

Středoškolská odborná činnost
Obor č. 1 – Matematika a matematická informatika

Numerické diferenciování

Autor:

Alexander Slávik

Septima A

Gymnázium, Brno-Řečkovice

Terezy Novákové 2, 621 00 Brno

Konzultant:

Mgr. Zdeněk Votava

Gymnázium, Brno-Řečkovice

Terezy Novákové 2, 621 00 Brno

BRNO, 2008
Jihomoravský kraj

Tímto prohlašuji, že jsem tuto soutěžní práci vypracoval samostatně pod vedením Mgr. Zdeňka Votavy a uvedl v seznamu použité literatury veškerou použitou literaturu a další informační zdroje včetně internetu.

V Brně dne 8. března 2008

Autor práce

Abstrakt

Cílem práce je popsat, vyzkoušet a srovnat různé metody pro numerické diferencování, tj. derivování a integrování necelých řádů. Toto vychází z teorie diferencování (fractional calculus). Popisované numerické metody jsou koncipovány tak, že diferencovaná funkce je zadána pouze jako soubor diskrétních bodů, s čímž se v praxi setkáme často. V textu práce je rozebrána diferencovací metoda založená na Grünwald-Letnikovově definici diferencování, Riemann-Liouvillově definici diferencování a metoda výpočtu Weylova diferencování pomocí diferencování Fourierových řad. Tyto metody byly v různých variacích aplikovány v ukázkových programech v jazyce Object Pascal. Okomentované zdrojové kódy ukázkových programů jsou k práci přiloženy a mohou být dále využity v praxi.

Z testů plyne, že metoda založená na Grünwald-Letnikovově definici pracuje rychle a relativně přesně pro kladné i záporné řády diferencování. Největší chyba nastává poblíž dolní meze diferencování, která se projevuje hlavně pro diferencování kladného řádu. Výhodou metody založené na Riemann-Liouvillově definici je, že oproti předchozí zmíněné může přijímat jako vstupní data i neekvidistantní body. Přesná je hlavně pro záporné řády diferencování, neboť pro kladné je třeba provádět opakované numerické derivování, které způsobuje chyby poblíž dolní meze diferencování a konce vstupních dat. Poslední metoda, založená na diferencování Fourierových řad, má omezenou přesnost podle toho, jak dobře lze vstupní data vyjádřit Fourierovou řadou. Při diferencování pak chyba vzrůstá s řádem diferencování.

Poděkování

Na tomto místě bych chtěl vyjádřit své díky všem lidem, bez kterých by vznik této práce nebyl možný, ať už přispěli jakkoliv. Zvláště děkuji následujícím osobám:

Mgr. Zdeňkovi Votavovi, mému konzultantovi a vyučujícímu fyziky, za cenné rady a připomínky při tvorbě práce i při dalších příležitostech,

Mgr. et Mgr. Monice Kratochvílové, zaměstnankyni Moravské zemské knihovny, za zprostředkování zapůjčení literatury k tématu práce,

Mgr. Ondřeji Pokorovi za pomoc při řešení matematických problémů všeho druhu,

Bc. Jaroslavu Zůdovi za totéž,

všem dobrovolníkům z internetové služby **Ask Dr. Math**¹ za pomoc při „pronikání“ do teorie obsažené v této práci.

¹<http://mathforum.org/dr.math/>

Obsah

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Úvod | 1 |
| 2 | Úvod do teorie diferencování | 2 |
| 2.1 | Diferenciální operátor | 2 |
| 2.2 | Funkce gama a beta | 3 |
| 2.3 | Grünwald-Letnikovova definice diferenciálu | 4 |
| 2.4 | Riemann-Liouvillova definice diferenciálu | 6 |
| 2.5 | Diferenciál funkce $(t - a)^\nu$ | 6 |
| 2.6 | Vlastnosti diferenciálu | 7 |
| 2.7 | Weylův diferenciál | 10 |
| 2.8 | Laplaceova transformace diferenciálu | 11 |
| 2.9 | Fourierova transformace diferenciálu | 12 |
| 3 | Numerické diferencování | 13 |
| 3.1 | Metoda založená na Grünwald-Letnikovově definici | 13 |
| 3.2 | Metoda založená na Riemann-Liouvillově definici | 15 |
| 3.3 | Srovnání metod | 17 |
| 3.4 | Metoda založená na diferencování Fourierových řad | 20 |
| 4 | Ukázkové programy | 22 |
| 4.1 | Jednotka FracCalcUtils | 22 |
| 4.2 | GL 1 | 23 |
| 4.3 | GL 2 | 23 |
| 4.4 | RL 1 | 24 |
| 4.5 | RL 2 | 24 |
| 4.6 | RL 3 | 25 |
| 4.7 | FS 1 | 25 |
| 4.8 | FS 2 | 25 |
| 4.9 | Jednotka TaylorU | 25 |
| 5 | Závěr | 27 |
| | Použitá literatura | 28 |

1 Úvod

Asi v žádné vědě se nestřetáváme s abstrakcí a zobecněním tak často, jako v matematice. Vezměme například komplexní čísla. Ptáme-li se, kolik je $\sqrt{-1}$, nenacházíme v obvyklé aritmetice reálných čísel odpověď, protože zřejmě neexistuje žádné reálné číslo, jehož druhá mocnina by byla záporná. Můžeme ovšem předpokládat, že existuje číselný obor, ve kterém takovýto výraz má smysl a ve kterém můžeme provádět stejné operace, jako v reálných číslech – což jsou komplexní čísla. Dalším takovým příkladem mohou být euklidovské prostory – vidíme-li, že analogická pravidla platí pro geometrii na přímce, v rovině i v prostoru, můžeme tato pravidla rozšířit na jakýkoliv vyšší počet rozměrů. Pro popisování fraktálů byly dokonce zavedeny prostory, které nemají celočíselný počet rozměrů.

Mne osobně tato vlastnost matematiky vždy fascinovala. Jeden příklad za všechny: před několika lety jsem kombinací několika vzorců z tabulek odvodil vztah pro obsah pravidelného n -úhelníka,

$$S = \frac{1}{2} n \sin\left(\frac{360^\circ}{n}\right) \cdot r^2,$$

kde r je poloměr kružnice opsané n -úhelníku. Následně jsem se bavil tím, že jsem za n dosazoval hodnoty, pro které vzorec nemá v tomto významu smysl, tj. $1, 2, \frac{1}{2}, -1$ atd. a sledoval jsem, jakých hodnot obsah nabývá.² Není tedy divu, že mě teorie diferencování (v angl. originále *fractional calculus*), která se zabývá derivacemi a integrály necelých řádů, zaujala okamžitě poté, co jsem na ni narazil.

Vzhledem k tomu, že se kromě matematiky intenzivně věnuji i programování, rozhodl jsem se v této práci zaměřit na oblast, která tyto dvě disciplíny spojuje, tj. numerické metody. Ačkoliv se může teorie diferencování nezasvěcenému zdát jako matematická „hračka“, ve skutečnosti nachází své využití v praxi (např. pro popis dějů ve vodných roztocích, pro popis přenosu tepla a v kvantové mechanice), a tak je požadavek stanovit numericky hodnoty diferencování oprávněný.

Práce je rozdělena do tří hlavních částí – v první je čtenář seznámen se základy teorie diferencování, v druhé rozebírám samotné numerické metody a v poslední jsou popsány ukázkové programy, které jsem naprogramoval, abych ilustroval funkčnost jednotlivých algoritmů pro diferencování.

²Mimo jiné jsem pomocí tohoto „odvodil“ vztah $\lim_{n \rightarrow \infty} n \sin \frac{\pi}{n} = \pi$.

2 Úvod do teorie diferenciování

Cílem této práce není podat čtenáři kompletní soubor informací o diferenciování. Tato sekce tak prezentuje pouze základy této obsáhlé teorie, které jsou nutné pro pochopení a zvládnutí jejích aplikací v částech práce věnované numerickým metodám a jejich implementaci. Složitá odvození a důkazy jsou tak redukovány na minimum, popř. úplně vynechány.

2.1 Diferenciální operátor

V teoretické sekci práce bude naším úkolem rozšířit klasický diferenciální a integrální počet do nové úrovně, kde chybí požadavek pro to, aby řád derivace, resp. integrálu byl celočíselný. Jinak řečeno, hledáme takový operátor \mathbf{D} , pro který bude pro libovolné $n \in \mathbb{N}$ platit:

$$\begin{aligned} {}_a\mathbf{D}_t^n f(t) &= \frac{d^n}{dt^n} f(t) \\ {}_a\mathbf{D}_t^{-n} f(t) &= \underbrace{\int_a^t \int_a^{t_1} \int_a^{t_2} \dots \int_a^{t_{n-1}}}_{n} f(t_n) dt_n \dots dt_1 dt \\ {}_a\mathbf{D}_t^0 f(t) &= f(t) \end{aligned}$$

a zároveň má platit, že pro pevně zvolené t se hodnota výrazu ${}_a\mathbf{D}_t^q f(t)$ mění spojitě v závislosti na proměnné $q \in \mathbb{R}$.

Pro operátor \mathbf{D} použijeme označení *diferenciální operátor* (zahrnuje v sobě jak derivování, tak integrování), zkráceně *diferenciál*. Jeho horní index budeme nazývat *řád diferenciálu*, popř. *řád diferenciování*. Dolní indexy u operátoru značí *meze diferenciování* ($t > a$), tedy interval, na kterém diferenciováme – pro celočíselné integrování je jejich význam zřejmý a jsou nutné pro všechny řády diferenciování kromě přirozených a nuly (obyčejná derivace má pouze lokální charakter, což ovšem neplatí pro neceločíselné). V této práci budu obvykle značit řád diferenciálu q , dolní mez a a horní t , což je zároveň také nezávislá proměnná funkce. Pojmem diferenciál také označuji celý výraz ${}_a\mathbf{D}_t^q f(t)$.

Výrazy, kde je $q > 0$, budeme nazývat analogicky s vžitou nomenklaturou derivace, tedy například první derivace, půltá derivace, čtyřpětina derivace atd. Stejně tak pro případ $q < 0$ zvolíme pojmenování integrál. Pokud není zřejmé, zda je q kladné či záporné, uchýlíme se k obecnému pojmu diferenciál.

2.2 Funkce gama a beta

Ještě než se pustíme do definování diferentiálu, je třeba se seznámit s funkcí, která má v teorii diferenciování rozsáhlé využití. Tou je funkce gama (také nazývána Eulerova funkce druhého druhu), která je definována následovně:

$$\Gamma(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n! n^t}{t(t+1)(t+2) \cdots (t+n)}. \quad (1)$$

Zřejmě $D(\Gamma) = \mathbb{R} \setminus \{0; -1; -2; \dots\}$, protože pro nulu a záporná celá čísla je vždy jeden z činitelů součinu ve jmenovateli nulový. Často se setkáváme s jiným definičním vztahem, který je však omezen jen na $t > 0$:

$$\Gamma(t) = \int_0^{\infty} \tau^{t-1} e^{-\tau} d\tau. \quad (2)$$

Nejvýznamějším vztah pro funkci gama je indentita³

$$\Gamma(t+1) = t \cdot \Gamma(t). \quad (3)$$

Srovnáme-li (3) s rekurzivní definicí faktoriálu,

$$0! = 1, \quad n! = n \cdot (n-1)!$$

docházíme k závěru

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (4)$$

platnému pro $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Můžeme tedy tvrdit, že funkce gama je svým způsobem rozšířením faktoriálu i na jiná čísla než přirozená. Poměrně významnou je funkční hodnota v $\frac{1}{2}$, která je rovna $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$, odkud pomocí (3) dostaneme funkční hodnoty pro jakékoliv $n + \frac{1}{2}, n \in \mathbb{Z}$.

S funkcí gama je úzce svázána funkce beta (Eulerův integrál prvního druhu), definovaná vztahem

$$B(t, u) = \int_0^1 \tau^{t-1} (1-\tau)^{u-1} d\tau. \quad (5)$$

Uvedený integrál konverguje pro $t > 0, u > 0$ a lze převést na výraz

$$B(t, u) = \frac{\Gamma(t)\Gamma(u)}{\Gamma(t+u)}. \quad (6)$$

Více o funkcích gama a beta v [3] a zejména v [4].

³Lze snadno ukázat integrováním per partes:

$$\Gamma(t+1) = \int_0^{\infty} \tau^t e^{-\tau} d\tau = [-e^{-\tau} \tau^t]_0^{\infty} + t \int_0^{\infty} \tau^{t-1} e^{-\tau} d\tau = t \cdot \Gamma(t)$$

2.3 Grünwald-Letnikovova definice diferenciálu

Aby diferenciál splňoval nároky uvedené v sekci 2.1, je logické, že jeho odvození začneme z konvenčních definic. Připomeňme klasickou definici derivace spojitě funkce $f(t)$:

$$f'(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t) - f(t-h)}{h}. \quad (7)$$

Dosažením tohoto vztahu „do sebe sama“ dostaneme druhou derivaci, tedy

$$\begin{aligned} f''(t) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f'(t) - f'(t-h)}{h} \\ &= \lim_{h_1 \rightarrow 0} \lim_{h_2 \rightarrow 0} \frac{\frac{f(t) - f(t-h_1)}{h_1} - \frac{f(t-h_2) - f(t-h_1-h_2)}{h_1}}{h_2} \end{aligned}$$

Protože $h_1 \rightarrow 0$ i $h_2 \rightarrow 0$, můžeme předpokládat $h_1 = h_2$, čímž se předchozí vzorec zjednoduší na

$$f''(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t) - 2f(t-h) + f(t-2h)}{h^2} \quad (8)$$

Zcela analogicky ještě nalezneme takovýto vzorec pro třetí derivaci:

$$f'''(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t) - 3f(t-h) + 3f(t-2h) - f(t-3h)}{h^3} \quad (9)$$

Ze (7), (8) a (9) vidíme, že každé další derivování přidává další funkční hodnotu a koeficienty u těchto se jeví jako kombinační čísla se střídajícím se znaménkem. Díky tomuto poznatku můžeme obecný vztah⁴ pro $n \in \mathbb{N}$:

$$f^{(n)}(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^n} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} f(t - kh) \quad (10)$$

Nyní přejdeme k integrálům. Výchozím bodem pro nás bude obvyklá Cauchy-Riemannova definice:

$$\int_a^t f(t_1) dt_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} h \sum_{k=0}^{N-1} f(t - kh), \quad h = \frac{t-a}{N}. \quad (11)$$

Opětovným integrováním získáváme (nadále za předpokladu $h = \frac{t-a}{N}$)

$$\int_a^t \int_a^{t_1} f(t_2) dt_2 dt_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} h^2 \sum_{k=0}^{N-1} (k+1) f(t - kh). \quad (12)$$

⁴Korektní důkaz lze provést úplnou indukcí.

Pro získání lepší představy o obecném vztahu ještě jednou zintegrujeme:

$$\int_a^t \int_a^{t_1} \int_a^{t_2} f(t_3) dt_3 dt_2 dt_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} h^3 \sum_{k=0}^{N-1} \frac{(k+1)(k+2)}{2} f(t - kh). \quad (13)$$

Z výše uvedených vztahů již lze odhadnout požadovaný obecný vzorec ve tvaru

$$\int_a^t \int_a^{t_1} \int_a^{t_2} \dots \int_a^{t_{n-1}} f(t_n) dt_n \dots dt_1 dt = \lim_{N \rightarrow \infty} h^n \sum_{k=0}^{N-1} \binom{k+n-1}{k} f(t - kh). \quad (14)$$

Zřejmě $h \rightarrow 0$, když $N \rightarrow \infty$. Všimneme si zajímavé věci – upravíme-li vztah (10) tak, aby se podobal (14), tj.

$$f^{(n)}(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{h^n} \sum_{k=0}^{N-1} (-1)^k \binom{n}{k} f(t - kh)$$

a aplikujeme i zde předpoklad $h = \frac{t-a}{N}$, výsledek sumace se nezmění, protože stále platí $h \rightarrow 0$ a pro všechna $k > n$ nutně $\binom{n}{k} = 0$ (předpokládáme přirozené n). Vezmeme-li ještě v úvahu kombinatorickou identitu

$$(-1)^k \binom{n}{k} = \binom{k-n-1}{k},$$

dokážeme již za použití diferitegrálního operátoru stanovit vzorec zahrnující jak (10), tak (14):

$${}_a \mathbf{D}_t^n f(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} h^{-n} \sum_{k=0}^{N-1} \binom{k-n-1}{k} f(t - kh) \quad (15)$$

Tento vzorec má zřejmě smysl i pro necelé n . Po nahrazení n za $q \in \mathbb{R}$ a dosazení za h dostáváme Grünwald-Letnikovovu definici diferintegrálu

$${}_a \mathbf{D}_t^q f(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{N}{t-a} \right)^q \sum_{k=0}^{N-1} \binom{k-q-1}{k} f\left(t - k \left(\frac{t-a}{N} \right)\right). \quad (16)$$

Protože pro $q \notin \mathbb{N}$ (i když $q > 0$) dostáváme nekonečný počet sčítanců, je nutné specifikovat konstatnu a , která značí dolní mez diferintegrování.

V [1] je představen ještě mírně poupravený definiční vztah, jehož účelem je zlepšit konvergenční vlastnosti:

$${}_a \mathbf{D}_t^q f(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{N}{t-a} \right)^q \sum_{k=0}^{N-1} \binom{k-q-1}{k} f\left(t - \left(k - \frac{q}{2}\right) \left(\frac{t-a}{N} \right)\right). \quad (17)$$

Tohoto vzorce později využijeme při numerickém diferintegrování pro jeho lepší vlastnosti.

2.4 Riemann-Liouvillova definice diferintegrálu

Odvození této definice bude o poznání snažší. Vyjdeme zde z Cauchyho integrálního vzorce

$$\int_a^t \int_a^{t_1} \int_a^{t_2} \dots \int_a^{t_{n-1}} f(t_n) dt_n \dots dt_1 dt = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t f(\tau)(t-\tau)^{n-1} d\tau \quad (18)$$

Podle (4) stačí nahradit faktoriál za jeho ekvivalent v podobě funkce gama a dostáváme

$${}_a\mathbf{D}_t^q f(t) = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_a^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{q+1}} d\tau, \quad (19)$$

což je vztah platný pro $q < 0$ (pro ostatní integrál nutně diverguje). Rozšíření na kladná q provedeme přidáním opakovaného derivování, tj.

$${}_a\mathbf{D}_t^q f(t) = \frac{d^n}{dt^n} \frac{1}{\Gamma(n-q)} \int_a^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{q-n+1}} d\tau \quad (20)$$

kde volíme n tak, aby $q - n < 0$. Jinou možností je vzorec odvozený integrováním per partes

$${}_a\mathbf{D}_t^q f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-q)} \int_a^t \frac{f^{(n)}(\tau)}{(t-\tau)^{q-n+1}} d\tau + \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)(t-a)^{k-q-n}}{\Gamma(k-q-n+1)}, \quad (21)$$

přičemž n volíme stejně jako v předchozím případě. Vztahy (19) a (20), popř. (21) společně dávají Riemann-Liouvillovu definici diferintegrálu.

Riemann-Liouvillova definice je identická s Grünwald-Letnikovovou díky faktu, že ve vzorci (14) je levá strana totožná s levou stranou v (18). Z uvedené definice vyplývá, že aby byla funkce $f(t)$ diferintegrovatelná (s dolní mezí a), musí splňovat podmínku

$$\lim_{t \rightarrow a} (t-a)f(t) = 0 \quad (22)$$

a musí být definována na intervalu $(a; t)$.

2.5 Diferintegrál funkce $(t-a)^\vartheta$

Pro některé další úvahy bude užitečné znát diferintegrál mocninné funkce, pod čímž zde rozumíme $(t-a)^\vartheta$. Aby byla takováto funkce diferintegrovatelná, musí splňovat podmínku (22), tj. $\vartheta > -1$. Tento stanovíme užitím

Riemann-Liouvillový definice (19), nejprve jen pro $q < 0$:

$$\begin{aligned}
{}_a\mathbf{D}_t^q(t-a)^\vartheta &= \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_a^t \frac{(\tau-a)^\vartheta}{(t-\tau)^{q+1}} d\tau \\
&= \frac{1}{\Gamma(-q)} (t-a)^{\vartheta-q} \int_0^1 \xi^\vartheta (1-\xi)^{-q-1} d\xi \\
&= \frac{1}{\Gamma(-q)} (t-a)^{\vartheta-q} \mathbf{B}(-q, \vartheta+1) \\
&= \frac{\Gamma(\vartheta+1)}{\Gamma(\vartheta-q+1)} (t-a)^{\vartheta-q}, \tag{23}
\end{aligned}$$

kde byla v druhém kroku použita substituce $\tau = a + \xi(t-a)$ a v posledním vztah mezi beta a gama funkcí (6).

Tento vztah jsme ale odvodili pouze pro integrály. S ohledem na rozšířenou definici (20) však můžeme snadno jeho platnost rozšířit na libovolné $q \in \mathbb{R}$. Za povšimnutí ještě stojí, že volbou řádu diferintegrálu $n \in \mathbb{N}$ a exponentu mocninné funkce $m \in \mathbb{N}$ dostáváme vztah známý z konvenčního diferenciálního počtu, tj.

$$\frac{d^n}{dt^n} (t-a)^m = \frac{m!}{(m-n)!} (t-a)^{m-n}, \quad m \geq n. \tag{24}$$

2.6 Vlastnosti diferintegrálu

Linearita

Platí

$${}_a\mathbf{D}_t^q(C \cdot f(t)) = C \cdot {}_a\mathbf{D}_t^q f(t) \tag{25}$$

$${}_a\mathbf{D}_t^q(f(t) + g(t)) = {}_a\mathbf{D}_t^q f(t) + {}_a\mathbf{D}_t^q g(t) \tag{26}$$

Tato vlastnost plyne přímo z Grünwald-Letnikovovy i Riemann-Liouvillový definice, neboť při sumaci, klasickém integrování i klasickém derivování se linearita rovněž zachovává.

Diferintegrování nekonečných řad

Z výše uvedených vztahů zřejmě plyne, že můžeme diferintegrovat jakoukoliv konečnou řadu po jednotlivých členech. Totéž můžeme provést i s nekonečnou řadou, pokud splňuje podmínku, která je na ni kladena i při obyčejném derivování a integrování, tj. musí konvergovat stejnoměrně. Při splnění tohoto tedy platí rovnost

$${}_a\mathbf{D}_t^q \left(\sum_{n=1}^{\infty} f_n(t) \right) = \sum_{n=1}^{\infty} {}_a\mathbf{D}_t^q f_n(t). \tag{27}$$

Díky skutečnosti, že mocninná řada konverguje stejnoměrně, můžeme diferenciovat Taylorovu řadu ve tvaru $\sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(a)(t-a)^k}{k!}$ po jejích jednotlivých členech. Využitím známého diferenciálního mocninné funkce (23) získáme další možnou definici diferenciálního (omezenou ovšem pouze na analytické funkce)

$${}_a\mathbf{D}_t^q f(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(a)(t-a)^{k-q}}{\Gamma(k-q+1)}. \quad (28)$$

Rozšířené Leibnizovo pravidlo

Leibnizovo pravidlo, které udává vztah pro n -tou derivaci součinu funkcí, lze pomocí integrování per partes rozšířit i pro n -násobný integrál součinu. Odtud již vede jen krok k obecnějšímu vzorci diferenciálního součinu, který je ve tvaru

$${}_a\mathbf{D}_t^q (f(t)g(t)) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\binom{q}{k} {}_a\mathbf{D}_t^k f(t) \cdot {}_a\mathbf{D}_t^{q-k} g(t) \right). \quad (29)$$

Změna měřítka

Změnou měřítka je zde myšlena náhrada $f(t)$ za $f(kt)$, $k \in \mathbb{R}$. Pro obecnou dolní mez a je úprava diferenciálního takoveto upravené funkce algebraicky velmi náročná, proto se omezíme pouze na dolní mez nulovou. V takovém případě platí⁵

$${}_0\mathbf{D}_t^q f(kt) = k^q {}_0\mathbf{D}_{kt}^q f(kt), \quad (30)$$

což plně koresponduje s klasickými pravidly pro derivování a integrování.

Průběh poblíž dolní meze

Připustíme, že funkce $f(t)$ je analytická alespoň v nějakém malém (pravém) okolí své dolní meze. Potom jí v tomto okolí můžeme vyjádřit Taylorovou řadou, ze které získáme vztah pro diferenciál (28). Odtud získáváme pravidlo pro hodnotu v dolní mezi,

$${}_a\mathbf{D}_a^q f(t) = \begin{cases} 0 & \text{pro } q < 0 \\ f(a) & \text{pro } q = 0 \\ \infty & \text{pro } q > 0, \end{cases} \quad (31)$$

⁵Podle (19) platí pro $q < 0$

${}_0\mathbf{D}_t^q f(kt) = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_0^t f(k\tau)(t-\tau)^{-q-1} d\tau = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_0^s f(\sigma) \left(\frac{s}{k} - \frac{\sigma}{k}\right)^{-q-1} k^{-1} d\sigma = k^q {}_0\mathbf{D}_{kt}^q f(kt)$
zavedením $kt = s, k\tau = \sigma$. Odtud pomocí (20) rozšíříme na všechna $q \in \mathbb{R}$.

přičemž nekonečné hodnoty pro $q > 0$ nabývá derivace samozřejmě jen tehdy, pokud není q celé číslo a pokud neplatí $f(a) = f'(a) = \dots f^{(n-1)}(a) = 0$, kde $n = \lceil q \rceil$.⁶

Nyní mějme, že $f(t)$ nemá v dolní mezi a konečnou hodnotu, ale je diferencovatelná. Potom lze vyjádřit jako $f(t) = (t - a)^p g(t)$, $p \in (-1; 0)$. Připustíme opět, že $g(t)$ lze vyjádřit Taylorovou řadou. Pak je možné vyjádřit diferenciál funkce $f(t)$ jako

$${}_a\mathbf{D}_t^q f(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{g^{(k)}(a)}{k!} \frac{\Gamma(p+k+1)}{\Gamma(p+k-q+1)} (t-a)^{p+k-q}. \quad (32)$$

Odtud další máme vztah pro hodnotu v dolní mezi,

$${}_a\mathbf{D}_a^q f(t) = \begin{cases} 0 & \text{pro } q < p \\ \Gamma(p+1)g(a) & \text{pro } q = p \\ \infty & \text{pro } q > p. \end{cases} \quad (33)$$

Vidíme, že kromě výjimečných případů má diferenciál funkce v dolní mezi buď nulovou hodnotu, nebo zde (limitně) nabývá nekonečné hodnoty.

Skládání diferenciálů

Již několikrát bylo v této práci s úspěchem použito pravidlo pro skládání diferenciálu s klasickou derivací, tj.

$$\frac{d^n}{dt^n} {}_a\mathbf{D}_t^q f(t) = {}_a\mathbf{D}_t^{q+n} f(t), \quad (34)$$

$n \in \mathbb{N}$. Prohodíme-li pořadí, neboli pokud diferencujeme funkci $f^{(n)}(t)$, dostáváme složitější výsledek plynoucí z (21)

$${}_a\mathbf{D}_t^q f^{(n)}(t) = {}_a\mathbf{D}_t^{q+n} f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)(t-a)^{k-q-n}}{\Gamma(k-q-n+1)}, \quad (35)$$

platný za předpokladu, že $f^{(n)}(t)$ splňuje podmínku (22).

Podobné chování můžeme očekávat v případě dvou operátorů \mathbf{D} . Úvahu nad úpravou výrazu ${}_a\mathbf{D}_t^q ({}_a\mathbf{D}_t^r f(t))$ rozdělíme na dva případy podle znaménka řádu r .

1. $r \leq 0$

V takovém případě se jedná o diferencování integrálu, který lze vyjádřit jednodušší Riemann-Liouvillovou definicí (19). Aplikací rozšířené definice (20) na toto získáváme pravidlo

$${}_a\mathbf{D}_t^q ({}_a\mathbf{D}_t^r f(t)) = {}_a\mathbf{D}_t^{q+r} f(t). \quad (36)$$

⁶ $\lceil x \rceil$ zde značí zaokrouhlení na celé číslo směrem k ∞ , tedy např. $\lceil 1,9 \rceil = 2$, $\lceil -1,8 \rceil = -1$

2. $r > 0$

Podle (21) získáváme

$${}_a\mathbf{D}_t^r f(t) = {}_a\mathbf{D}_t^{r-n} f^{(n)}(t) + \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)(t-a)^{k-r}}{\Gamma(k-r+1)}, \quad (37)$$

kde volíme $n = \lceil r \rceil$. V takovém případě je nutně diferintegrál na pravé straně integrálem, můžeme tedy na něj použít pravidlo (36). Suma na pravé straně ovšem obsahuje mocninné funkce, jejichž exponent je menší než -1 – tyto nesplňují podmínku (22), tím pádem nemůžeme ${}_a\mathbf{D}_t^r f(t)$ dále diferintegrovat.

Za určitých podmínek však tyto členy sumy zmizí a tak je diferintegrovaní dovoleno. Zaprvé je to v případě $r \in \mathbb{N}$ (odkud plyne $n = r$), čímž se (37) změní na (35). Dále toto nastane, pokud $f(a) = f'(a) = \dots = f^{(n-2)}(a) = 0$. Potom ze sumy zůstane jen poslední člen, jehož exponent je větší než -1 . Ten pak snadno diferintegrujeme jako mocninnou funkci. Potom platí

$$\begin{aligned} {}_a\mathbf{D}_t^q({}_a\mathbf{D}_t^r f(t)) &= {}_a\mathbf{D}_t^q \left({}_a\mathbf{D}_t^{r-n} f^{(n)}(t) + \frac{f^{(n-1)}(a)(t-a)^{n-r-1}}{\Gamma(n-r)} \right) \\ &= {}_a\mathbf{D}_t^{q+r-n} f(t) + \frac{f^{(n-1)}(a)(t-a)^{n-q-r-1}}{\Gamma(n-q-r)} \\ &= {}_a\mathbf{D}_t^{q+r} f(t), \end{aligned} \quad (38)$$

kde jsme využili toho, že $f(t)$ má v a derivace nulové až po $n-2$ -tý řád.

Musíme ovšem mít na paměti, že úpravu (37) jsme mohli provést pouze za podmínky, že $f^{(n)}(t)$ je diferintegrovatelná. Mohou nastat případy, kdy $f^{(n)}(t)$ diferintegrovatelná není, diferintegrál ${}_a\mathbf{D}_t^r f(t)$ ale je (např. pokud $f(t) = t^{\frac{4}{5}}$, $a = 0$, $r = \frac{6}{5} \Rightarrow n = 2$). V takovém případě nelze pravidlo pro skládání diferintegrálů nijak jednoduše vyjádřit.

2.7 Weylův diferintegrál

Speciálním druhem diferintegrálu je tzv. Weylův diferintegrál, pro nějž je charakteristická volba dolní meze $a = -\infty$. Takovýto diferintegrál je definován jen pro málo funkcí, zejména však pro konstantní a exponenciální:

$$-\infty\mathbf{D}_t^q C = 0 \quad (39)$$

$$-\infty\mathbf{D}_t^q e^{kt} = k^q e^{kt} \quad (40)$$

Využitím Eulerových vzorců můžeme z tohoto získat diferintegrál i goniometrických funkcí,

$$-\infty\mathbf{D}_t^q \sin t = \sin \left(t + \frac{q\pi}{2} \right) \quad (41)$$

$$-\infty\mathbf{D}_t^q \cos t = \cos \left(t + \frac{q\pi}{2} \right) \quad (42)$$

2.8 Laplaceova transformace diferintegrálu

Laplaceova transformace (zde značena operátorem \mathcal{L}) je definovaná vztahy⁷

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = \int_0^{\infty} f(t)e^{-pt} dt \quad (43)$$

$$\mathcal{L}^{-1}\{F(p)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} F(p)e^{pt} dp \quad (44)$$

Obrazy obyčejných derivací a integrálů jsou dány těmito vzorci:

$$\mathcal{L}\{f^{(n)}(t)\} = p^n \mathcal{L}\{f(t)\} - \sum_{k=0}^{n-1} p^{n-k-1} f^{(k)}(0) \quad (45)$$

$$\mathcal{L}\left\{\int_0^t \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \dots \int_0^{t_{n-1}} f(t_n) dt_n \dots dt_1 dt\right\} = \frac{\mathcal{L}\{f(t)\}}{p^n}. \quad (46)$$

Vzorce pro tyto obrazy lze sjednotit do jednoho, obsahujícího diferintegrál:

$$\mathcal{L}\{{}_0\mathbf{D}_t^n f(t)\} = p^n \mathcal{L}\{f(t)\} - \sum_{k=0}^{n-1} p^k f^{(n-k-1)}(0). \quad (47)$$

Tento platí, protože pro $n \leq 0$ je sumace prázdná. Na libovolné $q \in \mathbb{R}$ rozšíříme velmi jednoduše:

$$\mathcal{L}\{{}_0\mathbf{D}_t^q f(t)\} = p^q \mathcal{L}\{f(t)\} - \sum_{k=0}^{n-1} p^k {}_0\mathbf{D}_0^{q-k-1} f(t) \quad (48)$$

kde $n \in \mathbb{Z}$ volíme tak, aby $q \in (n-1; n)$. Tohoto výsledku se lze dobrat, pokud bereme Riemann-Liouvillův definiční integrál (19) jako konvoluci diferintegrované funkce s mocninou funkcí a dále postupujeme podle pravidla pro obraz konvoluce v Laplaceově transformaci. Je nutné upozornit, že v sumě se vyskytují diferintegrály s oběma mezemi nulovými, které mohou nabývat nekonečných hodnot – potom Laplaceův obraz diferintegrálu neexistuje.

Pokud uvažujeme pouze $q < 0$ (v takovém případě suma „zmizí“ a dosadíme-li získaný výraz jako obraz do zpětné Laplaceovy transformace, získáme jednu možnou definici diferintegrálu, tj.

$${}_0\mathbf{D}_t^q f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{p^q \mathcal{L}\{f(t)\}\}. \quad (49)$$

⁷V kontextu integrálních transformací je předmět zpravidla značen malým písmenem a jeho obraz příslušným velkým, tedy např. $F(p) = \mathcal{L}\{f(t)\}$.

Tato definice je ovšem příliš komplikovaná pro rozumné využití a hlavně je omezená pouze na funkce, pro které existuje obraz v Laplaceově transformaci (což nesplňuje např. e^{t^2}).

Poznamenejme ještě, že Laplaceova transformace nachází v tomto kontextu využití zvláště při řešení rovnic s derivacemi a integrály necelých řádů.

2.9 Fourierova transformace diferintegrálu

Fourierovu transformaci, kterou zde označíme operátorem \mathcal{F} , definují vztahy

$$\mathcal{F}\{f(t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt \quad (50)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\{F(\omega)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)e^{i\omega t} dt \quad (51)$$

Protože je ve Fourierově transformaci obraz integrálu složitější a obsahuje Diracovu funkci $\delta(\omega)$, omezíme se zde pouze na obraz derivace:

$$\mathcal{F}\{f^{(n)}(t)\} = (i\omega)^n \mathcal{F}\{f(t)\} \quad (52)$$

Analogicky jako u Laplaceovy transformace, i zde lze použitím pravidla pro obraz konvoluce odvodit obecný vzorec pro obraz diferintegrálu, v tomto případě ovšem Weylova a pouze pro $q > 0$:

$$\mathcal{F}\{_{-\infty}\mathbf{D}_t^q f(t)\} = (i\omega)^q \mathcal{F}\{f(t)\} \quad (53)$$

Opět bychom mohli použít tuto transformaci pro definování Weylova diferintegrálu, ovšem nároky na předmět Fourierovy transformace (zejména podmínka, že $\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)| dt$ musí mít konečnou hodnotu) jsou tak velké, že je takřka zbytečné něco takového uvažovat.

3 Numerické diferencování

Tato část práce si klade za cíl prezentovat numerické metody, jejichž účel je vypočítat hodnotu diferencálu. Budeme předpokládat, že funkci, kterou chceme diferencovat, neznáme v celém intervalu stanoveném mezemi diferencálu, ale pouze v několika diskretních bodech. Při odvozování metod budeme vycházet z definic uvedených v teoretické části práce.

3.1 Metoda založená na Grünwald-Letnikovově definici

Pro zjednodušení budeme uvažovat $a = 0$. V takovém případě se Grünwald-Letnikovova definice (16) diferencálu zjednoduší na

$${}_0\mathbf{D}_t^q f(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{N}{t}\right)^q \sum_{k=0}^{N-1} \binom{k-q-1}{k} f\left(t - k\frac{t}{N}\right) \quad (54)$$

Z této definice odvodíme přibližný vztah zcela jednoduše odstraněním požadavku $N \rightarrow \infty$, tedy

$${}_0\mathbf{D}_t^q f(t) \approx h^{-q} \sum_{k=0}^{N-1} \binom{k-q-1}{k} f(t - kh) \quad (55)$$

kde jsme navíc zaměnili $h = \frac{t}{N}$. Význam konstanty h je zde zřejmý – je to rozstup mezi zadanými body, které diferencujeme. Dosazováním zadaných funkčních hodnot za $f(t - kh)$ tedy dostaneme přibližnou hodnotu diferencálu.

Zjedoduzení výpočtu této sumy lze provést užitím zřejmého vztahu

$$\binom{k-q-1}{k} = \frac{k-q-1}{k} \binom{k-q-2}{k-1} \quad (56)$$

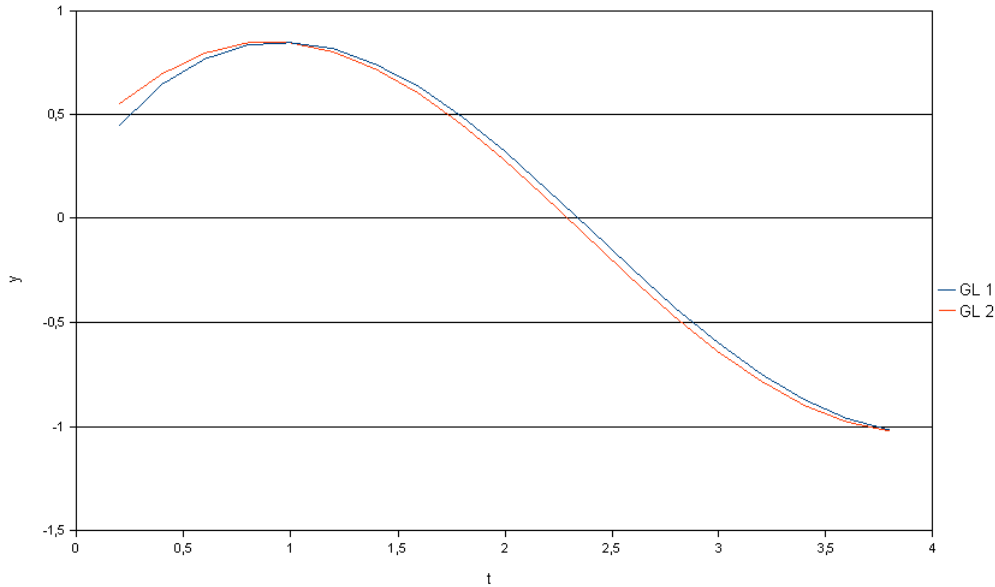
Pomocí něhož lze určit koeficient u funkční hodnoty z předchozího pouhým násobením. Ještě větší zjedoduzení je v podobě posloupnosti $\{r_k\}_{k=0}^{N-1}$, kterou definujeme takto:

$$\begin{aligned} r_0 &= f(h) \\ r_k &= \frac{N-q-k-1}{N-k} r_{k-1} + f((k+1)h) \end{aligned} \quad (57)$$

Pro poslední člen této posloupnosti platí

$$r_{N-1} = \sum_{k=0}^{N-1} \binom{k-q-1}{k} f(t - kh) \quad (58)$$

Algoritmus založený na postupném počítání členů této posloupnosti potřebuje pro výpočet následujícího členu pouze jedno násobení a jedno sečtení.



Obrázek č. 1: Znázornění rozdílu mezi numerickou metodou výpočtu vycházející z originální Grünwald-Letnikovovy definice (GL 1) a z její upravené verze (GL 2). Diferentegrovanou funkcí je $\sin t$ a řád diferentegrovaní je $\frac{1}{2}$. Křivky jsou skoro totožné, ale vzájemně posunuté.

Nyní se zaměříme na modifikovanou definici (17), jejímž účelem je urychlit konvergenci k výsledné hodnotě diferentegrálu. Metoda založená na této upravené definici však vyžaduje funkční hodnoty $f(t + \frac{q}{2}h - kh)$, které explicitně známe pouze v případě, když q je sudé celé číslo. V ostatních případech je třeba funkci interpolovat. Protože jsou vstupní hodnoty ekvidistantní, můžeme použít metody odvozené z Lagrangeových polynomů, konkrétně čtyřbodovou interpolaci, danou vztahem

$$f(t_0 + ph) \approx -\frac{p(p-1)(p-2)}{6}f(t_0 - h) + \frac{(p^2-1)(p-2)}{2}f(t_0) - \frac{p(p+1)(p-2)}{2}f(t_0 + h) + \frac{p(p^2-1)}{6}f(t_0 + 2h), \quad (59)$$

Nejlepší výsledky tato interpolace dosahuje pro $p \in \langle 0; 1 \rangle$. Chceme-li tohoto dosáhnout, nejprve zjistíme, „o kolik h “ jsou požadované funkční hodnoty posunuty. Toto posunutí označíme s a je rovno $\lfloor \frac{q}{2} \rfloor$.⁸ Potom dosadíme $p = \frac{q}{2} - s$ a $t_0 = kh + sh$ a zřejmě platí $f(kh + \frac{q}{2}) = f(t_0 + ph)$. Tato interpolace však nejde použít pro některé krajní zadané body, protože pro výpočet vyžaduje hodnoty sousedních bodů. Pro tyto body musíme pro odhad jejich hodnot použít jinou aproximaci (jinou volbu t_0 a p).

⁸ $\lfloor x \rfloor$ zde značí zaokrouhlení na celé číslo směrem k $-\infty$, tedy např. $\lfloor 1,9 \rfloor = 1$, $\lfloor -1,2 \rfloor = -2$

Protože upravený definiční vztah, ze kterého při odvození tohoto algoritmu vycházíme, vyžaduje pouze jiné funkční hodnoty, můžeme jeho výpočet také převést na úsporný cyklus pomocí již zmíněné posloupnosti.

Pro diferenciování s libovolnou dolní mezí a postupujeme tak, že souřadnice zadaných bodů posuneme o a , čímž získáme nulovou dolní mez a při výstupu provedeme posun zpátky. V praxi je ovšem takováto operace zbytečná, neboť diferenciovací algoritmus explicitně nevyžaduje t -ové souřadnice bodů, pouze rozestup mezi nimi.

3.2 Metoda založená na Riemann-Liouvillově definici

Nyní se zaměříme na druhou definici diferenciování, která je s Grünwald-Letnikovovou identická. Opět budeme uvažovat zjednodušený případ $a = 0$. Potom podle Riemann-Liouvillové definice (19)

$${}_0\mathbf{D}_t^q f(t) = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{q+1}} d\tau \quad (60)$$

pro $q < 0$. Uvedený integrál lze numericky určit mnoha metodami. Můžeme je rozdělit na dvě skupiny podle toho, kdy se provádí interpolace – buď interpolujeme celý integrovaný výraz $f(\tau)(t-\tau)^{-q-1}$, nebo nejprve interpolujeme pouze funkci $f(t)$ a výsledný integrál určíme algebraicky.

Rozebereme nejprve první případ, který je zřejmější. Ze zadaných bodů popisujících funkci $f(t)$ vytvoříme násobením body popisující funkci $g(\tau) = f(\tau)(t-\tau)^{-q-1}$. Vše, co musíme dále udělat, je tuto funkci numericky zintegrovat (určit $\int_0^t g(\tau)d\tau$). Pro toto existuje mnoho metod – primitivní lichoběžníková metoda, Newton-Cotesovy vzorce (pokud jsou body popisující $f(t)$ ekvidistantní) a další. Všimněme si ale, že pokud $q > -1$, exponent u dvojčlenu $t-\tau$ je stále záporný, tudíž integrál sice konverguje, ale je nevlastní. Určit hodnotu takového integrálu je prakticky nemožné, pokud máme funkci zadanou pouze jako soubor diskretních bodů. Z tohoto důvodu je tato metoda omezena pouze na $q < -1$.

V druhém případě budeme vycházet z toho, že můžeme funkci $f(t)$ na určitém intervalu popsat nějakou interpolací a tu následně integrovat. Pro zjednodušení algebraické interpolace upravíme definiční interval takto:

$$\int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{q+1}} d\tau = \int_0^t \frac{f(t-\tau)}{\tau^{q+1}} d\tau. \quad (61)$$

Nyní předpokládejme, že integrujeme na nějakém dílčím intervalu $\langle t-t_2; t-t_1 \rangle$, přičemž funkční hodnoty v t_1 a t_2 známe. Uvažujme lineární interpolaci

$f(t) \approx at + b$, účinnou pro $t \in \langle t_1; t_2 \rangle$. Pro jednoduchost ještě substituujeme $r = -q - 1$. Pak

$$\int_{t-t_2}^{t-t_1} \frac{f(t-\tau)}{\tau^{q+1}} d\tau \approx \int_{t-t_2}^{t-t_1} [a(t-\tau) + b] \tau^r d\tau. \quad (62)$$

Integrál na levé straně můžeme velmi snadno zintegrovat, čímž dostáváme

$$\int_{t-t_2}^{t-t_1} [a(t-\tau) + b] \tau^r d\tau = \left[-\frac{a}{r+2} \tau^{r+2} + \frac{at+b}{r+1} \tau^{r+1} \right]_{t-t_2}^{t-t_1}. \quad (63)$$

Výsledný integrál je součet takovýchto dílčích integrálů, tedy

$$\int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{q+1}} d\tau \approx \sum_{\cup \langle t_1; t_2 \rangle = \langle 0; t \rangle} \left[-\frac{a(t_1, t_2)}{r+2} \tau^{r+2} + \frac{a(t_1, t_2)t + b(t_1, t_2)}{r+1} \tau^{r+1} \right]_{t-t_2}^{t-t_1}, \quad (64)$$

kde $a(t_1, t_2), b(t_1, t_2)$ představují koeficienty lineární interpolace na intervalu $\langle t_1; t_2 \rangle$.

Stejný postup můžeme použít i pro přesnější kubickou interpolaci $f(t) \approx at^3 + bt^2 + ct + d$, jejíž koeficienty získáme pomocí definice Lagrangeových interpolačních polynomů. V takovém případě dostáváme úpravou dílčího integrálu

$$\begin{aligned} & \int_{t-t_2}^{t-t_1} [a(t-\tau)^3 + b(t-\tau)^2 + c(t-\tau) + d] \tau^r d\tau = \\ & = \int_{t-t_2}^{t-t_1} [-a\tau^3 + (3at+b)\tau^2 - (3at^2+2bt+c)\tau + (at^3+bt^2+ct+d)] \tau^r d\tau \\ & = \left[-\frac{a}{r+4} \tau^{r+4} + \frac{3at+b}{r+3} \tau^{r+3} - \frac{3at^2+2bt+c}{r+2} \tau^{r+2} + \frac{at^3+bt^2+ct+d}{r+1} \tau^{r+1} \right]_{t-t_2}^{t-t_1}. \quad (65) \end{aligned}$$

Přibližnou hodnotu celého integrálu opět získáme součtem dílčích.

V čem je výhoda této metody oproti předchozí? Pokud numericky stanovujeme diferenciální integrál ve všech zadaných bodech, potom nám stačí spočítat a dále uchovávat v paměti zhruba tolik souborů koeficientů popisujících interpolaci, kolik máme zadaných bodů. Oproti tomu při první metodě musíme (pokud takto integrujeme) určovat koeficienty interpolace pro každý výpočet dílčího integrálu, takže celkový počet provedených interpolací roste s objemem vstupních dat kvadraticky. Navíc je tato metoda omezená slabší podmínkou $q < 0$.

Všechny výše uvedené úvahy se omezovaly pouze na $q < 0$, popř. $q < -1$. Rozšířit diferintegrační metodu na libovolné $q \in \mathbb{R}$ jde pomocí definičního vztahu (20), který přidává opakovanou derivaci. Pro toto použijeme vzorec pro přibližnou derivaci, který předpokládá znalost funkčních hodnot $f(t - h_1)$, $f(t + h_2)$:

$$f'(t) \approx \frac{\frac{h_1}{h_2}(f(t + h_2) - f(t)) + \frac{h_2}{h_1}(f(t) - f(t - h_1))}{h_1 + h_2}. \quad (66)$$

Takovýto přístup je užitečný, pokud diferintegrujeme soubor bodů a chceme znát hodnotu diferintegrálu v každém zadaném bodě. Potom nejprve určíme pro každý bod integrál a na vzniklý soubor dat aplikujeme tuto derivační metodu, dokud nedosáhneme požadovaného řádu.

3.3 Srovnání metod

Pro jedoduchost budeme dále numerické metody založené na Grünwald-Letnikovově definici nazývat *GL metody* a metodám založeným na Riemann-Liouvillově definici *RL metody*.

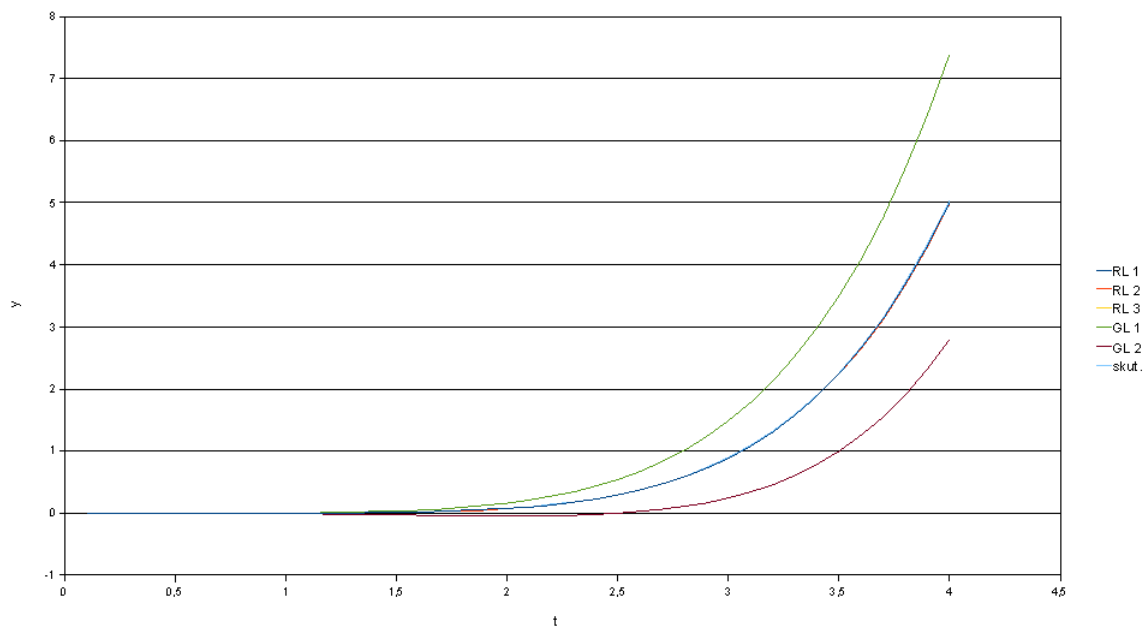
Očividnou výhodou numerických RL metod je, že vstupní data nemusí být ekvidistantní. Tohoto lze teoreticky dosáhnout interpolováním i u GL metod, ovšem takovýto postup by byl velmi náročný. Výhodou této ovšem je jedoduchost algoritmu, což má za následek rychlejší výpočet. Navíc pokud diferintegrujeme soubor dat, u RL metod vzniká pro derivace vyšších řádů podstatná odchylka u krajních bodů souboru, neboť pro tyto nelze použít efektivní aproximaci derivace a při dalším derivování se tato chyba šíří do dalších bodů.

Pro srovnání efektivity jednotlivých metod jsem pomocí programů popsaných v poslední části práce vygeneroval grafy, které ukazují efektivitu metod pro různé funkce a různé řády diferintegrálu. Pro metody jsou použity následující zkratky:

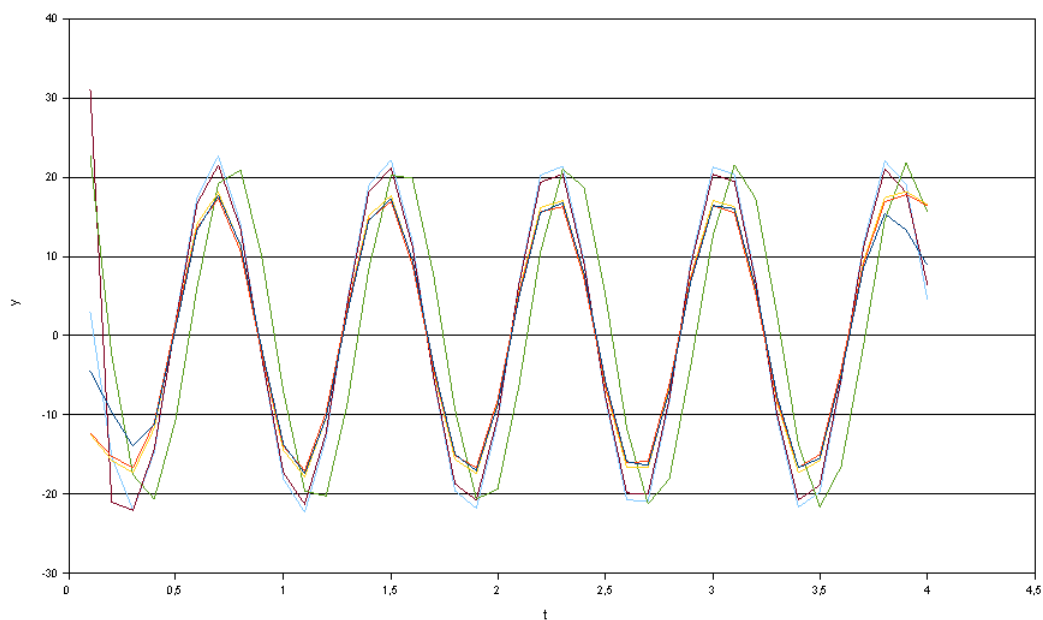
- GL 1 – GL metoda odvozená z originální definice
- GL 2 – GL metoda odvozená z upravené definice
- RL 1 – RL metoda, kde se interpoluje se celý výraz za znakem integrálu
- RL 2 – –II–, na původní funkci je použita lineární interpolace
- RL 3 – –II–, na původní funkci je použita kubická interpolace

Metoda GL 1 se ukazuje jako nepřesná pro skoro jakákoliv vstupní data, její výhoda spočívá pouze ve velmi jednoduchém algoritmu. Ten je užitečný v případě, kdy máme interval, na kterém diferintegrujeme, popsaný velkým množstvím bodů, což zajistí požadovanou přesnost. Metoda GL 2 je výrazně přesnější, selhává pouze pro některé integrály.

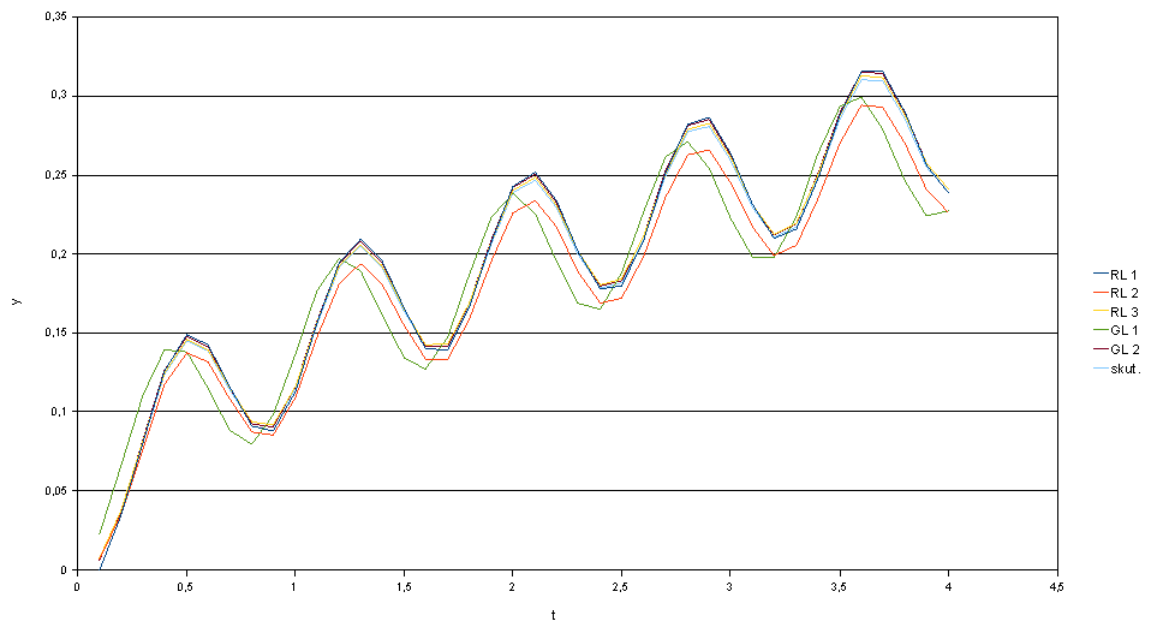
Z RL metod se ukazuje jako nejúčinnější RL 3. Efektivita metody RL 2 závisí na tom, jak dobře vstupní data jdou popsat lineární aproximací.



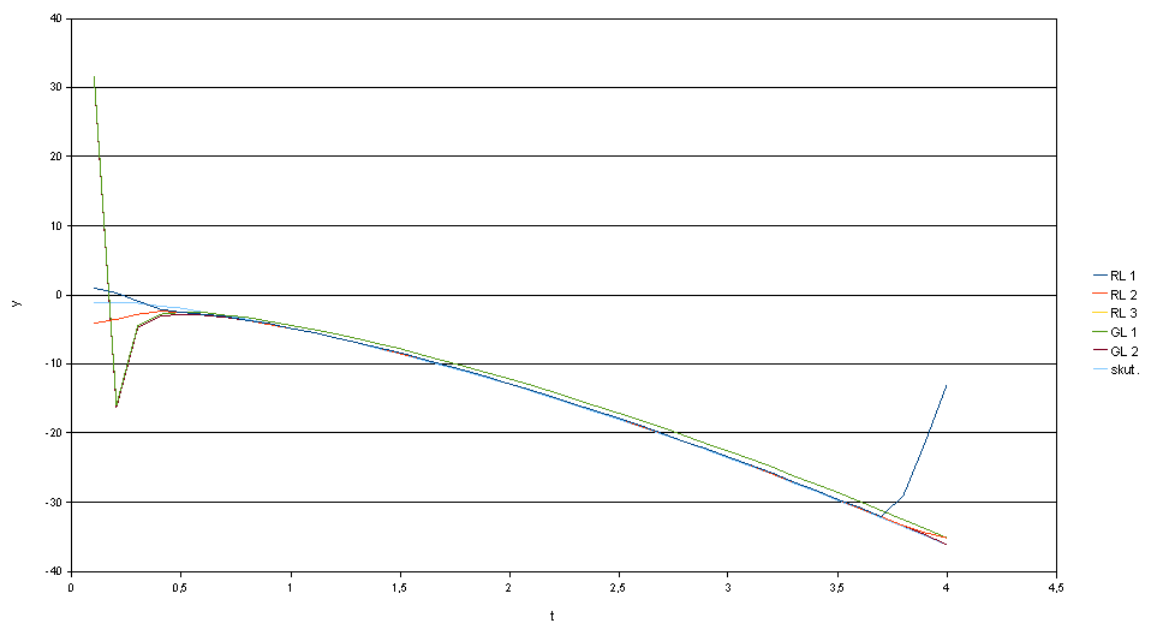
Obrázek č. 2: Diferintegrovaní řádu $-5,5$ funkce \sqrt{t} , vstupní data tvoří 41 bodů. Zatímco grafy výsledků RL metod se takřka kryjí se skutečným výsledkem, GL metody dosahují značně nepřesných výsledků.



Obrázek č. 3: Diferintegrovaní řádu $1,5$ funkce $\sin 8t$, vstupní data tvoří 41 bodů, takže funkce je popsána dost nepřesně. Nejlepších výsledků dosahuje metoda GL 2, výsledky RL metod zhruba odpovídají přímo úměrně zmenšeným skutečným hodnotám.



Obrázek č. 4: Diferentrování řádu $-1,5$ funkce $\sin 8t$, vstupní data tvoří 41 bodů (až na řád stejný případ jako na obrázku č. 3). Zde kromě metody GL 1 selhává i metoda RL 2, protože pro takto nepřesně zadanou funkci způsobuje lineární aproximace značné chyby. Nejlepších výsledků dosahuje metoda RL 3.



Obrázek č. 5: Diferentrování řádu $1,5$ funkce $1 - t^3$, vstupní data tvoří 41 bodů. V podstatné části průběhu funkce se výsledky všech metod (kromě GL 1) takřka shodují se skutečnými hodnotami. U RL 1 lze pozorovat značnou odchylku u konce vstupních dat, způsobenou opakovaným derivováním.

Metoda RL 1 má výsledky velmi podobné metodě RL 3, problém ovšem nastává při kladných řádech diferenciování, neboť musí vždy provést o jednu derivaci víc, což zvyšuje nepřesnost (zvláště u okrajů vstupních dat).

Všechny metody mají zpravidla problémy s výpočtem derivace poblíž dolní meze, protože pro kladné řády nabývá mnohdy diferencióval v dolní mezi nekonečnou hodnotu. RL metody pak navíc způsobují nepřesnost i u konce vstupních dat kvůli větším nepřesnostem při derivování v koncovém bodě.

Mimo grafy uvedené v této práci jsem vygeneroval ještě další, ovšem pro ilustraci postačují tyto.

3.4 Metoda založená na diferenciování Fourierových řad

Tato metoda se od předchozích dvou liší tím, že jejím účelem není určit přibližnou hodnotu diferencióval s konečnou dolní mezí, ale numerický výpočet Weylova diferencióval periodické funkce. Vstupními daty budou opět diskretní hodnoty, které v tomto případě budou představovat jednu periodu diferencióvané funkce. Vyjdeme z toho, že každou integrovatelnou funkci s periodou 2π lze vyjádřit jako nekonečnou Fourierovu řadu

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kt + b_k \sin kt), \quad (67)$$

kde koeficienty a_k , b_k jsou určeny jako

$$a_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(t) \cos kt \, dt \quad (68)$$

$$b_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(t) \sin kt \, dt. \quad (69)$$

Toto snadno rozšíříme pro funkci s libovolnou periodou p :

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(a_k \cos \left(\frac{2\pi}{p} kt \right) + b_k \sin \left(\frac{2\pi}{p} kt \right) \right) \quad (70)$$

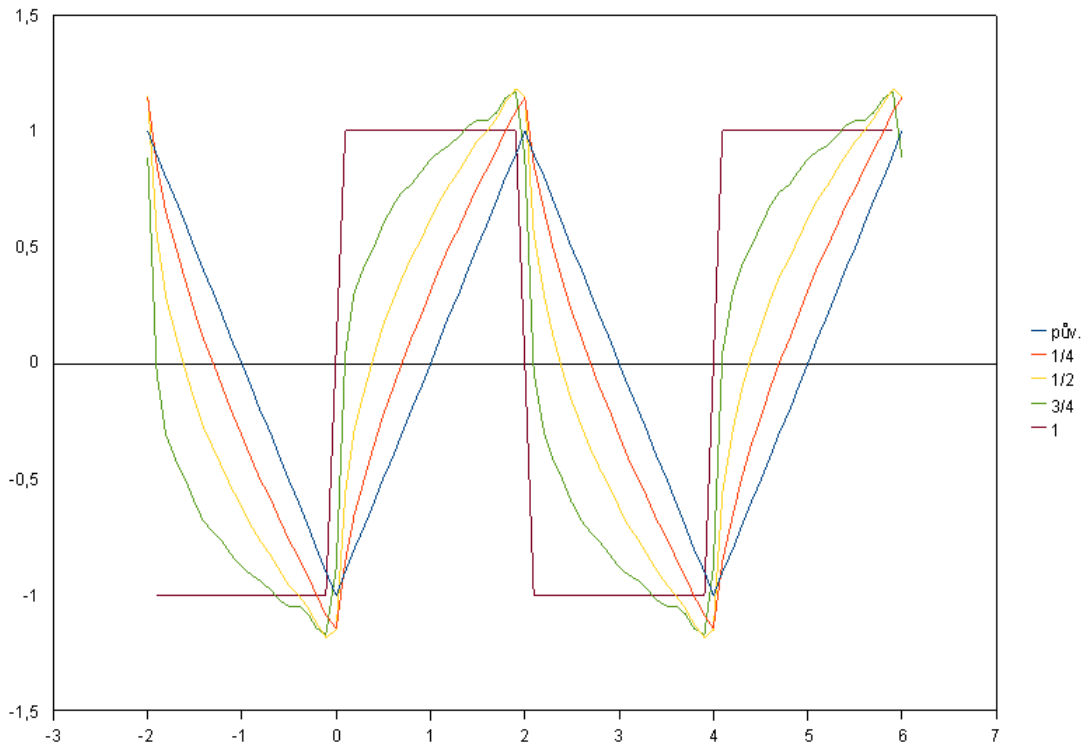
$$a_k = \frac{2}{p} \int_0^p f(t) \cos \left(\frac{2\pi}{p} kt \right) dt \quad (71)$$

$$b_k = \frac{2}{p} \int_0^p f(t) \sin \left(\frac{2\pi}{p} kt \right) dt. \quad (72)$$

Díky skutečnosti, že Fourierova řada konverguje stejnoměrně (viz např. [6]), můžeme zaměnit pořadí diferenciování a sumace. Weylovy diferenciály zde se vyskytujícími elementárními funkcemi jsou uvedeny v podsekcí 2.7 na str. 10. Přímým diferenciováním tedy získáváme

$$-\infty \mathbf{D}_t^q f(t) = \sum_{k=1}^{\infty} (\rho k)^q \left(a_k \cos \left(\rho k t + \frac{q\pi}{2} \right) + b_k \sin \left(\rho k t + \frac{q\pi}{2} \right) \right), \quad (73)$$

kde $\rho = \frac{2\pi}{p}$. Tento vzorec platí pro libovolné $q \in \mathbb{R}$ pouze v případě $a_0 = 0$. Pokud tomu tak není, je platnost omezena pouze na $q > 0$, neboť Weylův integrál konstanty nemá konečnou hodnotu.



Obrázek č. 6: Pilovitá funkce a její derivace. Čtvrtinová, půltá a tříčtvrtinová derivace byly generovány metodou diferenciování Fourierových řad. Je dobře vidět, jak s rostoucím řádem roste i nepřesnost metody.

Celý problém se redukuje na stanovení koeficientů a_k a b_k , které blíže rozebírám v další části této práce. Přesnost této metody závisí zejména na tom, jak dobře lze funkci popsanou vstupními daty aproximovat Fourierovou řadou, a také na řádu q – s rostoucím řádem roste koeficient k^q u členů řady, takže mají ve výsledné sumě větší podíl členy s vyšším k , jejichž výpočet je však nepřesnější, tudíž je i výsledek výpočtu nepřesnější.

4 Ukázkové programy

Abych ilustroval aplikaci numerických metod pro diferencování, které jsou popsány v předchozí části práce, naprogramoval jsem několik ukázkových programů, které tyto postupy využívají. Všechny zdrojové kódy jsou napsány v jazyce Object Pascal a lze je nalézt na CD přiloženém k práci. Zdrojové kódy jsou okomentované a mohou sloužit jako inspirace, popř. přímo být zkopírovány v jiných aplikacích. Pro lepší pochopení samozřejmě doporučuji do nich nahlédnout.

Úkolem těchto programů je numericky stanovit diferenciální rovnice ve všech zadaných bodech (zpravidla kromě prvního). Vstupní data jsou vždy uložena v souboru `input.txt` a jsou formátována tak, že na každém řádku jsou uvedena dvě čísla, oddělená od sebe mezerou. Tato dvojice určuje jeden bod $[t, y]$ diferencované funkce. Je nutné, aby byla data seřazena vzestupně podle t -ové hodnoty. Stejně je formátován i soubor s výstupními daty, `output.txt`.

4.1 Jednotka `FracCalcUtils`

Páteřní jednotka všech ukázkových programů. Její obsah je následující:

- Definice datových typů `TData` a `TVector`, které slouží pro manipulaci se zpracovávanými daty
- Metodu `LoadDataFromFile`, která načte data ze souboru ve výše uvedeném formátu do proměnné typu `TData`
- Funkci `gamma`, jejíž výpočet je založen na Lanczosově aproximaci
- Metody pro numerické derivování a integrování.

Výpočet derivace probíhá jednoduše podle vztahu (66). Integrování probíhá pomocí interpolace Lagrangeovými polynomy třetího nebo druhého stupně, jejichž výpočet zde blíže rozvedu.

Při interpolaci kubickým polynomem ve tvaru $at^3 + bt^2 + ct + d$ předpokládáme, že máme zadané souřadnice čtyř bodů $[t_0, y_0], [t_1, y_1], [t_2, y_2], [t_3, y_3]$. Vypočítáme následující koeficienty:

$$\begin{aligned}v_0 &= \frac{y_0}{(t_0 - t_1)(t_0 - t_2)(t_0 - t_3)} \\v_1 &= \frac{y_1}{(t_1 - t_0)(t_1 - t_2)(t_1 - t_3)} \\v_2 &= \frac{y_2}{(t_2 - t_0)(t_2 - t_1)(t_2 - t_3)} \\v_3 &= \frac{y_3}{(t_3 - t_0)(t_3 - t_1)(t_3 - t_2)},\end{aligned}$$

které ponecháme pro zrychlení výpočtu v paměti, protože jsou vícekrát potřeba pro určení samotných koeficientů interpolačního polynomu:

$$\begin{aligned}
 a &= v_0 + v_1 + v_2 + v_3 \\
 b &= -[v_0(t_1 + t_2 + t_3) + v_1(t_0 + t_2 + t_3) + \\
 &\quad + v_2(t_0 + t_1 + t_3) + v_3(t_0 + t_1 + t_2)] \\
 c &= v_0(t_1t_2 + t_1t_3 + t_2t_3) + v_1(t_0t_2 + t_0t_3 + t_2t_3) + \\
 &\quad + v_2(t_0t_1 + t_0t_3 + t_1t_3) + v_3(t_0t_1 + t_0t_2 + t_1t_2) \\
 d &= -(v_0t_1t_2t_3 + v_1t_0t_2t_3 + v_2t_0t_1t_3 + v_3t_0t_1t_2)
 \end{aligned}$$

Jakmile známe potřebné koeficienty, zintegrujeme mezi prostředními dvěma body pomocí vzorce $\left[\frac{a}{4}t^4 + \frac{b}{3}t^3 + \frac{c}{2}t^2 + dt\right]_{t_1}^{t_2}$. Tento postup je implementován v proceduře `LgrIntegral`.

Velmi podobně funguje i kvadratická interpolace ve tvaru $at^2 + bt + c$. Zde se koeficienty určí pomocí výpočtů

$$\begin{aligned}
 v_0 &= \frac{y_0}{(t_0 - t_1)(t_0 - t_2)} \\
 v_1 &= \frac{y_1}{(t_1 - t_0)(t_1 - t_2)} \\
 v_2 &= \frac{y_2}{(t_2 - t_0)(t_2 - t_1)} \\
 a &= v_0 + v_1 + v_2 \\
 b &= -[v_0(t_1 + t_2) + v_1(t_0 + t_2) + v_2(t_0 + t_1)] \\
 c &= v_0t_1t_2 + v_1t_0t_2 + v_2t_0t_1.
 \end{aligned}$$

Tato interpolace nachází využití hlavně v případech, kdy nemáme dostatek bodů pro použití jiných metod – typicky tedy při derivování okrajových bodů a integrování s okrajovým bodem jako jednou mezí. Je použita ve funkcích `LgrBeginIntegral`, `LgrEndIntegral`, `LgrBeginDerivative` a `LgrEndDerivative`.

4.2 GL 1

Tento velmi jednoduchý program využívá pro diferenciování metodu založenou na Grünwald-Letnikovově definici diferenciálu. Pro nejvyšší zrychlení výpočtu sumy je použito zjednodušení, založené na posloupnosti (57).

4.3 GL 2

Od GL 1 se tento program liší tím, že pro lepší výsledky užívá metodu odvozenou z upravené Grünwald-Letnikovovy definice. Konečný výpočet sumy probíhá stejně, nejprve je ale nutné interpolací nalézt přibližné funkční

hodnoty v požadovaných bodech. Pro toto je použita Lagrangeova čtyřbodo-
vá interpolace (59). Ta probíhá v praxi takto: vypočtou se koeficienty

$$A = -\frac{p(p-1)(p-2)}{6} \qquad B = \frac{(p^2-1)(p-2)}{2}$$

$$C = -\frac{p(p+1)(p-2)}{2} \qquad D = \frac{p(p^2-1)}{6},$$

kde $p = \frac{q}{2} - s$ podle dříve uvedeného významu (viz str. 14). Cyklem pro-
jdeme všechna vstupní data a ukládáme nová data s hodnotou $Ay_{i-1+s} +$
 $By_{i+s} + Cy_{i+1+s} + Dy_{i+2+s}$. Tato metoda nemůže fungovat pro některé krajní
body (nejsou vpravo i vlevo od nich dva body se známou hodnotou, které
tato interpolace vyžaduje), a tak jsou pro ně vygenerovány jiné koeficienty
 A, B, C, D (je jinak zvoleno p). Potom se těmito násobí hodnoty v okrajových
(„prvních“ nebo „posledních“) čtyřech bodech.

Jakmile je interpolace dokončena, používají se pro další výpočty pouze
tato nová data. Program dále pracuje stejně jako GL 1.

4.4 RL 1

Tento program diferenciuje vstupní data metodou založenou na Rie-
mann-Liouvillově definici. Na začátku program rozhodne, jestli bude na konci
potřeba ještě derivovat nebo stačí jen integrovat. Pak jsou postupně pro
každou horní mez diferenciování vygenerovány a uloženy hodnoty celého
výrazu za znakem diferenciálu. Tato data jsou následně integrována za po-
mocí interpolace Lagrangeovým polynomem (tj. metodami `LgrIntegral`, `Lgr-`
`BeginIntegral` a `LgrEndIntegral` z jednotky `FracCalcUtils`). Pokud už není třeba
derivovat, tyto integrály jsou požadované hodnoty a tak se zapisují přímo do
výstupního souboru. V opačném případě se ukládají pouze do paměti, kde
jsou poté podrobena opakované derivaci, dokud se nedosáhne požadovaného
řádu diferenciálu. Tato data jsou pak vypsána do výstupního souboru.

4.5 RL 2

Další z programů, jejichž hlavní algoritmus je založen na Riemann-Liou-
villově definici. V tomto ale probíhá nejprve lineární interpolace vstupních
dat a až potom probíhá samotné diferenciování. Pro každý dílčí interval
jsou určeny příslušné koeficienty této interpolace a ty jsou následně uloženy
do paměti, aby se nemusely počítat zvlášť pro všechny horní meze diferin-
tegrování. Další výpočty probíhají integrováním na dílčích intervalech podle
vzorce (63). Po tomto program dále pracuje prakticky stejně jako RL 1.

4.6 RL 3

Program pracující skoro stejně jako jeho předchůdce, RL 2. Jediným rozdílem je, že interpolace vstupních dat není lineární, nýbrž kubická. Dílčí integrály jsou pak numericky stanoveny pomocí vzorce (65).

4.7 FS 1

Tento program numericky stanovuje Weylův diferintegrál periodické funkce pomocí vyjádření Fourierovou řadou. Je omezen pouze na ekvidistantní vstupní data. Hlavním problémem je zde stanovení koeficientů a_k a b_k , které si nyní přiblížíme.

Předpokládejme vstupní data y_0, y_1, \dots, y_N , které popisují jednu periodu funkce (takže $y_0 = y_N$) a tato perioda má délku p . Potom jednoduchou úpravou vzorců z [4] získáváme

$$a_k = \frac{2}{N} \sum_{l=0}^{N-1} y_l \cos\left(\frac{2\pi}{p} kt_l\right)$$
$$b_k = \frac{2}{N} \sum_{l=0}^{N-1} y_l \sin\left(\frac{2\pi}{p} kt_l\right).$$

Těchto koeficientů potřebujeme právě $\lfloor \frac{N}{2} \rfloor$, protože tolik bude použito členů řady. Hodnoty diferintegrálů potom spočteme pomocí vzorce (73), kde v sumě nahradíme ∞ za $\lfloor \frac{N}{2} \rfloor$.

4.8 FS 2

V tomto programu je použita jiná metoda výpočtu Fourierových koeficientů, a to přímo podle jejich definic (71), (72). Tato metoda tak může pracovat i pokud jsou vstupní data neekvidistantní. Vzhledem k předpokladu periodičnosti funkce můžeme snadno určit i body „před“ a „za“ vstupními daty (jednou periodou), a tak integrování může probíhat výhradně metodou `LgrlIntegral`.

Aby oba programy (FS 1 a FS 2) pracovaly analogicky k programům využívajícím GL a RL metody, diferintegrál se počítá pouze pro body z vstupních dat a pro jediný zadaný řád diferintegrování. Jakmile ale jednou známe příslušné koeficienty Fourierovy řady, můžeme vypočítat přibližnou hodnotu diferintegrálu v jakémkoliv bodě a pro jakýkoliv (kladný) řád.

4.9 Jednotka TaylorU

Tato jednotka není určena k numerickému diferintegrování, jsou v ní však implementovány funkce `DerSin` a `DerExp`, které podle vzorce (28) vypočítávají

diferenciál funkcí $\sin t$ a e^t . Lze zadat libovolnou dolní a horní mez, řád diferenciování i počet členů řady. Pro kladné řady nelze vypočítat hodnotu v dolní mezi, je vyvolána výjimka.

Jednotku `TaylorU` příkládám k práci proto, aby čtenář mohl při případném zkoušení přiložených programů porovnávat jejich výsledky se skutečnými hodnotami diferenciálů goniometrických a exponenciálních funkcí.

5 Závěr

V práci jsem popsal základy teorie diferencování a numerické metody v této teorii aplikovatelné. Metody byly porovnány a implementovány v jazyce Object Pascal. Čtenář práce tak může při použití numerických metod ve svých aplikacích přímo využít přiložených zdrojových kódů (měly by být snadno přenosné i do jiných programovacích jazyků). Práce lze využít i jako pouhé seznámení s teorií diferencování, protože česká odborná veřejnost je s touto problematikou seznámena minimálně a česky psané publikace na toto téma neexistují. Případným zájemcům o tuto nesporně zajímavou teorii doporučuji anglicky psané knihy [1] a [2], které o tématu pojednávají poměrně srozumitelně.

Použitá literatura

- [1] Oldham, K. B. – Spanier, J.: *The Fractional Calculus: theory and applications of differentiation and integration to arbitrary*, Academic Press, New York 1974. ISBN 0-12-525550-0.
- [2] Podlubný, I.: *Fractional Differential Equations: an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications*, Academic Press, San Diego 1999. ISBN 0-12-558840-2.
- [3] Rektorys, K. a spolupracovníci: *Přehled užití matematiky I*, Prometheus, Praha 1996. ISBN 80-85849-92-5.
- [4] Abramowitz, M. – Stegun, I. A.: *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover Publications, New York 1972
- [5] Pírko, Z. – Veit, J.: *Laplaceova transformace*, Státní nakladatelství technické literatury, Praha 1972
- [6] Došlá, Z. – Plch, R. – Sojka, P.: *Nekonečné řady s programem Maple* [online], dostupné z URL: <http://www.math.muni.cz/~plch/nkpm/nradtisk.pdf>
- [7] Kotlík, B. – Lank, V. – Růžičková – K., Vondra, M. – Vošický, Z.: *Matematické, fyzikální a chemické tabulky*, Fragment, Praha 2003. ISBN 80-7200-521-9
- [8] *Xuru's Website* [online], dostupné z URL: <http://www.xuru.org>
- [9] *MathWorld*, internetová encyklopedie [online], dostupné z URL: <http://mathworld.wolfram.com>
- [10] *PlanetMath* [online], internetová encyklopedie, dostupné z URL: <http://planetmath.org>
- [11] *Wikipedie* [online], otevřená encyklopedie, dostupné z URL: <http://en.wikipedia.org>