Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 11, n. 1, 2025.

Trabalho apresentado no XLIII CNMAC, Centro de Convenções do Armação Resort - Porto de Galinhas - PE, 2024

**Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**

# Derivada de Caputo no Modelo de Difusão de Oxigênio

Tiago F. C. Santos[1] Sandro R. Mazorche[2]
UFJF, Juiz de Fora, JF

Este trabalho apresentará uma versão fracionária do modelo de difusão de oxigênio em tecidos. O caso clássico foi proposto e estudado inicialmente em [3]. Nossa proposta se baseará nas ideias do artigo [1] onde uma solução analítica aproximada é calculada por meio das séries de Fourier.

Consideramos o problema unidimensional no qual existe uma distribuição da concentração de oxigênio no interior de uma célula. A partir do instante $t = 0$, o oxigênio passa a ser absorvido pelo meio e, desta forma, encontrar uma solução para o problema, é determinar a concentração $c(x,t)$, com $0 \leq x \leq 1$, $t \geq 0$ ; e também encontrar a fronteira móvel, que é a posição, $x_0(t) \in [0,1]$, na qual a concentração se anula no instante $t$. Em $t = 0$ temos $x_0(0) = 1$. Para maiores detalhes sobre o modelo, ver [3]. Segue a descrição do modelo adimensionalizado:

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

que deve satisfazer as seguintes condições:

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

$$c = \frac{1}{2}(1-x)^2\,,\ 0 \leq x \leq 1\,,\ t = 0\,. \tag{3}$$

Propomos o modelo fracionário que deve satisfazer as condições (2)-(3) e é definido pela seguinte equação diferencial fracionária:

$${}_0^C D_t^\alpha[c(x,t)] = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 1\,, \quad 0 \leq x \leq x_0(t)\,, \quad t \geq 0 \ \ , \tag{4}$$

onde ${}_0^C D_t^\alpha[c(x,t)]$ é a derivada de Caputo, ver [2], representada por:

$${}_0^C D_t^\alpha[c(x,t)] = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\alpha} \frac{\partial c}{\partial \tau}(x,\tau)\, d\tau\,,\ 0 < \alpha \leq 1\,. \tag{5}$$

Utilizando as técnicas apresentadas por [1] obtivemos uma solução analítica aproximada para o modelo fracionário. É importante destacar que essa solução não satisfaz a condição física $c(x,t) \geq 0$ e, portanto, é apenas uma aproximação. Sabemos que a série de Fourier para a condição inicial do problema é dada por: $\frac{1}{2}(1-x)^2 \sim \frac{1}{6} + \frac{2}{\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k cos(k\pi(1-x))}{k^2}$.

Supondo $c(x,t) = a_0(t) + \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t) cos(k\pi(1-x))$ e substituindo essa expressão em (4), obtemos:

$${}_0^C D_t^\alpha[a_0(t)] = -1 \iff a_0(t) = -\frac{t^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} + A_0, \tag{6}$$

$${}_0^C D_t^\alpha[a_k(t)] = -k^2\pi^2 a_k(t) \iff a_k(t) = A_k E_\alpha(-k^2\pi^2 t^\alpha), \tag{7}$$

[1]tiago.santos@estudante.ufjf.br
[2]sandro.mazorche@ufjf.br

onde $E_\alpha(y) = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^n}{\Gamma(\alpha n + 1)}$ é a função de Mittag-Leffler. Com as equações (6)-(7) e a condição inicial, podemos determinar $a_n(t)$, $\forall n \in \mathbb{N}$ e, desse modo, obter a solução do caso fracionário:

$$c(x,t) = \frac{1}{6} - \frac{t^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} - \frac{2}{\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^{k-1}E_\alpha(-k^2\pi^2t^\alpha)\frac{cos(k\pi(1-x))}{k^2} \ . \tag{8}$$

Portanto, temos uma solução aproximada, e que coincide com a solução encontrada em [1] quando $\alpha = 1$. Com isso, é possível avaliar os efeitos causados no modelo ao utilizar uma derivada fracionária, como, por exemplo, determinar o tempo $t_\alpha$ em que a concentração passa a ser nula em $x = 0$, ou seja, $c(0,t) = 0 \ , \ t \geq t_\alpha$. A partir da equação (8), utilizando métodos iterativos, encontramos os seguintes valores de $t_\alpha$ para $\alpha \in \{1, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5\}$.

$$t_1 = 0.196 \ , \ t_{0.9} = 0.163 \ , \ t_{0.8} = 0.129 \ , \ t_{0.7} = 0.097 \ , \ t_{0.6} = 0.066 \ , \ t_{0.5} = 0.039.$$

O valor de $t_1$ é o encontrado em [3] e para $\alpha < 1$ é possível perceber que o tempo necessário para anular a concentração de oxigênio também diminui, sugerindo que a derivada fracionária causa um efeito de aumento da velocidade de absorção de oxigênio no meio.

O próximo passo é descrever o modelo fracionário na forma de um problema de complementaridade no qual aplicaremos o algoritmo FDA-NCP [4], como feito em [5] para o caso clássico. Para determinar a fronteira móvel, $x_0(t)$, utiliza-se um refinamento local da malha, como pode ser visto em [3], porém para o caso fracionário não é possível adaptar essa técnica de forma direta, uma vez que o operador fracionário é não local. Além disso, estamos interessados em aplicar outras derivadas fracionárias ao modelo, como, por exemplo, a derivada de Riemann-Liouville. Desta forma, entendemos que estamos contribuindo para o estudo do cálculo fracionário aplicado a modelagem matemática.

## 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] 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.

[2] R. F. Camargo e E. C. Oliveira. **Cálculo Fracionário**. 1a. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2015. ISBN: 9788578613297.

[3] 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.

[4] J. Herskovits e S. R. Mazorche. “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.

[5] W. S. Pereira, A. Gutierrez, S. R. Mazorche e G. Chapiro. “Simulação de um problema de difusão de oxigênio utilizando o método de elementos finitos e FDA-NCP.” Em: **SIMMEC/EMMCOMP, 11** (2014).


 