



Revista Eletrônica
Paulista de Matemática

ISSN 2316-9664
Volume 7, dez. 2016
Edição ERMAC

Lislaine Cristina Cardoso
Universidade Estadual
Paulista/UNESP Botucatu
lislaine@ibb.unesp.br

Fernando Luiz Pio dos Santos
Universidade Estadual
Paulista/UNESP Botucatu
flpio@ibb.unesp.br

**Rubens de Figueiredo
Camargo**
Universidade Estadual
Paulista/UNESP Bauru
rubens@fc.unesp.br

Método de diferenças finitas não clássico aplicado ao cálculo fracionário

Nonstandard schemes finite difference applied to fractional calculus

Resumo

A teoria do cálculo fracionário tem se tornado uma importante ferramenta para descrever a dinâmica de sistemas complexos em diversas áreas do conhecimento, como física, biomatemática, química e biologia. Pelo fato de que nem todos os sistemas de equações diferenciais, de ordem inteira ou fracionária, apresentam solução analítica, surge a necessidade de obter métodos numéricos para aproximar tais soluções. No âmbito de cálculo de ordem não inteira há poucos algoritmos desenvolvidos, então apresentamos neste trabalho um método numérico para aproximar a solução de uma equação de ordem fracionária. Este método numérico é dado por meio de diferenças finitas não clássico. Como aplicação para o método proposto é apresentada a solução numérica para a equação logística fracionária e para o modelo de Brusselator fracionário. Esses resultados obtidos através de simulação estão de acordo com os teóricos obtidos através da análise de estabilidade encontrados na literatura.

Palavras-chave: Cálculo Fracionário, Método Numérico, Equação Logística, Modelo de Brusselator.

Abstract

The theory of fractional calculus has become an important tool to describe the dynamics of complex systems in several areas of knowledge, such as physics, biomathematics, chemistry and biology. Due to the fact not all differential equations presents an analytical solution, the need arises to obtain numerical methods to approximate this solutions. In the context of fractional calculus, there are a few developed algorithms, then in this paper we present an numerical method to approximate the solution of fractional equation. This method is given by nonstandard scheme finite difference. As application we shown the numerical solution to fractional logistic equation and to fractional Brusselator model. This results obtained by simulation prove the theoretical it given by stability analysis found in the literature.

Keywords: Fractional Calculus, Numerical methods, Logistic Equation, Brusselator Model.



1 Introdução

Durante as últimas décadas o cálculo fracionário tem se tornado uma importante ferramenta para descrever a dinâmica de sistemas complexos em diversas áreas do conhecimento.

A utilização de conceitos e técnicas do cálculo de ordem não inteira tem possibilitado importantes resultados em várias áreas do conhecimento, como controle e robótica, circuitos elétricos, biomatemática, química, biologia, processos estocásticos, entre outros (CAMARGO; OLIVEIRA, 2015). Além disso é uma ferramenta importante para refinar a descrição de fenômenos naturais, em particular aqueles que possuem dependência temporal (PODLUBNY, 1999).

Pelo fato de que nem todos os sistemas de equações diferenciais, de ordem inteira ou fracionária, apresentam solução analítica, surge a necessidade de obter métodos numéricos para aproximar tais soluções.

A essência dos métodos numéricos está na representação discreta (finita) do problema que, em geral, modelado como contínuo (CUMINATO; MENEGUETTE JUNIOR, 2013).

Para os sistemas de ordem inteira, os métodos numéricos mais utilizados para encontrar tais aproximações são Runge Kutta e diferenças finitas (CUMINATO; MENEGUETTE JUNIOR, 2013; FORTUNA, 2000).

A ideia geral do método de diferenças finitas é a discretização do domínio e a substituição das derivadas presentes na equação diferencial por aproximações envolvendo valores numéricos da função. Na prática, substitui-se as derivadas pela razão incremental que converge para o valor da derivada quando o incremento tende a zero (FORTUNA, 2000).

Por outro lado, o método de diferenças finitas não clássico (NSFD) foi introduzido por Mickens e Smith (1990) para encontrar a solução numérica de equações diferenciais ordinárias e parciais, e atualmente tem sido estudado em diversos campos. Esse método consiste na diferenciação de uma função com um dado conjunto finito de valores da variável dependente em determinados pontos conhecidos da variável independente. Além disso, tal método diferentemente do clássico, que utiliza um espaçamento h fixo, leva em conta uma função denominador dependendo de h e de um conjunto de parâmetros λ , isto é, $\phi = \phi(h, \lambda)$ (MICKENS; SMITH, 1990; ONGUN; ARSLAN; GARRAPPA, 2013; WANG; LI, 2007).

No âmbito de cálculo de ordem não inteira há poucos algoritmos desenvolvidos. O método mais utilizado para encontrar numericamente a solução de equações fracionárias é Adam-Bashforth-Moulton (ABMM) (DEMIRCI; OZALP, 2012; DIETHELM et al, 2005).

Então a proposta desse trabalho é construir um esquema envolvendo diferenças finitas não clássico, seguindo o esquema proposto por Mickens e Smith (1990) para aproximar a solução de uma equação de ordem não inteira.

O trabalho está organizado como segue: na seção 1 uma breve introdução ao trabalho; na seção 2 os principais conceitos de cálculo fracionário; na seção 3 a discretização do método NSFD; na seção 4 as aplicação para o método numérico; na seção 5 as principais conclusões.

2 Preliminares

Nessa seção será introduzido alguns conceitos da teoria de cálculo fracionário indispensáveis ao desenvolvimento desse trabalho.

2.1 Cálculo Fracionário

A partir da generalização do conceito de fatorial, feito através da função gama, vamos introduzir a integral fracionária de Riemann-Liouville.

Definição 1 Sejam $f : R \rightarrow R$ uma função integrável e $n \in N$. Definimos as integrais de ordens n e n , denotadas, respectivamente, por I e I^n , como

$$If(t) = \int_0^t f(t_1) dt_1 \quad e \quad I^n f(t) = \int_0^t \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \cdots \int_0^{t_{n-1}} f(t_n) dt_n dt_{n-1} \cdots dt_2 dt_1.$$

Teorema 2 Para $f : R \rightarrow R$ integrável temos

$$I^n f(t) = \phi_n(t) * f(t) = \int_0^t \phi_n(t - \tau) f(\tau) d\tau = \int_0^t \frac{(t - \tau)^{n-1}}{(n-1)!} f(\tau) d\tau, \quad (1)$$

na qual o símbolo $*$ denota a convolução de Laplace e $\phi_n(t)$ a Gel'fand-Shilov, definida para $v \notin \mathbb{Z}_-$, como $\phi_v(t) = \begin{cases} \frac{t^{v-1}}{\Gamma(v)} & \text{se } t \geq 0 \\ 0 & \text{se } t < 0 \end{cases}$ e $\Gamma(v)$ a função Gama definida por $\Gamma(v) = \int_0^\infty e^{-t} t^{v-1} dt$.

Definição 3 Seja $f(t)$ uma função integrável. Utilizamos a generalização do conceito de fatorial pela função gama para definir a integral de Riemann-Liouville de ordem α de $f(t)$, denotada por $I^\alpha f(t)$, como

$$I^\alpha f(t) = \phi_\alpha(t) * f(t) = \int_0^t \frac{(t - \tau)^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} f(\tau) d\tau. \quad (2)$$

Definição 4 Sejam $f(t)$ uma função diferenciável, $m \in N$ e $\alpha \notin N$ tais que $m - 1 < \text{Re}(\alpha) < m$, quando $\alpha = m$, temos a definição usual. A derivada de ordem α no sentido de Caputo é definida como sendo a integral fracionária de uma derivada de ordem inteira, de forma que a lei dos expoentes faça sentido. isto é,

$$D^\alpha f(t) = I^{m-\alpha} D^m f(t) = \phi_{m-\alpha} * D^m f(t). \quad (3)$$

Segue, como consequência da definição, que $D^\alpha t^\beta = t^{\beta-\alpha} \Gamma(\beta + 1) / \Gamma(\beta - \alpha + 1)$, que recupera o resultado clássico quando $\alpha = n$ e $\beta = m$, com $n, m \in N$.

Definição 5 O operador de Grünwald – Letnikov (GL) para derivadas fracionárias é definido como

$$D_{GL}^\alpha f(t) = \lim_{h \rightarrow \infty} h^{-\alpha} \sum_{j=0}^{[k]} w_j^{(\alpha)} f(t - jh) \quad t \in [0, t_f], \quad (4)$$

em que $0 < \alpha < 1$, $[k]$ é a parte inteira de $k = \frac{t-a}{h}$, com a e t sendo os limites reais do operador D^α , o qual denota a derivada fracionária, h é o espaçamento e $w_j^{(\alpha)}$ é o coeficiente GL definido como

$$w_0^{(\alpha)} = 1, \quad w_j^{(\alpha)} = \left(1 - \frac{1 + \alpha}{j}\right) w_{j-1}^{(\alpha)}, \quad j = 1, 2, \dots \quad (5)$$

$$w_0^{(\alpha-1)} = 1, \quad w_j^{(\alpha-1)} = \left(1 - \frac{\alpha}{j}\right) w_{j-1}^{(\alpha-1)}, \quad j = 1, 2, \dots \quad (6)$$

Lema 6 *Sejam $0 < \alpha < 1$ e $w_n^{(\alpha)}, w_n^{(\alpha-1)}$ os coeficientes do operador GL. Para $n = 1, 2, \dots$ tem-se:*

- i) $-1 < w_n^{(\alpha)} < 0$;*
- ii) $0 < w_n^{(\alpha-1)} < 1$.*

3 Método de diferenças finitas

Nessa seção apresentamos a ideia básica para a discretização através do método de diferenças finitas para uma equação diferencial. Posteriormente apresentamos o processo de discretização NSFD para uma equação de ordem inteira e para uma equação de ordem arbitrária.

O método NSFD foi proposto por Mickens e Smith (1990), e atualmente é utilizado em várias aplicações numéricas (MICKENS; SMITH, 1990; ONGUN; ARSLAN; GARRAPPA, 2013; ZI-BAEI; NAMJOO, 2015).

3.1 Discretização por diferenças finitas

Considere uma equação diferencial da forma

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y). \quad (7)$$

Então podemos escrever a equação (7)

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y(t+h) - y(t)}{h} + O(h) \quad (8)$$

em que $O(h)$ é o erro de truncamento de ordem h ($h > 0$). Com isso pelo método de diferenças finitas temos a seguinte discretização

$$\frac{dy}{dt} \cong \frac{y(t+h) - y(t)}{h} \quad (9)$$

como erro de ordem h .

3.2 Discretização NSFD

3.2.1 Equação diferencial

Considere uma equação diferencial da forma

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y, \lambda) \quad (10)$$

em que λ é o vetor de parâmetros. O esquema NSFD é construído seguindo dois passos:

1. A derivada do lado esquerdo de (10) é substituída pela representação discreta na forma

$$\frac{dy}{dt} \approx \frac{y_n - y_{n-1}}{\phi(h, \lambda)} \quad (11)$$

em que y_n é uma aproximação de $y(t_n)$, $h > 0$ é o passo de tempo e $\phi(h, \lambda)$ é a função denominador (MICKENS; SMITH, 1990);

2. O termo não linear de (10) é dado pela representação discreta não local

$$F(t, y_n, y_{n-1}, \dots, \lambda). \quad (12)$$

Com isso, podemos escrever a equação (10) como

$$\frac{y_n - y_{n-1}}{\phi(h, \lambda)} = F(t, y_n, y_{n-1}, \dots, \lambda). \quad (13)$$

A derivada discreta do lado esquerdo da equação (13) é uma generalização da representação clássica discreta que é obtida usando $\phi(h, \lambda) = h$. A função denominador $\phi(h, \lambda)$ é uma função de h e deve satisfazer a condição de consistência

$$\phi(h, \lambda) = h + O(h^p), \quad p > \alpha, \quad h \rightarrow 0, \quad (14)$$

em que $O(h^p)$ é o erro de truncamento (CUMINATO; MENEGUETTE JUNIOR, 2013; ONGUN; ARSLAN; GARRAPPA, 2013).

3.3 Equação diferencial de ordem não inteira

Uma equação de ordem fracionária pode ser discretizada de forma análoga ao apresentado anteriormente. Entretanto, devem ser levadas em consideração algumas peculiaridades dos sistemas de ordem fracionária, como o fato de que o operador de ordem fracionária é um operador não local, assim a representação discreta das derivadas deve levar em conta a solução no tempo anterior.

Através do operador GL (4) e do processo descrito na seção anterior, podemos escrever:

$$D_{GL}^\alpha f(t) \cong \frac{1}{\phi(h, \lambda)} \sum_{j=0}^h w_j^{(\alpha)} (f(t - jh)). \quad (15)$$

Com isso decorre da equação (15) que uma equação de ordem não inteira pode ser discretizada como segue

$$\frac{1}{\phi(h, \lambda)} \sum_{j=0}^n w_j^\alpha (x_{n-j} - y_0) = f(t_n, x_n, x_{n-1}, \dots, \lambda), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (16)$$

A condição de consistência (14) não garante a convergência da representação discreta para derivadas fracionárias em (16). Assim a condição de consistência será

$$\phi(h, \lambda) = h^\alpha + O(h^p), \quad p > \alpha. \quad (17)$$

Neste trabalho utilizamos a função denominador ($\phi(h, \mu + 1)$) como dada em Mickens e Smith (1990).

$$\phi(h, \mu + 1) = \frac{1 - e^{-h^\alpha(\mu+1)}}{\mu + 1}. \quad (18)$$

Mais informações acerca da função ϕ podem ser vistas em Mickens e Smith (1990) e Ongum; Arslan e Garrappa (2013).

4 Aplicações

Nessa seção apresentaremos duas aplicações utilizando o método dada pela equação (16). Inicialmente apresentamos a solução numérica para a equação Logística de ordem fracionária e posteriormente para o modelo de Brusselator de ordem não inteira.

4.1 Equação Logística

A equação logística clássica foi proposta por Pierre François Verhulst e pode ser considerada, sem perda de generalidade, como

$$\frac{dy(t)}{dt} = ky(t)[1 - y(t)], \quad y(t) > 0 \quad (19)$$

em que k é a constante de proporcionalidade

Fazendo a mudança de variável $z(t) = 1/y(t)$ de modo a converter a equação (19) em uma equação linear, obtemos

$$\frac{dz(t)}{dt} = k(1 - z) \quad (20)$$

que é uma EDO, linear e separável, cuja solução analítica é dada por

$$z(t) = 1 + \frac{1}{c}e^{-kt} \quad \text{com} \quad z(0) = 1 + \frac{1}{c} \quad (21)$$

em que c é a constante de integração. Como $y(t) = z(t)^{-1}$ temos que $1/c = 1/y(0) - 1$ e consequentemente;

$$y(t) = \frac{1}{1 + \left[\frac{1}{y(0)} - 1 \right] e^{-kt}}. \quad (22)$$

Destacamos que $0 < y(0) < 1$ e que $\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = 1$.

A partir dos resultados apresentados na Seção 2, temos uma generalização via cálculo fracionário para a equação logística. Tomando, sem perda de generalidade $0 < \alpha < 1$, obtemos a equação logística de ordem não inteira

$$\frac{d^\alpha z(t)}{dt^\alpha} = k(1 - z) \quad (23)$$

cuja solução analítica é

$$z(t) = 1 + [z(0) - 1]E_\alpha(-kt^\alpha) \quad (24)$$

em que E_α é a função de Mittag Leffer (CAMARGO; OLIVEIRA, 2015).

Lembrando que, no caso inteiro, $y(t) = 1/z(t)$ podemos escrever

$$\frac{1}{z(t)} = \frac{1}{1 + \left[\frac{1}{y(0)} - 1\right] E_\alpha(-kt^\alpha)}. \quad (25)$$

Ao aplicar o limite $\alpha \rightarrow 1$ na equação (25), recuperamos o resultado da equação(22).

4.2 Discretização

Para discretizar a equação (23), considere z_n a aproximação para $z(t_n)$, então substituindo o lado direito de (23), por $z(t) \rightarrow z(t_n)$, aplicando a equação (16) e isolando z_n , obtemos

$$z_n = \frac{w_n^{(\alpha-1)} z_0 - \sum_{j=1}^n w_j^{(\alpha)} z_{n-j} - \phi(h)k}{1 + \phi(h)k} \quad (26)$$

que é a equação logística fracionária discretizada.

4.3 Resultados

A Figura 1 mostra a solução numérica dada pela equação (26) para o modelo Logístico de ordem fracionária dado pela equação (23). Foram utilizados os parâmetros $k = 1$, $h = 0.05$, $z(0) = 0.2$, $t = 50$ e $\alpha = (0, 2; 0, 4; 0, 6; 0, 8; 1)$.

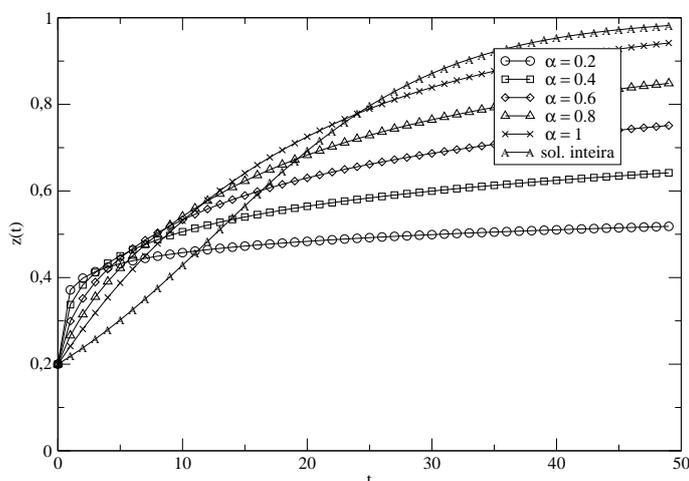


Figura 1: Solução numérica da equação logística fracionária.

A Figura 1 apresenta a solução numérica da equação logística para diferentes valores de α . Podemos observar nessa figura que quando $\alpha = 1$ a solução converge para a capacidade de suporte. Podemos notar ainda que para $\alpha = 1$ a capacidade de suporte é atingida mais rapidamente.

4.4 Modelo de Brusselator

O modelo de Brusselator, que foi proposto por Prigogine e Lefever em 1968, é um sistema de equações diferenciais não lineares, utilizado em reações químicas autocatalíticas (ON-GUN; ARSLAN; GARRAPPA, 2013). Esse modelo apresenta oscilações que não dependem da quantidade de reagente presente inicialmente.

Sua versão clássica é dado por

$$\begin{cases} \frac{dx(t)}{dt} = a - (\mu + 1)x(t) + x(t)^2y(t) \\ \frac{dy(t)}{dt} = \mu x(t) - x(t)^2y(t) \end{cases} \quad (27)$$

em que $x(t)$ e $y(t)$ representam, respectivamente, o ativador e o inibidor e a e μ são parâmetros externos.

De acordo com Podlubny (1999), o modelo de Brusselator de ordem não inteira, $0 < \alpha < 1$, é dado por

$$\begin{cases} D^\alpha x(t) = a - (\mu + 1)x(t) + x(t)^2y(t) \\ D^\alpha y(t) = \mu x(t) - x(t)^2y(t) \end{cases} \quad (28)$$

4.5 Discretização

Considere x_n e y_n aproximações para $x(t_n)$ e $y(t_n)$. Então substituindo o termo não linear do lado direito de (28) por

$$x(t) \rightarrow x(t_{n-1}), \quad x^2(t)y(t) \rightarrow x(t_n)x(t_{n-1})y(t_{n-1})$$

e aplicando a equação (16) no sistema (28), obtemos

$$\begin{cases} x_n + \sum_{j=1}^n w_j^{(\alpha)} x_{n-j} - w_n^{(\alpha-1)} x_0 = \phi(h)[a - (\mu + 1)x_{n-1} + x_n x_{n-1} y_{n-1}], \\ y_n + \sum_{j=1}^n w_j^{(\alpha)} y_{n-j} - w_n^{(\alpha-1)} y_0 = \phi(h)[\mu x_{n-1} - x_n x_{n-1} y_{n-1}]. \end{cases} \quad (29)$$

Isolando x_n e y_n , temos

$$\begin{cases} x_n = \frac{w_n^{(\alpha-1)} x_0 - \sum_{j=1}^n w_j^{(\alpha)} x_{n-j} + \phi(h)[a - (\mu + 1)x_{n-1}]}{1 - \phi(h)x_{n-1}y_{n-1}} \\ y_n = \frac{w_n^{(\alpha-1)} y_0 - \sum_{j=1}^n w_j^{(\alpha)} y_{n-j} + \phi(h)[\mu x_{n-1} - x_n x_{n-1} y_{n-1}]}{1 - \phi(h)x_{n-1}y_{n-1}} \end{cases} \quad (30)$$

que é o sistema de ordem fracionária discretizado.

4.6 Resultados

Os parâmetros utilizados para realizar a simulação para o modelo de Brusselator foram $a = 1, \mu = 3, \alpha = (1; 0,7), h = 0,05, t = 4000$ e $(x_0, y_0) = (1, 1; 2, 9)$.

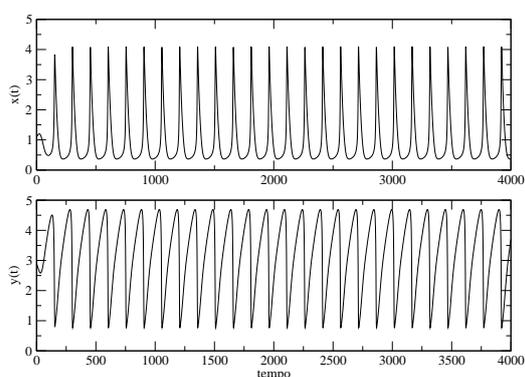


Figura 2: Dinâmica para $\alpha = 1$.

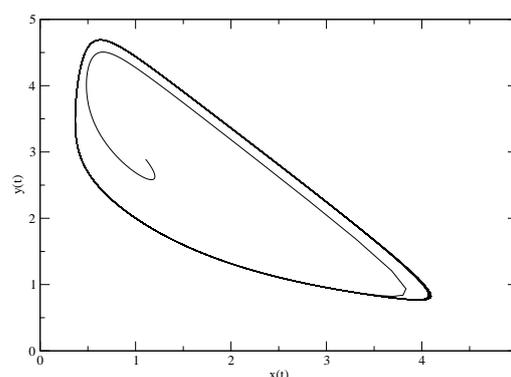


Figura 3: Retrato de fase.

Para o modelo de Brusselator, podemos observar que tanto para o caso fracionário, quando $\alpha = 0,7$, quanto para o caso clássico, $\alpha = 1$, a solução apresenta comportamento oscilatório instável. Isso pode ser observado nas Figuras 2 e 4.

A partir do retrato de fase apresentado nas Figuras 3 e 5, vemos que as trajetórias convergem para um ciclo limite. Esses resultados obtidos através da simulação numérica estão de acordo com os teóricos obtidos por Ongum; Arslan e Garrappa (2013), através do estudo da análise de estabilidade.

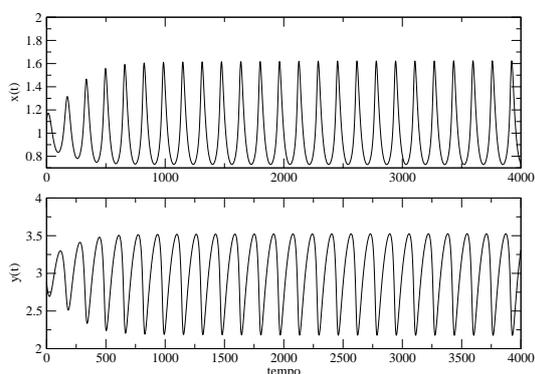


Figura 4: Dinâmica para $\alpha = 0,7$.

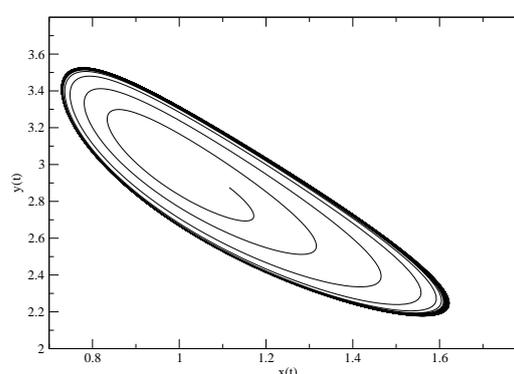


Figura 5: Retrato de fase.



5 Conclusão

Com a crescente ascensão do cálculo fracionário nas mais diversas áreas do conhecimento, este trabalho evidencia a importância de se estudar métodos numéricos para aproximar a solução de uma equação de ordem não inteira. O estudo de tais métodos ainda é um campo amplo e com muito potencial a ser explorado pois existem poucos algoritmos desenvolvidos que aproximam a solução de uma equação de ordem arbitrária.

O método proposto nesse artigo, baseado na discretização por meio de diferenças finitas não local, foi aplicado para aproximar a solução numérica para a equação logística fracionária e para o modelo de Brusselator fracionário.

Para a equação logística, a partir da solução numérica encontrada, observamos que quanto menor a ordem da derivada mais lenta será a convergência da solução para a capacidade de suporte. Já solução numérica encontrada para o modelo de Brusselator era esperada, uma vez que tal solução está de acordo com os resultados obtidos por meio do estudo de estabilidade encontrados na literatura.

Continuações naturais deste trabalho são as mais diversas possíveis. Em particular vamos estudar e implementar outros métodos numéricos com objetivo de analisar qual o mais adequado na resolução de equações de ordem não inteira.

Agradecimentos: Os autores agradecem o apoio financeiro da agência de fomento CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior).

6 Referências Bibliográficas

CAMARGO, R. F.; OLIVEIRA, E. C. **Cálculo fracionário**. São Paulo: Livraria da Física, 2015.

CUMINATO, J. A.; MENEGUETTE JUNIOR, M. **Discretização de equações diferenciais parciais**: técnicas de diferenças finitas, Rio de Janeiro: SBM, 2013.

DEMIRCI, E.; OZALP, N. A method for solving differential equations of fractional order. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 236, n. 11, p. 2754-2762, 2012.

DIETHELM, K. et al. Algorithms for the fractional calculus: a selection of numerical methods. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 194, n. 6, p. 743-773, 2005.

FORTUNA, A. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos**: conceitos básicos e aplicações. São Paulo: EDUSP, 2000.

MICKENS, R.; SMITH, A. Finite-difference models of ordinary differential equations: influence of denominator functions, **Journal of the Franklin Institute**, v. 327, p. 143-149, 1990.

ONGUN, M. Y.; ARSLAN, D.; GARRAPPA, R. Nonstandard finite difference schemes for a fractional-order Brusselator system, **Advances in Difference equations**, 2013.

PODLUBNY, I. **Fractional differential equation**. San Diego: Academic Press, 1999.



WANG, Y.; LI, C. Does the fractional Brusselator with efficient dimension less than 1 have a limit cycle? **Physics Letters A**, v. 363, n. 5-6, p. 414-419, 2007.

ZIBAEI, S.; NAMJOO, M. A nonstandard finite difference scheme for solving fractional-order model of HIV-1 infection of CD4+ T-cells. **Iranian Journal of Mathematical Chemistry**, v. 6, n. 2, p. 169-184, 2015.