

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Estudo do Coeficiente de Difusão Secundária em Problema de Difusão Anômala

Jader Lugon Junior¹

Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, IFF, Macaé, RJ

Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues²

Departamento de Modelagem Computacional, IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ

Luiz Bevilacqua³

Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa em Engenharia, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

Diego Campos Knupp⁴

João Flávio Vieira Vasconcellos⁵

Antônio J. Silva Neto⁶

Departamento de Engenharia Mecânica e Energia, Instituto Politécnico IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ

Resumo. Uma formulação recentemente desenvolvida para o problema de difusão anômala com termo de quarta ordem apresentou em determinadas situações particulares valores negativos na solução. Neste trabalho é realizado um estudo do efeito coeficiente de difusão secundária visando contribuir para o entendimento do comportamento das soluções nestas situações. Foi implementada uma função para representar a variação na parcela sujeita a difusão primária e secundária, de acordo com a quantidade da propriedade em difusão. Os resultados obtidos são compatíveis com aqueles apresentados em trabalhos anteriores na literatura.

Palavras-chave. Retenção, Difusão, Bi-fluxo, Equações diferenciais de quarta ordem

1 Introdução

O fenômeno de difusão de uma propriedade em um meio contínuo pode, na maioria das aplicações, ser descrito pela lei de Fick. Porém, existem casos em que para a modelagem do fenômeno de difusão necessita-se de outras formulações para representar adequadamente sua variação espacial e temporal. A recente formulação analítica desenvolvida pelos pesquisadores Bevilacqua et al. [1–3] permite descrever o comportamento do processo difusivo considerando que uma parcela da grandeza de interesse seja retida.

¹jlugonjr@gmail.com

²pwatts@iprj.uerj.br

³bevilacqua@coc.ufrj.br

⁴diegoknupp@iprj.uerj.br

⁵jflavio@iprj.uerj.br

⁶ajsneto@iprj.uerj.br

Em um caso unidimensional, a equação que representa a difusão primária e secundária pode ser descrita como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \beta K_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \beta(1 - \beta) K_4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \quad (1)$$

onde ϕ representa a concentração de um soluto ou o número de indivíduos em uma população, x representa a coordenada espacial, t o tempo, β a parcela sujeita à difusão primária e $(1 - \beta)$ é a parcela retida ou associada à difusão secundária, e K_2 e K_4 são parâmetros relacionados à difusão primária e secundária respectivamente.

A Equação (1), com diferentes condições de contorno e inicial, foi resolvida por Silva et al. [4, 7–9] utilizando soluções analíticas em situações particulares, o Método de Diferenças Finitas, bem como a rotina NDSolve do software Mathematica e após a realização do estudo de sensibilidade foram desenvolvidas soluções para o problema inverso de difusão anômala utilizando métodos de inferência Bayesiana e máxima verossimilhança.

O problema estacionário para a mesma equação foi abordado por Vasconcellos et al. [10], que desenvolveram uma solução usando o Método de Volumes Finitos e dedicaram atenção especial às dificuldades numéricas relacionadas às condições de contorno de primeiro, segundo e terceiro tipos (Dirichlet, Neumann e Robin).

Em determinados casos específicos, a recente formulação de difusão apresentou valores negativos para a função modelada em algumas posições do domínio espacial, onde apenas valores positivos poderiam ter significado físico. O presente trabalho buscou contribuir para melhorar o entendimento destas situações, reproduzindo alguns casos com tais ocorrências e propondo uma variação nos valores do coeficiente Γ_4 associado à difusão secundária.

2 Metodologia

Primeiramente foram estudados os casos em que foram obtidos valores negativos na solução do problema de difusão anômala.

2.1 Estudo do Coeficiente de Difusão Secundária

São definidos os coeficientes de difusão primária e secundária

$$\Gamma_2 = \beta K_2 \quad (2)$$

e

$$\Gamma_4 = \beta(1 - \beta) K_4 \quad (3)$$

Para considerar uma variação no coeficiente de difusão secundária é possível formular que tal variação seja feita no parâmetro β ou em K_4 . Neste trabalho foi considerada a variação de β em função de ϕ , que também afeta a difusão primária, caracterizada por Γ_2 . Então, para permitir uma variação de $\beta(\phi)$, é necessário rever a Equação (1) e a partir de Bevilacqua et al. [3]

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = K_2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\beta \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} \right] - K_4 \frac{\partial}{\partial x} \left[\beta(1 - \beta) \frac{\partial^3 \phi(x, t)}{\partial x^3} \right] \quad (4)$$

e, portanto,

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = K_2 \left[\frac{\partial \beta}{\partial x} \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} + \beta \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} \right] - K_4 \left[(1 - 2\beta) \frac{\partial \beta}{\partial x} \frac{\partial^3 \phi(x, t)}{\partial x^3} + \beta(1 - \beta) \frac{\partial^4 \phi(x, t)}{\partial x^4} \right] \quad (5)$$

Na seção seguinte será descrito como o parâmetro β e a derivada $\frac{\partial \beta}{\partial x}$ serão tratados numericamente.

2.2 Função $\beta(\phi)$

Considerando o interesse em resolver situações nas quais $\beta(\phi)|_{\phi=0} = 1$ (eliminando o efeito da difusão secundária) e posteriormente seja definida por um patamar aproximadamente constante, foi então implementada uma formulação representando β por uma função sigmóide dependente de $\phi(x, t)$

$$\beta(\phi) = \beta_{max} - \frac{\beta_{max} - \beta_{min}}{1 + e^{-\gamma(\phi - \phi_0)}} \quad (6)$$

onde β_{max} , β_{min} , γ e ϕ_0 definem a função sigmóide e sua derivada analítica é dada por

$$\frac{\partial \beta}{\partial \phi} = -\gamma(\beta_{max} - \beta_{min}) \frac{e^{-\gamma(\phi - \phi_0)}}{(1 + e^{-\gamma(\phi - \phi_0)})^2} \quad (7)$$

conforme representado na Fig. 1 a seguir.

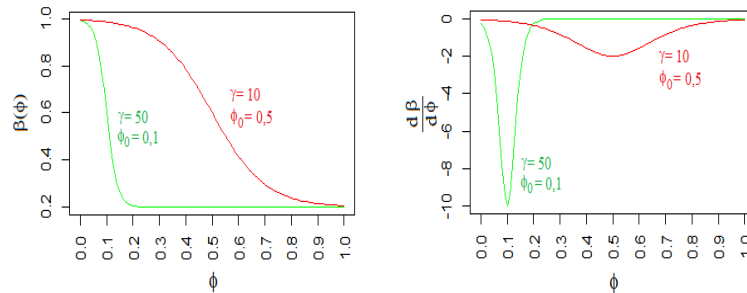


Figura 1: Gráfico da função sigmóide e sua derivada para diferentes parâmetros ϕ_0 e γ ($\beta_{max} = 1$ e $\beta_{min} = 0.2$).

A solução do problema de difusão anômala foi obtida utilizando o Método de Diferenças Finitas (MDF) programado no software R [6]. Foi adotada uma solução atrasada no tempo para β e $\frac{\partial \beta}{\partial x}$, ou seja, considerando que $\beta^{t+\Delta t} \approx \beta^t$ e $\frac{\partial \beta^{t+\Delta t}}{\partial x} \approx \frac{\partial \beta^t}{\partial x}$. Como

$$\frac{\partial \beta}{\partial x} = \frac{\partial \beta}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (8)$$

é possível utilizar a Equação (7), solução analítica para $\frac{\partial \beta}{\partial \phi}$ e calcular $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ por diferenças finitas, Equação (9), sendo ambas atrasadas no tempo

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_x^{t+\Delta t} = \frac{\phi_{x-2\Delta x}^t - 8\phi_{x-\Delta x}^t + 8\phi_{x+\Delta x}^t - \phi_{x+2\Delta x}^t}{12\Delta x} + O(\Delta x^4) \quad (9)$$

para obter a derivada $\frac{\partial \beta}{\partial x}$, que é necessária para solucionar a Equação (5).

3 Descrição dos casos estudados

Foi considerado o problema de difusão anômala com a seguinte condição inicial

$$\phi(x, t)|_{t=0} = \left[\text{sen} \left(\frac{\pi}{L} x \right) \right]^{100} \quad (10)$$

e as seguintes condições de contorno

$$\phi(x, t)|_{x=0} = \phi(x, t)|_{x=L} = 0 \quad (11)$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=L} = 0 \quad (12)$$

idêntico àquele tratado na Ref. [9] para fins de validação e com objetivo de estudar a situação observada de valores negativos na solução ao se considerar $\beta = \text{const.}$ Assim, será possível avaliar a efetividade da solução desenvolvida neste trabalho, com uso de $\beta(\phi)$.

Foram avaliadas as soluções com três diferentes conjuntos de parâmetros β , β_{max} , β_{min} , γ , ϕ_0 (ver Tab. 1), sendo que para todos os casos $L = 1,00$, $K_2 = 1.00E - 3$, $K_4 = 1.00E - 5$ e $t_f = 1,0$.

Tabela 1: Estudos de Caso implementados.

Variável	Caso 1	Caso 2	Caso 3
β	0,2	$\beta(\phi)$	$\beta(\phi)$
β_{max}	NA	1,0	1,0
β_{min}	NA	0,2	0,2
γ	NA	1000	50
ϕ_0	NA	0,01	0,5

Em todas as simulações realizadas, o tempo de observação foi discretizado em 1000 intervalos e o domínio espacial em 100 intervalos. O tempo computacional em um notebook com processador Intel(R) Core(TM) i5-5200U CPU @e 2.20GHz foi de aproximadamente 0,6s para cada simulação realizada.

4 Resultados e Discussão

Na Figura 2 são apresentados os resultados obtidos com o Método de Diferenças Finitas (MDF) nos casos de estudo 1, 2 e 3, para investigar a ocorrência de valores negativos na solução da equação de difusão anômala desenvolvida.

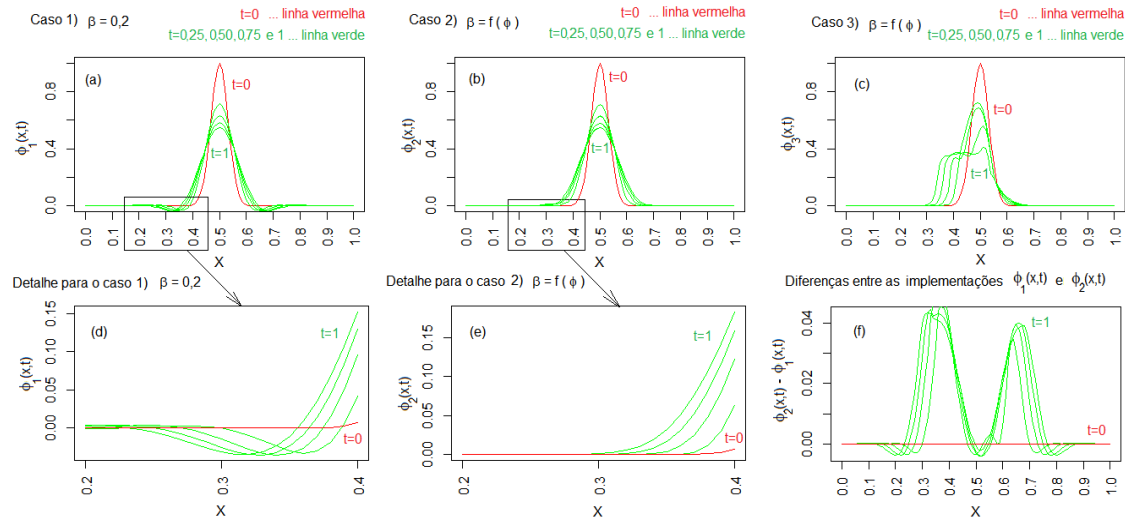


Figura 2: Resultados para os casos estudados. (a) β constante; (b) β variável ($\gamma = 2500$ e $\phi_0 = 0,01$); (c) β variável ($\gamma = 50$ e $\phi_0 = 0,3$); (d) detalhe da solução β constante; detalhe da solução β variável ($\gamma = 1000$ e $\phi_0 = 0,01$); (f) diferenças nas soluções dos casos 1 e 2.

No gráfico (a), mais especificamente no detalhe (d), é possível notar a ocorrência dos valores negativos para o caso 1 com $\beta = const$. Os resultados obtidos com a implementação de $\beta(\phi)$ no estudo de caso 2, com $\gamma = 1000$ e $\phi = 0,01$, estão apresentado nos gráficos (b) e no detalhe (e), onde é possível observar que já não ocorrem os valores negativos na solução. No gráfico (c) é apresentado o resultado para o estudo de caso 3, com $\gamma = 50$ e $\phi = 0,3$, onde pode ser observada uma anomalia de difusão causada na solução dependendo dos parâmetros estabelecidos para a função β e que será objeto de estudo posterior. O resultado da diferença entre as duas implementações entre os casos 1 e 2 está representada no gráfico (f).

As soluções desenvolvidas podem ser obtidas para o ambiente R na plataforma CRAN (Comprehensive R Archive Network) sob o nome "AdvDif4" [5].

5 Conclusões e Trabalhos Futuros

A implementação do MDF com variação do parâmetro β foi realizada para o problema de difusão anômala, sendo foi possível eliminar a ocorrência de valores negativos na solução. Tais resultados negativos podem ser incompatíveis com o fenômeno simulado, como por exemplo os estudos de dinâmica populacional.

Observou-se que dependendo dos parâmetros estabelecidos para representar a variação de β , podem ocorrer diferentes efeitos na difusão anômala, o estudo de tais efeitos serão objeto de trabalhos futuros.

Com o modelo desenvolvido será possível projetar de experimentos utilizando técnicas de estudo de sensibilidade para estimativa dos parâmetros necessários ao uso do modelo em aplicações onde ocorram efeitos de retenção associados com a difusão.

Para a solução de problemas inversos, busca-se com frequência soluções para os problemas diretos correspondentes que sejam acuradas e obtidas com tempo computacional reduzido. A solução aqui apresentada atende estes requisitos.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro da FAPERJ, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, do CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, e da CAPES, Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior.

Referências

- [1] L. Bevilacqua, A. C. N. R. Galeão e F. P. Costa, *A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion process*, An Acad Bras Cienc, 83:1443–1464, 2011.
- [2] L. Bevilacqua, A. C. N. R. Galeão e F. P. Costa, *On the significance of higher order differential terms in diffusion process*, J. Brazilian Soc. Mech Sci Eng. 33:166–175, 2011. DOI: 10.1590/S1678-58782011000200007.
- [3] L. Bevilacqua, A. C. N. R. Galeão, J. G. Simas e A. P. R. Doce, *A new theory for anomalous diffusion with a bimodal flux distribution*, J. Brazilian Soc. Mech Sci Eng., 35:1–10, 2013.
- [4] D. C. Knupp, L. G. Silva, L. Bevilacqua, A. C. N. R. Galeão e A. J. Silva Neto, *Inverse Analysis of a New Anomalous Diffusion Model Employing Maximum Likelihood and Bayesian Estimation*, In: Silva Neto, A.J., Santiago e O.L., Silva, G.N., *Mathematical Modeling and Computational Intelligence in Engineering Applications*, cap. 7 p. 89–104. Springer International Publishing, ISBN 978-3-319-38868-7, DOI: 10.1007/978-3-319-38869-4.
- [5] J. Lugon Jr., P. P. G. W. Rodrigues, L. Bevilacqua, D. C. Knupp, J. F. V. Vasconcellos e A. J. Silva Neto, *AdvDif4: Solving 1D Advection Bi-Flux Diffusion Equation*, CRAN - The Comprehensive R Archive Network, 2018, <https://CRAN.R-project.org/package=AdvDif4>.
- [6] R Core Team. R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, 2017, URL <https://www.R-project.org/>.

- [7] L. G. Silva, D. C. Knupp, L. Bevilacqua, A. C. N. R. Galeão, J. G. Simas, J.F.Vasconcellos, e A. J. Silva Neto, *Investigation of a new model for anomalous diffusion phenomena by means of an inverse analysis*, 4th Inverse Problems, Design and Optimization Symposium, Albi, France, 2013.
- [8] L. G. Silva, D. C. Knupp, L. Bevilacqua, A. C. N. R. Galeão e A. J. Silva Neto, *Inverse problem in anomalous diffusion with uncertainty propagation*. 8th International Conference on Inverse Problems in Engineering-ICIPE 2014, Cracow, Poland, 2014.
- [9] L. G. Silva, D. C. Knupp, L. Bevilacqua, A. C. N. R. Galeão e A. J. Silva Neto, *Formulação e solução de um Problema Inverso de Difusão Anômala com Técnicas Estocásticas*, *Ciência e Natura*, 36:82–96, 2014. DOI: 10.5902/2179460X13184.
- [10] J. F. V. Vasconcellos, G. M. Marinho e J. H. Zanni, *Análise numérica da equação da difusão anômala com fluxo bimodal*. *Rev. int. métodos númer. cálc. diseño ing.*, 33:242–249, 2016. DOI:10.2016/j.rimni.2016.05001.