

**POLITECHNIKA ŁÓDZKA**

**Wydział Elektrotechniki, Elektroniki,  
Informatyki i Automatyki**

**ROZPRAWA DOKTORSKA**  
**Streszczenie**

mgr inż. Dariusz Brzeziński

**Problems of Numerical Calculation of Derivatives and  
Differential Equations of Fractional Orders**

**Problematyka numerycznych obliczeń pochodnych i równań  
różniczkowych ułamkowych rzędów**

Promotor  
Prof. Dr Hab. Inż. Piotr Ostalczyk

Łódź 2016

## Wstęp

Rachunek różniczkowy i całkowity ułamkowych rzędów (w skrócie - rachunek ułamkowych rzędów) może być interpretowany jako rozszerzenie koncepcji operatora różniczkowania całkowitego rzędu  $n$  do rzędu dowolnego  $\nu$ .

Angielski termin *fractional calculus* przyjęty do określenia rachunku ułamkowych rzędów jest mylący, bowiem sugeruje, iż rzędy różniczkowania i całkowania mogą przybierać jedynie wartości niecałkowite. Właściwszym określeniem tej dziedziny matematyki jest różniczkowanie i całkowanie rzędu *dowolnego*. W praktyce, tak rzędy różniczkowania jak i całkowania mogą przyjmować wartości rzeczywiste lub zespolone. W tym kontekście klasyczne pochodne i całki rzędów całkowitych należy rozważać jak specjalne przypadki rachunku ułamkowych rzędów.

Początki rachunku ułamkowych rzędów sięgają tego samego okresu, co tradycyjnego rachunku różniczkowego i całkowego całkowitych rzędów, tj. końca XVI wieku. Jednak koncepcja ta nie była szerzej dyskutowana ani badana aż do początków wieku XVIII.

Najważniejsze daty, w kontekście zagadnień rozważanych w niniejszej rozprawie doktorskiej to lata: 1832, kiedy to Liouville, a w 1876 Riemann ogłosili znaną dziś szeroko definicję pochodnej i całki ułamkowych rzędów; w 1876 - Grünwald zdefiniował pochodną ułamkowych rzędów jako granicę sumy.

Jednak zauważalny wzrost zainteresowania tą nową dziedziną matematyki daje się odnotować dopiero w ostatnich 40-stu latach: pierwsza konferencja poświęcona rachunkowi ułamkowych rzędów i jego zastosowaniom odbyła się w 1974 roku na uniwersytecie w New Heaven, w stanie Connecticut, USA; pierwsza monografia autorów Oldham i Spanier *The Fractional Calculus. Theory and Application of Differentiation and Integration to Arbitrary Order* została opublikowana w tym samym roku.

Wczesne badania nad zastosowaniem rachunku ułamkowych rzędów w matematyce, fizyce, chemii, inżynierii, ekonomii, biologii miały charakter czysto teoretyczny. Ostatnio daje się jednak zauważyć znaczący wzrost ilości badań nad praktycznym jego zastosowaniem w fizyce, naukach technicznych, biologii i ekonomii. Szczególną intensywność zastosowań należy odnotować w elektrotechnice, elektronice, sterowaniu, a także w rozpoznawaniu i przetwarzaniu sygnałów. Warto zauważyć w tym miejscu, że plakat zatytułowany *Fractional Calculus: Models, Algorithms, Technology* opublikowany przez prof. J. A. Tenreiro Machado w czasopiśmie *Discontinuity, Nonlinearity, and Complexity*, 4(4), w 2015 roku wymienia ponad 30 dziedzin zastosowań rachunku ułamkowych rzędów.

Operatory różniczkowania i całkowania ułamkowych rzędów to operatory nielokalne. Powoduje to, że teoria rachunku różniczkowego ułamkowych rzędów stała się znakomitym instrumentem do opisu pamięci oraz dziedzicznych właściwo-

ści różnych procesów fizycznych. Na przykład, pochodne i całki rzędów połówkowych okazały się bardziej przydatne w formułowaniu pewnych problemów elektrochemicznych niż klasyczne modele. Zastosowanie teorii rachunku ułamkowych rzędów do teorii entropii stało się również ważnym narzędziem oraz głównym tematem wielu badań naukowych. Wiąże się to z faktem, że entropia ułamkowych rzędów może być użyta do opracowania nowych algorytmów segmentacji obrazów oraz w analizie procesów anomalnej dyfuzji i równań różniczkowych jej dotyczących. Z kolei badania prowadzone w dziedzinie teorii sterowania wykazały, że regulatory PID opisane równaniami ułamkowych rzędów oraz regulatory PID zmiennych, ułamkowych rzędów przewyższają swoimi możliwościami klasyczne regulatory PID. Zastosowanie tych pierwszych w sterowaniu np. ramieniem robota poprawia właściwości dynamiczne układu zamkniętego.

Wymienione przykłady korzyści z zastosowania rachunku ułamkowych rzędów pozwalają zrozumieć dlaczego temat ten skupia uwagę coraz większej rzeszy naukowców z całego świata; według *Science Watch of Thomson Reuters* to obecnie *Emerging Research Front*.

Nielokalność pochodnych i całek ułamkowych rzędów zwiększa wydatnie stopień trudności ich numerycznych obliczeń, tzn. podczas ich obliczania muszą być wzięte pod uwagę wartości funkcji z całego zakresu a nie tylko wartości sąsiadujące z punktem, w którym obliczana jest pochodna lub całka ułamkowych rzędów.

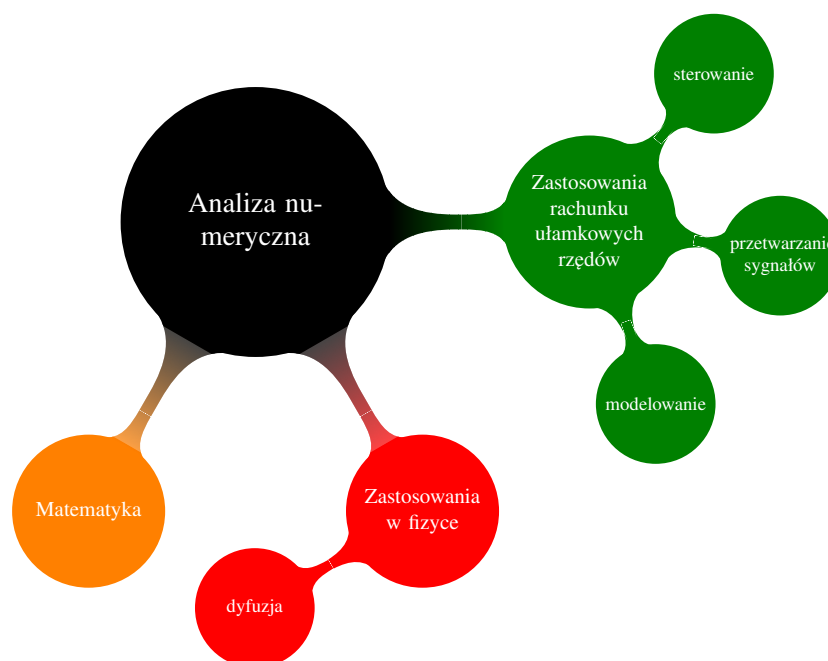
Fakt ten oraz to, że pochodne i całki ułamkowych rzędów funkcji elementarnych są tzw. funkcjami specjalnym (np. funkcjami Mittag-Lefflera), oszacowanie dokładności których wiąże się z dużymi trudnościami obliczeniowymi, był podstawową trudnością powodującą, że rachunek ułamkowych rzędów nie miał wielu zastosowań aż do lat siedemdziesiątych wieku dwudziestego.

Pochodne i całki ułamkowych rzędów można obliczyć na podstawie znanych od lat definicji i wzorów wykorzystując metody numeryczne. Zagadnienie to jest jednak nie w pełni rozwiązane, szczególnie w kontekście dokładności numerycznych obliczeń oraz sposobów jej szacowania.

Wykazanie i przeanalizowanie zalet oraz wad tych metod w sensie poziomu dokładności numerycznych obliczeń stanowią integralną część niniejszej rozprawy doktorskiej, m.in. ze względu na to, że zakres oraz efektywność praktycznych zastosowań pochodnych i całek ułamkowych rzędów mogą zostać wydatnie zwiększone poprzez zmaksymalizowanie dokładności ich numerycznych obliczeń.

Kontynuując wieloletnie, osobiste zainteresowania tematem metod numerycznych – szczególnie całkowania numerycznego (praca przejściowa poświęcona kwadratom Newtona-Cotesa, inżynierska – kwadratom Gaussa, magisterska wykorzystywała zebraną wcześniej wiedzę do fourierowskiej analizy sygnałów),

autor niniejszej rozprawy postanowił poświęcić czas swoich studiów doktoranckich, swoje siły, wiedzę oraz zdolności programistyczne idei zwiększenia dokładności obliczeń pochodnych i całek rzeczywistych rzędów i ich praktycznym zastosowaniom.



Rys. 1: Potencjalne dziedziny zastosowań pochodnych i całek ułamkowych rzędów.

Ważnymi częściami składowymi opracowywania każdego algorytmu komputerowego jest weryfikacja poprawności oraz dokładności jego działania. W obu przypadkach konieczna jest znajomość wartości dokładnej obliczanej wielkości. W przypadku numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów obie części są utrudnione, a często wręcz niemożliwe do przeprowadzenia ze względu na fakt, że analityczne wzory na wartości dokładne dostępne są jedynie dla kilku typów funkcji: funkcji potęgowych, wykładniczych, trygonometrycznych, hiperbolicznych i skoku jednostkowego.

Rezultaty niniejszej rozprawy prezentowane są w kategorii dokładności, której przyjętą miarą jest błąd względny lub błąd względny wyrażony w %. Podstawą jego obliczenia jest znajomość wartości dokładnej. Stąd kolejnym ważnym celem niniejszej rozprawy doktorskiej kompleksowe rozwiązanie problemu szacowania dokładności numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów, t.j. opracowanie uniwersalnego kryterium szacowania dokładności numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów dowolnej funkcji.

Jedną z ważnych dziedzin, w których stosowany jest rachunek ułamkowych rzędów są rozwiązania równań różniczkowych ułamkowych rzędów. Niestety w przypadku wielu z nich, znalezienie rozwiązania jest bardzo trudne. Dlatego poszukiwanie nowych numerycznych algorytmów gwarantujących znajdowanie stabilnych oraz dokładnych rozwiązań równań różniczkowych ułamkowych rzędów jest ważnym celem wielu prowadzonych obecnie badań naukowych.

W tym celu mogą być również użyte algorytmy stosowane w tradycyjnej analizie numerycznej jednak – w większości przypadków – muszą być one dostosowane do nowych wymogów. Tak jest w przypadku transformaty Laplace'a stosowanej od dawna do uzyskiwania rozwiązań klasycznych, liniowych, stacjonarnych równań różniczkowych rzędów całkowitych. Ważną częścią uzyskiwania tych rozwiązań jest odwrotna transformata Laplace'a. W przypadkach, kiedy formuła odwrotnej transformaty Laplace'a rozwiązania nie istnieje, lub jest trudna do uzyskania, stosowana jest metoda aproksymacyjna z wykorzystaniem metod numerycznych.

W tym kontekście kolejnym celem badań prowadzonych na potrzeby realizacji tej niniejszej rozprawy doktorskiej stała się ocena dokładności numerycznej aproksymacji odwrotnej transformaty Laplace'a m.in. na przykładzie rozwiązań liniowych równań różniczkowych ułamkowych rzędów.

Numeryczne obliczanie pochodnych i całek ułamkowych rzędów wraz z ich zastosowaniami rozważanymi w niniejszej rozprawie wymagało umiejętnego połączenia kilku dziedzin informatyki i matematyki, m.in. algorytmiki, metod numerycznych, programowania oraz dużej wiedzy teoretycznej i praktycznej na temat całkowania numerycznego.

Stopień trudności problemów przewidzianych do rozwiązania związanych z tezami postawionym w rozprawie wymagał nie tylko zaprojektowania nowych algorytmów i wybrania oraz dostosowania istniejących metod numerycznych. Wymagał także zastosowania nowoczesnej technologii programistycznej nazwanej *infinite precision computing*, która umożliwia używanie dowolnej precyzji w obliczeniach komputerowych.

Zastosowanie dowolnej precyzji, ograniczonej jedynie sprzętem umożliwia nie tylko zwiększenie dokładności numerycznych obliczeń oraz pełne wykorzystanie opracowanych algorytmów, ale także wyeliminowanie m.in. błędów spowodowanych niewłaściwym zaokrągleniem operacji matematycznych cechujących wykorzystanie arytmetyki komputerowej opartej na podwójnej precyzji.

Ważność tego problemu pokazał Toshio Fukushima w czasopiśmie *The Astronomical Journal* w 2001 roku następującym przykładem: „W czasach komputerów o dużej mocy obliczeniowej, błędy związane z całkowaniem numerycznym są głównym ograniczeniem badań naukowych dotyczących złożonych układów

dynamicznych, takich jak długoterminowa stabilność naszego układu gwiazdowego i wielu pozasłonecznych planet[...]" i prezentuje dowód, że użycie podwójnej precyzji w obliczeniach numerycznych prowadzi do kumulacji błędu zaokrąglenia rzędu 1 radiana na układ słoneczny.

### Tezy Rozprawy

1. W celu zwiększenia dokładności numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów należy: (i) zastosować podstawienie zmiennej niezależnej w funkcji podcałkowej lub (ii) dostosować funkcję wagową w kwadraturze Gaussa-Jacobiego.
2. W celu oszacowania dokładności numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów dowolnej funkcji należy zastosować reguły składania uogólnionych operatorów różniczkowania i całkowania ułamkowych rzędów.
3. Zastosowanie algorytmu Talbota lub De Hooga numerycznej aproksymacji odwrotnej transformaty Laplace'a prowadzi do uzyskania rozwiązań równań różniczkowych liniowych ułamkowych rzędów z wysoką dokładnością.

Tezy postawione w rozprawie zostały udowodnione. Poniżej zaprezentowany jest obszerny skrót najważniejszych rezultatów oraz wnioski końcowe.

### Teza 1

Jak już wspomniano wcześniej, istnieje wiele definicji oraz wzorów, które mogą być użyte do obliczania pochodnych i całek ułamkowych rzędów. Metody zwiększenia dokładności numerycznych obliczeń zaprezentowane w niniejszej rozprawie dotyczą wyłącznie wykorzystania wzorów na (i) całkę ułamkowych rzędów Riemanna-Liouville'a, (ii) pochodną ułamkowych rzędów Caputo i jej równoważną postać Riemanna-Liouville'a oraz (iii) pochodno-całkę Grünwalda-Letnikova.

W przypadku (i) oraz (ii) do obliczania całek jak i pochodnych ułamkowych rzędów wykorzystywane jest klasyczne całkowanie numeryczne znane z klasycznej analizy numerycznej rzędów całkowitych.

W przypadku (iii) do aproksymacji pochodnych i całek ułamkowych rzędów wykorzystywane są różnice skończone w postaci wzorów na różnice i sumy wsteczne rzędów ułamkowych.

Zagadnienie niskiej dokładności obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów uzyskiwanych z zastosowaniem wzorów Riemanna-Liouville'a i Caputo można zawęzić do problemu związanego z całkowaniem rdzenia wyrażenia podcałkowego w tych wzorach. Charakterystyka funkcji, której pochodną lub całkę ułamkowych rzędów obliczamy odgrywa w tym kontekście drugorzędną rolę. Obecność nieregularności w rdzeniu wyrażenia podcałkowego w wymienionych wzorach na końcu zakresu całkowania oraz jego szybko-zmienność w końcowej części powodują, że to właśnie rdzeń stanowi najtrudniejszą do całkowania część wyrażenia podcałkowego.

Wykorzystanie dostępnych algorytmów i technik całkowania numerycznego znanych z tradycyjnej analizy numerycznej ani też poprzez zastosowanie jednej z nielicznych metod opracowanych na ich podstawie i dedykowanych obliczeniom pochodnych i całek ułamkowych rzędów nie umożliwia generalnie zwiększenia dokładności obliczeń do satysfakcjonującego poziomu. Dokładność jest niska, w zależności od użytej metody, obliczanego rzędu oraz funkcji - błąd względny obliczony w stosunku do wartości dokładnych może wynieść od 1% do 200-300%. Zostało to wykazane w *stanie wiedzy* – w przeglądzie wybranych metod numerycznych i ich możliwości w kontekście dokładności obliczeń.

Dla przykładu - użycie najdokładniejszej z tych metod - zmodyfikowanej przez prof. Diethelma metoda trapezów umożliwia obliczanie pochodnych i całek ułamkowych rzędów z dokładnością maksymalnie do kilku miejsc po przecinku - jedynie dla wąskiego zakresu rzędów z okolic rzędu 0.5 oraz prostych funkcji. Pozostałe rzędy są niemożliwe do obliczenia ze względu na wartości błędów ok. 60 – 90%. Pochodne rzędów bliskich zeru i całek bliskich jedności obarczone są wieluset procentowym błędem względnym.

Zastosowanie różnic/sum wstecznych Grünwalda-Letnikova – metody opartej o definicję pochodnych i całek ułamkowych rzędów jako sumy, również nie umożliwia zwiększenia dokładności do satysfakcjonującego poziomu: dokładność ta ograniczona jest do kilku miejsc po przecinku, jest silnie zależna od ułamkowego rzędu oraz typu funkcji, a także pewnych współczynników. Ilość tych współczynników obliczonych i wymnożonych przez wartości funkcji determinują generalną dokładność obliczeń. Dla przykładu: zastosowanie 600 współczynników do obliczenia pochodnej lub całki rzędu 0.5 prostej funkcji (np. skoku jednostkowego) gwarantuje obliczenia z dokładnością 4 miejsc po przecinku; zwiększenie tej dokładności do 8 miejsc po przecinku wymaga zastosowania kilkudziesięciu milionów współczynników. Bardziej skomplikowane funkcje oraz niższe rzędy pochodnych i całek wymagają ponad 2 miliardy współczynników.

Mimo, że problematyka ta nie została zdefiniowana jako teza, w trakcie prac nad udowodnieniem tezy 1 podjęto również badania nad zwiększeniem efektywności metody Grünwalda-Letnikova, tzn. zredukowaniem ilości współczynników koniecznych do uzyskania pochodnych i całek ułamkowych rzędów z określo-

ną dokładnością.

Całka oznaczona jest wyrażona jako pole powierzchni pod wykresem funkcji i jest ograniczona pewnym zakresem oraz osią X. Całkowanie numeryczne to umożliwia przybliżone obliczanie całki oznaczonej poprzez zastosowanie różnych metod numerycznych.

Najpopularniejszą numeryczną metodą obliczania całki oznaczonej jest kwadratura. Polega ona na dopasowywaniu figur geometrycznych w pole powierzchni pod wykresem funkcji. Suma powierzchni wpasowanych figur jest następnie sumowana i stanowi wartość całki. Największym wyzwaniem jest odpowiednie dobranie figur tak, by ich pola powierzchni wpasowały się całkowicie w pole powierzchni funkcji, a ich nadmiar zniósł się całkowicie z niedomiarem.

Przykładami kwadratur są m.in.: metoda prostokątów, kwadratury Newtona-Cotesa: metoda trapezów oraz metoda Simpsona oraz kwadratury Gaussa.

Kwadratury te możemy stosować do prawie wszystkich typów funkcji. Natomiast kwadratury Gaussa, w których funkcja podcałkowa jest aproksymowana przez odpowiedni wielomian, znajdują zastosowanie jedynie w przypadku całkowania konkretnych, ściśle wyselekcjonowanych funkcji. Wynika to z ich powiązania z tzw. funkcjami wagowymi. Wyjątek stanowi kwadratura Gaussa-Legendra z funkcją wagową 1.

Formuły trapezów oraz Simpsona są formułami zamkniętymi, tzn. wymagają, aby wartość funkcji  $f(a)$  i  $f(b)$  były określone. Nie mogą być zatem stosowane do całek posiadających nieusuwalne osobliwości na końcach przedziałów. W przypadku takich funkcji podcałkowych można posłużyć się zmodyfikowaną metodą prostokątów wykorzystującą punkty środkowe przedziałów lub odpowiednimi kwadraturami Gaussa.

Kolejną różnicą między kwadraturami Newtona-Cotesa i Gaussa jest sposób dzielenia zakresu całkowania na podprzedziały. W kwadraturach Newtona-Cotesa przedział całkowania jest podzielony na podprzedziały o równej szerokości. W przypadku zmodyfikowanej metody prostokątów do obliczenia wartości funkcji w węzłach kwadratury brany jest środek każdego podprzedziału. Natomiast cechą kwadratur Gaussa jest fakt, że ich węzły nie leżą w środku podprzedziałów, lecz w miejscach, które zdecydowanie większą dokładność obliczonej wartości całki. Węzłami kwadratur Gaussa są miejsca zerowe odpowiednich wielomianów.

Wymienione metody całkowania numerycznego są metodami podstawowymi. Oprócz nich istnieje wiele innych odmian, rozszerzeń metod Gaussa. Najciekawsze z nich to: kwadratury Gaussa-Radau i Gaussa-Lobatto zawierające pewne, z góry narzucone węzły oraz bardzo wydajna metoda opracowana w połowie lat 60-tych przez rosyjskiego informatyka A.S. Kronroda. Jego modyfikacja kwadratury Gaussa-Legendre'a zwana kwadraturą Gaussa-Kronroda wykorzystuje zestawy węzłów, tzw. pary: np. 15-punktowa kwadratura Gaussa-Kronroda zawiera w so-



bie węzły 7-punktowej kwadratury Gaussa, 8 dodatkowych węzłów oraz zupełnie inne współczynniki kwadratury (wagi).

Waga determinuje szerokość podprzedziałów, na jakie jest podzielony zakres całkowania w kwadraturach Gaussa.

Dysponując tą wiedzą, w celu zwiększenia dokładności numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów opracowano dwie koncepcje: (i) dopasowania funkcji podcałkowej do wymogów całkowania z wysoką dokładnością z wykorzystaniem wybranej metody całkującej oraz (ii) dostosowania numerycznej metody całkującej do możliwości całkowania z wysoką dokładnością funkcji wyposażonej w trudną cechę.

W przypadku (i) wykorzystano technikę podstawienia zmiennej niezależnej w rdzeniu wyrażenia podcałkowego we wzorach Riemanna-Liouville'a i Caputo. Technika ta jest znana z całkowania analitycznego. Polega na przekształceniu funkcji podcałkowej w poszukiwaniu formuły, dla której istnieje wzór na wyrażenie pierwotne.

Celem zastosowania podstawienia zmiennej niezależnej w całkowaniu numerycznym jest uzyskanie kształtu funkcji podcałkowej, który jest optymalny w stosunku do wymagań całkowania z wysoką dokładnością dla wybranej metody numerycznej.

W rozprawie zaproponowano dwa efektywne sposoby dopasowania (przekształcenia) wyrażenia podcałkowego do pożądanego kształtu zgodnego z wymogami wybranej numerycznej metody całkującej. Sposoby te umożliwiły obliczanie całki z wielokrotnie wyższą dokładnością niż zastosowanie danej metody numerycznej do tej samej funkcji podcałkowej nieprzekształconej:

1. Analityczne przekształcenie funkcji podcałkowej przez zastosowanie podstawienia zmiennej niezależnej z użyciem 3 własnych podstawień dostosowujących funkcję podcałkową do całkowania kwadraturami Gaussa Legendre'a, Gaussa-Kronroda i Gaussa-Laguerra.
2. Przekształcenie funkcji podcałkowej przez zastosowanie podstawienia zmiennej niezależnej w postaci kwadratury numerycznej znanej jako Transformacja Dwukrotnie-wykładnicza łączącej podstawienie z użyciem funkcji hiperbolicznych oraz całkowanie metodą trapezów.

Zastosowanie analitycznego przekształcenia funkcji podcałkowej do pożądanego kształtu w kontekście zastosowanej numerycznej metody całkującej (kwadratur Gaussa) jest bardzo efektywne i umożliwia maksymalnie czterokrotne zwiększenie dokładności przy jednoczesnej dziesięciokrotnej redukcji ilości miejsc próbkowania w porównaniu z dokładnością obliczeń uzyskanych z zastosowaniem tej

samej metody numerycznej bez podstawienia w funkcji podcałkowej. Metoda ta jest jednak żmudna, bowiem wymaga ręcznego przekształcenia każdej funkcji podcałkowej przed zastosowaniem wybranej kwadratury Gaussa.

Poniżej przedstawiono podstawienia, które zastosowano w celu przekształcenia wzorów na pochodne i całki Riemanna-Liouville'a i Caputo dla przykładowych funkcji w celu dostosowania ich kształtu do wymogów całkowania z wykorzystaniem wybranych kwadratur Gaussa:

Gaussa-Legendre'a i Gaussa-Kronroda (1-2) oraz Gaussa-Laguerra (3):

1.  $1 - \tau = e^{1-1/u}$ .
2.  $\tau = 1 - e^{1-1/u}$ ,  $t - \tau = e^{1-1/u}$ .
3.  $1 - \tau = 1/t^\alpha$   $\alpha = 1, 2, 3, \dots$ ,  $t - 1 = u$ .

Przekształcenie funkcji podcałkowej z użyciem podstawienia zmiennej niezależnej w postaci numerycznej kwadratury, wykorzystującej Transformację Dwukrotnie-wykładniczą eliminuje żmudne analityczne podstawienie w funkcji podcałkowej i automatyzuje je oraz całkowanie.

Kwadratura numeryczna automatyzująca proces podstawienia jest bardzo wydajna i dokładna pod warunkiem znalezienia i zastosowania do podstawienia wyrażenia, które spełnia wymogi optymalności dla wybranej metody całkującej.

Idea podstawienia zmiennej w postaci kwadratury Dwukrotnie-wykładniczej (the Double Exponential Quadrature) zastosowana w niniejszej rozprawie jest znana od dawna, jednak nie była używana do tego typu obliczeń, tj. obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów rzędów. Powodem był stopień trudności funkcji podcałkowej oraz ograniczenia podwójnej precyzji w programowaniu.

Przekształcenie funkcji podcałkowej w wykorzystaniem funkcji hiperbolicznych

$$x = \phi(t) = \operatorname{tgh}\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right), \quad \phi'(t) = \frac{\frac{\pi}{2} \cosh t}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right)}$$

zmienia jej kształt na wklęsło-wypukły. Matematycznie udowodniono, że do całkowania funkcji podcałkowej o takim kształcie najlepsze rezultaty daje metoda trapezów. Dlatego połączenie tych dwóch metod, pod nazwą Transformacja Dwukrotnie-wykładnicza umożliwia nawet pięćdziesięciokrotne zwiększenie dokładności numerycznych obliczeń całek rzędów ułamkowych  $\langle 0, 2; 1 \rangle$  oraz pochodnych rzędów ułamkowych  $\langle 0; 0, 8 \rangle$  w stosunku do dokładności obliczeń uzyskanych z zastosowaniem metody trapezów bez wstępnego przekształcenia funkcji podcałkowej (błąd względny obliczony w stosunku do wartości dokładnej wyniósł maksymalnie  $10^{-50}$ ). Dokładność ta zależna jest jednak od ułamkowego rzędu oraz typu funkcji podcałkowej.

Uzyskanie tak dużego przyrostu dokładności było efektem zwiększenia precyzji obliczeń do 1500, a w przypadkach niektórych rzędów do 5000 cyfr ze względu na występowanie bardzo małych wartości w trakcie obliczenia całek przekształconych funkcji podcałkowych, które nie mieściły się w zakresie podwójnej precyzji powodując niedomiar. Dodatkowo, ze względu na użycie metody trapezów, koniecznym było zastosowanie dodatkowego podstawienia w punkcie nieregularności w przypadku użycia podwójnej precyzji lub zwiększonej precyzji ze względu na występowanie w tym punkcie nadmiaru.

Brak satysfakcjonujących wyników całkowania dla pozostałych, od wymienionych rzędów, związany jest ze zwiększającą się wartością potęgą w rdzeniu wzorów Riemanna-Liouville'a i Caputo oraz właściwościami funkcji użytych do podstawienia.

W przypadku (ii) poszukiwana była kwadratura, którą można zastosować do całkowania funkcji wyposażonych w nieregularności na końcu przedziału całkowania. Jedną z kwadratur o takich możliwościach jest kwadratura Gaussa-Jacobiego. Może być ona użyta jednak jedynie do całkowania funkcji posiadających nieregularności na obu końcach przedziału domkniętego  $\langle -1, 1 \rangle$ . By móc użyć ją do obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów z użyciem wzorów Riemanna-Liouville'a i Caputo konieczne było dostosowanie funkcji wagowej  $p(x) = (1-x)^\lambda (1+x)^\beta$  w tej kwadraturze do całkowania funkcji podcałkowej z nieregularnością tylko na jednym końcu zakresu całkowania. Należało także dokonać konwersji dowolnego zakresu całkowania  $\langle a, b \rangle$  do zakresu obsługiwanego przez kwadraturę.

Standardowy sposób użycia kwadratur Gaussa ogranicza się do zastosowania stabelaryzowanych, ogólnie-dostępnych wartości wag i węzłów. W przypadku użycia funkcji wagowej o dowolnych wartościach  $\lambda$  i  $\beta$  koniecznym jest obliczanie wag i węzłów w programie całkującym. Wymusza to obliczanie za każdym razem wielomianu Jacobiego  $J_n^{(\lambda, \beta)}(x)$ , jego miejsc zerowych, które stanowią węzły kwadratury, pochodnej tego wielomianu  $J_n^{(\lambda, \beta)'}(x)$  oraz innych wartości koniecznych do obliczenia wag.

Efektom zastosowania tak dostosowanej kwadratury Gaussa-Jacobiego umożliwiło wyeliminowanie z całkowania numerycznego trudnego, z punktu widzenia dokładności całkowania, rdzenia wyrażenia podcałkowego we wzorach Riemanna-Liouville'a i Caputo i obliczanie jego wartości z wykorzystaniem wzoru na funkcję wagową. Takie podejście pozwoliło wielokrotne zwiększenie dokładności z wykorzystaniem podwójnej precyzji w obliczeniach. Zwiększenie precyzji do 100 miejsc po przecinku (ok. 300 bitów na mantysę w liczbie zmiennoprzecinkowej) umożliwiło na maksymalnie stukrotne zwiększenie dokładności numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów (błąd względny

obliczony w stosunku do wartości dokładnej wyniósł maksymalnie  $10^{-120}$ ), niezależnie od obliczanego rzędu ułamkowego, zakresu całkowania oraz typu funkcji podcałkowej, przy drastycznym zmniejszeniu miejsc próbkowania do średnio 8-16, a maksymalnie do 32. Warto podkreślić, że dokładność pochodnych i całek rzędów bliskich zeru i jedności, np. 0.0000001... czy 0.9999999999... z użyciem opracowanej metody, które są niemożliwe do obliczenia jakąkolwiek inną metodą, jest podobnie wysoka, co rzędów 0.5. Rząd ten jest najprostszy do obliczenia.

Jednakże konieczność obliczania komponentów kwadratury: węzłów i wag, konwersji zakresu całkowania wydatnie zwiększa stopień trudności zastosowania kwadratury. Dodatkowo, potrzeba maksymalizacji dokładności działania użytego algorytmu obliczania wielomianu, jego miejsc zerowych oraz pochodnej, a także samego algorytmu całkowania wymusiła zastosowanie zwiększonej precyzji w obliczeniach.

Złożoność obliczeniowa komputerowego obliczania węzłów i wag w kwadraturze Gaussa kształtuje się na poziomie  $n^2$ , gdzie  $n$  jest stopniem wielomianu użytego w całkowaniu. Zastosowanie w programie szybkiego algorytmu naukowców N. Hale i A. Townsend umożliwiło zredukowanie tej wartości do  $n$ .

Użycie zwiększonej precyzji w obliczeniach poprzez zastosowanie biblioteki GNU MPFR wiąże się ze zwiększeniem złożoności obliczeniowej, pamięciowej oraz czasowej. Ciekawym kompromisem między dokładnością obliczeń, a ich złożonością czasową jest zastosowanie tzw. *wrappera* MPFR C++, który umożliwia użycie standardowej składni C++ w programowaniu wraz ze zmiennymi dowolnej precyzji. Zastosowanie tego rozwiązania pozwoliło na znaczącą redukcję złożoności czasowej, tzn. zastosowanie zmiennych o precyzji maksymalnie do 100 miejsc po przecinku nie zwiększyło w mierzalny sposób złożoności czasowej w stosunku do złożoności z użyciem standardowej podwójnej precyzji nawet na komputerze pc wyprodukowanym w 2008 roku.

Dotyczy to wszystkich obliczeń komputerowych, których rezultaty prezentowane są w niniejszej rozprawie.

Badania nad zwiększeniem dokładności numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów prowadzone w celu udowodnienia tez zawartych w niniejszej rozprawie objęły dodatkowo metodę Grünwalda-Letnikova, która wykorzystuje różnice/sumy wsteczne do ich aproksymacji.

Algorytm tej metody składa się z odpowiedniego sposobu sumowania wartości funkcji oraz specjalnych współczynników, których wartości dążą do 0 wraz z ich indeksami dążącymi do  $\infty$ .

Wartości funkcji, kolejność ich sumowania są kluczem do poprawności obliczeń. Z tego też powodu funkcja nie może być w żaden sposób przekształcona, tzn. jej kształt nie może być zmieniony.

Sposób rozwiązania problemu dokładności numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów z wykorzystaniem wzoru Grünwalda-Letnikova wymagał zupełnie innego podejścia niż to miało miejsce w przypadku wzorów Riemanna-Liouville'a i Caputo, a mianowicie wymagało zastosowania:

1. Innego (równoważnego) sposobu sumowania.
2. Odmiennej metody dyskretyzacji.
3. Dyskretyzacji z większą ilością niż jeden punkt na krok sumowania.

W przypadku (1) zastosowanie innego sposobu sumowania w postaci schematu Hornera umożliwiło na dodanie kilku ważnych możliwości metodzie Grünwalda-Letnikova z punktu widzenia obliczeń komputerowych, takich jak: naturalny sposób czytania danych oraz zwiększenie dokładności obliczeń przy zmniejszonej ilości współczynników (zwiększenie efektywności przy jednoczesnym zmniejszeniu złożoności obliczeniowej).

Zastosowanie schematu Hornera wiązało się z użyciem współczynników o innych właściwościach w sumowaniu. Wykorzystując właściwość dążenie ich wartości do jedności przy indeksach dążących do  $\infty$ , można było założyć, że od pewnego indeksu ich wartość można było zastąpić wartością 1. Umożliwiło to zastąpienie obliczania współczynników i mnożenia ich przez wartości funkcji - jedynie sumowaniem wartości funkcji. Efektem była możliwość pominięcia minimalnie 5% a maksymalnie 30 % współczynników w zależności od typu funkcji bez obniżania dokładności więcej niż 0,1% ponad założony poziom.

W przypadku (2) zwiększenie dokładności osiągnięto poprzez zastosowanie próbkowania funkcji w środku lub na końcu przedziału zamiast na początku, które jest zastosowane w klasycznym wzorze Grünwalda-Letnikova.

Zastosowanie takiego schematu dyskretyzacji jest bardzo efektywne, bo umożliwia nawet czterokrotne zwiększenie dokładności obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów przy zastosowaniu tej samej ilości współczynników. Wiąże się z minimalną zmianą kodu dotyczącą próbkowania funkcji

W przypadku (3) zastosowano próbkowanie z dwoma lub trzema punktami, zamiast jednego na jeden krok sumowania. Metody te są odpowiednikami: metody prostokątów z punktem centralnym oraz metody Simpsona.

Zastosowanie wymienionych modyfikacji umożliwiło na wielokrotne zwiększenie dokładności obliczeń w przypadku testowanych funkcji w stosunku do dokładności z zastosowaniem klasycznego wzoru Grünwalda-Letnikova. Jednakże poziom zwiększenia dokładności zależał od charakterystyki funkcji, co jest związane z algorytmem sumowania oraz właściwościami stosowanych współczynników.

Przykładowo, w przypadku funkcji okresowej o wysokiej częstotliwości, której obwiednia jest stała lub rosnąca, wykorzystując klasyczny wzór Grünwalda-Letnikova, by uzyskać pochodne i całki ułamkowych rzędów obarczone błędem względnym mniejszym niż  $10^{-8}$  obliczonym w stosunku do wartości dokładnej, wymagane jest obliczenie i wymnożenie ponad 2,5 miliarda współczynników.

Zastosowanie zaproponowanych metod (2) i (3) redukuje tę ilość do wielkości 100 tysięcy w tym samym przypadku.

## Teza 2

Szacowanie dokładności oraz efektywności są ważną częścią procesu opracowywania algorytmu, bowiem umożliwiają ocenę poprawności jego działania oraz jego dokładność.

Do szacowania dokładności zwykle używa się wartości przyjętej za dokładną, w stosunku do której oblicza się wartość błędu: bezwzględnego, względnego lub względnego wyrażonego w %.

W przypadku obliczeń numerycznych pochodnych i całek ułamkowych rzędów szacowanie dokładności jest w większości przypadków niemożliwe ze względu na fakt, że wzory na wartości dokładne dostępne są jedynie dla wybranych funkcji: potęgowych, wykładniczych, trygonometrycznych, hiperbolicznych i skoku jednostkowego.

Jednym z celów niniejszej rozprawy było kompleksowe rozwiązanie tego problemu, tzn. opracowanie takiego kryterium szacowania dokładności numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów, który umożliwiłby określanie jej dla dowolnej funkcji.

Określenie takiego kryterium objęło zastosowanie:

1. Zasad składania uogólnionych operatorów różniczkowania i całkowania ułamkowych rzędów.
2. Różniczkowanie i całkowanie ułamkowych rzędów funkcji Mittag-Lefflera.

Składanie operatorów różniczkowania lub całkowania ułamkowych rzędów polega na obliczeniu całki lub pochodnej ułamkowego rzędu i wprowadzeniu obliczonej wartości jako funkcji do kolejnego całkowania lub różniczkowania ułamkowego rzędu. By móc wykorzystać składanie operatorów w celu szacowania dokładności, należy wielokrotnie powtórzyć operację złożenia - tak, by suma złożonych rzędów wyniosła 1 (by móc przyrównać uzyskaną wartość do wartości klasycznej całki 1 rzędu lub pierwszej pochodnej) lub 0 (złożenie rzędów całkowania i różniczkowania (lub odwrotnie), by móc przyrównać uzyskaną wartość do wartości funkcji).

Użycie składania operatorów w celu szacowania dokładności wymagało opracowania dwóch algorytmów numerycznego składania operatorów: innego dla kwadratur z równoodległymi węzłami i innego dla kwadratur Gaussa.

W przypadku węzłów równoodległych, złożenie operatorów polegało na obliczeniu całki/pochodnej danego rzędu ułamkowego we wcześniej obliczonych węzłach w zakresie całkowania zakresu. Była to tzw. całka wewnętrzna. Następnie wartości całki wewnętrznej w tych samych węzłach wprowadzane były jako wartości funkcji do następnego całkowania z wybranym rzędem. Była to tzw. całka zewnętrzna. Takie złożenie było powtarzane do momentu gdy suma rzędów wyniosła 1 lub 0, w zależności od ustalonego kryterium zakończenia.

W przypadku użycia kwadratur Gaussa algorytm był inny: najpierw obliczane były węzły w celu obliczenia całki zewnętrznej, a następnie w tych węzłach obliczane były wartości całki/pochodnej wewnętrznej danego rzędu. Obliczone wartości wprowadzane były jako wartości funkcji w celu obliczenia całki zewnętrznej. Kryterium zakończenia było takie samo, jak w przypadku złożenia dla kwadratur z równoodległymi węzłami całkowania.

Określenie przydatności składania operatorów jako kryterium szacowania dokładności numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów wymagało zastosowania różnych podejść w celu oceny wpływu ilości złożenia operatorów zastosowanych w celu uzyskania rzędu 1 lub 0 na efektywność tego kryterium:

1. Minimalnej ilości złożań.
2. Maksymalnej ilości złożań.
3. Złożenia rzędów o takich samych wartościach.
4. Złożenia rzędów o różnych wartościach.
5. Zastosowanie jedynie złożań operatorów całkowania.
6. Zastosowanie jedynie złożań operatorów różniczkowania.
7. Zastosowanie złożań najpierw operatorów całkowania a potem różniczkowania.
8. Zastosowanie złożań najpierw operatorów różniczkowania a potem całkowania.

(1-2) Umożliwiło określenie jak rozkłada się błąd na kolejne złożenia operatorów oraz ile złożań jest możliwe w przypadku danej metody całkującej, zanim skumulowany błąd nie zwiększy się ponad wyznaczone maksimum.

(3-4) Umożliwiło określenie czy i jakim stopniu wartości rzędów w kolejnych złożeniach wpływają na efektywność kryterium w przypadku każdej przetestowanej metody całkującej.

Warunki poprawnego składania operatorów różniczkowania i całkowania obwarowane są przez surowe zasady. Ta część testu umożliwiła sprawdzenie ich dla:

(5-6) składania rzędów - oddzielnie dla całkowania i, oddzielnie - dla różniczkowania.

(7-8) składania rzędów mieszanych - różniczkowania i całkowania w różnych kombinacjach.

Całkowanie i różniczkowanie funkcji wykładniczych z wykorzystaniem funkcji Mittag-Lefflera umożliwiło porównanie dokładności całkowania w przypadku, kiedy funkcja jest podana wzorem lub funkcji dyskretnej z funkcją obliczoną z rozwinięcia w szereg. Umożliwiło także wprowadzenie jako funkcji rozwiniętej w szereg pochodnej lub całki dowolnego ułamkowego rzędu funkcji wykładniczej.

Przeprowadzone badania oraz otrzymane wyniki pozwoliły na wyciągnięcie wniosku, że numeryczne składanie operatorów różniczkowania i całkowania ułamkowych rzędów może być praktycznie i efektywnie użyte do oszacowania dokładności obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów dowolnej funkcji. Jednakże, jak precyzyjnie może być oszacowana ta dokładność, zależy od tego jak użyta numeryczna metoda całkująca reaguje na zmniejszającą się ilość informacji o funkcji w zakresie całkowania. Taka utrata informacji spowodowana jest przejściem od funkcji ciągłej podanej wzorem do funkcji dyskretnej, której wartości znane są tylko w wybranych punktach.

Funkcja ciągła (podana wzorem) występuje jedynie w pierwszym kroku złożenia operatorów, tzn. podczas pierwszego całkowania lub różniczkowania z rzędem ułamkowym. W momencie pierwszego złożenia operatorów, funkcja podcałkowa dostępna jest jedynie w predefiniowanych punktach. Powoduje to utratę informacji o niej, co wpływa na zmniejszenie efektywności numerycznych metod użytych do całkowania, szczególnie kwadratur Gaussa.

Efektywność składania operatorów jako narzędzia do szacowania dokładności z wykorzystaniem funkcji Mittag-Lefflera jest taka sama, jak w przypadku, kiedy funkcja jest podana wzorem: po jednokrotnym złożeniu operatorów efektywność zmniejsza się w zależności od zastosowanej metody całkującej.

Kolejność, w jakiej rzędy ułamkowe są składane (ich wartości) wpływają na efektywność metody szacowania dokładności jedynie w przypadku, kiedy kształt funkcji podcałkowej ma wpływ na dokładność całkowania z wykorzystaniem danej metody numerycznej: w przypadku zastosowania kwadratury Gaussa-Jacobiego - nie ma wpływu, a w przypadku kwadratury Dwukrotnie-wykładniczej - ma



ogromny wpływ, bowiem wykorzystujemy do całkowania metodę trapezów.

Numeryczne obliczanie pochodnych i całek ułamkowych rzędów z wysoką dokładnością to trudne zadanie, które wymaga zastosowania wyspecjalizowanych narzędzi jak choćby kwadratur Gaussa. Kwadratury te są skomplikowane w konstrukcji i w użyciu. Jednak, w przypadku trafnego wyboru kwadratury w kontekście funkcji podcałkowej, gwarantują wynik o wysokiej dokładności z pomocą kilku-kilkunastu zaledwie punktów próbkowania funkcji. Dodatkowym warunkiem koniecznym uzyskania obliczeń o wysokiej dokładności jest dostępność informacji o całkowanej funkcji w całym zakresie całkowania, tzn. dostępność funkcji w postaci ciągłej (funkcja podana wzorem). Jeśli funkcja dostępna jest jedynie w wybranych punktach (funkcja dyskretna), możliwości kwadratur Gaussa w kontekście dokładności zmniejszają się drastycznie, tzn. szacowanie dokładności z wykorzystaniem składania operatorów ułamkowych rzędów jest możliwe jedynie do poziomu 6-7 miejsc dziesiętnych, z wykorzystaniem maksymalnie 1-krotnego złożenia operatorów.

Kwadratury zbudowane w oparciu o podstawienie zmiennej niezależnej o mniejszym stopniu skomplikowania budowy i użycia, jak choćby kwadratura Dwukrotnie-wykładnicza znacznie lepiej *tolerują* utratę informacji o funkcji przy przejściu do całkowania funkcji dyskretniej. W ich przypadku szacowanie dokładności z użyciem składania operatorów ułamkowych rzędów jest bardzo dokładne. tzn. dokładność możliwa do uzyskania przez daną metodę może być w całości oszacowana z użyciem maksymalnie 3-krotnego złożenia operatorów.

Podobnie dobry efekt może zostać osiągnięty przy szacowaniu dokładności algorytmicznie prostych metod jak np. metoda Grünwalda-Letnikova. W przypadku tej metody dokładność może być w całości oszacowana z użyciem nawet 4- i więcej-krotnego złożenia operatorów ułamkowych rzędów.

Zasadniczą zaletą opracowanej metody szacowania dokładności numerycznych obliczeń w oparciu o składanie operatorów różniczkowania i całkowania ułamkowych rzędów jest to, że dokładność może być oszacowana z minimalną precyzją do 6-7 miejsc po przecinku dla dowolnej funkcji, a nie tylko dla funkcji, dla których dostępne są wzory na wartości dokładne.

### Teza 3

Transformata Laplace'a jest efektywnym narzędziem stosowanym od dawna do znajdowania rozwiązań klasycznych liniowych równań różniczkowych. Dzięki wykorzystaniu kilku jej właściwości można ją stosować również do znajdowania rozwiązań liniowych równań różniczkowych ułamkowych rzędów.

Ważną częścią znajdowania rozwiązań jest odwrotna transformata Laplace'a. Klasyczne podejście do tego problemu to znalezienie oryginału transformaty z wykorzystaniem tabel z przypadkami szczególnymi transformaty Laplace'a (tzw. parami Laplace'a: transformata-oryginał) lub zastosowanie teorii zmiennych zespolonych. W przypadku występowania biegunów, zwykle stosuje się podejście wykorzystujące do całkowania kontur Bromwicha.

W przypadkach, kiedy oryginał transformaty Laplace'a nie istnieje, lub jest trudny do znalezienia lub obliczenia, stosowana jest komputerowa metoda aproksymacyjna z wykorzystaniem metod numerycznych.

Teza 3 niniejszej rozprawy doktorskiej dotyczy dokładności numerycznej aproksymacji odwrotnej Transformaty Laplace'a, w kontekście:

1. Możliwości zastosowania w rachunku ułamkowych rzędów.
2. Uzyskiwania rozwiązań równań różniczkowych liniowych ułamkowych rzędów.

W tym celu wyselekcjonowano i zaimplementowano w języku C++ i Python 7 algorytmów numerycznej aproksymacji odwrotnej Transformaty Laplace'a reprezentujących najważniejsze podejścia do tego problemu i przetestowano je pod kątem dokładności oraz uniwersalności z użyciem 3 zestawów problemów do odwrócenia zawierających następujące zagadnienia:

- Trudne w kontekście obliczeń komputerowych funkcje okresowe oraz funkcje wyposażone w potęgi w postaci ułamków naturalnych.
- Stosowane w rachunku ułamkowych rzędów, np. jedno- i dwu-parametrowa funkcja Mittag-Lefflera i skok jednostkowy.
- Rozwiązania ważnych równań różniczkowych liniowych ułamkowych rzędów, np. niejednorodne równanie Bagley-Torvika, niejednorodne równanie liniowe, liniowy IVP, ułamkowe równanie oscylacyjne i inne.

Rezultaty pomiarów dla każdego problemu i każdej metody zaprezentowano w postaci graficznego porównania wykresów rozwiązania aproksymowanego z wykresem rozwiązania dokładnego oraz wykresu błędu względnego obliczonego w stosunku do rozwiązania dokładnego w danym zakresie dla zmiennej  $t$ .

Numeryczna aproksymacja odwrotnej Transformaty Laplace'a jest źle postawionym problemem odwrotnym związanym z występowaniem we wzorze mnożenia przez funkcję wykładniczą czasu.

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{st} F(s) ds,$$

gdzie  $s$  jest zmienną zespoloną, a  $t$  zmienną rzeczywistą.

W tym problemie błędy algorytmiczne oraz błędy wywołane przez użycie ograniczonej precyzji w obliczeniach mogą prowadzić do wykładniczej rozbieżności rozwiązań.

W celu przeciwdziałania tym problemom zastosowano dwa podejścia:

1. Zastosowanie wysokiej precyzji w programowaniu z wykorzystaniem bibliotek GNU GMP i GNU MPFR.
2. Użycie wielu algorytmów skutecznych dla określonej grupy problemów.

Zmienne wysokiej precyzji konieczne były do poprawnego zaimplementowania większości numerycznych algorytmów aproksymacji odwrotnej Transformaty Laplace'a ze względu na ograniczone wartości możliwe do zapamiętania przez zmienne podwójnej precyzji  $10^{-308} - 10^{308}$ .  $10^{308} \sim e^{709}$ , co jest zbyt małą wartością nawet dla małych  $t$  (wartość  $t$  wymnożona przez liczbę o dużej dowolnie wybranej wartości w zamian za nieskończoność zapisaną w zmiennej  $s$ ). Dla  $t$  o ujemnych wartościach, może dochodzić nawet do zmiany na niewłaściwy znaku operacji.

Dodatkowo - w przypadku odwracania transformat z nieregularnościami, dochodzi często do występowania nadmiarów.

Do testów wybrano algorytmy reprezentujące większość podejść do problemu inwersji i wykorzystujące:

- Różnice skończone: algorytm Stehest.
- Rozwinięcie w szereg Fouriera: algorytmy Abate and Whitta, De Hooga i FFT.
- Całkowanie po zniekształconym konturze: algorytm Talbota.
- Rozwinięcie funkcji rzeczywistej z wykorzystaniem aproksymacji Padée (dla  $z = st$ ): algorytm Vlach i Singhai'a.
- Wykorzystanie funkcji ważonych: algorytm Zakiana.

Wnioski z badań są następujące:

1. Dokładność rozwiązań równań różniczkowych liniowych ułamkowych rzędów uzyskanych za pomocą numerycznej aproksymacji odwrotnej transformaty Laplace'a zależy od trafności wyboru algorytmu w kontekście konkretnego problemu do odwrócenia.

2. Ten sam problem może być poprawnie odwrócony z wykorzystaniem różnych algorytmów. Z tego też powodu wybór algorytmu powinien zostać dokonany w kontekście konkretnej transformaty.
3. Najdokładniejszym oraz najbardziej uniwersalnym algorytmem jest algorytm Talbota. Algorytm ten wymaga jednak wprowadzenia koordynatów nieregularności w transformacie, co może utrudniać efektywne jego zastosowanie.
4. Algorytm De Hooga, jest - w większości przypadków - równie dokładny, co algorytm Talbota. Nie wymaga wprowadzania koordynatów nieregularności w transformacie. Może być zatem użyty w sytuacjach, kiedy są one trudne do ustalenia.
5. Algorytm autorów Abate and Whitt jest zalecany w sytuacjach, kiedy oryginałami są funkcje okresowe.

Siedem algorytmów do numerycznej aproksymacji odwrotnej transformaty Laplace'a zostało zaprogramowanych jednocześnie z użyciem języków C++ i Python. Oba języki dysponują podobnymi możliwościami, jednak programowanie w języku Python wymaga mniejszej ilości linii kodu.

Ze względu na zwięzłość zastosowanych algorytmów nie stwierdzono ani zwiększonej dokładności ani prędkości wykonywania kodu w języku Python w porównaniu z implementacjami w języku C++.

Zastosowanie zmiennych o wysokiej precyzji oraz odpowiednich bibliotek matematycznych umożliwiło wyeliminowanie większości problemów związanych z implementacją algorytmów, a także spowodowało:

- Przyrost dokładności w porównaniu z programami napisanym z wykorzystaniem podwójnej precyzji.
- Możliwość zapamiętania w zmiennych liczb o większych wartościach, ograniczonych jedynie ilością pamięci operacyjnej.
- Eliminacja typowych błędów oraz ograniczeń związanych z zastosowaniem podwójnej precyzji, mi.in. poprawne zaokrąglenie operacji matematycznych.
- Dostępność w bibliotece GNU MPFR wielu gotowych - trudnych do obliczenia funkcji.

### Dodatki:

Rozległość przeprowadzonych badań na potrzeby udowodnienia tez rozprawy doktorskiej umożliwiła rozwiązanie dodatkowo kilku ważnych problemów:

1. Określenie związku pomiędzy ilością współczynników a dokładnością numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów z wykorzystaniem metody Grünwalda-Letnikova.
2. Minimalizacja wpływu ograniczonej ilości czasu i pamięci na dokładność obliczeń w czasie rzeczywistym za pomocą tzw. *ogona obliczeń* o zmiennej długości oraz alternatywnych metod dyskretyzacji funkcji z wykorzystaniem metody Grünwalda-Letnikova.
3. Zastosowanie Transformacji Dwukrotnie-wykładniczej jako kwadratury numerycznej z odpowiednio dobraną funkcją do podstawienia w zastępstwie kwadratur Gaussa.

Ad (1) Dokładność numerycznych obliczeń pochodnych i całek ułamkowych rzędów z użyciem metody Grünwalda-Letnikova zależy m.in. od ilości współczynników użytych w trakcie obliczeń. Ich ilość konieczna do uzyskania pochodnych i całek ułamkowych rzędów o zadanej dokładności zależy z kolei od charakterystyki funkcji oraz ułamkowego rzędu.

- Jeśli funkcja jest monotonicznie rosnąca konieczne jest użycie mniejszej ilości współczynników do zakończenia obliczeń zadaną dokładnością niż to jest w przypadku funkcji monotonicznie rosnącej.
- Dla funkcji stałej ilość współczynników zależy wyłącznie od rzędu pochodnej lub całki i rośnie wraz z nim.
- Częstotliwość funkcji okresowej wpływa silnie na ilość współczynników. Ich ilość rośnie wraz z częstotliwością. Jeśli dodatkowo obwód funkcji jest rosnący lub stały i jest obliczany niski rząd pochodnej lub całki - ilość współczynników może wzrosnąć do kilku milionów. Jeśli dokładność ma wzrosnąć do 7-8 miejsc po przecinku, koniecznym będzie obliczenie i użycie ponad 2 miliardów współczynników.

Ad (2) Zastosowanie uproszczonych wzorów Grünwalda-Letnikova i jego równoważnej postaci Hornera wraz z *ogonem obliczeń* o zmiennej długości umożliwia minimalizację wpływu tej zależności na dokładność obliczeń w czasie rzeczywistym.

- Badania nad wpływem *ogona obliczeń* o zmiennej długości (eliminacja z obliczeń pewnej ilości współczynników) na dokładność obliczeń pozwala na wyciągnięcie wniosku, że jedynie w przypadku uproszczonej, równoważnej postaci Hornera możliwe jest pominięcie części współczynników bez utraty dokładności, tzn. pomijając w odpowiedni sposób 5 do 30% współczynników koniecznych do uzyskania wyników zadaną dokładnością, dokładność nie zmniejsza się więcej niż 0.1% poniżej przyjętego poziomu.

Zostało to potwierdzone doświadczalnie poprzez porównanie wyników symulacji komputerowej z wynikami uzyskanymi z wykorzystaniem systemu czasu rzeczywistego wyposażonego w DSP.

- Zmiana na próbkowanie z wykorzystaniem punktu centralnego w przedziale wiąże się z nieznacznymi zmianami w algorytmie i kodzie metody Grünwalda-Letnikova i umożliwia wielokrotne zmniejszenie ilości współczynników koniecznych do uzyskania wyników zadaną dokładnością.

W przypadku podanego powyżej przykładu funkcji okresowej o wysokiej częstotliwości, możliwa jest redukcja koniecznych współczynników z 2 miliardów do 100 tysięcy w celu obliczenia pochodnej/całki tego samego ułamkowego rzędu, tej samej funkcji.

Ad (3) Numeryczne obliczanie całek oznaczonych trudnych funkcji wymaga zastosowania wyspecjalizowanych metod, tzn. kwadratur Gaussa. Ich stosowanie jest jednak obwarowane wieloma warunkami. Kwadratury te są także skomplikowane w swojej konstrukcji. Jednym słowem, nie mogą być narzędziem ogólnego użycia.

Transformacja Dwukrotnie-wykładnicza z właściwie, w kontekście całkowanej funkcji oraz problemu, dobranym wyrażeniem do podstawienia zmiennej niezależnej umożliwia numeryczne obliczanie trudnych całek z dokładnością równą, a często wyższą niż z wykorzystaniem odpowiednich kwadratur Gaussa: Gaussa-Laguerra, Gaussa-Hermita, Gaussa-Jacobiego, Gaussa-Legendre'a czy nawet niezwykle wydajnej modyfikacji kwadratury Gaussa-Legendre'a - Gaussa-Kronroda. Możliwe jest to jednak ze zwiększoną ilością miejsc próbkowania ze względu na użycie do całkowania metody trapezów. Ilość ta nie jest jednak większa od standardowej ilości miejsc próbkowania w przypadku tej metody całkowania.

Stopień trudności problemów wybranych do rozwiązania w ramach realizacji tej niniejszej rozprawy doktorskiej spowodował, że programowanie z wykorzystaniem standardowej podwójnej precyzji okazało się niewystarczające. Została

---

ona zastąpiona biblioteką GNU MPFR, która umożliwia definiowanie zmiennych dowolnej precyzji - ograniczonej jedynie możliwościami użytego sprzętu.

Sposób użycia biblioteki GNU MPFR wymusza programowanie świadome ograniczeń arytmetyki komputerowej o podwójnej precyzji: rozbitcie każdej operacji matematycznej na operacje podstawowe, definiowanie zmiennych pośrednich operacji matematycznych oraz wybór jednej z pięciu dostępnych metody zaokrąglenia każdej operacji matematycznej umożliwia zminimalizowanie wpływu na wyniki końcowe wad i ograniczeń zwykle stosowanej arytmetyki o podwójnej precyzji. Dodaje także nowoczesną funkcjonalność istniejącym już językom programowania.

Funkcjonalność ta jest dodatkowo rozszerzona poprzez dostępność w bibliotekach GNU MPFR i `mpmath` funkcji trudnych do obliczenia jak np. funkcja gamma i odwrotna gamma. Dostępność gotowych do użycia trudnych funkcji ułatwia programowanie i zmniejsza wpływ błędów obliczeń pośrednich na wyniki końcowe.

Trzeba być jednak świadomym, że zastosowanie zmiennych z więcej niż 100 cyframi precyzji (300 bitów na mantysę w liczbie zmiennoprzecinkowej) zwiększa znacznie złożoność czasową obliczeń. Zastosowanie biblioteki GNU MPFR zwiększa także wydatnie złożoność obliczeniową i pamięciową, co może utrudniać zastosowanie do obliczeń, w których czas wykonania programu odgrywa kluczową rolę. Jednak - w sytuacjach, gdy koniecznym jest zastosowanie jedynie zmiennych o zwiększonej precyzji, zastosowanie tzw. *wrappera* MPFR C++ umożliwia redukcję złożoności czasowej obliczeń do poziomu złożoności z wykorzystaniem podwójnej precyzji.

Dalsze kierunki badań:

Opracowanie numerycznego algorytmu rozwiązywania równań różniczkowych ułamkowych rzędów wykorzystującego kwadraturę Gauss-Jacobiego. Metody typu *implicit* wykorzystujące punkty kolokacyjne, w których rozwiązanie równania różniczkowego aproksymowane jest wielomianem należą do najefektywniejszych narzędzi tego typu.