

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA

Tiago de Faria Cordeiro Santos

Cálculo Fracionário: Soluções analíticas e numéricas de modelos

Juiz de Fora
2025

Tiago de Faria Cordeiro Santos

Cálculo Fracionário: Soluções analíticas e numéricas de modelos

Dissertação apresentada ao Departamento de
Matemática da Universidade Federal de Juiz
de Fora como requisito parcial à obtenção do
grau de bacharel em Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Sandro Rodrigues Mazorche

Juiz de Fora

2025

Ficha catalográfica elaborada através do Modelo Latex do CDC da UFJF
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Santos, Tiago de Faria Cordeiro.

Cálculo Fracionário : Soluções analíticas e numéricas de modelos /
Tiago de Faria Cordeiro Santos. – 2025.
55 f. : il.

Orientador: Sandro Rodrigues Mazorche

Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade Federal de Juiz de Fora,
Instituto de Ciências Exatas. Departamento de Matemática, 2025.

1. Cálculo fracionário. 2. Modelos matemáticos. 3. Equações diferenci-
ais fracionárias. I. Rodrigues Mazorche, Sandro, orient. II. Título.

Tiago de Faria Cordeiro Santos

Cálculo Fracionário: Soluções analíticas e numéricas de modelos

Dissertação apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Matemática.

Aprovada em 24 de Julho de 2025

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Sandro Rodrigues Mazorche - Orientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Profa. Dra. Beatriz Casulari da Motta Ribeiro
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Sergio Guilherme de Assis Vasconcelos
Universidade Federal de Juiz de Fora

Dedico este trabalho ao meu pai, minha mãe e meus irmãos.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus.

Agradeço aos meus pais, Leandro e Rita, por todo o apoio e incentivo ao longo desse caminho, o que possibilitou a conclusão desta etapa, e também por sempre acreditarem em mim.

Agradeço ao meu orientador Sandro pelos ensinamentos durante a Iniciação Científica e a elaboração deste trabalho, e também pelo incentivo em conhecer mais sobre a pesquisa matemática.

Agradeço aos professores Beatriz e Sergio, por aceitarem participar da banca, e pelas sugestões e considerações que ajudaram a melhorar o texto.

Agradeço a todos os professores da minha graduação, por toda a contribuição em minha formação acadêmica e pessoal. Em especial, agradeço à professora Beatriz, pela oportunidade de participar do Programa de Iniciação Científica Jr. (PIC).

Agradeço à Universidade Federal de Juiz de Fora e ao Departamento de Matemática.

RESUMO

O cálculo fracionário é uma área da matemática que busca generalizar os conceitos do cálculo de ordem inteira. A partir dessa ideia, surgiram as integrais e derivadas fracionárias, que dependem de um certo parâmetro α e coincidem com os operadores clássicos para valores inteiros de α . Isso motivou o estudo de modelos fracionários, que podem fornecer, em certos casos, uma melhor descrição de fenômenos do que os modelos clássicos. Este trabalho tem como objetivo apresentar formulações fracionárias dos modelos de difusão de calor e de difusão de oxigênio em tecidos absorventes. Para isso, mostramos inicialmente as funções e as ferramentas necessárias para este estudo, assim como algumas de suas propriedades. Em seguida, definimos as integrais e derivadas fracionárias, exibindo também uma forma construtiva de obter um operador fracionário. Após isso, indicamos como é feita a discretização das derivadas de ordem não inteira que são utilizadas para obter soluções numéricas. Por fim, trazemos uma discussão sobre a obtenção de soluções analíticas e/ou numéricas dos modelos fracionários propostos, assim como uma análise qualitativa dos resultados obtidos.

Palavras-chave: cálculo fracionário; modelos matemáticos; equações diferenciais fracionárias.

ABSTRACT

Fractional calculus is an area of mathematics that seeks to generalize the concepts from integer order calculus. From this idea, fractional integrals and derivatives emerged, which depend on a certain parameter α and coincide with the classical operators for integer values of α . This has motivated the study of fractional models, which can provide, in certain cases, a better description of phenomena than classical models. This work aims to present fractional formulations of the heat diffusion and oxygen diffusion in absorbing tissues models. To this end, we first introduce the functions and tools necessary for this study, as well as some of their properties. Next, we define fractional integrals and derivatives, also presenting a constructive approach to obtain a fractional operator. After that, we indicate how the discretization of non-integer derivatives that are used to obtain numerical solutions is done. Finally, we present a discussion on obtaining analytical and/or numerical solutions of the proposed fractional models, as well as a qualitative analysis of the results obtained.

Keywords: fractional calculus; mathematical models; fractional differential equations.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Gráfico da função Gama.	12
Figura 2 - Gráfico da função Beta.	13
Figura 3 - Gráfico da função de Mittag-Leffler.	15
Figura 4 - Discretização da derivada de Caputo.	29
Figura 5 - Discretização da derivada de Riemann-Liouville.	32
Figura 6 - Gráfico da função $E_\alpha(-t^\alpha)$	36
Figura 7 - Solução analítica $u(x, t)$ da formulação de Caputo em $t = 0.001$	37
Figura 8 - Solução analítica $u(x, t)$ da formulação de Caputo em $t = 1$	38
Figura 9 - Gráfico da função $e^{-r_2 t} E_\alpha(-r_1^\alpha t^\alpha)$	40
Figura 10 - Solução analítica $u(x, t)$ da formulação de ${}^*D^\alpha$ em $t = 0.001$, com $\alpha = 0.6$	41
Figura 11 - Solução analítica $u(x, t)$ da formulação de ${}^*D^\alpha$ em $t = 0.15$, com $\alpha = 0.6$	41
Figura 12 - Domínio Ω do problema.	45
Figura 13 - Gráfico da solução $c(x, t)$ do caso clássico.	46
Figura 14 - Curvas $(s_\alpha(t), t)$ para diferentes valores de α	48
Figura 15 - Gráfico de $c(x, t)$ em tempos específicos para $\alpha = 0.9$ e $\alpha = 0.7$	49
Figura 16 - Gráfico de $c(x, t)$ para $\alpha = 0.8$ e $\alpha = 0.6$	50
Figura 17 - Gráfico de $c(x, t)$ em tempos específicos para $\alpha = 0.8$ e $r_1 = 0.6$	51
Figura 18 - Gráfico de $c(x, t)$ para $\alpha = 0.8$ e $r_1 = 0.6$	52

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	11
2.1	FUNÇÃO GAMA	11
2.2	FUNÇÃO DE GEL'FAND-SHILOV	12
2.3	FUNÇÃO BETA	13
2.4	FUNÇÃO DE MITTAG-LEFFLER	14
2.5	TRANSFORMADA DE LAPLACE	16
2.6	SÉRIES DE FOURIER	19
3	CÁLCULO FRACIONÁRIO	20
3.1	INTEGRAL FRACIONÁRIA	20
3.2	DERIVADAS FRACIONÁRIAS	21
3.3	EQUAÇÕES DIFERENCIAIS FRACIONÁRIAS	24
3.4	NOVO OPERADOR	25
3.5	DISCRETIZAÇÃO	27
4	APLICAÇÃO EM MODELOS	33
4.1	EQUAÇÃO DO CALOR	33
4.1.1	Formulação com a derivada de Caputo	34
4.1.2	Formulação com o novo operador	38
4.2	MODELO DE DIFUSÃO DE OXIGÊNIO	41
4.2.1	Modelo clássico	42
4.2.2	Formulações fracionárias	47
5	CONCLUSÃO	53
	REFERÊNCIAS	54

1 INTRODUÇÃO

O cálculo de ordem arbitrária, ou cálculo fracionário, tem como principal objetivo generalizar os operadores do cálculo integro-diferencial. Esta área recebeu um maior destaque a partir de 1974, quando foi realizada a primeira conferência internacional de cálculo fracionário. Porém, o cálculo fracionário teve início quase três séculos antes, com uma correspondência entre Leibniz e L'Hôpital datada de 1695, questionando sobre uma possível generalização da derivada de ordem inteira para ordens arbitrárias. A partir desse momento, muitos matemáticos contribuíram para esta teoria apresentando possíveis formas de obter uma derivada fracionária.

Em 1823, Abel obteve a solução do problema da tautócrona, onde aparece uma derivada de ordem meio, que poderia ser vista como uma primeira aplicação do cálculo fracionário. Com isso, a ideia de estudar modelos matemáticos do ponto de vista fracionário se popularizou. Atualmente, existem diversos estudos sobre a modelagem fracionária aplicada a variados problemas, como o modelo SIR fracionário e o oscilador harmônico fracionário.

Por conta disso, este trabalho tem como principal objetivo o estudo da formulação fracionária de dois modelos matemáticos: difusão de calor e difusão de oxigênio em tecidos absorventes. Apesar de serem representados por equações semelhantes, os dois modelos apresentam propostas diferentes, já que o segundo é um problema de fronteira móvel. Trataremos esses modelos obtendo soluções analíticas e/ou numéricas, avaliando os resultados obtidos.

A principal referência dos capítulos 2 e 3 é o livro (4), que é o primeiro livro de cálculo fracionário em português publicado no Brasil, e também os artigos (12) e (13), que apresentam a ideia para a construção de uma equação diferencial fracionária. A seção dedicada à discretização dos operadores fracionários utiliza alguns resultados presentes em (7). Faremos também alguns comentários sobre a teoria das transformadas de Laplace e das séries de Fourier, que podem ser encontradas com mais detalhes em (3). No capítulo 4, veremos o modelo de difusão de oxigênio em tecidos, que é proposto no trabalho (6), sendo estudado do ponto de vista analítico nos artigos (1) e (11), e do ponto de vista numérico em (2), (5) e (15). Já a formulação fracionária é tratada no trabalho (14) com uma proposta analítica, e também nos trabalhos (9), (10), (16), (17) e (18), onde são apresentadas soluções analíticas aproximadas e numéricas, destacando também o que ocorre com a fronteira móvel.

Este trabalho está organizado da seguinte forma:

No capítulo 2, apresentamos as definições das funções Gama, Gel'Fand-Shilov, Beta e Mittag-Leffler de um e dois parâmetros, que serão necessárias para tratar dos conceitos do cálculo fracionário. São discutidas as propriedades que aparecerão ao longo dos outros

capítulos. Além disso, exibimos a definição da transformada de Laplace, com alguns comentários e exemplos que serão importantes para a resolução de equações diferenciais fracionárias, e também apresentamos as séries de Fourier, que são utilizadas para dar a solução analítica de um dos modelos.

No capítulo 3, descrevemos os principais operadores do cálculo de ordem não inteira: a integral fracionária, a derivada de Caputo e a derivada de Riemann-Liouville. Alguns exemplos são apresentados, assim como a solução de algumas EDF's que aparecem nos modelos fracionários. Também descrevemos uma forma construtiva de se obter um operador fracionário a partir de uma EDO. Por fim, demonstramos como obter as formas discretizadas das derivadas fracionárias, que são utilizadas para obter as soluções numéricas de equações diferenciais.

No capítulo 4, aplicamos os conceitos vistos ao longo do texto em modelos matemáticos. Inicialmente, estudamos duas formulações fracionárias do modelo de difusão de calor, obtendo a solução analítica de cada caso e comparando com a solução numérica. Fazemos uma análise qualitativa da solução, com o objetivo de compreender melhor os efeitos obtidos através do cálculo fracionário. Apresentaremos então o modelo de difusão de oxigênio em tecidos absorventes, e suas versões fracionárias. Avaliamos então o comportamento da solução obtida numericamente, associando ao comportamento da difusão do calor.

No capítulo 5, discutimos os resultados obtidos e os cuidados necessários para a modelagem com operadores fracionários.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo apresentamos as principais definições e ferramentas que serão utilizadas nas discussões sobre o cálculo fracionário. Além disso, mostramos também propriedades e fórmulas que serão necessárias para realizar os cálculos presentes nos próximos capítulos. As discussões apresentadas neste capítulo podem ser encontradas de forma mais completa em (3) e (4).

2.1 FUNÇÃO GAMA

O cálculo fracionário tem como objetivo generalizar os conceitos e operadores do cálculo de ordem inteira, como as derivadas e integrais. Para isso, são utilizadas funções com propriedades que permitem a construção desta teoria, e são conhecidas como funções especiais. Um dos principais exemplos é a função Gama, denotada por $\Gamma(x)$, que possui a seguinte representação integral:

$$\Gamma(t) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{t-1} dx. \quad (2.1)$$

Esta integral imprópria converge quando $t > 0$. Uma das propriedades mais interessantes dessa função é que $\Gamma(t+1) = t\Gamma(t)$. De fato, utilizando a técnica de integração por partes, podemos ver que:

$$\begin{aligned} \Gamma(t+1) &= \int_0^{\infty} e^{-x} x^t dx \\ &= -x^t e^{-x} \Big|_0^{\infty} + t \int_0^{\infty} e^{-x} x^{t-1} dx \\ &= t\Gamma(t). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Esta propriedade traz uma grande versatilidade para a função Gama, que é conhecida como a generalização do fatorial, já que $\Gamma(1) = \int_0^{\infty} e^{-x} dx = 1$, e se $n \in \mathbb{N}$, então, pela propriedade acima:

$$\Gamma(n) = (n-1).\Gamma(n-1) = \dots = (n-1).(n-2)...2.1.\Gamma(1) = (n-1)!. \quad (2.3)$$

Desta forma, se conhecemos o valor da função Gama em um ponto t , então podemos gerar uma sequência de valores conhecidos dada por $(\Gamma(t+n))_{n \in \mathbb{N}}$. Como exemplo, podemos calcular $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)$:

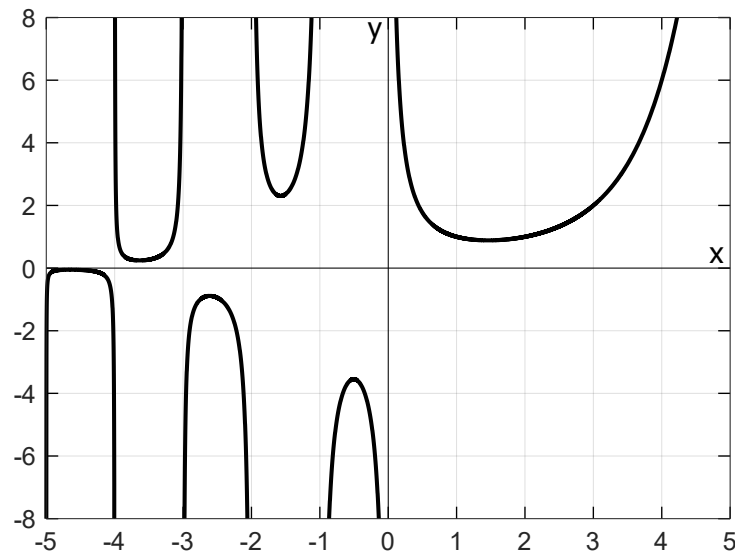
$$\begin{aligned} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) &= \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\frac{1}{2}-1} dx \\ &= \int_0^{\infty} e^{-u^2} (u^2)^{-\frac{1}{2}} (2u) du \\ &= 2 \int_0^{\infty} e^{-u^2} du \\ &= \sqrt{\pi}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde utilizamos a mudança de variáveis $x = u^2$. A partir do valor obtido, podemos calcular os valores de $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$, $\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)$,...

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}, \quad \dots \quad (2.5)$$

Podemos definir a função Gama nos números reais negativos não inteiros, e também para os números complexos por meio das técnicas de prolongamento analítico, porém, para os propósitos deste texto, utilizaremos apenas valores reais positivos de t . Na figura 1 apresentamos o gráfico da função Gama estendida para os reais negativos não inteiros.

– Figura 1 - Gráfico da função Gama.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

2.2 FUNÇÃO DE GEL'FAND-SHILOV

Conhecendo a função Gama, podemos utilizá-la para definir funções que podem ser vistas como generalizações de casos particulares do cálculo clássico. Sabemos, por exemplo, que os termos da série de Taylor da função exponencial são dados por $\phi_n(t) = \frac{t^n}{n!}$, com $n \in \mathbb{N}$. Ao derivar um desses termos, obtemos $\phi'_n(t) = \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} = \phi_{n-1}(t)$. Podemos estender essa ideia para um número real positivo α através da função Gama, definindo:

$$\phi_\alpha(t) = \begin{cases} \frac{t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)}, & \text{se } t > 0, \\ 0 & , \text{ se } t \leq 0. \end{cases} \quad (2.6)$$

Essa é conhecida com a função de Gel'fand-Shilov, que generaliza os termos $\frac{t^n}{n!}$ anteriores. Note que, se $\alpha > 1$ e $t > 0$, então:

$$\phi'_\alpha(t) = \frac{(\alpha-1)t^{\alpha-2}}{\Gamma(\alpha)} = \frac{t^{\alpha-2}}{\Gamma(\alpha-1)} = \phi_{\alpha-1}(t), \quad (2.7)$$

mantendo a relação que era observado no caso particular. Além disso, mostraremos adiante que a função de Gel'fand-Shilov está diretamente relacionada ao cálculo de n integrais repetidas, o que pode ser visto como uma integral de ordem $n \in \mathbb{N}$.

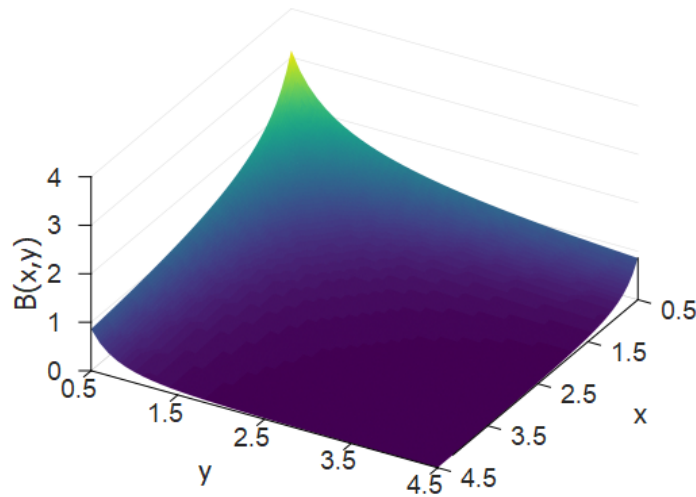
2.3 FUNÇÃO BETA

Dados dois valores reais positivos x e y , a função Beta aplicada no par (x, y) , denotada por $B(x, y)$, é dada pela seguinte integral definida:

$$B(x, y) = \int_0^1 u^{x-1}(1-u)^{y-1} du. \quad (2.8)$$

Realizando uma simples mudança de variáveis, podemos perceber que a função Beta é simétrica, ou seja, $B(x, y) = B(y, x)$. Isto também fica claro quando olhamos para o seu gráfico, apresentado na figura 2. Neste caso, a função está aplicada no conjunto $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2, 0.5 \leq x \leq 4.5, 0.5 \leq y \leq 4.5\}$.

– Figura 2 - Gráfico da função Beta.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

É possível obter uma relação com a função Gama, que é deduzida da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \Gamma(x)\Gamma(y) &= \left(\int_0^\infty e^{-t} t^{x-1} dt \right) \left(\int_0^\infty e^{-s} s^{y-1} ds \right) \\ &= \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-(t+s)} t^{x-1} s^{y-1} ds dt \\ &= \int_0^1 \int_0^\infty e^{-u} u^{x-1} v^{x-1} u^{y-1} (v-1)^{y-1} u dv du \\ &= \int_0^\infty e^{-u} u^{x+y-1} du \int_0^1 v^{x-1} (v-1)^{y-1} dv \\ &= \Gamma(x+y)B(x, y), \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde utilizamos a mudança de variáveis: $t = uv$ e $s = u(1 - v)$, com $\left| \frac{\partial(t,s)}{\partial(u,v)} \right| = |-u| = u$. Com isso, temos a seguinte fórmula para a função Beta:

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}, \quad (2.10)$$

que irá nos auxiliar nos cálculos envolvendo derivadas fracionárias. Podemos perceber que ao aumentar os valores de x e de y , a função $B(x, y)$ se aproxima de 0. Além disso, também notamos que:

$$B\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(1)} = \sqrt{\pi}\sqrt{\pi} = \pi, \quad (2.11)$$

o que também pode ser visto na figura 2.

2.4 FUNÇÃO DE MITTAG-LEFFLER

Apresentaremos agora a função de Mittag-Leffler, que desempenha um papel fundamental no cálculo fracionário, de forma análoga à função exponencial no cálculo de ordem inteira. Por conta disso, ela foi apelidada de rainha das funções especiais, e possui diversas generalizações e aplicações na resolução de equações diferenciais fracionárias. Mostraremos aqui duas definições: a função de Mittag-Leffler e sua generalização de dois parâmetros.

Sejam $t, \alpha \in \mathbb{R}$, com $\alpha > 0$. A função de Mittag-Leffler, denotada por $E_\alpha(t)$, é dada pela seguinte série de potências:

$$E_\alpha(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(\alpha n + 1)}. \quad (2.12)$$

No caso particular em que $\alpha = 1$, a função de Mittag-Leffler coincide com a função exponencial:

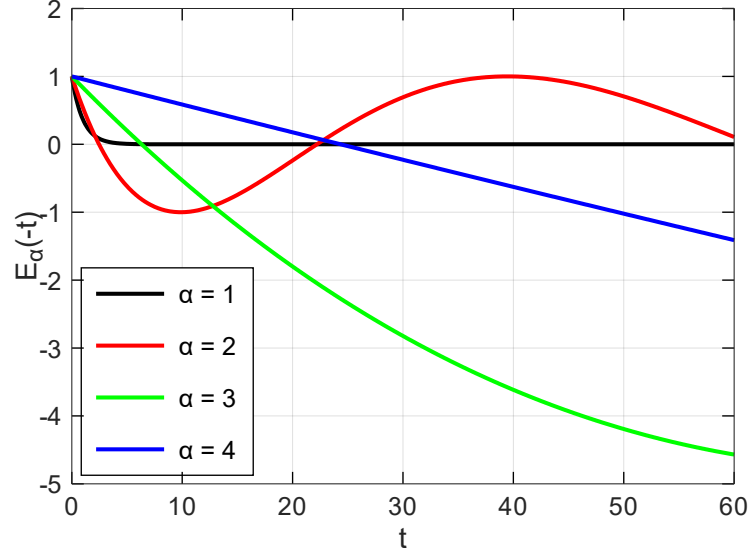
$$E_1(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(n+1)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} = e^t, \quad (2.13)$$

então podemos enxergá-la como sua generalização. Na figura 3, apresentamos o gráfico da função $E_\alpha(-t)$ para $\alpha \in \{1, 2, 3, 4\}$. Podemos perceber que o comportamento varia bastante dependendo do parâmetro α , já que ela é uma função monótona quando $\alpha = 1$, porém oscila para $\alpha = 2$. Além disso, ela também assume valores negativos para $\alpha \in \{2, 3, 4\}$.

Por conta dessas propriedades, a função de Mittag-Leffler pode ser utilizada para obter diversas outras funções como casos particulares. Por exemplo, tomando o parâmetro $\alpha = 2$ e calculando a função em $-t^2$, obtemos:

$$E_2(-t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n}}{\Gamma(2n+1)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n}}{(2n)!} = \cos t. \quad (2.14)$$

– Figura 3 - Gráfico da função de Mittag-Leffler.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

Se considerarmos t^2 ao invés de $-t^2$, então:

$$E_2(t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{2n}}{\Gamma(2n+1)} = \frac{1}{2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^n}{n!} \right] = \cosh t. \quad (2.15)$$

Desta forma, a versatilidade dessa função se destaca para os matemáticos, e, por conta disso, surgiram muitas formas de torná-la ainda mais geral. Uma forma de generalização é a introdução de um segundo parâmetro $\beta > 0$, que nos dá a função de Mittag-Leffler de dois parâmetros, denotada por $E_{\alpha,\beta}(t)$, dada por:

$$E_{\alpha,\beta}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(\alpha n + \beta)}. \quad (2.16)$$

No caso em que $\beta = 1$, retornamos para a função de Mittag-Leffler, ou seja, $E_{\alpha,1}(t) = E_{\alpha}(t)$. Com esta função, podemos obter mais casos particulares. Por exemplo, tomando $tE_{2,2}(-t^2)$ temos que:

$$tE_{2,2}(-t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n+1}}{\Gamma(2n+2)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n+1}}{(2n+1)!} = \sin t, \quad (2.17)$$

e se utilizarmos t^2 no lugar de $-t^2$, obtemos:

$$tE_{2,2}(t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{2n+1}}{\Gamma(2n+2)} = \frac{1}{2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^n}{n!} \right] = \sinh t. \quad (2.18)$$

Uma relação importante entre as duas definições pode ser obtida derivando a função de Mittag-Leffler calculada em t^{α} , o que resulta em:

$$\frac{d}{dt} E_{\alpha}(t^{\alpha}) = \frac{d}{dt} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{\alpha n}}{\Gamma(\alpha n + 1)} \right] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha n t^{\alpha n - 1}}{\Gamma(\alpha n + 1)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{\alpha n + \alpha - 1}}{\Gamma(\alpha n + \alpha)}, \quad (2.19)$$

sendo a última expressão igual a $t^{\alpha-1}E_{\alpha,\alpha}(t^\alpha)$. Note que na conta (2.19) a derivada é passada para dentro da série. Isto pode ser feito pois a série de funções utilizada na definição da função de Mittag-Leffler converge uniformemente em qualquer conjunto compacto. Este resultado será útil quando precisarmos derivar ou integrar a função de Mittag-Leffler.

Destacamos que as funções foram apresentadas da forma em que serão utilizadas neste texto, como funções de valores reais, uma vez que nosso propósito é estudar modelos matemáticos de um ponto de vista aplicado. Porém, as definições dessas funções são mais gerais, e podem ser vistas como funções de variáveis complexas. Além disso, os parâmetros nas funções de Gel'Fand-Shilov e de Mittag-Leffler também podem ser números complexos com $Re(\alpha) > 0$ e $Re(\beta) > 0$. Mais detalhes podem ser encontrados no trabalho (4).

2.5 TRANSFORMADA DE LAPLACE

Veremos agora uma transformada integral que será utilizada na resolução de equações diferenciais fracionárias (EDF's). Uma transformada integral é uma relação:

$$Y(s) = \int_a^b K(s, t)y(t)dt, \quad (2.20)$$

onde $K(s, t)$ é chamado de núcleo da transformada. Desta forma, a equação (2.20) relaciona uma função $y(t)$ com sua transformada $Y(s)$. As transformadas integrais são ferramentas muito úteis na resolução de equações diferenciais ordinárias (EDO's), e tem como objetivo reduzir problemas mais complicados em problemas mais simples de serem resolvidos. Um caso particular é a transformada de Laplace, que utiliza o núcleo $K(s, t) = e^{-st}$. Com isso, definimos:

Definição 1. Seja $f : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ uma função integrável. A transformada de Laplace da função f é dada por:

$$\mathcal{L}[f(t)] := F(s) = \int_0^\infty e^{-st}f(t)dt, \quad (2.21)$$

desde que a integral imprópria acima convirja para algum valor de s .

Podemos garantir que existe um valor $k \in \mathbb{R}$ tal que a integral acima converge quando $s > k$ ao supor algumas hipóteses para a função f . Para isso, temos a seguinte definição:

Definição 2. Diz-se que uma função f é de ordem exponencial em $[0, \infty)$ se existirem constantes $M > 0$ e $\lambda \in \mathbb{R}$ tais que:

$$|f(t)| \leq Me^{\lambda t}, \quad (2.22)$$

para todo $t > 0$.

Se f é uma função contínua e de ordem exponencial, então:

$$\left| \int_0^A e^{-st} f(t) dt \right| \leq \int_0^A e^{-st} |f(t)| dt \leq M \int_0^A e^{-(s-\lambda)t} dt = \frac{M}{s-\lambda} - \frac{Me^{-(s-\lambda)A}}{s-\lambda}, \quad (2.23)$$

e, no caso em que $s > \lambda$, a última expressão é menor do que $\frac{M}{s-\lambda}$ para todo $A > 0$. Portanto:

$$\left| \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt \right| \leq \frac{M}{s-\lambda}, \quad (2.24)$$

para todo $s > \lambda$. Com isso, concluímos que a transformada de Laplace $\mathcal{L}[f(t)] = F(s)$ de uma função contínua e de ordem exponencial está bem definida para todo $s > \lambda$, para algum $\lambda \in \mathbb{R}$.

Por outro lado, dada uma função $F(s)$, podemos nos perguntar sobre quais condições podemos obter uma função $f(t)$ tal que $\mathcal{L}[f(t)] = F(s)$, o que leva à transformada inversa de Laplace. Porém, precisaríamos de um estudo mais aprofundado sobre funções de variáveis complexas para estudar essa fórmula, o que não é o objetivo deste trabalho. Nos limitaremos ao seguinte fato: se f e g são funções contínuas com a mesma transformada de Laplace, então $f(t) = g(t)$. Com isso, se soubermos que $F(s) = \mathcal{L}[f(t)]$ para uma função contínua conhecida, podemos concluir que $\mathcal{L}[y(t)] = F(s)$ com $y(t)$ contínua implica $y(t) = f(t)$. Utilizaremos esse resultado para obter a solução de equações diferenciais mais à frente.

No entanto, para aplicar esta ferramenta na resolução de equações diferenciais, devemos primeiro conhecer suas principais propriedades e saber o que ocorre quando aplicamos a transformada em certas funções. Por conta disso, apresentaremos aqui os conceitos que serão necessários neste trabalho.

Inicialmente, notemos que a transformada de Laplace é uma transformação linear, pois a transformada da função nula é também a função nula, e se $f, g : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ são funções tais que $\mathcal{L}[f(t)] = F(s)$ e $\mathcal{L}[g(t)] = G(s)$ estão bem definidas para $s > k$, para algum $k \in \mathbb{R}$, e $c \in \mathbb{R}$, então:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[cf(t) + g(t)] &= \int_0^\infty e^{-st} [cf(t) + g(t)] dt \\ &= c \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt + \int_0^\infty e^{-st} g(t) dt \\ &= c\mathcal{L}[f(t)] + \mathcal{L}[g(t)], \quad s > k. \end{aligned} \quad (2.25)$$

O próximo passo intuitivo seria pensar na situação em que temos o produto de duas transformadas, ou seja, $\mathcal{L}[h(t)] = \mathcal{L}[g(t)]\mathcal{L}[f(t)]$. Para entender multiplicações de transformadas, introduzimos o conceito de convolução.

Definição 3. Dadas duas funções f e g , definimos o produto de convolução entre f e g , denotado por $f * g$, como:

$$(f * g)(t) := \int_0^t f(t - \tau)g(\tau) d\tau. \quad (2.26)$$

Através da mudança de variáveis $t - \tau = u$, podemos ver que o produto de convolução é comutativo. Com isso, podemos enunciar o seguinte resultado:

Teorema 4. Se $F(s) = \mathcal{L}[f(t)]$ e $G(s) = \mathcal{L}[g(t)]$ existem para todo $s > k \geq 0$, então:

$$F(s)G(s) = \mathcal{L}[(f * g)(t)], \quad s > k. \quad (2.27)$$

Demonstração. Ver (3). □

Considere agora $f : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^1 tal que $\mathcal{L}[f(t)]$ e $\mathcal{L}[f'(t)]$ existem. Então a transformada de Laplace de $f'(t)$ é dada por:

$$\mathcal{L}[f'(t)] = s\mathcal{L}[f(t)] - f(0). \quad (2.28)$$

De fato, utilizando a definição da transformada temos que:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[f'(t)] &= \int_0^\infty e^{-st} f'(t) dt \\ &= \int_0^\infty e^{-st} f'(t) - se^{-st} f(t) + se^{-st} f(t) dt \\ &= s \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt + \int_0^\infty \frac{d}{dt} [e^{-st} f(t)] dt \\ &= s\mathcal{L}[f(t)] + e^{-st} f(t) \Big|_0^\infty \\ &= s\mathcal{L}[f(t)] - f(0). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Esta propriedade pode ser generalizada para derivadas de ordem superior, e por conta disso é muito útil na resolução de problemas de valor inicial. No entanto, ao resolver esse tipo de problema, também precisamos calcular a transformada de funções explícitas. Calcularemos então alguns exemplos, começando pelas funções polinomiais. Por conta da linearidade da transformada, basta considerarmos t^μ , com $\mu \geq 0$. Desta forma, temos:

$$\mathcal{L}[t^\mu] = \int_0^\infty e^{-st} t^\mu dt = \int_0^\infty e^{-x} \left(\frac{x}{s}\right)^\mu \frac{1}{s} dx = \frac{1}{s^{\mu+1}} \int_0^\infty e^{-x} x^\mu du = \frac{\Gamma(\mu+1)}{s^{\mu+1}}, \quad (2.30)$$

onde utilizamos que a integral na última igualdade é a definição da função $\Gamma(\mu+1)$, e consideramos $s > 0$. Portanto a transformada de Laplace de t^μ é dada por:

$$\mathcal{L}[t^\mu] = \frac{\Gamma(\mu+1)}{s^{\mu+1}}, \quad s > 0. \quad (2.31)$$

Quando consideramos a função exponencial e^{-kt} , com $k \neq 0$, obtemos:

$$\mathcal{L}[e^{-kt}] = \int_0^\infty e^{-st} e^{-kt} dt = \int_0^\infty e^{-(s+k)t} dt = -\frac{e^{-(s+k)t}}{s+k} \Big|_0^\infty = \frac{1}{s+k}, \quad (2.32)$$

se $s > -k$. Logo, a transformada de Laplace de e^{-kt} é dada por:

$$\mathcal{L}[e^{-kt}] = \frac{1}{s+k}, \quad s > -k. \quad (2.33)$$

Agora, iremos determinar a transformada de Laplace da função de Mittag-Leffler, que será de vital importância para resolver as EDF's. Para isso, vamos considerar $E_\alpha(-k^\alpha t^\alpha)$, com $k > 0$. Aplicando a definição da transformada, temos que:

$$\mathcal{L}[E_\alpha(-k^\alpha t^\alpha)] = \int_0^\infty e^{-st} E_\alpha(-k^\alpha t^\alpha) dt = \int_0^\infty e^{-st} \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n k^{\alpha n} t^{\alpha n}}{\Gamma(\alpha n + 1)} dt. \quad (2.34)$$

Podemos mudar a ordem da integral e do somatório, obtendo:

$$\mathcal{L}[E_\alpha(-k^\alpha t^\alpha)] = \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n k^{\alpha n}}{\Gamma(\alpha n + 1)} \int_0^\infty e^{-st} t^{\alpha n} dt = \frac{1}{s} \sum_{n=0}^\infty (-1)^n \left(\frac{k^\alpha}{s^\alpha} \right)^n. \quad (2.35)$$

onde utilizamos que a integral acima é a transformada da função $t^{\alpha n}$. Note que a série obtida é a série geométrica, com razão $-\frac{k^\alpha}{s^\alpha}$. Considerando $s > k$, temos:

$$\mathcal{L}[E_\alpha(-k^\alpha t^\alpha)] = \frac{1}{s} \frac{1}{\left(1 + \frac{k^\alpha}{s^\alpha}\right)} = \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + k^\alpha}, \quad s > k. \quad (2.36)$$

Note que para $\alpha = 1$ recuperamos a transformada da função exponencial, como era esperado.

2.6 SÉRIES DE FOURIER

Nesta seção, apresentaremos brevemente os principais resultados sobre as séries de Fourier, que são utilizadas quando resolvemos equações diferenciais parciais pelo método de separação de variáveis. Por conta disso, elas serão necessárias para expressar as soluções analíticas dos modelos. As demonstrações e os resultados sobre o assunto podem ser encontrados em (3).

Dizemos que uma função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é dita periódica de período T se $f(x+T) = f(x)$ para todo $x \in \mathbb{R}$. Dada uma função f definida em um intervalo limitado, podemos definir uma extensão periódica.

Os exemplos principais de funções periódicas são as funções trigonométricas seno e cosseno. Enunciaremos agora um resultado que relaciona uma função diferenciável e periódica qualquer com essas duas funções.

Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável e periódica de período $T = 2L$. Então a série de Fourier de f , dada por:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^\infty \left[a_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right], \quad (2.37)$$

converge em cada ponto x para o valor $f(x)$, sendo os termos a_n e b_n dados por:

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \quad \text{e} \quad b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx. \quad (2.38)$$

3 CÁLCULO FRACIONÁRIO

Neste capítulo, os conceitos apresentados nas fundamentações teóricas serão utilizados para definir os operadores do cálculo de ordem não inteira. Primeiramente, apresentamos a integral fracionária, para então podermos definir a derivada de Caputo e a derivada de Riemann-Liouville. Trabalharemos com casos particulares das definições, que podem ser encontradas com mais detalhes em (4). Com isso, vemos como construir uma EDF a partir de uma EDO, com base no artigo (13). Por fim, vemos as contas realizadas para obter a forma discretizada dos operadores fracionários, que são discutidas no livro (7).

3.1 INTEGRAL FRACIONÁRIA

Os operadores do cálculo fracionário têm como objetivo generalizar as definições clássicas. No caso das integrais e das derivadas, que estão definidas para uma ordem $n \in \mathbb{N}$, a ideia de generalização é focada em estender suas definições para ordens arbitrárias no conjunto dos números reais, ou até mesmo nos números complexos. Deve-se preservar o caso clássico quando a ordem for inteira, ou seja, quando tal ordem for um número natural devemos retornar aos operadores tradicionais. Por conta disso, podemos entender melhor os conceitos do cálculo fracionário quando investigamos os conceitos já conhecidos. Olhemos então para uma integral de ordem n de uma função $f(t)$ integrável, que denotaremos por $(I^n f)(t)$:

$$(I^n f)(t) = \int_0^t \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \cdots \int_0^{t_{n-2}} \int_0^{t_{n-1}} f(t_n) dt_n dt_{n-1} \cdots dt_3 dt_2 dt_1. \quad (3.1)$$

Podemos reescrever tal expressão de maneira mais conveniente, dado por um produto de convolução com a função de Gel'Fand-Shilov com parâmetro igual a n , o que é apresentado no seguinte teorema:

Teorema 5. Sejam f uma função integrável, t um número real positivo e n um número natural. Então:

$$(I^n f)(t) = (\phi_n * f)(t) = \int_0^t \frac{(t - \tau)^{n-1}}{(n-1)!} f(\tau) d\tau. \quad (3.2)$$

Demonstração. Faremos a demonstração por indução em n . No caso $n = 1$, temos:

$$\int_0^t \frac{(t - \tau)^{1-1}}{(1-1)!} f(\tau) d\tau = \int_0^t f(\tau) d\tau = (I^1 f)(t). \quad (3.3)$$

Logo, o passo base é verdadeiro. Suponha agora que o teorema seja verdadeiro para $n = k$. Vamos mostrar que a igualdade também é válida para $n = k + 1$. Como $(I^{k+1} f)(t) = I^1(I^k f)(t)$, temos, pela hipótese de indução:

$$(I^{k+1} f)(t) = \int_0^t \left[\int_0^u \frac{(u - \tau)^{k-1}}{(k-1)!} f(\tau) d\tau \right] du. \quad (3.4)$$

Mudando a ordem de integração na expressão acima, obtemos:

$$(I^{k+1}f)(t) = \int_0^t \left[\int_\tau^t \frac{(u-\tau)^{k-1}}{(k-1)!} f(\tau) du \right] d\tau = \int_0^t \frac{(t-\tau)^k}{k!} f(\tau) d\tau, \quad (3.5)$$

que é o resultado desejado. $\square$

Com o resultado acima, podemos nos perguntar o que aconteceria se no lugar de $n \in \mathbb{N}$ fosse um número positivo $\alpha \in \mathbb{R}$. Note que $(t - \tau)$ nunca é negativo na integral, de forma que faz sentido a expressão $(t - \tau)^{\alpha-1}$. Além disso, sabemos que o fatorial pode ser generalizado pela função Gama da seguinte maneira $(n - 1)! = \Gamma(n)$, e o caso geral se tornaria $\Gamma(\alpha)$. Essas observações motivam a definição de uma integral de ordem arbitrária. Apresentamos então a seguinte definição:

Definição 6. Seja α um número real positivo. A integral fracionária de Liouville de ordem α , denotada por $(I_{0+}^\alpha f)(t)$, é definida por:

$$(I_{0+}^\alpha f)(t) := \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t - \tau)^{1-\alpha}} d\tau, \quad t > 0. \quad (3.6)$$

Desta forma, a integral fracionária irá coincidir com a integral de ordem $n \in \mathbb{N}$ quando $\alpha = n$, já que a definição de integral fracionária de uma função f é o produto de convolução $(\phi_\alpha * f)(t)$. Como exemplo, vamos calcular a integral fracionária de funções da forma $f(t) = t^\mu$, com $\mu \geq 0$. Neste caso, teremos:

$$I_{0+}^\alpha t^\mu = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{\tau^\mu}{(t - \tau)^{1-\alpha}} d\tau = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \tau^\mu (t - \tau)^{\alpha-1} d\tau. \quad (3.7)$$

Podemos aplicar a mudança de variáveis $\tau = xt$, obtendo:

$$\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^1 t^\mu x^\mu t^{\alpha-1} (1 - x)^{\alpha-1} t dx = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} t^{\mu+\alpha} \int_0^1 x^\mu (1 - x)^{\alpha-1} dx. \quad (3.8)$$

Note que a integral acima é a função $B(\mu + 1, \alpha)$. Utilizando a relação entre a função Beta e a função Gama, concluímos que:

$$I_{0+}^\alpha t^\mu = \frac{t^{\mu+\alpha}}{\Gamma(\alpha)} \frac{\Gamma(\mu + 1)\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\mu + 1 + \alpha)} = \frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\mu + 1 + \alpha)} t^{\mu+\alpha}. \quad (3.9)$$

3.2 DERIVADAS FRACIONÁRIAS

Apresentada a integral fracionária, nosso próximo passo será definir uma derivada fracionária. Isto pode ser feito de diversas formas, pois ao contrário da derivada clássica, que possui interpretações geométricas e físicas, as derivadas fracionárias não descrevem fenômenos naturais. Por conta disso, não existe apenas uma definição de derivada de ordem não inteira. Neste texto, iremos apresentar duas definições que utilizam a integral de Liouville: a derivada de Riemann-Liouville e a derivada de Caputo.

Definição 7. Seja α um número real positivo. A derivada de Riemann-Liouville de ordem α é definida por:

$$\begin{aligned} \left({}^{RL}D_{0+}^{\alpha}f\right)(t) &:= \left(\frac{d}{dt}\right)^n \left(I_{0+}^{n-\alpha}f\right)(t) \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(\frac{d}{dt}\right)^n \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha-n+1}} d\tau; \quad n = [\alpha] + 1, \quad t > 0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

A ideia para obter o operador de Riemann-Liouville é calcular a derivada de ordem n da integral de ordem $n - \alpha$ para então obter uma derivada de ordem α . Tal conceito tem como base considerar a derivação como operação inversa da integração. Então também podemos pensar em uma derivada de ordem α como sendo uma integral de ordem $n - \alpha$ de uma derivada de ordem n , que é caso da seguinte definição:

Definição 8. Seja α um número real positivo. A derivada de Caputo de ordem α é definida por:

$$\begin{aligned} \left({}^CD_{0+}^{\alpha}f\right)(t) &:= \left(I_{0+}^{n-\alpha}f^{(n)}\right)(t) \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^t \frac{f^{(n)}(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha-n+1}} d\tau; \quad n = [\alpha] + 1, \quad t > 0. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Note que, diferente da derivada clássica, as derivadas de ordem arbitrária apresentadas são operadores não locais, pois dependem de uma integral. Isso faz com que as derivadas fracionárias carreguem as informações da função nos tempos anteriores, o que é conhecido como efeito memória.

É importante destacar que as definições apresentadas nesta seção são casos particulares de definições mais completas. Em geral, podemos definir os limites de integração em outros intervalos nas integrais fracionárias, e que são indicados pelos índices a^+ e b^- que representam as integrações nos intervalos (a, t) e (t, b) , respectivamente. Além disso, a ordem α pode ser um número complexo com $Re(\alpha) > 0$. Estas definições são apresentadas e discutidas com mais detalhes no livro (4).

Neste texto, iremos nos restringir às definições apresentadas, e com os valores de α no intervalo $(0, 1]$. Desta forma, simplificaremos a notação utilizando ${}^{RL}D^{\alpha}$ e ${}^CD^{\alpha}$ no lugar de ${}^{RL}D_{0+}^{\alpha}$ e ${}^CD_{0+}^{\alpha}$, respectivamente. Com isso, trabalharemos com os seguintes casos particulares da derivada de Riemann-Liouville:

$$\left({}^{RL}D^{\alpha}f\right)(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha}} d\tau; \quad t > 0, \quad (3.12)$$

e da derivada de Caputo:

$$\left({}^CD^{\alpha}f\right)(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{f'(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha}} d\tau; \quad t > 0. \quad (3.13)$$

Apesar de serem parecidos, os operadores acima possuem diferenças significativas quando aplicadas em funções. O exemplo mais notável ocorre no caso das funções constantes. Dada $f(t) = k$, com $k \in \mathbb{R}$, temos que:

$$\left({}^C D^\alpha f\right)(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{0}{(t-\tau)^\alpha} d\tau = 0, \quad (3.14)$$

que é o que ocorre também no cálculo de ordem inteira, e seria considerado o resultado esperado. Porém, quando calculamos a derivada de Riemann-Liouville, obtemos:

$$\left({}^{RL} D^\alpha f\right)(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{k}{(t-\tau)^\alpha} d\tau = \frac{k}{\Gamma(1-\alpha)t^\alpha}. \quad (3.15)$$

Por conta disso, a derivada de Riemann-Liouville é frequentemente preterida por não preservar certas propriedades desejáveis em aplicações, principalmente quando estamos trabalhando com modelos, e a derivada de Caputo acaba sendo mais utilizada. Porém, existem casos em que é mais vantajoso trabalhar com a formulação de Riemann-Liouville. Mostraremos neste trabalho uma forma construtiva de obter um operador fracionário, e nesse processo aparecerá a derivada de Riemann-Liouville.

De forma mais geral, podemos calcular as derivadas fracionárias de uma função $f(t) = t^\mu$, com $\mu > 0$, utilizando a equação (3.9). Temos então:

$$\left({}^C D^\alpha f\right)(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{\mu t^{\mu-1}}{(t-\tau)^\alpha} d\tau = I_{0+}^{1-\alpha} \mu t^{\mu-1} = \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-\alpha+1)} t^{\mu-\alpha}. \quad (3.16)$$

E no caso da derivada de Riemann-Liouville, temos:

$$\left({}^{RL} D^\alpha f\right)(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{t^\mu}{(t-\tau)^\alpha} d\tau = \frac{d}{dt} I_{0+}^{1-\alpha} t^\mu = \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-\alpha+1)} t^{\mu-\alpha}. \quad (3.17)$$

Observe que obtivemos o mesmo resultado para as duas derivadas. Isto ocorre pois $\left({}^C D^\alpha f\right)(t)$ e $\left({}^{RL} D^\alpha f\right)(t)$ coincidem quando $0 < \alpha \leq 1$, $f(0) = 0$ e a função $f(t)$ possui uma certa regularidade. Isto também fica evidente ao olhar para as discretizações desses operadores, que serão apresentadas mais à frente.

Vejamos agora uma propriedade importante que será utilizada para resolver equações diferenciais fracionárias. Dada uma função f , podemos calcular a transformada de Laplace de $\left({}^C D^\alpha f\right)(t)$ e de $\left({}^{RL} D^\alpha f\right)(t)$. Para isso, notemos que:

$$\left({}^C D^\alpha f\right)(t) = (\phi_{1-\alpha} * f')(t) \quad \text{e} \quad \left({}^{RL} D^\alpha f\right)(t) = (\phi_{1-\alpha} * f)'(t), \quad (3.18)$$

onde $\phi_{1-\alpha}(t) = \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}$ é a função de Gel'Fand-Shilov. Pela propriedade da transformada do produto de convolução, temos que:

$$\mathcal{L}\left[\left({}^C D^\alpha f\right)(t)\right] = \mathcal{L}\left[\frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\right] \mathcal{L}[f'(t)]. \quad (3.19)$$

Com isso, obtemos:

$$\mathcal{L}\left[\left({}^C D^\alpha f\right)(t)\right] = s^{\alpha-1} \{s \mathcal{L}[f(t)] - f(0)\} = s^\alpha \mathcal{L}[f(t)] - s^{\alpha-1} f(0). \quad (3.20)$$

Já no caso da derivada de Riemann-Liouville, devemos utilizar primeiro a transformada da derivada:

$$\mathcal{L} \left[\left({}^{RL}D^\alpha f \right) (t) \right] = s \mathcal{L}[(\phi_{1-\alpha} * f)(t)] - (\phi_{1-\alpha} * f)(0), \quad (3.21)$$

desde que o limite:

$$\lim_{t \rightarrow 0} (\phi_{1-\alpha} * f)(t) = (\phi_{1-\alpha} * f)(0) \quad (3.22)$$

esteja bem definido. Então:

$$\mathcal{L} \left[\left({}^{RL}D^\alpha f \right) (t) \right] = s^\alpha \mathcal{L}[f(t)] - (\phi_{1-\alpha} * f)(0). \quad (3.23)$$

Com estas ferramentas em mãos, seremos capazes de resolver equações diferenciais envolvendo esses operadores, uma vez que a transformada torna as complicadas equações diferenciais em equações algébricas nas quais podemos isolar o termo $\mathcal{L}[y(t)]$, onde $y(t)$ é a função que buscamos determinar. Pelos comentários e exemplos feitos na seção de transformadas de Laplace, conhecer a expressão de $\mathcal{L}[y(t)]$ em função da variável s será o suficiente para determinar a função contínua $y(t)$.

3.3 EQUAÇÕES DIFERENCIAIS FRACIONÁRIAS

Nesta seção, apresentamos a solução de algumas equações diferenciais nas quais aparecem a derivada fracionária de Caputo, considerando problemas de valores iniciais. Os exemplos que resolvemos serão utilizados nas discussões presentes no capítulo 4.

Começemos com um caso mais simples, dado pelo seguinte problema de valor inicial:

$$\begin{cases} \left({}^CD^\alpha y \right) (t) = t^\mu \\ y(0) = y_0 \end{cases} \quad (3.24)$$

Inicialmente, aplicamos a transformada de Laplace em ambos os lados dessa equação, obtendo:

$$s^\alpha \mathcal{L}[y(t)] - s^{\alpha-1} y(0) = \frac{\Gamma(\mu+1)}{s^{\mu+1}}, \quad (3.25)$$

onde podemos isolar a transformada da função y , o que nos dá:

$$\mathcal{L}[y(t)] = \frac{\Gamma(\mu+1)}{s^{\mu+1+\alpha}} + \frac{y_0}{s}, \quad (3.26)$$

e a partir da transformada de $f(t) = t^\mu$, calculada na equação (2.30), podemos concluir que:

$$y(t) = \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu+\alpha+1)} t^{\mu+\alpha} + y_0. \quad (3.27)$$

Este resultado pode ser conferido calculando a derivada de Caputo da função $y(t)$ obtida, onde podemos usar a fórmula (3.16). Evidentemente, teremos $\left({}^CD^\alpha y \right) (t) = t^\mu$. O próximo problema é um dos mais famosos no cálculo fracionário, pois nele podemos

perceber a importância da função de Mittag-Leffler para essa teoria. Considere o seguinte PVI:

$$\begin{cases} ({}^C D^\alpha y)(t) = -\lambda y(t) \\ y(0) = y_0 \end{cases} \quad (3.28)$$

No caso particular em que $\alpha = 1$, o problema irá coincidir com o famoso modelo de Malthus, que trata sobre um crescimento populacional proporcional ao tamanho da população. Para resolvê-lo, iremos novamente aplicar a transformada de Laplace:

$$s^\alpha \mathcal{L}[y(t)] - s^{\alpha-1} y(0) = -\lambda \mathcal{L}[y(t)], \quad (3.29)$$

donde podemos obter a expressão:

$$\mathcal{L}[y(t)] = y_0 \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + \lambda}, \quad (3.30)$$

sendo o lado direito da expressão a transformada de Laplace da função de Mittag-Leffler. Portanto:

$$y(t) = y_0 E_\alpha(-\lambda t^\alpha). \quad (3.31)$$

No cálculo fracionário, a forma mais comum de obter um modelo generalizado é substituindo a derivada clássica por uma derivada fracionária, como feito nas equações acima. Caso tivéssemos utilizado a derivada de Riemann-Liouville ao invés da derivada de Caputo, encontraríamos o seguinte problema: ao aplicar a transformada de Laplace, apareceria o termo $(\phi_{1-\alpha} * y)(0)$, que é desconhecido. Para contornar tal problema, deveríamos mudar os dados do problema, fornecendo então o valor de $(\phi_{1-\alpha} * y)(0)$ como dado inicial. Porém, isto nem sempre é possível de ser realizado nos modelos que queremos generalizar.

Além disso, apenas substituir a ordem da derivada na equação pode fazer com que o modelo perca propriedades importantes, o que mostraremos no capítulo 4. Portanto, nem sempre essa é uma boa forma de obter uma equação diferencial fracionária. Por conta disso, apresentaremos uma forma construtiva de chegar em uma EDF, sem que seja necessário alterar o dado inicial ou substituir a derivada.

3.4 NOVO OPERADOR

No trabalho (13) é apresentada uma proposta de como obter modelos fracionários de forma construtiva utilizando as funções de Mittag-Leffler, que tem como objetivo introduzir certos conceitos do cálculo fracionário nos modelos, como o efeito memória, preservando propriedades físicas essenciais do modelo original. Nesta seção, mostraremos de forma simplificada as contas realizadas para realizar tal construção, assim como uma possível interpretação de seu significado.

Inicialmente, consideramos o seguinte problema de valor inicial:

$$\begin{cases} y'(t) = -ry(t) \\ y(0) = y_0 \end{cases} \iff y(t) = y_0 e^{-rt}. \quad (3.32)$$

Neste caso, dizemos que a função possui um núcleo exponencial. Gostaríamos de estudar o que aconteceria com a equação se o núcleo da função $y(t)$ fosse alterado para uma função $K(t)$. Mais especificamente, gostaríamos de encontrar uma função $K(t)$ para a qual pudéssemos escrever uma Equação Diferencial Fracionária. Com esse objetivo, definimos o núcleo como sendo $K(t) = e^{-r_2 t} E_\alpha(-r_1^\alpha t^\alpha)$, com $r_1 + r_2 = 1$. Desta forma, temos:

$$y(t) = y_0 e^{-r_2 t} E_\alpha(-r_1^\alpha t^\alpha). \quad (3.33)$$

Avaliaremos então o que ocorre com a derivada da função $y(t)$, e tentaremos escrevê-la em função de $y(t)$. Temos então que:

$$\begin{aligned} y'(t) &= -r_2 y_0 e^{-r_2 t} E_\alpha(-r_1^\alpha t^\alpha) + y_0 e^{-r_2 t} \frac{d}{dt} [E_\alpha(-r_1^\alpha t^\alpha)] \\ &= -r_2 y(t) - r_1^\alpha e^{-r_2 t} y_0 t^{\alpha-1} E_{\alpha,\alpha}(-r_1^\alpha t^\alpha). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Perceba que:

$$\begin{aligned} {}^{RL}D^{1-\alpha}[e^{r_2 t} y(t)] &= y_0 \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{E_\alpha(-r_1^\alpha \tau^\alpha)}{(t-\tau)^{1-\alpha}} d\tau \\ &= y_0 \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n r_1^{\alpha n}}{\Gamma(\alpha n + 1)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\tau^{\alpha n}}{(t-\tau)^{1-\alpha}} d\tau \\ &= y_0 \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n r_1^{\alpha n}}{\Gamma(\alpha n + 1)} \frac{\Gamma(\alpha) \Gamma(\alpha n + 1)}{\Gamma(\alpha n + \alpha + 1)} \frac{d}{dt} t^{\alpha n + \alpha} \\ &= y_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n r_1^{\alpha n} (\alpha n + \alpha) t^{\alpha n + \alpha - 1}}{\Gamma(\alpha n + \alpha + 1)} \\ &= y_0 t^{\alpha-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n r_1^{\alpha n} t^{\alpha n}}{\Gamma(\alpha n + \alpha)}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

que é a expressão da função $y_0 t^{\alpha-1} E_{\alpha,\alpha}(-r_1^\alpha t^\alpha)$. Substituindo essa relação na equação (3.34), obtemos:

$$y'(t) = -r_2 y(t) - r_1^\alpha e^{-r_2 t} {}^{RL}D^{1-\alpha}[e^{r_2 t} y(t)]. \quad (3.36)$$

A nova equação possui os parâmetros r_1 e α , e a derivada clássica é mantida. Dessa forma, a derivada da função y será proporcional a um peso da função $y(t)$ somado a um peso da derivada de Riemann-Liouville de $e^{r_2 t} y(t)$. Isso pode ser interpretado como uma média ponderada entre a equação clássica e uma equação fracionária, que adiciona o termo $E_\alpha(-r_1^\alpha t^\alpha)$ na solução. Com isso, define-se um novo operador, que denotaremos por ${}^*D^\alpha$, dado por:

$$({}^*D^\alpha y)(t) := r_2 y(t) + r_1^\alpha e^{-r_2 t} {}^{RL}D^{1-\alpha} [e^{r_2 t} y(t)]. \quad (3.37)$$

Esse novo operador será utilizado para definir uma das formulações fracionárias dos modelos que serão apresentados no capítulo 4. É importante destacar que as contas aqui exibidas foram simplificadas para se adaptar melhor ao propósito deste texto. Uma construção mais geral pode ser feita a partir de uma EDO não homogênea, onde é necessário utilizar a transformada de Laplace para chegar no resultado desejado. Mais discussões sobre essa construção e sobre o núcleo aqui utilizado podem ser vistos nos trabalhos (12) e (13).

3.5 DISCRETIZAÇÃO

Como nosso objetivo é trabalhar com modelos matemáticos utilizando conceitos do cálculo fracionário, devemos ter uma forma de obter uma aproximação da solução de tais equações, uma vez que na maior parte dos casos não é possível obter uma solução analítica. Por conta disso, apresentaremos as principais ideias de como obter uma aproximação razoável da solução, conhecida como solução numérica. No caso clássico, existem diversos métodos de como isto pode ser feito, como o método de diferenças finitas e o método de elementos finitos. Aqui, daremos foco aos operadores de ordem não inteira, e descreveremos o esquema L1 de discretização das derivadas fracionárias de Caputo e de Riemann-Liouville.

Considere uma função $f : [T_0, T_1] \rightarrow \mathbb{R}$ que satisfaz uma certa EDO conhecida. Queremos obter uma aproximação de tal função no intervalo $[T_0, T_1]$. Para isso, restringimos nossa atenção a um subconjunto finito ordenado desse intervalo e que contenha T_0 e T_1 , chamado de partição do intervalo, que denotaremos por P . Então $P = \{t_0, t_1, \dots, t_n\}$, com $t_0 = T_0$, $t_1 = T_1$ e $t_{k+1} - t_k = \Delta t_k > 0$, $k = 0, \dots, n-1$. Ao trabalhar com a formulação discreta do problema, iremos aproximar o valor da função f e dos operadores do cálculo nos pontos de P .

Se quisermos calcular, por exemplo, uma aproximação para $f'(t_k)$, com $k = 0, \dots, n-1$, teremos:

$$f'(t_k) \approx \frac{f(t_{k+1}) - f(t_k)}{\Delta t_k}, \quad (3.38)$$

desde que tenhamos Δt_k pequeno. Isto segue diretamente da definição de derivada, dada pelo limite:

$$f'(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t}, \quad (3.39)$$

o que também torna possível calcular a ordem de convergência da aproximação em função de Δt . O esquema acima é conhecido como método de diferenças finitas progressivas de primeira ordem.

No caso em que queremos aproximar os operadores de Caputo e de Riemann-Liouville, consideramos $\Delta t_k = \Delta t$, para todo $k = 0, \dots, n-1$. Além disso, como os limites de integração na definição desses operadores são 0 e t , também temos $T_0 = 0$. Desta forma, o esquema L1 de discretização será uma aproximação das derivadas fracionárias. Para

a derivada de Caputo, o valor de $({}^C D^\alpha f)(t_j)$, com $1 \leq j \leq n$, pode ser aproximado da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
({}^C D^\alpha f)(t_j) &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{t_j} \frac{f'(\tau)}{(t_j - \tau)^\alpha} d\tau \\
&= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{f'(\tau)}{(t_j - \tau)^\alpha} d\tau \\
&\approx \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \frac{f(t_{k+1}) - f(t_k)}{\Delta t} \int_{t_k}^{t_{k+1}} (t_j - \tau)^{-\alpha} d\tau \\
&\approx \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \frac{f(t_{k+1}) - f(t_k)}{\Delta t} \left[-\frac{(t_j - \tau)^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right]_{t_k}^{t_{k+1}} \\
&\approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \frac{f(t_{k+1}) - f(t_k)}{\Delta t} [(t_j - t_k)^{1-\alpha} - (t_j - t_{k+1})^{1-\alpha}] \\
&\approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)(\Delta t)^\alpha} \sum_{k=0}^{j-1} [f(t_{k+1}) - f(t_k)] [(j-k)^{1-\alpha} - (j-k-1)^{1-\alpha}].
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Para simplificar a expressão acima, utilizamos a notação:

$$\begin{cases} a_k = \frac{(k+1)^{1-\alpha} - 2k^{1-\alpha} + (k-1)^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)(\Delta t)^\alpha}, & k = 1, \dots, n, \\ b_k = \frac{(k-1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)(\Delta t)^\alpha}, & k = 1, \dots, n, \\ a_0 = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)(\Delta t)^\alpha}. \end{cases} \tag{3.41}$$

Desta forma, a aproximação da derivada de Caputo da função f , calculada no ponto t_j , é dada por:

$$({}^C D^\alpha f)(t_j) \approx a_0 f(t_j) + \sum_{k=1}^{j-1} f(t_k) a_{j-k} + f(t_0) b_j. \tag{3.42}$$

Assim, fica evidente o efeito memória presente nas derivadas fracionárias, pois para calculá-las no ponto t_j , necessitamos do valor da função em todos os pontos t_k , com $0 \leq k \leq j$. Esse comportamento resulta em elevado custo computacional, devido à necessidade de acessar todos os valores anteriores da função. Uma forma interessante de visualizar esta situação é através da representação matricial do operador discretizado. De fato, temos que:

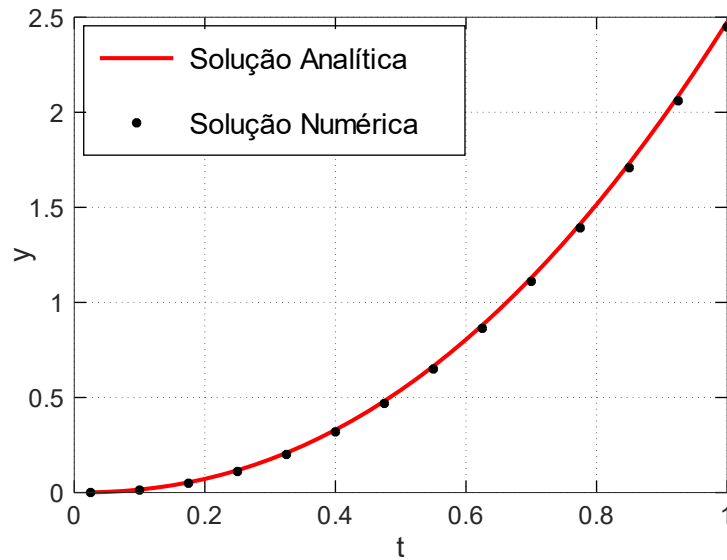
$$\begin{aligned}
({}^C D^\alpha f)(t_1) &\approx b_1 f(t_0) + a_0 f(t_1), \\
({}^C D^\alpha f)(t_2) &\approx b_2 f(t_0) + a_1 f(t_1) + a_0 f(t_2), \\
({}^C D^\alpha f)(t_3) &\approx b_3 f(t_0) + a_2 f(t_1) + a_1 f(t_2) + a_0 f(t_3), \\
&\vdots \\
({}^C D^\alpha f)(t_n) &\approx b_n f(t_0) + a_{n-1} f(t_1) + a_{n-2} f(t_2) + \dots + a_1 f(t_{n-1}) + a_0 f(t_n).
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Então podemos enxergar a derivada de Caputo discretizada como uma transformação linear do espaço das funções definidas na partição P e chegando no espaço das funções definidas em $P \setminus \{0\}$, e que pode ser representado pela matriz:

$$[{}^C D^\alpha] = \begin{bmatrix} b_1 & a_0 & 0 & & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & a_1 & a_0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ b_3 & a_2 & a_1 & & 0 & 0 & 0 \\ & \vdots & & \ddots & & \vdots & \\ b_{n-1} & a_{n-2} & a_{n-3} & & a_1 & a_0 & 0 \\ b_n & a_{n-1} & a_{n-2} & \cdots & a_2 & a_1 & a_0 \end{bmatrix} \quad (3.44)$$

Como exemplo, calculamos a aproximação da derivada de Caputo de ordem $\alpha = 0.8$ da função $f(t) = t^3 + 1$ no intervalo $[0, 1]$, com $\Delta t = 0.025$. Os resultados obtidos estão apresentados na figura 4, onde podemos comparar a solução analítica e a solução numérica de $({}^C D^\alpha f)(t) = \frac{\Gamma(4)}{\Gamma(3.2)} t^{2.2}$. Destacamos apenas alguns dos pontos obtidos para facilitar a visualização.

– Figura 4 - Discretização da derivada de Caputo.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

É possível verificar que esta discretização calcula o valor exato da derivada de Caputo de uma função afim, ou seja, $f(t) = at + b$, com $a, b \in \mathbb{R}$. Isto também pode ser visto por meio das contas realizadas acima. Para outros tipos de funções, o erro da aproximação irá depender do valor de Δt . A seguir, apresentamos a fórmula para o erro relativo entre as soluções numérica e analítica:

$$ER = \frac{\|SN - SA\|}{\|SA\|}, \quad (3.45)$$

onde SN é o vetor da solução numérica, SA é o vetor da solução analítica e $||.||$ é a norma euclidiana. Na tabela 1 apresentamos os erros obtidos ao calcular $({}^C D^\alpha f)(t)$ no intervalo $[0, 1]$, com $f(t) = t^3 + 1$, para diferentes valores de Δt e de α .

Tabela 1 – Erro relativo da aproximação da derivada de Caputo.

$\Delta t \backslash \alpha$	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
10^{-1}	7.125×10^{-3}	1.879×10^{-2}	3.787×10^{-2}	6.867×10^{-2}	1.175×10^{-1}
10^{-2}	1.608×10^{-4}	5.957×10^{-4}	1.766×10^{-3}	4.850×10^{-3}	1.278×10^{-2}
10^{-3}	2.960×10^{-6}	1.596×10^{-5}	7.231×10^{-5}	3.104×10^{-4}	1.290×10^{-3}
10^{-4}	5.086×10^{-8}	4.099×10^{-7}	2.895×10^{-6}	1.962×10^{-5}	1.291×10^{-4}

Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

Podemos perceber que ao diminuir o valor de Δt , o erro relativo da aproximação também diminui, para todos os valores de α apresentados. Note também que a convergência é mais rápida para valores menores de α , e, quando $\alpha = 1$, o erro diminui quase na mesma proporção que Δt . Isso ocorre pois neste caso a discretização irá coincidir com o método de diferenças finitas, que possui esta propriedade devido à fórmula de Taylor.

A discretização da derivada de Riemann-Liouville pode ser feita de maneira semelhante, porém devemos ter cuidado com o valor $f(0)$, pois caso $f(0) \neq 0$, então a derivada de Riemann-Liouville não estará definida em 0. Por causa disso, a conta realizada para obter a discretização é feita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} ({}^{RL} D^\alpha f)(t_j) &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dt_j} \int_0^{t_j} \frac{f(\tau)}{(t_j - \tau)^\alpha} d\tau \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dt_j} \int_0^{t_j} \frac{f(\tau) - f(0)}{(t_j - \tau)^\alpha} d\tau + \frac{f(0)}{\Gamma(1-\alpha)t_j^\alpha}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

E para o primeiro termo da expressão, denotando $g(t) = f(t) - f(0)$, temos a aproximação:

$$\begin{aligned} &\approx \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \left[\frac{\int_0^{t_{j+1}} g(\tau)(t_{j+1} - \tau)^{-\alpha} d\tau - \int_0^{t_j} g(\tau)(t_j - \tau)^{-\alpha} d\tau}{\Delta t} \right] \\ &\approx \frac{\Delta t^{-1}}{\Gamma(1-\alpha)} \left[\int_0^{t_j} \frac{g(\tau)}{(t_{j+1} - \tau)^\alpha} - \frac{g(\tau)}{(t_j - \tau)^\alpha} d\tau + \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{g(\tau)}{(t_{j+1} - \tau)^\alpha} d\tau \right] \\ &\approx \frac{\Delta t^{-1}}{\Gamma(1-\alpha)} \left[\sum_{k=0}^{j-1} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{g(\tau)}{(t_{j+1} - \tau)^\alpha} - \frac{g(\tau)}{(t_j - \tau)^\alpha} d\tau + \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{g(\tau)}{(t_{j+1} - \tau)^\alpha} d\tau \right] \\ &\approx \frac{\Delta t^{-1}}{\Gamma(1-\alpha)} \left\{ \sum_{k=0}^{j-1} g(t_k) \left[\frac{-(t_{j+1} - \tau)^{1-\alpha} + (t_j - \tau)^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right]_{t_k}^{t_{k+1}} + g(t_j) \left[\frac{-(t_{j+1} - \tau)^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right]_{t_j}^{t_{j+1}} \right\} \\ &\approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)\Delta t^\alpha} \left\{ \sum_{k=0}^{j-1} g(t_k) [(j-k+1)^{1-\alpha} - 2(j-k)^{1-\alpha} + (j-k-1)^{1-\alpha}] + g(t_j) \right\}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Adotando a seguinte notação:

$$\begin{cases} a_k = \frac{(k+1)^{1-\alpha} - 2k^{1-\alpha} + (k-1)^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)(\Delta t)^\alpha}, & k = 1, \dots, n, \\ c_k = \frac{(k-1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)(\Delta t)^\alpha} + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)(k\Delta t)^\alpha}, & k = 1, \dots, n, \\ a_0 = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)(\Delta t)^\alpha}, \end{cases} \quad (3.48)$$

obtemos que a aproximação de ${}^{RL}D^\alpha f$ calculada no ponto t_j é dada por:

$$\left({}^{RL}D^\alpha f\right)(t_j) \approx a_0 f(t_j) + \sum_{k=1}^{j-1} f(t_k) a_{j-k} + f(t_0) c_j. \quad (3.49)$$

E, analogamente ao caso da derivada de Caputo, sua representação matricial será:

$$\left[{}^{RL}D^\alpha\right] = \begin{bmatrix} c_1 & a_0 & 0 & & 0 & 0 & 0 \\ c_2 & a_1 & a_0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ c_3 & a_2 & a_1 & & 0 & 0 & 0 \\ & \vdots & & \ddots & & \vdots & \\ c_{n-1} & a_{n-2} & a_{n-3} & & a_1 & a_0 & 0 \\ c_n & a_{n-1} & a_{n-2} & \cdots & a_2 & a_1 & a_0 \end{bmatrix} \quad (3.50)$$

Note que a única diferença entre as discretizações das derivadas de Riemann-Liouville e de Caputo está no termo que acompanha $f(0)$, dados pelos c_k e b_k , respectivamente, sendo que $c_k = b_k + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)(k\Delta t)^\alpha}$. Isto destaca que se $f(0) = 0$ então as duas derivadas, considerando certa regularidade da função f , coincidem.

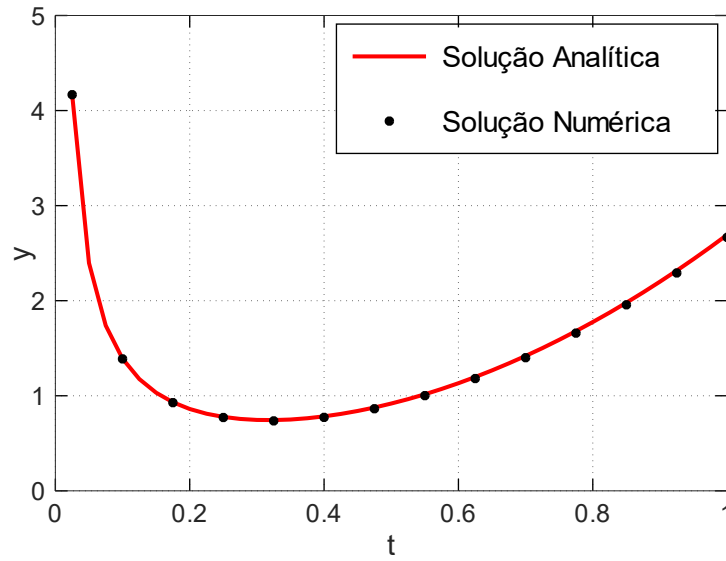
Podemos notar a diferença que ocorre quando calculamos a aproximação da derivada de Riemann-Liouville de ordem $\alpha = 0.8$ na mesma função da figura 4, que é $f(t) = t^3 + 1$ no intervalo $[0, 1]$, com $\Delta t = 0.025$. Na figura 5 podemos ver os resultados obtidos da solução analítica e da solução numérica de $\left({}^{RL}D^\alpha f\right)(t) = \frac{\Gamma(4)}{\Gamma(3.2)} t^{2.2} + \frac{1}{\Gamma(0.2)} t^{-0.8}$. Destacamos apenas alguns dos pontos obtidos para facilitar a visualização.

Note que a derivada de Riemann-Liouville desta função não estará definida em $t = 0$, pois $f(0) \neq 0$. Consequentemente, o resultado é diferente do obtido para a derivada de Caputo. Porém, para valores maiores de t , o termo $\frac{1}{\Gamma(0.2)} t^{-0.8}$ se aproxima de 0, e, portanto, o comportamento das duas funções será semelhante.

Na tabela 2 mostramos os erros relativos obtidos ao calcular a aproximação de $\left({}^{RL}D^\alpha f\right)(t)$ para a mesma função $f(t) = t^3 + 1$.

Podemos perceber que no caso $\alpha = 1$ o erro será o mesmo nas duas tabelas, já que as duas discretizações irão coincidir com a discretização da derivada clássica. Outra característica importante é que a velocidade de convergência também depende do valor de α , indicando que a convergência do método depende da ordem da derivada utilizada.

– Figura 5 - Discretização da derivada de Riemann-Liouville.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

Tabela 2 – Erro relativo da aproximação da derivada de Riemann-Liouville.

$\Delta t \backslash \alpha$	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
10^{-1}	2.842×10^{-3}	9.158×10^{-2}	2.315×10^{-2}	5.450×10^{-2}	1.175×10^{-1}
10^{-2}	5.670×10^{-5}	2.441×10^{-4}	8.348×10^{-4}	2.900×10^{-3}	1.278×10^{-2}
10^{-3}	1.024×10^{-6}	6.135×10^{-5}	2.746×10^{-5}	1.146×10^{-4}	1.290×10^{-3}
10^{-4}	1.753×10^{-8}	1.525×10^{-7}	8.836×10^{-7}	3.900×10^{-6}	1.291×10^{-4}

Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

Além disso, por consequência das contas realizadas, estas discretizações retornam a solução exata quando aplicadas em uma função afim, ou seja, $f(t) = at + b$, com $a, b \in \mathbb{R}$. Para outros tipos de funções, a convergência e o erro cometido irão depender de Δt , porém é possível mostrar que para funções com uma certa regularidade o erro da aproximação das derivadas é da ordem de $(\Delta t)^{2-\alpha}$. Isto pode ser verificado nas tabelas acima, analisando o que ocorre com o erro relativo quando fixamos α e diminuimos Δt . Estas informações podem ser encontradas com mais detalhes em livros de análise numérica de operadores e equações fracionárias, como o livro (7).

As duas discretizações apresentadas nessa seção serão utilizadas para obter a solução numérica dos modelos fracionários presentes no capítulo 4, então sua aplicação terá o foco voltado para a resolução de equações diferenciais.

4 APLICAÇÃO EM MODELOS

No cálculo fracionário, busca-se encontrar aplicações das derivadas fracionárias em modelos matemáticos, com o objetivo de avaliar as propriedades que serão mantidas ou perdidas com essa generalização, além dos efeitos que podem ser obtidos com o novo parâmetro da ordem da derivada.

Nosso objetivo nesse capítulo é estudar o modelo de difusão de oxigênio em tecidos, proposto por Crank e Gupta em 1972, no artigo (6), porém agora com a aplicação de operadores do cálculo fracionário. Por se tratar de um problema de fronteira móvel, o que significa que o domínio da variável espacial não está fixo ao longo do tempo, encontrar a solução analítica se torna inviável. Por conta disso, faremos uma avaliação de soluções numéricas obtidas utilizando as discretizações apresentadas anteriormente.

Para validar os métodos numéricos utilizados e também para entender melhor como funcionam os processos de difusão vistos através das derivadas fracionárias, estudaremos inicialmente a equação do calor com operadores fracionários. Nestes casos, seremos capazes de obter soluções analíticas e compará-las com os resultados numéricos, e também avaliar as diferenças com relação à solução do caso clássico. Trabalharemos com duas formulações da equação do calor: com a derivada de Caputo e com o operador ${}^*D^\alpha$.

4.1 EQUAÇÃO DO CALOR

A equação do calor é um modelo matemático que descreve a difusão de calor em um meio. No caso unidimensional, podemos pensar no problema de definir a função $u(x, t)$ que descreve a temperatura de uma barra no tempo $t \geq 0$ e no ponto $0 \leq x \leq L$, sendo $x = 0$ e $x = L$ as extremidades das barras. Para isso, devemos conhecer a distribuição inicial de calor no instante $t = 0$, que pode ser dada por uma função $f(x)$, e alguma informação sobre a temperatura da barra em suas extremidades. A função $f(x)$ é a condição inicial do problema, e as informações nas extremidades são as condições de contorno, que podem ser:

- Condições de Dirichlet: definem a temperatura ao longo do tempo, ou seja, são funções $T_1(t)$ e $T_2(t)$ tais que $u(0, t) = T_1(t)$ e $u(L, t) = T_2(t)$.
- Condições de Neumann: definem a variação de temperatura, ou seja, são da forma $u_x(0, t) = T_1(t)$ e $u_x(L, t) = T_2(t)$.
- Condições de Robin: nos diz que a variação de temperatura é proporcional à própria temperatura, ou seja, é uma combinação das condições de Dirichlet e de Neumann, na forma $a_1(t)u(0, t) + b_1(t)u_x(0, t) = T_1(t)$ e $a_2(t)u(L, t) + b_2(t)u_x(L, t) = T_2(t)$.

Problemas nos quais aparecem condições diferentes em $x = 0$ e $x = L$ são ditos problemas com condições mistas.

Por fim, a temperatura $u(x, t)$ na barra deve satisfazer também uma equação diferencial parcial, que relaciona a sua variação no tempo à segunda derivada com relação à variável espacial, descrevendo o fenômeno de difusão. Ela é dada por:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \rho \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (4.1)$$

onde ρ é o coeficiente de difusão térmica. Este é um modelo clássico e bem conhecido, cuja solução pode ser obtida pelo método de separação de variáveis. Neste trabalho, vamos considerar $\rho = 1$ para avaliar duas formulações fracionárias deste modelo. Para isso, utilizaremos as seguintes notações:

$${}^C D_t^\alpha [g(x, t)] = \frac{1}{\Gamma(1 - \alpha)} \int_0^t \frac{1}{(t - \tau)^\alpha} \frac{\partial g(x, \tau)}{\partial \tau} d\tau, \quad (4.2)$$

$${}^* D_t^\alpha [g(x, t)] = r_2 g(x, t) + \frac{r_1^\alpha e^{-r_2 t}}{\Gamma(\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{e^{r_2 \tau} g(x, \tau)}{(t - \tau)^{1-\alpha}} d\tau. \quad (4.3)$$

4.1.1 Formulação com a derivada de Caputo

Nesta seção, propomos uma formulação fracionária da equação, substituindo a derivada clássica pela derivada de Caputo. Fazemos um estudo qualitativo dessa equação com condições de Neumann homogêneas, obtendo uma solução analítica e comparando-a com a solução numérica. Consideremos então o problema:

$$\begin{cases} {}^C D_t^\alpha [u(x, t)] = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \\ u_x(0, t) = 0 \\ u_x(L, t) = 0 \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (4.4)$$

Assim como no caso clássico, buscaremos uma solução para esse problema utilizando o método de separação de variáveis. Suponha então que $u(x, t) = X(x)T(t)$. Pela equação acima, X e T satisfazem:

$$X(x) \left({}^C D^\alpha T \right) (t) = X''(x)T(t), \quad (4.5)$$

que podemos escrever como:

$$\frac{X''(x)}{X(x)} = \frac{\left({}^C D^\alpha T \right) (t)}{T(t)} = -\lambda, \quad (4.6)$$

onde $\lambda \in \mathbb{R}$. A última igualdade ocorre pois igualamos duas funções com variáveis diferentes, e isso só pode ocorrer quando elas são constantes. A partir da expressão acima

e das condições de contorno do problema, podemos concluir que a função X é solução de:

$$\begin{cases} X''(x) + \lambda X(x) = 0 \\ X'(0) = 0 \\ X'(L) = 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

A solução do problema acima é bem conhecida, e é dada por $X(x) = \cos(\frac{n\pi x}{L})$, onde $n \in \mathbb{N}$. Neste caso, $\lambda = \frac{n^2\pi^2}{L^2}$. Porém, para a função T , obtemos a seguinte EDF:

$$\left({}^C D^\alpha T\right)(t) + \lambda T(t) = 0. \quad (4.8)$$

Como discutido anteriormente, a solução dessa EDF é dada por $T(t) = E_\alpha(-\lambda t^\alpha)$, com λ como definido acima. Recorrendo à teoria das séries de Fourier, podemos concluir que a solução $u(x, t)$ é dada por:

$$u(x, t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n E_\alpha\left(-\frac{n^2\pi^2 t^\alpha}{L^2}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (4.9)$$

onde os coeficientes a_n são os coeficientes da série de Fourier da função $f(x)$ com uma extensão par, dados por:

$$a_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx. \quad (4.10)$$

Podemos avaliar a solução obtida para compreender o que é alterado quando inserimos a derivada de Caputo no contexto da equação do calor. Isto pode ser feito avaliando a função $E_\alpha(-kt^\alpha)$ com $\alpha \in (0, 1)$. No gráfico apresentado na figura 6, notamos que a função de Mittag-Leffler decresce de forma mais acelerada do que a exponencial no começo, porém se aproxima do zero de forma mais lenta. Este efeito é conhecido como cauda pesada na teoria de distribuições.

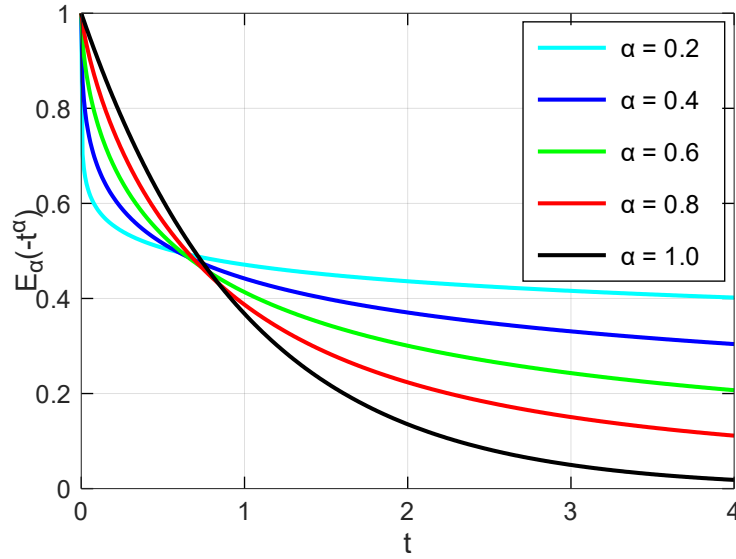
A interpretação dessa mudança no comportamento da solução pode ser entendida como uma forma de difusão anômala, na qual a propriedade da matéria ou energia estudada se difere do usual, alterando a maneira com que ela se distribui no meio.

Apesar disso, uma importante propriedade do modelo é preservada. Como existe uma distribuição inicial em uma região do espaço, e as condições de Neumann nos dizem que não existe fluxo nas fronteiras dessa região, então é esperado que a quantidade total seja mantida ao longo do tempo. Esta noção intuitiva é conhecida como balanço de massa. Matematicamente, isto pode ser descrito da seguinte forma: em um instante inicial, existe uma quantidade Q_0 de matéria ou energia na região do espaço dada por $[0, L]$, onde:

$$Q_0 = \int_0^L u(x, 0) dx = \int_0^L f(x) dx. \quad (4.11)$$

Se nos extremos 0 e L desta região não existe um fluxo deste material em nenhum momento, ou seja, $c_x(0, t) = 0$ e $c_x(L, t) = 0$, então a quantidade total $Q(t)$ dada por:

$$Q(t) = \int_0^L u(x, t) dx, \quad (4.12)$$

– Figura 6 - Gráfico da função $E_\alpha(-t^\alpha)$.

Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

será constante, com $Q(t) = Q_0$.

Utilizando Q_0 e $Q(t)$ como definidos acima, e olhando para a solução $u(x, t)$ obtida, temos que:

$$Q(t) = \int_0^L \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n E_\alpha \left(-\frac{n^2 \pi^2 t^\alpha}{L^2} \right) \cos \left(\frac{n \pi x}{L} \right) \right] dx = \frac{a_0}{2} L = \int_0^L f(x) dx, \quad (4.13)$$

donde de fato temos $Q(t) = Q_0$.

Portanto, o balanço de massa da equação foi mantido quando alteramos a derivada na variável temporal. Porém, se a equação não fosse homogênea, ou se o modelo fosse mais complicado, isso não aconteceria, como veremos no modelo de difusão de oxigênio.

Esta propriedade fica evidente ao estudarmos o modelo com a condição inicial definida, onde podemos ver a expressão da solução analítica e compará-la com a solução numérica. Com isso, poderemos entender melhor o comportamento desse tipo de difusão, e também verificar os métodos numéricos utilizados. No exemplo, consideramos $L = 1$.

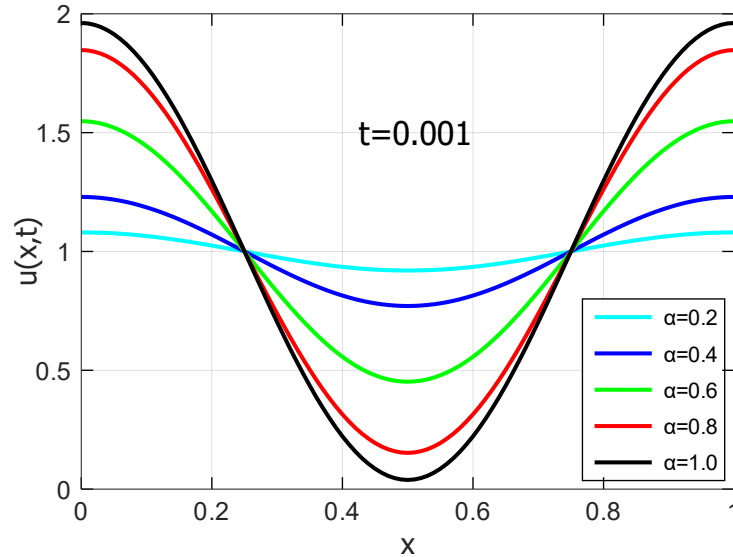
Exemplo 9. Considere a condição inicial $f(x) = 1 + \cos(2\pi x)$. Neste caso, os coeficiente da série de Fourier da função já são conhecidos, e são dados por $a_0 = 2$, $a_1 = 0$, $a_2 = 1$ e $a_n = 0$, para todo $n \geq 3$. Portanto, a solução será:

$$u(x, t) = 1 + E_\alpha(-4\pi^2 t^\alpha) \cos(2\pi x). \quad (4.14)$$

Na figura 7 temos o gráfico da função $u(x, t)$, com $t = 0.001$, para diferentes valores de α . Podemos notar que para valores de α próximos de 1 ainda não houve uma mudança significativa em relação à condição inicial, enquanto para valores de α próximos de zero

a função está próxima do estado estacionário, que neste exemplo é $u(x, t) = 1$. Isso significaria que a difusão é acelerada nos instantes iniciais, e é mais rápida para valores menores de α .

– Figura 7 - Solução analítica $u(x, t)$ da formulação de Caputo em $t = 0.001$.



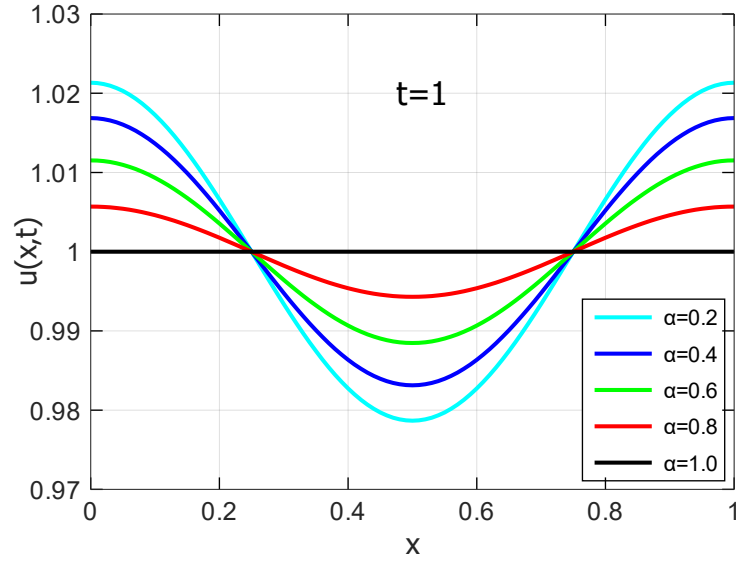
Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

Porém, quando avaliamos o comportamento da função no instante $t = 1$, percebemos que a solução já está muito próxima do estado de equilíbrio no caso clássico, mas para outros valores de α a difusão ainda está ocorrendo, como se ela tivesse sido "desacelerada". Este fenômeno está associado com a propriedade de cauda pesada da função de Mittag-Leffler, que também pode ser entendido como o efeito memória que foi adicionado no modelo. Esta situação está retratada na figura 8.

Além da solução analítica, obtivemos também a solução numérica. Para isso, utilizamos o esquema L1 para a derivada de Caputo e o método de diferenças finitas para a segunda derivada na variável espacial. A tabela 3 apresenta o erro relativo entre as soluções para diferentes valores de Δt e de α , mantendo fixo $\Delta x = 0.025$ e olhando para a solução em $x \in [0, 1]$, $t \in [0, 1]$. Destacamos que, nesse caso, a solução que estamos avaliando é representada por uma matriz de dimensões $\left(\frac{1}{\Delta x} + 1\right) \times \left(\frac{1}{\Delta t} + 1\right)$. Por exemplo, quando $\Delta x = 0.025$ e $\Delta t = 0.002$, teremos uma matriz 41×501 .

Podemos perceber que o erro relativo já é pequeno para $\Delta t = 0.002$, e diminui quando diminuimos Δt , o que indica que o método utilizado está de fato fornecendo uma boa aproximação da solução. Isso nos ajuda a validar o método utilizado, pois ele também será aplicado no próximo modelo, o qual não conhecemos a solução analítica.

– Figura 8 - Solução analítica $u(x, t)$ da formulação de Caputo em $t = 1$.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

Tabela 3 – Erro relativo da solução numérica da formulação de Caputo.

$\Delta t \backslash \alpha$	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
2.0×10^{-3}	5.352×10^{-4}	2.470×10^{-3}	4.456×10^{-3}	3.485×10^{-3}	2.309×10^{-3}
1.0×10^{-3}	4.248×10^{-4}	1.966×10^{-3}	2.877×10^{-3}	1.902×10^{-3}	1.226×10^{-3}
5.0×10^{-4}	3.364×10^{-4}	1.514×10^{-3}	1.759×10^{-3}	1.033×10^{-3}	6.748×10^{-4}
2.5×10^{-4}	2.657×10^{-4}	1.125×10^{-3}	1.035×10^{-3}	5.676×10^{-4}	3.968×10^{-4}

Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

4.1.2 Formulação com o novo operador

Em geral, apenas substituir a derivada clássica por uma derivada fracionária faz com que o modelo perca muitas propriedades importantes, além de não existir nenhum tipo de interpretação para tal mudança. Com isso em mente, a ideia de utilizar um operador obtido de forma construtiva se encaixa melhor neste contexto. Dessa forma, iremos propôr um modelo de difusão fracionária, porém agora com o operador ${}^*D^\alpha$. Para isso, manteremos as condições de contorno e a condição inicial, e o modelo será:

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = {}^*D_t^\alpha \left[\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right] \\ u_x(0, t) = 0 \\ u_x(L, t) = 0 \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (4.15)$$

A ideia desse novo modelo é que a taxa de variação de $u(x, t)$ no tempo será igual

a uma proporção da derivada segunda de $u(x, t)$ na variável espacial, o que seria a difusão clássica, somada com uma proporção da derivada segunda de $u(x, t)$ porém com um peso na informação dos tempos anteriores, que poderia representar um fenômeno de difusão anômala. Isso nos dá uma interpretação para o modelo fracionário. Além disso, também podemos obter a solução analítica do problema para este caso. Utilizando o método de separação de variáveis, chegamos em:

$$\frac{X''(x)}{X(x)} = \frac{T'(t)}{(*D^\alpha T)(t)} = -\lambda, \quad (4.16)$$

novamente com $\lambda \in \mathbb{R}$. Como as condições de contorno foram mantidas, a função $X(x)$ ainda deve satisfazer (4.7), donde $X(x) = \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$, com $n \in \mathbb{N}$. A função $T(t)$, porém, terá que satisfazer a seguinte EDF:

$$T'(t) + \lambda (*D^\alpha T)(t) = 0. \quad (4.17)$$

Note que esta é a equação que utilizamos para definir o operador $*D^\alpha$, e, portanto, a sua solução é:

$$T(t) = e^{-r_2 \lambda t} E_\alpha(-r_1^\alpha \lambda t^\alpha). \quad (4.18)$$

Com isso, a solução $u(x, t)$ do modelo será dada por:

$$u(x, t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\frac{r_2 n^2 \pi^2}{L^2} t} E_\alpha\left(-\frac{r_1^\alpha n^2 \pi^2}{L^2} t^\alpha\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (4.19)$$

onde os termos a_n são definidos como em (4.10). A solução obtida é muito parecida com a do caso de Caputo, que é recuperada quando $r_1 = 1$. Porém agora temos dois parâmetros para ajustar na equação. Além disso, quando $r_1 = 0$, retornaremos para a solução do problema clássico, independente do valor dado para α . Desta forma, a solução é uma transição entre a solução do caso clássico e a solução do caso fracionário de Caputo de ordem α , com o parâmetro r_1 indicando a porcentagem de cada um que é considerada.

Na figura 9, exibimos o gráfico da função $y(t) = e^{-r_2 t} E_\alpha(-r_1^\alpha t^\alpha)$, com $\alpha = 0.6$ e o valor de r_1 variando. É possível notar que o comportamento da Mittag-Leffler é suavizado pela exponencial quando diminuimos o valor de r_1 . Com isso, o efeito de cauda pesada não será tão forte, o que será refletido quando formos avaliar a solução do modelo.

Além disso, o balanço de massa também será mantido, uma vez que:

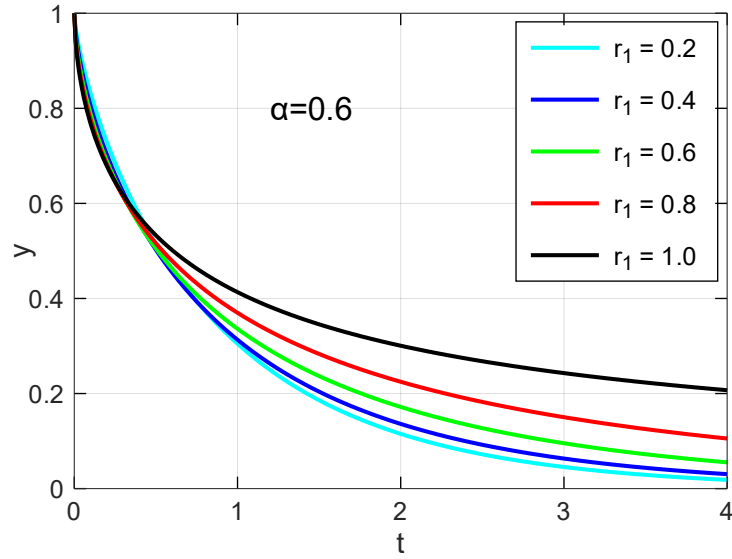
$$Q(t) = \int_0^L \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\frac{r_2 n^2 \pi^2}{L^2} t} E_\alpha\left(-\frac{r_1^\alpha n^2 \pi^2}{L^2} t^\alpha\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right] dx = \int_0^L f(x) dx, \quad (4.20)$$

donde a relação $Q(t) = Q_0$ é mantida, como na formulação anterior. Vejamos agora o que ocorre no problema com mesma solução inicial que o exemplo anterior.

Exemplo 10. Consideremos novamente a condição inicial $f(x) = 1 + \cos(2\pi x)$. Neste caso, a solução será dada por:

$$u(x, t) = 1 + e^{-4\pi^2 r_2 t} E_\alpha(-4\pi^2 r_1^\alpha t^\alpha) \cos(2\pi x). \quad (4.21)$$

– Figura 9 - Gráfico da função $e^{-r_2 t} E_\alpha(-r_1^\alpha t^\alpha)$.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

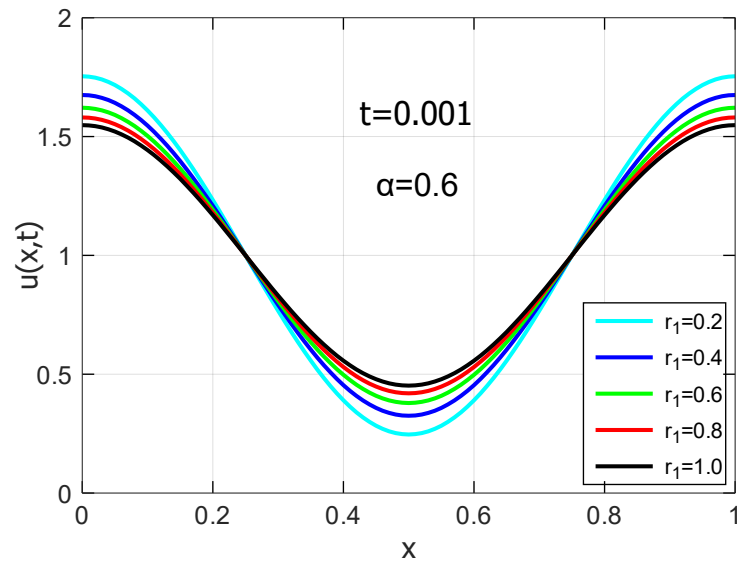
Na figura 10 está representado o caso particular $\alpha = 0.6$, onde a solução no tempo $t = 0.001$ é apresentada para diferentes valores de r_1 . Para $r_1 = 1$, temos a mesma solução do modelo de Caputo com $\alpha = 0.6$, mas ao diminuir o valor de r_1 observamos que o processo de difusão ocorrerá de forma um pouco mais lenta nos instantes iniciais, sem uma grande variação entre os resultados. Isso indica que o termo exponencial ameniza a difusão acelerada que a Mittag-Leffler proporciona nos instantes iniciais.

Avançando agora para $t = 0.15$, percebemos uma mudança significativa, já que a solução terá se aproximado bastante do estado de equilíbrio para os valores de r_1 diferentes de 1, mesmo quando $r_1 = 0.8$, o que pode ser visto na figura 11. Isso ocorre pois o decaimento exponencial se sobrepõe em relação ao efeito de cauda pesada da Mittag-Leffler, fazendo com que o processo de difusão não se estenda por tanto tempo. Essa é uma vantagem dessa formulação do modelo, pois os processos de difusão normalmente não ocorrem de forma tão lenta como no caso de Caputo.

Obtivemos também a solução numérica do problema. Como o modelo varia entre o caso clássico e a formulação de Caputo, comparamos o erro ao variar o valor de r_1 com α fixo. Na tabela 4 apresentamos o erro relativo entre as soluções para diferentes valores de Δt e de r_1 , mantendo fixo $\Delta x = 0.025$ e $\alpha = 0.9$, olhando para a solução em $x \in [0, 1]$, $t \in [0, 1]$.

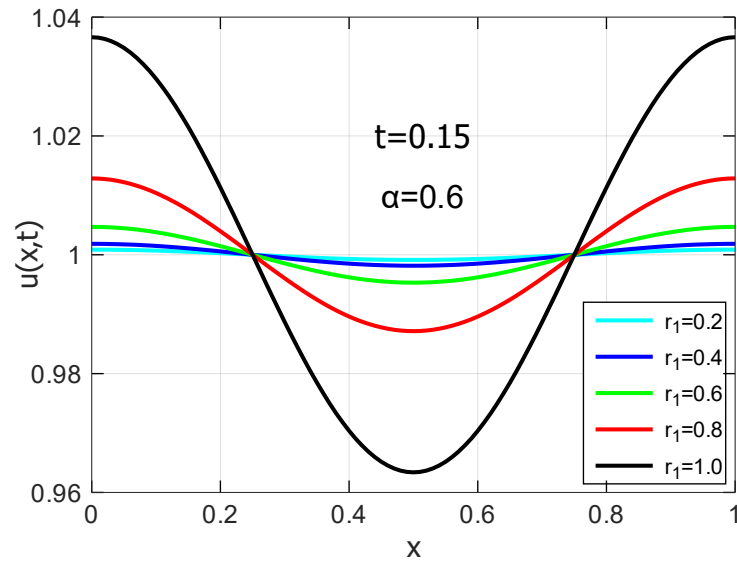
O erro relativo se manteve em uma faixa próxima de 10^{-3} nos dois casos, e diminuiu quando Δt diminuiu, o que indica que os métodos utilizados nos dão boas aproximações para a solução.

– Figura 10 - Solução analítica $u(x, t)$ da formulação de ${}^*D^\alpha$ em $t = 0.001$, com $\alpha = 0.6$.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

– Figura 11 - Solução analítica $u(x, t)$ da formulação de ${}^*D^\alpha$ em $t = 0.15$, com $\alpha = 0.6$.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

4.2 MODELO DE DIFUSÃO DE OXIGÊNIO

O modelo de difusão de oxigênio foi proposto em 1972 no artigo (6), e desde então vários trabalhos sobre esse modelo foram publicados. Alguns têm como proposta obter soluções analíticas aproximadas fazendo suposições sobre o comportamento da fronteira móvel nos instantes iniciais, como (2). Outros buscam métodos numéricos para resolver o

Tabela 4 – Erro relativo da solução numérica da formulação de ${}^*D^\alpha$.

$\Delta t \backslash \alpha$	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
2.0×10^{-3}	3.845×10^{-3}	4.519×10^{-3}	4.577×10^{-3}	3.873×10^{-3}	8.702×10^{-4}
1.0×10^{-3}	3.060×10^{-3}	3.961×10^{-3}	4.221×10^{-3}	3.710×10^{-3}	4.257×10^{-4}
5.0×10^{-4}	2.705×10^{-3}	3.724×10^{-3}	4.087×10^{-3}	3.674×10^{-3}	2.382×10^{-4}
2.5×10^{-4}	2.544×10^{-3}	3.621×10^{-3}	4.036×10^{-3}	3.671×10^{-3}	1.473×10^{-4}

Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

problema, como a utilização da formulação em complementaridade nos trabalhos (15) e (8). No artigo (11) verificaram propriedades da solução utilizando métodos integrais. Em (14), buscou-se uma formulação do modelo utilizando ferramentas do cálculo fracionário, porém com um maior foco na solução da equação sem as informações da fronteira móvel.

Neste trabalho, apresentaremos duas formulações fracionárias do modelo, utilizando a derivada de Caputo e o operador ${}^*D^\alpha$, com o objetivo de avaliar o comportamento da solução da equação e da fronteira móvel, verificando quais propriedades serão mantidas. Para isso, faremos um estudo numérico dos modelos e uma análise qualitativa dos resultados obtidos. Começaremos com a dedução do modelo clássico e de suas principais propriedades, que tentaremos generalizar para o caso fracionário.

4.2.1 Modelo clássico

O modelo tem como objetivo representar a difusão de oxigênio em tecidos absorventes, ou seja, como o oxigênio irá se espalhar por um meio enquanto é absorvido pelas células do tecido. Separamos este processo em duas etapas, sendo que na primeira buscaremos um estado estacionário da distribuição do oxigênio, e na segunda teremos que resolver uma EDP com um domínio não regular, determinado pela fronteira móvel. No problema, consideramos que o tecido sobre o qual o oxigênio se encontra é unidimensional, e será representado pelo conjunto dos reais não negativos. A função $C(X, T)$ representa a concentração de oxigênio no ponto X no instante T , e deverá satisfazer a seguinte equação:

$$\frac{\partial C(X, T)}{\partial T} = \rho \frac{\partial^2 C(X, T)}{\partial X^2} - \sigma, \quad (4.22)$$

onde ρ é uma constante de difusão e σ é a taxa com que o oxigênio é absorvido pelas células.

Na primeira etapa, o oxigênio está sendo injetado no tecido por uma de suas extremidades, de forma que a concentração no ponto $X = 0$ seja constante e igual a $C(0, T) = C_0$. Isso faz com que o oxigênio se espalhe pelo interior do tecido ao mesmo tempo em que é absorvido pelas células. Essa situação ocorre até que um estado estacionário seja atingido, ou seja, $C_T(X, T) = 0$. Nesse estado, o oxigênio terá avançado no interior do tecido até um ponto $X = L$, de forma que a concentração e a variação da quantidade de

oxigênio sejam nulas a partir desse ponto, ou seja, $C(X, T) = 0$ e $C_X(X, T) = 0$ para todo $X \geq L$. A solução do estado estacionário satisfaz a equação:

$$\rho \frac{\partial^2 C(X, T)}{\partial X^2} - \sigma = 0, \quad (4.23)$$

com as seguintes condições de contorno:

$$C(0, T) = 0, \quad C(L, T) = 0, \quad C_X(L, T) = 0. \quad (4.24)$$

Com isso, podemos determinar a distribuição estacionária e o ponto L , dados por:

$$C(X, T) = \frac{\sigma}{2\rho}(X - L)^2 \quad \text{e} \quad L = \sqrt{\frac{2\rho C_0}{\sigma}}. \quad (4.25)$$

A segunda etapa ocorre após a concentração atingir o estado de equilíbrio. A partir do instante $T = 0$ a extremidade $X = 0$ é selada, impedindo a passagem de oxigênio nesse ponto, o que significa $C_X(0, T) = 0$ para $T \geq 0$. Com isso, a quantidade de oxigênio presente no meio irá diminuir, fazendo com que o ponto que delimita a presença de oxigênio retroceda em direção ao ponto $X = 0$. Para cada tempo T , denotaremos esse ponto por $S(T)$, o que define uma função S chamada de fronteira móvel. Pela definição, temos que $S(0) = L$. Como não existe passagem de oxigênio a partir desse ponto, segue que $C(X, T) = 0$ e $C_X(X, T) = 0$ para todo $X \geq S(T)$. Essa etapa continua até a concentração se anular em todo o meio, o que acontece no instante $T = T^*$. Dessa forma, a solução do problema consiste em determinar as funções $C(X, T)$ e $S(T)$ que satisfazem:

$$\frac{\partial C(X, T)}{\partial T} = \rho \frac{\partial^2 C(X, T)}{\partial X^2} - \sigma, \quad (4.26)$$

com condições de contorno:

$$C(0, T) = 0, \quad C(S(T), T) = 0, \quad C_X(S(T), T) = 0, \quad (4.27)$$

e condição inicial:

$$C(X, 0) = \frac{\sigma}{2\rho}(X - L)^2, \quad (4.28)$$

com $T \in [0, T^*]$, $X \in [0, S(T)]$, $S(0) = L$ e $S(T^*) = 0$.

Podemos obter o modelo sem os parâmetros C_0 , ρ e σ , fazendo a seguinte mudança de variáveis:

$$x = \frac{1}{L}X, \quad t = \frac{\rho}{L^2}T, \quad c(x, t) = \frac{\rho}{\sigma L^2}C\left(Lx, \frac{L^2}{\rho}t\right), \quad s(t) = \frac{1}{L}S\left(\frac{L^2}{\rho}t\right). \quad (4.29)$$

Desta forma, temos a equação:

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} - 1, \quad (4.30)$$

com condições de contorno:

$$c_x(0, t) = 0, \quad c(s(t), t) = 0, \quad c_x(s(t), t) = 0, \quad 0 \leq t \leq t^*, \quad (4.31)$$

com $s(0) = 1$ e $s(t^*) = 0$, e condição inicial:

$$c(x, 0) = \frac{1}{2}(x - 1)^2, \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (4.32)$$

A equação do modelo é muito parecida com a equação do calor, sendo o termo constante igual a -1 a única diferença entre os dois. Porém agora o domínio do problema é mais complexo, pois depende da curva desconhecida $(s(t), t)$. Por conta disso, obter uma solução analítica do problema seria muito complicado. Veremos então algumas propriedades que podem ser obtidas a partir do modelo e que serão úteis para a resolução numérica do modelo, e depois tentaremos entendê-las para o caso fracionário. Podemos integrar a equação (4.30) na variável espacial, obtendo:

$$\begin{aligned} \int_0^{s(t)} \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} dx &= \int_0^{s(t)} \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} dx - \int_0^{s(t)} 1 dx \\ \int_0^{s(t)} \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} dx &= \left. \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0}^{x=s(t)} - s(t) \\ \int_0^{s(t)} \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} dx &= -s(t), \quad t > 0. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Esta expressão nos dá uma fórmula para obter a fronteira móvel numericamente, pois apesar de $s(t)$ também aparecer no limite de integração, sabemos que a concentração deve ser nula em todos os pontos após a fronteira móvel, e consequentemente sua derivada também será nula. Portanto, basta deixarmos os limites de integração fixos ao longo do tempo. Outra propriedade importante do modelo, relacionada ao balanço de massa, pode ser obtida a partir de (4.33). Utilizando a regra de Leibniz e integrando a expressão na variável temporal, obtemos:

$$\begin{aligned} s(t) &= -\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^{s(t)} c(x, t) dx \right) \\ \int_0^{t^*} s(t) dt &= -\int_0^{t^*} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^{s(t)} c(x, t) dx \right) dt \\ \int_0^{t^*} s(t) dt &= -\int_0^{s(t^*)} c(x, t^*) dx + \int_0^{s(0)} c(x, 0) dx \\ \int_0^{t^*} s(t) dt &= \int_0^1 c(x, 0) dx = \frac{1}{6}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Esse resultado pode ser interpretado da seguinte maneira: no instante $t = 0$, a quantidade total de oxigênio é de $\frac{1}{6}$, e como a taxa de absorção de oxigênio é igual a uma unidade por instante de tempo (após a adimensionalização), segue que a razão entre a quantidade inicial de oxigênio e a área da região onde ele foi absorvido é 1, ou seja, todo o

oxigênio presente no tecido foi absorvido. Esta propriedade também é interessante para verificar se a solução numérica está se aproximando do valor esperado.

Uma maneira mais direta de obter uma aproximação para a fronteira móvel é utilizando a fórmula de Taylor em um ponto próximo da fronteira móvel. Para isso, derivamos a condição de contorno $c(s(t), t) = 0$, obtendo que $c_t(s(t), t) = 0$, donde, pela equação (4.30), temos $c_{xx}(s(t), t) = 1$. Como o polinômio de Taylor de $c(x, t)$ em torno do ponto $s(t)$ é dado por:

$$c(x, t) \approx c(s(t), t) + \frac{\partial c(s(t), t)}{\partial x}(x - s(t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c(s(t), t)}{\partial x^2}(x - s(t))^2, \quad (4.35)$$

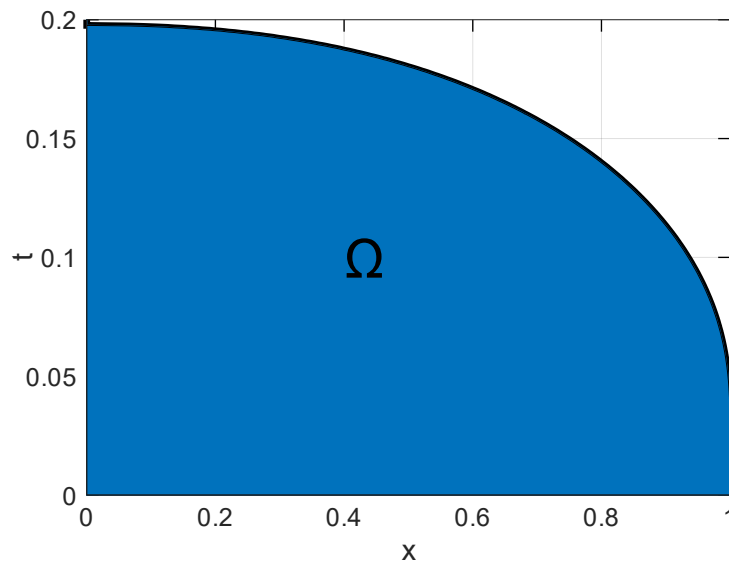
podemos simplificar a expressão utilizando as condições de contorno, isolando $s(t)$ para obter:

$$s(t) \approx x + \sqrt{2c(x, t)}, \quad (4.36)$$

onde utilizamos o sinal positivo pois tomamos $x < s(t)$. Com isso, obtemos uma fórmula para encontrar uma aproximação de $s(t)$ em cada t , desde que x esteja suficientemente próximo da fronteira móvel.

Na figura 12 está representado o domínio $\Omega = \{(x, t) \in \mathbb{R}^2, 0 \leq t \leq t^*, 0 \leq x \leq s(t)\}$ do problema, onde utilizamos a curva $(s(t), t)$ obtida numericamente. Apesar de não conhecermos a expressão analítica para $s(t)$, podemos verificar que o resultado obtido se aproxima da solução verificando se ela satisfaz as propriedades (4.33) e (4.34), o que de fato ocorre.

– Figura 12 - Domínio Ω do problema.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

Apesar de possuir um domínio com uma geometria complicada, o problema pode ser reescrito em uma formulação que utiliza um domínio retangular. Para isso, utilizamos

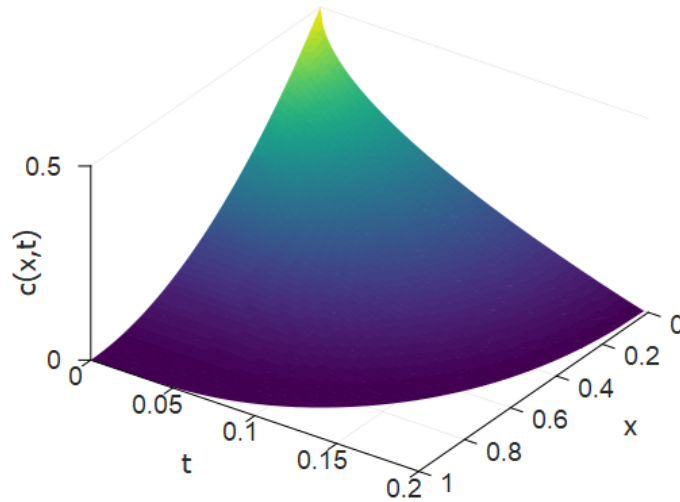
as propriedades físicas do modelo. Sabemos que a fronteira móvel delimita a presença de oxigênio, então teremos $c(x, t) \geq 0$ em Ω , e $c(x, t) = 0$ quando $x \geq s(t)$. Além disso, a equação (4.30) é satisfeita em Ω , ou seja, $\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} + 1 = 0$, e fora dele as derivadas da função $c(x, t)$ serão todas nulas e teremos $\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} + 1 = 1 > 0$. Desta forma, para $0 \leq x \leq 1$ e $t \geq 0$, teremos:

$$\begin{aligned} c(x, t) &\geq 0, \\ \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} + 1 &\geq 0, \\ \left[\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} + 1 \right] c(x, t) &= 0. \end{aligned} \tag{4.37}$$

Esse é conhecido como um problema de complementaridade, e está definido em um domínio retangular, o que faz com que o tratamento numérico seja mais simples. A equivalência entre as duas formulações apresentadas para o modelo pode ser encontrada em (1). Nos trabalhos (5) e (15), a escrita em complementaridade é utilizada para resolver o problema numericamente através do algoritmo FDA-NCP, descrito no trabalho (8).

Neste trabalho, usamos a complementaridade e o algoritmo FDA-NCP para obter os resultados numéricos do modelo de difusão de oxigênio, e também para as suas formulações fracionárias que serão apresentadas. Para o caso clássico, exibimos na figura 13 o gráfico da solução $c(x, t)$ obtida numericamente, restrita ao domínio Ω .

– Figura 13 - Gráfico da solução $c(x, t)$ do caso clássico.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

Podemos perceber que a condição inicial é satisfeita em $t = 0$, e então a quantidade de oxigênio diminui devido ao processo de absorção sendo realizado pelas células do tecido. Aproximadamente no instante $t = 0.05$, a fronteira móvel começa a retroceder em direção

ao ponto $x = 0$ (o que também pode ser visto na figura 12), e então a concentração se anula em todo o meio em um instante próximo de $t = 0.2$.

Com isso, vimos a apresentação do modelo de difusão de oxigênio em tecidos absorventes e as suas principais características presentes na literatura. Queremos agora estudar formulações fracionárias desse modelo, verificando as propriedades físicas que serão mantidas, o que acontece com a solução e também o que ocorre com a fronteira móvel do problema.

4.2.2 Formulações fracionárias

Neste seção apresentaremos discussões sobre as formulações do modelo utilizando a derivada de Caputo e o operador ${}^C D^\alpha$. Os resultados que serão apresentados foram obtidos numericamente utilizando os métodos de discretização apresentados neste texto, os quais verificamos por meio dos exemplos vistos neste capítulo, onde resolvemos EDP's semelhantes as que serão trabalhadas agora. Um estudo mais aprofundado sobre esses métodos pode ser encontrado em (7). Além disso, utilizamos a formulação de um problema de complementaridade, como em (5) e (15), com a aplicação do algoritmo FDA-NCP, descrito em (8). As formulações aqui apresentadas são descritas com mais detalhes nos trabalhos (10) e (18), que foram produzidos durante a pesquisa desses modelos e foram apresentados em eventos.

Nosso estudo foi focado na segunda etapa do problema, sem alterar a condição inicial do problema. Inicialmente, avaliamos a formulação do modelo com a derivada de Caputo, onde apenas substituímos a derivada na variável temporal pela derivada de Caputo de ordem α na equação adimensionalizada, obtendo o modelo:

$${}^C D_t^\alpha [c(x, t)] = \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} - 1, \quad (4.38)$$

mantendo as condições de contorno e a condição inicial. Porém, como a fronteira móvel também faz parte da solução do problema, ela irá depender do valor de α . Por conta disso, utilizaremos a notação $s_\alpha(t)$ para indicar a fronteira móvel do problema com derivada de ordem α .

É evidente que a manipulação das equações e funções se torna mais complicada neste caso, já que lidar com uma derivada fracionária requer mais cuidados do que a derivada clássica. Porém, ainda podemos obter algumas aproximações análogas ao do caso clássico. Integrando a equação (4.38) na variável espacial, obtemos:

$$\int_0^{s(t)} {}^C D_t^\alpha [c(x, t)] dx = \int_0^{s(t)} \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} dx - \int_0^{s(t)} 1 dx = -s(t).$$

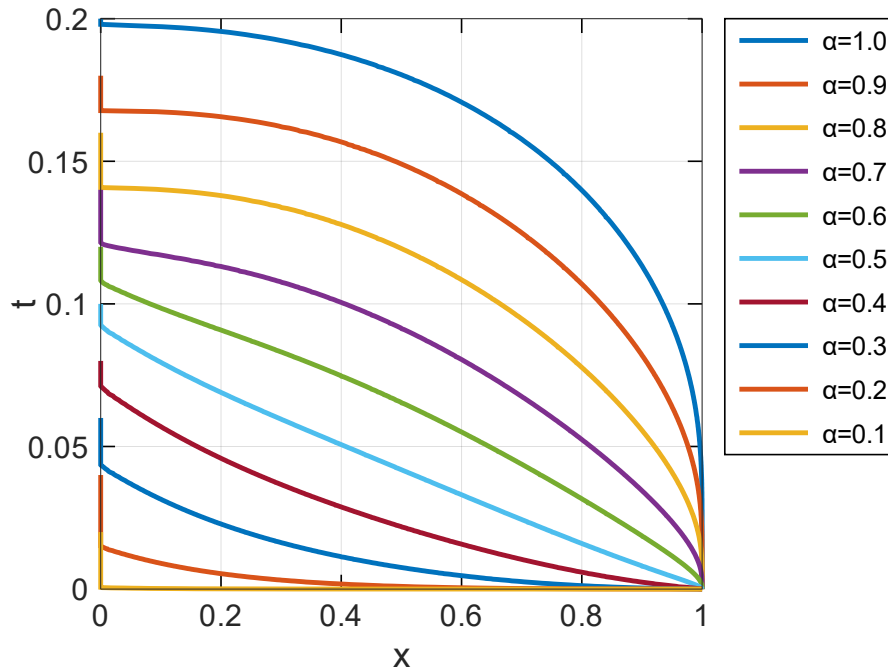
Já no caso do polinômio de Taylor, não teremos a garantia que $c_{xx}(s_\alpha(t), t) = 1$,

porém ainda podemos obter:

$$s_\alpha(t) \approx x + \sqrt{\frac{2c(x,t)}{1 + {}^C D^\alpha [c(s_\alpha(t), t)]}}. \quad (4.39)$$

Apesar de serem aproximações mais difíceis de se obter numericamente, elas nos apresentaram bons resultados quando comparamos as duas fórmulas e a solução $c(x, t)$. Com isso, pudemos obter $s_\alpha(t)$, para diversos valores de α , o que está apresentado na figura 14. Podemos então destacar a principal característica dessa formulação: a fronteira móvel retrocede de forma mais rápida quando diminuimos o valor de α . Isso fica nítido quando comparamos com o caso $\alpha = 1$, que também está representado na figura 12.

– Figura 14 - Curvas $(s_\alpha(t), t)$ para diferentes valores de α .



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

Matematicamente, isto significa que a área abaixo da fronteira móvel está diminuindo quando alteramos a ordem α da derivada, deixando de ser igual a $\frac{1}{6}$ como no caso clássico. Porém, este valor tinha uma interpretação física: todo o oxigênio que estava no tecido no instante inicial foi absorvido a uma taxa igual a -1 , o que representava o balanço de massa da equação. Para entender o que ocorreu, primeiro percebemos que a equação:

$$({}^C D^\alpha y)(t) = -1, \quad (4.40)$$

aparece de forma implícita na equação (4.38), já que podemos escrever:

$$c(x, t) = w(x, t) + y(t). \quad (4.41)$$

Como discutido anteriormente na equação (3.24), a solução de (4.40) é o caso particular da solução (3.27) quando $\mu = 0$, e é dada por $y(t) = -\frac{t^\alpha}{\Gamma(1+\alpha)} + y(0)$. Podemos considerar $y(0) = 0$ definindo $w(x, 0) = c(x, 0)$. Desta forma, a função $w(x, t)$ satisfaz:

$${}^C D_t^\alpha[w(x, t)] = {}^C D_t^\alpha[c(x, t)] - ({}^C D^\alpha y)(t) = c_{xx}(x, t) - 1 + 1 = w_{xx}(x, t), \quad (4.42)$$

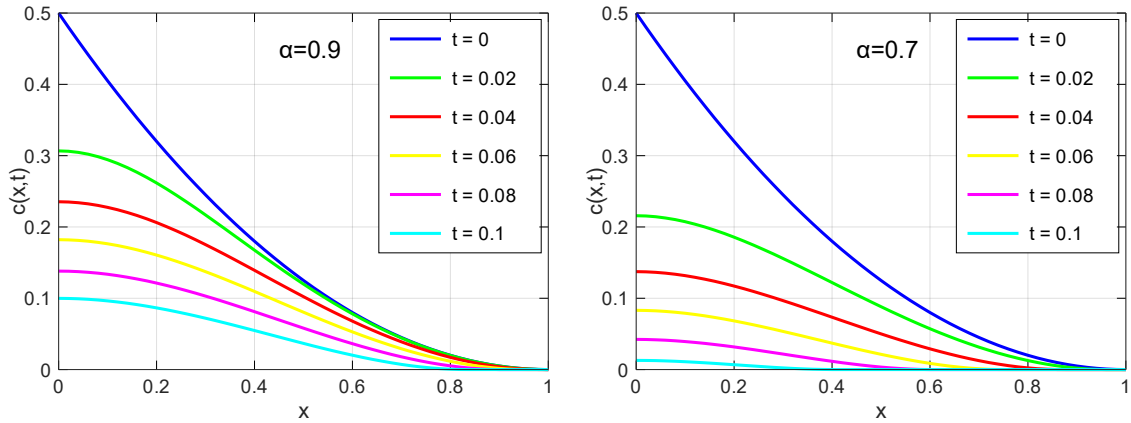
que é a equação da formulação de Caputo do modelo de difusão de oxigênio. Além disso, podemos ainda obter que $w_x(0, t) = c_x(0, t) = 0$ e $w_x(s_\alpha(t), t) = c_x(s_\alpha(t), t) = 0$, ou seja, as derivadas em x de $w(x, t)$ se anulam em $x = 0$ e $x = s_\alpha(t)$, indicando que não há fluxo de oxigênio nessas regiões. Concluimos então que:

$$c(x, t) = w(x, t) - \frac{t^\alpha}{\Gamma(1+\alpha)}, \quad (4.43)$$

onde $w(x, t)$ satisfaz a equação de difusão de calor fracionária, com condições de contorno que dependem da fronteira móvel. Desta forma, percebemos que a taxa de absorção do oxigênio foi alterada quando substituímos a derivada clássica, pois $c_t(x, t) = w_t(x, t) - 1$ quando $\alpha = 1$, mas $c_t(x, t) = w_t(x, t) - \frac{t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)}$ quando $\alpha \neq 1$. Isso faz com que o oxigênio seja absorvido mais rapidamente e, conseqüentemente, sua concentração se anule em menos tempo.

Na figura 15 exibimos o gráfico da função $c(x, t)$ nos tempos $t = 0, t = 0.02, t = 0.04, t = 0.06, t = 0.08$ e $t = 0.1$, para $\alpha = 0.9$ e $\alpha = 0.7$.

– Figura 15 - Gráfico de $c(x, t)$ em tempos específicos para $\alpha = 0.9$ e $\alpha = 0.7$.



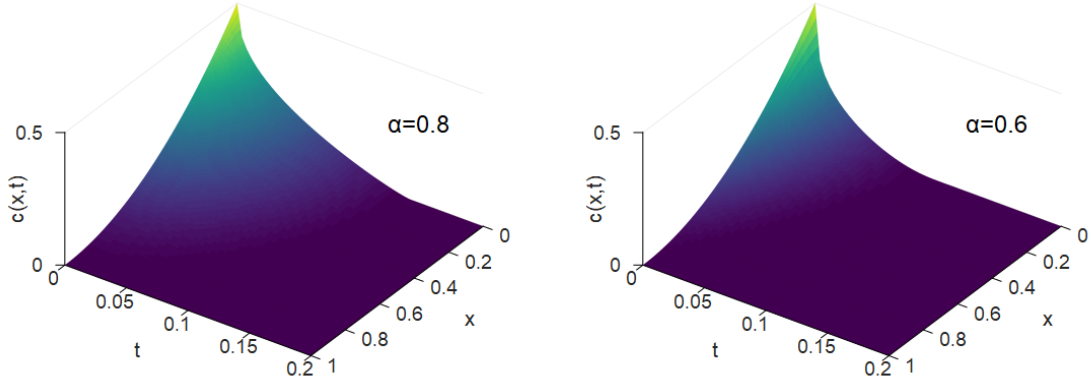
Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

A concentração no caso $\alpha = 0.7$ é menor do que no caso $\alpha = 0.9$ em cada tempo, o que é uma consequência do fato do oxigênio estar sendo absorvido de forma mais rápida. Além disso, também fica claro que a derivada na variável x se anula em $x = 0$ e também sobre a fronteira móvel, independentemente do valor de α .

Já na figura 16 temos o gráfico da função $c(x, t)$ para $\alpha = 0.8$ e $\alpha = 0.6$ no domínio retangular da complementaridade. Por conta disso, a concentração é nula nos

pontos $x \geq s_\alpha(t)$. Comparando com a figura 13, que representa a solução do caso clássico, percebemos o que significa o consumo acelerado de oxigênio visualmente.

– Figura 16 - Gráfico de $c(x, t)$ para $\alpha = 0.8$ e $\alpha = 0.6$.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

Os resultados obtidos mostram que a formulação com a derivada de Caputo possui propriedades interessantes, mas também altera características importantes do modelo. Além disso, quando α se aproxima de zero, vemos que a absorção de oxigênio ocorre de maneira quase instantânea, o que não faz sentido do ponto de vista físico do modelo.

Por conta disso, buscamos uma nova formulação fracionária do modelo, sem apenas trocar as derivadas. Para isso, utilizaremos o operador ${}^*D^\alpha$. A proposta então é estudar a equação:

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = {}^*D_t^\alpha \left[\frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} \right] - 1, \quad (4.44)$$

mantendo as condições de contorno e a condição inicial. Analogamente ao caso anterior, podemos escrever a função $c(x, t)$ como a soma das funções $w(x, t)$ e t , com:

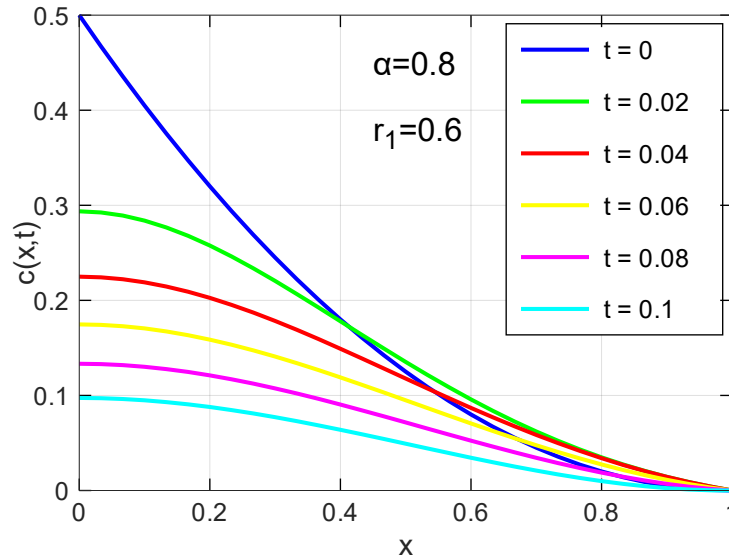
$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial t} = {}^*D_t^\alpha \left[\frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} \right]. \quad (4.45)$$

Desta forma, teremos $c_t(x, t) = w_t(x, t) - 1$, o que indica que a taxa de absorção é mantida constante mesmo ao variar os parâmetros α e r_1 . Com isso, evitamos uma situação extrema como a absorção instantânea que aparecia com a derivada de Caputo. Outro aspecto importante é a velocidade com que a difusão irá ocorrer. Como agora o processo de absorção não é afetado, poderemos avaliar a relação entre a absorção do oxigênio e a sua difusão, que se dará de forma acelerada nos instantes iniciais pelo que foi visto no modelo de difusão de calor.

Na figura 17 temos o caso em que $\alpha = 0.8$ e $r_1 = 0.6$, mostrando o gráfico da concentração $c(x, t)$ em tempos específicos. Podemos notar que ocorre um aumento na

concentração próximo de $x = 1$ nos instantes iniciais, pois o oxigênio está se espalhando pelo tecido mais rapidamente do que é absorvido.

– Figura 17 - Gráfico de $c(x, t)$ em tempos específicos para $\alpha = 0.8$ e $r_1 = 0.6$.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

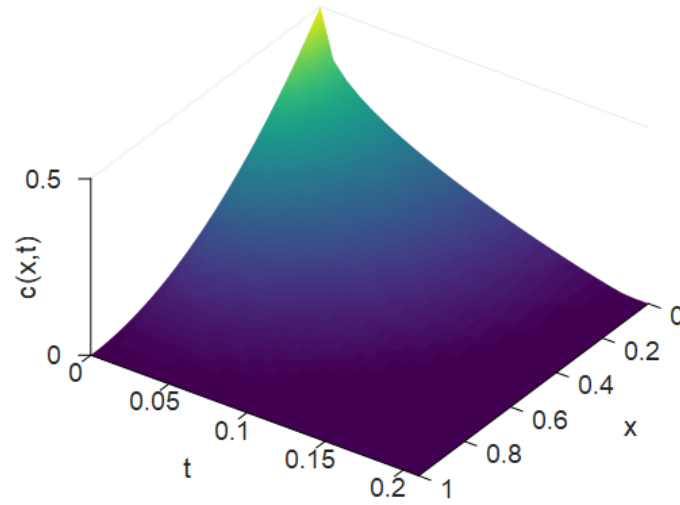
Além disso, a concentração não diminui tão rapidamente quanto no caso de Caputo, já que agora a taxa de absorção é mantida constante e igual a -1 . Dessa forma, a área abaixo da fronteira móvel é mantida próxima do valor esperado, o que indica que o balanço de massa da equação deve ser mantido nesse caso. Na figura 18 temos o gráfico da função $c(x, t)$ para $\alpha = 0.8$ e $r_1 = 0.6$, onde podemos ver que o comportamento da solução é visualmente parecido com o do caso clássico.

Neste modelo, quando variamos os parâmetros α e r_1 ainda obtemos resultados parecidos, pois apenas adicionamos um certo peso que depende das informações nos tempos anteriores, sem que as principais características do modelo fossem afetadas. Os principais efeitos observados são o espalhamento do oxigênio pelo tecido e que o domínio do problema continua com uma área próxima a do caso clássico.

O tratamento de forma analítica do modelo é mais complicado, pois precisamos considerar uma derivada fracionária com peso exponencial, o que não é uma tarefa fácil. Por conta disso, não conseguimos uma boa maneira de expressar a fronteira móvel para obtê-la numericamente, podendo apenas percebê-la visualmente através da solução $c(x, t)$. Também não podemos afirmar se a área abaixo da fronteira móvel é exatamente $\frac{1}{6}$, pois nos baseamos apenas nos resultados numéricos.

No entanto, os resultados aqui apresentados mostram que a formulação do problema com o operador $*D^\alpha$ é promissora e possui boas propriedades, tornando-a interessante para

– Figura 18 - Gráfico de $c(x, t)$ para $\alpha = 0.8$ e $r_1 = 0.6$.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025).

uma pesquisa mais aprofundada, assim como a aplicação do operador em outros modelos.

Destacamos que os resultados apresentados nesse capítulo servem para mostrar exemplos de como é a modelagem fracionária, evidenciar que certos cuidados devem ser tomados e também discutir sobre o que é perdido ou acrescentado nos modelos ao utilizar as ferramentas do cálculo fracionário. Todos esses aspectos foram importantes durante a pesquisa e essas questões levaram à produção dos trabalhos (9), (10), (16), (17) e (18), onde temos as construções das ideias que foram desenvolvidas neste texto e uma avaliação mais detalhada sobre os modelos aqui apresentados.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho, exploramos o uso do cálculo fracionário como ferramenta para generalizar operadores clássicos, com destaque para suas motivações físicas e implicações em modelagens mais realistas de sistemas com memória. Discutimos diversas definições de derivadas fracionárias, suas propriedades e aplicações, com especial atenção à função de Mittag-Leffler, que desempenha papel central em modelos fracionários.

Os estudos apresentados neste trabalho tem como objetivo fundamentar a teoria necessária para trabalhar com a modelagem fracionária. Para isso, revisamos os conceitos do cálculo fracionário que foram necessários para definir os modelos propostos. Isto nos permitiu estudar assuntos que não são vistos durante a graduação, como as funções especiais, os operadores fracionários e também o tratamento numérico da resolução de equações diferenciais. Ao mesmo tempo, vimos algumas situações nas quais os conhecimentos obtidos durante um curso de matemática podem ser aplicados em problemas clássicos, como os conhecimentos que são adquiridos nas disciplinas de análise e de equações diferenciais.

Em particular, a pesquisa sobre o modelo de difusão de oxigênio em tecidos absorventes nos forneceu resultados interessantes relacionadas à modelagem fracionária, que é um tema que vem ganhando destaque atualmente. Esse estudo levou a produção de trabalhos que foram apresentados em eventos da matemática, o que também contribuiu para a construção das ideias do texto. Além disso, a avaliação de um caso mais simples, dado pelo modelo de difusão de calor, permitiu a aplicação de técnicas analíticas para resolução dos problemas e a avaliação do comportamento da solução, auxiliando na interpretação do modelo mais complexo.

A aplicação do cálculo fracionário nos modelos apresentados permitiu que conhecêssemos características importantes da modelagem fracionária, como a interpretação do efeito memória, a perda de propriedades físicas e a possibilidade de novos resultados. Além disso, os resultados obtidos, tanto analíticos quanto numéricos, mostraram que certos cuidados devem ser tomados ao construir uma nova equação fracionária. Por conta disso, definimos uma formulação do problema com um operador obtido de forma construtiva, o que nos deu resultados que mantiveram propriedades importantes do modelo, mostrando que a modelagem fracionária pode fornecer bons resultados.

Com isso, pretendemos prosseguir pesquisando sobre as propriedades das formulações apresentadas, buscando confirmar analiticamente as propriedades dos modelos fracionários, e desenvolver as técnicas numéricas empregadas na resolução do modelo. Além disso, a perspectiva para a aplicação dessa nova técnica de modelagem fracionária em equações mais complexas e sistemas se torna promissora, abrindo a possibilidade de estudar diversos modelos a partir do ponto de vista do cálculo fracionário.

REFERÊNCIAS

- 1 BAIOCCHI, C.; POZZI, G. **An evolution variational inequality related to a diffusion-absorption problem**, Applied Mathematics and Optimization, n. 2, p. 304-314, 1975. DOI: 10.1007/BF01448174.
- 2 BOUREGHDA, A. **Numerical solution of the oxygen diffusion in absorbing tissue with a moving boundary**, Communications in Numerical Methods in Engineering, v. 22, n. 9, p. 933-942, 2006. DOI: 10.1002/cnm.857.
- 3 BOYCE, E., W. **Equações Diferenciais Elementares e Problemas De Valores De Contorno**, 11^a Edição, 2020.
- 4 CAMARGO , R. F.; OLIVEIRA, E. C. **Cálculo Fracionário**. São Paulo: Livraria da Física, 2015.
- 5 CHAPIRO, G.; MAZORCHE, S. R.; NORMANB, J. H.; ROCHEC, J. R. **Solution of the Non-Linear Parabolic Problems Using Nonlinear Complementarity Algorithm (FDA-NCP)**, Mecánica Computacional Vol XXIX, p. 2141-2153, 2010.
- 6 CRANK, J.; GUPTA, R. S. **A Moving Boundary Problem Arising from the Diffusion of Oxygen in Absorbing Tissue**, IMA Journal of Applied Mathematics, n. 10, p. 19-33, 1972. DOI: 10.1093/IMAMAT/10.1.19.
- 7 GUO, B.; PU, X.; HUANG F. **Fractional Partial Differential Equations and Their Numerical Solutions**. World Scientific Publishing, 2015.
- 8 HERSKOVITS, J.; MAZORCHE, S. R. **A feasible directions algorithm for nonlinear complementarity problems and applications in mechanics**, Structural and Multidisciplinary Optimization, n.37, p.435-446, 2008. DOI: 10.1007/s00158-008-0252-5.
- 9 MAZORCHE, S. R.; SANTOS, T. F. C. **Oxygen diffusion model in a cell described using a fractional operator**, XVII ENAMA, 2024.
- 10 MAZORCHE, S. R.; SANTOS, T. F. C. **Problema de difusão de oxigênio via derivadas fracionárias**, Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 11, n.1, 2025. DOI: 10.5540/03.2025.011.01.0464.
- 11 MITCHELL, S.L. **An accurate application of the integral method applied to the diffusion of oxygen in absorbing tissue**, Applied Mathematical Modelling, v. 38, n. 17, p.4396-4408, 2014. DOI: 10.1016/j.apm.2014.02.021.
- 12 MONTEIRO, N. Z.; SANTOS, R. W.; MAZORCHE S. R. **Bridging the gap between models based on ordinary, delayed, and fractional differentials equations through integral kernels**, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., v. 121, n. 19, p. 1-11, 2024. DOI: 10.1073/pnas. 2322424121.
- 13 MONTEIRO, N. Z.; SANTOS, R. W.; MAZORCHE S. R. **Constructive fractional models through Mittag-Leffler functions**, Computational and Applied Mathematics, v. 43, n. 177, p. 1-26, 2024. DOI: 10.1007/s40314-024-02680-z.

- 14 MORALES, D. V. F.; GÓMEZ, A. J. F.; ATANGANA, A. **Modelling the oxygen diffusion equation within the scope of fractional calculus**, Thermal Science, n. 23, p. 1279-1287, 2019. DOI: 10.2298/TSCI180108096M.
- 15 PEREIRA, W. S.; GUTIERREZ, A.; MAZORCHE, S. R.; CHAPIRO, G. **Simulação de um problema de difusão de oxigênio utilizando o método de elementos finitos e FDA-NCP**, SIMMEC/EMMCOMP, 2014.
- 16 SANTOS, T. F. C.; OLIVEIRA, T. S. ; MAZORCHE, S. R. **Derivadas Fracionárias em Modelos**, SEMIC, 2024.
- 17 SANTOS, T. F. C.; MAZORCHE, S. R. **Modelo de Difusão de Oxigênio descrito através de um Operador Fracionário**, XVI Workshop de Verão do Programa de Pós-Graduação em Matemática da UFJF, 2025.
- 18 SANTOS, T. F. C.; MAZORCHE, S. R. **Derivada de Caputo no modelo de difusão de oxigênio**, Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 11, n.1, 2025.