

СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ

Siberian Electronic Mathematical Reports

<http://semr.math.nsc.ru>

Том 5, стр. 581–594 (2008)

УДК 519.245, 519.63

MSC 65Nxx, 65Cxx

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ
ТЕОРИИ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ

А. Н. БОНДАРЕНКО, Д. С. ИВАЩЕНКО

ABSTRACT. We present two methods numerical solution boundary problems for time fractional diffusion equation. The results of cross-validation computer testing also discussed.

Keywords: anomalous diffusion, numerical methods, Monte Carlo method.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время значительный интерес представляют физические исследования диффузионных процессов аномальной природы, отклоняющихся от классической гауссовской диффузии, которые встречаются во множестве физических систем (см. [1, 2] и цитированную там литературу). Для аномального диффузионного процесса характерно в первую очередь то, что зависимость среднеквадратического смещения от времени

$$(1) \quad \langle x^2(t) \rangle \sim \frac{2K_\alpha}{\Gamma(1+\alpha)} t^\alpha$$

отклоняется от «нормального» линейного закона $\langle x^2(t) \rangle \sim K_1 t$. Здесь K_1 и K_α — «обычный» и обобщенный коэффициенты диффузии размерности $\text{см}^2 \text{с}^{-1}$ и $\text{см}^2 \text{с}^{-\alpha}$ соответственно (при $\alpha = 1$ имеем $\Gamma(2) = 1$). Показатель аномальной диффузии $\alpha \neq 1$ определяет, будет ли процесс классифицирован

BONDARENKO, A.N., IVASHCHENKO, D.S., NUMERICAL METHODS FOR SOLVING BOUNDARY PROBLEMS OF ANOMALOUS DIFFUSION THEORY.

© 2008 Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С.

Итоговый научный отчет по междисциплинарному интеграционному проекту СО РАН: «Разработка теории и вычислительной технологии решения обратных и экстремальных задач с приложением в математической физике и гравимагниторазведке».

Работа поддержана междисциплинарным интеграционным проектом СО РАН № 48.

Поступила 1 сентября 2008 г., опубликована 27 ноября 2008 г.

как субдиффузионный (дисперсионный, медленный) при $0 < \alpha < 1$ или супердиффузионный (ускоренный, быстрый) при $\alpha > 1$. Обычно рассматривается область $1 < \alpha \leq 2$, где $\alpha = 2$ — баллистический предел, описываемый волновым уравнением.

Соотношение (1) описывает так называемые «странные» процессы переноса в нелинейных динамических системах, то есть негауссовы процессы, допускающие корреляции на сколь угодно больших пространственно-временных масштабах.

Рассматриваемым моделям могут быть поставлены в соответствие дифференциальные уравнения дробного порядка, из которых видно, что данные процессы являются сильно нелокальными и характеризуются широкими корреляциями во времени и/или пространстве, представимыми в виде медленно убывающих по степенному закону ядер в соответствующих интегро-дифференциальных уравнениях.

Мы представим здесь два разработанных подхода к численному решению краевых задач для уравнений аномальной диффузии. Первый подход основан на построении разностной схемы с использованием производной Грюнвальда — Летникова. Второй подход является обобщением метода Монте Карло, предназначенным для статистического моделирования уравнений аномальной диффузии. Он основан на недавних результатах Горенфло и Майнарди [3].

Приведены результаты компьютерных экспериментов и дан сравнительный анализ этих подходов.

1.1. Основные понятия. Обозначим $\Omega = [a, b]$, $-\infty \leq a < b \leq \infty$, т. е. область Ω может рассматриваться как отрезок, луч или вся ось.

Определение 1. Через $AC(\Omega)$, обозначается класс функций $f(x)$, абсолютно непрерывных на Ω . Класс $AC(\Omega)$ совпадает с классом первообразных от интегрируемых по Лебегу функций.

Определение 2. Через $AC^1(\Omega)$ обозначается класс функций $f(x)$, непрерывно дифференцируемых на Ω .

Пусть $[\alpha]$ и $\{\alpha\}$ — соответственно целая и дробная части числа α , так что $\alpha = [\alpha] + \{\alpha\}$.

Определение 3. Пусть $f(x) \in L_1(a, b)$. Интеграл

$$(2) \quad I_{a+}^{\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x \frac{f(\xi)}{(x - \xi)^{1-\alpha}} d\xi, \quad x > a,$$

называется дробным интегралом Римана—Лиувилля порядка $\alpha > 0$.

Определение 4. Пусть $f(x) \in AC([a, b])$. Выражение

$$(3) \quad D_{a+}^{\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(1 - \alpha)} \frac{d}{dx} \int_a^x \frac{f(\xi)}{(x - \xi)^{\alpha}} d\xi, \quad 0 < \alpha < 1,$$

называется дробной производной Римана—Лиувилля порядка α .

В силу тождеств Абеля дробная производная (3) переходит в обычную «целую» производную $D^1 f(x) \equiv f'_x$ при $\alpha \rightarrow 1$.

Введем в рассмотрение оператор дробного дифференцирования Капуто, который представляет собой модификацию дробной производной Римана—Лиувилля.

Лемма 1. *Дробная производная Римана—Лиувилля (3) может быть представлена в виде*

$$(4) \quad D_{a+}^{\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \left[\frac{f(a)}{(x-a)^{\alpha}} + \int_a^x \frac{f'(\xi) d\xi}{(x-\xi)^{\alpha}} \right].$$

Отсюда следует, что

$$(5) \quad \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^x \frac{f'(\xi) d\xi}{(x-\xi)^{\alpha}} = D_{a+}^{\alpha} f(x) - \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{f(a)}{(x-a)^{\alpha}}.$$

Определение 5. *Выражение*

$$(6) \quad D_{a+}^{\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^x \frac{f'(\xi)}{(x-\xi)^{\alpha}} d\xi$$

называют дробной производной Капуто [4, 5].

Известно следующее соотношение.

Лемма 2. *Справедлива формула*

$$(7) \quad D_{a+}^{\alpha} f(x) = I_{a+}^{1-\alpha} D^1 f(x).$$

2. РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ ДРОБНОГО ПОРЯДКА ПО ВРЕМЕНИ С ПОСТОЯННЫМ КОЭФФИЦИЕНТОМ

Рассмотрим по аналогии с [3] дифференциальное уравнение с дробной производной по времени:

$$(8) \quad {}_t D_{0+}^{\alpha} u(x, t) = \lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t), \quad 0 < \alpha < 1,$$

где $x \in R$, $t \in R_0^+$, а оператор ${}_t D_{0+}^{\alpha}$ — это оператор дробного дифференцирования Капуто. Будем рассматривать краевую задачу для уравнения (8) в прямоугольнике

$$(9) \quad \Omega = \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T\}.$$

Требуется найти непрерывное в прямоугольнике Ω решение $u = u(x, t)$ задачи

$$(10) \quad {}_t D_{0+}^{\alpha} u(x, t) = \lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leq T,$$

$$(11) \quad u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1,$$

$$(12) \quad u(0, t) = \psi_1(t), \quad u(1, t) = \psi_2(t), \quad 0 \leq t \leq T.$$

Введем сетки

$$(13) \quad \bar{\omega}_h = \{x_i = ih, i = 0, 1, \dots, N, h = 1/N\},$$

$$(14) \quad \bar{\omega}_{\tau} = \{t_j = j\tau, j = 0, 1, \dots, M, \tau = T/M\}$$

и сетку в Ω :

$$(15) \quad \widehat{\Omega} = \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_\tau = \left\{ (x_i, t_j) : x_i \in \bar{\omega}_h, t_j \in \bar{\omega}_\tau \right\}.$$

Обозначим через y_i^j значение в узле (x_i, t_j) сеточной функции y , определенной на $\widehat{\Omega}$. Заменяя производную ${}_t D_{0+}^\alpha$ ее разностным аналогом, а $\partial^2 u / \partial x^2$ — второй разностной производной и вводя вещественный параметр $0 \leq \sigma \leq 1$, получим разностную схему с весами

$$(16) \quad y_t^{(\alpha)} = \Lambda_\lambda \left(\sigma y_i^{j+1} + (1 - \sigma) y_i^j \right),$$

где оператор Λ_λ действует по правилу

$$(17) \quad \Lambda_\lambda y_i^j = \frac{\lambda^2}{h^2} \left[y_{i-1}^j - 2y_i^j + y_{i+1}^j \right].$$

Заметим, что данная разностная схема является многослойной с переменным числом слоев. Начальные и краевые условия аппроксимируем точно:

$$(18) \quad y_i^0 = y(x_i, 0) = u_0(x_i),$$

$$(19) \quad y_0^j = \psi_1^j, \quad y_N^j = \psi_2^j.$$

Рассмотрим схему с весами (16), где в случае $\sigma = 0$ получим формулу, позволяющую явным образом выразить значения y на следующем слое через значения на текущем слое:

$$(20) \quad y_i^{j+1} = \left[\alpha - 2 \frac{\lambda^2 \tau^\alpha}{h^2} \right] y_i^j + \frac{\lambda^2 \tau^\alpha}{h^2} \left(y_{i-1}^j + y_{i+1}^j \right) + Y_i^j,$$

$$(21) \quad Y_i^j = \sum_{k=0}^j (-1)^k \binom{\alpha}{k} y_i^0 - \sum_{k=2}^j (-1)^k \binom{\alpha}{k} y_i^{j+1-k}.$$

При $\sigma \neq 0$ приведем выражение (16) к виду

$$(22) \quad L \left[y_i^{j+1} \right] = A_i y_{i-1}^{j+1} - C_i y_i^{j+1} + B_i y_{i+1}^{j+1} = -F_i^j,$$

а именно

$$(23) \quad y_{i-1}^{j+1} - \left[\frac{h^2}{\sigma \lambda^2 \tau^\alpha} + 2 \right] y_i^{j+1} + y_{i+1}^{j+1} = -F_i^j,$$

$$(24) \quad F_i^j = \frac{h^2}{\sigma \lambda^2 \tau^\alpha} Y_i^j + \left[\frac{\alpha h^2}{\sigma \lambda^2 \tau^\alpha} - 2 \frac{1 - \sigma}{\sigma} \right] y_i^j + \frac{1 - \sigma}{\sigma} \left(y_{i-1}^j + y_{i+1}^j \right).$$

При $\sigma = 1$ (чисто неявная схема) имеем:

$$(25) \quad y_{i-1}^{j+1} - \left[\frac{h^2}{\lambda^2 \tau^\alpha} + 2 \right] y_i^{j+1} + y_{i+1}^{j+1} = -\frac{h^2}{\lambda^2 \tau^\alpha} \left(Y_i^j + \alpha y_i^j \right).$$

Для этой многослойной схемы был разработан метод прогонки и исследована ее устойчивость.

Теорема 1. *Если имеет место соотношение*

$$(26) \quad \tau^\alpha \leq \frac{\alpha h^2}{2(1 - \sigma) \lambda^2},$$

то разностная схема с весами (22) устойчива в \mathbf{C} .

Доказательство можно найти в [6].

3. МЕТОД МОНТЕ КАРЛО ДЛЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ

3.1. Классическая модель случайного блуждания. Известно, что численный подход к решению уравнения диффузии

$$(27) \quad \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \lambda^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2},$$

основанный на использовании соответствующей разностной схемы, предполагает применение дискретной модели марковского случайного блуждания для классического броуновского движения. Заменяя производные в уравнении (27), их разностными аналогами, рассмотрим явную разностную схему

$$(28) \quad \frac{y_i(t_{j+1}) - y_i(t_j)}{\tau} = \lambda^2 \frac{y_{i-1}(t_j) - 2y_i(t_j) + y_{i+1}(t_j)}{h^2},$$

в которой $y_i(t_j)$ может интерпретироваться как вероятность пребывания «случайно блуждающей» частицы в точке x_i в момент времени t_j . Теперь мы имеем марковский процесс, при котором промежутку времени $\Delta t = (t_n, t_{n+1})$ соответствуют вероятности пребывания, распределенные в соответствии с «законом перехода»:

$$y_i(t_{j+1}) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} p_k y_{i-k}(t_j), \quad i \in \mathbf{Z}, j \in \mathbf{N},$$

где через p_k обозначаются «коэффициенты переноса», каждый из которых представляет собой вероятность перехода из точки x_{i-k} в точку x_i (или из x_i в x_{i+k}). Коэффициенты переноса определяются из разностного уравнения и заданного начального условия. Процесс становится однородным по пространству (вероятность p_k перехода из x_i в x_{i+k} не зависит от i) и стационарным по времени (p_k не зависит от j). Далее, коэффициенты переноса должны удовлетворять условиям

$$(29) \quad \sum_{k=-\infty}^{\infty} p_k = 1, \quad p_k \geq 0, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

В данном случае коэффициенты переноса могут быть найдены из (28) и (29):

$$p_0 = 1 - 2 \frac{\lambda^2 \tau}{h^2}, \quad p_{\pm 1} = \frac{\lambda^2 \tau}{h^2}, \quad p_k = 0, \quad k = 2, 3, \dots$$

и должны удовлетворять условию

$$(30) \quad 0 < \rho = \frac{\lambda^2 \tau}{h^2} \leq \rho_{\max} = \frac{1}{2}.$$

Условия (29) и (30) являются основными для стандартной модели случайного блуждания для гауссовского процесса. Константа ρ в рассматриваемом контексте обозначается как «масштабная постоянная» уравнения диффузии. В данном случае считается, что частица может делать только один «шаг» единичной длины влево или вправо или оставаться на месте (делать «шаг» длины ноль). Это соответствует известной простой реализации броуновского движения.

3.2. Построение дискретной модели случайного блуждания для диффузии дробного порядка по времени. В работах Горенфло и Майнарди [3, 7, 8] были рассмотрены дискретные модели случайного блуждания для немарковских диффузионных процессов. Основная идея состоит в замене дробно-дифференциального уравнения

$${}_t D_{0+}^{\alpha} u(x, t) = \lambda^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2},$$

разностным, используя следующее представление дробной производной по времени в форме Грюнвальда—Летникова (начиная с $t = t_{j+1}$):

$$(31) \quad y_i^{(\alpha)}(t_{j+1}) = \sum_{k=0}^{j+1} (-1)^k \binom{\alpha}{k} \frac{y_i(t_{j+1-k}) - y_i(t_0)}{\tau^{\alpha}}, \quad 0 < \alpha < 1.$$

В данном случае дробная производная Грюнвальда—Летникова трактуется как разностный аналог дробной производной Капуто (6). Тогда, полагая, что

$$\sum_{k=1}^j = 0 \text{ при } j = 0, \text{ имеем}$$

$$(32) \quad \begin{aligned} y_i(t_{j+1}) &= y_i(t_0) \sum_{k=0}^j (-1)^k \binom{\alpha}{k} + \sum_{k=1}^j (-1)^{k+1} \binom{\alpha}{k} y_i(t_{j+1-k}) \\ &+ \frac{\tau^{\alpha} \lambda^2}{h^2} [y_{i-1}(t_j) - 2y_i(t_j) + y_{i+1}(t_j)]. \end{aligned}$$

Таким образом, выражение (32) представляет собой «универсальный закон перехода» [8] от t_j к t_{j+1} , справедливый для всех $j \geq 0$. Для удобства дальнейших рассуждений введем обозначения

$$c_k = (-1)^{k+1} \binom{\alpha}{k} = \left| \binom{\alpha}{k} \right|, \quad k \geq 1, \quad b_j = \sum_{k=0}^j (-1)^k \binom{\alpha}{k}, \quad j \geq 0, \quad \rho = \frac{\tau^{\alpha} \lambda^2}{h^2}.$$

Заметим, что в случае классической диффузии ($\alpha = 1$) все c_k равны нулю, кроме $b_0 = c_1 = 1$, а при $0 < \alpha < 1$ обладают свойствами

$$(33) \quad \sum_{k=1}^{\infty} c_k = 1, \quad 1 > \alpha = c_1 > c_2 > \dots \rightarrow 0;$$

$$(34) \quad b_0 = 1 = \sum_{k=1}^{\infty} c_k, \quad b_j = 1 - \sum_{k=1}^j c_k = \sum_{k=j+1}^{\infty} c_k;$$

$$1 = b_0 > b_1 > \dots \rightarrow 0.$$

Обратим внимание, что коэффициенты c_k и b_j формируют последовательности положительных чисел, не больших единицы. Таким образом, «универсальный закон перехода» (32) может быть представлен в виде

$$y_i(t_{j+1}) = b_j y_i(t_0) + \sum_{k=1}^j c_k y_i(t_{j+1-k}) + \rho [y_{i-1}(t_j) - 2y_i(t_j) + y_{i+1}(t_j)].$$

Были получены следующие результаты.

Теорема 2. Если имеет место соотношение

$$(35) \quad \tau^\alpha \leq \frac{\alpha h^2}{2\lambda^2},$$

то схема (38) устойчива в \mathbf{C} .

Обратим внимание, что $c_1 = \alpha$. Схема (35) сохраняет «неотрицательность», если все коэффициенты неотрицательны, что достигается при

$$(36) \quad 0 < \rho = \frac{\tau^\alpha \lambda^2}{h^2} \leq \frac{\alpha}{2}.$$

Заметим, что выражение (36) совпадает с условием устойчивости явной разностной схемы для уравнения диффузии дробного порядка по времени.

Полные доказательства можно найти в [6].

Можно так же показать [3], что справедливо следующее утверждение.

Теорема 3. Схема (35) консервативна, то есть

$$\sum_{i=-\infty}^{+\infty} |y_i(t_0)| < \infty \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=-\infty}^{+\infty} y_i(t_j) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} y_i(t_0).$$

Схема (35) может быть интерпретирована в терминах «случайного блуждания» следующим образом: величины $y_i(t_j)$ рассматриваются в качестве вероятностей пребывания в точке x_i в момент t_j , удовлетворяющих условию нормировки $\sum_{i=-\infty}^{\infty} y_i(t_0) = 1$.

При $j = 0$ уравнение (35) означает (при надлежащем истолковании пространственного индекса i): частица, находящаяся в точке x_i в момент t_0 , в течение промежутка времени между моментами t_0 и t_1 с вероятностью ρ может попасть в соседнюю точку x_{j+1} , с вероятностью ρ — в соседнюю точку x_{j-1} и с вероятностью $1 - 2\rho$ остаться в точке x_i . При $j \geq 1$ выражение (35) может быть представлено, с учетом того, что $\alpha = c_1$, в виде

$$(37) \quad \begin{aligned} y_i(t_{j+1}) &= \left(1 - \sum_{k=1}^j c_k\right) y_i(t_0) + c_j y_i(t_1) + c_{j-1} y_i(t_2) + \dots + c_2 y_i(t_{j-1}) \\ &+ (c_1 - 2\rho) y_i(t_j) + \rho [y_{i+1}(t_j) + y_{i-1}(t_j)]. \end{aligned}$$

Разумеется, все коэффициенты (вероятности) неотрицательны и их сумма равна единице.

Анализ выражения (37) позволяет заключить, что в нем учитывается вся «история» частицы, то есть весь ее путь $\{x(t_0), x(t_1), \dots, x(t_j)\}$. Если частица в момент времени t_j находится в точке x_i , то с вероятностью $c_1 - 2\rho$ она останется в x_i и в момент t_{j+1} , с вероятностью ρ попадет в x_{i+1} и с вероятностью ρ окажется в x_{i-1} . Но сумма этих вероятностей равна $c_1 = \alpha \leq 1$.

Поэтому, исключая случай $\alpha = 1$, в котором рассматривается классическая диффузия (марковский процесс), при $\alpha < 1$ учитывается также и поведение частицы в предыдущие моменты времени (немарковский процесс). Значит, вклад в событие, состоящее в том, что в момент времени t_{j+1} частица останется в точке x_i , от t_{j-1} -го временного слоя равен c_2 , от t_{j-2} -го слоя — c_3, \dots , от t_1 -го слоя — c_j и, наконец, вклад от t_0 -го слоя, $t_0 = 0$, равен b_j . Таким

образом, вся история «блуждания» частицы вплоть до момента t_j определяет, с вероятностной точки зрения, положение частицы в момент времени t_{j+1} .

3.3. Разложение случайного блуждания на диффузионную и дисперсионную составляющие. Исследуем проблему моделирования движения частицы от t_j -го временного слоя к t_{j+1} -му. Предположим, что частица находится в точке x_i в момент времени t_j . Будем рассматривать случайные числа, равномерно распределенные на интервале $[0, 1)$, разделенном на подынтервалы следующим образом (рис. 1). Слева направо, начиная с нуля, интервал $[0, 1)$ содержит подынтервалы соответственно длины $c_1, c_2, \dots, c_n, b_n$, для определенности слева замкнутые, справа открытые. Сумма длин подынтервалов равна единице.

Далее, первый из них, длины c_1 , также разделяется на подынтервалы длины $\rho, c_1 - 2\rho, \rho$. Затем смотрим, в какой из «больших» подынтервалов попадает случайное число. Если в первый подынтервал длины $c_1 = \rho + c_1 - 2\rho + \rho$, то смотрим, в какой из «малых» подынтервалов попало случайное число, и в соответствии с этим делаем вывод о дальнейшем поведении частицы: переместится она в точку x_{i-1} , останется в x_i или попадет в x_{i+1} . Если выбранное случайное число попало в один из интервалов $c_2, c_3, \dots, c_k, \dots, c_{n-1}, c_n$, то частица перемещается назад на одну из своих предыдущих позиций $x(t_{n+1-k})$, которая случайно может совпасть с $x_i = x(t_j)$. Если же случайное число попадает в крайний правый интервал длины b_n , то частица перемещается назад в свое начальное положение $x(t_0)$.

Представим уравнение (32) в виде

$$y_i^{j+1} = V_i^j + Y_i^j,$$

где сеточную функцию

$$(38) \quad V_i^j = \left[\alpha - 2 \frac{\lambda^2 \tau^\alpha}{h^2} \right] y_i^j + \frac{\lambda^2 \tau^\alpha}{h^2} (y_{i-1}^j + y_{i+1}^j)$$

будем называть диффузионной составляющей, которая характеризует вклад текущего временного слоя в событие, состоящее в переходе частицы на слой t_{j+1} , а сеточную функцию

$$(39) \quad Y_i^j = \sum_{k=0}^j (-1)^k \binom{\alpha}{k} y_i^0 - \sum_{k=2}^j (-1)^k \binom{\alpha}{k} y_i^{j+1-k}$$

будем называть дисперсионной составляющей, которая содержит информацию об «истории» частицы. Существование в схеме (32) дисперсионной части говорит о том, что оператор дробного дифференцирования, в отличие от производной первого порядка, является нелокальным и учитывает информацию о «прошлом» системы. Это означает, что в ряде случаев положение частицы в момент t_{j+1} определяется ее предыдущими положениями, а не только позицией в момент t_j .

При моделировании периодического источника в методе Монте-Карло используется периодическая функция, связывающая количество «испускаемых» источником частиц с дискретными моментами времени, а также амплитудой и частотой. Заметим сразу, что в данном случае для наиболее точной имитации диффузионного процесса необходимо, чтобы число «испускаемых» источником частиц было достаточно велико ($\sim 10^5$).

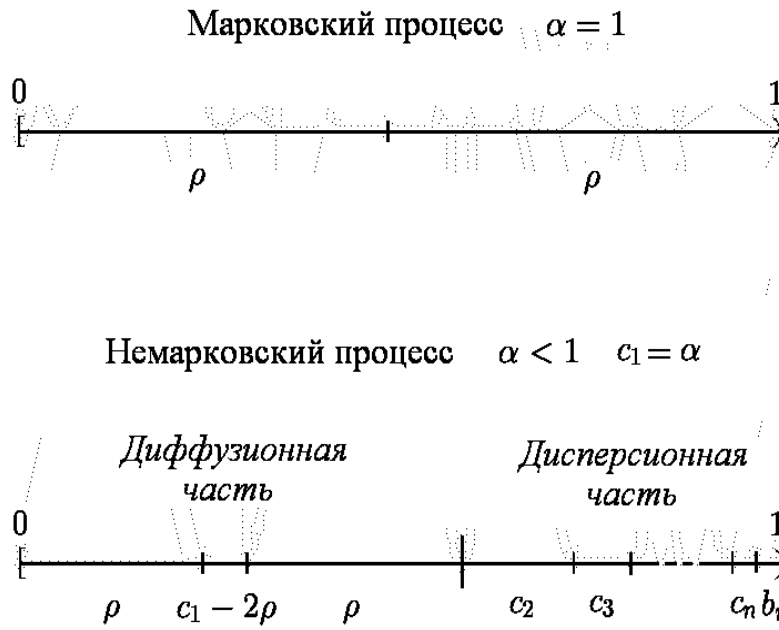


Рис. 1. Вероятности перехода

3.4. Метод Монте-Карло, модифицированный для решения прямых задач для уравнения аномальной диффузии.

- (1) Задаем показатель аномальной диффузии α , коэффициент λ , шаг по координате h , шаг по времени τ ; вычисляем вероятность перехода ρ ;
- (2) задаем количество групп частиц P , максимальное количество частиц в группе N и максимальное количество шагов, которое могут совершить частицы (время эксперимента) M ;
- (3) задаем источник и вычисляем коэффициенты c и b ;
- (4) создаем «карту» движения частиц: двумерный массив u_{ji} , где номер строки — номер шага по времени, номер столбца — номер текущей частицы, элементы массива — позиции частиц;
- (5) для каждой группы частиц $l = 0, 1, 2, \dots, P - 1$
 для каждого момента времени $j = l, l + 1, l + 2, \dots, M - 1$
 для каждой частицы $i = 0, 1, 2, \dots, S_l - 1$
 - а) генерируем случайное число m ;
 - б) заполняем интервал $[0, 1)$ подынтервалами $\text{intervals}_k = 1 - b_k$, $k = 0, 1, 2, \dots, j - 1$;
 - в) диффузионная часть $m < \alpha$:
 если $m \in [0, \rho)$, то $u_{ji} = u_{j-1, i} - 1$;
 если $m \in [\rho, \alpha - \rho)$, то $u_{ji} = u_{j-1, i}$;
 если $m \in [\alpha - \rho, \alpha)$, то $u_{ji} = u_{j-1, i} + 1$;
 - г) дисперсионная часть $m \geq \alpha$:
 если $m \in [1 - b_j, 1)$, то $u_{ji} = 0$;

если $m \in [c_2, 1 - b_j)$, тогда
 если $m < \text{intervals}_k$, то $u_{ji} = u_{j-k,i}$
 иначе $k = k + 1$.

Отметим, что чем больше числа N и M , тем точнее аппроксимация.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Был разработан программный комплекс, в рамках которого были проведены вычислительные эксперименты с целью исследования возможностей решения обратных задач в предположении, что данные обратной задачи моделируются методом Монте-Карло или методом конечных разностей, а затем на их основе проводится проверка адекватности «основной» модели процесса аномальной диффузии — дифференциального уравнения с дробной производной по времени и его разностного аналога. Ниже проведен сравнительный анализ результатов численного моделирования методами Монте-Карло и конечных разностей, а также сравнение их с аналитическим решением.

4.1. Численное решение второй краевой задачи с однородными граничными условиями. В области $\Omega_0^1 = \{(x, t) : 0 \leq x \leq 1, t \geq 0\}$ рассмотрим краевую задачу для уравнения диффузии дробного порядка по времени вида

$$(40) \quad {}_t D_{0+}^\alpha u = \lambda^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < \alpha \leq 1,$$

$$(41) \quad u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1,$$

$$(42) \quad u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad t > 0.$$

Здесь $u = u(x, t)$, $|u(x, t)| < M$, где M — константа; $u_0 \in C([0, 1])$ ограничена и ${}_t D_{0+}^\alpha$ — оператор дробного дифференцирования Капуто.

Ее решение может быть найдено [10] для случая $u_0(x) = x(1 - x)$:

$$(43) \quad v(x, t, \alpha) = \frac{8}{\pi^3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin[(2n+1)\pi x]}{(2n+1)^3} E_\alpha(-\pi^2(2n+1)^2 \lambda^2 t^\alpha).$$

Воспользуемся асимптотическим представлением функции Миттаг-Леффлера и запишем (43) в виде

$$(44) \quad v(x, t, \alpha) = \frac{8}{\pi^4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin[(2n+1)\pi x]}{(2n+1)^3} \sum_{k=0}^K \frac{(-1)^{k+1} \sin(\pi \alpha k) \Gamma(\alpha k)}{[-\pi^2(2n+1)^2 \lambda^2 t^\alpha]^k}.$$

Число K выбирается достаточно большим ($K \geq 20$), с тем чтобы K -е слагаемое во внутренней сумме не оказывало существенного влияния ($\sim 10^{-9}$) на всю сумму. Заметим, что в случае $\alpha = 1$ формула (44) примет вид

$$(45) \quad u(x, t) = \frac{8}{\pi^3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin[(2n+1)\pi x]}{(2n+1)^3} \exp(-\pi^2(2n+1)^2 \lambda^2 t).$$

На рис. 2 представлены результаты численного и аналитического решений краевой задачи (40)–(42) при $\lambda = 1.0$, $t = 0.5$. Использовалась чисто неявная схема, и в случае $\alpha = 1$ выбирались $h = 0.01$, $\tau = h^2/6\lambda^2 = 0.000016667$; в случае $\alpha = 0.75$ выбирались $h = 0.0025$, $\tau = 0.0005$; в случае $\alpha = 0.5$ выбирались $h = 0.05$, $\tau = 0.000005$.

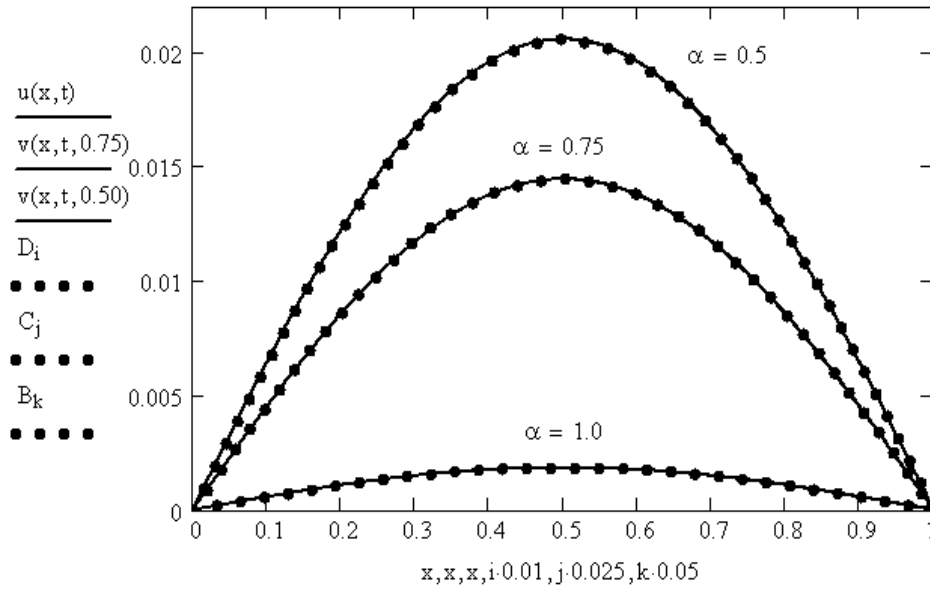


Рис. 2. Сравнение результатов численного (точки) и аналитического (сплошные линии) решений краевой задачи (40)–(42)

4.2. **Численное решение первой краевой задачи методом Монте-Карло.** В области $\Omega_0^2 = \{(x, t) : x \geq 0, t \geq 0\}$ рассмотрим первую краевую задачу для уравнения диффузии дробного порядка по времени вида

$$(46) \quad {}_tD_{0+}^{2\beta} u = \lambda^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < 2\beta \leq 1,$$

$$(47) \quad u(x, 0) = 0, \quad x > 0,$$

$$(48) \quad u(0, t) = \psi(t), \quad t > 0.$$

Здесь $u = u(x, t)$, $|u(x, t)| < M$, где M — константа; $\psi \in C([0, \infty))$ и ${}_tD_{0+}^{2\beta}$ — оператор дробного дифференцирования Капуто (6).

Определение 6. Обозначим через $G(x, t)$ решение задачи (46), (47), (48) при $\psi(t) = \delta(t)$. Функцию $G(x, t)$ назовем функцией Грина [4] краевой задачи (46), (47), (48).

Применяя обобщенное преобразование Лапласа по переменной t было получено [6] следующее представление функции Грина.

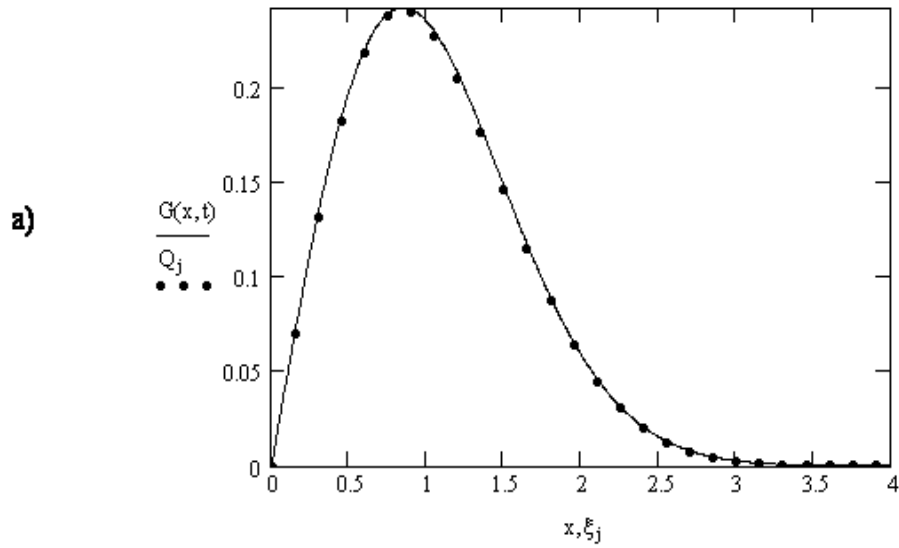
$$(49) \quad G(x, t) = \frac{1}{t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(-\beta n)} \frac{x^n}{\lambda^n t^{\beta n}}.$$

При $\beta = 1/2$ она приобретает классический вид:

$$G(x, t) = \frac{x}{2\lambda\sqrt{\pi t^3}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\lambda^2 t}\right).$$

На рис.3 представлены результаты работы метода Монте-Карло для классической диффузии (а) и диффузии дробного порядка (б) при нахождении

$$G(x,t) := \frac{x}{2 \cdot \lambda \cdot \sqrt{\pi \cdot t^3}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4 \cdot \lambda^2 \cdot t}\right)$$



$$G(x,t) := \sum_{k=0}^K \frac{(-1)^k \cdot x^k}{k! \cdot \pi \cdot \lambda^k \cdot t^{\beta \cdot k + 1}} \cdot \sin[(-\beta \cdot k) \cdot \pi] \cdot \Gamma(\beta \cdot k + 1)$$

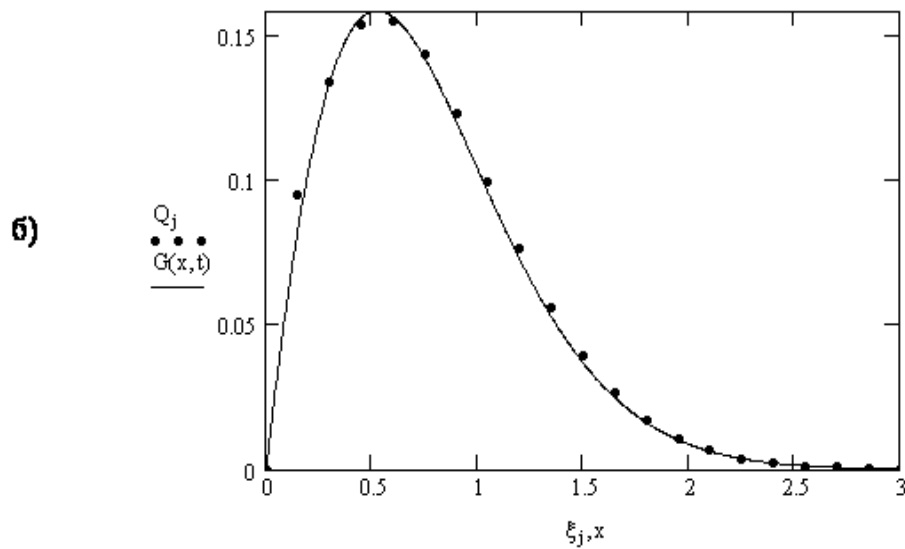


Рис. 3. Метод Монте-Карло для а) классической диффузии и б) диффузии дробного порядка ($\beta = 0.375$): график функции Грина первой краевой задачи в момент времени t

функции Грина первой краевой задачи (46), (47), (48). В случае а): количество частиц равно 10^8 , $\lambda = 0.6$, $t = 1$, $h = 0.075$; в случае б): количество частиц равно 10^9 , $\lambda = 0.4$, $t = 1$, $h = 0.15$, $\beta = 0.375$, $K = 170$.

При моделировании функции Грина методом Монте-Карло в точке $x = 0$ должен располагаться так называемый «поглощающий экран», т. е. все частицы, попадающие на этот экран, должны «исчезнуть». Кроме этого, здесь требуется достаточно большая вероятность $\alpha - 2\rho$ того, что частица задержится в текущей точке.

Из графиков видно, что на начальной стадии диффузионного процесса результаты решения задачи, полученные аналитическим методом и методом конечных разностей, хорошо согласуются с результатами, полученными методом Монте-Карло, что говорит об адекватности выбранной модели рассматриваемому процессу.

Отметим, однако, что на точность аппроксимации существенно влияют максимальное количество частиц в группе N и максимальное количество шагов M , которое могут совершить частицы. Чем больше M , тем шире «область наилучшей точности аппроксимации», т. е. тем длиннее отрезок оси абсцисс, которому соответствует наибольшая близость двух кривых. С другой стороны, чем больше N , тем меньше «зашумлено» моделируемое решение, тем точнее аппроксимация.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // *Phys. Rep.*, 2000, Vol. 339, P. 1–77.
- [2] Metzler R., Klafter J. The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics // *J. Phys. A: Math. Gen.*, 2004, Vol. 37, P. R161–R208.
- [3] Gorenflo R., Mainardi F., Moretti D., Paradisi P. Time fractional diffusion: a discrete random walk approach // *Nonlinear Dynamics*, 2002, Vol. 29, P. 129–143.
- [4] Mainardi F. The fundamental solutions for the fractional diffusion-wave equation // *Appl. Math. Lett.*, 1996, Vol. 9, No. 6, P. 23–28.
- [5] Podlubny I. The Laplace Transform method for Linear Differential Equations of the Fractional Order // Pre-Print, 1994.
- [6] Bondarenko A.N., Ivaschenko D.S. Numerical methods for solving inverse problems for time fractional diffusion equation with variable coefficient // *JIP* submitted
- [7] Gorenflo R., Mainardi F., Moretti D., Pagnini G., Paradisi P. Discrete random walk models for space-time fractional diffusion // *Chemical Physics*, 2002, Vol. 284, P. 521–544.
- [8] Gorenflo R., Vivoli A., Mainardi F. Discrete and continuous random walk models for space-time fractional diffusion // *Nonlinear Dynamics*, 2004, Vol 38, P. 101–116.
- [9] Gorenflo R., Mainardi F. Simply and multiply scaled diffusion limits for continuous time random walks // *Journal of Physics: Conference series*, 2005, Vol. 7, P. 1–16.
- [10] S. B. Yuste and L. Acedo, An explicit finite difference method and a new von Neumann-type stability analysis for fractional diffusion equations. *SIAM J. Numer. Anal.* **42** (2005), 1862–1874.

Анатолий Николаевич Бондаренко,
 Институт Математики им. С.Л. Соболева,
 пр. Коптюга, 4,
 630090, Новосибирск, Россия
E-mail address: bondarenkoan1953@mail.ru

ДМИТРИЙ СЕРГЕЕВИЧ ИВАЩЕНКО,
ООО «РН-УФАНИПИНЕФТЬ»,
ул. РЕВОЛЮЦИОННАЯ, д. 96/2
450078, УФА, РОССИЯ
E-mail address: stanger@ngs.ru