

# Problema de Difusão de Oxigênio via Derivadas Fracionárias

Sandro R. Mazorche<sup>1</sup>; Tiago F. C. Santos<sup>2</sup>  
UFJF, Juiz de Fora, MG

**Resumo.** O problema de difusão de oxigênio em tecidos é descrito de maneira semelhante ao problema de difusão de calor e pode ser tratado como um problema de fronteira móvel. Apesar das dificuldades no cálculo de soluções analíticas, a formulação variacional do problema permite escrevê-lo na forma de um problema de complementaridade, que pode ser resolvido pelo algoritmo chamado em inglês de Feasible Directions Algorithm for Nonlinear Complementarity Problems ou FDA-NCP, desenvolvido por Herskovits e Mazorche [5]. Neste trabalho estudamos os efeitos provocados pela substituição da derivada clássica pela derivada de Caputo de ordem  $\alpha \in (0, 1]$ , por meio de uma análise comparativa entre os modelos clássico e fracionário. Apresentamos conclusões qualitativas, via evidências visuais das simulações realizadas, como, por exemplo, a relação entre a fronteira móvel e a ordem  $\alpha$  da derivada fracionária.

**Palavras-chave.** Cálculo Fracionário, Modelagem, Difusão de Oxigênio, Complementaridade

## 1 Introdução

Acredita-se que o cálculo fracionário teve sua origem no ano de 1695 através de uma carta escrita por L'Hopital destinada a Leibniz, questionando a possibilidade da existência de uma derivada de ordem  $\frac{1}{2}$ . A partir desse momento, o tema foi discutido por diversos matemáticos, ganhando maior destaque durante o século XX. Por se tratar de uma área relativamente recente da matemática, o cálculo fracionário tem atraído cada vez mais a atenção dos matemáticos, que buscam interpretações físicas para esse operador. Dessa forma, se torna interessante estudar os efeitos causados pela derivada fracionária em um modelo já conhecido, como o problema de difusão do oxigênio estudado por Boureghda [2], Crank e Gupta [4].

Neste trabalho, apresentaremos de forma direta a modelagem clássica do processo de difusão do oxigênio em tecidos, bem como as condições iniciais e de fronteira do modelo. A captura da fronteira móvel é um desafio, a qual é a curva em que a concentração passa a ser nula. Definiremos ainda uma formulação em complementaridade do modelo.

Com o problema adimensionalizado, iremos propôr a substituição da derivada clássica no tempo por uma derivada fracionária do tipo Caputo de ordem  $0 < \alpha \leq 1$ . Utilizando técnicas semelhantes às de Boureghda [2], iremos calcular uma solução analítica para a equação fracionária. Também definiremos um problema de complementaridade para o caso fracionário, no qual aplicaremos o algoritmo FDA-NCP, Herskovits e Mazorche [5]. Por fim, apresentaremos os resultados numéricos obtidos.

---

<sup>1</sup>sandro.mazorche@ufjf.br

<sup>2</sup>tiago.santos@estudante.ufjf.br

## 2 Descrição do Problema

O modelo de difusão de oxigênio é um problema clássico, que vem sendo estudado há mais de 50 anos. Nesta seção, faremos uma breve descrição da parte física do modelo, além de apresentar as equações que o descrevem. Mais detalhes podem ser encontrados em Boureghda [2] e Crank e Gupta [4].

Inicialmente, o oxigênio é liberado no meio, e parte dele é absorvida pelos tecidos. A quantidade de oxigênio na superfície é mantida constante até que a concentração entre em equilíbrio e o oxigênio deixe de avançar no interior do meio. Na segunda etapa, a superfície é selada de forma a impedir o fluxo de oxigênio através dela. O oxigênio continua a ser absorvido pelos tecidos, e a profundidade na qual existe oxigênio no interior do meio diminui, se aproximando da superfície selada, como pode ser visto na Figura 1. O problema consiste em determinar a concentração em cada instante e acompanhar o movimento da fronteira que delimita a presença de oxigênio no tecido, conhecida como fronteira móvel.

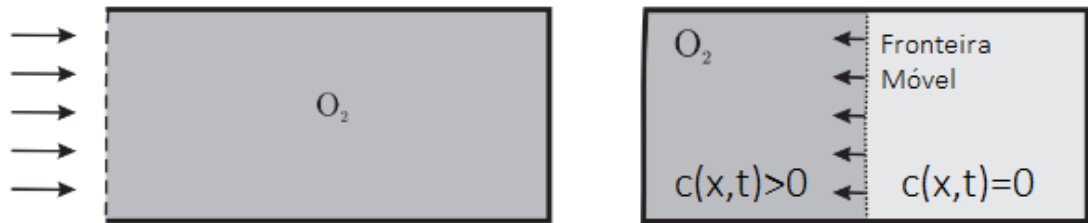


Figura 1: Representação das duas etapas do modelo. Fonte: referência Pereira et al. [6].

Quando trabalhamos com derivadas fracionárias, devemos ter atenção com as constantes que aparecem nas equações, pois elas perdem seu significado físico. A fim de minimizar esse efeito, trabalharemos com as equações adimensionalizadas, ver Boureghda [2], Crank e Gupta [4], Pereira et al. [6]. Para o caso unidimensional, temos que  $0 \leq x \leq 1$  representa o meio. Enquanto no instante inicial,  $t = 0$ , temos uma distribuição da concentração de oxigênio tal que  $x = 0$  é a posição com maior concentração e  $x = 1$  é a posição onde a concentração é nula. Dessa forma, com a evolução no tempo, a fronteira móvel do problema se desloca da posição  $x = 1$  em direção a  $x = 0$ , sendo definida como  $x_0(t)$ . Assim, a solução do problema é encontrar uma função  $c(x, t)$  que forneça a concentração de oxigênio na posição  $x$  e no instante  $t$ , bem com a fronteira móvel  $x_0(t)$ . Seguem as equações que regem o modelo.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 1, \quad 0 \leq x \leq x_0(t), \quad t \geq 0. \quad (1)$$

Com condições de fronteira:

$$c = \frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad x = x_0(t), \quad t \geq 0; \quad (2)$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad x = 0, \quad t \geq 0; \quad (3)$$

$$c = \frac{1}{2}(1 - x)^2, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t = 0. \quad (4)$$

Devido à natureza do modelo, a concentração de oxigênio no meio é sempre maior ou igual a zero, ou seja,  $c(x, t) \geq 0$ . Portanto, é possível reescrevê-lo na forma de um problema de complementaridade, que é definido por uma variável não negativa, e um operador não negativo sobre essa variável, de forma que o produto entre a variável e o operador se anule.

No modelo em questão, a equação (1) é satisfeita quando  $0 \leq x \leq x_0(t)$ , ou seja, quando  $c \geq 0$ , e temos  $\frac{\partial c}{\partial t} - \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + 1 = 0$ . Se  $x > x_0(t)$ , então  $c = 0$  e  $\frac{\partial c}{\partial t} - \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + 1 = 1 > 0$ .

Dessa forma, obtemos a complementaridade descrita na equação (5).

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + 1 \geq 0 \quad , \quad c \geq 0 \quad \text{e} \quad \left( \frac{\partial c}{\partial t} - \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + 1 \right) c = 0. \quad (5)$$

A equivalência entre a solução do problema de complementaridade (5) e a solução do problema de (1) - (4) pode ser encontrada em Baiocchi e Pozzi [1]. A partir dessas duas formulações, realizamos estudos com o foco em explorar os efeitos que podem ser obtidos ao aplicar o cálculo fracionário no modelo de difusão de oxigênio em tecidos.

### 3 Modelo Fracionário

Nossa proposta de modelo fracionário considera a aplicação de uma derivada fracionária no lugar da derivada clássica. Para isso, utilizamos a derivada de Caputo, definida como:

$${}_0^C D_t^\alpha [c(x, t)] = \frac{1}{\Gamma(1 - \alpha)} \int_0^t \frac{1}{(t - \tau)^\alpha} \frac{\partial c}{\partial \tau}(x, \tau) d\tau, \quad 0 < \alpha \leq 1. \quad (6)$$

Com isso, nossa proposta é substituir a equação (1) pela equação fracionária (7).

$${}_0^C D_t^\alpha [c(x, t)] = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 1, \quad (7)$$

mantendo as condições (2), (3) e (4).

Para obter uma solução aproximada para o modelo fracionário, adaptamos as técnicas de Bouregghda [2], que se baseiam no método de separação de variáveis e nas séries de Fourier, e que foram utilizadas para encontrar uma solução aproximada para o problema clássico. Resumidamente, mostraremos parte da resolução apresentada em Bouregghda [2]. A série de Fourier da função  $f(x) = x^2$ , definida no intervalo  $[-1, 1]$ , é:

$$x^2 = \frac{1}{3} + \frac{4}{\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k \cos(k\pi x)}{k^2}. \quad (8)$$

Substituindo  $x$  por  $(1 - x)$  e multiplicando por  $\frac{1}{2}$ , temos:

$$c(x, 0) = \frac{1}{2}(1 - x)^2 = \frac{1}{6} + \frac{2}{\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k \cos(k\pi(1 - x))}{k^2}. \quad (9)$$

Portanto, a partir da equação (9), supõe-se que existam  $a_0(t)$  e  $a_k(t)$  funções tais que:

$$c(x, t) = a_0(t) + \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t) \cos(k\pi(1 - x)). \quad (10)$$

A representação da função  $c(x, t)$  por meio de uma série de cossenos é importante, pois dessa maneira a condição (3) é satisfeita:

$$\frac{\partial c}{\partial x}(0, t) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t) k \pi \operatorname{sen}(k \pi(1 - 0)) = 0. \tag{11}$$

Nossa proposta de resolução do modelo fracionário inicia-se aqui, com a observação de que o operador de Caputo é linear, o que favorece a sua aplicação na expressão (10), pois ela será a candidata a solução da equação (7).

$${}_0^C D_t^\alpha [c(x, t)] = {}_0^C D_t^\alpha [a_0(t)] + \sum_{k=1}^{\infty} {}_0^C D_t^\alpha [a_k(t)] \cos(k \pi(1 - x)), \tag{12}$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = - \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t) k^2 \pi^2 \cos(k \pi(1 - x)). \tag{13}$$

Logo, substituindo a função  $c(x, t)$ , dada por (10), na equação fracionária (7), obtemos:

$${}_0^C D_t^\alpha [a_0(t)] + \sum_{k=1}^{\infty} {}_0^C D_t^\alpha [a_k(t)] \cos(k \pi(1 - x)) = - \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t) k^2 \pi^2 \cos(k \pi(1 - x)) - 1. \tag{14}$$

Assim, chegamos às seguintes relações:

$${}_0^C D_t^\alpha [a_0(t)] = -1 \iff a_0(t) = -\frac{t^\alpha}{\Gamma(\alpha + 1)} + A_0, \tag{15}$$

$${}_0^C D_t^\alpha [a_k(t)] = -k^2 \pi^2 a_k(t) \iff a_k(t) = A_k E_\alpha(-k^2 \pi^2 t^\alpha), \tag{16}$$

onde  $E_\alpha(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(\alpha n + 1)}$  é a função de Mittag-Leffler de um parâmetro, conhecida como a generalização da função exponencial, ver Camargo e Oliveira [3]. Por fim, utilizando a condição inicial (9), determinamos as constantes  $A_0$  e  $A_k$ , para todo  $k \in \{1, 2, 3, \dots\}$ . Logo, a solução aproximada fracionária é dada pela equação (17):

$$c(x, t) \approx \frac{1}{6} - \frac{t^\alpha}{\Gamma(\alpha + 1)} + \frac{2}{\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k E_\alpha(-k^2 \pi^2 t^\alpha) \frac{\cos(k \pi(1 - x))}{k^2}. \tag{17}$$

No caso em que  $\alpha = 1$ , a equação (17) coincide com a solução do caso clássico, o que é esperado devido à natureza da derivada fracionária. Com isso, seremos capazes de obter resultados importantes sobre o comportamento do modelo fracionário.

Assim como em Boureghda [2], a solução  $c(x, t)$  encontrada é apenas uma aproximação. A condição natural  $c(x, t) \geq 0$  não é satisfeita. Para considerar essa restrição física do problema, trabalharemos com o problema de complementaridade (5).

## 4 Discretização

Para utilizar o algoritmo FDA-NCP, Herskovits e Mazorche [5], no problema, devemos inicialmente discretizar o modelo. Considere  $0 \leq x \leq 1$  e  $0 \leq t \leq t_{max}$ , onde  $t_{max}$  é um instante tal que  $c(x, t_{max}) = 0, \forall x \in [0, 1]$ . Dividimos o intervalo  $[0, 1]$  em  $n_x$  intervalos de comprimento  $\Delta_x = \frac{1}{n_x}$  e o intervalo  $[0, t_{max}]$  em  $n_t$  intervalos de comprimento  $\Delta_t = \frac{t_{max}}{n_t}$ . Desta forma, teremos uma malha de pontos com  $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{n_x-1} < x_{n_x} = 1$  e  $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n_t-1} < t_{n_t} = t_{max}$ .

Para a discretização da equação (7), utilizamos o método de diferenças finitas para  $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$  e o método multipasso para  ${}_0^C D_t^\alpha [c(x, t)]$ . Utilizaremos a notação  $c(x_i, t_j) = c_{i,j}$ .

$$\frac{\partial^2 c_{i,j}}{\partial x^2} \approx \frac{c_{i+1,j} - 2c_{i,j} + c_{i-1,j}}{\Delta_x^2}. \tag{18}$$

Por conta do efeito de memória nas derivadas fracionárias, a sua discretização é mais complexa do que um simples método de diferenças finitas. Nesse caso, optamos pela técnica de multipassos, que é mostrada aqui de forma resumida. Utilizando que  $t_i = i\Delta_t$  e que  $\alpha\Gamma(\alpha) = \Gamma(\alpha + 1)$ , temos:

$$\begin{aligned} {}_0^C D_t^\alpha [h(t_k)] &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{t_k} \frac{h'(z)}{(t_k - z)^\alpha} dz \approx \\ &\approx \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{i=0}^{k-1} \frac{h(t_{i+1}) - h(t_i)}{\Delta_t} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (t_k - z)^{-\alpha} dz = \\ &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)\Delta_t^\alpha} \sum_{i=0}^{k-1} [h(t_{i+1}) - h(t_i)] [(k-i)^{1-\alpha} - (k-i-1)^{1-\alpha}]. \end{aligned} \tag{19}$$

No conjunto de equações (19) temos a forma discretizada da derivada de Caputo conforme o esquema L1. Note que podemos reescrever a expressão de  ${}_0^C D_t^\alpha [h(t_k)]$  como segue abaixo:

$$\frac{h(t_k) - h(t_{k-1})}{\Gamma(2-\alpha)\Delta_t^\alpha} + \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)\Delta_t^\alpha} \sum_{i=0}^{k-2} [h(t_{i+1}) - h(t_i)] [(k-i)^{1-\alpha} - (k-i-1)^{1-\alpha}]. \tag{20}$$

É fácil perceber da equação (20), quando  $\alpha = 1$ , o primeiro termo se tornará a discretização clássica em diferenças finitas, enquanto o somatório se anula. Para  $\alpha < 1$ , fica claro que o somatório carrega o efeito de memória, que é uma característica das derivadas fracionárias.

Portanto, o problema de complementaridade discretizado pode ser descrito como:

$${}_0^C D_t^\alpha [c_{i,j}] - \frac{\partial^2 c_{i,j}}{\partial x^2} + 1 \geq 0 \quad , \quad c_{i,j} \geq 0 \quad , \quad \left( {}_0^C D_t^\alpha [c_{i,j}] - \frac{\partial^2 c_{i,j}}{\partial x^2} + 1 \right) c_{i,j} = 0 \tag{21}$$

Dessa forma, podemos resolver numericamente o problema e comparar os resultados obtidos com a solução numérica e a solução analítica a fim de compreender o comportamento do modelo ao aplicar um método fracionário.

## 5 Resultados Numéricos

Nesta seção iremos apresentar os resultados obtidos ao aplicar o algoritmo de complementaridade FDA-NCP, proposto em Herskovits e Mazonche [5], assim como foi feito em Pereira et al. [6] para o caso clássico. Além disso, a equação (17) foi utilizada a fim de aproximar o tempo necessário para a concentração se anular em todo o meio para um determinado  $\alpha$ . Notamos que ao utilizar a derivada de Caputo com  $0 < \alpha < 1$  a concentração irá diminuir de forma mais rápida do que no problema clássico, como é possível observar nas Figuras 2 (a),(b) e (c).

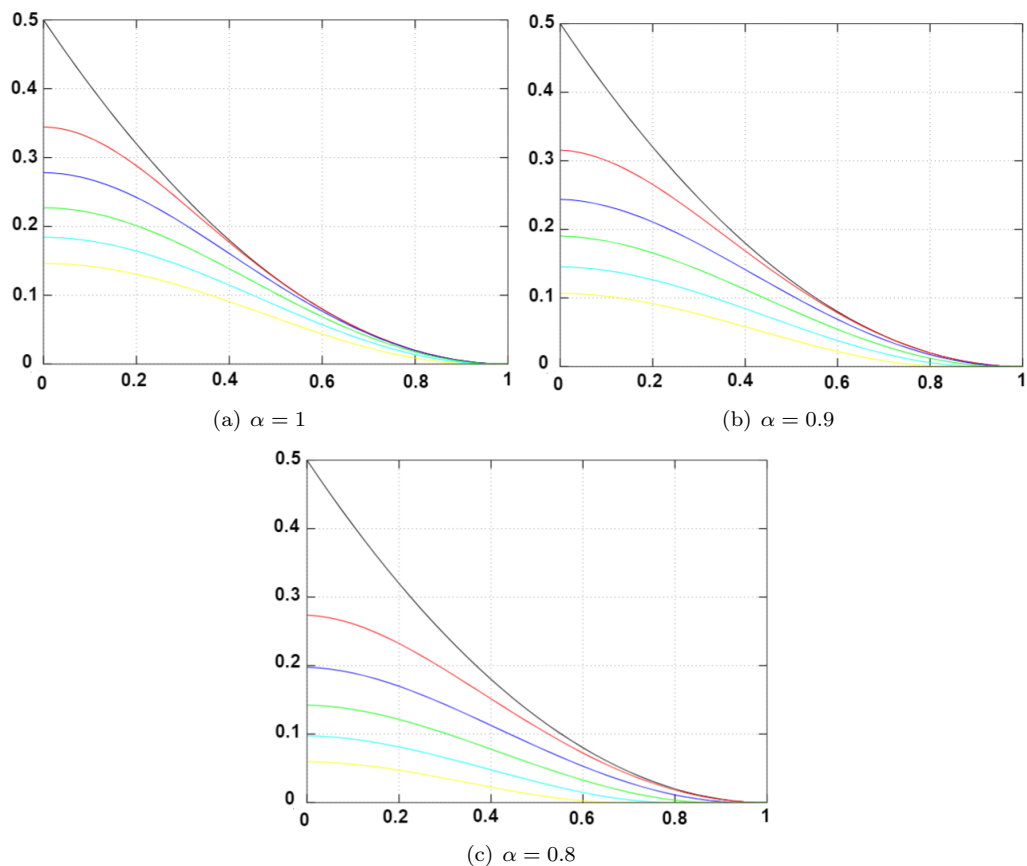


Figura 2: Gráficos da concentração  $c(x, t)$  obtida através do algoritmo FDA-NCP. Fonte: dos autores.

Na Figura 2 , foram representadas as concentrações em  $t \in \{0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1\}$ , no intervalo  $x \in [0, 1]$ . Para um mesmo  $t$ , podemos notar que  $c(x, t)$  diminui em todo o intervalo quando reduzimos o valor de  $\alpha$ .

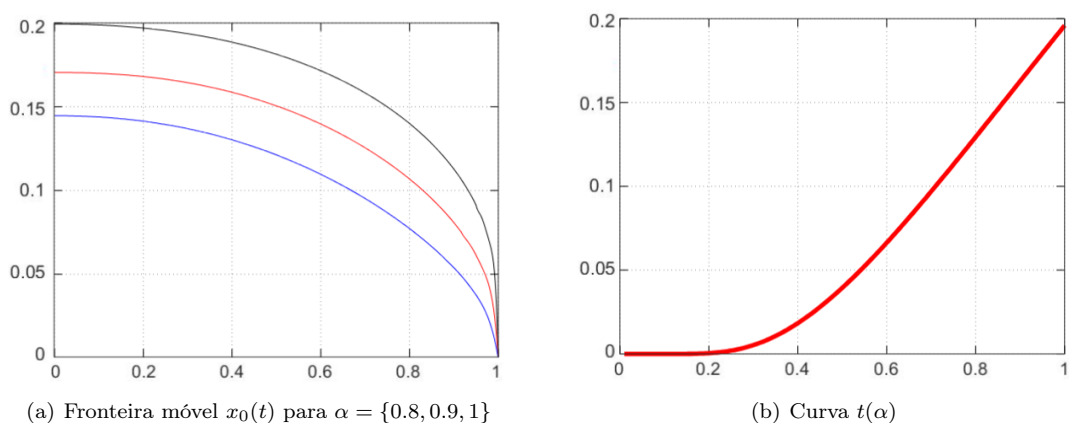


Figura 3: (a) Fronteira móvel obtida a partir do algoritmo FDA-NCP. (b) Curva  $t(\alpha)$  obtida a partir da solução analítica. Fonte: dos autores.

Esse comportamento é refletido na fronteira móvel do problema, como é mostrado na Figura 3 (a). O formato da curva  $x_0(t)$  não sofre grandes alterações, sendo apenas deslocado para baixo. Isso mostra o efeito de aceleração da difusão ao utilizar uma derivada de ordem fracionária.

Já na Figura 3 (b), temos o gráfico da curva  $t(\alpha)$ , ou seja, em qual tempo a concentração se anula ao utilizar um determinado  $\alpha$ . Ela foi obtida através da solução analítica dada pela equação (10). Essa curva apresenta um comportamento não linear e é coerente com os resultados obtidos numericamente.

## 6 Conclusões

Nessa pesquisa, inserimos o cálculo fracionário no contexto da difusão de oxigênio. A partir disso, obtivemos resultados numéricos interessantes sobre como o comportamento da solução é afetado pela ordem  $\alpha$  da derivada, e confirmamos esses fatos através da avaliação da solução analítica aproximada.

Com esses resultados, estamos motivados a aprimorar as técnicas numéricas utilizadas para resolver o problema. O uso de melhores aproximações para as derivadas e métodos mais precisos para capturar a fronteira móvel são alguns exemplos de como sofisticar os estudos sobre o modelo. Além disso, aplicaremos outras derivadas fracionárias no problema, como a derivada de Riemann-Liouville, o que deve contribuir com os conhecimentos já obtidos.

## Agradecimentos

Agradecemos à Pró-Reitoria de Pós-graduação e Pesquisa da Universidade Federal de Juiz de Fora por apoiar nossa pesquisa através de uma bolsa PIBIC.

## Referências

- [1] C. Baiocchi e G. Pozzi. “An evolution variational inequality related to a diffusion-absorption problem”. Em: **Applied Mathematics and Optimization**. Ed. por M. Cojocaru, I. Kotsireas, R. Makarov, R. Melnik e H. Shodiev. Vol. 2. 1975, pp. 304–314.
- [2] A. Boureghda. “Numerical solution of the oxygen diffusion in absorbing tissue with a moving boundary”. Em: **Communications in Numerical Methods in Engineering**, vol. 22, n. 9 (2006), pp. 933–942. DOI: 10.1002/cnm.857.
- [3] R. F. Camargo e E. C. Oliveira. **Cálculo Fracionário**. 1a. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2015. ISBN: 9788578613297.
- [4] J. Crank e R. S. Gupta. “A Moving Boundary Problem Arising from the Diffusion of Oxygen in Absorbing Tissue”. Em: **IMA Journal of Applied Mathematics** 10 (1972), pp. 19–33. DOI: 10.1093/IMAMAT/10.1.19.
- [5] J. Herskovits e S. R. Mazonche. “A feasible directions algorithm for nonlinear complementarity problems and applications in mechanics”. Em: **Structural and Multidisciplinary Optimization** 37 (2008), pp. 435–446. DOI: 10.1007/s00158-008-0252-5.
- [6] W. S. Pereira, A. Gutierrez, S. R. Mazonche e G. Chapiro. “Simulação de um problema de difusão de oxigênio utilizando o método de elementos finitos e FDA-NCP.” Em: **SIM-MEC/EMMCOMP**, 11 (2014).