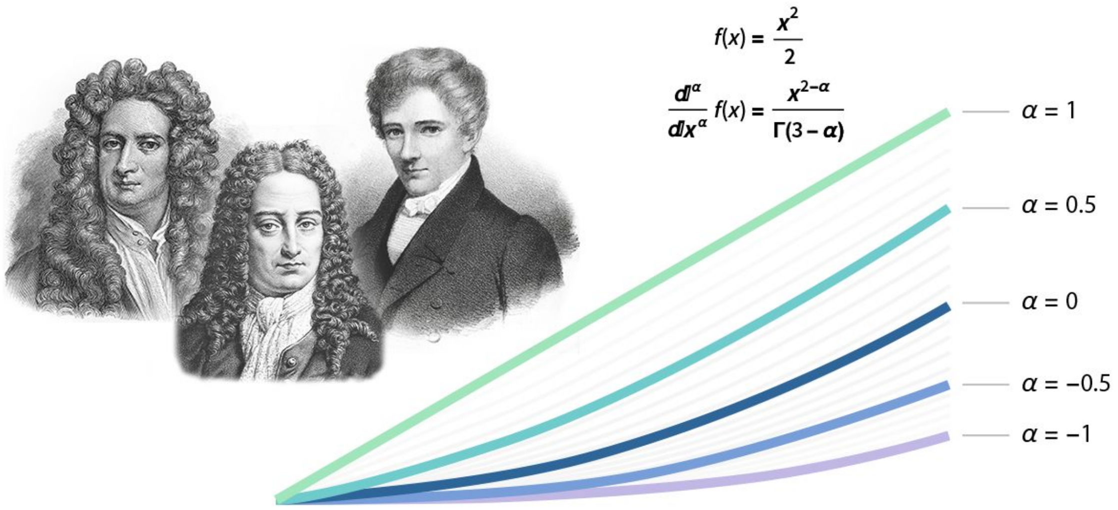
numfracpy, implementando técnicas del cálculo fraccionario



Autores:
Jorge Hernán López
Eddy Anthony Cruz

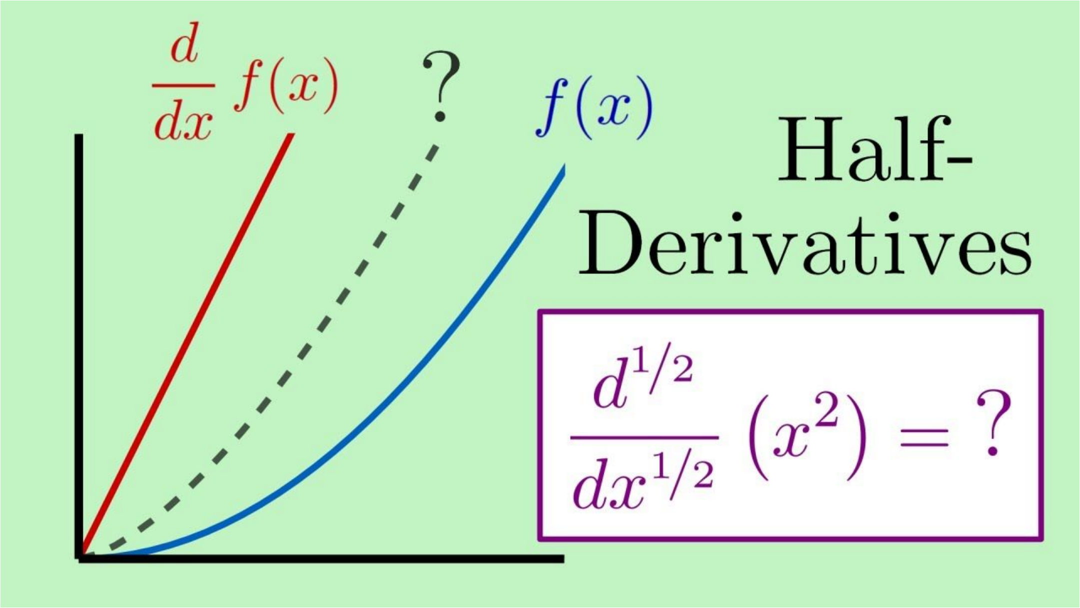
TANTVM POSSVMVS QVANTVM SCIMVS
UNIVERSIDAD DE NARIÑO
Universidad de **Nariño**

IX Encuentro Regional de Ciencias Físicas 2023
"Una perspectiva desde la Ciencia y Tecnologías Cuánticas"

Introducción al Cálculo Fraccionario

El origen del cálculo fraccionario se remonta al año de 1695 cuando en la correspondencia entre L'Hopital y Leibniz nacía la pregunta acerca del significado de la derivada de orden 1/2.

$$\frac{d^{1/2}}{dx^{1/2}}\left(\frac{d^{1/2}f}{dx^{1/2}}\right)=\frac{df}{dx}$$



Del Cálculo Clásico al Cálculo Fraccionario

$$f''(x) = \lim_{h\to 0} \left\{ \frac{\dfrac{f(x) - f(x-h)}{h} - \dfrac{f(x-h) - f(x-2h)}{h}}{h} \right\}$$

$$f''(x) = \lim_{h\to 0} \frac{1}{h^2} \{f(x) - 2f(x-h) + f(x-2h)\}$$

Por inducción se obtiene

$$f^n(x) = \lim_{h\to 0} \frac{1}{h^n} \sum_{j=0}^{n} (-1)^j \binom{n}{j} f(x - jh)$$

Integral de Riemann-Liouville (I)

$$n \longrightarrow -\alpha \quad f^{-\alpha}(x) = \lim_{h\to 0} h^{\alpha} \sum_{j=0}^{n} (-1)^j \binom{-\alpha}{j} f(x - jh) \quad h = \frac{x-a}{n} \quad a < x$$

$$\binom{-\alpha}{j} = \frac{-\alpha(-\alpha-1)\cdots(-\alpha-j+1)}{j!} = (-1)^j \frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+j-1)}{j!} = (-1)^j \frac{\Gamma(\alpha+j)}{j!\Gamma(\alpha)}$$

$$\Gamma(n+1) = n!$$

$$I^{\alpha}(f) = f^{-\alpha}(x) = \lim_{n\to\infty} h^{\alpha} \sum_{j=0}^{n} \frac{\Gamma(\alpha+j)}{j!\Gamma(\alpha)} f(x - jh) \quad h = \frac{x-a}{n} \quad a < x$$

Integral de Riemann-Liouville (II)

Para $\alpha = 1$ $$I^1(f) = \lim_{n\to\infty} h \sum_{j=0}^{n} f(x - jh) = \int_a^x f(s)\,ds$$

Para $\alpha = n, \quad n \in \mathbb{N}$ $$I^n(f) = \frac{1}{(n-1)!}\int_a^x (x-s)^{n-1} f(s)\,ds$$

Por extensión para $\alpha \in \mathbb{R}$ $${}_aI_x^{\alpha}(f) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_a^x (x-s)^{\alpha-1} f(s)\,ds$$

Derivada de Riemann Liouville

$$D^{\alpha} f(x) = D^{n} D^{-(n-\alpha)} f(x) = D^{n} I^{(n-\alpha)} f(x)$$

$$\text{Para } n = 1 \qquad D^{\alpha}_{a,x} f(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_a^x \frac{f(s)}{(x-s)^{\alpha}} \, ds$$

Derivada de Caputo

$$D^{\alpha} f(x) = D^{-(n-\alpha)} D^{n} f(x) = I^{(n-\alpha)} D^{n} f(x)$$

$$\text{Para } n = 1 \qquad {}_{C}D^{\alpha}_{a,x} f(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^x \frac{f'(s)}{(x-s)^{\alpha}} \, ds$$

Aplicaciones del Cálculo Fraccionario (I)

Física

- Spin fraccionario
- Espectroscopía fraccionaria de Hadrones
- Invarianza Gauge en Teorías de Campos Fraccionarios
- Modelo de Langevin en la difusión anómala en líquidos complejos.

Mecánica y Sistemas Dinámicos

- Modelos de elasticidad no-local y viscoelasticidad fraccionarias de nanoestructuras
- Transporte de gas en medios heterogéneos
- Un modelo de red de orden fraccionario para modelar una epidemia de rápida propagación

Aplicaciones del Cálculo Fraccionario (II)

Biología

- Modelos de tumores óseos usando derivadas de orden variable
- Estudio de la viscoelasticidad de células y tejidos
- Difusión celular anómala

Procesamiento de Señales e Imágenes

Teoría de Control

Estudios del medio ambiente

Ciencia de los Materiales

Economía

Librería *numfracpy*

La librería *numfracpy* se encuentra en el repositorio oficial de Python denominado Python Package Index (https://pypi.org/project/numfracpy/). En su estado actual permite calcular:

- Integral de Riemann-Liouville
- Derivada de Riemann-Liouville
- Derivada de Caputo
- Derivada de Grunwald-Letnikov
- Solución de una ecuación diferencial
- Solución de un sistema de ecuaciones diferenciales
- Funciones de Mittag-Leffler (https://github.com/khinsen/mittag-leffler)

Resultados de derivadas de orden 1/2 (I)

Algunas derivadas de Riemann-Liouville y de Caputo

$$D_{RL}^{1/2}(\sqrt{x})|_{x=1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \approx 0{,}886226925453$$

$$D_{RL}^{1/2}(x^2-1)|_{x=1} = \frac{5}{3\sqrt{\pi}} \approx 0{,}94031597258$$

$$D_{RL}^{1/2}(e^x)|_{x=1} = e \cdot \mathtt{erf}(1) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \approx 2{,}854887836$$

$$D_{C}^{1/2}(\sqrt{x})|_{x=1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \approx 0{,}886226925453$$

$$D_{C}^{1/2}(x^2-1)|_{x=1} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \approx 1{,}504505556127$$

$$D_{C}^{1/2}(e^x)|_{x=1} = e \cdot \mathtt{erf}(1) \approx 2{,}2906982523$$

Relación entre las derivadas de Riemann-Liouville y de Caputo

$${}_{RL}D_{0,t}^{\alpha} f(t) = {}_{C}D_{0,t}^{\alpha} f(t) + \frac{f(0)t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}$$

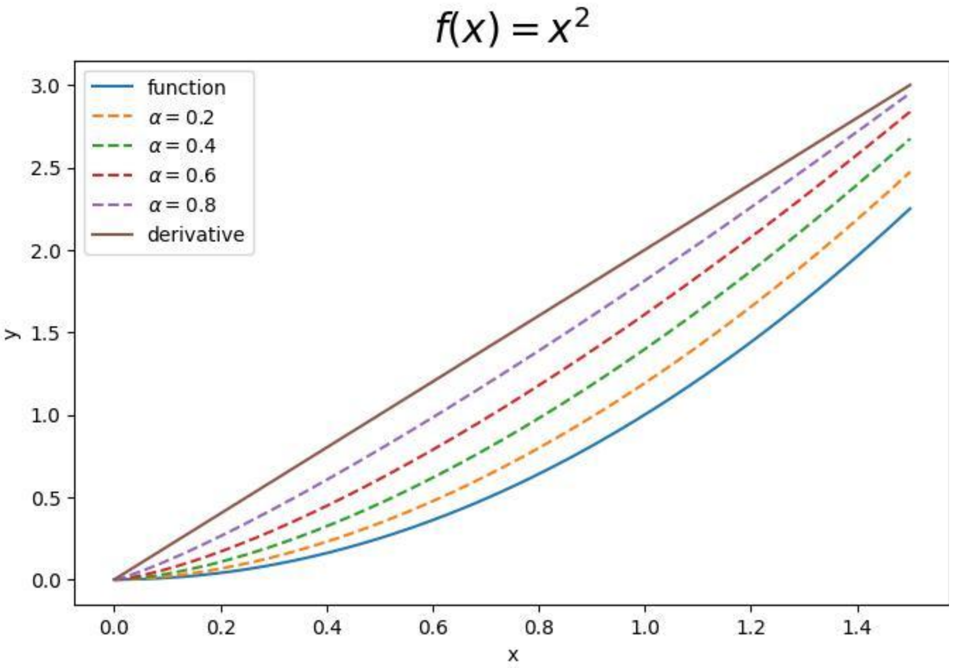
Resultados de derivadas de orden 1/2 (II)

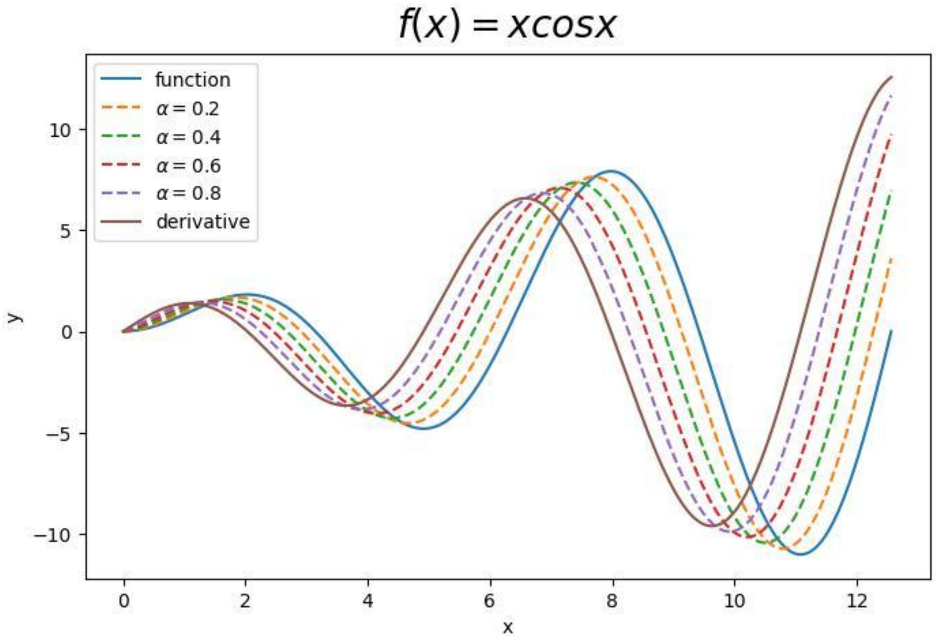
Función	Derivada	Valor	Error Absoluto	Error Relativo
$\sqrt{x}$	RL1	0.88631629	8.936e-5	1.008e-4
	Caputo	0.88631629	8.936e-5	1.008e-4
	GL1	0.88627175	4.482e-5	5.057e-5
x^2 - 1	RL1	0.93996561	3.504e-4	3.726e-4
	Caputo	1.50415519	3.504e-4	2.329e-4
	GL1	0.93620587	4.110e-3	4.371e-3
e^x	RL1	2.85441978	4.681e-4	1.640e-4
	Caputo	2.29023020	4.680e-4	2.043e-4
	GL1	2.84836369	6.524e-3	2.285e-3

Se usó un paso de 1/120 y el intervalo [0,1].

Comparar con Tabla 3 en: Adams, Matthew. "differint: A python package for numerical fractional calculus." *arXiv preprint arXiv:1912.05303* (2019).

Gráfica de algunas derivadas





Derivada de Riemann-Liouville

Derivada de Caputo

Ecuaciones Diferenciales con Derivadas fraccionarias

La solución numérica del problema de valor inicial

$$\begin{cases} {}_C D_{0,t}^{\alpha} u(t) = f(t, u(t)), & m-1 < \alpha < m \in \mathbb{Z}^+ \\ u^j(0) = u_0^j, & j = 0, 1, \cdots, m-1 \end{cases}$$

Este problema es equivalente a la siguiente ecuación integral de Volterra (K. Diethelm and N. J. Ford, Analysis of fractional differential equations, J. Math Anal. Appl. 265 (2002) 229-248)

$$u(t) = \sum_{j=0}^{m-1} \frac{t^j}{j!} u_0^j + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} f(s, u(s)) ds = \sum_{j=0}^{m-1} \frac{t^j}{j!} u_0^j + {}_{RL}D_{0,t}^{-\alpha} f(t, u(t))$$

Para resolver este problema usamos el método de Adams fraccionario (Li, C., & Zeng, F. (2015). *Numerical methods for fractional calculus* (Vol. 24). CRC Press)

$$u_{n+1}^{P} = \sum_{j=0}^{m-1} \frac{t_{n+1}^{j}}{j!} u_0^{j} + \Delta t^{\alpha} \sum_{j=0}^{n} b_{j,n+1} f(t_j, u_j)$$

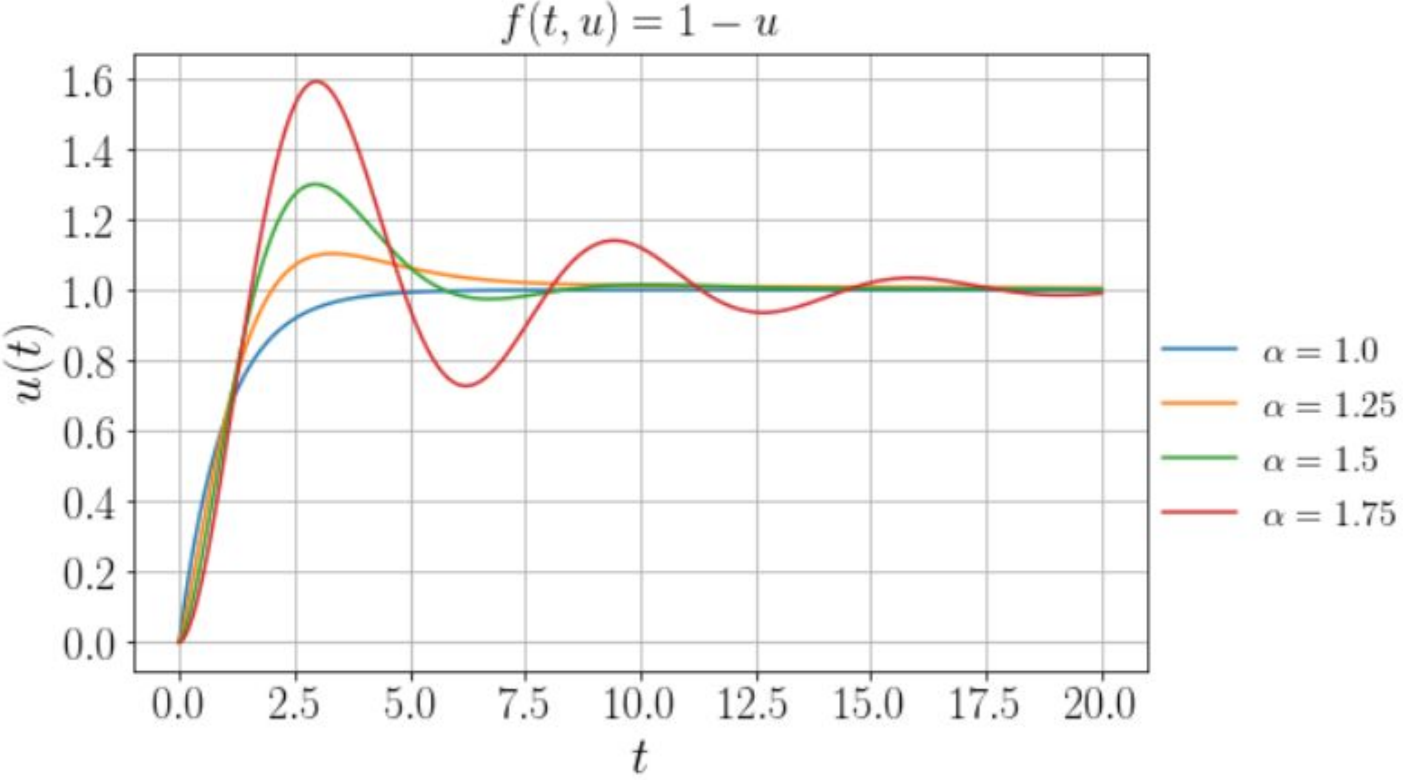
$$u_{n+1} = \sum_{j=0}^{m-1} \frac{t_{n+1}^{j}}{j!} u_0^{j} + \sum_{j=0}^{n} a_{j,n+1} f(t_j, u_j) + a_{n+1,n+1} f(t_{n+1}, u_{n+1}^{P})$$

donde

$$b_{j,n+1} = \frac{1}{\Gamma(\alpha+1)} [(n-j+1)^{\alpha} - (n-j)^{\alpha}]$$

$$a_{j,n+1} = \frac{\Delta t^{\alpha}}{\Gamma(\alpha+2)} \begin{cases} n^{\alpha+1} - (n-\alpha)(n+1)^{\alpha}, & j=0 \\ (n-j+2)^{\alpha+1} - 2(n-j+1)^{\alpha+1} + (n-j)^{\alpha+1}, & 1 \leq j \leq n \\ 1, & j=n+1 \end{cases}$$

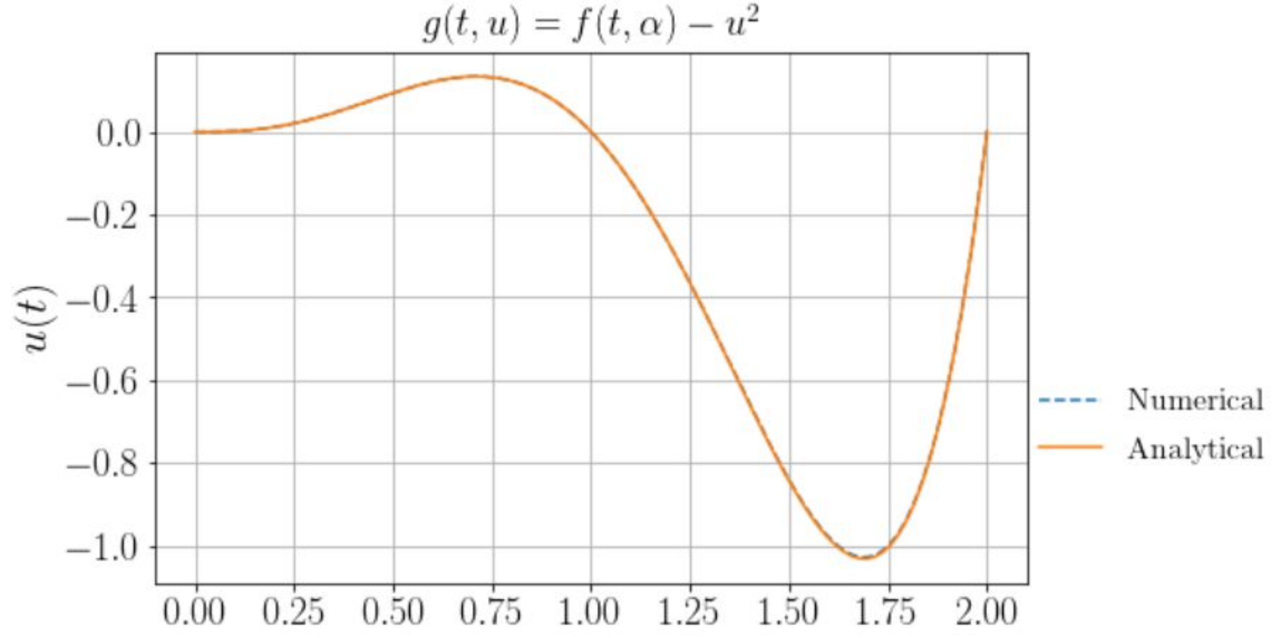
$$_C D^{\alpha}_{0,t} u(t) = 1 - u(t); \quad 1 \leq \alpha < 2, \quad t \in [0, 20]$$



Comparar con: Diethelm, Kai, et al. "Algorithms for the fractional calculus: a selection of numerical methods." Computer methods in applied mechanics and engineering (2005).

$$ {}_{C}D_{0,t}^{\alpha} u(t) + u^2(t) = f(t); \quad 0 < \alpha < 1, \quad t \in [0,2] $$

$$ f(t) = \frac{\Gamma(6)}{\Gamma(6-\alpha)} t^{5-\alpha} - 3\frac{\Gamma(5)}{\Gamma(5-\alpha)} t^{4-\alpha} + 2\frac{\Gamma(4)}{\Gamma(4-\alpha)} t^{3-\alpha} + (t^5 - 3t^4 + 2t^3)^2 $$



La solución analítica para $u(0) = 0$ y $\alpha = 1/2$ está dada por $u(t) = t^5 - 3t^4 + 2t^3$

Ejemplo de un Sistema de Ecuaciones Diferenciales Fraccionarias

El siguiente problema de valor inicial

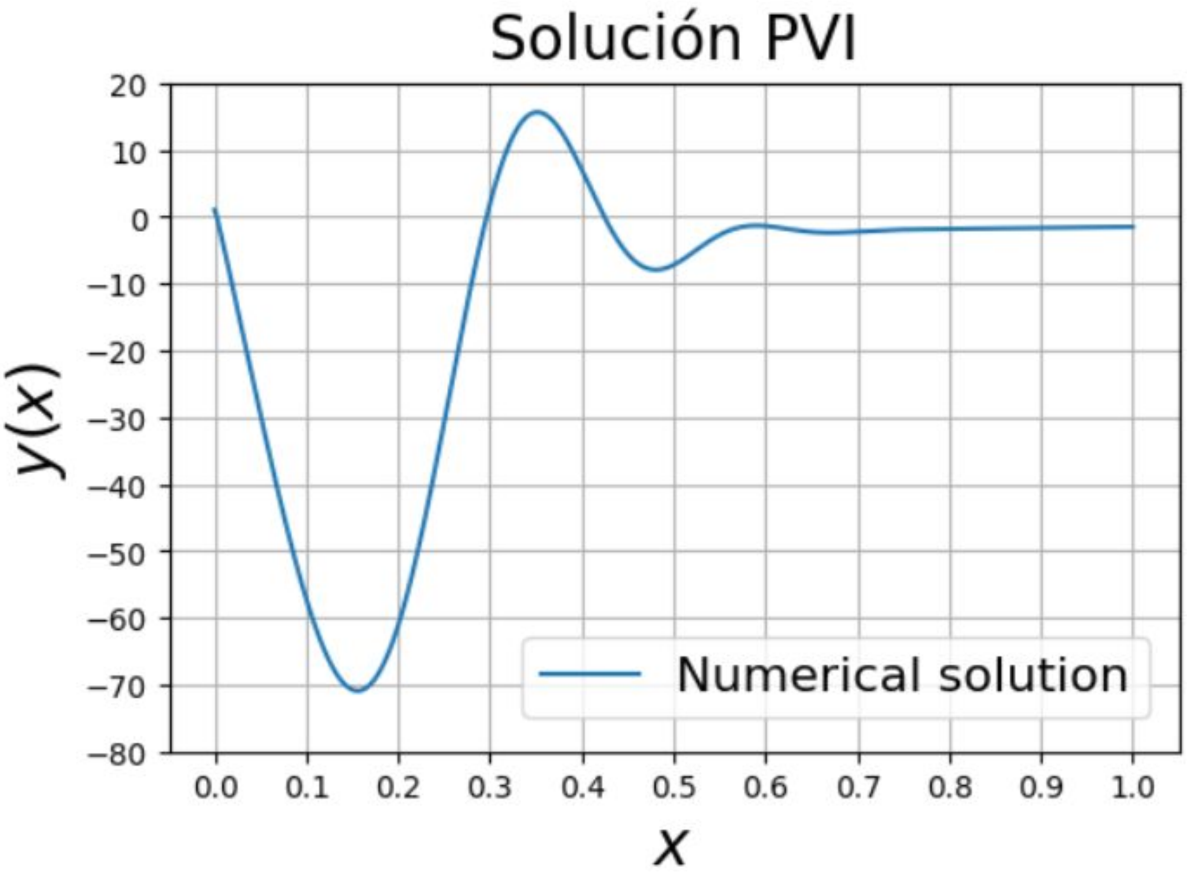
$$
{}_C D^{1,8} y(x) + 300x^2 \, {}_C D^{0,4} y(x) + 500 \sin(x) y(x) = 100e^x
$$

$$
y(0) = 1, \quad y'(0) = -700
$$

es equivalente al sistema (Baleanu, Dumitru, et al. *Fractional calculus: models and numerical methods*. Vol. 3. World Scientific, 2012)

$$
\begin{aligned}
y_1(x) &= y(x) \\
{}_C D^{0,4} y_1(x) &= y_2(x) \\
{}_C D^{0,6} y_2(x) &= y_3(x) \\
{}_C D^{0,8} y_3(x) &= -300x^2 y_2(x) - 500 \sin(x) y_1(x) + 100e^x
\end{aligned}
$$

$$
y_1(0) = 1, \quad y_2(0) = 0, \quad y_3(0) = -700
$$



(paso h=1/4000) Comparar con: Baleanu, D., Diethelm, K., Scalas, E., & Trujillo, J. J. (2012). *Fractional calculus: models and numerical methods* (Vol. 3). World Scientific.

¡Gracias!

Universidad de **Nariño**

IX Encuentro Regional de Ciencias Físicas 2023

"Una perspectiva desde la Ciencia y Tecnologías Cuánticas"