

# Algoritmos Numéricos para a Equação da Difusão Fracionária – Análise da Complexidade Temporal

Jhoab P. de Negreiros<sup>1</sup>

Professor Doutor na Associação Brasileira de Educadores Lassalistas, Niterói, 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

**Resumo.** Neste trabalho, apresentamos um estudo comparativo da análise da complexidade temporal para algoritmos numéricos utilizados para a equação da difusão fracionária com coeficientes constantes. São consideradas seis derivadas fracionárias: de Riemann-Liouville, de Caputo, de Caputo-Fabrizio, de Atangana-Baleanu do tipo Caputo (esses operadores não locais), e de Chen e de Katugampola (operadores locais). A abordagem numérica escolhida é um esquema implícito de diferenças finitas, inspirado no método clássico de Euler regressivo e testes computacionais são apresentados com resultados que comprovam as conclusões teóricas.

**Palavras-chave.** Equação da difusão fracionária, Derivadas fracionárias, Método de diferenças finitas, Complexidade temporal.

## 1 Introdução

As equações de difusão fracionária nos últimos anos têm atraído considerável interesse devido às suas aplicações em diversas áreas da ciência, pois possibilitam, em alguns casos, modelos mais precisos. Portanto, há uma grande necessidade de propor eficientes métodos numéricos para esses modelos. Adaptações dos métodos consagrados para derivadas de ordem inteira são propostas para as derivadas fracionárias mais disseminadas e utilizadas em aplicações. Tendo acesso a esses algoritmos, torna-se necessário realizar um estudo da complexidade computacional, tanto em relação ao tempo, quanto em relação ao espaço.

A complexidade de tempo de um algoritmo desempenha um papel fundamental na análise e no projeto eficiente de sistemas computacionais. Essa medida quantifica o intervalo de tempo que um algoritmo necessita para execução comparativamente ao volume de dados na entrada, sendo essencial para avaliar o desempenho e a escalabilidade de soluções computacionais. Neste trabalho, vamos nos ater apenas à complexidade computacional temporal dos códigos que aproximam a solução da equação da difusão fracionária com a derivada fracionária em relação à variável temporal usando diferentes operadores, a saber, derivada de Riemann-Liouville, Caputo, Caputo-Fabrizio, Atangana-Baleanu do tipo Caputo, Chen e Katugampola.

## 2 Operadores Fracionários

Nesta seção, vamos apresentar a definição dos operadores de derivadas fracionárias que serão utilizados neste trabalho.

---

<sup>1</sup>jhoabnegreiros@gmail.com

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

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

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

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

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

**Definição 2.2** (Caputo). *Seja  $[a, b]$  um intervalo finito do eixo real  $\mathbb{R}$ . Para  $\alpha \in \mathbb{C}$  ( $Re(\alpha) \geq 0$ ) as derivadas fracionárias de Caputo, à esquerda  ${}_CD_{a,t}^{\alpha}f(t)$ , de ordem  $\gamma$ , são definidas por*

$${}_CD_{a,t}^{\gamma}f(t) := \frac{1}{\Gamma(n-\gamma)} \int_a^t \frac{f^{(n)}(s)}{(t-s)^{\gamma-n+1}} ds \quad (2)$$

onde  $m$  é um inteiro positivo satisfazendo  $m-1 < \gamma \leq m$ .

**Definição 2.3** (Caputo-Fabrizio). *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*

$${}_{CF}D_{a,t}^{\gamma}f(t) := \frac{M(\gamma)}{1-\gamma} \int_a^t \exp\left(-\gamma \frac{t-s}{1-\gamma}\right) f'(s) ds \quad (3)$$

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

**Definição 2.4** (Atangana-Baleanu). *Sejam  $f \in H^1(a, b)$ ,  $b > a$  e  $\gamma \in [0, 1]$ . A derivada fracionária segundo Atangana-Baleanu do tipo Caputo é dada por*

$${}_{ABC}D_{a,t}^{\gamma}f(t) := \frac{M(\gamma)}{1-\gamma} \int_a^t E_{\gamma}\left(-\gamma \frac{(t-s)^{\gamma}}{1-\gamma}\right) f'(s) ds, \quad (4)$$

onde  $E_{\gamma}(\cdot)$  é a função de Mittag-Leffler de um parâmetro e  $M(\gamma)$  é o análogo ao fator de normalização da derivada de Caputo-Fabrizio.

**Definição 2.5** (Chen). *Sejam  $t \in \mathbb{R}$  e  $f(t)$  uma função. A derivada de Chen de ordem  $\gamma > 0$  de  $f$  é definida a partir do limite na equação (5)*

$${}_{CH}D_t^{\gamma} = \lim_{s \rightarrow t} \frac{f(t) - f(s)}{t^{\gamma} - s^{\gamma}}. \quad (5)$$

Aplicando a regra de l'Hôpital em (5), podemos escrever a derivada de Chen de forma alternativa como

$${}_{CH}D_t^{\gamma} = \frac{f'(t)}{\gamma t^{\gamma-1}}. \quad (6)$$

**Definição 2.6** (Katugampola). *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*

$${}_KD^{\gamma}f(t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f^{(n)}(te^{\epsilon t^{n-\gamma}}) - f^{(n)}(t)}{\epsilon}, \quad (7)$$

para todo  $t > 0$ .

Considerando  $\gamma \in (0, 1]$  e  $f$  uma função diferenciável em um ponto  $t > 0$ , podemos escrever a derivada de Katugampola da seguinte maneira

$${}_KD^{\gamma}f(t) = t^{1-\gamma} f'(t). \quad (8)$$

### 3 Problema Modelo

Nesta seção formula-se o problema de valores iniciais e de contorno da equação diferencial fracionária proposta por [3]. Pretende-se determinar a distribuição de temperatura,  $u(x, t)$ , tal que

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D_{0,t}^\gamma \left( \mathcal{K}_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right) + f(x, t), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq T, \quad (9a)$$

$$u(x, 0) = \phi(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (9b)$$

$$u(0, t) = l(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (9c)$$

$$u(L, t) = r(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (9d)$$

onde  $D_{0,t}^\gamma$  representa a derivada fracionária de ordem  $\gamma$ ;  $\mathcal{K}_\gamma$  é o coeficiente de difusão fracionária, que inclui o parâmetro de correção dimensional [4]; e  $\phi(x)$ ,  $l(t)$ ,  $r(t)$  e  $f(x, t)$  são funções suficientemente regulares fornecidas.

#### 3.1 Esquemas Numéricos

Efetuamos uma abordagem numérica de (9) via método das diferenças finitas, sendo aplicados os esquemas baseados nos de Euler regressivo. A malha computacional no domínio de (9a) 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 (9a) as diferenças centradas (ordem igual a 2) [1].

A derivada de Riemann-Liouville será aproximada numericamente pela derivada fracionária de Grünwald-Letnikov [2],

$$[{}_{RL}D_{0,t}^\gamma u(t)]_{t=t_n} = \frac{1}{\Delta t^\gamma} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{\gamma}{k} u(t_{n-k}) + O(\Delta t). \quad (10)$$

Será aplicado o método denominado L1 para aproximar a derivada de Caputo [2]:

$$[{}_{CD}D_{0,t}^\gamma u(t)]_{t=t_n} = \frac{1}{\Delta t^\gamma} \sum_{k=0}^{n-1} b_{n-k-1} (u(t_{k+1}) - u(t_k)) + O(\Delta t). \quad (11)$$

A aproximação empregada na derivada de ordem arbitrária de Caputo-Fabrizio é aquela proposta em [6],

$$[{}_{CF}D_{0,t}^\gamma u(t)]_{t=t_n} = \frac{M(\gamma)}{\gamma \Delta t} \left( e^{\frac{\gamma}{1-\gamma} \Delta t} - 1 \right) \sum_{k=1}^n [u(t_{n-k+1}) - u(t_{n-k})] e^{-\frac{\gamma}{1-\gamma} k \Delta t} + O(\Delta t). \quad (12)$$

O esquema de aproximação para a derivada fracionária de Atangana-Baleanu do tipo Caputo é a proposta por [7],

$$[{}_{ABC}D_{0,t}^\gamma u(t)]_{t=t_n} = \frac{M(\gamma)}{1-\gamma} \sum_{k=0}^n \mathcal{C}_k^n f(t_k) + R_n, \quad (13)$$

onde  $R_n$  é o erro de truncamento e, se representarmos  $E_{\gamma,2} \left[ \frac{-\gamma}{1-\gamma} (t_n - t_k)^\gamma \right]$  com  $E_k^n$ , então

$$\mathcal{C}_k^n := \begin{cases} (n-1)E_1^n - nE_0^n, & \text{se } k=0, \\ (n-k+1)E_{k-1}^n - 2(n-k)E_k^n + (n-k-1)E_{k+1}^n, & \text{se } 0 < k < n, \\ E_{n-1}^n, & \text{se } k=n. \end{cases} \quad (14)$$

As características dos operadores locais de Chen e de Katugampola permitem elaborar esquemas numéricos para a derivada fracionária utilizando somente as diferenças regressivas:

$$[{}_{CH}D^\gamma u(t)]_{t=t_n} = \frac{(n\Delta t)^{1-\gamma}}{\gamma} \left( \frac{u(t_n) - u(t_{n-1})}{\Delta t} \right) + O(\Delta t), \tag{15}$$

$$[{}_{K}D^\gamma u(t)]_{t=t_n} = (n\Delta t)^{1-\gamma} \left( \frac{u(t_n) - u(t_{n-1})}{\Delta t} \right) + O(\Delta t). \tag{16}$$

### 3.2 Procedimentos Numéricos

Após aplicar os esquemas definidos na Seção 3.1 na equação da difusão fracionária (9a), esquematizamos o método tipo Euler regressivo com as derivadas fracionárias [5].

- Derivada fracionária de Riemann-Liouville;

$$\frac{U_i^n - U_i^{n-1}}{\Delta t} = \frac{\mathcal{K}_\gamma}{\Delta t^\gamma} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{\gamma}{k} \left( \frac{U_{i-1}^{n-k} - 2U_i^{n-k} + U_{i+1}^{n-k}}{\Delta x^2} \right) + f(x_i, t_n) \tag{17}$$

$$U_i^n = U_i^{n-1} + r \sum_{k=0}^n \omega(k) (U_{i-1}^{n-k} - 2U_i^{n-k} + U_{i+1}^{n-k}) + \Delta t f_i^n, \tag{18}$$

com  $r := \mathcal{K}_\gamma \frac{\Delta t^{1-\gamma}}{\Delta x^2}$  e  $\omega(k) := (-1)^k \binom{\gamma}{k}$ . Para  $1 \leq i \leq M - 1$ , a forma matricial para (18) é

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \sum_{k=0}^n \omega(k) (\mathbf{A}\mathbf{U}^{n-k} + \mathbf{C}^{n-k}) + \Delta t \mathbf{f}^n, \tag{19}$$

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

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

- Derivada fracionária de Caputo;

$$\mathbf{U}^n = \mathbf{U}^{n-1} + \sum_{k=0}^{n-1} b_{n-k-1} (\mathbf{A}\mathbf{U}^{k+1} - \mathbf{U}^k) + \mathbf{C}^{k+1} - \mathbf{C}^k + \Delta t \mathbf{f}^n, \tag{20}$$

onde  $b_k = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} [(k+1)^{1-\gamma} - k^{1-\gamma}]$ .

- Derivada fracionária de Caputo-Fabrizio;

$$\mathbf{U}^n = \mathbf{U}^{n-1} + \sum_{k=1}^n \mathcal{E}(k) [\mathbf{A}'(\mathbf{U}^{n-k+1} - \mathbf{U}^{n-k}) + \mathbf{C}^{n-k+1} - \mathbf{C}^{n-k}] + \Delta t \mathbf{f}^n \tag{21}$$

onde  $\mathcal{E}(k) := \exp\left(-\frac{\gamma}{1-\gamma} k \Delta t\right)$  e  $\mathbf{A}'$  com  $r' := \frac{\mathcal{K}_\gamma}{\gamma \Delta x^2} \left[ \exp\left(\frac{\gamma}{1-\gamma} \Delta t\right) - 1 \right]$ .

- Derivada fracionária de Atangana-Baleanu do tipo Caputo;

$$\mathbf{U}^n = \mathbf{U}^{n-1} + \sum_{k=0}^n \mathcal{C}_n^k (\mathbf{A}''\mathbf{U}^k + \mathbf{C}^k) + \Delta t \mathbf{f}^n \tag{22}$$

em  $A''$ ,  $r'' := \mathcal{K}\tau^\alpha \Delta t / [(1 - \alpha)\Delta x^2]$ .

- Derivada fracionária de Chen;

$$U^n = U^{n-1} + \mathcal{P}(n) [A(U^n - U^{n-1}) + C^n - C^{n-1}] + \Delta t f^n \tag{23}$$

onde  $\mathcal{P}(n) := n^{1-\alpha}/\alpha$ .

- Derivada fracionária de Katugampola;

$$U^n = U^{n-1} + \mathcal{T}(n) [A(U^n - U^{n-1}) + C^n - C^{n-1}] + \Delta t f^n \tag{24}$$

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

## 4 Experimentos numéricos

Nesta seção, será apresentado um experimento para medir o tempo de execução dos diferentes códigos propostos neste trabalho. Este teste visa não apenas quantificar o tempo necessário para a conclusão de tarefas específicas, mas também fornecer *insights* valiosos sobre a eficácia relativa dos algoritmos utilizados. A solução numérica é encontrada para o problema (9), relativa ao domínio  $(x, t) \in [0, 1] \times [0, 1]$ , estando os dados usados descritos a seguir:

- $f(x, t) = (1, 5t^{0,5} - \pi^2) \exp(\pi x) \text{sen}(\pi x)$ ;
- $\phi(x) = 0$ ;  $l(t) = 0$ ;  $r(t) = 0$ ;

com os parâmetros  $\Delta x = 1/400$ ,  $\mathcal{K}_\gamma = 1$  e  $\alpha = 0, 5$ .

Os valores da complexidade temporal dos códigos com as diferentes derivadas fracionárias foram analisados por meio da reta de regressão ajustada ao gráfico *log-log*, conforme exibido nos gráficos das Fig. 1 - 3. A inclinação da reta de regressão no gráfico *log-log* indica a complexidade de tempo do código. Os gráficos exibidos na Fig. 3 mostram que o tempo de execução dos códigos com as derivadas locais de Chen e Katugampola aumentam proporcionalmente ao volume das entradas, i.e,  $O(n)$ . A complexidade vista nas Fig. 1 e 2 ficou em torno de  $O(n^{1.3})$  para as derivadas fracionárias de Riemann-Liouville, Caputo e Atangana-Baleanu, e  $O(n^{1,6})$  para Caputo-Fabrizio.

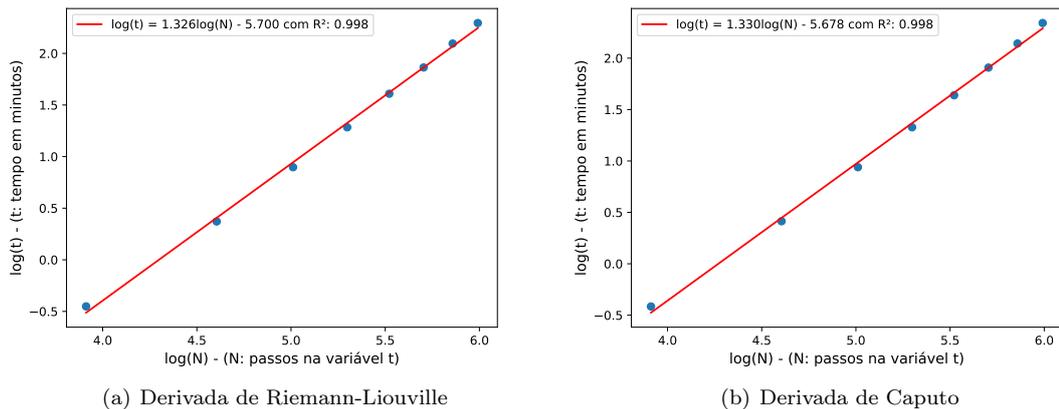


Figura 1: Gráfico log-log do tempo  $t$  em minutos em função do número de passos  $N = 500; 1000; 1500; 2000; 2500; 3000; 3500; 4000$ . Fonte: Elaborada pelos autores.

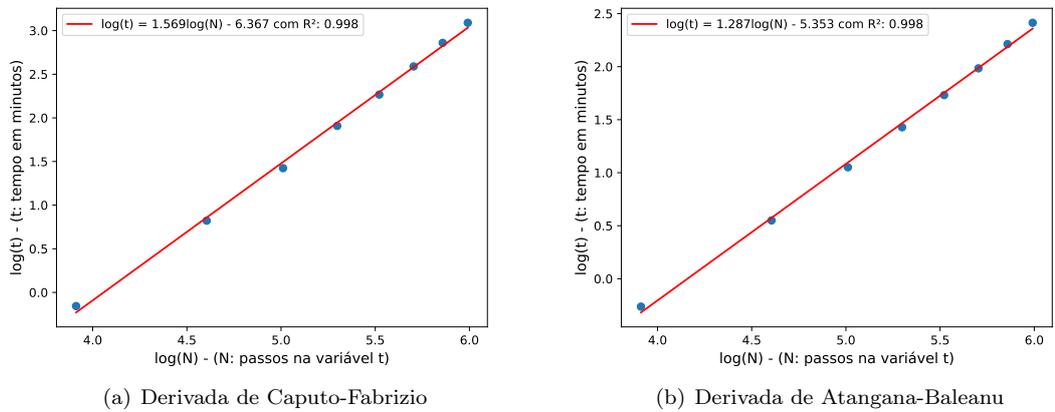


Figura 2: Gráfico log-log do tempo  $t$  em minutos em função do número de passos  $N = 500; 1000; 1500; 2000; 2500; 3000; 3500; 4000$ . Fonte: Elaborada pelos autores.

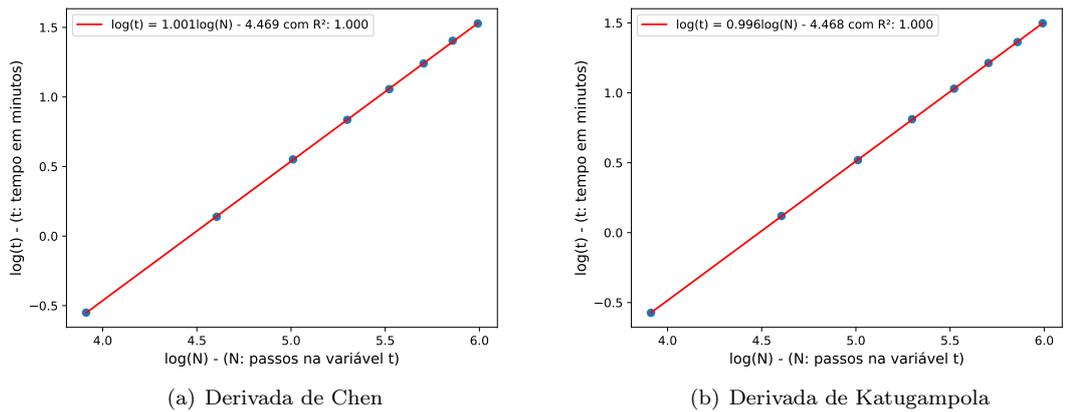


Figura 3: Gráfico log-log do tempo  $t$  em minutos em função do número de passos  $N = 500; 1000; 1500; 2000; 2500; 3000; 3500; 4000$ . Fonte: Elaborada pelos autores.

## 5 Considerações Finais

O trabalho aqui descrito consistiu em uma investigação sobre a análise da complexidade temporal em algoritmos numéricos aplicados à equação da difusão fracionária com seis diferentes escolhas para as derivadas fracionárias. A abordagem numérica via método das diferenças finitas mostrou-se eficiente, uma vez que a execução dos códigos foi eficaz ao resolver o problema dentro de um intervalo de tempo que se adequa às expectativas, apresentando um desempenho satisfatório.

A complexidade temporal foi obtida pelo coeficiente da reta de regressão ajustada aos pontos do gráfico *log-log* do número de passos  $N$  e o tempo demandado. Os resultados indicam que a escolha do operador fracionário impacta significativamente a complexidade dos algoritmos, quando alteramos de um operador local para um operador não local. Esse resultado era esperado, visto que, ao fazermos uso dos operadores não locais, para cada avanço na variável temporal é necessário

revisitar os dados de cada passo já calculado, o que não ocorre com as derivadas locais. Os códigos com derivadas locais apresentaram uma complexidade temporal  $O(n)$  e as não locais em torno de  $O(n^{1.3})$ , para as derivadas de Riemann-Liouville, Caputo e Atangana-Baleanu e  $O(n^{1.6})$  para a de Caputo-Fabrizio.

A fim de continuar este trabalho, visa-se investigar a quantidade de memória necessária para executar os algoritmos em diferentes cenários. Numa outra direção, investigar a complexidade temporal e de memória para equações em que a derivada fracionária é aplicada tanto à variável temporal como à(s) espacia(l)is.

## 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] R. J. LeVeque. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems**. SIAM, 2007. ISBN: 978-0-898716-29-0.
- [2] C. Li e F. Zeng. **Numerical Methods for Fractional Calculus**. Chapman & Hall/CRC Numerical Analysis and Scientific Computing Series. CRC Press, 2015. ISBN: 9781482253818.
- [3] R. Metzler e J. Klafter. “The random walk’s guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach”. Em: **Physics Reports** 339.1 (2000), pp. 1–77. ISSN: 0370-1573. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(00\)00070-3](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(00)00070-3).
- [4] J. P. de Negreiros, C. A. de Moura e C. O. de Faria. “Numerical algorithms considering a dimensional correction parameter on the fractional order diffusion equation”. Em: **C.Q.D. - Revista Eletrônica Paulista de Matemática** 22.2 (2022). URL: <https://sistemas.fc.unesp.br/ojs/index.php/revistacqd/article/view/324>.
- [5] J. P. de Negreiros. “Métodos de Diferenças Finitas para a Equação de Difusão Fracionária”. Tese de doutorado. UERJ, 2023.
- [6] S. Qureshi, N. A. Rangaig e D. Baleanu. “New numerical aspects of Caputo-Fabrizio fractional derivative operator”. Em: **Mathematics** 7.4 (2019), p. 374. ISSN: 2227-7390. DOI: 10.3390/math7040374.
- [7] S. Yadav, R. K. Pandey e A. K. Shukla. “Numerical approximations of Atangana–Baleanu Caputo derivative and its application”. Em: **Chaos, Solitons & Fractals** 118 (2019), pp. 58–64. ISSN: 0960-0779. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2018.11.009>.