



DOI: 10.5335/rbca.v12i1.10067 Vol. 12, Nº 1, pp. 95-103

Homepage: seer.upf.br/index.php/rbca/index

ARTIGO ORIGINAL

Estudo numérico da difusão unidimensional transiente empregando o Cálculo Fracionário

Numerical study of transient one-dimensional diffusion employing the Fractional Calculus

Jaque Willian Scotton¹, Julian Moises Sejje Suarez², Antonio Gledson Oliveira Goulart²

¹Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, Universidade Federal do Rio Grande, ²Instituto de Matemática, Estatística e Física, Universidade Federal do Rio Grande

*jaquewillian@gmail.com, jul.sejje@gmail.com, antonio.goulart@gmail.com

Recebido: 10/10/2019. Revisado: 08/01/2020. Aceito: 21/03/2020.

Resumo

No presente trabalho, são apresentados os resultados obtidos em simulações numéricas do problema da difusão unidimensional transiente de um escalar passivo onde, diferentemente das abordagens tradicionais, emprega-se uma versão fracionária no espaço e no tempo da equação governante do problema. Na realização do estudo, são consideradas as derivadas fracionárias de Riemann-Liouville e o problema foi resolvido pelo Método das Diferenças Finitas, com o objetivo de verificar como os perfis de solução são influenciados pelas ordens das derivadas. Dentre os resultados obtidos, verificaram-se alterações significativas nos perfis de concentração para diferentes valores da ordem das derivadas, α , contidos no intervalo (0,1), evidenciando o grande potencial dos modelos fracionários na modelagem de problemas nos quais os tradicionais modelos com derivadas de ordem inteira não são capazes de representar com a precisão que se necessita.

Palavras-Chave: Simulação numérica; Difusão unidimensional; Derivadas fracionárias; Riemann-Liouville; Diferenças Finitas.

Abstract

This paper presents the results obtained in numerical simulations of the transient one-dimensional diffusion problem of a passive scalar where, unlike the traditional approaches, we employ a fractional space and time version of the governing equation of the problem. In the study, the Riemann-Liouville fractional derivatives were considered and the problem was solved by the Finite Difference Method, in order to verify how the solution profiles are influenced by the orders of the derivatives. Among the obtained results, we verified significant changes in the concentration profiles for different values of the order of derivatives, 0 < α < 1, showing the great potential of the fractional models in the modeling of problems in which the classical models are not able to represent as accurately as needed.

Keywords: Numerical simulation; One-dimensional diffusion; Fractional derivatives; Riemann-Liouville; Finite Differences.

1 Introdução

A difusão unidimensional transiente é um problema clássico em estudos de transferência de calor, com aplicação prática no fenômeno da condução de calor em uma barra, por exemplo, cuja solução analítica para a distribuição de temperaturas pode ser obtida por séries de Fourier (Butkov, 1978, Kreyszig, 2009).

A equação governante desse problema, no entanto, não é adequada para modelar sistemas onde ocorre difusão anômala, como a difusão em plasmas (Berryman, 1977), a difusão em fractais (Stephenson, 1995), o transporte de fluidos em meios porosos (Spohn, 1993) e o estudo da energia vibracional em proteínas (Yu and Leitner, 2003), entre outras aplicações. Esse também é o caso, por exemplo, da difusão turbulenta, a qual, conforme verificado por Richardson (1926), tem um caráter superdifusivo. Em seus estudos, Richardson, ao medir as variações nas espessuras de plumas liberadas por chaminés em campos de velocidades turbulentas, observou que as larguras das plumas cresciam segundo uma lei de potência do tipo t^{α} , com $\alpha \geq 3$, diferentemente do que ocorre em fenômenos comuns de difusão, onde α = 1.

Nesse âmbito, muitos trabalhos foram desenvolvidos nos últimos anos, como os de Meerschaert and Tadjeran (2004), Momani (2007), Liu et al. (2007), Ray (2009), Goulart et al. (2017, 2019), Simmons et al. (2017), Hejazi et al. (2014), Tadjeran et al. (2006), Tayebi et al. (2017), modificando as equações da difusão, ou da advecçãodifusão, clássicas, considerando ordens não inteiras nas derivadas dessas equações, a fim de buscar uma melhor representação dos fenômenos de difusão anômala.

Meerschaert and Tadjeran (2004) desenvolveram um método numérico para resolver a equação da advecçãodifusão unidimensional transiente, com derivada de ordem fracionária no termo difusivo. A modelagem proposta por eles é baseada em aproximações por diferenças finitas e permite considerar coeficientes variá-

Tadjeran et al. (2006) apresentaram uma discretização da equação da difusão unidimensional transiente, com derivada fracionária no espaço, empregando o método de Crank-Nicholson com segunda ordem de precisão no espaço e no tempo. No trabalho, foi considerada a derivada de Riemann de ordem 1 < α < 2, à esquerda, aproximada pela fórmula de Grünwald deslocada.

Momani (2007) apresentou a solução numérica da equação da advecção-difusão unidimensional com derivada fracionária de ordem α no termo transiente e com um termo fonte não linear. A solução foi baseada no método da decomposição de Adomian e a derivada fracionária tomada conforme a definição de Caputo. Dois exemplos foram resolvidos sendo que, no primeiro, foram apresentados os resultados obtidos para diferentes valores de α , comparando-os com os da solução exata (disponível apenas para o caso $\alpha = 1$) e, no segundo, um caso especial foi considerado, no qual o método da decomposição de Adomian levou à solução exata do

Liu et al. (2007) consideraram a equação da advecçãodifusão unidimensional com coeficientes variáveis e

derivadas de ordem fracionária em todos os termos (segundo Caputo, no termo transiente; segundo Riemann-Liouville, nos termos advectivo e difusivo). Para discretizar as derivadas de Riemann-Liouville, utilizaram a fórmula de Grünwald padrão no termo advectivo (0 < α < 1) e a fórmula de Grünwald modificada no termo difusivo (1 < α < 2). Em suas análises consideraram dois métodos: um explícito, o qual provaram ser condicionalmente estável e convergente; e um implícito, o qual provaram ser incondicionalmente estável e convergente.

Ray (2009) resolveu analiticamente a equação da difusão transiente, unidimensional e bidimensional, com derivada fracionária de Riemann-Liouville no espaço. No trabalho foi utilizado o Método da Decomposição de Adomian de dois passos, que se distingue do Método da Decomposição clássico por uma pequena alteração na relação recursiva do método, a qual além de acelerar a convergência, permite que se obtenha a solução exata utilizando apenas duas iterações.

Hejazi et al. (2014), por sua vez, analisaram a estabilidade e a convergência de um método baseado em Volumes Finitos na solução da equação da advecçãodifusão unidimensional com derivada fracionária de ordem 1 < α < 2 no termo difusivo.

Goulart et al. (2017) avaliaram os desempenhos de dois modelos fracionários - um com coeficiente de difusão constante e outro com coeficiente de difusão em função da distância longitudinal - comparativamente as suas respectivas versões clássicas (com derivadas de ordens inteiras) na representação de casos estacionários de dispersão de contaminantes na atmosfera. No trabalho, aplicaram derivas de Caputo nos termos advectivos das equações e verificaram que as modelagens fracionárias forneceram resultados significativamente melhores do que as modelagens clássicas.

Tayebi et al. (2017), por sua vez, apresentaram um método sem malha para resolver a equação da advecçãodifusão bidimensional e transiente, considerando a derivada fracionária de Caputo no termo temporal, tanto constante, de ordem α , quanto variável, de ordem $\alpha(x, y, t)$.

Simmons et al. (2017) apresentaram uma nova discretização, baseada no Método dos Volumes Finitos, da equação da difusão unidimensional transiente, com derivada de ordem fracionária no espaço. No estudo, foi empregada a definição integral da derivada fracionária de Riemann-Liouville (a discretização da derivada foi feita escrevendo a integral como um somatório) e o método foi desenvolvido visando a aplicação em malhas não uniformes. Eles também consideraram um caso teste, onde o termo advectivo foi incluído na equação, porém sem derivada fracionária, quando compararam as soluções obtidas empregando uma malha uniforme com outra não uniforme e verificaram que a malha não uniforme se mostrou sensivelmente mais precisa em relação a uma solução de referência.

Goulart et al. (2019) generalizaram o trabalho de Goulart et al. (2017), parametrizando também o fluxo de concentração com derivada de ordem fracionária. No trabalho, mesmo considerando o coeficiente de difusão turbulenta e a velocidade do vento constantes,

verificaram que a modelagem fracionária forneceu resultados muito bons quando confrontados com dados experimentais. Outro importante resultado do estudo foi a inferência de que pode haver uma relação entre a ordem da derivada e a estrutura física da turbulência, já que quando houve predominância da energia mecânica no fluxo turbulento todos os experimentos foram melhor descritos por α = 0.72 e quando houve predominância da energia devida à convecção térmica, os dados experimentais foram melhor descritos por α = 0.80.

Como pode-se verificar, a grande maioria dos trabalhos citados foi desenvolvida visando o desenvolvimento e a análise de métodos numéricos para a resolução das equações diferenciais fracionárias. Apenas alguns concentraram-se nas aplicações práticas dos modelos fracionários. No presente trabalho, porém, apresenta-se uma versão fracionária da equação da difusão unidimensional transiente com derivadas de ordem 0 < α < 1 no tempo e no espaço e os resultados obtidos em simulações numéricas realizadas empregando o Método das Diferenças Finitas, com o objetivo de verificar como os perfis de solução são influenciados pelas ordens das derivadas na difusão de um escalar passivo, estudo que não tem qualquer referência direta na literatura, sendo portando um trabalho original. Nesse estudo são consideradas derivadas fracionárias segundo a definição de Riemann-Liouville, discretizadas pela fórmula de Grünwald-Letnikov.

Difusão unidimesional transiente

A equação da difusão unidimensional transiente clássica é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial C}{\partial x} \right) \tag{1}$$

onde: x é a coordenada espacial [L], t é a coordenada temporal [T], C = C(x, t) é a concentração [ML^{-3}] e K é o coeficiente de difusão $[L^2T^{-1}]$.

Uma versão com derivada fracionária da Eq. (1) é

$$\frac{\partial^{\alpha} C}{\partial t^{\alpha}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial^{\alpha} C}{\partial x^{\alpha}} \right) \tag{2}$$

onde: $\partial^{\alpha}C/\partial t^{\alpha}$ e $\partial^{\alpha}C/\partial x^{\alpha}$ são as derivadas de Riemann-Liouville, à esquerda, de ordem $0 < \alpha < 1$.

No caso específico do coeficiente de difusão ser constante, pode-se ainda reescrever a Eq. (2) como

$$\frac{\partial^{\alpha} C}{\partial t^{\alpha}} = K \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^{\alpha} C}{\partial x^{\alpha}} \right). \tag{3}$$

É interessante observar que, se α = 1, a Eq. (3) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial C}{\partial t} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{4}$$

que é a equação do calor unidimensional. Entretanto,

uma vez que a relação

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^{\alpha} C}{\partial x^{\alpha}} \right) = \frac{\partial^{1+\alpha} C}{\partial x^{1+\alpha}}$$
 (5)

não é válida para toda função quando α é um número fracionário qualquer, optou-se por manter a equação governante do problema na forma dada pela Eq. (3). Para fechar o problema, é preciso ainda definir o domínio e as condições inicial e de contorno. Nesse trabalho, considera-se o domínio $[0, L] \times [0, T]$, a condição inicial

$$C(x,0) = f(x) \tag{6}$$

e as condições de contorno de Dirichlet

$$C(0,t) = C_0 \tag{7}$$

$$C(L,t) = C_L \tag{8}$$

onde: C_0 e C_L são constantes.

3 Sobre as derivadas fracionárias

Uma das principais diferenças entre os operadores diferenciais de ordem inteira é os de ordem fracionária está no fato de que, enquanto os de ordem inteira são operadores locais, os de ordem fracionária são não locais e as derivadas fracionárias de uma função f em relação a x, num ponto x_0 em [a, b], por exemplo, dependem dos valores de f em todo o intervalo [a,b] ($[a,x_0]$ no caso de derivada à esquerda; $[x_0, b]$ no caso de derivada à direita). No caso da derivada fracionária no tempo, em particular, tem-se que a derivada da função num determinado instante t depende de todos os instantes anteriores a partir do inicial, levando ao que pode-se chamar de efeito de memória sobre os cálculos das derivadas. Essa característica de não localidade dos operadores é de grande importância para problemas de difusão anômala, os quais conforme (Camargo and Oliveira, 2015, Podlubny, 1999, Zhou, 2014, Sabatier et al., 2007), podem ser modelados por equações diferenciais fracionárias.

Há diversas definições para as derivadas de ordens fracionárias e aqui são apresentadas algumas delas. A derivada fracionária de Riemann-Liouville de uma função f em um ponto x em [a, b], à esquerda, é definida por (Samko et al., 1993)

$$_{RL}D_{a+}^{\alpha}f(x)=\frac{1}{\Gamma(n-\alpha)}\frac{d^{n}}{dx^{n}}\int_{a}^{x}\frac{f(\xi)}{(x-\xi)^{\alpha-n+1}}d\xi \qquad (9)$$

onde: $n = [\alpha] + 1, \alpha \in \mathbb{R}_+^*, x > a$ e $\Gamma(\cdot)$ é a função Gama, que é uma generalização da generalização do cálculo de fatoriais para valores não pertencentes ao conjunto dos números naturais. Essa é, sem dúvida, uma das definições de derivadas fracionárias mais utilizadas e, como se pode observar na Eq. (9), trata-se de uma derivada de ordem inteira de uma integral fracionária.

Outra definição de derivada fracionária muito utilizada é a derivada de Caputo, a qual é definida, à esquerda, por

$${}^CD^{\alpha}_{a+}f(x)=\frac{1}{\Gamma(n-\alpha)}\int_a^x\frac{f^{(n)}(\xi)}{(x-\xi)^{\alpha-n+1}}d\xi \qquad (10)$$

onde: $n = [\alpha] + 1, \alpha \in \mathbb{R}_+^*, x > a$. É interessante observar que a grande diferença entre as definições de Riemann-Liouville (Eq. (9)) e de Caputo (Eq. (10)) está na ordem das operações de derivação e de integração. Essa simples alteração, no entanto, faz com que a derivada fracionária de Caputo de uma função constante seja zero, algo que não ocorre na definição de Riemann-Liouville. Além disso, as condições iniciais para as equações diferenciais fracionárias com derivadas de Caputo são de ordem inteira, o que possibilita a rigor uma melhor interpretação física (Podlubny, 1999).

Outra definição de derivada fracionária de grande utilidade na solução de problemas numéricos é a derivada de Grüwnald-Letnikov, a qual, à esquerda, em um intervalo [a, b] em que x é um ponto desse intervalo, é dada por (Samko et al., 1993)

$$f_{a+}^{(\alpha)}(x) = \lim_{\Delta x \to 0^+} \frac{1}{\Delta x^{\alpha}} \sum_{k=0}^{\frac{x-a}{\Delta x}} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(x - k\Delta x)$$
 (11)

onde: $\alpha \in \mathbb{R}_+^*, x > a$.

É importante mencionar que para uma grande classe de funções que aparecem em problemas físicos reais e em aplicações de engenharia, as definições de Riemann-Liouville e de Grünwald-Letnikov são equivalentes, o que permite a utilização da definição de Riemann-Liouville durante a formulação do problema e o emprego da definição de Grünwald-Letnikov na obtenção da solução numérica (Podlubny, 1999).

Além das formulações apresentadas, há outras que merecem ser mencionadas, como a derivada fracionária de Hilfer, que interpola as derivadas de Riemann-Liouville e de Caputo, a de Riesz, que tem sido muito empregada em equações diferenciais com derivadas fracionárias no espaço, a de Weyl, a de Hadamard e a de Marchaud, cujas definições, além de outras, podem ser encontradas em Miller and Ross (1993), Samko et al. (1993), Podlubny (1999) e Hilfer (2000).

Discretização pelo Método das Diferenças **Finitas**

Seja a malha espacial $x_i = ih$ para i = 0, 1, ...M com h = L/M, e a malha temporal $t_n = n\tau$ para n = 0, 1, ..., Ncom τ = T/N.

A derivada de Grünwald-Letnikov (Eq. (11)) pode ser aproximada truncando-se a soma infinita presente na definição e substituindo-se o Δx pelo passo espacial h. Assim,

$$\frac{\partial^{\alpha}C(x,t)}{\partial x^{\alpha}} \approx \frac{1}{h^{\alpha}} \sum_{i=0}^{x/h} w_{j}^{\alpha}C(x-jh,t)$$
 (12)

$$\frac{\partial^{\alpha} C(x,t)}{\partial t^{\alpha}} \approx \frac{1}{\tau^{\alpha}} \sum_{j=0}^{t/\tau} w_{j}^{\alpha} C(x,t-j\tau)$$
 (13)

onde: os coeficientes w_i^{α} são calculados pela relação de recorrência (Podlubny, 1999)

$$w_0^{\alpha} = 1$$
 $w_j^{\alpha} = \left(1 - \frac{\alpha + 1}{j}\right) w_{j-1}^{\alpha}, \quad j = 1, 2, ...$ (14)

A derivada inteira da Eq. (3) pode ser aproximada de tal modo que

$$\frac{\partial^{\alpha} C(x_{i}, t_{n})}{\partial t^{\alpha}} = \frac{K}{h} \left[\frac{\partial^{\alpha} C(x_{i+1}, t_{n})}{\partial x^{\alpha}} - \frac{\partial^{\alpha} C(x_{i}, t_{n})}{\partial x^{\alpha}} \right].$$
 (15)

Substituindo as aproximações dadas pelas Eqs. (12) e (13) na Eq. (15), obtem-se

$$\frac{1}{\tau^{\alpha}} \sum_{j=0}^{n} w_{j}^{\alpha} C(x_{i}, t_{n-j}) = \frac{K}{h^{\alpha+1}} \sum_{j=0}^{i+1} w_{j}^{\alpha} C(x_{i-j+1}, t_{n}) - \frac{K}{h^{\alpha+1}} \sum_{j=0}^{i} w_{j}^{\alpha} C(x_{i-j}, t_{n}).$$
(16)

Definindo $P = 1/\tau^{\alpha}$ e $B = K/h^{\alpha+1}$, chega-se ao sistema de equações lineares

$$B(w_{i}^{\alpha} - w_{i+1}^{\alpha}) C(x_{0}, t_{n}) + \dots + B(w_{1}^{\alpha} - w_{2}^{\alpha}) C(x_{i-1}, t_{n}) + [Pw_{0}^{\alpha} + B(w_{0}^{\alpha} - w_{1}^{\alpha})] C(x_{i}, t_{n}) + (-Bw_{0}^{\alpha}) C(x_{i+1}, t_{n}) + Pw_{1}^{\alpha} C(x_{i}, t_{n-1}) + \dots + Pw_{n}^{\alpha} C(x_{i}, t_{0}) = 0$$
(17)

onde: i = 1, 2, ..., M - 1 e n = 1, 2, ...N, $C(x_0, t_n) = C_0$, $C(x_M, t_n) = C_L$ e $C(x_i, t_0) = f(x)$.

Note que para α = 1, o sistema reduz-se a

$$(-B)C(x_{i-1}, t_n) + (P + 2B)C(x_i, t_n) + (-B)C(x_{i+1}, t_n) + (-P)C(x_i, t_{n-1}) = 0$$
 (18)

onde: i=1,2,...,M-1 e n=1,2,...N, $C(x_0,t_n)=C_0$, $C(x_M,t_n)=C_L$ e $C(x_i,t_0)=f(x)$, que é exatamente o sitema resultante da discretização da equação clássica (Eq. (4)) pelo Método das Diferenças Finitas onde a derivada de primeira ordem é aproximada por

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} \approx \frac{C(x_i,t_n) - C(x_i,t_{n-1})}{\tau} \tag{19}$$

e a de segunda ordem por

$$\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \approx \frac{C(x_{i-1},t_n) - 2C(x_i,t_n) + C(x_{i+1},t_n)}{h^2}.$$
 (20)

No presente trabalho, o Método das Diferenças Finitas foi implementado em FORTRAN e o sistema linear resultante (Eq. (17)), resolvido pelo Método de Jacobi. Optou-se pela discretização por Diferenças Finitas e pela resolução numérica do sistema linear de equações empregando um método implícito pelo fato de trabalhos como os de Liu et al. (2007) e de Meerschaert and Tadjeran (2004) já terem proposto e testado tais metodologias, uma vez que tal proposição foge do escopo do presente trabalho.

Resultados e discussões

O problema formado pela Eq. (3) para $0 \le x \le 10$ e $t \ge 0$, com α = 1, K = 1, C_0 = C_L = 0 e C(x,0) = f(x), onde

$$f(x) = \begin{cases} x & 0 < x < 5 \\ 10 - x & 5 < x < 10 \end{cases}$$
 (21)

tem a solução analítica dada pela série de Fourier (Kreyszig, 2009)

$$C(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{10}\right) e^{-\left(\frac{n\pi}{10}\right)^2 t}$$
 (22)

onde os coeficientes de Fourier são

$$\begin{cases} A_n = 0 & \text{se } n \text{ \'e par} \\ A_n = \frac{40}{n^2 \pi^2} & \text{se } n = 1, 5, 9, \dots \\ A_n = -\frac{40}{n^2 \pi^2} & \text{se } n = 3, 7, 11, \dots \end{cases}$$
 (23)

A equação da difusão (Eq. (3)), é também chamada de equação do calor, uma vez que governa o problema homogêneo de difusão unidimensional de calor, em que uma importante aplicação está no estudo da distribuição de temperatura em uma barra com seção transversal constante, de material homogêneo e isolada lateralmente, de tal forma que o fluxo de calor propaga-se apenas em uma única direção, ao longo da barra (Kreyszig, 2009).

Para verificar a modelagem fracionária, faz-se a ordem α das derivadas ser muito próxima de 1 e comparase os resultados numéricos obtidos com os resultados analíticos do caso clássico, onde α = 1. Nesse procedimento, espera-se que quanto mais próximo de 1 esteja o valor de α , mais próximos da solução exata estejam os resultados numéricos, desde que a malha seja suficientemente refinada. Na Tabela 1 são apresentados os diferentes refinamentos de malha considerados nesse trabalho e os erros absolutos máximos entre cada uma dessas malhas e a solução analítica, onde pode-se observar que quanto mais refinada é a malha, mais próximos da solução exata estão os resultados numéricos. Havendo a necessidade de uma precisão maior, basta então utilizar valores de h e au menores. A condição de erro absoluto E_{Ab} < 3.10⁻², porém, já é suficiente para

os propósitos do nosso estudo. Desse modo, a malha M₅ poderia ser utilizada sem nenhum problema. No entanto, optou-se por utilizar a malha com refinamento um pouco menor (M_6) , uma vez que o custo computacional não é demasiado em qualquer um dos casos. Essa malha, como pode-se observar na Tabela 1, satisfaz a condição de $E_{Ab} < 2.10^{-2}$, o qual corresponde a um erro relativo menor do que 0.9%. Nas simulações, foi tomado α = 0.999 e, na solução por séries de Fourier, considerou-se n = 200.

Nesse trabalho, foram considerados apenas valores de $t \le 6$. Isso, entretanto, não significa que as soluções próximas de zero não sejam de interesse, apenas selecionou-se esse intervalo porque, para o objetivo do presente trabalho que é verificar as diferenças entre as soluções obtidas pelo modelo clássico e pelo modelo com derivadas fracionárias, a visualização gráfica dessas diferenças é mais facilmente verificada para valores maiores.

Tabela 1: Erro Absoluto máximo entre cada malha e a solução exata

Malha	h	au	E _{Ab} máximo
M_1	2.5	0.5	$4.67.10^{-1}$
M_2	1.0	0.25	$2.06.10^{-1}$
M_3	0.5	0.1	$1.04.10^{-1}$
M_4	0.25	0.05	$5.20.10^{-2}$
M_5	0.1	0.025	$2.26.10^{-2}$
M_6	0.05	0.01	1.98.10 ⁻²

A comparação entre os resultados numéricos obtidos com a malha mais refinada (M_6) para α = 0.999 e os analíticos para α = 1 também pode ser observada na Fig. 1, onde são apresentados os perfis de concentração ao longo de x para diferentes valores de t. Na imagem, pode-se observar que ambos os resultados são realmente muito próximos, de modo que o processo de verificação foi concluído com êxito.

Na Fig. 2, por sua vez, são apresentadas as variações nos perfis de concentração para diferentes valores de t quando a ordem das derivadas foi decrescida de 0.999 para 0.99. Note que a aparentemente sutil variação de α em -0.009 já foi suficiente para causar alterações significativas nos perfis de C, uma vez que os valores de concentração registrados com α = 0.999, tornaramse visivelmente menores quando α = 0.99, ao longo de todo o domínio para os mesmos valores de t. Esse fato pode ser ainda melhor visualizado na Fig. 3 e na Fig. 4, onde são apresentados os resultados obtidos para outros valores de t e para valores de α ainda menores.

No caso da Fig. 3, manteve-se fixo t = 1 e analisaramse os perfis de concentração em relação a x para diferentes valores de α . É interessante observar que na medida em que a ordem das derivadas foi sendo decrescida, além dos valores de C também diminuírem, o que verificou-se foi uma tendência à assimetria, ainda que leve, nos perfis, principalmente para os valores de α mais baixos. Foram registrados valores de C maiores na metade esquerda do nosso domínio, o que se deve ao fato de terem sido consideradas apenas derivadas à

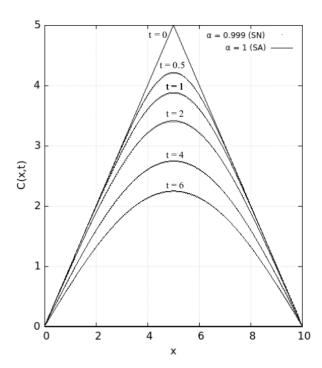


Figura 1: Verificação - Solução Analítica (SA) para α = 1 e Solução Numérica (SN) para α = 0.999.

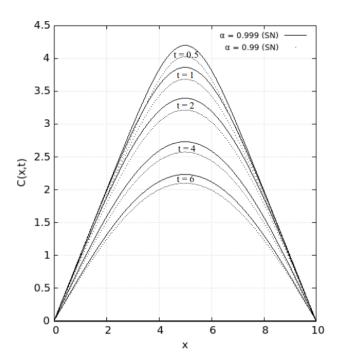


Figura 2: Resultados numéricos para α = 0.999 e α = 0.99 e diferentes valores de t.

esquerda. Dessa forma, se tivessem sido consideradas apenas derivadas à direita, os perfis seriam alterados, com valores de C maiores na metade direita do domínio e, se fossem consideradas derivadas à direita e à

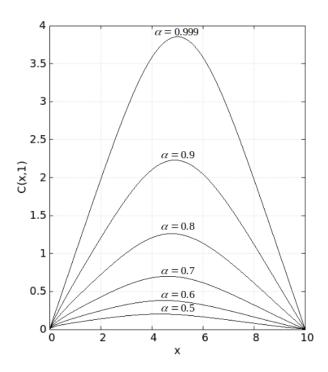


Figura 3: Resultados numéricos para t = 1 e diferentes valores de α .

esquerda com igual peso, teria-se então perfis de concentração simétricos. Essa característica de assimetria ou simetria já foi também verificada em outros trabalhos, como o de Hejazi et al. (2014). Para os propósitos desse estudo, porém, o que se quer destacar é o enorme leque de possibilidades que se abre nas modelagens de diferentes problemas ao se considerar derivadas de ordens fracionárias em vez das tradicionais derivadas de ordens inteiras, tornando possível a representação de comportamentos tanto simétricos quanto assimétricos, mesmo que sejam utilizados coeficientes constantes (como em nosso caso, onde K = 1).

No caso da Fig. 4, por sua vez, são apresentados os resultados numéricos obtidos para diferentes valores de α em todo o domínio [0, 10] × [0, 6], onde observam-se as variações nos perfis de C ao longo do tempo para cada valor de α considerado, de $\alpha \approx$ 1 até α = 0.9 com passo de 0.02. É interessante observar que cada variação no valor de α , ainda que de apenas 0.02, fez com que os perfis de C fossem sensivelmente alterados, fornecendo valores de concentração significativamente menores sempre que a ordem das derivadas foi reduzida.

Considerações finais

A alteração das ordens α das derivadas para valores significativamente menores do que 1 causou mudanças sensíveis nos perfis de solução, onde verificou-se que quanto menores foram essas ordens, menores também foram os valores de concentração C ao longo do domínio em x e t. Outro fato registrado foi a assimetria dos perfis de concentração para valores mais baixos de α ,

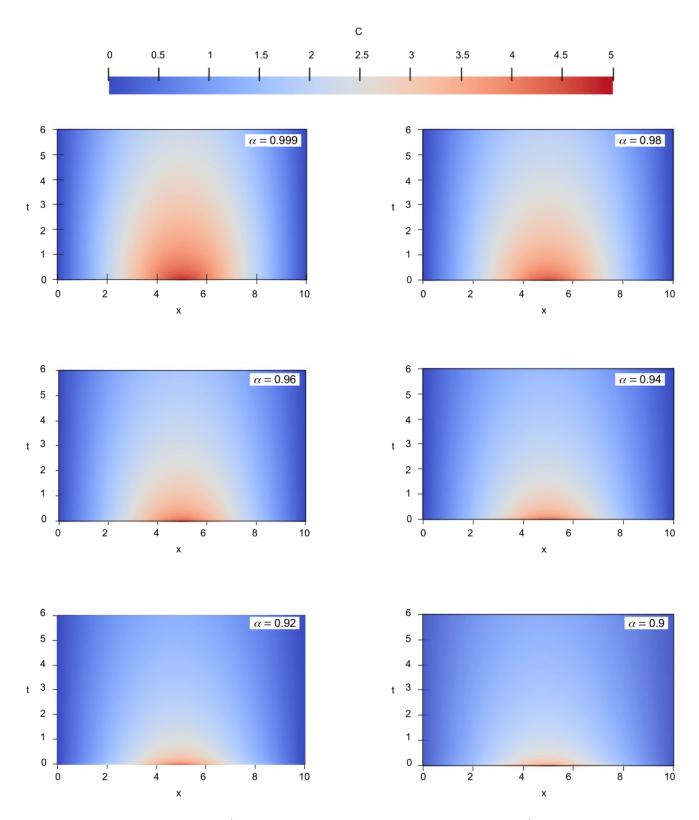


Figura 4: Resultados numéricos para diferentes valores de α em todo o domínio $[0,10] \times [0,6]$.

o que era esperado devido à consideração de derivadas fracionárias somente à esquerda.

Há muitas situações práticas que envolvem o fenômeno da difusão anômala, como é o caso da turbulência, por exemplo. Em tais situações, as equações clássicas (com derivadas de ordens inteiras) não são totalmente adequadas para serem empregadas nas modelagens. É nesse contexto que emergem então os modelos fracionários, que se apresentam como valiosas ferramentas na representação dos comportamentos que não conseguese registrar com a precisão que se deseja utilizando-se os modelos tradicionais. Desse modo, estudos como o aqui apresentado, são de grande importância, não somente por se tratar de um assunto em ascensão, mas principalmente por apresentarem a enorme variedade de situações que podem ser melhor representadas com a alteração das ordens das derivadas, antes inteiras, agora fracionárias, uma vez que essas ordens arbitrárias acabam por tornar-se um parâmetro a mais nas equações, possibilitando assim uma melhor representação de determinados fenômenos.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Referências

- Berryman, J. (1977). Evolution of a stable profile for a class of nonlinear diffusion equations with fixed boundaries, Journal of Mathematical Physics 18: 2108-2112. https://doi.org/10.1063/1.523190.
- Butkov, E. (1978). Física Matemática, LTC, Rio de Janeiro.
- Camargo, R. and Oliveira, E. (2015). Cálculo Fracionário, Editora Livraria da Física, São Paulo.
- Goulart, A., Lazo, M. and Suarez, J. (2019). A new parameterization for the concentration flux using the fractional calculus to model the dispersion of contaminants in the planetary boundary layer, Physica A 518: 38-49. https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.
- Goulart, A., Lazo, M., Suarez, J. and Moreira, D. (2017). Fractional derivative models for atmospheric dispersion of pollutants, *Physica A* **477**: 9–19. https: //doi.org/10.1016/j.physa.2017.02.022.
- Hejazi, H., Moroney, T. and Liu, F. (2014). Stability and convergence of a finite volume method for the space fractional advection-dispersion equation, Journal of Computational and Applied Mathematics **255**: 684–697. https://doi.org/10.1016/j.cam.2013.06.039.
- Hilfer, R. (2000). Applications of Fractional Calculus in Physics, World Scientific Publishing, New York. https: //doi.org/10.1142/3779.

- Kreyszig, E. (2009). Matemática Superior para Engenharia, LTC, Rio de Janeiro.
- Liu, F., Zhuang, P., Anh, V., Turner, I. and Burrage, K. (2007). Stability and convergence of the difference methods for the space-time fractional advectiondiffusion equation, Applied Mathematics and Computation 191: 12-20. https://doi.org/10.1016/j.amc.2006.
- Meerschaert, M. and Tadjeran, C. (2004). Finite difference approximations for fractional advectiondispersion flow equations, Journal of Computational and Applied Mathematics 172: 65-77. https://doi.org/ 10.1016/j.cam.2004.01.033.
- Miller, K. and Ross, B. (1993). An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations, John Wiley and sons, New York.
- Momani, S. (2007). An algorithm for solving the fractional convection-diffusion equation with nonlinear source term, Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation 12: 1283-1290. https: //doi.org/10.1016/j.cnsns.2005.12.007.
- Podlubny, I. (1999). Fractional Differential Equations, Academic Press, San Diego.
- Ray, S. (2009). Analytical solution for the space fractional diffusion equation by two-step adomian decomposition method, Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation 14: 1295–1306. https: //doi.org/10.1016/j.cnsns.2008.01.010.
- Richardson, L. (1926). Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph, Proceedings of the Royal Society of London, Vol. 110, pp. 709-737. https: //doi.org/10.1098/rspa.1926.0043.
- Sabatier, J., Agrawal, O. and Tenreiro Machado, J. (2007). Advances in Fractional Calculus: Theoretical Developments and Applications in Physics and Engineering, Springer, Dordrecht. https://doi.org/10.1007/ 978-1-4020-6042-7.
- Samko, S., Kilbas, A. and Marichev, O. (1993). Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications, Gordon and Breach Science Publishers, Amsterdam.
- Simmons, A., Yang, Q. and Moroney, T. (2017). A finite volume method for two-sided fractional diffusion equations on non-uniform meshes, Journal of Computational Physics 335: 747-759. https://doi.org/10. 1016/j.jcp.2017.01.061.
- Spohn, H. (1993). Surface dynamics below the roughening transition, Journal de Physique 3: 69-81. https: //doi.org/10.1051/jp1:1993117.
- Stephenson, J. (1995). Some non-linear diffusion equations and fractal diffusion, *Physica A* **222**: 234–247. https://doi.org/10.1016/0378-4371(95)00201-4.
- Tadjeran, C., Meerschaert, M. and Scheffler, H. (2006). A second-order accurate numerical approximation

- for the fractional diffusion equation, Journal of Computational Physics 213: 205-213. https://doi.org/10. 1016/j.jcp.2005.08.008.
- Tayebi, A., Shekari, Y. and Heydari, M. (2017). A meshless method for solving two-dimensional variable-order time fractional advection-diffusion equation, Journal of Computational Physics 340: 655-669. https:/ //doi.org/10.1016/j.jcp.2017.03.061.
- Yu, X. and Leitner, D. (2003). Anomalous diffusion of vibrational energy in proteins, Journal of Chemical Physics 119: 12673-12679. https://doi.org/10.1063/ 1.1626636.
- Zhou, Y. (2014). Basic theory of fractional differential equations, World Scientific, Singapore. https://doi. org/10.1142/10238.