

Algoritmos Numéricos para a Equação de Difusão Linear de Ordem Fracionária

Cristiane O. de Faria¹

UERJ, Rio de Janeiro, RJ

Carlos A. de Moura²

UERJ, Rio de Janeiro, RJ

Jhoab P. de Negreiros³

UNIGRANRIO, Rio de Janeiro, RJ

Resumo Consideramos a equação da difusão do calor em uma dimensão com coeficiente constante, na qual a variação temporal é simulada pela derivada fracionária de Riemann-Liouville. A abordagem numérica escolhida é o método das diferenças finitas, aplicando-se três esquemas baseados nos métodos clássicos de Euler, progressivo e regressivo, e no de Crank-Nicolson. As aproximações propostas para a derivada de ordem fracionária empregam a expressão de Grünwald-Litnikov, conforme descrito em [5].

Palavras-chave Aproximação por diferenças finitas, Equação da Difusão Fracionária, Derivadas Fracionárias, Operador de Riemann-Liouville

1 Introdução

No século XVII, de forma independente, Leibniz e Newton desenvolveram o cálculo diferencial de ordem inteira. Esse tópico matemático, inspirado pelo estudo de fenômenos que envolvem o movimento de corpos e sua variação, se desenvolveu e alcançou suficiente rigor já no século XIX. Durante este mesmo período, o chamado cálculo de ordem não inteira, ou simplesmente fracionária, teve origem na correspondência trocada em 1695 entre l'Hôpital e Leibniz para caso da derivada de ordem $1/2$. A partir do início do Século XIX, muitos autores contribuíram para o cálculo fracionário. Nas últimas décadas, na pesquisa de distintos modelos, propuseram-se diferentes definições para derivadas de ordem fracionária. Apesar de não dispormos de uma interpretação geométrica com a simplicidade das derivadas inteiras, as derivadas fracionárias permitem a modelagem de problemas que envolvem conceitos de não-localidade e o efeito de memória [1].

Neste artigo vamos nos ater à derivada fracionária de Riemann-Liouville. O texto está organizado da seguinte forma. Inicialmente explicitamos a definição da derivada fracionária de Riemann-Liouville. Em seguida, apresentamos os esquemas numéricos de diferenças finitas escolhidos para aproximar a solução de uma equação linear de difusão do calor com derivada temporal fracionária. E finalizamos o trabalho ponderando os resultados de um exemplo tratado pelos três esquemas numéricos que implementamos.

¹cofaria@ime.uerj.br

²demoura@ime.uerj.br

³jhoab.negreiros@pos.ime.uerj.br

2 Derivada Fracionária segundo Riemann-Liouville

Em 1869, Nikolý Sonin publicou o primeiro trabalho que emprega o operador conhecido como derivada de Riemann-Liouville. Esse operador é definido em termos da integral fracionária:

Definição 2.1. Para $\alpha > 0$ definem-se as integrais fracionárias de Riemann-Liouville à esquerda e à direita para uma função f , integrável no sentido de Riemann em (a_-, a_+) , de ordem α por

$${}_{RL}I_{a_-,t}^\alpha f(t) := {}_{RL}I_{t,a_-}^\alpha f(t), \quad \text{sendo} \quad {}_{RL}I_{t,a_\pm}^\alpha f(t) := \pm \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_t^{a_\pm} [\pm(s-t)]^{\alpha-1} f(s) ds, \quad (1)$$

onde denota-se por $\Gamma(\cdot)$ a função Gama.

A partir das integrais fracionárias em (1), são introduzidas as derivadas fracionárias:

Definição 2.2. Sendo $\alpha > 0$, para uma dada função f , integrável a Riemann em (a_-, a_+) , suas derivadas fracionárias de Riemann-Liouville, à esquerda e à direita, de ordem α , são definidas por

$${}_{RL}D_{a_-,t}^\alpha f(t) := {}_{RL}D_{t,a_-}^\alpha f(t), \quad \text{sendo} \quad {}_{RL}D_{t,a_\pm}^\alpha f(t) := \pm \frac{(-1)^m}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dt^m} \int_t^{a_\pm} [\pm(s-t)]^{m-\alpha-1} f(s) ds, \quad (2)$$

e m o inteiro positivo que satisfaz $m-1 < \alpha \leq m$, chamado teto inteiro de α .

3 Equação da Difusão Fracionária

Escolhidos os parâmetros $K > 0$ e $0 < \alpha < 1$, nesta seção consideramos a equação da difusão em uma dimensão com derivada temporal fracionária no sentido de Riemann-Liouville. Queremos encontrar $u(x, t)$ tal que

$$\frac{\partial u}{\partial t} = {}_{RL}D_{0,t}^\alpha \left(K \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) + f(x, t), \quad 0 \leq x \leq L, \quad t \geq 0 \quad (3a)$$

$$u(x, 0) = \phi(x), \quad 0 \leq x \leq L \quad (3b)$$

$$u(0, t) = l(t), \quad t \geq 0 \quad (3c)$$

$$u(L, t) = r(t), \quad t \geq 0. \quad (3d)$$

onde $\phi(x)$, $l(t)$ e $r(t)$ são funções contínuas. Se $\alpha \rightarrow 0$, podemos pensar que, em algum sentido, (3a) se reduz à equação clássica de difusão.

3.1 Procedimentos Numéricos

Efetuamos uma abordagem numérica de (3) via método das diferenças finitas, sendo aplicados os esquemas baseados nos de Euler progressivo, regressivo e no de Crank-Nicolson [2]. A malha computacional no domínio de (3a) é definida por $x_i := i\Delta x = ih$, $i = 0, 1, 2, \dots, M$, $L = M\Delta x$, $t_n := n\Delta t = nk$, $n = 0, 1, 2, \dots, N$, $T = N\Delta t$. Nos pontos (x_i, t_n) da malha denotamos $u(x_i, t_n)$ por U_i^n , utilizando para a primeira derivada temporal os esquemas numéricos (de ordem igual a 1) com as diferenças progressivas e regressivas no tempo e para a derivada segunda espacial tomamos em (3a) as diferenças centradas (ordem igual a 2) [4].

A derivada fracionária de Grünwald-Letnikov para uma função suficientemente regular $u(t)$ é equivalente à sua derivada fracionária no sentido de Riemann-Liouville [3]. A partir da definição da derivada fracionária de Grünwald-Letnikov chegamos a

$${}_{RL}D_{0,t}^{\alpha u(t)} \approx \frac{1}{\Delta t^\alpha} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{\alpha}{k} u(t_{n-k}). \quad (4)$$

A expressão (4) é uma aproximação linear (de ordem 1) para qualquer $\alpha > 0$. Contudo, para $1 < \alpha < 2$, ela pode gerar esquemas numéricos instáveis [6].

Após aplicar os esquemas definidos na Seção 3.1, o método do tipo Euler progressivo é:

$$U_i^{n+1} = U_i^n + r \sum_{k=0}^n \omega(k) (U_{i-1}^{n-k} - 2U_i^{n-k} + U_{i+1}^{n-k}) + \Delta t f_i^n, \quad (5)$$

com $r := \frac{\Delta t^{1-\alpha}}{\Delta x^2}$ e $\omega(k) := (-1)^k \binom{\alpha}{k}$. Para $1 \leq i \leq M - 1$, a forma matricial para (5) é

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \sum_{k=0}^n \omega(k) (\mathbf{A}\mathbf{U}^{n-k} + \mathbf{C}^{n-k}) + \Delta t \mathbf{f}^n, \quad (6)$$

onde $\mathbf{f}^n = (f_1^n, f_2^n, \dots, f_{N-1}^n)^t$, $\mathbf{U}^n := (U_1^n, U_2^n, \dots, U_{N-1}^n)^t$, $\mathbf{C}^{n-k} := (rU_0^{n-k}, 0, \dots, 0, rU_N^{n-k})^t$,

$$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} -2r & r & 0 & \dots & 0 \\ r & -2r & r & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & r & -2r & r \\ 0 & \dots & 0 & r & -2r \end{pmatrix}.$$

O método tipo Euler regressivo é

$$U_i^n = U_i^{n-1} + r \sum_{k=0}^n \omega(k) (U_{i-1}^{n-k} - 2U_i^{n-k} + U_{i+1}^{n-k}) + \Delta t f_i^n, \quad (7)$$

com r e $\omega(k)$ definidos como no método tipo Euler progressivo. Para $1 \leq i \leq M - 1$, a equação (7) pode ser reescrita na forma matricial como

$$\mathbf{U}^n = \mathbf{U}^{n-1} + \sum_{k=0}^n \omega(k) (\mathbf{A}\mathbf{U}^{n-k} + \mathbf{C}^{n-k}) + \Delta t \mathbf{f}^n. \quad (8)$$

As Figuras 1(a)-(c) e 2(a)-(c), exibem a dependência dos valores calculados com relação aos nós nos três primeiros níveis para o método tipo Euler progressivo e o tipo Euler regressivo, respectivamente. O estêncil formado pelas arestas vermelhas mostra os valores que precisam ser conhecidos para o cálculo do nó i no passo n . Esta visualização comprova o efeito de memória quando utilizamos a derivada fracionária.

O método tipo Crank-Nicolson pode ser construído neste contexto a partir dos métodos tipo Euler progressivo e regressivo, seguindo o caminho do caso clássico:

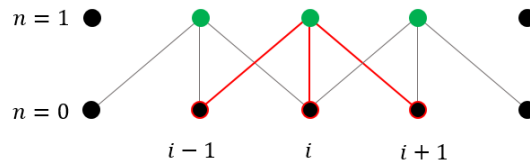
$$U_i^{n+1} = U_i^n + \frac{1}{2\Delta t^{\alpha-1}} \sum_{k=0}^n \omega(k) (\partial_x^2 U^{n-k} + \partial_x^2 U^{n+1-k}) + \Delta t \left(\frac{f_i^n + f_i^{n+1}}{2} \right), \quad (9)$$

onde $\partial_x^2 U$ denota a aproximação central para a derivada segunda. Para $1 \leq i \leq M - 1$, a equação (9) fica, na forma matricial,

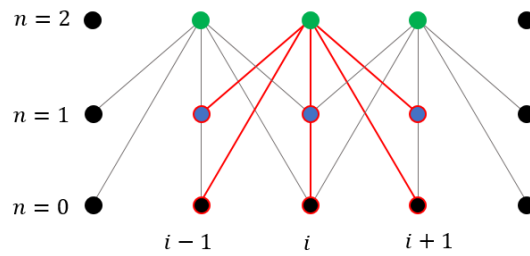
$$U^{n+1} = U^n + \sum_{k=0}^n \omega(k) (BU^{n-k} + C^{n-k} + BU^{n+1-k} + C^{n+1-k}) + \Delta t f^{n+\frac{1}{2}}, \quad (10)$$

sendo $f^{n+\frac{1}{2}} := \frac{f^n + f^{n+1}}{2}$ e

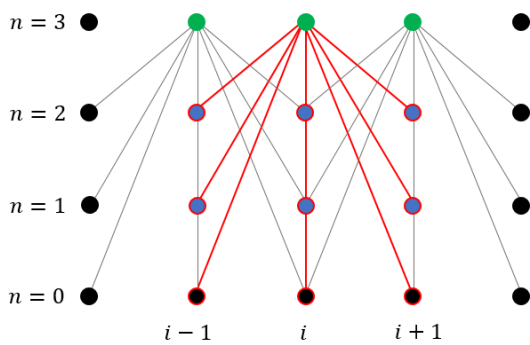
$$B := \begin{pmatrix} -r & 0,5r & 0 & \dots & 0 \\ 0,5r & -r & 0,5r & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0,5r & -r & 0,5r \\ 0 & \dots & 0 & 0,5r & -r \end{pmatrix}.$$



(a) nível n=1



(b) nível n=2



(c) nível n=3

Figura 1: Visualização do estêncil representativo (em vermelho), esquema da aproximação do método tipo Euler progressivo no (a) nível n=1, (b) nível n=2 e (c) nível n=3.

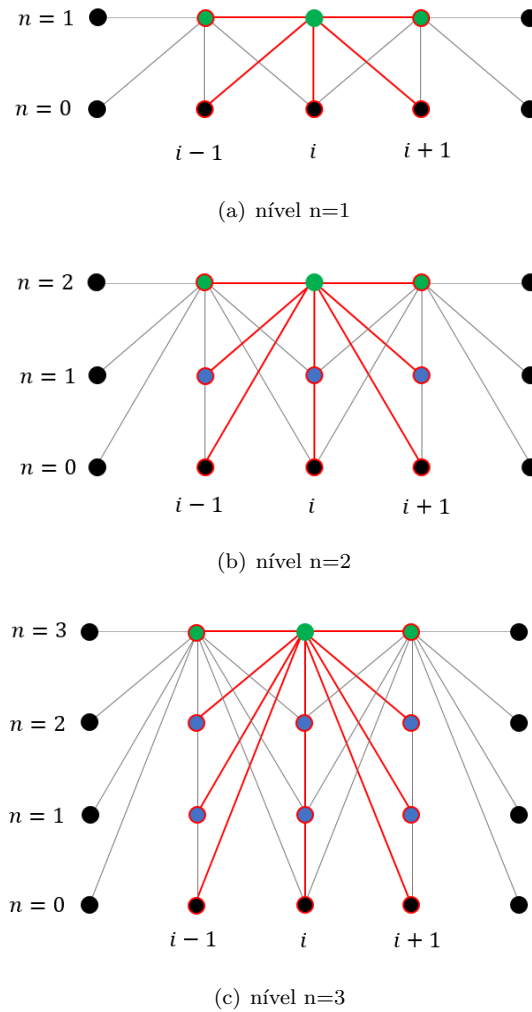


Figura 2: Visualização do estêncil representativo (em vermelho), esquema da aproximação do método tipo Euler regressivo no (a) nível n=1, (b) nível n=2 e (c) nível n=3.

4 Resultados Numéricos

Nesta seção comparamos as soluções aproximadas propostas pelos três métodos para o problema (3a)-(3d) com a correspondente solução analítica. A função $u(x, t) = t^{1,5} \exp(\pi(x - \alpha))$ é a solução encontrada para o problema (3), relativa ao domínio $(x, t) \in [0, 1] \times [0, 1]$, estando os dados usados descritos a seguir.

- $f(x, t) = \left(1, 5t^{0,5} - \pi^2 \frac{\Gamma(2,5)}{\Gamma(2,5-\alpha)} t^{1,5-\alpha}\right) \exp(\pi(x - \alpha));$
- $\phi(x) = 0; \quad l(t) = t^{1,5} \exp(-\pi\alpha); \quad r(t) = t^{1,5} \exp(\pi(1 - \alpha)).$

Os primeiros testes foram efetuados com o método tipo Euler progressivo (6). A Tabela 1 apresenta os resultados encontrados para o erro na norma L^2 com $\Delta t = 1/40000$ fixado e variando o número de passos na variável espacial, como também a ordem da derivada fracionária. Os

resultados numéricos obtidos sugerem não somente uma dependência entre Δt e Δx – como é encontrado no caso do método clássico de Euler progressivo – mas também uma dependência relativa à ordem da derivada fracionária, o que se pode esperar a partir da Teoria dos Operadores.

Tabela 1: Erro na norma L^2 do método tipo Euler progressivo com $\Delta t = 1/40000$.

| M | $\alpha = 0, 1$ | $\alpha = 0, 2$ | $\alpha = 0, 3$ | $\alpha = 0, 4$ | $\alpha = 0, 5$ |
|-----|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-----------------|
| 10 | $2, 8564 \times 10^{-2}$ | $2, 0960 \times 10^{-2}$ | $1, 5387 \times 10^{-2}$ | $1, 1299 \times 10^{-2}$ | NaN |
| 20 | $7, 1664 \times 10^{-3}$ | $5, 2543 \times 10^{-3}$ | $3, 8541 \times 10^{-3}$ | NaN | NaN |
| 30 | $3, 1813 \times 10^{-3}$ | $2, 3294 \times 10^{-3}$ | NaN | NaN | NaN |
| 40 | $1, 7848 \times 10^{-3}$ | $1, 3044 \times 10^{-3}$ | NaN | NaN | NaN |
| 50 | $1, 1382 \times 10^{-3}$ | NAN | NaN | NaN | NaN |

Os resultados da Tabela 1 motivam a busca por outro esquema na abordagem do problema (3), visto que, mesmo tomando valores na ordem de 10^{-5} para Δt , não foi obtida convergência para valores de α maiores ou igual a 0,5. O método tipo Euler regressivo apresentou-se neste sentido como uma escolha adequada, conforme os testes descritos a seguir.

Os resultados mostrados na Tabela 2 podem ser considerados muito bons, com base na verificação da ordem calculada pela norma L^2 , visto que estes se equiparam aos do método de Euler regressivo clássico [4], quando aplicados à equação de difusão de ordem inteira.

O efeito de memória das derivadas fracionárias justifica escolhas reduzidas do número de passos na variável temporal, visto que, no problema abordado (3), a derivada fracionária atua na variável temporal e sua aproximação numérica é dada por (4), que possui um somatório dependente do número de passos na variável temporal.

Tabela 2: Erro na norma L^2 do método tipo Euler regressivo, $\Delta x = 1/1000$

| N | $\alpha = 0, 2$ | ordem | $\alpha = 0, 5$ | ordem | $\alpha = 0, 8$ | ordem |
|-----|--------------------------|--------|--------------------------|--------|--------------------------|--------|
| 8 | $3, 2701 \times 10^{-2}$ | | $4, 0344 \times 10^{-2}$ | | $2, 5335 \times 10^{-2}$ | |
| 16 | $1, 6365 \times 10^{-2}$ | 0,9987 | $2, 0271 \times 10^{-2}$ | 0,9929 | $1, 2959 \times 10^{-2}$ | 0,9672 |
| 32 | $8, 1665 \times 10^{-3}$ | 1,0008 | $1, 0148 \times 10^{-2}$ | 0,9956 | $6, 5703 \times 10^{-3}$ | 0,9736 |
| 64 | $4, 0723 \times 10^{-3}$ | 1,0018 | $5, 0717 \times 10^{-3}$ | 0,9973 | $3, 3127 \times 10^{-3}$ | 0,9784 |
| 128 | $2, 0305 \times 10^{-3}$ | 1,0024 | $2, 5333 \times 10^{-3}$ | 0,9983 | $1, 6645 \times 10^{-3}$ | 0,9820 |

No caso clássico, a abordagem via método tipo Crank-Nicolson se justifica por gerar aproximações melhores com relação ao método tipo Euler regressivo, o que possibilitaria uma liberdade maior na escolha do número de passos para as variáveis temporal e espaciais. No entanto, observamos que, para as aproximações calculadas pelo método tipo Crank-Nicolson na Tabela 3, com os mesmos parâmetros utilizados no estudo do método tipo Euler regressivo, esta melhoria não foi encontrada na ordem de convergência calculada. Esta influência da derivada fracionária no método tipo Crank-Nicolson também foi relatada em [5], p.146.

5 Conclusões

Os testes computacionais apresentados neste trabalho sugerem que o método tipo Euler progressivo é condicionalmente estável e que essa condição para estabilidade relaciona Δt , Δx e α . Contudo, a necessidade de escolher valores muito pequenos para Δt demanda um acréscimo significativo no tempo de processamento do código e também no uso da memória requerida, o que pode

Tabela 3: Erro na norma L^2 do método tipo Crank-Nicolson, $\Delta x = 1/1000$

| N | $\alpha = 0,2$ | ordem | $\alpha = 0,5$ | ordem | $\alpha = 0,8$ | ordem |
|-----|-------------------------|--------|-------------------------|--------|-------------------------|--------|
| 8 | $5,2346 \times 10^{-2}$ | | $4,9025 \times 10^{-2}$ | | $2,9113 \times 10^{-2}$ | |
| 16 | $2,6130 \times 10^{-2}$ | 1,0024 | $2,4839 \times 10^{-2}$ | 0,9815 | $1,4864 \times 10^{-2}$ | 0,9698 |
| 32 | $1,3028 \times 10^{-2}$ | 1,0032 | $1,2435 \times 10^{-2}$ | 0,9896 | $7,5282 \times 10^{-3}$ | 0,9756 |
| 64 | $6,4972 \times 10^{-3}$ | 1,0034 | $6,2159 \times 10^{-3}$ | 0,9932 | $3,7929 \times 10^{-3}$ | 0,9801 |
| 128 | $3,2416 \times 10^{-3}$ | 1,0033 | $3,1056 \times 10^{-3}$ | 0,9951 | $1,9049 \times 10^{-3}$ | 0,9835 |

inviabilizar seu uso. O método tipo Euler regressivo gerou resultados computacionais muito satisfatórios e compatíveis com os do método de Euler regressivo clássico quando aplicado na equação de ordem inteira.

A abordagem pelo método tipo Crank-Nicolson, assim como no método tipo Euler regressivo, produziu aproximações que indicam serem ambos esquemas incondicionalmente estáveis. Todavia, os resultados pelo método tipo Crank-Nicolson são compatíveis com aqueles apresentados na literatura [5], mas não como no método clássico.

Dando continuidade a este trabalho, a análise teórica da estabilidade dos três métodos será desenvolvida e outras aproximações para a derivada fracionária que possibilitem melhores desempenhos no método tipo Crank-Nicolson serão propostas.

Referências

- [1] Camargo, R. F. & Oliveira, E. C. *Cálculo Fracionário*, 1^a ed. Liv. da Física, São Paulo, 2015.
- [2] Cunha, M. Cristina C. *Métodos Numéricos*, 2^a ed. Ed. Unicamp, Campinas, 2010.
- [3] Diethelm, K., Baleanu, D. & Scalas, M. *Fractional Calculus: Models and Numerical Methods*, 2nd ed. World Scientific, 5 Toh Tuck Link, 2012.
- [4] LeVeque, R. J. *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*. SIAM, Philadelphia, 2007.
- [5] Li, C. & Zeng, F. *Numerical methods for fractional calculus*, 1st ed. Chapman and Hall/CRC, Boca Raton, 2015.
- [6] Meerschaert, M. M. & Tadjeran, C. Finite difference approximations for fractional advection–dispersion flow equations, *J. Comp. Appl. Math.* 172:65–77, 2004.