Caputo 分数阶导数的一种二阶逼近方法

黄凤辉

（华南理工大学理学院，广州 510641）

摘要：根据 Riemann-Liouville 分数阶积分的一种二阶精度的逼近方法，导出求解 Caputo 分数阶导数的一种二阶方法。该方法可以看作是一阶导数二阶精度的三点公式的推广。最后给出 2 个数值例子，验证了方法的有效性及其收敛精度。

关键词：偏微分方程数值解；Caputo 分数阶导数；Riemann-Liouville 分数阶积分

中图分类号：O175.2 **文献标识码**：A **文章编号**：1674-2850(2012)07-1205-7

A second-order accurate numerical approximation for Caputo fractional derivatives

HUANG Fenghui

(*School of Sciences, South China University of Technology, Guangzhou* 510641, *China*)

Abstract: This paper proposes a second-order accurate algorithm for Caputo fractional derivative based on the numerical algorithm for the fractional Riemann-Liouville integration. The method can be considered the generalization of the three points formula for the first-order derivative. Two numerical examples are given to illustrative the effectiveness and the convergence order of the method.

Key words: numerical solution of partial differential equations; Caputo fractional derivative; Riemann-Liouville fractional integral

0 引言

分数阶微积分是传统的整数阶微积分概念的推广，专门研究任意阶积分和微分的数学性质及其应用领域。数学家 LEIBNIZ 在 1695 年最早提出了这一思想，在他之后也有许多数学家先后在该领域做出了杰出的贡献。近三百年来，分数阶微积分这一重要的纯数学分支已渐成体系，但是发展极为缓慢，而且分数阶微积分理论还不完善。其主要原因是分数阶微积分的多种定义之间的不等价性及其非局部性使其缺乏明显的几何意义，应用一时受到限制。直到 MANDELBROT 提出分形学说，将 Riemann-Liouville 分数阶微积分用以分析和研究分形媒介中的布朗运动，分数阶微积分才在许多学科的现代工程计算中得到广泛关注和应用。另外，PODLUBNY[1]和 MACHADO[2]分别给出了分数阶导数的几何及应用解释。由于应用的推广，分数阶微积分在近几年得到了较大发展，已被广泛应用于物理、化学、地下水模拟、系统生物、金融、水文、生态环境等诸多领域[3~6]，引起了越来越多的专家和学者的兴趣和关注。然而，分数阶微积分在数值算法方面还是比较有限的。现有的算法包括基于 Grunwald-Letnikov 分数阶导数的逼近公式（称之为 G 算法，一阶精度）[7]；LUBICH 于 1986 年提出的所谓 R 算法（计算分数阶积分，一～二阶精度）和 L 算法（计算 α 阶分数阶导数，精度小于二阶）[8~9]；Lubich 分数阶线性多步法[10]；以及 DIETHELM[11]于 1997 年提出的所谓 D 算法（计算 α 阶分数阶导数，$0<\alpha<1$ 时为 $2-\alpha$ 阶精度）。这些方法最终都表示成一些给定的离散点上的函数值的加权和，可以看作是整数阶导数差商逼近的推广，统称为分数阶导数的差商逼近。这里将一种求解 Riemann-Liouville 分数阶积分的二阶精度的 R 算法推广应用到求解 Caputo 分数阶导数上，得到一种新的二阶精度方法。

基金项目：高等学校博士学科点专项科研基金（新教师基金）(20070561040)；中央高校基本科研业务费专项资金（2009ZM0050）

作者简介：黄凤辉（1974—），女，副教授，主要研究方向：微分方程数值解. E-mail：huangfh@scut.edu.cn

1 分数阶微积分介绍

1.1 定义

一直以来，人们不断探讨分数阶微积分的定义及其性质。在不同科学技术领域的应用问题中，分数阶微积分采用的定义也有所不同。主要有 Riemann-Liouville，Weyl，Reize，Caputo，Compos 等定义。下面给出这里要用到的分数阶微积分的定义。

定义 1 设 $\mu\in\mathbb{R}$，对于实函数 $f(x)$，$x>0$，若存在实数 $p>\mu$，$f_1(x)\in C(0,\infty)$，使得 $f(x)=x^p f_1(x)$，那么称函数 $f(x)$ 属于空间 C_μ；当且仅当 $f^{(m)}(x)\in C_\mu$ 时，$f(x)$ 属于空间 C_μ^m，$m\in\mathbb{N}$.

定义 2 若 $f(x)\in C_\mu$，$\mu\geqslant -1$，则 $\alpha\geqslant 0$ 阶 Riemann-Liouville 分数阶积分定义为

$$J_a^\alpha f(x)=\frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_a^x (x-y)^{\alpha-1}f(y)\mathrm{d}y,\quad \alpha>0,\ x>a,$$
$$J_a^0 f(x)=f(x).$$

特别地，当 $a=0$ 时，简记 $J_0^\alpha f(x)=J^\alpha f(x)$. Riemann-Liouville 分数阶积分算子具有如下一些性质。

引理 1 若 $f(x)\in C_\mu^m(\mu\geqslant -1)$，$\alpha,\beta>0$，$0\neq\gamma\geqslant -1$，则有

1) $J_a^\alpha J_a^\beta f(x)=J_a^{\alpha+\beta}f(x)$，　　2) $J_a^\alpha J_a^\beta f(x)=J_a^\beta J_a^\alpha f(x)$，

3) $J_a^\alpha (x-a)^\gamma=\dfrac{\Gamma(\gamma+1)}{\Gamma(\alpha+\gamma+1)}(x-a)^{\alpha+\gamma}$，　4) $J^\alpha \mathrm{e}^{ax}=x^\alpha\sum\limits_{k=0}^{\infty}\dfrac{(ax)^k}{\Gamma(\alpha+k+1)}$，

5) $J^\alpha\cos(ax)=x^\alpha\sum\limits_{k=0}^{\infty}\dfrac{(-1)^k(ax)^{2k}}{\Gamma(\alpha+2k+1)}$，　　6) $J^\alpha\sin(ax)=x^\alpha\sum\limits_{k=0}^{\infty}\dfrac{(-1)^k(ax)^{2k+1}}{\Gamma(\alpha+2k+2)}$.

有关 Riemann-Liouville 分数阶积分算子的性质请参见文献[7]。

定义 3 函数 $f(x)\in C_{-1}^m$，$m\in\mathbb{N}$，定义 α 阶 Caputo 分数阶导数为

$${}_aD_*^\alpha f(x)=J_a^{m-\alpha}[f^{(m)}(x)]=\begin{cases}\dfrac{1}{\Gamma(m-\alpha)}\displaystyle\int_a^x (x-y)^{m-\alpha-1}f^{(m)}(y)\mathrm{d}y, & m-1<\alpha<m,\\ \dfrac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}f(x), & \alpha=m.\end{cases}\tag{1}$$

特别地，当 $a=0$ 时，简记 ${}_aD_*^\alpha f(x)=D_*^\alpha f(x)$.

定义 4 若函数 $f(x)\in C_\mu$，$\mu\geqslant -1$，定义其 α 阶 Riemann-Liouville 分数阶导数为

$${}_aD^\alpha f(x)=\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}[J_a^{m-\alpha}f(x)]=\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\left[\frac{1}{\Gamma(m-\alpha)}\int_a^x (x-y)^{m-\alpha-1}f(y)\mathrm{d}y\right]\quad (m-1<\alpha\leqslant m).$$

引理 2 若 $m-1<\alpha\leqslant m$，函数 $f(x)\in C^{m-1}$，并设 ${}_aD^\alpha f(x)$ 存在，那么

$${}_aD^\alpha f(x)={}_aD_*^\alpha f(x)+\sum_{k=0}^{m-1}\frac{x^{k-\alpha}f^{(k)}(a)}{\Gamma(k-\alpha+1)}.\tag{2}$$

1.2 分数阶积分的 R2 算法

数值计算分数阶积分、微分方程，特别是线性和非线性的 Abel 积分方程，以及含分数阶积分算子的积分微分方程，其关键是寻找好的数值方法求解 Riemann-Liouville 积分算子。LUBICH[8]提供了一类方法（R 算法），其中一种具有二阶精度，即所谓的 R2 算法，由如下定理给出。另外，为书写简洁，取 $a=0$，但不是必要的。

定理 1 （R2 算法[8~9]） 设 $f(x)\in C^2[0,T]$，$x_k=kh$，$h=T/N$，则

$$[J^{\alpha}f(x)](x_k)=\sum_{j=0}^{k}a_{j,k}f(x_j)+E_J(f,h,\alpha),$$

其中，

$$a_{j,k}=\frac{h^{\alpha}}{\Gamma(\alpha+2)}\begin{cases}(k-1)^{\alpha+1}-(k-\alpha-1)k^{\alpha}, & j=0,\\ (k-j+1)^{\alpha+1}-2(k-j)^{\alpha+1}+(k-j-1)^{\alpha+1}, & 1\leqslant j\leqslant k-1,\\ 1, & j=k,\end{cases}$$

$|E_J(f,h,\alpha)|\leqslant c_{\alpha}\|f''\|_{\infty}(x_k)^{\alpha}h^2=O(h^2)$，$c_{\alpha}$ 是与 α 有关的常数。

注：当 $\alpha=1$ 时，R2 算法退化成复化梯形公式：

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{M-1}f(x_k)]+O(h^2),\ x_k=a+kh,\ h=(b-a)/M,\ k=0,1,\cdots,M.$$

因此，R2 算法也可以看作是复化梯形公式的推广。

2 Caputo 分数阶导数的数值逼近

2.1 数值逼近公式

由 Caputo 分数阶导数的定义 3，并应用 R2 算法可以得到如下求解 Caputo 分数阶导数的方法（在定理 1 中，α 用 $m-\alpha$ 替代，f 用 $f^{(m)}$ 取代）。

定理 2 设 $f(x)\in C^{m+2}[0,T]$，$m-1<\alpha\leqslant m$，并令 $x_k=kh$，$h=T/N$，则

$$[D_*^{\alpha}f(x)](x_k)=\frac{h^{m-\alpha}}{\Gamma(m-\alpha+2)}\{[(k-1)^{m-\alpha+1}-(k-m+\alpha-1)k^{m-\alpha}]f^{(m)}(x_0)+f^{(m)}(x_k)+$$
$$\sum_{j=1}^{k-1}[(k-j+1)^{m-\alpha+1}-2(k-j)^{m-\alpha+1}+(k-j-1)^{m-\alpha+1}]f^{(m)}(x_j)\}+E_D(f,h,\alpha),\qquad(3)$$

其中，$|E_D(f,h,\alpha)|\leqslant c_{m-\alpha}\|f^{(m+2)}\|_{\infty}(x_k)^{m-\alpha}h^2=O(h^2)$，$c_{m-\alpha}$ 是与 α 有关的常数。

在具体进行数值计算时，式（3）中整数阶导数可以用一些高阶方法（大于等于 2 阶精度）离散，最后仍保证二阶精度。下面以 $0<\alpha\leqslant 1$ 为例讨论，此时 $m=1$，式（3）中的各个节点上的一阶导数分别采用如下二阶方法离散：

$$f'(x_0)=\frac{-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)}{2h}+O(h^2),\qquad(4)$$

$$f'(x_k)=\frac{f(x_{k-2})-4f(x_{k-1})+3f(x_k)}{2h}+O(h^2),\quad k\geqslant 2\qquad(5)$$

$$f'(x_j)=\frac{f(x_{j+1})-f(x_{j-1})}{2h}+O(h^2),\quad 1\leqslant j\leqslant k-1,\qquad(6)$$

特别地，当 $\alpha=1$ 时，公式退化成一阶导数的三点逼近式（5）。

另外，对于 Riemann-Liouville 分数阶导数，根据它与 Caputo 分数阶导数的关系式（2），可以推出其对应的数值逼近格式，这里不多讨论。

2.2 精度及收敛性测试

为验证方法的有效性及其收敛性，选择了存在解析导数的函数来进行数值模拟。这里只讨论 $0<\alpha\leqslant 1$ 的情况，且对式（3）中的一阶导数采用二阶逼近格式［式（4）～式（6）］离散。另外，下面所有的数值结果若没有特别说明，则是计算 $x=1$ 处的导数值。

数值算例 1：考虑函数 $f(x)=E_{\mu}(-x^{\mu})$，μ 为给定的常数。由分数阶微积分的性质（引理 1）及 Caputo 分数阶导数的定义可以推出：$D^{\alpha}E_{\mu}(-x^{\mu})=x^{-\alpha}E_{\mu,1-\alpha}(-x^{\mu})-\dfrac{x^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}$，其中 $E_{\alpha,\beta}(z)$ 为 Mittag-

Leffler 函数，它由如下级数形式定义：

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

特别地，$E_{\alpha,1}(z)=E_{\alpha}(z)$.

表 1 给出了 α=0.5 时不同步长 h 和 μ 下的绝对误差值。由表 1 可以看出：对于不同的 μ，绝对误差随着步长 h 的减小而减小，即方法收敛。为进一步观察方法的精度，描述了误差与步长 h 的关系，如图 1 所示，其中两坐标均为对数坐标，μ=2.5. 虚线分别为不同 α 取值下步长与绝对误差的关系，实线则为 $y=2x$ 的直线。由图 1 可以看出：不同 α 取值下，绝对误差的对数与步长对称均为直线关系，且与$y=2x$的直线平行，表明方法是二阶收敛精度，即 $|E_D(f,h,\alpha)|=O(h^2)$.

表 1 不同步长 h 下的绝对误差

Tab. 1 Absolute errors varying with step h

h	$\lvert E_D(f,h,0.5)\rvert\ (\mu=2.0)$	$\lvert E_D(f,h,0.5)\rvert\ (\mu=3.5)$	$\lvert E_D(f,h,0.5)\rvert\ (\mu=6.3)$
0.1	0.000 647 304 870 06	0.001 082 029 069 89	0.000 019 356 100 03
0.05	0.000 234 928 148 24	0.000 371 820 401 56	0.000 011 954 872 95
0.01	0.000 013 424 837 22	0.000 020 222 890 64	0.000 000 961 951 63
0.005	0.000 003 598 329 595	0.000 005 370 950 47	0.000 000 272 069 27
0.001	0.000 000 156 905 360	0.000 000 231 643 458	0.000 000 012 605 61
0.000 5	0.000 000 039 996 080	0.000 000 058 905 831	0.000 000 003 254 42

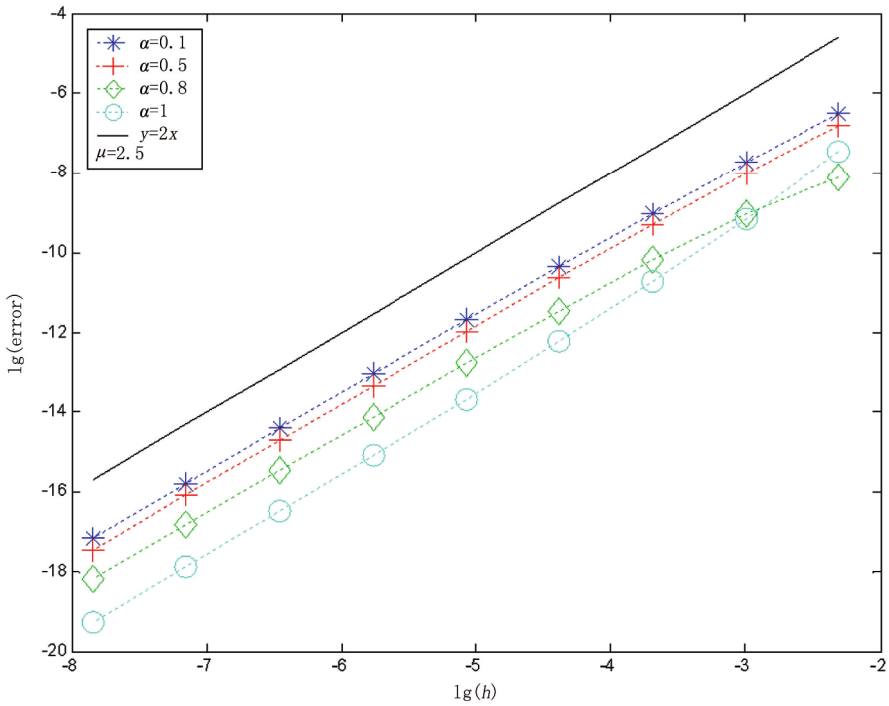


图 1 误差与步长的关系

Fig. 1 Errors as a function of the time step

数值算例 2：考虑函数 $f(x)=e^{ax}+\sin(bx)$，其中 a，b 为给定的常数。由分数阶微积分的性质（引理 1）及 Caputo 分数阶导数的定义，可以推出其解析导函数为

$$x^{-\alpha}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(ax)^k}{\Gamma(k-\alpha+1)}+bx^{1-\alpha}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k(bx)^{2k}}{\Gamma(2k-\alpha+2)}.$$

表 2 给出了不同步长 h 和 α 下的绝对误差值，此时 $a=-2$，$b=1$. 由表 2 可以看出：对于不同的 α，绝对误差随着步长 h 的减小而减小，即方法收敛。图 2 描述了误差与步长 h 的关系，其中两坐标均为对数坐标，$\alpha=0.5$. 虚线分别为不同 a，b 取值下步长与绝对误差的关系，实线则为 $y=2x$ 的直线。由图 2 可以看出：对于不同的具体函数 $f(x)$，绝对误差对数值与步长对数值均为直线关系，且与 $y=2x$ 的直线平行，表明方法是二阶收敛精度，即 $|E_D(f,h,\alpha)|=O(h^2)$.

表 2 不同步长下各分数阶导数的绝对误差

Tab. 2 Absolute errors varying with various step h

h	α			
	0.1	0.5	0.7	1
0.10	0.008 214 953 837 30	0.005 959 040 649 52	0.002 865 000 736 21	0.006 209 368 761 43
0.05	0.002 357 069 672 77	0.001 807 929 623 13	0.001 027 750 988 95	0.001 449 319 949 93
0.025	0.000 629 252 002 00	0.000 499 372 303 88	0.000 309 004 896 24	0.000 350 043 213 33
0.012 5	0.000 162 491 957 29	0.000 132 105 432 16	0.000 086 497 122 80	0.000 086 009 523 65
0.006 25	0.000 041 287 514 58	0.000 034 171 219 98	0.000 007 876 799 63	0.000 021 316 811 39
0.001	0.000 001 071 710 59	0.000 000 912 090 06	0.000 000 300 586 901	0.000 000 541 746 04
0.000 5	0.000 000 268 293 36	0.000 000 229 669 36	0.000 000 082 659 080	0.000 000 135 342 02

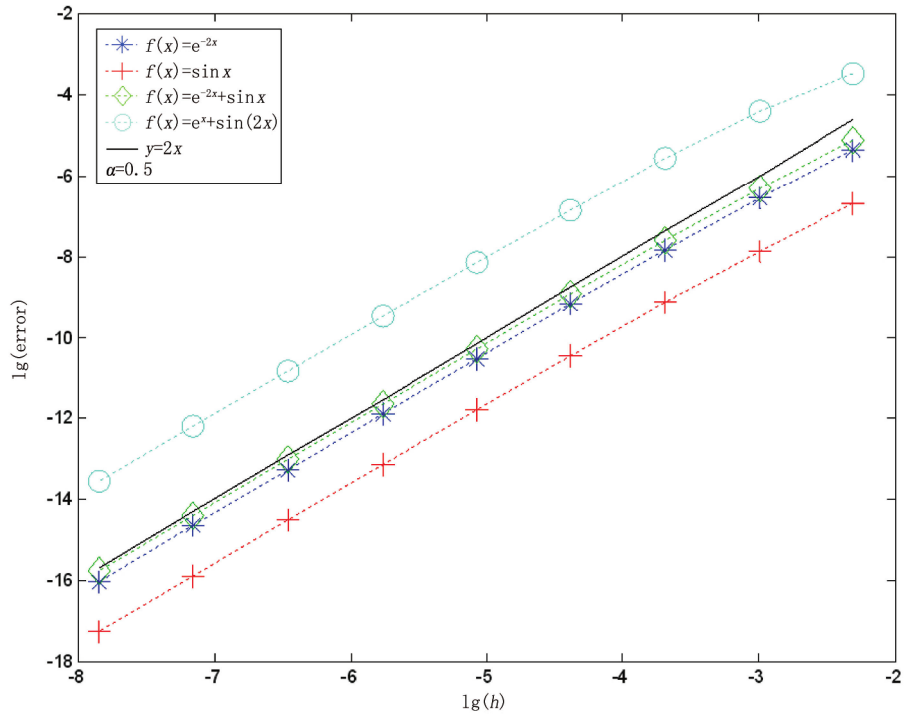


图 2 误差与步长的关系

Fig. 2 Errors as a function of the time step

另外，在前面提到的多种分数阶微积分的逼近方法中，只有 L 算法是直接针对 Caputo 分数阶导数提出的一种逼近方法。这里，将其拿来与式（3）进行比较，用这 2 种数值算法计算函数 $f(x)=e^{-2x}+\sin\left(\frac{3x}{2}\right)$ 在 $x=0.5$ 时的 Caputo 分数阶导数值。图 3 给出的即是 2 种方法的误差与步长 h 关系的比较，其中两坐标均为对数坐标，$\alpha=0.3$. 由图 3 可以看出：式（3）是二阶收敛，且高于 L 算法的精度（$0<\alpha<1$时为 $2-\alpha$ 阶精度[12]）。

以上 2 个算例均表明了式（3）的有效性及其二阶收敛精度。

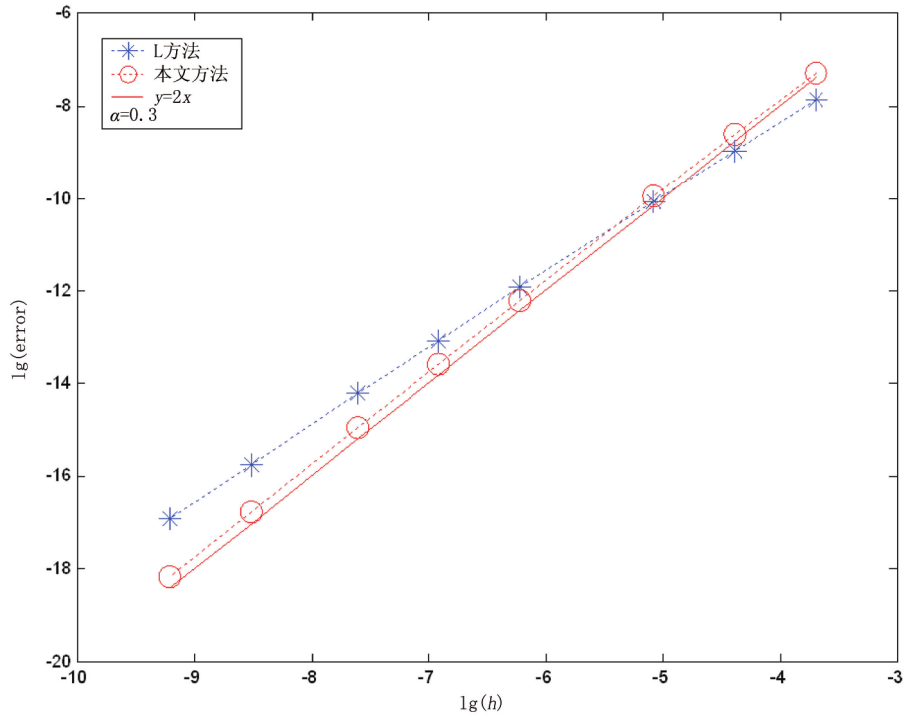


图 3　两种方法的误差与步长关系的比较

Fig. 3　Comparison of the relationships between error and time step of the two methods

3　结论

给出了一种数值求解 Caputo 分数阶导数的二阶精度方法。数值测试结果表明了 $0<\alpha\leqslant 1$ 时方法的有效性。特别地，当 $\alpha=1$ 时，方法退化为一阶导数的三点差商逼近格式（5）。另外，该方法也可以推广应用到数值计算 Riemann-Liouville 分数阶导数。

[参考文献] (References)

[1] PODLUBNY I. Geometric and physical interpretation of fractional integration and fractional differentiation[J]. Fractional Calculus and Applied Analysis, 2002, 5(4): 367-386.

[2] MACHADO T J A. Fractional derivatives: probability interpretation and frequency response of rational approximations[J]. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulations, 2009, 14(9-10): 3492-3497.

[3] DIETHELM K, FREED A D. On the solution of nonlinear fractional-order differential equations used in the modeling of viscoplasticity[A]. KEIL F, MACKENS W, WERTHER J, et al. Scientisc Computing in Chemical Engineering II. Computational Fluid Dynamics, Reaction Engineering, and Molecular Properties[C]. Heidelberg: Springer-Verlag, 1999. 217-224.

[4] BENSON D A, WHEATCRAFT S W, MEERSCHAERT M M. Application of a fractional advection-dispersion equation[J]. Water Resources Research, 2000, 36(6): 1403-1412.

[5] MAINARDI F, RABERTO M, GORENFLO R, et al. Fractional calculus and continuous-time finance II: the waiting-time distribution[J], Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2000, 287(3-4): 468-481.

[6] SU N, LIU F, ANH V. Simulating seawater intrusion in aquifers using the modified Fokker-Planck equation and Boussinesq equation subject to phase-modulated tidal waves[A]. GULATI C, LIN Y X, MISHRA S, et al. Advances in Statistics, Combinatorics and Related Areas Selected Papers from the SCRA2001-FIM VIII[C]. Singapore: World Scientific, 2002. 320-331.

[7] PODLUBNY I. Fractional differential equations[M]. San Diago: Academic Press, 1999.

[8] LUBICH C H. Discretized fractional calculus[J]. SIAM J. Math. Anal., 1986, 17: 704-719.

[9] DIETHELM K, FORD N J, FREED A D. Detailed error analysis for a fractional Adams method[J]. Numerical Algorithms, 2004, 36(l): 31-52.

[10] LUBICH C H. Fractional linear multistep methods for Abel-Volterra integral equations of the second kind[J]. Math. Comp., 1985, 45(172): 462-469.

[11] DIETHELM K. An algorithm for the numerical solution of differential equations of fractional order[J]. Electron. Trans. Numer. Anal., 1997, 5: 1-6.

[12] 郭柏灵，蒲学科，黄凤辉. 分数阶偏微分方程及其数值解[M]. 北京：科学出版社，2011.
GUO B L, PU X K, HUANG F H. Fractional partial differential equations and their numenrical solutions[M]. Beijing: Science Press, 2011. (in Chinese)