,9$; $k_1=10^{-2}$; $k_3=5 \times 10^{-3}$),
A- Difusão Anômala e C-Difusão Clássica.

Analisando primeiramente os casos 1 a 3 (Figuras 9 a 11), em que k_1 foi mantido constante, observa-se que para valores de λ próximos de zero a difusão anômala foi semelhante a difusão clássica nos primeiros instantes de tempo e com o passar do tempo os processos se distanciaram. Com o aumento de λ , este distanciamento tornou-se ainda mais acentuado, distribuindo as partículas quase em sua totalidade para a direita. Este comportamento já era esperado, pois quando λ tende a zero, o processo anômalo se equivale ao processo clássico.

Para os casos 4 a 6 (Figuras 12 a 14), em que λ foi mantido constante, nota-se que o aumento de k_1 foi determinante para tornar os processos mais distantes, em que valores altos para este parâmetro levaram a um processo anômalo com ainda mais preferência pelo lado direito. Além disso, no caso 4, no qual o processo foi simulado com o menor valor para k_1 percebe-se que o processo anômalo foi quase simétrico, mostrando ainda um atraso em relação ao tempo comparado ao processo clássico. Esta observação pode ser exemplificada na Figura 12, na qual as curvas de $t=1000$ (anômalo) e $t=200$ (clássico) quase se sobrepueram.

6 CONCLUSÃO

O presente Trabalho de Conclusão de Curso teve por objetivo fazer uma revisão sobre o fenômeno de difusão anômala em sistemas de engenharia. Neste sentido, uma comparação foi feita com o processo clássico de difusão em que foram apresentadas as técnicas de abordagem utilizadas na literatura para a resolução do processo anômalo e um foco especial foi dado ao modelo proposto por BEVILACQUA *et al.* (2011a, 2011b).

Assim, foi feito o desenvolvimento matemático do modelo destes pesquisadores para um processo de difusão simétrica com retenção de partículas e assimétrica sem retenção. Em seguida estes modelos foram simulados utilizando o Método das Linhas. Em linhas gerais, foi possível observar que a metodologia considerada foi capaz de obter resultados que estão em concordância com os reportados por SILVA (2016).

No modelo simétrico, observou-se que quanto maior o valor do parâmetro β , maior é número de partículas que se difundem e o modelo de difusão anômala se aproxima do modelo de difusão clássico. Em relação à influência do parâmetro k_4 , observou-se que o seu aumento implica em um maior distanciamento entre os dois processos, em que o processo anômalo é mais lento comparado ao clássico.

Quanto a difusão assimétrica, o aumento em módulo do parâmetro λ , ou seja, mais próximo de 1 ou -1, resultou em maiores diferenças entre os modelos anômalo e clássico e quando próximo de zero, os processos se aproximaram. Para o parâmetro k_1 , foi constatado que seu aumento levou a um processo anômalo com ainda mais preferência para um dos lados, esquerda ou direito, a depender do sinal de λ .

Por fim, ressalta-se que o estudo da difusão anômala é relativamente novo e requer muito esforço da comunidade científica para um melhor entendimento deste fenômeno, já que são várias as questões que ainda estão em aberto. Neste contexto, sugere-se em trabalhos futuros abordar este tema em um estudo multidimensional ou envolvendo fluxos cruzados, a fim de ampliar o conhecimento acerca deste assunto tão contemporâneo e com potencial para importantes descobertas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AMBLARD F.; MAGGS, A. C.; YURKE, B.; PARGELLIS, A. N.; LEIBLER, S. Subdiffusion and anomalous local viscoelasticity in action networks. *Phys. Rev. Lett.*, 77:4470, 1996.
- BALESCU, R. Anomalous transport in turbulent plasmas and continuous time random walks. *Phys. Rev. E*, 51:4807, 1995.
- BARKAI, E.; KLAFTER, J. Comment on subdiffusion and anomalous local viscoelasticity in actin networks. *Phys. Rev. Lett.*, 81:1134, 1998.
- BEVILACQUA, L.; GALEÃO, A. C. N. R.; COSTA, F. P. A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion process. *Annals of the Brazilian Academy of Sciences*, v. 83, n. 4, pp. 1443-1464, 2011a.
- 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* 34, pp. 166-175, 2011b.
- BOUCHAUD, J. P.; OTT, A.; LANGEVIN, D.; URBACH, W. Anomalous diffusion in elongated micelles and its Lévy flight interpretation. *J. Phys. II, France*, v. 1, p. 1465-1482, 1991.
- COLNAGO, M. Estudo da estabilidade do método das linhas usando a dinâmica de um cabo flexível. Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional da Faculdade de Ciências e Tecnologia da UNESP, Presidente Prudente-SP. (Tese de Mestrado), 76 p., 2012.
- DEREC, C.; SMERLAK, M.; SERVAIS, J.; BACRI, J. C. Anomalous diffusion in microchannel under magnetic field. *Physics Procedia* 9, pp. 109-112, 2010.
- GONÇALVES, G.; LENZI, M. K.; MORAES, L. S.; LENZI, E. K. ANDRADE, M. F. Difusão anômala e equações fracionárias de difusão. *Acta Sci. Technol, Maringá, Brazil*, v. 27, n. 2, p. 123-131, 2005.

- HAVLIN, S.; MOVSHOVITZ, D.; TRUS, B.; WEISS, G. H. Probability densities for the displacement of random walks on percolation clusters. *J. Phys. A*, 18:L719, 1985.
- HILFER, R. *Applications of Fractional Calculus in Physics*. Singapore: World Scientific, 2000.
- KLAFTER, J.; SCHLESINGER, M. F.; ZUMOFEN, G. Beyond Brownian motion, *Phys. Today*, New York, v. 49, p. 33-39, 1996.
- KNUPP, D. C.; SILVA, L. G.; BEVILACQUA, L.; GALEÃO, A. C. N. R.; SILVA NETO, A. J. Uncertainty analysis in the solution of an inverse anomalous diffusion problem employing maximum likelihood and Bayesian estimation. *Convención Científica de Ingeniería y Arquitectura*, 13p, 2014.
- MAOSHENG, J. The fourth order diffusion model for a bi-flux mass transfer. Programa de Pós Graduação em Engenharia Civil, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, UFRJ, Rio de Janeiro-RJ. (Tese de Doutorado), 151 p., 2017.
- METZLER, R.; KLAFTER, J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Phys. Rep.* 339, pp. 1–77, 2000.
- NOSSAL, R. Stochastic aspects of biological locomotion. *J. Stat. Phys.*, 30:391, 1983.
- OTT, A.; BOUCHAUD, J. P.; LANGEVIN, D.; URBACH, W. Anomalous diffusion in "living polymers": A genuine Levy flight? *Phys. Rev. Lett.*, New York, v. 65, p. 2201-2204, 1990.
- PEDRON, I. T. Estudos em difusão anômala. Departamento de Física/Universidade Estadual de Maringá, UEL, Maringá-PR. (Tese de Doutorado), 97 p., 2003.
- PENG, C. K.; MIETUS, J.; HAUSDORFF, J. M.; HAVLIN, S.; STANLEY, H. E.; GOLDBERGER, A. L. Long-range anti correlations and non-Gaussian behavior of the heartbeat. *Phys. Rev. Lett.*, New York, v. 70, p. 1343-1347, 1993.
- PORTO, M.; BUNDE, A.; HAVLIN S.; ROMAN, H. E. Structural and dynamics properties of the percolation back bone in two and three dimensions. *Phys. Rev. E*, 56:1667, 1997.
- PRATO, D.; TSALLIS, C. Non extensive foundation of Lévy distributions. *Phys. Rev. E*, New York, v. 60, p. 2398- 2401, 1999.

- SCHER, H.; MONTROLL, E. Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids. *Phys. Rev. B*, 12:2455, 1975.
- SILVA, L. G. Problemas diretos e inversos em processos de difusão anômala. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, UERJ, Nova Friburgo-RJ. (Tese de Doutorado), 112 p., 2016.
- SOLOMON, T. H.; WEEKS, E. R.; SWINNEY, H. L. Observation of anomalous diffusion and Lévy flights in a two-dimensional rotating flow. *Phys. Rev. Lett.*, New York, v. 71, p. 3975-3979, 1993.
- SPOHN, H. Surface dynamics below the roughening transition. *J. Phys. I, France*, v. 3, p. 69-81, 1993.
- STERZA, R. L.; BRANDI, A. C. Comparação entre métodos numéricos: Runge-Kutta de quarta ordem e previsor-corretor. *Revista Eletrônica Paulista de Matemática*, ISSN 2316-9664, v. 7, 11 p., 2016.
- RAMOS, M. J. C. Aplicações do método das soluções fundamentais em problemas de difusão. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal da Paraíba, UFPB, João Pessoa-PB. (Tese de Mestrado), 77 p., 2016.
- VALLE, K. N. F. Métodos numéricos de Euler e Runge-Kutta. Programa de Pós-graduação em Matemática Para Professores com Ênfase em Cálculo da Universidade Federal de Minas Gerais, UFMG, Belo Horizonte, 2012.
- WEEKS E. R.; SWINNEY, H. L. Anomalous diffusion resulting from strongly asymmetric random walks. *Phys. Rev. E*, 57:4915, 1998.
- WU, J.; BERLAND, K. M. Propagators and time-dependent diffusion coefficients for anomalous diffusion. *Biophysical Journal* 95, pp. 2049-2052, 2008.
- ZUMOFEN, G.; BLUMEN, A.; KLAFTER, J. Current flow under anomalous diffusion conditions: Lévy walks. *Phys. Rev. A*, 41:4558, 1990.