

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALFENAS

TAINÁH MARTINS RESENDE SANTOS

**APRIMORANDO O MÉTODO DE REGULARIZAÇÃO DE TIKHONOV
UTILIZANDO UM OPERADOR DIFERENCIAL DE ORDEM FRACIONÁRIA**

Alfenas/MG

2020

TAINÁH MARTINS RESENDE SANTOS

**APRIMORANDO O MÉTODO DE REGULARIZAÇÃO DE TIKHONOV
UTILIZANDO UM OPERADOR DIFERENCIAL DE ORDEM FRACIONÁRIA**

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para
obtenção do título de Mestre em Química pela Univer-
sidade Federal de Alfenas.

Área de concentração: Físico-Química.

Orientador: Prof. Dr. Nelson Henrique Teixeira Lemes.

Alfenas/MG

2020

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal de Alfenas

Santos, Taináh Martins Resende.
S237a Aprimorando o método de regularização de Tikhonov utilizando um
operador diferencial de ordem fracionária / Taináh Martins Resende Santos -
Alfenas/MG, 2020.
104 f. : il. --

Orientador: Nelson Henrique Teixeira Lemes.
Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal de Alfenas,
2020.
Bibliografia.

1. Físico-química. 2. Problema inverso (Equações diferenciais). 3.
Cálculo diferencial. I. Lemes, Nelson Henrique Teixeira. II. Título.

CDD-541

TAINÁH MARTINS RESENDE SANTOS

**APRIMORANDO O MÉTODO DE REGULARIZAÇÃO DE TIKHONOV
UTILIZANDO UM OPERADOR DIFERENCIAL DE ORDEM FRACIONÁRIA**

A Banca examinadora abaixo-assinada,
aprova a Dissertação apresentada como
parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre
em Química pela Universidade Federal de Alfenas.
Área de concentração: Físico-Química.

Aprovado em 04/02/2020.

Prof. Dr. Nelson Henrique Teixeira Lemes (Orientador)

Universidade Federal de Alfenas - UNIFAL-MG

Assinatura:



Prof. Dr. Anderson José de Oliveira

Universidade Federal de Alfenas - UNIFAL-MG

Assinatura:



Prof. Dr. Teodorico de Castro Ramalho

Universidade Federal de Lavras - UFLA

Assinatura:



*À minha família, por ter batalhado junto a mim todos os dias.
A vocês, Papai, Mamãe e irmão, todo meu amor e eterna gratidão!*

DEDICO.

AGRADECIMENTOS

A Deus e a Nossa Senhora Aparecida, pelo dom da vida e do saber.

Ao meu pai, Sebastião Martins Santos, por nunca medir esforços para cada pedido meu e sempre acreditar no meu potencial. Seus esforços não foram em vão, eis aqui mais uma das provas.

À minha mãe, Aparecida Assunção Resende, pelas orações diárias e por toda força que sempre me passou. Pelas broncas, ensinamentos e carinhos que a cada dia me apresentava de forma diferente. A mulher que me tornei é, com certeza, espelho seu.

Ao meu irmão, Luiz Fernando Resende Santos, pelo apoio de sempre, por servir como exemplo em inúmeras ocasiões e por todo regalo.

À vó Nini (*in memorian*), pelas suas incansáveis rezas pelas milhares de provas, tanto da faculdade, quanto da vida. Obrigada por todo ensinamento. Minha eterna saudade!

Ao meu tio Eustáquio (*in memorian*), pelo companheirismo de sempre e por nunca ter medido esforços para nos ajudar. O senhor foi nota mil. Saudade grande!

A todos os meus tios, primos e amigos, pelo companheirismo e pela força de sempre.

Aos meus amigos de Oliveira, Lavras e Alfenas, sem vocês eu certamente não conseguiria.

À minha amiga de graduação, mestrado e república, Michele Dorcília de Oliveira Silva, agradeço imensamente pela grande parceria e cumplicidade durante todos esses anos, principalmente ao dividir a mesma república. Você faz muita falta!

À minha amiga e companheira de laboratório, Camila Assis Tavares, por sempre me ajudar sem nunca hesitar, por toda paciência e, principalmente, pelos bons momentos compartilhados durante o Mestrado.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Nelson Henrique Teixeira Lemes, pela paciência, excelente orientação, pelos momentos de descontração e as belas discussões sobre Ciência. O senhor é, certamente, um grande exemplo de pessoa e cientista!

De fato, Ciência não se faz sozinho. Portanto, agradeço ao Prof. Dr. Anderson José de Oliveira e ao Prof. Dr. Teodorico de Castro Ramalho, por terem aceitado com satisfação em colaborar com este trabalho. Sem dúvidas, os conselhos foram de grande valia.

À agência de fomento, por todo auxílio durante a pesquisa. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

À Universidade Federal de Lavras (UFLA) e aos professores que tive ao longo da graduação.

À Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL), por tornar possível esta conquista, especialmente ao Instituto de Química (IQ).

A todos os professores que tive ao longo da vida, principalmente aqueles que me inspiraram e continuam me inspirando para um dia, quem sabe, me tornar uma excelente professora como eles.

A todos que, direta ou indiretamente, contribuem para que o meu amor pela Ciência continue se engrandecendo. A cada dia que passa tenho mais orgulho de fazer parte de uma comunidade científica que busca fazer uma Ciência boa e de qualidade. Felizmente, tenho muitos exemplos a seguir.

A todos, agradeço de coração!

*“A matemática pura é, a sua maneira,
a poesia das ideias lógicas.”*

(EINSTEIN, 1935, p.1)

RESUMO

A regularização de Tikhonov é o método usual para resolver problemas inversos mal colocados, recomendado quando se considera a presença de erros experimentais nos dados de entrada. No entanto, em alguns casos, o uso dessa técnica ainda não é suficiente para fornecer boas soluções. Neste trabalho, uma melhoria do método de regularização de Tikhonov foi proposta e testada no problema inverso da radiação de corpo negro. A metodologia aqui empregada consiste em substituir os operadores diferenciais de ordem inteira, presentes na solução do funcional original, por um operador diferencial de ordem não inteira. Esta proposta, inédita na literatura, fornece uma maior flexibilidade para modelar a solução de interesse, pois leva em consideração dois parâmetros, λ e α , diferente da técnica usual de Tikhonov. Além do mais, esta proposta possui um maior espaço de solução do que quando se considera operadores de ordem inteira. Neste estudo, é demonstrado de maneira clara que o uso de um operador diferencial de ordem fracionária fornece um resultado melhor do que a técnica usual, mesmo quando considerada a presença de erros experimentais.

Palavras-chaves: Cálculo Fracionário. Derivada de Grünwald-Letnikov. Problema Inverso. Regularização de Tikhonov.

ABSTRACT

Tikhonov regularization is a typical method used to solve ill-posed inverse problems, recommended when experimental errors in input data are considered. However, for some cases, this technique does not ensure good solutions. In this work, an improvement on the Tikhonov regularization method was proposed and tested on the black body radiation problem solution. The methodology consists in replacing the differential operator of integer-order, that can be found in the solution of the original functional, for a differential operator of non-integer order. This unprecedented proposal provides more flexibility regarding modeling the solution of interest, due two parameters, λ e α , which is different from the original Tikhonov method. Furthermore, it has a greater solution space when compared to integer differential operators. In this work, it is clearly shown that the differential operator of fractional order provides a better solution than the usual method, even when the presence of experimental error is considered.

Keywords: Fractional Calculus. Grünwald-Letnikov derivative. Inverse Problem. Tikhonov Regularization.

LISTA DE FIGURAS

Figura 4.1	– Estrutura matemática de um problema físico, onde a obtenção de \mathbf{g} é realizada por um Problema Direto e a obtenção de \mathbf{f} por um Problema Inverso.	20
Figura 4.2	– Derivada de ordem 1/2 da função trigonométrica $\text{sen}(t)$ em relação a t (linha contínua com círculos). A linha pontilhada representa a função $\text{sen}(t)$ e a linha contínua com pontos a função $\text{cos}(t)$	40
Figura 5.1	– Ilustração esquemática de uma curva-L.	51
Figura 5.2	– Rotina utilizada para a obtenção dos dados.	55
Figura 6.1	– Função $f(T)$ exata obtida através da equação (5.9).	59
Figura 6.2	– Espectro de radiação de corpo negro simulado sem a presença de erros experimentais.	61
Figura 6.3	– Espectro de radiação de corpo negro simulado com a presença de erros experimentais.	61
Figura 6.4	– Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo) e a solução \mathbf{f} calculada sem a regulação de Tikhonov (equação (5.15) com $a_0 = a_1 = a_2 = 0$), linha preta contínua.	64
Figura 6.5	– Curva-L obtida através da equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$, linha preta contínua. O ponto marcado pelo quadrado corresponde ao parâmetro de regularização de $3,16 \times 10^{-10}$	65
Figura 6.6	– Norma da derivada primeira da solução, $\ \mathbf{D}^{(1)}\mathbf{f}_{\lambda,\alpha}^*\ $, obtida pela equação (5.18) para diferentes valores de α , com λ fixo.	67
Figura 6.7	– Curva-L para a equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ (linha preta contínua) e equação (5.18) com $\alpha = 0,6$ (linha preta pontilhada). Os pontos marcados pelo quadrado e pelo círculo correspondem aos parâmetros de regularização do $3,16 \times 10^{-10}$ para a equação (5.15) e (5.18), respectivamente.	68

Figura 6.8	–	Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo) e as calculadas. A linha contínua vermelha foi obtida pela equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ e a linha contínua verde pela equação (5.15) com $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$. O símbolo asterisco azul é a solução encontrada pela equação (5.18) com $\alpha = 0,6$. Todos esses resultados foram obtidos usando $\lambda = 3,16 \times 10^{-10}$	69
Figura 6.9	–	Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo) e a solução f calculada através da equação (5.15) com $a_2 = 1$ e $a_0 = a_1 = 0$, linha preta contínua.	72
Figura 6.10	–	Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo) e a solução f calculada através da equação (5.18) com $\alpha = 1,2$, linha preta contínua.	73
Figura 6.11	–	Minimização da norma do resíduo para a equação (5.12) ou (5.15) com $a_0 = a_1 = a_2 = 0$, círculos pretos.....	73
Figura 6.12	–	Minimização da norma do resíduo para a equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ (triângulos vermelhos) e $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$ na mesma equação (círculos verdes). Os quadrados azuis representam o resultado da equação (5.18) com $\alpha = 0,6$	74
Figura 6.13	–	Função $f(T)$ exata obtida através da equação (6.7).....	77
Figura 6.14	–	Função $f(T)$ exata obtida através da equação (6.8).....	78
Figura 6.15	–	Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo), obtida pela equação (6.7) e as calculadas. A linha contínua vermelha foi obtida pela equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ e a linha contínua verde pela equação (5.15) com $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$. O símbolo asterisco azul é a solução encontrada pela equação (5.18) com $\alpha = 0,5$. Todos esses resultados foram obtidos usando $\lambda = 4,47 \times 10^{-10}$	79
Figura 6.16	–	Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo), obtida pela equação (6.8) e as calculadas. A linha contínua vermelha foi obtida pela equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ e a linha contínua verde pela equação (5.15) com $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$. O símbolo asterisco azul é a solução encontrada pela equação (5.18) com $\alpha = 0,6$. Todos esses resultados foram obtidos usando $\lambda = 1,95 \times 10^{-10}$	80

Figura 6.17	–	Derivada de Grünwald-Letnikov da função seno de 0 a 2π , com a presença de pequenos erros, para $\alpha = 0,2$ (linha vermelha), $\alpha = 0,5$ (linha preta), $\alpha = 0,9$ (linha azul) e $\alpha = 1,0$ (linha verde). As linhas pontilhadas representam a função seno sem a presença de erros.	81
Figura A.1	–	Ilustração esquemática de um corpo negro.	91
Figura A.2	–	Gráfico da densidade de energia ($\rho_T(\nu)$) pela frequência (ν), segundo a formulação proposta por Rayleigh-Jeans para a radiação de corpo negro.	94
Figura A.3	–	Gráfico da densidade de energia ($\rho_T(\lambda)$) pelo comprimento de onda (λ), segundo a formulação proposta por Max Planck para a radiação de corpo negro.	96

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
2	JUSTIFICATIVA	17
3	OBJETIVOS	18
3.1	OBJETIVO GERAL	18
3.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	18
4	REFERENCIAL TEÓRICO	19
4.1	PROBLEMAS INVERSOS DE PRIMEIRA ORDEM	19
4.1.1	Definição	19
4.1.2	Problemas Inversos mal colocados.....	22
4.1.3	Equação Integral de Fredholm de Primeira Ordem	23
4.2	O MÉTODO DE REGULARIZAÇÃO DE TIKHONOV	25
4.2.1	Definição	25
4.2.2	Primeira Restrição	28
4.2.3	Segunda Restrição	29
4.2.4	Terceira Restrição.....	30
4.3	A ORIGEM DO CÁLCULO FRACIONÁRIO	32
4.4	A DERIVADA FRACIONÁRIA DE GRÜNWARD-LETNIKOV	35
4.4.1	Definição	35
4.4.2	Representação matricial do operador derivada de ordem fracionária	41
4.4.3	Caracterização do operador como não local.....	42
4.4.4	Propriedades da derivada de Grünwald-Letnikov	43
4.5	O PROBLEMA INVERSO DA RADIAÇÃO DE CORPO NEGRO	44
5	METODOLOGIA	47
5.1	A DISCRETIZAÇÃO	47
5.2	SIMULAÇÃO DOS DADOS DE ENTRADA	48
5.3	A PROPOSTA DA DERIVADA FRACIONÁRIA - ${}^{GL}\mathbf{D}^{(\alpha)}$	49
5.4	A OBTENÇÃO DO ESPECTRO CALCULADO - \mathbf{g}^{cal}	53
5.5	O MATLAB COMO FERRAMENTA PARA OBTENÇÃO DOS DADOS.....	54

6	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	56
7	CONCLUSÃO	83
	PERSPECTIVAS.....	85
	REFERÊNCIAS.....	86
	APÊNDICES	90

1 INTRODUÇÃO

A Ciência, em essência, envolve dois importantes pilares, situações práticas, com a observação de experimentos, e/ou situações teóricas, onde modelos matemáticos são desenvolvidos. Esses dois alicerces descrevem situações rotineiras na área de Físico-Química. Neste cenário, vários problemas surgem, muitos deles sendo resolvidos por técnicas de Problemas Diretos e outros por técnicas de Problemas Inversos, sempre envolvendo ferramentas matemáticas sofisticadas, como métodos numéricos, cálculo diferencial e integral, regularizações e uso de redes neurais artificiais (FERREIRA, 2016).

Problemas Inversos, de modo geral, são problemas que lidam com a obtenção da causa de algum evento que é inacessível diretamente no laboratório, através de efeitos que podem ser observados diretamente nos experimentos. No entanto, nas rotinas laboratoriais, sempre estão inclusos ruídos que são gerados, geralmente, por erros em medidas experimentais. Neste contexto, Problemas Inversos na presença de erros experimentais, são denotados como Problemas Inversos mal colocados (BRAGA et al., 2016; DE SOUZA, 2009).

Em Físico-Química e áreas de Ciências em geral, a resolução de Problemas Inversos na presença de erros experimentais não é uma tarefa trivial. Muitas vezes, resolver esse tipo de problema por técnicas já conhecidas, como por exemplo o método dos mínimos quadrados, não é suficiente para obter resultados que satisfazem as exigências físicas do problema, como uma norma finita da solução (LEMES, 2018).

Uma maneira de contornar essa dificuldade, é fazer uso de um método de regularização já bastante consagrado na literatura, o método de regularização de Tikhonov, também chamado de critério de regularização de Tikhonov. Método esse desenvolvido por Phillips, em 1962 e por Tikhonov, em 1963 (PHILLIPS, 1962; TIKHONOV, 1963).

Para muitas aplicações, o método de regularização de Tikhonov tem sido usado com grande sucesso (BRAGA, 2001; HANSEN, 1998; LEMES; BRAGA; BELCHIOR, 1998; VOGEL, 2002). No entanto, em alguns casos, como o mostrado neste trabalho, a solução obtida por esse método converge para soluções que são oscilantes e não fornecem resultados fisicamente adequados ao problema. Neste caso, é necessário buscar outras estratégias.

É neste cenário que surge a proposta deste trabalho, descrever e examinar o aperfeiçoamento do método de regularização de Tikhonov através da inclusão da derivada de ordem fracionária como critério adicional. Em outras palavras, a proposta deste estudo, inédita na literatura, consiste em alterar a derivada ordinária no método de Tikhonov por uma derivada de ordem não inteira.

Em uma breve busca na literatura, pode-se encontrar vários trabalhos que motivam o uso da derivada de ordem fracionária como uma alternativa melhor do que a derivada usual de ordem inteira, como em alguns exemplos citados por Sun et al. (2018).

A tendência é que a derivada de ordem fracionária diminua as oscilações da função que se deseja minimizar. Essa informação carrega a motivação para a mudança na ordem das derivadas. Além disso, outra motivação, de grande interesse em diversas áreas da Ciência, é o fato da derivada de ordem fracionária possuir um efeito de memória. Isto significa o mesmo que dizer que o operador derivada de ordem fracionária é caracterizado como um operador não local (LEMES, 2018; WEI et al., 2017; TEODORO; OLIVEIRA; DE OLIVEIRA, 2018). Além do mais, em uma perspectiva mais ampla, fazer uso de uma derivada fracionária pode ajudar na investigação do impacto que o Cálculo Fracionário possui na realização de Problemas Inversos.

No presente trabalho, a formulação de uma derivada fracionária proposta por Grünwald e Letnikov foi utilizada para generalizar o conceito de derivada de ordem inteira para não inteira. Das muitas definições para derivadas de ordem fracionária, a de Grünwald-Letnikov se apresenta com grande aplicabilidade, além de seu uso ser sugestivo quando se trabalha com a resolução de problemas de forma numérica, pelo fato de ser definida por um somatório (DE OLIVEIRA; MACHADO, 2014).

Para testar o modelo matemático proposto neste trabalho, foi preciso aplicá-lo em algum exemplo. Nesse sentido, o problema inverso da radiação do corpo negro foi utilizado como protótipo para investigar o método proposto. Em linhas gerais, esse problema consiste em determinar, a partir do espectro de energia irradiada $g(\nu)$, a distribuição da temperatura superficial, $f(T)$, de uma fonte considerada como um corpo negro (BOJARSKI, 1982).

2 JUSTIFICATIVA

Em uma perspectiva mais ampla, o que motiva trabalhar com Cálculo Fracionário (CF) é descobrir o impacto que esta nova área tem para as Ciências aplicadas. Muitas questões ainda permanecem em aberto e precisam ser investigadas, por exemplo: o fato deste novo ramo da Matemática ainda não possuir nenhuma definição totalmente aceita pela comunidade científica do que possa ser uma derivada fracionária; qual seria uma interpretação física e geométrica adequada; qual o momento mais apropriado para se aplicar uma derivada de ordem não inteira; quando seria mais útil; dentre outros.

É neste contexto que a Química Teórica busca aplicar estes novos conceitos de CF a problemas tanto da Química, quanto da Física, Engenharia e muitas outras áreas do conhecimento, no intuito de elucidar essa nova abordagem da matemática. Além do mais, como se sabe, este é um dos fundamentos da Química Teórica, propor novos caminhos para estudar problemas de interesses gerais na Ciência.

Para alcançar esse objetivo mais amplo, é necessário cautela e ao mesmo tempo precisão, propor caminhos que sejam bem fundamentados pela Matemática. Uma estratégia para tentar entender o significado dessa ordem fracionária é visualizar aplicações dessa derivada em diferentes problemas, aplicar e ver como se comporta o sistema neste caso e analisar o que ocasionou de diferente, isto é, como a ordem fracionária impactou no problema, podendo inferir uma possível interpretação.

Em linhas gerais, o que motiva e justifica o uso do CF, em especial a derivada fracionária, é que essa derivada de ordem não inteira possui uma norma menor do que a proposta pela derivada de ordem inteira. A tendência é que a derivada de ordem fracionária diminua as oscilações da função que se deseja minimizar, isto é, essa derivada filtra essas oscilações, não permitindo que a função exploda (lê-se: vá para infinito). Além, também, da derivada fracionária ser denominada como um operador não local, isto é, possuir um efeito de memória.

3 OBJETIVOS

3.1 OBJETIVO GERAL

Este trabalho tem como objetivo geral analisar o impacto da derivada de ordem fracionária na resolução de um Problema Inverso. Para tal, busca-se a comparação de qual processo recupera melhor as informações de dados experimentais, sendo a norma da função incógnita, ora com a derivada de ordem inteira, ora com a derivada de ordem fracionária. Em outras palavras, o foco do trabalho foi obter uma solução \mathbf{f} , cuja norma residual $\|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}\|$ seja mínima.

3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Para alcançar este objetivo geral, é proposto os seguintes passos:

- a) Utilizar a técnica de discretização de variáveis no problema da radiação de corpo negro - subseção (5.1);
- b) Simular computacionalmente os dados referentes ao espectro de emissão de radiação de corpo negro - subseção (5.2);
- c) Aplicar a técnica de Tikhonov ora com a derivada de ordem inteira, ora com a derivada de ordem fracionária, utilizando a derivada fracionária de Grünwald-Letnikov - subseção (5.3);
- d) Obter, através de um problema direto, o espectro de energia calculado, \mathbf{g}^{cal} - subseção (5.4);
- e) Propor programas (algoritmos) para a solução das equações de interesse através do auxílio do MATLAB - subseção (5.5);
- f) Sugerir uma interpretação, segundo a comparação da ordem das derivadas, da influência do Cálculo Fracionário em Problemas Inversos mal colocados - seção (6).

4 REFERENCIAL TEÓRICO

4.1 PROBLEMAS INVERSOS DE PRIMEIRA ORDEM

4.1.1 Definição

A Matemática é uma linguagem extremamente importante no contexto da Química, Física e Engenharia. Através dela, pode-se obter informações valiosas a respeito de um experimento sob investigação, incluindo desde dados de fácil acesso até dados de difícil acesso e entendimento. Além disso, a Matemática nos possibilita uma visão mais detalhada de um certo experimento, trazendo mais certeza para os dados obtidos. De maneira geral, a ciência dos números e das equações busca dar uma descrição clara, consistente, verificável e útil dos fenômenos da natureza, correlacionando seus efeitos a suas causas (DE SANTANA, 2016).

A estrutura matemática por trás de uma teoria, que descreva dados com efeitos mensuráveis e causas presumidas, pode, de maneira geral, envolver equações integrais, diferenciais ou um emaranhado conjunto delas e pode ser descrita como na equação (4.1) (LEMES, 2018).

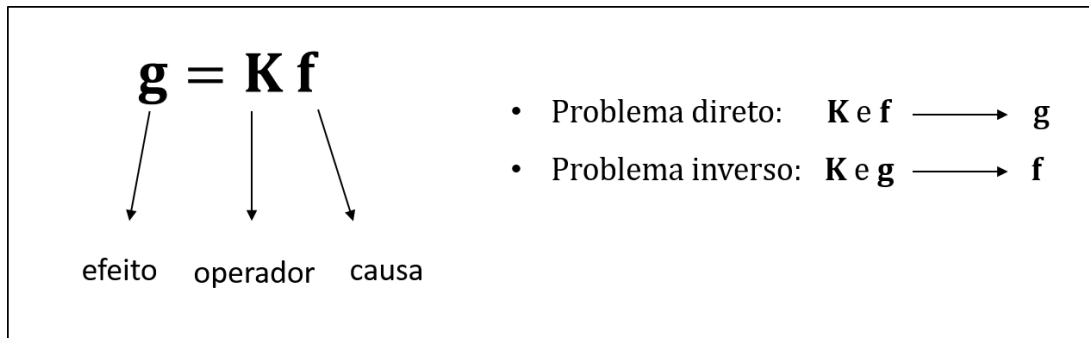
$$\hat{\mathbf{K}}(\mathbf{f}, \mathbf{g}) = 0 \quad (4.1)$$

Na equação (4.1), \mathbf{g} representa alguma propriedade mensurável e \mathbf{f} alguma propriedade inacessível diretamente no laboratório. Tais elementos descrevem o fenômeno a ser investigado e são relacionados pelo operador $\hat{\mathbf{K}}$ que, dentro do escopo da teoria, carregam entre si uma relação de causa (\mathbf{f}) e efeito (\mathbf{g}). Tratando-se de um problema linear, a equação (4.1) pode ser escrita na forma $\mathbf{g} = \mathbf{Kf}$ (BRAGA et al., 2016; FERREIRA, 2016; DE SOUZA, 2009).

Imaginando uma operação matemática (\mathbf{K}) em que algumas informações sobre \mathbf{f} são fornecidas, pode-se obter a solução de \mathbf{g} . Esse é um típico exemplo que os estudantes desde sempre são treinados a resolver, caracterizado como Problema Direto (DE SOUZA, 2009). Entretanto, os cientistas em suas pesquisas laboratoriais estão, a todo momento, lidando com Problemas Inversos, pois o que fazem, de maneira geral, é obter resultados experimentais e se perguntarem a causa daquele efeito (resultado). Sendo assim, a execução de um Problema

Inverso ocorre pela obtenção de \mathbf{f} a partir das informações de \mathbf{K} e \mathbf{g} , como apresentado na Figura 4.1 (BRAGA et al., 2016).

Figura 4.1 – Estrutura matemática de um problema físico, onde a obtenção de \mathbf{g} é realizada por um Problema Direto e a obtenção de \mathbf{f} por um Problema Inverso.



Fonte: Da Autora (2020).

É possível visualizar, com certa clareza, o que representa um Problema Inverso através de um simples exemplo puramente matemático. O exemplo descrito na caixa a seguir, descreve uma simples inversão de uma função escolhida, $y = 10^x$. Portanto, se são fornecidos os valores de entrada, x , facilmente se realiza o Problema Direto e obtém-se o valor de saída, isto é, y (LEMES, 2018).

Neste momento, para encontrar a inversa do operador, representado por $\hat{\mathbf{P}}^{-1}$, é preciso se questionar: qual operação inversa é necessária fazer em y para se obter x ? Assim, é possível entender que essa operação corresponde a função logaritmo na base 10. Portanto, através de y , pode-se obter a informação de x pela resolução de um Problema Inverso (LEMES, 2018).

Na descrição deste exemplo, pode-se perceber que o operador inverso existe. Portanto, para realizar o Problema Inverso e inverter a função que foi usada como exemplo, tem-se a função logaritmo na base 10. No entanto, nem sempre é possível conhecer o operador inverso. Nesses casos, é preciso tomar caminhos diferentes envolvendo métodos de regularização (BRAGA et al., 2016), como no caso deste trabalho, onde foi utilizada a regularização de Tikhonov como estratégia.

De modo geral, ao fazer uso do método de Tikhonov é possível tornar os vetores, que antes eram quase linearmente dependentes (QLD), em vetores com linhas linearmente independentes (LI). Em outras palavras, a solução foi regularizada. Dessa forma, não se tem mais, em tese, a dificuldade de calcular a inversa que se tinha antes.

Exemplo simples de uma inversão:

- *Estrutura matemática:* $\mathbf{y} = \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{x})$;
- *Função exemplo:* $\mathbf{y} = 10^{\mathbf{x}}$;
- *Problema Direto:* se $\mathbf{x} = 1$, então $\mathbf{y} = 10$;
- *Problema Inverso:* $\mathbf{x} = \hat{\mathbf{P}}^{-1}(\mathbf{y})$, logo $\mathbf{x} = \log_{10} \mathbf{y}$,
sendo assim, se $\mathbf{y} = 100$, então $\mathbf{x} = 2$.

Em linhas gerais, a partir da nomenclatura utilizada no trabalho ($\mathbf{g} = \mathbf{Kf}$), tem-se que a obtenção de \mathbf{f} , a partir de \mathbf{g} e \mathbf{K} , é tratada como um Problema Inverso de primeira ordem. No caso de \mathbf{f} e \mathbf{g} serem conhecidos e a obtenção do operador \mathbf{K} for o objetivo (por exemplo, quando se busca o modelo físico que descreve a relação causa/efeito), esse problema é tratado como Problema Inverso de segunda ordem. No entanto, vale ressaltar, que os Problemas Inversos de segunda ordem geralmente não possuem solução única e costumam ser de resolução mais complicada do que os de primeira ordem (DE SOUZA, 2009).

Por fim, vale comentar que um matemático ao tratar um Problema Inverso não encontra muitas dificuldades, pois, a rigor, sem lidar com erros experimentais as complicações todas somem. Entretanto, para os pesquisadores que lidam com áreas experimentais, como os químicos, por exemplo, ao estudar esse tipo de problema se deparam com inúmeras dificuldades, afinal, diferente dos matemáticos, esses lidam, a todo momento, com erros experimentais. Nesse sentido, Problemas Inversos, considerando a presença de erros experimentais, são denominados como Problemas Inversos mal colocados (ZHDANOV, 2009).

4.1.2 Problemas Inversos mal colocados

Os primeiros estudos envolvendo um Problema Inverso foram desenvolvidos pelo matemático norueguês Niels Henrik Abel (1802 – 1829), em 1826. Mesmo não considerando a presença de erros experimentais, Abel foi o primeiro cientista a propor uma formulação matemática rigorosa para a teoria de Problemas Inversos, tornando-se assim o precursor para outros estudos (ABEL, 2012).

Em 1923, quase cem anos depois do trabalho de Abel, o matemático francês Jacques Salomon Hadamard (1865 – 1963) elucidou as condições para um Problema Inverso ser considerado como mal colocado (HADAMARD, 1923). Segundo Hadamard, um problema é considerado como bem colocado se satisfizer três seguintes condições, a saber:

- a) a solução deve existir (existência);
- b) a solução deve ser única (unicidade); e
- c) a solução deve depender continuamente dos dados (continuidade).

Em outras palavras, pode-se dizer que para uma faixa arbitrária de dados, deve-se, necessariamente, existir uma solução; além disso, a solução precisa ser única; e, por fim, que deve-se existir uma dependência contínua entre os dados de entrada e os dados de saída. Se qualquer uma dessas condições não for satisfeita, tem-se um problema mal colocado (DE SOUZA, 2009).

Os Problemas Inversos representam um novo horizonte para as ciências experimentais, como é o caso da Química. Hoje em dia, é possível modelar matematicamente com precisão vários fenômenos que ocorrem na natureza e em laboratórios de pesquisa (DE SANTANA, 2016).

Com o emprego dos dados experimentais, torna-se imprescindível o uso de técnicas matemáticas adequadas, a fim de se modelar tais experimentos. Isso se torna mais evidente quando se tem problemas mal colocados, bastante corriqueiros em diversas áreas da Ciência (DE SOUZA, 2009).

Para seguir nessa linha de pesquisa, é de extrema importância se atentar aos pré-requisitos básicos para o entendimento adequado de Problemas Inversos mal colocados, que são compreender o conceito de existência, unicidade e continuidade. Investigar problemas em que a solução possa não existir, não ser única ou então não ser contínua é, certamente, um grande desafio em Química e em outras áreas da Ciência em geral (BRAGA et al., 2016).

De maneira geral, diversos experimentos em Físico-Química e em outras áreas experimentais, podem ser modelados através de integrais. Neste contexto, uma das equações mais utilizadas é conhecida como Equação Integral de Fredholm (FERREIRA, 2012).

4.1.3 Equação Integral de Fredholm de Primeira Ordem

A representação de diversos problemas das áreas de exatas, como problemas físicos, podem envolver técnicas que são de difícil desenvolvimento e entendimento. Desta forma, é sempre buscado novas maneiras de simplificar essa complexidade, através de equações integrais, que se apresentam de forma mais acessível (FERREIRA, 2016).

A estrutura de uma Equação de Fredholm de primeira ordem, equação (4.2), pode ser interpretada da seguinte maneira (DE SOUZA, 2009):

$$g(x) = \int_a^b K(x,y)f(y)dy, \quad (4.2)$$

1. a função $f(y)$ representa uma entrada;
2. o núcleo da integral, $K(x,y)$, se refere a um operador que será aplicado sobre a entrada; e
3. a função $g(x)$, a saída do processo.

A equação (4.2) fornece a mesma interpretação comentada anteriormente, onde para se obter $g(x)$ é preciso conhecer o núcleo da integral $K(x,y)$ e as informações de $f(y)$. Neste caso, esse processo é classificado como um Problema Direto. Por outro lado, a partir das informações de $g(x)$ e $K(x,y)$, tem-se $f(y)$, denominado como Problema Inverso (FERREIRA, 2016).

Para ampliar a representação da Equação de Fredholm de primeira ordem suponha que essa equação deva ser calculada nos pontos x_1, x_2, \dots, x_m . Dessa forma, tem-se um conjunto de

equações, exposto em (4.3).

$$\begin{aligned}
 g(x_1) &= \int_a^b K(x_1, y) f(y) dy \\
 g(x_2) &= \int_a^b K(x_2, y) f(y) dy \\
 &\vdots \\
 g(x_m) &= \int_a^b K(x_m, y) f(y) dy
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Resolvendo a Equação de Fredholm para um x_i fixo, tem-se a equação (4.4) e, por conseguinte, a equação (4.5). A equação (4.6) é a forma simplificada de (4.5), onde $K_{ij} = w_j K(x_i, y_j)$, $f_j = f(y_j)$ e $g_i = g(x_i)$.

$$g(x_i) = \int_a^b K(x_i, y) f(y) dy \tag{4.4}$$

$$g(x_i) = \sum_{j=1}^m w_j K(x_i, y_j) f(y_j) \tag{4.5}$$

$$g_i = \sum_{j=1}^m K_{ij} f_j \tag{4.6}$$

Todo esse processo fornece a equação (4.7) que, em linhas gerais, representa a Equação de Fredholm de primeira ordem em seu formato matricial (DE SOUZA, 2009).

$$\mathbf{g} = \mathbf{Kf} \tag{4.7}$$

Na equação (4.2), é importante dar ênfase aos limites de integração, são eles que dão sentido a representação dessa equação como uma Equação de Fredholm de primeira ordem. Isso é tão verdade se e somente se, b for uma constante ou infinito. No caso de b ser igual a uma função, por exemplo, $b = x$, essa equação seria denotada como Equação Integral de Volterra de primeira ordem (LEMES, 2018).

A equação da radiação de corpo negro, alvo neste trabalho, é um típico exemplo de uma Equação de Fredholm de primeira ordem. Dessa forma, é preciso lembrar que resolver o problema inverso da radiação de corpo negro não se trata de uma tarefa trivial, uma vez que é preciso considerar a presença do erro experimental e que, sendo assim, trata-se de um problema

mal colocado (SUN; JAGGARD, 1987).

É preciso então “lançar mão” de técnicas que regularizem as soluções de interesse e que contornem os problemas gerados, quando se considera a presença de erros. Um método já bastante consagrado na literatura se refere ao método de regularização proposto pelo matemático russo Andrei Nikolaevich Tikhonov, em 1963 (TIKHONOV, 1963).

4.2 O MÉTODO DE REGULARIZAÇÃO DE TIKHONOV

4.2.1 Definição

Um método bastante empregado na literatura para encontrar o mínimo de uma função que diminua a diferença entre um valor calculado e um valor experimental, conhecido como Método dos Mínimos Quadrados, é descrito pela equação (4.8) (DE SOUZA, 2009).

$$\Phi(\mathbf{f}) = \|\mathbf{K}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 = \sum_i \left(\sum_j K_{ij}f_j - g_i \right)^2 \quad (4.8)$$

Para encontrar uma função \mathbf{f} que minimize a norma do resíduo, $\|\mathbf{K}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2$, deve-se derivar o funcional $\Phi(\mathbf{f})$ em relação a f_j , para $j = 1, 2, 3, \dots, n$ e impor a condição de encontrar um mínimo, isto é, igualar a zero, conforme mostra a equação (4.9). Na continuidade, tem-se então a equação (4.10), onde $i = 1, 2, 3, \dots, m$ e que, na forma matricial, pode ser reescrita conforme mostra a equação (4.11) (LEMES, 2018).

$$\left. \frac{\partial \Phi(\mathbf{f})}{\partial f_j} \right|_{f_j^*} = 0 \quad (4.9)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi(\mathbf{f})}{\partial f_j} \right|_{f_j^*} = 2 \sum_i \left(\left[\sum_j K_{ij}f_j^* \right] K_{ij} \right) - 2 \sum_i g_i K_{ij} = 0 \quad (4.10)$$

$$\mathbf{K}^T \mathbf{K} \mathbf{f}^* = \mathbf{K}^T \mathbf{g} \quad (4.11)$$

Por fim, pode-se chegar na equação (4.12), onde a parcela $(\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T$, é conhecida como inversa de Moore-Penrose ou ainda como Pseudo Inversa. Para matrizes quadradas ($n =$

m) tem-se $(\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T = \mathbf{K}^{-1}$ (COSTA, 2013).

$$\mathbf{f}^* = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{g} \quad (4.12)$$

Dessa forma, pode-se dizer que a solução encontrada pela equação (4.12) satisfaz a condição estabelecida pelo método dos mínimos quadrados, ou seja, a solução fornece uma norma residual mínima. Contudo, a solução por meio desta equação fornece uma norma de \mathbf{f} ($\|\mathbf{f}\|$) fisicamente inaceitável (LEMES, 2018).

Em outras palavras, a resolução de um problema por meio do método dos mínimos quadrados minimiza a norma do resíduo, $\|\mathbf{K}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|$, às custas de uma norma da solução, $\|\mathbf{f}\|$, que apresenta muitas oscilações. Desta forma, é preciso fazer uso de técnicas de regularização (BRAGA et al., 2016).

Uma técnica muito explorada na literatura é o método de regularização de Tikhonov, proposto em 1963 pelo matemático russo Andrei Nikolaevich Tikhonov (1906 – 1993) (TIKHONOV, 1963). Este método consiste em adicionar informações extras ao método dos mínimos quadrados, transformando a equação (4.8) na equação (4.13),

$$\Phi_\lambda(\mathbf{f}) = \|\mathbf{K}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 + \lambda^2 \|\mathbf{L}\mathbf{f}\|^2. \quad (4.13)$$

Na equação acima, λ , chamado de parâmetro de regularização, representa um valor a ser encontrado que controla o balanço entre a norma do resíduo e a norma da restrição adicional. Este parâmetro é geralmente obtido por uma curva-L e é responsável por pesar as restrições adicionais (COSTA, 2017). Mais detalhes são apresentados na Seção 5.

Na equação (4.13), \mathbf{L} representa um operador usualmente expresso na forma da equação (4.14), em que a_0 , a_1 e a_2 são valores constantes e iguais a 0 ou 1, dependendo das condições a serem impostas. A função $\hat{\mathbf{f}}$ é um valor inicial estimado para a solução, em muitos casos escolhe-se atribuir $\hat{\mathbf{f}} = 0$ (BRAGA, 2001).

$$\|\mathbf{L}\mathbf{f}\|^2 = a_0 \left\| \mathbf{f} - \hat{\mathbf{f}} \right\|^2 + a_1 \left\| \frac{d\mathbf{f}}{dx} \right\|^2 + a_2 \left\| \frac{d^2\mathbf{f}}{dx^2} \right\|^2 \quad (4.14)$$

Juntando as equações (4.13) e (4.14), pode-se obter a equação (4.15), a seguir:

$$\Phi_\lambda(\mathbf{f}) = \|\mathbf{K}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 + \lambda^2 \left(a_0 \|\mathbf{f} - \hat{\mathbf{f}}\|^2 + a_1 \left\| \frac{d\mathbf{f}}{dx} \right\|^2 + a_2 \left\| \frac{d^2\mathbf{f}}{dx^2} \right\|^2 \right). \quad (4.15)$$

Pode-se definir a quantidade $\varepsilon_i = \sum_{j=1}^n K_{ij}f_j - g_i$ e ampliar a descrição do funcional descrito em (4.15), como segue a equação:

$$\begin{aligned} \Phi_\lambda(\mathbf{f}) = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 + \lambda^2 \left\{ a_0 \sum_{j=1}^n (f_j - \hat{f}_j)^2 + a_1 \sum_{j=1}^{n-1} (f_{j+1} - f_j)^2 \right. \\ \left. + a_2 \sum_{j=1}^{n-2} (f_{j+2} - 2f_{j+1} + f_j)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Portanto, seguindo a mesma lógica descrita para o método dos mínimos quadrados, é preciso encontrar um mínimo para a equação (4.16), como mostra a equação (4.17). Dessa forma, para encontrar uma solução ótima, é preciso derivar e impor a condição de mínimo, isto é, igualar a zero (4.17) (LEMES, 2018).

$$\mathbf{f}_\lambda = \min_{\mathbf{f}} \Phi_\lambda(\mathbf{f}) \quad \therefore \quad \frac{\partial \Phi_\lambda(\mathbf{f})}{\partial f_j} = 0 \quad (4.17)$$

Resolvendo a equação acima, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_\lambda(\mathbf{f})}{\partial f_j} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \varepsilon_i^2}{\partial \varepsilon_i} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial f_j} \right) + \lambda^2 \{ 2a_0(f_j - \hat{f}_j) - 2a_1(f_{j+1} - f_j) + 2a_1(f_j - f_{j-1}) \\ + 2a_2(f_{j+2} - 2f_{j+1} + f_j) - 4a_2(f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}) + 2a_2(f_j - 2f_{j-1} + f_{j-2}) \} = 0, \end{aligned} \quad (4.18)$$

para j entre 1 e n . Rearranjando a equação (4.18), chega-se na expressão

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \left(\left[\sum_{j=1}^n K_{ij}f_j \right] K_{ij} \right) - \sum_{i=1}^n g_i K_{ij} - \lambda^2 a_0 \hat{f}_j + \lambda^2 \{ a_0 f_j - a_1 (f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}) \\ + a_2 (f_{j+2} - 4f_{j+1} + 6f_j - 4f_{j-1} + f_{j-2}) \} = 0, \end{aligned} \quad (4.19)$$

e, finalmente, na equação matricial

$$\mathbf{K}^T \mathbf{K} \mathbf{f} - \mathbf{K}^T \mathbf{g} - \lambda^2 a_0 \hat{\mathbf{f}} + \lambda^2 \{ a_0 \mathbf{H}_0 + a_1 \mathbf{H}_1 + a_2 \mathbf{H}_2 \} \mathbf{f} = 0. \quad (4.20)$$

A equação (4.20) é geralmente expressa em termos da solução \mathbf{f} , que agora está regularizada, \mathbf{f}_{reg} . Portanto, é possível reescrevê-la conforme mostra a equação (4.21), onde \mathbf{H}_0 representa a matriz identidade \mathbf{I} , \mathbf{H}_1 representa o operador derivada de ordem um e, por fim, \mathbf{H}_2 representa o operador derivada de ordem dois (BRAGA, 2001).

$$\mathbf{f}_{\text{reg}} = \{\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \lambda^2(a_0 \mathbf{H}_0 + a_1 \mathbf{H}_1 + a_2 \mathbf{H}_2)\}^{-1} (\mathbf{K}^T \mathbf{g} + \lambda^2 a_0 \hat{\mathbf{f}}) \quad (4.21)$$

Métodos que regularizam funções são de grande importância na resolução de Problemas Inversos devido, principalmente, aos erros embutidos nos dados experimentais e aos de arredondamento (BRAGA et al., 2016). Portanto, levando em conta o contexto deste trabalho, torna-se sugestivo analisar separadamente as três restrições adicionais expostas pela equação (4.14).

4.2.2 Primeira Restrição

Considere a reformulação da primeira parte da equação (4.14), associada à constante a_0 , na equação (4.22) a seguir.

$$\|\mathbf{L}\mathbf{f}\|^2 = a_0 \|\mathbf{f} - \hat{\mathbf{f}}\|^2 = a_0 \sum_{j=1}^n (f_j - \hat{f}_j)^2 \quad (4.22)$$

Deve-se encontrar uma função \mathbf{f} que minimize o funcional descrito na equação (4.23). O processo para encontrar o mínimo de uma função é bem conhecido, basta derivar e igualar a zero, como foi mostrado na equação (4.17) (LEMES, 2018).

$$\Phi_\lambda(\mathbf{f}) = \|\mathbf{K}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 + \lambda^2 a_0 \|\mathbf{f} - \hat{\mathbf{f}}\|^2 \quad (4.23)$$

Dessa forma, após derivar o funcional acima, encontra-se a solução \mathbf{f} descrita da forma:

$$\mathbf{f} = (\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \lambda^2 a_0 \mathbf{I})^{-1} (\mathbf{K}^T \mathbf{g} + \lambda^2 a_0 \hat{\mathbf{f}}), \quad (4.24)$$

em que \mathbf{I} representa uma matriz identidade. Note que se $\lambda = 0$, a solução retorna para o caso descrito pelo método dos mínimos quadrados, descrito pela equação (4.12) (DE SOUZA, 2009).

4.2.3 Segunda Restrição

A definição de derivada primeira pode ser representada na forma

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (4.25)$$

A equação (4.25) é bem conhecida por todos os estudantes de exatas. Entretanto, a representação de uma derivada em sua forma matricial não é tão conhecida como a definição (4.25). Sendo assim, é sugestivo mostrar como é feita a representação matricial de equações provindas de derivadas (LEMES, 2018).

Dessa forma, para analisar a forma matricial da segunda restrição, referente à norma da derivada primeira de \mathbf{f} (ver equação (4.14)), considere inicialmente os pontos arbitrários a seguir,

$$\|\mathbf{Lf}\|^2 = a_1 \left\| \frac{d\mathbf{f}}{dx} \right\|^2 = \frac{a_1}{h^2} [(f_2 - f_1)^2 + (f_3 - f_2)^2 + (f_4 - f_3)^2]. \quad (4.26)$$

Calculando as derivadas parciais, pode-se obter como resultado as equações apresentadas em (4.27).

$$\begin{aligned} \frac{\partial \|\mathbf{Lf}\|^2}{\partial f_1} &= \frac{a_1}{h^2} [2(f_2 - f_1)(-1)] = 2\frac{a_1}{h^2} (f_1 - f_2) = 0 \\ \frac{\partial \|\mathbf{Lf}\|^2}{\partial f_2} &= \frac{a_1}{h^2} [2(f_2 - f_1) + 2(f_3 - f_2)(-1)] = 2\frac{a_1}{h^2} (-f_1 + 2f_2 - f_3) = 0 \\ \frac{\partial \|\mathbf{Lf}\|^2}{\partial f_3} &= \frac{a_1}{h^2} [2(f_3 - f_2) + 2(f_4 - f_3)(-1)] = 2\frac{a_1}{h^2} (-f_2 + 2f_3 - f_4) = 0 \\ \frac{\partial \|\mathbf{Lf}\|^2}{\partial f_4} &= \frac{a_1}{h^2} [2(f_4 - f_3)] = 2\frac{a_1}{h^2} (-f_3 + f_4) = 0 \end{aligned} \quad (4.27)$$

Portanto, as equações parciais descritas em (4.27) podem ser então agrupadas na forma de matrizes, como é apresentado na equação (4.28) (DE SOUZA, 2009).

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \|\mathbf{Lf}\|^2}{\partial f_1} &= 2\frac{a_2}{h^4}[(f_3 - 2f_2 + f_1)] = 2\frac{a_2}{h^4}(f_1 - 2f_2 + f_3) = 0 \\
\frac{\partial \|\mathbf{Lf}\|^2}{\partial f_2} &= 2\frac{a_2}{h^4}[(f_3 - 2f_2 + f_1)(-2) + (f_4 - 2f_3 + f_2)] \\
&= 2\frac{a_2}{h^4}(-2f_1 + 4f_2 - 2f_3 + f_2 - 2f_3 + f_4) \\
&= 2\frac{a_2}{h^4}(-2f_1 + 5f_2 - 4f_3 + f_4) = 0 \\
\frac{\partial \|\mathbf{Lf}\|^2}{\partial f_3} &= 2\frac{a_2}{h^4}[(f_3 - 2f_2 + f_1) + (f_4 - 2f_3 + f_2)(-2) + (f_5 - 2f_4 + f_3)] \\
&= 2\frac{a_2}{h^4}(f_1 - 2f_2 + f_3 - 2f_2 + 4f_3 - 2f_4 + f_3 - 2f_4 + f_5) \\
&= 2\frac{a_2}{h^4}(f_1 - 4f_2 + 6f_3 - 4f_4 + f_5) = 0 \\
\frac{\partial \|\mathbf{Lf}\|^2}{\partial f_4} &= 2\frac{a_2}{h^4}[(f_4 - 2f_3 + f_2) + (f_5 - 2f_4 + f_3)(-2) + (f_6 - 2f_5 + f_4)] \\
&= 2\frac{a_2}{h^4}(f_2 - 2f_3 + f_4 - 2f_3 + 4f_4 - 2f_5 + f_4 - 2f_5 + f_6) \\
&= 2\frac{a_2}{h^4}(f_2 - 4f_3 + 6f_4 - 4f_5 + f_6) = 0 \\
\frac{\partial \|\mathbf{Lf}\|^2}{\partial f_5} &= 2\frac{a_2}{h^4}[(f_5 - 2f_4 + f_3) + (f_6 - 2f_5 + f_4)(-2)] \\
&= 2\frac{a_2}{h^4}(f_3 - 2f_4 + f_5 - 2f_4 + 4f_5 - 2f_6) \\
&= 2\frac{a_2}{h^4}(f_3 - 4f_4 + 5f_5 - 2f_6) = 0 \\
\frac{\partial \|\mathbf{Lf}\|^2}{\partial f_6} &= 2\frac{a_2}{h^4}[(f_6 - 2f_5 + f_4)] = 2\frac{a_2}{h^4}(f_4 - 2f_5 + f_6) = 0
\end{aligned} \tag{4.34}$$

As equações agregadas em (4.34) podem ser representadas por sua forma matricial, como mostra a equação (4.35) (DE SOUZA, 2009).

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 5 & -4 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -4 & 5 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \\ f_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{4.35}$$

De maneira geral, esse cálculo clássico tem como foco a resolução e descrição de fenômenos que envolvem movimento e variação que, na linguagem da matemática, estão associados aos conceitos de área e tangente. Em outras palavras, o formalismo desse cálculo de ordem inteira se ocupa, essencialmente, com a resolução de dois problemas geométricos particulares, o problema das áreas e o problema das tangentes, o que dá nome aos dois principais ramos dessa Ciência, o cálculo integral e o cálculo diferencial, respectivamente (ANTON; BIVENS; DAVIS, 2014; FULINI, 2016; CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015).

Existem indícios na história da Matemática de que o matemático inglês Issac Barrow, um professor de Newton, tenha sido o primeiro a descobrir uma ligação entre esses dois ramos do cálculo. No entanto, somente Newton e Leibniz foram capazes de compreender a verdadeira importância desta relação e explorá-la de maneira adequada. Foi então que, no fim do século XVII e meados do século XVIII, eles (independentes um do outro) desenvolveram o cálculo diferencial e integral, fundindo os dois ramos do cálculo (CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015; OLIVEIRA, 2010; TEODORO; OLIVEIRA; DE OLIVEIRA, 2018).

O que eles fizeram, em outras palavras, foi relacionar esses dois problemas através do chamado *teorema fundamental do cálculo*,

$$(DJf)(t) = f(t) \quad (4.39)$$

onde D representa a derivada e J a integral.

Há quem diga que é impossível datar uma futura teoria, pois convenhamos, parece loucura prever o nascimento de alguma teoria que ainda não é conhecida. No entanto, não é o que parece ao que diz respeito a teoria do Cálculo Fracionário (CF). A história da Matemática conta que o CF surgiu da troca de correspondência entre L'Hôpital e Leibniz, onde o assunto principal foi derivada (CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015).

Em suas correspondências, Leibniz propôs uma possível generalização para a derivada de ordem inteira para uma derivada de ordem, a princípio, arbitrária. Foi então que L'Hôpital devolveu a pergunta para Leibniz, questionando para o caso particular em que a ordem da derivada fosse meio, isto é, fracionária (TEODORO; OLIVEIRA; DE OLIVEIRA, 2018).

Em outras palavras, L'Hôpital questionou a interpretação do significado, na notação de

Leibniz $d^n y/dx^n$ (com $n = 1, 2, \dots$), quando $n = 1/2$. A resposta de Leibniz à questão levantada por L'Hôpital é conhecida pela sua audácia e esperteza quanto a ver além; a saber sua resposta: “isto é, aparentemente, um paradoxo que um dia vai gerar várias consequências importantes” (CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015; LEMES, 2018).

A carta enviada a L'Hôpital, com a resposta a seu questionamento e uma possível formulação (deixando claro ser, naquele tempo, um paradoxo), datada de 30 de setembro de 1695, é considerada, através de um consenso na comunidade científica, como sendo a data de nascimento do chamado Cálculo Fracionário. Sendo assim, Leibniz é considerado, além de um dos criadores do cálculo de ordem inteira, o pai do Cálculo Fracionário (CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015).

É importante salientar que nos últimos três séculos, a questão se estendeu sendo também colocada para α irracional (π) ou complexo (i). Portanto, os termos Cálculo de Ordem Arbitrária, ou Cálculo de Ordem Não Inteira, ou ainda, Cálculo de Ordem Generalizada, seriam maneiras mais abrangentes de se referir ao assunto, porém Cálculo Fracionário (CF) é o termo consagrado na literatura e de longe o mais utilizado (OLIVEIRA, 2010).

Torna-se válido ainda ressaltar a importância do CF fazendo uma analogia à Mecânica Quântica. Assim como a Mecânica de Newton parecia estar completa até o surgimento das teorias de Planck, Einstein, e outros, o Cálculo Diferencial e Integral também parecia estar completo, e com o advento do Cálculo Fracionário, existe agora uma evolução, cujas consequências podem ser tão formidáveis quanto às advindas da Física Quântica (LEMES, 2018).

Acredita-se que este novo ramo da Matemática só se tornará realmente popular entre os cientistas quando existir um problema que é solucionado apenas com os conceitos do CF. A Mecânica Clássica, já muito bem desenvolvida no final do século XIX, não foi capaz de explicar fenômenos que aconteciam a nível microscópico. Foi então que, a partir dos estudos da radiação de corpo negro, a Mecânica Quântica ganhou voz na comunidade científica e proporcionou tecnologias que encantaram toda a população e cientistas. Portanto, acredita-se que o CF atrairá os olhares da Ciência, seguindo o mesmo caminho percorrido pela Mecânica Quântica, quando surgiu e ganhou popularidade (LEMES, 2018).

Em linhas gerais, pode-se dizer que existem ainda muitas lacunas a serem preenchidas neste contexto do CF, por exemplo, como interpretar geometricamente e fisicamente uma de-

rivada fracionária, ou qual o problema mais adequado para se aplicar uma derivada de ordem não inteira. Esses e outros questionamentos foram levantados no seu surgimento em 1695 e, curiosamente, perduram até hoje (OLIVEIRA, 2010).

Existem várias formulações possíveis para uma derivada fracionária, cada uma mais adequada para um problema físico que outra. As definições mais conhecidas são as de Riemann-Liouville, Caputo, Grünwald-Letnikov, Liouville, Weyl e Riesz-Feller (CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015).

A pergunta que cabe neste momento é: por que tantas formulações de derivadas fracionárias? Por que não existe uma generalizada que pode ser aplicada em todos os casos, como a derivada de ordem inteira? Muito se precisa analisar, mas de antemão, pode-se dizer que este é um dos grandes desafios para quem trabalha neste ramo da Matemática (LEMES, 2018).

A formulação de derivada fracionária proposta por Grünwald-Letnikov é uma derivada muito utilizada na literatura (CAMARGO, 2009; TEODORO; MACHADO; DE OLIVEIRA, 2019). Esta formulação é o alvo deste trabalho, portanto, merece um olhar mais abrangente, como segue no próximo tópico.

4.4 A DERIVADA FRACIONÁRIA DE GRÜNWALD-LETNIKOV

4.4.1 Definição

Em 1868, o matemático russo Aleksey Vasilievich Letnikov (1837 – 1888) propôs, em sua dissertação de mestrado, a derivada que é alvo deste tópico. Conta a história da Matemática que, até a data da sua defesa, Letnikov não teve conhecimento do artigo proposto em 1867 pelo matemático austríaco Anton Karl Grünwald (1838 – 1920), onde a mesma sugestão foi feita. Nos tempos atuais, a equação proposta por esses dois matemáticos é conhecida como derivada fracionária de Grünwald-Letnikov (GRÜNWALD, 1867; LETNIKOV, 1868; LEMES, 2018).

A derivada fracionária, segundo Grünwald e Letnikov, começa pela tentativa de fornecer uma generalização para uma equação de ordem inteira (DUMITRU; KAI; ENRICO, 2012; OLDHAM; SPANIER, 1974). Portanto, inicialmente, considere a derivada primeira definida

como,

$$\frac{df(t)}{dt} = f'(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t) - f(t-h)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} [f(t) - f(t-h)]. \quad (4.40)$$

A definição (4.40) é bastante conhecida por todos que se encontram no contexto das áreas de exatas. Dessa forma, pode-se expressar a derivada segunda como,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f(t)}{dt^2} &= \frac{df'(t)}{dt} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f'(t) - f'(t-h)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \left[\frac{f(t) - f(t-h)}{h} - \frac{f(t-h) - f(t-2h)}{h} \right] \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^2} [f(t) - 2f(t-h) + f(t-2h)]. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Repetindo a mesma ideia anterior para a derivada terceira, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{d^3 f(t)}{dt^3} &= \frac{df''(t)}{dt} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f''(t) - f''(t-h)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \left[\frac{f'(t) - f'(t-h)}{h} - \frac{f'(t-h) - f'(t-2h)}{h} \right] \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^2} \left[\frac{f(t) - f(t-h)}{h} - \frac{f(t-h) - f(t-2h)}{h} - \frac{f(t-h) - f(t-2h)}{h} + \frac{f(t-2h) - f(t-3h)}{h} \right] \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^3} [f(t) - 3f(t-h) + 3f(t-2h) - f(t-3h)] \end{aligned} \quad (4.42)$$

e, na sequência, para a derivada quarta o resultado é

$$\begin{aligned} \frac{d^4 f(t)}{dt^4} &= \frac{df'''(t)}{dt} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f'''(t) - f'''(t-h)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^2} [f''(t) - f''(t-h) - f''(t-h) + f''(t-2h)] \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^3} [f'(t) - f'(t-h) - f'(t-h) + f'(t-2h) - f'(t-h) + f'(t-2h) + f'(t-2h) - f'(t-3h)] \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^3} \left[\frac{f(t) - f(t-h)}{h} - \frac{f(t-h) - f(t-2h)}{h} - \frac{f(t-h) - f(t-2h)}{h} + \frac{f(t-2h) - f(t-3h)}{h} \right. \\ &\quad \left. - \frac{f(t-h) - f(t-2h)}{h} + \frac{f(t-2h) - f(t-3h)}{h} + \frac{f(t-2h) - f(t-3h)}{h} - \frac{f(t-3h) - f(t-4h)}{h} \right] \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^4} [f(t) - 4f(t-h) + 6f(t-2h) - 4f(t-3h) + f(t-4h)]. \end{aligned} \quad (4.43)$$

O *insight* que Grünwald e Letnikov tiveram foi visualizar, por meio das equações (4.40-4.43), um padrão surgindo (PODLUBNY, 1999; LEMES, 2018). Eles propuseram generalizar

as equações anteriores na forma

$$\frac{d^n f(t)}{dt^n} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^n} \sum_{k=0}^n (-1)^k C_{n,k} f(t - kh), \quad (4.44)$$

para $n = 1, 2, 3$ e 4 , onde o coeficiente binomial, $C_{n,k}$, é dado por

$$C_{n,k} = \binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}. \quad (4.45)$$

Este resultado ainda é válido para $n = 5, 6, 7, \dots$

Para obter uma derivada fracionária, a primeira intuição de qualquer pessoa é tratar, na equação (4.44), $n = 1/2$, por exemplo. Assim, pode-se dizer que chegamos então em uma definição de uma derivada fracionária? Ainda não! Não é uma tarefa tão trivial como muitos recém-chegados na área e leigos acreditam. Segundo alguns, “*basta derivar, ao invés de um número inteiro, um número fracionário*”.

Neste momento, na tentativa de definir uma derivada fracionária surgia o primeiro empecilho, pois o que se sabia era que a função fatorial era bem definida para números inteiros positivos e não números fracionários, como $\frac{1}{2}!$. A estratégia encontrada para contornar este problema foi dada pelo matemático e físico suíço Leonhard Paul Euler (1707 – 1783), em 1730 (RAMÍREZ, 2015).

O recurso consistia em usar a interpolação entre a função fatorial e a função gama, que é válida tendo como pano de fundo a propriedade $(x - 1)! = \Gamma(x)$, onde a função gama é representada por $\Gamma(x)$. Portanto, esse coeficiente binomial em termos da função gama pode ser observado pela equação (4.46) (LEMES, 2018).

$$C_{n,k} = \binom{n}{k} = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(n-k+1)} \quad (4.46)$$

Nota-se que agora é possível tratar $n = \alpha$, onde α representa uma ordem fracionária

para o operador derivada, como mostra a equação (4.47).

$$C_{\alpha,k} = \binom{\alpha}{k} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\alpha-k+1)} \quad (4.47)$$

Uma nova estratégia para um cálculo mais sofisticado, levando em consideração a fórmula de recorrência para os coeficientes binomiais, é descrita pela equação (4.48). Esta fórmula proporciona uma maior rapidez e estabilidade na convergência dos cálculos (LEMES, 2018).

$$C_{\alpha,k}^* = \left(1 - \frac{\alpha+1}{k}\right) C_{\alpha,k-1}^* \quad (4.48)$$

Por fim, chega-se então a equação (4.49) que é conhecida como derivada fracionária de Grünwald-Letnikov (DE OLIVEIRA; MACHADO, 2014; TEODORO; MACHADO; DE OLIVEIRA, 2019),

$$[{}^{GL}D^{(\alpha)}f](t) = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^N (-1)^k C_{\alpha,k}^* f(t-kh), \quad (4.49)$$

onde $\alpha \in \mathbb{R}^+$ e $N = \lceil t/h \rceil$, isto é, N é o maior inteiro mais próximo de t/h . Vale comentar que, além da notação usada na equação (4.49), as notações a seguir também são usuais no contexto de derivadas fracionárias,

$$\frac{d^\alpha f(t)}{dt^\alpha} = f^{(\alpha)} = D^\alpha f. \quad (4.50)$$

É possível realizar a implementação numérica da derivada de Grünwald-Letnikov, equação (4.49), através do software MATLAB. Dessa forma, a subrotina a seguir, *derivadagl*, apresenta o resultado para a derivada fracionária, DGL, para função $f(t) = \text{sen}(t)$. Os *inputs* do código são *tmax*, *dt*, *h* e *a*. Isto significa dizer que $a = \alpha$ e que a função $d^\alpha f(t)/dt^\alpha$ é calculada para t entre 0 e *tmax* e *h* representa o limite infinitesimal.

É importante salientar que, quanto menor o *h* escolhido, maior será N (número de pontos no somatório) e mais lento o cálculo da derivada de Grünwald-Letnikov. Dessa forma, a escolha do parâmetro *h* deve levar em conta um equilíbrio entre o tempo de computação e a precisão desejada (LEMES, 2018).

O algoritmo descrito dentro da caixa fornece como resultado o gráfico descrito na Figura 4.2, onde a linha contínua com círculos representa a derivada fracionária da função $\text{sen}(t)$,

a linha pontilhada é a própria função $\sin(t)$ e, por fim, a linha contínua com pontos é a representação da função $\cos(t)$. Nota-se, portanto, que a derivada fracionária é algo representado entre a função seno e a função cosseno.

```
function DGL=derivadagl(tmax,dt,h,a)
%>>derivadagl(2*pi,0.1,0.01,0.5);

t=0:dt:tmax;t=t';

for j=1:length(t);
N=ceil(t(j)/h);
for k=0:N
i=k+1;
T(j,i)=(-1)^k*cbg(a,k)*func(t(j)-k*h);
end
end
DGL=sum(T')/h^a;
[t, DGL']

plot(t,DGL,'ko-')
hold on
plot(t,sin(t),'k:')
hold on
plot(t,cos(t),'k-', 'Marker', '.')
axis([0 6.5 -1 1])
xlabel('t')
ylabel('sen(t)')
end

function c=cbg(a,k)
w=1;
for j=1:k
w=w*(1-(a+1)/j);
```

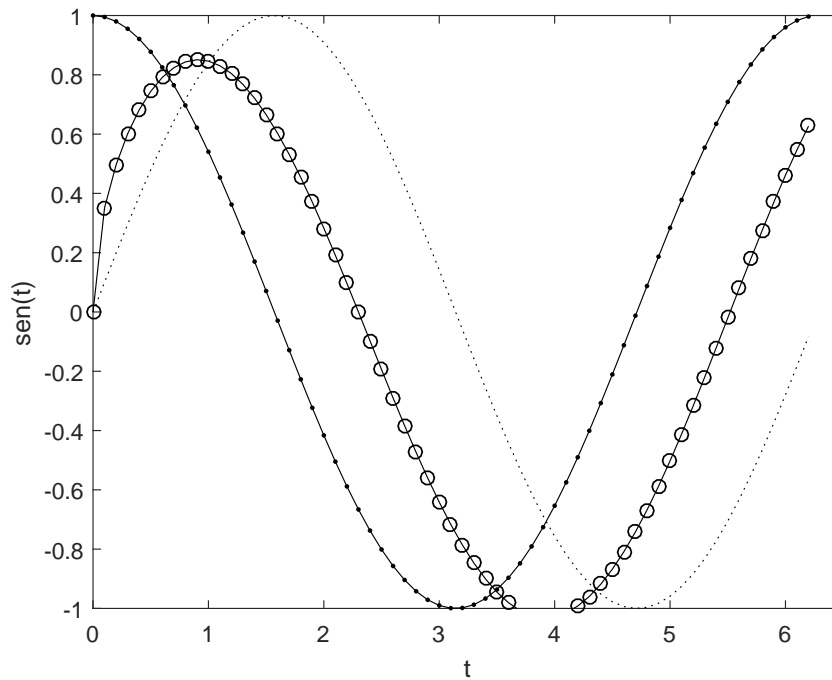
```

end
c=w/(-1)^k;
end

function f=func(t)
f=sin(t);
end

```

Figura 4.2 – Derivada de ordem 1/2 da função trigonométrica $\text{sen}(t)$ em relação a t (linha contínua com círculos). A linha pontilhada representa a função $\text{sen}(t)$ e a linha contínua com pontos a função $\text{cos}(t)$.



Fonte: LEMES (2018).

Assim como em outros momentos deste estudo foi apresentada a forma matricial do operador derivada de ordem inteira, vale também apresentar o operador derivada de ordem fracionária em sua forma matricial.

4.4.2 Representação matricial do operador derivada de ordem fracionária

A derivada fracionária de Grünwald-Letnikov, $[{}^{GL}D^{(\alpha)}f](t)$, pode ser reescrita na sua forma matricial como $\mathbf{d} = \mathbf{D}^{(\alpha)}\mathbf{f}$. Para tal, considere na equação (4.49) que h é um elemento fixo e portanto $N_i = \lceil t_i/h \rceil$. O operador matricial $\mathbf{D}^{(\alpha)}$ é representado por (4.51), assim como o vetor coluna \mathbf{f} , por (4.52) (LEMES, 2018).

$$\mathbf{D}^{(\alpha)} = \frac{1}{h^{(\alpha)}} \begin{bmatrix} C_{\alpha,0}^* & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -C_{\alpha,1}^* & C_{\alpha,0}^* & 0 & 0 & \dots & 0 \\ C_{\alpha,2}^* & -C_{\alpha,1}^* & C_{\alpha,0}^* & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ (-1)^N C_{\alpha,N}^* & (-1)^{N-1} C_{\alpha,N-1}^* & (-1)^{N-2} C_{\alpha,N-2}^* & (-1)^{N-3} C_{\alpha,N-3}^* & \dots & C_{\alpha,0}^* \end{bmatrix} \quad (4.51)$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} f(0) \\ f(h) \\ f(2h) \\ \vdots \\ f(Nh) \end{bmatrix} \quad (4.52)$$

Desta forma, fazendo a multiplicação de cada linha de (4.51) por (4.52), tem-se o vetor coluna descrito na equação (4.53), cujos elementos são as derivadas fracionárias de Grünwald-Letnikov em cada ponto. As dimensões das matrizes \mathbf{d} , $\mathbf{D}^{(\alpha)}$ e \mathbf{f} são $(m \times 1)$, $(m \times m)$ e $(m \times 1)$, respectivamente.

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} D^{(\alpha)} f(0) \\ D^{(\alpha)} f(h) \\ D^{(\alpha)} f(2h) \\ \vdots \\ D^{(\alpha)} f(Nh) \end{bmatrix} \quad (4.53)$$

Pode-se notar, pela definição de derivada fracionária, segundo Grünwald e Letnikov, que ao calcular o valor da derivada fracionária em um ponto qualquer é preciso considerar o valor da função em uma quantidade de pontos maior que a da respectiva derivada de ordem inteira (note o somatório na equação (4.49)) (TEODORO; OLIVEIRA; DE OLIVEIRA, 2018).

Neste momento, pode-se introduzir um conceito muito importante no contexto do Cálculo Fracionário e que fornece, por sua vez, uma motivação para o uso da derivada fracionária, o conceito de memória e, conseqüentemente, o conceito de operador não local.

4.4.3 Caracterização do operador como não local

O efeito de memória é um dos mais importantes aspectos do Cálculo Fracionário, visto que uma derivada fracionária, por definição, leva em consideração uma maior faixa de informação de uma função que se deseja derivar. Em outras palavras, a derivada fracionária lida com a memória da função. Neste contexto, uma derivada de ordem fracionária é caracterizada como um operador não local (CAMARGO, 2009; WEY et al., 2017).

Para entender melhor o conceito de não localidade, considere a equação (4.49) para o cálculo de $\frac{df(t)}{dt}$ e $\frac{d^{1/2}f(t)}{dt^{1/2}}$ em $t = 1$. Para isto, considere também nos dois casos $h = 0, 1$, que leva a $N = t/h = 1/0, 1 = 10$. Sendo assim, para a derivada de ordem 1, tem-se o cálculo descrito pela equação (4.54).

$$D^1 f(t)|_{t=1} = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h} [C_{1,0}^* f(t) - C_{1,1}^* f(t-h)] = \frac{1}{h} [C_{1,0}^* f(1) - C_{1,1}^* f(0,9)] \quad (4.54)$$

Ao analisar a equação (4.54) pode-se perceber que $C_{1,k}^* = 0$ sempre que $k > 1$. Isto ocorre porque $\alpha - k + 1$ (ver equação (4.47)) é igual a um número inteiro negativo para $k > \alpha$ e, neste caso, $\Gamma(\alpha - k + 1)$ é infinito, o que deixa $C_{\alpha,k}^* = 0$. Em outras palavras, a função gama

é sempre infinita para um inteiro negativo. Este é o resultado esperado quando α é um inteiro positivo. Portanto, o cálculo envolveu apenas o conhecimento da função f nos tempos $t = 1$ e $t = 0,9$. Neste caso, diz-se que operador é *local* (LEMES, 2018).

Para o caso do cálculo da derivada de ordem $1/2$ tem-se

$$\begin{aligned} D^{1/2}f(t)|_{t=1} = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h^{1/2}} [& C_{1/2,0}^* f(t) - C_{1/2,1}^* f(t-h) + C_{1/2,2}^* f(t-2h) \\ & - C_{1/2,3}^* f(t-3h) + C_{1/2,4}^* f(t-4h) - C_{1/2,5}^* f(t-5h) + C_{1/2,6}^* f(t-6h) \\ & - C_{1/2,7}^* f(t-7h) + C_{1/2,8}^* f(t-8h) - C_{1/2,9}^* f(t-9h) + C_{1/2,10}^* f(t-10h)] \quad . \end{aligned} \quad (4.55)$$

Nota-se, na equação (4.55), que todos os valores de $C_{1/2,k}^*$ são diferentes de zero para todo k . Desta forma, o cálculo da derivada de ordem $1/2$ envolve o conhecimento da função f nos tempos $t, t-h, t-2h, t-3h, \dots, t-Nh$, como mostra a equação (4.56). Neste caso, diz-se que operador é *não local* (LEMES, 2018).

$$\begin{aligned} D^{1/2}f(t)|_{t=1} = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h^{1/2}} [& C_{1/2,0}^* f(1) - C_{1/2,1}^* f(0,9) + C_{1/2,2}^* f(0,8) \\ & - C_{1/2,3}^* f(0,7) + C_{1/2,4}^* f(0,6) - C_{1/2,5}^* f(0,5) + C_{1/2,6}^* f(0,4) \\ & - C_{1/2,7}^* f(0,3) + C_{1/2,8}^* f(0,2) - C_{1/2,9}^* f(0,1) + C_{1/2,10}^* f(0)] \end{aligned} \quad (4.56)$$

Entender as características de um operador derivada de ordem fracionária é de extrema importância para o desenvolvimento de novas teorias e novas aplicações. Neste contexto, é preciso definir quais as propriedades um operador deve ter para se apresentar como uma alternativa de derivada de ordem não inteira.

4.4.4 Propriedades da derivada de Grünwald-Letnikov

Existem mais de 30 formulações de derivadas fracionárias, cada uma mais adequada para um problema físico que a outra. Desta forma, deve-se existir algum pré-requisito para que uma derivada seja considerada como, de fato, uma derivada fracionária (TEODORO; MACHADO; DE OLIVEIRA, 2019).

Em 2015, Ortigueira e Machado propuseram um critério, contendo cinco itens, que um operador deve cumprir para que este seja considerado uma derivada fracionária (ORTIGUEIRA;

MACHADO, 2015):

- a) a derivada fracionária é um operador linear, isto é, $D^{(\alpha)}(af(x) + bg(x)) = aD^{(\alpha)}f(x) + bD^{(\alpha)}g(x)$;
- b) a derivada de ordem zero de uma função é a própria função, ou seja, $D^{(0)}f(x) = f(x)$;
- c) a derivada fracionária coincide com a derivada ordinária quando a ordem é um inteiro;
- d) a lei dos expoentes é satisfeita, para qualquer α e β , isto é, $D^{(\alpha)}D^{(\beta)}f(x) = D^{(\beta)}D^{(\alpha)}f(x) = D^{(\alpha+\beta)}f(x)$; e
- e) vale a regra de Leibniz generalizada,

$$D^{\alpha}[f(x)g(x)] = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\alpha}{k} D^k f(x) D^{\alpha-k} g(x).$$

Nesse sentido, analisando os itens citados anteriormente, pode-se concluir que a formulação de derivada fracionária proposta por Grünwald e Letnikov estão de acordo com os critérios impostos para que um operador seja considerado como um operador derivada de ordem fracionária. A validação deste critério para a derivada de Grünwald e Letnikov pode ser encontrada no trabalho de doutorado de TEODORO, G. S., 2019 (TEODORO, 2019).

Todo o conteúdo abordado nas seções anteriores precisa ser testado em algum protótipo. Desta forma, no presente estudo, o problema inverso da radiação de corpo negro serviu como teste para que se possa analisar qual o impacto a proposta do trabalho teve na resolução de um problema inverso. É preciso, portanto, entender do que se trata o problema inverso da radiação de corpo negro, apresentado a seguir.

4.5 O PROBLEMA INVERSO DA RADIAÇÃO DE CORPO NEGRO

Como se sabe, um objeto submetido a um aquecimento emite radiação, pense por exemplo em uma chapa de ferro (GEARHART, 2009). O espectro de emissão de radiação de um corpo negro, chamado de brilho espectral, $P(\nu)$, dependendo de uma área unitária a uma temperatura absoluta T , pode ser descrito pela lei de Planck, equação (4.57), onde h a constante

de Planck, k a constante de Boltzmann, c a constante da velocidade da luz e ν a frequência da radiação emitida (CHOI; LATERMAN; SHIN, 2006).

$$P(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (4.57)$$

No entanto, é preciso considerar que um objeto não está em uma única temperatura e, sim, que ele possui uma distribuição de temperatura que depende da área. Sendo assim, o espectro de radiação emitido, $g(\nu)$, depende agora da variação de temperatura ao longo de sua área superficial, $f(T)$, como mostrado na equação (4.58) (TAN et al., 1994).

$$g(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \int_0^\infty \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} f(T) dT \quad (4.58)$$

O problema inverso da radiação do corpo negro consiste então na determinação da distribuição de temperatura, $f(T)$, ao longo de sua área superficial, dado o espectro de energia total, $g(\nu)$. Em outras palavras, o problema equivale em resolver a equação integral (4.58) para $f(T)$, sendo ela considerada uma equação integral de Fredholm de primeira ordem (LI, 2005).

O primeiro a propor uma solução inversa para este problema foi Norbert N. Bojarski, em 1982. A proposta de seu trabalho consistiu em resolver o problema usando a transformada de Laplace e um processo iterativo (BORJARSKI, 1982).

No entanto, essa e outras técnicas que usufruem da transformada inversa de Laplace, carregam defeitos em relação à implementação com dados realistas. A transformada inversa de Laplace aplicada a dados experimentais, leva a problemas instáveis tanto do ponto de vista analítico, quanto do ponto de vista numérico (LAKHTAKIA, 1986).

Além disso, outra questão a ser levada em consideração é o fato do problema ser considerado como mal colocado, como sugerido por sua definição através de uma equação integral de Fredholm de primeira ordem (WU; MA, 2013).

Uma outra tentativa de solucionar o problema da radiação do corpo negro foi explorada por Nanxian em 1987, utilizando a transformada de Fourier. Entretanto, esse caminho também carrega dificuldades quanto à resolução da operação inversa, trazendo problemas quanto à existência, unicidade e continuidade (NANCHIAN, 1987).

Devido aos problemas apresentados anteriormente, uma implementação numérica da inversão através do método de regularização de Tikhonov, foi demonstrada por Sun e Jaggard também em 1987. Esse método possui a habilidade de contornar vários problemas indesejáveis e ainda fornece resultados precisos (SUN; JAGGARD, 1987).

Seguindo nessa mesma linha de estudo, no presente trabalho, foi proposto utilizar o método de regularização de Tikhonov para diminuir as inconveniências devido o problema inverso da radiação de corpo negro ser considerado um problema mal colocado (LEMES, 2018).

Contudo, de maneira inédita na literatura, este trabalho sugeriu aperfeiçoar essa técnica de regularização com a implementação de uma derivada de ordem fracionária. Dessa forma, o próximo tópico demonstra os passos realizados neste estudo para alcançar o objetivo do mesmo.

O APÊNDICE A (A procura pela Luz Ideal) apresenta mais detalhes sobre como foi realizada a descoberta da radiação de corpo negro, além de apresentar, de forma sucinta, dois importantes trabalhos sobre esse tema, o trabalho Rayleigh-Jeans e o trabalho do célebre físico teórico Max Planck, aquele a quem a comunidade científica honrou consagrando-o como o pai da teoria quântica.

5 METODOLOGIA

5.1 A DISCRETIZAÇÃO

A grosso modo, discretizar significa transformar uma equação contínua em uma equação algébrica com pontos discretos. Portanto, como primeiro passo necessário para alcançar o objetivo deste trabalho, foi necessário discretizar a equação que foi utilizada como teste para o método matemático aqui proposto.

Como mencionado, o problema escolhido foi o problema inverso da radiação do corpo negro, que consiste na determinação da distribuição de temperatura ao longo de sua área superficial, isto é, o problema equivale a resolver a equação integral (5.1) para $f(T)$.

Na equação (5.1), $g(\nu)$ representa o espectro de radiação emitido; h , a constante de Planck; k , a constante de Boltzmann; c , a constante da velocidade da luz; ν , a frequência; e, por fim, $f(T)$ representa a distribuição de temperatura ao longo de sua área superficial.

Na prática, $f(T) = 0$ quando $T \geq T_{max}$, de modo que a faixa de integração pôde ser reescrita entre 0 e T_{max} . Sendo assim, a equação (5.1) pôde ser reescrita na forma da equação (5.2), onde $K(\nu, T)$ representa o núcleo da integral, $1/(\exp(h\nu/kT) - 1)$, juntamente com as constantes da equação, $2h\nu^3/c^2$.

$$g(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} f(T) dT \quad (5.1)$$

$$g(\nu) = \int_0^{T_{max}} K(\nu, T) f(T) dT \quad (5.2)$$

De maneira geral, os diferentes métodos de quadratura (retângulos, trapézios e parábolas) são colocados na forma como mostrada pela equação (5.3), onde w_j representam os pesos para o método de quadratura escolhido, próprio de cada método. Neste trabalho, a discretização foi realizada através da quadratura por parábolas. Mais detalhes são apresentados na Seção 6.

$$g(\nu_i) = \sum_{j=1}^m K(\nu_i, T_j) f(T_j) w_j \quad (5.3)$$

É possível perceber que o método de quadratura será melhor tanto quanto mais rápida for a convergência. Por conseguinte, quanto melhor o método, menor o número de intervalos em que a região entre 0 e T_{max} será dividida.

Como mencionado, o processo de discretização tem como finalidade a obtenção de uma equação integral na sua forma matricial, tal como

$$\mathbf{g} = \mathbf{K}\mathbf{f}, \quad (5.4)$$

onde

$$\mathbf{g} = [g(v_1) \ g(v_2) \ \dots \ g(v_n)]^T, \quad (5.5)$$

$$\mathbf{f} = [f(T_1) \ f(T_2) \ \dots \ f(T_m)]^T \quad (5.6)$$

e

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} w_1K(v_1, T_1) & w_2K(v_1, T_2) & \dots & w_mK(v_1, T_m) \\ w_1K(v_2, T_1) & w_2K(v_2, T_2) & \dots & w_mK(v_2, T_m) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_1K(v_n, T_1) & w_2K(v_n, T_2) & \dots & w_mK(v_n, T_m) \end{bmatrix}, \quad (5.7)$$

sendo as dimensões das matrizes, \mathbf{g} , \mathbf{K} e \mathbf{f} iguais a $(n \times 1)$, $(n \times m)$ e $(m \times 1)$, respectivamente. Desta forma, pode-se notar que a obtenção de \mathbf{g} pela equação (5.4) ocorre pela multiplicação da matriz \mathbf{K} (5.7), pelo vetor coluna \mathbf{f} (5.6).

O próximo passo após realizar a integração numérica da equação da radiação de corpo negro (5.1), equação (5.4), foi realizar o problema direto, de modo a obter os dados referentes ao espectro de radiação de corpo negro, \mathbf{g} . Levando em consideração a escolha de desenvolver este trabalho no âmbito apenas teórico, estes dados foram simulados computacionalmente.

5.2 SIMULAÇÃO DOS DADOS DE ENTRADA

A simulação dos dados experimentais, $g(v)$, foi realizada por meio da equação (5.8), que representa, de forma simplificada, a mesma equação mostrada em (5.3). Neste momento, nota-se que para realizar a simulação dos dados experimentais, acontece a realização de um

Problema Direto, onde através de \mathbf{K} e \mathbf{f} , obtém-se \mathbf{g} .

$$g_i = \sum_{j=1}^m K_{ij} f_j w_j \quad (5.8)$$

Na equação (5.8), $f_j = f(T_j)$, $K_{ij} = \frac{2hv_i^3}{c^2} (e^{\frac{hv_i}{kT_j}} - 1)^{-1}$, $g_i = g(v_i)$ e w_j são pesos para o método da quadratura por parábolas.

Os dados de $f(T)$ foram simulados para temperaturas entre 10^{-2} e $900 K$, com $\delta = 450$ e $\beta = 25000$, através da equação (5.9). Para uma simulação que reproduza a realidade dos laboratórios, foi considerado, posteriormente, um coeficiente de variação de 5% e de 10% nos dados de g_i . Mais detalhes sobre o que cada variável representa na equação (5.9) são apresentados na Seção 6.

$$f(T_j) = e^{\frac{-(T_j - \delta)^2}{\beta}} \quad (5.9)$$

A equação (5.9) representou, nas discussões futuras, a função $f(T)$ exata, a qual foi comparada com as funções $f(T)$ calculadas. A comparação da função exata aconteceu com as equações apresentadas no próximo tópico, sendo $f(T)$ calculada pelo método dos mínimos quadrados, pela técnica de Tikhonov e pela proposta da derivada fracionária.

5.3 A PROPOSTA DA DERIVADA FRACIONÁRIA - ${}^{GL}\mathbf{D}^{(\alpha)}$

Como abordado em seções anteriores, podemos expressar, de maneira geral, um problema linear na forma de $\mathbf{g} = \mathbf{Kf}$. Desta forma, uma solução aceitável para este sistema seria encontrar uma função \mathbf{f} , que minimize o funcional descrito na equação (5.10), ou seja, é preciso encontrar um \mathbf{f} ótimo, simbolizado aqui por \mathbf{f}^* , que faça a diferença entre \mathbf{Kf} e \mathbf{g} ser mínima (método dos mínimos quadrados), equação (5.11).

$$\Phi(\mathbf{f}) = \|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}\|^2 \quad (5.10)$$

$$\mathbf{f}^* = \min_{\mathbf{f}} \Phi(\mathbf{f}) \quad (5.11)$$

No entanto, para encontrar um \mathbf{f} ótimo nos deparamos com uma matriz \mathbf{K} que não é quadrada, o que impede o cálculo da inversa de \mathbf{K} . Diante disso, a estratégia para tornar essa matriz quadrada consiste em multiplicar a matriz \mathbf{K} por sua matriz transposta ($\dim[\mathbf{K}] = n \times m$; $\dim[\mathbf{K}^T] = m \times n$; $\dim[\mathbf{K} \cdot \mathbf{K}^T] = n \times n$).

Matematicamente, isso equivale a multiplicar ambos os lados da equação $\mathbf{g} = \mathbf{Kf}$ por \mathbf{K}^T , o que fornece $\mathbf{K}^T \mathbf{g} = \mathbf{K}^T \mathbf{Kf}$ e, por conseguinte, pode-se encontrar uma solução para \mathbf{f}^* , dada pela equação (5.12), a qual denotamos a matriz $(\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1}$ de Pseudo Inversa de \mathbf{K} .

$$\mathbf{f}^* = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{g} \quad (5.12)$$

Sobre a equação citada acima, é importante salientar que ao calcular \mathbf{f}^* para um Problema Inverso mal colocado, ou seja, quando se considera a presença de um erro experimental nos dados de \mathbf{g} , é possível minimizar a norma do resíduo ($\|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}\|$), como é o interesse do método dos mínimos quadrados. Porém, isso acontece às custas de uma norma da solução ($\|\mathbf{f}\|$) que explode (lê-se: vai para infinito), isto é, que oscila muito.

Neste contexto, é preciso uma estratégia para contornar este problema da solução (5.12) não ser adequada para descrever o modelo físico. Um caminho bastante explorado na literatura é a utilização do método de regularização de Tikhonov.

O método de Tikhonov consiste em encontrar a solução \mathbf{f} que torne mínima a função $\Phi_\lambda(\mathbf{f})$, sendo

$$\Phi_\lambda(\mathbf{f}) = \|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}\|^2 + \lambda^2 (a_0 \|\mathbf{f}\|^2 + a_1 \|\mathbf{f}'\|^2 + a_2 \|\mathbf{f}''\|^2), \quad (5.13)$$

onde \mathbf{f} linha representa a derivada primeira e \mathbf{f} duas linhas representa a derivada segunda. Os parâmetros a_0 , a_1 e a_2 são chaves que são usadas para bloquear ($a_i = 0$) e desbloquear ($a_i = 1$) a restrição adicional na norma do resíduo. O parâmetro de regularização λ representa o peso dado à restrição adicional. Essa restrição pode fornecer uma solução aproximada estável com norma finita (restringida por $\|\mathbf{f}\|$) e que oscila pouco (restringida por $\|\mathbf{f}'\|$ e $\|\mathbf{f}''\|$).

Encontrar uma solução ótima, ou seja, \mathbf{f}^* , significa então minimizar o funcional descrito em (5.13), como mostrado pela equação (5.14). A condição para minimizar uma função é bem conhecida, basta derivar e igualar a zero. Com isso, é possível obter a equação (5.15), onde

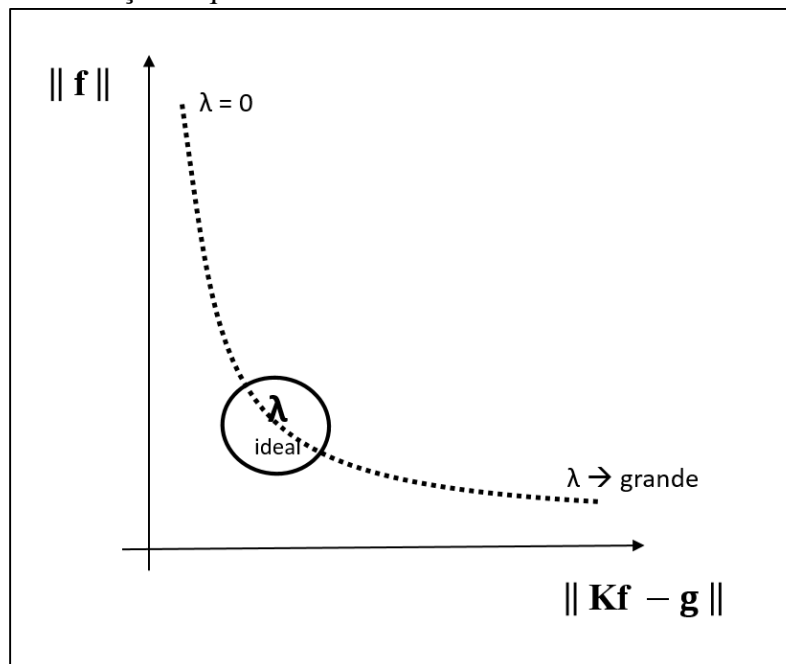
$\mathbf{D}^{(0)}$ é a matriz identidade \mathbf{I} , $\mathbf{D}^{(1)}$ é a forma matricial do operador derivada de primeira ordem e $\mathbf{D}^{(2)}$ é a representação matricial do operador derivada de segunda ordem¹. Detalhes desta demonstração são apresentados na Seção 4.2.

$$\mathbf{f}_\lambda^* = \min_{\mathbf{f}} \Phi_\lambda(\mathbf{f}) \quad (5.14)$$

$$\mathbf{f}_\lambda^* = \{\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \lambda^2(a_0 \mathbf{D}^{(0)} + a_1 \mathbf{D}^{(1)} + a_2 \mathbf{D}^{(2)})\}^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{g} \quad (5.15)$$

Existe um λ que estabelece o bom equilíbrio entre a norma do resíduo e as demais restrições, $\|\mathbf{f}\|$, $\|\mathbf{f}'\|$ e $\|\mathbf{f}''\|$. Esse parâmetro de regularização ideal é escolhido geralmente pela curva-L. A Figura 5.1 apresenta um esboço de uma curva-L.

Figura 5.1 – Ilustração esquemática de uma curva-L.



Fonte: Da Autora (2020).

Nota-se, pela observação da Figura 5.1, que para cada ponto na curva tem-se um valor de λ . Dessa forma, para o primeiro ponto, tem-se $\lambda = 0$, que tem seu valor aumentado a medida que é construída a forma L da curva. O eixo das abscissas é representado pela norma do resíduo, assim como o eixo das ordenadas é representado pela norma da solução.

¹A fim de evitar alguma confusão com variáveis que são elevadas a determinados números, o grupo de pesquisa adotou a notação $\mathbf{D}^{(0)}$, $\mathbf{D}^{(1)}$ e $\mathbf{D}^{(2)}$, com suas respectivas ordens das derivadas entre os parênteses. Isto significa que trata-se de um operador derivada de ordem zero, assim como um operador derivada de primeira ordem e um operador derivada de segunda ordem, respectivamente.

Para cada valor do parâmetro de regularização tem-se uma norma da solução e uma norma residual. Quando λ é igual a zero, a solução encontrada minimiza a norma do resíduo, mas, em geral, com grande valor da norma da solução. Por outro lado, quando λ é grande, encontramos uma solução com norma finita, porém com norma residual grande, como observado na Figura 5.1.

Sendo assim, existe um parâmetro de regularização ideal que estabelece um bom equilíbrio entre essas duas contribuições. Geralmente, este λ ideal é obtido pelo canto da curva. Neste trabalho, a curva-L foi usada para obter o parâmetro de regularização inicial.

Nesta etapa, pode-se incorporar o objetivo proposto neste trabalho, que consiste em melhorar o funcional de Tikhonov (5.13), substituindo as derivadas de ordem inteira, por uma derivada de ordem fracionária, como ilustrado pela equação (5.16), sendo a ordem fracionária denotada por α .

$$\Phi_{\lambda,\alpha}(\mathbf{f}) = \|\mathbf{K}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 + \lambda^2 \left\| \frac{d^\alpha \mathbf{f}}{dt^\alpha} \right\|^2 \quad (5.16)$$

Encontrar uma solução \mathbf{f}^* que minimize o funcional de Tikhonov, depende agora, não apenas do parâmetro de regularização λ , mas também da ordem da derivada fracionária, α , como pode ser visto pela equação (5.17).

$$\mathbf{f}_{\lambda,\alpha}^* = \min_{\mathbf{f}} \Phi_{\lambda,\alpha}(\mathbf{f}) \quad (5.17)$$

O resultado apresentado na equação (5.17) pode ser obtido por procedimentos semelhantes aos da equação (5.15), levando à equação (5.18). Se considerado um λ fixo, pode-se então modular um α de modo a fornecer uma melhor solução de \mathbf{f} , o que torna a proposta mais flexível.

$$\mathbf{f}_{\lambda,\alpha}^* = \{\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \lambda^2 \mathbf{D}^{(\alpha)}\}^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{g} \quad (5.18)$$

Na equação (5.18), $\mathbf{D}^{(\alpha)}$ é o operador derivada fracionária de Grünwald-Letnikov, descrito pela equação (5.19), e α é a ordem da derivada. A equação (5.20) descreve o coeficiente binomial presente em (5.19).

$$[{}^{GL}D^{(\alpha)} f](t) = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^N (-1)^k C_{\alpha,k}^* f(t - kh) \quad (5.19)$$

$$C_{\alpha,k} = \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(k + 1)\Gamma(\alpha - k + 1)} \quad (5.20)$$

Uma fórmula de recorrência para o coeficiente binomial, que utiliza uma informação anterior para calcular um próximo dado, foi implementado nos cálculos. Este novo coeficiente binomial, $C_{\alpha,k}^*$, mostrado na equação (5.21), fornece um cálculo com uma maior rapidez e estabilidade na convergência dos dados.

$$C_{\alpha,k}^* = \left(1 - \frac{\alpha + 1}{k}\right) C_{\alpha,k-1}^* \quad (5.21)$$

De maneira análoga às comparações que foram realizadas entre a função $f(T)$ exata e as calculadas pelas equações (5.12), (5.15) e (5.18), o espectro de radiação de corpo negro experimental, simulado pela equação (5.8), foi comparado com o espectro de radiação calculado. A obtenção do espectro calculado, \mathbf{g}^{cal} , é apresentado no tópico a seguir.

5.4 A OBTENÇÃO DO ESPECTRO CALCULADO - \mathbf{g}^{cal}

Após realizar o Problema Inverso para obter as funções $f(T)$, calculadas pelo método dos mínimos quadrados (5.12), pela técnica de regularização de Tikhonov (5.15) e, por fim, pela proposta da derivada fracionária (5.18), pôde-se realizar o Problema Direto para obter, desta vez, o espectro total de energia calculado, \mathbf{g}^{cal} .

Esta nova informação permitiu a comparação com o espectro total de energia experimental, \mathbf{g}^{exp} . O bom resultado acontece quando a diferença, $\mathbf{g}^{\text{cal}} - \mathbf{g}^{\text{exp}}$, for menor do que o erro experimental considerado. Essa é uma comparação muito usual no contexto de Problemas Inversos.

Em linhas gerais, as subseções anteriores (5.1, 5.2, 5.3 e 5.4) permitiram mostrar o caminho para o desenvolvimento de toda a proposta do trabalho. Por fim, foi preciso de meios para solucionar as equações apresentadas até o momento e que permitiram analisar se a inclusão do operador derivada de ordem fracionária foi eficaz ou não.

A execução de todas as equações apresentadas no presente trabalho foi realizada por meio de auxílio computacional, o software MATLAB.

5.5 O MATLAB COMO FERRAMENTA PARA OBTENÇÃO DOS DADOS

O MATLAB é um software que foi criado por Cleve Moler no fim dos anos de 1970 e lançado comercialmente em 1984 pela empresa *MathWorks*. Esta ferramenta de trabalho é um ambiente completo que contém diversas rotinas para, principalmente, resolução de equações.

É uma linguagem de programação apropriada àqueles que desejam implementar e testar soluções que sejam capazes de auxiliar em investigações laboratoriais. Ele é voltado, em geral, para engenheiros e cientistas.

Em outras palavras, o MATLAB pode ser considerado um “laboratório de matemática”, destinado a fazer cálculos cujo elemento básico de informação é uma matriz (MATLAB = *Matrix Laboratory*).

Neste trabalho, todo algoritmo proposto para a resolução das equações de interesse foi desenvolvido pelo grupo de pesquisa de Química Matemática do Instituto de Química - UNIFAL-MG, com coordenação do professor e pesquisador Dr. Nelson H. T. Lemes. O código completo pode ser encontrado ao final deste trabalho (APÊNDICE B).

Em linhas gerais, o algoritmo proposto trata-se de uma sequência de códigos, elaborados com a finalidade de obter os respectivos dados e gráficos deste manuscrito. A Figura 5.2 foi preparada com o propósito de fornecer uma maior compreensão da função do algoritmo e de todo o processo executado neste trabalho.

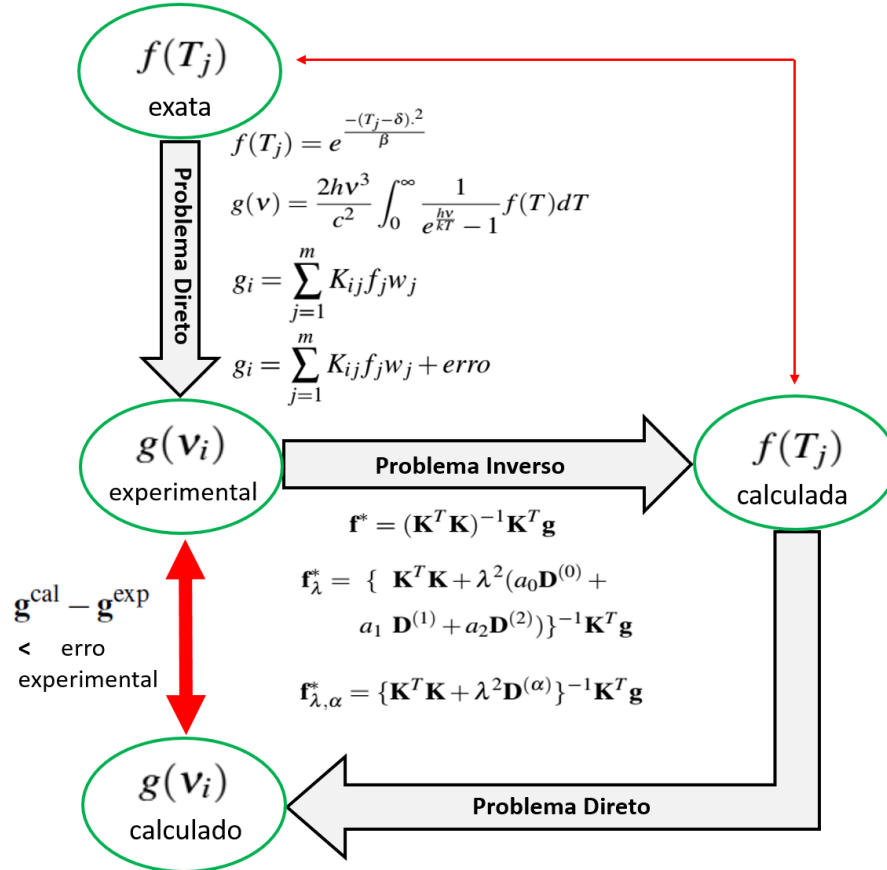
O algoritmo apresentado no APÊNDICE B foi construído de maneira a atender esta sequência descrita na Figura 5.2. Essa ilustração também simplifica toda metodologia proposta neste estudo.

De maneira resumida, após obter o \mathbf{g} experimental, que pode também ser chamado de \mathbf{g} exato, foi possível realizar o Problema Inverso e calcular as funções $f(T)$ para os três casos mencionados. Posteriormente, essas funções foram comparadas com a função exata, inicialmente proposta.

Uma segunda comparação, mais usual quando se trata de trabalhos envolvendo problemas inversos, foi realizada após obter o espectro total de radiação calculado, \mathbf{g}^{cal} , por um

Problema Direto. Essa comparação foi realizada pelo espectro experimental e o calculado, onde foi esperado que essa diferença fosse menor do que o erro experimental considerado.

Figura 5.2 – Rotina utilizada para a obtenção dos dados.



Fonte: Da Autora (2020).

6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Como já mencionado, precisou-se inicialmente discretizar a equação (5.1) pela quadratura por parábolas. Esta escolha pode ser justificada através de um simples exemplo retirado de LEMES (2018). Considere, por exemplo, a integral exposta pela equação (6.1).

$$\int_0^{\pi/2} \text{sen}(x)dx \quad (6.1)$$

Se $f(x)$ é uma função definida no intervalo $[a, b]$, onde $a = 0$ e $b = \pi/2$, então a integral definida de $f(x)$, de a até b , será dada pela área sob a curva $f(x)$ entre os limites a e b . Partindo desta premissa, pode-se dizer, aproximadamente, que a integral corresponde a soma das áreas dos retângulos, trapézios ou polinômios contidos neste intervalo.

Desta forma, tem-se as equações (6.2), (6.3) e (6.4) que descrevem, respectivamente, a integração numérica por retângulos, trapézios e polinômios. Nota-se a devida equivalência com o cálculo de suas áreas, onde a área de um retângulo é obtida através da *base* \times *altura*, área do trapézio é representada por $(\text{base maior} + \text{base menor}) \times \text{altura}/2$ e, por fim, P_2 representa um polinômio de segundo grau dado por $P_2(x) = ax^2 + bx + c$.

$$I_{ret} = \int_a^b f(x)dx = \lim_{h \rightarrow 0} \sum_{i=0}^{n-1} f(\epsilon_i)h \quad (6.2)$$

$$I_{trap} = \int_a^b f(x)dx = \lim_{h \rightarrow 0} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{[f(x_{i+1}) + f(x_i)]h}{2} \quad (6.3)$$

$$I_{par} = \int_a^b f(x)dx = \lim_{h \rightarrow 0} \sum_{i=\text{ímpar}}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+2}} P_2(x)dx \quad (6.4)$$

Pode-se dizer que a quadratura por parábolas é mais eficaz considerando os casos em que foram feitos 16, 32, 64 e 128 intervalos entre a e b . A Tabela 6.1 apresenta os valores para cada quadratura.

A subrotina *intpar*, retirada de LEMES (2018), testa o método da parábola para o caso da integral (6.1), que foi a mesma utilizada para testar os outros métodos citados usando os pesos adequados. O argumento de entrada da subrotina representa o número de intervalos em que a região, entre a e b , será dividida, isto é, n .

Tabela 6.1 – Comparação entre os métodos de quadratura por retângulos, trapézios e parábolas da integral $\int_0^{\pi/2} \text{sen}(x)dx$, cuja solução exata é 1.

n	Retângulo	Trapézio	Parábola
16	0,9501	0,9992	1,0000
32	0,9753	0,9998	1,0000
64	0,9877	0,9999	1,0000
128	0,9939	1,0000	1,0000

Fonte: LEMES (2018).

```
function sab=intpar(n)
a=0; b=pi/2; dx=(b-a)/n;
i=0:n; x=a+i*dx;
f=func(x);
s1=sum(f(2:2:n));
s2=sum(f(3:2:n-1));
sab=[f(1)+4*s1+2*s2+f(n+1)]*dx/3;
end

function f=func(x)
f=sin(x);
end
```

Nota-se, pela observação da Tabela 6.1, que a convergência dos dados para o método da parábola são mais rápidos quando comparados com os métodos do retângulo e trapézio. É preciso mais do que 128 intervalos para que a convergência pela quadratura por retângulos chegue ao valor esperado, 1. Para o método do trapézio, esse mesmo intervalo consegue atingir o valor da unidade.

Esses dois métodos são superados quando implementado o método da parábola. Com apenas 16 intervalos obtém-se o valor esperado. Portanto, com este simples exemplo pode-se justificar a escolha por este método para a realização da discretização da equação (5.1).

Como dito, essa equação se trata de uma equação integral de Fredholm de primeira ordem, cuja determinação do $f(T)$ é um problema mal colocado. O motivo pelo qual esse

problema é considerado como mal colocado tem total ligação com o que é chamado de índice de condicionamento. Neste momento, cabe uma discussão extremamente válida, principalmente por ser algo que muitos experimentais não abordam.

É sugestivo pensar que se nas rotinas laboratoriais são cometidos pequenos erros nas medições, serão acarretados erros também pequenos nos resultados obtidos. Na linguagem mostrada no trabalho, seria o mesmo que dizer que se ligeiras perturbações fossem acrescentadas nos dados de \mathbf{g} , por exemplo, devido a erros experimentais, a solução \mathbf{f} também seria apenas ligeiramente modificada.

No entanto, nem sempre isso acontece. Existem casos em que uma pequena perturbação nos valores de entrada \mathbf{g} acabam por induzir grandes variações na solução de sistemas \mathbf{f} e, nesse caso, a matriz \mathbf{K} é dita mal condicionada. No caso oposto da matriz ser considerada bem condicionada, as soluções \mathbf{f} apresentariam erros da mesma ordem de grandeza das perturbações consideradas nos dados de entrada \mathbf{g} .

Em outras palavras, o índice de condicionamento de uma matriz é uma medida da sensibilidade da solução \mathbf{f} quanto a perturbações nos dados de \mathbf{g} . Sendo assim, se o índice de condicionamento de \mathbf{K} for grande, uma pequena alteração nos dados pode levar a uma solução \mathbf{f} inaceitável.

A determinação do índice de condicionamento da matriz \mathbf{K} é feita pela multiplicação da norma de \mathbf{K} vezes a norma de sua inversa, ou seja, $cond(\mathbf{K}) = \|\mathbf{K}\| \|\mathbf{K}^{-1}\|$. Através da equação (6.5), pode-se notar que o índice de condicionamento relaciona o erro relativo em \mathbf{f} , representado por $\frac{\|\Delta\mathbf{f}\|}{\|\mathbf{f}\|}$, e o erro relativo em \mathbf{g} , pela parcela $\frac{\|\Delta\mathbf{g}\|}{\|\mathbf{g}\|}$.

$$\frac{\|\Delta\mathbf{f}\|}{\|\mathbf{f}\|} \leq \|\mathbf{K}\| \|\mathbf{K}^{-1}\| \frac{\|\Delta\mathbf{g}\|}{\|\mathbf{g}\|} \quad (6.5)$$

A expressão acima fornece um limite para $\frac{\|\Delta\mathbf{f}\|}{\|\mathbf{f}\|}$ para um dado $\frac{\|\Delta\mathbf{g}\|}{\|\mathbf{g}\|}$. Este limite aumenta com o índice de condicionamento da matriz \mathbf{K} . Portanto, mesmo com um pequeno erro relativo considerado em \mathbf{g} , o erro relativo gerado em \mathbf{f} dependerá, intrinsecamente, do índice de condicionamento da matriz \mathbf{K} .

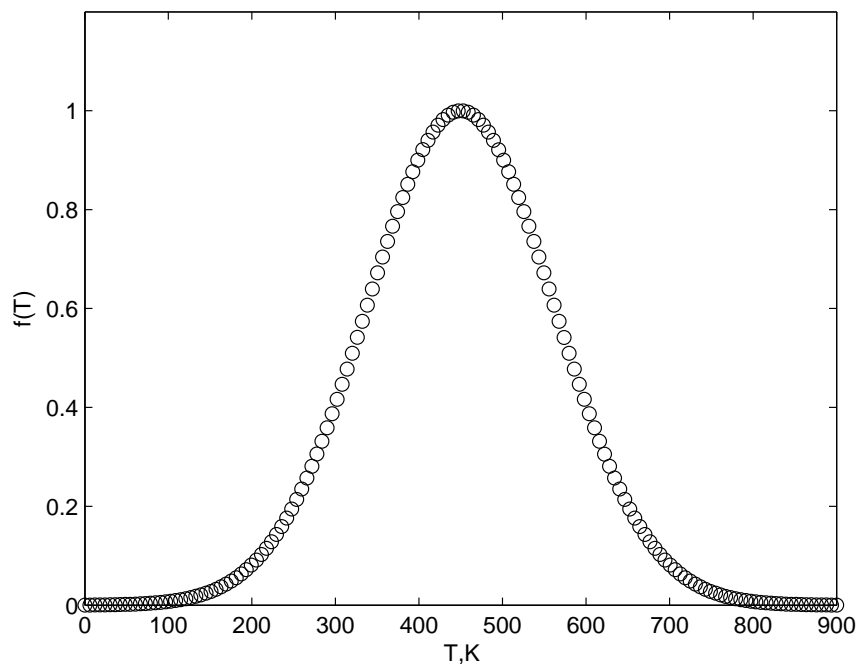
No presente trabalho, o índice de condicionamento da matriz \mathbf{K} foi equivalente a $1,37 \times$

10^{71} . Portanto, diante do exposto, pode-se entender que devido ao alto valor deste índice, mesmo na presença de pequenos erros nos dados de entrada, isto certamente irá gerar grandes oscilações na solução do problema.

Este fato evidencia a terceira condição para um problema ser considerado como mal colocado, a não continuidade. Dessa forma, o problema inverso da radiação de corpo negro é, de fato, um problema mal colocado.

Como comentado anteriormente, a obtenção do espectro de energia total experimental (g^{exp}) foi simulado neste trabalho. Para tal, foi preciso antes de uma função $f(T)$ exata que pudesse, através de um problema direto, fornecer o espectro de radiação experimental (ver Figura 5.2). Dessa forma, a função $f(T)$ exata, descrita pela equação (5.9), tem o formato apresentado pela Figura 6.1.

Figura 6.1 – Função $f(T)$ exata obtida através da equação (5.9).



Fonte: Da Autora (2020).

A equação (5.9) é bastante utilizada em estudos sobre radiação de corpo negro. Nesta equação, a variável T_j representa a faixa de temperatura, considera de 10^{-2} até 900 K, além disso, δ corresponde ao ponto de máximo na curva, assim como o valor de β modula sua largura. Os valores para este gráfico correspondem a $\delta = 450$ e $\beta = 25000$.

A subrotina *fext1*, permite construir o gráfico descrito na Figura 6.1. Através desse có-

digão, pode-se notar que os valores de entrada correspondem às variáveis citadas anteriormente, T_{max} , δ e β . Portanto, alterando esses valores, pode-se também alterar a curva correspondente.

```
function fext1(Tmax,delta,beta)
%>>fext1(900,450,25000)

afunc=@(T) exp(-(T-delta).^2/beta);

T=0.01:5:Tmax;

a1=afunc(T);

figure(1)
plot(T,a1,'ko')
xlabel('T,K')
ylabel('f(T)')
axis([0 900 0 1.15])

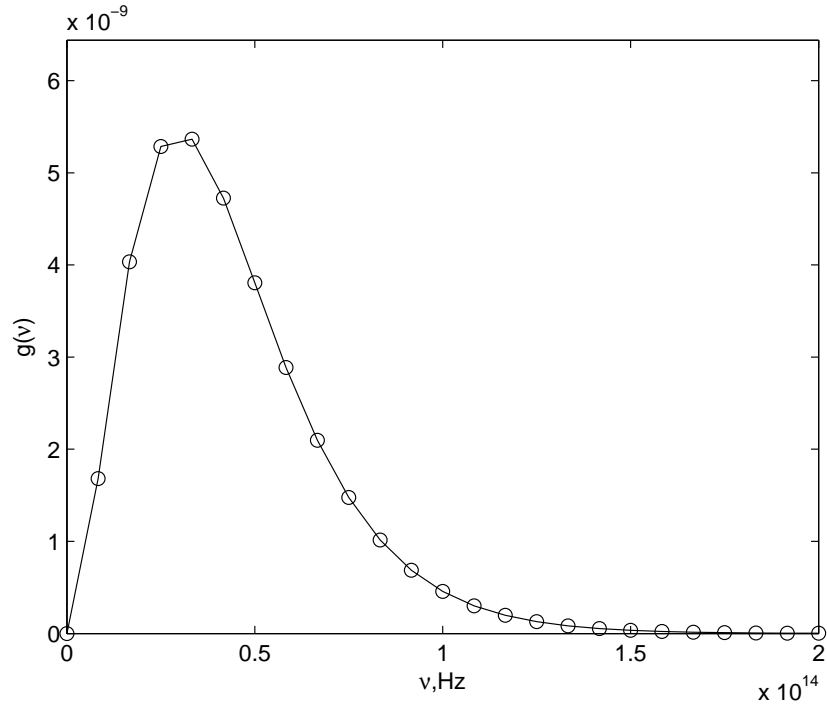
end
```

Através da equação (5.9) é possível também visualizar a afirmativa citada anteriormente de que, na prática, $f(T) = 0$ quando $T \geq T_{max}$. Quanto maior o valor de T , maior o argumento da função exponencial. Entretanto, se tratando de um termo que possui um negativo, pode-se esperar que quanto maior o valor da temperatura, menor se tornará a função, isto é, $f(T)$ tenderá cada vez mais a zero.

Com a função $f(T)$ exata já obtida, pôde-se então obter os valores correspondentes ao espectro de radiação de corpo negro experimental, \mathbf{g}^{exp} , através da equação (5.8). A Figura 6.2 apresenta a distribuição de $g(\nu)$ para vários valores de frequência, sem a presença de erro experimental.

Para uma simulação mais realista, que representasse mais a realidade nos laboratórios, erros experimentais foram introduzidos no espectro total de energia, g_i , equação (5.8). Esta

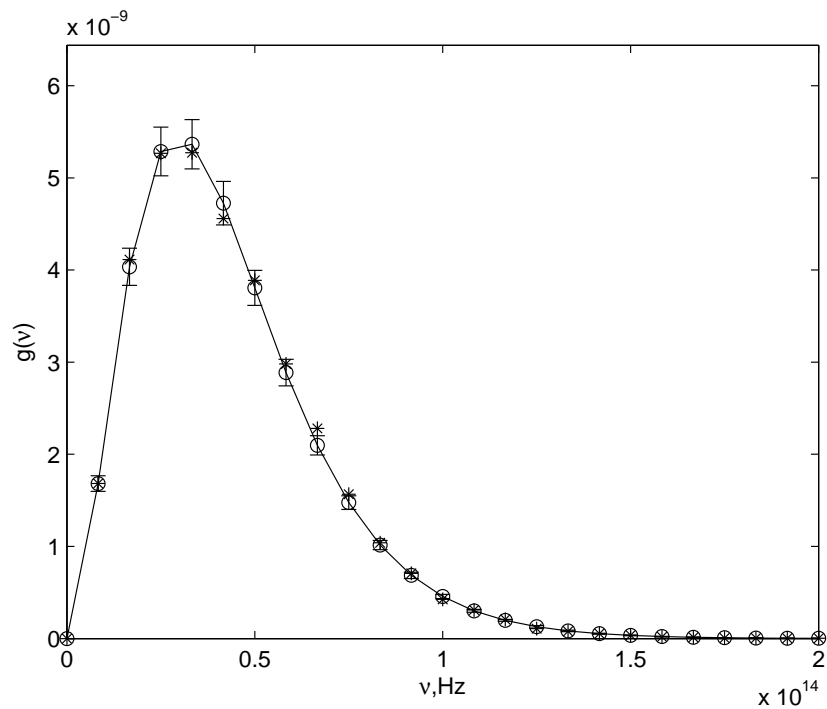
Figura 6.2 – Espectro de radiação de corpo negro simulado sem a presença de erros experimentais.



Fonte: Da Autora (2020).

nova simulação é descrita na Figura 6.3.

Figura 6.3 – Espectro de radiação de corpo negro simulado com a presença de erros experimentais.



Fonte: Da Autora (2020).

A estratégia utilizada para a inclusão de erros experimentais, foi sortear valores próximos dos valores exatos, indicados pelos círculos nas Figuras 6.2 e 6.3. Portanto, inicialmente foi proposta a inclusão de barras de erro nos dados exatos, obtidas por uma distribuição gaussiana, com o propósito de que os valores sorteados fossem próximos dos valores exatos. Esses novos valores são mostrados na Figura 6.3 pelos asteriscos.

O tamanho da barra de erro, considerada em cada valor exato, varia de tamanho. Essa diferença pode ser justificada pela observação da equação (6.6), onde pode-se notar que o desvio padrão, σ , que modula a largura da gaussiana e, conseqüentemente o tamanho da barra de erro, é calculado sobre o valor de $g(\nu)$, representado na equação pela média, \bar{x} . Na equação (6.6), Cv representa o coeficiente de variação.

$$Cv = \frac{\sigma}{\bar{x}} \times 100\% \quad \therefore \quad \sigma = \frac{Cv}{100\%} \times \bar{x} \quad (6.6)$$

Portanto, a barra de erro representa o coeficiente de variação de 5%, para valores de ν entre 0 e $1 \times 10^{14} \text{ Hz}$ e 10%, para valores de ν entre $1 \times 10^{14} \text{ Hz}$ e $2 \times 10^{14} \text{ Hz}$. Sendo assim, para valores como, por exemplo, $\nu = 0,4 \times 10^{14} \text{ Hz}$, tem-se um grande valor de $g(\nu)$ correspondente, logo, o desvio padrão calculado sobre este valor fornece uma barra de erro grande. Em contrapartida, para valores como, por exemplo, $\nu = 0,1 \times 10^{14} \text{ Hz}$, tem-se um valor pequeno de $g(\nu)$ e, conseqüentemente, uma barra de erro menor.

Para valores maiores de frequência ($1 \times 10^{14} \text{ Hz}$ a $2 \times 10^{14} \text{ Hz}$) foi considerado um coeficiente de variação de 10%. Isso porque, em média, tem-se uma maior imprecisão ao trabalhar com valores de medidas menores, isto é, para valores grandes de ν , tem-se a medida em $g(\nu)$ muito pequena, o que sugere considerar um coeficiente de variação maior, 10%.

Sendo a equação da radiação de corpo negro colocada em seu formato matricial, $\mathbf{g} = \mathbf{Kf}$, a escolha do tamanho dos vetores correspondeu a um vetor coluna \mathbf{g} de comprimento 25, \mathbf{K} uma matriz de tamanho 25×150 e \mathbf{f} um vetor de comprimento 150.

Em algumas situações experimentais, pode-se dizer que não é possível obter muitos resultados experimentais, uma vez que esta situação depende de diversos fatores como, por exemplo, quantidade de reagentes, aparelhagem disponível, dentre outros. Desta maneira, o valor pequeno do vetor \mathbf{g} (25) foi pensado a partir desta premissa.

Por outro lado, o tamanho do vetor \mathbf{f} (150) foi proposto pensando em deixar evidente que problemas inversos mal colocados possuem uma grande oscilação. Em outras palavras, considerar um vetor \mathbf{f} pequeno, seria o mesmo que camuflar as oscilações, o que pode-se entender que não seria algo que representaria a realidade dos problemas tratados.

Após simulado o espectro de radiação de corpo negro experimental, pôde-se partir para a próxima etapa do estudo, a obtenção das funções \mathbf{f} calculadas, obtidas a partir da informação de \mathbf{g} . Essa etapa foi realizada pelo método dos mínimos quadrados, regularização de Tikhonov e pela proposta da derivada fracionária.

A resolução de problemas inversos na presença de erros experimentais não é uma tarefa trivial. Muitas vezes, resolver um problema inverso por técnicas já conhecidas, como por exemplo, o método dos mínimos quadrados, não é suficiente para obter resultados que satisfazem as exigências físicas do problema, como uma norma finita da solução.

O problema citado anteriormente ocorre quando se resolve a equação proposta em (5.12), e que pode também ser visualizado através da equação (5.15), quando se considera $a_0 = a_1 = a_2 = 0$. Através deste caminho é possível encontrar uma solução que tenha um resíduo $\|\mathbf{K}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|$ razoavelmente pequeno, porém com uma norma da solução $\|\mathbf{f}\|$ grande.

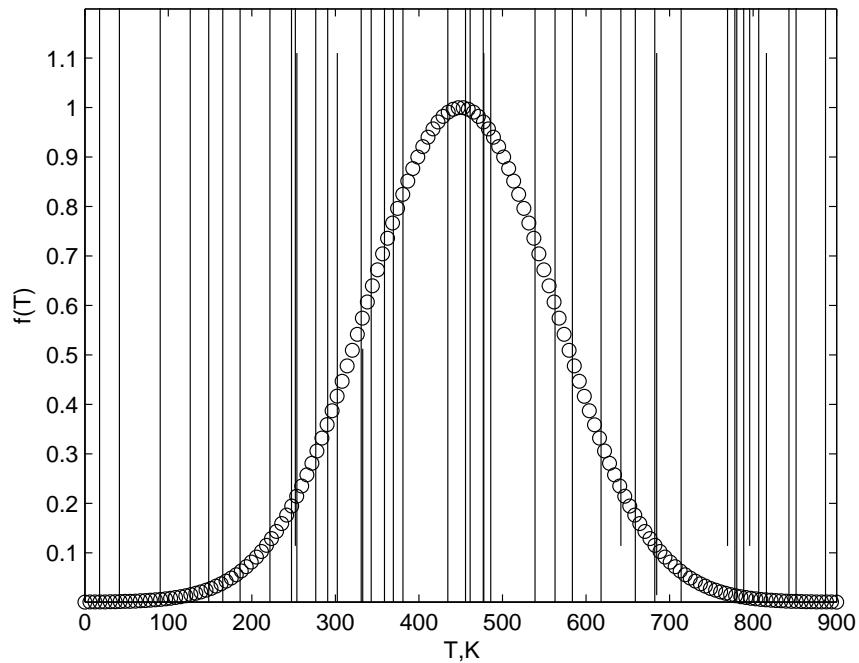
Por meio da Figura 6.4 pode-se entender, claramente, que a obtenção da função \mathbf{f} sem uma técnica de regularização é uma solução inaceitável para o problema, uma vez que sua solução explode, isto é, a solução vai para infinito em torno da solução exata.

A estratégia usual para contornar este problema é fazer uso do método de regularização de Tikhonov (equação (5.15)). A grosso modo, a proposta de Tikhonov consistiu em tornar os vetores da matriz \mathbf{K} , que são quase linearmente dependentes (QLD), em uma matriz de vetores linearmente independentes (LI). Para isso, foi proposto adicionar o termo $\lambda^2 \mathbf{I}$ na matriz $(\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1}$, deixando assim todas as linhas LI.

Para muitos casos, a solução proposta por Tikhonov teve grande sucesso (BRAGA, 2001; HANSEN, 1998; LEMES; BRAGA; BELCHIOR, 1998; VOGEL, 2002). No entanto, para alguns outros casos, a solução ainda exhibe oscilações muito grandes quando há erros nos dados de \mathbf{g} , devido ao problema ser mal colocado.

Neste contexto, foi proposta uma melhoria neste método. Tal melhoria consistiu em adi-

Figura 6.4 – Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo) e a solução f calculada sem a regulação de Tikhonov (equação (5.15) com $a_0 = a_1 = a_2 = 0$), linha preta contínua.



Fonte: Da Autora (2020).

cionar à norma residual, um operador derivada de ordem fracionária, que pode ser visualizado pela equação (5.18).

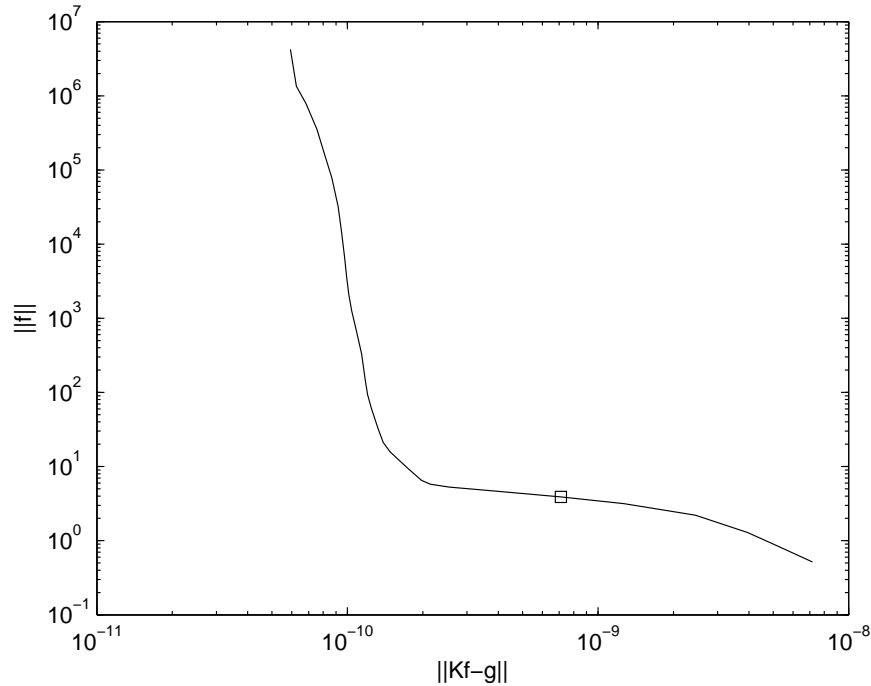
Entretanto, para realizar a comparação entre os dois processos mostrados (técnica de Tikhonov e a proposta da derivada fracionária), foi necessário coletar algumas informações antes como, por exemplo, qual parâmetro de regularização (λ) usar e qual a ordem da derivada fracionária, isto é, qual o valor de α .

O método de regularização de Tikhonov requer apenas um parâmetro para regularizar a solução (λ). Já a proposta deste trabalho, considera dois parâmetros, λ e α , o que torna a proposta mais flexível, uma vez que para regularizar a solução pode-se manter o λ fixo e modular o valor de α a fim de fornecer uma melhor solução, ou seja, uma solução que se aproxime mais da solução exata.

Portanto, o primeiro passo consistiu em obter o parâmetro de regularização através da equação (5.15), com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$, que seria o mesmo que considerar $\alpha = 0$. A curva-L, apresentada na Figura 6.5, foi utilizada para fornecer um λ inicial que, geralmente, é indicado

pelo canto da curva. O valor sugerido pela curva correspondeu a 1×10^{-11} . A construção da curva preta contínua seguiu uma sequência que se repetiu do início da curva até o final.

Figura 6.5 – Curva-L obtida através da equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$, linha preta contínua. O ponto marcado pelo quadrado corresponde ao parâmetro de regularização de $3,16 \times 10^{-10}$.



Fonte: Da Autora (2020).

A sequência proposta para a construção da curva foi iniciada ao assumir um valor de λ , incluir na equação (5.15) e obter uma solução para \mathbf{f} . Após isso, foi possível obter a norma de $\|\mathbf{f}\|$ e a norma do resíduo $\|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}\|$, o que resultou em um ponto da curva preta contínua. O processo descrito se repetiu até que se completasse toda curva.

Desta maneira, para cada valor de λ foi possível obter uma solução \mathbf{f} através da equação (5.15) que, por sua vez, possibilitou a construção de vários gráficos $f(T)$ por T . Destes vários gráficos, foi possível escolher o que visivelmente se adequou melhor à solução que se buscava.

Em outras palavras, testando os valores próximos do sugerido pela curva, foi possível obter um valor melhor. Este valor, $3,16 \times 10^{-10}$, forneceu uma melhor solução, isto é, controlou melhor o formato da solução. A Figura 6.5 apresenta o valor escolhido, sinalizado pelo quadrado na curva.

Vale comentar que a curva-L é um gráfico utilizado como primeiro recurso para se

obter um valor inicial e que fornece um bom equilíbrio entre a norma da solução e a norma do resíduo. Em muitos casos, o valor sugerido pela curva é, de fato, o melhor valor para a solução de interesse.

Entretanto, isso pode variar de problema para problema como, por exemplo, no caso deste trabalho. O valor sugerido pela curva correspondia a um valor bom, no entanto, testando outros valores pôde-se encontrar um valor ($3,16 \times 10^{-10}$) que fornecia uma melhor solução para \mathbf{f} .

Além disso, pode-se notar que o valor sinalizado pelo quadrado na Figura 6.5 corresponde a um valor que está mais a direita do canto da curva-L, com pouca diferença entre a norma da solução, porém com o valor da norma do resíduo aumentado. Ainda assim, é possível compreender que o mais importante é garantir que a norma da solução ($\|\mathbf{f}\|$) esteja minimizada.

Após a obtenção do parâmetro de regularização ótimo para a equação (5.15), foi assumido que este parâmetro ($3,16 \times 10^{-10}$) era também um λ ótimo para a equação (5.18). Era preciso, portanto, provar esta hipótese proposta. Para isso, antes foi necessário obter a ordem fracionária, α , para poder então realizar a comparação.

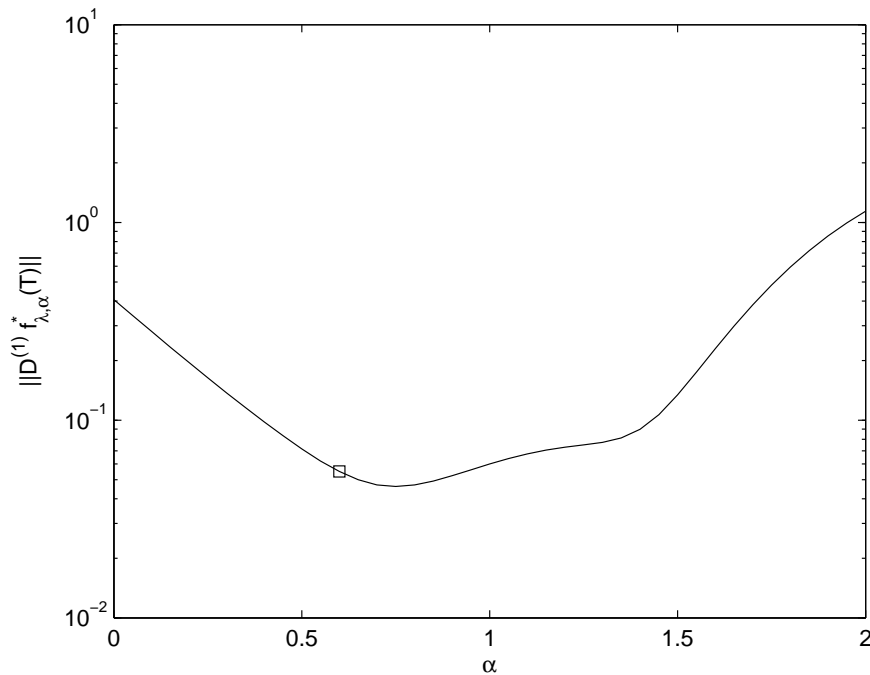
A escolha do α foi realizada por meio do gráfico exposto na Figura 6.6, que corresponde à curva obtida pela norma da derivada primeira da solução, $\|\mathbf{D}^{(1)}\mathbf{f}_{\lambda,\alpha}^*\|$, para vários valores de α .

A justificativa para a obtenção da ordem fracionária através da derivada primeira da função está na sua definição geométrica, a inclinação da curva. Quando se trabalha com uma função que oscila muito, a derivada primeira dessa função irá oscilar ainda mais, pois ora a inclinação da reta irá para mais infinito, ora para menos infinito, ora para zero, e assim por diante.

A função investigada neste trabalho possui grandes oscilações, devido o problema ser mal colocado. Portanto, para saber o quanto essa função realmente oscila, basta calcular a norma da sua derivada primeira.

Portanto, pode-se inferir que quando a norma da derivada primeira da função é pequena, quer dizer que, para aquele valor de α , existe uma pequena oscilação em \mathbf{f}^* e, por outro lado, quando a norma da derivada for grande para determinado valor de α , que \mathbf{f}^* está oscilando

Figura 6.6 – Norma da derivada primeira da solução, $\|\mathbf{D}^{(1)}\mathbf{f}_{\lambda,\alpha}^*\|$, obtida pela equação (5.18) para diferentes valores de α , com λ fixo.



Fonte: Da Autora (2020).

muito.

O processo de construção da curva partiu da escolha inicial de um valor de α (por exemplo, 0,0, 0,1, 0,2, 0,3, etc) e, posteriormente, era calculada a derivada fracionária de Grünwald-Letnikov e incluída na equação (5.18).

Dessa forma, era possível obter a função $\mathbf{f}_{\lambda,\alpha}^*$ e fazer a derivada primeira. Por fim, era então calculado a norma da derivada primeira da função para o α escolhido inicialmente. Esse processo foi realizado para todos os pontos usados na construção da curva.

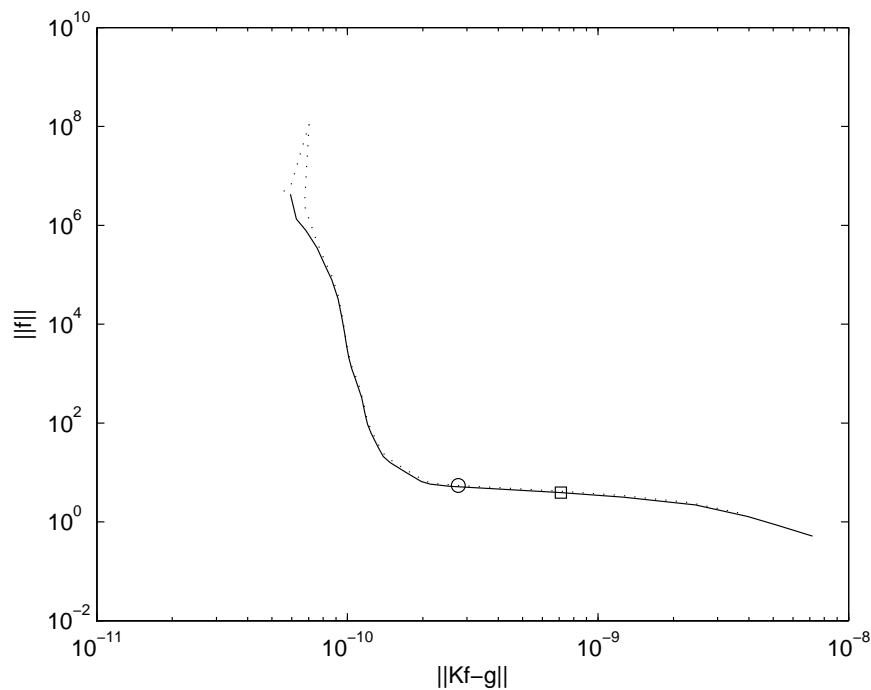
Em linhas gerais, a intenção era que o α ótimo seria aquele que estivesse no mínimo da curva, o qual era possível inferir que, para aquele valor, a função estaria oscilando menos. Entretanto, graficamente, optou-se por α correspondente a 0,6, que é um valor próximo do sugerido pelo mínimo da curva. Este valor pode ser visto na Figura 6.6, sinalizado pelo quadrado.

Sendo assim, este gráfico foi usado com o mesmo intuito do gráfico da curva-L, que era estimar um valor inicial e, depois, testando valores próximos do sugerido, era encontrado um valor que se adequava melhor à solução desejada.

Depois de determinada a ordem fracionária, pôde-se fazer a comparação das duas soluções (5.15 e 5.18) com o mesmo valor do parâmetro de regularização e visualizar se as normas das soluções e dos resíduos eram próximas.

Sendo assim, através da equação (5.18), com α fixo (0,6), pôde-se encontrar a solução $\mathbf{f}_{\lambda,\alpha}^*$, calcular sua norma, assim como a norma do resíduo e obter todos os pontos para construir a curva pontilhada preta, exposta na Figura 6.7. Para esta curva, o valor sugerido pela curva-L correspondeu a 3×10^{-11} .

Figura 6.7 – Curva-L para a equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ (linha preta contínua) e equação (5.18) com $\alpha = 0,6$ (linha preta pontilhada). Os pontos marcados pelo quadrado e pelo círculo correspondem aos parâmetros de regularização do $3,16 \times 10^{-10}$ para a equação (5.15) e (5.18), respectivamente.



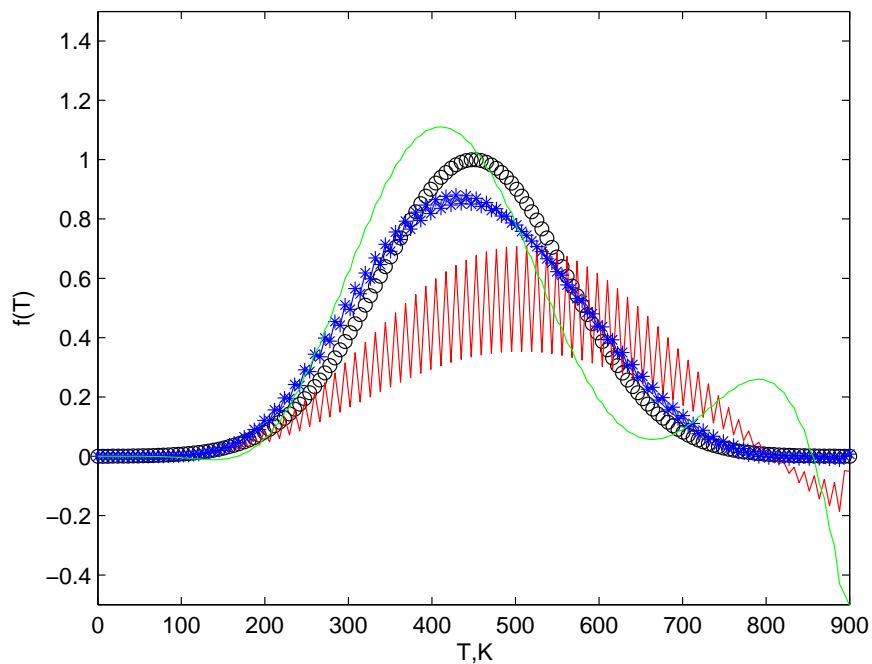
Fonte: Da Autora (2020).

Na Figura 6.7, ambos os símbolos, quadrado e círculo, correspondem ao parâmetro de regularização $3,16 \times 10^{-10}$, sendo o primeiro obtido pela equação (5.15), com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ e o segundo pela equação (5.18), com $\alpha = 0,6$. Pode-se notar que as normas das duas soluções e dos dois resíduos são próximas, o que valida a hipótese inicial de que o parâmetro de regularização ótimo para (5.15), é também o λ ótimo para (5.18).

Realizadas as etapas descritas anteriormente, pôde-se então realizar as comparações entre a solução $f(T)$ exata e as calculadas pela regularização de Tikhonov (ora $a_0 = 1$ e $a_1 =$

$a_2 = 0$, ora $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$) e a proposta do trabalho com $\alpha = 0,6$. A Figura 6.8 apresenta tais comparações.

Figura 6.8 – Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo) e as calculadas. A linha contínua vermelha foi obtida pela equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ e a linha contínua verde pela equação (5.15) com $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$. O símbolo asterisco azul é a solução encontrada pela equação (5.18) com $\alpha = 0,6$. Todos esses resultados foram obtidos usando $\lambda = 3,16 \times 10^{-10}$.



Fonte: Da Autora (2020).

A Figura 6.8 trata-se de um gráfico da distribuição de temperatura $f(T)$ para várias temperaturas. É importante salientar que o cálculo da função obtida pelo método dos mínimos quadrados não foi incluído neste gráfico pelo fato, já comentado, de sua norma da solução possuir grandes oscilações, o que prejudicaria uma visualização mais eficaz das outras soluções (ver Figura 6.4).

Todas as comparações foram realizadas tendo como referência a equação (5.9), que é descrita pelos círculos pretos, e com o parâmetro de regularização igual a $3,16 \times 10^{-10}$. Na primeira comparação, pode-se destacar a linha contínua vermelha, obtida pela equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$, isto é, considera-se a adição do operador derivada de ordem zero, $\mathbf{D}^{(0)}$.

Nota-se nesta comparação a grande oscilação que este operador derivada fornece. En-

contrar \mathbf{f} por este caminho chega-se a uma solução instável, além de não ser uma boa aproximação para a função exata.

Na segunda comparação, é possível encontrar um resultado melhor quando se considera na equação (5.15) $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$. Este resultado é mostrado na Figura 6.8 pela linha verde contínua. No entanto, é possível perceber que esta solução fornece uma amplitude grande, além de uma visível oscilação para temperaturas maiores.

Estas são as melhores soluções fornecidas pela equação (5.15). Geralmente, as estratégias utilizadas para melhorar essas soluções são:

- a) remover os erros experimentais de \mathbf{g} ;
- b) diminuir a dimensão do vetor \mathbf{f} ; e
- c) mudar a rotina de quadratura numérica.

No entanto, remover os erros experimentais, assim como diminuir a dimensão do vetor \mathbf{f} , não são estratégias que, geralmente, químicos teóricos adotariam.

Como se sabe, a Química Teórica busca descrever, com o auxílio da Matemática, a realidade da natureza e dos laboratórios experimentais. Desta forma, não considerar a presença de erros experimentais não seria algo praticável, uma vez que tais erros são intrínsecos de cada experimento.

Além disso, como já comentado, diminuir a dimensão do vetor \mathbf{f} seria o mesmo que disfarçar as oscilações. Entretanto, simplesmente por considerar a presença dos erros experimentais, já se trata de um problema mal colocado, devido a não continuidade. Por conseguinte, se está lidando com oscilações. Assim, para uma representação mais realista é preciso, de fato, considerar um vetor \mathbf{f} com dimensão significativa.

Por fim, a última estratégia seria mudar a quadratura numérica. Contudo, já foi demonstrado que a quadratura por parábolas, escolhida neste trabalho, converge mais rapidamente do que as outras quadraturas. Em outras palavras, o número de intervalos que se divide a área pretendida de a até b é consideravelmente inferior aos outros métodos.

Este trabalho propôs um caminho diferente destes citados. Quando a equação (5.18) é usada para encontrar \mathbf{f} , tem-se um novo parâmetro, α . Neste caso, com λ fixo ($3,16 \times 10^{-10}$), pode-se usar α para controlar a amplitude das oscilações. Com $\alpha = 0,6$, encontra-se uma solução que possui uma norma residual pequena, bem como oscilações de pequena amplitude. Estes resultados são mostrados na Figura 6.8 pelos asteriscos azuis.

Portanto, é possível notar facilmente que o uso da equação (5.18) ao invés da equação (5.15) fornece um resultado que é melhor. Além disso, a proposta deste trabalho recupera as mesmas representações propostas pelo método de regularização de Tikhonov.

Quando $\alpha = 0$, a solução da equação (5.18) é igual ao caso em que $a_0 = 1$, $a_1 = 0$ e $a_2 = 0$, na equação (5.15). Se $a_0 = 0$, $a_1 = 1$ e $a_2 = 0$, na equação (5.15), fornece o mesmo resultado que $\alpha = 1$, na equação (5.18). Finalmente, a equação (5.15) e a equação (5.18) levam ao mesmo resultado quando $a_0 = 0$, $a_1 = 0$ e $a_2 = 1$, com $\alpha = 2$ na ordem da derivada.

Fora desses casos especiais, existem muitas soluções que não estão contidas no espaço de solução da equação (5.15), mas estão contidas no espaço de solução da equação (5.18), onde $\alpha \in \mathbb{R}^+$ e $0 \leq \alpha \leq 2$. As situações citadas anteriormente podem justificar que a proposta deste trabalho fornece uma melhor flexibilidade e melhores opções de trabalho.

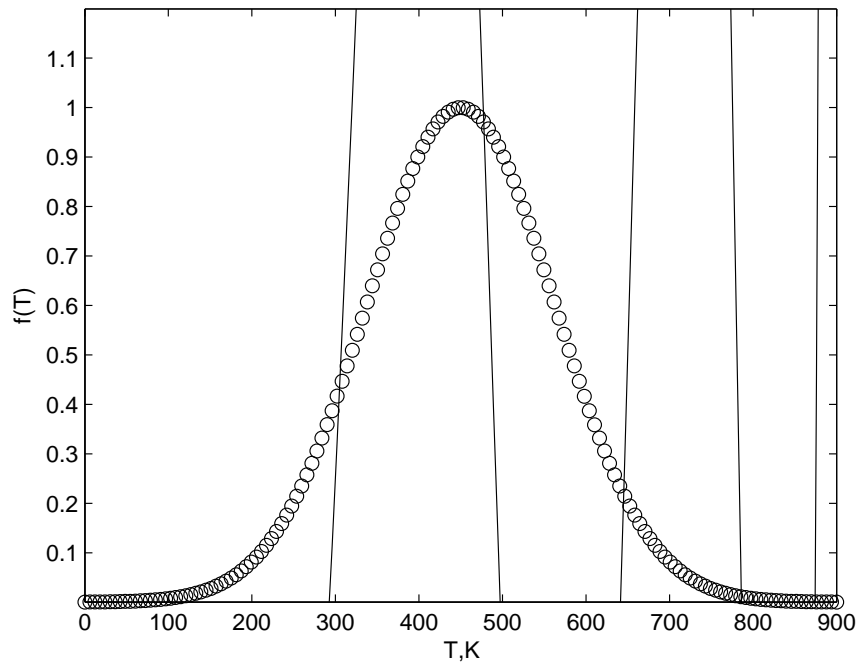
Sendo assim, pode-se dizer que o gráfico da Figura 6.8 é demonstrado para $\alpha = 0$, através da linha contínua vermelha, $\alpha = 0,6$ pelos símbolos asteriscos azuis e, por fim, $\alpha = 1$, representado pela linha contínua verde. Desta forma, é possível perceber que a medida que se varia α de 0 até 1, ou seja, da linha vermelha até a linha verde, a solução se aproxima da exata. Assim, é sugestivo pensar que algo entre 0 e 1 seria, de fato, o resultado que mais se aproximaria da curva preta exata.

Não foi demonstrado até o exato momento como se comportaria a solução obtida através da derivada segunda, ou seja, $a_2 = 1$ e $a_0 = a_1 = 0$ na equação (5.15). Este resultado pode ser visualizado através da Figura 6.9.

Nota-se que, assim como na solução do método dos mínimos quadrados (com $a_0 = a_1 = a_2 = 0$ na equação (5.15)), mostrada Figura 6.4, a solução obtida pela adição do operador derivada de segunda ordem, $\mathbf{D}^{(2)}$, não fornece uma boa aproximação com a solução exata.

Além disso, a título de curiosidade, na Figura 6.10 foi plotado o gráfico para $\alpha = 1,2$.

Figura 6.9 – Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo) e a solução \mathbf{f} calculada através da equação (5.15) com $a_2 = 1$ e $a_0 = a_1 = 0$, linha preta contínua.



Fonte: Da Autora (2020).

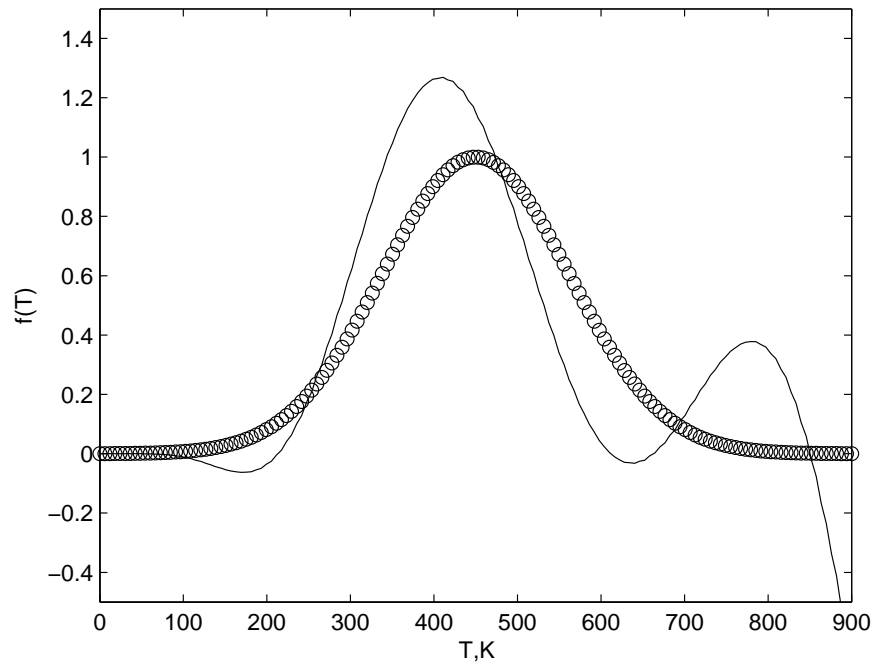
É possível notar a similaridade com a solução obtida pela equação (5.15) com $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$ (linha verde contínua) mostrada na Figura 6.8. Percebe-se, entretanto, que as amplitudes aumentam em torno da solução exata, o que nos permite inferir que os valores fracionários de 1 até 2, não são situações favoráveis.

Ao retornar à Figura 5.2, é possível notar uma última etapa, extremamente importante, a comparação do \mathbf{g} experimental, obtido por simulação, com o \mathbf{g} calculado. Essa é uma comparação muito usual no contexto de Problemas Inversos.

É possível antes, demonstrar uma afirmativa apresentada em linhas anteriores. Durante o texto foi afirmado que a solução \mathbf{f} , obtida através do método dos mínimos quadrados, minimiza a norma do resíduo ($\|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}\|$), no entanto, com uma norma da solução ($\|\mathbf{f}\|$) com grandes oscilações (ver Figura 6.4).

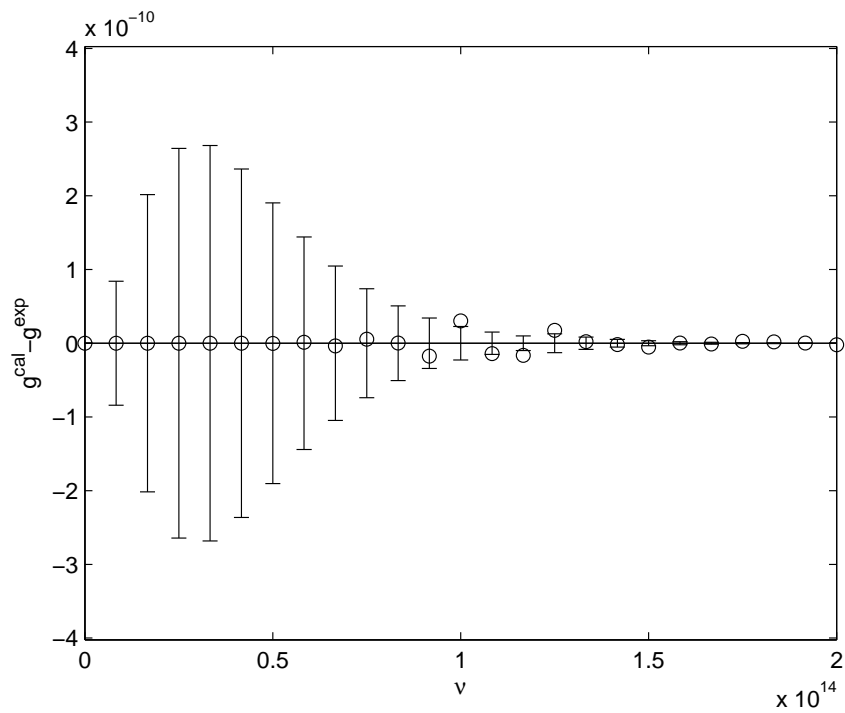
Através da Figura 6.11, é possível visualizar que, de fato, a norma do resíduo é minimizada quando utilizada a equação (5.12) ou (5.15) com $a_0 = a_1 = a_2 = 0$. Essa observação pode ser notada pelos círculos pretos.

Figura 6.10 – Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo) e a solução f calculada através da equação (5.18) com $\alpha = 1,2$, linha preta contínua.



Fonte: Da Autora (2020).

Figura 6.11 – Minimização da norma do resíduo para a equação (5.12) ou (5.15) com $a_0 = a_1 = a_2 = 0$, círculos pretos.

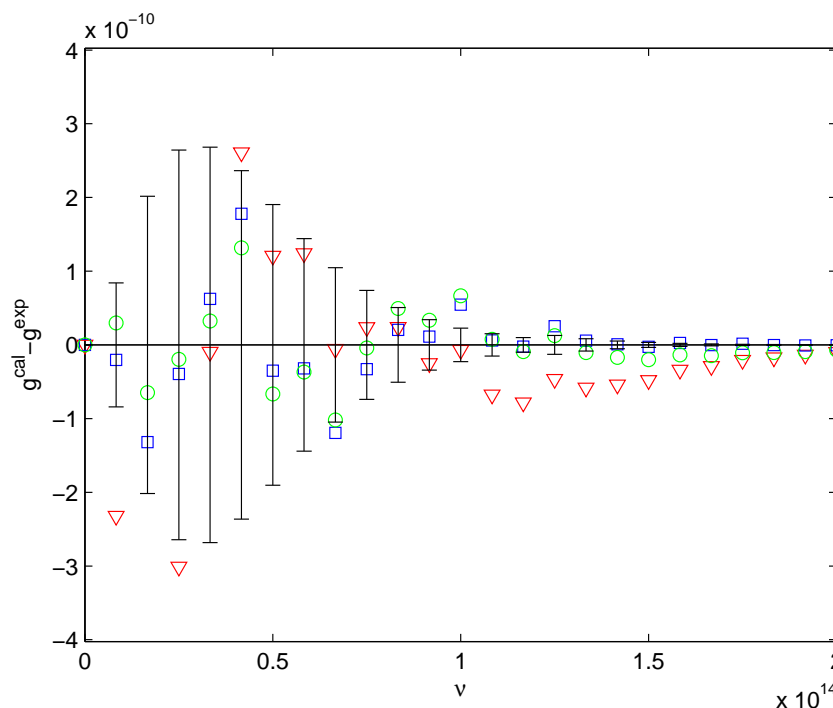


Fonte: Da Autora (2020).

O tamanho da barra de erro considerado possui o mesmo significado exposto anteriormente. Portanto, para valores de ν entre 0 até 1×10^{14} Hz foi considerado um coeficiente de variação de 5% e para valores maiores (1×10^{14} Hz a 2×10^{14} Hz) foi considerado um coeficiente de variação de 10%.

A Figura 6.12 possui a mesma interpretação, porém para as outras soluções com o método de Tikhonov e a proposta da derivada fracionária. O gráfico apresenta a diferença entre o espectro de radiação de corpo negro experimental e o calculado, para vários valores de frequência.

Figura 6.12 – Minimização da norma do resíduo para a equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ (triângulos vermelhos) e $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$ na mesma equação (círculos verdes). Os quadrados azuis representam o resultado da equação (5.18) com $\alpha = 0,6$.



Fonte: Da Autora (2020).

Os triângulos vermelhos representam o resíduo para o resultado obtido pela equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ e os círculos verdes representam o resíduo para o resultado obtido pela equação (5.15) com $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$. Vale lembrar que esses resultados podem ser obtidos usando a equação (5.18) com $\alpha = 0$ e $\alpha = 1$. Os quadrados azuis representam o resultado da equação (5.18) com $\alpha = 0,6$.

Um fato de vital importância a ser observado é se a diferença considerada está dentro

da margem de erro, isto é, dentro da barra. Sendo assim, pode-se observar que os valores recuperados para o triângulo vermelho estão, em média, fora da margem do erro experimental e com grandes oscilações.

Analisando os círculos verdes, pode-se notar que para este caso os valores recuperados estão dentro da margem do erro experimental para valores pequenos de frequência e fora da margem do erro experimental para grandes valores de frequência.

Reafirmando o que o gráfico da Figura 6.8 apresentou, é possível visualizar com auxílio da Figura 6.12 que a diferença entre o espectro de radiação experimental e o calculado, representado pelos quadrados azuis, está dentro da margem do erro experimental e com pequenas oscilações.

Em outras palavras, quando α é igual a zero, a solução encontrada não minimiza a norma residual (ver triângulos vermelhos na Figura 6.12), com a presença de grandes oscilações (linha contínua vermelha na Figura 6.8). Por outro lado, quando α é igual a um, é encontrado uma solução que se afasta do valor exato (ver círculos verdes na Figura 6.12), com uma grande oscilação em grande frequência (linha contínua verde na Figura 6.8). Portanto, existe um α que estabelece um bom equilíbrio entre a norma residual e as oscilações, este α ótimo fornece a solução desejada.

Todos esses resultados foram obtidos usando $\lambda = 3,16 \times 10^{-10}$. Para a solução encontrada pela equação (5.18), com $\alpha = 0,6$ e $\lambda = 3,16 \times 10^{-10}$, a diferença entre \mathbf{g} experimental e \mathbf{g} calculado está dentro do erro experimental e com pequenas oscilações.

Existem muitas outras situações em que é possível testar a metodologia proposta neste trabalho. Por exemplo, testar para outras formulações de derivadas fracionárias, aplicar em outro protótipo, aumentar o erro atribuído em $g(v)$, testar para outras funções $f(T)$ exatas, dentre outras sugestões que surgirão. Todas essas propostas podem ser investigadas futuramente.

O método proposto neste trabalho chegou a ser testado para outras funções $f(T)$ exatas. Sendo assim, da mesma maneira que a função (5.9) foi construída, pensando no valor de cada parâmetro, outras funções podem ser criadas. Neste trabalho, foram apresentadas duas outras funções $f(T)$ para comparação com as funções calculadas. Essas equações são descritas a seguir, equações (6.7) e (6.8).

$$f(T) = 0.3 \exp\left(\frac{-(T-350)^2}{4500}\right) + 0.7 \exp\left(\frac{-(T-750)^2}{7500}\right) \quad (6.7)$$

$$f(T) = \frac{\tanh\left(\frac{T-250}{20}\right) + \tanh\left(\frac{-T+550}{20}\right)}{2} \quad (6.8)$$

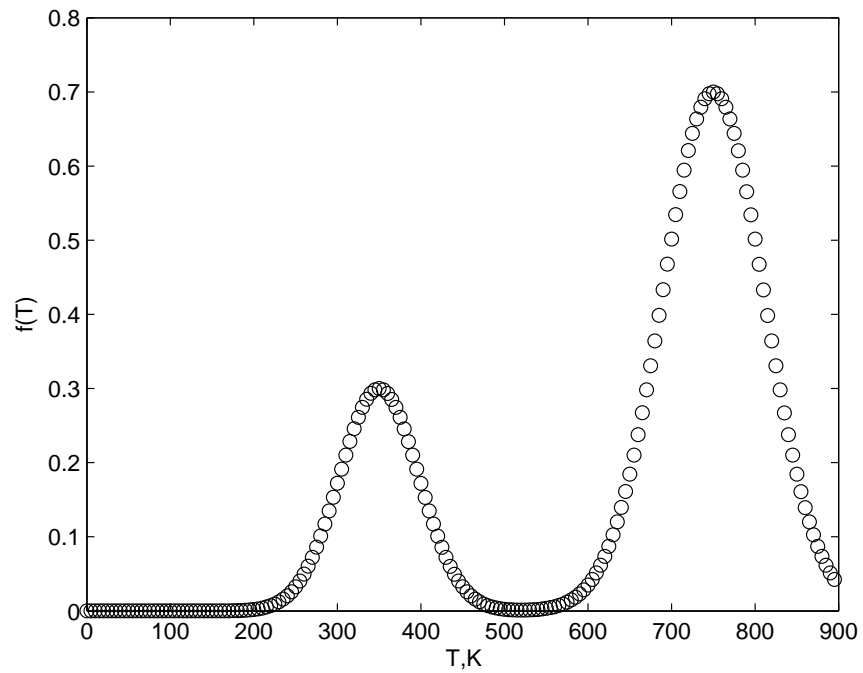
A Figura 6.13 representa a equação descrita em 6.7, assim como a subrotina *fext2* permite construir o gráfico descrito pela função exponencial. Da mesma forma, a Figura 6.14 representa a equação (6.8), a qual envolve a função tangente hiperbólica. A subrotina *fext3* constrói a curva exposta na Figura 6.14.

Aplicando os casos descritos nas equações (6.7) e (6.8) na metodologia do trabalho, foi possível obter as Figuras 6.15 e 6.16. A mesma análise realizada na Figura 6.8, pôde ser efetuada para estes novos casos.

Os melhores resultados foram encontrados quando se considerou a ordem da derivada fracionária $\alpha = 0,5$, para o caso da Figura 6.15 e $\alpha = 0,6$ para a descrição da Figura 6.16. O parâmetro de regularização considerado foi $\lambda = 4,47 \times 10^{-10}$ e $\lambda = 1,95 \times 10^{-10}$, respectivamente.

A dimensão dos vetores \mathbf{g} , \mathbf{f} e da matriz \mathbf{K} , assim como o coeficiente de variação ora de 5%, ora de 10%, foram mantidos. Mais uma vez, a modificação proposta (símbolo asterisco azul) permitiu alcançar resultados melhores, com uma norma da solução pequena, assim como pequenas oscilações, quando em comparação com o modelo usual, isto é, quando $\alpha = 0$ (linha contínua vermelha) ou $\alpha = 1$ (linha contínua verde).

Figura 6.13 – Função $f(T)$ exata obtida através da equação (6.7).



Fonte: Da Autora (2020).

```
function fext2(Tmax,delta,delta1,beta,beta1)
%>>fext2(900,350,750,4500,7500)

afunc=@(T) 0.3*exp(-(T-delta).^2/beta)+0.7*exp(-(T-delta1).^2/beta1);

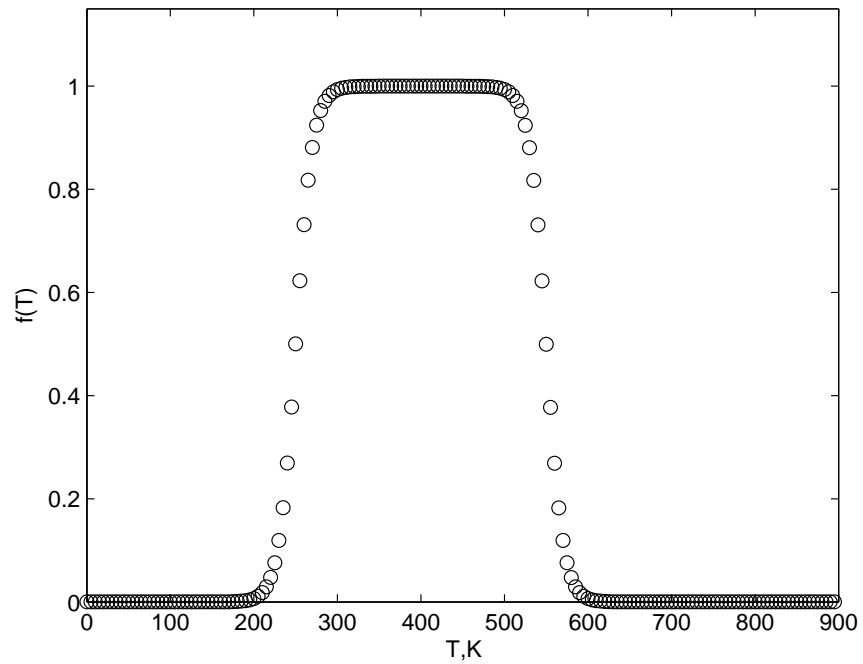
T=0.01:5:Tmax;

a2=afunc(T);

figure(1)
plot(T,a2,'ko')
xlabel('T,K')
ylabel('f(T)')
axis([0 900 0 0.8])

end
```

Figura 6.14 – Função $f(T)$ exata obtida através da equação (6.8).



Fonte: Da Autora (2020).

```
function fext3(Tmax,delta,delta1,beta)
%>>fext3(900,250,550,20)

afunc=@(T) (tanh((T-delta)/beta)+tanh((-T+delta1)/beta))/2;

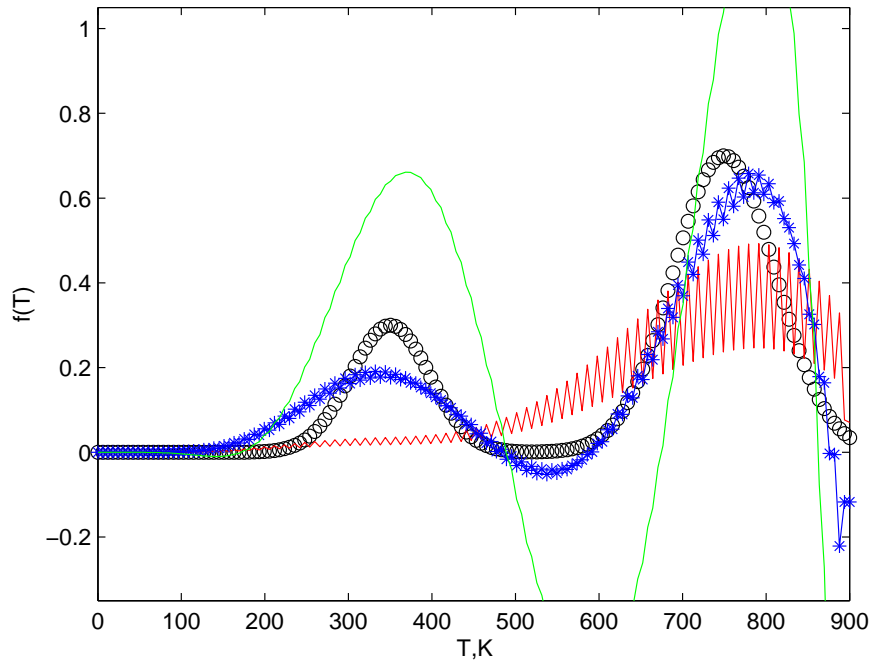
T=0.01:5:Tmax;

a3=afunc(T);

figure(1)
plot(T,a3,'ko')
xlabel('T,K')
ylabel('f(T)')
axis([0 900 0 1.15])

end
```

Figura 6.15 – Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo), obtida pela equação (6.7) e as calculadas. A linha contínua vermelha foi obtida pela equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ e a linha contínua verde pela equação (5.15) com $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$. O símbolo asterisco azul é a solução encontrada pela equação (5.18) com $\alpha = 0,5$. Todos esses resultados foram obtidos usando $\lambda = 4,47 \times 10^{-10}$.



Fonte: Da Autora (2020).

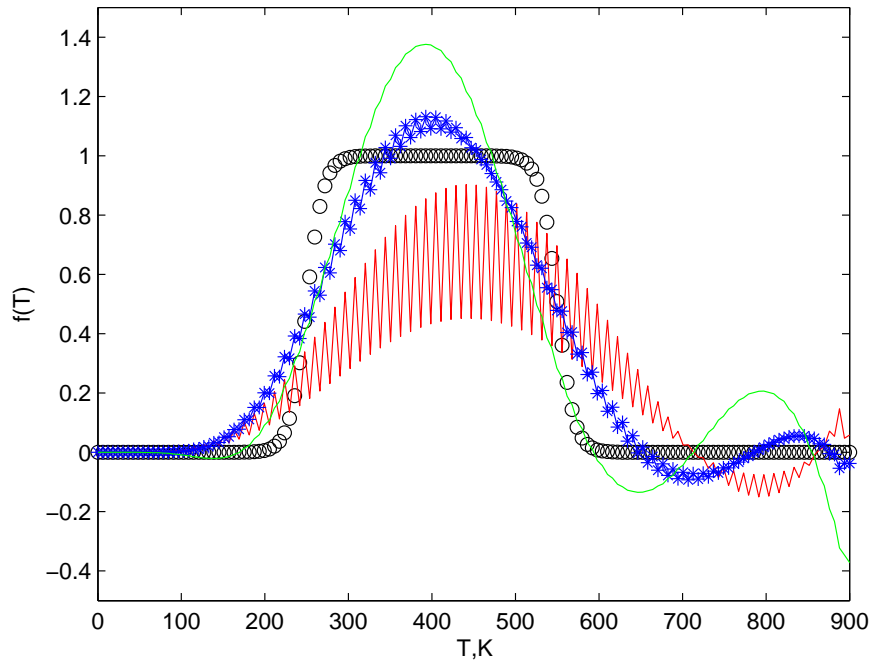
Os resultados apresentados nas Figuras 6.8, 6.12, 6.15 e 6.16, mostram que a modificação proposta neste estudo é mais eficaz e mais flexível do que o método tradicional, permitindo obter resultados melhores mesmo quando se considera a resolução de um problema mal colocado, isto é, um problema com a presença de erros experimentais.

Não é possível afirmar ao certo o que levou à melhoria da solução quando utilizado o operador derivada de ordem fracionária. Para afirmar tal resultado, seria preciso entender rigorosamente o que significa/representa α .

Levando em consideração que a ordem fracionária ainda não possui uma definição geométrica e física, além de não saber em quais situações sua aplicação é favorável ou não, muito ainda se precisa analisar e ser compartilhado por toda comunidade científica.

Entretanto, o que os pesquisadores engajados neste projeto de pesquisa sugerem é que a melhoria aconteceu, em princípio, devido ao fato da derivada fracionária possuir uma norma

Figura 6.16 – Comparação entre a distribuição de temperatura exata (círculo), obtida pela equação (6.8) e as calculadas. A linha contínua vermelha foi obtida pela equação (5.15) com $a_0 = 1$ e $a_1 = a_2 = 0$ e a linha contínua verde pela equação (5.15) com $a_1 = 1$ e $a_0 = a_2 = 0$. O símbolo asterisco azul é a solução encontrada pela equação (5.18) com $\alpha = 0,6$. Todos esses resultados foram obtidos usando $\lambda = 1,95 \times 10^{-10}$.



Fonte: Da Autora (2020).

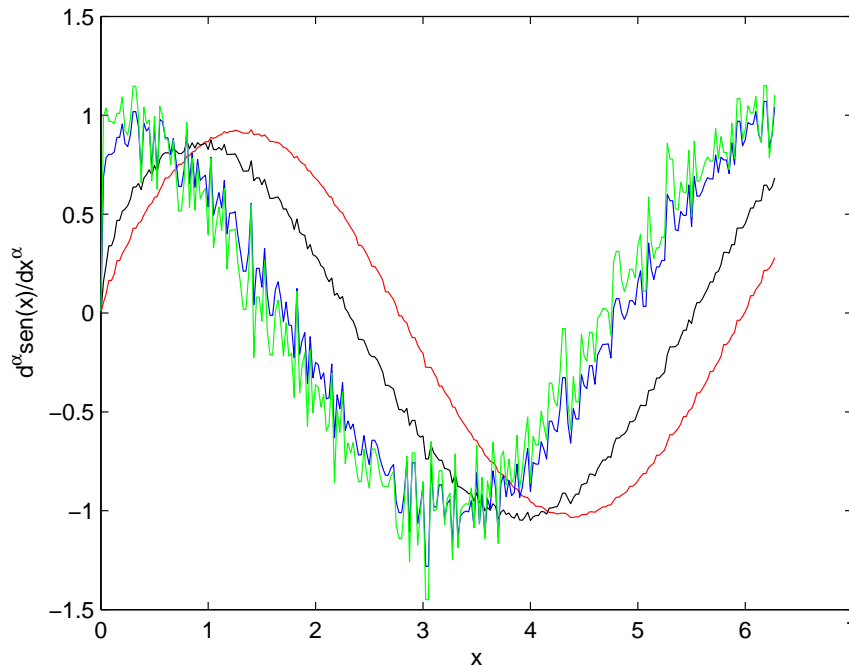
menor do que a derivada de ordem inteira.

Justificar tal afirmativa torna-se relativamente simples quando se considera, por exemplo, a derivada fracionária de Grünwald-Letnikov da função seno, de 0 a 2π , com pequenos erros. Realizando a derivada para $\alpha = 0,2$ (linha vermelha), $\alpha = 0,5$ (linha preta), $\alpha = 0,9$ (linha azul) e $\alpha = 1,0$ (linha verde) obtém-se o ilustrado na Figura 6.17. As linhas pontilhadas em cada curva representam a função seno sem a presença de erros.

É possível notar as pequenas oscilações quando se realiza a derivada de seno para $\alpha = 0,2$, a linha vermelha contínua (com erros) e a linha pontilhada (sem erros) possuem grande similaridade. Para a derivada com valor de $\alpha = 0,5$ (linha preta contínua e pontilhada), é possível notar que as curvas começam a se diferenciar.

A partir da variação de α para valores maiores, por exemplo, $\alpha = 0,9$, nota-se que grandes oscilações começam a aparecer (linha azul). Quanto mais se aproxima da derivada de

Figura 6.17 – Derivada de Grünwald-Letnikov da função seno de 0 a 2π , com a presença de pequenos erros, para $\alpha = 0,2$ (linha vermelha), $\alpha = 0,5$ (linha preta), $\alpha = 0,9$ (linha azul) e $\alpha = 1,0$ (linha verde). As linhas pontilhadas representam a função seno sem a presença de erros.



Fonte: Da Autora (2020).

valor inteiro (linha verde), mais oscilações aparecem. Isto é, quanto maior a ordem da derivada, maior a norma dessa derivada e, conseqüentemente, maiores oscilações ocorrem.

Desta forma, o uso de derivadas fracionárias fornece uma grande motivação para serem usadas no lugar de derivadas de ordem inteira. Através da Figura 6.17, pode-se visualizar a afirmativa de que derivadas fracionárias possuem uma norma menor do que as derivadas de ordem inteira. A subrotina *dfracsen*, permite a construção do gráfico (6.17).

```
function dfracsen(sigma)
%>>dfracsen(0.0025)
randn('seed',1.7282e9);
hx=0.025;
x=0:hx:2*pi;x=x';
f=@(x) sin(x);
ferr=f(x)+sigma*randn(size(x));
```

```

DGL02=derivadaglm(x,hx,0.2);
DGL05=derivadaglm(x,hx,0.5);
DGL09=derivadaglm(x,hx,0.9);
DGL1=derivadaglm(x,hx,1.0);

figure(1)
plot(x,DGL02*ferr,'r',x,DGL05*ferr,'k',x,DGL09*ferr,'b',x,DGL1*ferr,'g')
hold on
plot(x,DGL02*f(x),'r:',x,DGL05*f(x),'k:',x,DGL09*f(x),'b:',x,...
DGL1*f(x),'g:')
xlabel('x')
ylabel('d^{\alpha}sen(x)/dx^{\alpha}')
end

function [DGL]=derivadaglm(t,h,a)
for j=1:length(t);
N=ceil(t(j)/h);
i=1;
for k=N:-1:0
T(j,i)=(-1)^k*cbg(a,k)/h^a;
i=i+1;
end
end
DGL=T;
end

function c=cbg(a,k)
w=1;
for j=1:k
w=w*(1-(a+1)/j);
end
c=w/(-1)^k;
end

```

7 CONCLUSÃO

Grandes avanços na Ciência e na tecnologia têm sido possíveis a partir dos tão falados Problemas Inversos. Sem dúvida, os Problemas Inversos representam um novo horizonte para a caracterização das ciências experimentais, onde se consegue modelar matematicamente, com precisão, fenômenos que ocorrem na natureza e em laboratórios de pesquisa.

O mais interessante no estudo de Problemas Inversos é o fato de desenvolver o hábito de “pensar inversamente”, pois considerando apenas o problema direto, a situação não será analisada por todos os lados. No entanto, em muitos artigos, livros, textos em geral, é sempre dado ênfase a um determinado problema de forma direta. Isso pode ser atribuído muitas vezes à tradicional forma de ensinar. Desta forma, pode-se dizer que parte do processo de visualizar/-reconhecer um Problema Inverso está relacionada com a intuição e essa depende, certamente, da experiência de cada um.

De maneira análoga aos Problemas Inversos, investigações envolvendo o ainda tímido Cálculo Fracionário podem contribuir fortemente com diversas áreas da Ciência. Este relativamente novo ramo da Matemática vem conquistando cada vez mais seu espaço.

Considerando que o papel central da Ciência está direcionado às perguntas, para os amantes da Ciência, trabalhar com Cálculo Fracionário traduz o mais empolgante de ser cientista. Partindo deste pensamento, pode-se entender o grande fascínio que é trabalhar neste novo ramo da matemática. Diferente do cálculo tradicional, de ordem inteira, o Cálculo Fracionário ainda possui muitas questões levantadas desde a sua origem e que não foram respondidas até o momento.

Para alguns, isto gera um desestímulo para trabalhar com estes conceitos. No entanto, para aqueles cientistas que compreendem a questão central de toda a Ciência, as perguntas, se fascinam com o quanto ainda se pode descobrir com este novo ramo.

Do ponto de vista de atizar a curiosidade de pesquisadores, o Cálculo Fracionário executa este papel com maestria. Com certeza, todo cientista que se dispõe a investigar este ramo e que se propõe a entender alguns conceitos, percebe o grande alcance que esta área pode proporcionar.

Neste cenário, um emaranhado de técnicas de Problemas Inversos atrelados a técnicas do Cálculo Fracionário, certamente agrega uma complexidade, no entanto, ao mesmo tempo, gera uma importante investigação que pode proporcionar grandes frutos para a Ciência no futuro.

Em linhas gerais, pôde-se concluir com a execução deste trabalho que, ao propor uma solução que dependesse de dois parâmetros (λ e α), obteve-se uma maior flexibilidade para modelar a solução de interesse. Como foi possível notar, mantendo um parâmetro fixo, neste caso λ , pôde-se modular um α que melhor se adequou ao resultado pretendido.

Outro destaque importante deste estudo consiste no espaço de solução que cada proposta possui. A proposta deste trabalho forneceu um espaço de solução bem maior que o espaço de solução da proposta de Tikhonov. No método de regularização de Tikhonov, α pôde assumir apenas três valores, 0, 1 ou 2. Já a proposta da derivada fracionária permitiu que o α variasse de 0 até 2. Além disso, essa proposta pôde recuperar as sugestões da técnica de Tikhonov.

Em outras palavras, o presente trabalho mostrou que esta modificação da derivada de ordem inteira, para a derivada de ordem fracionária, foi mais eficaz, ora com $\alpha = 0,6$, ora com $\alpha = 0,5$, do que com o método de Tikhonov com o valores inteiros para as derivadas.

Além disso, mesmo considerando a presença de erros experimentais (coeficiente de variação de 5% e 10% em dados simulados), isto é, mesmo se tratando de um problema mal colocado, a metodologia proposta forneceu melhores resultados do que a técnica tradicional.

Desta forma, o aprimoramento proposto no método de Tikhonov levou a melhores resultados do que aqueles do método usual de regularização, melhora essa que foi reconhecida quando a comparação foi feita usando o problema inverso da radiação de corpo negro. Sendo assim, pôde-se inferir que a aplicação de conceitos do Cálculo Fracionário melhorou a resolução de um Problema Inverso, como almejado no início de todo o estudo.

PERSPECTIVAS

A expectativa é que o estudo aqui desenvolvido possa servir de ponto de partida para outros trabalhos. Alguns tópicos foram destacados a seguir para que, em um futuro, possam ser investigados. São eles:

- a) aprimorar o método de obtenção da ordem fracionária, α ;
- b) aplicar o modelo proposto neste trabalho em outro protótipo;
- c) incluir o modelo fracionário da técnica de regularização de Tikhonov, proposto neste trabalho, no estudo de Redes Neurais Artificiais de Hopfield;
- d) aumentar o erro atribuído a $g(v)$; e
- e) alterar a derivada fracionária utilizada.

REFERÊNCIAS

- ABEL, N. H. **Oeuvres completes de Niels Henrik Abel**. Cambridge: Cambridge University, 2012. v.1.
- ANTON, H.; BIVENS, I.; DAVIS, S. **Cálculo**. 10. ed. São Paulo: Bookman, 2014.
- BOJARSKI, N. Inverse black body radiation. **IEEE Transactions on Antennas and Propagation**, v. 30, n. 4, p. 778-780, 1982.
- BRAGA, J. P. Numerical comparison between Tikhonov regularization and singular value decomposition methods using the L curve criterion. **Journal of Mathematical Chemistry**, v. 29, n. 2, 2001.
- BRAGA, J. P. et al. Problemas inversos mal colocados em química. **Química Nova**, v. 39, n. 7, p. 886-891, 2016.
- CAMARGO, R. F. **Cálculo fracionário e aplicações**. 2009. 135f. Tese (Doutorado em Matemática) - Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2009.
- CAMARGO, R. F.; DE OLIVEIRA, E. C. **Cálculo fracionário**. São Paulo: Livraria da Física, 2015.
- CHOI, K.; LATERMAN, A. D.; SHIN, J. Regularized minimum divergence methods for the inverse blackbody radiation problem. **Inverse Problems**, v. 22, n. 4, p. 1381-1403, 2006.
- COSTA, É. D. M. **Problemas inversos em termodinâmica: tratamento quântico e clássico**. 2013. 59f. Dissertação (Mestrado em Química) - Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, Alfenas, 2013.
- COSTA, É. D. M. **Determinação da função energia potencial a partir do coeficiente de viscosidade quântico abordando a teoria de problemas inversos**. 2017. 86f. Dissertação (Doutorado em Química) - Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, Alfenas, 2017.
- DAVID, S. A.; LINARES, J. L.; PALLONE, E. M. J. A. Fractional order calculus: historical apologia, basic concepts and some applications. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 33, n. 4, 2011.
- DE OLIVEIRA, E. C.; MACHADO, J. A. A review of definitions for fractional derivatives and integral. **Mathematical Problems in Engineering**, v. 2014, p. 1-6, 2014.
- DE SANTANA, J. E. O. **Matemática aplicada à química**. 2016. 96f. Dissertação (Mestrado em Matemática) - Departamento de Matemática, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2016.
- DE SOUSA, R. V. **Problemas diretos e inversos em química e física médica**. 2009. 158f. Tese (Doutorado em Química) - Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas

Gerais, Belo Horizonte, 2009.

DUMITRU, B.; KAI, D.; ENRICO, S. **Fractional calculus: models and numerical methods**. Singapore: World Scientific, 2012. v.3.

EINSTEIN, A. Carta de Albert Einstein em homenagem a Emmy Noether após a morte dela. Jornal americano **The New York Times**, New York, 1º de maio de 1935. Disponível em: <https://www.bbc.com/portuguese/amp/geral-39275631>. Acesso em: 22 de outubro de 2019.

EISBERG, R.; RESNICK, R. **Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas**. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1979.

FERREIRA, B. D. L. **Problemas diretos e inversos em cinética química e ressonância magnética nuclear**. 2012. 98f. Dissertação (Mestrado em Química) - Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2012.

FERREIRA, B. D. L. **Problemas diretos e inversos em cinética química e reconstrução de imagens**. 2016. 175f. Tese (Doutorado em Química) - Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2016.

FULINI, M. A. **História do cálculo diferencial e integral**. 2016. 55f. Monografia (Licenciatura em Matemática) - Departamento de Matemática e Estatística, Universidade Federal de São João del-Rei, São João del-Rei, 2016.

GEARHART, C. Black body radiation. **Physics Education**, v.7, p. 39-42, 2009.

GRÜNWARD, A. K. Derivationen und deren Anwedung. **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 12, p. 441-480, 1867.

HADAMARD, J. **Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations**. New Haven: Yale University, 1923.

HANSEN, P. C. **Rank-deficient and discrete ill-posed problems: numerical aspects of linear inversion**. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2005. v.4.

KABANIKHIN, S. I. Definitions and examples of inverse and ill-posed problems. **Journal of Inverse and Ill-Posed Problems**, v. 16, n. 4, p. 317-357, 2008.

LAKHTAKIA, M. N.; LAKHTAKIA, A. On some relations for the inverse blackbody radiation problem. **Applied Physics B. Photophysics and Laser Chemistry**, v. 39, n. 3, p. 191-193, 1986.

LEMES, N. H. T.; BRAGA, J. P.; BELCHIOR, J. C. Spherical potential energy function from second virial coefficient using Tikhonov regularization and truncated singular value decomposition. **Chemical physics letters**, v. 296, n. 3-4, p. 233-238, 1998.

LEMES, N. H. T. **Cálculo fracionário: teoria, métodos e aplicações**. v. 1. Semestre 1, ano 2018. Notas de aula (disciplina de Mestrado) - Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, Alfenas, 2018.

LEMES, N. H. T. **Problemas inversos**. Semestre 1, ano 2018. Notas de aula (disciplina de

Mestrado) - Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, Alfenas, 2018.

LETNIKOV, A. V. Theory of Differentiation with an arbitrary index. **Matematicheskii Sbornik**, v. 3, p. 1-68, 1868.

LI, H. Solution of inverse blackbody radiation problem with conjugate gradient method. **IEEE Transactions on Antennas and Propagation**, v. 53, n. 5, p. 1840-1842, 2005.

MACHADO, J. T.; KIRYAKOVA, V.; MAINARDI, F. Recent history of fractional calculus. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, v. 16, n.3, p. 1140-1153, 2011.

NANXIAN, C. A new method for inverse black body radiation problem. **Chinese Physics Letters**, v. 4, n. 8, p. 337, 1987.

OLDHAM, K.; SPANIER, J. **The fractional calculus theory and applications of differentiation and integration to arbitrary order**. New York: Elsevier, 1974.

OLIVEIRA, H. S. **Introdução ao cálculo de ordem arbitrária**. 2010. 122f. Dissertação (Mestrado Profissional em Matemática) - Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2010.

ORTIGUEIRA, M. D.; MACHADO, J. A. T. What is a fractional derivative?. **Journal of computational Physics**, v. 293, p. 4-13, 2015.

PHILLIPS, D. L. A Technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind. **Journal of the Association for Computing Machinery**, p. 84-97, 1962.

PODLUBNY, I. **Fractional differential equations**. San Diego: Academic Press, 1999.

RAMÍREZ, J. P. S. **Função gama**. 2015. 11f. Monografia - Departamento de Matemática - Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2016.

RICHIT, A. **Aspectos conceituais e instrumentais do conhecimento da prática do professor de cálculo diferencial e integral no contexto das tecnologias digitais**. 2010. 243f. Dissertação (Mestrado em Ensino e Aprendizagem de Matemática e seus Fundamentos Filosófico-Científicos) - Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista, Rio Claro, 2010.

SÓLYOM, A. RICHTER, P. **Quantum Mechanics and Solid State Physics for Electric Engineers**. Notas de aula - Department of Atomic Physics - Faculty of Natural Sciences - Budapest University of Technology and Economics, 2014.

SUN, H. et al. 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.

SUN, X.; JAGGARD, D. L. The inverse blackbody radiation problem: A regularization solution. **Journal of Applied Physics**, v. 62, p. 4382, 1987.

TAN, X. et al. Numerical investigation of the inverse blackbody radiation problem. **Journal of the Optical Society of America A**, v. 11, n. 3, p. 1068-1072, 1994.

TIKHONOV, A. N. Translated in Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method. **Soviet Mathematics**, p. 1035-1038, 1963.

TEODORO, G. S.; OLIVEIRA, D. S.; DE OLIVEIRA, E. C. Sobre derivadas fracionárias. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 40, n. 2, 2018.

TEODORO, G. S. **Derivadas fracionárias: tipos e critérios de validade**. 2019. 182f. Tese (Doutorado em Matemática Aplicada) - Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2019.

TEODORO, G. S.; MACHADO, J. A. T.; DE OLIVEIRA, E. C. A review of definitions of fractional derivatives and other operators. **Journal of Computational Physics**, v. 388, p. 195-208, 2019.

VOGEL, C. R. **Computational methods for inverse problems**. Philadelphia: Siam, 2002. v.23.

WEI, Y. et al. A note on short memory principle of fractional calculus. **Fractional Calculus and Applied Analysis**, v. 20, n. 6, p. 1382-1404, 2017.

WU, J. MA, Z. A regularized GMRES method for inverse blackbody radiation problem. **Thermal Science**, v. 17, n. 3, p. 847-852, 2013.

ZEILINGER, A. **A face oculta da natureza: o novo mundo da física quântica**. São Paulo: Globo, 2005.

ZHDANOV, M. S. Principles of ill-posed inverse problem solution. **Methods in Geochemistry and Geophysics**. v. 43, p. 299-319, 2009.

APÊNDICE A - A procura pela Luz Ideal

Antes de iniciar, é importante salientar que o conteúdo abordado no texto descrito neste APÊNDICE seguiu a abordagem feita nos livros: “*A face oculta da natureza: o novo mundo da física quântica*”, de Anton Zeilinger (2005) e “*Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*”, dos autores Eisberg e Resnik (1979).

A definição sobre *Radiação de Corpo Negro* aqui exposta, foi brilhantemente abordada por Anton Zeilinger em seu livro, além de diversas outras descrições importantes sobre a Física Quântica em um contexto geral. Recomenda-se, com satisfação, a leitura deste livro. Além disso, procurou-se abordar, de maneira sucinta, os estudos sobre da radiação de corpo negro com foco nos trabalhos de Rayleigh-Jeans e Max Planck, parte essa extraída do excelente livro de Eisberg e Resnik.

No fim do século XIX, estava em debate nos países industriais, uma questão a respeito de duas novas tecnologias que eram de grande importância para a iluminação das cidades. O dilema consistia em qual tipo de fonte de iluminação era mais apropriada, gás ou eletricidade. O impasse consistia em descobrir qual tipo de iluminação fornecia mais luz e menos custo.

Dessa forma, era necessário realizar medições físicas muito exatas para que então fosse possível comparar a luz a gás e a luz elétrica, relativamente mais recente na época. Sendo assim, os físicos se mobilizaram para conseguir realizar tais medições.

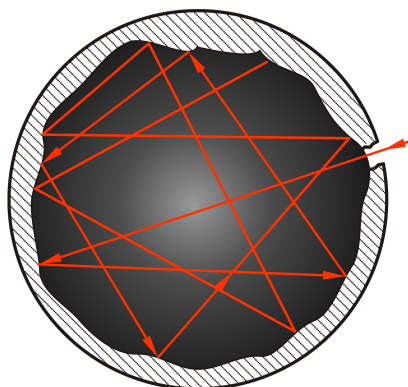
Surgiu-se, inicialmente, a proposta de se comparar diretamente as duas fontes de iluminação. No entanto, os cientistas, logo no início, se depararam com grandes dificuldades, pois, como se sabe, a luz emitida depende de inúmeros fatores. Por exemplo, a luz elétrica é dependente da constituição do filamento incandescente e seu formato, da quantidade de energia que é transmitida, do gás que ocupa o frasco de vidro, dentre outros. O caso da luz a gás também é dependente de fatores semelhantes.

Sendo assim, foi proposto que ao invés de se comparar as duas fontes de luz diretamente, que a comparação fosse feita com uma fonte de luz ideal, em que as propriedades não dependessem desses parâmetros, ou seja, uma fonte que gere uma “luz ideal”.

Algo curioso é que os físicos tinham acabado de descobrir, naquela mesma época,

uma fonte de luz ideal. Eles criaram um modelo de corpo aquecido, o qual chamaram de Corpo Negro, que se tratava de uma esfera oca com um pequeno furo conectando sua superfície externa com a cavidade em seu interior. Esse corpo ideal, Figura A.1, possuía a habilidade de não refletir nenhuma luz, qualquer que fosse a fonte - uma lâmpada ou holofote - ele sempre iria parecer negro, daí o nome.

Figura A.1 – Ilustração esquemática de um corpo negro.



Fonte: SÓLYOM; RICHTER (2014).

Estudos realizados naquela época apontaram que a luz no interior de uma cavidade era dependente *apenas* da temperatura de suas paredes e não da sua constituição. Como se sabe, um corpo incandescente emite luz. Por exemplo, uma chapa de ferro aquecida: inicialmente ficará preta, mais tarde ficará em um vermelho escuro e, quanto mais quente, mais brilho apresentará. Nota-se, portanto, que não somente a intensidade da luz emitida se altera, mas também a cor transmitida, sendo totalmente dependentes da temperatura. Essa afirmação é válida a medida em que todas as paredes da cavidade possuem a mesma temperatura.

Ao se incandescerem, as paredes da cavidade podem emitir e absorver luz ao mesmo tempo. Como se sabe, toda superfície (como por exemplo, as páginas desta dissertação) absorve uma parte da luz incidente sobre ela e reflete uma outra, de modo que podemos visualizar os objetos. O mesmo é válido para as paredes da cavidade (Figura A.1).

Sendo assim, a luz presente no interior da cavidade aumentará com a emissão de luz das paredes e diminuirá por causa da quantidade de luz absorvida por elas, fornecendo, automaticamente, um estado de equilíbrio. Tal equilíbrio é alcançado quando as paredes emitem e absorvem a mesma quantidade de luz, dependendo, evidentemente, da temperatura. Este estado de equilíbrio é denominado como equilíbrio térmico.

A independência da quantidade de luz, da constituição das paredes do interior da cavidade que estava sendo investigada naquela época, era então justificada pelo equilíbrio mencionado, pois a proporção entre a quantidade de luz emitida e absorvida por uma determinada temperatura, era igual para todos os corpos. O que estava sendo descrito dentro da cavidade era, portanto, uma fonte de luz ideal, pois a luz emitida não dependia das propriedades da fonte de luz. Surgia então a luz ideal buscada, com a qual se podia comparar todas as outras fontes de luz.

A dificuldade do momento era como utilizar a luz ideal na prática. A proposta era utilizar uma cavidade bem grande em que seria possível fazer um buraco extremamente fino, através do qual se escaparia luz, independente de qual fosse a temperatura. A intenção era fazer um buraco tão fino, que a luz contida no interior da cavidade se alteraria sutilmente com a emissão da luz por este pequeno orifício. Essa “luz” que escapava da cavidade foi tratada como *radiação de corpo negro*. Encontra-se então a “luz ideal” que pôde finalmente servir como fonte de comparação para a luz a gás e para a luz elétrica.

Nos tempos atuais, o impasse a respeito de qual fonte de iluminação fornece mais luz e menos custo está resolvido de modo incontestável. No final das contas, foram as forças do mercado que determinaram essa decisão. No entanto, os experimentos desenvolvidos naquela época no Instituto Imperial de Física e Tecnologia de Berlim, a respeito da luz ideal, tiveram consequências insatisfatórias para os físicos.

Como era evidente, por uma questão de princípio, a cor da luz de uma cavidade dependia apenas da sua temperatura. No entanto, por muito tempo os físicos não foram capazes de dar uma explicação estritamente teórica para o caso da luz, cobra-se aqui não somente exemplos, mas sim um formalismo matemático, descrevendo assim uma situação completamente insatisfatória para esses cientistas (considerando também que um dos objetivos da física é explicar todos os fenômenos naturais da maneira mais simples possível).

Ao se falar de luz ideal, era desejado ter um enunciado matemático exato a respeito da quantidade de luz emitida pela cavidade e sobre sua cor. O desenvolvimento dessa teoria sobre a radiação do corpo negro foi, mais tarde, elucidado pelo célebre físico alemão Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858 – 1947), considerado por toda comunidade científica como o pai da física quântica.

Contudo, antes que Planck propusesse sua teoria, muitos outros cientistas tentaram explicar o fenômeno da luz, propondo modelos e mais modelos. Dentre eles, se destacam: Kirchhoff - sendo ele autor do termo *corpo negro*; Stefan-Boltzmann; Wien - onde o termo *deslocamento de Wien* ficou conhecido; e Rayleigh-Jeans - a partir do trabalho desses dois cientistas, pode-se dizer que a história da física tomou um novo rumo.

Tudo começou quando Rayleigh-Jeans propôs um modelo, equação (A.1), para descrever a densidade de radiação dentro de um corpo negro, $\rho_T(\nu)$, onde a frequência está representada por ν ; k , a constante de Boltzmann; T , a temperatura; e, c , a constante da velocidade da luz. No entanto, ao comparar com o modelo experimental, logo se notou uma enorme discrepância com o que a teoria clássica propunha.

$$\rho_T(\nu) = \frac{8\pi\nu^2 kT}{c^3} d\nu \quad (\text{A.1})$$

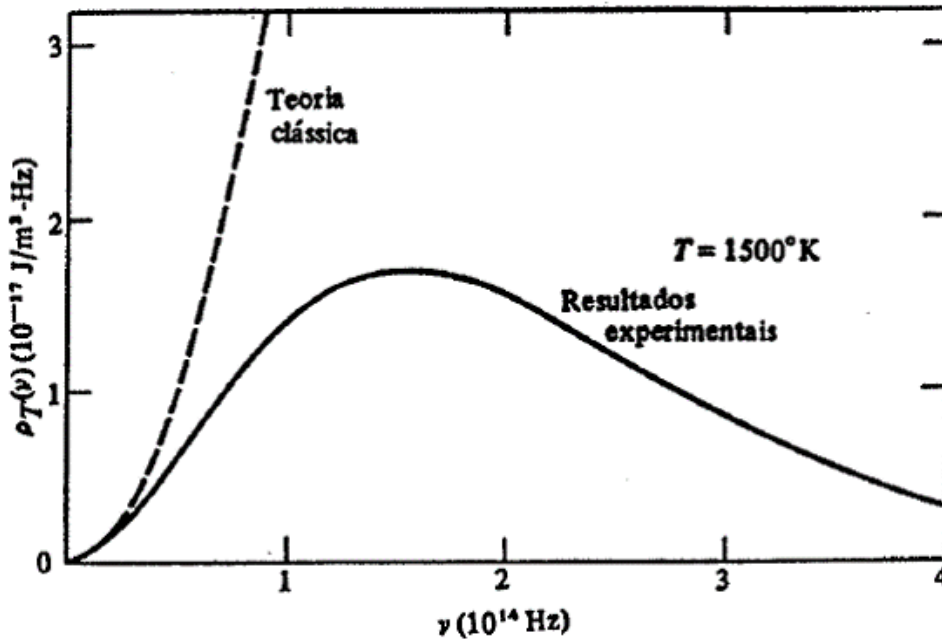
O gráfico ilustrado na Figura A.2, da densidade de energia pela frequência, mostra a comparação das previsões da equação de Rayleigh-Jeans com os dados experimentais. A discrepância entre as curvas é evidente. É notório que no limite de baixas frequências, o espectro clássico se aproxima dos resultados experimentais, mas à medida que a frequência cresce, a previsão teórica vai pra infinito. Já o experimento mostra que a densidade de energia sempre permanece finita, como de fato deveria permanecer.

Em baixas frequências, notava-se que o modelo teórico concordava com o modelo experimental. Entretanto, a medida que a frequência aumentava, ou seja, chegava perto da região do ultravioleta, a diferença ficava cada vez maior. Este episódio ficou conhecido como Catástrofe do Ultravioleta. Foi este cenário que Planck encontrou ao iniciar seus estudos sobre radiação de corpo negro.

A grosso modo, o caminho diferente que Planck tomou foi considerar algo totalmente novo na época, o conceito dos *quanta*. No trabalho de Rayleigh-Jeans, foi considerado que a energia média das ondas estacionárias ($\bar{\mathcal{E}}$) dentro de um corpo negro era igual a KT apenas.

Planck não achava correto o fato da energia média das ondas estacionárias dentro de um corpo negro não ter nenhuma relação com a frequência (ν) dessas ondas. Então, logo no início, o físico alemão imaginou que a energia média deveria ser uma variável que dependesse

Figura A.2 – Gráfico da densidade de energia ($\rho_T(\nu)$) pela frequência (ν), segundo a formulação proposta por Rayleigh-Jeans para a radiação de corpo negro.



Fonte: EISBERG; RESNICK (1979).

da frequência, isto é, $\bar{\epsilon}(\nu)$.

A grande contribuição de Planck surgiu quando ele sugeriu que a energia de cada onda, ϵ , fosse tratada como uma variável discreta. Dessa forma, era necessário que o cálculo da energia média, $\bar{\epsilon}$, fosse feito através de somas, ao invés de uma integral.

Em outras palavras, o físico teórico propôs que se modificasse o cálculo da energia média tratando a variável como se fosse, ao invés de uma variável contínua (calculada através de uma integral, como ela sempre foi considerada pela física clássica), uma variável discreta, ou seja, descrita por um somatório, como mostram as equações (A.2 - Rayleigh-Jeans) e (A.3 - Max Planck). A função $P(\epsilon) = \frac{e^{-\epsilon/kT}}{kT}$ representa a função distribuição de Boltzmann.

$$\bar{\epsilon} = \frac{\int_0^{\infty} \epsilon P(\epsilon) d\epsilon}{\int_0^{\infty} P(\epsilon) d\epsilon} \quad (\text{A.2})$$

$$\bar{\epsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon P(\epsilon)}{\sum_{n=0}^{\infty} P(\epsilon)} \quad (\text{A.3})$$

Planck supôs que a energia de cada onda individual, ϵ , poderia ter apenas certos valores

discretos, ao invés de qualquer valor, e que os valores discretos da energia fossem uniformemente distribuídos. Esses valores discretos, ou melhor, pacotes de energia, foram nomeados pelo próprio físico como *quanta*, onde surge a equação $\varepsilon = nh\nu$, sendo h , a famosa constante de Planck.

Esta nova contribuição para a energia das ondas, incluída na equação (A.3), fornece a nova equação para o cálculo da energia média das ondas estacionárias dentro de um corpo negro, equação (A.4).

$$\bar{\varepsilon}(\nu) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (\text{A.4})$$

A fórmula que ele imediatamente obteve para a densidade de energia, $\rho_T(\nu)$, do espectro do corpo negro, usando esse resultado para $\bar{\varepsilon}(\nu)$ em vez do valor clássico $\bar{\varepsilon} = kT$, usada por Rayleigh-Jeans, está ilustrada pela equação (A.5). Trocando a frequência ν pelo comprimento de onda λ , $\nu = c/\lambda$, tem-se a equação (A.6). Essa é então a formulação proposta por Max Planck para a radiação de corpo negro.

$$\rho_T(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu \quad (\text{A.5})$$

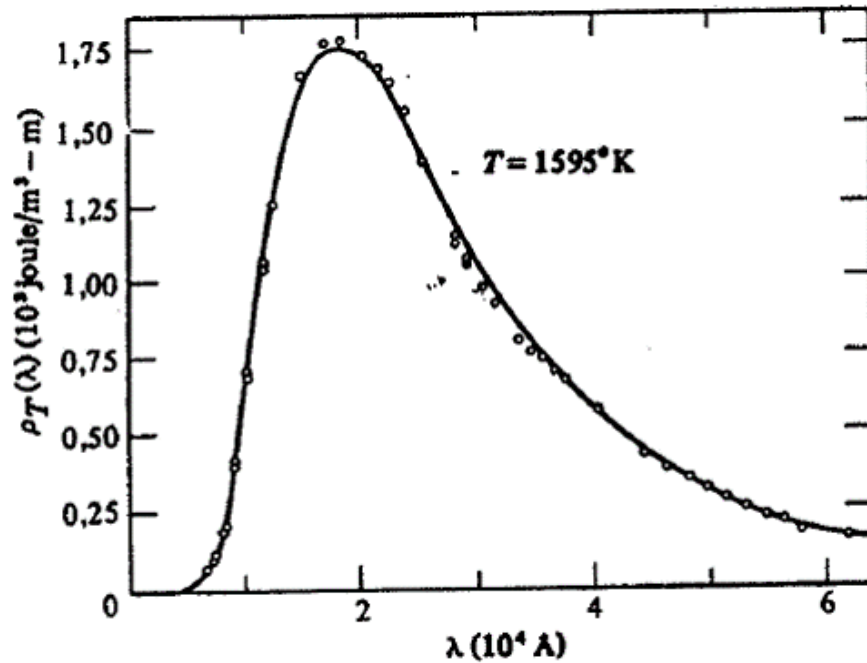
$$\rho_T(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} d\lambda \quad (\text{A.6})$$

A Figura A.3 demonstra, por meio da equação (A.6), a previsão de Planck para a densidade de energia (linha sólida) comparada aos resultados experimentais (círculos) para a densidade de energia de um corpo negro, a uma temperatura de $1595K$.

Nota-se, portanto, que os resultados experimentais estão de total acordo com a fórmula de Planck. É importante salientar que Planck não alterou a distribuição de Boltzmann. “Tudo” o que ele fez foi tratar a energia das ondas estacionárias, oscilando senoidalmente com o tempo, como uma grandeza discreta em vez de contínua.

Em 14 de dezembro de 1900, Planck apresentou essas ideias na certamente mais histórica sessão da Sociedade de Física de Berlim. Esse episódio é considerado a hora de nascimento

Figura A.3 – Gráfico da densidade de energia ($\rho_T(\lambda)$) pelo comprimento de onda (λ), segundo a formulação proposta por Max Planck para a radiação de corpo negro.



Fonte: EISBERG; RESNICK (1979).

da física quântica. De início, muitos não deram crédito para a teoria dos *quanta*, inclusive o próprio Planck. O único a dar crédito à teoria foi Einstein, em seu trabalho sobre o efeito fotoelétrico, onde pôde enfim comprovar a teoria dos *quanta*. Foi a partir daí, que a nova teoria quântica começou a ganhar força.

Atualmente, a física quântica é o fundamento de muitas áreas da alta tecnologia moderna. O laser, por exemplo, não seria imaginável sem a física quântica. Sem ela, não teríamos os semicondutores. Sem os semicondutores não haveria o computador moderno que, por sua vez, não possibilitaria a invenção de coisas tão importantes como telefones celulares - isso sem dizer que hoje, em quase todos os aparelhos modernos, inclusive o automóvel, existem pequenos computadores embutidos. A física quântica tornou-se assim o fundamento de uma grande parte da economia dos países industriais.


```

T=y;           %K
v=x;           %Hz
h=6.626070040e-34; %J.s
k=1.38064852e-23; %J/K
c=2.99792458e8; %m/s

for i=1:n+1
    for j=1:m+1
        K(i,j)=1./(exp(h*v(i)/(k*T(j)))-1);
    end
end

wpar=ones(n+1,m+1)*dy/3;
wpar(:,2:2:m)=wpar(:,2:2:m)*4;
wpar(:,3:2:m-1)=wpar(:,3:2:m-1)*2;
Kpar=wpar.*K;

randn('seed',1.7282e9);
fext=afunc(T);

figure(1) %Figura 6.1
plot(y,fext,'ko')
xlabel('T,K')
ylabel('f(T)')
axis([0 900 0 max(fext)*1.2])

const=2*h*v.^3/c^2;
sc=repmat(const,1,m+1);
K=Kpar.*sc;
wext=K*fext; Wext=wext;

```



```

lambdaq(i)=lambda;
i=i+1;
end

format long e

figure(3) %Figura 6.5 e 6.7
loglog(normrt,normft,'k-')
hold on

ik1=numlam; %26
lambdaq(ik1)

loglog(normrt(ik1),normft(ik1),'ks')

ylabel('||f||')
xlabel('||Kf-g||')

DGL=derivadaglm(y,hy,alpha);

i=1;
for lk=lmin:dl:lmax
    lambda=10^lk;
    a1=(K'*K+lambda^2*DGL)\(K'*W);
    f=a1; Kf=K*f;
    normrtal(i)=norm(Kf-W);
    normftal(i)=norm(f);
    lambdaq(i)=lambda;
    i=i+1;
end

loglog(normrtal,normftal,'k:')

```

```
loglog(normrtal(ik1),normftal(ik1),'ko')
```

```
%RESULTADO FINAL
```

```
lambdaot=lambdaq(ik1);
```

```
DGL0=derivadaglm(y,hy,0);
```

```
DGLa=derivadaglm(y,hy,alpha);
```

```
DGL1=derivadaglm(y,hy,1);
```

```
DGL12=derivadaglm(y,hy,1.2);
```

```
DGL2=derivadaglm(y,hy,2);
```

```
icond=cond(K'*K)
```

```
a4=(K'*K)\(K'*W);
```

```
a5=(K'*K+lambdaot^2*DGL0)\(K'*W);
```

```
a6=(K'*K+lambdaot^2*DGLa)\(K'*W);
```

```
a7=(K'*K+lambdaot^2*DGL1)\(K'*W);
```

```
a8=(K'*K+lambdaot^2*DGL12)\(K'*W);
```

```
a10=(K'*K+lambdaot^2*DGL2)\(K'*W);
```

```
figure(4) %Figura 6.8
```

```
plot(y,a,'ko',y,a5,'r-')
```

```
axis([0 900 -max(a)*0.5 max(a)*1.5])
```

```
hold on
```

```
plot(y,a6,'b*-')
```

```
plot(y,a7,'g-')
```

```
xlabel('T,K')
```

```
ylabel('f(T)')
```

```
figure(5) %Figura 6.12
```

```
v1=[0, 2e14];v2=[0, 0];
```

```

plot(v1,v2,'k-')
hold on
axis([0 2e14 -max(sdp)*1.5 max(sdp)*1.5])
plot(x,K*a5-W,'rv')
plot(x,K*a6-W,'bs')
plot(x,K*a7-W,'go')
xx=zeros(size(Wext));
errag=sdp;
errorbar(x,xx,errag,'k')
xlabel('\nu')
ylabel('g^{cal}-g^{exp}')

i=1;
for alpha1=0:0.05:2
DGL=derivadaglm(y,hy,alpha1);
a3=(K'*K+lambdaot^2*DGL)\(K'*W);
f=a3; Kf=K*f;
normrt3(i)=norm(Kf-W);
normft3(i)=norm(f);

DGL=derivadaglm(y,hy,1);
normft3b(i)=norm(DGL1*f);

alphaq(i)=alpha1;
i=i+1;
end

format long e

figure(6) %Figura 6.6
semilogy(alphaq,normft3b,'k-')
hold on

```

```

alnum=find(abs(alphaq-alpha)<1e-5);
semilogy(alphaq(alnum),normft3b(alnum),'ks')
ylabel('||D^{(1)} f_{\lambda,\alpha}(T)||')
xlabel('\alpha')

```

```

fmq=inv(K'*K)*K'*W;

```

```

figure(7) %Figura 6.4
plot(y,fmq,'k-',y,fext,'ko')
xlabel('T,K')
ylabel('f(T)')
axis([0 900 min(fext)*1.2 max(fext)*1.2])

```

```

figure(8) %Figura 6.9
plot(y,a10,'k-',y,fext,'ko')
xlabel('T,K')
ylabel('f(T)')
axis([0 900 min(fext)*1.2 max(fext)*1.2])

```

```

figure(9) %Figura 6.10
plot(y,a8,'k-',y,fext,'ko')
xlabel('T,K')
ylabel('f(T)')
axis([0 900 -max(a)*0.5 max(a)*1.5])

```

```

figure(10) %Figura 6.11
v1=[0, 2e14];v2=[0, 0];
plot(v1,v2,'k-')
hold on
axis([0 2e14 -max(sdp)*1.5 max(sdp)*1.5])
plot(x,K*a4-W,'ko')
xx=zeros(size(Wext));

```

```

errag=sdp;
errorbar(x,xx,errag,'k')
xlabel('\nu')
ylabel('g^{cal}-g^{exp}')

end

function [DGL]=derivadaglm(t,h,a)

for j=1:length(t);
N=ceil(t(j)/h);
i=1;
for k=N:-1:0
    T(j,i)=(-1)^k*cbg(a,k)/h^a;
    i=i+1;
end
end
T(1,1)=1; T(1,2)=0;

DGL=T;
end

function c=cbg(a,k)
w=1;
for j=1:k
    w=w*(1-(a+1)/j);
end
c=w/(-1)^k;
end

```