VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV MATEMATIKY

INSTITUTE OF MATHEMATICS

NUMERICKÉ METODY ŘEŠENÍ DIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC NECELOČÍSELNÉHO ŘÁDU

NUMERICAL METHODS OF SOLVING FRACTIONAL DIFFERENTIAL EQUATIONS

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE — Adam Kyjovský

AUTHOR

VEDOUCÍ PRÁCE — doc. Ing. Luděk Nechvátal, Ph.D.

SUPERVISOR

BRNO 2018

Zadání bakalářské práce

Ústav:	Ústav matematiky
Student:	**Adam Kyjovský**
Studijní program:	Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor:	Matematické inženýrství
Vedoucí práce:	**doc. Ing. Luděk Nechvátal, Ph.D.**
Akademický rok:	2017/18

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma bakalářské práce:

Numerické metody řešení diferenciálních rovnic neceločíselného řádu

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Teorie diferenciálních rovnic neceločíselného řádu se v průběhu posledních desetiletí stala dobře etablovanou matematickou disciplínou. Tento stav je do značné míry podpořen technickou praxí, neboť se ukázalo, že mnohé reálné úlohy lze rovnicemi obsahujícími neceločíselné derivace modelovat lépe. Na druhé straně však lze očekávat, že analytické řešení takových rovnic bude obecně ještě obtížnější než v případě klasických rovnic celočíselného řádu, a důležitou roli tedy hrají numerické metody.

Cíle bakalářské práce:

Teoretická (rešeršní část):
1) Základy teorie diferenciálních rovnic neceločíselného řádu (existence a jednoznačnost řešení počáteční úlohy s Caputovou derivací);
2) Přehled numerických metod pro řešení počátečních úloh s Caputovou derivací.

Praktická část:
1) Implementace vybraných metod v prostředí MATLAB;
2) Testovaní na modelových úlohách.

Seznam doporučené literatury:

DEITHELM, K. The Analysis of Fractional Differential Equations, An Application-Oriented Exposition Using Differential Operators of Caputo Type. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010. ISBN 978--642-14574-2.

GARRAPPA, R. Trapezoidal methods for fractional differential equations: Theoretical and computational aspects. Math. Comput. Simul. 2015, 110, 96-112.

LUBICH, C. Discretized fractional calculus. SIAM J. Math. Anal. 1986, 17, 704-719.

PODLUBNÝ, I. Fractional Differential Equations. Academic Press Inc., San Diego, CA, 1999. ISBN 978-0125588409.

Termín odevzdání bakalářské práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2017/18

V Brně, dne

L. S.

prof. RNDr. Josef Šlapal, CSc.
ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
děkan fakulty

Abstrakt

Bakalářská práce se zabývá numerickými metodami řešení diferenciálních rovnic neceločíselného řádu. Jsou uvedeny některé základní pojmy zlomkového kalkulu a výsledky teorie zlomkových diferenciálních rovnic, jako jsou existence a jednoznačnost řešení počáteční úlohy s Caputovou derivací. Dále je uveden přehled vybraných numerických metod pro řešení takových počátečních úloh. Tyto metody jsou testovány a porovnány na modelové úloze.

Abstract

This bachelor's thesis deals with numerical methods of solving fractional differential equations. Some fundamental notions of fractional calculus and basic results from the theory of fractional differential equations (such as existence and uniqueness of the solution to an initial value problem with the Caputo derivative) are presented. Further, a summary of selected numerical methods for solving such initial value problems is presented. These methods are tested and compared on a model problem.

klíčová slova

zlomkový kalkulus, diferenciální rovnice, numerické metody

keywords

fractional calculus, fractional differential equations, numerical methods

Kyjovský, A.: *Numerické metody řešení diferenciálních rovnic neceločíselného řádu*, Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2018. 30 s. Vedoucí bakalářské práce doc. Ing. Luděk Nechvátal, Ph.D.

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci *Numerické metody řešení diferenciálních rovnic neceločíselného řádu* vypracoval samostatně pod vedením doc. Ing. Luďka Nechvátala, Ph.D. s použitím materiálů uvedených v seznamu literatury.

Adam Kyjovský

Rád bych poděkoval svému školiteli doc. Ing. Luďku Nechvátalovi, Ph.D. za cenné rady, věcné připomínky, vstřícnost a ochotu u konzultací při zpracování této práce.

Adam Kyjovský

Obsah

Úvod

Tato práce je zaměřena na numerické řešení úloh z oblasti matematiky zvané zlomkový kalkulus, tedy diferenciální a integrální počet s neceločíselnými řády. Dá se říci, že problematika je zhruba stejně stará jako klasický diferenciální a integrální počet, neboť zmínky o tomto odvětví matematiky pochází z konce 17. století, kdy G. W. Leibniz v dopise G. l'Hospitalovi představil symbol pro zapisování n-tých derivací: $\frac{d^n}{dx^n}f$. Na to l'Hospital v dopise odpovídá mimo jiné i dotazem, co tento symbol znamená, když $n = \frac{1}{2}$. To Leibniz nedokázal zodpovědět a považoval to za paradox. Tento dopis je obecně považován jako první zmínka o zlomkové derivaci kvůli $n = \frac{1}{2}$, dnes se již dobře ví, že není důvod omezovat se pouze na čísla racionální (dokonce se ukazuje, že i komplexní řády mají své opodstatnění), nicméně pojmenování z historických důvodů zůstalo stejné.

Mnoho inženýrských i jiných aplikací vede na problémy s rovnicemi neceločíselného řádu. Například v mechanice modelování viskoelastických a viskoplastických látek, v chemii modelování polymerů a proteinů, v elektronickém inženýrství přenos ultrazvukových vln a v neposlední řadě i v medicíně modelování lidské tkáně pod externím napětím.

Dnes existuje mnoho přístupů k zobecnění diferenciálního a integrálního počtu na neceločíselné řády. Mezi nejznámější přístupy k takovým zobecněním patří Riemannova–Liouvilleova derivace a Caputova derivace. První ze zmíněných konceptů je historicky starší a matematicky dobře ucelená teorie, avšak u praktických úloh velmi obtížně aplikovatelná. Zejména z toho důvodu, že diferenciální rovnice vyžadují počáteční podmínky neceločíselného řádu. Tento problém překonává Caputův přístup, který je jistou modifikací Riemannova–Liouvilleova přístupu.

Tato bakalářská práce se věnuje některým moderním numerickým metodám pro řešení počátečních úloh s Caputovou derivací, které využívají analytické vlastnosti pro ekvivalentní převod na integrální rovnici. To se ukazuje být výhodnější z hlediska efektivnosti odvozených numerických metod.

Práce je rozčleněna do šesti kapitol. V první kapitole uvedeme některé potřebné pojmy nutné pro dále uvedené definice a věty. V kapitole druhé jsou uvedeny konkrétní přístupy k definování zlomkových derivací a integrálů. Třetí kapitola se věnuje diferenciálním rovnicím s Caputovou derivací, je zde popsána existence a jednoznačnost řešení těchto rovnic. Ve čtvrté kapitole jsou uvedeny numerické metody, jejich odvození a některé jejich vlastnosti. Kapitola pátá popisuje stabilitu uvedených numerických metod a šestá se věnuje numerickým experimentům.

Práce čerpá převážně z monografií [1], [6] a článků [2], [3] a [5]. Veškeré důkazy k uvedeným tvrzením je možné v této literatuře dohledat.

1 Přehled potřebných pojmů

Před samotným definováním neceločíselných derivací a integrálů uveďme prostory funkcí, které budeme využívat.

Symbolem $C(\langle a,b\rangle)$ označíme množinu všech spojitých funkcí definovaných na uzavřeném intervalu $\langle a,b\rangle$.

Vedle spojitosti budeme potřebovat ještě silnější typ spojitosti na intervalu, uveďme proto její definici.

Definice 1.1. Funkci f nazveme *aboslutně spojitou* na intervalu $\langle a,b\rangle$, jestliže pro všechna $\varepsilon > 0$ existuje $\delta > 0$ takové, že pro každý systém intervalů $\langle a_1,b_1\rangle, \langle a_2,b_2\rangle, \ldots, \langle a_n,b_n\rangle$, v němž $a \le a_1 \le b_1 \le a_2 \le b_2 \le \ldots a_n \le b_n \le b$, a $\sum_{i=1}^{n}(a_i - b_i) < \delta$ platí

$$\sum_{i=1}^{n} |f(b_i) - f(a_i)| < \varepsilon.$$

Množinu všech absolutně spojitých funkcí na uzavřeném intervalu budeme pak značit $AC(\langle a,b\rangle)$.

Nechť f je absolutně spojitá funkce na $\langle a,b\rangle$. Potom f má derivaci skoro všude a platí

$$f(x) = f(a) + \int_a^x f'(t)dt \quad \forall x \in \langle a,b\rangle .$$

Symbolem $AC^n(\langle a,b\rangle)$ pak označíme množinu funkcí, kde libovolná f má spojité derivace na $\langle a,b\rangle$ až do řádu $(n-1)$ a $f^{(n-1)} \in AC$.

Množinu Lebesgueovsky integrovatelných funkcí budeme značit $L^p(\langle a,b\rangle)$. Tedy f je meřitelná a norma $\|f\|_p = \int_a^b |f|^p dx < \infty$.

Nyní uveďme některé vyšší transcendentní funkce, které hrají ve zlomkovém kalkulu významnou roli.

Definice 1.2 (Gama funkce)**.** Zobrazení $\Gamma : (0,\infty) \to \mathbb{R}$, definováné předpisem

$$\Gamma(z) := \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}dt, \quad \mathrm{Re}(z) > 0, \tag{1.1}$$

se nazývá Gama funkce.

Důležitou vlastností této funkce je

$$\Gamma(z+1) = \Gamma(z)z,$$

odtud plyne spolu s $\Gamma(1) = 1$ faktoriálová vlastnost

$$\Gamma(n) = (n-1)! \qquad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Definice 1.3. Funkce definovaná předpisem

$$E_\alpha(z) := \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z^j}{\Gamma(j\alpha+1)}, \quad \alpha > 0,$$

se nazývá jednoparametrická Mittag-Lefflerova funkce. Dále funkce definovaná

$$E_{\alpha,\beta}(z) := \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z^j}{\Gamma(j\alpha+\beta)}, \quad \alpha > 0, \beta > 0,$$

se nazývá Mittag-Lefflerova funkce dvou parametrů.

2 Derivace a integrály neceločíselného řádu

Hlavní myšlenka zlomkového kalkulu je úzce spjata s klasickým diferenciálním a integrálním počtem, jehož důležitým výsledkem je základní věta integrálního počtu. Tato věta ukazuje vztah mezi derivacemi a integrály.

Věta 2.1. (Základní věta integrálního počtu) *Nechť $f : \langle a, b\rangle \to \mathbb{R}$ je spojitá a $F : \langle a, b\rangle \to \mathbb{R}$ definovaná*

$$F(x) := \int_a^x f(t)dt.$$

Potom F je diferencovatelná na $\langle a, b\rangle$ a platí zde

$$F' = f.$$

Jedním z cílů zlomkového kalkulu je v jistém smyslu zachování této vlastnosti. Pro přehlednost zavedeme derivování a integrování funkcí v klasickém smyslu jako operátory

$$Df := f',$$

kde f je diferencovatelná funkce a

$$I_a f(x) := \int_a^x f(t)dt \qquad \text{pro } a < x < b,$$

kde f je riemannovsky integrovatelná na $\langle a, b\rangle$. Násobné derivování a integrování potom označíme jako D^n a I_a^n pro $n \in \mathbb{N}$, tj. $D^1 := D$, $I_a^1 := I_a$, $D^n := DD^{n-1}$ a $I_a^n := I_a I_a^{n-1}$ pro $n \geq 2$.

Když vyjádříme tvrzení věty 2.1 pomocí operátorové notace, dostaneme

$$DI_a f = f.$$

To pro $n \in \mathbb{N}$ implikuje

$$D^n I_a^n f = f.$$

V následujících podkapitolách uvedeme přístupy pro případ $n \notin \mathbb{N}$. Nyní uveďme dvě lemmata, která hrají důležitou roli v těchto neceločíselných zobecněních. Prvním je Cauchyho vzorec pro opakované integrování.

Lemma 2.2. *Nechť f je riemannovsky integrovatelná na $\langle a, b\rangle$. Potom pro $a < x < b$ a $n \in \mathbb{N}$ platí*

$$I_a^n f(x) = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-t)^{n-1} f(t)dt.$$

Další lemma je důsledkem věty 2.1.

Lemma 2.3. *Nechť $m, n \in \mathbb{N}$ jsou taková, že $m > n$. Dále nechť f je funkce se spojitou n-tou derivací na $\langle a, b\rangle$. Potom platí*

$$D^n f = D^m I_a^{m-n} f.$$

Důkaz. Z věty 2.1 $D^{m-n} I_a^{m-n} f = f$. Na obě strany použijeme operátor D^n. Dostáváme $D^n D^{m-n} I_a^{m-n} f = D^n f$, kde $D^n D^{m-n} = D^m$. □

2.1 Riemannovy–Liouvilleovy operátory

Výchozí vztah pro následující definici je Cauchyho vzorec pro opakované integrování. V tomto vztahu se však vyskytuje faktoriál, který nemá smysl pro $n \notin \mathbb{N}$. Ten ale můžeme nahradit gamma funkcí, která je jeho zobecněním.

Definice 2.4 (Riemannův–Liouvilleův integrál)**.** Nechť $\alpha \in \mathbb{R}^+$ a $a < x < b$. Potom výraz

$$I_a^\alpha f(t) := \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} f(t) dt$$

nazveme Riemannovým–Liouvilleovým integrálem (dále jen RL integrál) řádu α.

Poznamenejme, že $I_a^\alpha f$ má smysl, jestliže $f \in L^1(\langle a, b \rangle)$.

Výchozím vztahem pro následující definici je lemma 2.3.

Definice 2.5 (Riemannova–Liouvilleova derivace)**.** Nechť $m = \lceil \alpha \rceil$ a $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{N}$. Potom výraz

$$D_a^\alpha f(t) := D^m I_a^{m-\alpha} f(t), \qquad a \leq t \leq b$$

nazveme Riemannovou–Liouvilleovou derivací (dále jen RL derivací) řádu α. Symbolem $\lceil \alpha \rceil$ zde rozumíme horní celou část čísla α, tj.

$$\lceil \alpha \rceil = \min\{n \in \mathbb{Z} \mid n \geq \alpha\}.$$

Poznamenejme, že RL derivace existuje, jestliže $f \in AC^m(\langle a, b \rangle)$.

2.2 Caputův diferenciální operátor

Definice 2.6 (Caputova derivace)**.** Nechť $n = \lceil \alpha \rceil, \alpha \notin \mathbb{N}$ a $a \in \mathbb{R}$. Potom Caputova derivace je definována

$${}^C D_a^\alpha f(t) := D_a^\alpha \left[f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (t-a)^k \right],$$

kde D_a^α je operátor RL derivace.

Věta 2.7. *Nechť* $\mathrm{Re}(\alpha) \geq 0$ *a* $n = \lceil \alpha \rceil$. *Jestliže* $f \in AC^m(\langle a, b \rangle)$, *potom* ${}^C D_a^\alpha f$ *existuje skoro všude na* $\langle a, b \rangle$. *Za předpokladu* $\alpha \notin \mathbb{N}$, ${}^C D_a^\alpha f(t)$ *může být zapsáno ve tvaru*

$${}^C D_a^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^x (x-t)^{n-\alpha-1} y^{(n)} dt = I_a^{n-\alpha} D^n f(t).$$

3 Diferenciální rovnice neceločíselného řádu s jednou Caputovou derivací

Jak již bylo naznačeno v úvodu, budeme se věnovat pouze rovnicím, kde se vyskytuje Caputův diferenciální operátor a to zejména kvůli jeho výhodě v předepisování počátečních podmínek. Máme-li rovnici s Caputovou derivací, která je α-tého řádu, $\alpha \notin \mathbb{N}$, její podmínky jsou ve tvaru

$$D^k x(t_0) = x_a^{(k)}, \quad k = 0, 1, \ldots, m-1, \quad m = \lceil \alpha \rceil.$$

Naproti tomu diferenciální rovnice s RL derivací vyžadují podmínky v tvaru neceločíselném, což je z hlediska aplikovatelnosti v praxi problém. Kdybychom chtěli změřit hodnoty počátečních podmínek, většinou bychom nevěděli jak zlomkovou derivaci interpretovat. Oproti tomu např. první nebo druhá derivace (např. polohy v čase: rychlost a zrychlení) jsou dobře měřitelné.

3.1 Existence a jednoznačnost řešení

Zabývejme se nyní otázkou řešitelnosti diferenciálních rovnic obsahujících neceločíselnou derivaci (v našem případě Caputovou). Uvažujme tedy následující počáteční úlohu (umístěnou do $t = 0$)

$$^{C}D_0^{\alpha} x(t) = f(t, x(t)) \tag{3.1}$$

s podmínkami

$$D^k x(0) = x_0^{(k)}, \quad k = 0, 1, \ldots, m-1; \quad m = \lceil \alpha \rceil. \tag{3.2}$$

Věta 3.1. *Nechť $\alpha > 0$ a $m = \lceil \alpha \rceil$. Dále nechť $x_0^{(0)}, \ldots, x_0^{(m-1)} \in \mathbb{R}, K > 0$ a $h^* > 0$. Definujeme $G := \{(t, x) : t \in \langle 0, h^* \rangle, |x - \sum_{k=0}^{m-1} t^k x_0^{(k)}/k!| \leq K\}$ a nechť funkce $f : G \to \mathbb{R}$ je spojitá. Dále definujeme $M := \sup_{(t,x) \in G} |f(t, x)|$ a*

$$h := \begin{cases} h^* & \textit{jestliže } M = 0, \\ \min\{h^*, (K\Gamma(n+1)/M)^{1/n}\} & \textit{jinak.} \end{cases}$$

Potom existuje funkce $x \in C(\langle 0, h \rangle)$, která je řešením počáteční úlohy (3.1), (3.2).

Lemma 3.2. *Za předpokladů věty* 3.1 *je funkce $x \in C(\langle 0, h \rangle)$ řešením počáteční úlohy* (3.1), (3.2) *právě tehdy, když je řešením (obecně nelineární) Volterrovy integrální rovnice druhého druhu, která je tvaru*

$$x(t) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k}{k!} x_0^{(k)} + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t - \tau)^{n-1} f(\tau, x(\tau)) d\tau. \tag{3.3}$$

Věta 3.3. *Nechť $\alpha > 0$ a $m = \lceil n \rceil$. Dále nechť $x_0^{(0)}, \ldots, x_0^{(m-1)} \in \mathbb{R}, K > 0$ a $h^* > 0$. Definujme množinu G stejně jako ve větě* 3.1*, dále nechť funkce $f : G \to \mathbb{R}$ je spojitá a splňuje lipschitzovskou podmínku vzhledem k druhé proměnné, tj.*

$$|f(t, x_1) - f(t, x_2)| \leq L|x_1 - x_2|$$

s konstantou $L > 0$ nezávislou na t, x_1 a x_2. Nechť h je definováno stejně jako ve Větě 3.1*. Pak existuje jediná funkce $x \in C(\langle 0, h \rangle)$, která je řešením počáteční úlohy* (3.1), (3.2).

4 Numerické řešení

V této kapitole uvedeme konkrétní numerické metody pro řešení počáteční úlohy (věnujeme se pouze úlohám s jednou Caputovou derivací), včetně některých jejich vlastností a odvození.

Numerickým řešením počáteční úlohy rozumíme určení přibližných funkčních hodnot hledané funkce x v uzlových bodech získaných dělením intervalu $\langle a, b\rangle$. Mějme tedy takové *dělení* intervalu $a = 0 < t_1 < \cdots < t_N = b$. Body t_n, $n = 0, 1, \ldots, N$ nazýváme *uzlové* body dělení a vzdálenost $h_n = t_n - t_{n-1}$ mezi sousedícími body je *délka* kroku. Přibližnou hodnotu (aproximaci) v uzlovém bodě t_n pak označme jako x_n. Zajímá-li nás přibližná hodnota řešení pro body z intervalu $\langle a, b\rangle$ různé od uzlových, můžeme je určit interpolací.

Numerickou metodou rozumíme předpis, pomocí kterého získáme numerické řešení $x_1, x_2, \ldots, x_N$ (x_0 je určena počáteční podmínkou). Jestliže předpis pro hodnotu x_{n+1} závisí na předchozích hodnotách $x_n, x_{n-1}, \ldots, x_{n-k+1}$ řekneme, že se jedná o metodu k-*krokovou.*

Řekneme, že numerická metoda je *konvergentní*, jestliže nám umožňuje získat libovolně přesné řešení (zmenšováním kroku). To jest $\|x_n - x(t_n)\| \to 0$ pro $h \to 0$.

Dalším důležitým pojmem je *stabilita* numerické metody. Zhruba řečeno, metoda je stabilní pokud dává kvalitativně stejně se chovající řešení jako původní diferenciální rovnice. Tato problematika bude podrobnějí rozebrána v kapitole 5.

Lokální diskretizační chyba je chyba, která se dopoustíme ve výpočtu x_{n+1} za předpokladu $x(t_n) = x_n$. Používá se pouze pro analýzu vlastností metody. Značí se lte_n (z angličtiny local truncation error). Nechť je dána numerická metoda

$$x_{n+k} = \Psi(t_{n+k}, x_n, x_{n+1}, \ldots, x_{n+k-1}, h).$$

Tato metoda má lokální diskretizační chybu

$$lte^h_{n+k} = \Psi(t_{n+k}, x_n, x_{n+1}, \ldots, x_{n+k-1}, h) - x(t_{n+k}).$$

Další vlastností numerických metod je konzistence. O metodě řekneme že je *konzistentní*, jestliže

$$\lim_{h\to 0} \frac{lte^h_{n+k}}{h} = 0.$$

Konzistence je nutnou podmínkou konvergence, ale ne postačující. Aby metoda byla konvergentní musí být konzistentní a stabilní.

Lokální chyba je chyba, které se skutečně dopustíme v reálném výpočtu při jednom kroku.

Globální chyba vyjadřuje kumulaci lokálních chyb na konci výpočtu. Je-li t_N poslední uzel intervalu a x_N numerická aproximace v tomto bodě, pak globální chybu můžeme vyjádřit jako $e_n = x(t_n) - x_n$ pro $n = 0, 1, \ldots, N$.

Asymptotické chování funkcí se popisuje pomocí tzv. Landauvoa symbolu O (v angličtině často jako Big O notation). Nechť funkce ϕ je definována na $(0, s^*\rangle$ a p je libovolné číslo. O funkci ϕ řekneme, že je řádu $O(s^p)$, jestliže existuje kladné číslo C (nezávislé na s), takové že pro všechna $s \in (0, s^*\rangle$ platí $|\phi(s)| \le Cs^p$. Píšeme pak $\phi(s) = O(s^p)$.

Obvykle chybu numerické metody můžeme vyjádřit pomocí symbolu O. Jestliže $|e_n| = |x(t_n) - x_n| \le Ch^p$ pak říkáme, že chyba metody je řádu $O(h^p)$. Jestliže $e_n \to 0$ pro $h \to 0$, pak numerické řešení získané konkrétní metodou konverguje k přesnému řešení. Číslo p nazveme *řádem konvergence.*

Numerické metody řešení zlomkových diferenciálních rovnic uváděné v této práci používají jako výchozí vztah pro odvození ekvivalentní integrální rovnici. V této integrální rovnici pak aproximují RL integrál ruznými způsoby. Některé historicky starší metody aproximují přímo člen se zlomkovou derivací v původní rovnici. Stručně a bez větších detailů uvedeme jednu z takových metod. Tou je aproximace Grünwaldovi–Letnikovovi derivace (dále GL derivace). Pro širokou skupinu funkcí je GL derivace ekvivalentní s RL derivací. Uveďme její definici

$$ {}_aD_t^\alpha f = \lim_{h\to 0} \frac{{}_a\Delta_h^\alpha f}{h^\alpha}, \quad {}_a\Delta_h^\alpha f(t) = \sum_{j=0}^{\lceil \frac{t-a}{h} \rceil} (-1)^j \binom{\alpha}{j} f(t-jh). $$

Aproximace je dána

$$ {}_aD_t^\alpha f \approx_a \Delta_h^\alpha f. $$

4.1 Zlomková metoda prediktor–korektor

Tato metoda se dá považovat za zobecnění klasické Adamsovy–Bashforthovy–Moultonovy metody pro řešení počátečních úloh prvního řádu. Vyjdeme z toho, že počáteční úloha (3.1), (3.2) je ekvivalentní Volterrově integrální rovnici druhého druhu ve smyslu, že funkce x je řešením počáteční úlohy tehdy a jenom tehdy, když je řešením Volterrovy integrální rovnice

$$ x(t) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k}{k!} x_0^{(k)} + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{\alpha-1} f(\tau, x(\tau)) d\tau. $$

Začneme tím, že stručně uvedeme klasickou metodu pro ODR1 a obdobným způsobem odvodíme algoritmus pro zlomkový případ. Uvažujme tedy nejprve rovnici prvního řádu s počáteční podmínkou

$$ \begin{aligned} x'(t) &= f(t, x(t)), \\ x(0) &= x_0. \end{aligned} \tag{4.1} $$

Funkci f uvažujeme takovou, aby existovalo jediné řešení na intervalu $\langle 0, T\rangle$. Při rovnoměrném dělení intervalu na N dílků jsou uzlové body dány $t_n = nh$, $n = 0, 1, 2, \dots$ kde krok $h = \frac{T}{N}$. Naším cílem je získat předpis pro numerické řešení x_{n+1}, když známe $x_n \approx x(t_n)$. Vyjdeme z integrace rovnice (4.1) přes interval $\langle t_n, t_{n+1}\rangle$:

$$ x(t_{n+1}) = x(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, x(t)) dt \tag{4.2} $$

Integrál na pravé straně rovnosti (4.2) nahrádíme lichoběžníkovou formulí pro výpočet integrálu. Získáme tak jeho aproximaci. Nyní můžeme nahradit $x(t_n)$ aproximací x_n

$$ x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2} \big[f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x_{n+1})) \big]. \tag{4.3} $$

Na pravé straně (4.3) neznáme hodnotu aproximace x_{n+1}, kterou se snažíme vypočítat. Proto tuto rovnici použijeme v iterativním smyslu, kdy do pravé strany dosadíme místo x_{n+1} předběžnou aproximaci $\tilde{x}_{n+1}$. Tuto předběžnou aproximaci, neboli prediktor, získáme opět z (4.2), ale s využitím obdélníkové formule s levým uzlovým bodem místo lichoběžníkové. Obdržíme

$$\tilde{x}_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n), \tag{4.4}$$

což je explicitní Eulerova metoda. Kombinací (4.3) a (4.4) dostaneme předpis

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}\big[f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, \tilde{x}_{n+1})\big]. \tag{4.5}$$

Dále je známo, že chyba této metody je

$$\max_{1 \le n \le N} |x(t_n) - x_n| = O(h^2).$$

Jedná se o metodu typu PECE (z angličtiny Predict, Evaluate, Correct, Evaluate. To znamená: předpovědět, vyhodnotit, opravit, vyhodnotit.) a to z důvodu konkrétní implementace. Nejdříve bychom začali počítat prediktor (4.4), potom vyčíslíme $f(t_{n+1}, \tilde{x}_{n+1})$, následně spočteme korektor (4.5) a vyčíslíme $f(t_{n+1}, x_{n+1})$. Hodnota je uložena a dále se iterační krok opakuje.

Obdobným způsobem odvodíme předpis pro neceločíselný řád rovnice. Výchozí rovnicí nyní bude (3.3). V bodě t_{n+1} dostáváme

$$x(t_{n+1}) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t_{n+1}^k}{k!} t_0^{(k)} + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^{t_{n+1}} (t_{n+1} - \tau)^{\alpha-1} f(\tau, x(\tau)) d\tau.$$

Suma před integrálem je určena počátečními podmínkami, tudíž zbývá aproximovat integrál a to provedeme následovně

$$\int_0^{t_{n+1}} (t_{n+1} - z)^{\alpha-1} g(z) dz \approx \int_0^{t_{n+1}} (t_{n+1} - z)^{\alpha-1} \tilde{g}_{n+1}(z) dz,$$

kde $\tilde{g}_{n+1}$ je lineární splajn aproximující funkci g. Použitím standartních metod lze integrál na pravé straně zapsat jako

$$\int_0^{t_{n+1}} (t_{n+1} - z)^{\alpha-1} \tilde{g}_{n+1}(z) dz = \frac{h^\alpha}{\alpha(\alpha+1)} \sum_{j=0}^{n+1} a_{j,n+1} g(t_j),$$

kde koeficienty v sumě jsou dány

$$a_{j,n+1} = \begin{cases} n^{\alpha+1} - (n-\alpha)(n+1)^\alpha & \text{jestliže } j = 0, \\ (n-j+2)^{\alpha+1} + (n-j)^{\alpha+1} - 2(n-j+1)^{\alpha+1} & \text{jestliže } 1 \le j \le n, \\ 1, & \text{jestliže } j = n+1. \end{cases}$$

Touto náhradou získáme předpis pro korektor zlomkového zobecnění

$$\begin{aligned} x_{n+1} = &\sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k}{k!} x_0^{(k)} + \frac{h^\alpha}{\Gamma(\alpha+2)} f(t_{n+1}, \tilde{x}_{n+1})) \\ &+ \frac{h^\alpha}{\Gamma(\alpha+2)} \sum_{j=0}^{n} a_{j,n+1} f(t_j, x_j). \end{aligned}$$

Tento zápis jsme si mohli dovolit s přihlédnutím k faktu, že $a_{n+1,n+1} = 1$ a dvojnásobné aplikace vlastnosti Gamma funkce $\Gamma(\alpha)\alpha = \Gamma(\alpha + 1)$.

Nyní se zaměříme na zbývající část a tou je odvození prediktoru, podobně jako v celočíselném případě zvolíme jednodušší náhradu integrálu. Integrál aproximujeme obdélníkovým pravidlem, tj. máme

$$\int_0^{t_{n+1}} (t_{n+1} - z)^{\alpha-1} \tilde{g}_{n+1}(z) dz \approx \sum_{j=0}^{n} b_{j,n+1} g(t_j),$$

kde koeficienty v sumě jsou dány

$$b_{j,n+1} = \frac{h^\alpha}{\alpha} \Big((n + 1 - j)^\alpha - (n - j)^\alpha \Big).$$

Potom predikovaná hodnota $\tilde{x}_{n+1}$ je určena

$$\tilde{x}_{n+1} = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^k}{k!} x_0^{(k)} + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{j=0}^{n} b_{j,n+1} f(t_j, \tilde{x}_j).$$

Numerická analýza v literatuře říká, že chyba této metody na intervalu $\langle 0, T\rangle$, při N krocích a délce kroku $h = T/N$ je

$$\max_{1 \le j \le N} |x(t_j) - x_j| = O(h^p),$$

kde

$$p = \min\{2, 1 + \alpha\}.$$

Lze ukázat, že důvodem takto zadané mocniny p je fakt, že p musí být minimem řádu korektoru a metody prediktoru plus řád diferenciálního operátoru α. V případě $\alpha = 1$ je $p = 2$, to si odpovídá s celočíselnou metodou uvedenou dříve. Tuto metodu budeme označovat jako αPECE.

4.2 Zlomkové lineární vícekrokové metody

Jiným přístupem k získání numerického řešení jsou zlomkové lineární vícekrokové metody (anglicky fractional linear multistep methods, zkráceně FLMM), které vychází z klasických lineárních vícekrokových metod. U těchto metod problematika spočívá v aproximaci RL integrálu v (3.3) pomocí konvoluční kvadratury

$$I_h^\beta g(t_n) = h^\beta \sum_{j=0}^{n} \omega_{n-j} g(t_j) + h^\beta \sum_{j=0}^{s} w_{n,j} g(t_j). \tag{4.6}$$

Koeficienty $w_{n,j}$ slouží v této aproximaci pro překonání možné singularity integrandu (číslo s je popsáno níže). Konvoluční koeficienty ω_n jsou hlavní komponentou metody a charakterizují metodu. Získáme je z konkrétní lineární vícekrokové metody pro ODR. Uveďme tedy obecnou lineární vícekrokovou metodu

$$\sum_{j=0}^{k} \rho_j y_{n-j} = \sum_{j=0}^{k} \sigma_j f(t_{n-j}, y_{n-j}). \tag{4.7}$$

S rovnicí (4.7) jsou asociovány charakteristické polynomy

$$\rho(z) = \rho_0 z^k + \rho_1 z^{k-1} + \cdots + \rho_{k-1} z + \rho_k,$$
$$\sigma(z) = \sigma_0 z^k + \sigma_1 z^{k-1} + \cdots + \sigma_{k-1} z + \sigma_k.$$

Každé metodě je přiřazena tzv. generující funkce ω. Určíme ji pomocí charakteristických polynomů následujícím způsobem

$$\omega(\xi) = \frac{\sigma(\frac{1}{\xi})}{\rho(\frac{1}{\xi})}.$$

Klasické lineární vícekrokové metody mohou být přeformulovány jako (4.6) s $\beta = 1$ (případ ODR). Koeficienty ω_n potom získáme jako koeficienty mocninné řady

$$\omega(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n \xi^n.$$

V případě zlomkových lineárních vícekrokových metod se generující funkce změní následujícím způsobem

$$\omega_\beta(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n \xi^n, \quad \omega_\beta(\xi) = \frac{\sigma^\beta(\frac{1}{\xi})}{\rho^\beta(\frac{1}{\xi})}, \tag{4.8}$$

kde β je řád integrálu.

Nyní věnujme pozornost koeficientům $w_{n,j}$. Odvozují se z (4.6) pro $g = t^\nu$, kde $\nu \in \mathcal{A}_{p-1} \cup \{p-1\}$. Zde je p řád konvergence metody a množina $\mathcal{A}_l$ je dána jako

$$\mathcal{A}_l = \{m \in \mathbb{R} \,|\, m = i + j\beta, \quad j, i \in \mathbb{N}, m < l\}.$$

Jedním z výsledků zlomkového kalkulu je vzorec pro výpočet RL integrálu mocninné funkce řádu $\alpha \in \mathbb{R}$, který je dán

$$I_{t_0}^{\alpha}(t - t_0)^\nu = \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\alpha+\nu+1)}(t-t_0)^{\alpha+\nu}, \qquad \text{pro } \nu > -1,\, t \geq t_0.$$

Tento výsledek použijeme v (4.6), spolu s $p = 2$ (jelikož námi diskutované metody jsou řádu 2) dostáváme

$$\sum_{j=0}^{s} w_{n,j} j^\nu = -\sum_{j=0}^{n} \omega_{n-j} j^\nu + \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\alpha+\nu+1)} n^{\nu+\alpha},$$

kde $\nu \in \mathcal{A}_1 \cup \{1\}$ a s je počet prvků množiny $\mathcal{A}_1$. Koeficienty $w_{n,j}$ obdržíme, když v každém kroku , řešíme soustavu $n+1$ lineárních rovnic.

Po aplikaci metody tohoto typu na (3.1) a (3.2) dostáváme

$$x_n = T_{m-1}(t_n) + h^\alpha \sum_{j=0}^{s} w_{n,j} f_j + h^\alpha \sum_{j=0}^{n} \omega_{n-j} f_j, \tag{4.9}$$

kde $f_j = (t_j, x_j)$ a T_{m-1} je Taylorův rozvoj funkce x se středem v t_0 (počátek intervalu)

$$T_{m-1}(t_n) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(t_n - t_0)^k}{k!} x_0^{(k)}.$$

Následující věta říká, za jakých podmínek je metoda konvergentní.

Věta 4.1. *Nechť implicitní lineární vícekroková metoda s charakteristickými polynomy ρ, σ je stabilní, konzistentní a řádu p, s kořeny polynomu σ mající absolutní hodnoty ≤ 1. Potom zlomková lineární vícekroková metoda* (4.9) *je konvergentní řádu p.*

Efektivní vyčíslení koeficientů ω_n jako koeficientů mocninné řady je nejtěžší překážkou. I když pro některé metody tohoto typu existují algoritmy pro pohodlnější manipulaci s mocninou řadou, pro většinu je nejefektivnějším nástrojem Millerův vzorec, který je uveden v následující větě.

Věta 4.2. *Nechť $\phi(\xi) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \xi^n$ je mocninná řada. Potom pro libovolné $\beta \in \mathbb{C}$,*

$$(\phi(\xi))^\beta = \sum_{n=0}^{\infty} v_n^{(\beta)} \xi^n,$$

kde koeficienty $v_n^{(\beta)}$ jsou určeny rekurentně

$$v_0^{(\beta)} = 1, \quad v_n^{(\beta)} = \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{(\beta+1)j}{n} - 1 \right) a_j v_{n-j}^{(\beta)}.$$

Tento vzorec tedy umožňuje určení prvních N koeficientů řady $(\phi(\xi))^\beta$ s počtem operací úměrným N^2. Pro mnohé případy je výpočtová náročnost ve skutečnosti menší. Například v situaci, kdy generující funkce má tvar $(1 \pm \xi)^\beta$, potom $a_1 = \pm 1$ a $a_2 = a_3 = \cdots = 0$. Aplikací věty 4.2 v tomto případě dostaneme

$$\omega_0^{(\beta)} = 1, \quad \omega_n^{(\beta)} = \pm \left(\frac{\beta+1}{n} - 1 \right) \omega_{n-1}, \tag{4.10}$$

kde počet operací zahrnuje N sčítání a $2N$ násobení.

Nyní uvedeme jednotlivé metody.

Zlomkové lichoběžníkové pravidlo

Nejprve vezměme v úvahu lichoběžníkové pravidlo pro ODR

$$y_{n+1} - y_n = \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1}).$$

Charakteristické polynomy této metody mají tvar

$$\rho(z) = z - 1 \quad \text{a} \quad \sigma(z) = \frac{z+1}{2}.$$

Ty dávají generující funkci ve tvaru

$$\omega(\xi) = \frac{\sigma(\frac{1}{\xi})}{\rho(\frac{1}{\xi})} = \frac{(1+\xi)}{2(1-\xi)} = \frac{1}{2}\left(1 + 2\sum_{n=1}^{\infty} \xi^n\right).$$

Generující funkce pro neceločíselný řád α má podle (4.8) tvar

$$\omega_\alpha(\xi) = \left(\frac{(1+\xi)}{2(1-\xi)} \right)^\alpha.$$

Pro vyčíslení prvních N členů mocninné řady odpovídající $\omega_\alpha(\xi)$ je výpočetně výhodnější použít jiný způsob než přímou aplikaci Millerova vzorce (počet operací je zde úměrný N^2). Jedním z těchto způsobů je využití algoritmu rychlé Fourierovy transformace (anglicky Fast Fourier Transform, zkratka FFT).

Generující funkci lichoběžníkového pravidla rozdělíme na činitele $(1+\xi)^\alpha$ a $2^\alpha(1-\xi)^{-\alpha}$. Tím docílime toho, že aplikace věty 4.2 povede na případ (4.10). Následně vyhodnotíme koeficienty jejich součinu pomocí FFT algoritmu. Tímto se výpočetní náročnost redukuje na $3N\log_2 4N$, kde N je mocnina 2. V MATLABu lze toto efektivně provést pomocí pár řádků kódu.

```
x = fft([omega1,zeros(size(omega1))]);
y = fft([omega2,zeros(size(omega2))]);
omega = ifft(x.*y);
omega = omega(1:N);
```

kde `omega1` a `omega2` jsou řádkové vektory s koeficienty funkcí $(1+\xi)^\alpha$ a $2^\alpha(1-\xi)^{-\alpha}$, které spočítáme snadno pomocí (4.10). Označení pro tuto metodu je FT (z anglického fractional trapezoidal rule).

Newtonova–Gregoryho formule

Lichoběžníkové pravidlo patří do skupiny k-krokových Adamsových–Moultonových metod

$$y_{n+1} - y_n = h\sum_{i=0}^{k} \gamma_i \nabla^i f_{n+1},$$

kde $\nabla^i f_{n+1}$ představuje zpětnou diferenci, tj. $\nabla^0 f_{n+1} = f_{n+1}$ a $\nabla^{i+1} f_{n+1} = \nabla^i f_{n+1} - \nabla^i f_n$. Koeficienty γ_i zde představují prvních $k+1$ koeficientů mocninné řady

$$G(\xi) = \gamma_0 + \gamma_1(1-\xi) + \dots + \gamma_k(1-\xi)^k + \dots$$

funkce $G(\xi) = \frac{(\xi-1)}{\ln\xi}$. To lze zkráceně zapsat jako

$$[G(\xi)]_k = \gamma_0 + \gamma_1(1-\xi) + \dots + \gamma_k(1-\xi)^k.$$

Výsledná generující funkce je

$$\omega(\xi) = \frac{[G(\xi)]_k}{1-\xi}.$$

Zvolíme-li $k = 1$ dostaneme $\gamma_0 = 1$ a $\gamma_1 = -\frac{1}{2}$. To vede na předpis pro klasické lichoběžníkové pravdilo. Dále umocníme-li generující funkci řádem α, dostaneme zlomkovou variantu lichoběžníkového pravidla uvedenou dříve.

Ukázalo se, že záměnou operací $[\cdot]_k$ a umocnění na α (nejprve umocníme $G(\xi)$ na α a potom vezmeme prvních $(k+1)$ členů) dostaneme jinou skupinu metod, které jsou známy jako Newtonovy–Gregoryho formule (dále budeme používat zkratku NG). Pro přehlednost označme $\tau = 1-\xi$,

$$(G(\xi))^\alpha = (G(1-\tau))^\alpha = \left(-\frac{\ln(1-\tau)}{\tau}\right)^{-\alpha} = \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tau^n}{n+1}\right)^{-\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{\gamma}_n^\alpha \tau^n.$$

Koeficienty $\bar{\gamma}_n^\alpha$ můžeme vyčíslit pomocí věty 4.2.

Generující funcke těchto metod má tvar

$$\omega(\xi) = \frac{[(G(\xi))^\alpha]_k}{(1-\xi)^\alpha}.$$

Pro 1-krokovou Adamsovu metodu je $\bar{\gamma}_0^\alpha = 1$, $\bar{\gamma}_1^\alpha = \frac{\alpha}{2}$ a generující funkce je

$$\omega_\alpha(\xi) = \frac{1 - \frac{\alpha}{2}(1-\xi)}{(1-\xi)^\alpha} = (1-\xi)^{-\alpha}\big(1 - \frac{\alpha}{2}(1-\xi)\big).$$

Po úpravách je výpočet prvních N koeficientů funcke $\omega_\alpha(\xi)$ dán

$$\omega_0 = 1 - \frac{\alpha}{2}, \quad \omega_n = \big(1 - \frac{\alpha}{2}\big)\omega_n^{(-\alpha)} + \frac{\alpha}{2}\omega_{n-1}^{(-\alpha)},$$

kde $\omega_n^{(-\alpha)}$ jsou koeficienty funkce $(1-\xi)^\alpha$ určené pomocí (4.10). Výpočetní náročnost pro určení těchto koeficientů je N.

Zlomková metoda zpětného derivování

Pro ODR je metoda zpětného derivování druhého řádu dána

$$y_{n+2} - \frac{4}{3}y_{n+1} + \frac{1}{3}y_n = \frac{2h}{3}f_{n+2}$$

s charakteristickými polynomy $\rho(z) = (z^2 - 4/3z + 1/3)$, $\sigma(z) = 2/3z^2$ a generující funkcí

$$\omega(\xi) = \frac{\sigma(\frac{1}{\xi})}{\rho(\frac{1}{\xi})} = \frac{2}{3(1 - 4\xi/3 + \xi^2/3)}.$$

Tato metoda disponuje řádem konvergence 2 a velmi dobrou stabilitou, později ověříme, zda si zachová tyto vlastnosti i její neceločíselná varianta.

Koeficienty generující funkce $\omega^\alpha(\xi)$ opět vyčíslíme pomocí Millerova vzorce (věta 4.2). Nejprve jej aplikujeme na $(1 - 4\xi/3 + \xi^2/3)^{-\alpha}$, to dá

$$\tilde{\omega}_0 = 1, \quad \tilde{\omega}_1 = \frac{4}{3}\alpha\tilde{\omega}_0, \quad \tilde{\omega}_n = \frac{4}{4}\left(1 + \frac{\alpha-1}{n}\right)\tilde{\omega}_{n-1} + \frac{4}{3}\left(\frac{2(1-\alpha)}{n} - 1\right)\tilde{\omega}_{n-2},$$

a potom $\omega_n = 2^\alpha\tilde{\omega}_n/3^\alpha$. Celkový počet operací jde zde opět úměrný N. Tato metoda se označuje jako FBDF (z anglického fractional backward differentiation formula).

5 Stabilita

Jak už bylo naznačeno dříve, vágně řečeno, stabilitou metody rozumíme vlastnost, kdy se numerické řešení chová kvalitativně stejně jako příslušné přesné řešení. Zejména pak, je-li nulové řešení ODR (soustavy ODR) asymptoticky stabilní v Ljapunovově smyslu, pak trajektorie, které začínají „blízko“ počátku, zůstávají stále „blízko“ a pro $t \to \infty$ jsou k počátku přitahovány. Pokud je toto chování zachováno i v případě numerického řešení získaného nějakou metodou, pak takovou metodu považujeme za stabilní. Přesněji, tato myšlenka je podstatou pojmu A-stabilní numerické metody, který je v teorii stability numerických metod základním.

V případě ODR celočíselného řádu se stabilita testuje na lineární rovnici

$$x'(t) = \lambda x(t), \quad \lambda \in \mathbb{C}. \tag{5.1}$$

Takovou rovnici lze chápat jako linearizaci autonomní nelineární rovnice

$$x'(t) = g(x(t))$$

v okolí hyperbolického bodu rovnováhy x^* (v takovém případě je $\lambda = g'(x^*) \in \mathbb{R}$). Je známo, že nulové řešení rovnice (5.1) je asymptoticky stabilní právě tehdy, když λ leží v levé polorovině komplexní roviny (tj. $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$). Aplikujeme-li numerickou metodu (s pevným krokem h) na rovnici (5.1) a označíme S oblast asymptotické stability (v numerice nazývané oblast absolutní nebo lineární stability), tj. množiny hodnot $h\lambda \in \mathbb{C}$, pro které numerické řešení x_n konverguje k nule pro $n \to \infty$, pak metodu nazveme *A-stabilní*, jestliže S je nadmnožinou levé komplexní poloroviny, tj.

$$S \supseteq \mathbb{C}^- = \{\lambda \in \mathbb{C} : \mathrm{Re}(\lambda) < 0\}.$$

V opačném případě, kdy $S \subset \mathbb{C}^-$ ($S \neq \emptyset$), hovoříme o *podmíněně stabilní* metodě. Prototypem A-stabilní metody je zpětná (implicitní) Eulerova metoda, prototypem podmíněně stabilní metody je dopředná (explicitní) Eulerova metoda.

Analogický přístup lze aplikovat i v případě ODR zlomkového řádu. Testovací rovnicí nyní bude rovnice

$$^{C}D_0^{\alpha} x(t) = \lambda x(t), \quad \lambda \in \mathbb{C}, \quad 0 < \alpha < 2, \tag{5.2}$$

která má opět ustálený stav $x \equiv 0$. Zobecnění výsledku o asymptotické stabilitě tohoto řešení je uvedeno v následující větě.

Věta 5.1 ([7])**.** *.Nechť $\alpha > 0$. Nulové řešení rovnice* (5.2) *je asymptoticky stabilní tehdy a jenom tehdy, když $\lambda \in \Sigma_\alpha$, kde $\Sigma_\alpha = \{z \in \mathbb{C} : |\arg(z)| > \alpha\pi/2\}$.*

Jestliže aplikujeme zlomkovou metodu prediktor–korektor, nebo zlomkovou lineární vícekrokovou metodu na (5.2), numerické řešení této rovnice $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ získáme vyčíslením konvoluční kvadratury

$$x_n = g_n + h^{\alpha}\lambda \sum_{j=0}^{n} \omega_{n-j} x_j, \quad . \tag{5.3}$$

Následující věta popisuje oblast stability $S_\alpha \subseteq \mathbb{C}$ tak, že $x_n \to 0$, když $h^\alpha \lambda \in S_\alpha$.

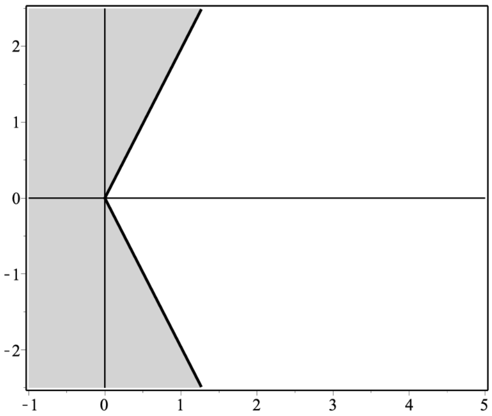
Věta 5.2. *Nechť $\alpha > 0$. Předpokládejme, že posloupnost $\{g_n\}$ je konvergentní a že koeficienty kvadratury ω_n splňují*

$$\omega_n = \frac{n^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha+1)} + u_n, \quad \sum_{n=0}^{\infty} |u_n| < \infty.$$

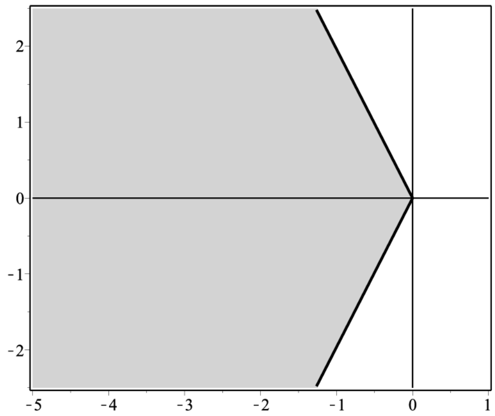
Potom oblast absolutní stability konvoluční kvadratury (5.3) *je*

$$S_\alpha = \mathbb{C} \setminus \left\{ \frac{1}{\omega_\alpha(\xi)} : |\xi| \le 1 \right\}, \quad \omega_\alpha(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n \xi^n.$$

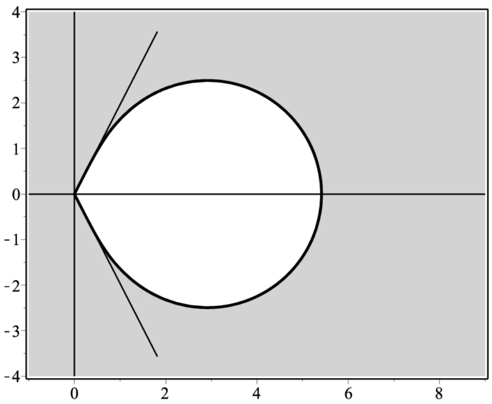
V literatuře lze dohledat, že FLMM splňují předpoklady věty 5.2. Pro metody zlomkových diferenciálních rovnic je výhodné zavést pojem $A(\frac{\alpha\pi}{2})$-stability, kdy požadujeme, aby $\Sigma_\alpha \subseteq S_\alpha$. Prototypem $A(\frac{\alpha\pi}{2})$-stabilní metody je zlomkové lichoběžníkové pravidlo FT. Úhel $\frac{\alpha\pi}{2}$ je zde mezi reálnou osou a hranicí oblasti. Na následujících obrázcích je množina S_α vyznačena šedou oblastí. U metod NG a FBDF je naznačena hranice $A(\frac{\alpha\pi}{2})$-stability tenkou čarou. Pro zlomkovou variantu metody prediktor–korektor generující funkce $\omega_\alpha(\xi)$ nelze analyticky vyjádřit, proto není uveden obrázek s oblastí stability.



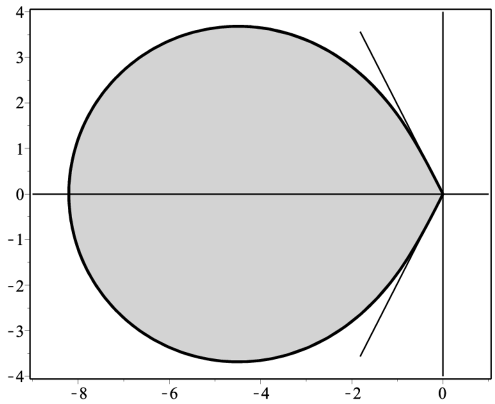
Obrázek 1: FT pro $\alpha = 0.7$



Obrázek 2: FT pro $\alpha = 1.3$



Obrázek 3: NG pro $\alpha = 0.7$



Obrázek 4: NG pro $\alpha = 1.3$

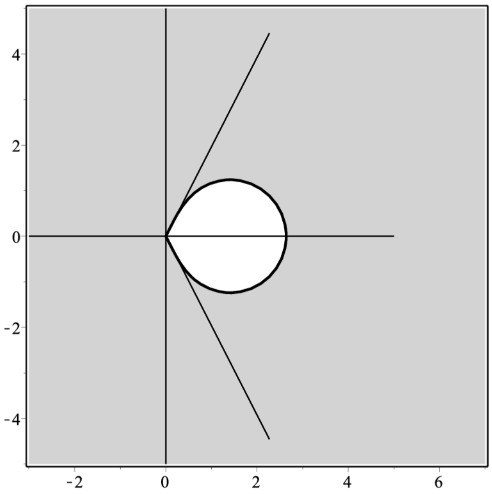
Pro $0 < \alpha < 1$ lze pozorovat, že se oblast S_α s rostoucím α zmenšuje, ale všechny uvedené metody jsou $A(\frac{\alpha\pi}{2})$-stabilní. V tomto rozsahu α má největší oblast stability (oproti FT) metoda FBDF, po ní metoda NG. Pro $1 < \alpha < 2$ je situace jiná. Pouze FT a BDF si zachovávají $A(\frac{\alpha\pi}{2})$-stabilitu, kdežto metodya NG ji ztrácí.

6 Numerické experimenty

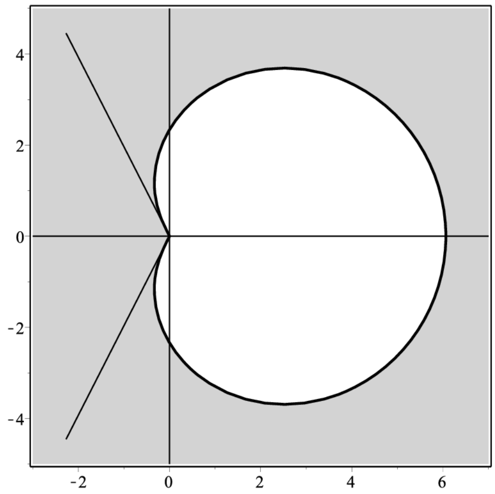
Uvedené numerické metody byly srovnány na testovací úloze (5.2) s hodnotou $\lambda = -1$ pro řády rovnic $\alpha = 0.7$ a $\alpha = 1.7$

Jedním z výsledků zlomkového kalkulu je přesné řešení testovací úlohy (5.2), to je dáno

$$x(t) = E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha),$$



Obrázek 5: FBDF pro $\alpha = 0.7$



Obrázek 6: FBDF pro $\alpha = 1.3$

při podmínce $x(0) = 1$ pro $t \geq 0$ a $\lambda \in \mathbb{R}$.

Zkratky použitých metod:

- αPECE – Zlomková metoda prediktor–korektor
- FT – Zlomkové lichoběžníkové pravidlo (Fractional Trapezoidal rule)
- NG – Newtonovy–Gregoryho formule
- FBDF – Zlomkové metody zpětného derivování (Fractional Backwards Differentiation Formula)

Chyba e_N je spočítána jako

$$e_N = |x(t_N) - x_N|.$$

Hodnota $x(t_N)$ je určena pomocí [4] numericky s chybou přibližně 10^{-15}. Odhad řádu konvergence EOC (anglicky Estimated Order of Convergence) je spočítán pomocí

$$\text{EOC} = \log_2 \frac{e_N}{e_{2N}}.$$

V tabulce je použit zkrácený zápis čísel, např. $1.23(-4)$ zde představuje $1.23 \cdot 10^{-4}$.

$\alpha = 0.7$								
N	α PECE		FTR		NG		FBDF	
-	e_N	EOC	e_N	EOC	e_N	EOC	e_N	EOC
25	$1.88(-4)$		$2.16(-7)$		$1.17(-6)$		$9.55(-6)$	
50	$5.62(-5)$	1.748	$5.55(-7)$	1.361	$1.11(-6)$	0.074	$4.38(-6)$	1.128
100	$1.70(-5)$	1.722	$2.77(-7)$	1.002	$4.65(-7)$	1.261	$1.54(-6)$	1.506
200	$5.21(-6)$	1.707	$9.88(-8)$	1.490	$1.55(-7)$	1.580	$4.79(-7)$	1.685
400	$1.60(-6)$	1.701	$3.06(-8)$	1.688	$4.68(-8)$	1.732	$1.38(-7)$	1.788
800	$4.94(-7)$	1.697	$8.84(-9)$	1.794	$1.32(-8)$	1.819	$3.84(-8)$	1.852
1600	$1.52(-7)$	1.695	$2.43(-9)$	1.858	$3.62(-9)$	1.873	$1.03(-8)$	1.895

Tabulka 1: Chyby e_N a odhady řádu konvergence EOC pro t=1, α=0.7 a $\lambda = -1$.

Pro metodu αPECE výsledky výpočtů v tabulce 1 potvrzují teoretický výsledek, že metoda konverguje s řádem $1 + \alpha$ pro $\alpha < 1$. Z hlediska velikosti chyby je pro řád $\alpha < 1$ nejpřesnější metoda FT. Pro řády $1 < \alpha < 2$ má nejmenší chybu metoda NG a odhad řádu všech metod přibližně odpovídá 2.

$\alpha = 1.7$								
N	α PECE		FTR		NG		FBDF	
-	e_N	EOC	e_N	EOC	e_N	EOC	e_N	EOC
25	$7.68(-5)$		$1.17(-4)$		$9.35(-7)$		$4.39(-4)$	
50	$1.88(-5)$	2.031	$2.99(-5)$	1.971	$4.57(-7)$	1.032	$1.15(-4)$	1.928
100	$4.64(-6)$	2.020	$7.56(-6)$	1.983	$2.20(-7)$	1.057	$2.97(-5)$	1.960
200	$1.15(-6)$	2.012	$1.91(-6)$	1.989	$7.10(-8)$	1.629	$7.53(-6)$	1.977
400	$2.86(-7)$	2.008	$4.79(-7)$	1.994	$2.02(-8)$	1.813	$1.90(-6)$	1.987
800	$7.12(-8)$	2.005	$1.20(-7)$	1.996	$5.43(-9)$	1.897	$4.78(-7)$	1.992
1600	$1.78(-8)$	2.003	$3.00(-8)$	1.998	$1.41(-9)$	1.940	$1.20(-7)$	1.995

Tabulka 2: Chyby e_N a odhady řádu konvergence EOC pro t=1, α=1.7 a $\lambda = -1$.

Závěr

V této práci bylo cílem uvést základy zlomkového kalkulu a několik metod řešení diferenciálních rovnic neceločíselného řádu. V první části (kapitoly 1–3) byla pozornost zaměřena na teorii zlomkového kalkulu. Byly definovány derivace a integrály neceločíselného řádu a řečeny podmínky jejich existence. Dále je uvedeno za jakých podmínek existuje jednoznačné řešení diferenciální rovnice neceločíselného řádu a důležité vlastnosti, kterých je využito při odvození numerických metod.

Druhá část (kapitoly 4–6) je věnována odvození a testování numerických metod. Mezi uvedené metody patří zlomková metoda prediktor–korektor a některé metody ze skupiny zlomkových lineárních vícekrokových metod (FT, NG, FBDF). Tyto metody jsou dále porovnány z hlediska stability v závislosti na neceločíselném řádu rovnice α. Pro řády $0 < \alpha < 1$ jsou všechny uvedené metody nezávislé na velikosti kroku. Pro řády $1 < \alpha < 2$ touto vlastností disponují pouze metody FT a FBDF, metody NG a αPECE jsou proto nevhodné pro řešení tuhých systémů v tomto rozsahu řádu. V poslední kapitole jsou porovnány výsledky zmíněných metod z hlediska přesnosti a odhadovaného řádu konvergence.

Literatura

[1] Diethelm, K.: *The Analysis of Fractional Differential Equations, An Application-Oriented Exposition Using Differential Operators of Caputo Type*, Springer, 2010. 247 s. ISBN 978-3-642-14573-5.

[2] Diethelm, K., Ford, N. J., Freed A. D.: *A predictor-corrector approach for the numerical solution of fractional differential equations*, Nonlinear Dynamics **29** (2002), 3–22.

[3] Garrappa, R.: *Trapezoidal methods for fractional differential equations: Theoretical and computational aspects*, Math. Comput. Simul. **110** (2015), 96–112.

[4] Garrappa, R.: *Numerical evaluation of two and three parameter Mittag-Leffler functions*, SIAM Journal of Numerical Analysis **53** (2015), 1350-1369.

[5] Lubich, C.: *Discretized fractional calculus*, SIAM J. Math. Anal. **17** (1986), 704–719.

[6] Podlubný, I.: *Fractional Differential Equations* , Academic Press Inc., San Diego, CA, 1999. 340 s. ISBN 978-0-125-58840-9.

[7] Matignon, D.: *Stability results for fractional differential equations with applications to control processing*, Computational Engineering in Systems and Application Multiconference **2** (1996), 963–968.

Apendix

Implementace metody αPECE v programovacím jazyce MATLAB. Řeší počáteční úlohu zlomkové diferenciální rovnice s jedním Caputovým operátorem řádu α.

`fdefun` – funkce pravé strany, `t0` – začátek intervalu, `t_final` – konec intervalu, `ic` – vektor s počátečními podmínkami, `alpha` - řád rovnice, `h` – délka kroku.

```
function [ t, x ] = fde_pece( fdefun, t0 , t_final, ic, alpha, h )

N=floor((t_final-t0)/h);
t=t0:h:N*h;
m=ceil(alpha);
A=zeros(1,N);B=A;
problemSize=max(size(ic(:,1)));
fMat=zeros(problemSize,N);

for k=1:N
    B(k)=k^alpha-(k-1)^alpha; %koeficienty korektoru
    A(k)=(k+1)^(alpha+1)-2*k^(alpha+1)+(k-1)^(alpha+1); %koef. prediktoru
end

x(:,1)=ic(:,1);
u=zeros(1,m);

for j=1:N
    for k=1:m
        u(k)=(j*h)^(k-1)/(factorial(k-1));
    end
    icSum = ic*u';

    fMat(:,j) = feval(fdefun,t0+(j-1)*h,x(:,j));
    predictSum = fMat(:,1:j)*flip(B(1:j))';
    xPredict = icSum+(h^alpha/gamma(alpha+1))*predictSum;

    p=[0,flip(A(1:j-1))]';
    correctorSum = fMat(:,1:j)*p;

    x(:,j+1)=icSum+h^alpha/gamma(alpha+2)*(feval(fdefun,j*h,xPredict)+...
        ((j-1)^(alpha+1)-(j-1-alpha)*j^alpha)*fMat(:,1)+correctorSum);
end
end
```