

分数阶 Caputo 导数的 Dirichlet 型边值问题的射线方法阶数为 $\alpha \in (1, 2)$

Kai Diethelm*

对于与阶数为 $\alpha \in (1, 2)$ 的非线性分数阶微分方程相关的 Dirichlet 型边值问题的数值解，我们建议使用打靶法。特别地，我们证明所谓的比例分割技术在选择所需的初始值时会导致收敛到高精度且迭代次数非常少的数值方案，并提供了这种有利数值行为的分析背景解释。

1 介绍

本文的主要目标是建立一种数值方法，用于求解区间 $[0, T]$ 上的非线性分数阶微分方程

$$D^\alpha y(t) = f(t, y(t)) \quad (1a)$$

阶为 $\alpha \in (1, 2)$ 的狄利克雷型边值条件下的

$$y(0) = b_0, \quad y(T) = b_1, \quad (1b)$$

的边值问题，其中涉及某些 $T > 0$ 和任意给定的 $b_0, b_1 \in \mathbb{R}$ 。在公式 (1a) 中， D^α 表示以起点 0 开始的 Caputo 型微分算子，在我们的假设 $1 < \alpha < 2$ 下定义为

$$D^\alpha z(t) = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \frac{d^2}{dt^2} \int_0^t (t-\tau)^{1-\alpha} [z(\tau) - z(0) - \tau z'(0)] d\tau,$$

参见 [6, Chapter 3]。

众多用于类似问题数值解的算法已被提出，但它们通常仅针对微分方程是线性 [2, 3, 4, 17, 22] 的特殊情况构建和分析。这是一个我们不希望施加的限制。因此，我们的方法将遵循与那些工作中提出的方案显著不同的设计原则。

*Faculty of Applied Natural Sciences and Humanities (FANG), Technical University of Applied Sciences Würzburg-Schweinfurt, Ignaz-Schön-Str. 11, 97421 Schweinfurt, Germany, kai.diethelm@thws.de; ORCID 0000-0002-7276-454X

2 一种打靶方法

众所周知，使用 Caputo 导数的阶数为 $\alpha \in (1, 2)$ 的分数阶微分方程与二阶经典边值问题有许多共同的性质。因此，似乎自然地要采用一种已被证明对二阶问题有效的数值方法，即射击法 [19] 概念，也用于这里考虑的分数阶问题。射击法的基本原理包括将给定的边值问题重新解释为一个初值问题，该初值问题在感兴趣区间的左端点处需要通过迭代过程确定其第二个初始值 $y'(0)$ ，使得区间右端点的边界条件得到满足。后者是通过标准的分数阶初值问题数值求解器以近似的方式实现的。从抽象的角度来看，这导致了以下算法：

1. 设置 $k = 0$ 并猜测 $y'(0)$ 的一个值 $b'_{0,k}$ 。
2. 数值计算初值问题的近似解 y_k ，该问题包括微分方程 (1a) 和初始条件 $y_k(0) = b_0$ 和 $y'_k(0) = b'_{0,k}$ 。
3. a) 如果 $y_k(T)$ 足够接近所需的边界值 b_1 ，接受 y_k 作为边值问题 (1) 的近似解并停止。
b) 否则，确定一个新的猜测 $b'_{0,k+1}$ 用于 $y'(0)$ ，将 k 增加 1，并返回步骤 2。

要完整地描述和实现这样的算法，则需要指定以下组件：

- 初始猜测 $b'_{0,k}$ 的选择 对于 $y'(0)$ ，
- 初始值问题在第 2 步中所需的数值求解器，并且
- 计算下一个猜测值 $b'_{0,k+1}$ 的算法，如果当前迭代中计算出的近似解对于 $y'(0)$ 而言不够准确。

特别地，我们可以这样解释最后一个项目：由于所有其他数据保持不变，我们可以认为当前近似解在右端点的函数值 $y_k(T)$ 只依赖于初始猜测 $b'_{0,k}$ ，即存在某个函数 ϕ 使得 $y_k(T) = \phi(b'_{0,k})$ 成立。为了达到我们的目标 $y_k(T) = b_1$ ，因此我们需要找到一个满足方程

$$\phi(b'_{0,k}) = b_1. \quad (2)$$

的值 $b'_{0,k}$ 。因此，为了获得一个快速的射线算法，有效地解决这个（通常是非线性的）方程至关重要。在此背景下一个明显的想法是使用牛顿法；确实，这已经被建议过，例如，在 [1] 中。然而，计算这种方法所需导数并不总是可行的，并且即使能够计算这些导数，它们的评估也可能成本过高。因此，我们提出了一种基于以下结果的不同方法，该结果是最近关于分数阶初始值问题（阶数为 $\alpha \in (1, 2)$ ）某些性质的一个观察的推论，参见 [5, Theorem 8]。

定理 1. 考虑初值问题

$$D^\alpha y_k(t) = f(t, y_k(t)), \quad y_k(0) = y_0, \quad y'_k(0) = y_{k,1} \quad (k = 1, 2) \quad (3)$$

对于 $t \in [0, \tilde{T}]$ 其中 $1 < \alpha < 2$, 其中假设 f 是连续的, 并且在第二个变量中满足具有 *Lipschitz* 常数 L 的 *Lipschitz* 条件。假设 $y_{1,0} \leq y_{2,0}$ 和 $y_{1,1} \leq y_{2,1}$ 。然后, 定义

$$\tilde{a}_*(t) := \inf_{\tau \in [0, t], y \neq 0} \frac{f(\tau, y + y_1(\tau)) - f(\tau, y_1(\tau))}{y}$$

and

$$\tilde{a}^*(t) := \sup_{\tau \in [0, t], y \neq 0} \frac{f(\tau, y + y_1(\tau)) - f(\tau, y_1(\tau))}{y},$$

存在某个 $T \in (0, \tilde{T}]$ 使得

$$(y_{2,1} - y_{1,1})tE_{\alpha,2}(\tilde{a}_*(t)t^\alpha) \leq y_2(t) - y_1(t) \leq (y_{2,1} - y_{1,1})tE_{\alpha,2}(\tilde{a}^*(t)t^\alpha) \quad (4)$$

对于所有 $t \in [0, T]$ 。

这里, $E_{\alpha,\beta}$ 表示通常的两参数 Mittag-Leffler 函数 [16]。由定理 1, 我们可以读出两条重要信息:

1. 如果 T 足够小, 我们可以保证边值问题 (1) 具有唯一解。
2. 特殊情况 $t = T$ 的方程 (4) 而言, 至少在渐近意义上, 区间右端点处两个解的边界值之差 $y_2(T) - y_1(T)$ 与这些解在左端点处的一阶导数之差 $y_{2,1} - y_{1,1} = y_2'(0) - y_1'(0)$ 成正比, 前提是这两个解本身在左端点处重合, 即如果 $y_1(0) = y_2(0)$ 。

其中前者让我们得出结论, 对解进行数值近似是有意义的。后者告诉我们可以采用在 [11] 中介绍的方法解决阶数为 $\alpha \in (0, 1)$ 的分数终端值问题, 并使用所谓的比例分割法来确定初始值 $y'(0)$ 的下一个猜测值。实际上, 这相当于用割线法求解方程 (2)。

因此, 根据 [11] 中概述的策略, 我们的算法按照公式

$$\begin{aligned} b'_{0,k+1} &= b'_{0,k} + (b_1 - y_k(T)) \frac{b'_{0,k} - b'_{0,k-1}}{y_k(T) - y_{k-1}(T)} \\ &= \lambda_{k+1} b'_{0,k} + (1 - \lambda_{k+1}) b'_{0,k-1} \end{aligned} \quad (5)$$

计算出 $b'_{0,k+1}$ 对于 $y'(0)$ 的猜测值其中

$$\lambda_{k+1} = \frac{b_1 - y_{k-1}(T)}{y_k(T) - y_{k-1}(T)}.$$

由于我们在 (5) 中展示的方法使用了 $b'_{0,k}$ 和 $b'_{0,k-1}$, 即当前对 $y'(0)$ 的近似值和前一个, 来计算新的猜测值 $b'_{0,k+1}$, 因此需要提供两个初始猜测值来启动算法。因此, 为了完成射线法的描述, 我们需要指定初始猜测值 $b'_{0,0}$ 和 $b'_{0,1}$ 用于 $y'(0)$ 。

在讨论的类似应用 [11] 中已经表明, 这种方法对于起始值的选择非常鲁棒, 并且达到给定精度所需的迭代次数仅非常弱地依赖于所选 $b'_{0,0}$ 和 $b'_{0,1}$ 的值。因此我们通常使用特别简单和计算成本低廉的选择

$$b'_{0,0} = 0 \quad \text{and} \quad b'_{0,1} = \frac{1}{T}(b_1 - b_0) \quad (6)$$

(后者是在给定区间上的精确解的一阶导数的平均值)。在特殊情况下当 $b_0 = b_1$, 这将导致 $b'_{0,0} = b'_{0,1}$, 这是不允许的, 因此我们此时 (仅在此时) 用

$$b'_{0,0} = 0 \quad \text{and} \quad b'_{0,1} = \begin{cases} 1 & \text{if } y_0(T) > b_1, \\ -1 & \text{if } y_0(T) < b_1. \end{cases} \quad (7)$$

替换 (6)

最后, 根据 [11, 12] 的观察结果, 我们建议使用分数阶 Adams-Bashforth-Moulton 方法 [8, 9] 或二阶分数阶后向差分公式 [20, 21] 来求解选定初始条件下的分数阶初值问题。为了简化和提高效率, 我们为这些求解器使用均匀网格, 并采用基于 FFT 的实现方式 [15, 18], 该方式只需 $O(N \log^2 N)$ 次操作即可计算出在 N 个网格点上的数值解。

3 方法的性质

算法的误差可以通过一种类似于在 [11] 中终端值问题求解器所采用的方法来进行分析。

定理 2. 假设定理 1 的前提条件, 即 T 按照该定理所述进行选择, 并且初值问题求解器以某个常数 $p > 0$ 逼近给定的分数阶微分方程 (1a) 的解具有 $O(N^{-p})$ 收敛阶。那么

$$\max_{j=0,1,2,\dots,N} |y(t_j) - y_k(t_j)| = O(|y'(0) - b'_{0,k}|) + O(N^{-p}). \quad (8)$$

证明. 证明遵循了 [11, proofs of Theorems 4.1 and 4.2] 的思路。 $\square$

此外, 正如在 [11, Subsection 4.2] 中所见, 该算法具有数值稳健性, 并且继承了基础分数阶常微分方程求解器的稳定性。我们在这里建议的求解器 (Adams-Bashforth-Moulton 或分数阶 BDF) 已被证明是合适的, 在 [13, 14, 20] 中。

4 一个数值示例

作为一个数值示例来展示我们方法的性能, 我们来看属于图 1 中蓝色曲线的微分方程

$$D^{1.55}y(t) = \frac{1}{(t+5)^{0.65}} \sin(1.3 \cdot t \cdot y(t)), \quad (9a)$$

一个稍作变化的问题, 讨论见 [11, Example 5.3]。为了以适当的方式指定相关的狄利克雷边界条件, 我们首先注意到边值问题解的唯一性确实依赖于所考虑区间的长度。如果我们选择例如区间 $[0, 5.384]$ 并通过步长为 $h = 10^{-6}$ 的 BDF2 数值计算一些解, 那么我们可以观察到如图 1 所示的行为。我们选择了两个解 y_1 和 y_2 满足微分方程 (9a) 的初始条件 $y_1(0) = y_2(0) = 1$, $y_1'(0) = -0.15$ 和 $y_2'(0) = -0.3$, 分别。由于区间过长, 无法满足保证这些解分离所需的条件, 我们发现 y_1 和 y_2 的图像在 $t^* \approx 5.384$ 处相交, 并且具有相同的函数值 $y_1(t^*) = y_2(t^*) = y^* \approx 0.387$ 。因此, 在如此长的区间内, 微分方程 9a 在边界条件 $y(0) = 1$ 和 $y(t^*) = y^*$ 下的边值问题至少有两个解。在这种情况下, 通常无法预测射线法会收敛到哪一个解。

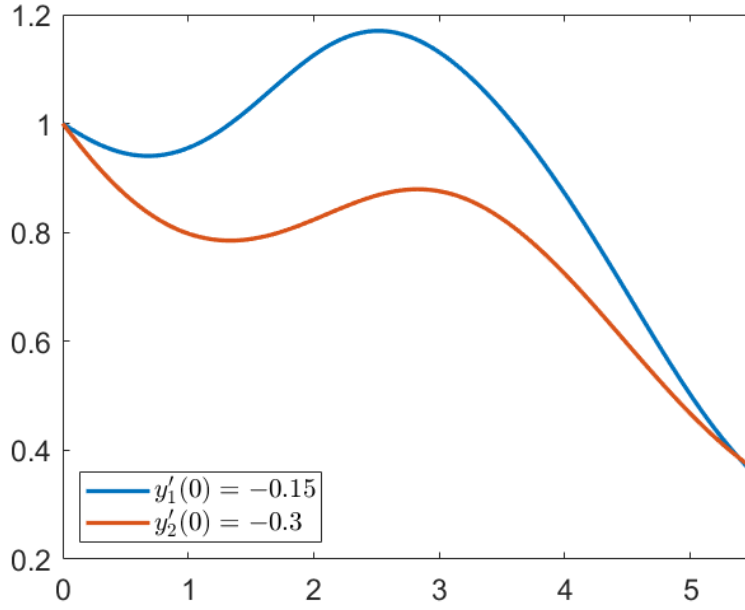


Figure 1: 微分方程 (9a) 的两个解 y_1 和 y_2 的图形, 它们都满足 $y_k(0) = 1$, 但 $y_k'(0)$ 的值不同: 这两个解在 $t^* \approx 5.384$ 处相交。

因此, 我们需要减小区间长度以保证边值问题解的唯一性。根据 [5] 的观察, 可以通过选择区间 $[0, 2.9]$ 来证明存在唯一的解。因此, 在我们的数值示例中, 我们将微分方程 (9a) 与边界条件

$$y(0) = 1 \quad \text{and} \quad y(2.9) = 1.145 \quad (9b)$$

结合起来。。使用 BDF2 方法解决此情境中的初始值问题, 我们的算法随后给出了表 1 所示的结果。我们可以观察到, 即使对于请求的精度为 10^{-10} , 射线法也仅在 7 次迭代中收敛至该误差。

step size	requested accuracy	no. of shooting iterations	actual maximal error over $[0, 2.9]$
1/100	10^{-4}	5	$1.15 \cdot 10^{-5}$
1/100	10^{-8}	6	$1.25 \cdot 10^{-7}$
1/200	10^{-8}	6	$2.91 \cdot 10^{-8}$
1/400	10^{-8}	6	$4.95 \cdot 10^{-9}$
1/400	10^{-10}	7	$6.76 \cdot 10^{-9}$
1/800	10^{-10}	7	$7.24 \cdot 10^{-10}$

Table 1: 边值问题的数值结果 (9)。

计算是通过我们的算法的 MATLAB 实现完成的，可以从 [7] 下载。

5 总结与结论

在我们最近的论文 [11] 中，我们开发并分析了用于求解与 Caputo 型分数阶微分方程相关的终端值问题的比例分割方案。该方程的阶数为 $\alpha \in (0, 1)$ 。现在我们将所涉及的微分算子的阶数假设更改为 $\alpha \in (1, 2)$ 。那么，此类方程的理论表明单一的终端条件已不足以保证解的唯一性。从我们在 [5] 中开发的结果来看，在考虑区间的长度满足一定条件下，如果将终端条件增加一个初始条件，则可以恢复唯一性，从而生成具有狄利克雷数据的边值问题。自然地，我们想要寻求此类方程的有效数值解法，并且我们在此展示了通过适当调整来自 [11] 的数值方案，我们可以为此更高阶的问题创建这样一个有效的算法，该问题有两组附加条件而非一组。

软件

本文中描述的主要算法的 MATLAB 源代码可以从 Zenodo 平台上的专用仓库 [7] 免费下载，从而允许所有读者重现我们数值实验的结果。所需的辅助例行程序也可以从 Zenodo 获得；见 [10]。我们的函数在 MATLAB R2023a 中进行了测试。

竞争利益 作者声明与本研究内容相关的不存在任何利益冲突。

References

- [1] Al-Mdallal, Q.M., Hajji, M.A.: A convergent algorithm for solving higher-order nonlinear fractional boundary value problems. *Fract. Calc. Appl. Anal.* **18**(6), 1423–1440 (2015). DOI 10.1515/fca-2015-0082
- [2] Al-Mdallal, Q.M., Syam, M.I., Anwar, M.N.: A collocation-shooting method for solving fractional boundary value problems. *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* **15**(12), 3814–3822 (2010). DOI 10.1016/j.cnsns.2010.01.020
- [3] Cen, Z., Huang, J., Xu, A.: An efficient numerical method for a two-point boundary value problem with a Caputo fractional derivative. *J. Comput. Appl. Math.* **336**, 1–7 (2018). DOI 10.1016/j.cam.2017.12.018
- [4] Cen, Z., Huang, J., Xu, A., Le, A.: A modified integral discretization scheme for a two-point boundary value problem with a Caputo fractional derivative. *J. Comput. Appl. Math.* **367**, 112465 (2020). DOI 10.1016/j.cam.2019.112465
- [5] Chaudhary, R., Diethelm, K., Hashemishahraki, S.: On the separation of solutions to fractional differential equations of order $\alpha \in (1, 2)$. *Appl. Numer. Math.* **203**, 84–96 (2024). DOI 10.1016/j.apnum.2024.05.020
- [6] Diethelm, K.: The Analysis of Fractional Differential Equations, *Lecture Notes in Mathematics*, vol. 2004. Springer, Berlin (2010). DOI 10.1007/978-3-642-14574-2
- [7] Diethelm, K.: A MATLAB implementation of the proportional secting algorithm for fractional boundary value problems. Zenodo **Record #10656806** (2024). DOI 10.5281/zenodo.10656806. Version 1.0
- [8] Diethelm, K., Ford, N.J., Freed, A.D.: A predictor-corrector approach for the numerical solution of fractional differential equations. *Nonlinear Dynam.* **29**, 3–22 (2002). DOI 10.1023/A:1016592219341
- [9] Diethelm, K., Ford, N.J., Freed, A.D.: Detailed error analysis for a fractional Adams method. *Numer. Algorithms* **36**, 31–52 (2004). DOI 10.1023/B:NUMA.0000027736.85078.be
- [10] Diethelm, K., Garrappa, R., Uhlig, F.: A MATLAB implementation of the proportional secting algorithm for fractional terminal value problems. Zenodo **Record #7678311** (2023). DOI 10.5281/zenodo.7678311. Version 1.0
- [11] Diethelm, K., Uhlig, F.: A new approach to shooting methods for terminal value problems of fractional differential equations. *J. Sci. Comput.* **97**, 38 (2023). DOI 10.1007/s10915-023-02361-9

- [12] Ford, N.J., Morgado, M.L.: Fractional boundary value problems: Analysis and numerical methods. *Fract. Calc. Appl. Anal.* **14**, 554–567 (2011). DOI 10.2478/s13540-011-0034-4
- [13] Garrappa, R.: On linear stability of predictor-corrector algorithms for fractional differential equations. *Internat. J. Comput. Math.* **87**, 2281–2290 (2010). DOI 10.1080/00207160802624331
- [14] Garrappa, R.: Trapezoidal methods for fractional differential equations: Theoretical and computational aspects. *Math. Comput. Simul.* **110**, 96–112 (2015). DOI 10.1016/j.matcom.2013.09.012
- [15] Garrappa, R.: Numerical solution of fractional differential equations: A survey and a software tutorial. *Mathematics* **6**, 16 (2018). DOI 10.3390/math6020016
- [16] Gorenflo, R., Kilbas, A.A., Mainardi, F., Rogosin, S.: Mittag-Leffler Functions, Related Topics and Applications, 2nd edn. Springer, Berlin (2020). DOI 10.1007/978-3-662-61550-8
- [17] Gracia, J.L., Stynes, M.: Central difference approximation of convection in Caputo fractional derivative two-point boundary value problems. *J. Comput. Appl. Math.* **273**, 103–115 (2015). DOI 10.1016/j.cam.2014.05.025
- [18] Hairer, E., Lubich, C., Schlichte, M.: Fast numerical solution of nonlinear Volterra convolution equations. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* **6**, 532–541 (1985). DOI 10.1137/0906037
- [19] Keller, H.B.: Numerical Methods for Two-Point Boundary-Value Problems. Dover, Mineola (2018)
- [20] Lubich, C.: Fractional linear multistep methods for Abel-Volterra integral equations of the second kind. *Math. Comput.* **45**, 463–469 (1985). DOI 10.1090/S0025-5718-1985-0804935-7
- [21] Lubich, C.: Discretized fractional calculus. *SIAM J. Numer. Anal.* **17**, 704–719 (1986). DOI 10.1137/0517050
- [22] Stynes, M., Gracia, J.L.: A finite difference method for a two-point boundary value problem with a Caputo fractional derivative. *IMA J. Numer. Anal.* **35**(2), 698–721 (2015). DOI 10.1093/imanum/dru011