

# Uma abordagem numérica sobre o efeito dos operadores fracionários na derivação temporal para a equação de difusão fracionária.

Cristiane O. Faria<sup>1</sup>

Instituto de Matemática e Estatística, UERJ, Rio de Janeiro, RJ

Carlos A. de Moura<sup>2</sup>

Professor Visitante Titular do PPG-EM e PPG-CComp, UERJ, Rio de Janeiro, RJ

Jhoab P. de Negreiros<sup>3</sup>

Programa de Pós-Graduação em Ciências Computacionais, UERJ, Rio de Janeiro, RJ

**Resumo.** Neste trabalho apresentamos um estudo sobre o efeito do operador de derivada fracionária na derivação temporal em duas variações da equação de difusão fracionária. As equações de difusão generalizada com derivadas de ordem fracionária têm se mostrado bastante eficientes para descrever a difusão em sistemas complexos, com a vantagem de produzir em alguns casos modelos mais precisos. A abordagem numérica escolhida é o método das diferenças finitas, em um esquema implícito. As derivadas fracionárias adotadas são a de Riemann-Liouville, a de Caputo-Fabrizio e a de Katugampola. Um experimento numérico será apresentado com os resultados exibidos com o intuito de comparar os modelos apresentados.

**Palavras-chave.** Equação da difusão fracionária, Aproximações por diferenças finitas, Derivada fracionária de Riemann-Liouville, Caputo-Fabrizio e Katugampola.

## 1 Introdução

Nas últimas décadas o cálculo fracionário tem demonstrado ser uma ferramenta adequada quando aplicado na modelagem de muitos problemas. Não é fácil representar a complexidade de alguns fenômenos em seus modelos; no entanto, a generalização da equação da difusão fracionária pelo uso das derivadas de ordem fracionária tem sido eficaz para modelar a difusão em sistemas anômalos, tais como: a difusão em transporte de fluidos em meios porosos [12], difusão em plasmas [2], difusão em fractais [13], entre outros.

Variações da equação da difusão com derivadas fracionárias aplicadas relativamente à variável temporal e ou espacial têm sido empregadas em diferentes problemas. Aqui, vamos considerar a equação da difusão com derivada fracionária temporal aplicada no termo da difusão, como proposto em dois artigos de revisão de Metzler e Klafter [7, 8]. A outra variação da equação da difusão que será trabalhada também com derivada fracionária temporal é a que foi utilizada com relativo sucesso no problema do transporte não fickiano em meios porosos [15], contaminante de fratura em matriz de rocha porosa [4], dentre outros.

Neste trabalho, vamos estudar o comportamento das duas versões da equação da difusão fracionária considerando três definições para a derivada fracionária, que foram escolhidas segundo a classificação feita por Teodoro em sua tese de doutorado [14]. A primeira derivada fracionária é

---

<sup>1</sup>cofaria@ime.uerj.br

<sup>2</sup>demoura@ime.uerj.br

<sup>3</sup>jhoab.negreiros@pos.ime.uerj.br

a proposta por Caputo-Fabrizio em 2015, que difere do operador clássico de Riemann-Liouville por ser definido por um núcleo de memória não singular [3]. Além dessas duas formulações de derivadas fracionárias não locais, também vamos empregar o operador segundo Katugampola, que é uma derivada fracionária local [5].

## 2 Operadores Fracionários

Nesta seção vamos apresentar a definição dos operadores de derivadas fracionárias que serão utilizados neste trabalho. Também apresentaremos os modelos com as respectivas equações da difusão fracionária. No ano de 1869, Nikoly Sonin publicou o primeiro trabalho que emprega o operador em termos da integral fracionária, que hoje é conhecido como derivada de Riemann-Liouville.

**Definição 2.1.** *A derivada fracionária de Riemann-Liouville de ordem  $\gamma > 0$  à esquerda de uma função  $f(t)$   $t \in (a, b)$  é definida como*

$${}_{RL}D_{a,t}^{\gamma}f(t) := \frac{1}{\Gamma(m-\gamma)} \frac{d^m}{dt^m} \int_a^t (t-s)^{m-\gamma-1} f(s) ds, \tag{1}$$

sendo  $m$  o inteiro positivo que satisfaz  $m - 1 < \gamma \leq m$ , chamado teto inteiro de  $\gamma$ .

Em 2015, Michele Caputo e Mauro Fabrizio apresentaram uma nova definição para derivada fracionária [3]. Esse operador, que hoje é chamado de derivada segundo Caputo-Fabrizio, possui como núcleo da integral fracionária uma função não singular.

**Definição 2.2.** *Para  $0 \leq \gamma \leq 1$ ,  $-\infty \leq a < t$  e  $f \in H^1(a, b)$  com  $b > a$ . A derivada fracionária no tempo segundo Caputo-Fabrizio de ordem  $\gamma$  é definida por*

$${}_{CF}D_{a,t}^{\gamma}f(t) := \frac{M(\gamma)}{1-\gamma} \int_a^t \exp\left(-\gamma \frac{t-s}{1-\gamma}\right) f'(s) ds \tag{2}$$

onde  $t \geq 0$  e  $M(\gamma)$  é uma função de normalização em que  $M(0) = M(1) = 1$ .

A derivada fracionária definida por Katugampola em 2014 é um operador local, diferente dos dois anteriores. Essa formulação é definida em termos de limite e cumpre diversas propriedades clássicas, incluindo: linearidade, regra do produto, regra do quociente, dentre outras [5].

**Definição 2.3.** *Sejam  $t \in \mathbb{R}$ ,  $n \in \mathbb{N}$  e  $f(t)$  uma função real  $n$  vezes diferenciável. A derivada fracionária de Katugampola de ordem  $\gamma$ , sendo  $n < \gamma \leq n + 1$ , da função  $f$  é dada por*

$${}_K D^{\gamma} f(t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f^{(n)}(te^{\epsilon t^{n-\gamma}}) - f^{(n)}(t)}{\epsilon}, \tag{3}$$

para todo  $t > 0$ .

**Teorema 2.1.** *Considere  $\gamma \in (0, 1]$  e  $f$  uma função diferenciável em um ponto  $t > 0$ , então*

$${}_K D^{\gamma} f(t) = t^{1-\gamma} f'(t). \tag{4}$$

*Demonstração.* Ver [5] □

### 3 Problema Modelo

Nesta seção formula-se o problema de valores iniciais e de contorno da Equação Diferencial Fracionária (EDF).

Pretende-se determinar a distribuição de temperatura,  $u(x, t)$ , tal que

$$\tau^{\alpha-1} D_{0,t}^{\alpha} (u(x, t)) = \tau^{\beta} D_{0,t}^{\beta} \left( \mathcal{K} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right) + f(x, t), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq T, \quad (5a)$$

$$u(x, 0) = \phi(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (5b)$$

$$u(0, t) = l(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (5c)$$

$$u(L, t) = r(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (5d)$$

onde:  $\phi(x)$ ,  $l(t)$ ,  $r(t)$  e  $f(x, t)$  são funções suficientemente regulares dadas. A ordem da derivada fracionária  $\alpha$  e  $\beta$ , são definidas do seguinte modo. Para  $0 < \alpha < 1$  se tem  $\beta = 0$  e quando  $0 < \beta < 1$  tomamos  $\alpha = 1$ . O parâmetro  $\mathcal{K}$  é a difusividade térmica e  $\tau$  o parâmetro de correção dimensional cuja unidade é tempo [10].

#### 3.1 Esquemas Numéricos

Efetuamos uma abordagem numérica de (5) via método das diferenças finitas, sendo aplicados os esquemas baseados nos de Euler regressivo. A malha computacional no domínio de (5a) é definida por  $x_i := i\Delta x$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, M$ ,  $L = M\Delta x$ ,  $t_n := n\Delta t$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots, N$ ,  $T = N\Delta t$ . 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 regressivas no tempo e para a derivada segunda espacial tomamos em (5a) as diferenças centradas (ordem igual a 2) [6].

A formulação de Riemann-Liouville será aproximada numericamente por Grünwald-Letnikov. As derivadas fracionárias obtidas por esses operadores para uma função suficientemente regular são equivalentes [1]. A partir da definição da derivada fracionária de Grünwald-Letnikov chegamos a

$$[{}_{RL}D_{0,t}^{\gamma} u(t)]_{t=t_n} = \frac{1}{\Delta t^{\gamma}} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{\gamma}{k} u(t_{n-k}) + O(\Delta t), \quad (6)$$

sendo a expressão (6) uma aproximação linear para qualquer  $\gamma > 0$ .

A aproximação empregada na derivada de ordem arbitrária de Caputo-Fabrizio é aquela proposta em [11]. O esquema (7) montado a partir do uso da clássica fórmula de diferenças finitas de dois pontos para a derivada primeira é uma aproximação linear.

$$[{}_{CF}D_{0,t}^{\gamma} u(t)]_{t=t_n} = \frac{M(\gamma)}{\gamma \Delta t} \left( e^{-\frac{\gamma}{1-\gamma} \Delta t} - 1 \right) \sum_{k=1}^n [u(t_{n-k+1}) - u(t_{n-k})] e^{-\frac{\gamma}{1-\gamma} k \Delta t} + O(\Delta t). \quad (7)$$

As características do operador local de Katugampola permitem elaborar um esquema numérico para a derivada fracionária utilizando somente as diferenças regressivas. Pelo Teorema 2.1, temos a relação formal entre a derivada de Katugampola com a derivada ordinária de ordem um, para  $0 < \gamma < 1$ ,

$$[{}_{K}D^{\gamma} u(t)]_{t=t_n} = t_n^{1-\gamma} \left( \frac{u(t_n) - u(t_{n-1})}{\Delta t} \right) + O(\Delta t). \quad (8)$$

#### 3.2 Procedimentos Numéricos

Após aplicar os esquemas definidos na Seção 3.1, esquematizamos o método tipo Euler regressivo com as derivadas fracionárias.

**Método 1** – Riemann-Liouville ( $0 < \beta < 1$  e  $\alpha = 1$ );

$$\frac{U_i^n - U_i^{n-1}}{\Delta t} = \frac{\tau^\beta \mathcal{K}}{\Delta t^\beta} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{\beta}{k} \left( \frac{U_{i-1}^{n-k} - 2U_i^{n-k} + U_{i+1}^{n-k}}{\Delta x^2} \right) + f(x_i, t_n) \quad (9)$$

$$U_i^n = U_i^{n-1} + r \sum_{k=0}^n \omega(k) (U_{i-1}^{n-k} - 2U_i^{n-k} + U_{i+1}^{n-k}) + \Delta t f_i^n, \quad (10)$$

com  $r := \mathcal{K} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left( \frac{\tau}{\Delta t} \right)^\beta$  e  $\omega(k) := (-1)^k \binom{\beta}{k}$ . Para  $1 \leq i \leq M - 1$ , a forma matricial para (10) é

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \sum_{k=0}^n \omega(k) (\mathbf{A} \mathbf{U}^{n-k} + \mathbf{C}^{n-k}) + \Delta t \mathbf{f}^n, \quad (11)$$

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

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

**Método 2** – Caputo-Fabrizio ( $0 < \beta < 1$  e  $\alpha = 1$ );

$$U_i^n = U_i^{n-1} + \tau^\beta \mathcal{K} \frac{M(\beta)}{\beta} \left( e^{\frac{\tau^\beta}{1-\beta} \Delta t} - 1 \right) \sum_{k=1}^n \mathcal{E}(k) (\partial_x^2 U_i^{n-k+1} - \partial_x^2 U_i^{n-k}) + \Delta t f_i^n \quad (12)$$

onde  $\mathcal{E}(k) := \exp\left(-\frac{\alpha}{1-\alpha} k \Delta t\right)$  e  $\partial_x^2 U_i^n$  denota as diferenças centradas na posição  $i$  e no nível  $n$ .

**Método 3** – Katugampola ( $0 < \beta < 1$  e  $\alpha = 1$ );

$$U_i^n = U_i^{n-1} + \tau^\beta \mathcal{K} \mathcal{T}(n) (\partial_x^2 U_i^n - \partial_x^2 U_i^{n-1}) + \Delta t f_i^n. \quad (13)$$

onde  $\mathcal{T}(n) := (n \Delta t)^{1-\alpha}$ .

**Método 4** – Riemann-Liouville ( $0 < \alpha < 1$  e  $\beta = 0$ );

$$\frac{\tau^{\alpha-1}}{\Delta t^\alpha} \sum_{k=0}^n \omega(k) U_i^{n-k} = \mathcal{K} \partial_x^2 U_i^n + f_i^n, \quad (14)$$

**Método 5** – Caputo-Fabrizio ( $0 < \alpha < 1$  e  $\beta = 0$ );

$$\frac{\tau^{\alpha-1} M(\alpha)}{\alpha \Delta t} \left( e^{\frac{\tau^\alpha}{1-\alpha} \Delta t} - 1 \right) \sum_{k=1}^n \mathcal{E}(k) (U_i^{n-k+1} - U_i^{n-k}) = \mathcal{K} \partial_x^2 U_i^n + f_i^n \quad (15)$$

**Método 6** – Katugampola ( $0 < \alpha < 1$  e  $\beta = 0$ );

$$\frac{\tau^{\alpha-1}}{\Delta t} \mathcal{T}(n) (U_i^n - U_i^{n-1}) = \mathcal{K} \partial_x^2 U_i^n + f_i^n. \quad (16)$$

Os Esquemas (6), (7) e (8) são aproximações lineares das derivadas fracionárias, que resultam em um erro de truncamento local na ordem de  $\Delta t$  para a variável temporal e  $\Delta x^2$  para a variável espacial nos métodos de 1 a 6. A análise da estabilidade do **Método 1** mostra que ele é incondicionalmente estável, e sua ordem de convergência na norma  $L_2$  é de  $O(\Delta t + \Delta x^2)$  [9].

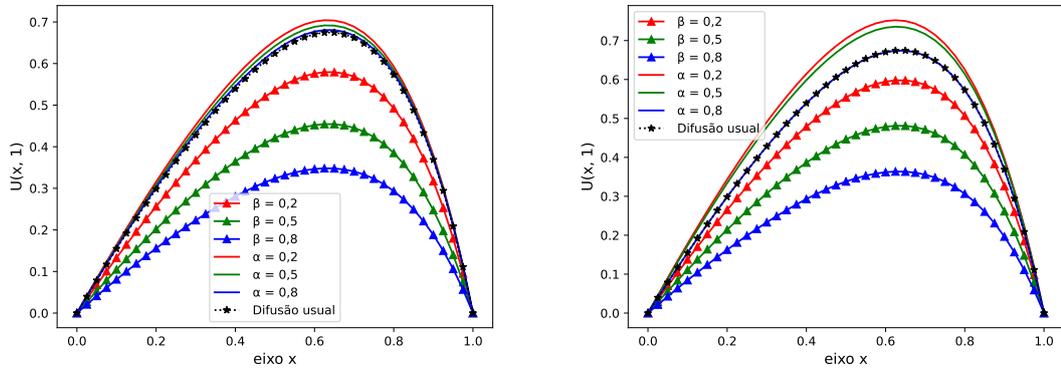
## 4 Experimentos numéricos

Nesta seção é apresentado um experimento numérico que dá suporte a um estudo comparativo entre os três operadores, a saber, Riemann-Liouville, Caputo-Fabrizio e Katugampola e as duas variações consideradas em (5a). A solução numérica encontrada para o problema (5), relativa ao domínio  $(x, t) \in [0, 1] \times [0, 1]$ , estando os dados usados descritos a seguir:

- $f(x, t) = t^{3/2}\text{sen}(\pi x)$ ;
- $\phi(x) = 0$ ;  $l(t) = 0$ ;  $r(t) = 0$ .

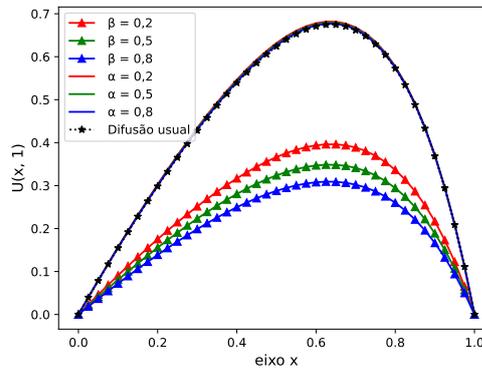
As Figuras 1(a)-(c) exibem comparações entre as abordagens ( $0 < \alpha < 1$ ,  $\beta = 0$ ) e ( $\alpha = 1$ ,  $0 < \beta < 1$ ), na equação (5a). Se fixado  $\beta = 0$  e  $\alpha = 1$  fazendo  $\alpha \rightarrow 1$  e  $\beta \rightarrow 0$ , respectivamente, podemos pensar que, em algum sentido, (5a) se reduz à equação da difusão usual.

O efeito da ordem fracionária para cada operador empregado, com a difusão usual.



(a) Operador de Riemann-Liouville

(b) Operador de Caputo-Fabrizio



(c) Operador de Katugampola

Figura 1: O efeito da ordem fracionária  $\alpha$  e  $\beta$  na solução numérica associada aos operadores (a) Riemann-Liouville, (b) Caputo-Fabrizio e (c) Katugampola. Considerando,  $\mathcal{K} = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $\Delta x = 1/40$  e  $\Delta t = 1/200$ . Fonte: Elaborada pelos autores.

Na Figura 2 (a) e (b) são exibidos os resultados da aplicação dos operadores de derivada fracionária de Riemann-Liouville, Caputo-Fabrizio e Katugampola na duas versões que foram consideradas.

Em (a)  $\alpha$  fixo e  $0 < \beta < 1$  e em (b)  $0 < \alpha < 1$  e  $\beta$  fixado.

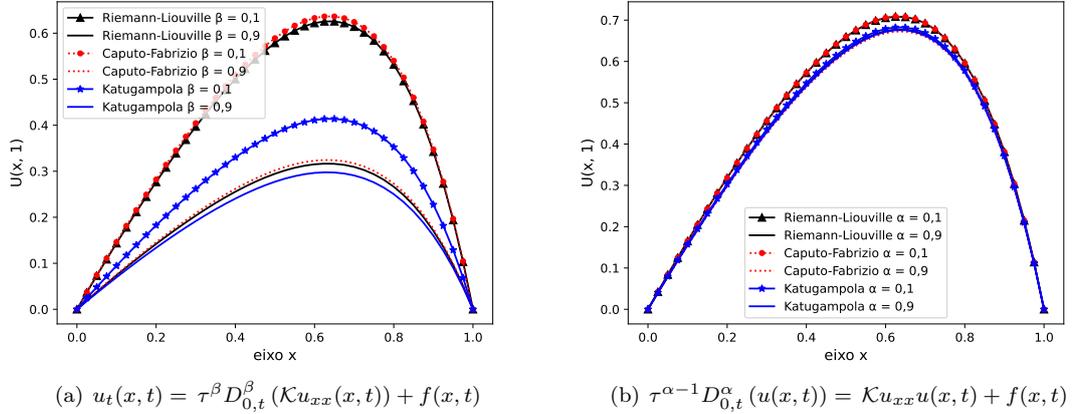


Figura 2: O efeito da utilização dos operadores de derivada fracionária de Riemann-Liouville, Caputo-Fabrizio e Katugampola, nas versões da equação da difusão de ordem fracionária ( $0 < \alpha < 1$ ,  $\beta = 0$ ) e ( $\alpha = 1$ ,  $0 < \beta < 1$ ). Considerando,  $\mathcal{K} = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $\Delta x = 1/40$  e  $\Delta t = 1/200$ . Fonte: Elaborada pelos autores.

## 5 Considerações Finais

Os testes computacionais apresentados neste trabalho sugerem que a versão da equação da difusão fracionária com  $\alpha = 1$  e ( $0 < \beta < 1$ ), é uma versão da EDP mais adequada para modelar aplicações do problema de difusão não usual. Isto porque, a ordem da derivada fracionária teve uma influência muito maior na solução numérica para diferentes valores de  $\beta$ , quando comparado a outra versão da equação da difusão fracionária a qual teve a variação da ordem  $\alpha$ . Essa maior variabilidade na escolha com esta combinação dos parâmetros, sugere que poderemos analisar mais aplicações reais de sistemas complexos.

Quanto a escolha da derivada fracionária para ser utilizada, os testes computacionais indicam que a derivada clássica de Riemann-Liouville, assim como o operador de núcleo não singular de Caputo-Fabrizio tiveram relativa equivalência na solução numérica de alguns valores de  $\beta$  investigados. Por outro lado, o operador local de Katugampola foi o que produziu diferentes resultados quando comparados com as outras duas derivadas fracionárias.

Dando continuidade a este trabalho, visa-se aplicar outros operadores com núcleo singular e não singular como as derivadas de Caputo e de Atangana e Baleanu. Realizar uma análise teórica nas versões das equações da difusão estudada, especificamente dos Métodos 2 a 6, bem como aplicações.

## Agradecimentos

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

## Referências

- [1] D. Baleanu et al. **Fractional calculus: models and numerical methods**. 2<sup>a</sup> ed. Singapore: World Scientific, 2012, p. 448.
- [2] J. G. Berryman. “Evolution of a stable profile for a class of nonlinear diffusion equations with fixed boundaries”. Em: **Journal of Mathematical Physics** 18.11 (1977), pp. 2108–2115.
- [3] Michele Caputo e Mauro Fabrizio. “A new definition of fractional derivative without singular kernel”. Em: **Progress in Fractional Differentiation & Applications** 1.2 (2015), pp. 73–85.
- [4] Sergei Fomin, Vladimir Chugunov e Toshiyuki Hashida. “Application of fractional differential equations for modeling the anomalous diffusion of contaminant from fracture into porous rock matrix with bordering alteration zone”. Em: **Transport in Porous Media** 81 (2010), pp. 187–205.
- [5] Udita N Katugampola. “A new fractional derivative with classical properties”. Em: **arXiv preprint arXiv:1410.6535** (2014).
- [6] Randall J LeVeque. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems**. SIAM, 2007.
- [7] Ralf Metzler e Joseph Klafter. “The random walk’s guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach”. Em: **Physics reports** 339.1 (2000), pp. 1–77.
- [8] Ralf Metzler e Joseph Klafter. “The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics”. Em: **Journal of Physics A: Mathematical and General** 37.31 (2004), R161.
- [9] Jhoab P de Negreiros, Cristiane O Faria e Carlos A de Moura. “Um estudo de estabilidade por Fourier para a equação de difusão fracionária com correção dimensional”. Em: **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics** 9.1 (2022).
- [10] Jhoab Pessoa de Negreiros, Carlos Antonio de Moura e Cristiane Oliveira de Faria. “Numerical algorithms considering a dimensional correction parameter on the fractional order diffusion equation”. Em: **CQD-Revista Eletrônica Paulista de Matemática** (2022).
- [11] Sania Qureshi, Norodin A Rangaig e Dumitru Baleanu. “New numerical aspects of Caputo-Fabrizio fractional derivative operator”. Em: **Mathematics** 7.4 (2019), p. 374.
- [12] H. Spohn. “Surface dynamics below the roughening transition”. Em: **Journal de Physique I** 3.1 (1993), pp. 69–81.
- [13] J. Stephenson. “Some non-linear diffusion equations and fractal diffusion”. Em: **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications** 222.1-4 (1995), pp. 234–247.
- [14] Graziane Sales Teodoro. “Derivadas fracionárias: tipos e critérios de validade”. Doutorado em Matemática Aplicada. São Paulo: Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, 2019, p. 182.
- [15] Alexey Zhokh e Peter Strizhak. “Non-Fickian transport in porous media: Always temporally anomalous?” Em: **Transport in Porous Media** 124 (2018), pp. 309–323.