

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

AVALIAÇÃO DO SEGUNDO MOMENTO EM MODELOS DE DIFUSÃO CLÁSSICA E BI-FLUXO

Jader Lugon Junior¹ - jljunior@iff.edu.br

Gisele Moraes Marinho² - giselemarinho11@gmail.com

Diego Campos Knupp² - diegoknupp@iprj.uerj.br

Luiz Bevilacqua³ - bevilacqua@coc.ufrj.br

Antônio J. Silva Neto² - ajsneto@iprj.uerj.br

¹Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental, Instituto Federal Fluminense, Macaé, RJ, Brasil

²Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico - Nova Friburgo, RJ, Brasil

³Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Resumo. Neste trabalho foi avaliado o segundo momento em modelos de difusão, inspirado no uso do deslocamento quadrático médio (MSD - Mean Square Displacement) como ferramenta para estudo dos modelos clássico e do modelo bi-fluxo, sendo ambos resolvidos por meio do software Wolfram Mathematica. O modelo clássico corresponde, por exemplo, à equação para transferência de calor descrita por Fourier ou à equação de Fick para difusão de substâncias químicas em uma solução. A análise do segundo momento permite classificar se o processo difusivo pode ser classificado como normal, subdifusivo ou superdifusivo. São apresentados os resultados obtidos em casos unidimensionais variando os coeficientes de difusão, sendo discutidos os resultados obtidos.

Keywords: Difusão anômala, Difusão bi-fluxo, Deslocamento Quadrático Médio, MSD.

1. INTRODUÇÃO

O fenômeno de difusão pode ser descrito como o processo pelo qual matéria é transportada dentro de um sistema de uma posição para outra, como resultado do movimento aleatório das moléculas. A partir de tal definição são encontradas inúmeras aplicações, variando a forma das equações que descrevem tal fenômeno dependendo da área de estudo. Em transferência de calor por exemplo, é importante citar a equação da difusão de calor de Fourier, em química encontra-se as equações de Fick para descrever a difusão de substâncias químicas em solução e inúmeras outras formulações para aplicações científicas inspiradas nestes modelos, cabendo citar Einstein (1956); Metzler et al. (2014).

Porém existem muitas áreas de estudo em que o processo difusivo não segue exatamente tais formulações de difusão linear, caracterizando processos de difusão considerados anômalos. Considere a equação (Metzler et al., 2014)

$$\langle x^2(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2(\phi - \phi_0) dx = K_\alpha t^\alpha \quad (1)$$

onde $\langle x^2(t) \rangle$ representa o segundo momento da função $\phi(x, t)$, o parâmetro α é o expoente de difusão, t é o tempo e K_α é o coeficiente de difusão correspondente.

Segundo Metzler et al. (2014) é usual adotar como critério de classificação do fenômeno de difusão a partir do expoente α , definindo como um fenômeno de subdifusão quando ($0 < \alpha < 1$) e como superdifusão quando ($\alpha > 1$). A difusão clássica, também chamada de linear, é caracterizada por $\alpha = 1$. O objetivo deste trabalho é avaliar o comportamento do modelo de difusão Bi-fluxo quanto a tal classificação.

2. FORMULAÇÃO DO MODELO BI-FLUXO

Seguindo a formulação desenvolvida por Bevilacqua et al. (2011), considere o processo representado na Figura 1. A cada passo de tempo (Δt), o conteúdo de determinada célula é redistribuído, retendo a quantidade $\alpha\phi_n$, e transferindo metade do conteúdo remanescente para as células vizinhas, isto é, $0,5\beta\phi_n$ para cada lado, onde $\alpha + \beta = 1$.

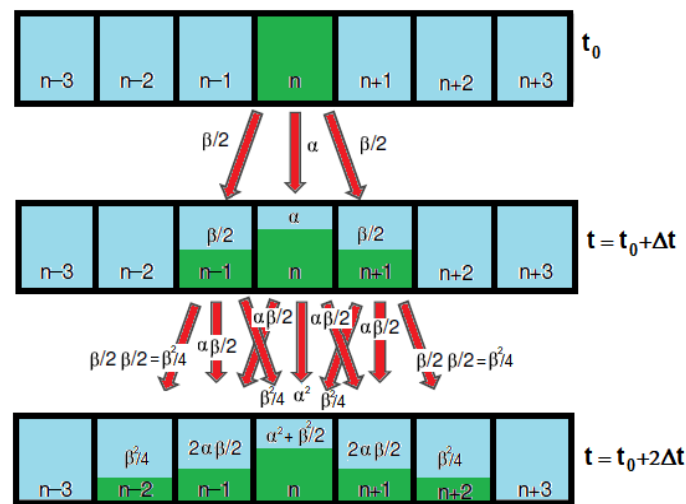


Figura 1- Distribuição simétrica com efeito de retenção $\beta = (1 - \alpha)$.

A regra é traduzida em expressões algébricas

$$\phi_n^t = (1 - \beta)\phi_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta\phi_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta\phi_{n+1}^{t-1} \quad (2)$$

$$\phi_n^{t+1} = (1 - \beta)\phi_n^t + \frac{1}{2}\beta\phi_{n-1}^t + \frac{1}{2}\beta\phi_{n+1}^t \quad (3)$$

e após uma manipulação algébrica das Eqs. (2) e (3), a seguinte expressão é obtida Bevilacqua et al. (2011,a); Jiang et al. (2016)

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

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. É interessante notar que quando $K_4 = 0$, elimina-se o termo de quarta ordem da formulação e tem-se uma equivalência com o modelo de difusão clássica, considerando que o produto βK_2 corresponde ao coeficiente de difusão.

Silva et al. (2014) resolveram a equação de difusão bi-fluxo e realizaram o estudo de sensibilidade utilizando o software Mathematica com o objetivo de estimar os parâmetros da formulação de difusão bi-fluxo. Em artigos posteriores, a mesma equipe de pesquisadores desenvolveu soluções para o problema inverso de difusão bi-fluxo (Silva et al., 2014, 2013; Knupp et al., 2016) utilizando como metodologias a inferência Bayesiana e a máxima verossimilhança.

Vasconcellos et al. (2016) utilizaram o Método de Volumes Finitos no desenvolvimento de uma solução para o problema estacionário para resolver a equação de difusão bi-fluxo estudando particularmente as dificuldades numéricas relacionadas às condições de contorno (Dirichlet, Neumann e Robin).

Jiang et al. (2018) utilizaram a teoria de difusão bi-fluxo para estudar o processo de dispersão de partículas em um substrato, no qual a presença de anisotropias localizadas podem perturbar alguns parâmetros físicos no processo de difusão e modificar o fluxo.

No presente trabalho, diferentes processos de difusão bi-fluxo são estudados desenvolvendo soluções com o software Mathematica, calculando a evolução temporal do MSD visando avaliar suas características, comparando com o Deslocamento Quadrático Médio (MSD) calculado com a formulação clássica e discutindo suas classificações como sub ou superdifusivos.

3. DESCRIÇÃO DOS ESTUDOS DE CASO

Com o objetivo de avaliar diferentes estudos de caso, foi considerado um problema com a seguinte condição inicial

$$\phi(x, t)|_{t=0} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (5)$$

onde $\mu = L/2$ e $\sigma = 0,01$ e com as condições de contorno (C. C.) dispostas na Tabela 1

Tabela 1- Condição de Contorno.

	Lado esquerdo ($x = 0$)	Lado direito ($x = L$)
C. C. 1	$\frac{d\phi}{dx} = 0$	$\frac{d\phi}{dx} = 0$
C. C. 2	$\frac{d^3\phi}{dx^3} = 0$	$\frac{d^3\phi}{dx^3} = 0$

As soluções foram avaliadas com seis diferentes conjuntos de parâmetros, sendo que para todos os casos o comprimento $L = 4,00$, o tempo final de observação t_f e os outros parâmetros do modelo estão apresentados na Tabela 2.

Tabela 2- Estudos de Caso implementados.

Variável	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5	Caso 6
β	0,2	0,2	0,2	0,8	0,8	0,8
K_2	1,0	1,0	1,0	0,1	0,1	0,1
K_4	0,0	0,05	0,1	0,0	0,05	0,1
t_f	0,5	0,5	0,5	0,3	0,3	0,3

4. RESULTADOS

Na Fig. 2 são representados os resultados obtidos para os casos 1, 2, 3, 4, 5 e 6 apresentados na Tabela 2, considerando os seguintes instantes de tempo: $t = t_f/4$; $t = t_f/4$; $t = 3/4t_f$; $t = t_f$.

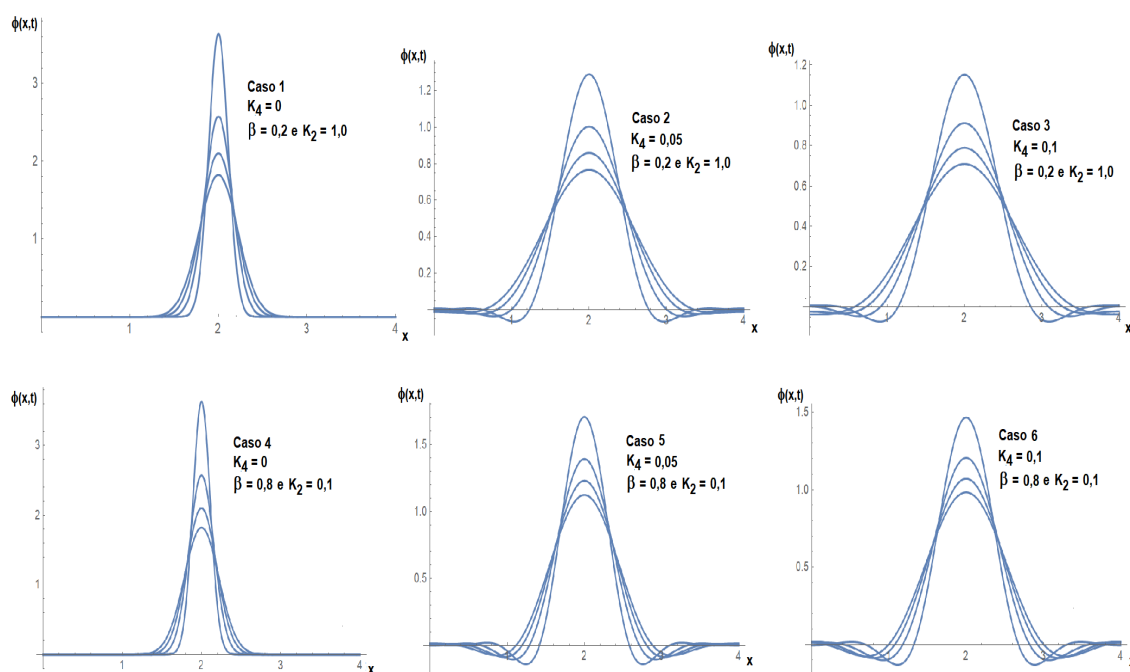


Figura 2- Resultados considerando os diferentes casos apresentados na Tab. 2.

É possível observar o efeito da introdução e posterior aumento do coeficiente K_4 nas soluções representadas na Fig. 2. Observar que a escala vertical de cada gráfico é alterada para permitir melhor visualização.

A Fig. 3 apresenta os resultados da variação temporal do segundo momento da função para os 6 casos em estudo. Nos gráficos indicados como (a) e (a)LogLog estão representados os casos 1 e 2, nos gráficos (b) e (b)LogLog estão representados os casos 1 e 3; em (c) e (c)LogLog estão representados os casos 4 e 5; e finalmente em (d) e (d)LogLog estão representados os casos 4 e 6.

É possível observar na Fig. 3 nos gráficos (a) e (a)LogLog, que representam os casos 1 e 2, que as duas curvas são muito próximas, mas a presença do coeficiente K_4 provoca um

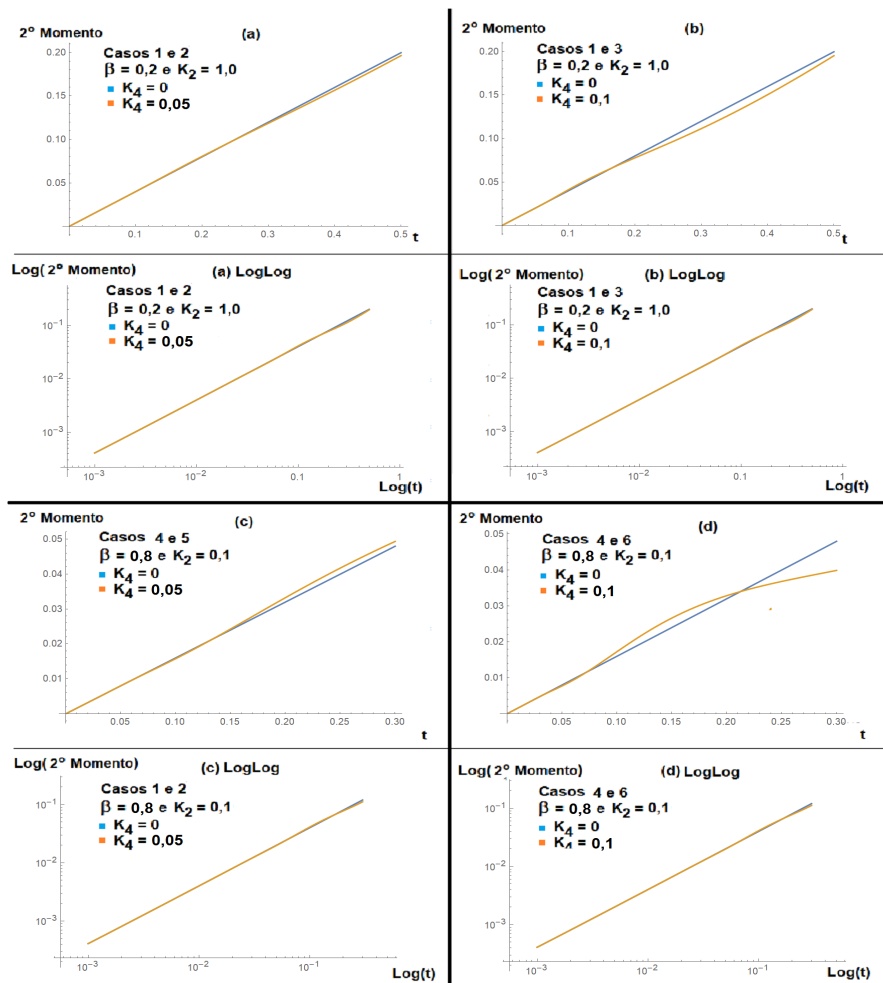


Figura 3- Variação do segundo momento ao longo do tempo para os 6 casos estudados.

comportamento levemente superdifusivo. Depois, ao estudar os casos 1 e 3, nos gráficos (b) e (b)LogLog, o aumento do coeficiente K_4 no caso 3, observa-se um aumento no comportamento subdifusivo.

Continuando a análise da Fig. 3, nos gráficos (c) e (c)LogLog, representando os casos 4 e 5, observa-se que a associação do aumento do valor de β e presença do coeficiente K_4 causa um efeito superdifusivo. A seguir, nos gráficos (d) e (d)LogLog, correspondentes aos casos 4 e 6, o aumento do coeficiente K_4 corresponde a um comportamento de superdifusão seguido de um período de subdifusão.

5. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

As soluções obtidas para os estudos de caso considerados permitiram avaliar o comportamento do fenômeno, comparando com o gráfico do segundo momento da função a partir do uso do Deslocamento Quadrático Médio (MSD) para o modelo clássico e então classificando a solução do modelo bi-fluxo, dependendo dos coeficientes adotados.

Os resultados obtidos são promissores, e tal comportamento da solução da equação de difusão bi-fluxo merece ser estudado com maior detalhamento em trabalhos futuros.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro fornecido 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

- R.Metzler, J.Jeon, A.G.Cherstvy e E.Barkai, 2014. *Anomalous diffusion models and their properties: non-stationarity, non-ergodicity, and ageing at the centenary of single particle tracking*. Phys. Chem. Chem. Phys., 2014, 16, 24128. <http://dx.doi.org/10.1039/c4cp03465a>.
- A. Einstein, 1956. *Investigations on the theory of the Brownian movement*, ed. R. Furth, Dover, New York, NY, 1956.
- L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão e F.P. Costa, 2011. *A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion process*. An Acad Bras Cienc. 83 (2011) 1a443-1464.
- L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão e F.P.Costa, 2011a. *On the significance of higher order differential terms in diffusion process*. J. Brazilian Soc. Mech Sci Eng. 33 (2011) 166-175.
- L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão, J.G.Simas e A.P.R.Doce, 2013. *A new theory for anomalous diffusion with a bimodal flux distribution*. J. Brazilian Soc. Mech Sci Eng. (2013) 1-10.
- D.C.Knupp, L.G.Silva, L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão e A.J.Silva Neto, 2016, *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.
- L.G.Silva, D.C.Knupp, L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão e A.J.Silva Neto, 2014. *Inverse problem in anomalous diffusion with uncertainty propagation*. 8th International Conference on Inverse Problems in Engineering-ICIPE 2014. Cracow, Poland.
- L.G.Silva, D.C.Knupp, L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão e A.J.Silva Neto, 2014, *Formulação e solução de um Problema Inverso de Difusão Anômala com Técnicas Estocásticas*. Ciência e Natura, (2014) p. 82-96. <http://dx.doi.org/10.5902/2179460X13184>.
- L.G.Silva, D.C.Knupp, L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão, J.G.Simas, J.F.Vasconcellos, e A.J.Silva Neto, 2013, *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).

- J.F.V.Vasconcellos, G.M.Marinho e J.H.Zanni, 2016. *Análise numérica da equação da difusão anômala com fluxo bimodal*. Rev. int. métodos númer. cálc. diseño ing. <http://dx.doi.org/10.2016/j.rimni.2016.05001>.
- Bevilacqua, L., Jiang, M., Silva Neto, A. J. e Galeão, A.C.N.R., 2016, *An Evolutionary Model of Bi-Flux Diffusion Processes*. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, Vol. 38, No. 5, pp. 1421-1432. <http://dx.doi.org/10.1007/s40430-015-0475-5>.
- Jiang, M., Bevilacqua, L., Silva Neto, A. J., Galeão, A.C.N.R. e Zhu, J., 2018, *Bi-Flux Theory Applied to the Dispersion of Particle in Anisotropic Substratum*. Applied Mathematical Modeling, Vol. 64, pp. 121-134. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2018.07.022>.

APPENDIX A

SECOND MOMENT EVALUATION IN CLASSIC AND BI-FLUX DIFFUSION MODELS

Abstract: *In this work, the second moment in diffusion models was evaluated, inspired in the use of the Mean Squared Displacement (MSD) as a tool to study the classic and the Bi-flux models, being both solved using the Wolfram Mathematica software. The classic model corresponds, for example, to the heat transfer equation described by Fourier or the Fickian equation for the diffusion of chemical substances in a solution. The second moment analysis allows to classify if the process can be called normal, subdiffusive or superdiffusive. The results obtained considering one dimension cases are presented and discussed, varying the diffusion coefficients.*

Keywords: *Anomalous Diffusion, Bi-flux diffusion, Mean Squared Displacement, MSD.*