

# Comparação do Método de Galerkin para a Equação Estacionária de Difusão-Advecção-Reação de Ordem Inteira e Não-Inteira

João P. A. Barros<sup>1</sup>

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

Cristiane O. Faria<sup>2</sup>

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

Carlos A. de Moura<sup>3</sup>

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

Jhoab P. de Negreiros<sup>4</sup>

Professor Doutor na Ass. Brasileira de Educadores Lassalistas, Niterói, RJ

**Resumo.** Neste estudo foi realizado uma análise comparativa entre o método de Galerkin aplicado à equação estacionária de difusão-advecção-reação de ordem inteira e não-inteira. Apresentaremos as ferramentas utilizadas para desenvolver o método no caso de ordem fracionária. Discutiremos os testes de refinamento da malha, a variação da ordem fracionária e a influência do número de Péclet. Destacaremos as diferenças entre as abordagens e os resultados computacionais obtidos com suas vantagens e desvantagens.

**Palavras-chave.** Equação Estacionária de Difusão-Advecção-Reação, Derivada Fracionária, Método de Galerkin, Número de Péclet.

## 1 Introdução

O cálculo fracionário, tão antigo quanto o cálculo de ordem inteira, tem suas raízes na correspondência entre L'Hôpital e Leibniz, e possui uma história rica e diversificada. Dentre suas diversas aplicações, destacam-se duas aplicações bastante conhecidas: a curva tautocrônica de Abel e o problema do oscilador harmônico. Essas aplicações evidenciam sua capacidade de modelar fenômenos complexos com maior precisão do que o cálculo tradicional de ordem inteira. Apesar de ser uma disciplina antiga, o interesse e a pesquisa nessa área têm crescido significativamente nos últimos anos. Inclusive, já existe até livro nacional dedicado ao assunto [1].

Este estudo concentra-se na análise comparativa entre o método de Galerkin aplicado à equação estacionária de difusão-advecção-reação com derivadas de ordem inteira e não-inteira. Exploraremos as ferramentas utilizadas para desenvolver o método na abordagem fracionária, serão realizados testes de refinamento da malha, variações na ordem fracionária e o impacto do número de Péclet. Serão discutidas as diferenças entre essas abordagens e os resultados computacionais obtidos, abordando suas respectivas vantagens e desvantagens.

A equação de difusão-advecção-reação desempenha um papel importante em diversas áreas do conhecimento, como por exemplo na Biomatemática. Este estudo se concentra exclusivamente na

---

<sup>1</sup>jpab\_7@hotmail.com

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

<sup>3</sup>demoura@ime.uerj.br

<sup>4</sup>jhoabnegreiros@gmail.com

aplicação do método de Galerkin em sua forma unidimensional estacionária, tendo um caráter exploratório. Os estudos de [3], [4] e [8] foram fundamentais para esta pesquisa.

## 2 Operadores Fracionários

Nesta seção, apresentaremos a definição dos operadores fracionários que serão utilizados neste trabalho.

**Definição 2.1.** [*Integral fracionária de Riemann-Liouville à esquerda*] A integral fracionária à esquerda de Riemann-Liouville com ordem  $\beta > 0$  para uma dada função  $f(x)$ ,  $x \in (x_L, x_R)$  é definida como:

$$D_{x_L,x}^{-\beta} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_{x_L}^x (x-s)^{\beta-1} f(s) ds, \quad (1)$$

onde  $\Gamma(\cdot)$  é a função gama e  $\beta$  a ordem da integral fracionária.

**Observação:** quando  $\beta = 0$  temos que o operador  $D_{x_L,x}^{-\beta} = I$ , o operador identidade [6].

**Definição 2.2.** [*Derivada fracionária de Riemann-Liouville à esquerda*] A derivada de Riemann-Liouville à esquerda de ordem  $\beta > 0$  da função dada  $f(x)$ , onde  $x \in (x_L, x_R)$ , é definida como:

$${}_{RL}D_{x_L,x}^{\beta} f(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\beta)} \frac{d^m}{dx^m} \int_{x_L}^x (x-s)^{m-\beta-1} f(s) ds, \quad (2)$$

onde  $\Gamma(\cdot)$  é a função gama e  $m$  é o menor número inteiro positivo maior que  $\beta$  ( $m-1 \leq \beta < m$ ).

**Observação:** quando  $\beta = n \in \mathbb{N}$ , obtemos  $D_{x_L,x}^n f(x) = f^{(n)}(x)$ , onde  $f^{(n)}(x)$  é a usual  $n$ -ésima derivada de  $f(x)$ . Para  $\beta = 0$ ,  $D_{x_L,x}^0 f(x) = f(x)$  e recupera-se a própria função [7].

## 3 Problema Modelo

Nesta seção, formula-se a equação diferencial fracionária proposta por [2]:

$$\begin{cases} -a \nabla \cdot (D_{0,x}^{-\beta} \nabla u(x)) + b \nabla u(x) + cu(x) = f(x) & \text{em } \Omega = (0, 1), \\ u(0) = 0, \\ u(1) = 1, \end{cases} \quad (3)$$

onde  $D_{0,x}^{-\beta}$  representa o operador de integral fracionária de Riemann-Liouville à esquerda de ordem  $\beta$  (com  $0 \leq \beta < 1$ ),  $a$  é o coeficiente de difusão (com  $a > 0$ ),  $b$  a velocidade,  $c$  é o coeficiente de decaimento e  $f(x)$  o termo fonte.

### 3.1 Formulação Variacional

Seja  $u \in H^\alpha(\Omega)$  onde  $\alpha = 1 - \frac{\beta}{2}$ , e a função teste  $v \in V$ , tal que:

$$V = \{v \in H^\alpha(\Omega), v(0) = v(1) = 0\}.$$

Multiplicando por  $v$  em ambos os lados da equação no problema modelo e integrando em todo o domínio, obtemos:

$$\int_0^1 -a \nabla \cdot (D_{0,x}^{-\beta} \nabla u) v + b \nabla u v + cuv \, dx = \int_0^1 f v \, dx. \quad (4)$$

Aplicando integral por partes no termo da integral fracionária, temos:

$$(aD_{0,x}^{-\beta}\nabla u, \nabla v)_\Omega + (b\nabla u, v)_\Omega + (cu, v)_\Omega = (f, v)_\Omega, \tag{5}$$

onde  $(\cdot, \cdot)_\Omega$  é o produto interno no espaço  $\Omega$ . Utilizando a definição de  $\beta$ , da derivada de Riemann-Liouville e ferramentas de cálculo, podemos reescrever como:

$$(a_{RL}D_{0,x}^{1-\beta}u, \nabla v)_\Omega + (b\nabla u, v)_\Omega + (cu, v)_\Omega = (f, v)_\Omega. \tag{6}$$

Tomando  $\gamma = 1 - \beta$  chegamos em

$$(a_{RL}D_{0,x}^\gamma u, \nabla v)_\Omega + (b\nabla u, v)_\Omega + (cu, v)_\Omega = (f, v)_\Omega. \tag{7}$$

### 3.2 Método de Galerkin

Seja  $\Omega = [x_L, x_R]$  um domínio finito, define-se  $S_h$  uma partição uniforme de  $\Omega$ , dada por:

$$x_L = x_0 < x_1 < \dots < x_{m-1} < x_m = x_R, \quad m \in \mathbb{Z}^+. \tag{8}$$

Podemos denotar  $\Delta x = |x_{i-1} - x_i|$  e  $\Omega_i = [x_{i-1}, x_i]$  para  $i = 1, 2, \dots, m$ , e em seguida o espaço de elementos finitos  $V_h$  como o conjunto de funções polinomiais por partes na malha  $S_h$ , expresso como

$$V_h = \{v : v|_{\Omega_i} \in P_1(\Omega_i), v \in C(\Omega)\}.$$

onde  $P_1(\Omega_i)$  é o espaço de polinômios lineares definidos em  $\Omega_i$  e  $V_h \subset V$ . As funções  $\phi_1, \dots, \phi_{m-1}$  de  $V_h$  utilizadas são funções lagrangeanas lineares por partes (ver [5]).

Para definir os termos envolvendo a derivada fracionária de Riemann-Liouville, é necessário estabelecer apenas um lema, os outros termos se resolvem analogamente ao caso inteiro.

**Lema 3.1.** [3] Para  $i = 1, 2, \dots, m - 1$ , temos:

$${}_{RL}D_{x_L,x}^\gamma \phi_i(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \frac{d}{dx} \int_{x_L}^x (x-s)^{-\gamma} \phi_i(s) ds$$

e obtemos

$${}_{RL}D_{x_L,x}^\gamma \phi_i(x) = \lambda \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq x_{i-1}, \\ (x - x_{i-1})^{1-\gamma}, & \text{se } x_{i-1} \leq x \leq x_i, \\ -2(x - x_i)^{1-\gamma} + (x - x_{i-1})^{1-\gamma}, & \text{se } x_i \leq x \leq x_{i+1}, \\ (x - x_{i+1})^{1-\gamma} - 2(x - x_i)^{1-\gamma} + (x - x_{i-1})^{1-\gamma}, & \text{se } x > x_{i+1}, \end{cases}$$

onde  $0 < \gamma < 1$  e  $\lambda = 1/\Gamma(2-\gamma)(\Delta x)$ .

Retomando ao resultado anterior (7), o objetivo é encontrar  $u_h \in V_h$  tal que:

$$(a_{RL}D_{0,x}^\gamma u_h, \nabla v_h)_\Omega + (b\nabla u_h, v_h)_\Omega + (cu_h, v_h)_\Omega = (f, v_h)_\Omega, \quad \forall v_h \in V_h. \tag{9}$$

Substituindo  $u_h = \sum_{j=1}^{m-1} c_j \phi_j(x)$  e  $v_h = \phi_i(x)$ , tal que,  $i = 1, \dots, m - 1$ , obtemos:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{m-1} c_j \left[ (a_{RL}D_{0,x}^\gamma \phi_j(x), \nabla \phi_i(x))_\Omega + (b\nabla \phi_j(x), \phi_i(x))_\Omega + (c\phi_j(x), \phi_i(x))_\Omega \right] \\ & = (f, \phi_i(x))_\Omega \end{aligned} \tag{10}$$

**Lema 3.2.** Para  $i = 1, 2, \dots, m - 1$ , temos:

$$a \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{\partial^\gamma \phi_j(x)}{\partial x^\gamma} (\nabla \phi_i(x)) dx + a \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial^\gamma \phi_j(x)}{\partial x^\gamma} (\nabla \phi_i(x)) dx = \tau_1 \cdot g_{i,j} \quad (11)$$

e essa relação implica que

$$g_{i,j} = \tau_1 \begin{cases} k_{i-j} - k_{i-j+1}, & \text{se } j \leq i - 2, \\ 2^{2-\gamma} - 3 - k_2, & \text{se } j = i - 1, \\ 4 - 2^{2-\gamma}, & \text{se } j = i, \\ -1, & \text{se } j = i + 1, \\ 0, & \text{se } j \geq i + 2. \end{cases} \quad (12)$$

Define-se  $k_n = -(n - 2)^{2-\gamma} + 3(n - 1)^{2-\gamma} - 3n^{2-\gamma} + (n + 1)^{2-\gamma}$ , onde este termo foi encontrado resolvendo as integrais para os casos  $j \geq i + 2$  e  $j \leq i - 2$ . E define-se  $\tau_1 = \frac{a}{\Gamma(3-\gamma)\Delta x^\gamma}$ .

Para a construção da matriz global, serão utilizados os conceitos anteriormente apresentados. Dessa forma, a matriz global resultante é dada abaixo:

$$M_{i,j} = \begin{cases} \tau_1(k_{i-j} - k_{i-j+1}), & \text{se } j \leq i - 2, \\ \tau_1(2^{2-\gamma} - 3 - k_2) + \frac{b}{2} + \frac{c\Delta x}{6}, & \text{se } j = i - 1, \\ \tau_1(4 - 2^{2-\gamma}) + \frac{2c\Delta x}{3}, & \text{se } j = i, \\ -\tau_1 - \frac{b}{2} + \frac{c\Delta x}{6}, & \text{se } j = i + 1, \\ 0, & \text{se } j \geq i + 2. \end{cases} \quad (13)$$

É importante ressaltar que quando  $\beta = 0$  obtemos  $\gamma = 1$ , com isso, retornamos a matriz global do caso inteiro. Assim sendo, obtemos uma matriz global tridiagonal, que é dada a seguir:

$$M_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{se } j \leq i - 2, \\ -\frac{a}{\Delta x} + \frac{b}{2} + \frac{c\Delta x}{6}, & \text{se } j = i - 1, \\ \frac{2a}{\Delta x} + \frac{2c\Delta x}{3}, & \text{se } j = i, \\ -\frac{a}{\Delta x} - \frac{b}{2} + \frac{c\Delta x}{6}, & \text{se } j = i + 1, \\ 0, & \text{se } j \geq i + 2. \end{cases} \quad (14)$$

Por fim, a ultima etapa é resolver o sistema linear com as respectivas condições de fronteira:

$$MC = F, \quad (15)$$

onde  $M$  é a matriz global,  $C$  é o vetor incógnita que queremos encontrar e  $F$  é o vetor força global.

### 3.3 Experimentos Numéricos

Seja  $u = x^2$  a solução exata do problema,  $a = 3$ ,  $b = 0,0001$  e  $c = 10^{-8}$  e  $\gamma = \beta = 0,5$ . Sendo assim, pretende-se determinar a concentração  $u(x)$ , tal que:

$$\begin{cases} -a\nabla \cdot (D_{0,x}^{-\beta} \nabla u) + b\nabla u + cu = -\frac{2ax^\beta}{\Gamma(\beta+1)} + 2bx + cx^2 & \text{em } \Omega = (0, 1), \\ u(0) = 0, \\ u(1) = 1. \end{cases} \quad (16)$$

O primeiro teste realizado foi a comparação entre a solução analítica e a solução encontrada pelo método de Galerkin, abaixo é possível visualizar os gráficos comparativos:

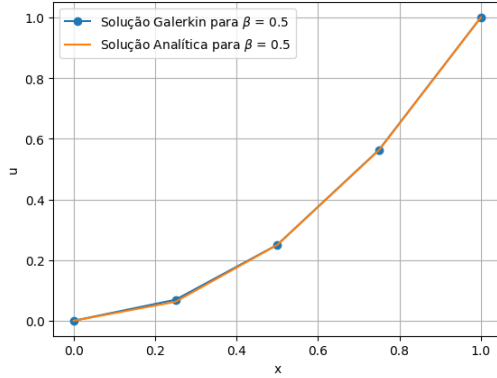


Figura 1: Solução para 5 nós.  
Fonte: Elaborada pelos autores.

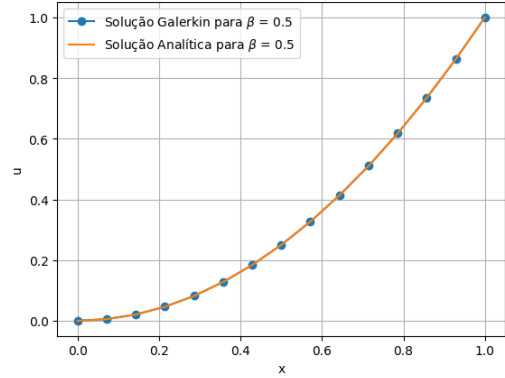


Figura 2: Solução para 15 nós.  
Fonte: Elaborada pelos autores.

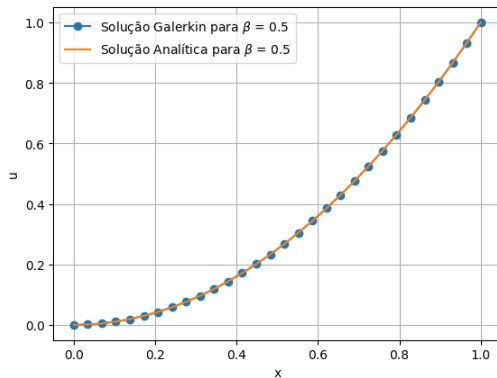


Figura 3: Solução para 30 nós.  
Fonte: Elaborada pelos autores.

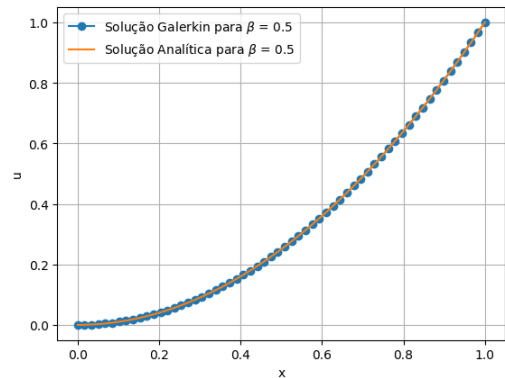


Figura 4: Solução para 60 nós.  
Fonte: Elaborada pelos autores.

Convém lembrar que  $\gamma = 1 - \beta$ , onde  $\beta$  representa a ordem da integral fracionária. Ao observar ambas as figuras e conduzir outros testes, variando os valores de  $\gamma$  e  $\beta$ , não podemos concluir – apenas observando as curvas – qual obteve a melhor aproximação. No entanto, podemos afirmar que os 4 casos forneceram boas aproximações.

Para determinar a melhor aproximação, foi calculado o erro na norma  $L^2$ , que é dado por:

$$\|u(x) - u_h(x)\|_{L^2(\Omega)} = \sqrt{\Delta x \sum_{i=0}^m |u(x_i) - u_h(x_i)|^2}, \quad (17)$$

onde  $u(x)$  é a solução analítica,  $u_h(x)$  a solução aproximada,  $m$  o número de nós e  $\Delta x = |x_{i+1} - x_i|$ .

Tabela 1: Estudo variando o número de nós.

Número de nós(m)	$\Delta x$	Erro na norma $L^2$
5	0,25	$3,4289 \times 10^{-3}$
15	0,07	$1,8537 \times 10^{-4}$
30	0,03	$4,0658 \times 10^{-5}$
60	0,01	$1,9253 \times 10^{-5}$

É importante ressaltar que esta equação necessita de uma análise análoga ao caso inteiro. Quando o valor de  $b$  é elevado, a precisão da aproximação tende a diminuir e, em algumas circunstâncias, pode até ocorrer a não convergência. Para investigar se esse comportamento se estende ao problema de ordem fracionária, foram realizados testes variando somente o valor de  $b$ .

Seja  $u = x^2$  a solução analítica do problema,  $a = 3$  e  $c = 10^{-8}$  e  $m=15$ , variando os valores de  $b$  temos:

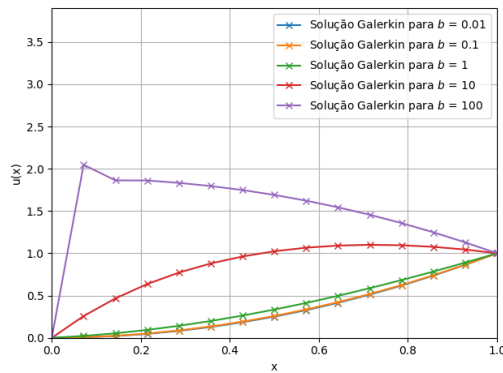


Figura 5: Solução com ordem inteira para 15 nós.

Fonte: Elaborada pelos autores.

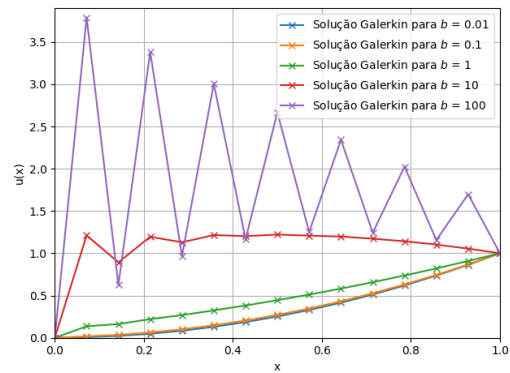


Figura 6: Solução com ordem fracionária  $\beta = 0,5$  para 15 nós.

Fonte: Elaborada pelos autores.

Observando as Figuras 5 e 6, concluímos que o problema de ordem fracionária também é influenciado pelo número de Péclet. Contudo, dependendo da ordem da derivada fracionária, o resultado pode apresentar uma leve melhora em relação a derivada de ordem inteira.

Além dos estudos anteriores, um novo teste foi conduzido variando a ordem da derivada fracionária e empregando 60 nós, utilizando os mesmos dados

Seja  $u = x^2$  a solução analítica do problema,  $a = 3$ ,  $b = 0,0001$  e  $c = 10^{-8}$  e  $m = 60$ , variando os valores de  $\beta$  temos:

Tabela 2: Teste variando as ordens.

Ordem da derivada( $\gamma$ )	$\beta$	Erro na norma $L^2$	Tempo de execução do código
0,25	0,75	$2,8147 \times 10^{-5}$	0,5
0,50	0,50	$1,9253 \times 10^{-5}$	0,5
0,75	0,25	$2,4074 \times 10^{-5}$	0,5
1,0	0	$6,1339 \times 10^{-6}$	0,3
Caso inteiro	-	$6,1346 \times 10^{-6}$	0,3

Ao analisar os dados da tabela apresentada, é evidente que os melhores resultados encontrados e com menor erro foram para o caso  $\beta = 0$  e o caso inteiro, onde os resultados são praticamente

iguais. É interessante notar que quando  $\beta$  é igual a zero, retornamos à equação do caso inteiro para este problema (16). Os resultados encontrados ambos foram muito próximos.

## 4 Considerações Finais

O estudo analisou a aplicação do método de Galerkin com ordem inteira e não-inteira, destacando que a abordagem de ordem inteira e  $\beta = 0$  obtiveram os melhores resultados. Aumentar o número de nós melhora a precisão, mas aumenta o custo computacional, mais ainda no caso de ordem não-inteira, devido à complexidade da matriz global do sistema, que não é tridiagonal. Com  $\beta = 0$ , o resultado foi quase equivalente ao caso de ordem inteira, especialmente com poucos nós, resultando em tempos de execução semelhantes, com um número maior de nós, ocorre o que foi dito anteriormente, um custo computacional maior. O número de Péclet continuou influenciando na aproximação dos resultados obtidos no caso fracionário. Seria interessante futuramente investigar o impacto do uso de Riemann-Liouville à direita, reformulando a equação para incluir ambos os termos, e explorar o caso transiente, fornecendo assim novas perspectivas de pesquisa.

## Agradecimentos

Agradecimentos à FAPERJ - Brasil, por financiar o projeto de doutorado.

## Referências

- [1] R.F. Camargo e E.C de Oliveira. “**Cálculo Fracionário**”. Editora Livraria de Física, 2015.
- [2] V. J. Ervin e J. P. Roop. “Variational formulation for the stationary fractional advection dispersion equation”. Em: **Numerical Methods for Partial Differential Equations: An International Journal** 22.3 (2006), pp. 558–576. DOI: <https://doi.org/10.1002/num.20112>.
- [3] L. Feng, P. Zhuang, F. Liu, I. Turner e Y. Gu. “Finite element method for space-time fractional diffusion equation”. Em: **Numerical Algorithms** 72 (2016), pp. 749–767. DOI: 10.1007/s11075-015-0065-8.
- [4] C. Li e F. Zeng. **Numerical Methods for Fractional Calculus**. Chapman & Hall/CRC Numerical Analysis and Scientific Computing Series. CRC Press, 2015. ISBN: 9781482253818. URL: <https://books.google.com.br/books?id=qS-sCQAAQBAJ>.
- [5] M. A. Rincón e L. Ishih. **Introdução ao método de elementos finitos-Computação e Análise em Equações Diferenciais Parciais**. Rio de Janeiro: UFRJ, 2013.
- [6] G. S. Teodoro, D. S. Oliveira e E. C. de Oliveira. “Derivadas fracionárias: critérios para classificação”. Em: **C.Q.D. - Revista Eletrônica Paulista de Matemática** (2017). Aceito. ISSN: 2316-9664.
- [7] G. S. Teodoro, D. S. Oliveira e E. C. de Oliveira. “Sobre derivadas fracionárias”. Em: **Revista Brasileira de Ensino de Física** (2018). Aceito. DOI: 10.1590/1806-9126-RBEF-2017-0213.
- [8] P. Zhuang, F. Liu, I. Turner e Y.T. Gu. “Finite volume and finite element methods for solving a one-dimensional space-fractional Boussinesq equation”. Em: **Applied Mathematical Modelling** 15 (2014), pp. 3860–3870. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apm.2013.10.008>.