ЛИТЕРАТУРА

1. **Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г.** Регуляризующие алгоритмы и априорная информация.— М.: Наука, 1983.
2. **Рид М., Саймон Б.** Методы современной математической физики. В 4-х т.— М.: Мир, 1977.— Т. 1: Функциональный анализ.
3. **Иванов В. К., Васин В. В., Танана В. П.** Теория линейных некорректных задач и ее приложения.— М.: Наука, 1978.
4. **Федотов А. М.** Линейные некорректные задачи со случайными ошибками в данных.— Новосибирск: Наука, 1982.
5. **Воскобойников Ю. Е.** Выбор размерности функциональных приближений экспериментальных данных // Автометрия.— 1985.— № 4.
6. **Бриллинджер Д.** Временные ряды. Обработка данных и теория.— М.: Мир, 1980.

Поступила в редакцию 30 июля 1986 г.

УДК 518 : 517.949.12

Р. Р. НИГМАТУЛЛИН, М. Х. САЛАХОВ

(Казань)

РЕГУЛЯРИЗОВАННЫЙ АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ ДРОБНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Понятие дробной производной (ДП) было введено еще Лейбницем [1]. Значительный вклад в разработку понятия ДП внес русский математик А. В. Летников. Как отмечается в [2], им было обобщено понятие производной и предложены новые оригинальные методы в решении дифференциальных уравнений с полиномиальными коэффициентами. Кроме того, он показал, что многие спецфункции могут быть выражены через элементарные посредством применения к ним оператора ДП.

Особый интерес заслуживает применение оператора ДП в естественных науках и практических исследованиях. Первое практическое применение ДП половинного порядка и ее аналоговая реализация стали активно использоваться в электрохимии [3, 4], что стимулировало появление монографии [5], где систематизирована обширная библиография (в основном математическая) по развитию аппарата дробного исчисления. Отметим также работу [6], где оператор ДП был использован для описания деформации в высокоэластичных полимерах. Совсем недавно вышла монография [7], автор которой, базируясь на идеях Летникова [2], предложил новый метод поиска граничных решений широкого класса уравнений тепломассопереноса.

Цель настоящей работы — разработка устойчивого алгоритма расчета ДП на основе метода статистической регуляризации. Проведены численные эксперименты по вычислению ДП от различных функций.

ДП и ее основные свойства. Нам понадобятся два основных определения оператора ДП, которые, как показано в [5], эквивалентны друг другу.

1. Определение Грюнвальда [8], Летникова [2]

$$D_a^q f \equiv \frac{d^q f}{[d(x-a)]^q} = \lim_{N\to\infty}\left\{\frac{\left[\dfrac{x-a}{N}\right]^{-q}}{\Gamma(-q)}\sum_{j=0}^{N-1}\frac{\Gamma(j-q)}{\Gamma(j+1)} f\left(x-j\left[\frac{x-a}{N}\right]\right)\right\}. \quad (1а)$$

Здесь q — произвольное действительное число; $f=f(x)$ — действительная функция; $\Gamma(x)$ — гамма-функция; пределы изменения x: $a\leqslant x<\infty$.

2. Определение через интеграл Римана — Лиувилля [2]

$$D_a^q f = [\Gamma(-q)]^{-1} \int_a^x (x-y)^{-q-1} f(y)\, dy, \quad q<0, \tag{1б}$$

$$D_a^q f = \frac{d^n}{dx^n}\left[\frac{d^{q-n} f}{[d(x-a)]^{q-n}}\right], \quad q>0, \tag{1в}$$

где n — ближайшее целое, удовлетворяющее для заданного q условию $q-n<0$.

Как следует из определений (1), значение ДП существенно зависит от величины a и по этой причине правильнее было бы назвать эту операцию не взятием производной, а дифинтегрированием, что подчеркивает промежуточное положение этой операции между дифференцированием и интегрированием [5]. Но так как этот термин не является общепризнанным, мы предпочтем понятие ДП, вкладывая в него более широкий смысл. Отметим некоторые свойства ДП, которые будут использоваться в дальнейшем:

а) линейность

$$D_a^q (f_1+f_2) = D_a^q f_1 + D_a^q f_2; \tag{2а}$$

б) ассоциативность (коммутативность)

$$D_a^{q_1} D_a^{q_2} f = D_a^{q_2} D_a^{q_1} f = D_a^{q_1+q_2} f, \tag{2б}$$

если $f \neq 0$, $D_a^{q_1} f$, $D_a^{q_2} f \neq 0$ [5];

в) правило Лейбница

$$D_a^q (f_1 f_2) = \sum_{j=0}^{\infty} \binom{q}{j} D_a^{q-j} f_1 D_a^j f_2. \tag{2в}$$

В формуле (2в) величина $\binom{q}{j}$ — биномиальный коэффициент. Кроме того, отметим значение ДП от степеней функции x^p [2, 5]

$$\frac{d^q (x-a)^p}{[d(x-a)]^q} = \begin{cases} \dfrac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p+1-q)}(x-a)^{p-q}, & p>-1; \\ \infty, & p \leqslant -1. \end{cases} \tag{3}$$

Выражение (3) будет использоваться в качестве тестов при численных расчетах. Из формулы (3) следует, в частности, что

$$\frac{d^q C}{[d(x-a)]^q} = C\frac{(x-a)^{-q}}{\Gamma(1-q)}, \quad \text{где } C \text{ — константа}, \tag{4}$$

и ДП от единицы не обращается в нуль. Пользуясь свойством δ-функции Дирака и используя определение (1б), можно показать, что [5]

$$\frac{d^q \delta(x-x_0)}{[d(x-a)]^q} = \frac{(x-x_0)^{-q-1}}{\Gamma(-q)}. \tag{5}$$

Таким образом, от заведомо разрывной функции можно получить непрерывную производную для всех $x \neq x_0$.

Алгоритм регуляризации. Известно [9, 10], что задача дифференцирования экспериментальных данных является неустойчивой, что проявляется в усилении случайных ошибок, всегда присутствующих в эксперименте. Получение приемлемых результатов в этом случае возможно только при явном или неявном введении априорной информации об искомой функции, например, об ее ограниченности, гладкости, монотонности и т. д., т. е. регуляризации решения.

В данной работе для вычисления ДП используется метод статистической регуляризации (МСР) [11—13]. Задача дифференцирования [9, 10, 13—15] может рассматриваться либо как решение интегрального уравнения первого рода (1б, 1в), которое в операторном виде можно записать в виде

$$A\varphi = f, \tag{6}$$

либо в форме вычисления оператора в точке

$$Df = \varphi, \tag{7}$$

где A — некоторый оператор, φ — искомая производная, f — заданная функция, D — оператор, соответствующий постановке (1а).

Обычно в рамках МСР в качестве исходной формулировки задачи рассматривается алгебраизованный ее вариант с включением ошибок измерений. Регуляризованное решение при этом для (6) записывается в виде

$$\bar{\varphi}_\alpha = (A_q^T W A_q + \alpha\Omega)^{-1} A_q^T W \bar{f}, \tag{8}$$

а для (7) — в виде [13, 15]

$$\bar{\varphi}_\alpha = D_q (W + \alpha D_q^T \Omega D_q)^{-1} W \bar{f}, \tag{9}$$

где A_q, D_q — матрицы, соответствующие алгебраизации (6), (7); W — матрица ошибок вектора $\mathbf{f}(1 \times N)$; Ω — положительно определенная симметричная матрица, учитывающая гладкость искомого вектора $\boldsymbol{\varphi}(1 \times N)$; α — параметр регуляризации. Вопросы решения (8) и (9), выбора α и Ω достаточно подробно рассмотрены в литературе (см., например, [9—17]).

При $A_q^{-1} = D_q$ формулировки (8) и (9) эквивалентны. Существенным моментом является определение матриц A_q, D_q при алгебраизации. При определении матриц A_q и D_q для конечных значений N вносится ошибка алгебраизации. Следует иметь в виду, что относительная погрешность алгебраизации $\varepsilon_q(f)_M$, определяемая в виде [5],

$$\varepsilon_q(f)_M = \left[\left(\frac{d^q f}{dx^q}\right)_M - \frac{d^q f}{dx^q}\right] \Big/ \frac{d^q f}{dx^q}, \tag{10}$$

где индекс M означает определенный тип алгоритма, зависит не только от N, но также и от величины q и от вида функции f. Матрица $D_q(k, j)$ может быть определена, например, из формулы (1а), если переписать ее для конечного N в виде

$$\varphi_k = \sum_{j=0}^{k} D_q(k, j) f_j = \left[\frac{x-a}{N}\right]^{-q} \sum_{j=0}^{k} \frac{\Gamma(j-q)}{\Gamma(-q)\Gamma(j+1)} f_j \quad (j, k = \overline{0, N-1}), \tag{11}$$

где q — произвольное действительное число. Матрица A_q определяется из соотношений (1б), (1в). В [5] проведен анализ относительной погрешности $\varepsilon_q(f)_M$ при различных способах алгебраизации. Так, например, для функции $f = x^2$ получено [5]

$$\varepsilon_q(x^2)_{(1а)} = \frac{q(q-2)}{2N}, \quad q \text{ — произвольное}, \tag{12}$$

$$\varepsilon_q(x^2)_{(1в)} = \frac{2-q}{N^2}\left[\frac{\zeta(1-q)}{N^{-q}} + \frac{1-q}{12}\right], \quad 0 \leqslant q < 1, \tag{13}$$

где $\zeta_{(q)}$ — дзета-функция Римана.

Анализируя (12) и (13), можно заметить, что при малых N в силу специфического хода функции $\zeta(q)$ вблизи $q = 1$ ошибка (13) для некоторых N и q может превосходить ошибку по (12). В общем случае при выборе метода алгебраизации необходимо провести исследование относительной ошибки для определенного q и функции f. В вычислительном плане выбор матрицы по (11) предпочтительнее ввиду существования единого алгоритма для всех q, а относительная ошибка при этом имеет монотонный характер. При проведении расчетов нами использовался алгоритм (11). Определив матрицу $D_q = A_q^{-1}$, регуляризованное ре-

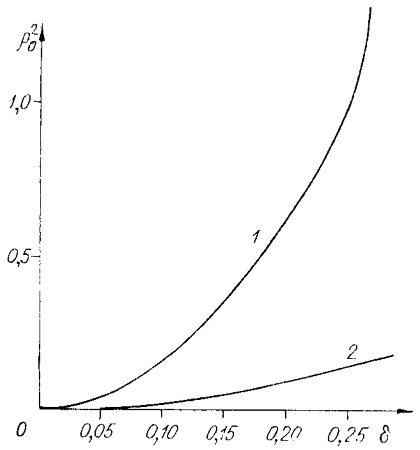

Рис. 1. Зависимость величины ρ_0^2 (15) от относительного уровня шума δ для функции $f(x) = x$ при $q = 0{,}5$:
1 — нерегуляризованное решение; 2 — регуляризованное решение

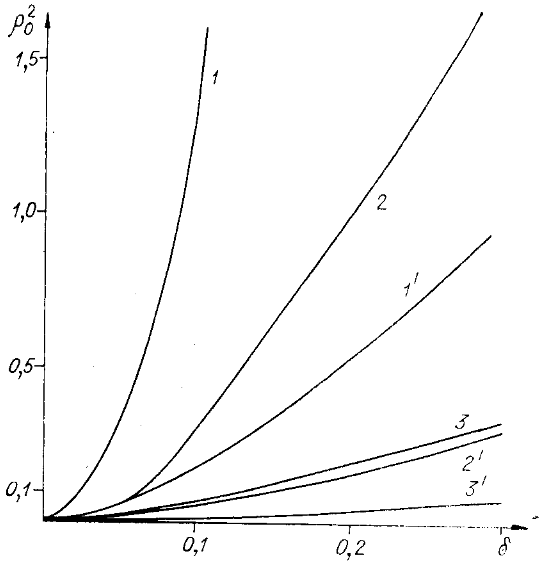

Рис. 2. То же, что и на рис. 1 для функции $f(x) = 1 - x^2$ при различных q:
1 — 0,75; 2 — 0,5; 3 — 0,25 (нерегуляризованное решение); 1' — 0,75; 2' — 0,5; 3' — 0,25 (регуляризованное)

шение можно находить по (8) либо по (9). На наш взгляд, более эффективно, особенно при обработке массивов большой размерности, использование формулы (9). При целых q (9) в отличие от (8) позволяет включить в алгоритм технику циркуляционных матриц [13—15], что приводит к тому, что взамен матриц $(N \times N)$ все операции производятся с порождающими их векторами $(1 \times N)$. При дробных же q выражение (9) позволяет путем декомпозиции выделить задачу сглаживания

$$\bar{\varphi}_\alpha = D_q \bar{f}_\alpha, \qquad (14)$$

для которой также эффективно могут быть использованы циркуляционные матрицы.

Результаты численных расчетов и их обсуждение. С целью проверки эффективности предложенного алгоритма были проведены математические эксперименты. Расчеты проводились по (14) при $N = 32{,}64$.

При моделировании вектор измерений правой части определялся как $\tilde{f}_i = f(x_i) + \xi_i$. Случайные не коррелированные между собой числа ξ_i, имитирующие шум измерения, подчинялись нормальному распределению с нулевым средним и дисперсией $\sigma_i^2 = (\delta\,|f(x_i)|/2{,}3)^2$ [17], где δ — относительный уровень шума. Полученные таким образом значения $\tilde{f}_i$ являлись «экспериментальными». В качестве меры, характеризующей точность построенного регуляризованного решения, бралась величина

$$\rho_0 = \left(\sum_{i=0}^{N-1} (\varphi_\alpha(x_i) - \varphi(x_i))^2 \Big/ \sum_{i=0}^{N-1} \varphi^2(x_i) \right)^{1/2}. \qquad (15)$$

Величина ρ_0 отличается лишь нормировкой от общепринятой в статистике среднеквадратичной ошибки S. Обе меры ρ_0, S имеют широкую область применимости при обработке физического эксперимента [15, 17], в вычислительной томографии [18], причем ρ_0 определяется как нормированная мера среднеквадратичного отличия. Следует отметить их «чувствительность» к большим отклонениям восстановленного решения от истинного на локальных областях (в области экстремумов функций).

На рис. 1 представлена зависимость величины ρ_0 от относительного уровня шума δ для регуляризованного и нерегуляризованного решений при $f(x) = x$. На рис. 2 представлена эта же зависимость при различных значениях параметра q для функции $f(x) = 1 - x^2$. Из рисунков видна эффективность регуляризованного алгоритма даже в условиях «наброса» ошибок порядка 20—30%.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Leibniz G. W.** Letter from Hanover, Germany, Sept. 30, 1695 to G. A. V. 2. L'Hospital Leibnizen Mathematische Schriften.— Hildesheim: Olms Verl., 1962.— P. 301—302.
2. **Шостак Р. Я.** Историко-математические исследования.— М.: ГИТТЛ, 1952.
3. **Нигматуллин Р. Ш., Белавин Б. А.** Электролитический дробно-дифференцирующий и интегрирующий двухполюсник.— М.: ГИТТЛ, 1964.— (Тр. КАИ; вып. 82).
4. **Нигматуллин Р. Ш., Вяселев М. Р.** Осциллополярография с применением ступенчатого напряжения // Журн. аналитич. химии.— 1964.— Вып. 5.
5. **Oldham K., Spanier J.** The fractional calculus.— N. Y.: Academ. Press., In. C., 1974.
6. **Слонимский Г. Л., Шестопал В. О.** Статическое описание релаксационных процессов в полимерах // ВМС.— 1978.— Т. А 20, № 8.
7. **Бабенко Ю. И.** Тепломассообмен.— Л.: Химия, 1986.

[illegible]

12. **Турчин В. Ф., Козлов В. П., Малкевич М. С.** Использование методов математической статистики для решения некорректных задач // УФН.— 1970.— Т. 102, вып. 3.
13. **Грачев И. Д., Салахов М. Х., Фишман И. С.** Статистическая регуляризация при обработке эксперимента в прикладной спектроскопии.— Казань: Изд-во КГУ, 1986.
14. **Grachev I. D., Salakhov M. Kh., Fishman I. S.** Efficient algorithms for the processing of multidimensional spectroscopic data arrays // Comput. Enhanc. Spectroscopy.— 1984.— V. 2, N 1.— P. 1—12.
15. **Грачев И. Д., Салахов М. Х.** Численное дифференцирование многомерных экспериментальных данных // Автометрия.— 1985.— № 2.
16. **Туровцева Л. С.** Решение обратных некорректных задач методом статистической регуляризации. (Программа ОБР).— М., 1975.— (Препринт/Ин-т прикл. математики им. М. В. Келдыша АН СССР; № 23).
17. **Воскобойников Ю. Е., Преображенский Н. Г., Седельников А. И.** Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике.— Новосибирск: Наука, 1984.
18. **Хермен Г.** Восстановление изображений по проекциям.— М.: Мир, 1983.

Поступила в редакцию 17 ноября 1986 г.