



Vakgroep Wiskunde: Analyse, Logica en Discrete Wiskunde (WE16)

Numerieke algoritmen voor het berekenen van de Caputo afgeleide

door

Brecht Boeykens

Promotor: Dr. K. Van Bockstal

Begeleider: F. Maes

Bachelorproef ingediend tot het behalen van de academische graad van
Bachelor of Science in de Wiskunde

Academiejaar 2023–2024

Inhoudsopgave

1	Inleiding	ii
2	Fractionele Calculus	1
2.1	Definities	1
2.2	Eigenschappen	2
2.2.1	Gedrag van <i>Caputo</i> afgeleide als parameters naderen naar kritische waarden	3
3	Numerieke methode	6
3.1	L1 methode	6
3.1.1	Foutbegrenzing	7
3.1.2	Experimentele orde	12
3.2	L2 methode	16
3.2.1	Foutbegrenzing	17
3.2.2	Experimentele orde	21
4	Opmerkingen	22
A	Appendix	23

1 Inleiding

De term fractionele analyse komt voor het eerst voor in een brief tussen Guillaume de l'Hôpital en Gottfried Wilhelm Leibniz [5] [3]. De grootte doorbraak is echter voor Niels Henrik Abel en Liouville. Deze wiskundigen hebben de theorie van fractionele afgeleiden en fractionele afgeleide opgesteld, en verbanden tussen de twee gelegd. Michele Caputo heeft midden vorige eeuw dan zijn eigen definitie aan fractionele afgeleide gegeven.

Als we beginnen met het leren van getallen en hun betekenis en eigenschappen, starten we steeds bij de natuurlijke getallen. Dit omdat ze in het dagelijkse leven het meest eenvoudig te begrijpen zijn. Deze worden dan later uitgebreid met gehele en rationale getallen. Nadien komen de reële getallen aan bod. Met reëel wordt bedoeld dat deze getallen reële zaken voorstellen, i.e. afstanden, themperatuur, gewicht, snelheid, Maar met een computer kunnen we jammer genoeg deze reële getallen werken. Want een computer kan maar werken met een eindig aantal bits. Eveneens kunnen we er slechts een eindig aantal breuken in opslaan. Deze breuken zullen de benadering vormen voor de reële getallen.

Fractionele analyse is in dit opzicht een uitbreiding van de klassieke analyse over integralen en afgeleiden van gehele orde, net zoals de reële getallen een uitbreiding zijn van de gehele getallen. Bekijk nu eens de rij van n -orde integralen en n -orde afgeleiden:

$$\dots, \int_a^b d\tau_2 \int_a^{\tau_2} f(\tau_1) d\tau_1, \int_a^b df(\tau_1) \tau_1, f(t), \frac{d}{dt}f(t), \frac{d^2}{dt^2}f(t), \dots \quad (1)$$

In volgorde staat hier de tweede orde integraal, de eerste orde integraal, de functie, de eerste orde afgeleide en de tweede orde afgeleide. Een fractionele afgeleide of integraal zit nu tussen 2 termen deze vorige rij. Zo zal een fractionle afgeleide van orde 1,5 ergens tussen de eerste en tweede orde afgeleide zich bevinden.

Een van de eerste toepassingen van een fractionele analyse is de volgende vergelijking

$$\int_a^x \frac{\phi(t)}{(x-t)^\alpha} dt = f(x), \text{ met } x > a, 0 < \alpha < 1, \quad (2)$$

voor het oplossen van het tautochrone probleem [3]. Hoewel er niet bedoeld werd om dit probleem als voorbeeld voor fractionele analyse te gebruiken, kunnen we in (2) grote gelijkenissen zien met de definities die aan fractionele afgeleiden worden gegeven.

We zullen de volgende beschrijving voor fractionele afgeleide en integralen gebruiken

$$D_{a,x}^\alpha f(t), \quad (3)$$

waarbij α, a, x parameters zijn. De orde van de afgeleide of integraal is α en duid de plaats tussen welke 2 termen in (1) staat. Daarnaast zijn a en x de grenzen waarover de afgeleide is gedefinieerd. Soms wordt er nog een extra index gebuikt die niet is aangegeven in (3), dit is het type fractionele afgeleide of integraal dat gebruikt wordt. In volgende sectie zullen we steeds gebruik maken van deze index om niet te verwarren met welke fractionele afgeleide we werken.

2 Fractionele Calculus

2.1 Definities

We beginnen eerst met het definiëren van de Gamma $\Gamma(z)$ en Beta $B(x, y)$ functies.

$$\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} t^{z-1} e^{-t} dt, \quad \text{met } z \in \mathbb{C} \text{ en } \operatorname{Re}(z) > 0 \quad (4)$$

$$B(x, y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt \quad \text{met } x, y \in \mathbb{C} \text{ en } \operatorname{Re}(x) > 0, \operatorname{Re}(y) > 0 \quad (5)$$

Er volgen nu enkele eigenschappen van $\Gamma(z)$ en $B(x, y)$ zonder bewijs.

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (6)$$

$$\Gamma(n+1) = n!, \quad n \in \mathbb{N} \quad (7)$$

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \quad (8)$$

Er zijn verschillende mogelijkheden om fractionele afgeleiden en integralen te definiëren. De meest gebruikte fractionele integralen zijn de linker- en rechterzijdige *Riemann-Liouville* integralen:

$$({}_{RL}D_{a,x}^{-\alpha}f)(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x \frac{f(t)}{(x-t)^{1-\alpha}} dt, \quad \alpha > 0, \quad (9)$$

$$({}_{RL}D_{x,b}^{-\alpha}f)(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b \frac{f(t)}{(t-x)^{1-\alpha}} dt, \quad \alpha < 0. \quad (10)$$

Er zijn daarnaast verschillende meer bekendere vormen van fractionele afgeleiden. De links- en rechtzijdige *Riemann-Liouville* afgeleiden,

$$({}_{RL}D_{a,x}^{\alpha}f)(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_a^x \frac{f(t)}{(x-t)^{\alpha+1-m}} dt, \quad m-1 \leq \alpha < m \in \mathbb{Z}^+, \quad (11)$$

$$({}_{RL}D_{x,b}^{\alpha}f)(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_x^b \frac{f(t)}{(t-x)^{\alpha+1-m}} dt, \quad m-1 \leq \alpha < m \in \mathbb{Z}^+. \quad (12)$$

Deze *Riemann-Liouville* afgeleiden kunnen aanleiding geven tot onstabiele algoritmes [3] en zijn minder vaak voorkomend dan de volgende fractionele afgeleiden, de *Caputo* afgeleiden

$$({}_CD_{a,x}^{\alpha}f)(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^x \frac{f^{(m)}(t)}{(x-t)^{\alpha+1-m}} dt, \quad m-1 \leq \alpha < m \in \mathbb{Z}^+, \quad (13)$$

$$({}_CD_{x,b}^{\alpha}f)(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_x^b \frac{f^{(m)}(t)}{(t-x)^{\alpha+1-m}} dt, \quad m-1 \leq \alpha < m \in \mathbb{Z}^+, \quad (14)$$

waarbij $f^{(m)}(t)$ de m -de orde afgeleide van f is.

De *Grünwald-Letnikov* afgeleide is geïnspireerd door de gehele orde afgeleide en is voornamelijk van theoretisch belang

$${}_{GL}D_{a,x}^\alpha f = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta_{a,h}^\alpha f(t)}{h^\alpha}, \quad \Delta_{a,h}^\alpha f(t) = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{t-a}{h} \rfloor} (-1)^j \binom{\alpha}{j} f(t-jh). \quad (15)$$

2.2 Eigenschappen

Analoog zoals bij gehele orde afgeleiden is de fractionele afgeleide een lineaire operator:

$$D_{a,x}^\alpha (\lambda f + \mu g) = \lambda D_{a,x}^\alpha f + \mu D_{a,x}^\alpha g. \quad (16)$$

Dit volgt direct uit de definities en het feit dat de gehele orde afgeleide en integraal lineair zijn in hun argument. Het bewijs voor de *Caputo* afgeleide is als volgt

Bewijs voor (16).

$$\begin{aligned} {}_CD_{a,x}^\alpha (\lambda f + \mu g)(x) &= \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^x \frac{(\lambda f + \mu g)^{(m)}(t)}{(x-t)^{\alpha+1-m}} dt, \quad m-1 \leq \alpha < m \in \mathbb{Z}^+, \\ &= \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^x \frac{(\lambda f^{(m)} + \mu g^{(m)})(t)}{(x-t)^{\alpha+1-m}} dt \\ &= \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^x \left(\lambda \frac{f^{(m)}(t)}{(x-t)^{\alpha+1-m}} + \mu \frac{g^{(m)}(t)}{(x-t)^{\alpha+1-m}} \right) dt \\ &= \frac{\lambda}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^x \frac{f^{(m)}(t)}{(x-t)^{\alpha+1-m}} dt + \frac{\mu}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^x \frac{g^{(m)}(t)}{(x-t)^{\alpha+1-m}} dt \\ &= \lambda {}_CD_{a,x}^\alpha f + \mu {}_CD_{a,x}^\alpha g \end{aligned}$$

□

Het bewijs voor de *Riemann-Liouville* en *Riesz* afgeleiden verloopt analoog.

Net zoals voor gehele integralen zijn veel functies niet uit te drukken in elementaire functies, i.e. veeltermen, machtsfuncties, goniometrische functies, gamma, zonder dat hier een integraal aan te pas komt. En aangezien de *Caputo* fractionele afgeleide een integratie uitvoert, zullen er functies zijn die niet in elementaire functies kunnen uitgedrukt worden. Echter functies van het type $(t-a)^\lambda$ kunnen wel.

Stelling 2.1. *Zij $f(t) = (t-a)^\lambda$, en de Caputo afgeleide $[{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=y}$, met $y > a$, $m-1 \leq \alpha < m \in \mathbb{Z}^+$ en $\lambda \in \{0, 1, 2, \dots, m-1\} \wedge \lambda > m-1$. Dan is de Caputo afgeleide van f gegeven door*

$$[{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=y} = \begin{cases} 0, & \text{als } \lambda \in \{0, 1, 2, \dots, m-1\} \\ \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-\alpha+1)} (y-a)^{\lambda-\alpha}, & \text{als } \lambda > m-1 \end{cases} \quad (17)$$

Bewijs. Merk op dat als $\lambda \in \{0, 1, 2, \dots, m-1\}$ dan is $f^{(m)} = 0$ en ook $[{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=y} = 0$.

Als $\lambda > m-1$ dan is

$$f^{(m)}(t) = \lambda(\lambda-1)(\lambda-2)\dots(\lambda-(m-1))(t-a)^{\lambda-m}$$

gebruikmakend van eigenschap (6), bekommen we $\lambda(\lambda-1)(\lambda-2)\dots(\lambda-(m-1))\Gamma(\lambda-(m-1)) = \Gamma(\lambda+1)$. Deze formule herleid $f^{(m)}(t)$ tot

$$\begin{aligned} &= \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-(m-1))}(t-a)^{\lambda-m} \\ &= \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-m+1)}(t-a)^{\lambda-m}. \end{aligned} \quad (18)$$

Dus

$$[{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=y} = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-m)} \int_a^y \frac{(t-a)^{\lambda-m}}{(y-t)^{\alpha+1-m}} dt.$$

Gebruiken we de substitutie $t = a + (y-a)\xi$, dan wordt

$$\begin{aligned} [{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=y} &= \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-m+1)} (y-a) \int_0^1 \frac{(y-a)^{\lambda-m} \xi^{\lambda-m}}{((y-a)-(y-a)\xi)^{\alpha+1-m}} d\xi \\ &= \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-m+1)} (y-a)^{\lambda-\alpha} \int_0^1 \xi^{\lambda-m} (1-\xi)^{m-\alpha-1} d\xi. \end{aligned}$$

Merk op dat $m-\alpha > 0$ en $\lambda-m+1 > 0$. Dan kunnen we de integraal vervangen door de Beta functie

$$[{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=y} = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-m+1)} (y-a)^{\lambda-\alpha} B(\lambda-m+1, m-\alpha)$$

Door de eigenschap (8) volgt er finaal

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-m+1)} (y-a)^{\lambda-\alpha} \frac{\Gamma(m-\alpha)\Gamma(\lambda-m+1)}{\Gamma(\lambda-\alpha+1)} \\ &= \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-\alpha+1)} (y-a)^{\lambda-\alpha}. \end{aligned}$$

□

2.2.1 Gedrag van *Caputo* afgeleide als parameters naderen naar kritische waarden

We zullen eerst het gedrag van de *Caputo* afgeleide beschouwen als de bovengrens naar de ondergrens nadert. Veronderstel dat $f(x)$, een onbepaalde afleidbare functie in een omgeving

van punt a , een Taylor ontwikkeling heeft in het interval $[a, x]$, dan is de taylorreeks van f in a gegeven door

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (t-a)^n \quad (19)$$

in het interval $t \in [a, x]$.

Lemma 2.1. *Als f onbepaald afleidbaar is in een omgeving van a , dan wordt de limiet van de Caputo afgeleide, voor $x \rightarrow a \wedge x > a$ als volgt gegeven*

$$\lim_{x \rightarrow a+} {}_C D_{a,x}^{\alpha} f = \begin{cases} \frac{f(a)}{\Gamma(1-\alpha)}, & \text{als } \alpha = 0 \\ \infty, & \text{als } \alpha > 0. \end{cases}$$

Bewijs. Aangezien f onbepaald afleidbaar is in een omgeving van a , heeft f een taylorreeks voor $t \in [a, a + \epsilon]$. Door termsgewijs de fractionele afgeleide te nemen en formule (17) te gebruiken met $\lambda = n$, wordt de Caputo afgeleide

$$\begin{aligned} ({}_C D_{a,x}^{\alpha} f)(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} {}_C D_{a,x}^{\alpha} (x-a)^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n-\alpha+1)} (x-a)^{n-\alpha} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{\Gamma(n-\alpha+1)} (x-a)^{n-\alpha} \end{aligned}$$

De term die de gevraagde limiet bepaald, is diegene met de laagste graad, nl. $\frac{f(a)}{\Gamma(-\alpha+1)} (x-a)^{-\alpha}$.

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow a+} {}_C D_{a,x}^{\alpha} f &= \lim_{x \rightarrow a+} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{\Gamma(n-\alpha+1)} (x-a)^{n-\alpha} \\ &= \lim_{x \rightarrow a+} \frac{f(a)}{\Gamma(-\alpha+1)} (x-a)^{-\alpha} \end{aligned} \quad (20)$$

In (20) zien we dat als $\alpha = 0$ de limiet $f(a)$ is, en als $\alpha > 0$ de limiet ∞ □

Ook als we toestaan dat f een integreerbare singulariteit heeft in a , kunnen we een uitdrukking vinden voor de limiet. Door het bewijs van lemma 2.1 mutatis mutandis te gebruiken.

Lemma 2.2. *Onderstel dat f een integreerbare singulariteit heeft in $x = a$ en geschreven kan worden als $f(x) = g(x)(x-a)^q$ met $q > -1$ en g analytisch op $[a, a + \epsilon]$ voor een $\epsilon > 0$, $g(a) \neq 0$. Dan wordt de limiet van de Caputo afgeleide, voor $x \rightarrow a+$ als volgt gegeven*

$$\lim_{x \rightarrow a+} {}_C D_{a,x}^{\alpha} f = \begin{cases} g(a) \frac{\Gamma(q+1)}{\Gamma(q-\alpha+1)}, & \text{als } \alpha = q \\ \infty, & \text{als } \alpha > q. \end{cases}$$

Bewijs. Aangezien g is analytisch in het interval $[a, a + \epsilon]$, heeft g een Taylorreeks. Bijgevolg is

$$f(x) = (x - a)^q g(x) = (x - a)^q \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^{n+q}. \quad (21)$$

Door op (21) terms gewijs de fractionele afgeleide te nemen en formule (17) te gebruiken, wordt de Caputo afgeleide

$$\begin{aligned} ({}_C D_{a,x}^{\alpha} f)(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^{(n)}(a)}{n!} {}_C D_{a,x}^{\alpha} (x - a)^{n+q} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^{(n)}(a)}{n!} \frac{\Gamma(n + q + 1)}{\Gamma(n + q - \alpha + 1)} (x - a)^{n+q-\alpha} \end{aligned}$$

De term die de limiet bepaald is diegene met de laagste graad, nl. $\frac{g(a)}{n!} \frac{\Gamma(q+1)}{\Gamma(q-\alpha+1)} (x - a)^{q-\alpha}$ waarvoor $n = 0$. Analoog als in Lemma 2.1 volgt

$$\lim_{x \rightarrow a+} {}_C D_{a,x}^{\alpha} f = \lim_{x \rightarrow a+} g(a) \frac{\Gamma(q+1)}{\Gamma(q-\alpha+1)} (x - a)^{q-\alpha} = \begin{cases} g(a)\Gamma(q+1), & \text{als } \alpha = q \\ \infty, & \text{als } \alpha > q \end{cases} \quad (22)$$

□

Bekijken we nu eens wat er gebeurt als de orde α nadert naar een natuurlijk getal, zouden we dan van een fractionele afgeleide naar een gehele orde afgeleide gaan? Om dit bewijzen maken we een kleine omweg via *Riemann-Liouville* integralen

Stelling 2.2. *Zij $(\alpha_k)_{k=1}^{\infty}$ een convergente rij van niet-negatieve getallen met limiet α . Dan, voor elke f continu,*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} ({}_R L D_{a,x}^{-\alpha_k} f)(x) = ({}_R L D_{a,x}^{-\alpha} f)(x)$$

Het bewijs kan gevonden worden in [1]

En we kunnen een *Caputo* afgeleide van f zien als een *Riemann-Liouville* integraal van een afgeleide van f . Dit kan eenvoudig nagegaan worden

$$({}_C D_{x,b}^{\alpha} f)(x) = \frac{1}{\Gamma(m - \alpha)} \int_x^b \frac{f^{(m)}(t)}{(t - x)^{\alpha+1-m}} dt = ({}_R L D_{a,x}^{\alpha-m} f^{(m)})(x)$$

Stelling 2.3. *Zij $(\alpha_k)_{k=1}^{\infty}$ een convergente rij van niet-negatieve getallen met limiet $m \in \mathbb{N}$. Dan, voor elke $f \in C^{(m)}$ continu,*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} ({}_C D_{a,x}^{\alpha_k} f)(x) = f^{(m)}(x)$$

Deze Stelling kan bewezen worden door over te gaan naar de *Riemann-Liouville* integraal en hierop Stelling 2.2 toe te passen en het gevraagde volgt vanzelf.

3 Numerieke methode

Net zoals bij gehele orde afgeleiden en integralen hebben functies niet altijd een expliciete uitdrukking of is deze vrij moeilijk te vinden. Daarom doen we beroep op numerieke methoden om deze afgeleiden en integralen te berekenen. In deze sectie zullen we enkele methoden bekijken om numeriek de *Caputo* afgeleide te bepalen.

3.1 L1 methode

In deze deel komt de L1 [3] methode aan bod. Dit is de eenvoudigste methode voor het berekenen van de afgeleide, en is gebaseerd op de methode voor het berekenen van *Riemann-Liouville* fractionele integralen. Deze methode wordt gebruikt voor $0 < \alpha < 1$.

Zij nu $f \in C^2[a, b]$ tweede orde continu afleidbaar, en beschouw een uniform rooster $\{x_k\}_{k=0}^N$ op het interval $[a, b]$ waarvoor $x_0 = a$, $x_N = b$ en $h = \frac{b-a}{N}$. De punten kunnen op volgende manier worden geschreven $x_j = x_0 + jh$, $j = 0, 1, 2, \dots, N$. De Caputo afgeleide van f in het roosterpunt x_j wordt dan:

$$\begin{aligned} [{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=x_j} &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^{x_j} (x_j - t)^{-\alpha} f'(t) dt & a = x_0 \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} f'(t) dt. \end{aligned} \quad (23)$$

Gebruiken we nu de voorwaartse differentie $\frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h}$ als benadering voor $f'(t)$ in het interval $[x_k, x_{k+1}]$, dan krijgen we de benadering

$$\begin{aligned} [{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=x_j} &\approx \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} dt \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \left[\int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} dt \right] \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} \\ &= \sum_{k=0}^{j-1} b_{j-k-1} (f(x_{k+1}) - f(x_k)) \end{aligned}$$

waarbij $b_{j-k-1} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{1}{h} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} dt$

Voor de L1 methode gebruiken we dus volgend formule

$$[\delta_x^\alpha f]_{x=x_j} = \sum_{k=0}^{j-1} b_{j-k-1} (f(x_{k+1}) - f(x_k)), \quad 1 \leq j \leq N \quad (24)$$

De coëfficiënten b_k voor $k = 0, 1, \dots, j-1$ kunnen als volgt berekend worden

$$\begin{aligned}
 b_{j-k-1} &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{1}{h} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} dt \\
 &= -\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{1}{h} \frac{1}{1-\alpha} [(x_j - t)^{1-\alpha}]_{x_k}^{x_{k+1}} \\
 &= -\frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \frac{1}{h} [(x_j - x_{k+1})^{1-\alpha} - (x_j - x_k)^{1-\alpha}] \\
 &= -\frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \frac{h^{1-\alpha}}{h} [(j - (k+1))^{1-\alpha} - (j - k)^{1-\alpha}] \\
 &= -\frac{h^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} [(j - (k+1))^{1-\alpha} - (j - k)^{1-\alpha}], \tag{25}
 \end{aligned}$$

of nog,

$$b_k = \frac{h^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} [(k+1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}]. \tag{26}$$

We zullen in de implementatie van de L1 methode de coëfficiënten b_k , uitdrukking (26) gebruiken.

3.1.1 Foutbegrenzing

De foutterm die bij deze berekening (24) hoort, is van de orde $\mathcal{O}(h^{2-\alpha})$. Dit is eenvoudig in te zien doordat voorwaartse differentie een fout van orde $\mathcal{O}(h)$ introduceert, i.e. $f'(t) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} + \mathcal{O}(h)$. Deze fout propageert tot $\mathcal{O}(h^{2-\alpha})$ bij de benadering van ${}_CD_{a,x}^\alpha f$ door $[\delta_x^\alpha f]_{x=x_j}$.

Stelling 3.1. *Zij $0 < \alpha < 1$ en $f \in C^2[a, b]$ dan geldt*

$$\left| E_{L1}(f) \Big|_{x=x_j} - [\delta_x^\alpha f]_{x=x_j} - [{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=x_j} \right| \leq C_j h^{2-\alpha}, \tag{27}$$

met C_j de positieve constante gegeven door

$$C_j = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \left[\frac{1-\alpha}{12} + \frac{2^{2-\alpha}}{2-\alpha} - (2^{-\alpha} + 1) \right] \max_{x_0 \leq x \leq x_j} |f''(x)|. \tag{28}$$

Om dit te bewijzen zullen we een afschatting maken van de absolute fout $E_{L1}(f) \Big|_{x=x_j}$, die het verschil tussen de exacte waarde, verkregen door (23) analytisch te bepalen, en de waarde verkregen door de L1 methode (24). We zullen een onder- en bovengrens zoeken voor deze $E_{L1}(f) \Big|_{x=x_j}$. Hiervoor zullen we de afgeleide $f'(t)$ en de voorwaartse differentie, in het integrandum, van elkaar af trekken. Door Taylorformule met integraal restterm te gebruiken, bekomen we een verschil van integralen waarin f'' in voorkomt. Passen we nadien de stelling van Fubini, om de dubbelintegralen om te wisselen, en verder uit te werken, bekomen we een som van

integralen. Hierna bepalen we dan de onder- en bovengrens van $|E_{L1}(f)|_{x=x_j}|$. De ondergrens wordt gevonden doordat elk integrandum positief is. En de bovengrens wordt berekend door de som in 2 deelsommen op te splitsen. Beide delen worden uitgerekend door gebruik te maken van *Numerieke Wiskunde* [6, Stelling 5.1] en dan deze verder te begrenzen en vereenvoudigen.

We herhalen hier [6, Stelling 5.1] zonder bewijs.

Stelling 3.2. Zij $f \in C^{n+1}[a, b]$ en $y_0, y_1, \dots, y_n$ onderling verschillende punten in $[a, b]$, zij $p_n(x) = \sum f(y_i)l_i(x)$ een Lagrange-interpolatie veelterm door de punten $(y_i, f(y_i))$. Dan bestaat er voor elke $t \in [a, b]$, een $\xi_t \in]a, b[$ zodat

$$f(t) = p_n(t) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_t)}{(n+1)!}(t-y_0)(t-y_1)\dots(t-y_n). \quad (29)$$

Bewijs van Stelling 3.1. Zij

$$R = \int_{x_0}^{x_j} \frac{f'(t)}{(x_j - t)^\alpha} dt - \sum_{k=0}^{j-1} \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} dt$$

dan is

$$|R| = |E_{L1}(f)|_{x=x_j} |\Gamma(1 - \alpha)|$$

Door de stelling van Taylor met integraalrestterm weten we dat voor een $t \in [x_k, x_{k+1}]$,

$$f'(t) - \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} = \frac{1}{h} \left[\int_{x_k}^t f''(s)(s - x_k) ds - \int_t^{x_{k+1}} f''(s)(x_{k+1} - s) ds \right].$$

Dit komt door de Taylor ontwikkeling van $f(t)$ rond x_k af te trekken van de Taylor ontwikkeling van $f(t)$ rond x_{k+1} .

Dit geeft:

$$\begin{aligned} R &= \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} \left[f'(t) - \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} \right] dt \\ &= \frac{1}{h} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} \left[\int_{x_k}^t f''(s)(s - x_k) ds - \int_t^{x_{k+1}} f''(s)(x_{k+1} - s) ds \right] dt. \end{aligned} \quad (30)$$

we bekommen dus een dubbelintegraal en het integrandum is een meetbare functie omdat wegens $(x_j - t)^{-\alpha}$ meetbaar is, $0 < \alpha < 1$ en $f''(s)(s - x_k)$ begrensd en meetbaar is. Door de stelling

van Fubini volgt dan dat we de volgorde van de integralen mogen veranderen. We krijgen dan

$$\begin{aligned}
R &= \frac{1}{h} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} \left[\int_{x_k}^t f''(s)(s - x_k) ds - \int_t^{x_{k+1}} f''(s)(x_{k+1} - s) ds \right] dt \\
&= \frac{1}{h} \sum_{k=0}^{j-1} \left[\int_{x_k}^{x_{k+1}} f''(s)(s - x_k) \left(\int_s^{x_{k+1}} (x_j - t)^{-\alpha} dt \right) ds \right. \\
&\quad \left. - \int_{x_k}^{x_{k+1}} f''(s)(x_{k+1} - s) \left(\int_{x_k}^s (x_j - t)^{-\alpha} dt \right) ds \right] \\
&= \frac{1}{1 - \alpha} \sum_{k=0}^{j-1} \left[\int_{x_k}^{x_{k+1}} f''(s) \frac{s - x_k}{h} ((x_j - s)^{1-\alpha} - (x_j - x_{k+1})^{1-\alpha}) ds \right. \\
&\quad \left. - \int_{x_k}^{x_{k+1}} f''(s) \frac{x_{k+1} - s}{h} ((x_j - x_k)^{1-\alpha} - (x_j - s)^{1-\alpha}) ds \right] \\
&= \frac{1}{1 - \alpha} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f''(s) \left[(x_j - s)^{1-\alpha} \left(\frac{s - x_k}{h} + \frac{x_{k+1} - s}{h} \right) - \left(\frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \right) \right] ds \\
&= \frac{1}{1 - \alpha} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f''(s) \left[(x_j - s)^{1-\alpha} - \left(\frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \right) \right] ds.
\end{aligned}$$

We zullen nu de absolute waarde van R nemen. Via de driehoeksongelijkheid kunnen we een afchatting naar boven toe vinden.

$$\begin{aligned}
|R| &= \left| \frac{1}{1 - \alpha} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f''(s) \left[(x_j - s)^{1-\alpha} - \left(\frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \right) \right] ds \right| \\
&\leq \frac{1}{1 - \alpha} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} |f''(s)| \left| (x_j - s)^{1-\alpha} - \left(\frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \right) \right| ds
\end{aligned} \tag{31}$$

Nu schatten we $|f''(t)|$ naar boven af via $|f''(t)| \leq \max_{x_k \leq x \leq x_j} |f''(x)| =: M_{2,j}$.

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{1}{1 - \alpha} \sum_{k=0}^{j-1} M_{2,j} |f''(x)| \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left| \left[(x_j - s)^{1-\alpha} - \left(\frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \right) \right] \right| ds \\
&\leq \frac{M_{2,j}}{1 - \alpha} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left| (x_j - s)^{1-\alpha} - \left(\frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \right) \right| ds
\end{aligned} \tag{32}$$

Noteer nu $g_j(s) = (x_j - s)^{1-\alpha}$. We zien dat $g \in C([x_0, x_j])$. De Lagrange interpolatie in het interval $[x_k, x_{k+1}]$ met 2 verdeelpunten is

$$p_{1,k}(s) = \frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \tag{33}$$

Het integrandum van (32) kan, met [6, Stelling 5.1], dan vervangen worden door

$$\begin{aligned} (x_j - s)^{1-\alpha} - \left(\frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \right) &= g_j(s) - p_{1,k}(s) \\ &= \frac{(1-\alpha)(-\alpha)(s - x_k)(s - x_{k+1})}{2(x_j - \xi_s)^{\alpha+1}} \geq 0 \end{aligned} \quad (34)$$

met $\xi_s \in (x_k, x_{k+1})$. De enige 2 factoren die negatief zijn, $(-\alpha)$ en $s - x_{k+1}$, wat na vermenigvuldigen een positief resultaat geeft.

We weten dat voor $0 \leq k \leq j-1$ en $0 < \alpha < 1$,

$$\sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left[(x_j - s)^{1-\alpha} - \left(\frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \right) \right] ds \geq 0 \quad (35)$$

want het integrandum in elke term is positief wegens (34).

Verder geldt ook

$$\sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left[(x_j - s)^{1-\alpha} - \left(\frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \right) \right] ds < +\infty, \quad (36)$$

Om dit te bewijzen werken we in 2 stappen. Allereerst vinden we een afschatting voor de som Σ_1 van $k = 0$ tot $j-3$, en nadien voor de som Σ_2 van $k = j-2$ tot $j-1$. De reden waarom we deze opsplitsing maken wordt verder verklaard.

Voor de Σ_1 geldt

$$\begin{aligned} \Sigma_1 &= \sum_{k=0}^{j-3} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left[g(s) - \left(\frac{s - x_k}{h} g(x_{k+1}) + \frac{x_{k+1} - s}{h} g(x_k) \right) \right] ds \\ &= \sum_{k=0}^{j-3} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{(1-\alpha)\alpha(s - x_k)(x_{k+1} - s)}{2(x_j - \xi_s)^{\alpha+1}} ds \end{aligned} \quad (37)$$

$$\leq \frac{\alpha(1-\alpha)}{2} \sum_{k=0}^{j-3} (x_j - x_{k+1})^{-\alpha-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (s - x_k)(x_{k+1} - s) ds \quad (38)$$

$$\begin{aligned} &\leq \frac{h^2}{12} \alpha(1-\alpha) \sum_{k=0}^{j-3} \int_{x_{k+1}}^{x_{k+2}} (x_j - s)^{-\alpha-1} ds \\ &\leq \frac{1-\alpha}{12} h^{2-\alpha} \end{aligned} \quad (39)$$

De eerste verhoging gebeurt na stap (37), waar $\frac{1}{(x_j - \xi_s)^{\alpha+1}}$ naar boven wordt afgeschat door $\frac{1}{(x_j - x_{k+1})^{\alpha+1}}$. De verhoging in (38), wordt verklaard doordat $\bar{g}_j(s) = (x_j - s)^{-\alpha}$ een stijgende

convexe functie is in $[x_0, x_j]$, i.e. voor $s, t \in [x_0, x_j]$ geldt $((t-s)\bar{g}'_j(s) + \bar{g}_j(s) \leq g(t)$. En dus

$$\begin{aligned} h \bar{g}'_j(x_{k+1}) + \bar{g}_j(x_{k+1}) &\leq \bar{g}_j(x_{k+2}) \\ \Leftrightarrow \bar{g}'_j(x_{k+1}) &\leq \frac{\bar{g}_j(x_{k+2}) - \bar{g}_j(x_{k+1})}{h} \\ \Leftrightarrow \alpha(x_j - x_{k+1})^{-\alpha-1} &\leq \frac{1}{h} \int_{x_{k+1}}^{x_{k+2}} (x_j - s)^{-\alpha-1} ds. \end{aligned}$$

De integraal bij stap (38) wordt als volgt uitgerekend

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} (s - x_k)(s - x_{k+1}) ds = \int_0^h s(h-s) ds = \left[\left(h \frac{s^2}{2} - \frac{s^3}{3} \right) \right]_0^h = h^3 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} \right) = \frac{h^3}{6}$$

Voor (39) wordt de integraal uitgerekend en in de sommatie is telescopisch

$$\begin{aligned} \alpha \sum_{k=0}^{j-3} \int_{x_{k+1}}^{x_{k+2}} (x_j - s)^{-\alpha-1} ds &= \sum_{k=0}^{j-3} ((x_j - x_{k+2})^{-\alpha} - (x_j - x_{k+1})^{-\alpha}) \\ &= (x_j - x_{j-1})^{-\alpha} - (x_j - x_0)^{-\alpha} \\ &\leq (x_j - x_{j-1})^{-\alpha} \\ &= h^{-\alpha}. \end{aligned} \tag{40}$$

Deze laatste stap is de reden dat we een opsplitsing maken. Moest er tot $j-2$ gesommeerd worden dan zou de som $(x_j - x_j)^{-\alpha}$ bevatten in (40), wat niet mogelijk is.

Σ_2 heeft de volgende bovengrens

$$\begin{aligned} &\sum_{k=j-2}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left[g(s) - \left(\frac{s - x_k}{h} g(x_{k+1}) + \frac{x_{k+1} - s}{h} g(x_k) \right) \right] ds \\ &= \int_{x_{j-2}}^{x_j} g(s) ds - h \left[\frac{g(x_{j-2})}{2} + g(x_{j-1}) + \frac{g(x_j)}{2} \right], \end{aligned}$$

Omdat $g(x_j) = (x_j - x_j)^{1-\alpha} = 0$

$$\begin{aligned} &= \int_{x_{j-2}}^{x_j} g(s) ds - h \left[\frac{g(x_{j-2})}{2} + g(x_{j-1}) \right] \\ &= \frac{1}{2-\alpha} [-(x_j - x_j)^{2-\alpha} + (x_j - x_{j-2})^{2-\alpha}] - h \left[\frac{(x_j - x_{j-2})^{1-\alpha}}{2} + (x_j - x_{j-1})^{1-\alpha} \right] \\ &= \frac{1}{2-\alpha} [-0^{2-\alpha} + 2^{2-\alpha}] - h \left[\frac{(2h)^{1-\alpha}}{2} + (h)^{1-\alpha} \right] \\ &= \frac{2^{2-\alpha}}{2-\alpha} h^{2-\alpha} - (2^{-\alpha} + 1) h^{2-\alpha} \\ &= \left[\frac{2^{2-\alpha}}{2-\alpha} - (2^{-\alpha} + 1) \right] h^{2-\alpha}. \end{aligned} \tag{41}$$

Formules (35), (39) en (41) leveren gecombineerd

$$\begin{aligned} 0 &\leq \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left[(x_j - s)^{1-\alpha} - \left(\frac{s - x_k}{h(x_j - x_{k+1})^{\alpha-1}} + \frac{x_{k+1} - s}{h(x_j - x_k)^{\alpha-1}} \right) \right] ds \\ &\leq \left[\frac{1-\alpha}{12} + \frac{2^{2-\alpha}}{2-\alpha} - (2^{-\alpha} + 1) \right] h^{2-\alpha}. \end{aligned}$$

Dit geeft de volgende afschatting voor de foutterm:

$$\left| E_{L1}(f) \Big|_{x=x_j} \right| \leq \frac{1}{2-\alpha} \left[\frac{1-\alpha}{12} + \frac{2^{2-\alpha}}{2-\alpha} - (2^{-\alpha} + 1) \right] \max_{x_0 \leq x \leq x_j} |f''(x)| h^{2-\alpha}$$

□

We zien dat de h een belangrijke rol speelt in de afschattings fout. En zullen zeggen dat de convergentie orde van de fout $h^{2-\alpha}$. Een andere belangrijke factor die de afschattings fout beïnvloed is $\max_{x_0 \leq x \leq x_j} |f''(x)|$.

3.1.2 Experimentele orde

De absolute fout $\left| E_{L1}(f) \Big|_{x=x_j} \right|$ zoals beschreven in Stelling 2.1. De convergentie orde q is door volgende formule te vinden

$$q \approx \frac{|\log \frac{e_{h_1}}{e_{h_2}}|}{|\log \frac{h_1}{h_2}|} \quad (42)$$

Deze is bekomen door volgende redenering. De vrije parameter in (24) is h . We nemen de ansatz $e_h = \left| E_{L1}(f) \Big|_{x=x_j} \right|$, waarbij beide termen $[\delta_x^\alpha f]_{x=x_j}$ en $[{}_C D_{a,x}^\alpha f]_{x=x_j}$ berekend zijn met de rekenmachine. Voor de convergentie orde q , zal e_h zich gedragen als $C_j h^q$.

$$e_h := \left| [\delta_x^\alpha f]_{x=x_j} - [{}_C D_{a,x}^\alpha f]_{x=x_j} \right| \approx C_j h^q$$

Door het quotiënt te nemen van 2 verschillende fouten met verschillende h 's, kunnen we de constante coëfficiënt C elimineren

$$\frac{e_{h_1}}{e_{h_2}} \approx \frac{h_1^q}{h_2^q}. \quad (43)$$

Door hiervan de logaritme te nemen bekomen we benadering van de orde in (42).

Om de experimentele fout van de L1 methode te analyseren, is de L1 methode in Python 3.12.4 geïmplementeerd. Er is voor verschillende functies de absolute fout (AE) en de convergentie orde (CO) van de Caputo afgeleide, $\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^1 (1-t)^{-\alpha} f'(t) dt$, berekend.

voorbeeld 1. Zij $f(x) = x^2, x \in [0, 1]$ dan is de *Caputo* afgeleide van f van orde α in $x = 1$ voor $\alpha = 0.2; 0.4; 0.6; 0.8$, gegeven door respectievelijk 1.192; 1.398; 1.610; 1.815. In Tabel 1 staan de

absolute fouten en de convergentie ordes voor verschillende α 's en $h \in \{\frac{1}{10}, \frac{1}{250}, \frac{1}{250}\}$. Het is het duidelijk dat de waarde voor de convergentie orde in de buurt van $2 - \alpha$ liggen.

Tabel 1: Numerieke resultaten voor L1 methode met functie $f(x) = x^2$. Voor verschillende waarden van α en h .

α	h	AE	CO	α	h	AE	CO
0.2	$\frac{1}{10}$	2.7×10^{-3}		0.4	$\frac{1}{10}$	8.697×10^{-4}	
	$\frac{1}{50}$	1.718×10^{-4}	1.715		$\frac{1}{50}$	7.027×10^{-4}	1.563
	$\frac{1}{250}$	1.035×10^{-5}	1.745		$\frac{1}{250}$	5.512×10^{-5}	1.581
0.6	$\frac{1}{10}$	2.142×10^{-2}		0.8	$\frac{1}{10}$	4.769×10^{-2}	
	$\frac{1}{50}$	2.300×10^{-3}	1.3866		$\frac{1}{50}$	6.951×10^{-3}	1.1965
	$\frac{1}{250}$	2.436×10^{-4}	1.3949		$\frac{1}{250}$	1.009×10^{-3}	1.1990

voorbeeld 2. Zij $f(x) = x^4, x \in [0, 1]$ dan is de *Caputo* afgeleide in $x = 1$. In Tabel 2 staan de absolute fouten en de convergentie ordes voor verschillende α 's en verschillende h . Ook hier is in de kolom convergentie orde, duidelijk te zien dat de convergentie orde $2 - \alpha$ is.

Tabel 2: Numerieke resultaten voor L1 methode met functie $f(x) = x^4$. Voor verschillende waarden van α en h .

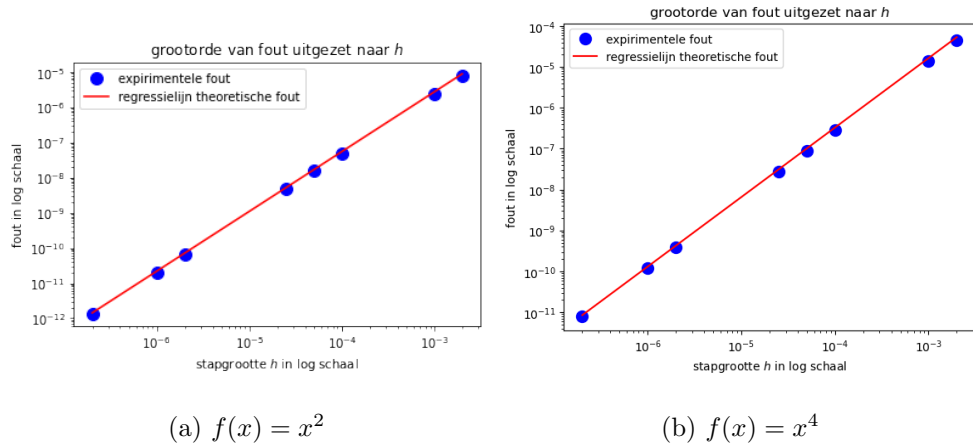
α	h	AE	CO	α	h	AE	CO
0.2	$\frac{1}{10}$	2.73×10^{-2}		0.4	$\frac{1}{10}$	9.704×10^{-2}	
	$\frac{1}{50}$	2.075×10^{-3}	1.6016		$\frac{1}{50}$	9.326×10^{-3}	1.4553
	$\frac{1}{250}$	1.356×10^{-4}	1.694		$\frac{1}{250}$	7.806×10^{-4}	1.5412
0.6	$\frac{1}{10}$	2.578×10^{-1}		0.8	$\frac{1}{10}$	6.045×10^{-1}	
	$\frac{1}{50}$	3.221×10^{-2}	1.2922		$\frac{1}{50}$	1.001×10^{-1}	1.1172
	$\frac{1}{250}$	3.569×10^{-3}	1.3669		$\frac{1}{250}$	1.498×10^{-2}	1.1801

In Voorbeeld 1 en 2 hebben we de absolute fout en convergentie orde berekend voor enkele waarden van h . Door h nu veel kleiner te kiezen kunnen we beter inzicht krijgen in de convergentie orde.

voorbeeld 3. We zullen dezelfde functies als in voorbeeld 1 en 2 gebruiken. We zullen de Caputo afgeleide met de L1 methode berekenen, voor de stapgrootte $h = 2.0 \times 10^{-3}, 1.0 \times$

$10^{-3}, 1.0 \times 10^{-4}, 5.0 \times 10^{-5}, 2.5 \times 10^{-5}, 2.0 \times 10^{-6}, 1.0 \times 10^{-6}, 2.0 \times 10^{-7}$ en $\alpha = 0.3$. In Grafieken 1 zijn deze waarden uitgezet, op logaritmische schaal. De rode lijn geeft de theoretische fout weer zoals bewezen in Stelling 3.1. De blauwe punten geven de experimentele fout weer. De richtingscoëfficiënt van de regressielijn geeft dan ook de convergentie orde weer, deze zijn respectievelijk 1.6940 en 1.6893. Deze twee waarden liggen dicht in de buurt bij $2 - \alpha = 1.7$. Ondanks dat beide grafieken er hetzelfde uitzien, is er een klein verschil. De grafiek met $f(x) = x^4$ heeft een groter absolute fout. Dit is te zien doordat de machten op de schaal van de verticale as groter zijn. Dit wordt verklaard doordat $\max_{x_0 \leq x \leq x_j} |f''(x)|$ verschillend is voor de 2 functies.

Figuur 1: De absolute fouten in functie van de stapgrootte h . De rode lijn duidt de theoretische fout aan, en de blauwe punten duiden de experimentele fout aan.



voorbeeld 4. Stel $f(x) = x^{1.6}$ dan is $f \notin C^2([0, 1])$. Formule (28) kan dus niet gebruikt worden voor een afchatting van de fout. We zien echter in Tabel 3 dat de convergentie orde van de L1 methode dicht bij de waarde $2 - \alpha$ ligt.

voorbeeld 5. In dit voorbeeld laten we de bovengrens van de Caputo afgeleide naar de ondergrens naderen, zoals bestudeerd in Stelling 2.2. Stel $f(x) = e^x x^{-0.6}$, $a = 0$ en $\mu = -0.6$ met $\alpha = 0.5$. Dan is $g(x) = e^x$. Berekenen we nu experimenteel deze Caputo afgeleide met bovengrens $x_j = 10^{-\kappa}$ en $\kappa \in \{2, 5, 8, 11\}$ en bijhorende stapgrootte $h = 10^{-\kappa-1}$. Om geen waarde te moeten evalueren in 0 zullen we de ondergrens zeer laag zetten op 10^{-16} . In Tabel 4 is af te lezen dat de waarde van de $[\delta_x^\alpha f]_{x=x_j}$ steeds verder daalt.

Tabel 3: Numerieke resultaten voor L1 methode met functie $f(x) = x^{1.6}$. Voor verschillende waarden van α en h .

α	h	AE	CO	α	h	AE	CO
0.2	$\frac{1}{10}$	1.4534×10^{-3}		0.4	$\frac{1}{10}$	4.4622×10^{-3}	
	$\frac{1}{50}$	8.4308×10^{-5}	1.7394		$\frac{1}{50}$	3.4854×10^{-4}	1.5842
	$\frac{1}{250}$	5.2091×10^{-6}	1.7595		$\frac{1}{250}$	2.6907×10^{-5}	1.5914
0.6	$\frac{1}{10}$	1.0697×10^{-2}		0.8	$\frac{1}{10}$	2.3420×10^{-2}	
	$\frac{1}{50}$	1.1196×10^{-3}	1.4024		$\frac{1}{50}$	3.3561×10^{-3}	1.2071
	$\frac{1}{250}$	1.17537×10^{-4}	1.4004		$\frac{1}{250}$	4.8515×10^{-4}	1.2017

Tabel 4: Numerieke resultaten voor L1 methode met functie $f(x) = x^6$. Voor verschillende waarden van de bovengrens x_j .

bovengrens	10^{-2}	10^{-5}	10^{-8}	10^{-11}
$[\delta_x^\alpha f]_{x=x_j}$	-3×10^{10}	-2×10^{12}	-1×10^{14}	-7×10^{15}

3.2 L2 methode

De L2 methode die we gaan bespreken is diegene waarvoor in (13) $1 < \alpha < 2$ geldt. En we zullen enkele kenmerken van de L1 methode gebruiken. Verder stellen in deze sectie $a = 0$. Veronderstellen we nu $f \in C^3([a, x])$ drie keer continu afleidbaar is en een uniform rooster $\{x_k\}_{k=0}^N$ op het interval $[0, b]$ zoals in paragraaf 3.1. Er geldt

$$\begin{aligned} [{}_C D_{a,x}^\alpha f]_{x=x_j} &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \int_a^{x_j} (x_j - t)^{1-\alpha} f''(t) dt \\ &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{1-\alpha} f''(t) dt. \end{aligned}$$

Voor de eenvoud zullen we een substitutie $x_j - t = s$ uitvoeren

$$= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} s^{1-\alpha} f''(x_j - s) ds \quad (44)$$

Gebruiken we nu de voorwaartse differentie

$$\frac{f(x_j - x_{k+1}) - 2f(x_j - x_k) + f(x_j - x_{k-1}))}{h^2}$$

als benadering voor $f''(x_j - s)$ in het interval $[x_k, x_{k+1}]$

$$\begin{aligned} [\Delta_x^\alpha f]_{x=x_j} &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} s^{1-\alpha} \frac{f(x_j - x_{k+1}) - 2f(x_j - x_k) + f(x_j - x_{k-1}))}{h^2} ds \\ &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} s^{1-\alpha} ds \left[\frac{f(x_j - x_{k+1}) - 2f(x_j - x_k) + f(x_j - x_{k-1}))}{h^2} \right] \\ &= \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} u_k (f(x_j - x_{k+1}) - 2f(x_j - x_k) + f(x_j - x_{k-1})). \end{aligned}$$

We veranderen de volgorde van de termen in de som zodat de er steeds maar één functie waarde in de som staat

$$= \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{k=-1}^{j-1} (u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}) f(x_j - x_k) \quad (45)$$

waarbij $u_k = \frac{2-\alpha}{h^2} \int_{x_k}^{x_{k+1}} s^{1-\alpha} ds$

(46)

In formule (45) komt er een term voor met $f(x_{-1})$, We kunnen $f(x_{-1}) = f(x_1)$ zetten als $f'(x_0) = 0$, moest dit niet het geval zijn kunnen we altijd nog $f(x_{-1})$ definiëren door een rechte door $(x_0, f(x_0))$ en $(\frac{x_0+x_1}{2}, f(\frac{x_0+x_1}{2}))$ te trekken en die rechte te evalueren in x_{-1} .

Het L2 schema dat we gaan implementeren maakt gebruik van deze substitutie in (44). Moesten we in (44) geen substitutie gebruikt zijn dan is de afchatting de volgende

$$[\Delta_x^\alpha f]_{x=x_j} = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{j-1} \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))}{h^2} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{ds}{(x_j - s)^{\alpha-1}}. \quad (47)$$

Deze formule zal gebruikt worden voor de afchatting van de foutterm.

De coëfficiënten u_k voor $k = 0, 1, \dots, j-1$ worden analoog als de b_{j-k-1} coëfficiënten berekend

$$\begin{aligned} u_k &= \frac{2-\alpha}{h^2} \int_{x_k}^{x_{k+1}} s^{1-\alpha} ds \\ &= \frac{2-\alpha}{h^2} \frac{1}{2-\alpha} [s^{2-\alpha}]_{x_k}^{x_{k+1}} \\ &= \frac{1}{h^2} [x_{k+1}^{2-\alpha} - x_k^{2-\alpha}] \end{aligned}$$

met $a = 0$ is $x_k^{2-\alpha} = (kh)^{2-\alpha}$, dan geeft de uitdrukking

$$\begin{aligned} u_k &= \frac{h^{2-\alpha}}{h^2} [(k+1)^{2-\alpha} - k^{2-\alpha}] \\ &= h^{-\alpha} [(k+1)^{2-\alpha} - k^{2-\alpha}]. \end{aligned} \quad (48)$$

Verder stellen we $u_k = 0$ voor $k > j$ en $k < 0$.

Stel nu $W_k = h^\alpha (u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1})$, dan vinden we

$$\begin{cases} W_{-1} &= h^{-\alpha} u_0 = 1, \\ W_0 &= -2(1^{2-\alpha} - 0^{2-\alpha}) + (2^{2-\alpha} - 1^{2-\alpha}) = 2^{2-\alpha} - 3, \\ W_k &= (k+2)^{2-\alpha} - 3(k+1)^{2-\alpha} + 3k^{2-\alpha} - (k-1)^{2-\alpha}, \\ W_{j-1} &= -2j^{2-\alpha} + 3(j-1)^{2-\alpha} - (j-2)^{2-\alpha}, \\ W_j &= j^{2-\alpha} - (j-1)^{2-\alpha}. \end{cases}$$

De benadering van de *Caputo* afgeleide van de L2 methode is dan

$$[\Delta_x^\alpha f]_{x=x_j} = \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)} h^\alpha \sum_{k=-1}^{j-1} W_k f(x_j - x_k) \quad (49)$$

3.2.1 Foutbegrenzing

Net zoals we bij de L1 methode hebben gedaan gaan we bovengrens voor de afrondingsfout zoeken. Hiervoor zullen we de L2 methode omzetten naar een L1 methode. Maar daarvoor zoeken we eerste een manier om de parameter α tussen 0 en 1 te krijgen in de *Caputo* afgeleide.

Voor $1 < \alpha < 2$ zouden we kunnen stellen dat $\beta = \alpha - 1$ dan geldt $0 < \beta < 1$. Het verband tussen de *Caputo* afgeleide met orde α en *Caputo* afgeleide met orde β is dan

$$\begin{aligned} [{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=x_j} &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \int_a^{x_j} (x_j - t)^{1-\alpha} f''(t) dt \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_a^{x_j} (x_j - t)^{-\beta} \left(\frac{d}{dt} f'(t) \right) dt \\ &= [{}_CD_{a,x}^\beta f']_{x=x_j}. \end{aligned}$$

Stelling 3.3. Zij $1 < \alpha < 2$ en $f \in C^3[a, x]$ dan geldt

$$E_{L2}(f)|_{x=x_j} \left| [\Delta_x^\alpha f]_{x=x_j} - [{}_CD_{a,x}^\alpha f]_{x=x_j} \right| \leq B_j h^{3-\alpha}, \quad (50)$$

met B_j de positieve constante en $M_{3,x_j} = \max_{x_0 \leq x \leq x_j} |f^{(3)}(x)|$

$$B_j = \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)} \left[\frac{2-\alpha}{12} + \frac{2^{3-\alpha}}{3-\alpha} - (2^{1-\alpha} + 1) + j^{2-\alpha} \right] M_{3,x_j}. \quad (51)$$

Om dit te bewijzen gaan we zoals al gezegd, $E_{L2}(f)|_{x=x_j}$ proberen te herleiden. Zo bekomen we twee termen, een term die overeenkomt met uitdrukking (30) en een restterm. Deze eerste term kan afgeschat worden die Stelling 3.1. De tweede term schatten we af via de middelwaardestelling.

Bewijs. Zij

$$K = \left(\sum_{k=0}^{j-1} \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))}{h^2} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{ds}{(x_j - t)^{\alpha-1}} \right) - \int_{x_0}^{x_j} \frac{f''(t)}{(x_j - t)^{1-\alpha}} dt.$$

Daarmee vinden we

$$|K| = \Gamma(2-\alpha) \left| E_{L2}(f)|_{x=x_j} \right|.$$

Door de stelling van Taylor met integraalrestterm weten we dat voor $t \in [x_k, x_{k+1}]$,

$$f''(t) - \frac{f'(x_{k+1}) - f'(x_k)}{h} = \frac{1}{h} \left[\int_{x_k}^t f^{(3)}(s)(s - x_k) ds - \int_t^{x_{k+1}} f^{(3)}(s)(x_{k+1} - s) ds \right]. \quad (52)$$

Dit komt door de Taylor ontwikkeling van $f'(x_k)$ rond t af te trekken van de Taylor ontwikkeling van $f'(x_{k+1})$ rond t . Door nu de stelling van Taylor met restterm van Lagrange te gebruiken, kunnen we $f'(x_k)$ en $f'(x_{k+1})$ ontwikkelen rond respectievelijk x_{k-1} en x_k . Voor $f'(x_k)$ geeft dit

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1}))}{h} + h \frac{f''(\xi_k)}{2} \quad \text{met } \xi_k \in [x_k, x_{k+1}]. \quad (53)$$

Hiermee kunnen we verder (52) verder vereenvoudigen

$$f''(t) - \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))}{h^2} \quad (54)$$

$$= \frac{1}{h} \left[\int_{x_k}^t f^{(3)}(s)(s - x_k)ds - \int_t^{x_{k+1}} f^{(3)}(s)(x_{k+1} - s)ds \right] \quad (55)$$

$$+ \left[\frac{f''(\xi_{k+1})}{2} - \frac{f''(\xi_k)}{2} \right]. \quad (56)$$

Dit levert:

$$\begin{aligned} K &= \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{1-\alpha} \left[f''(t) - \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))}{h^2} \right] dt \\ &= \frac{1}{h} \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{1-\alpha} \left[\int_{x_k}^t f^{(3)}(s)(s - x_k)ds - \int_t^{x_{k+1}} f^{(3)}(s)(x_{k+1} - s)ds \right] dt \\ &\quad + \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{1-\alpha} \left[\frac{f''(\xi_{k+1})}{2} - \frac{f''(\xi_k)}{2} \right] dt. \\ &= \Sigma_1 + \Sigma_2 \end{aligned} \quad (57)$$

De eerste sommatie Σ_1 in (57) kan via dezelfde aanpak als in Stelling 3.1. Na de substitutie $\beta = \alpha - 1$, en wordt naar boven begrensd door

$$\begin{aligned} |\Sigma_1| &\leq \frac{1}{1-\beta} \left[\frac{1-\beta}{12} + \frac{2^{2-\beta}}{2-\beta} - (2^{-\beta} + 1) \right] M_{3,x_j} h^{2-\beta} \\ &= \frac{1}{2-\alpha} \left[\frac{2-\alpha}{12} + \frac{2^{3-\alpha}}{3-\alpha} - (2^{1-\alpha} + 1) \right] M_{3,x_j} h^{3-\alpha}. \end{aligned} \quad (58)$$

De tweede sommatie Σ_2 in (57) kan op volgende manier worden afgeschat

$$\begin{aligned} |\Sigma_2| &= \left| \sum_{k=0}^{j-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{1-\alpha} dt \right|, \\ &\leq \sum_{k=0}^{j-1} \left| \int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{1-\alpha} dt \right| \left| \frac{f''(\xi_{k+1})}{2} - \frac{f''(\xi_k)}{2} \right|, \end{aligned}$$

via de driehoeksongelijkheid. We rekenen nu de optredende integraal uit

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} (x_j - t)^{1-\alpha} dt = \frac{1}{2-\alpha} [(j-k)^{2-\alpha} - (j-k-1)^{2-\alpha}],$$

wat positief is want $j-k \geq j-k-1$. Dit geeft

$$|\Sigma_2| \leq \sum_{k=0}^{j-1} \frac{1}{2-\alpha} h^{2-\alpha} [(j-k)^{2-\alpha} - (j-k-1)^{2-\alpha}] \left| \frac{f''(\xi_{k+1})}{2} - \frac{f''(\xi_k)}{2} \right|$$

We gebruiken nu de middelwaardestelling: namelijk dat $\xi_k \in [x_k, x_{k+1}]$ en $\xi_{k+1} \in [x_{k+1}, x_{k+2}]$ dus $\xi_{k+1} > \xi_k$. Verder is $f'' \in C([\xi_k, \xi_{k+1}])$, wegens de middelwaardestelling geldt $f''(\xi_{k+1}) - f''(\xi_k) = (\xi_{k+1} - \xi_k)f^{(3)}(\zeta_k)$ voor zekere $\zeta_k \in]\xi_k, \xi_{k+1}[$.

Aldus is

$$|\Sigma_2| \leq \sum_{k=0}^{j-1} \frac{1}{2-\alpha} h^{2-\alpha} [(j-k)^{2-\alpha} - (j-k-1)^{2-\alpha}] \left| \frac{1}{2} (\xi_{k+1} - \xi_k) f^{(3)}(\zeta_k) \right|.$$

Via $|\xi_{k+1} - \xi_k| \leq 2h$, komt er

$$\begin{aligned} |\Sigma_2| &\leq \sum_{k=0}^{j-1} \frac{1}{2-\alpha} h^{2-\alpha} [(j-k)^{2-\alpha} - (j-k-1)^{2-\alpha}] \left| h f^{(3)}(\zeta_k) \right| \\ &\leq \frac{1}{2-\alpha} \left[\sum_{k=0}^{j-1} (j-k)^{2-\alpha} - (j-k-1)^{2-\alpha} \right] M_{3,x_j} h^{3-\alpha} \\ &\leq \frac{1}{2-\alpha} \left[\sum_{k=0}^{j-1} (j-k)^{2-\alpha} - (j-k-1)^{2-\alpha} \right] M_{3,x_j} h^{3-\alpha} \end{aligned}$$

De somatie is telescoopisch

$$\begin{aligned} |\Sigma_2| &\leq \frac{1}{2-\alpha} (j^{2-\alpha} - 0) M_{3,x_j} h^{3-\alpha} \\ |\Sigma_2| &\leq \frac{j^{2-\alpha}}{2-\alpha} M_{3,x_j} h^{3-\alpha} \end{aligned} \tag{59}$$

Tellen we (58) en (59) nu bij elkaar op dan bekomen we een bovengrens van $|K|$

$$|K| \leq |\Sigma_1| + |\Sigma_2| \leq \frac{1}{2-\alpha} \left[\frac{2-\alpha}{12} + \frac{2^{3-\alpha}}{3-\alpha} - (2^{1-\alpha} + 1) + j^{2-\alpha} \right] M_{3,x_j} h^{3-\alpha} \tag{60}$$

Stellen we B_j gelijk aan

$$B_j = \frac{1}{\Gamma(3-\alpha)} \left[\frac{2-\alpha}{12} + \frac{2^{3-\alpha}}{3-\alpha} - (2^{1-\alpha} + 1) + j^{2-\alpha} \right] M_{3,x_j} \tag{61}$$

Dan is

$$[\Delta_x^\alpha f]_{x=x_j} = [\Delta_x^\alpha f]_{x=x_j} + \mathcal{O}(h^{3-\alpha})$$

□

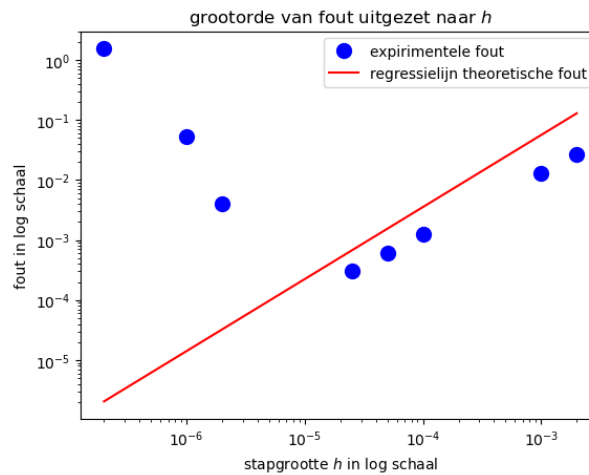
3.2.2 Experimentele orde

voorbeeld 6. Zij $f(x) = x^4, x \in [0, 1]$, we berekenen de *Caputo* afgeleide in $x = 1$ met orde $1 < \alpha < 2$. In Tabel 5 staan de absolute fouten (AE) en de convergentie ordes (CO) voor verschillende α en h waarden. Hier is in de kolom convergentie orde niet te zien dat de convergentie orde $3 - \alpha$ is. Dit is omdat we met relatieve grote waarden h werken. In Figuur 2 is te zien dat voor $h > 10^{-5}$ de convergentie orde $3 - \alpha$ is, wat de theoretische bepaalde fout is. Voor kleiner $h < 10^{-5}$ wordt deze fout terug groter. Dit kan komen doordat afrondingsfouten zich opstapelen in de berekening.

Tabel 5: Numerieke resultaten voor L2 methode met functie $f(x) = x^4$. Voor verschillende α en h waarden.

α	h	AE	CO	α	h	AE	CO
1.2	$\frac{1}{10}$	0.70		1.8	$\frac{1}{10}$	1.56	
	$\frac{1}{50}$	0.14	0.985		$\frac{1}{50}$	0.30	1.03
	$\frac{1}{250}$	0.03	1.0		$\frac{1}{250}$	0.06	1.04
	$\vdots$				$\vdots$		

Figuur 2: De absolute fouten in functie van de stapgrootte h voor de functie $f(x) = x^4$. De rode lijn duidt de theoretische fout aan, en de blauwe punten duiden de experimentele fout aan.



4 Opmerkingen

De L1 en L2 methoden voor het bereken van de *Caputo* afgeleide zijn nog maar het topje van een grote ijsberg. Doordat ze beiden een uniform rooster gebruiken, en weinig continue afleidbaarheid vragen. Andere mogelijke methoden bestaan uit een andere vorm van verdeelpunten te kiezen, de niet uniforme roosterpunten. Een beter keuze van grid is er één waar er meer verdeelpunten bij de bovengrens van een rechte fractionele afgeleide of de ondergrens bij linkse fractionele afgeleide [3], omdat het integrandum dan meer varieert. Een verdere verbetering zou er kunnen komen als we weten dat de functie een hogere mate van gladheid heeft, zoals de $L1 - 2$ methode [2], dit is een variatie van de L1 methode waarbij de functie C^3 over een interval. Voor de L2 methode bestaat er een kleine andere variant de L2C methode die een ander vorm van differentie gebruikt om de afgeleide te benaderen.

Het is al even in de inleiding aan bod gekomen maar in heel veel fysicavraagstukken wordt fractionele calculus gebruikt. Zoals bijvoorbeeld bij modellering van visco-elastische materialen [1] te bereken van materialen. Hierin wordt de fractionele afgeleiden gebruikt in vergelijkingen, zoals bij differentiaal vergelijkingen waar gehele afgeleide worden gebruikt. Er zijn ook fractionele vergelijkingen die gebruikt als alternatief voor de golfvergelijking en warmte vergelijking. Deze alternatieven kunnen vaak beter de werkelijke beschrijven dan de vergelijking met de gehele afgeleide. Deze laatste 2 hebben steeds minstens twee parameters, een ruimtelijke en een tijd parameter. In [8] vinden we een methode voor tweede orde $L2 - 1\sigma$ CrankNicolson methode voor het bereken van de golfvergelijking in twee dimensies.

A Appendix

```
1 import numpy as np
2 from scipy.special import gamma, comb
3
4 import matplotlib.pyplot as plt
```

Listing 1: Imports toevoegen

```
1 def L1(fun, alpha, lower, upper, N=10, factor = 1):
2     '''
3     Berekend de caputo afgeleide van een functie met alpha waarde tussen 0 en 1,
4     door gebruik te maken van L1 schema.
5
6     Parameters:
7         fun      (callable)      een functie
8         alpha (float)             de orde van de afgeleide tussen 0 en 1.
9         lower (float)            de ondergrens van de integraal
10        upper (float)            de bovengrens van de integraal
11        N        (int)           het aantal verdeelpunten dat het interval [onder,
12                                boven] is N+1
13        factor (float)           De maximale 2 de orde afgeleide van f in het
14                                interval [onder, boven]
15
16    output:
17        De waarde van de caputo afgeleide en de theoretische fout.
18
19    '''
20    # controles voor juiste invoerwaarden
21    if not (0 < alpha and alpha < 1):
22        raise Exception("$\alpha$ niet binnen juiste grenzen.")
23    if N<1:
24        raise Exception("N moet positief zijn")
25    if upper < lower:
26        raise Exception("bovengrens is groter dan ondergrens")
27
28    # zet de lengte en het aantal tussenpunten voor een 'uniform grid' vast
29    h= (upper - lower) /N
30
31    #berekend de coëfficiënten b en de functiewaarden in de verdeelpunten
32    b= np.array([k for k in range(N+1)])**(1-alpha)
```

```

30     x = np.linspace(lower, upper, N+1)
31     fx = fun(x[:-1])
32
33     b = b[1:] - b[:-1]
34     fx = fx[:-1] - fx[1:]
35
36
37     # berekend de waarde van caputo afgeleide en fout
38     waarde = h**(-alpha) * b@fx /gamma(2-alpha)
39     fout = 1/gamma(2-alpha) * ( (1-alpha)/12 +2**(2-alpha) / (2-alpha) - (2**(-
40     alpha) +1)) * h**(2-alpha) * factor
41
42     return waarde, fout

```

Listing 2: Implementatie L1 methode.

```

1 def L2(fun, alpha, lower, upper, h = 0.1, N=10, factor=1):
2     '''
3     Berekend de caputo afgeleide van een functie met alpha waarde tussen 1 en 2,
4     door gebruik te maken van L2 schema.
5
6     Parameters:
7         fun (callable)     een functie
8         alpha (float)      de orde van de afgeleide
9         lower (float)      de ondergrens van de integraal
10        upper (float)      de bovengrens van de integraal
11        N (int)            het aantal verdeelpunten dat het interval [onder,
12        boven] is N+1
13
14        factor (float)      De maximale 3 de orde afgeleide van f in het
15        interval [onder, boven]
16
17
18    output:
19        De waarde van de caputo afgeleide en de theoretische fout.
20
21    '''
22
23    # controles voor juiste invoerwaarden
24    if not (1 < alpha and alpha < 2):
25        raise Exception("$\alpha$ niet binnen juiste grenzen.")
26
27    if N<1:
28        raise Exception("N moet positief zijn")

```

```

23     if upper < lower:
24         raise Exception("boven grens is groter dan ondergrens")
25
26     # zet de lengte en het aantal tussenpunten voor een 'uniform grid' vast
27     h = (upper - lower) / N
28
29     # berekend de coëfficiënten [0, 1, 2**(2-alpha), 3**(2-alpha), ... , N**(2-
30     # alpha)]
31     coef = np.array([(k) for k in range(N+1)]**(2-alpha))
32
33     W = np.zeros(N+2)
34     W[0] = 1
35     W[1] = (coef[2] - 3)
36     W[N+1] = coef[N] - coef[N-1]
37     W[N] = - 2 * coef[N] + 3*coef[N-1] - coef[N-2]
38     W[2: N] = coef[3:] - 3 * coef[2:N] + 3*W[1:N-1] - coef[:N-2]
39
40     # berekend de functiewaarden in bepaalde punten
41     x = np.linspace(lower-h, upper, N+2)
42     fx = fun(x[:-1])
43
44     # berekend de waarde van afgeleide
45     waarde = h**(-alpha) * np.dot(W, fx) / gamma(3-alpha)
46     fout = 1/gamma(3-alpha) * ( (2-alpha)/12 + 2**(3-alpha) / (3-alpha) - (2**(1-
47     alpha) + 1)) * h**(3-alpha)*factor
48
49     return waarde, fout

```

Listing 3: Implementatie L2 methode.

```

1 def convergentieOrde(stapGrootte, waarden, exact, grens = 0):
2     '''
3     Berekend de convergentie orde van een reeks waarden in functie van hun
4     stapgrootte. door de richtingscoëfficiënt van de regressielijn van de
5     experimentele fout uitgedrukt in functie van de stapgrootte.
6
7     Parameters:
8         stapGrootte (list: double)           de afstand tussen 2 opeenvolgende
9         waarden (list: float, float)         de waarde en de fout via de methode

```

```

    bekomen.
9         exact      (float)                de exacte waarde van de caputo
        integraal die berekend werd
10        grens      (int)                *optioneel. vanaf welke waarde in de
        lijst wordt gestard. Is om eventuele uitschieters uit te sluiten.
11    output:
12        de convergentie orde.
13
14    '''
15    # klaarzetten van de lijsten door vanaf grens te beginnen
16    stapGrootte= stapGrootte[grens:]
17    uitkomsten= np.array([g[0] for g in waarden[grens:]])
18
19    # logaritmes nemen van de stapgrootte en de absolute fout
20    xLog = np.log(stapGrootte)
21    yELog = np.log(np.abs(uitkomsten-exact))
22
23    # berekend de regressielijn
24    A = np.vstack([xLog, np.ones(len(xLog))]).T
25    mE, cE = np.linalg.lstsq(A, yELog, rcond=None)[0]
26
27    return mE, cE

```

Listing 4: Implementatie convergentie orde de bepalen.

```

1 def converGraph(stapGrootte, waarden_fouten, exact, grens = 0, factor=1):
2     '''
3     plot de fout in functie van de stapgrootte, er kunnen 2 zaken uit de grafiek
        af te lezen zijn, de experimentele fout en de theoretische fout.
4
5     Parameters:
6         stapGrootte (list: double)                de afstand tussen 2 opeenvolgende
        punten in een uniform grid. die gebruikt
7         waarde      (list: float, float)         de waarde ne de fout via de methode
        bekomen.
8         exact      (float)                de exacte waarde van de caputo
        integraal die berekend werd
9         grens      (int)                *optioneel. vanaf welke waarde in de
        lijst wordt gestard. Is om eventuele uitschieters uit te sluiten.
10        factor      (float)                *optioneel. geeft de waarde voor |max
        f''(x)|

```

```

11
12     '''
13     # klaarzetten van de lijsten door vanaf grens te beginnen
14     stapGrootte= stapGrootte[grens:]
15     waarden= waarden_fouten[grens:]
16     stapGrootte[:-1]
17     waarden[:-1]
18
19     val= np.array([g[0] for g in waarden])
20     fouten = np.array([g[1]*factor for g in waarden])
21
22     # logaritme nemen van de stapgrootte en de absolute fout berekenen.
23     xLog = np.log(stapGrootte)
24     yELog = np.abs(val-exact)
25
26     # de theoretische foutgrens bepalen
27     A = np.vstack([xLog, np.ones(len(xLog))]).T
28     mT, cT = np.linalg.lstsq(A, np.log(fouten), rcond=None)[0]
29
30     # figuur maken
31     fig,ax = plt.subplots()
32     ax.set_title(r"grootorde van fout uitgezet naar $h$")
33     ax.set_yscale('log')
34     ax.set_xscale('log')
35
36     ax.plot(stapGrootte, yELog, 'bo', label='expirimentele fout', markersize=10)
37     ax.plot(stapGrootte, np.exp(mT*xLog + cT), 'r', label='regressielijn
theoretische fout')
38     ax.set_xlabel(r"stapgrootte $h$ in log schaal")
39     ax.set_ylabel(r"fout in log schaal")
40     ax.legend(fontsize=10)
41
42     plt.show()

```

Listing 5: Implementatie voor grafiek met absolute fout naar stapgrootte.

```

1 def exacteCaputoVeelterm(macht, alpha, a, x):
2     """
3     berekend de exacte waarde van de Caputo afgeleide van een functie $f(t) = (t
-a)^{\{macht\}}$
4

```

```
5     input
6         macht (float)  de macht van de functie f
7         alpha (float)  waarde voor de Caputo afgeleide.
8         a      (float)  ondergrens
9         x      (float)  bovengrens
10    """
11    return (gamma(macht+1) / gamma(macht-alpha+1) ) * ((x-a)**(macht-alpha))
```

Listing 6: Implementatie exacte oplossing van Caputo afgeleide van een machtsfunctie.

Referenties

- [1] Kai Diethelm. *The analysis of fractional differential equations*, volume 2004 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 2010. An application-oriented exposition using differential operators of Caputo type.
- [2] Guang-hua Gao, Zhi-zhong Sun, and Hong-wei Zhang. A new fractional numerical differentiation formula to approximate the Caputo fractional derivative and its applications. *J. Comput. Phys.*, 259:33–50, 2014.
- [3] Changpin Li and Min Cai. *Theory and numerical approximations of fractional integrals and derivatives*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, [2020] ©2020.
- [4] Francesco Mainardi. *Fractional calculus and waves in linear viscoelasticity*. Imperial College Press, London, 2010. An introduction to mathematical models.
- [5] Igor Podlubny. *Fractional differential equations*, volume 198 of *Mathematics in Science and Engineering*. Academic Press, Inc., San Diego, CA, 1999. An introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications.
- [6] Joris Van der Jeugt. *Numerieke Analyse*. Ghent University, 2023. Cursusnota's.
- [7] Jason Vindas. *Analyse I*. Ghent University, 2021. Cursusnota's.
- [8] Yuan-Ming Wang and Zi-Yun Zheng. A second-order $L2-1_\sigma$ Crank-Nicolson difference method for two-dimensional time-fractional wave equations with variable coefficients. *Comput. Math. Appl.*, 118:183–207, 2022.