

Numerieke benadering van de fractionele Fisher- en Gray-Scott modellen

Schrijver: Marco van Oort
Begeleider: Paul Zegeling

Januari 2015

Inhoudsopgave

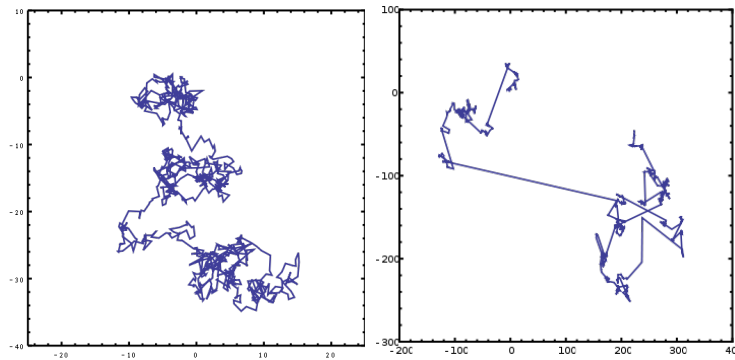
1	Introductie	3
I	Fractionele afgeleiden en primitieven	4
2	Benodigde theorie	4
2.1	Gammafunctie	4
2.2	Monomen	5
2.3	Cauchy's formule voor gerepeteerde integratie	5
2.4	Formule voor n -de afgeleide	7
2.5	Bèta functie	7
2.6	Gershgorin schijven	8
3	Fractionele integralen & afgeleiden	9
3.1	Riemann-Liouville fractionele integraal	10
3.2	Riemann-Liouville fractionele afgeleide	11
3.3	Caputo fractionele afgeleide	12
3.4	Riemann-Liouville versus Caputo	12
3.4.1	Enkele voorbeelden	13
3.5	Linker- en rechterafgeleide	14
3.6	Grünwald-Letnikov fractionele afgeleide	14
3.6.1	Unificatie van afgeleiden en integralen	14
3.6.2	Gegeneraliseerde binomiaalcoëfficiënten	16
3.6.3	Generalisatie naar fractionele ordes	17
4	Discretisatie	17
4.1	L2	18
4.1.1	Algemeen stelsel	19
4.1.2	Vierkant stelsel	21
4.2	L2C	22
4.2.1	Vierkant stelsel	24
4.3	Nauwkeurigheid van L2 en L2C	25
4.3.1	Uitgewerkt voorbeeld	27

II	Fractionele partiële differentiaalvergelijkingen	28
5	Fractionele diffusie-vergelijking	28
5.1	Stabiliteit	28
5.1.1	L2	28
5.1.2	L2C	29
5.1.3	Grünwald-Letnikov	31
5.1.4	Vergelijking met artikelen	31
5.2	Nauwkeurigheid	32
5.3	Semi-impliciet schema	33
5.4	Berekeningen	34
5.4.1	Kwadratische beginvoorwaarde	34
5.4.2	Evolutie van een puls	34
6	Een evenwichtsvergelijking	39
6.1	Exacte oplossing	39
6.2	Berekeningen	39
7	Fractionele fisher-vergelijking	42
7.1	Analytische oplossingen bij $\alpha = 2$	43
7.2	Discretisatie	43
7.2.1	Linksbewegende golf	43
7.2.2	Rechtsbewegende golf	44
8	Het fractionele Gray-Scott model	48
8.1	Splitsende golven	48
9	Conclusie	51
III	Appendix	52
10	Uitwerkingen	52
10.1	Nauwkeurigheid van afgeleide-benaderingen uitgewerkt	52
11	Berekeningen in <i>Julia</i>	53
11.1	Voor- en nadelen van <i>Julia</i>	53

1 Introductie

Geheeltallige afgeleiden zijn alom bekend, maar wat er zich tussen deze geheeltallige afgeleiden afspeelt wordt minder vaak besproken. Dit is niet geheel verwonderlijk, aangezien we bekende concepten kunnen relateren aan geheeltallige afgeleiden, zoals ‘snelheid’ bij de eerste afgeleide en ‘acceleratie’ bij de tweede afgeleide. Een zinnige verklaring voor *fractionele afgeleiden* zoals de anderhalve afgeleide lijkt dan ver te zoeken.

In [4] wordt de reactie-diffusie Fisher-vergelijking $\partial_t u = \chi \partial_x^2 u + F(u)$ besproken, met in het bijzonder $F(u) = \gamma u(1 - u)$. Hier beschrijft de tweede afgeleide de diffusie van deeltjes, met bijbehorende diffusie-coëfficiënt χ , en beschrijft F de reactie tussen deeltjes. De reden dat de tweede afgeleide gebruikt wordt om de diffusie te beschrijven, blijkt gebaseerd te zijn op de aanname dat de willekeurige beweging van deeltjes een Gaussisch proces is, ook wel bekend als brownse beweging. De intrede van de fractionele afgeleide gebeurt hier dan ook op het moment dat deze aanname niet meer geldig is, en er bijvoorbeeld Lévy-vluchten aanwezig zijn. Op dat moment is er nog steeds willekeurige beweging aanwezig, maar verplaatsen deeltjes zich geregeld over relatief grote afstanden. Zie figuur 1. Dit gedrag is niet te bevatten met een standaard tweede afgeleide term, waardoor er een beroep wordt gedaan op fractionele afgeleiden.



Figuur 1: **Links:** Brownse beweging. **Rechts:** Lévy vluchten. Bron: [2]

Hoewel de naam *fractionele afgeleide* impliceert dat de afgeleide een orde $q \in \mathbb{Q}_{>0}$ heeft, hoeft dat niet per se. Met de theorie die in dit onderzoek beschreven wordt, kunnen afgeleiden van willekeurige orde $\alpha \in \mathbb{R}_{>0}$ behandeld worden. In sommige speciale gevallen is het zelfs mogelijk om afgeleiden van orde $\alpha \in \mathbb{R}$ te bevatten in één formule, waarbij afgeleiden van orde $\alpha < 0$ geïnterpreteerd worden als primitieven. In deze gevallen zijn afgeleide en primitieve samengenomen in één operator, die ook wel *differintegraal* genoemd wordt.

Dit onderzoek is verdeeld over 3 delen. In het deel 1 beschouwen we fractionele afgeleiden en integralen, en de eigenschappen daarvan. Hieronder vallen hoofdstuk 2, waarin we enkele benodigde gereedschappen herhalen; hoofdstuk 3, waarin we de verschillende aanpakken voor fractionele afgeleiden en integralen behandelen; en hoofdstuk 4, waarin we bekijken hoe we fractionele afgeleiden kunnen discretiseren voor gebruik in computer-simulaties. In deel 2 beschouwen we fractionele afgeleiden van orde $\alpha \in [1, 2]$. In hoofdstukken 5, 6 en 7 beschouwen we de hierboven besproken fractionele Fisher-vergelijking. In hoofdstuk 8 behandelen we de fractionele versie van het Gray-Scott model. Deel 3 is de appendix, waarin enkele extra uitwerkingen staan (hoofdstuk 9), en waarin een kleine samenvatting staat over de bevindingen over het gebruik van de relatief jonge programmeertaal *Julia*, waarin de numerieke berekeningen gedaan zijn (hoofdstuk 10).

De vergelijkingen, gebruikte methoden, en bewijzen zijn geïnspireerd door met name artikelen [4], [6] en [12]. Waar nodig is boven de hoofdstukken aangegeven op welk artikel dat hoofdstuk gebaseerd is.

Deel I

Fractionele afgeleiden en primitieven

2 Benodigde theorie

2.1 Gammafunctie

De gammafunctie wordt gegeven door de volgende oneigenlijke integraal:

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

Deze functie heeft een aantal opmerkelijke eigenschappen, waarvan we de belangrijkste op een rij zetten. We beperken ons tot de reële getallen, ook al zijn de meeste resultaten ook zo over te dragen naar het complexe vlak.

1. De integraal convergeert voor alle $x \in \mathbb{R}_{>0}$,
2. $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}_{>0}$,
3. $\Gamma(n+1) = n! \quad \forall n \in \mathbb{N}_0$.

Deze eigenschappen zullen we kort bewijzen. Voor 1. schrijven we:

$$\int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt = \int_0^1 t^{x-1} e^{-t} dt + \int_1^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt.$$

We zien, aangezien $0 \leq t < \infty$, dat $t^{x-1} e^{-t} \leq t^{x-1}$. Samen met het feit dat $\int_0^1 t^s dt < \infty$ voor $s > -1$, kunnen we concluderen dat $\int_0^1 t^{x-1} e^{-t} dt$ convergeert voor $x > 0$. Verder weten we dat e^t sneller groeit dan elke polynoom. Daarom kunnen we een a vinden zo dat $t^{x-1} e^{-t} \leq e^{t/2} e^{-t} = e^{-t/2}$ voor alle $t > a$. Nu schrijven we:

$$\int_1^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt = \int_1^a t^{x-1} e^{-t} dt + \int_a^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt.$$

We weten dat $\int_1^a t^{x-1} e^{-t} dt < \infty$ vanwege continuïteit. Verder is $\int_a^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt \leq \int_a^{\infty} e^{-t/2} dt < \infty$. Hiermee is 1. aangetoond.

Voor 2. gebruiken we partiële integratie:

$$\begin{aligned} \Gamma(x+1) &= \int_0^{\infty} t^x e^{-t} dt \\ &= [-t^x e^{-t}]_{t=0}^{\infty} - \int_0^{\infty} -x t^{x-1} e^{-t} dt \\ &= x \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt \\ &= x \Gamma(x). \end{aligned}$$

Merk op dat het tweede =-teken alleen geldt voor $x > 0$. Voor 3. gebruiken we het gevolg dat $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n) \quad \forall n \in \mathbb{N}$. Merk op dat ook geldt:

$$\begin{aligned} \Gamma(1) &= \int_0^{\infty} t^0 e^{-t} dt \\ &= \int_0^{\infty} e^{-t} dt \\ &= [-e^{-t}]_{t=0}^{\infty} \\ &= 0 + e^0 = 1. \end{aligned}$$

Met inductie zien we nu dat $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n) = n(n-1)\Gamma(n-1) = n(n-1)\dots 2 \cdot 1 \cdot \Gamma(1) = n!$. We behandelen nu nog twee extra eigenschappen:

4. $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$,

5. Het domein van Γ is uit te breiden tot $\mathbb{R} \setminus \{0, -1, -2, \dots\}$.

Voor 4. gebruiken we de substitutie $t = s^2$ ($dt = 2s ds$), en maken we gebruik van de Gaussische integraal:

$$\begin{aligned} \Gamma(\frac{1}{2}) &= \int_0^\infty t^{-\frac{1}{2}} e^{-t} dt \\ &= \int_0^\infty s^{-1} 2s e^{-s^2} ds \\ &= 2 \int_0^\infty e^{-s^2} ds \\ &= 2 \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\pi} = \sqrt{\pi}. \end{aligned}$$

Voor 5. merken we op dat we eigenschap 2. kunnen herschrijven tot $\Gamma(x) = \frac{\Gamma(x+1)}{x}$. We kunnen deze identiteit gebruiken om vanuit $\{\Gamma(x) \mid x \in]0, 1[\}$ de waarden van $\{\Gamma(x) \mid x \in]-1, 0[\}$ te berekenen. Hieruit kunnen we dan weer $\{\Gamma(x) \mid x \in]-2, -1[\}$ berekenen, en zo verder. Met deze methode zijn we in staat om $\Gamma(x)$ te berekenen voor alle $x \in \mathbb{R}$, met uitzondering van $x = 0, -1, -2, \dots$, hier bevinden zich singulariteiten.

Verder geldt ook de volgende gelijkheid:

$$\Gamma(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n! n^x}{z(z+1) \cdots (z+n)}. \quad (2)$$

Voor een (uitgebreid) bewijs hiervan, zie [9, p. 4].

2.2 Monomen

De gebroken afgeleide en gebroken integraal van monomen, en dus polynomen, zijn niet lastig om te definiëren. We kennen voor $k, n \in \mathbb{N}$ de identiteiten:

$$\begin{aligned} D^n x^k &= \frac{d^n}{dx^n} x^k = \frac{k!}{(k-n)!} x^{k-n} \quad (k \geq n), \\ D^{-n} x^k &= \mathcal{J}^n x^k = \frac{k!}{(k+n)!} x^{k+n}. \end{aligned}$$

Hier is D^n gedefinieerd als de n -de afgeleide, en is $\mathcal{J}^n = D^{-n}$ de n -de primitieve. De gelijknissen in deze twee formules leiden tot de volgende voor de hand liggende generalisatie voor $p, \alpha \in \mathbb{R}$, $p \geq 0$:

$$D^\alpha x^p = \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-\alpha+1)} x^{p-\alpha} \quad (\alpha \leq p). \quad (3)$$

Een dergelijke formule als (3), waarbij differentiëren en integreren in één formule gecombineerd kunnen worden, wordt ook wel *differintegraal* genoemd.

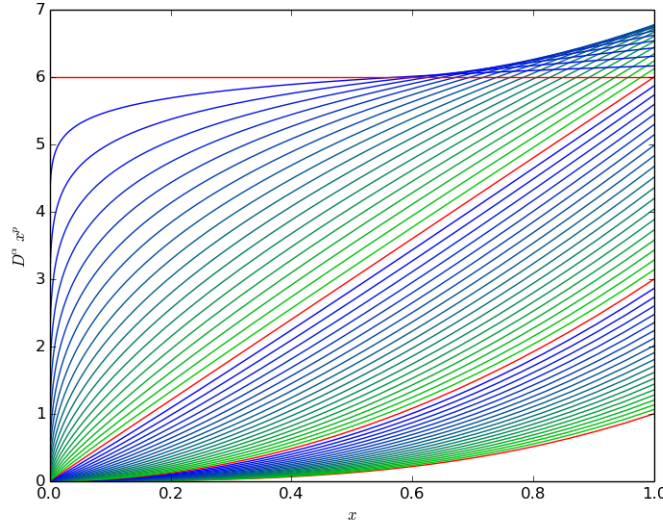
2.3 Cauchy's formule voor gerepeteerde integratie

Zij f een continue functie. De n -de primitieve met ondergrens a wordt dan gegeven door:

$$f^{(-n)}(t) = \int_a^t \int_a^{x_n} \cdots \int_a^{x_2} f(x_1) dx_1 \cdots dx_{n-1} dx_n.$$

Deze n -de primitieve kan ook als één integraal worden geschreven:

$$f^{(-n)}(t) = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t (t-x)^{n-1} f(x) dx. \quad (4)$$



Figuur 2: Fractionele afgeleiden van x^p met $p = 3$, volgens (3). Van onderaan tot bovenaan zijn waarden van α gebruikt tussen de 0.0 en 3.0 respectievelijk, met tussenstappen van 0.05. Elke rode lijn komt overeen met een gehele afgeleide, van onder naar boven $D^0 x^3 = x^3$, $D^1 x^3 = 3x^2$, $D^2 x^3 = 6x$ en $D^3 x^3 = 6$. De onderste zone van groen naar blauw komt dus overeen met α -waarden 0.05, ..., 0.95. De middelste zone komt overeen met 1.05, ..., 1.95, en de bovenste zone is 2.05, ..., 2.95.

Het bewijs hiervan volgt met inductie. Voor $n = 1$ is het duidelijk dat formule (4) de volgende vorm aanneemt:

$$f^{(-1)}(t) = \int_a^t f(x) dx.$$

Het bewijs van deze gelijkheid volgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f^{(-1)}(t) &= \frac{d}{dt} \int_a^t f(x) dx \\ &= \frac{d}{dt} \left(f^{(-1)}(t) - f^{(-1)}(a) \right) \\ &= f(t) - 0. \end{aligned}$$

Er van uitgaande dat formule (4) klopt voor n , gaan we nu bewijzen dat hij klopt voor $n + 1$:

$$\begin{aligned} f^{(-(n+1))}(t) &= \int_a^t f^{(-n)}(x) dx \\ &= \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t \int_a^x (x-x_2)^{n-1} f(x_2) dx_2 dx. \end{aligned}$$

Als we nu de volgorde van integratie om te draaien, krijgen we:

$$\begin{aligned} f^{(-(n+1))}(t) &= \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t \int_{x_2}^t (x-x_2)^{n-1} f(x_2) \, dx \, dx_2 \\ &= \frac{1}{n!} \int_a^t [(x-x_2)^n]_{x=x_2}^{x=t} f(x_2) \, dx_2 \\ &= \frac{1}{n!} \int_a^t (t-x_2)^n f(x_2) \, dx_2. \end{aligned}$$

Hiermee is het bewijs compleet. In het vervolg zullen we de n -de primitieve met vaste ondergrens a en variabele ondergrens t noteren met $\mathcal{J}^n f(t)$ of ${}_a D_t^{-n} f(t)$:

$$\mathcal{J}^n f(t) = {}_a D_t^{-n} f(t) := \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t (t-x)^{n-1} f(x) \, dx = f^{(-n)}. \quad (5)$$

2.4 Formule voor n -de afgeleide

Het is bekend dat de eerste afgeleide wordt gegeven door:

$$f'(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t) - f(t-h)}{h}.$$

Voor de tweede afgeleide geldt evenzo:

$$\begin{aligned} f''(t) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f'(t) - f'(t-h)}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \left(\frac{f(t) - f(t-h)}{h} - \frac{f(t-h) - f(t-2h)}{h} \right) \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t) - 2f(t-h) + f(t-2h)}{h^2} \end{aligned}$$

en voor de derde afgeleide hebben we:

$$f^{(3)}(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t) - 3f(t-h) + 3f(t-2h) - f(t-3h)}{h^3}.$$

Meer in het algemeen zien we dat voor $n \in \mathbb{N}$ geldt:

$$f^{(n)}(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^n} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} f(t-rh), \quad (6)$$

waarbij $\binom{n}{r}$ de gebruikelijke notatie is voor de binomiaalcoëfficiënten:

$$\binom{n}{r} = \frac{n(n-1)(n-2) \cdots (n-r+1)}{r!} = \frac{n!}{r!(n-r)!}. \quad (7)$$

2.5 Bèta functie

De Bèta functie wordt gegeven door de volgende integraal:

$$B(p, q) = \int_0^1 (1-u)^{p-1} u^{q-1} \, du. \quad (8)$$

In twee bewijzen zullen we de volgende eigenschap nodig hebben:

$$B(p, q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)} = B(q, p). \quad (9)$$

We behandelen deze functie niet verder behalve het melden van bovenstaande eigenschappen. Eigenschap (9) kan bewezen worden door middel van Laplace-transformaties, maar dat zullen we hier dus niet doen.

2.6 Gershgorin schijven

Dit hoofdstuk heeft zijn analoog in [5, pp. 135–136].

Beschouw een $n \times n$ -matrix $A = (a_{ij})$, en definiëer

$$r_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|.$$

Dan worden de Gershgorin schijven gedefinieerd door

$$R_i = \{z \in \mathbb{C} \mid |z - a_{ii}| \leq r_i\}.$$

Nu ligt elke eigenwaarde $\lambda \in \mathbb{C}$ van A in de vereniging van deze schijven:

$$\lambda \in \bigcup_{i=1}^n R_i.$$

Voor elke λ bestaat er namelijk een eigenvector $\vec{y} \neq \vec{0}$, zodat $A\vec{y} = \lambda\vec{y}$. Kies nu i zodat $|y_i| = \max\{|y_j|\}$, waarbij y_i de i -de component van \vec{y} is. Voor deze component kunnen we schrijven $\sum_{j=1}^n a_{ij}y_j = \lambda y_i$, ofwel:

$$\lambda = \sum_{j=1}^n a_{ij} \frac{y_j}{y_i} = a_{ii} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} \frac{y_j}{y_i}.$$

Hieruit volgt:

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| a_{ij} \frac{y_j}{y_i} \right| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| = r_i,$$

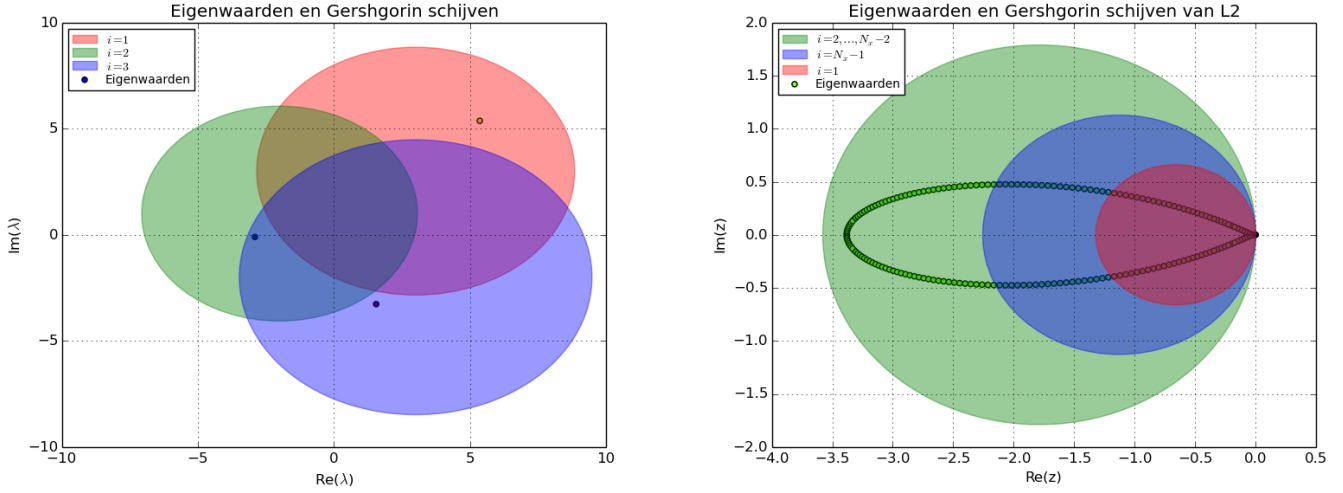
oftewel $\lambda \in R_i$. Omdat het a priori niet duidelijk is voor welke i geldt $|y_i| = \max\{|y_j|\}$, kunnen we slechts concluderen dat λ in één van de schijven ligt, ofwel in de vereniging van de schijven.

De betekenis van de naam ‘Gershgorin schijven’ wordt duidelijker als we de eigenwaarden λ van A in het complexe vlak tekenen. Deze liggen dan namelijk binnen de schijven R_i , met straal r_i rond middelpunt a_{ii} . Zie figuur 3 voor de eigenwaarden en Gershgorin schijven van de matrix

$$A = \begin{pmatrix} 3 + 3i & 2 - 3i & -2 + 1i \\ -2 + 2i & -2 + 1i & -1 - 2i \\ 3 - 3i & -1 - 2i & 3 - 2i \end{pmatrix}. \quad (10)$$

De eigenwaarden van deze matrix zijn ongeveer $5.36 + 5.37i$, $1.55 - 3.27i$ en $-2.90 - 0.10i$.

Als de diagonaal van A uit enkel reële getallen bestaat, liggen de middelpunten van de schijven automatisch



Figuur 3: **Links:** De eigenwaarden van de matrix in (10), samen met de Gershgorin schijven. **Rechts:** De eigenwaarden en Gershgorin schijven van de L2-methode met $\alpha = 1.5$, die we later in secties 4.1 en 5.1.1 zullen bespreken. Verdere details over dit figuur worden bij figuur 5 gegeven.

ook op de reële as. Hierop volgend formuleren we de volgende stelling:

Stelling: Als $a_{ii} \in \mathbb{R}$, $a_{ii} + r_i \leq 1$ en $a_{ii} - r_i \geq -1$, dan geldt:

$$\lambda \in R_i \quad \Rightarrow \quad |\lambda| \leq 1,$$

waarbij R_i de i -de Gershgorin schijf is.

Bewijs:

We combineren een aantal ongelijkheden. Allereerst, als $\lambda \in R_i$, dan houdt dat in dat $|\lambda - a_{ii}| \leq r_i$. Verder volgt uit de driehoeksongelijkheid dat $||\lambda| - |a_{ii}|| \leq |\lambda - a_{ii}|$. Ten derde volgt uit $r_i \leq 1 - a_{ii}$ en $r_i \leq 1 + a_{ii}$ dat $r_i \leq 1 - |a_{ii}|$. Uit deze drie ongelijkheden kunnen we afleiden:

$$||\lambda| - |a_{ii}|| \leq |\lambda - a_{ii}| \leq r_i \leq 1 - |a_{ii}|.$$

Hieruit maken we op dat $||\lambda| - |a_{ii}|| \leq 1 - |a_{ii}|$, wat equivalent is met:

$$|a_{ii}| - 1 \leq |\lambda| - |a_{ii}| \leq 1 - |a_{ii}|.$$

Hieruit volgt tenslotte:

$$2|a_{ii}| - 1 \leq |\lambda| \leq 1,$$

en hierin zien we het gewenste resultaat $|\lambda| \leq 1$. □

3 Fractionele integralen & afgeleiden

Formule (5) geeft ons de mogelijkheid om de n -de primitieve van een functie f te bepalen. Als we in deze formule $n \in \mathbb{N}$ vervangen door $\gamma \in \mathbb{R}_+$, en daarom dus ook $(n-1)!$ door $\Gamma(\gamma)$, krijgen we de volgende formule voor de primitieve van orde γ van f :

$$\boxed{\mathcal{J}^\gamma f(t) = {}_a D_t^{-\gamma} f(t) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^t (t-x)^{\gamma-1} f(x) dx.} \quad (11)$$

Deze uitdrukking is beter bekend onder de naam *Riemann-Liouville fractionele integraal*. Om de afgeleide van f van orde $\alpha \in \mathbb{R}$ te bepalen, laten we $\gamma \in \mathbb{R}_+$ en $m \in \mathbb{N}$ zo zijn dat $m - \gamma = \alpha > 0$. De afgeleide van f van orde α kunnen we dan bepalen door m maal te differentiëren en γ maal te integreren. Er zijn verschillende manieren om dit te doen, waaronder de volgende twee methoden. Deze heten respectievelijk de Riemann-Liouville en Caputo fractionele afgeleiden:

$$\boxed{RLD_t^\alpha f(t) = \frac{d^m}{dt^m} ({}_a D_t^{-\gamma} f(t)),} \quad (12)$$

$$\boxed{CD_t^\alpha f(t) = {}_a D_t^{-\gamma} f^{(m)}(t).} \quad (13)$$

Merk op dat bij Riemann-Liouville eerst γ maal wordt geïntegreerd, om daarna m keer te differentiëren, terwijl bij Caputo deze volgorde is omgedraaid. De parametercombinatie die we vanaf nu zullen gebruiken is $m = \lceil \alpha \rceil$, waaruit volgt $0 \leq \gamma = m - \alpha = \lceil \alpha \rceil - \alpha \leq 1$.

3.1 Riemann-Liouville fractionele integraal

De fractionele Riemann-Liouville integraal wordt gegeven door formule (11). We kunnen bewijzen dat deze definitie voldoet aan de volgende eigenschap:

$$\mathcal{J}^\gamma \mathcal{J}^\mu f(t) = \mathcal{J}^{\gamma+\mu} f(t) = \mathcal{J}^\mu \mathcal{J}^\gamma f(t). \quad (14)$$

We schrijven de compositie uit:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^\gamma \mathcal{J}^\mu f(t) &= \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^t (t-x)^{\gamma-1} (\mathcal{J}^\mu f(x)) dx \\ &= \frac{1}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\mu)} \int_a^t (t-x)^{\gamma-1} \left(\int_a^x (x-y)^{\mu-1} f(y) dy \right) dx \\ &= \frac{1}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\mu)} \int_a^t \int_a^x (t-x)^{\gamma-1} (x-y)^{\mu-1} f(y) dy dx. \end{aligned}$$

Als we nu de volgorde van integratie omdraaien, krijgen we:

$$\mathcal{J}^\gamma \mathcal{J}^\mu f(t) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\mu)} \int_a^t f(y) \int_y^t (t-x)^{\gamma-1} (x-y)^{\mu-1} dx dy,$$

waarop we nu de substitutie $x = y + (t-y)z$ kunnen toepassen:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^\gamma \mathcal{J}^\mu f(t) &= \frac{1}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\mu)} \int_a^t f(y) \int_0^1 ((t-y)(1-z))^{\gamma-1} ((t-y)z)^{\mu-1} (t-y) dz dy \\ &= \frac{1}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\mu)} \int_a^t f(y) (t-y)^{\gamma+\mu-1} \int_0^1 (1-z)^{\gamma-1} z^{\mu-1} dz dy. \end{aligned}$$

We gebruiken nu eigenschap (9) van de Bèta-functie:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^\gamma \mathcal{J}^\mu f(t) &= \frac{1}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\mu)} \int_a^t f(y) (t-y)^{\gamma+\mu-1} \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\mu)}{\Gamma(\gamma+\mu)} dy \\ &= \frac{1}{\Gamma(\gamma+\mu)} \int_a^t (t-y)^{\gamma+\mu-1} f(y) dy \\ &= \mathcal{J}^{(\gamma+\mu)} f(t). \end{aligned}$$

Merk op dat $\mathcal{J}^\gamma \mathcal{J}^\mu f(t) = \mathcal{J}^\mu \mathcal{J}^\gamma f(t)$ volgt uit de symmetrie in $\mathcal{J}^{\gamma+\mu} f(t)$. Hiermee is (14) bewezen.

3.2 Riemann-Liouville fractionele afgeleide

De fractionele Riemann-Liouville afgeleide wordt gegeven door formule (12), met $m = \lceil \alpha \rceil$ en $\gamma = m - \alpha$:

$${}^{RL}D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \frac{d^m}{dt^m} \int_a^t (t-x)^{\gamma-1} f(x) dx. \quad (15)$$

Stel $\alpha \in \mathbb{R} \rightarrow m \in \mathbb{N}$ (dus $\gamma \rightarrow 0$), dan krijgen we met behulp van partiële integratie het volgende:

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow m} {}^{RL}D_t^\alpha f(t) &= \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{d^m}{dt^m} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^t (t-x)^{\gamma-1} f(x) dx \\ &= \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{d^m}{dt^m} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \left(\frac{1}{\gamma} (t-a)^\gamma f(a) + \frac{1}{\gamma} \int_a^t (t-x)^\gamma f'(x) dx \right) \\ &= \frac{d^m}{dt^m} \left(f(a) + \int_a^t f'(x) dx \right) \\ &= \frac{d^m}{dt^m} (f(a) + (f(t) - f(a))) \\ &= \frac{d^m}{dt^m} f(t). \end{aligned}$$

Aan de andere kant, stel $\alpha \in \mathbb{R} \rightarrow m-1 \in \mathbb{N}$ (dus $\gamma \rightarrow 1$), dan krijgen we het volgende:

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow m-1} {}^{RL}D_t^\alpha f(t) &= \lim_{\gamma \rightarrow 1} \frac{d^m}{dt^m} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^t (t-x)^{\gamma-1} f(x) dx \\ &= \frac{d^m}{dt^m} \int_a^t f(x) dx \\ &= \frac{d^{m-1}}{dt^{m-1}} (f(t) - f(a)) \\ &= \frac{d^{m-1}}{dt^{m-1}} f(t). \end{aligned}$$

Voor $\alpha \in \mathbb{N}$ is de Riemann-Liouville integraal dus gelijk aan de bekende geheeltallige afgeleide. Aangezien dit in beide richtingen zo is ($\alpha \rightarrow m$, $\alpha \rightarrow m-1$), kunnen we concluderen dat de Riemann-Liouville integraal voor $\alpha \in \mathbb{R}$ een zekere interpolatie biedt tussen de bekende geheeltallige afgeleiden. Merk op dat hieruit kunt afleiden dat geldt:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} {}^{RL}D_t^\alpha f(t) = f(t).$$

Zie voor een uitgebreider bewijs hiervan [9, p. 65–67].

Merk ook op dat voor $0 \leq \beta < \min\{\alpha, 1 - \gamma\}$ geldt:

$$\begin{aligned} {}^{RL}D_t^\alpha (\mathcal{J}^\beta f(t)) &= \frac{d^m}{dt^m} (\mathcal{J}^\gamma (\mathcal{J}^\beta f(t))) \\ &= \frac{d^m}{dt^m} (\mathcal{J}^{\gamma+\beta} f(t)) \\ &= {}^{RL}D_t^{\alpha-\beta} f(t). \end{aligned}$$

En ook, voor $k \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} \frac{d^k}{dt^k} {}^{RL}D_t^\alpha f(t) &= \frac{d^k}{dt^k} \frac{d^m}{dt^m} (\mathcal{J}^\gamma f(t)) \\ &= \frac{d^{k+m}}{dt^{k+m}} (\mathcal{J}^\gamma f(t)) \\ &= {}^{RL}D_t^{\alpha+k} f(t). \end{aligned}$$

Bovenstaande identiteiten zijn in omgekeerde volgorde niet noodzakelijkerwijs waar. Bijvoorbeeld ${}^{RL}D_t^\alpha f^{(k)}(t) \neq {}^{RL}D_t^{\alpha+k} f(t)$, behalve als er voldaan wordt aan enkele voorwaarden. Deze voorwaarden zullen we zien in sectie 3.4.

3.3 Caputo fractionele afgeleide

De fractionele Caputo afgeleide wordt gegeven door formule (13), met $m = \lceil \alpha \rceil$ en $\gamma = m - \alpha$:

$${}^C D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^t (t-x)^{\gamma-1} f^{(m)}(x) dx. \quad (16)$$

Stel $\alpha \in \mathbb{R} \rightarrow m \in \mathbb{N}$ (dus $\gamma \rightarrow 0$), dan krijgen we, net als bij Riemann-Liouville, met behulp van partiële integratie het volgende:

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow m} {}^C D_t^\alpha f(t) &= \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^t (t-x)^{\gamma-1} f^{(m)}(x) dx \\ &= \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{\Gamma(\gamma+1)} \left((t-a)^\gamma f^{(m)}(a) + \int_a^t (t-x)^\gamma f^{(m+1)}(x) dx \right) \\ &= f^{(m)}(a) + \int_a^t f^{(m+1)}(x) dx \\ &= f^{(m)}(t). \end{aligned}$$

Aan de andere kant, stel dat $\alpha \in \mathbb{R} \rightarrow m-1 \in \mathbb{N}$ (dus $\gamma \rightarrow 1$), dan krijgen we:

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow m-1} {}^C D_t^\alpha f(t) &= \lim_{\gamma \rightarrow 1} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^t (t-x)^{\gamma-1} f^{(m)}(x) dx \\ &= \int_a^t f^{(m)}(x) dx \\ &= f^{(m-1)}(t) - f^{(m-1)}(a). \end{aligned}$$

In tegenstelling tot de Riemann-Liouville afgeleide, is de Caputo afgeleide voor gehele ordes slechts in beide richtingen ($\alpha \rightarrow m$, $\alpha \rightarrow m-1$) gelijk aan de geheeltallige afgeleiden als $f^{(m-1)}(a) = 0$.

Merk ook op dat voor $0 \leq \beta < \min\{\alpha, 1 - \gamma\}$ geldt:

$$\mathcal{J}^\beta ({}^C D_t^\alpha f(t)) = {}^C D_t^{\alpha-\beta} f(t).$$

En ook, voor $k \in \mathbb{N}$:

$${}^C D_t^\alpha f^{(k)}(t) = {}^C D_t^{\alpha+k} f(t).$$

Merk op dat deze twee identiteiten op eenzelfde manier te bewijzen zijn als de identiteiten bij Riemann-Liouville, ondanks dat die identiteiten niet hetzelfde zijn als deze.

Ook hier zijn de identiteiten in omgekeerde volgorde niet noodzakelijkerwijs waar. Bijvoorbeeld ${}^C D_t^\alpha (\mathcal{J}^\beta f(t)) \neq {}^C D_t^{\alpha-\beta} f(t)$, behalve als er voldaan wordt aan enkele voorwaarden. Deze voorwaarden zullen we zien in sectie 3.4.

3.4 Riemann-Liouville versus Caputo

De Riemann-Liouville en Caputo fractionele afgeleiden zijn in het algemeen niet gelijk aan elkaar. Er bestaat echter wel een verband tussen deze afgeleiden, dit verband zullen we nu bepalen.

Als we herhaald de hoofdstelling van de integraalrekening toepassen, krijgen we de volgende formule voor $f(t)$:

$$\begin{aligned}
f(t) &= f(a) + \int_a^t f'(x_1) dx_1 \\
&= f(a) + \int_a^t f'(a) + \int_a^{x_1} f''(x_2) dx_2 dx_1 \\
&= f(a) + \int_a^t f'(a) dx + \int_a^t \int_a^{x_1} f''(x_2) dx_2 dx_1 \\
&= f(a) + (t-a)f'(a) + \mathcal{J}^2(f''(x_2)) \\
&= \dots \\
&= \mathcal{J}^m(f^{(m)}(t)) + \sum_{k=0}^{m-1} (t-a)^k f^{(k)}(a).
\end{aligned}$$

Met het bovenstaande resultaat, en met behulp van formule (3), kunnen we nu het volgende afleiden:

$$\begin{aligned}
{}^{RL}D_t^\alpha f(t) &= \frac{d^m}{dt^m} (\mathcal{J}^{m-\alpha} f(t)) \\
&= \frac{d^m}{dt^m} (\mathcal{J}^{m-\alpha} \mathcal{J}^m(f^{(m)}(t))) + \frac{d^m}{dt^m} \left(\mathcal{J}^{m-\alpha} \sum_{k=0}^{m-1} (t-a)^k f^{(k)}(a) \right) \\
&= \mathcal{J}^{m-\alpha} (f^{(m)}(t)) + \frac{d^m}{dt^m} \left(\sum_{k=0}^{m-1} \frac{\Gamma(k+1)}{\Gamma(k-\alpha+m+1)} (t-a)^{k-\alpha+m} f^{(k)}(a) \right) \\
&= {}^C D_t^\alpha f(t) + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{f^{(k)}(a)}{\Gamma(k-\alpha+1)} (t-a)^{k-\alpha}. \tag{17}
\end{aligned}$$

Als $f^{(k)}(a) = 0$ voor alle $k = 0, 1, \dots, m-1$, hebben we dus ${}^{RL}D_t^\alpha f(t) = {}^C D_t^\alpha f(t)$. In secties 3.2 en 3.3 hebben we ook al enkele ‘logische’ eigenschappen gezien die pas gelden als er aan bepaalde voorwaarden is voldaan, dat zijn precies deze voorwaarden. Veel eigenschappen gelden bij fractionele afgeleiden dus pas, indien $f^{(k)}(a) = 0$ voor alle $k = 0, 1, \dots, m-1$.

3.4.1 Enkele voorbeelden

Het uitwerken van de fractionele afgeleiden voor $f(t) = c$, met c een constante, geeft:

$$\begin{aligned}
{}^{RL}D_t^\alpha c &= \frac{c}{\Gamma(1-\alpha)} (t-a)^{-\alpha}, \\
{}^C D_t^\alpha c &= 0.
\end{aligned}$$

Voor een (getransleerd) monoom $f(t) = (t-b)^n$ met $n \in \mathbb{N}$ voeren we n maal partiële integratie uit:

$$\begin{aligned}
{}^{RL}D_t^\alpha (t-b)^n &= \Gamma(n+1) \left(\sum_{k=0}^{n-1} \frac{(a-b)^{n-k}}{\Gamma(n-k+1)} \cdot \frac{(t-a)^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)} + \frac{(t-a)^{n-\alpha}}{\Gamma(n-\alpha+1)} \right), \\
{}^C D_t^\alpha (t-b)^n &= \Gamma(n+1) \left(\sum_{k=m}^{n-1} \frac{(a-b)^{n-k}}{\Gamma(n-k+1)} \cdot \frac{(t-a)^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)} + \frac{(t-a)^{n-\alpha}}{\Gamma(n-\alpha+1)} \right).
\end{aligned}$$

Merk op dat deze uitdrukkingen voor $b = a$ overeenkomen met de eerder afgeleide formule in (3). Voor de machtsfunctie $f(t) = (t - a)^\nu$ met $\nu \in \mathbb{R}$ gebruiken we eigenschappen (8) en (9) van de Bèta functie, en de substitutie $x = a + y(t - a)$ in formules (15) en (16):

$${}^{RL}D_t^\alpha (t - a)^\nu = {}^C D_t^\alpha (t - a)^\nu = \frac{\Gamma(\nu + 1)}{\Gamma(\nu - \alpha + 1)} (t - a)^{\nu - \alpha}.$$

Voor $f(t) = e^t$ krijgen we ten slotte, met ondergrens $a = 0$:

$$\begin{aligned} {}^{RL}D_0^\alpha e^t &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^{k+m-\alpha}}{\Gamma(k+m-\alpha+1)} = \sum_{k=m}^{\infty} \frac{t^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)}, \\ {}^C D_0^\alpha e^t &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)}. \end{aligned}$$

We zien dat de fractionele afgeleide van e^t niet gelijk is aan e^t , zoals bij gehele afgeleiden wel het geval is. We vergelijken de twee methoden nog even in een kort overzicht:

Riemann-Liouville	Caputo
Voor $m - \alpha \rightarrow 0$ en $m - \alpha \rightarrow 1$ krijg je exact de gehele afgeleide terug.	Voor $m - \alpha \rightarrow 0$ krijg je exact de gehele afgeleide terug, voor $m - \alpha \rightarrow 1$ slechts als $f^{(m-1)}(a) = 0$.
De afgeleide van een constante is niet 0.	De afgeleide van een constante is 0.

3.5 Linker- en rechterafgeleide

We hebben tot nu toe integralen beschouwd waarbij we integreren van a tot t . We kunnen ook integreren van t tot b , wat ons een ‘rechter’-afgeleide geeft. De ‘rechter’-afgeleide versie van de ‘linker’-afgeleide in (15) wordt dan bijvoorbeeld gegeven door ([9, eq. 2.175]):

$${}^{RL}D_b^\alpha f(t) = \frac{(-1)^m}{\Gamma(\gamma)} \frac{d^m}{dt^m} \int_t^b (x - t)^{\gamma-1} f(x) dx. \quad (18)$$

Hoewel we deze rechter-afgeleide verder niet zullen gebruiken, is het wel goed om te weten dat deze bestaat. Enkele effecten van fractionele afgeleiden zullen namelijk toe te schrijven zijn aan het gebruik van een linker- of rechterafgeleide.

3.6 Grünwald-Letnikov fractionele afgeleide

3.6.1 Unificatie van afgeleiden en integralen

Dit hoofdstuk heeft zijn analoog in [9], hoofdstuk 2.2.

De Grünwald-Letnikov fractionele afgeleide gaat niet uit van integreren, zoals Riemann-Liouville en Caputo dat doen, maar juist van differentiëren. In (6) hadden we voor $p \in \mathbb{N}$ de volgende formule afgeleid:

$$f^{(p)}(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^p} \sum_{r=0}^p (-1)^r \binom{p}{r} f(t - rh), \quad (19)$$

met $\binom{p}{r}$ gedefinieerd zoals in (7). We kunnen een generalisatie van de differentiequotiënt in (19) formuleren met:

$$f_h^{(p)}(t) = \frac{1}{h^p} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{p}{r} f(t - rh). \quad (p \in \mathbb{N}) \quad (20)$$

Voor $n \geq p$ staat hier (voor $h \rightarrow 0$) precies hetzelfde als in (19), aangezien $\binom{p}{r} = 0$ voor $r > p$. Merk op dat we hier dus ook de limiet $n \rightarrow \infty$ kunnen nemen.

We definiëren:

$$\left[\begin{matrix} p \\ r \end{matrix} \right] = \frac{p(p+1) \cdots (p+r-1)}{r!}.$$

Dan geldt:

$$\binom{-p}{r} = \frac{-p(-p-1) \cdots (-p-r+1)}{r!} \quad (21)$$

$$= (-1)^{-p-r+1-(-p+1)} \frac{p(p+1) \cdots (p+r-1)}{r!} = (-1)^r \left[\begin{matrix} p \\ r \end{matrix} \right]. \quad (22)$$

Als we nu in (20) p vervangen door $-p$, krijgen we:

$$\begin{aligned} f_h^{(-p)}(t) &= \frac{1}{h^{-p}} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{-p}{r} f(t-rh) \\ &= h^p \sum_{r=0}^n \left[\begin{matrix} p \\ r \end{matrix} \right] f(t-rh). \quad (p \in \mathbb{N}) \end{aligned} \quad (23)$$

Voor vaste n zal (23) naar 0 gaan als $h \rightarrow 0$. Voor $n \rightarrow \infty$ zal dit echter niet zo zijn, dus we kiezen $h = \frac{t-a}{n}$, waarbij a ook hier een vaste ondergrens blijkt te zijn. Als we namelijk kiezen $p = 1$, dan is $\left[\begin{matrix} p \\ r \end{matrix} \right] = 1$, dus:

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} f_h^{(-1)}(t) = \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^p \sum_{r=0}^n f(t-rh) = \int_0^{t-a} f(t-z) dz = \int_a^t f(\tau) d\tau,$$

waarin we in de laatste stap de substitutie $\tau = t - z$ hebben gebruikt. Dit resultaat wekt het vermoeden dat voor $h \rightarrow 0$, (23) gelijk is aan (5):

$${}^G L_a D_t^{-p} f(t) := \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^p \sum_{r=0}^n \left[\begin{matrix} p \\ r \end{matrix} \right] f(t-rh) \stackrel{?}{=} \frac{1}{(p-1)!} \int_a^t (t-x)^{p-1} f(x) dx = f^{(-p)}.$$

Voor $p = 1$ hebben we dit reeds aangetoond. We gaan deze gelijkheid nu met inductie voor $p + 1$ bewijzen, ervan uitgaande dat het voor p klopt. We definiëren de functie

$$f_1(t) = \int_a^t f(\tau) d\tau, \quad (24)$$

waarvoor in de limiet geldt:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f_1(t) - f_1(t-h)}{h} = f(t). \quad (25)$$

Hiermee kunnen we (23) herschrijven:

$$\begin{aligned} {}^G L_a D_t^{-p-1} f(t) &= \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^{p+1} \sum_{r=0}^n \left[\begin{matrix} p+1 \\ r \end{matrix} \right] f(t-rh) \\ &= \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^p \sum_{r=0}^n \left[\begin{matrix} p+1 \\ r \end{matrix} \right] f_1(t-rh) - \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^p \sum_{r=0}^n \left[\begin{matrix} p+1 \\ r \end{matrix} \right] f_1(t-(r+1)h). \end{aligned} \quad (26)$$

Als we de bekende identiteit $\binom{p}{r} = \binom{p-1}{r-1} + \binom{p-1}{r}$ gebruiken in combinatie met (22), zien we dat geldt:

$$\binom{p}{r} + \binom{p+1}{r-1} = \binom{p+1}{r}, \quad (27)$$

met inachtneming van $\binom{p+1}{-1} = 0$. We passen (27) toe op de eerste som in (26), en vervangen r door $r-1$ in de tweede som:

$$\begin{aligned} {}^G L_a D_t^{-p-1} f(t) &= \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^p \sum_{r=0}^n \binom{p}{r} f_1(t-rh) + \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^p \sum_{r=0}^n \binom{p+1}{r-1} f_1(t-rh) \\ &\quad - \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^p \sum_{r=1}^{n+1} \binom{p+1}{r-1} f_1(t-rh) \\ &= {}^G L_a D_t^{-p} f_1(t) + \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^p \binom{p+1}{-1} f_1(t-rh) - \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^p \binom{p+1}{n} f_1(t-rh) \end{aligned} \quad (28)$$

$$= {}^G L_a D_t^{-p} f_1(t) - (t-a)^p \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^p} \binom{p+1}{n} f_1\left(a - \frac{t-a}{n}\right). \quad (29)$$

Uit de definitie van f_1 in (24) volgt:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_1\left(a - \frac{t-a}{n}\right) = f_1(a) = 0.$$

Met behulp van (2) zien we dat

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^p} \binom{p+1}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^p} \frac{(p+1)(p+2) \cdots (p+n)}{n!} = \frac{1}{p\Gamma(p)} = \frac{1}{\Gamma(p+1)}.$$

Hieruit volgt nu met (14):

$$\begin{aligned} {}^G L_a D_t^{-p-1} f(t) &= {}^G L_a D_t^{-p} f_1(t) = \mathcal{J}^p \mathcal{J}^1 f(t) = \mathcal{J}^{p+1} f(t) \\ &= \frac{1}{p!} \int_a^t (t-x)^p f(x) dx. \end{aligned}$$

Voor $p \in \mathbb{N}$ zien we dus dat ${}^G L_a D_t^{-p} f(t) = f^{(-p)}(t)$. Bij elkaar kunnen we dus concluderen, dat we ${}^G L_a D_t^p f(t)$ kunnen gebruiken voor zowel differentiëren als integreren:

$${}^G L_a D_t^p f(t) := \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^{-p} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{p}{r} f(t-rh) = f^{(p)}(t). \quad (p \in \mathbb{Z}) \quad (30)$$

3.6.2 Gegeneraliseerde binomiaalcoëfficiënten

Formule (7) geeft een formule voor de binomiaalcoëfficiënt $\binom{n}{r}$ voor $n, r \in \mathbb{N}$. Voor $p \in \mathbb{R}$ en $r \in \mathbb{N}$ kunnen we formule (7) als volgt generaliseren:

$$\binom{p}{r} = \frac{p(p-1)(p-2) \cdots (p-r+1)}{r!} = \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(r+1)\Gamma(p-r+1)}. \quad (31)$$

De tweede gelijkheid kunnen we inzien door middel van de volgende gelijkheid:

$$\Gamma(p+1) = p(p-1)(p-2) \cdots (p-r+1)\Gamma(p-r+1).$$

3.6.3 Generalisatie naar fractionele ordes

Het doel ontschiet zich om de gehele theorie te behandelen omtrent het bewerkstelligen van de Grünwald-Letnikov fractionele afgeleide, welke in feite al wordt gegeven door formule (30):

$${}^{GL}D_t^p f(t) := \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh=t-a}} h^{-p} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{p}{r} f(t-rh). \quad (p \in \mathbb{R}) \quad (32)$$

Hier is $\binom{p}{r}$ de binomiaal-coëfficiënt zoals in (31). Een volledige afleiding van (32) kan worden gevonden in [9], secties 2.2.2 en 2.2.3. We noemen hieronder wel kort enkele eigenschappen.

$${}^{GL}D_t^{-\gamma} f(t) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^t (t-x)^{\gamma-1} f(x) dx = \mathcal{J}^\gamma f(t) = {}^{RL}D_t^{-\gamma} f(t) \quad ([9, \text{eq. 2.40}]) \quad (33)$$

$${}^{GL}D_t^\alpha f(t) = {}^C D_t^\alpha f(t) + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{f^{(k)}(a)}{\Gamma(k-\gamma+1)} (t-a)^{k-\gamma} = {}^{RL}D_t^\alpha f(t) \quad ((17) \text{ en } [9, \text{eq. 2.54}]) \quad (34)$$

We zien dat, onder de voorwaarde dat f voldoende vaak differentieerbaar is, de Grünwald-Letnikov afgeleide overeenkomt met de Riemann-Liouville afgeleide.

4 Discretisatie

Een exacte uitdrukking voor de afgeleide van orde α is slechts in een beperkt aantal gevallen te vinden. Voor ingewikkeldere functies zal men een beroep moeten doen op numerieke benaderingen. We behandelen hier de discretisatie van de fractionele Caputo afgeleide, van orde $\alpha \in [1, 2]$. Maar voordat we dit doen, behandelen we eerst een functie die we later nodig zullen hebben.

De functie g

We definiëren voor $j \geq 1$ de functie $g(j) = g_j = (j+1)^{2-\alpha} - j^{2-\alpha}$. De notaties $g(j)$ en g_j zullen we door elkaar gebruiken. Merk op dat $(j+1)^{2-\alpha} > j^{2-\alpha}$, dus g_j is positief voor alle j . Verder weten we:

$$\frac{\partial g_j}{\partial j} = (2-\alpha)((j+1)^{1-\alpha} - j^{1-\alpha}) = (2-\alpha) \left(\frac{1}{(j+1)^{\alpha-1}} - \frac{1}{j^{\alpha-1}} \right) < 0.$$

Hieruit volgt dat $g_{j+1} < g_j$, ofwel g is monotoon dalend. Nu merken we op dat we de k -de afgeleide van $g(j)$ als volgt kunnen schrijven:

$$g^{(k)}(j) = (2-\alpha)(1-\alpha) \cdots (2-(k-1)-\alpha) \left(\frac{1}{(j+1)^{k+\alpha-2}} - \frac{1}{j^{k+\alpha-2}} \right).$$

Voor $k \geq 1$ is $\frac{1}{(j+1)^{k+\alpha-2}} - \frac{1}{j^{k+\alpha-2}} < 0$, en is $(2-k-\alpha) < 0$. Dan kunnen we ook schrijven:

$$g^{(k)}(j) = |(2-\alpha)(1-\alpha) \cdots (2-(k-1)-\alpha)| (-1)^{k-1} \left(\frac{1}{(j+1)^{k+\alpha-2}} - \frac{1}{j^{k+\alpha-2}} \right).$$

Hieruit concluderen we dat $g^{(k)}(j) < 0$ als k oneven is, en $g^{(k)}(j) > 0$ als k even is. Merk op dat de volgende eigenschap ook geldt:

$$\sum_{j=0}^{n-1} g_j = n^{2-\alpha}. \quad (35)$$

Discretisatie: L2 en L2C

We nemen vanaf nu aan dat $1 < \alpha < 2$. Dan is, met $m = \lceil \alpha \rceil = 2$:

$$\begin{aligned} {}^C_0D_x^\alpha u(x) &= \mathcal{J}_0^{m-\alpha} \left(\frac{d^m}{dx^m} u(x) \right) \\ &= \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_0^x (x-s)^{m-\alpha-1} u''(s) ds \\ &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \int_0^x (x-s)^{1-\alpha} u''(s) ds \\ &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \int_0^x s^{1-\alpha} u''(x-s) ds \end{aligned}$$

Merk op dat we hierboven $a = 0$ hebben gebruikt. We beschouwen $x \in [0, 1]$, en verdelen dit interval in $N_x + 1$ equidistante punten x_k . Met $\Delta_x = 1/N_x$ en $x_k = k \cdot \Delta_x$, volgt dat $x_0 = 0$ en $x_{N_x} = 1$. Verder is $u_k = u(x_k)$, en definiëren we $\vec{u} = (u_1, u_2, \dots, u_{N_x-1})^T \in \mathbb{R}^{N_x-1}$. Merk op dat de randpunten u_0 en u_{N_x} niet in deze vector zijn inbegrepen.

Er zijn meerdere manieren om de bovenstaande integraal te benaderen. We bespreken er twee, die onderling verschillen in de behandeling van de tweede afgeleide. Ze heten respectievelijk L2 en L2C:

$$u''(x_k) \approx \frac{u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}}{\Delta_x^2}, \quad (\text{L2})$$

$$u''(x_k) \approx \frac{u_{k-2} - u_{k-1} - u_k + u_{k+1}}{2\Delta_x^2}. \quad (\text{L2C})$$

We hebben eerder gezien dat uitdrukkingen voor en relaties tussen de fractionele afgeleide aanzienlijk vereenvoudigen als $u^{(k)}(0) = 0$ voor $k = 0, \dots, m-1$. In dit hoofdstuk zullen we rekening houden met deze eigenschap, en we zullen deze ook een aantal keer gebruiken. Na dit hoofdstuk zullen we uitsluitend nog situaties beschouwen die voldoen aan deze eis, die voor het geval $m = 2$ vertaalt naar $u(0) = 0$ en $u'(0) = 0$.

4.1 L2

Met L2 krijgen we de volgende benadering:

$$\begin{aligned} {}^C_0D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i} &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \int_0^{x_i} s^{1-\alpha} u''(x_i-s) ds \\ &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^{1-\alpha} u''(x_i-s) ds \\ &\approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} u''(x_i-x_j) \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^{1-\alpha} ds, \end{aligned}$$

waarbij we $u''(x_i - s)$ benaderd hebben door de waarde in het punt $s = x_j$ te nemen. We gebruiken nu de L2-benadering voor de tweede afgeleide, en werken het resultaat daarvan uit:

$$\begin{aligned}
{}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i} &\approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} \left(\frac{u_{i-j-1} - 2u_{i-j} + u_{i-j+1}}{\Delta_x^2} \right) \left(\frac{x_{j+1}^{2-\alpha} - x_j^{2-\alpha}}{2-\alpha} \right) \\
&= \frac{\Delta_x^{2-\alpha}}{(2-\alpha)\Gamma(2-\alpha)\Delta_x^2} \sum_{j=0}^{i-1} (u_{i-j-1} - 2u_{i-j} + u_{i-j+1}) ((j+1)^{2-\alpha} - j^{2-\alpha}) \\
&= \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \sum_{j=0}^{i-1} (u_{i-j-1} - 2u_{i-j} + u_{i-j+1}) ((j+1)^{2-\alpha} - j^{2-\alpha}) \\
&= \sum_{j=-1}^i w_j^i(\alpha) u_{i-j}.
\end{aligned} \tag{36}$$

Hier hebben we de coëfficiënten van u_{i-j} bij elkaar genomen als $w_j^i(\alpha)$ voor $0 \leq i \leq N_x$ en $-1 \leq j \leq i$. Hierbij geldt $w_j^0 = 0 \ \forall j$. Als $i = 1$, dan hebben we:

$$w_j^1(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \cdot \begin{cases} 1 & j = -1 \\ -2 & j = 0 \\ 1 & j = 1 \end{cases}$$

Als $i \geq 2$, hebben we, met de conventie $0^0 = 0$:

$$w_j^i(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \cdot \begin{cases} 1 & j = -1 \\ 2^{2-\alpha} - 3 & j = 0 \\ (j+2)^{2-\alpha} - 3(j+1)^{2-\alpha} + 3j^{2-\alpha} - (j-1)^{2-\alpha} & j = 1, \dots, i-2 \\ -2i^{2-\alpha} + 3(i-1)^{2-\alpha} - (i-2)^{2-\alpha} & j = i-1 \\ i^{2-\alpha} - (i-1)^{2-\alpha} & j = i \end{cases}$$

Deze uitdrukkingen kunnen we ook in termen van g_j schrijven:

$$w_j^i(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \cdot \begin{cases} 1 & j = -1 \\ g_1 - 2 & j = 0 \\ g_{j+1} - 2g_j + g_{j-1} & j = 1, \dots, i-2 \\ -2g_{i-1} + g_{i-2} & j = i-1 \\ g_{i-1} & j = i \end{cases}$$

4.1.1 Algemeen stelsel

We kunnen nu de afgeleide ook met een $(N_x - 1) \times (N_x + 1)$ -matrix:

$${}_0^C D_x^\alpha \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N_x-2} \\ u_{N_x-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1^1 & w_0^1 & w_{-1}^1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ w_2^2 & w_1^2 & w_0^2 & w_{-1}^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ w_3^3 & w_2^3 & w_1^3 & w_0^3 & w_{-1}^3 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{N_x-2}^{N_x-2} & w_{N_x-3}^{N_x-2} & \dots & \dots & w_{-1}^{N_x-2} & 0 & \dots & \vdots \\ w_{N_x-1}^{N_x-1} & w_{N_x-2}^{N_x-1} & \dots & \dots & w_0^{N_x-1} & w_{-1}^{N_x-1} & \dots & \vdots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N_x-2} \\ u_{N_x-1} \\ u_{N_x} \end{pmatrix}.$$

Merk op dat we hier nog geen uitdrukking hebben voor de fractionele afgeleiden van u_0 en u_{N_x} . We zouden kunnen beargumenteren dat ${}_0^C D_x^\alpha u_0 = 0$, omdat we integreren van 0 tot 0. Echter, de afgeleiden van zowel u_0 als u_{N_x} zijn ook onderhevig aan randvoorwaarden, dit is de reden dat ze niet in de matrix zijn opgenomen.

Gedrag voor gehele α

Merk op dat we met $\alpha = 2$ voor alle i de normale tweede afgeleide terugkrijgen:

$$\begin{aligned} w_{-1}^i(2) &= \frac{1}{\Delta_x^2}, & w_0^i(2) &= \frac{-2}{\Delta_x^2}, & w_1^i(2) &= \frac{1}{\Delta_x^2}, \\ w_j^i(2) &= 0 & (j &= 2, \dots, i). \end{aligned}$$

Merk ook op dat we met $\alpha = 1$ niet slechts de eerste afgeleide terugkrijgen. Voor $i \geq 2$ hebben we:

$$\begin{aligned} w_{-1}^i(1) &= \frac{1}{\Delta_x}, & w_0^i(1) &= \frac{-1}{\Delta_x}, \\ w_j^i(1) &= 0 & (j &= 1, \dots, i-2), \\ w_{i-1}^i(1) &= \frac{-1}{\Delta_x}, & w_i^i(1) &= \frac{1}{\Delta_x}. \end{aligned}$$

We hadden al gezien dat voor $i = 1$ geldt $w_{-1}^1(1) = \frac{1}{\Delta_x}$, $w_0^1(1) = \frac{-2}{\Delta_x}$ en $w_1^1(1) = \frac{1}{\Delta_x}$. Merk op dat dit overeenkomt met de resultaten in sectie 3.3.

Gelijke coëfficiënten

In de formule voor $w_j^i(\alpha)$ zien we dat alleen w_i^i en w_{i-1}^i afhankelijk zijn van i . Hieruit leiden we de volgende bruikbare eigenschap af:

$$w_j^i = w_j^{i'} \quad \forall (i, i', j) : j \leq \max(i, i') - 2. \quad (37)$$

In een berekende matrix $W_{N_x}(\alpha)$ zal deze eigenschap zichtbaar zijn door gelijke waarden op alle diagonale lijnen van linksboven naar rechtsonder, op de waarden in de eerste twee kolommen na.

Teken van coëfficiënten

We definiëren $d = \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} > 0$. Uit de formule voor $w_j^i(\alpha)$ is te zien dat $w_{-1}^i(\alpha) = 1 \cdot d \geq 0$ en $w_0^i(\alpha) \leq d(2^{2-1} - 3) = -d \leq 0$.

Voor $j = 1, \dots, i-2$ gebruiken we de Taylor-expansie voor g_{j+1} en g_{j-1} in $\frac{1}{d}w_j^i(\alpha) = g_{j+1} - 2g_j + g_{j-1}$:

$$\frac{1}{d}w_j^i(\alpha) = -2g_j + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(1)^k}{k!} g^{(k)}(j) + \frac{(-1)^k}{k!} g^{(k)}(j) = \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ even}}}^{\infty} \frac{2}{k!} g^{(k)}(j).$$

We sommeren hier uiteindelijk alleen over even k . We hadden al gezien dat $g^{(k)}(j) > 0$ voor even k , dus we kunnen concluderen dat $w_j^i(\alpha) > 0$ voor $j = 1, \dots, i-2$.

Voor $j = i$ zien we dat $\frac{1}{d}w_j^i(\alpha) = g_{i-1} > 0$. Voor $j = i-1$ is er geen eenduidig resultaat af te leiden. We kunnen wel inzien dat geldt $\frac{1}{d}(w_{i-1}^i + w_i^i) = -2g_{i-1} + g_{i-2} + g_{i-1} = g_{i-2} - g_{i-1} > 0$.

Som van coëfficiënten

Een verwachte eigenschappen van de coëfficiënten is de volgende:

$$\sum_{j=-1}^i w_j^i(\alpha) = 0. \quad (38)$$

Voor $i = 1$ volgt deze identiteit duidelijk uit de expliciet gegeven formule. Voor $i \geq 2$ hebben we, met $d = \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha}$:

$$\begin{aligned} \sum_{j=-1}^i w_j^i(\alpha) &= d((1) + (g_1 - 2) + (-2g_{i-1} + g_{i-2}) + (g_{i-1}) + \sum_{j=1}^{i-2} g_{j+1} - 2g_j + g_{j-1}) \\ &= d(g_1 - 1 - g_{i-1} + g_{i-2} + (g_0 - g_1 - g_{i-2} + g_{i-1})) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Hiermee blijkt inderdaad dat (38) klopt.

Vergelijking met andere artikelen

Lynch et al. ([6], hoofdstuk 2) en Shen & Liu ([12], hoofdstuk 2) hebben dezelfde aanpak gebruikt voor het berekenen van de fractionele afgeleide. De coëfficiënten zijn echter niet helemaal hetzelfde. Echter, de resulterende schema's zijn wel hetzelfde, onder enkele voorwaarden:

- De methode van Lynch et al. komt overeen met de hier besproken methode als $u_0 = u_1 = 0$, wat neerkomt op $u(0) = 0$ en $u'(0) = 0$.
- De methode van Shen & Liu komt overeen met de hier besproken methode als $u_0 = u_1$ en $u_{n-1} = u_{N_x}$, wat neerkomt op $u'(0) = 0$ en $u'(1) = 0$. Om in te zien dat het resultaten dan gelijk zijn, moet wel een index-transformatie worden toegepast op de coëfficiënten.

4.1.2 Vierkant stelsel

We nemen nu aan dat $u'(0) = 0$, wat we kunnen bereiken door te stellen $u_0 = u_1$. Verder beschouwen twee randvoorwaarden aan de rechterkant, voor u_{N_x} :

1. $u'(1) = 0$, dus $u_n = u_{N_x-1}$,
2. $u(1) = u_{N_x} = c$, met c een constante.

In beide gevallen kunnen we de fractionele afgeleide nu als volgt schrijven:

$$\begin{aligned} {}_0^C D_x^\alpha \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N_x-2} \\ u_{N_x-1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} w_1^1 + w_0^1 & w_{-1}^1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ w_2^2 + w_1^2 & w_0^2 & w_{-1}^2 & 0 & \dots & 0 \\ w_3^3 + w_2^3 & w_1^3 & w_0^3 & w_{-1}^3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & & \ddots & \vdots \\ w_{N_x-2}^{N_x-2} + w_{N_x-3}^{N_x-2} & w_{N_x-4}^{N_x-2} & & \dots & w_{-1}^{N_x-2} & \\ w_{N_x-1}^{N_x-1} + w_{N_x-2}^{N_x-1} & w_{N_x-3}^{N_x-1} & & \dots & w_0^{N_x-1} & \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N_x-2} \\ u_{N_x-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ w_{-1}^{N_x-1} u_{N_x} \end{pmatrix} \\ &= W_{N_x}(\alpha) \cdot \vec{u} + (w_{-1}^{N_x-1} \cdot u_{N_x}) \cdot \vec{e}_{N_x-1}. \end{aligned} \quad (39)$$

Hier hebben we gelijk de $(N_x - 1) \times (N_x - 1)$ -matrix $W_{N_x}(\alpha)$ gedefinieerd.

Als nu $u_{N_x} = u_{N_x-1}$, kunnen we de extra vector in de matrix halen, door het element rechts-onder in $W_{N_x}(\alpha)$ vervangen door $w_0^{N_x-1} + w_{-1}^{N_x-1}$. De afgeleide wordt dan een lineaire transformatie. Merk op dat we ook een lineaire transformatie krijgen als je de randvoorwaarde $u_{N_x} = 0$ forceert. In andere gevallen blijft de afgeleide een affine transformatie.

Als we $s \in \{0, 1\}$ definiëren als $s = 0$ als $u(1) = 0$ en $s = 1$ als $u'(1) = 0$, krijgen we de volgende lineaire

transformatie:

$$\begin{aligned}
{}_0^C D_x^\alpha \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N_x-2} \\ u_{N_x-1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} w_1^1 + w_0^1 & w_{-1}^1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ w_2^2 + w_1^2 & w_0^2 & w_{-1}^2 & 0 & \dots & 0 \\ w_3^3 + w_2^3 & w_1^3 & w_0^3 & w_{-1}^3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{N_x-2}^{N_x-2} + w_{N_x-3}^{N_x-2} & w_{N_x-4}^{N_x-2} & \dots & \dots & \dots & w_{-1}^{N_x-2} \\ w_{N_x-1}^{N_x-1} + w_{N_x-2}^{N_x-1} & w_{N_x-3}^{N_x-1} & \dots & \dots & \dots & w_0^{N_x-1} + s w_{-1}^{N_x-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N_x-2} \\ u_{N_x-1} \end{pmatrix} \\
&= W_{N_x}(\alpha) \cdot \vec{u}. \tag{40}
\end{aligned}$$

Merk op dat $w_0^{N_x-1} + s w_{-1}^{N_x-1} = \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} (2^{2-\alpha} - 3 + s) \leq 0$.

4.2 L2C

We werken analoog aan de uitwerking van L2, maar nemen nu in formule (36) de andere benadering voor de tweede afgeleide:

$$\begin{aligned}
{}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i} &\approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} u''(x_i - x_j) \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^{1-\alpha} ds \\
&\approx \frac{\Delta_x^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} \left(\frac{u_{i-j-2} - u_{i-j-1} - u_{i-j} + u_{i-j+1}}{2\Delta_x^2} \right) ((j+1)^{2-\alpha} - j^{2-\alpha}) \\
&= \sum_{j=-1}^{i+1} \hat{w}_j^i(\alpha) u_{i-j}.
\end{aligned}$$

Hier zijn de coëfficiënten van u_{i-j} gedefinieerd als $\hat{w}_j^i(\alpha)$ voor $0 \leq i \leq N_x$ en $-1 \leq j \leq i+1$. Hierbij geldt $\hat{w}_j^0 = 0 \ \forall j$, en verder geldt:

$$\hat{w}_j^1(\alpha) = \frac{1}{2\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \cdot \begin{cases} 1 & j = -1 \\ -1 & j = 0 \\ -1 & j = 1 \\ 1 & j = 2 \end{cases}$$

$$\hat{w}_j^2(\alpha) = \frac{1}{2\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \cdot \begin{cases} 1 & j = -1 \\ 2^{2-\alpha} - 2 & j = 0 \\ -2^{2-\alpha} & j = 1 \\ 2 - 2^{2-\alpha} & j = 2 \\ 2^{2-\alpha} - 1 & j = 3 \end{cases} = \frac{1}{2\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \cdot \begin{cases} g_0 & j = -1 \\ -g_0 + g_1 & j = 0 \\ -g_0 - g_1 & j = 1 \\ g_0 - g_1 & j = 2 \\ g_1 & j = 3 \end{cases}$$

Als $i \geq 3$, hebben we:

$$\hat{w}_j^i(\alpha) = \frac{1}{2\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \cdot \begin{cases} 1 & j = -1 \\ 2^{2-\alpha} - 2 & j = 0 \\ 3^{2-\alpha} - 2^{3-\alpha} & j = 1 \\ (j+2)^{2-\alpha} - 2(j+1)^{2-\alpha} + 2(j-1)^{2-\alpha} - (j-2)^{2-\alpha} & j = 2, \dots, i-2 \\ -i^{2-\alpha} + 2(i-2)^{2-\alpha} - (i-3)^{2-\alpha} & j = i-1 \\ -i^{2-\alpha} + 2(i-1)^{2-\alpha} - (i-2)^{2-\alpha} & j = i \\ i^{2-\alpha} - (i-1)^{2-\alpha} & j = i+1 \end{cases}$$

$$= \frac{1}{2\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \cdot \begin{cases} g_0 & j = -1 \\ -g_0 + g_1 & j = 0 \\ -g_0 - g_1 + g_2 & j = 1 \\ g_{j-2} - g_{j-1} - g_j + g_{j+1} & j = 2, \dots, i-2 \\ g_{i-3} - g_{i-2} - g_{i-1} & j = i-1 \\ g_{i-2} - g_{i-1} & j = i \\ g_{i-1} & j = i+1 \end{cases}$$

Ook met de coëfficiënten \hat{w}_j^i kunnen we, net als bij L2, een matrix $\hat{W}_{N_x}(\alpha)$ opstellen. Met deze benadering van de tweede afgeleide, is het ook nodig dat we u_{-1} weten. Vanaf het volgende hoofdstuk beschouwen we situaties met $\frac{d}{dx}u(0) = 0$, dan is $u_{-1} = u_1$. De \hat{W} -matrix wordt dan van dezelfde omvang als de matrix W :

$$\hat{W}_{N_x}(\alpha) = \begin{pmatrix} \hat{w}_1^1 & \hat{w}_0^1 + \hat{w}_2^1 & \hat{w}_{-1}^1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \hat{w}_2^2 & \hat{w}_1^2 + \hat{w}_3^2 & \hat{w}_0^2 & \hat{w}_{-1}^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \hat{w}_3^3 & \hat{w}_2^3 + \hat{w}_4^3 & \hat{w}_1^3 & \hat{w}_0^3 & \hat{w}_{-1}^3 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ \hat{w}_{N_x-2}^{N_x-2} & \hat{w}_{N_x-3}^{N_x-2} + \hat{w}_{N_x-1}^{N_x-2} & \hat{w}_{N_x-2}^{N_x-2} & \dots & & & \hat{w}_{-1}^{N_x-2} & 0 \\ \hat{w}_{N_x-1}^{N_x-1} & \hat{w}_{N_x-2}^{N_x-1} + \hat{w}_{N_x-1}^{N_x-1} & \hat{w}_{N_x-3}^{N_x-1} & \dots & & & \hat{w}_0^{N_x-1} & \hat{w}_{-1}^{N_x-1} \end{pmatrix}$$

Gedrag voor gehele α

Ook hier krijgen we met $\alpha = 2$ voor alle i de normale tweede afgeleide weer terug:

$$w_{-1}^i(2) = \frac{1}{2\Delta_x^2}, \quad w_0^i(2) = \frac{-1}{2\Delta_x^2}, \quad w_1^i(2) = \frac{-1}{2\Delta_x^2}, \quad w_2^i(2) = \frac{1}{2\Delta_x^2},$$

$$w_j^i(2) = 0 \quad (j = 3, \dots, i+1).$$

Merk ook op dat we ook hier met $\alpha = 1$ niet slechts de eerste afgeleide terugkrijgen. Voor $i \geq 3$ hebben we:

$$w_{-1}^i(1) = \frac{1}{2\Delta_x}, \quad w_0^i(1) = 0, \quad w_1^i(1) = \frac{-1}{2\Delta_x},$$

$$w_j^i(1) = 0 \quad (j = 2, \dots, i-2),$$

$$w_{i-1}^i(1) = \frac{-1}{2\Delta_x}, \quad w_i^i(1) = 0, \quad w_{i+1}^i(1) = \frac{1}{2\Delta_x}.$$

Analoge resultaten zijn af te leiden voor $i = 1$ en $i = 2$. Net als bij de L2-methode zien we dat dit overeenkomt met de resultaten in sectie 3.3.

Gelijke coëfficiënten

Net als bij L2, zien we in de formule voor $\hat{w}_j^i(\alpha)$ dat alleen \hat{w}_{i+1}^i , \hat{w}_i^i en \hat{w}_{i-1}^i afhankelijk zijn van i . Hieruit maken we op dat ook hier voor alle i, i' en $j \leq \max(i, i') - 2$ geldt $\hat{w}_j^i = \hat{w}_j^{i'}$.

Teken van coëfficiënten

Net als bij L2 gaan we afleiden welk teken de verschillende coëfficiënten hebben. We schrijven $d = \frac{1}{2\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} > 0$. Voor $i = 1$ zijn de tekens duidelijk uit de definitie, voor $i = 2$ gebruiken we het resultaat dat $g_i > g_{i+1} > 0$. Daarmee zien we dat $\hat{w}_{-1}^2 > 0$, $\hat{w}_0^2 < 0$, $\hat{w}_1^2 < 0$, $\hat{w}_2^2 > 0$ en $\hat{w}_3^2 > 0$.

Voor $i \geq 3$ zien we vanwege hetzelfde resultaat dat $\hat{w}_{-1}^i = dg_0 > 0$, $\hat{w}_0^i = -d \cdot (g_0 - g_1) < 0$, $\hat{w}_1^i = -dg_0 - d \cdot (g_1 - g_2) < 0$ en $\hat{w}_i^i = d \cdot (g_{i-2} - g_{i-1}) > 0$. Verder is $\hat{w}_{i+1}^i = dg_{i-1} > 0$, maar kunnen we over \hat{w}_{i-1}^i niet veel zeggen. Wel kunnen we inzien dat $\hat{w}_{i-1}^i + \hat{w}_{i+1}^i = d \cdot (g_{i-3} - g_{i-2}) > 0$.

Voor $j = 2, \dots, i - 2$ gebruiken we weer een Taylor expansie, en het feit dat $g^{(k)}(j) > 0$ voor even k :

$$\begin{aligned} \frac{1}{d}\hat{w}_j^i &= (g(j-2) + g(j+1)) - (g(j-1) + g(j)) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1.5)^k + (1.5)^k}{k!} g^{(k)}(j-0.5) - \frac{(-0.5)^k + (0.5)^k}{k!} g^{(k)}(j-0.5) \\ &= \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ even}}}^{\infty} \frac{2}{k!} ((1.5)^k - (0.5)^k) \cdot g^{(k)}(j-0.5) > 0. \end{aligned}$$

Som van coëfficiënten

Voor $i = 1$ en $i = 2$ is het duidelijk dat $\sum_{j=-1}^{i+1} \hat{w}_j^i(\alpha) = 0$. Voor $i \geq 3$ hebben we, met $d = \frac{1}{2\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha}$:

$$\begin{aligned} \sum_{j=-1}^{i+1} \hat{w}_j^i(\alpha) &= d((g_0) + (-g_0 + g_1) + (-g_0 - g_1 + g_2) + (g_{i-3} - g_{i-2} - g_{i-1}) + (g_{i-2} - g_{i-1}) \\ &\quad + (g_{i-1}) + \sum_{j=2}^{i-2} (g_{j-2} - g_{j-1} - g_j + g_{j+1})) \\ &= d(-g_0 + g_2 + g_{i-3} - g_{i-1} + (g_0 - g_2 - g_{i-3} + g_{i-1})) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Hiermee is de aangetoond dat de som ook hier, net als bij L2, gelijk is aan 0.

4.2.1 Vierkant stelsel

Voor overzichtelijkheid gebruiken we hier $n = N_x$. We kunnen net als bij L2 ook bij L2C een affiene transformatie opstellen, als volgt:

$$\begin{aligned} {}_0D_x^\alpha \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \hat{w}_0^1 + \hat{w}_1^1 + \hat{w}_2^1 & \hat{w}_{-1}^1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \hat{w}_1^2 + \hat{w}_2^2 + \hat{w}_3^2 & \hat{w}_0^2 & \hat{w}_{-1}^2 & 0 & \dots & 0 \\ \hat{w}_2^3 + \hat{w}_3^3 + \hat{w}_4^3 & \hat{w}_1^3 & \hat{w}_0^3 & \hat{w}_{-1}^3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{w}_{n-3}^{n-2} + \hat{w}_{n-2}^{n-2} + \hat{w}_{n-1}^{n-2} & \hat{w}_{n-4}^{n-2} & \dots & \dots & \dots & \hat{w}_{-1}^{n-2} \\ \hat{w}_{n-2}^{n-1} + \hat{w}_{n-1}^{n-1} + \hat{w}_n^{n-1} & \hat{w}_{n-3}^{n-1} & \dots & \dots & \dots & \hat{w}_0^{n-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \hat{w}_{-1}^{n-1} u_n \end{pmatrix} \\ &= \hat{W}_n(\alpha) \cdot \vec{u} + (\hat{w}_{-1}^{n-1} \cdot u_n) \cdot \vec{e}_{n-1}. \end{aligned} \tag{41}$$

Met s gedefinieerd zoals in sectie 4.1.2 kunnen we hier dan als volgt weer een lineaire transformatie van maken:

$$\begin{aligned}
{}_0^C D_x^\alpha \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \hat{w}_0^1 + \hat{w}_1^1 + \hat{w}_2^1 & \hat{w}_{-1}^1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \hat{w}_1^2 + \hat{w}_2^2 + \hat{w}_3^2 & \hat{w}_0^2 & \hat{w}_{-1}^2 & 0 & \dots & 0 \\ \hat{w}_2^3 + \hat{w}_3^3 + \hat{w}_4^3 & \hat{w}_1^3 & \hat{w}_0^3 & \hat{w}_{-1}^3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & & \ddots & \vdots \\ \hat{w}_{n-3}^{n-2} + \hat{w}_{n-2}^{n-2} + \hat{w}_{n-1}^{n-2} & \hat{w}_{n-4}^{n-2} & \dots & & & \hat{w}_{n-1}^{n-2} \\ \hat{w}_{n-2}^{n-1} + \hat{w}_{n-1}^{n-1} + \hat{w}_n^{n-1} & \hat{w}_{n-3}^{n-1} & \dots & & & \hat{w}_0^{n-1} + s\hat{w}_{-1}^{n-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix} \\
&= \hat{W}_n(\alpha) \cdot \vec{u}. \tag{42}
\end{aligned}$$

4.3 Nauwkeurigheid van L2 en L2C

Dit hoofdstuk heeft zijn analoog in [12, h.5].

Vanaf nu zullen we de discretisatie van de fractionele afgeleide met behulp van L2 aanduiden met ‘de L2-methode’. Evenzo noemen we de L2C-variant voortaan ‘de L2C-methode’. In principe duiden de benamingen L2/L2C slechts op de discretisaties van de tweede afgeleide, maar hier wijken we dus iets van af.

We noteren de benaderde afgeleide van orde α met $\overline{{}_0^C D_x^\alpha u(x)}$. We bewijzen dat ${}_0^C D_x^\alpha u(x) = \overline{{}_0^C D_x^\alpha u(x)} + \mathcal{O}(\Delta_x)$. Voor L2 weten we:

$$\begin{aligned}
\overline{{}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i}} &= \frac{\Delta_x^2}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \sum_{j=0}^{i-1} g_j \frac{u_{i-j-1} - 2u_{i-j} + u_{i-j+1}}{\Delta_x^2} \\
&= \frac{\Delta_x^2}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \sum_{j=0}^{i-1} g_j (u''(x_i - j \cdot \Delta_x) + \mathcal{O}(\Delta_x^2)).
\end{aligned}$$

Evenzo voor L2C:

$$\begin{aligned}
\overline{{}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i}} &= \frac{\Delta_x^2}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \sum_{j=0}^{i-1} g_j \frac{u_{i-j-2} - u_{i-j-1} - u_{i-j} + u_{i-j+1}}{2\Delta_x^2} \\
&= \frac{\Delta_x^2}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} \sum_{j=0}^{i-1} g_j (u''(x_i - j \cdot \Delta_x) + \mathcal{O}(\Delta_x)).
\end{aligned}$$

We nemen $p = 2$ voor L2 en $p = 1$ voor L2C. Dan zien we met (35) dat

$$\begin{aligned}
\overline{{}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i}} &= \frac{\Delta_x^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} g_j (u''(x_i - j \cdot \Delta_x) + \mathcal{O}(\Delta_x^p)) \\
&= \frac{\Delta_x^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} g_j u''(x_i - j \cdot \Delta_x) + \frac{\Delta_x^{2-\alpha} i^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \mathcal{O}(\Delta_x^p) \\
&= \frac{\Delta_x^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} g_j u''(x_i - j \cdot \Delta_x) + \frac{x_i^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \mathcal{O}(\Delta_x^p) \\
&= \frac{\Delta_x^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} g_j u''(x_i - j \cdot \Delta_x) + \mathcal{O}(\Delta_x^p).
\end{aligned}$$

α	$\Delta_x = 0.04$	$\Delta_x = 0.02$	$\Delta_x = 0.01$	$\Delta_x = 0.005$	$\Delta_x = 0.0025$	Factor
1.0	0.0537985	0.0263477	0.0130405	0.00648742	0.00323558	2.0194
1.1	0.0513987	0.0252634	0.01253	0.0062409	0.00311473	2.0155
1.2	0.0488566	0.0241297	0.0120034	0.0059896	0.00299265	2.0101
1.3	0.0460928	0.0229114	0.0114464	0.0057279	0.00286724	2.0024
1.4	0.0429904	0.0215526	0.0108339	0.00544517	0.00273418	1.9913
1.5	0.039379	0.0199645	0.0101229	0.00512167	0.00258476	1.9757
1.6	0.0350125	0.0180083	0.00924062	0.00472124	0.00240172	1.9540
1.7	0.0295394	0.0154685	0.00806499	0.00417837	0.00215138	1.9250
1.8	0.0224647	0.0120146	0.00639341	0.00337588	0.00176876	1.8879
1.9	0.013124	0.00714985	0.00389412	0.00210636	0.00113003	1.8461
2.0	0.00238095	0.000828941	0.000290857	0.000102446	3.61522e-5	2.8488

Tabel 1: Fouten van benaderde fractionele afgeleide van het monoom $u(x) = x^3$, gebruikmakend van L2. De fout is berekend met (43).

Aan de andere kant, zien we met behulp van de middelwaardstelling voor integralen dat

$$\begin{aligned}
{}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i} &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^{1-\alpha} u''(x_i - s) ds \\
&= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} u''(x_i - \xi_j) \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^{1-\alpha} ds \\
&= \frac{\Delta_x^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} g_j u''(x_i - \xi_j),
\end{aligned}$$

waarbij $\xi_j \in [x_j, x_{j+1}]$. Als we bovenstaande formules combineren, zien we met $u''(x_i - j \cdot \Delta_x) = u''(x_i - \xi_j) + \mathcal{O}(\Delta_x)$ en (35) dat

$$\begin{aligned}
\left| \overline{{}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i}} - {}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i} \right| &= \left| \frac{\Delta_x^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} g_j [u''(x_i - j \cdot \Delta_x) - u''(x_i - \xi_j)] + \mathcal{O}(\Delta_x^p) \right| \\
&= \left| \frac{\Delta_x^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{j=0}^{i-1} g_j \mathcal{O}(\Delta_x) + \mathcal{O}(\Delta_x^p) \right| \\
&= \left| \frac{\Delta_x^{2-\alpha} i^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \mathcal{O}(\Delta_x) + \mathcal{O}(\Delta_x^p) \right| \\
&= \left| \frac{x_i^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \mathcal{O}(\Delta_x) + \mathcal{O}(\Delta_x^p) \right| \\
&= \mathcal{O}(\Delta_x).
\end{aligned}$$

Hiermee is de nauwkeurigheid van $\mathcal{O}(\Delta_x)$ aangetoond.

We bekijken nu de nauwkeurigheid van de L2- en L2C-methoden bij de eerste en tweede afgeleide, respectievelijk $\alpha = 1$ en $\alpha = 2$. Als we aannemen dat $u'(0) = 0$, dan krijgen we de volgende benaderingen bij L2, met bijbehorende nauwkeurigheden:

$$\begin{aligned}
u'(x_i) &= {}_0^C D_x^{\alpha=1} u(x)|_{x=x_i} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta_x}, & \mathcal{O}(\Delta_x) \\
u''(x_i) &= {}_0^C D_x^{\alpha=2} u(x)|_{x=x_i} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta_x^2}, & \mathcal{O}(\Delta_x^2)
\end{aligned}$$

α	$\Delta_x = 0.04$	$\Delta_x = 0.02$	$\Delta_x = 0.01$	$\Delta_x = 0.005$	$\Delta_x = 0.0025$	Factor
1.0	0.00121049	0.000300382	7.48153e-5	1.86689e-5	4.66284e-6	4.0140
1.1	0.000749130	0.000171091	3.85775e-5	8.53589e-6	1.84091e-6	4.4924
1.2	0.000292027	8.30233e-5	3.06816e-5	1.13794e-5	4.00582e-6	2.9401
1.3	0.000913344	0.000347177	0.000124211	4.27401e-5	1.43167e-5	2.8293
1.4	0.00216348	0.000798674	0.000285502	9.98879e-5	3.44214e-5	2.8166
1.5	0.00397904	0.00150268	0.00055636	0.000203254	7.35613e-5	2.7123
1.6	0.00659359	0.0025983	0.001011	0.00039008	0.000149644	2.5765
1.7	0.0103556	0.00430157	0.00177268	0.000726809	0.000297003	2.4300
1.8	0.0157595	0.00694277	0.00304439	0.00133121	0.000581074	2.2821
1.9	0.0235	0.0110232	0.00515841	0.00241078	0.00112583	2.1375
2.0	0.0345443	0.0172989	0.00865515	0.00432889	0.00216476	1.9987

Tabel 2: Fouten van benaderde fractionele afgeleide van het monoom $u(x) = x^3$, gebruikmakend van L2C. De fout is berekend met (43).

en voor L2C het volgende:

$$u'(x_i) = {}_0^C D_x^{\alpha=1} u(x)|_{x=x_i} \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta_x}, \quad \mathcal{O}(\Delta_x^2)$$

$$u''(x_i) = {}_0^C D_x^{\alpha=2} u(x)|_{x=x_i} \approx \frac{u_{i+1} - u_i - u_{i-1} + u_{i-2}}{2\Delta_x^2}. \quad \mathcal{O}(\Delta_x)$$

Zie voor een bewijs van deze nauwkeurigheden Appendix 10.1. Uit deze nauwkeurigheden kunnen we opmaken dat de L2 methode beter zal werken als α dicht bij 2 ligt, terwijl L2C beter zal werken als α dicht bij 1 ligt.

4.3.1 Uitgewerkt voorbeeld

We hebben de afgeleide van orde α van $u(x) = x^3$ benaderd met behulp van de L2- en L2C-methoden. We weten met behulp van formule (3) dat de analytische uitdrukking voor deze afgeleide gegeven wordt door

$${}_0^C D_x^\alpha u(x) = \frac{\Gamma(4)}{\Gamma(4-\alpha)} x^{3-\alpha}.$$

Zie tabellen 1 en 2 voor de fouten bij verschillende α en Δ_x , berekend met

$$\delta u = \frac{\sum_{i=1}^{N_x-1} \left(\overline{{}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i}} - {}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i} \right)^2}{\sum_{i=1}^{N_x-1} \left({}_0^C D_x^\alpha u(x)|_{x=x_i} \right)^2}. \quad (43)$$

In deze tabellen is ook de gemiddelde factor vermeldt waarmee de fout δu omlaag gaat, als Δ_x met een factor 2 omlaag gaat. Hierin zien we dat de fout van $\mathcal{O}(\Delta_x)$ wordt gehandhaafd. Merk op dat we de randpunten $u(0)$ en $u(1)$ niet meenemen in de berekening van de fout, om randeffecten te voorkomen.

In de tabellen zien we het verwachte gedrag van L2 en L2C bij $\alpha = 1$ en $\alpha = 2$ enigszins terug. Bij L2C zien we daar bij $\alpha = 1.0$ de kwadratische nauwkeurigheid, terwijl er bij $\alpha = 2.0$ slechts lineaire nauwkeurigheid is. Bij L2 zien we bij $\alpha = 2.0$ duidelijk een verhoogde verkleiningsfactor bij $\alpha = 2.0$, maar zijn er voor de rest alleen factoren rond de 2, die op lineaire nauwkeurigheid duiden. De uitspraak dat L2 beter zou werken rond $\alpha = 2$ is hier dus niet helemaal in terug te zien.

Deel II

Fractionele partiële differentiaalvergelijkingen

In dit deel behandelen we twee partiële differentiaalvergelijkingen. In hoofdstuk 5, 6 en 7 behandelen we varianten op de volgende reactie-diffusie vergelijking:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \chi {}_0 D_x^\alpha [u(x, t) - u(0, t)] + F(x, u). \quad (44)$$

In hoofdstuk 8 behandelen we het Gray-Scott model:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} &= \epsilon_1 {}_0 D_x^{\alpha_1} [u(x, t) - u(0, t)] - uv^2 + c_1(1 - u), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \epsilon_2 {}_0 D_x^{\alpha_2} [v(x, t) - v(0, t)] + uv^2 - c_2 v. \end{cases} \quad (45)$$

In beide vergelijkingen bepalen we de afgeleide van $\hat{u}(x, t) = u(x, t) - u(0, t)$, zodat $\hat{u}(0, t) = 0$. Verder nemen we overall als randvoorwaarde $\frac{d}{dx}u(0, t) = 0$. Hierdoor geldt dus altijd ${}^{RL}D_0^\alpha \hat{u}(x, t) = {}^C D_x^\alpha \hat{u}(x, t)$, en hierom zullen we vanaf nu de aanduiding RL of C weglaten: ${}_0 D_x^\alpha \hat{u}(x, t)$.

Hier discretiseren we t weer hetzelfde als dat we bij x hebben gedaan. We nemen $t \in [0, T]$, en verdelen dit interval in $N_t + 1$ equidistante punten t_n . Met $\Delta_t = T/N_t$ en $t_n = n \cdot \Delta_t$, volgt dat $t_0 = 0$ en $t_{N_t} = T$.

De programma-code die gebruikt is voor de numerieke resultaten in de komende hoofdstukken, is te vinden in [13].

5 Fractionele diffusie-vergelijking

Dit hoofdstuk heeft zijn analog in [12, h.6], en [6, h.5].

De fractionele diffusie-vergelijking wordt gegeven door:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \chi {}_0 D_x^\alpha [u(x, t) - u(0, t)] \quad (1 \leq \alpha \leq 2). \quad (46)$$

Gebruikmakend van de L2- of L2C-discretisatie in sectie 4, kunnen we deze vergelijking benaderen volgens:

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^n + \Delta_t \chi W_{N_x}(\alpha) \cdot \vec{u}^n = (I_{N_x} + \Delta_t \chi W_{N_x}(\alpha)) \cdot \vec{u}^n. \quad (47)$$

Hier staat \vec{u}^n voor de waarde van \vec{u} op tijdstip t_n . Merk op dat we de term $-u(0, t)$ hier hebben weggelaten, omdat de Caputo-afgeleide van een constante gelijk is aan 0. We definiëren de matrix $A = I_{N_x} + \Delta_t \chi W_{N_x}(\alpha)$, waardoor de vergelijking wordt $\vec{u}^{n+1} = A \cdot \vec{u}^n$. We nemen aan dat $\frac{d}{dx}u(0, t) = 0$, oftewel $u_0^n = u_1^n$.

5.1 Stabiliteit

In sectie 2.6 hebben we gezien hoe we de eigenwaarden $\lambda \in \mathbb{C}$ van A kunnen afschatten met behulp van Gershgorin schijven. We beschouwen wederom een willekeurige eigenwaarde λ van A met eigenvector $\vec{y} \neq \vec{0}$, en kiezen i zodat $|y_i| = \max\{|y_j|\}$, waarbij y_i de i -de component van \vec{y} is.

Met i zo gekozen, weten we dat geldt $|\lambda - a_{ii}| \leq r_i$. Voor stabiliteit is het gewenst dat geldt $|\lambda| \leq 1$. Aangezien $a_{ii} \in \mathbb{R}$, volgt uit de stelling in sectie 2.6 dat $|\lambda| \leq 1$ als $a_{ii} + r_i \leq 1$ en $a_{ii} - r_i \geq -1$.

5.1.1 L2

Noteer $b = \frac{\Delta_t \chi}{\Gamma(3-\alpha)\Delta_x^\alpha} > 0$ en $\tilde{b} = \Delta_t \chi > 0$. We onderscheiden een aantal gevallen voor i .

1. Stel $i = 1$, dan is $r_1 = |a_{12} \frac{y_2}{y_1}| = b |\frac{y_2}{y_1}| \leq b$, en $a_{11} = 1 - b$. We zien dat $a_{11} + r_1 \leq 1 - b + b = 1$, en $a_{11} - r_1 \geq 1 - b - b = 1 - 2b$. Hieruit concluderen we dat moet gelden $b \leq 1$.

2. Stel $2 \leq i \leq N_x - 2$. We weten uit sectie 4.1 dat $w_j^i > 0$ voor $j = -1$ en $j = 1, \dots, i - 2$, en dat $w_i^i + w_{i-1}^i > 0$. Verder weten we ook dat $\sum_{j=-1}^i w_j^i = 0$. Hiermee volgt:

$$\begin{aligned} r_i &= \tilde{b}(w_i^i + w_{i-1}^i) \left| \frac{y_1}{y_i} \right| + \tilde{b}w_{-1}^i \left| \frac{y_{i+1}}{y_i} \right| + \sum_{j=2}^{i-1} \tilde{b}w_{i-j}^i \left| \frac{y_j}{y_i} \right| \\ &\leq \tilde{b}(w_i^i + w_{i-1}^i) + \tilde{b}w_{-1}^i + \sum_{j=2}^{i-1} \tilde{b}w_{i-j}^i \\ &= \tilde{b} \sum_{\substack{j=-1 \\ j \neq 0}}^i w_j^i = -\tilde{b}w_0^i = b(2 - g_1). \end{aligned}$$

We weten dat $a_{ii} = 1 - b(2 - g_1)$, hiermee is dus $a_{ii} + r_i \leq 1$ en $a_{ii} - r_i \geq 1 - 2b(2 - g_1)$. Dus als $b(2 - g_1) \leq 1$, dan is $|\lambda| \leq 1$.

3. Stel $i = N_x - 1$. Dan is, analoog aan bovenstaande afleiding:

$$\begin{aligned} r_i &= \tilde{b}(w_i^i + w_{i-1}^i) \left| \frac{y_1}{y_i} \right| + \sum_{j=2}^{i-1} \tilde{b}w_{i-j}^i \left| \frac{y_j}{y_i} \right| \\ &\leq \tilde{b}(w_i^i + w_{i-1}^i) + \sum_{j=2}^{i-1} \tilde{b}w_{i-j}^i \\ &= \tilde{b} \sum_{j=1}^i w_j^i = -\tilde{b}(w_0^i + w_{-1}^i) = b(1 - g_1). \end{aligned}$$

Met $a_{ii} = 1 - b(2 - g_1) + bs$ zien we dat $a_{ii} + r_i = 1 - b + bs \leq 1$, en $a_{ii} - r_i = 1 - b(3 - s - 2g_1)$. Dus als $b\left(\frac{3-s}{2} - g_1\right) \leq 1$, is $|\lambda| \leq 1$.

Als we de resultaten hierboven combineren, zien we dat $|\lambda| \leq 1$, als $\max\{b, b(2 - g_1), b\left(\frac{3-s}{2} - g_1\right)\} \leq 1$. Aangezien $1 \leq 2 - g_1 = 3 - 2^{2-\alpha} \leq 2$, is $b \leq b(2 - g_1)$. Ook is $b\left(\frac{3-s}{2} - g_1\right) \leq b(2 - g_1)$, dus de stabiliteitseis wordt $b(2 - g_1) \leq 1$, wat we ook kunnen schrijven als:

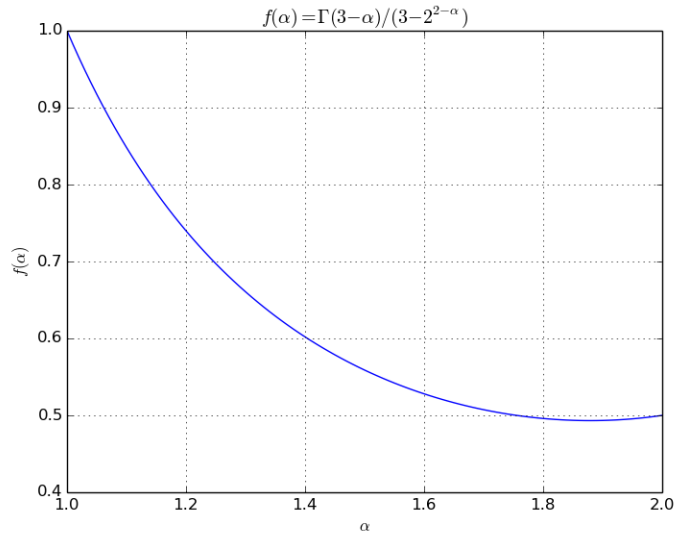
$$\frac{\Delta_t \chi}{\Delta_x^\alpha} \leq \frac{\Gamma(3 - \alpha)}{3 - 2^{2-\alpha}}. \quad (48)$$

Merk op dat voor $\alpha = 1$ en $\alpha = 2$ de bekende stabiliteitsvoorwaarden terugkomen, respectievelijk $\frac{\Delta_t \chi}{\Delta_x} \leq 1$ en $\frac{\Delta_t \chi}{\Delta_x^2} \leq \frac{1}{2}$.

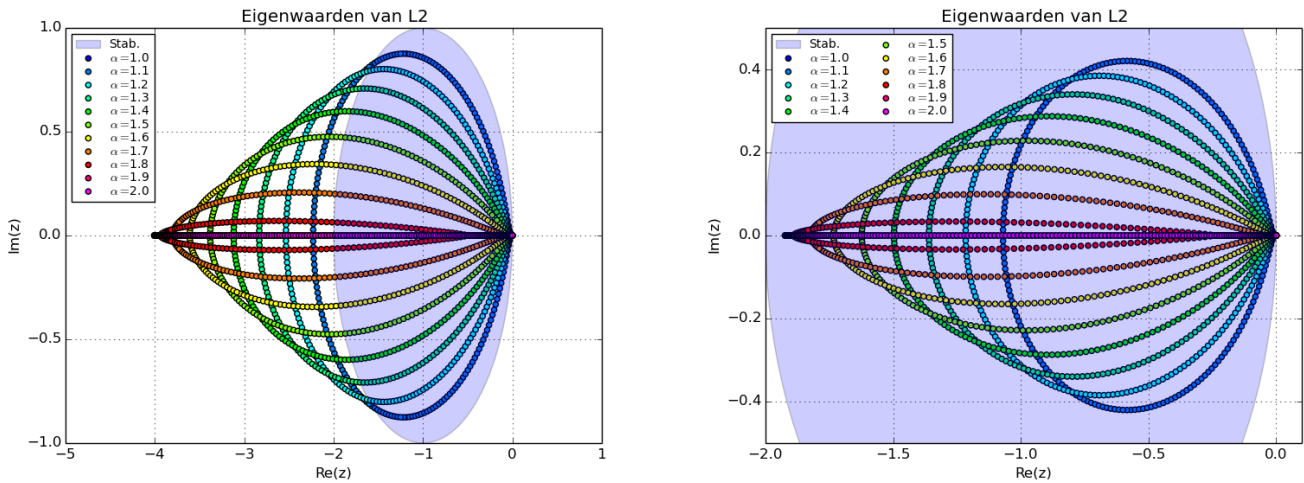
Voor een grafische weergave van de stabiliteitseis, zie figuur 4. Merk op dat $f(\alpha) \leq 0.5$ voor $1.75 \lesssim \alpha \leq 2$. Zie figuur 5 voor een grafische weergave van de eigenwaarden van L2.

5.1.2 L2C

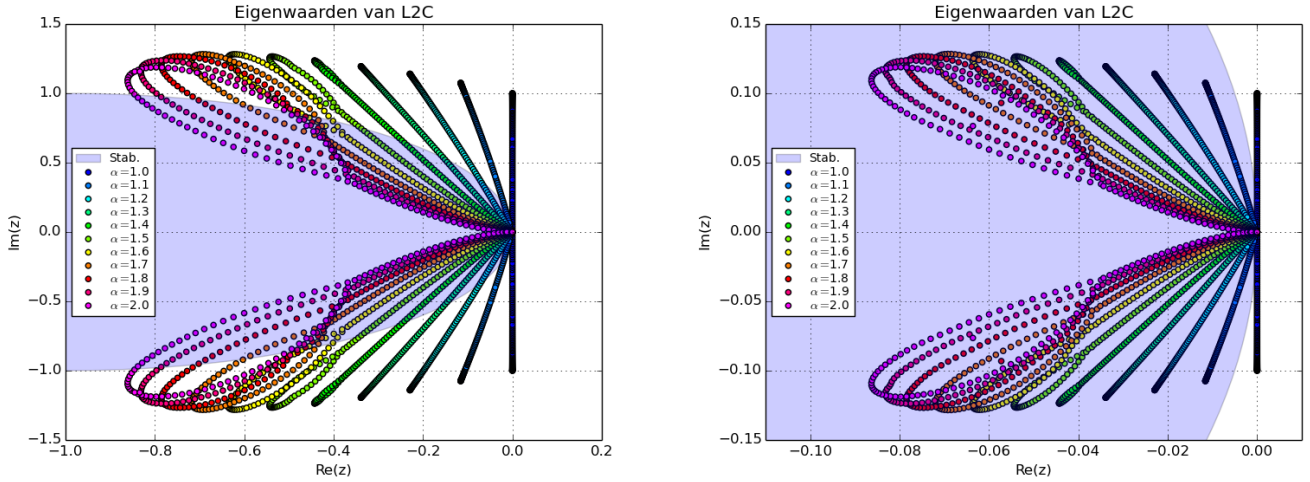
Voor L2C is er geen methode bekend om een stabiliteits-eis af te leiden. We kunnen echter wel, net als bij L2, de eigenwaarden bepalen en grafisch weergeven voor verschillende α , zie figuur 6. Met het proberen van enkele waarden voor Δ_t blijkt dat voor $\alpha = 1.5$ de stabiliteitseis voor L2C ongeveer hetzelfde is als voor L2.



Figuur 4: Stabiliteitseis voor $L2$



Figuur 5: Eigenwaarden $z = \lambda \chi \Delta_t$ van $L2$, met $N_x = 200$ en $\frac{\chi \Delta_t}{\Delta x^2} = 1.0$ links en $\frac{\chi \Delta_t}{\Delta x^2} = 0.48$ rechts. Merk op dat voor $\alpha = 1.0$ de eigenwaarden gelijk zijn aan ofwel -1.0 ofwel 0.0 , deze zie je dus niet in het figuur. Verder overlappen de eigenwaarden voor $\alpha = 1.9$ en $\alpha = 2.0$ elkaar, die van 1.9 zie je dus grotendeels niet. Helemaal links zijn er wel enkele waarden van $\alpha = 1.9$ zichtbaar, in het linkerfiguur links van de lijn $\text{Re}(z) = -4$. Hierin is terug te zien dat stabiliteit eist dat $f(\alpha) \leq 0.5$ tussen $\alpha \approx 1.75$ en $\alpha = 2.0$. We zien dat we alle eigenwaarden binnen het stabiliteitsgebied (blauwe cirkel) van Euler Forward kunnen laten vallen door Δ_t klein genoeg te kiezen.



Figuur 6: Eigenwaarden $z = \lambda \chi \Delta_t$ van L2C, met $N_x = 200$ en $\frac{\chi \Delta_t}{\Delta_x^2} = 1.0$ links en $\frac{\chi \Delta_t}{\Delta_x^2} = 0.1$ rechts. We zien dat voor Δ_t klein genoeg, we alle eigenwaarden binnen het stabiele gebied voor EF kunnen krijgen (blauwe cirkel), behalve voor $\alpha = 1.0$. Merk op dat L2C juist gekozen was omdat het rond $\alpha = 1.0$ een fout van $\mathcal{O}(\Delta_x^2)$ had. We zien hier dat L2C ondanks de gunstige fout in de buurt van $\alpha = 1.0$, daar nog steeds voor stabiliteit een relatief kleine Δ_t nodig heeft, en dat L2C voor exact $\alpha = 1.0$ zelfs onvoorwaardelijk instabiel is.

5.1.3 Grünwald-Letnikov

De Grünwald-Letnikov fractionele afgeleide kan ook gebruikt worden om de afgeleide van orde α te benaderen. Weghalen van de limiet $h \rightarrow 0$ in formule (32) geeft:

$${}^{GL}D_t^\alpha f(t) \approx h^{-\alpha} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{\alpha}{r} f(t - rh). \quad (nh = t - a) \quad (49)$$

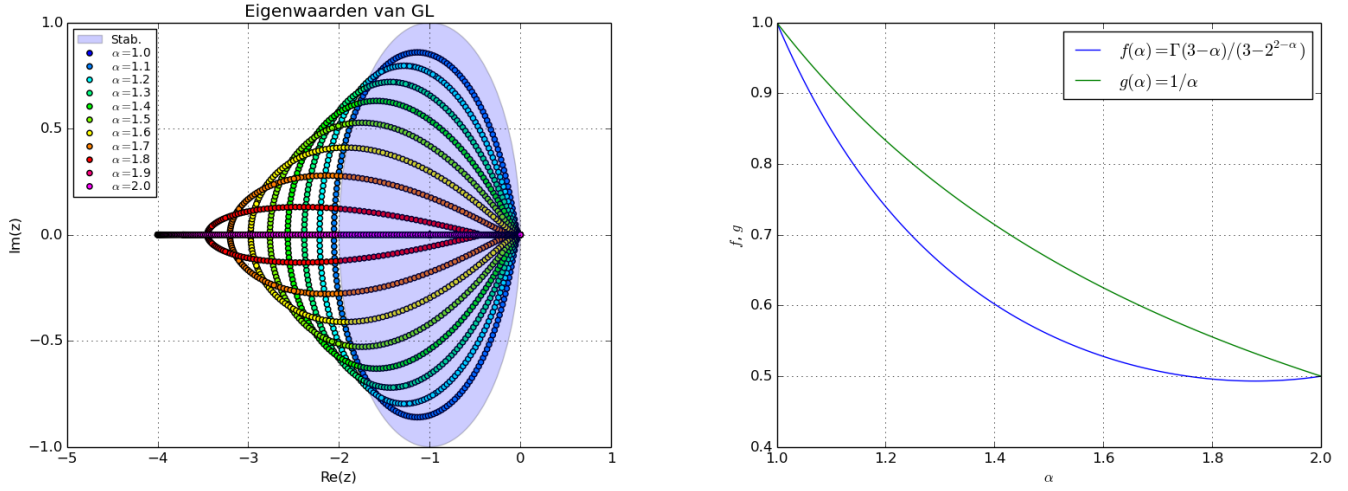
Ondanks dat de Riemann-Liouville en Grünwald-Letnikov fractionele afgeleiden samenvallen voor vaak genoeg differentieerbare functies, komen de discretisaties in het algemeen niet overeen. In [7, prop. 2.1, prop. 2.3] wordt bewezen dat de standaard discretisatie zoals in vergelijking (49) onvoorwaardelijk instabiel is. Er wordt echter ook aangetoond ([7, th. 2.7], [8, prop. 2.1]) dat de ‘vershoven’ Grünwald-Letnikov afgeleide voorwaardelijk stabiel is, met stabiliteits-eis $\frac{\chi \Delta_t}{\Delta_x^2} \leq \frac{1}{\alpha}$. Deze verschoven variant wordt hierbij gegeven door:

$${}^{GLs}D_t^\alpha f(t) \approx h^{-\alpha} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{\alpha}{r} f(t - (r-1)h). \quad (nh = t - a) \quad (50)$$

5.1.4 Vergelijking met artikelen

De afleiding van de stabiliteits-eis van L2 ($\frac{\Delta_t \chi}{\Delta_x^2} \leq \frac{\Gamma(3-\alpha)}{3-2^{2-\alpha}}$) is gebaseerd op het artikel van Shen & Liu ([12, h.4]), dus de in sectie 5.1.1 gevonden eis komt ook overeen met die in het artikel. Lynch ([6]) beweert echter een minder strenge stabiliteits-eis van $\frac{\Delta_t \chi}{\Delta_x^2} < 1$. Een numerieke proef laat zien dat met vaste $\alpha = 1.5$, $\Delta_x = 0.0025$, $\chi = 0.05$, $x_0 = 0.5$ en $W = 0.1$, instabiliteiten voorkomen vanaf $\Delta_t \gtrsim 0.0015$. We zien dat hier geldt $\frac{\Delta_t \chi}{\Delta_x^2} = 0.6$. Dit gedrag komt overeen met Shen & Liu, en is in tegenspraak met Lynch.

We hebben gezien dat de Grünwald-Letnikov afgeleide een andere stabiliteits-eis heeft, $\frac{\Delta_t \chi}{\Delta_x^2} \leq \frac{1}{\alpha}$. Deze eis is



Figuur 7: **Links:** Eigenwaarden $z = \lambda\chi\Delta_t$ van GL, met waarden zoals in figuur 5 (links). **Rechts:** Vergelijking van de stabiliteitseis van L2 (blauw) met die van GL (groen). We zien dat de GL discretisatie een iets minder strenge stabiliteits-eis heeft dan L2.

minder streng dan de eis voor L2, maar strenger dan de eis die Lynch beschrijft. Zie ook figuur 7.

5.2 Nauwkeurigheid

Dit hoofdstuk heeft zijn analoog in [12, h.5].

In sectie 4.3 hebben we gezien dat de L2- en L2C-methoden een nauwkeurigheid hebben van $\mathcal{O}(\Delta_x)$: ${}_0D_x^\alpha u(x) = \overline{{}_0D_x^\alpha u(x)} + \mathcal{O}(\Delta_x)$. We kunnen nu bewijzen dat het schema in (47) een nauwkeurigheid heeft van $\mathcal{O}(\Delta_x + \Delta_t)$.

We definiëren de fout op elk gridpunt (x_i, t_n) als $e_i^n = u_i^n - u(i\Delta_x, n\Delta_t)$. Verder is $\vec{e}^n = (e_1^n, \dots, e_{N_x-1}^n)$. Als we $u(x_i, t_n)$ invullen in (47), krijgen we:

$$\frac{(\vec{u}^{n+1} - \vec{e}^{n+1}) - (\vec{u}^n - \vec{e}^n)}{\Delta_t} = \chi W_{N_x}(\alpha) \cdot (\vec{u}^n - \vec{e}^n) = \chi \overline{{}_0D_x^\alpha (\vec{u}^n - \vec{e}^n)}.$$

Als we nu ${}_0D_x^\alpha u(x, t) = \overline{{}_0D_x^\alpha u(x, t)} + \mathcal{O}(\Delta_x)$ gebruiken, zie we dat:

$$\frac{(\vec{u}^{n+1} - \vec{e}^{n+1}) - (\vec{u}^n - \vec{e}^n)}{\Delta_t} = \chi \left({}_0D_x^\alpha \vec{u}^n + \vec{\mathcal{O}}(\Delta_x) - \overline{{}_0D_x^\alpha \vec{e}^n} \right).$$

Per component wordt dit:

$$\frac{(u_i^{n+1} - e_i^{n+1}) - (u_i^n - e_i^n)}{\Delta_t} = \chi \left({}_0D_x^\alpha u(x_i, t_n) + \mathcal{O}(\Delta_x) - \overline{{}_0D_x^\alpha e_i^n} \right).$$

Met Taylor (formule (68)) zien we dat dit wordt:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x_i, t_n) + \mathcal{O}(\Delta_t) - \frac{e_i^{n+1} - e_i^n}{\Delta_t} = \chi \left({}_0D_x^\alpha u(x_i, t_n) + \mathcal{O}(\Delta_x) - \overline{{}_0D_x^\alpha e_i^n} \right).$$

Aangezien $\frac{\partial}{\partial t} u(x_i, t_n) = \chi_0 D_x^\alpha u(x_i, t_n)$, wordt dit:

$$\frac{e_i^{n+1} - e_i^n}{\Delta_t} = \chi_0 \overline{D_x^\alpha e_i^n} + \mathcal{O}(\Delta_x + \Delta_t).$$

In vector-notatie kan dit weer als volgt geschreven worden:

$$\frac{\vec{e}^{n+1} - \vec{e}^n}{\Delta_t} = \chi_0 \overline{D_x^\alpha \vec{e}^n} + \vec{\mathcal{O}}(\Delta_x + \Delta_t) = \chi W_{N_x}(\alpha) \cdot \vec{e}^n + \vec{\mathcal{O}}(\Delta_x + \Delta_t).$$

Met A zoals we deze eerder dit hoofdstuk gedefinieerd hebben, wordt dit dan weer:

$$\vec{e}^{n+1} = A \cdot \vec{e}^n + \Delta_t \vec{\mathcal{O}}(\Delta_x + \Delta_t) = A \cdot \vec{e}^n + \vec{d},$$

waarbij $\vec{d} = \Delta_t \vec{\mathcal{O}}(\Delta_x + \Delta_t)$. We veronderstellen dat we beginnen zonder fout ($e_i^0 = 0$), en verder gebruiken we de gewone randvoorwaarden $u_0^n = u_1^n$ en $u_{N_x}^n = s \cdot u_{N_x-1}^n$. Nu is

$$\vec{e}^{n+1} = (A^n + A^{n-1} + \dots + A^2 + A + I) \cdot \vec{d}.$$

Hieruit kunnen we afleiden dat:

$$\begin{aligned} \|\vec{e}^{n+1}\|_\infty &\leq (\|A^n\|_\infty + \|A^{n-1}\|_\infty + \dots + \|A^2\|_\infty + \|A\|_\infty + \|I\|_\infty) \cdot \|\vec{d}\|_\infty \\ &\leq (\|A\|_\infty^n + \|A\|_\infty^{n-1} + \dots + \|A\|_\infty^2 + \|A\|_\infty + \|I\|_\infty) \cdot \|\vec{d}\|_\infty. \end{aligned}$$

Nu geldt:

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq N_x-1} \sum_{j=1}^{N_x-1} |a_{ij}| = \max_{1 \leq i \leq N_x-1} r_i + |a_{ii}|.$$

In het geval van L2 zien we dat bovenstaande impliceert dat $\|A\|_\infty \leq 1$ als voldaan wordt aan de stabiliteitseis (48). Voor L2C kunnen we hetzelfde concluderen, echter is hiervoor geen uitdrukking voor de stabiliteitseis bekend. Als $\|A\|_\infty \leq 1$, kunnen we schrijven:

$$\|\vec{e}^{n+1}\|_\infty \leq (n+1) \cdot \|\vec{d}\|_\infty \leq (n+1) \cdot \Delta_t \mathcal{O}(\Delta_x + \Delta_t) = t_{n+1} \mathcal{O}(\Delta_x + \Delta_t).$$

Hieruit volgt dat $e_i^n \rightarrow 0$ als $\Delta_t \rightarrow 0$ en $\Delta_x \rightarrow 0$ op een dusdanige manier dat aan de stabiliteits-eis is voldaan. In dat geval geldt dus $u_i^n \rightarrow u(x_i, t_n)$, en is het schema nauwkeurig met orde $\mathcal{O}(\Delta_x + \Delta_t)$.

5.3 Semi-impliciet schema

De hierboven afgeleide stabiliteitseis heeft grote gevolgen voor de maximale grootte van Δ_t . Om enigszins van deze stabiliteitseis af te komen, wordt in [6, p.411] een semi-impliciet schema voorgesteld. We noteren met T_{N_x} de tridiagonaal-matrix bestaande uit de hoofd diagonaal en de twee naastliggende nevendagonalen uit W_{N_x} (of \hat{W}_n). In het geval van W_{N_x} hebben we:

$$T_{N_x} = \begin{pmatrix} w_1^1 + w_0^1 & w_{-1}^1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ w_2^2 + w_1^2 & w_0^2 & w_{-1}^2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & w_1^3 & w_0^3 & w_{-1}^3 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & w_1^{N_x-3} & w_0^{N_x-3} & w_{-1}^{N_x-3} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & w_1^{N_x-2} & w_0^{N_x-2} & w_{-1}^{N_x-2} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & w_1^{N_x-1} & w_0^{N_x-1} \end{pmatrix} \quad (51)$$

x_i	$u_i(t = 0.3)$	$u_i(t = 1.0)$
0.0000	0.17059348	0.66448616
0.3142	0.29611164	0.81327892
0.6283	0.62850632	1.19324889
0.9425	1.15109485	1.76574848
0.2566	1.86552712	2.51692844
1.5708	2.77362799	3.42068444
1.8850	3.87622461	4.41458646
2.1991	5.16587697	5.38537671
2.5132	6.55631807	6.18592210
2.8274	7.69348506	6.68865634
3.1416	8.08554778	6.84144863

Tabel 3: Berekende waarden met een kwadratische beginvoorwaarde

Het impliciete schema wordt dan als volgt:

$$(I_{N_x} - T_{N_x}) \cdot \vec{u}^{n+1} = (I_{N_x} + \Delta_t \chi (W_{N_x} - T_{N_x})) \cdot \vec{u}^n. \quad (52)$$

Hiermee zijn we nog niet van instabiliteiten af, maar het staat wel toe om een aanzienlijk grotere tijdstap Δ_t te kiezen dan bij het expliciete schema. Bij dit semi-impliciete schema zal dus niet de stabiliteit, maar de gewenste nauwkeurigheid bepalen welke waarde voor Δ_t benodigd is. Merk op dat de randen $x = 0$ en $x = 1$ niet meegenomen worden in het semi-impliciete schema, maar dat deze expliciet worden behandeld.

Alternatieve semi-impliciete schema's

Het bovenstaande semi-impliciete schema behandelt alleen 3 diagonalen impliciet. Je zou ook de volledige W_{N_x} -matrix impliciet kunnen behandelen, wat waarschijnlijk zal resulteren in een nog ruimere stabiliteits-eis. Echter, het oplossen van een stelsel vergelijkingen in een tridiagonaalmatrix (zoals T_{N_x}) kan gedaan worden in $\mathcal{O}(N_x)$ operaties, terwijl het oplossen van een beneden-hessenbergmatrix (zoals W_{N_x}) $\mathcal{O}(N_x^2)$ operaties kost. Omdat er voor het oplossen van een beneden-hessenbergmatrix ook een $(N_x - 1) \times (N_x - 1)$ -matrix in het geheugen opgebouwd moet worden, kiezen we voor het oplossen van de tridiagonaalmatrix. We merken wel op dat het wel mogelijk is om een stelsel-oplosser te schrijven die slechts $\mathcal{O}(N_x)$ geheugen voor de matrix W_{N_x} nodig heeft, uitgaande van het 'gelijke coëfficiënten' principe, maar dat zullen we hier niet doen. Bij het uitvoeren van berekeningen, gebruiken we voor het oplossen van de stelsels vergelijkingen de in *Julia* ingebouwde functionaliteit hiervoor.

5.4 Berekeningen

5.4.1 Kwadratische beginvoorwaarde

We beschouwen de beginvoorwaarde $u(x, 0) = x^2$ en randvoorwaarde $\frac{\partial}{\partial x} u(\pi, t) = 0$ zoals in [12, h.6]. Hiervoor nemen we $x \in [0, \pi]$. Voor $\alpha = 1.7$, $\chi = 0.4$, $\Delta_x = \frac{\pi}{100}$ en $\Delta_t = 10^{-4}$ geven we de resultaten van de expliciete L2-methode op $T = 0.3$ en $T = 1.0$ weer in tabel 3. Vergelijk deze resultaten met tabellen 1 & 2 uit [12, p.C884]: alle resultaten komen tot op het vijfde decimaal overeen met de daar weergegeven EFDA-kolom.

5.4.2 Evolutie van een puls

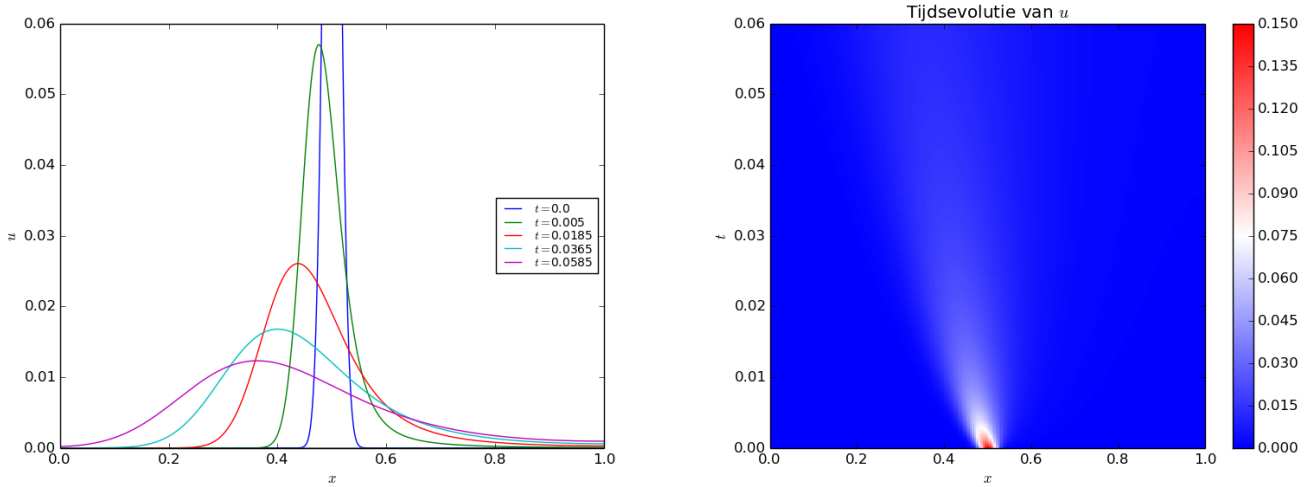
Nu beschouwen we de beginvoorwaarde $u(x, 0) = c \cdot \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2W}\right]$, zoals in [6, h.5]. Verder gebruiken we randvoorwaarden $\frac{\partial}{\partial x} u(0, t) = 0$ en $\frac{\partial}{\partial x} u(1, t) = 0$. Voor $\alpha = 1.0$ zou de puls van de beginvoorwaarde met constante snelheid moeten gaan verplaatsen. In het bijzonder zou de hoogte constant moeten blijven:

$$u(x, t) = c \cdot \exp\left[-\frac{(x + \chi t - x_0)^2}{2W}\right].$$

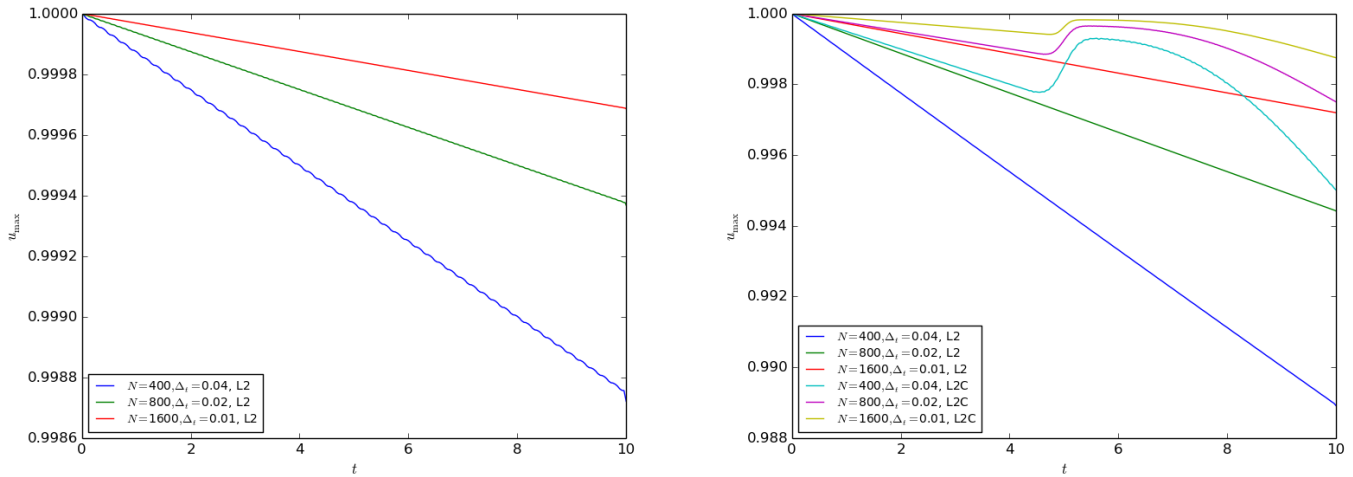
Voor $\alpha = 2.0$ zou de puls in moeten zakken vanwege diffusie, waarbij het maximum voor alle t op $x = x_0$ aangenomen wordt:

$$u(x, t) = \frac{c}{\sqrt{4\pi\chi t}} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{4\chi t}\right].$$

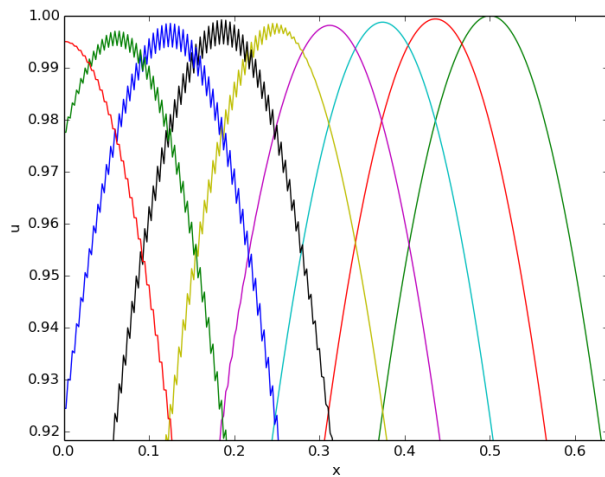
Voor $1.0 < \alpha < 2.0$ verwachten we een combinatie van deze twee effecten. Zie figuren 8 t/m 12 voor resultaten van numerieke berekeningen.



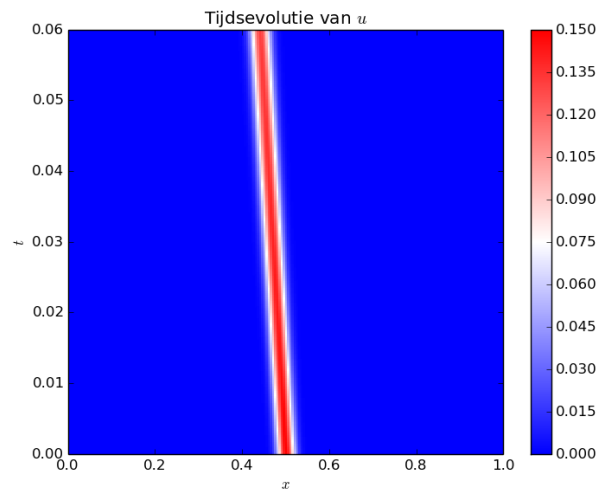
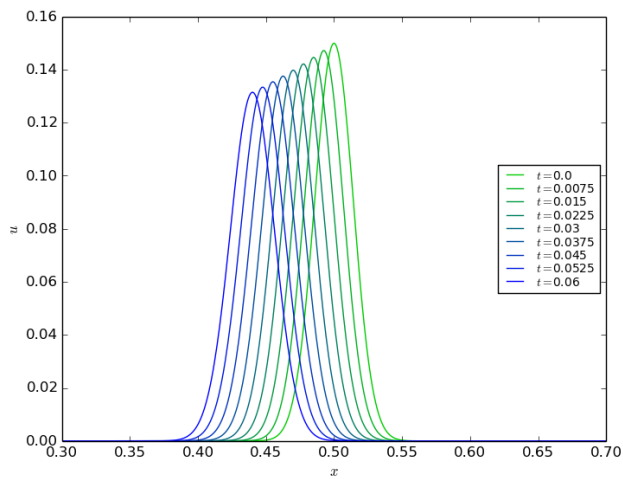
Figuur 8: Numerieke benadering van de fractionele diffusie-vergelijking parameters $\alpha = 1.5$, $\Delta_x = 10^{-3}$, $\Delta_t = 5 \cdot 10^{-6}$, $c = 0.15$, $\chi = 1.0$ en $W = 2 \cdot 10^{-4}$. De berekening is gedaan met de expliciete L2-methode. Vergelijk met [6, fig.5], maar merk op dat de waarden niet precies overeenkomen. De situatie daar heb ik niet kunnen reconstrueren.



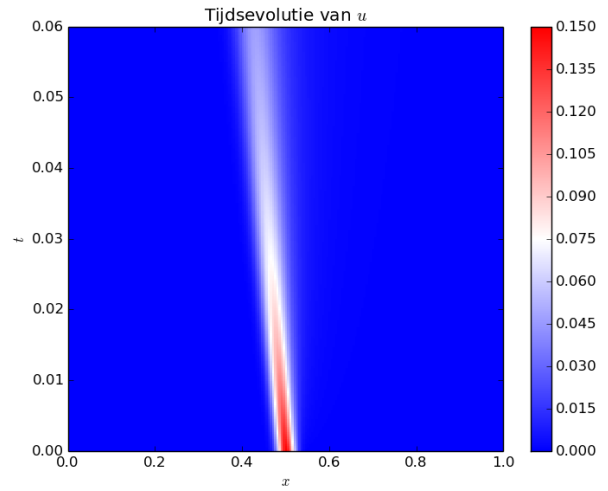
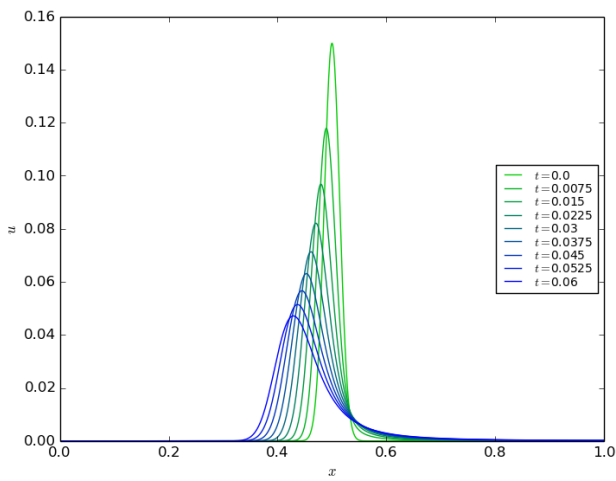
Figuur 9: De waarde van de top van u gedurende de tijd $0 \leq t \leq 10$, berekend met parameters $\alpha = 1.0$, $\Delta_x = 1/N$, $c = 1.0$, $\chi = 0.05$ en $W = 0.1$. Links is de expliciete methode weergegeven, en is L2C niet weergegeven omdat deze instabiel is en dus meteen wegschiet richting $+\infty$. Rechts is de impliciete methode weergegeven. Ook hier is L2C instabiel, maar dit blijft nog enigszins beperkt. Zie ook figuur 10. We zien ook dat de impliciete methode iets onnauwkeuriger is dan de expliciete methode. Vergelijk met [6, fig.3]. Alle stabiele berekeningen houden zich goed aan de snelheid van $\chi = 0.05$, hiervan laten we geen figuur zien.



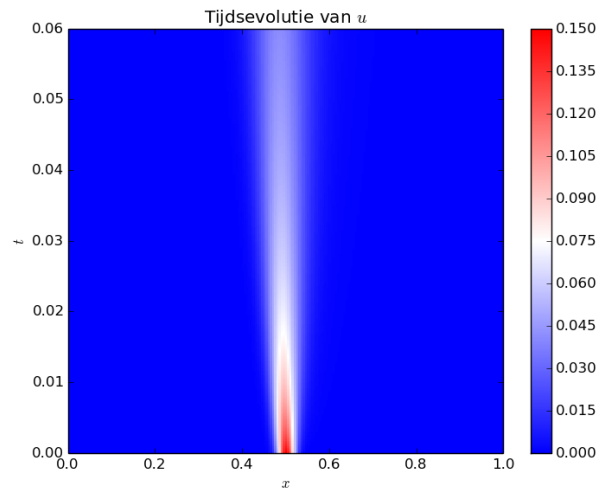
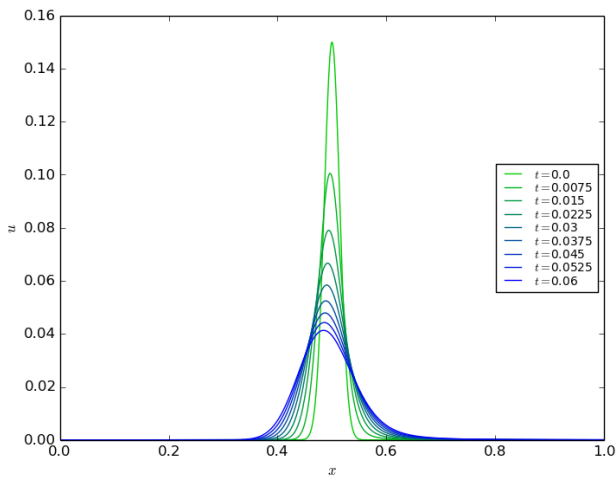
Figuur 10: De evolutie van u gedurende de tijd, verplaatsend van rechts naar links, berekend met de impliciete L2C methode, $\Delta_x = 1/400$, $\Delta_t = 0.04$, en verder dezelfde waarden als in figuur 9. We zien dat de bult in figuur 9 veroorzaakt wordt door instabiliteit.



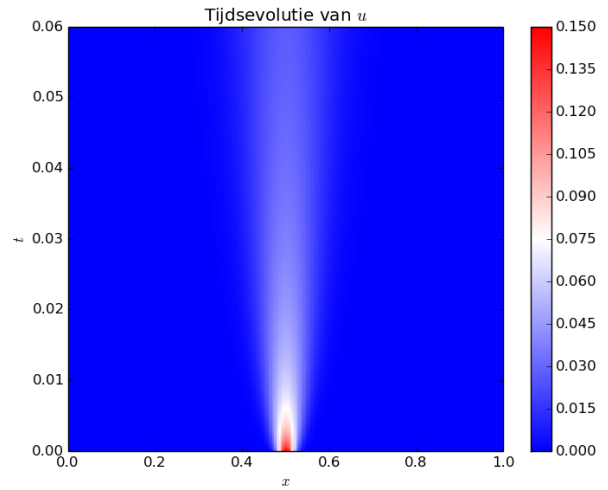
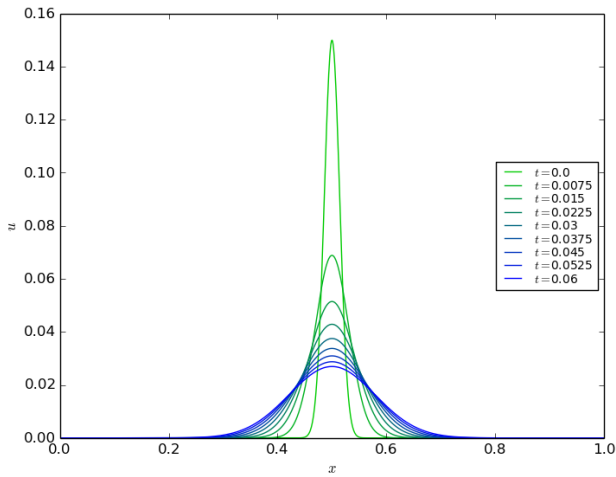
Figuur 11: Fractionele diffusie-vergelijking met $\alpha = 1.0$ en $\chi = 1.0$. Verder zijn $\Delta_x = 10^{-3}$, $\Delta_t = 5 \cdot 10^{-6}$, $c = 0.15$, $W = 2 \cdot 10^{-4}$, en is gerekend met de semi-impliciete L2 methode. Merk op dat de top niet dezelfde hoogte aanhoudt, dit is een effect van de numerieke benadering.



(a) $\alpha = 1.25, \chi = 0.5$



(b) $\alpha = 1.75, \chi = 0.05$



(c) $\alpha = 2.0, \chi = 0.05$

Figuur 12: Fractionele diffusie-vergelijking met α en χ zoals aangegeven. Verder zijn $\Delta_x = 10^{-3}$, $\Delta_t = 5 \cdot 10^{-6}$, $c = 0.15$, $W = 2 \cdot 10^{-4}$, en is gerekend met de semi-impliciete L2 methode.

6 Een evenwichtsvergelijking

Dit hoofdstuk heeft zijn analoog in [6], hoofdstuk 4.

Om de nauwkeurigheid van de benaderingen te testen, beschouwen we een simpelere versie van (44). Hierbij construeren we een exacte oplossing, om die daarna te vergelijken met numerieke resultaten.

6.1 Exacte oplossing

De formule die we beschouwen is, voor $1 < \alpha \leq 2$:

$$S(x) + \chi {}_0D_x^\alpha [u(x) - u(0)] = 0, \quad (53)$$

waarin we in het vervolg $\chi = 1$ nemen. $S(x)$ is een bronfunctie, die we nu definiëren als $S(x) = 1 - x^{2-\alpha}$. Als we aannemen dat ${}_0D_x^{-\alpha} ({}_0D_x^\alpha u(x)) = u(x)$, kunnen we vergelijking (53) oplossen voor $u(x)$:

$$u(x) = u(0) + {}_0D_x^{-\alpha}(-S(x)) = u(0) + {}_0D_x^{-\alpha}(x^{2-\alpha} - 1)$$

Met (3) kunnen we de fractionele integratie uitvoeren:

$$u(x) = u(0) + {}_0D_x^{-\alpha}(x^{2-\alpha}) - {}_0D_x^{-\alpha}(1) = u(0) + \frac{\Gamma(3-\alpha)}{2}x^2 - \frac{1}{\Gamma(\alpha+1)}x^\alpha.$$

Als we nu als randvoorwaarde eisen $u(1) = 0$, krijgen we:

$$0 = u(1) = u(0) + \frac{\Gamma(3-\alpha)}{2} - \frac{1}{\Gamma(\alpha+1)} \Rightarrow u(0) = -\frac{\Gamma(3-\alpha)}{2} + \frac{1}{\Gamma(\alpha+1)}$$

In één formule wordt dit:

$$u(x) = \frac{1-x^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} - \frac{\Gamma(3-\alpha)}{2}(1-x^2). \quad (54)$$

Merk op dat, aangezien $1 < \alpha \leq 2$, hieruit volgt dat $u'(0) = 0$. Als we $u(x)$ en $S(x)$ nu terug invullen in (53), zien we dat er geen tegenspraak optreedt, dus onze aanname dat ${}_0D_x^{-\alpha} ({}_0D_x^\alpha u(x)) = u(x)$ is hier geoorloofd. We voegen een tijdsparameter t toe, zodat we met $u(x, t)$ en beginvoorwaarde $u(x, 0)$, de volgende evenwichtsvergelijking krijgen:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = S(x) + \chi {}_0D_x^\alpha [u(x, t) - u(0, t)] = 0. \quad (55)$$

We kiezen een beginvoorwaarde $u(x, 0)$ die niet te veel afwijkt van formule (54). We discretiseren nu formule (55):

$$\bar{u}^{n+1} = \bar{u}^n + \Delta_t \cdot (S(x) + \chi W_{N_x}(\alpha) \cdot [\bar{u}^n - u_0^n]). \quad (56)$$

Als we dit doorrekenen zou de oplossing \bar{u}^n voor $n \rightarrow \infty$ moeten convergeren naar $u(x)$ in (54).

6.2 Berekeningen

Als we vergelijking (56) doorrekenen in ‘kunstmatige’ tijd, zou voor T groot genoeg de eindoplossing \bar{u}^{N_t} ongeveer gelijk moeten zijn aan $u(x)$ in (54). De fout tussen deze twee berekenen we dan met de formule:

$$\delta u = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{N_x} [u_i^{N_t} - u(x_i)]^2}{\sum_{i=0}^{N_x} u(x_i)^2}}. \quad (57)$$

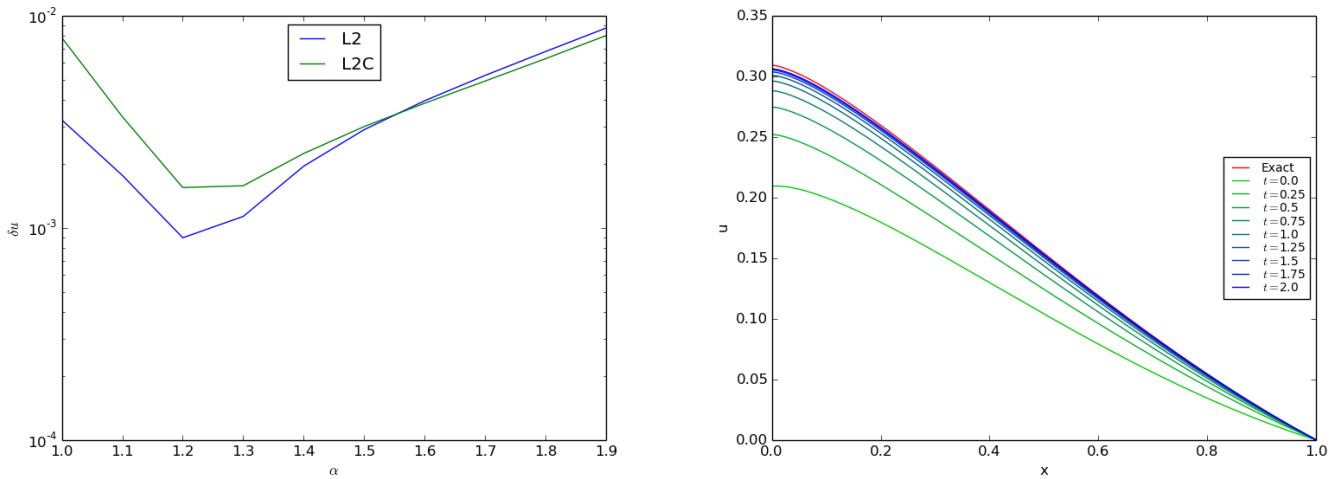
Als beginoplossing voegen we een lineaire term toe aan (54):

$$u(x, 0) = \frac{1 - x^\alpha}{\Gamma(\alpha + 1)} - \frac{\Gamma(3 - \alpha)}{2}(1 - x^2) + b \cdot (x - 1). \quad (58)$$

Deze verstoorde beginsituatie behoudt de randvoorwaarde $u(1) = 0$.

In alle berekeningen nemen we $T = 10.0$, $\chi = 1.0$ en $b = 0.1$, tenzij anders vermeld. In figuur 13 zien we dat de numerieke resultaten convergeren naar de exacte oplossing. Echter, het theoretische resultaat dat L2 nauwkeuriger zou zijn dan L2C rond $\alpha = 2.0$, en vice versa bij $\alpha = 1.0$, zien we hier niet terug. In tabel 4 zien we dat een halvering van de ruimtestap ook ongeveer een halvering van de fout veroorzaakt, iets wat overeenstemt met de $\mathcal{O}(\Delta_x)$ nauwkeurigheid van de benadering van de fractionele afgeleiden met de L2- en L2C-methoden. In tabellen 5 en 6 zien we dat een kleinere Δ_t zorgt voor een snellere convergentie naar u^{Nt} . Tezamen zorgen combinaties van kleinere Δ_x en Δ_t dus voor een snellere convergentie naar de exacte oplossing.

Bij de tabellen staat ook aangegeven met welke tabellen uit [6] ze vergeleken kunnen worden. Hierbij moet wel opgemerkt worden dat de resultaten niet kwantitatief zijn te vergelijken, aangezien in dat artikel de gebruikte beginvoorwaarde niet gegeven is. Het is dus zeer waarschijnlijk dat we hier een andere beginvoorwaarde hebben genomen.



Figuur 13: Links: Fout zoals berekend met (57) voor de benadering van de evenwichtsvergelijking met behulp van de L2 en L2C methoden. De gebruikte parameters zijn $\Delta_x = 1/400$, $\Delta_t = 2 \cdot 10^{-6}$, $T = 10.0$, $\alpha = 1.5$. Verder is de semi-impliciete methode gebruikt. Vergelijk met [6, fig.2]. **Rechts:** Verloop van u^t in de tijd, voor $\alpha = 1.5$ en de semi-impliciete L2-methode, en verder de waarden zoals in het linkerfiguur.

N_x	α	δu (L2)	δu (L2C)
100	1.1	0.0072665	0.015290
200	1.1	0.0035688	0.0071633
400	1.1	0.0017679	0.0033403
100	1.5	0.011853	0.011511
200	1.5	0.0058467	0.0058941
400	1.5	0.0029016	0.0030007
100	1.9	0.030724	0.027715
200	1.9	0.016459	0.015036
400	1.9	0.0087434	0.0080553

Tabel 4: Fouten zoals berekend met (57) op $T = 10.0$, voor verschillende $\Delta_x = 1/N_x$ en α , met $\Delta_t = 2 \cdot 10^{-6}$ en berekend met de semi-impliciete L2- en L2C-methoden. Vergelijk met [6, Tabel 2].

t	δu ($\Delta_t = 2 \cdot 10^{-6}$, L2)	δu ($\Delta_t = 2 \cdot 10^{-5}$, L2)	δu ($\Delta_t = 2 \cdot 10^{-4}$, L2)	δu ($\Delta_t = 2 \cdot 10^{-3}$, L2)
1.0	0.041059	0.042342	0.055156	0.14964
2.0	0.0074522	0.0077664	0.011484	0.07124
3.0	0.0034401	0.0034965	0.0042942	0.034677
4.0	0.0029665	0.0029756	0.0031296	0.017646
5.0	0.0029095	0.0029109	0.0029394	0.009724
6.0	0.0029026	0.0029028	0.0029079	0.0060501
7.0	0.0029018	0.0029018	0.0029027	0.004354
8.0	0.0029017	0.0029017	0.0029018	0.003573
9.0	0.0029016	0.0029016	0.0029017	0.0032129
10.0	0.0029016	0.0029016	0.0029017	0.0030463

Tabel 5: Fouten zoals berekend met (57) op verschillende t met verschillende waarden voor Δ_t , met $\Delta_x = 1/400$ en $\alpha = 1.5$ en berekend met de semi-impliciete L2-methode. Vergelijk met [6, Tabel 3].

t	δu ($\Delta_t = 2 \cdot 10^{-6}$, L2)	δu ($\Delta_t = 2 \cdot 10^{-5}$, L2)	δu ($\Delta_t = 2 \cdot 10^{-4}$, L2)	δu ($\Delta_t = 2 \cdot 10^{-3}$, L2)
1.0	0.041554	0.046054	0.088453	0.23682
2.0	0.0076913	0.0088545	0.026139	0.17788
3.0	0.0035701	0.0037941	0.009252	0.13348
4.0	0.0030702	0.0031087	0.0046864	0.10028
5.0	0.0030092	0.0030154	0.0034559	0.075512
6.0	0.0030017	0.0030027	0.0031239	0.057047
7.0	0.0030008	0.003001	0.0030341	0.043281
8.0	0.0030007	0.0030007	0.0030097	0.033019
9.0	0.0030007	0.0030007	0.0030031	0.025369
10.0	0.0030007	0.0030007	0.0030013	0.019666

Tabel 6: Fouten zoals berekend met (57) op verschillende t met verschillende waarden voor Δ_t , met $\Delta_x = 1/400$ en $\alpha = 1.5$ en berekend met de semi-impliciete L2C-methode. Vergelijk met [6, Tabel 4].

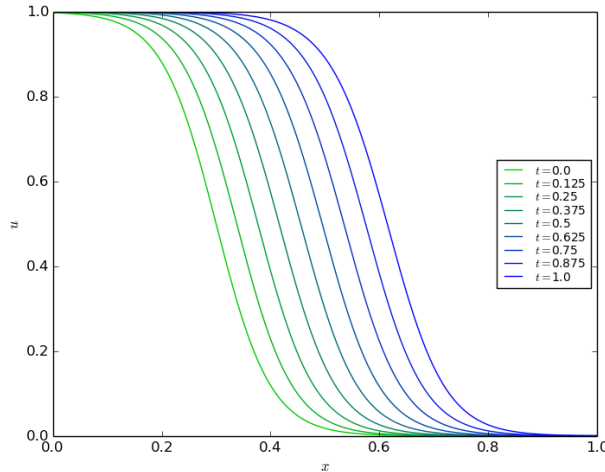
7 Fractionele fisher-vergelijking

Dit hoofdstuk heeft zijn analoog in [6], hoofdstuk 6.

De Fisher-vergelijking is de partiële differentiaalvergelijking:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F(x, u), \quad (59)$$

met $F(x, u) = \gamma u(1 - u)$. Voor juiste begin- en randvoorwaarden, is de oplossing van deze vergelijking een lopende golf die zijn eigen vorm behoudt, zie figuur 14.



Figuur 14: Tijdsevolutie van u voor een rechtsbewegende golf in de fisher-vergelijking. De gebruikte parameters zijn $\alpha = 2.0$, $\chi = 1.0 \cdot 10^{-3}$, $\gamma = 6.0$, $W = 5.0 \cdot 10^{-2}$ en $x_0 = 0.3$. De berekening is gedaan met de semi-impliciete L2-methode, met $\Delta_x = 1/400$ en $\Delta_t = 0.001$. De expliciete methode geeft hetzelfde resultaat, L2C geeft een iets langzamer bewegende golf ($c = 0.29$) dan L2 ($c = 0.32$).

We bekijken hier een variant op deze vergelijking, de *fractionele* Fisher-vergelijking:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \chi {}_0 D_x^\alpha [u(x, t) - u(0, t)] + F(x, u), \quad (60)$$

voor $1 \leq \alpha \leq 2$. We gebruiken $f(x, t) = u(x, t) - u(0, t)$, zodat $f(0, t) = 0$, waardoor één van de extra termen in (17) wegvalt. Dit is consistent met de gewone Fisher-vergelijking, aangezien de tweede afgeleide van een constante 0 is. We nemen als eerste randvoorwaarde $\frac{\partial f}{\partial x}(0, t) = 0$, hierdoor valt ook de andere extra term in (17) weg, waardoor geldt ${}^{RL}D_0^\alpha f = {}^C D_0^\alpha f$. Als tweede randvoorwaarde nemen we $\frac{\partial f}{\partial x}(1, t) = 0$. Deze tweede randvoorwaarde komt niet helemaal overeen met [6], maar dat blijkt weinig effect te hebben op de resultaten.

We beschouwen twee klassen beginvoorwaarden:

$$u(x, 0) = u_0^{r,l}(x) = \frac{1}{2} \left(1 \mp \tanh \left(\frac{x - x_0}{2W} \right) \right). \quad (61)$$

Hier neemt $u_0^r(x)$ het $-$ teken, wat een golf creëert die naar rechts loopt, en neemt $u_0^l(x)$ het $+$ teken, resulterend in een golf die naar links loopt.

7.1 Analytische oplossingen bij $\alpha = 2$

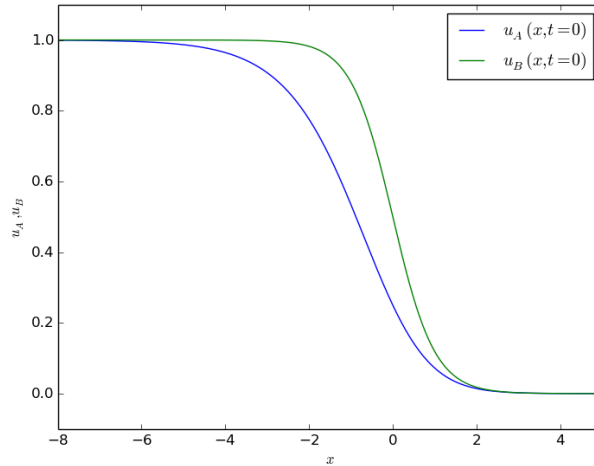
Een uitdrukking voor u die voldoet aan (59) met $\chi = 1$ en $\gamma = 6$ is:

$$u_A(x, t) = \frac{1}{(1 + e^{x-5t})^2} = \frac{1}{1 + 2e^{x-5t} + e^{2(x-5t)}}. \quad (62)$$

Daarnaast voldoet de volgende uitdrukking aan (59) als $\chi = 0$:

$$u_B(x, t) = \frac{1}{2} \left(1 \pm \tanh \left(\frac{x - x_0 - ct}{2W} \right) \right) = \frac{1}{1 + \exp[\mp(x - x_0 - ct)/W]}, \quad (63)$$

waarbij $c = -\frac{1}{2}\gamma W$. In het algemeen is $\chi \neq 0$, maar toch gebruiken we deze uitdrukking wel als beginvoorwaarde in (61). Aan de hand van bovenstaande oplossingen verwachten we dat de golf zich in de loop van tijd zal vervormen naar een vorm die enigszins afwijkt van (63), bijvoorbeeld naar iets als (62), voordat een stabiele golf aangenomen wordt, die zich gelijkvormig verplaatst in de tijd. We moeten dus voor $\alpha < 2$ ook rekening mee houden met deze observatie. De twee golven zijn te vergelijken in figuur 15.



Figuur 15: Twee golven die beide voldoen aan (59), beschreven door (62) met $t = 0$ en (63) met $W = -1/2$, $x_0 = 0$ ($\gamma = 20$) en $t = 0$.

7.2 Discretisatie

Discretisatie van (60) met behulp van vergelijking (40) geeft:

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^n + \Delta_t \cdot \left(\chi W_{N_x} \cdot \vec{u}^n + \gamma \vec{u}^n \otimes (\vec{1} - \vec{u}^n) \right), \quad (64)$$

waarbij we met \otimes componentsgewijze vermenigvuldiging noteren, en $\vec{1}$ de één-vector voorstelt.

7.2.1 Linksbewegende golf

We beschouwen de beginvoorwaarde $u(x, 0) = u_0^l(x)$, met $x_0 = 0.9$. Met deze beginvoorwaarde ontstaat er voor $\alpha = 2.0$ een golf die naar links loopt. Voor $\alpha = 1.1$ gebeurt dit ook, maar pas na een korte overgang van de beginvoorwaarde naar een stabiele golf, zie figuur 16. In deze figuur is ook een afbeelding opgenomen

van de zelfgelijkenis van de golf, waarin we u weergeven ten opzichte van $x + ct$. We berekenen de snelheid c door in elke tijdstap bij te houden voor welke x de benadering van $u(x, t)$ gelijk is aan 0.5. Dit gebeurt door een interpolatie tussen de hoogste x_a waarvoor $u(x_a, t) < 0.5$ en de laagste x_b waarvoor $u(x_b, t) > 0.5$. Om interpolatiefouten weg te werken, nemen we het gemiddelde over de laatste 11 tijdstappen voor de tijdstap waarvan we c willen weten.

We zien in figuur 16 dat de snelheid van de golf berekend met L2C ($c = 0.0103$) iets lager ligt dan bij L2 ($c = 0.0119$). In [6, p. 417] wordt besproken dat de minimale snelheid van de golf gelijk is aan

$$c_{\min} = \frac{\alpha\gamma}{\alpha - 1} \left[(\alpha - 1) \frac{\chi}{\gamma} \right]^{1/\alpha}, \quad (65)$$

en dat voor W dicht bij $W_{\min} = [(\alpha - 1)\chi/\gamma]^{1/\alpha}$ de snelheid c ook ongeveer gelijk is aan c_{\min} . Voor de parameters in figuur 16 is c_{\min} ongeveer gelijk aan 0.009933, oftewel iets lager dan de snelheden die L2 en L2C bewerkstelligen.

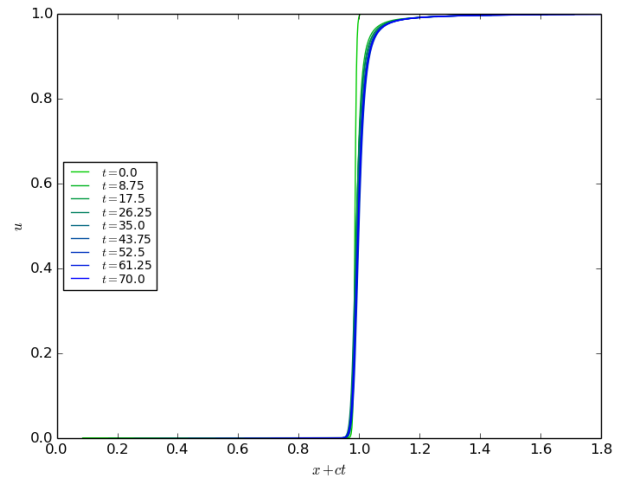
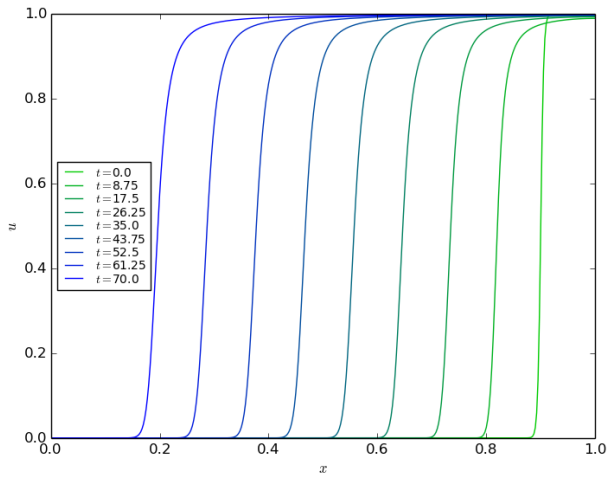
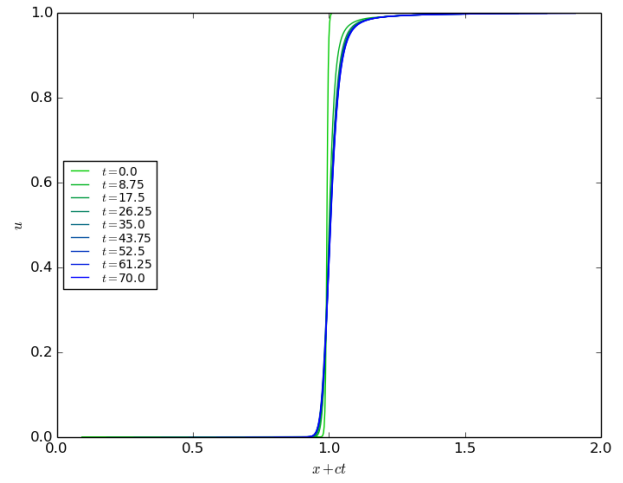
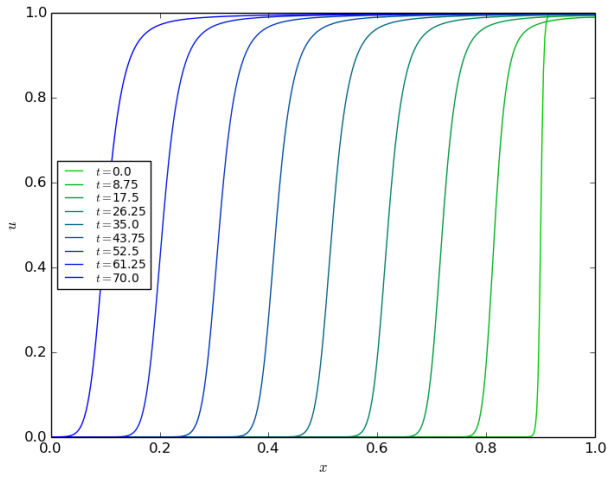
Eindsnelheid

Voor $\alpha = 1.9$ hebben we de uiteindelijke snelheid van de golf berekend als het gemiddelde van de snelheden in de laatste 11 tijdstappen. Zie figuur 17 voor de numerieke waarden van deze eindsnelheid, als functie van Δ_x voor verschillende Δ_t . Uit deze figuren kunnen we dezelfde conclusies trekken als in [6, p. 418]. Voor grote Δ_x is de snelheid vrijwel onafhankelijk van Δ_t , en dat deze in de buurt komt van c_{\min} . Dit geldt vooral voor L2 en in mindere mate ook voor L2C. Voor kleinere Δ_x zien we dat ook Δ_t kleiner moet worden om de snelheid dicht bij c_{\min} te houden. We zien ook hier dat de snelheden berekend door de L2C-methode lager zijn dan die berekend door L2.

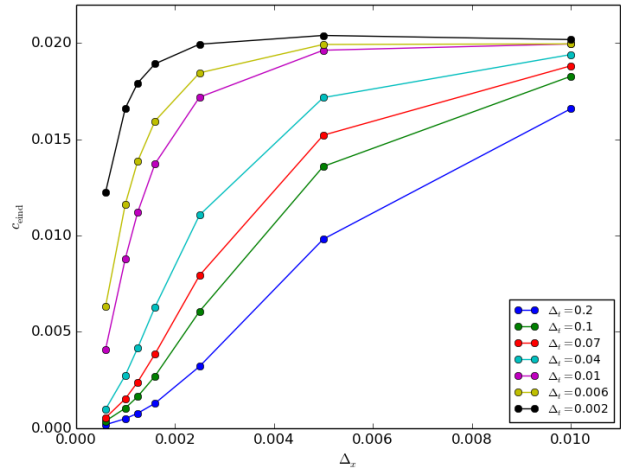
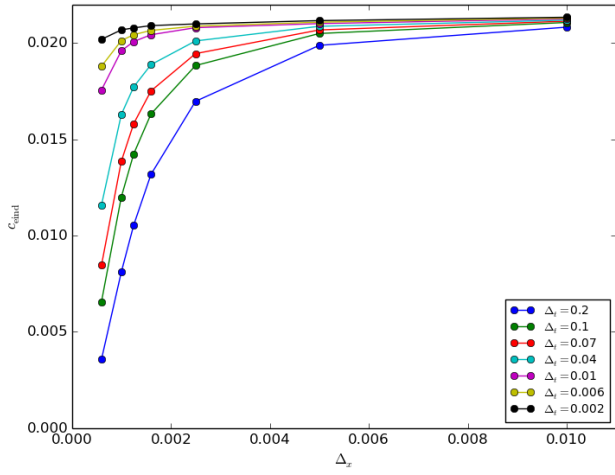
Als we c_{eind} weergeven als een functie van $\eta = \Delta_x^\alpha / (\chi\Delta_t)$, krijgen we de afbeeldingen zoals in figuur 18. We zien dat c_{eind} te beschrijven is als functie van η . We zien ook dat bij de L2-methode de eindsnelheid correcte waarden aanneemt voor $\eta \gtrsim 1.0$. Aangezien dit bij de L2C-methode eerder $\eta \gtrsim 10.0$ is, blijkt hier de L2-methode een minder strenge eis op Δ_t te leggen voor goede resultaten.

7.2.2 Rechtsbewegende golf

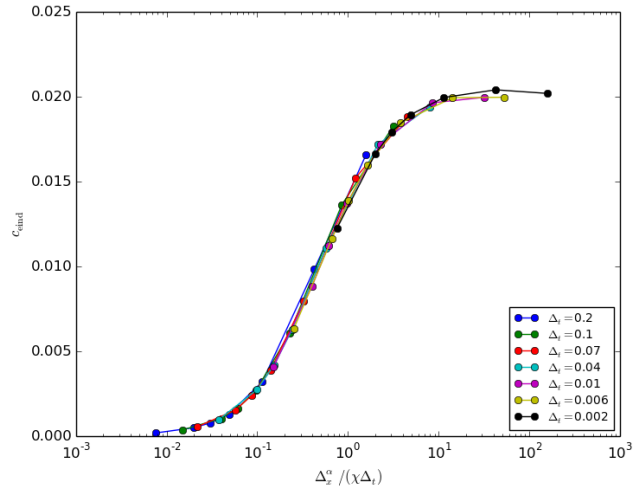
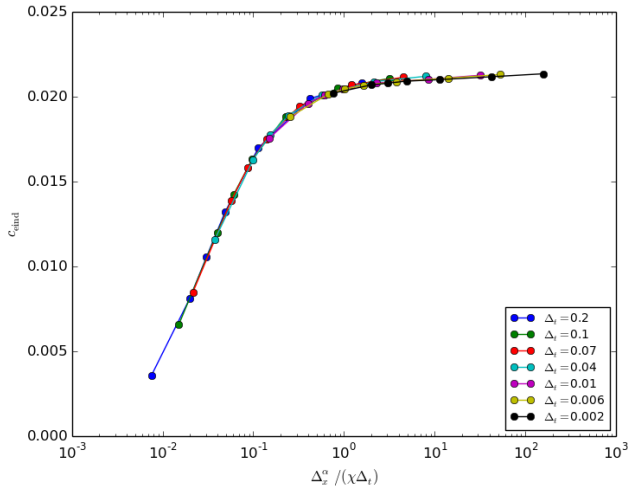
We beschouwen de beginvoorwaarde $u(x, 0) = u_0^r(x)$, met $x_0 = 3 \cdot 10^{-3}$. Met deze beginvoorwaarde ontstaat er voor $\alpha = 2.0$ een golf die naar rechts loopt. Voor $\alpha < 2.0$ blijft de golf echter niet gelijkvormig, zoals wel bij de linksbewegende golven gebeurt. We zien dit in figuur 19. Dit verschil tussen ‘links’ en ‘rechts’ komt doordat we de ‘linker’ fractionele afgeleide die we hier gebruiken, ofwel omdat we van 0 tot x integreren, in plaats van bijvoorbeeld van x tot 1. Dus waar de linksbewegende golf een gelijkvormige golf bleef, smeert de rechtsbewegende golf zichzelf uit. Ter vergelijking geven we in figuur 20 dezelfde berekening weer, maar dan met een linksbewegende golf vanaf $x_0 = 1 - 3 \cdot 10^{-3}$.



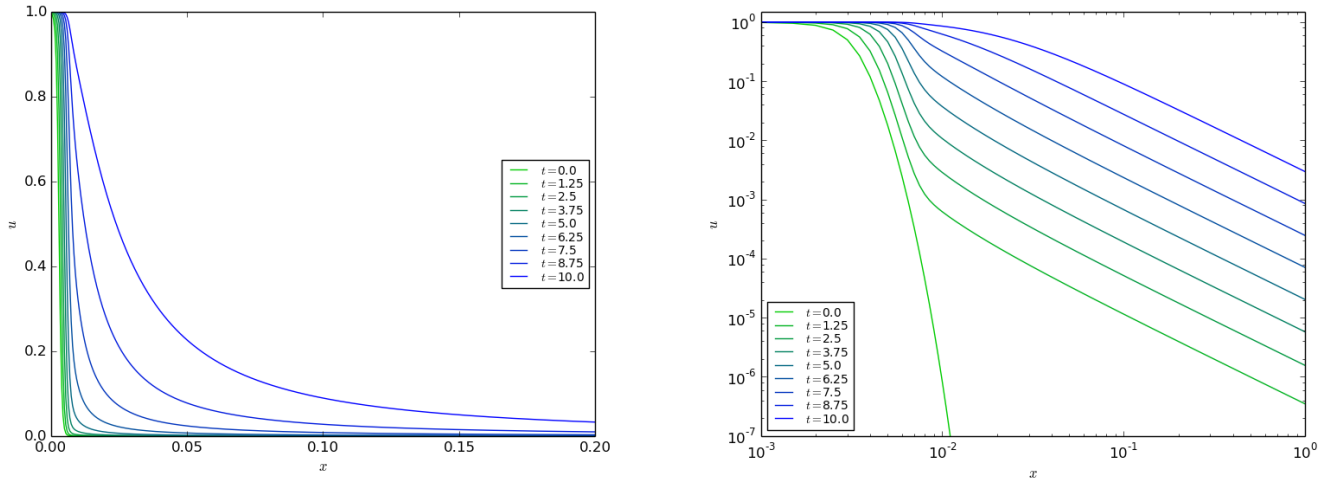
Figuur 16: Tijdsevolutie van u voor de linksbewegende golf. De gebruikte parameters zijn $\alpha = 1.1$, $\chi = 5.0 \cdot 10^{-3}$, $\gamma = 1/3$, $W = W_{\min}$ en $x_0 = 0.9$. In de bovenste figuren is het resultaat van $L2$ weergegeven en de onderste figuren geven de resultaten van $L2C$ weer, beide met $\Delta_x = 1/400$ en $\Delta_t = 0.001$ en semi-impliciet. De expliciete methoden geven dezelfde resultaten. Vergelijk met [6, fig 10 & 11].



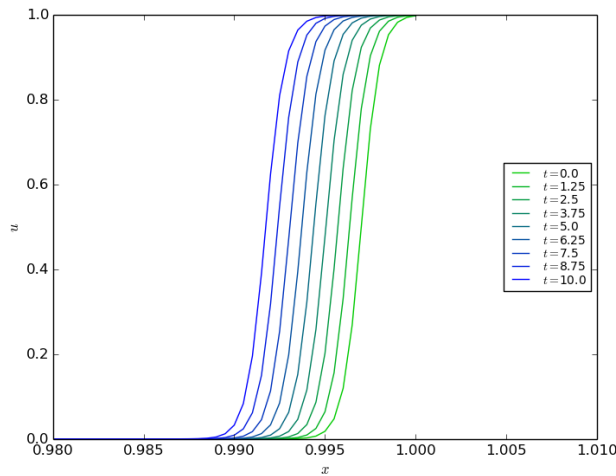
Figuur 17: Eindsnelheid van u in de linkslopende golf, als functie van Δ_x voor verschillende Δ_t . Links is de $L2$ -methode gebruikt, rechts de $L2C$ -methode, beide semi-impliciet. De gebruikte waarden zijn $\alpha = 1.9$, $\chi = 5.0 \cdot 10^{-4}$, $\gamma = 1/3$, $W = W_{\min}$, $x_0 = 0.9$ en $T = 30$. Bij deze waarden is $W_{\min} \approx 0.030878$ en $c_{\min} \approx 0.021729$. [6, fig 7].



Figuur 18: Eindsnelheid van u in de linkslopende golf, als functie van $\Delta_x^\alpha / (\chi \Delta_t)$ voor verschillende Δ_t . Links is de $L2$ -methode gebruikt, rechts de $L2C$ -methode, beide semi-impliciet. De gebruikte waarden zijn hetzelfde als in figuur 17. Vergelijk met [6, fig 8 & 9].



Figuur 19: Tijdsevolutie van u voor de rechtsbewegende golf. Beide figuren geven dezelfde resultaten weer, het linkerfiguur met lineaire assen en het rechterfiguur met logaritmische assen. De gebruikte parameters zijn $\alpha = 1.5$, $\chi = 5.0 \cdot 10^{-7}$, $\gamma = 1.0$, $W = 0.5 \cdot 10^{-3}$ en $x_0 = 3 \cdot 10^{-3}$. De berekeningen zijn uitgevoerd met $\Delta_x = 5 \cdot 10^{-4}$ en $\Delta_t = 0.01$, met de semi-impliciete L2-methode. De andere methoden (L2C, expliciet) geven dezelfde resultaten, deze geven we dus niet nog eens apart weer. Vergelijk met [4, fig. 1].



Figuur 20: Tijdsevolutie van u voor de linksbewegende golf, op dezelfde waarden als in figuur 19, behalve de hier gebruikte $x_0 = 1 - 3 \cdot 10^{-3}$. De andere methoden (L2C, expliciet) geven geen zichtbaar afwijkende resultaten, deze geven we dus niet nog eens apart weer. De snelheid van de golf is $c = 5.23 \cdot 10^{-4}$ volgens L2C, en $c = 5.29 \cdot 10^{-4}$ volgens L2. Zie ook [4, fig. 3] voor het resultaat van een vergelijkbare berekening.

8 Het fractionele Gray-Scott model

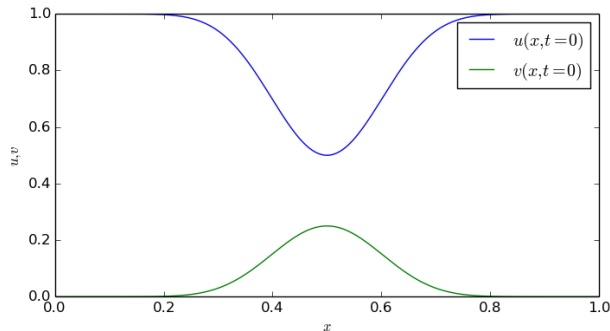
We behandelen nu een stelsel van twee gekoppelde partiële differentiaalvergelijkingen:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \epsilon_1 {}_0D_x^{\alpha_1} [u(x, t) - u(0, t)] - uv^2 + c_1(1 - u), & x \in [0, 1], \quad t \in [0, T], \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \epsilon_2 {}_0D_x^{\alpha_2} [v(x, t) - v(0, t)] + uv^2 - c_2v. \end{cases} \quad (66)$$

Hierbij beschouwen we de randvoorwaarden $u(0, t) = u(1, t) = 1$, $v(0, t) = v(1, t) = 0$ en beginvoorwaarden:

$$u(x, 0) = 1 - \frac{1}{2} \sin^{10}(\pi x), \quad v(x, 0) = \frac{1}{4} \sin^{10}(\pi x).$$

Voor $\alpha_1 = \alpha_2 = 2.0$ staat in vergelijking (66) het Gray-Scott model.



Figuur 21: De gebruikte beginvoorwaarde bij het Gray-Scott model

We discretiseren dit model als volgt:

$$\begin{cases} \vec{u}^{n+1} = \vec{u}^n + \Delta_t \cdot (\epsilon_1 W_{N_x} \cdot \vec{u}^n - uv^2 + c_1(\vec{1} - \vec{u}^n)), \\ \vec{v}^{n+1} = \vec{v}^n + \Delta_t \cdot (\epsilon_2 W_{N_x} \cdot \vec{v}^n + uv^2 - c_2\vec{v}). \end{cases} \quad (67)$$

8.1 Splitsende golven

Voor de parameters kiezen we nu:

$$\epsilon_1 = 10^{-4}, \quad \epsilon_2 = 10^{-6}, \quad c_1 = 0.01 \quad \text{en} \quad c_2 = 0.0474.$$

Met deze getalwaarden en de beginvoorwaarden zoals hierboven, beschrijft het Gray-Scott model het splitsen van golven, zie figuur 23(f). We bekijken hier verder alleen het verloop van $v(x, t)$, omdat deze doorgaans stijlere pieken heeft dan $u(x, t)$, waardoor in $v(x, t)$ de verschillende pieken dus gemakkelijker te onderscheiden zijn. Daarnaast beschrijven $u(x, t)$ en $v(x, t)$ soortgelijke patronen, dat wil zeggen dat beide oplossingen pieken op dezelfde posities bevatten. We slaan dus niets over door alleen naar $v(x, t)$ te kijken.

We bekijken hoe dit model zich gedraagt voor $1.0 \leq \alpha_1, \alpha_2 \leq 2.0$, zie figuur 22. We zien in dit figuur dat een hogere α_1 in het algemeen meer splitsingen geeft op $t = T = 500$. Een effect dat wel aanwezig is, maar niet uit figuur 22 af te leiden is, is dat een hogere α_2 zorgt dat de golven sneller gaan lopen. In de afbeeldingen in figuur 23 is dit te zien, de golven bewegen hier bij hogere α_2 sneller naar rechts.

We kijken nu in meer detail naar de verschillende gebieden in figuur 22. In alle situaties ontstaan tussen $t = 0$ en $t = 50$ twee golven uit de beginvoorwaarde, die bestaat uit één golf (zie figuur 21). Wat daarna gebeurd, hangt af van de combinatie van α_1 en α_2 :

Groene ruiten. Hier dooft de linkergolf uit, terwijl de rechtergolf in stand blijft. De rechtergolf blijft bij $\alpha_2 \lesssim 1.3$ min of meer op dezelfde plek, terwijl deze bij $\alpha_2 \gtrsim 1.6$ meer naar rechts loopt.

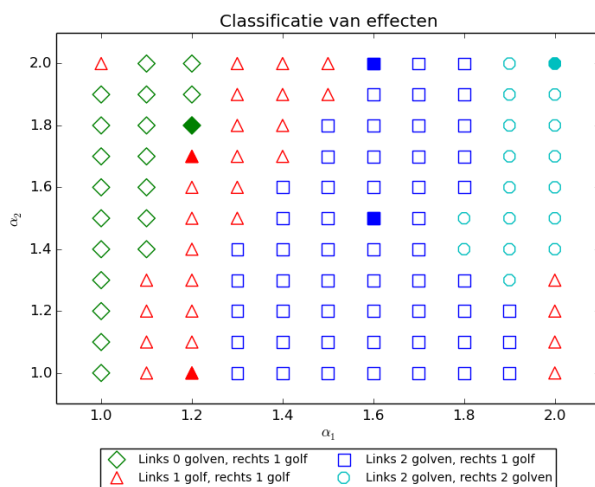
Rode driehoeken. Hier blijven zowel de linkergolf als de rechtergolf wel in stand.

We bekijken eerst het grote gebied in het midden. Ondanks dat zowel de linker- als de rechtergolf hier in stand blijven, zijn ze niet helemaal van dezelfde vorm. De linkergolf is in veel gevallen tot $t \approx 200$ aanzienlijk lager dan de rechter. Op $t = 500$ hebben beide golven ongeveer dezelfde hoogte. De dip van de linkergolf bij $t \lesssim 200$ is een kenmerk van de asymmetrie van de linker-afgeleide. De golven blijven bij $\alpha_2 \lesssim 1.3$ min of meer op dezelfde plek, terwijl ze bij $\alpha_2 \gtrsim 1.6$ duidelijk meer naar rechts lopen. In sommige situaties ontstaat er links van de linkergolf ook nog een tweede linkergolf. Deze dooft daarna echter wel weer uit. Dit gebeurt onder andere bij $\alpha_1 = 1.5$, $\alpha_2 = 1.9$, en hierin zien we ook een overgang naar de blauwe vierkanten.

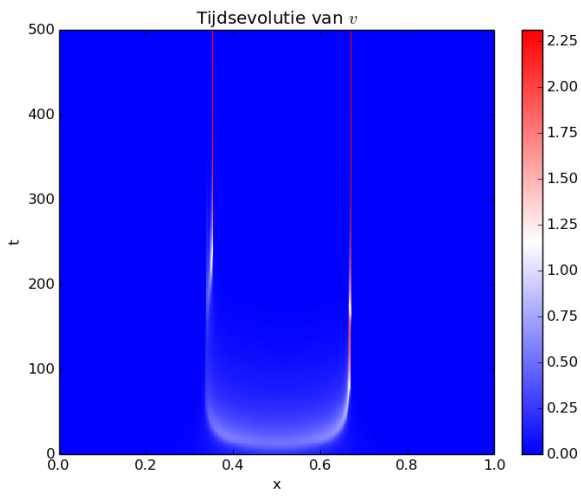
Er zijn naast het grote gebied ook nog twee losse gebieden met rode driehoeken. De eerste is één rode driehoek bij $\alpha_1 = 1.0$, $\alpha_2 = 2.0$. Hier ontstaan ook twee golven, de rechter is echter wel hoger en loopt iets sneller dan de linker. Ook loop de rechtergolf naar rechts, en de linkergolf naar links, in tegenstelling tot de rest. Rond $\alpha_1 = 2.0$ en $\alpha_2 = 1.0$ zijn ook vier rode driehoeken te zien. Deze resultaten komen kwalitatief nog het meest overeen met de situatie op $\alpha_1 = 1.1$, $\alpha_2 = 1.0$, maar dan zonder dip in de linkergolf. De linker- en rechtergolf blijven na $t = 100$ op dezelfde plek, en splitsen niet verder, in ieder geval niet tot $t = 500$.

Blauwe vierkanten. Dit is met 55 van de 121 bezettingen duidelijk het grootste gebied in het figuur. Hier blijft de rechtergolf, net als hiervoor, gewoon in stand, terwijl de linkergolf splitst in twee golven. Deze tweede splitsing gebeurt overal net voor $t = 200$, waarna de uiterst linker golf ook hier in veel gevallen eerst iets lager is, om daarna in hoogte toe te nemen. Net als hiervoor blijven de golven bij $\alpha_2 \lesssim 1.4$ ongeveer op dezelfde plaats, en bewegen ze bij $\alpha_2 \gtrsim 1.6$ duidelijker naar rechts. De uiterst linker golf beweegt in sommige gevallen naar links in plaats van rechts, met name bij $\alpha_1 \gtrsim 1.7$, $\alpha_2 \gtrsim 1.6$.

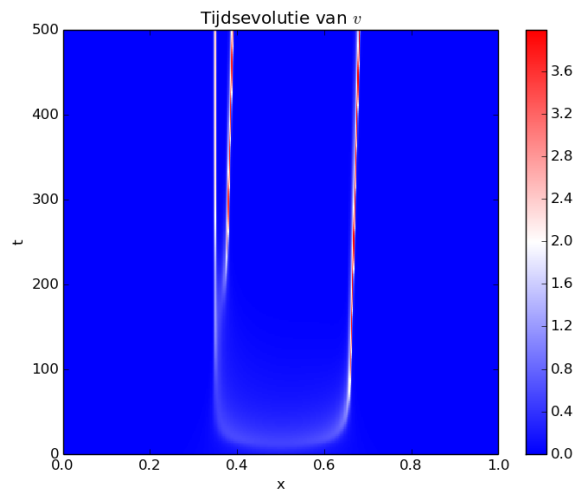
Cyaankleurige cirkels. Hier hebben de resultaten ongeveer dezelfde vorm als bij $\alpha_1 = \alpha_2 = 2.0$. Net voor $t = 200$ splitsen zowel de linker- als rechtergolf beide in twee golven, resulterend in vier golven. Hiervan lopen er twee naar links, en twee naar rechts. In dit gebied hebben de binnenste twee golven na $t = 200$ een kleine dip, in plaats van de uiterst linkergolf zoals in het blauwe-vierkanten gebied.



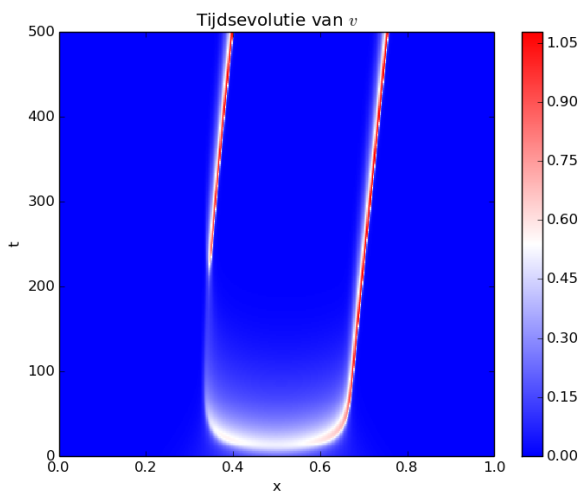
Figuur 22: Classificatie van de effecten die ontstaan in het fractionele Gray-Scott model. De classificatie is gebaseerd op de vorm van u en v op $T = 500$. De berekeningen zijn gedaan met de impliciete L^2 -methode, met $\Delta_x = 1/400$ en $\Delta_t = 0.01$. Van de ingekleurde iconen zijn extra afbeeldingen beschikbaar in figuur 23.



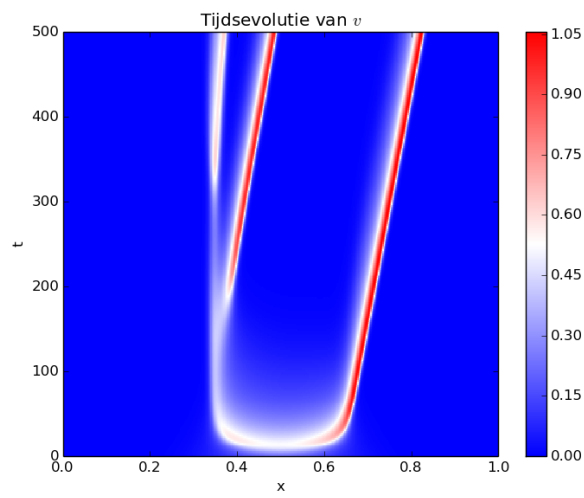
(a) $\alpha_1 = 1.2, \alpha_2 = 1.0$



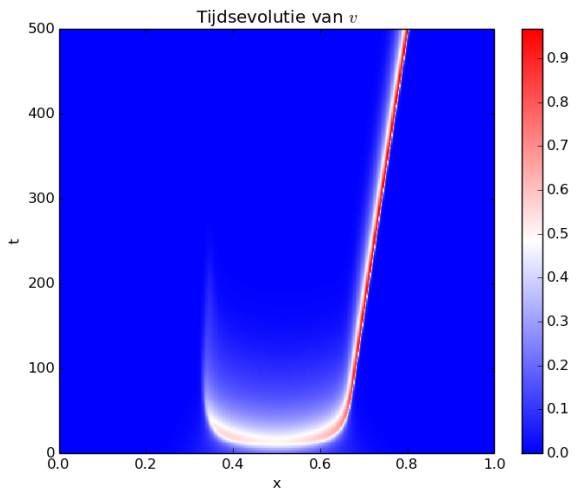
(b) $\alpha_1 = 1.6, \alpha_2 = 1.5$



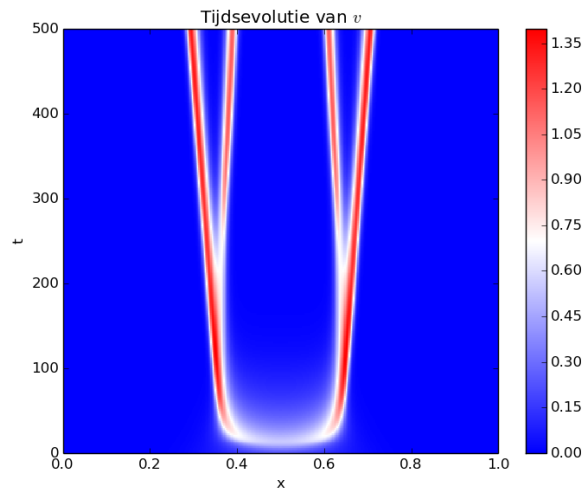
(c) $\alpha_1 = 1.2, \alpha_2 = 1.7$



(d) $\alpha_1 = 1.6, \alpha_2 = 2.0$



(e) $\alpha_1 = 1.2, \alpha_2 = 1.8$



(f) $\alpha_1 = 2.0, \alpha_2 = 2.0$

Figuur 23: Tijdsevolutie van v voor verschillende α_1 en α_2 . Zie ook figuur 22.

9 Conclusie

Terwijl er bijna geen verwarring bestaat over de definitie van geheeltallige afgeleiden, is er bij fractionele afgeleiden niet een eenduidige definitie aan te wijzen. We hebben hier de Riemann-Liouville, Grünwald-Letnikov en Caputo fractionele afgeleiden gezien, en ook wanneer deze precies gelijk zijn aan elkaar. Er zijn echter nog meer fractionele afgeleiden te definiëren, ieder met zijn eigen plus- en minpunten. Een samenvatting van ook enkele van deze andere methodes is te vinden in een andere scriptie, [10].

We hebben gezien dat de op L2 en L2C gebaseerde schema's goed werken voor het benaderen van fractionele afgeleiden, en dat ze ook goed te gebruiken zijn voor het benaderen van de oplossingen van partiële differentiaalvergelijkingen. We hebben ook gezien dat het relatief eenvoudig mogelijk is om semi-impliciete schema's te gebruiken bij het benaderen van fractionele differentiaalvergelijkingen.

Helaas hebben we wel moeten concluderen dat artikel [6] niet altijd even duidelijk is in het vermelden van gebruikte waarden voor de parameters, waardoor niet alle resultaten te controleren waren. De meeste resultaten kloppen kwalitatief wel, maar bijvoorbeeld de stabiliteits-eis in dat artikel blijkt strenger te moeten zijn dan dat daar aangegeven wordt.

We hebben ook gezien dat het Gray-Scott model opmerkelijke resultaten levert voor $\alpha_{1,2} \in [1, 2]$. Waar het Gray-Scott model voor $\alpha_{1,2} = 2$ symmetrische resultaten oplevert, is dit voor $\alpha_{1,2} < 2$ niet het geval: de linkergolf vertoont vaak heel ander gedrag dan de rechtergolf.

Deel III

Appendix

10 Uitwerkingen

10.1 Nauwkeurigheid van afgeleide-benaderingen uitgewerkt

We geven hier de uitwerking van de nauwkeurigheid van enkele discretisaties van gehele afgeleiden die volgen uit de L2- en L2C-methoden. Deze worden elders in de tekst gebruikt, maar de uitwerking is te groot om daar te behandelen. Aangezien de meeste resultaten hieronder redelijk bekend zijn, zou de Appendix de beste plaats zijn om deze uitwerkingen te plaatsen.

Niet-centrale eerste afgeleide:

$$\begin{aligned}\frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{\Delta_x} &= \frac{u(x_i) + \Delta_x u'(x_i) + \frac{1}{2} \Delta_x^2 u''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^3) - u(x_i)}{\Delta_x} \\ &= u'(x_i) + \frac{1}{2} \Delta_x u''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^2)\end{aligned}\quad (68)$$

Centrale tweede afgeleide:

$$\begin{aligned}\frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{\Delta_x^2} &= \frac{1}{\Delta_x^2} \left(u(x_i) + \Delta_x u'(x_i) + \frac{1}{2} \Delta_x^2 u''(x_i) + \frac{1}{6} \Delta_x^3 u'''(x_i) + \frac{1}{24} \Delta_x^4 u''''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^5) \right. \\ &\quad \left. + u(x_i) - \Delta_x u'(x_i) + \frac{1}{2} \Delta_x^2 u''(x_i) - \frac{1}{6} \Delta_x^3 u'''(x_i) + \frac{1}{24} \Delta_x^4 u''''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^5) \right. \\ &\quad \left. - 2u(x_i) \right) \\ &= u''(x_i) + \frac{1}{12} \Delta_x^2 u''''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^3)\end{aligned}$$

Centrale eerste afgeleide:

$$\begin{aligned}\frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2\Delta_x} &= \frac{1}{2\Delta_x} \left(u(x_i) + \Delta_x u'(x_i) + \frac{1}{2} \Delta_x^2 u''(x_i) + \frac{1}{6} \Delta_x^3 u'''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^4) \right. \\ &\quad \left. - (u(x_i) - \Delta_x u'(x_i) + \frac{1}{2} \Delta_x^2 u''(x_i) - \frac{1}{6} \Delta_x^3 u'''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^4)) \right) \\ &= u'(x_i) + \frac{1}{6} \Delta_x^2 u'''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^4)\end{aligned}$$

Niet-centrale tweede afgeleide:

$$\begin{aligned}\frac{u(x_{i+1}) - u(x_i) - u(x_{i-1}) + u(x_{i-2}))}{2\Delta_x^2} &= \frac{1}{2\Delta_x^2} \left(u(x_i) + \Delta_x u'(x_i) + \frac{1}{2} \Delta_x^2 u''(x_i) + \frac{1}{6} \Delta_x^3 u'''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^4) \right. \\ &\quad \left. - u(x_i) \right. \\ &\quad \left. - (u(x_i) - \Delta_x u'(x_i) + \frac{1}{2} \Delta_x^2 u''(x_i) - \frac{1}{6} \Delta_x^3 u'''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^4)) \right. \\ &\quad \left. + (u(x_i) - 2\Delta_x u'(x_i) + 2\Delta_x^2 u''(x_i) - \frac{4}{3} \Delta_x^3 u'''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^4)) \right. \\ &\quad \left. \right) \\ &= u''(x_i) - \Delta_x u'''(x_i) + \mathcal{O}(\Delta_x^4)\end{aligned}$$

11 Berekeningen in *Julia*

Bij het doorrekenen van de modellen die hiervoor zijn besproken, is gebruik gemaakt van de relatief jonge programmeertaal *Julia*. Deze taal is in C/C++, Scheme en in Julia zelf geschreven, en nadert (naar hun eigen zeggen) de snelheid van C programma's. De syntaxis van Julia-code is te vergelijken met die van Matlab, met hier en daar enkele kenmerkende verschillen. Het is in Julia ook mogelijk om code uit C en Fortran aan te roepen, en met een extra pakket is het ook mogelijk om Python code aan te roepen. Julia bevat geen functies om grafieken te maken, maar de python-pakket PyPlot biedt deze functionaliteit wel. Julia beschikt over een type-systeem, en het is mogelijk om gelijkende functies voor verschillende typen dezelfde naam te geven door middel van Multiple Dispatch. Het starten van een berekening geschiedt door de volgende stappen uit te voeren:

1. In een shell in de code-map `julia` uitvoeren, dit opent een interactieve julia-shell.
2. De julia-code van het project laden, in dit geval `include("fractDeriv.jl")`. De eerste keer duurt het laden vrij lang door het moeten laden van de toegevoegde pakketten (zoals PyPlot), maar na de eerste keer worden deze standaard overgeslagen waardoor het laden in een fractie van een seconde gebeurt.
3. Aanroepen van de gewenste berekening. Voor dit project is dit veelal `fractDeriv()` of `fractGrayScott()`.

Julia beschikt over een JIT-systeem, dat de benodigde functies compileert net voordat ze nodig zijn. De gecompileerde code wordt daarna bewaard voor later hergebruik. Julia beschikt ook over een functie `code_native()` waarmee de gecompileerde Assembly-code van een functie bekeken kan worden, om te kijken wat de computer precies uitvoert als de functie aangeroepen wordt.

11.1 Voor- en nadelen van Julia

Er zijn enkele voor- en nadelen verbonden aan het gebruik van Julia, hieronder staan er enkele op een rijtje.

Voordelen

- Als de code goed opgezet is, kunnen alle instellingen in de interactieve shell aangegeven worden. Hieronder vallen dus parameters als Δ_x , Δ_t , T en α , maar ook bijvoorbeeld het beginwaardeprobleem (Fisher, Gray-Scott) en de discretisatie-methode (L2, L2C, Grünwald-Letnikov, maar ook impliciet/-expliciet). Een opdracht kan er bijvoorbeeld als volgt uit zien:

```
res_u, res_v = fractGrayScott(dx=0.001, dt=0.01, bwp=GrayScott(a1=1.9, a2=1.1),  
disc1=L2("im"), disc2=L2("im"), imgX=500, imgT=250);
```

Dit is waarschijnlijk afgekeken van de programmeertaal Python.

- Julia is inderdaad snel. Bij enkele vergelijkingen met Matlab- en Octave-code kwam Julia als overduidelijke winnaar uit de bus. Merk echter op dat hieruit nog geen algemeen oordeel gemaakt kan worden. Enkele andere vergelijkingen zijn op de website [1] te vinden, al zijn er wel personen die ook deze vergelijkingen niet representatief vinden.
- Het is gratis te gebruiken, en draait op vrijwel alle besturingssystemen.

Nadelen

- Het installeren van Julia vergt enige moeite. Op Ubuntu gaat dat nog redelijk gemakkelijk door gebruik te maken van een pakketbeheer-programma, maar op Windows is het aanzienlijk lastiger.

- Julia is een vrij nieuwe taal, dus er is nog relatief weinig documentatie op internet te vinden. De nodige documentatie is er wel, maar als je iets specifiek zoekt zul je zelf op onderzoek uit moeten. Hieronder valt bijvoorbeeld het tekenen van de stabiliteitscirkel in figuren 5 en 6.
- De berekeningen zijn snel, maar het (eenmalig) inladen van extra pakketten is langzaam.

Referenties

- [1] Website van de programmeertaal julia. <http://julialang.org/>.
- [2] Wikipedia pagina over lévy flights. http://en.wikipedia.org/wiki/L%C3%A9vy_flight.
- [3] D. del Castillo-Negrete. Front propagation in reaction-diffusion systems with anomalous diffusion. *arXiv*, 1409.3132, Sep 2014.
- [4] D. del Castillo-Negrete, B. A. Carreras, and Vickie E. Lynch. Front dynamics in reaction-diffusion systems with levy flights: A fractional diffusion approach. *Physical Review Letters*, 91(1):018302–1 – 018302–4, Jul 2003. Two versions available.
- [5] Eugene Isaacson and Herbert Bishop Keller. *Analysis of numerical methods*. Dover publications, inc., New York, dover edition edition, 1994. pp.135–136.
- [6] V.E. Lynch, B.A. Carreras, D. del Castillo-Negrete, K.M. Ferreira-Mejias, and H.R. Hicks. Numerical methods for the solution of partial differential equations of fractional order. *Journal of Computational Physics*, 192:406–421, Jul 2003.
- [7] Mark M Meerschaert and Charles Tadjeran. Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 172:65–77, 2004.
- [8] Mark M Meerschaert and Charles Tadjeran. Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations. *Applied Numerical Mathematics*, 56:80–90, 2006.
- [9] I. Podlubny. *Fractional Differential Equations*, volume 198. Academic Press, 1999.
- [10] Daniëlle Remmelzwaan. De wonderlijke wereld van de gebroken afgeleide. Bachelorscriptie, Jul 2008.
- [11] Daniël Rutten. An introduction to fractional calculus. Bachelorscriptie, Jan 2011.
- [12] S. Shen and F. Liu. Error analysis of an explicit finite difference approximation for the space fractional diffusion equation with insulated ends. *ANZIAM J.*, 46:C871–C887, Jun 2005.
- [13] M. van Oort. Code gebruikt bij bachelorscriptie. <https://github.com/marcovo/bachelorscriptie>, Jan 2015.
- [14] Marcus Webb. Fractional calculus: differentiation and integration of non-integer order. Presentatie, May 2012.
- [15] Paul Zegeling. Fractional des:intro, properties and numerical approximations. Presentatie.