

Mafalda Seco da Fonseca

Soluções numéricas para um problema de difusão de Knudsen

Dissertação de Mestrado em Matemática, Área de Especialização em
Análise Aplicada e Computação, orientada pela Professora Doutora Ercília
Cristina da Costa e Sousa e apresentada ao Departamento de Matemática
da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra.

Julho 2018



UNIVERSIDADE DE COIMBRA

Soluções numéricas para um problema de difusão de Knudsen

Mafalda Seco da Fonseca



UNIVERSIDADE DE COIMBRA

Mestrado em Matemática

Master in Mathematics

Dissertação de Mestrado | MSc Dissertation

Julho 2018

Agradecimentos

Apesar do processo de escrita de uma dissertação tenda a ser um pouco solitário, o contributo de algumas pessoas foi essencial para que tudo tivesse corrido pelo melhor.

À Professora Doutora Ercília Cristina da Costa e Sousa, orientadora desta dissertação, agradeço todo o apoio, disponibilidade e partilha de conhecimento. Reconheço sobretudo a especial atenção dada à minha escrita, pois provar um teorema parece-me mais simples que escrever frases completas.

Ao longo dos seis anos de aulas no Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra, tive a oportunidade de aprender com ótimos professores e a eles deixo também um sincero obrigada. Em particular ao Professor Doutor José Augusto Mendes Ferreira, que abriu as portas da matemática numérica na minha vida.

Ouve-se dizer “diz-me com quem andas e dir-te-ei quem és”, se algum dia se provar a veracidade desta afirmação sem dúvida que me julgarão das melhores pessoas do mundo, pois é dessas que me rodeio. Aos meus amigos, que não vou nomear evitando assim esquecer-me de alguém, desculpem as minhas ausências e muito obrigada por estarem sempre presentes.

Há vida para além do curso, pelo que não posso deixar de referir o Núcleo de Estudantes de Matemática da Associação Académica de Coimbra, que de diversas formas contribuiu no desenvolvimento desta dissertação. Não mencionar As FANS - Tuna Feminina da Universidade de Coimbra, seria tão grave como dividir por zero, às minhas meninas um particular agradecimento por encherem a minha vida de histórias de pura magia.

Este ano não teria sido o mesmo sem o meu irmão, e a ele agradeço simplesmente por ser quem é.

Por fim às pessoas que tornaram tudo isto possível, os meus pais, que me educaram numa casa cheia de números. Desde a roupa de bebé com contas de somar, às brincadeiras com calculadoras nos tempos mortos, a matemática foi desde cedo uma constante. Obrigada por terem feito tudo o que puderam, e não puderam, por mim, este é o resultado do trabalho por que tanto lutámos.

Resumo

Um processo de difusão é caracterizado pelo transporte de matéria devido ao movimento aleatório das moléculas. A difusão de Knudsen é um processo de difusão anômalo que ocorre em meios porosos, onde o transporte de matéria é efetuado maioritariamente pela colisão das moléculas com as paredes do meio. Nesta dissertação apresentamos um modelo que envolve difusão anômala. Este modelo é descrito por uma equação integro-diferencial que envolve um operador diferencial, que é uma derivada fracionária de Riemann-Liouville no tempo.

A solução analítica de equações que utilizam derivadas fracionárias não é fácil de obter analiticamente e, por isso, é necessário recorrer a métodos numéricos com vista a encontrar soluções aproximadas. Vamos apresentar essencialmente dois métodos numéricos, um explícito e um implícito no tempo. A derivada fracionária é aproximada pela denominada fórmula de Grünwald-Letnikov. Estes métodos numéricos só terão interesse se forem estáveis e convergirem para a solução exata, pelo que a sua convergência é analisada através da análise de Fourier e do método da energia.

Abstract

A diffusion process is characterized by the transport of matter as a result of random molecular motion. Knudsen diffusion is an anomalous diffusion process, which occurs in porous media, and where the transport of matter is mostly due to the collision of molecules with the inside walls.

In this thesis, we present a model that involves anomalous diffusion. It is described by an integro-differential equation, which involves the Riemann-Liouville fractional derivative in time. The analytical solution of equations that involve fractional derivatives are difficult to obtain and therefore, we need to use numerical methods in order to find approximate solutions. We will present two numerical methods, an implicit and an explicit in time. The fractional derivative is approximated by Grünwald-Letnikov formula. These numerical methods need to be stable and converge to the exact solution. Hence the convergence and stability of the numerical methods are studied through the Fourier analysis and the energy method.

Conteúdo

Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xiii
1 Introdução	1
1.1 Difusão e meios porosos	1
1.2 Difusão de Knudsen	2
2 Modelos de difusão e reação	5
2.1 Transformadas de Fourier e de Laplace	5
2.2 Densidades mesoscópicas	7
2.3 Distribuição exponencial e equação de difusão e reação	11
2.4 Distribuição da lei de potência e equação de difusão anômala e reação	13
3 Métodos numéricos	17
3.1 Método numérico para o problema de difusão clássica	17
3.2 Métodos numéricos para o problema de difusão anômala	18
3.2.1 Operador fracionário e a sua aproximação	19
3.2.2 Método de Euler explícito	24
3.2.3 Método de Euler implícito	25
4 Convergência de métodos numéricos	27
4.1 Noções Gerais	27
4.2 Convergência do método de Euler explícito	28
4.2.1 Estabilidade	29
4.2.2 Convergência	32
4.3 Convergência do método de Euler implícito	34
4.3.1 Estabilidade	35
4.3.2 Convergência	38
4.4 Resultados numéricos	38
4.4.1 Ordem de convergência do método explícito	39
4.4.2 Ordem de convergência do método implícito	43
4.4.3 Influência do parâmetro γ	46

5 Conclusão	49
Bibliografia	51

Lista de Figuras

1.1	Difusão molecular.	1
1.2	Meio poroso.	2
1.3	Difusão de Knudsen em meio poroso.	2
1.4	Lei dos cossenos da reflexão.	3
4.1	Solução numérica do problema (4.37) com $d_\gamma = 1$ e $r_\gamma = 0$. (a) $\gamma = 0.5$. (b) $\gamma = 1$. . .	46
4.2	Solução numérica do problema (4.37) com $d_\gamma = 1$ e $r_\gamma = 0$. (a) $t = 0.01$. (b) $t = 1$. . .	46
4.3	Solução numérica do problema (4.38) com $d_\gamma = 1$ e $r_\gamma = 1$. (a) $\gamma = 0.5$. (b) $\gamma = 1$. . .	47
4.4	Solução numérica do problema (4.39) com $d_\gamma = 1$ e $t = 0.1$. (a) $\gamma = 0.5$. (b) $\gamma = 1$. . .	48

Lista de Tabelas

4.1	Resultados relativos ao problema (4.33) em $T = 0.05$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$	40
4.2	Resultados relativos ao problema (4.34) em $T = 0.05$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$	41
4.3	Resultados relativos ao problema (4.35) em $T = 0.05$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$	42
4.4	Resultados relativos ao problema (4.36) em $T = 0.05$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$	43
4.5	Resultados relativos ao problema (4.33) em $T = 0.1$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$	44
4.6	Resultados relativos ao problema (4.34) em $T = 0.1$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$	45

Capítulo 1

Introdução

Neste capítulo faremos uma breve introdução à temática da difusão. Falaremos da difusão molecular e da difusão de Knudsen associada aos meios porosos. No âmbito da difusão de Knudsen, estudaremos um caso particular, em que a função densidade que descreve o movimento da partícula terá uma distribuição de lei de potência e é obtida através da lei dos cossenos da reflexão.

1.1 Difusão e meios porosos

A difusão é o fenómeno onde a matéria é transportada de uma região de um sistema para outra, surgindo como resultado do movimento aleatório das moléculas [7]. Este fenómeno é facilmente observado no nosso quotidiano, tendo como exemplo, a mistura de dois líquidos na ausência de correntes de convecção. Neste processo, as partículas tendem a movimentar-se da região com maior concentração para a região com menor concentração, até que seja atingido um estado de equilíbrio (ver Figura 1.1). Quando este é atingido, as moléculas movimentam-se segundo direções completamente aleatórias. Por exemplo, podemos calcular a média quadrática do deslocamento efetuado num intervalo de tempo, mas nunca a direção tomada num certo instante de tempo.

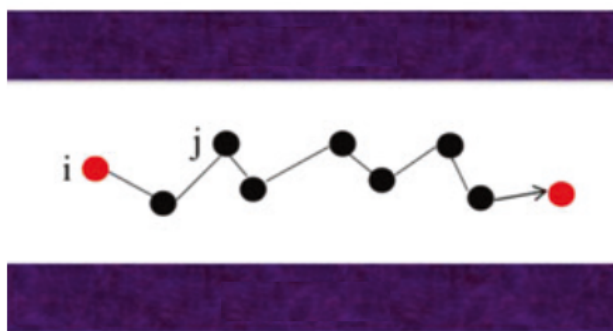


Fig. 1.1 Difusão molecular.

Tendo agora a noção geral do mecanismo do processo geral de difusão, particularizemos o processo de difusão em meios porosos. Começemos então por estabelecer o que se considera por um meio poroso.

Um meio poroso, ou material poroso, é composto por matéria heterogénia (ver Figura 1.2). Estes materiais estão divididos em duas partes, sendo uma parte composta por um material sólido, a chamada *matriz sólida*, e a outra por um material não sólido e que pode ser preenchido por outros materiais (sejam eles líquidos ou gasosos), denominado por *espaço poroso* [1].

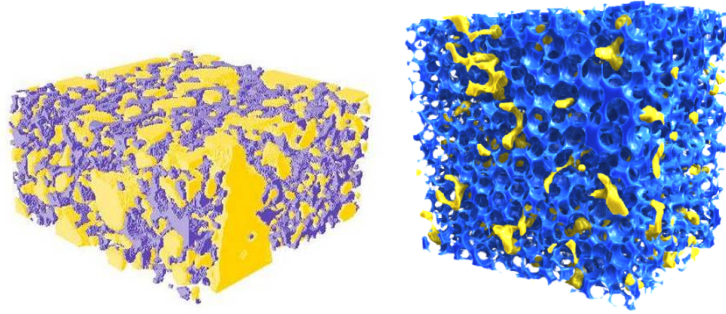


Fig. 1.2 Meio poroso.

De um modo geral, a matriz sólida está bem distribuída ao longo do material. Os poros do espaço poroso são consideravelmente estreitos e estão, na maioria dos casos, interligados, sendo estes chamados de *espaço de poro efetivo*. Quando algum poro não está ligado a qualquer outro, podemos considerá-lo como fazendo parte da matriz sólida.

Podemos de seguida questionar de que forma as características destes materiais contribuem para alterar o fenómeno da difusão.

A difusão pode ser dividida em difusão molecular e difusão de Knudsen. A difusão molecular, também designada por difusão normal ou contínua, refere-se ao movimento relativo das diferentes partículas, devendo-se este ao choque das partículas entre si. A difusão de Knudsen assume que as partículas chocam com as paredes do meio, como discutiremos mais detalhadamente na secção seguinte.

1.2 Difusão de Knudsen

Na difusão de Knudsen o transporte de matéria é dominado pelas colisões das moléculas com as paredes do meio poroso [12]. O movimento das moléculas é realizado ao longo de uma sequência de segmentos de reta que ligam uma parede à outra, como se pode observar na Figura 1.3.



Fig. 1.3 Difusão de Knudsen em meio poroso.

Vamos analisar detalhadamente um caso particular. Consideremos duas paredes paralelas infinitas que distam l , uma partícula que se desloca com velocidade constante entre estas e que quando atinge uma das paredes é refletida. A direção da reflexão é determinada pelo ângulo θ , que se forma entre a normal à parede e o vetor velocidade da partícula. Na Figura 1.4 encontram-se ilustradas as considerações feitas anteriormente.

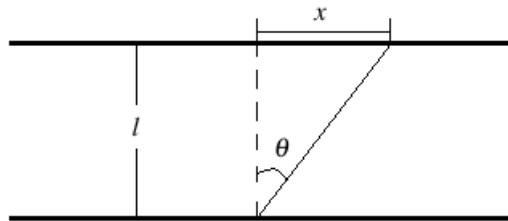


Fig. 1.4 Lei dos cossenos da reflexão.

A lei dos cossenos ([5], [8], [15]) diz-nos que a densidade de probabilidade com que uma molécula deixa a linha na direção formada por θ é dada por

$$f_{\Theta}(\theta) = \frac{1}{2} \cos(\theta).$$

A relação de x e θ é dada por $x = l \tan(\theta)$, como ilustrado na Figura 1.4.

Vamos determinar a função densidade de probabilidade associada a x , a partir da sua relação com θ e do resultado que se segue.

Teorema 1 ([11]). *Sejam X e Y duas variáveis aleatórias tais que $Y = \phi(X)$, onde ϕ e ϕ^{-1} são contínuas, bem como as suas derivadas.*

Então

$$f_Y(y) = f_X(\phi^{-1}(y)) (\phi^{-1}(y))',$$

onde $f_Y(y)$ é a função densidade associada à variável Y e $f_X(x)$ a função densidade associada à variável X .

Usando o teorema anterior, temos que

$$\rho(x) \frac{dx}{d\theta} = \frac{1}{2} \cos(\theta),$$

onde $\rho(x)$ denota $f_X(x)$.

Como $x = l \tan(\theta)$ temos que $\frac{dx}{d\theta} = l \sec^2(\theta)$, ou seja,

$$\rho(x)(l \sec^2(\theta)) = \frac{1}{2} \cos(\theta),$$

pelo que

$$\rho(x) = \frac{1}{2l} \cos^3(\theta).$$

Por forma a escrever $\rho(x)$ em função de x , vamos substituir θ em função de x . Temos sucessivamente

$$\rho(x) = \frac{1}{2l} \left(\frac{1}{\cos^2(\theta)} \right)^{-\frac{3}{2}} = \frac{1}{2l} (1 + \tan^2(\theta))^{-\frac{3}{2}} = \frac{1}{2l} \left(1 + \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right)^{-\frac{3}{2}}.$$

Estamos perante a distribuição de uma lei de potência. Denominam-se funções potência as funções da forma $f(x) = Cx^{-\alpha}$, com C uma constante de normalização, e α o expoente da função potência [19].

Apresentámos um caso particular como motivação para a introdução do caso mais geral em que as funções densidade têm a forma

$$\rho(x) = a \left(1 + \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right)^{-\frac{\mu}{2}}, \quad \mu > 2.$$

Estas funções comportam-se assintoticamente como $\rho(x) \sim x^{-\mu}$ quando $x \rightarrow \infty$.

Consideremos que estamos perante um modelo de saltos aleatórios, onde o tempo de voo da molécula após o choque com a parede é menor do que o tempo de absorção da molécula quando choca com a mesma. Neste caso, a função densidade $\Phi(x, t)$, que nos dá a probabilidade da molécula percorrer um passo de comprimento x no intervalo de tempo $[t, t + dt]$, é definida por

$$\Phi(x, t) = \psi(t)\rho(x),$$

onde $\rho(x)$ é a função densidade descrita anteriormente e $\psi(t)$ é a função densidade do tempo de absorção da molécula ([10]).

No capítulo que se segue, utilizaremos esta função densidade Φ , ou mais especificamente as funções ψ e ρ , para deduzirmos modelos de equações diferenciais associadas a dois processos difusivos distintos.

Capítulo 2

Modelos de difusão e reação

Neste capítulo, introduziremos duas densidades mesoscópicas que descrevem as reações que ocorrem entre o nível microscópico e o macroscópico, ou seja, as reações entre moléculas de escala inferior à molecular e superior à micrométrica. Com base nessas funções densidade, e recorrendo às transformadas de Laplace e de Fourier, obteremos uma equação integro-diferencial que nos permitirá deduzir os modelos de difusão e reação clássica e anómala. Posteriormente veremos de que modo é que a distribuição exponencial e a distribuição de lei de potência se relacionam com a equação de difusão e reação clássica, e a equação de difusão anómala e reação, respetivamente.

2.1 Transformadas de Fourier e de Laplace

Nas secções que se seguem, usaremos transformadas de Fourier e de Laplace. Para tal vamos introduzir as suas definições e algumas propriedades que serão necessárias, que podem ser encontradas em [3] e [9].

Definição 1. Para toda a função $\rho \in L^1(\mathbb{R})$, a transformada de Fourier, $\mathcal{F}\{\rho\}$, de ρ é definida por

$$\mathcal{F}\{\rho\}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)e^{ikx} dx, \quad k \in \mathbb{R}.$$

Definição 2. Para toda a função $\psi \in L^1(\mathbb{R}^+)$, a transformada de Laplace, $\mathcal{L}\{\psi\}$, de ψ é definida por

$$\mathcal{L}\{\psi\}(p) = \int_0^{+\infty} \psi(t)e^{-pt} dt, \quad p > 0.$$

Vamos definir dois produtos de convolução, que estão associados à transformada de Fourier e de Laplace, respetivamente.

Definição 3. Sejam $f, g \in L^1(\mathbb{R})$. O produto de convolução $f *_F g$ é definido por

$$(f *_F g)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x-z)g(z)dz.$$

Definição 4. Sejam $f, g \in L^1(\mathbb{R}^+)$. O produto de convolução $f *_L g$ é definido por

$$(f *_L g)(t) = \int_0^t f(t-\tau)g(\tau)d\tau.$$

Introduzidas as definições anteriores, estamos em condições de apresentar as seguintes propriedades associadas aos produtos de convolução.

Proposição 1. Sejam $f, g \in L^1(\mathbb{R})$. Então

$$\mathcal{F}\{f *_F g\}(k) = \mathcal{F}\{f\}(k) \cdot \mathcal{F}\{g\}(k).$$

Demonstração. Da definição de transformada de Fourier, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{f *_F g\}(k) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixk} (f *_F g)(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixk} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} f(x-z)g(z) dz \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{izk} g(z) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(x-z)k} f(x-z) dx \right) dz \\ &= \mathcal{F}\{f\}(k) \cdot \mathcal{F}\{g\}(k). \end{aligned}$$

□

Proposição 2. Sejam $f, g \in L^1(\mathbb{R}^+)$. Então

$$\mathcal{L}\{f *_L g\}(p) = \mathcal{L}\{f\}(p) \cdot \mathcal{L}\{g\}(p).$$

Demonstração. Atendendo à definição de transformada de Laplace, vem

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{f *_L g\}(p) &= \int_0^{+\infty} e^{-pt} (f *_L g)(t) dt \\ &= \int_0^{+\infty} e^{-pt} \left(\int_0^t f(t-\tau)g(\tau) d\tau \right) dt \\ &= \int_0^{+\infty} \left(g(\tau) \int_{\tau}^{+\infty} e^{-pt} f(t-\tau) dt \right) d\tau. \end{aligned}$$

Fazendo a mudança de variável $t - \tau = u$ ficamos com

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{f *_L g\}(p) &= \int_0^{+\infty} g(\tau) \left(\int_0^{+\infty} e^{-(u+\tau)p} f(u) du \right) d\tau \\ &= \int_0^{+\infty} g(\tau) e^{-\tau p} \left(\int_0^{+\infty} e^{-up} f(u) du \right) d\tau \\ &= \mathcal{L}\{f\}(p) \cdot \mathcal{L}\{g\}(p). \end{aligned}$$

□

De seguida, torna-se ainda pertinente a apresentação da seguinte propriedade da derivada da transformada de Laplace.

Proposição 3. *Sejam $f \in L^1(\mathbb{R}^+)$. Então,*

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial f}{\partial t}\right\}(p) = s\mathcal{L}\{f\}(p) - f(0).$$

Demonstração. Temos

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left\{\frac{\partial f}{\partial t}\right\}(p) &= \int_0^{+\infty} \frac{\partial f}{\partial t}(t)e^{-pt} dt \\ &= e^{-pt}f(t)\Big|_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} f(t)(-p)e^{-pt} dt \\ &= p\mathcal{L}\{f\}(p) - f(0).\end{aligned}$$

□

Por fim definamos as transformadas inversas de Fourier e de Laplace, respetivamente.

Definição 5. *Para toda a função $\rho \in L^1(\mathbb{R})$, a transformada de Fourier inversa, $\mathcal{F}^{-1}\{\rho\}$, de ρ é definida por*

$$\mathcal{F}^{-1}\{\rho\}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)e^{-ikx} dx, \quad k \in \mathbb{R}.$$

Definição 6. *A transformada de Laplace inversa, $\mathcal{L}^{-1}\{\psi\}$, de ψ é definida por*

$$\mathcal{L}^{-1}\{\psi\}(p) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} e^{zp} \psi(z) dz,$$

onde α é maior que a parte real de qualquer singularidade de ψ .

2.2 Densidades mesoscópicas

Vamos apresentar o processo de transporte que ocorre no meio poroso num regime de Knudsen, como apresentado em [10]. Introduzimos por isso, as densidades mesoscópicas $J(x,t)$ e $n(x,t)$, cujas equações descrevem as reações que ocorrem entre o nível microscópico e o macroscópico.

Denotemos por $n_0(x)$ a densidade inicial de partículas no ponto x e por $\psi(t)$ a densidade do tempo de absorção.

A função $J(x,t)$ é a função densidade das moléculas que chegam ao ponto x , no instante t , sabendo que chegaram ao ponto z no instante τ (com $z < x$ e $\tau < t$). Seja α a probabilidade com que as moléculas são aniquiladas pela parede porosa e $1 - \alpha$ a probabilidade com que as moléculas embatem na parede e seguem o seu movimento. A função $J(x,t)$ é definida por

$$J(x,t) = (1 - \alpha) \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} J(x-z, t-\tau) \psi(\tau) \rho(z) dz d\tau + (1 - \alpha) \psi(t) \int_{-\infty}^{+\infty} n_0(x-z) \rho(z) dz. \quad (2.1)$$

Seja $\Psi(t)$ a função probabilidade da sobrevivência da molécula dada por

$$\Psi(t) = \int_t^{+\infty} \psi(\tau) d\tau,$$

onde a sua transformada de Laplace é definida do seguinte modo

$$\mathcal{L}\{\Psi\}(p) = \frac{1 - \mathcal{L}\{\psi\}(p)}{p}. \quad (2.2)$$

Podemos definir $n(x, t)$ a função que nos dá a densidade de partículas no ponto x , no instante t , do seguinte modo [10]

$$n(x, t) = (1 - \alpha) \int_0^t J(x, t - \tau) \Psi(\tau) d\tau + (1 - \alpha) n_0(x) \Psi(t). \quad (2.3)$$

O teorema que se segue dá-nos uma equação integro-diferencial para $n(x, t)$.

Teorema 2. *Sejam $J(x, t)$ e $n(x, t)$ dados por (2.1) e (2.3) respetivamente.*

Então, temos

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \int_0^t K(t - \tau) \int_{-\infty}^{+\infty} (n(x - z, t - \tau) - n(x, \tau)) \rho(z) dz d\tau - \frac{\alpha}{1 - \alpha} \int_0^t R(t - \tau) n(\tau) d\tau, \quad (2.4)$$

onde K e R são funções de t , tais que as suas transformadas de Laplace são respetivamente dadas por

$$\mathcal{L}\{K\}(p) = \frac{p \mathcal{L}\{\psi\}(p)}{1 - \mathcal{L}\{\psi\}(p)} \quad e \quad \mathcal{L}\{R\}(p) = \frac{p}{1 - \mathcal{L}\{\psi\}(p)}. \quad (2.5)$$

Demonstração. Podemos reescrever (2.1) em função dos produtos de convolução $f *_F g$ e $f *_L g$ da seguinte forma

$$J(x, t) = (1 - \alpha) \left(\left(J *_F \rho \right) (x) *_L \psi \right) (t) + (1 - \alpha) \psi(t) \left(n_0 *_F \rho \right) (x).$$

Aplicando a transformada de Laplace, vem

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{J\}(x, p) &= (1 - \alpha) \mathcal{L} \left\{ \left(J *_F \rho \right) (x) *_L \psi \right\} (p) + (1 - \alpha) \mathcal{L}\{\psi\}(p) \left(n_0 *_F \rho \right) (x) \\ &= (1 - \alpha) \mathcal{L} \left\{ \left(J *_F \rho \right) (x) \right\} (p) \mathcal{L}\{\psi\}(p) + (1 - \alpha) \mathcal{L}\{\psi\}(p) \left(n_0 *_F \rho \right) (x) \\ &= (1 - \alpha) \left(\mathcal{L}\{J\}(p) *_F \rho \right) (x) \mathcal{L}\{\psi\}(p) + (1 - \alpha) \mathcal{L}\{\psi\}(p) \left(n_0 *_F \rho \right) (x). \end{aligned}$$

Agora aplicando a transformada de Fourier, tem-se

$$\begin{aligned} \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{J\}(k, p) &= (1 - \alpha) \mathcal{F} \left\{ \mathcal{L}\{J\}(p) *_F \rho \right\} (k) \mathcal{L}\{\psi\}(p) + (1 - \alpha) \mathcal{L}\{\psi\}(p) \mathcal{F} \left\{ n_0 *_F \rho \right\} (k) \\ &= (1 - \alpha) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{J\}(k, p) \mathcal{F}\{\rho\}(k) \mathcal{L}\{\psi\}(p) + \\ &\quad + (1 - \alpha) \mathcal{L}\{\psi\}(p) \mathcal{F}\{n_0\}(k) \mathcal{F}\{\rho\}(k) \\ &= (1 - \alpha) \mathcal{L}\{\psi\}(p) \mathcal{F}\{\rho\}(k) \left(\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{J\}(k, p) + \mathcal{F}\{n_0\}(k) \right). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Vamos agora reescrever (2.3) usando o produto de convolução de $f *_L g$. Temos

$$n(x, t) = (1 - \alpha) \left(J(x) *_L \Psi \right) (t) + (1 - \alpha) n_0(p) \Psi(t).$$

Aplicando a transformada de Laplace vem

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{n\}(x, p) &= \mathcal{L}\left\{J(x) *_L \Psi\right\}(p) + (1 - \alpha) n_0(x) \mathcal{L}\{\Psi\}(p) \\ &= (1 - \alpha) \mathcal{L}\{J\}(x, p) \mathcal{L}\{\Psi\}(p) + (1 - \alpha) n_0(x) \mathcal{L}\{\Psi\}(p). \end{aligned}$$

Usando a transformada de Fourier, obtemos

$$\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) = (1 - \alpha) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{J\}(k, p) \mathcal{L}\{\Psi\}(p) + (1 - \alpha) \mathcal{F}\{n_0\}(k) \mathcal{L}\{\Psi\}(p).$$

Substituindo $\mathcal{L}\{\Psi\}(p)$ por (2.2) temos

$$\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) = \frac{(1 - \alpha)(1 - \mathcal{L}\{\psi\}(p))}{p} \left(\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{J\}(k, p) + \mathcal{F}\{n_0\}(k) \right). \quad (2.7)$$

Por (2.6) obtemos que

$$\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{J\}(k, p) = \frac{(1 - \alpha) \mathcal{L}\{\psi\}(p) \mathcal{F}\{\rho\}(k) \mathcal{F}\{n_0\}(k)}{1 - (1 - \alpha) \mathcal{L}\{\psi\}(p) \mathcal{F}\{\rho\}(k)}.$$

Substituindo em (2.7), tem-se

$$\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) = \frac{(1 - \alpha)(1 - \mathcal{L}\{\psi\}(p))}{p} \frac{\mathcal{F}\{n_0\}(k)}{1 - (1 - \alpha) \mathcal{L}\{\psi\}(p) \mathcal{F}\{\rho\}(k)}.$$

Rearranjando a equação anterior vem

$$\begin{aligned} p \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) - p(1 - \alpha) \mathcal{L}\{\psi\}(p) \mathcal{F}\{\rho\}(k) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) &= \\ = (1 - \alpha)(1 - \mathcal{L}\{\psi\}(p)) \mathcal{F}\{n_0\}(k), \end{aligned}$$

pelo que

$$\frac{p \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p)}{(1 - \alpha)(1 - \mathcal{L}\{\psi\}(p))} - \frac{p \mathcal{L}\{\psi\} \mathcal{F}\{\rho\}(k) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p)}{1 - \mathcal{L}\{\psi\}(p)} = \mathcal{F}\{n_0\}(k).$$

Considerando as definições de $\mathcal{L}\{K\}(p)$ e $\mathcal{L}\{R\}(p)$ em (2.5) obtemos

$$\frac{1}{(1 - \alpha)} \mathcal{L}\{R\}(p) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) - \mathcal{L}\{K\}(p) \mathcal{F}\{\rho\}(k) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) = \mathcal{F}\{n_0\}(k).$$

Somando e subtraindo, no segundo membro, o termo $\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) \mathcal{L}\{K\}(p)$ vem

$$\begin{aligned} -\mathcal{F}\{n_0\}(k) &= \mathcal{L}\{K\}(p) (\mathcal{F}\{\rho\}(k) - 1) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) + \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) \mathcal{L}\{K\}(p) - \\ &\quad - \frac{1}{(1 - \alpha)} \mathcal{L}\{R\}(p) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p). \end{aligned}$$

Somando o termo $p\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p)$ segue-se que

$$p\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) - \mathcal{F}\{n_0\}(k) = \mathcal{L}\{K\}(p) (\mathcal{F}\{\rho\}(k) - 1) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) + \\ + \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) (\mathcal{L}\{K\}(p) + p) - \frac{1}{(1-\alpha)} \mathcal{L}\{R\}(p) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p).$$

Atendendo a (2.5), obtemos finalmente

$$p\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) - \mathcal{F}\{n_0\}(k) = \mathcal{L}\{K\}(p) (\mathcal{F}\{\rho\}(k) - 1) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) - \\ - \frac{\alpha}{(1-\alpha)} \mathcal{L}\{R\}(p) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p). \quad (2.8)$$

O próximo passo será aplicar a transformada inversa de Fourier e de Laplace em (2.8). Para o primeiro termo à direita de (2.8) temos

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{L}\{K\}(p) (\mathcal{F}\{\rho\}(k) - 1) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) \right\} (k) \right\} (p) = \\ = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \mathcal{L}\{K\}(p) \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{F}\{\rho\}(k) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) - \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) \right\} (k) \right\} (p) \\ = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \mathcal{L}\{K\}(p) \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{F} \left\{ \left(\rho *_{\mathcal{F}} \mathcal{L}\{n\}(p) \right) (x) - \mathcal{L}\{n\}(x, p) \right\} (k) \right\} (p) \right\} (p) \\ = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \mathcal{L}\{K\}(p) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L}\{n\}(x-z, p) \rho(z) dz - \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L}\{n\}(x, p) dz \right) \right\} (p).$$

Fazendo

$$\mathcal{L}\{I\}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L}\{n\}(x-z, p) \rho(z) dz \quad \text{e} \quad \mathcal{L}\{H\}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L}\{n\}(x, p) dz,$$

podemos escrever

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{L}\{K\}(p) (\mathcal{F}\{\rho\}(k) - 1) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) \right\} (k) \right\} (p) = \\ = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \mathcal{L} \left\{ \left(K *_{\mathcal{L}} I \right) (t) - \left(K *_{\mathcal{L}} H \right) (t) \right\} (p) \right\} (p) \\ = \int_0^t K(\tau) \int_{-\infty}^{+\infty} n(x-z, t-\tau) \rho(z) dz d\tau - \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} K(t-\tau) n(x, \tau) dz d\tau.$$

Como $\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(z) dz = 1$ vem

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{L}\{K\}(p) (\mathcal{F}\{\rho\}(k) - 1) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) \right\} (k) \right\} (p) = \\ = \int_0^t K(t-\tau) \int_{-\infty}^{+\infty} (n(x-z, t-\tau) - n(x, \tau)) \rho(z) dz d\tau.$$

De modo análogo se obtém

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ -\frac{\alpha}{1-\alpha} \mathcal{L}\{R\}(p) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) \right\} (p) = -\frac{\alpha}{1-\alpha} \int_0^t R(t-\tau) n(\tau) d\tau.$$

Por fim, diretamente da Propriedade 3 vem que

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{p\mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k,p) - \mathcal{F}\{n_0\}(k)\right\}(p) = \frac{\partial n}{\partial t}.$$

Chegamos assim à equação pretendida

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \int_0^t K(t-\tau) \int_{-\infty}^{+\infty} (n(x-z, t-\tau) - n(x, \tau)) \rho(z) dz d\tau - \frac{\alpha}{1-\alpha} \int_0^t R(t-\tau)n(\tau) d\tau.$$

□

2.3 Distribuição exponencial e equação de difusão e reação

Nesta secção iremos considerar uma distribuição exponencial para $\psi(t)$ de modo a obtermos uma equação com derivadas parciais que nos é familiar.

No teorema enunciado a seguir usaremos a função delta de Dirac, $\delta(x)$, onde assumimos que $\mathcal{L}\{\delta\}(p) = 1$.

Vamos então deduzir a equação de difusão e reação associada ao regime assintótico $t \rightarrow +\infty$, ou seja, quando o tempo de absorção, τ_w , é muito menor que t .

Teorema 3. *Seja $n(x,t)$ a função que verifica (2.4) e seja $\psi(t)$ definida por*

$$\psi(t) = \frac{1}{\tau_w} e\left(-\frac{t}{\tau_w}\right), \quad (2.9)$$

onde τ_w é o tempo de absorção.

Então $n(x,t)$ verifica

$$\frac{\partial n}{\partial t} = d_\gamma \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - r_\gamma n,$$

onde d_γ e r_γ são constantes reais positivas.

Demonstração. Sabendo que temos (2.9), vamos calcular as transformadas de Laplace de $\psi(t)$ e as de $K(t)$ e $R(t)$ cujas transformadas estão definidas em (2.5)

Temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{\psi\}(p) &= \int_0^{+\infty} \frac{1}{\tau_w} e^{-(\frac{1}{\tau_w}+p)t} dt = \frac{1}{1+p\tau_w}, \\ \mathcal{L}\{K\}(p) &= \frac{p \times \frac{1}{1+p\tau}}{1 - \frac{1}{1+p\tau_w}} = \frac{p(1+p\tau_w)}{(1+p\tau_w)(p\tau_w)} = \frac{1}{\tau_w}, \\ \mathcal{L}\{R\}(p) &= \frac{p}{1 - \frac{1}{1+p\tau_w}} = \frac{1+p\tau_w}{\tau_w}. \end{aligned}$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace obtemos

$$\begin{aligned} K(t) &= \mathcal{L}^{-1}\left\{\mathcal{L}\{K\}(p)\right\}(p) \\ &= \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{\tau_w}\right\}(p) = \frac{1}{\tau_w} \mathcal{L}^{-1}\{1\}(p). \end{aligned}$$

Como $\mathcal{L}\{\delta\}(p) = 1$

$$K(t) = \frac{1}{\tau_w} \delta(t).$$

Como $\tau_w \ll t$ podemos aproximar $\mathcal{L}\{R\}(p)$ a $\frac{1}{\tau_w}$.

Assim temos

$$R(t) = K(t) = \frac{1}{\tau_w} \delta(t).$$

Substituindo em (2.4) obtemos

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{\tau_w} \int_{-\infty}^{+\infty} (n(x-z, t) - n(x, t)) \rho(z) dz - \frac{\alpha}{\tau_w(1-\alpha)} n(x, t). \quad (2.10)$$

Considerando o desenvolvimento de $n(x-z, t)$ em série de Taylor até à segunda ordem em torno de z , temos

$$n(x-z, t) = n(x, t) - z \frac{\partial n}{\partial x}(x, t) + \frac{1}{2} z^2 \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}(x, t) + R_1(x), \quad (2.11)$$

onde $R_1(x)$ é o resto de terceira ordem que verifica

$$\lim_{x \rightarrow z} \frac{R_1(x)}{(x-z)^2} = 0.$$

Aplicando (2.11) em (2.10), e ignorando o resto $R_1(x)$, podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{\tau_w} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-z \frac{\partial n}{\partial x}(x, t) + \frac{1}{2} z^2 \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}(x, t) \right) \rho(z) dz - \frac{\alpha}{\tau_w(1-\alpha)} n(x, t) \\ &= \frac{1}{\tau_w} \left(-\frac{\partial n}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} z \rho(z) dz + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} z^2 \rho(z) dz \right) - \frac{\alpha}{\tau_w(1-\alpha)} n. \end{aligned}$$

Como estamos perante uma lei de probabilidade normalizada

$$\int_{-\infty}^{+\infty} z \rho(z) dz = 0.$$

Denotando ainda

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} z^2 \rho(z) dz,$$

obtemos

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2\tau_w} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{\alpha}{\tau_w(1-\alpha)} n.$$

Assumindo

$$d_\gamma = \frac{\sigma^2}{2\tau_w} \quad \text{e} \quad r_\gamma = \frac{\alpha}{\tau_w(1-\alpha)},$$

estabelecemos

$$\frac{\partial n}{\partial t} = d_\gamma \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - r_\gamma n.$$

□

2.4 Distribuição da lei de potência e equação de difusão anômala e reação

Nesta secção vamos considerar que $\psi(t)$ tem um comportamento assintótico semelhante a uma distribuição de lei de potência de modo a encontrar uma equação que descreva a difusão anômala e reação. Analogamente à secção anterior precisamos de calcular a transformada de Laplace de $\psi(t)$.

Comecemos assim por determinar a transformada de Laplace de uma lei de potência. Seja $0 < \alpha < 1$, K uma qualquer constante positiva e a função $\chi(t)$ dada por

$$\chi(t) \approx Kt^{-1-\alpha}.$$

A transformada de Laplace verifica ([13], [18])

$$\mathcal{L}\{\chi\}(p) = \int_0^{\infty} \chi(t)e^{-pt} dt \approx \lambda(p) + Kp^{\alpha}v(p), \quad t \rightarrow \infty, \quad (2.12)$$

onde

$$\lambda(p) = \int_0^T \chi(t)e^{-pt} dt \quad \text{e} \quad v(p) = \int_{pT}^{+\infty} x^{-1-\alpha}e^{-x}dx,$$

com $t \geq T$, sendo T uma constante positiva.

Integrando, por partes, duas vezes a expressão de $v(p)$ obtemos

$$v(p) = \frac{e^{-pT}}{\alpha(pT)^{\alpha}} - \frac{1}{\alpha(1-\alpha)} \left(-e^{-pT}(pT)^{1-\alpha} + \int_{pT}^{+\infty} x^{1-\alpha}e^{-x}dx \right).$$

Multiplicando ambos os membros por p^{α} , segue-se que

$$p^{\alpha}v(p) = \frac{e^{-pT}}{\alpha T^{\alpha}} - \frac{1}{\alpha(1-\alpha)} \left(-e^{-pT}pT^{1-\alpha} + \int_{pT}^{+\infty} x^{1-\alpha}e^{-x}dx \right). \quad (2.13)$$

Seja $\Gamma(x)$ a função Gamma definida por

$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} e^{-t}t^{x-1}dt, \quad t \in \mathbb{R}^+, x \in \mathbb{R}. \quad (2.14)$$

Fazendo desenvolvimento de Taylor (até à primeira ordem) de e^{-pT} em (2.13), em torno de p , obtemos

$$p^{\alpha}v(p) = \frac{1-pT}{\alpha T^{\alpha}} + \frac{pT}{\alpha(1-\alpha)T^{\alpha}} - \frac{p^{\alpha}\Gamma(1-\alpha)}{\alpha} + \mathcal{O}(p^2).$$

Usando novamente o desenvolvimento de Taylor, mas agora em $\lambda(p)$, para p suficientemente pequeno podemos escrever

$$\lambda(p) = \int_0^T \chi(t)dt - p \int_0^T t\chi(t)dt + \mathcal{O}(p^2).$$

Requerendo que $\mathcal{L}\{\chi\}(0) = 1$ podemos afirmar, por (2.12) que

$$\int_0^T \chi(t) dt = 1.$$

Substituindo em (2.12) temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{\chi\}(p) &= \lambda(p) + Kp^\alpha v(p) \\ &= 1 - \frac{K\Gamma(1-\alpha)}{\alpha} p^\alpha + p \left(\frac{KT^{1-\alpha}}{1-\alpha} - \int_0^T t\chi(t) \right) + \mathcal{O}(p^2). \end{aligned}$$

Por fim observamos que $\mathcal{L}\{\chi\}(p)$ tem o seguinte comportamento assintótico para $0 < \alpha < 1$ ([10], [13], [18])

$$\mathcal{L}\{\chi\}(p) \approx 1 - \frac{K\Gamma(1-\alpha)}{\alpha} p^\alpha. \quad (2.15)$$

Definamos agora um operador integro-diferencial que será necessário no que se segue.

Definição 7. A derivada fracionária de Riemann-Liouville de ordem α , ${}_a D_t^\alpha$, com $m-1 < \alpha < m$, é dada por

$${}_a D_t^\alpha n(x,t) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{\partial^m}{\partial t^m} \int_a^t n(x,\xi) (t-\xi)^{m-\alpha-1} d\xi, \quad (2.16)$$

onde $\Gamma(x)$ é a função Gamma definida em (2.14).

O teorema seguinte dá-nos a equação integro-diferencial para $n(x,t)$ que descreve o tipo de difusão anômala e reação [10].

Teorema 4. Seja $n(x,t)$ a função que verifica (2.4) e seja $\psi(t)$ uma função tal que

$$\psi(t) \approx \left(\frac{\tau_p}{t} \right)^{1+\gamma}, \quad t \rightarrow +\infty,$$

onde τ_p é a escala temporal do salto e $0 < \gamma < 1$.

Então, $n(x,t)$ verifica

$$\frac{\partial n}{\partial t} = d_\gamma D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - r_\gamma D_t^{1-\gamma} n,$$

com d_γ e r_γ constantes reais positivas que dependem de γ .

Demonstração. A transformada de Laplace de $\psi(t)$, atendendo a (2.15), é dada por

$$\mathcal{L}\{\psi\}(p) \approx 1 - C_\gamma (p\tau_p)^\gamma,$$

com C_γ uma constante real positiva que depende de γ .

Então, temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{R\}(p) &= \frac{p}{1 - 1 + C_\gamma (p\tau_p)^\gamma} = \frac{p^{1-\gamma}}{C_\gamma \tau_p^\gamma}, \\ \mathcal{L}\{K\}(p) &= \frac{p(1 - C_\gamma (p\tau_p)^\gamma)}{1 - 1 + C_\gamma (p\tau_p)^\gamma} = \frac{p^{1-\gamma}}{C_\gamma \tau_p^\gamma} (1 - C_\gamma (p\tau_p)^\gamma). \end{aligned}$$

Para p suficientemente pequeno, podemos considerar

$$\mathcal{L}\{K\}(p) \approx \frac{p^{1-\gamma}}{C_\gamma \tau_p^\gamma}.$$

Substituindo $\mathcal{L}\{\psi\}(p)$, $\mathcal{L}\{K\}(p)$ e $\mathcal{L}\{R\}(p)$ em (2.8) obtemos

$$\begin{aligned} p \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) - \mathcal{F}\{n_0\}(k) &= \frac{p^{1-\gamma}}{c_\gamma \tau_p^\gamma} (\mathcal{F}\{\rho\}(k) - 1) \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p) - \\ &- \frac{\alpha}{(1-\alpha)} \frac{p^{1-\gamma}}{c_\gamma \tau_p^\gamma} \mathcal{F} \circ \mathcal{L}\{n\}(k, p). \end{aligned}$$

Utilizando os mesmos argumentos usados na prova do Teorema 3, conseguimos, através das transformadas inversas de Fourier e Laplace, chegar à seguinte equação

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{C_\gamma \tau_p^\gamma} D_t^{1-\gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} (n(x-z, t) - n(x, t)) \rho(z) dz - \frac{\alpha}{(1-\alpha) C_\gamma \tau_p^\gamma} D_t^{1-\gamma} n.$$

Utilizando o desenvolvimento em séries de Taylor definido em (2.11), chegamos à equação

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2C_\gamma \tau_p^\gamma} D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{\alpha}{(1-\alpha) C_\gamma \tau_p^\gamma} D_t^{1-\gamma} n.$$

Consideremos agora

$$d_\gamma = \frac{\sigma^2}{2C_\gamma \tau_p^\gamma} \quad \text{e} \quad r_\gamma = \frac{\alpha}{(1-\alpha) C_\gamma \tau_p^\gamma},$$

podemos estabelecer

$$\frac{\partial n}{\partial t} = d_\gamma D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - r_\gamma D_t^{1-\gamma} n.$$

□

Capítulo 3

Métodos numéricos

Neste capítulo apresentaremos um método numérico para a equação de difusão e reação clássica e dois métodos numéricos para a equação de difusão anómala e reação que considerámos. Estes últimos diferem no método de diferenças finitas, mais concretamente na sua discretização no tempo, que darão origem a um método de Euler explícito e a outro implícito. Estes métodos numéricos incluem a discretização para o operador integro-diferencial apresentado anteriormente.

3.1 Método numérico para o problema de difusão clássica

Consideremos o problema de difusão reação constituído pela equação diferencial

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = d_\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) - r_\gamma u(x,t), \quad (x,t) \in (a,b) \times (0,T], \quad (3.1)$$

onde d_γ e r_γ são constantes reais positivas. Consideremos ainda a condição inicial dada por

$$u(x,0) = \phi(x), \quad x \in (a,b), \quad (3.2)$$

e as condições de fronteira

$$u(a,t) = u_a(t), \quad u(b,t) = u_b(t), \quad t \in (0,T]. \quad (3.3)$$

A solução analítica deste tipo de problemas é mais fácil de obter do que a solução de alguns casos de problemas de difusão anómala. No entanto, para certas condições iniciais e de fronteira não temos acesso às soluções analíticas, ou não conseguimos obter informação relevante a partir delas. Por isso é necessário recorrer a métodos numéricos para determinar soluções aproximadas.

Sejam

$$x_j = a + j\Delta x, \quad j = 0, 1, \dots, N \quad \text{e} \quad t_n = n\Delta t, \quad n = 0, 1, \dots, n_T,$$

onde o passo relativamente ao espaço e ao tempo são definidas, respetivamente, por

$$\Delta x = \frac{b-a}{N} \quad \text{e} \quad \Delta t = \frac{T}{n_T},$$

com T , n_T e N inteiros positivos.

Definamos agora os operadores de diferenças finitas em x e em t , nos pontos $u_j^n := u(x_j, t_n)$, por

$$\delta_x u_j^n = \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} \quad \text{e} \quad \delta_x^2 u_j^n = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}, \quad (3.4)$$

$$\delta_t u_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}. \quad (3.5)$$

A equação de difusão (3.1) nos pontos da malha é dada por

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) = d_\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) - r_\gamma u(x_j, t_n).$$

Usando desenvolvimentos em Taylor, é fácil verificar que se tem

$$\begin{aligned} \delta_t u_j^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t), \\ \delta_x^2 u_j^n &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta x^2). \end{aligned}$$

Seja U_j^n a solução aproximada de u_j^n . O método de Euler explícito para a equação de difusão reação clássica é dado por

$$\delta_t U_j^{n+\frac{1}{2}} = d_\gamma \delta_x^2 U_j^n - r_\gamma U_j^n. \quad (3.6)$$

Adicionalmente assumimos a condição inicial

$$U_j^0 = \phi_0(x_j), \quad (3.7)$$

e as condições de fronteira

$$U_0^n = u_a(t_n), \quad U_N^n = u_b(t_n). \quad (3.8)$$

A equação (3.6) é da forma

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} = d_\gamma \left(\frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right) - r_\gamma U_j^n,$$

ou seja,

$$U_j^{n+1} = d_\gamma \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n) + (1 - r_\gamma \Delta t) U_j^n.$$

3.2 Métodos numéricos para o problema de difusão anómala

Consideremos o problema de difusão anómala constituído pela equação integro-diferencial

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = d_\gamma \left({}_0D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)(x, t) - r_\gamma \left({}_0D_t^{1-\gamma} u \right)(x, t) + f(x, t), \quad (x, t) \in (a, b) \times (0, T], \quad (3.9)$$

onde d_γ e r_γ são constantes reais positivas e ${}_0D_t^{1-\gamma}$ a derivada fracionária de Riemann-Liouville definida em (2.16). Consideremos ainda a condição inicial dada por

$$u(x, 0) = \phi_0(x), \quad x \in (a, b), \quad (3.10)$$

e as condições de fronteira

$$u(a, t) = u_a(t), \quad u(b, t) = u_b(t), \quad t \in (0, T]. \quad (3.11)$$

Denotemos como anteriormente os pontos do domínio discreto por

$$x_j = a + j\Delta x, \quad j = 0, 1, \dots, N \quad \text{e} \quad t_n = n\Delta t, \quad n = 0, 1, \dots, n_T,$$

onde

$$\Delta x = \frac{b-a}{N} \quad \text{e} \quad \Delta t = \frac{T}{n_T},$$

com T , n_T e N inteiros positivos.

Temos, nos pontos da malha, que

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) = d_\gamma \left({}_0D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)(x_j, t_n) - r_\gamma \left({}_0D_t^{1-\gamma} u \right)(x_j, t_n) + f(x_j, t_n). \quad (3.12)$$

Esta equação é definida usando derivadas fracionárias e é necessário aproximá-las numericamente. Na secção que se segue discutimos como aproximar este operador.

3.2.1 Operador fracionário e a sua aproximação

A derivada fracionária de Riemann-Liouville, apresentada em (2.16), pode ser definida usando a fórmula de Grünwald-Letnikov [20] dada por

$${}^{GL}D_{a,t}^\alpha u(x, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t^\alpha} \sum_{k=0}^{\lceil \frac{t-a}{\Delta t} \rceil} (-1)^k \binom{\alpha}{k} u(x, t - k\Delta t), \quad (3.13)$$

onde $[a]$ denota a parte inteira de a e

$$(-1)^k \binom{\alpha}{k} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)}.$$

A definição de Grünwald-Letnikov representa a generalização das fórmulas de discretização para as derivadas de ordem inteira. Se tomarmos \mathbb{R} como domínio, o somatório presente em (3.13) é uma série, e esta converge absolutamente e uniformemente para cada $\alpha > 0$ e para toda a função limitada $u(t)$ [21].

Para garantir a existência do limite da soma definida em (3.13) precisamos do seguinte teorema.

Teorema 5 ([20]). *Seja β_k , com $k = 1, 2, \dots$, uma série e suponhamos que*

$$\begin{aligned}\lim_{k \rightarrow \infty} \beta_k &= 1, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_{n,k} &= 0 \quad \forall k, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n \alpha_{n,k} &= A \quad \forall k, \\ \sum_{k=1}^n |\alpha_{n,k}| &< K \quad \forall n.\end{aligned}$$

Então,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_{n,k} \beta_k = A.$$

Se impusermos determinadas condições a $u(t)$ e às suas derivadas, podemos estabelecer uma relação de igualdade entre as definições de Riemann-Liouville e de Grünwald-Letnikov.

Proposição 4 ([20]). *Seja $u(x, \cdot)$ uma função $m - 1$ vezes diferenciável em $[a, b]$ cujas derivadas até à ordem m sejam integráveis em $[a, b]$. Então, para todo o $m - 1 < \alpha < m$, temos*

$$\frac{1}{\Gamma(m - \alpha)} \frac{\partial^m}{\partial t^m} \int_a^t u(x, \xi) (t - \xi)^{m - \alpha - 1} d\xi = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{(\Delta t)^\alpha} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{t-a}{\Delta t} \rfloor} (-1)^k \binom{\alpha}{k} u(x, t - k\Delta t), \quad (3.14)$$

para $a' \leq x \leq b'$, ou seja,

$${}_a D_t^\alpha u(x, t) = {}^{GL} D_{a,t}^\alpha u(x, t).$$

Adicionalmente,

$${}_a D_t^\alpha u(x, t) = {}^{GL} D_{a,t}^\alpha u(x, t) = \sum_{r=0}^{m-1} \frac{\partial^r u}{\partial t^r}(x, a) \frac{(t-a)^{r-\alpha}}{\Gamma(r+1-\alpha)} + \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^t (t-\xi)^{m-\alpha-1} \frac{\partial^m u}{\partial t^m}(x, \xi) d\xi. \quad (3.15)$$

Demonstração. Começemos por mostrar que

$${}^{GL} D_{a,t}^\alpha u(x, t) = \sum_{r=0}^{m-1} \frac{\partial^r u}{\partial t^r}(x, a) \frac{(t-a)^{r-\alpha}}{\Gamma(r+1-\alpha)} + \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^t (t-\xi)^{m-\alpha-1} \frac{\partial^m u}{\partial t^m}(x, \xi) d\xi. \quad (3.16)$$

Foquemo-nos no segundo membro de (3.14) e denotemos por

$$u_{\Delta t}^\alpha = \frac{1}{(\Delta t)^\alpha} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{\alpha}{k} u(x, t - k\Delta t),$$

com $t - a = n\Delta t$.

Vamos agora manipular $u_{\Delta t}^\alpha$ por forma a analisar o limite quando $\Delta t \rightarrow 0$ e obter a expressão (3.16).

Consideremos a seguinte propriedade dos coeficientes binomiais

$$\binom{\alpha}{k} = \binom{\alpha-1}{k} + \binom{\alpha-1}{k-1}. \quad (3.17)$$

Podemos assim escrever

$$\begin{aligned}
u_{\Delta t}^{\alpha}(x, t) &= \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{\alpha-1}{k} u(x, t - k\Delta t) + \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} \sum_{k=1}^n (-1)^k \binom{\alpha-1}{k-1} u(x, t - k\Delta t) \\
&= \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{\alpha-1}{k} u(x, t - k\Delta t) + \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^{k+1} \binom{\alpha-1}{k} u(x, t - (k+1)\Delta t) \\
&= \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} (-1)^n \binom{\alpha-1}{n} u(x, a) + \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \binom{\alpha-1}{k} \Delta u(x, t - k\Delta t),
\end{aligned}$$

onde $\Delta u(x, t - k\Delta t) = u(x, t - k\Delta t) - u(x, t - (k+1)\Delta t)$. Podemos constatar que $\Delta u(x, t - k\Delta t)$ é uma diferença de primeira ordem da função $u(x, \xi)$ no ponto $\xi = t - k\Delta t$.

Aplicando a propriedade (3.17) $m-1$ vezes consecutivas, obtemos

$$\begin{aligned}
u_{\Delta t}^{\alpha}(x, t) &= \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} (-1)^k \binom{\alpha-1}{k} u(x, a) + \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \binom{\alpha-1}{k} \Delta u(x, t - k\Delta t) \\
&= \sum_{r=0}^{m-1} (-1)^{n-r} \binom{\alpha-r-1}{n-r} \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} \Delta^r u(x, a + r\Delta t) + \\
&\quad + \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} \sum_{k=0}^{n-m-2} (-1)^k \binom{\alpha-m-2}{k} \Delta^m u(x, t - k\Delta t).
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Vamos analisar o limite quando $\Delta t \rightarrow 0$ do r -ésimo termo do primeiro somatório de (3.18)

$$\begin{aligned}
&\lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ n\Delta t = t-a}} (-1)^{n-r} \binom{\alpha-r-1}{n-r} \frac{1}{\Delta t^{\alpha}} \Delta^r u(x, a + r\Delta t) = \\
&= \lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ n\Delta t = t-a}} (-1)^{n-r} \binom{\alpha-r-1}{n-r} (n-r)^{\alpha-r} \left(\frac{n}{n-r}\right)^{\alpha-r} (n\Delta t)^{r-\alpha} \frac{\Delta^r u(x, a + r\Delta t)}{\Delta t^r} \\
&= (t-a)^{r-\alpha} \lim_{n \rightarrow \infty} (-1)^{n-r} \binom{\alpha-r-1}{n-r} (n-r)^{\alpha-r} \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{n}{n-r}\right)^{\alpha-r} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta^r u(x, a + r\Delta t)}{\Delta t^r} \\
&= \frac{\partial^r u}{\partial t^r}(x, a) \frac{(t-a)^{r-\alpha}}{\Gamma(r+1-\alpha)}.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

De facto, se avaliarmos separadamente cada limite de (3.19) e atendendo à seguinte propriedade das funções Gamma

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n! n^z}{z(z+1)\dots(z+n)}, \tag{3.20}$$

temos

$$\begin{aligned}
&\lim_{n \rightarrow \infty} (-1)^{n-r} \binom{\alpha-r-1}{n-r} (n-r)^{\alpha-r} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(r+1-\alpha)\dots(n-\alpha)}{(n-r)^{r-\alpha}(n-r)!} = \\
&= \frac{1}{\Gamma(r+1-\alpha)}.
\end{aligned}$$

Facilmente verificamos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{n}{n-r} \right)^{\alpha-r} = 1 \quad \text{e} \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta^r u(x, a+r\Delta t)}{\Delta t^r} = \frac{\partial^r u}{\partial t^r}(x, a).$$

Pretendemos agora calcular o limite do segundo somatório de (3.18), que podemos escrever do seguinte modo

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t^\alpha} \sum_{k=0}^{n-m-2} (-1)^k \binom{\alpha-m-2}{k} \Delta^m u(x, t-k\Delta t) = \\ & = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \sum_{k=0}^{n-m-2} (-1)^k \Gamma(m-\alpha) \binom{\alpha-m-2}{k} k^{-m+1+\alpha} \Delta t (k\Delta t)^{m-1-\alpha} \frac{\Delta^m u(x, t-k\Delta t)}{\Delta t^m}. \end{aligned}$$

De modo a utilizar os resultados do Teorema 5, façamos

$$\begin{aligned} \beta_k &= (-1)^k \Gamma(m-\alpha) \binom{\alpha-m-2}{k} k^{-m+1+\alpha}, \\ \alpha_{n,k} &= \Delta t (k\Delta t)^{m-1-\alpha} \frac{\Delta^m u(x, t-k\Delta t)}{\Delta t^m}. \end{aligned}$$

Usando (3.20) verificamos que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \beta_k = \lim_{k \rightarrow \infty} (-1)^k \Gamma(m-\alpha) \binom{\alpha-m-2}{k} k^{-m+1+\alpha} = 1. \quad (3.21)$$

E ainda, se $m-1-\alpha > -1$, então

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{n-m-2} \alpha_{n,k} &= \lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ n\Delta t=t-a}} \sum_{k=0}^{n-m-2} \Delta t (k\Delta t)^{m-1-\alpha} \frac{\Delta^m u(x, t-k\Delta t)}{\Delta t^m} \\ &= \int_a^t (t-\xi)^{m-1-\alpha} \frac{\partial^m u}{\partial t^m}(x, \xi) d\xi. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Tendo em conta (3.21) e (3.22) e usando o Teorema 5 concluímos que

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ n\Delta t=t-a}} \frac{1}{\Delta t^\alpha} \sum_{k=0}^{n-m-2} (-1)^k \binom{\alpha-m-2}{k} \Delta^m u(x, t-k\Delta t) &= \\ = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^t (t-\xi)^{m-1-\alpha} \frac{\partial^m u}{\partial t^m}(x, \xi) d\xi. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Somando (3.19) e (3.23) obtemos finalmente

$$\begin{aligned} {}^{GL}D_{a,t}^\alpha &= \lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ n\Delta t=t-a}} u_{\Delta t}^\alpha(x, t) \\ &= \sum_{r=0}^{m-1} \frac{\partial^r u}{\partial t^r}(x, a) \frac{(t-a)^{r-\alpha}}{\Gamma(r+1-\alpha)} + \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^t (t-\xi)^{m-1-\alpha} \frac{\partial^m u}{\partial t^m}(x, \xi) d\xi. \end{aligned}$$

Resta agora mostrar que

$${}_a D_t^\alpha u(x, t) = \sum_{r=0}^{m-1} \frac{\partial^r u}{\partial t^r}(x, a) \frac{(t-a)^{r-\alpha}}{\Gamma(r+1-\alpha)} + \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^t (t-\xi)^{m-1-\alpha} \frac{\partial^m u}{\partial t^m}(x, \xi) d\xi.$$

Partindo de

$${}_a D_t^\alpha u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{\partial^m}{\partial t^m} \int_a^t u(x, \xi) (t-\xi)^{m-\alpha-1} d\xi.$$

Se integrarmos, por partes, m vezes a expressão acima ficamos com

$${}_a D_t^\alpha u(x, t) = \frac{\partial^m}{\partial t^m} \left(\sum_{r=0}^{m-1} \frac{u(x, a) (t-a)^{m-\alpha+r}}{\Gamma(m-\alpha+1+r)} + \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^t (t-\xi)^{m-\alpha-1} \frac{\partial^m u}{\partial t^m}(x, \xi) d\xi \right).$$

Derivando m vezes, em ordem a t , encontramos a expressão pretendida

$${}_a D_t^\alpha u(x, t) = \sum_{r=0}^{m-1} \frac{\partial^r u}{\partial t^r}(x, a) \frac{(t-a)^{r-\alpha}}{\Gamma(r+1-\alpha)} + \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^t (t-\xi)^{m-1-\alpha} \frac{\partial^m u}{\partial t^m}(x, \xi) d\xi.$$

provando assim que

$${}_a D_t^\alpha u(x, t) = {}^{GL}D_{a,t}^\alpha u(x, t).$$

□

A aproximação de Grünwald-Letnikov para as derivadas fracionárias surge imediatamente da sua definição, ou seja, uma aproximação da derivada (3.13) no ponto $t_n = a + n\Delta t$ é dada por

$${}^{GL}\delta_t^\alpha u(x, t_n) = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \frac{1}{\Delta t^\alpha} \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} u(x, t_n - k\Delta t).$$

Esta aproximação será de primeira ordem se a função estiver definida em \mathbb{R} e se cumprir as condições suficientes abaixo apresentadas.

Teorema 6 ([22]). *Sejam $m-1 < \alpha < m$ e $u(x, \cdot) \in C^{m+3}(\mathbb{R})$ tal que todas as derivadas até à ordem $m+3$ pertencem a $L^1(\mathbb{R})$.*

Então, a derivada de Riemann-Liouville dada por (2.16) verifica

$${}_a D_t^\alpha u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \frac{1}{\Delta t^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} u(x, t - k\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t), \quad (3.24)$$

para $t \in \mathbb{R}$.

Deste modo uma aproximação discreta da derivada fracionária da Riemann-Liouville baseada na fórmula de Grünwald-Letnikov definida em (3.24), como vimos é dada por

$${}^{GL}\delta_t^{(1-\gamma)} u^n = \frac{1}{\Delta t^\gamma} \sum_{i=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} u^k, \quad (3.25)$$

onde

$$\omega_k^{(1-\gamma)} = (-1)^k \binom{1-\gamma}{k}.$$

Estes coeficientes verificam a seguinte fórmula de recorrência [21]

$$\omega_0^{(1-\gamma)} = 1 \quad \text{e} \quad \omega_k^{(1-\gamma)} = \left(1 - \frac{(1-\gamma) + 1}{k}\right) \omega_{k-1}^{(1-\gamma)}.$$

3.2.2 Método de Euler explícito

O método de Euler explícito usa a discretização da derivada parcial em ordem ao tempo e a segunda derivada em ordem ao espaço de u , usando as diferenças finitas definidas em (3.4) e (3.5), que verifica

$$\begin{aligned} \delta_t u_j^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t), \\ \delta_x^2 u_j^n &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta x^2). \end{aligned} \quad (3.26)$$

A derivada fracionária, usando (3.24), verifica

$${}^{GL}\delta_t^{(1-\gamma)} u^n(x_j) = \left({}_0 D_t^{1-\gamma} u\right)(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t).$$

Perante certas condições de regularidade de u , temos

$${}^{GL}\delta_t^{(1-\gamma)} \delta_x^2 u_j^n = \left({}_0 D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta x^2 + \Delta t). \quad (3.27)$$

Sendo U_j^n a solução aproximada de u_j^n , um método numérico para a equação (3.9) é dado por

$$\begin{aligned} \delta_t U_j^{n+\frac{1}{2}} &= d_\gamma {}^{GL}\delta_t^{(1-\gamma)} (\delta_x^2 U_j^n) - r_\gamma {}^{GL}\delta_t^{(1-\gamma)} U_j^n + f_j^n, & n = 0, 1, \dots, n_T - 1, \\ & & j = 1, 2, \dots, N - 1. \end{aligned} \quad (3.28)$$

As condições iniciais são dadas por

$$U_j^0 = \phi_0(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, N, \quad (3.29)$$

e as condições de fronteira são

$$U_0^n = u_a(t_n), \quad U_N^n = u_b(t_n), \quad n = 1, 2, \dots, n_T - 1. \quad (3.30)$$

Se desenvolvermos a equação (3.28) obtemos

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} = d_\gamma \frac{1}{\Delta t^{1-\gamma}} \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(\frac{U_{j+1}^k - 2U_j^k + U_{j-1}^k}{\Delta x^2} \right) - r_\gamma \frac{1}{\Delta t^{1-\gamma}} \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} U_j^k + f_j^n.$$

Podemos reescrever a equação acima, de modo a isolar o termo de ordem $n+1$ da seguinte forma

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \Delta t^\gamma \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(d_\gamma \frac{U_{j+1}^k - 2U_j^k + U_{j-1}^k}{\Delta x^2} - r_\gamma U_j^k \right) + \Delta t f_j^n. \quad (3.31)$$

Verificamos que estamos perante um método explícito que, no entanto, depende de todos os valores do seu passado, ou seja, para determinar os valores u_j^{n+1} , $j = 1, \dots, N-1$, temos de recorrer aos valores $u_{j-1}^k, u_j^k, u_{j+1}^k$, $k = 0, \dots, n$. Este pormenor realça a não localidade da derivada fracionária no tempo.

3.2.3 Método de Euler implícito

Neste tipo de métodos o operador de diferenças finitas utilizado para a discretização da derivada em ordem ao tempo é definido do seguinte modo

$$\delta_t u_j^{n-\frac{1}{2}} = \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t}. \quad (3.32)$$

Assim a derivada parcial em ordem ao tempo e a segunda derivada em ordem ao espaço de u , usando as diferenças finitas definidas em (3.4) e (3.32), verificam

$$\begin{aligned} \delta_x^2 u_j^n &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta x^2), \\ \delta_t u_j^{n-\frac{1}{2}} &= \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Usando a derivada fracionária definida em (3.25), e sendo U_j^n a solução aproximada de u_j^n , outro método para a equação (3.9) é dado por

$$\begin{aligned} \delta_t U_j^{n-\frac{1}{2}} &= d_\gamma^{GL} \delta_t^{(1-\gamma)} (\delta_x^2 U_j^n) - r_\gamma^{GL} \delta_t^{(1-\gamma)} U_j^n + f_j^n, & n = 1, 2, \dots, n_T, \\ & & j = 1, 2, \dots, N-1. \end{aligned} \quad (3.34)$$

As condições iniciais são dadas por

$$U_j^0 = \phi_0(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, N, \quad (3.35)$$

e as condições de fronteira são

$$U_0^n = u_a(t_n), \quad U_N^n = u_b(t_n), \quad n = 1, 2, \dots, n_T. \quad (3.36)$$

Se desenvolvermos a equação (3.34) obtemos

$$\frac{U_j^n - U_j^{n-1}}{\Delta t} = d_\gamma \frac{1}{\Delta t^{1-\gamma}} \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(\frac{U_{j+1}^k - 2U_j^k + U_{j-1}^k}{\Delta x^2} \right) - r_\gamma \frac{1}{\Delta t^{1-\gamma}} \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} U_j^k + f_j^n.$$

Podemos reescrever a equação acima da seguinte forma

$$U_j^n = U_j^{n-1} + \Delta t^\gamma \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(d_\gamma \frac{U_{j+1}^k - 2U_j^k + U_{j-1}^k}{\Delta x^2} - r_\gamma U_j^k \right) + \Delta t f_j^n.$$

Capítulo 4

Convergência de métodos numéricos

Neste capítulo, estudaremos a convergência e a estabilidade dos métodos de Euler explícito e implícito para a equação de difusão anômala e reação descritos no capítulo anterior. Utilizaremos dois processos distintos para estudar a estabilidade dos métodos numéricos. Para o método explícito usaremos a análise de Fourier e para o método implícito recorreremos ao método da energia. Na última secção, mostraremos alguns resultados numéricos resultantes da implementação dos métodos numéricos referidos anteriormente. Em particular testaremos a ordem de convergência do método explícito e mostraremos a influência do parâmetro γ no comportamento da solução numérica obtida.

4.1 Noções Gerais

Consideremos um problema definido em $Q = (a, b) \times [0, T]$, com $a, b \in \mathbb{R}$, dado por

$$\begin{aligned} Lu &= f \quad \text{em } \Omega \times (0, T), \\ lu &= g \quad \text{em } \partial\Omega \times (0, T), \end{aligned} \tag{4.1}$$

onde L é um operador linear integro-diferencial e l um operador linear que especifica a condição de fronteira [14].

Considere-se ainda um método de diferenças finitas para determinar a solução numérica de (4.1). Sejam $\Omega_{\Delta x}$ o conjunto dos pontos discretos interiores da malha e $\partial\Omega_{\Delta x}$ o conjunto dos pontos da fronteira discretos. Para cada instante temporal $t_n = n\Delta t$, com $n = 0, 1, \dots, n_T$, o método de diferenças finitas pode ser definido por

$$\begin{aligned} L_{\Delta x, \Delta t} U^n(x) &= f^n(x) \quad \text{em } \Omega_{\Delta x}, \\ l_{\Delta x, \Delta t} U^n(x) &= g^n(x) \quad \text{em } \partial\Omega_{\Delta x}, \end{aligned} \tag{4.2}$$

onde $U^n(x) = U(x, t_n)$ denota o valor aproximado de $u(x, t_n)$. Mais ainda, os operadores $L_{\Delta x, \Delta t}$ e $l_{\Delta x, \Delta t}$ são lineares e representam a discretização de L e l , respetivamente.

Consideremos que (4.2) tem solução única. Quando a malha é muito fina ($\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0$), a sucessão de valores obtidos para a solução aproximada nos pontos da malha $\{U^n(x) : x \in \bar{\Omega}_{\Delta x}, n = 1, \dots, n_T\}$ deve coincidir com o conjunto de valores da solução exata nos pontos da malha $\{u^n(x) : x \in \bar{\Omega}_{\Delta x}, n = 1, \dots, n_T\}$. Por outras palavras, o método de diferenças finitas deve convergir para a solução

exata. A estabilidade e a consistência do método garante-nos que a solução aproximada converge para a solução exata.

Um método numérico da forma (4.2) diz-se estável para cada instante t_n , $n = 1, \dots, n_T$ se

$$C_0 \|U^n\|_{\Omega_{\Delta x}} \leq \|f^n\|_{\Omega_{\Delta x}} + \|g^n\|_{\partial\Omega_{\Delta x}}, \quad (4.3)$$

onde $\|\cdot\|_{\Omega_{\Delta x}}$ e $\|\cdot\|_{\partial\Omega_{\Delta x}}$ são normas dependentes dos pontos da malha de $\Omega_{\Delta x}$ e $\partial\Omega_{\Delta x}$ respetivamente, e C_0 é uma constante independente de Δx e Δt .

Definamos o erro de truncatura para $n = 1, \dots, n_T$ do seguinte modo

$$\begin{aligned} \varphi_{\Omega_{\Delta x}}^n &:= L_{\Delta x, \Delta t} u^n - f^n && \text{em } \Omega_{\Delta x}, \\ \varphi_{\partial\Omega_{\Delta x}}^n &:= l_{\Delta x, \Delta t} u^n - g^n && \text{em } \partial\Omega_{\Delta x}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Dizemos que o método é consistente para uma solução u de (4.1) suficientemente suave se

$$\|\varphi_{\Omega_{\Delta x}}^n\|_{\Omega_{\Delta x}} + \|\varphi_{\partial\Omega_{\Delta x}}^n\|_{\partial\Omega_{\Delta x}} \longrightarrow 0 \quad \text{quando } \Delta x \rightarrow 0 \quad \Delta t \rightarrow 0. \quad (4.5)$$

Para o método (4.2) consideramos o erro de truncatura em $\partial\Omega_{\Delta x}$ nulo, pelo que $\varphi_{\partial\Omega_{\Delta x}}$ não aparece explicitamente na análise do erro.

Por fim sabemos que a solução do método (4.2) converge para a solução de (4.1) relativamente à norma $\|\cdot\|_{\Omega_{\Delta x}}$ quando

$$\|u^n - U^n\|_{\Omega_{\Delta x}} \longrightarrow 0 \quad \text{para } n = 1, \dots, n_T \quad \text{e } \Delta x \rightarrow 0, \quad \Delta t \rightarrow 0.$$

Esta convergência diz-se de ordem p se este é o maior real positivo tal que

$$\|u^n - U^n\|_{\Omega_{\Delta x}} \leq C_1 (\Delta x^q + \Delta t^p) \quad \text{para } n = 1, \dots, n_T \quad \text{e } \Delta x \rightarrow 0, \quad \Delta t \rightarrow 0, \quad (4.6)$$

com C_1 uma constante positiva independente de Δx e Δt .

Teorema 7 ([14]). *Se o método de diferenças finitas (4.2) para o problema (4.1) for estável e consistente, no sentido de (4.3) e (4.5) respetivamente, então (4.2) converge para (4.1) em cada instante $t_n = n\Delta t$ com $n = 1, \dots, n_T$.*

4.2 Convergência do método de Euler explícito

Nesta secção usaremos a análise de Fourier para provar a estabilidade e a convergência do método explícito. A análise de Fourier pode ser usada em problemas de Cauchy, ou seja, quando a equação está definida em todo o espaço, sem fronteiras. Pode ainda ser usada no caso em que as condições de fronteira são periódicas, pois este tipo de problemas é equivalente aos problemas de Cauchy.

Consideremos o método de Euler explícito que determina a solução aproximada do problema (3.12), sem termo fonte,

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \mu_1 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} (U_{j+1}^k - 2U_j^k + U_{j-1}^k) - \mu_2 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} U_j^k, \quad n = 0, 1, \dots, n_T - 1, \quad (4.7)$$

$$j = 1, 2, \dots, N - 1.$$

onde $\mu_1 = d_\gamma \frac{\Delta t^\gamma}{\Delta x^2}$, $\mu_2 = r_\gamma \Delta t^\gamma$. As condições iniciais são dadas por

$$U_j^0 = \phi_0(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, N,$$

e as condições de fronteira são

$$U_0^n = u_a(t_n), \quad U_N^n = u_b(t_n), \quad n = 1, 2, \dots, n_T - 1.$$

4.2.1 Estabilidade

Definamos agora a função grelha $U^n(x)$ ([4], [6])

$$U^n(x) = \begin{cases} U_j^n, & x_j - \frac{\Delta x}{2} < x \leq x_j + \frac{\Delta x}{2}, \quad j = 1, 2, \dots, N - 1, \\ 0, & a \leq x \leq a + \frac{\Delta x}{2} \text{ ou } b - \frac{\Delta x}{2} < x \leq b. \end{cases} \quad (4.8)$$

O desenvolvimento de $U^n(x)$ em série de Fourier é dado por

$$U^n(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \eta_n(l) e^{i \frac{2\pi l}{b-a} x}, \quad (4.9)$$

onde $\eta_n(l) = \frac{1}{b-a} \int_a^b U^n(x) e^{-i \frac{2\pi l}{b-a} x} dx$.

Para $U^n = [U_1^n, U_2^n, \dots, U_{N-1}^n]^T$, seja

$$\|U^n\|_2 = \left(\sum_{j=1}^{N-1} \Delta x |U_j^n|^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{1}{b-a} \int_a^b |U^n(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.10)$$

Introduzimos ainda a igualdade de Parseval que será usada de seguida.

Proposição 5 ([3]). *Seja $f \in L^2$ da forma $f(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} c(l) e^{i \frac{2\pi l}{b-a} x}$. A igualdade de Parseval para séries trigonométricas de Fourier diz-nos que*

$$\frac{1}{b-a} \int_a^b |f(x)|^2 dx = \sum_{l=-\infty}^{\infty} |c(l)|^2.$$

Através da proposição anterior, podemos estabelecer a seguinte igualdade

$$\|U^n\|_2^2 = \sum_{l=-\infty}^{\infty} |\eta_n(l)|^2. \quad (4.11)$$

Vamos supor que uma solução para a equação (4.7) é da forma

$$U_j^n = \eta_n e^{i\sigma j\Delta x}, \quad (4.12)$$

onde $\sigma = \frac{2\pi l}{b-a}$.

Substituindo agora (4.12) em (4.7), obtemos

$$\begin{aligned} \eta_{n+1} e^{i\sigma j\Delta x} = & \eta_n e^{i\sigma j\Delta x} + \mu_1 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(\eta_k e^{i\sigma(j+1)\Delta x} - 2\eta_k e^{i\sigma j\Delta x} + \eta_k e^{i\sigma(j-1)\Delta x} \right) - \\ & - \mu_2 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \eta_k e^{i\sigma j\Delta x}. \end{aligned}$$

Dividindo a equação por $e^{i\sigma j\Delta x}$ tem-se

$$\eta_{n+1} = \eta_n + (e^{i\sigma\Delta x} - 2 + e^{-i\sigma\Delta x}) \mu_1 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \eta_k - \mu_2 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \eta_k.$$

Utilizando a fórmula de Euler para números complexos, vem

$$\begin{aligned} \eta_{n+1} = & \eta_n + (\cos(\sigma\Delta x) + i\sin(\sigma\Delta x) - 2 + \cos(-\sigma\Delta x) + i\sin(-\sigma\Delta x)) \mu_1 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \eta_k - \\ & - \mu_2 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \eta_k, \end{aligned}$$

que equivale a

$$\eta_{n+1} = \eta_n - 2(1 - \cos(\sigma\Delta x)) \mu_1 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \eta_k - \mu_2 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \eta_k.$$

Recorrendo à igualdade $\cos(2\theta_1) = 1 - 2\sin^2(\theta_1)$ obtemos finalmente

$$\eta_{n+1} = \eta_n - 4\sin^2\left(\frac{\sigma\Delta x}{2}\right) \mu_1 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \eta_k - \mu_2 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \eta_k. \quad (4.13)$$

De seguida, apresentamos um resultado relevante na identificação de algumas propriedades diretas dos coeficientes associados à aproximação (3.25).

Lema 1 ([6]). *Seja $\omega_k^{(1-\gamma)} = (-1)^k \binom{1-\gamma}{k}$, com $0 < \gamma < 1$, então*

$$\omega_0^{(1-\gamma)} = 1, \quad \omega_k^{(1-\gamma)} < 0, k > 0, \quad (4.14)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma)} = 0, \quad -\sum_{k=1}^n \omega_k^{(1-\gamma)} < 1, n \in \mathbb{N}. \quad (4.15)$$

De (4.14), podemos reescrever a igualdade (4.13) da seguinte forma

$$\eta_{n+1} = (1 - \mu) \eta_n - \mu \sum_{k=1}^n \omega_k^{(1-\gamma)} \eta_k, \quad (4.16)$$

onde $\mu = 4 \sin^2 \left(\frac{\sigma \Delta x}{2} \right) \mu_1 + \mu_2 \geq 0$.

Proposição 6 ([6]). *Suponhamos que η_{n+1} , $n = 0, 1, \dots, n_T - 1$, é solução de (4.16). Se $4\mu_1 + \mu_2 \leq 1$, com $\mu_1 = d_\gamma \frac{\Delta x^\gamma}{\Delta x^2}$ e $\mu_2 = r_\gamma \Delta t^\gamma$, então*

$$|\eta_{n+1}| \leq |\eta_0|, \quad n = 0, 1, \dots, n_T - 1.$$

Demonstração. Para $n = 0$, da equação (4.16), temos

$$\eta_1 = (1 - \mu)\eta_0.$$

Como $\mu \geq 0$ e $4\mu_1 + \mu_2 \leq 1$,

$$|\eta_1| \leq (1 - \mu)|\eta_0| \leq |\eta_0|.$$

Suponhamos agora que

$$|\eta_m| \leq |\eta_0|, \quad m = 1, 2, \dots, n.$$

A partir de (4.16) podemos deduzir as seguintes desigualdades

$$\begin{aligned} |\eta_{n+1}| &\leq (1 - \mu)|\eta_0| + \mu \sum_{k=1}^n |\omega_{n-k}^{(1-\gamma)}| |\eta_n| \\ &\leq \left(1 - \mu + \mu \sum_{k=1}^n |\omega_{n-k}^{(1-\gamma)}| \right) |\eta_0|. \end{aligned}$$

Por fim, de (4.15), estabelece-se o resultado pretendido

$$|\eta_{n+1}| \leq (1 - \mu + \mu)|\eta_0| = |\eta_0|.$$

□

O próximo teorema prova a estabilidade do método de Euler explícito.

Teorema 8 ([6]). *Seja $U^n = [U_1^n, U_2^n, \dots, U_{N-1}^n]$ solução do problema (4.7). Então se $4\mu_1 + \mu_2 \leq 1$, com $\mu_1 = d_\gamma \frac{\Delta x^\gamma}{\Delta x^2}$ e $\mu_2 = r_\gamma \Delta t^\gamma$, o método de Euler explícito para (3.12) é estável e U^n verifica*

$$\|U^n\|_2 \leq \|U^0\|_2.$$

Demonstração. Com o resultado da Proposição 6, e pela definição de $\|U^n\|_2^2$ dada em (4.11), temos

$$\begin{aligned} \|U^n\|_2^2 &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} |\eta_n(l)|^2 \\ &\leq \sum_{l=-\infty}^{\infty} |\eta_0(l)|^2 = \|U^0\|_2^2. \end{aligned}$$

Pelo que

$$\|U^n\|_2 \leq \|U^0\|_2.$$

□

4.2.2 Convergência

A fim de estudar a convergência do método de Euler explícito, definamos o erro de truncatura do seguinte modo

$$\varphi(x_j, t_n) = \delta_t u^{n+\frac{1}{2}} - \left(d_\gamma^{GL} \delta_t^{(1-\gamma)} (\delta_x^2 u_j^n) - r_\gamma^{GL} \delta_t^{(1-\gamma)} u_j^n \right).$$

Atendendo às aproximações definidas em (3.26) e (3.27) e ao Teorema 6 encontramos a ordem do erro de truncatura para soluções suficientemente suaves, ou seja, para $u \in C^{3,1}(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+)$

$$\begin{aligned} \varphi(x_j, t_n) &= \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t) - d_\gamma \left({}_0 D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)(x_j, t_n) - \mathcal{O}(\Delta x^2 + \Delta t) + r_\gamma \left({}_0 D_t^{1-\gamma} u \right)(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t) \\ &= \mathcal{O}(\Delta x^2 + \Delta t). \end{aligned}$$

Consequentemente, existe uma constante positiva C_2 , independente de Δx e Δt , tal que

$$|\varphi_j^n| \leq C_2(\Delta x^2 + \Delta t), \quad (4.17)$$

onde $\varphi_j^n := \varphi(x_j, t_n)$.

Seja ainda $e_j^n = u_j^n - U_j^n$, com u_j^n e U_j^n solução de (3.12) e (4.7) respetivamente, facilmente obtemos

$$\begin{aligned} e_j^{n+1} &= e_j^n + \mu_1 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(e_{j+1}^k - 2e_j^k + e_{j-1}^k \right) - \mu_2 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} e_j^k + \Delta t \varphi_j^{n+1}, \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (4.18) \\ & \quad n = 1, 2, \dots, n_T, \end{aligned}$$

onde $\mu_1 = d_\gamma \frac{\Delta t^\gamma}{\Delta x^2}$ e $\mu_2 = r_\gamma \Delta t^\gamma$, e ainda

$$\begin{aligned} e_0^n &= e_N^n = 0, \quad n = 1, 2, \dots, n_T, \\ e_j^0 &= 0, \quad j = 0, 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Podemos agora analisar a convergência deste método utilizando a análise de Fourier. Analogamente ao estudo da estabilidade definamos as funções grelha, $e^n(x)$ e $\varphi^n(x)$, do seguinte modo ([4], [6])

$$e^n(x) = \begin{cases} e_j^n, & x_j - \frac{\Delta x}{2} < x \leq x_j + \frac{\Delta x}{2}, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \\ 0, & a \leq x \leq a + \frac{\Delta x}{2} \text{ ou } b - \frac{\Delta x}{2} < x \leq b, \end{cases} \quad (4.19)$$

e

$$\varphi^n(x) = \begin{cases} \varphi_j^n, & x_j - \frac{\Delta x}{2} < x \leq x_j + \frac{\Delta x}{2}, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \\ 0 & a \leq x \leq a + \frac{\Delta x}{2} \text{ ou } b - \frac{\Delta x}{2} < x \leq b, \end{cases} \quad (4.20)$$

respetivamente. Pelo que as expansões de $e^n(x)$ e $\varphi^n(x)$, para $n = 0, 1, \dots, n_T$, em séries de Fourier são dadas, respetivamente, por

$$e^n(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \xi_n(l) e^{i \frac{2\pi l}{b-a} x} \quad \text{e} \quad \varphi^n(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_n(l) e^{i \frac{2\pi l}{b-a} x},$$

com

$$\xi_n(l) = \frac{1}{b-a} \int_a^b e^n(x) e^{-i \frac{2\pi l}{b-a} x} dx \quad \text{e} \quad \alpha_n(l) = \frac{1}{b-a} \int_a^b \varphi^n(x) e^{-i \frac{2\pi l}{b-a} x} dx.$$

Definamos $e^n = [e_1^n, e_2^n, \dots, e_{N-1}^n]^T$, $\varphi^n = [\varphi_1^n, \varphi_2^n, \dots, \varphi_{N-1}^n]^T$ e $\|\cdot\|_2$ segundo a expressão (4.10). Aplicando a igualdade de Parseval, para $n = 0, 1, \dots, n_T$, temos

$$\|e^n\|_2^2 = \sum_{l=-\infty}^{\infty} |\xi_n(l)|^2 \quad \text{e} \quad \|\varphi^n\|_2^2 = \sum_{l=-\infty}^{\infty} |\alpha_n(l)|^2. \quad (4.21)$$

Sejam

$$e_j^n = \xi_n e^{i\sigma j \Delta x} \quad \text{e} \quad \varphi_j^n = \alpha_n e^{i\sigma j \Delta x},$$

com $\sigma = \frac{2\pi l}{b-a}$. Então, se substituirmos e_j^n e φ_j^n em (4.18), obtemos

$$\xi_{n+1} = \xi_n - 4 \sin^2 \left(\frac{\sigma \Delta x}{2} \right) \mu_1 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \xi_k - \mu_2 \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \xi_k + \Delta t \alpha_{n+1}, \quad n = 0, 1, \dots, n_T - 1.$$

Pelo Lema 1, conseguimos simplificar a expressão anterior

$$\xi_{n+1} = (1 - \mu) \xi_n - \mu \sum_{k=1}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \xi_k + \Delta t \alpha_{n+1}, \quad n = 0, 1, \dots, n_T - 1, \quad (4.22)$$

onde $\mu = 4\mu_1 \sin^2 \left(\frac{\sigma \Delta x}{2} \right) + \mu_2 \geq 0$.

Sabemos ainda, por (4.17) e pela definição de $\|\cdot\|_2$, que

$$\|\varphi^{n+1}\|_2 \leq C_2 \sqrt{N \Delta x} (\Delta x^2 + \Delta t) = C_2 \sqrt{b-a} (\Delta x^2 + \Delta t). \quad (4.23)$$

Dada a convergência $\sum_{l=-\infty}^{\infty} |\alpha_n(l)|^2$ existe uma constante positiva C_3 tal que

$$|\alpha_n| \leq C_3 |\alpha_1|. \quad (4.24)$$

Proposição 7 ([6]). *Suponhamos que ξ_{n+1} , $n = 0, 1, \dots, n_T - 1$, é solução da equação (4.18). Então, se $4\mu_1 + \mu_2 \leq 1$, existe uma constante positiva C_3 tal que*

$$|\xi_{n+1}| \leq C_3 (n+1) \Delta t |\alpha_1|.$$

Demonstração. Para $n = 0$, da equação (4.22) e da desigualdade obtida em (4.24), temos

$$|\xi_1| = \Delta t |\alpha_1| \leq C_3 \Delta t |\alpha_1|.$$

Suponhamos agora que

$$|\xi_m| \leq C_3 m \Delta t |\alpha_1|, \quad m = 1, 2, \dots, n.$$

Notemos que $\mu \geq 0$ e $4\mu_1 + \mu_2 \leq 1$, portanto $0 \leq \mu_1$. Por (4.22), (4.24) e usando o Lema 1, temos

$$\begin{aligned} |\xi_{n+1}| &\leq (1-\mu)|\xi_n| + \mu \sum_{k=1}^n |\omega_{n-k}^{(1-\gamma)}| |\xi_k| + \Delta t |\alpha_{n+1}| \\ &\leq \left((1-\mu)n + \mu \sum_{k=1}^n |\omega_{n-k}^{(1-\gamma)}| k + 1 \right) C_3 \Delta t |\alpha_1| \\ &\leq ((1-\mu)n + \mu n + 1) C_3 \Delta t |\alpha_1| \\ &= C_3(n+1) \Delta t |\alpha_1|. \end{aligned}$$

□

Estamos agora em condições de enunciar um teorema que prova a convergência do método de Euler explícito para a equação (4.7).

Teorema 9 ([6]). *Sejam u_j^n e U_j^n , com $j = 0, 1, \dots, N$; $n = 1, 2, \dots, n_T$, as soluções de (3.12) e (4.7) respectivamente. Fazendo $e_j^n = u_j^n - U_j^n$ com $e^n = [e_0^n, e_1^n, \dots, e_N^n]^T$. Se $4\mu_1 + \mu_2 \leq 1$, o método de Euler explícito para (3.12) é convergente para a norma $\|\cdot\|_2$ e a ordem de convergência é $\mathcal{O}(\Delta x^2 + \Delta t)$.*

Demonstração. Sabendo (4.21) e (4.23), usando o resultado da Proposição 7, obtemos

$$\|e^n\|_2 \leq C_3(n+1)\Delta t \|\phi^1\|_2 \leq C_3(n+1)\Delta t C_2 \sqrt{b-a} (\Delta x^2 + \Delta t).$$

Como $(n+1)\Delta t \leq T$ temos

$$\|e^n\|_2 \leq C(\Delta x^2 + \Delta t),$$

com $C = C_3 C_2 T \sqrt{b-a}$.

□

4.3 Convergência do método de Euler implícito

Nesta secção usaremos o método da energia para provar a estabilidade e a convergência do método implícito.

Consideremos o método de Euler implícito que determina a solução aproximada do problema

$$\begin{aligned} U_j^n &= U_j^{n-1} + \Delta t^\gamma \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(d_\gamma \frac{U_{j+1}^k - 2U_j^k + U_{j-1}^k}{\Delta x^2} - r_\gamma U_j^k \right) + \Delta t f_j^n \quad n = 1, 2, \dots, n_T, \\ & \quad j = 1, 2, \dots, N-1. \end{aligned}$$

As condições iniciais são dadas por

$$U_j^0 = \phi_0(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, N-1,$$

e as condições de fronteira são

$$U_0^n = u_a(t_n), \quad U_N^n = u_b(t_n), \quad n = 2, 3, \dots, n_T.$$

4.3.1 Estabilidade

Consideremos $a = [a_1, a_2, \dots, a_N]^T$, $b = [b_1, b_2, \dots, b_N]^T$ e definamos o seguinte produto interno discreto, $(\cdot, \cdot)_N$, e a norma associada $\|\cdot\|_N$ por

$$(a, b)_N = \Delta x \sum_{j=0}^{N-1} a_j b_j, \quad a, b \in \mathbb{R}^{(N+1) \times 1},$$

$$\|a\|_N = \sqrt{(a, a)_N}.$$

De seguida introduzimos algumas notações associadas a este produto interno

$$(\delta_x a, \delta_x b)_N = \Delta x \sum_{j=0}^{N-1} \delta_x a_{j+\frac{1}{2}} \delta_x b_{j+\frac{1}{2}}, \quad (4.25)$$

$$(\delta_x^2 a, b)_N = \Delta x \sum_{j=1}^{N-1} (\delta_x^2 a_j) b_j, \quad (4.26)$$

$$\|a\|_{1,N} = \sqrt{(\delta_x a, \delta_x a)_N}.$$

O resultado que se segue relaciona as notações (4.25) e (4.26).

Lema 2 ([16]). *Sejam $a = [a_0, a_1, \dots, a_N]^T$ e $b = [b_0, b_1, \dots, b_N]^T$. Se $a_0 = a_N = b_0 = b_N$, então*

$$(\delta_x^2 a, b)_N = (a, \delta_x^2 b)_N = -(\delta_x a, \delta_x b)_N.$$

Demonstração. De (4.25), tem-se

$$\begin{aligned} (\delta_x^2 a, b)_N &= \Delta x \sum_{i=1}^{N-1} b_i (\delta_x^2 a_i) = \sum_{j=1}^{N-1} b_j \left(\frac{a_{j+1} - a_j}{\Delta x} - \frac{a_j - a_{j-1}}{\Delta x} \right) \\ &= \sum_{j=1}^{N-1} b_j (\delta_x a_{j+\frac{1}{2}}) - \sum_{j=1}^{N-1} b_j (\delta_x a_{j-\frac{1}{2}}) \\ &= \sum_{j=1}^{N-1} b_j (\delta_x a_{j+\frac{1}{2}}) - \sum_{j=0}^{N-2} b_{j+1} (\delta_x a_{j+\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

Como $a_0 = a_N = b_0 = b_N$,

$$\begin{aligned} (\delta_x^2 a, b)_N &= \sum_{j=0}^{N-1} b_j (\delta_x a_{j+\frac{1}{2}}) - \sum_{j=0}^{N-1} b_{j+1} (\delta_x a_{j+\frac{1}{2}}) \\ &= -\Delta x \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{b_{j+1} - b_j}{\Delta x} \right) \delta_x a_{j+\frac{1}{2}} = -\Delta x \sum_{j=0}^{N-1} \delta_x b_{j+\frac{1}{2}} \delta_x a_{j+\frac{1}{2}} \\ &= -(\delta_x a, \delta_x b)_N. \end{aligned}$$

□

O teorema que se segue, inspirado em [16], prova a estabilidade do método de Euler implícito para a equação (3.12).

Teorema 10. *Seja $U^n = [U_0^n, U_1^n, \dots, U_N^n]^T$ a solução do problema (3.34), $U_0^n = U_N^n = 0$ e $f^n = [f_0^n, f_1^n, \dots, f_N^n]^T$. Então, existe uma constante positiva C_6 independente de n tal que*

$$\|U^n\|_N^2 \leq (1 + \Delta t^\gamma r_\gamma) \|U^0\|_N^2 + \Delta t^\gamma d_\gamma |U^0|_{1,N}^2 + C_6 \max_{0 \leq k \leq nT} \|f^k\|_N^2.$$

Demonstração. Recordemos a equação que define o método de Euler implícito

$$U^n = U^{n-1} + \Delta t^\gamma \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(d_\gamma \delta_x^2 U^k - r_\gamma U^k \right) + \Delta t f^n.$$

Fazendo o produto interno discreto com U^n , vem

$$\begin{aligned} (U^n, U^n)_N &= (U^{n-1}, U^n)_N + \Delta t^\gamma \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(d_\gamma \delta_x^2 U^k - r_\gamma U^k, U^n \right)_N + \Delta t (f^n, U^n)_N \\ &= (U^{n-1}, U^n)_N + \Delta t^\gamma \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(d_\gamma \left(\delta_x^2 U^k, U^n \right)_N - r_\gamma \left(U^k, U^n \right)_N \right) + \Delta t (f^n, U^n)_N. \end{aligned}$$

Utilizando o Lema 2, podemos estabelecer

$$(U^n, U^n)_N = (U^{n-1}, U^n)_N - \Delta t^\gamma \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(d_\gamma \left(\delta_x U^k, \delta_x U^n \right)_N + r_\gamma \left(U^k, U^n \right)_N \right) + \Delta t (f^n, U^n)_N,$$

pela desigualdade de Cauchy-Schwartz

$$\begin{aligned} \|U^n\|_N^2 &\leq \frac{1}{2} (\|U^{n-1}\|_N^2 + \|U^n\|_N^2) - \frac{\Delta t^\gamma}{2} \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(d_\gamma \left(|U^k|_{1,N}^2 + |U^n|_{1,N}^2 \right) + r_\gamma \left(\|U^k\|_N^2 + \|U^n\|_N^2 \right) \right) + \\ &\quad + \Delta t \left(\varepsilon \|U^n\|_N^2 + \frac{1}{4\varepsilon} \|f^n\|_N^2 \right). \end{aligned} \tag{4.27}$$

Consideremos agora

$$b_n = \sum_{k=0}^n \omega_k^{(1-\gamma)},$$

então

$$\begin{aligned} b_n - b_{n-1} &= \sum_{k=0}^n \omega_k^{(1-\gamma)} - \sum_{k=0}^{n-1} \omega_k^{(1-\gamma)} \\ &= \omega_n^{(1-\gamma)} + \sum_{k=0}^{n-1} \omega_k^{(1-\gamma)} - \sum_{k=0}^{n-1} \omega_k^{(1-\gamma)} \\ &= \omega_n^{(1-\gamma)}. \end{aligned} \tag{4.28}$$

Mais ainda, b_n satisfaz $C_4 b_n \Delta t^\gamma \leq \Delta t \leq C_5 b_n \Delta t^\gamma$ onde C_4 e C_5 representam constantes reais positivas e independentes de n .

Substituindo em (4.27)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|U^n\|_N^2 &\leq \frac{1}{2} \|U^{n-1}\|_N^2 - \frac{\Delta t^\gamma}{2} \sum_{k=0}^n (b_{n-k} - b_{n-k-1}) \left(d_\gamma \left(|U^k|_{1,N}^2 + |U^n|_{1,N}^2 \right) + r_\gamma \left(\|U^k\|_N^2 + \|U^n\|_N^2 \right) \right) + \\ &\quad + \Delta t \left(\varepsilon \|U^n\|_N^2 + \frac{1}{4\varepsilon} \|f^n\|_N^2 \right). \end{aligned}$$

Reorganizando os somatórios

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|U^n\|_N^2 + \frac{\Delta t^\gamma}{2} \sum_{k=0}^n b_{n-k} \left(d_\gamma |U^k|_{1,N}^2 + r_\gamma \|U^k\|_N^2 \right) &\leq \frac{1}{2} \|U^{n-1}\|_N^2 + \frac{\Delta t^\gamma}{2} \sum_{k=0}^n b_{n-k-1} \left(d_\gamma |U^k|_{1,N}^2 + r_\gamma \|U^k\|_N^2 \right) - \\ &\quad - \frac{\Delta t^\gamma}{2} \sum_{k=0}^n (b_{n-k} - b_{n-k-1}) \left(d_\gamma |U^n|_{1,N}^2 + r_\gamma \|U^n\|_N^2 \right) + \Delta t \left(\varepsilon \|U^n\|_N^2 + \frac{1}{4\varepsilon} \|f^n\|_N^2 \right). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Consideremos a fórmula de energia dada por

$$E^n = \|U^n\|_N^2 + \Delta t^\gamma \sum_{k=0}^n b_{n-k} \left(d_\gamma |U^k|_{1,N}^2 + r_\gamma \|U^k\|_N^2 \right). \quad (4.30)$$

Aplicando em (4.29) a fórmula de energia

$$\frac{1}{2} E^n \leq \frac{1}{2} E^{n-1} - \frac{\Delta t^\gamma}{2} \sum_{k=0}^n \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(d_\gamma |U^n|_{1,N}^2 + r_\gamma \|U^n\|_N^2 \right) + \Delta t \left(\varepsilon \|U^n\|_N^2 + \frac{1}{4\varepsilon} \|f^n\|_N^2 \right).$$

Pela definição de b_n

$$E^n + \Delta t^\gamma b_n \left(d_\gamma |U^n|_{1,N}^2 + r_\gamma \|U^n\|_N^2 \right) \leq E^{n-1} + \Delta t \left(2\varepsilon \|U^n\|_N^2 + \frac{1}{2\varepsilon} \|f^n\|_N^2 \right),$$

que equivale a

$$E^n + \Delta t^\gamma b_n r_\gamma \|U^n\|_N^2 \leq E^{n-1} + \Delta t \left(2\varepsilon \|U^n\|_N^2 + \frac{1}{2\varepsilon} \|f^n\|_N^2 \right).$$

Escolhendo $\varepsilon = \frac{r_\gamma}{2C_5}$ que satisfaz

$$2\varepsilon \Delta t \leq 2C_5 \varepsilon \Delta t^\gamma b_n \leq \Delta t^\gamma b_n r_\gamma,$$

temos assim

$$E^n + \Delta t^\gamma b_n r_\gamma \|U^n\|_N^2 \leq E^{n-1} + \Delta t^\gamma b_n r_\gamma \|U^n\|_N^2 + \frac{C_5}{r_\gamma} \Delta t \|f^n\|_N^2.$$

Conseguimos simplificar a inequação anterior

$$E^n \leq E^{n-1} + C_6 \Delta t \|f^n\|_N^2,$$

com $C_6 = \frac{C_5}{r_\gamma}$.

Utilizando a recorrência da fórmula da energia, tem-se

$$\begin{aligned} E^n &\leq E^0 + C_6 \Delta t \sum_{k=1}^n \|f^k\|_N^2 \\ &\leq \|U^0\|_N^2 + \Delta t^\gamma \left(d_\gamma |U^0|_{1,N}^2 + r_\gamma \|U^0\|_N^2 \right) + C_6 \Delta t \sum_{k=1}^n \|f^k\|_N^2. \end{aligned}$$

Obtemos assim a expressão para $\|U^n\|_N^2$

$$\|U^n\|_N^2 \leq (1 + \Delta t^\gamma r_\gamma) \|U^0\|_N^2 + \Delta t^\gamma d_\gamma |U^0|_{1,N}^2 + C_6 \max_{0 \leq k \leq n} \|f^k\|_N^2. \quad \square$$

4.3.2 Convergência

Tal como na análise da convergência do método de Euler explícito, precisamos de averiguar a ordem do erro de truncatura. Pela definição apresentada em (4.4), tem-se

$$\varphi(x_j, t_n) = \delta_t u^{n-\frac{1}{2}} - \left(d_\gamma {}^{GL} \delta_t^{(1-\gamma)} (\delta_x^2 u_j^n) - r_\gamma {}^{GL} \delta_t^{(1-\gamma)} u_j^n \right) - f_j^n.$$

Atendendo às aproximações definidas em (3.27) e (3.33) obtemos

$$\begin{aligned} \varphi(x_j, t_n) &= \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t) - d_\gamma \left({}_0 D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)(x_j, t_n) - \mathcal{O}(\Delta x^2 + \Delta t) + r_\gamma \left({}_0 D_t^{1-\gamma} u \right)(x_j, t_n) \\ &\quad + \mathcal{O}(\Delta t) - f(x_j, t_n) \\ &= \mathcal{O}(\Delta x^2 + \Delta t). \end{aligned}$$

Com o teorema seguinte conseguimos majorar o erro associado a cada iteração, provando assim a convergência do método.

Teorema 11. *Sejam u_j^n e U_j^n , com $(j = 0, 1, \dots, N; n = 1, 2, \dots, n_T)$, as soluções de (3.12) e (3.34) respetivamente. Fazendo $e_j^n = u_j^n - U_j^n$ e seja $e^n = [e_0^n, e_1^n, \dots, e_N^n]^T$ bem como $\varphi^n = [\varphi_0^n, \varphi_1^n, \dots, \varphi_N^n]^T$, então existe uma constante C independente de n , Δt e Δx tal que*

$$\|e^n\|_N \leq C (\Delta t + \Delta x^2).$$

Demonstração. Facilmente obtemos

$$e_j^n = e_j^{n-1} + \Delta t^\gamma \sum_{k=0}^{n-1} \omega_{n-k}^{(1-\gamma)} \left(d_\gamma \delta_x^2 e_j^k - r_\gamma e_j^k \right) + \Delta t \varphi_j^n.$$

Pelo Teorema 10, conseguimos limitar $\|e^n\|_N^2$

$$\|e^n\|_N^2 \leq (1 + \Delta t^\gamma (4d_\gamma + r_\gamma)) \|e^0\|_N^2 + C_6 \max_{0 \leq k \leq n_T} \|\varphi^k\|_N^2.$$

Como $\|e^0\|_N = 0$ e $\varphi_i^n = \mathcal{O}(\Delta t + \Delta x^2)$, vem de imediato que

$$\|e^n\|_N \leq C (\Delta t + \Delta x^2).$$

□

4.4 Resultados numéricos

Nesta secção apresentamos alguns resultados numéricos que foram obtidos com a implementação dos métodos de Euler explícito e implícito para a equação da difusão anómala e reação. A implementação foi feita no MATLAB. Começamos por verificar a ordem de convergência do método explícito para alguns valores de γ e para diferentes soluções exatas, e discutiremos como estas afetam a ordem de convergência do método. De seguida apresentamos a convergência para o método implícito. Na

secção final, mostraremos algumas soluções numéricas obtidas através do método de Euler explícito para a equação em estudo, com a finalidade de observarmos o efeito do parâmetro γ em diferentes instantes de tempo. Apresentaremos ainda o efeito do coeficiente de reação r_γ , para valores de γ distintos.

4.4.1 Ordem de convergência do método explícito

Pretendemos ilustrar a ordem de convergência do método de Euler explícito (3.28), para a equação da difusão anômala e reação (3.12).

Vamos determinar o erro entre a solução exata e a solução numérica, para o instante $t_n = T$, do seguinte modo

$$\|e\|_\infty = \max\{u(x_j, T) - U(x_j, T)\}, \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (4.31)$$

onde $u(x_j, T)$ e $U(x_j, T)$, para $j = 0, 1, \dots, N$ são soluções de (3.12) e (3.28). A ordem de convergência do método será obtida pela seguinte igualdade

$$p = \frac{\ln\left(\frac{\|e_1\|}{\|e_2\|}\right)}{\ln\left(\frac{\Delta t_1}{\Delta t_2}\right)}. \quad (4.32)$$

De seguida, serão apresentados alguns problemas de difusão anômala. Consideramos soluções diferentes para verificar se afetam a ordem de convergência do método, já que a ordem de convergência de Δt , enunciada no Teorema 6, para a aproximação da derivada fracionária se verifica para uma função definida em \mathbb{R} . Assim, para ser verdadeira para uma função definida em $[0, T]$ temos que admitir condições de regularidade associadas à função extensão $\tilde{u}(x, t)$ que é igual a $u(x, t)$ para $t \geq 0$ e 0 para $t < 0$. Pelo que a regularidade da extensão $\tilde{u}(x, t)$ não é a mesma que a da função $u(x, t)$.

Consideremos o problema de valor inicial para o problema de difusão anômala

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \left({}_0D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)(x, t) + e^x \left((1+\gamma)t^\gamma - \frac{\Gamma(2+\gamma)}{\Gamma(1+2\gamma)} t^{2\gamma} \right), & (x, t) \in (0, 1) \times (0, T], \\ u(0, t) = t^{1+\gamma}, & t \in (0, T], \\ u(1, t) = et^{1+\gamma}, & t \in (0, T], \\ u(x, 0) = 0, & x \in [0, 1]. \end{cases} \quad (4.33)$$

A solução exata deste problema é

$$u(x, t) = e^x t^{1+\gamma}.$$

Na Tabela 4.1 estão representados, para cada valor de γ os erros máximos para cada valor de Δt considerado, tomando $\Delta x = 2^{-4}$.

	Δt	n_T	$\ e\ _\infty$	p
$\gamma = 1$	9.7656×10^{-4}	51	7.4217×10^{-5}	
	4.8828×10^{-4}	102	3.7309×10^{-5}	0.9922
	2.4414×10^{-4}	204	1.8713×10^{-5}	0.9955
	1.2207×10^{-4}	409	9.3968×10^{-6}	0.9938
$\gamma = 0.9$	4.5208×10^{-4}	110	3.7854×10^{-5}	
	2.2604×10^{-4}	221	1.9033×10^{-5}	0.9920
	1.1302×10^{-4}	442	9.5491×10^{-6}	0.9950
	5.6510×10^{-5}	884	4.8006×10^{-6}	0.9922
$\gamma = 0.8$	1.7263×10^{-4}	289	1.4985×10^{-5}	
	8.6314×10^{-5}	579	7.5484×10^{-6}	0.9893
	4.3157×10^{-5}	1158	3.8217×10^{-6}	0.9820
	2.1578×10^{-5}	2317	1.9573×10^{-6}	0.9653
$\gamma = 0.7$	5.0069×10^{-5}	998	4.2171×10^{-6}	
	2.5034×10^{-5}	1997	2.1935×10^{-6}	0.9430
	1.2517×10^{-5}	3994	1.1806×10^{-6}	0.8937
	6.2585×10^{-6}	7989	6.7389×10^{-7}	0.8089
$\gamma = 0.6$	9.6124×10^{-6}	5201	9.3299×10^{-7}	
	4.8062×10^{-6}	10403	6.1011×10^{-7}	0.6128
	2.4031×10^{-6}	20806	4.4848×10^{-7}	0.4440
	1.2015×10^{-6}	41614	3.6760×10^{-7}	0.2869
$\gamma = 0.5$	9.5365×10^{-7}	52430	5.0955×10^{-7}	
	4.7683×10^{-7}	104860	4.8771×10^{-7}	0.0632
	2.3812×10^{-7}	209720	4.7676×10^{-7}	0.0327

Tabela 4.1 Resultados relativos ao problema (4.33) em $T = 0.05$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$.

Consideremos agora o seguinte problema de valor inicial para o problema de difusão anômala

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \left({}_0D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) (x,t) + 2e^x \left(t - \frac{1}{\Gamma(2+\gamma)} t^{1+\gamma} \right), & (x,t) \in (0,1) \times (0,T], \\ u(0,t) = t^2, & t \in (0,T], \\ u(1,t) = et^2, & t \in (0,T], \\ u(x,0) = 0, & x \in [0,1]. \end{cases} \quad (4.34)$$

A solução exata deste problema é

$$u(x,t) = e^x t^2.$$

Na Tabela 4.2 estão representados, para cada valor de γ os erros máximos para cada valor de Δt considerado, tomando $\Delta x = 2^{-4}$.

	Δt	n_T	$\ e\ _\infty$	p
$\gamma = 1$	9.7656×10^{-4}	51	7.4217×10^{-5}	
	4.8828×10^{-4}	102	3.7309×10^{-5}	0.9922
	2.4414×10^{-4}	204	1.8713×10^{-5}	0.9955
	1.2207×10^{-4}	409	9.3968×10^{-6}	0.9938
$\gamma = 0.9$	4.5208×10^{-4}	110	3.0141×10^{-5}	
	2.2604×10^{-4}	221	1.5156×10^{-5}	0.9918
	1.1302×10^{-4}	442	7.6018×10^{-6}	0.9955
	5.6510×10^{-5}	884	3.8199×10^{-6}	0.9928
$\gamma = 0.8$	1.7263×10^{-4}	289	9.6737×10^{-6}	
	8.6314×10^{-5}	579	4.8675×10^{-6}	0.9909
	4.3157×10^{-5}	1158	2.4582×10^{-6}	0.9856
	2.1578×10^{-5}	2317	1.2534×10^{-6}	0.9716
$\gamma = 0.7$	5.0069×10^{-5}	998	2.2491×10^{-6}	
	2.5034×10^{-5}	1997	1.1570×10^{-6}	0.9589
	1.2517×10^{-5}	3994	6.1063×10^{-7}	0.9220
	6.2585×10^{-6}	7989	3.3747×10^{-7}	0.8555
$\gamma = 0.6$	9.6124×10^{-6}	5201	3.8317×10^{-7}	
	4.8062×10^{-6}	10403	2.3254×10^{-7}	0.7205
	2.4031×10^{-6}	20806	1.5721×10^{-7}	0.5647
	1.2015×10^{-6}	41614	1.1955×10^{-7}	0.3951
$\gamma = 0.5$	9.5365×10^{-6}	52430	1.1822×10^{-7}	
	4.7683×10^{-7}	104860	1.0879×10^{-7}	0.1200
	2.3812×10^{-7}	209720	1.0407×10^{-7}	0.0639

Tabela 4.2 Resultados relativos ao problema (4.34) em $T = 0.05$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$.

Tomemos agora o seguinte problema de valor inicial para o problema de difusão anómala

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \left({}_0D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)(x,t) + e^x \left(5t^4 - \frac{\Gamma(6)}{\Gamma(5+\gamma)} t^{4+\gamma} \right), & (x,t) \in (0,1) \times (0,T], \\ u(0,t) = t^5, & t \in (0,T], \\ u(1,t) = et^5, & t \in (0,T], \\ u(x,0) = 0, & x \in [0,1]. \end{cases} \quad (4.35)$$

A solução exata deste problema é

$$u(x,t) = e^x t^5.$$

Na Tabela 4.3 estão representados, para cada valor de γ os erros máximos para cada valor de Δt considerado, tomando $\Delta x = 2^{-4}$.

	Δt	n_T	$\ e\ _\infty$	p
$\gamma = 1$	9.7656×10^{-4}	51	2.6429×10^{-8}	
	4.8828×10^{-4}	102	1.3592×10^{-8}	0.9594
	2.4414×10^{-4}	204	6.8922×10^{-9}	0.9797
	1.2207×10^{-4}	409	3.5037×10^{-9}	0.9761
$\gamma = 0.9$	4.5208×10^{-4}	110	1.1559×10^{-8}	
	2.2604×10^{-4}	221	5.9565×10^{-9}	0.9565
	1.1302×10^{-4}	442	2.9981×10^{-9}	0.9904
	5.6510×10^{-5}	884	1.5049×10^{-9}	0.9943
$\gamma = 0.8$	1.7263×10^{-4}	289	4.0569×10^{-9}	
	8.6314×10^{-5}	579	2.0526×10^{-9}	0.9829
	4.3157×10^{-5}	1158	1.0305×10^{-9}	0.9942
	2.1578×10^{-5}	2317	5.1848×10^{-10}	0.9909
$\gamma = 0.7$	5.0069×10^{-5}	998	1.0245×10^{-9}	
	2.5034×10^{-5}	1997	5.1647×10^{-10}	0.9881
	1.2517×10^{-5}	3994	2.6115×10^{-10}	0.9838
	6.2585×10^{-6}	7989	1.3346×10^{-10}	0.9685
$\gamma = 0.6$	9.6124×10^{-6}	5201	1.6352×10^{-10}	
	4.8062×10^{-6}	10403	8.5665×10^{-11}	0.9326
	2.4031×10^{-6}	20806	4.6699×10^{-11}	0.8753
	1.2015×10^{-6}	41614	2.7214×10^{-11}	0.7790
$\gamma = 0.5$	9.5365×10^{-6}	52430	2.1351×10^{-11}	
	4.7683×10^{-7}	104860	1.5806×10^{-11}	0.4338
	2.3812×10^{-7}	209720	1.3030×10^{-11}	0.2781

Tabela 4.3 Resultados relativos ao problema (4.35) em $T = 0.05$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$.

Por fim consideremos o seguinte problema de valor inicial para o problema de difusão anômala

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \left({}_0D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)(x,t) + e^x \left(9t^8 - \frac{\Gamma(10)}{\Gamma(9+\gamma)} t^{8+\gamma} \right), & (x,t) \in (0,1) \times (0,T], \\ u(0,t) = t^9, & t \in (0,T], \\ u(1,t) = et^9, & t \in (0,T], \\ u(x,0) = 0, & x \in [0,1]. \end{cases} \quad (4.36)$$

A solução exata deste problema é

$$u(x,t) = e^x t^9.$$

Na Tabela 4.4 estão representados, para cada valor de γ os erros máximos para cada valor de Δt considerado, tomando $\Delta x = 2^{-4}$.

	Δt	n_T	$\ e\ _\infty$	p
$\gamma = 1$	9.7656×10^{-4}	51	2.9641×10^{-13}	
	4.8828×10^{-4}	102	1.5725×10^{-13}	0.9146
	2.4414×10^{-4}	204	8.0971×10^{-14}	0.9575
	1.2207×10^{-4}	409	4.1884×10^{-14}	0.9510
$\gamma = 0.9$	4.5208×10^{-4}	110	1.3562×10^{-13}	
	2.2604×10^{-4}	221	7.2231×10^{-14}	0.9089
	1.1302×10^{-4}	442	3.6594×10^{-14}	0.9809
	5.6510×10^{-5}	884	1.8425×10^{-14}	0.9900
$\gamma = 0.8$	1.7263×10^{-4}	289	5.0188×10^{-14}	
	8.6314×10^{-5}	579	2.5694×10^{-14}	0.9659
	4.3157×10^{-5}	1158	1.2919×10^{-14}	0.9920
	2.1578×10^{-5}	2317	6.5042×10^{-15}	0.9899
$\gamma = 0.7$	5.0069×10^{-5}	998	1.3179×10^{-14}	
	2.5034×10^{-5}	1997	6.6444×10^{-15}	0.9880
	1.2517×10^{-5}	3994	3.3395×10^{-15}	0.9925
	6.2585×10^{-6}	7989	1.6855×10^{-15}	0.9865
$\gamma = 0.6$	9.6124×10^{-6}	5201	2.1579×10^{-15}	
	4.8062×10^{-6}	10403	1.0997×10^{-15}	0.9726
	2.4031×10^{-6}	20806	5.6942×10^{-16}	0.9495
	1.2015×10^{-6}	41614	3.0421×10^{-16}	0.9044
$\gamma = 0.5$	9.5365×10^{-6}	52430	2.1322×10^{-16}	
	4.7683×10^{-7}	104860	1.3407×10^{-16}	0.6694
	2.3812×10^{-7}	209720	9.4442×10^{-17}	0.5045

Tabela 4.4 Resultados relativos ao problema (4.36) em $T = 0.05$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$.

Analisando as tabelas anteriormente apresentadas, notamos que a aproximação feita para a derivada fracionária é de primeira ordem para valores de γ próximos de 1, e que não acontece para valores inferiores ou iguais a 0.6. Vimos também que, para estes últimos valores de γ , conseguimos obter uma ordem de convergência mais próxima de 1, aumentando a regularidade da extensão $\tilde{u}(x, t)$ para $t < 0$.

4.4.2 Ordem de convergência do método implícito

Nesta secção, à semelhança da anterior, pretendemos ilustrar a ordem de convergência do método de Euler implícito (3.34) para a equação da difusão anômala e reação (3.12).

O erro entre a solução exata e a solução aproximada, para o instante $t_n = T$, bem como a ordem de convergência do método serão definidas novamente por (4.31) e (4.32), respetivamente.

Consideremos o problema de valor inicial (4.33) para o problema de difusão anômala. Na Tabela 4.5 estão apresentados, para cada valor de γ os erros máximos para cada valor de Δt considerado, tomando $\Delta x = 2^{-4}$.

	Δt	n_T	$\ e\ _\infty$	p
$\gamma = 1$	1/256	25	5.0051×10^{-4}	
	1/512	51	2.5486×10^{-4}	0.9737
	1/1024	102	1.2789×10^{-4}	0.9948
	1/2048	204	6.4123×10^{-5}	0.9960
$\gamma = 0.9$	1/256	25	5.0612×10^{-4}	
	1/512	51	2.5710×10^{-4}	0.9771
	1/1024	102	1.2913×10^{-4}	0.9935
	1/2048	204	6.4823×10^{-5}	0.9943
$\gamma = 0.8$	1/256	25	4.9104×10^{-4}	
	1/512	51	2.4905×10^{-4}	0.9794
	1/1024	102	1.2526×10^{-4}	0.9915
	1/2048	204	6.3002×10^{-5}	0.9915
$\gamma = 0.7$	1/256	25	4.5837×10^{-4}	
	1/512	51	2.3258×10^{-4}	0.9788
	1/1024	102	1.1730×10^{-4}	0.9876
	1/2048	204	5.9198×10^{-5}	0.9865
$\gamma = 0.6$	1/256	25	4.1165×10^{-4}	
	1/512	51	2.0966×10^{-4}	0.9734
	1/1024	102	1.0629×10^{-4}	0.9799
	1/2048	204	5.3977×10^{-5}	0.9776
$\gamma = 0.5$	1/256	25	3.5197×10^{-4}	
	1/512	51	1.8086×10^{-4}	0.9606
	1/1024	102	9.2591×10^{-5}	0.9659
	1/2048	204	4.7540×10^{-5}	0.9617
$\gamma = 0.4$	1/256	25	2.7765×10^{-4}	
	1/512	51	1.4512×10^{-4}	0.9361
	1/1024	102	7.5637×10^{-5}	0.9401
	1/2048	204	3.9632×10^{-5}	0.9324
$\gamma = 0.3$	1/256	25	1.8628×10^{-4}	
	1/512	51	1.0052×10^{-4}	0.8900
	1/1024	102	5.4244×10^{-5}	0.8899
	1/2048	204	2.9598×10^{-5}	0.8740

Tabela 4.5 Resultados relativos ao problema (4.33) em $T = 0.1$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$.

Podemos observar que a perda de convergência de primeira ordem no tempo, não se verifica para o método implícito, para este problema de valor inicial, como foi possível verificar para o método explícito.

Consideremos ainda o problema de valor inicial (4.34) para o problema de difusão anômala. Na Tabela 4.6 estão apresentados, para cada valor de γ os erros máximos para cada valor de Δt considerado, tomando $\Delta x = 2^{-4}$.

	Δt	n_T	$\ e\ _\infty$	p
$\gamma = 1$	1/256	25	5.0051×10^{-4}	
	1/512	51	2.5486×10^{-4}	0.9737
	1/1024	102	1.2789×10^{-4}	0.9948
	1/2048	204	6.4123×10^{-5}	0.9960
$\gamma = 0.9$	1/256	25	4.3491×10^{-4}	
	1/512	51	2.2117×10^{-4}	0.9755
	1/1024	102	1.1099×10^{-4}	0.9947
	1/2048	204	5.5685×10^{-5}	0.9952
$\gamma = 0.8$	1/256	25	3.6816×10^{-4}	
	1/512	51	1.8705×10^{-4}	0.9769
	1/1024	102	9.3888×10^{-5}	0.9944
	1/2048	204	4.7140×10^{-5}	0.9940
$\gamma = 0.7$	1/256	25	3.0404×10^{-4}	
	1/512	51	1.5441×10^{-4}	0.9775
	1/1024	102	7.7537×10^{-5}	0.9938
	1/2048	204	3.8979×10^{-5}	0.9922
$\gamma = 0.6$	1/256	25	2.4482×10^{-4}	
	1/512	51	1.2437×10^{-4}	0.9770
	1/1024	102	6.2501×10^{-5}	0.9927
	1/2048	204	3.1479×10^{-5}	0.9895
$\gamma = 0.5$	1/256	25	1.9126×10^{-4}	
	1/512	51	9.7259×10^{-5}	0.9756
	1/1024	102	4.8940×10^{-5}	0.9908
	1/2048	204	2.4717×10^{-5}	0.9855
$\gamma = 0.4$	1/256	25	1.4332×10^{-4}	
	1/512	51	7.3002×10^{-5}	0.9732
	1/1024	102	3.6813×10^{-5}	0.9877
	1/2048	204	1.8672×10^{-5}	0.9794
$\gamma = 0.3$	1/256	25	1.0065×10^{-4}	
	1/512	51	5.1406×10^{-5}	0.9694
	1/1024	102	2.6018×10^{-5}	0.9824
	1/2048	204	1.3290×10^{-5}	0.9692

Tabela 4.6 Resultados relativos ao problema (4.34) em $T = 0.1$ considerando $\Delta x = 2^{-4}$.

Notemos que no caso do método de Euler implícito para a equação da difusão anómala e reação, não é necessário ajustar o valor de Δt , para um determinado Δx previamente fixado, à media que γ varia. Este facto é consequência de não existirem condições de estabilidade para este método, como acontece para o método de Euler explícito, cujos resultados estão ilustrados na secção anterior.

4.4.3 Influência do parâmetro γ

O primeiro modelo apresentado trata-se de um modelo de difusão, ou seja, com coeficiente de reação nulo, descrito por

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \left({}_0D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)(x,t), & (x,t) \in (-8,8) \times (0,1], \\ u(-8,t) = u(8,t) = 0, & t \in (0,1], \\ u(x,0) = \frac{1}{\sqrt{0.2}} e^{-\frac{x^2}{0.2}}, & x \in [-8,8]. \end{cases} \quad (4.37)$$

Abaixo encontram-se os gráficos obtidos para $\gamma = 0.5$ (difusão anômala) e $\gamma = 1$ (difusão clássica), para diferentes instantes de t .

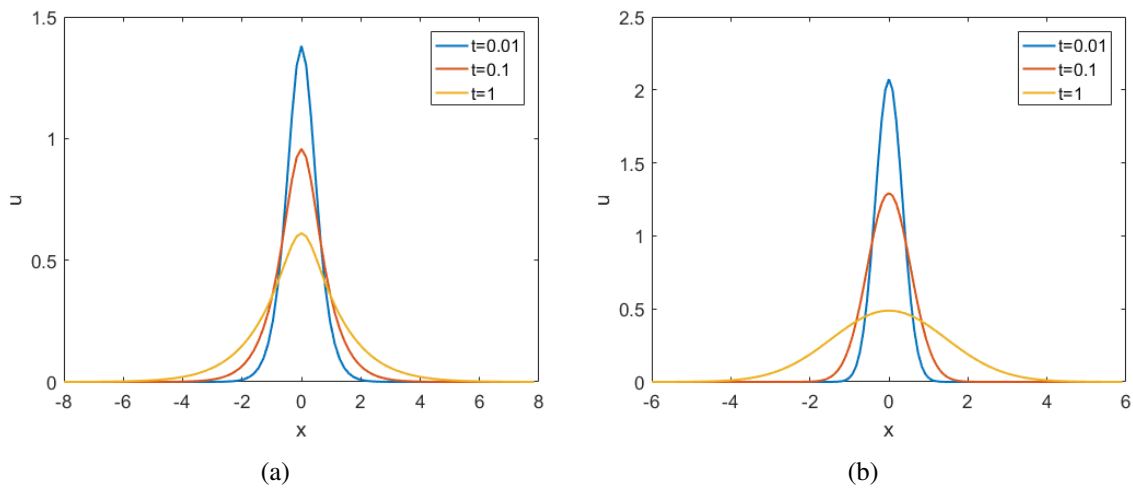


Fig. 4.1 Solução numérica do problema (4.37) com $d_\gamma = 1$ e $r_\gamma = 0$. (a) $\gamma = 0.5$. (b) $\gamma = 1$.

Com o objetivo de analisar o efeito do parâmetro γ , para os mesmos instantes de tempo, esboçaram-se os seguintes gráficos

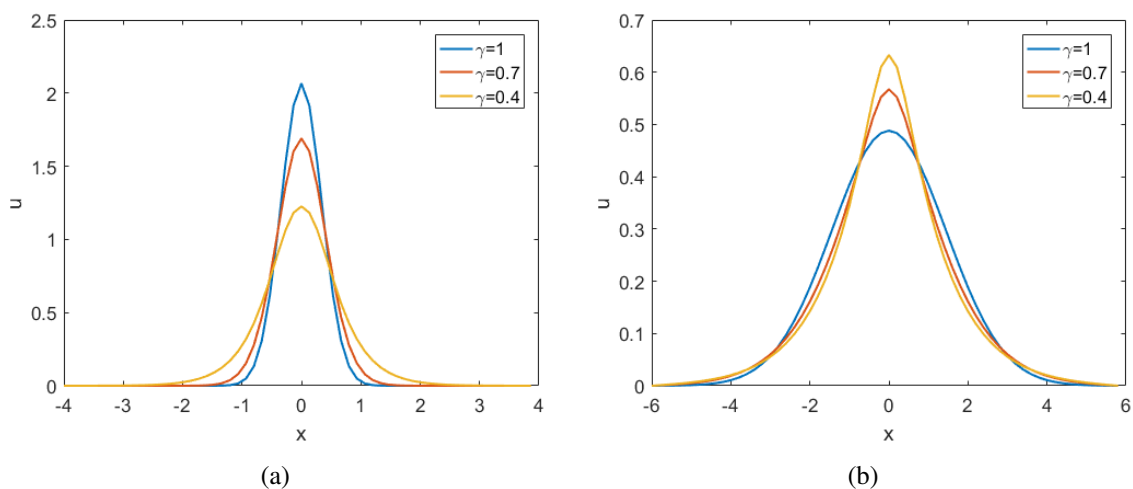


Fig. 4.2 Solução numérica do problema (4.37) com $d_\gamma = 1$ e $r_\gamma = 0$. (a) $t = 0.01$. (b) $t = 1$.

No segundo modelo, o coeficiente de reação é não nulo, estamos perante um modelo de difusão reação descrito por

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \left({}_0D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)(x,t) - u(x,t), & (x,t) \in (-6,6) \times (0,1], \\ u(-6,t) = u(6,t) = 0, & t \in (0,1], \\ u(x,0) = \frac{1}{\sqrt{0.2}} e^{-\frac{x^2}{0.2}}, & x \in [-6,6]. \end{cases} \quad (4.38)$$

Abaixo encontram-se os gráficos obtidos para $\gamma = 0.5$ (difusão anómala e reação) e $\gamma = 1$ (difusão e reação clássica), para diferentes instantes de t .

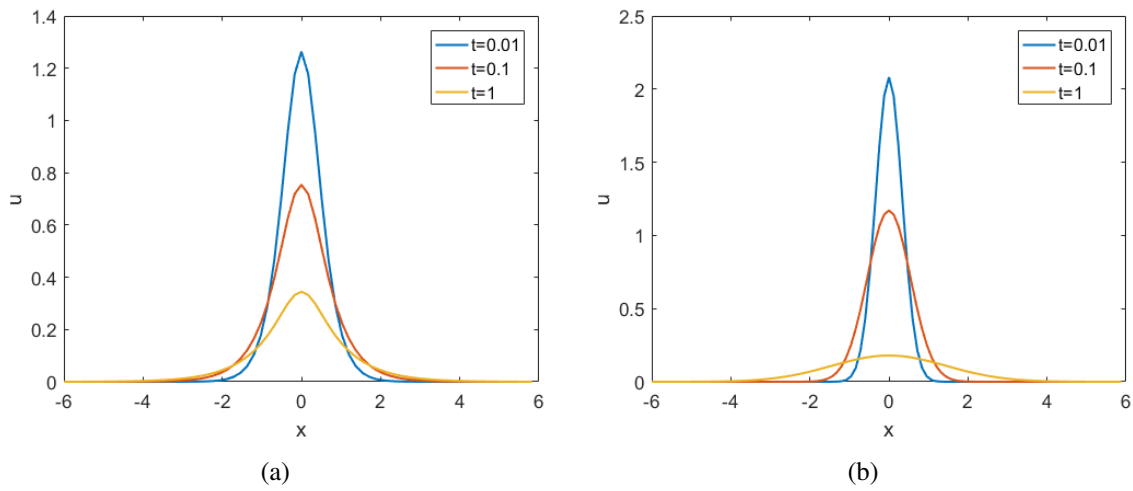


Fig. 4.3 Solução numérica do problema (4.38) com $d_\gamma = 1$ e $r_\gamma = 1$. (a) $\gamma = 0.5$. (b) $\gamma = 1$.

Por forma a observar o efeito do parâmetro r_γ , quer para a equação de difusão e reação anómala quer para a equação de difusão e reação clássica, implementamos um terceiro modelo descrito por

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \left({}_0D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)(x,t) - r_\gamma u(x,t), & (x,t) \in (-4,4) \times (0,1], \\ u(-4,t) = u(4,t) = 0, & t \in (0,1], \\ u(x,0) = \frac{1}{\sqrt{0.2}} e^{-\frac{x^2}{0.2}}, & x \in [-4,4]. \end{cases} \quad (4.39)$$

Abaixo encontram-se as imagens obtidas para a solução tomando $\gamma = 0.5$ e $\gamma = 1$.

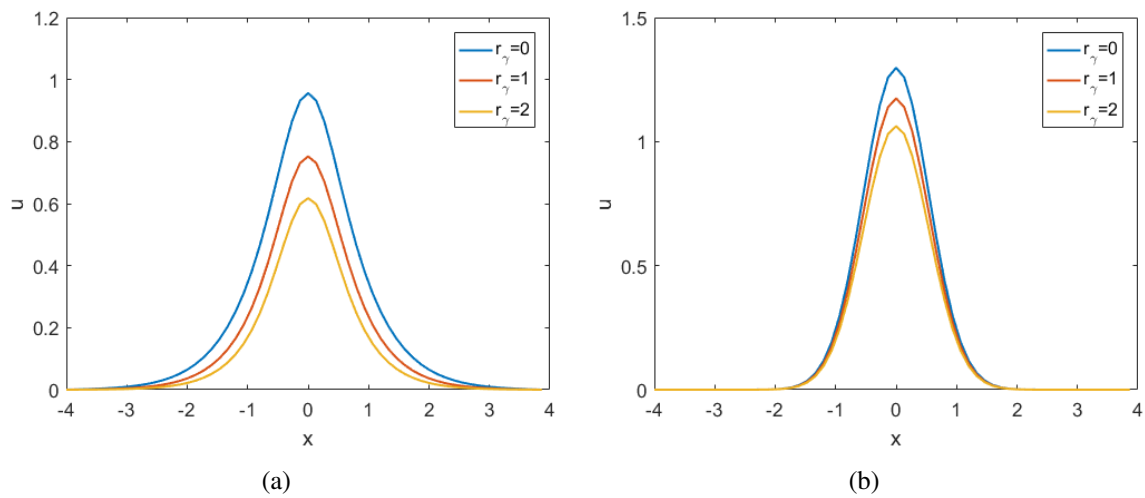


Fig. 4.4 Solução numérica do problema (4.39) com $d_\gamma = 1$ e $t = 0.1$. (a) $\gamma = 0.5$. (b) $\gamma = 1$.

Com a análise dos gráficos na Figura 4.2 e na Figura 4.3, constatamos que a difusão anômala e reação gera concentrações inferiores às geradas pela difusão e reação clássica, o que também se observa na Figura 4.2. Mais ainda, observa-se que com a diminuição do parâmetro γ o decréscimo da concentração é menos notório. Na Figura 4.4 verifica-se que a difusão anômala e reação, para valores de r_γ maiores, produz soluções mais distintas relativamente à difusão e reação clássica.

Capítulo 5

Conclusão

Nesta dissertação obteve-se, a partir de duas densidades mesoscópicas, uma equação integro-diferencial que representa equações de difusão e reação clássica e anómala. Estas equações foram deduzidas quando a distribuição atribuída à função densidade do tempo de absorção foi, respetivamente, uma distribuição exponencial e uma distribuição de lei de potência.

Tendo como objetivo encontrar uma solução aproximada do problema de difusão anómala e reação foram apresentados dois métodos numéricos, o método de Euler explícito e o implícito, para esta equação. Recorreu-se à fórmula de Grünwald-Letnikov para aproximar a derivada fracionária.

A estabilidade e convergência de ambos os métodos numéricos foram estudadas analiticamente. Adicionalmente foram apresentados vários testes numéricos para verificar a convergência do método numérico explícito e implícito. Pelas tabelas apresentadas na Secção 4.4.1 a aproximação estabelecida para a derivada fracionária é de primeira ordem para valores de γ próximos de 1, falhando para valores inferiores ou iguais a 0.6. Também se pode observar que quanto mais regular for a extensão da solução, para $t < 0$ melhores são os resultados obtidos. A ordem de convergência obtida numericamente não contradiz o resultado teórico provado, visto que o teorema que permite aproximar a derivada de Riemann-Liouville, pela fórmula de Grünwald Letnikov, refere-se a soluções definidas para $t \in \mathbb{R}$, e os testes foram efetuados para intervalos limitados, com $0 < t < T$. Por sua vez, na secção 4.4.2 observa-se que a convergência do método de Euler implícito é de primeira ordem para os diferentes valores de γ testados, inclusive na extensão das soluções menos regulares.

Relativamente aos gráficos apresentados na Secção 4.4.3 pode-se concluir que a difusão anómala e reação, para os mesmos instantes de tempo, gera concentrações inferiores comparativamente à difusão e reação clássica. Observa-se também um levantamento das caudas da função gaussiana com a redução do parâmetro γ . Ao alterar apenas o coeficiente de reação r_γ , nota-se que este produz um efeito mais relevante quando se trata da difusão anómala e reação, do que na difusão e reação clássica, ou seja as soluções são mais distintas à medida que se aumenta o parâmetro r_γ .

Bibliografia

- [1] J. Bear, *Dynamics of fluids in porous media*, Dover Publications, Inc, 1972.
- [2] R. J. Beerends, H. G. ter Morsche, J. C. van den Berg, E. M. van den Berg, E. M. van de Vrie; *Fourier and Laplace Transforms*; Cambridge university Press; 2003.
- [3] P. L. Butzer, R. J. Nessel, *Fourier Analysis and Approximation*, Volume 1, Academic Press, 1971.
- [4] J. Cao, C. Li, YQ. Chen, Compact difference method for solving the fractional reaction-subdiffusion equation with Neumann boundary value condition, *International Journal of Computer Mathematics*, 92:167-180, 2015.
- [5] F. Celestini, F. Mortessagne, Cosine law at the atomic scale: Toward realistic simulations of Knudsen diffusion, *Physical Review*, 77(2):021202, 2008.
- [6] C.M. Chen, F. Liu, K. Burrage, Finite difference methods and a fourier analysis for the fractional reaction-subdiffusion equation, *Applied Mathematics and Computation*, 198:754-769, 2008.
- [7] J. Crank, *The mathematics of diffusion*, Oxford University Press, 1975.
- [8] A. J. Dammers, M.-O. Coppens, Anomalous Knudsen diffusion in simple pore models, *Diffusion fundamentals*, 2(14):1-2, 2005.
- [9] L. C. Evans, *Partial Differential Equations*, American Mathematical Society, 1998.
- [10] S. Fedotov, S. H. Kim, H. Pitsch, Anomalous Knudsen diffusion and reactions in disordered porous media, *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs*, 2007.
- [11] E. Gonçalves, N. Mendes Lopes, *Probabilidades, princípios teóricos*, Escolar Editora, 2013.
- [12] W. He, W. Lv, J. H. Dickerson, *Gas transport in solid oxide fuel cells*, Springer, 2014.
- [13] B. I. Henry, T. A. M. Langlands, S. L. Wearne, Anomalous diffusion with linear reaction dynamics: From continuous time random walks to fractional reaction-diffusion equations, *Physical Review*, 74(3):031116, 2006.
- [14] B. S. Jovanović, E. Süli, *Analysis of Finite Difference Schemes, For Linear Partial Differential Equations with Generalized Solutions*, Springer, 2014.
- [15] M. Knudsen, *The cosine law in the kinetic of gases*, *Annalen der Physik*, 48:1113-1121, 1915.
- [16] C. Li, F. Zeng, *Numerical Methods for Fractional Calculus*, CRC Press, 2015.
- [17] Y. Li, D. Wang, Improved efficient difference method for the modified anomalous subdiffusion equation with a nonlinear source term, *International Journal of Computer Mathematics*, 94(4):821-840, 2016.
- [18] G. Margolin, B. Berkowitz, Continuous time random walks revisited: first passage time and spatial distributions, *Physica A*, 334:46-66, 2004.

-
- [19] M. E. J. Newman, Power laws, Pareto distributions and Zipf's law, *Contemporary Physics*, 46(5):323-351, 2005.
- [20] I. Podlubny, *Fractional differential equations*, Academic Press, 1999.
- [21] E. Sousa, How to approximate the fractional derivative of order $1 < \alpha < 2$, *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 22(4):1250075, 2012.
- [22] C. Tadjeran, M. M. Meerschaert, H.-P. Scheffler, A second-order accurate numerical approximation for the fractional diffusion equation, *Journal of Computational Physics*, 213:205-213, 2006.