

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS NO PROCESSO DE DIFUSÃO ANÔMALA USANDO EVOLUÇÃO DIFERENCIAL

William Júnio de Lima¹ - williamjunio.lima@gmail.com

Fran Sérgio Lobato² - fslobato@ufu.br

Fábio de Oliveira Arouca² - arouca@ufu.br

¹Universidade Federal de Goiás - Regional Catalão, Catalão, GO, Brazil

²Universidade Federal de Uberlândia - Uberlândia, MG, Brazil

Resumo. Nos últimos anos, o desenvolvimento e o aprimoramento de novas práticas experimentais associado à modelos matemáticos tem possibilitado o avanço no que tange o estudo do fenômeno de difusão anômala. No contexto experimental, a evidência deste fenômeno não é uma tarefa trivial, já que o mesmo só pode ser observado apenas para uma restrita gama de materiais presente na natureza. Na prática, uma das formas de se observar a presença deste fenômeno é verificar se os perfis de concentração colapsam em torno de um valor de referência definido em termos de uma nova variável independente que é função de um fator de escala. Caso esse fator assuma o valor de 0,5 tem-se a difusão clássica, isto é, o deslocamento quadrático médio é função linear do tempo. Caso contrário, tem-se a difusão anômala. Diante do que foi apresentado, a presente contribuição tem como objetivo aplicar o algoritmo de Evolução Diferencial para a determinação de parâmetros em um modelo empírico para fins da identificação do fenômeno de difusão anômala em diferentes materiais (tijolo de barro queimado e calcário). A partir dos resultados obtidos foi possível observar a presença do fenômeno de difusão anômala através da identificação do fator de escala.

Keywords: Problema inverso, difusão anômala, modelo matemático, Evolução Diferencial.

1. INTRODUÇÃO

No estudo dos fenômenos de transporte, o processo de difusão destaca-se pela grande quantidade de aplicações que podem ser encontradas, dentre as quais pode-se citar a modelagem de fenômenos químicos, físicos e biológicos. Em linhas gerais, define-se a difusão como sendo um processo de transporte de origem microscópica e que acontece, basicamente, pela colisão das moléculas que estão envolvidas no processo (Silva, 2006). A difusão ocorre quando existe um gradiente de concentração de uma espécie e, conseqüentemente, o transporte deste da região de maior concentração para a de menor concentração. Em nível macroscópico, o comportamento coletivo das partículas apresenta regularidade e segue modelos matemáticos já definidos anteriormente, como a 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 (difusão clássica), 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 de difusão anômala, no qual o deslocamento quadrático médio não é função linear do tempo, diferentemente do que ocorre no processo tradicional de difusão.

Uma das formas de se identificar o processo de difusão anômala é através da avaliação do denominado parâmetro de escala (α). Se este for igual a 0,5; tem-se a difusão clássica, isto é, o deslocamento quadrático médio das partículas é função linear do tempo. Por outro lado, se o valor deste parâmetro não for igual 0,5; tem-se a difusão anômala (Pedron, 2003).

Matematicamente, o fenômeno da difusão anômala têm sido representado por quatro diferentes abordagens, a saber, uma puramente empírica, uma fundamentada nas tradicionais equações diferenciais parciais em que o termo de difusividade é função da concentração, por meio de equações diferenciais com derivadas fracionárias e usando equações diferenciais parciais com ordem superior. Em cada uma destas faz-se necessário a definição do modelo matemático que representa esse fenômeno, bem como da sua identificação através da formulação e resolução de um problema inverso.

Diante do que foi apresentado, a presente contribuição tem como objetivo aplicar o algoritmo de Evolução Diferencial para a determinação de parâmetros, dentre estes o fator de escala, em um modelo fenomenológico em que a difusividade é função da concentração, em dois materiais, a saber, tijolo de barro queimado e calcário. Este trabalho apresenta a seguinte estrutura. A seção 2. apresenta aspectos relacionados à evidência experimental do fenômeno de difusão clássica e anômala. Já na seção 3. é apresentada uma breve descrição do modelo fenomenológico considerado para representar o fenômeno de difusão anômala. A metodologia e os resultados obtidos são apresentados nas seções 4. e 5. As conclusões são apresentadas na última seção desta contribuição.

2. EVIDÊNCIA EXPERIMENTAL DO FENÔMENO DE DIFUSÃO CLÁSSICA E ANÔMALA

Do ponto de vista experimental, os fenômenos de difusão clássica e anômala podem ser observados a partir da elaboração de um gráfico que relaciona a variável dependente em função de uma variável independente auxiliar, obtida a partir da transformação de Boltzmann (Pel *et al.*, 1996). Para um problema unidimensional e em estado dinâmico, esta variável independente pode ser expressa como sendo $xt^{-\alpha}$, em que x é a variável espacial, t é a variável temporal e α é definido como sendo o fator de escala.

A Figura 1 apresenta as distribuições de concentração para argamassa e gesso. Para estes materiais verifica-se que os perfis da concentração, em termos da variável independente $xt^{-0,5}$, se situam em torno de um perfil de referência (perfil definido em função da variável independente apresentada anteriormente) para cada material considerado. Neste caso, diz que os perfis colapsam em torno deste perfil de referência. Como o valor de α é igual a 0,5 tem-se a difusão clássica.

Por outro lado, a Figura 2 apresenta os perfis de concentração para tijolo de barro queimado (Fig. 2(a)) (Pel, 1995a; Pel *et al.*, 1995b, 1996; Kuntz e Lavallée, 2001) e calcário (Fig. 2(b)) (Carpenter *et al.*, 1993; Kuntz e Lavallée, 2001) considerando α igual a 0,5.

Para estas figuras não observa-se, de forma clara, o colapso dos perfis de concentração em

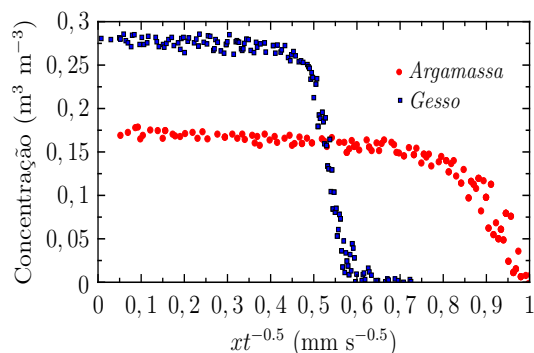


Figura 1- Evidência Experimental do Fenômeno de Difusão Clássica para Argamassa e Gesso.

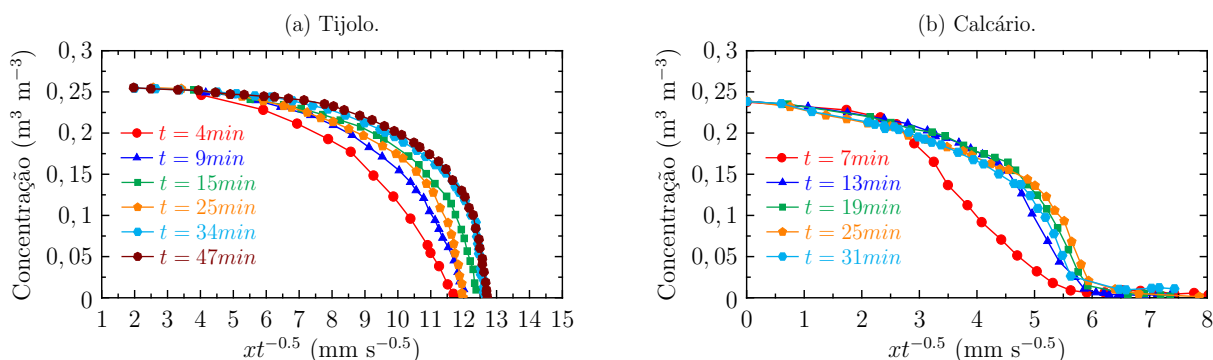


Figura 2- Evidência Experimental do Fenômeno de Difusão Anômala para o Tijolo de Barro Queimado e Calcário.

torno dos respectivos valores médios de referência. Conforme discutido por Kuntz e Lavallée (2001), a interpretação dos dados de absorção para estes dois materiais evidencia que este processo não se propaga conforme a tradicional Lei de Fick. Intuitivamente, espera-se que um valor de α diferente de 0,5 seja capaz de representar os perfis de concentração para estes dois materiais. Assim sendo, caso o valor deste parâmetro seja diferente de 0,5; está caracterizado o fenômeno de difusão anômala.

3. MODELAGEM MATEMÁTICA DO FENÔMENO DE DIFUSÃO ANÔMALA

Como apresentado anteriormente, o fenômeno de difusão anômala pode ser descrito considerando diferentes modelos empíricos e fenomenológicos. Neste contexto, em diversos casos é importante a identificação do tipo de mecanismo de transferência associado ao processo em análise. Para essa finalidade, considere um processo em que o fenômeno de transferência de massa em uma única dimensão e em estado transiente é dado pela seguinte equação diferencial parcial:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right), \quad (1)$$

em que θ é a concentração, x é a variável espacial, t é a variável temporal e D é a difusividade. Para o problema em que a umidade inicial é uniforme, Kuntz e Lavallée (2001) demonstraram

que a equação acima pode ser reescrita em termos da variável ϕ ($\phi = xt^{-0,5}$),

$$\frac{\phi}{2} \frac{d\theta}{d\phi} \frac{d}{d\phi} + \left(D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial \phi} \right), \quad (2)$$

$$\theta(\phi = 0) = \theta_1,$$

$$\theta(\phi = \infty) = \theta_0,$$

em que $\theta = \theta_0$ ($x > 0$ e $t = 0$), e $\theta = \theta_1$ ($x = 0$ e $t > 0$).

O modelo apresentado descreve o fenômeno de difusão anômala para o caso em que o fator de escala é igual a 0,5. Para representar outros casos, Kuntz e Lavallée (2001) propuseram um novo modelo matemático no qual, a partir da inserção de um expoente real n no termo que define a Lei de Fick, pode-se escrever a seguinte equação:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(\theta) \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^n \right). \quad (3)$$

Kuntz e Lavallée (2001) demonstraram que o parâmetro n pode ser relacionado com o fator de escala α na forma:

$$n = \frac{1}{\alpha} - 1. \quad (4)$$

Com este modelo, o fator de escala pode ser determinado a partir da estimação do parâmetro n para a modelagem fenomenológica. Além disso, a difusividade foi estimada de acordo com o seguinte modelo empírico (Lockington *et al.*, 1999; Silva, 2006):

$$D(\theta) = A_1 \exp(A_2 \theta), \quad (5)$$

em que A_1 e A_2 são parâmetros que devem ser estimados através da resolução do problema inverso.

Neste contexto, para a caracterização do fenômeno de difusão anômala no modelo proposto por Kuntz e Lavallée (2001), faz-se necessário a determinação dos parâmetros A_1 , A_2 e n via formulação e resolução de um problema inverso.

4. METODOLOGIA

Para a determinação dos parâmetros do modelo empírico descrito pela Eq.(5), bem como o parâmetro n , que está relacionado com o fator de escala α , faz-se necessário a formulação e a resolução de um problema inverso. Neste cenário, as próximas subseções apresentam, de forma resumida, a definição do problema inverso de interesse, bem como aspectos gerais sobre o algoritmo de ED.

4.1 Formulação do Problema Inverso

O problema inverso proposto neste trabalho consiste da determinação do vetor de incógnitas (A_1 , A_2 e n) que minimize o funcional FO (função objetivo) que representa o somatório da diferença entre o modelo de predição e os dados experimentais, conforme a seguinte relação:

$$FO \equiv \sum_{i=1}^{n_{exp}} \sum_{j=1}^{m_{exp}} \left(C^{exp}(t_i, x_j) - C^{pred}(t_i, x_j) \right)^2, \quad (6)$$

em que C^{exp} e C^{pred} representam o valor da variável dependente (concentração) experimental e predito pelo modelo, respectivamente, t é o tempo, x é a variável espacial, n_{exp} e m_{exp} representam os números de pontos experimentais conhecidos em t e em x , respectivamente.

Para a resolução do problema inverso proposto será considerado o algoritmo de ED, cuja ideia base é descrita na próxima subseção.

4.2 Algoritmo de Evolução Diferencial

Dentre os inúmeros métodos de otimização existentes, o algoritmo de ED, proposto por Storn e Price (1995), caracteriza-se como um dos mais empregados. Isto se deve ao grande número de aplicações que podem ser encontradas na literatura especializada, a sua capacidade de escapar de ótimos locais, pela facilidade de implementação e por sua habilidade no tratamento de problemas com diferentes tipos de variáveis (Lobato, 2008). Resumidamente, o seu procedimento geral pode ser resumido nas seguintes etapas (Storn e Price, 1995):

- Inicialmente, gera-se uma população inicial com NP soluções factíveis, isto é; o vetor de variáveis de projeto satisfazem os limites estabelecidos pelo usuário;
- Seleciona-se um indivíduo, de forma aleatória, para ser substituído e outros dois são selecionados para realizarem a subtração vetorial.
- Adiciona-se ao valor atual do indivíduo o resultado desta operação de subtração, sendo esta ponderada por um parâmetro, a saber, a taxa de perturbação F , também definida pelo usuário. Este procedimento representa o operador de cruzamento na ED;
- Se o vetor resultante apresenta um melhor valor em termos da função objetivo e se for gerado um número aleatório e este for menor do que a probabilidade de cruzamento (CR), definida pelo usuário, este substitui o candidato previamente escolhido, caso contrário, o candidato previamente escolhido é mantido na população.
- Este procedimento é repetido de forma que uma nova população, constituída por novos indivíduos e indivíduos remanescentes da população anterior, formem a nova população.
- Para finalizar o algoritmo, geralmente adota-se como critério de parada o número máximo de gerações.

Mais detalhes sobre o desenvolvimento matemático do algoritmo apresentado e de aspectos relacionados a sua implementação podem ser encontrados em Storn e Price (1995).

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para avaliar a metodologia proposta neste trabalho, alguns pontos devem ser destacados:

- Para a formulação da função objetivo foram considerados os pontos experimentais apresentados por Pel (1995a); Pel *et al.* (1995b, 1996); Carpenter *et al.* (1993); Kuntz e Lavallée (2001) para dois materiais, a saber, tijolo de barro queimado (Caso 1) e calcário (Caso 2);

- Parâmetros utilizados no algoritmo de ED: população com 25 indivíduos, número de gerações igual a 250, probabilidade de cruzamento e taxa de perturbação iguais a 0,8; respectivamente. Para esse conjunto de parâmetros, são necessárias $25 + 25 \times 250$ avaliações da função objetivo em cada execução do algoritmo;
- Para a aplicação do algoritmo de ED foi considerado o seguinte espaço de projeto: $[10^{-9}; 10^{-9}; 0] \leq [A_1; A_2; \alpha] \leq [100; 25; 1]$;
- Cada estudo de caso foi simulado dez vezes para a determinação dos valores que serão apresentados na sequência;
- O critério de parada adotado neste trabalho foi o número máximo de gerações, isto é; o procedimento evolutivo é finalizado se esse valor é alcançado.

5.1 Caso 1: Tijolo de Barro Queimado

Este estudo considera os perfis de concentração em função das variáveis espacial e temporal para o tijolo de barro queimado, conforme apresentado na Fig. 3.

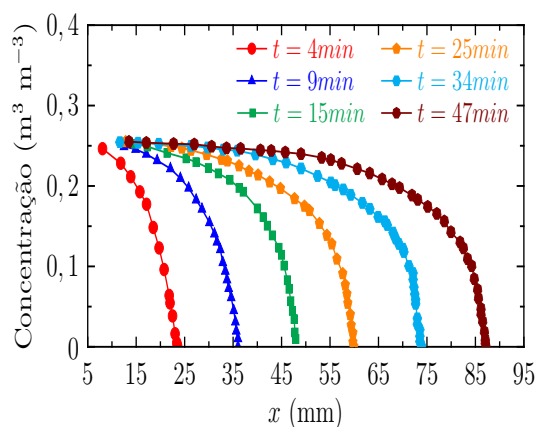


Figura 3- Perfis de Concentração em Função do Espaço e do Tempo para o Tijolo de Barro Queimado.

Na Tabela 1 são apresentados os parâmetros obtidos pela minimização da função objetivo considerando o modelo fenomenológico associado à expressão para a predição da difusividade proposta Eq. (5).

Tabela 1- Parâmetros Estimados pelo Algoritmo de ED para o Estudo de Caso 1.

	A_1 (mms $^{-\alpha}$)	A_2 (mms $^{-\alpha}$)	n (mms $^{-\alpha}$)	α	FO
Média	1,2472	11,4606	0,6764	0,5965	0,0423
Desvio Padrão	0,0154	1,6987	0,0123	0,0324	0,0013

A partir dos resultados apresentados nesta tabela é possível observar que o algoritmo de ED foi capaz de encontrar boas estimativas para o vetor de variáveis de projeto, visto os valores da média e do desvio padrão obtidos. A Figura 4 apresenta os perfis de concentração experimental (*Exp*) e preditos pelo modelo ajustado (*Sim*). Nesta figura é possível observar uma boa concordância qualitativa entre os pontos experimentais e preditos pelo modelo fenomenológico.

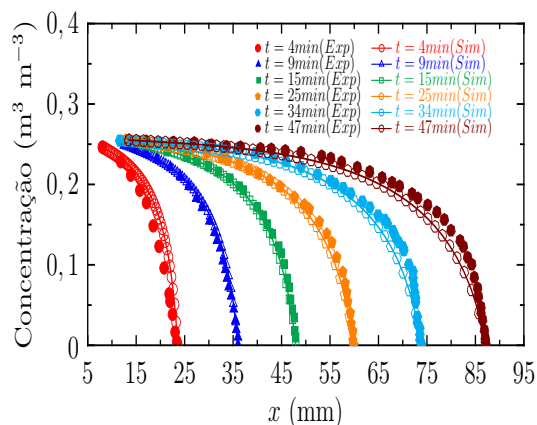


Figura 4- Perfis de Concentração Simulados e Preditos para o Tijolo de Barro Queimado.

5.2 Caso 2: Calcário

O próximo estudo de caso considera os perfis de concentração experimentais em função das variáveis espacial e temporal para o calcário, conforme a Fig. 5.

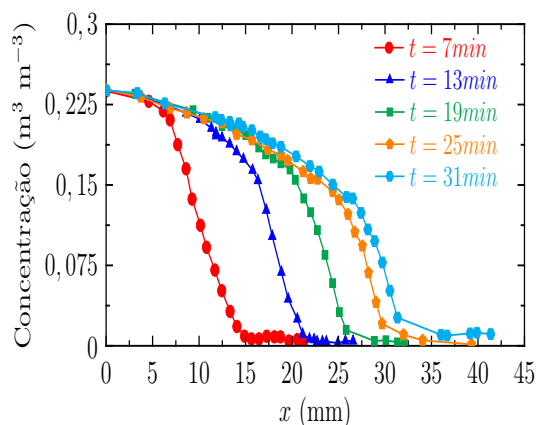


Figura 5- Perfis de Concentração em Função do Espaço e do Tempo para o Calcário.

Na Tabela 2 são apresentados os parâmetros obtidos pelo algoritmo de ED considerando o modelo fenomenológico associado à expressão para a predição da difusividade proposta. Nesta tabela observa-se boas estimativas para os parâmetros obtidos pelo o algoritmo de ED, em relação aos valores da média e do desvio padrão das variáveis de projeto e da função objetivo.

Tabela 2- Parâmetros Estimados pelo Algoritmo de ED para o Estudo de Caso 2 considerando o Modelo Fenomenológico.

	A_1 (mms $^{-\alpha}$)	A_2 (mms $^{-\alpha}$)	n (mms $^{-\alpha}$)	α	FO
Média	8,5136	0,1948	0,4985	0,6673	0,1081
Desvio Padrão	0,1322	0,0098	0,0566	0,0121	0,0057

A Figura 6 apresenta os perfis de concentração experimental (*Exp*) e preditos pelo modelo ajustado (*Sim*). Assim como no estudo de caso anterior, também observa-se uma boa concordância entre os valores experimentais e preditos pelo modelo proposto.

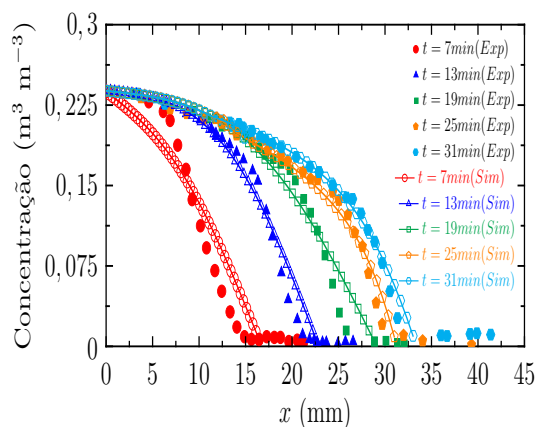


Figura 6- Perfis de Concentração Simulados e Preditos para o Calcário.

6. CONCLUSÕES

O presente trabalho teve por objetivo a formulação e a resolução de um problema inverso de difusão anômala em que uma das variáveis de projeto era o fator de escala, responsável por caracterizar o tipo de mecanismo envolvido no fenômeno em análise. Para essa finalidade foram considerados dois conjuntos de pontos experimentais apresentados na literatura especializada e o algoritmo de Evolução Diferencial como metodologia para a resolução do problema inverso proposto. A partir dos resultados obtidos foi possível constatar que a metodologia proposta foi capaz de estimar os parâmetros da equação de predição para a difusividade em função da concentração. Finalmente, observa-se com os valores estimados para o fator de escala, que ambos os processos não seguem o valor de 0,5; o que implica que ambos são reconhecidos como anômalos, assim como observado por Kuntz e Lavallée (2001).

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro da FAPEMIG e do CNPq para a realização deste trabalho. O Dr. William agradece o Programa de Pós-Graduação em Modelagem e Otimização da Universidade Federal de Goiás, Regional Catalão por sua bolsa de pós-doutorado.

REFERÊNCIAS

- 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*”, Material and Structures, v. 26, p. 286-292, 1993.
- Kuntz, H., Lavallée, “*Experimental evidence and theoretical analysis of anomalous diffusion during water infiltration in porous building materials.*”, Journal of Physics D: Applied Physics, v. 34, 2547-2554, 2001.

- Lobato, F. S., “Projeto de Sistemas de Engenharia usando Otimização Multi-objetivo”, Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, 2008.
- Lockington, D., Parlange, J. Y., Dux, P., “Sorptivity and the estimation of water penetration into unsaturated concrete”, Mater. Struct., v. 32, p. 342-347, 1999.
- Pedron, I. T. (2003), “Estudos em difusão anômala”, Tese de Doutorado, DF/UEM, Maringá-PR.
- Pel, L. (1995a), “Moisture Transport in Porous Building Materials”, Tese de Doutorado, Eindhoven Technical University, Netherlands.
- 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, p. 675-680, 1995.
- Pel, L., Kopinga, K., Brocken, H., “Moisture transport in porous building materials”, Heron, v. 41, p. 95-105, 1996.
- Silva, D. V. (2006), “Transporte Difusivo de Líquidos em Meios Porosos - Difusão Anômala em Zeólita Consolidada”, Dissertação de Mestrado, DF/UFPE, Pernambuco.
- Silva, L. G. (2006), “Problemas diretos e inversos em processos de difusão anômala”, Tese de Doutorado, PPGMC/IPRJ/UERJ, Nova Friburgo-RJ.
- Storn, R., Price, K. “Differential Evolution: A Simple and Efficient Adaptive Scheme for Global Optimization over Continuous Spaces”, Journal of Global Optimization, 11, 341–359, 1995.

DETERMINATION OF PARAMETERS IN ANOMALOUS DIFFUSION PROCESS USING DIFFERENTIAL EVOLUTION

Abstract. *In recent years, the development and improvement of new experimental practices associated to mathematical models has allowed the advance in study of anomalous diffusion phenomenon. In experimental context, the evidence of this phenomenon is not a trivial task, since the same can only be observed only for a restricted range of materials present in nature. In practice, one of ways to observe the presence of this phenomenon is to verify if the concentration profiles collapse around a defined reference value, described in terms of a new independent variable that is a function of a scale factor. If this factor assumes the value of 0.5, the classical diffusion is characterized, i.e., the mean squared displacement is a linear function of time. Otherwise, the anomalous diffusion is defined. In this contribution, the Differential Evolution algorithm is used to determine a set of parameters in an empirical model to identify the anomalous diffusion phenomenon considering two different materials. From the obtained results it was possible to observe the presence of anomalous diffusion phenomenon through the identification of the scale factor.*

Keywords: *Inverse Problem, anomalous diffusion, mathematical model, Differential Evolution.*