

分数階微分の数値計算法

2002MM020 平出 優佳

指導教員 杉浦 洋

1 はじめに

分数階微分は、整数階微分では数理モデル化できない物理現象に使われる [1][2]. そのような現象の数値解析に役立つよう、今回は分数階微分の数値計算法について考える. 定義式は下記のものを取り上げた [3].

$$(D^q f)(s) := \frac{1}{\Gamma(1-q)} \frac{d}{ds} \int_0^s \frac{f(t)}{(s-t)^q} dt$$

($0 < q < 1, 0 \leq s \leq d$) , d : 任意の値.

但し, 本研究では, 上記の定義式のガンマ関数を省略した

$$(\tilde{D}^q f)(s) := \frac{d}{ds} \int_0^s \frac{f(t)}{(s-t)^q} dt \quad (1)$$

の計算を考える. 具体的には, 2つの方法を提案し, その有効性を調べる. 相方とも特異積分の数値計算を長谷川・鳥居 [4] の方法を参考に行うが, これは, 微分したい関数 $f(t)$ を N 次のチェビシェフ補間多項式で近似するものである.

本文中の Σ'' は初項と末項をそれぞれ 1/2 倍して和をとり, Σ' は初項だけ 1/2 倍して和をとることを表す.

2 数値計算法 1

式 (1) のべき型特異関数を

$$Q(s) = \int_0^s \frac{f(t)}{(s-t)^q} dt \quad (0 < q < 1, 0 \leq s \leq d)$$

とおき, 数値積分, 数値微分を順に行う.

2.1 積分 $Q(s)$ の計算

まず, $f(t)$ のチェビシェフ補間多項式を求める. $0 \leq t \leq d$ であるため $u = 2t/d - 1$ ($-1 \leq u \leq 1$), $\alpha = -q$, $c = 2s/d - 1$ において

$$Q(s) = \left(\frac{d}{2}\right)^{\alpha+1} \int_{-1}^c f\left(\frac{(u+1)d}{2}\right) (c-u)^\alpha du$$

と変数変換し, $g(u) = f((u+1)d/2)$ として $g(u)$ の N 次チェビシェフ補間多項式 $p_N(u)$ を求める.

$$g(u) \sim p_N(u) = \sum_{k=0}^N {}''a_k T_k(u). \quad (2)$$

係数 a_k は, 補間点を $t_l = \cos(\pi l/N)$ ($l = 0, 1, \dots, N$) として

$$a_k = \frac{2}{N} \sum_{l=0}^N {}''g(t_l) T_k(t_l) \quad (k = 0, 1, \dots, N)$$

で計算できる. $\tilde{Q}(s) = \int_{-1}^c g(u)(c-u)^\alpha du$ とすれば, これは

$$\tilde{Q}_N(s) = \int_{-1}^c p_N(u)(c-u)^\alpha du$$

で近似して求めることができる. さて,

$$\begin{aligned} \int_u^c \{p_N(c) - p_N(v)\} (c-v)^\alpha dv \\ = \{F_N(c) - F_N(u)\} (c-u)^{\alpha+1} \end{aligned} \quad (3)$$

とおき, $t = -1$ として式を変形すると

$$\tilde{Q}_N(s) = (c+1)^{\alpha+1} \left\{ F_N(-1) - F_N(c) + \frac{p_N(c)}{\alpha+1} \right\}$$

であるから, $Q_N(s)$ は次の式で計算することができる.

$$Q_N(s) = (s)^{\alpha+1} \left\{ F_N(-1) - F_N(c) + \frac{p_N(c)}{\alpha+1} \right\} \quad (4)$$

ここで, 多項式 $F_N(u)$ は次のようにして求める.

$$F_N'(u) = \sum_{k=0}^{N-1} {}'b_k T_k'(u) \quad (5)$$

とおくと, 積分して

$$F_N(u) = \sum_{k=1}^N \frac{b_{k-1} - b_{k+1}}{2k} T_k(u) = \sum_{k=1}^N c_k T_k(u). \quad (6)$$

係数 b_k は, 式 (3) の両辺を u で微分し, 式 (2), (5), (6) を代入して導出した次の漸化式で計算する.

$$\frac{k-\alpha-1}{k} b_{k+1} - 2c b_k + \frac{k+\alpha+1}{k} b_{k-1} = 2a_k \quad (7)$$

但し, $k = N, N-1, \dots, 1$ であり, $k = N$ のとき右辺を 1/2 倍する. また, $b_N = b_{N+1} = 0$ である.

2.2 $Q_N(s)$ の数値微分

式 (4) の両辺を s で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} Q_N(s) &= (\alpha+1)s^\alpha \left\{ F_N(-1) - F_N(c) + \frac{p_N(c)}{\alpha+1} \right\} \\ &+ s^{\alpha+1} \left\{ \frac{d}{ds} F_N(-1) - \frac{d}{ds} F_N(c) + \frac{2p_N'(c)}{d(\alpha+1)} \right\} \end{aligned} \quad (8)$$

となる. $U_k(s)$ は第 2 種チェビシェフ多項式で

$$T_k'(s) = kU_{k-1}(s)$$

となることを用い, c_k が s の関数であることに注意して

$$\frac{d}{ds} F_N(-1) = \sum_{k=1}^N c_k'(s) T_k(-1).$$

$$\frac{d}{ds} F_N(c) = \sum_{k=1}^N \left\{ c_k'(s) T_k(c) + \frac{2}{d} k c_k(s) U_{k-1}(c) \right\}.$$

$c'_k(s) = (b'_{k-1}(s) - b'_{k+1}(s))/2k$ より $b'_k(s)$ を求めると, 式 (7) の両辺を s で微分し変形した漸化式

$$\frac{k-\alpha-1}{k}b'_{k+1} - 2cb'_k + \frac{k+\alpha+1}{k}b'_{k-1} = \frac{4}{d}b_k$$

で計算できる. 但し, $k = N, N-1, \dots, 1$ であり, $b'_N = b'_{N+1} = 0$ とする. また,

$$p'_N(c) = \sum_{k=0}^N ka_k U_{k-1}(c).$$

したがって, 式 (9) の導関数は全て計算でき, $Q_N(s)$ の数値微分ができる. よって, $(\tilde{D}^q f)(s)$ は近似式

$$\begin{aligned} (\tilde{D}_N^q f)(s) &= (1-q)s^{-q} \left\{ F_N(-1) - F_N(c) + \frac{p_N(c)}{1-q} \right\} \\ &+ s^{1-q} \left\{ \frac{d}{ds} F_N(-1) - \frac{d}{ds} F_N(c) + \frac{2p'_N(c)}{d(1-q)} \right\} \end{aligned}$$

で計算できる.

3 数値計算法 2

式 (1) における特異積分を部分積分すると

$$\int_0^s \frac{f(t)}{(s-t)^q} dt = \frac{f(0)s^{1-q}}{1-q} + \frac{1}{1-q} \int_0^s f'(t)(s-t)^{1-q} dt$$

となる. この両辺を s で微分して

$$(\tilde{D}^q f)(s) = \frac{f(0)}{s^q} + \int_0^s \frac{f'(t)}{(s-t)^q} dt$$

とし, 特異積分を 2 節と同様に求める. 但し, $f(t)$ が $f'(t)$ で置き換わっていることに注意する. また, $f'(t)$ のチェビシェフ補間多項式は式 (2) を微分することにより求める. この方法は数値微分が不要なので少ない計算量で済む. 結果, 近似式

$$\begin{aligned} (\tilde{D}_N^q f)(s) &= \frac{f(0)}{s^q} + s^{1-q} \left\{ F_{N-1}(-1) - F_{N-1}(c) + \frac{q_{N-1}(c)}{1-q} \right\} \end{aligned}$$

で計算できる.

4 プログラムの実行結果

いくつかのテスト関数を用いて $e_N = |(\tilde{D}^q f)(s) - (\tilde{D}_N^q f)(s)| \cdot s^q$ を計算し,

$$E_N = \max_{1 \leq j \leq m} e_N(s_j), \quad s_j = \frac{d}{m} j \quad (1 \leq j \leq m)$$

として縦軸に $\log_{10} E_N$, 横軸に N をとったグラフをつくり, d や q や特異点の位置を変化させて考察する. 下のグラフは関数を $f(t) = (t+a)^{q-1}$ とした時のものであり, それぞれ値は次の通りである. なお, 数値計算法 1 での実行結果である.

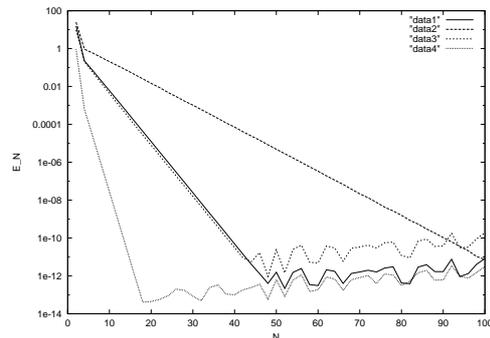
data1 : $a = 0.1, d = 1.0, q = 0.5$

data2 : $a = 0.1, d = 5.5, q = 0.5$

data3 : $a = 0.1, d = 1.0, q = 0.8$

data4 : $a = 0.9, d = 1.0, q = 0.5$

違う関数でも下のグラフと同様の傾向が見られる.



グラフはどれも右下がりの直線になり, 精度が高くなると不規則に振動してゆっくり右上りした. これは理論誤差が丸め誤差よりも小さくなったため, 計算回数の増加に伴って増える丸め誤差の様子がグラフに現れたと考えられる. また, 丸め誤差は q を 1 に近づけるほど大きくなり, 同様に, d を大きくした場合や特異点 $-a$ を微分区間に接近させた場合, 精度が悪くなる傾向が見られた.

2 つの方法での実行結果はほぼ同じになった. N が 10 以下で数値計算法 1 より 2 の方が安定している様子が見られたが, それ以外では丸め誤差も同じになってしまい, 疑問が残る.

5 おわりに

今後の課題として, q が 1 に近づいても丸め誤差をおさえられるようにすること, 理論誤差解析を行うことである. さらに, 本研究を生かして分数階微分を使った数理モデルの数値解析に取り組みたい.

参考文献

- [1] KAI DIETHELM: AN ALGORITHM FOR THE NUMERICAL SOLUTION OF DIFFERENTIAL EQUATIONS OF FRACTIONAL ORDER, Electronic Transactions on Numerical Analysis, vol.5, pp.1-6(1997.3).
- [2] 小藤俊幸: 記憶をもつ拡散方程式の数値計算, 調布シンポジウム 2005(2005.2.18).
- [3] K.B.OLDHAM, SPANIER: The Fractional Calculus, Mathematics in Science and Engineering, academic Press, vol.111(1974).
- [4] 長谷川武光, 鳥居達生: べき型特異性をもつ関数の不定積分に対する自動積分法, 日本応用数理学会論文誌, Vol.1, No.1, pp.1-11 (1991).