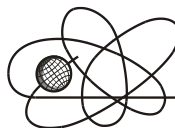




Российская Академия Наук

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

**ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ
БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ
АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ**



ИБРАЭ

RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

**NUCLEAR SAFETY
INSTITUTE**

Препринт ИБРАЭ № ИВРАЕ-2002-01

Preprint IBRAE-2002-01

В. М. Головизнин, В. П. Киселев, И. А. Короткин, Ю. И. Юрков

**НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ
АЛГОРИТМОВ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ДРОБНОЙ
ДИФФУЗИИ**

Москва
2002

Moscow
2002

УДК 504.054

Головизнин В.М., Киселев В.П., Короткин И.А., Юрков Ю.И. НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ДРОБНОЙ ДИФФУЗИИ. Препринт № ИВРАЭ-2002-01. Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 2002. 57 с. — Библиогр.: 22 назв.

Аннотация

В препринте приведен анализ численных методов решения уравнения дробной диффузии. Рассмотрены метод Фурье, явная и частично неявная разностные схемы первого порядка аппроксимации. Также приведены простейшие методы идентификации параметров дробной диффузии.

©ИВРАЭ РАН, 2002

Goloviznin V., Kiselev V., Korotkin I., Yurkov Y. SOME FEATURES OF COMPUTING ALGORITHMS FOR THE EQUATIONS FRACTIONAL DIFFUSION. Preprint № ИВРАЭ-2002-01. Moscow: Nuclear Safety Institute RAS, January 2002. 57 p. — Refs.: 22 items.

Abstract

In the work the analysis of numerical methods of the decision of the equation fractional diffusion is given. A Fourier's method, explicit and partially implicit difference scheme of the first order of approximation are considered. The elementary methods of identification of parameters fractional diffusion also are given.

©Nuclear Safety Institute, 2002

Некоторые особенности вычислительных алгоритмов для уравнений дробной диффузии

Головизнин В. М., Киселев В. П., Короткин И. А., Юрков Ю. И.

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ
113191, Москва, ул. Б. Тульская, 52
тел.: (095) 955-14-12, эл. почта: gol@ibrae.ac.ru

Содержание

Введение.....	
1 Псевдодифференциальные операторы дробной диффузии и их численная реализация	
1.1 Закон Фика для уравнения дробной диффузии	
1.2 Двумерные уравнения дробной диффузии и метод быстрого преобразования Фурье для их численного решения.....	
2 Разностные схемы для уравнений дробной диффузии	
2.1 Некоторые свойства разностных схем с дробными производными.....	
2.1.1 Устойчивость явной разностной схемы.....	
2.1.2 Нелокальность разностных операторов дробного дифференцирования	
2.1.3 Частично неявные безусловно устойчивые схемы и способ их численного решения	
2.1.4 Сравнение различных численных методов	
3 Нелинейная аппроксимация дробных потоков.....	
4 Идентификация параметров дробной диффузии.....	
5 Заключение	
6 Список литературы	
7 Приложение	

Введение

Несмотря на многовековую историю развития математического аппарата дробного интегрирования и дифференцирования [1], вопросы численной реализации соответствующих процедур с использованием высокопроизводительных вычислительных машин практически не нашли сколь либо полного отражения в существующей литературе [2-4]. В былые времена основное внимание уделялось изучению аналитических свойств этих объектов методами теории функций комплексного переменного. В последние годы, в связи с успешными попытками применить существующий математический аппарат дробного дифференцирования для описания процессов миграции примесей в сильно неоднородных средах, возродился интерес исследователей к этой области математики [5-6]. Особенный интерес к дробным производным проявляют гидрогеологи в связи с вопросами обоснования безопасности хранения высокоактивных долгоживущих радиоизотопов в геологических формациях [7]. Перенос, описываемый операторами с дробными производными, на больших расстояниях от источника приводит к совершенно иному поведению относительно малых концентраций по сравнению с классической диффузией. Эти малые концентрации, или «далекие хвосты распределений», при дробной диффузии подчинены степенному закону убывания, и их существование может заставить пересмотреть существующие ранее представления о безопасности, базирующиеся на представлениях об экспоненциальной скорости затухания.

Одним из наиболее интересных и практически важных вопросов, стоящих перед гидрогеологами в настоящее время, является вопрос об идентификации параметров дробной диффузии по результатам натуральных измерений. Тут существует достаточно много подходов, хотя ни один из них нельзя признать полностью удовлетворительным. Одна из причин этого, на наш взгляд, состоит в том, что существующие методики идентификации не получили должной обкатки на модельных данных, полученных в результате численного решения соответствующих уравнений. В последнем же обстоятельстве определенную роль играет недостаточная развитость численных методов решения уравнений дробной диффузии. Частично-му устранению существующего пробела и посвящена настоящая работа.

В настоящее время существует несколько определений производной дробного порядка. Одно из них определение дробной производной по Риману-Лиувиллю, идея которого заключается в обобщении формулы Коши для n -кратного интеграла

$$\int_a^x \int_a^{x_{n-1}} \dots \int_a^{x_1} \phi(x_0) dx_0 \dots dx_{n-1} = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-t)^{n-1} \phi(t) dt$$

на дробный порядок α . В настоящее время определение дробного интеграла согласно Риману-Лиувиллю представляется следующими выражениями:

$$I_{a+}^{\alpha} \phi(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} \phi(t) dt$$

$$I_{b-}^{\alpha} \phi(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b (t-x)^{\alpha-1} \phi(t) dt$$

где $\alpha > 0$. Первый из них называется левосторонним, а второй правосторонним. Эти интегралы определены на интегрируемых по Лебегу функциях на интервале $(a;b)$ и существуют почти всюду. Дробные интегралы Римана-Лиувилля удовлетворяют полугрупповому свойству:

$$I_{a+}^{\alpha} I_{a+}^{\beta} \phi = I_{a+}^{\alpha+\beta} \phi, \quad I_{b-}^{\alpha} I_{b-}^{\beta} \phi = I_{b-}^{\alpha+\beta} \phi, \quad \alpha > 0, \beta > 0.$$

Дробное дифференцирование вводится как операция обратная дробному интегрированию:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{a+}^{\alpha} \phi(x) = D^m I_{a+}^{m-\alpha} \phi(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_a^x \frac{\phi(t) dt}{(x-t)^{\alpha-m+1}} \\ D_{b-}^{\alpha} \phi(x) = (-1)^m D^m I_{b-}^{m-\alpha} \phi(x) = \frac{(-1)^m}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_x^b \frac{\phi(t) dt}{(t-x)^{\alpha-m+1}} \end{array} \right.$$

Дробные производные Римана-Лиувилля определены в классе функций $[\alpha] - 1$ раз абсолютно дифференцируемых на отрезке $[a;b]$ и существуют почти всюду.

Абсолютно другой подход использовали Грюнвальд и Летников. Они определили производную дробного порядка, обобщив формулу

$$f^{(n)}(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta_h^n f(x)}{h^n}$$

где $\Delta_h^n f(x)$ - конечная разность порядка n с шагом h , на случай нецелых n . В случае нецелых n конечная разность определяется следующим выражением:

$$\Delta_h^\alpha f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(x - kh)$$

где биномиальные коэффициенты определяются

$$\binom{\alpha}{k} = \frac{\alpha(\alpha-1)\dots(\alpha-k+1)}{k!} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\alpha-k+1)}$$

Таким образом, производная Грюнвальда-Летникова определяется выражением

$$f_{\pm}^{(\alpha)}(x) = \lim_{h \rightarrow +0} \frac{\Delta_{\pm h}^\alpha f(x)}{h^\alpha}$$

и существует для непрерывных функций. Отметим, что этот подход, предложенный давно Грюнвальдом и Летниковым, в последнее время вновь привлек к себе внимание с точки зрения удобства в приближенных вычислениях.

Особо стоит сказать об определении производных дробного порядка по Маршо

$$D_{\pm}^\alpha \phi(x) = -\frac{1}{\Gamma(-\alpha)A_l(\alpha)} \int_0^{\infty} \frac{\Delta_{\pm t}^l \phi(x)}{t^{1+\alpha}} dt, l > \alpha > 0$$

где

$$A_l(\alpha) = \sum_{k=0}^l (-1)^{k-1} \binom{l}{k} k^\alpha, \alpha > 0$$

Это определение более свойственно для производных на оси, т.к. дает большую свободу для функций на бесконечности по сравнению с определением Римана-Лиувилля. Вообще такие производные существуют на функциях $[\alpha]$ раз непрерывно дифференцируемых на оси и удовлетворяющих условию

$$\sup_{x \in R^1} |\phi(x)| < \infty \text{ и } |\phi^{(\lambda)}(x+h) - \phi^{(\lambda)}(x)| \leq A(x)h^\lambda, \lambda > \alpha - [\alpha]$$

Последнее определение производной дробного порядка, о котором мы здесь упомянем, разработанное Г. Вейлем, приспособлено для периодических функций. Идеи, положенные в основу этого определения, сводятся к тому, чтобы операция дробного интегрирования переводила периодические функции

$$\phi(x) \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} \phi_k e^{ikx}, \quad \phi_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-ikx} \phi(x) dx$$

в периодические с тем же периодом

$$I_{\pm}^{(\alpha)} \phi \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{\phi_k}{(\pm ik)^\alpha} e^{ikx} \quad D_{\pm}^{\alpha} \phi \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} (\pm ik)^{\alpha} \phi_k e^{ikx}$$

На основании таких положений определение Вейля дробного интеграла сводится к следующему выражению:

$$I_{\pm}^{(\alpha)} \phi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \phi(x-t) \Psi_{\pm}^{\alpha}(t) dt$$

где

$$\Psi_{\pm}^{\alpha}(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikt}}{(\pm ik)^{\alpha}} = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos\left(kt \mp \frac{\alpha\pi}{2}\right)}{k^{\alpha}}$$

Операция дробного дифференцирования по Вейлю определяется как обратная к дробному интегрированию и сводится к выражению:

$$D_{\pm}^{\alpha} f = \pm \frac{d}{dx} I_{\pm}^{(1-\alpha)} f$$

которое можно было бы назвать дробной производной Вейля-Лиувилля в сравнении с выражением

$$D_{\pm}^{\alpha} f = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} [f(x-t) - f(x)] \frac{d}{dt} \Psi_{\pm}^{1-\alpha}(t) dt$$

которое можно было бы назвать в этом плане дробной производной Вейля-Маршо.

Эти два определения совпадают на функциях удовлетворяющих условию Гельдера порядка $\lambda > \alpha$ на отрезке $[0; 2\pi]$.

В заключении стоит сказать, что существует несколько определений дробной производной, полученных с различных точек зрения, имеющих разные области определения и вообще говоря не всегда совпадающих. В частности:

1. Производная Грюнвальда-Летникова совпадает с производной Маршо на функциях, измеримых на оси и удовлетворяющих условию $\int_{\mathbb{R}^1} |f(x)|^p dx < \infty$, где $1 \leq p < \infty$.
2. Дробная производная Вейля-Лиувилля совпадает с дробной производной Римана-Лиувилля, если $\int_0^{2\pi} f(t) dt = 0$.
3. Дробная производная Вейля-Маршо совпадает с дробной производной Маршо для 2π -периодических функций.
4. На функциях, представимых дробным интегралом Римана-Лиувилля $f = I_{a+}^{\alpha} \varphi$ от измеримой функции, удовлетворяющей условию $\int_a^b |f(x)| dx < \infty$, производная Римана-Лиувилля и производная Маршо совпадают.

В рамках данной работы будет рассмотрено численное решение уравнения дробной диффузии с точки зрения определения дробной производной по Вейлю и Грюнвальду-Летникову. В последующих работах предполагается изучение решения уравнения дробной диффузии с дробной производной определенной по Риману-Лиувиллю и Маршо.

1. Псевдодифференциальные операторы дробной диффузии и их численная реализация

Одной из перспективных математических моделей для описания переноса в сильно неоднородных средах является модель дробной диффузии, которую в случае одного пространственного измерения можно представить в виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -n \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + (1+b) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^a C}{\partial x^a} + (1-b) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^a C}{\partial (-x)^a}; \quad (1.1)$$

Здесь $C(x,t)$ - концентрация переносимой субстанции, v - скорость конвективного переноса, D - коэффициент дисперсии, $\alpha : (1 \leq \alpha \leq 2)$ - дробная степень оператора, $\beta : (|\beta| \leq 1)$ - коэффициент его кососимметричности.

При условии, что все коэффициенты, входящие в уравнение (1.1), постоянны, периодическое решение $C(x,t) = C(x + 2\pi, t)$ этого уравнения обычно ищется с помощью разложения в ряд Фурье:

$$C(x,t) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k(t) \cdot \exp(ikx) \quad (1.2)$$

Применение преобразования Фурье к каждому из членов, входящих в (1.1), дает:

$$\begin{aligned} F\left[\frac{\partial C}{\partial t}\right] &= \frac{d\hat{c}_k(t)}{dt}; & F\left[-v \cdot \frac{\partial C}{\partial x}\right] &= v \cdot (-ik) \cdot \hat{c}_k(t); \\ F\left[(1+\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha}\right] &= (1+\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot (-ik)^\alpha \cdot \hat{c}_k(t); & (1.3) \\ F\left[(1-\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha}\right] &= (1-\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot (ik)^\alpha \cdot \hat{c}_k(t); \end{aligned}$$

В результате находим:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{c}_k(t)}{dt} &= L \cdot \hat{c}_k(t); & \hat{c}_k(t) &= \hat{c}_k(t_0) \cdot \exp(Lt); \\ L &= v \cdot (-ik) + (1+\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot (-ik)^\alpha + (1-\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot (ik)^\alpha; & (1.4) \end{aligned}$$

Учитывая, что

$$\begin{aligned} (ik)^\alpha &= |k|^\alpha \cdot \exp(i\pi\alpha/2) = |k|^\alpha \cdot [\cos(\pi\alpha/2) + i \cdot \sin(\pi\alpha/2)] \\ (-ik)^\alpha &= |k|^\alpha \cdot \exp(-i\pi\alpha/2) = |k|^\alpha \cdot [\cos(\pi\alpha/2) - i \cdot \sin(\pi\alpha/2)] \end{aligned}$$

получаем:

$$\hat{c}(k,t) = \hat{c}(k,t_0) \cdot [\cos(\psi \cdot t) + i \cdot \sin(\psi \cdot t)] \cdot \exp(D \cdot |k|^\alpha \cos(\pi\alpha/2) \cdot t);$$

$$\psi = -D \cdot |k|^\alpha \cdot \beta \cdot \sin(\pi\alpha/2) + v \cdot k$$

При практической реализации процедуры (1.4) для нахождения решений уравнения (1.1) при различных начальных условиях естественно использовать алгоритм быстрого преобразования Фурье. Для этого область определения задачи удобно покрыть равномерной расчетной сеткой с числом расчетных узлов $N = 2^n$ и стандартными подпрограммами прямого и обратного преобразования.

Приведем некоторые примеры расчетов, описывающих временную эволюцию фундаментального решения уравнения (1.1) при $v = 0$, $D = 1$ и различных значениях параметров α и β . Начальное

сеточное распределение имеет вид сеточной дельта-функции $\delta_h(j_0 - j) = \begin{cases} 1/h & \text{if } (j = j_0) \\ 0 & \text{if } (j \neq j_0) \end{cases}$, где

$$h = 2\pi/(N-1); \quad j_0 = N/2.$$

На рис. 1 представлено точное решение уравнения (1.1) при $\alpha = 1.75$ на момент времени $t=0.21539$; кривая, представляющая set 1, соответствует $\beta = 1$, другая (set 2)- отвечает параметру $\beta = -1$.

Параметры решений, представленных на последующих графиках (рис.2 и рис.3), приведены на рисунках.

Следует отметить, что иногда могут возникать негативные вычислительные эффекты, связанные с известным эффектом Гиббса. Наиболее наглядно это проявляется в вырожденном случае $\alpha = 1$. Рассмотрим начальные данные в виде единичной ступеньки, покрывающей шесть расчетных ячеек в середине области. Пусть $N=64$ и $\beta = 1$. На рис. 4 приведены соответственно начальный профиль (set 1) и результат его временной эволюции (set 2).

Для того, чтобы избежать подобных негативных вычислительных эффектов при $\alpha \cong 1$, достаточно удобно использовать численный метод интегрирования уравнений (1.4) по двухслойной разностной схеме:

$$\frac{\hat{c}_k^{n+1} - \hat{c}_k^n}{\tau} = L \cdot [\sigma \cdot \hat{c}_k^{n+1} + (1 - \sigma) \cdot \hat{c}_k^n]; \quad \tau = t_{n+1} - t_n;$$

$$\hat{c}_k^{n+1} = \Lambda_k \cdot \hat{c}_k^n; \quad \Lambda_k = \left[\frac{1 + \tau \cdot (1 - \sigma) \cdot L}{1 - \tau \cdot \sigma \cdot L} \right] \quad (1.5)$$

Из условия устойчивости этой схемы $\max_k |\Lambda_k| \leq 1$ следует, что при значениях весового параметра $0.5 \leq \sigma \leq 1$, она будет устойчива при любых шагах τ . Конечность шага интегрирования по времени вносит в решение аппроксимационную вязкость, величина которой зависит от значений весового параметра σ и величины временного шага τ . На рис.5 и рис.6 приведено сравнение аналитического (set 1) и численного решения (set 2) при $\sigma = 1$.

Вычислительная процедура (1.5), также базирующаяся на использовании быстрого прямого и обратного преобразования Фурье может быть использована при решении неоднородного уравнения (1.1) с линейной правой частью, зависящей от времени:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - (1+\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} - (1-\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha} = Q(x, t) \quad (1.6)$$

В этом случае уравнения (1.5) несколько модифицируются и примут вид:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{c}_k^{n+1} - \hat{c}_k^n}{\tau} &= L \cdot [\sigma \cdot \hat{c}_k^{n+1} + (1-\sigma) \cdot \hat{c}_k^n] + 0.5 \cdot (\hat{q}_k^{n+1} + \hat{q}_k^n) \\ \hat{c}_k^{n+1} &= \Lambda_k \cdot \hat{c}_k^n + \frac{\tau}{2} \cdot \left[\frac{\hat{q}_k^{n+1} + \hat{q}_k^n}{1-\tau \cdot \sigma \cdot L} \right]; \quad \Lambda_k = \left[\frac{1 + \tau \cdot (1-\sigma) \cdot L}{1 - \tau \cdot \sigma \cdot L} \right] \end{aligned} \quad (1.7)$$

где величины \hat{q}_k^n представляют собой коэффициенты фурье-разложения функции источника $Q(x, t)$ на соответствующем временном слое.

1.1 Закон Фика для уравнений дробной диффузии

Уравнение «конвекции - диффузии», даже в случае дробных производных, представляет собой условие баланса и его естественно попытаться записать в потоковом виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} = 0; \quad W = v \cdot C - L_{\beta}^{\alpha-1} \cdot C \quad (1.8)$$

где оператор дробного дифференцирования $L_{\beta}^{\alpha-1}$ следует определить таким образом, чтобы было выполнено соотношение:

$$\frac{\partial L_{\beta}^{\alpha-1} \cdot C}{\partial x} = (1+\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} + (1-\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha} \quad (1.9)$$

Нетрудно видеть, что фурье-образ оператора $L_{\beta}^{\alpha-1}$ может быть получен из фурье-образа правой части выражения (1.9) посредством ее умножения на фурье-образ оператора интегрирования:

$$F\left[L_{\beta}^{\alpha-1} \cdot C\right] = \frac{1}{(ik)} \cdot F\left[(1+\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha} C}{\partial x^{\alpha}} + (1-\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha} C}{\partial (-x)^{\alpha}}\right]$$

Откуда находим:

$$F\left[L_{\beta}^{\alpha-1}\right] = -\frac{D \cdot |k|^{\alpha-1}}{2} \cdot \left\{ (1+\beta) \cdot \exp\left[i \cdot \pi \cdot (\alpha+1)/2\right] + (1-\beta) \cdot \exp\left[-i \cdot \pi \cdot (\alpha-1)/2\right] \right\} \quad (1.10)$$

Из последнего соотношения и вытекает аналог закона Фика для дробной диффузии (при $\nu = 0$):

$$W = -L_{\beta}^{\alpha-1} \cdot C = -\left[(1+\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha-1} C}{\partial x^{\alpha-1}} - (1-\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha-1} C}{\partial (-x)^{\alpha-1}} \right] \quad (1.11)$$

Проанализируем поведение потоков при дробной диффузии для рассмотренных ранее примеров. На рис.7 приведен график дробного потока при параметрах, соответствующих рис. 2 ($\alpha = 1.5$ и $\beta = 1$).

На рис.8 представлена величина $W^{classic} = -D \cdot \frac{\partial C}{\partial x}$, (set 2), полученная дифференцированием точного решения уравнения в дробных производных и приведено ее сравнение с истинной величиной дробного потока. На рис.9 приведен график дробного потока при параметрах, соответствующих рис. 3 ($\alpha = 1.1$ и $\beta = 1$). Рис. 10 дает сравнительные характеристики классического определения потока $W^{classic} = -D \cdot \frac{\partial C}{\partial x}$ и дробного потока на тот же момент времени.

Аналогичные расчеты при $\beta = -1$ приводят к значениям потоков, являющимся зеркальным отражением приведенных графиков относительно середины области. На рис. 11 приведен график дробного потока при нулевой кососимметричности ($\beta = 0$), на рис. 12 дано сравнение этого потока с законом Фика. На рис. 13 и 14 приведены графики концентрации и различных типов потоков на один и тот же момент времени при $\beta = 1$ и $\beta = 0$ соответственно. Величины классических потоков $W^{classic}$ находились сеточным дифференцированием соответствующих аналитических решений, спроектированных в узлы расчетной сетки по формулам второго порядка точности:

$$\left(W^{classic}\right)_j = -D \cdot \frac{C_{j+1} - C_{j-1}}{2h}$$

Отличия в дробном и классическом потоках особенно наглядно проявляются на рис.15,16. По горизонтальной оси здесь отложены значения дробных потоков, по вертикальной – соответствующие им по-

токи Фика. Хорошо видно, что при $\beta = 1$ существует обширная область во втором квадранте, где эти потоки направлены в противоположные стороны. Возможность существования потоков, направленных в сторону градиентов функции концентрации, является одним из важных отличительных признаков дробной диффузии.

1. 2 Двумерные уравнения дробной диффузии и метод быстрого преобразования Фурье для их численного решения

В качестве обобщения уравнения (1.1) рассмотрим псевдодифференциальное двумерное уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = & (1 + \beta_x) \cdot \frac{D_x}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha_x} C}{\partial x^{\alpha_x}} + (1 - \beta_x) \cdot \frac{D_x}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha_x} C}{\partial (-x)^{\alpha_x}} + \\ & + (1 + \beta_y) \cdot \frac{D_y}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha_y} C}{\partial y^{\alpha_y}} + (1 - \beta_y) \cdot \frac{D_y}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha_y} C}{\partial (-y)^{\alpha_y}} \end{aligned} \quad (1.12)$$

где величины $u, v, D_x, D_y, \beta_x, \beta_y, \alpha_x, \alpha_y$ представляют собой константы, такие, что:

$$D_x > 0, D_y > 0; \beta_x \in [-1, 1]; \beta_y \in [-1, 1]; \alpha_x \in [1, 2]; \alpha_y \in [1, 2]$$

Будем искать периодическое решение уравнения (1.12) в квадратной области D2: $\{x \in [0, 2\pi]; y \in [0, 2\pi]\}$ в виде двух последовательных разложений в ряды Фурье. Вначале положим:

$$C(x, y, t) = \sum_{k_x=0}^{\infty} a(k_x, y, t) \cdot \exp(-i \cdot k_x \cdot x) \quad (1.13)$$

Подставляя (1.13) в (1.12) находим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} + u \cdot (-i \cdot k_x) \cdot a + v \cdot \frac{\partial a}{\partial y} = & \left[(1 + \beta_x) \cdot (-i \cdot k_x)^{\alpha_x} + (1 - \beta_x) \cdot (i \cdot k_x)^{\alpha_x} \right] \cdot \frac{D_x}{2} \cdot a + \\ & + (1 + \beta_y) \cdot \frac{D_y}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha_y} a}{\partial y^{\alpha_y}} + (1 - \beta_y) \cdot \frac{D_y}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha_y} a}{\partial (-y)^{\alpha_y}} \end{aligned} \quad (1.14)$$

Последующее представление

$$a(k_x, y, t) = \sum_{k_y=0}^{\infty} b(k_x, k_y, t) \cdot \exp(-i \cdot k_y \cdot y) \quad (1.15)$$

приводит к окончательному виду (1.12) в пространстве волновых векторов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial b}{\partial t} + u \cdot (-i \cdot k_x) \cdot b + v \cdot (-i \cdot k_y) \cdot b = & \left[(1 + \beta_x) \cdot (-i \cdot k_x)^{\alpha_x} + (1 - \beta_x) \cdot (i \cdot k_x)^{\alpha_x} \right] \cdot \frac{D_x}{2} \cdot b + \\ & + \left[(1 + \beta_y) \cdot (-i \cdot k_y)^{\alpha_y} + (1 - \beta_y) \cdot (i \cdot k_y)^{\alpha_y} \right] \cdot \frac{D_y}{2} \cdot b \end{aligned} \quad (1.16)$$

что можно представить в более компактном операторном виде

$$\frac{\partial b}{\partial t} = -L \cdot b$$

где

$$\begin{aligned} L = u \cdot (-i \cdot k_x) + v \cdot (-i \cdot k_y) - & \left[(1 + \beta_x) \cdot (-i \cdot k_x)^{\alpha_x} + (1 - \beta_x) \cdot (i \cdot k_x)^{\alpha_x} \right] \cdot \frac{D_x}{2} - \\ & - \left[(1 + \beta_y) \cdot (-i \cdot k_y)^{\alpha_y} + (1 - \beta_y) \cdot (i \cdot k_y)^{\alpha_y} \right] \cdot \frac{D_y}{2} \end{aligned} \quad (1.18)$$

Для численного решения уравнения (1.17), (1.18), как и в одномерном случае, покроем область D2 равномерной расчетной сеткой с шагом $h_x = h_y = 2\pi / (N - 1)$; $N = 2^n$ и ограничимся конечным числом членов разложений Фурье, отвечающих заданной расчетной сетке. Используя стандартный одномерный алгоритм быстрого преобразования Фурье по каждому из двух пространственных направлений, находим приближенное аналитическое решение уравнения (1.12):

$$\begin{aligned} b_{l,m}(t) &= b_{l,m}(t_0) \cdot \exp(-L_{l,m} \cdot t) \\ L_{l,m} &= u \cdot (-i \cdot l) + v \cdot (-i \cdot m) - \left[(1 + \beta_x) \cdot (-i \cdot l)^{\alpha_x} + (1 - \beta_x) \cdot (i \cdot l)^{\alpha_x} \right] \cdot \frac{D_x}{2} - \\ & - \left[(1 + \beta_y) \cdot (-i \cdot m)^{\alpha_y} + (1 - \beta_y) \cdot (i \cdot m)^{\alpha_y} \right] \cdot \frac{D_y}{2} \\ C_{n,j}(t) &= \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} b_{l,m}(t) \cdot \exp[-i \cdot l \cdot (n-1)h] \cdot \exp[-i \cdot m \cdot (j-1)h] \end{aligned} \quad (1.19)$$

Программа для реализации этого алгоритма была написана на языке ФОРТРАН – 90. В качестве базовой использовались стандартные программы - функции прямого и обратного быстрого преобразования Фурье действительной функции DFFTRF/DFFTRB.

В качестве примера рассмотрим задачу о сосредоточенном точечном источнике единичной мощности (сеточной дельта – функции), расположенном в середине области. Во всех приведенных далее

расчетах скорость адвективного переноса полагается равной нулю ($u = v = 0$). На рис. 17,18 для одного и того же момента времени приведены графики концентрации при $\alpha_x = \alpha_y = 2$; $\beta_x = \beta_y = 0$. Рис. 17 отвечает случаю изотропной диффузии ($D_x = D_y = 1$), рис. 18 – анизотропной Гауссовой диффузии с параметрами $D_x = 1$; $D_y = 0.1$.

На рис. 19 – 20 изображены концентрации при параметрах $D_x = D_y = 1$; $\beta_x = \beta_y = 0$; $\alpha_x = 2$, $\alpha_y = 1.1$ и $D_x = 1$; $D_y = 0.1$; $\beta_x = \beta_y = 0$; $\alpha_x = 1.1$, $\alpha_y = 2$ соответственно на момент времени $T=0.12334$. На рис. 21-22 представлены профили концентрации при анизотропии коэффициентов дисперсии и параметра α , отвечающей случаю $D_x = 1$; $D_y = 0.1$; $\beta_x = \beta_y = 0$; $\alpha_x = 1.1$, $\alpha_y = 2$, на последующие моменты времени. Рис. 23-24 дают наглядное представление о дрейфе концентрации при наличии кососметричности дробного диффузионного процесса: $D_x = D_y = 1$; $\beta_x = \beta_y = 1/\sqrt{2}$; $\alpha_x = 1.2$, $\alpha_y = 1.2$. Рис. 25-26 представляют динамику линий уровня концентрации в этом процессе.

2. Разностные схемы для уравнений дробной диффузии

При описании процесса дробной диффузии на конечном отрезке прямой $x \in [a, b]$ при отсутствии условия периодичности будем, как и ранее, использовать символическую запись (1.1), где под соответствующими операторами дробного дифференцирования будем понимать их представление в форме

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot \int_a^x \frac{C(\xi)}{(x-\xi)^{\alpha-1}} d\xi; & (1 < \alpha \leq 2) \\ \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha} &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot \int_b^x \frac{C(\xi)}{(\xi-x)^{\alpha-1}} d\xi \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \cdot \int_a^x \frac{C(\xi)}{(x-\xi)^\alpha} d\xi; \\ \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha} &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \cdot \int_b^x \frac{C(\xi)}{(\xi-x)^\alpha} d\xi; \end{aligned} \quad (0 < \alpha \leq 1) \quad (2.1')$$

Для численного решения уравнения (1.1) с представлением (2.1) отрезок $[a, b]$ покроем равномерной расчетной сеткой с шагом $h = (b-a)/(N-1)$, где N - полное число узлов расчетной сетки, включая граничные. На введенной расчетной сетке аппроксимируем соотношения (2.1) разностными производными Грюнвальда – Летникова [8]:

$$\frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha}(x_i, t) = \left\{ \frac{\Delta^\alpha C}{\Delta x^\alpha} \right\}_i + O(h) ; \quad \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha}(x_i, t) = \left\{ \frac{\Delta^\alpha C}{(-\Delta x)^\alpha} \right\}_i + O(h) ; \quad (2.2)$$

где

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\Delta^\alpha C}{\Delta x^\alpha} \right\}_i &= \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{[(x-a)/h]} \theta_k \cdot C(x_i - k \cdot h, t) ; \quad \theta_k = (-1)^k \binom{\alpha}{k} ; \\ \left\{ \frac{\Delta^\alpha C}{(-\Delta x)^\alpha} \right\}_i &= \frac{(-1)^n}{h^\alpha} \cdot \sum_{k=0}^{[(b-x)/h]} \theta_k \cdot C(x_i + k \cdot h, t) ; \end{aligned} \quad (2.3)$$

здесь n - ближайшее сверху к параметру α целое число, а θ_k представляют собой биномиальные коэффициенты, связанные рекуррентным соотношением:

$$\theta_{k+1} = -\frac{\theta_k \cdot (\alpha - k)}{k + 1} ; \quad \theta_0 = 1 \quad (2.4)$$

Если ввести равномерную расчетную сетку по времени с шагом τ , то простейшую разностную аппроксимацию уравнения (1.1) можно записать в виде:

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} + \nu \cdot \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{h} = (1 + \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left\{ \frac{\Delta^\alpha C^n}{\Delta x^\alpha} \right\}_i + (1 - \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left\{ \frac{\Delta^\alpha C^n}{(-\Delta x)^\alpha} \right\}_i \quad (2.5)$$

где $\nu = const > 0$ и n - номер временного слоя.

Нетрудно видеть, что уравнение (2.5) аппроксимирует исходное уравнение (1.1), (2.1) со вторым порядком как по времени, так и по пространству. И это, пожалуй, единственное позитивное свойство схемы (2.5). Она совершенно не пригодна для практического использования по следующим причинам:

Схема (2.5) позволяет ставить краевые задачи только первого рода

Схема (2.5) неустойчива

Тем не менее, принимая схему (2.5) за основу, модифицируем ее таким образом, чтобы устранить указанные недостатки. Всюду в дальнейшем будем полагать $\nu = 0$, и концентрировать основное внимание на аппроксимации оператора дробной производной.

Представим схему (2.5) в потоковом виде:

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} = (1+\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left(\frac{{}^{+\alpha}F_{i+1/2}^n - {}^{+\alpha}F_{i-1/2}^n}{h} \right) + (1-\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left(\frac{{}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n - {}^{-\alpha}F_{i-1/2}^n}{h} \right) \quad (2.6)$$

где ${}^{+\alpha}F_{i+1/2}^n$, ${}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n$ представляют собой выражения для дробных потоков, подлежащие определению.

Используя представления (2.3), выпишем разностное выражение для дробной производной порядка $(\alpha - 1)$ в направлении возрастания координаты x

$$\left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1} C}{\Delta x^{\alpha-1}} \right\}_i = \frac{1}{h^{\alpha-1}} \sum_{k=0}^{[(x-a)/h]} \theta_k \cdot C(x_i - k \cdot h, t); \quad \theta_k = (-1)^k \binom{\alpha-1}{k}; \quad (1 < \alpha \leq 2) \quad (2.7)$$

Непосредственной проверкой, используя свойство (2.4), нетрудно убедиться в том, что имеет место соотношение:

$$\left\{ \frac{\Delta^{\alpha} C}{\Delta x^{\alpha}} \right\}_i = \frac{1}{h} \cdot \left(\left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1} C}{\Delta x^{\alpha-1}} \right\}_i - \left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1} C}{\Delta x^{\alpha-1}} \right\}_{i-1} \right) \quad (2.8)$$

Аналогичным свойством обладают и дробные производные в отрицательном направлении:

$$\left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1} C}{(-\Delta x)^{\alpha-1}} \right\}_i = -\frac{1}{h^{\alpha-1}} \sum_{k=0}^{[(b-x)/h]} \theta_k \cdot C(x_i + k \cdot h, t); \quad \theta_k = (-1)^k \binom{\alpha-1}{k}; \quad (1 < \alpha \leq 2) \quad (2.9)$$

$$\left\{ \frac{\Delta^{\alpha} C}{(-\Delta x)^{\alpha}} \right\}_i = -\frac{1}{h} \cdot \left(\left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1} C}{(-\Delta x)^{\alpha-1}} \right\}_i - \left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1} C}{(-\Delta x)^{\alpha-1}} \right\}_{i+1} \right)$$

В частном случае $\alpha = 2$ выражения (2.7), (2.8) примут вид:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\Delta^1 C}{\Delta x^1} \right\}_i &= \frac{C_i - C_{i-1}}{h} = \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x_{i-1/2}} + O(h^2); \\ \left\{ \frac{\Delta^2 C}{\Delta x^2} \right\}_i &= \frac{C_i - 2 \cdot C_{i-1} + C_{i-2}}{h^2} = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \Big|_{x_{i-1}} + O(h^2); \end{aligned} \quad (2.10)$$

Из (2.10) видно, что точка, в которой достигается максимальный порядок аппроксимации первой и второй производных сдвинута влево относительно расчетного узла с номером i на половину ячейки и на целую ячейку соответственно.

Соотношения (2.9) при $\alpha = 2$ также упростятся:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\Delta^1 C}{(-\Delta x)^1} \right\}_i &= -\frac{C_i - C_{i+1}}{h} = \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x_{i+1/2}} + O(h^2); \\ \left\{ \frac{\Delta^2 C}{(-\Delta x)^2} \right\}_i &= -\frac{1}{h} \cdot \left(\left\{ \frac{\Delta^1 C}{(-\Delta x)^1} \right\}_i - \left\{ \frac{\Delta^1 C}{(-\Delta x)^1} \right\}_{i+1} \right) = \\ &= \frac{C_i - 2 \cdot C_{i+1} + C_{i+2}}{h^2} = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \Big|_{x_{i+1}} + O(h^2); \end{aligned} \quad (2.11)$$

Здесь также имеет место сдвиг точки наилучшей аппроксимации на половину ячейки вправо для первой производной и на целую ячейку – для второй производной.

Если подставить эти выражения в схему (2.5), получим:

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} = \Lambda_i \cdot \bar{C}^n \quad (2.12)$$

где

$$\Lambda_i \cdot \bar{C}^n = \frac{D}{2 \cdot h^2} \left[2 \cdot C_i^n - 2 \cdot (1 + \beta) \cdot C_{i-1}^n - 2 \cdot (1 - \beta) \cdot C_{i+1}^n + (1 + \beta) \cdot C_{i-2}^n + (1 - \beta) \cdot C_{i+2}^n \right] \quad (2.13)$$

Спектральный анализ устойчивости схемы (2.12) с оператором (2.13) показывает, что схема неустойчива при любых параметрах D, h, τ, β . Для придания схеме (2.5) устойчивости, произведем сдвиги се-

точных операторов дробных производных в ее правой части соответственно на один узел вправо и один узел влево:

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} = (1+\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left\{ \frac{\Delta^\alpha C^n}{\Delta x^\alpha} \right\}_{i+1} + (1-\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left\{ \frac{\Delta^\alpha C^n}{(-\Delta x)^\alpha} \right\}_{i-1} \quad (2.14)$$

Уравнение (2.14) при $\alpha = 2$ сводится к сеточному уравнению (2.12) с оператором

$$\Lambda_i \cdot \vec{C}^n = D \cdot \frac{C_{i+1}^n - 2 \cdot C_i^n + C_{i-1}^n}{h^2}, \quad (2.15)$$

аппроксимирующему исходное дифференциальное уравнение с порядком $O(\tau, h^2)$ и устойчивым при условии

$$\frac{D \cdot \tau}{h^2} \leq \frac{1}{2} \quad (2.16)$$

Представляет интерес также и другой предельный случай, соответствующий $\alpha = 1$.

Разностная схема (2.6) сводится при этом к (2.12) с оператором

$$\Lambda_i \cdot \vec{C}^n = (1+\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left(\frac{C_{i+1}^n - C_i^n}{h} \right) + (1-\beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left(\frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{h} \right) \quad (2.17)$$

описывающим при $\beta = 1$ монотонную аппроксимацию конвективного переноса влево с эффективной скоростью $v = -D$, и при $\beta = -1$ – монотонную аппроксимацию конвективного переноса вправо со скоростью $v = D$. При $\beta = 0$ сеточный оператор (2.17) превращается в диссипативный оператор

$$\Lambda_i \cdot \vec{C}^n = h \cdot D \cdot \left(\frac{C_{i+1}^n - 2 \cdot C_i^n + C_{i-1}^n}{h^2} \right)$$

имеющий первый порядок малости относительно шага пространственной сетки h . Можно показать, что схема (2.12) с оператором (2.17) устойчива при условии

$$\frac{\tau \cdot D}{h} \leq \frac{1}{2} \quad (2.18)$$

Таким образом, в обоих предельных случаях, разностная схема (2.14) аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение с первым порядком точности и условно устойчивы. При выполнении условий устойчивости в соответствии с теоремой Лакса [9] численное решение сходится к решению дифференциальной задачи.

Теперь, если вернуться к потоковому представлению (2.6), то, принимая за основу (2.14) и учитывая свойства дробных производных (2.8), (2.9), находим:

$${}^{+\alpha}F_{i+1/2}^n = \left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1}C}{\Delta x^{\alpha-1}} \right\}_{i+1} ; \quad {}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n = \left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1}C}{(-\Delta x)^{\alpha-1}} \right\}_i ; \quad (1 < \alpha \leq 2) \quad (2.19)$$

Покажем, что независимо от конкретного вида этих потоков, разностная схема (2.6) допускает корректное задание граничных условий первого, второго и третьего рода.

Действительно, если в граничных точках заданы значения концентраций C_1^n, C_N^n (граничные условия первого рода), то все дробные потоки полностью определены и уравнение (2.6) дает возможность вычислить значения концентраций на новом временном слое для всех внутренних точек области.

Пусть, для определенности на левой границе отрезка, в качестве граничного условия задано значение потока W_1^n . Записывая с первым порядком аппроксимации уравнение баланса для левого крайнего узла, получаем:

$$\frac{C_1^{n+1} - C_1^n}{\tau} = (1 + \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left(\frac{{}^{+\alpha}F_{3/2}^n - W_1^n}{h/2} \right) + (1 - \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left(\frac{{}^{-\alpha}F_{3/2}^n - W_1^n}{h/2} \right) \quad (2.20)$$

Уравнение (2.20) замыкает систему уравнений (2.6),(2.19). При граничном условии третьего рода достаточно аппроксимировать его по времени соотношением

$$\mu \cdot W_1^n + \eta \cdot C_1^{n+1} = \gamma \quad (2.21)$$

что также приводит к корректному замыканию системы уравнений (2.20), (2.6),(2.19).

На правой границе отрезка учет граничных условий производится аналогичным образом.

2.1 Некоторые свойства разностных схем с дробными производными

2.1.1 Устойчивость явной разностной схемы

Для исследования свойств разностной схемы (2.6) при значениях параметров $(1 \leq \alpha \leq 2)$, $(-1 \leq \beta \leq 1)$

$$\begin{aligned} \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} &= (1 + \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \mathbf{L}_i \cdot \bar{C}^n + (1 - \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \mathbf{R}_i \cdot \bar{C}^n \\ \mathbf{L}_i \cdot \bar{C}^n &= \left\{ \frac{\Delta^\alpha C^n}{\Delta x^\alpha} \right\}_{i+1} = \frac{1}{h} \left({}^{+\alpha}F_{i+1/2}^n - {}^{+\alpha}F_{i-1/2}^n \right) ; \quad (1 \leq \alpha \leq 2) \\ \mathbf{R}_i \cdot \bar{C}^n &= \left\{ \frac{\Delta^\alpha C^n}{(-\Delta x)^\alpha} \right\}_{i-1} = \frac{1}{h} \left({}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n - {}^{-\alpha}F_{i-1/2}^n \right) ; \quad (-1 \leq \beta \leq 1) \end{aligned} \quad (2.22)$$

где

$$\begin{aligned} {}^{+\alpha}F_{i+1/2}^n &= \left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1} C}{\Delta x^{\alpha-1}} \right\}_{i+1} = \frac{1}{h^{\alpha-1}} \sum_{k=0}^{[(x-a)/h]} \lambda_k \cdot C(x_{i+1} - k \cdot h, t) ; \\ {}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n &= \left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1} C}{(-\Delta x)^{\alpha-1}} \right\}_i = -\frac{1}{h^{\alpha-1}} \cdot \sum_{k=0}^{[(b-x)/h]} \lambda_k \cdot C(x_i + k \cdot h, t) ; \end{aligned} \quad (2.23)$$

а коэффициенты $\lambda_k = (-1)^k \binom{\alpha-1}{k}$ подчиняются рекуррентному соотношению

$$\lambda_{k+1} = -\frac{\lambda_k \cdot (\alpha - k - 1)}{k + 1} ; \quad \lambda_0 = 1 \quad (2.24)$$

Проанализируем структуру операторов \mathbf{R} и \mathbf{L} .

Оператор \mathbf{R} представляет собой полностью заполненную при $\alpha \neq 1, 2$ правую верхнюю треугольную матрицу с единичными элементами из нижнего левого треугольника, прилегающими к главной диагонали:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{h^\alpha} \begin{pmatrix} \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \cdots & \cdots & \cdots & \theta_{N-3} & \theta_{N-2} & \theta_{N-1} & \theta_N \\ 1 & \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \cdots & \cdots & \cdots & \theta_{N-3} & \theta_{N-2} & \theta_{N-1} \\ 0 & 1 & \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \cdots & \cdots & \cdots & \theta_{N-3} & \theta_{N-2} \\ 0 & 0 & 1 & \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \cdots & \cdots & \cdots & \theta_{N-3} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \theta_4 & \theta_5 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 & \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \theta_4 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 1 & \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 1 & \theta_1 & \theta_2 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 1 & \theta_1 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

В соответствии с (2.4)

$$\theta_0 = 1; \theta_1 = -\alpha; \theta_2 = \alpha \cdot (\alpha - 1) / 2; \dots; \theta_k \geq 0; (1 \leq \alpha \leq 2)$$

т.е. все коэффициенты, кроме стоящих на главной диагонали, положительны.

Можно показать, что имеет место соотношение:

$$S_0 = \sum_{k=0}^{\infty} \theta_k = 0; \quad S_2 = \sum_{k=2}^{\infty} \theta_k = \alpha - 1; \quad S_2^M = \sum_{k=2}^M \theta_k < S_2 = \alpha - 1; \quad (2.26)$$

Из (2.26) вытекает ряд важных следствий относительно спектра μ оператора \mathbf{R} :

$$\mathbf{R} \cdot \vec{C} = \mu \cdot \vec{C} \quad (2.27)$$

Согласно теореме Гершгорина [10], собственные числа матрицы \mathbf{R} на комплексной плоскости лежат в объединении кругов, центры которых задаются элементами главной диагонали, а радиусы равны сумме модулей всех остальных элементов данной строки. Таким образом, из теоремы Гершгорина и (2.26) следует, что

$$\begin{aligned} Re(\mu) &\leq -\alpha + 1 + S_2^N < 0 \\ max|\mu| &\leq \frac{1}{h^\alpha} |-\alpha - 1 - S_2^N| < \frac{2 \cdot \alpha}{h^\alpha} \end{aligned} \quad (2.28)$$

т.е. весь спектр матрицы лежит в отрицательной полуплоскости и максимальное по модулю собственное число ограничено величиной $2\alpha/h^\alpha$.

Совершенно аналогичными свойствами обладает и левый нижний треугольный оператор \mathbf{L} :

$$\mathbf{L} = \frac{1}{h^\alpha} \begin{pmatrix} \theta_1 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ \theta_4 & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \theta_{N-4} & \theta_{N-5} & \cdots & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_{N-3} & \theta_{N-4} & \cdots & \cdots & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & 0 \\ \theta_{N-2} & \theta_{N-3} & \cdots & \cdots & \cdots & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 \\ \theta_{N-1} & \theta_{N-2} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 \\ \theta_N & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

Откуда следует, что все собственные числа составного оператора \mathbf{A} также лежат в отрицательной полуплоскости и ограничены по модулю величиной $2D\alpha/h^\alpha$, независимо от значения параметра β . Этого вполне достаточно, чтобы оценить область устойчивости явной разностной схемы (2.12). Действительно, из (2.12) находим

$$\|\bar{C}^{n+1}\| = |1 - \tau \cdot \max(|\mu|)| \cdot \|\bar{C}^n\| \quad (2.30)$$

откуда непосредственно и следует необходимое условие устойчивости: $|1 - \tau \cdot \max(|\mu|)| \leq 1$, приводящее к критерию устойчивости в форме:

$$\frac{\alpha D \tau}{h^\alpha} \leq 1 \quad (2.31)$$

Легко видеть, что в случае производных целого порядка критерий (2.31) совпадает с хорошо известными критериями устойчивости для операторов первой и вторых производных.

2.1.2 Нелокальность разностных операторов дробного дифференцирования

Значения коэффициентов θ_k при $k > 3$ достаточно быстро стремятся к нулю. Соответствующие законы убывания зависят от величины параметра α . На рис. 29 приведены зависимости от α первых

трех коэффициентов матрицы \mathbf{R} ($\theta_0 = 1$ (set 1) ; $\theta_1 = -\alpha$ (set 2) ; $\theta_3 = \alpha \cdot (\alpha - 1) / 2$ (set3)). На рис. 30 и 31 представлены соответствующие зависимости для последующих шести коэффициентов.

Быстрое убывание коэффициентов θ_k наводит на мысль о возможности замены значительной их части нулевыми значениями, что могло бы привести к существенным упрощениям вычислительных алгоритмов. Тестовые расчеты, однако, показывают, что такого рода упрощения могут приводить к качественно неверным результатам.

Прежде всего следует отметить, что механическое обнуление малых коэффициентов в матрицах \mathbf{R} и \mathbf{L} приведет к нарушению дивергентности разностных уравнений, которое будет выражаться в появлении аппроксимационных источников или стоков переносимой величины, полностью меняющих всю картину диффузионного переноса. И этот эффект будет весьма значительным. Чтобы сохранить свойство консервативности уравнений при уменьшении шаблона аппроксимации, следует вернуться к потоковой форме уравнений (2.6) и исследовать последствия отбрасывания малых коэффициентов в выражениях для соответствующих потоков. Для потока ${}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n$, например, мы имеем:

$${}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n = -\frac{1}{h^{\alpha-1}} \cdot \sum_{k=0}^{[(b-x)/h]} \lambda_k \cdot C(x_i + k \cdot h, t); \quad (2.32)$$

$$\lambda_0 = 1; \lambda_1 = -(\alpha - 1); \lambda_2 = (\alpha - 1) \cdot (\alpha - 2) / 2; \dots; \lambda_{k+1} = -\frac{\lambda_k \cdot (\alpha - k)}{k}$$

Из (2.32) видно, что все коэффициенты λ_k , начиная со второго, оказываются отрицательными. Можно показать, что аналогично (2.26), коэффициенты λ_k имеют следующее свойство:

$$Q_0 = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_k = 0; \quad Q_2 = \sum_{k=2}^{\infty} \lambda_k = \alpha - 2; \quad Q_2^M = \sum_{k=2}^M \lambda_k < Q_2 = \alpha - 2; \quad (2.33)$$

На рис.2.2 а), б) приведены значения первых шести коэффициентов λ_k как функции параметра α . На рис. 2.2. с) представлено поведение частичных сумм

$$Q_0^n = \sum_{k=0}^n \lambda_k = f(n, \alpha) \quad (2.34)$$

при $\alpha = 1.5$ и $\alpha = 1.1$ соответственно и ($1 \leq n \leq 100$). Видно, что для достижения соответствующими суммами близких к нулю значений, требуется количество расчетных узлов, превосходящее многие сотни. Простое отбрасывание малых коэффициентов приводит к фиксации значительного дисбаланса в сумме коэффициентов, что не может не сказаться на качественном поведении рассчитываемых функций хотя бы в области «тяжелых» хвостов.

Таким образом, одной из важнейших характеристик разностных представлений дробных производных в общем случае, является их нелокальность, т.е. неограниченность сеточного шаблона для их определения. Для того, чтобы вычислить дробный разностный оператор в какой либо точке расчетной области, требуется привлечение всех без исключения расчетных узлов этой сетки.

2.1.3 Частично неявные безусловно устойчивые схемы и способ их численного решения

Явные разностные схемы (2.6),(2.19) имеют ограниченную область устойчивости, определяемую неравенством (2.31). В некоторых случаях существующее ограничение на выбор максимально допустимой величины шага интегрирования по времени может оказаться излишне обременительным. Для того, чтобы снять, или существенно ослабить это ограничение, необходимо вводить определенную степень неявности. Простейшее однопараметрическое семейство неявных схем, обобщающее понятия явной схемы (2.12), имеет вид:

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} = \Lambda_i \cdot \left[\sigma \cdot \bar{C}^{n+1} + (1-\sigma) \cdot \bar{C}^n \right]; \quad \sigma \in [0,1] \quad (2.35)$$

Из общей теории операторно-разностных схем следует, что при $\sigma \geq 0.5$ схемы (2.35) безусловно устойчивы.

При численной реализации схем (2.35) возникает проблема численного решения линейной системы алгебраических уравнений с плотно заполненной матрицей. Как прямые, так и итерационные методы приводят к ресурсоемким алгоритмам. Для того, чтобы снизить требования на запрашиваемые вычислительные ресурсы, можно рассмотреть более экономичный попеременно – треугольный тип неявных разностных схем, основанный на идее расщепления по физическим процессам:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{C}^{n+1/2} - \bar{C}^n}{\tau/2} &= (1+\beta) \frac{D}{2} \cdot \mathbf{L} \cdot \bar{C}^{n+1/2} + (1-\beta) \frac{D}{2} \cdot \mathbf{R} \cdot \bar{C}^n \\ \frac{\bar{C}^{n+1} - \bar{C}^{n+1/2}}{\tau/2} &= (1+\beta) \frac{D}{2} \cdot \mathbf{L} \cdot \bar{C}^{n+1/2} + (1-\beta) \frac{D}{2} \cdot \mathbf{R} \cdot \bar{C}^{n+1} \end{aligned} \quad (2.36)$$

или еще более экономичный алгоритм суммарной аппроксимации [11]:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{C}^{n+1/2} - \bar{C}^n}{\tau} &= (1+\beta) \frac{D}{2} \cdot \mathbf{L} \cdot \bar{C}^{n+1/2} \\ \frac{\bar{C}^{n+1} - \bar{C}^{n+1/2}}{\tau} &= (1-\beta) \frac{D}{2} \cdot \mathbf{R} \cdot \bar{C}^{n+1} \end{aligned} \quad (2.37)$$

Вычислительная экономия здесь достигается за счет того, что на обращение почти треугольных левых и правых матриц \mathbf{L} и \mathbf{R} требуется значительно меньшее количество арифметических операций.

Не останавливаясь на этих хорошо известных приемах, рассмотрим смешанный неявно – явный алгоритм, наиболее полно учитывающий специфику дробных производных.

Возьмем за основу явную потоковую схему (2.6) и модифицируем ее следующим образом:

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} = (1 + \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left(\frac{+{}^\alpha \tilde{F}_{i+1/2}^{n+1/2} - +{}^\alpha \tilde{F}_{i-1/2}^{n+1/2}}{h} \right) + (1 - \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left(\frac{-{}^\alpha \tilde{F}_{i+1/2}^{n+1/2} - -{}^\alpha \tilde{F}_{i-1/2}^{n+1/2}}{h} \right) \quad (2.38)$$

где

$$\begin{aligned} +{}^\alpha \tilde{F}_{i+1/2}^{n+1/2} &= \frac{C_{i+1}^{n+1} - (\alpha - 1) \cdot C_i^{n+1}}{h^{\alpha-1}} + (Lrest)_{i+1/2}^n; \\ -{}^\alpha \tilde{F}_{i+1/2}^{n+1/2} &= -\frac{C_i^{n+1} - (\alpha - 1) \cdot C_{i+1}^{n+1}}{h^{\alpha-1}} - (Rrest)_{i+1/2}^n; \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$(Lrest)_{i+1/2}^n = \frac{1}{h^{\alpha-1}} \sum_{k=2}^{[(x-a)/h]} \lambda_k \cdot C_{i-k}^n; \quad (Rrest)_{i+1/2}^n = \frac{-1}{h^{\alpha-1}} \cdot \sum_{k=2}^{[(b-x)/h]} \lambda_k \cdot C_{i+k}^n;$$

Уравнение (2.38) в этом случае сводится к досконально изученному уравнению с трех диагональной матрицей

$$\begin{aligned} \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} &= (1 + \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left(\frac{C_{i+1}^{n+1} - \alpha \cdot C_i^{n+1} + (\alpha - 1) \cdot C_{i-1}^{n+1}}{h^\alpha} \right) + \\ &+ (1 - \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left(\frac{(\alpha - 1) \cdot C_{i+1}^{n+1} - \alpha \cdot C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{h^\alpha} \right) + Q_i^n \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} Q_i^n &= \frac{1}{h} \cdot (1 + \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left[(Lrest)_{i+1/2}^n - (Lrest)_{i-1/2}^n \right] + \\ &+ \frac{1}{h} \cdot (1 - \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \left[(Rrest)_{i+1/2}^n - (Rrest)_{i-1/2}^n \right] \end{aligned}$$

которое решается экономичным методом трех точечной прогонки.

2.1.4 Сравнение различных численных методов

Как уже упоминалось, все приведенные выше разностные схемы свободны от условия периодичности, которое неизбежно накладывается при поиске решения с помощью разложения в ряд Фурье. Произведем сравнение результатов, полученных различными численными методами (явной разностной схемой (2.22), явно-неявной схемой (2.40) и методом Фурье) с точным решением. Такое решение в случае $\alpha = 2$ можно получить аналитически:

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{D\pi}} e^{-\frac{(x-\pi)^2}{4Dt}}, \quad C(x, t=0) = \delta(x - \pi).$$

Результаты сравнения представлены на рисунках 2.1 и 2.2. Видно, что все графики практически совпадают, и только метод Фурье с течением времени дает ожидаемое расхождение вблизи краев.

Тем не менее, для других значений α при тестировании разностных схем в качестве точного решения примем численный метод Фурье. Сравнение показывает (рисунки 2.3 – 2.5), что при стремлении параметра α к единице разностные алгоритмы «смазывают» график решения вдоль оси координат. Частично проблему удастся решить, если уменьшить шаг расчетной сетки (или увеличить число ее узлов). Это наглядно демонстрируют рисунки 2.6 – 2.7.

И все же при значениях α , очень близких к единице, расхождение сохраняется. Это, пожалуй, является единственным недостатком представленных выше разностных схем. Причина кроется в том, что при стремлении параметра α к единице, исходное уравнение дробной диффузии (1.1) вырождается в обычное уравнение переноса, для которого неприменимы обычные разностные схемы, если в качестве начального условия при этом применяется сеточная дельта-функция. Тем не менее, данные разностные алгоритмы могут быть очень полезными, например, при исследовании различных видов эстиматоров, которые позволяют по известному распределению концентрации идентифицировать параметры дробной диффузии. Ниже будет приведен пример эстиматора, основанного на анализе асимптотического поведения решения. При этом конечно важны величины концентрации на краях.

Наконец, чисто эмпирически можно убедиться в том, что явная схема (2.22) действительно устойчива только при значениях τ , удовлетворяющих неравенству (2.31):

$$\tau \leq \frac{h^\alpha}{\alpha D}.$$

Неявная схема (2.40) сохраняет устойчивость и при τ , существенно (на порядки) превышающих этот предел. При этом, как видно из рисунков 2.1 – 2.7, графики решений, полученных с помощью этих разностных схем, практически совпадают.

Также следует отметить, что все приведенные выше разностные схемы – первого порядка аппроксимации. Разработка алгоритмов более высокой точности найдет отражение в последующих публикациях.

3. Нелинейная аппроксимация дробных потоков

Метод Фурье для численного решения уравнений дробной диффузии имеет определенные ограничения на область применимости. Так все коэффициенты, входящие в это уравнение, должны быть постоянными, а пространственная область должна иметь форму прямоугольника или параллелепипеда. Если эти требования не выполнены, то необходимо использовать другие подходы, в частности, переходить к разностным схемам. Непосредственное использование дробных разностных производных приводит к

нелокальным сеточным операторам, определенным на всем множестве узлов расчетной сетки. Бенсоном было высказано предложение об использовании для описания качественного поведения решений при дробной диффузии нелинейных локальных сеточных операторов, которые могут приводить к решениям, степенным образом спадающих на больших расстояниях от источника. В работе [7] им была предложена схема:

$$C_i^{t+\Delta t} - C_i^t = \frac{D_0 \cdot \Delta t}{\Delta x^\alpha} \cdot \left((C_{i+1}^t - C_i^t)^{\alpha-1} - (C_i^t - C_{i-1}^t)^{\alpha-1} \right) \quad (3.1)$$

и приведены некоторые соображения в ее обоснование.

Рассмотрим данное предложение, представляющееся нам весьма интересным, более подробно. Перепишем схему (3.1) в потоковом виде:

$$\begin{aligned} \frac{C_i^{t+\Delta t} - C_i^t}{\Delta t} &= - \left(\frac{W_{i+1/2}^t - W_{i-1/2}^t}{\Delta x} \right); \\ W_{i+1/2}^t &= -D \cdot \left(\frac{C_{i+1}^t - C_i^t}{\Delta x} \right); \quad D = D_0 \cdot \left(\frac{C_{i+1}^t - C_i^t}{\Delta x} \right)^{\alpha-2} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Разностная схема (3.1), (3.2) является явной и условие ее устойчивости имеет вид

$$\frac{D \cdot \Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2} \quad (3.3)$$

Поскольку эффективный коэффициент дисперсии D стремится к бесконечности при стремлении градиента концентрации к нулю, схему (3.1) нельзя использовать при наличии в области решения задачи нулевых градиентов, в частности задачи о диффузии концентрации из точечного источника. Для того чтобы снять это очень сильное ограничение на класс решаемых задач, используем следующую процедуру. Вначале перейдем от схемы (3.1), (3.2) к дифференциальной постановке задачи устремляя пространственные и временные шаги расчетной сетки к нулю: $\Delta t \rightarrow 0$, $\Delta x \rightarrow 0$. Это приводит нас к нелинейному уравнению параболического типа с эффективным коэффициентом дисперсии D , зависящим от отрицательной степени градиента решения.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} = 0; \quad W = -D \frac{\partial C}{\partial x}; \quad D = \frac{D_0}{(\partial C / \partial x)^{(2-\alpha)}}; \quad (3.4)$$

Авторам данного отчета не известны какие либо работы, посвященные систематическому изучению параболических уравнений с таким типом нелинейности. Будем в дальнейшем называть уравнение (3.4) уравнением Бенсона.

Как уже отмечалось ранее, уравнение Бенсона вырождается в точках области с равным нулю градиентом концентрации, к которым, в частности, относятся точки локальных экстремумов решения. Это предъявляет особые требования к методам численного решения этого уравнения. Рассмотрим один из таких методов.

Аппроксимируем уравнение Бенсона однопараметрическим семейством потоковых разностных схем:

$$\begin{aligned} \frac{C_{i+1/2}^{n+1} - C_{i+1/2}^n}{\tau} + \sigma \cdot \frac{W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}}{h} + (1-\sigma) \cdot \frac{W_{i+1}^n - W_i^n}{h} &= 0; \\ W^{n+1} = -D_0 \cdot \left(\frac{C_{i+1/2}^{n+1} - C_{i-1/2}^{n+1}}{h} \right)^{\alpha-1} \end{aligned} \quad (3.5)$$

где $\sigma \in [0,1]$ - весовой параметр. Здесь и всюду в дальнейшем используются следующие обозначения: $\tau = \Delta t$ - временной шаг расчетной сетки, $h = \Delta x$ - пространственный шаг расчетной сетки, n - номер временного слоя.

Нетрудно видеть, что схема (2.5) аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение (3.4) с порядком $O(h^2 + \tau^2 + (\sigma - 0.5) \cdot \tau)$, т.е. при $\sigma = 0.5$ она обладает вторым порядком аппроксимации.

При $\sigma = 0$ схема совпадает со схемой Бенсона (3.1), при $\sigma \neq 0$ она является неявной и для ее решения необходимо использовать итерационные методы. Преобразуем уравнения (3.5) к виду:

$$\begin{aligned} \frac{C_{i+1/2}^{n+1} - C_{i+1/2}^n}{\tau} + \sigma \cdot \frac{W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}}{h} + (1-\sigma) \cdot \frac{W_{i+1}^n - W_i^n}{h} &= 0; \\ (W^{n+1})^\gamma = -(D_0)^\gamma \cdot \frac{C_{i+1/2}^{n+1} - C_{i-1/2}^{n+1}}{h}; \quad \gamma = \left(\frac{1}{\alpha-1} \right); \end{aligned} \quad (3.6)$$

и сведем его к одному уравнению относительно неизвестных потоков:

$$\begin{aligned} (W^{n+1})^\gamma &= \frac{\sigma \cdot \tau}{h^2} \cdot (W_{i+1}^{n+1} - 2 \cdot W_i^{n+1} + W_{i-1}^{n+1}) + Q; \\ Q &= -\frac{C_{i+1/2}^n - C_{i-1/2}^n}{h} + \frac{(1-\sigma) \cdot \tau}{h^2} \cdot (W_{i+1}^n - 2 \cdot W_i^n + W_{i-1}^n); \end{aligned} \quad (3.7)$$

Пусть s - итерационный параметр, такой что:

$$\begin{aligned} \hat{W}_i^s &= W_i^n \quad \text{if} \quad s = 0; \quad \hat{W}_i^{s+1} = \hat{W}_i^s + \delta \hat{W}_i^{s+1}; \\ W_i^{n+1} &= \hat{W}_i^{s+1} \quad \text{if} \quad \left| \delta \hat{W}_i^{s+1} \right| \leq \varepsilon; \quad s \rightarrow \infty; \end{aligned} \quad (3.8)$$

Подставляя это представление в (3.7) и раскладывая нелинейный член в ряд Тейлора до второго порядка малости, приходим к итерационному алгоритму Ньютона:

$$\begin{aligned} \eta \cdot \delta \hat{W}_i^{s+1} &= \frac{\sigma \cdot \tau}{h^2} \cdot (\delta \hat{W}_{i+1}^{s+1} - 2 \cdot \delta \hat{W}_i^{s+1} + \delta \hat{W}_{i-1}^{s+1}) + R_i ; \\ \eta &= \frac{\gamma}{D_0} \cdot \left[\frac{W^s}{D_0} \right]^{\gamma-1} ; R_i = Q_i + \frac{\sigma \cdot \tau}{h^2} \cdot (\hat{W}_{i+1}^s - 2 \cdot \hat{W}_i^s + \hat{W}_{i-1}^s) - \left(\frac{W^s}{D_0} \right)^\gamma ; \end{aligned} \quad (3.9)$$

Система разностных уравнений (3.9) на каждой итерации решается хорошо известным методом прогонки.

Хорошо известно, что в линейном случае (при $\alpha = 2$) уравнения (3.6) при $\sigma \geq 0.5$ являются безусловно устойчивыми. Известны теоретические результаты, распространяющие это утверждение и на квазилинейные уравнения при различных типах нелинейности, отличных от нашего случая. Многочисленные численные расчеты, проведенные по описываемой методике, подтвердили безусловную устойчивость схемы (3.6) при $\sigma \geq 0.5$ и $1.05 \leq \alpha \leq 2$. Итерационная процедура Ньютона также оказывается сходящейся в широком диапазоне параметров, представляющих практический интерес.

Для задачи о диффузии точечного источника, рассмотренной в предыдущем разделе, в качестве начального условия возьмем сеточную дельта-функцию, а граничные условия, соответствующие требованию периодичности решения, имеют вид:

$$W_1^n = W_N^n = 0 \quad (3.10)$$

для всех n .

Расчеты по описанной методике, проведенные для случая гауссовой диффузии ($\alpha = 2$) показали хорошее совпадение с аналитическим решением. На рис. 40-45 приведено сравнение решений уравнения дробной диффузии и уравнения Бенсона при различных параметрах α и $\beta = 0$. Видно, что на небольших временах, когда влияние границ области еще не сказывается, решения уравнения Бенсона качественно правильно описывают поведение решений при дробной диффузии. Имеющиеся количественные различия нарастают по мере уменьшения параметра α . Вероятно, их можно как-то скомпенсировать введением в выражение для нелинейного потока безразмерного множителя, зависящего от α :

$$W = -D' \frac{\partial C}{\partial x}; D' = f(\alpha) \cdot \frac{D_0}{(\partial C / \partial x)^{(2-\alpha)}}; \quad (3.11)$$

Поиск функции $f(\alpha)$ может составить предмет дополнительного исследования. Обращает на себя внимание возникновение и развитие плоского участка в точке экстремума функции концентрации. Это является прямым следствием обратной зависимости нелинейного коэффициента дисперсии от градиента и данный эффект вряд ли можно чем либо скомпенсировать в рамках принятой модели.

4. Идентификация параметров дробной диффузии

Один из основных вопросов теории дробной диффузии состоит в идентификации параметров основных уравнений по результатам распределения концентраций и ее динамике [12]. В настоящей работе мы остановимся только на простейших типах эstimаторов и проанализируем их применимость и чувствительность к неопределенностям на модельных данных, полученных в результате численного решения соответствующих уравнений в случае одного и двух пространственных измерений.

В одномерном случае для задачи об источнике в виде сеточной дельта-функции имеет место соотношение:

$$\frac{d(\ln[\max C(t)])}{d(\ln t)} = -\frac{1}{\alpha} \quad (4.1)$$

В двумерном случае при различных (анизотропных) показателях α_x и α_y аналогичное соотношение принимает вид:

$$\frac{d(\ln[\max C(t)])}{d(\ln t)} = -\left(\frac{1}{\alpha_x} + \frac{1}{\alpha_y}\right) \quad (4.2)$$

Расчеты показывают, что эstimаторы (4.1), (4.2) дают весьма точные результаты даже на относительно грубых расчетных сетках. На рис. 48 представлен характер сходимости к решению при $\beta = 0$ и различных показателях α . По оси абсцисс здесь отложены величины, пропорциональные номеру расчетного шага. Видно, что точность вычисления со временем возрастает, пока не начинают сказываться условия периодичности. На рис. 49 приведены аналогичные расчеты для двумерного случая при $\beta_x = \beta_y = 0$.

Недостатком эstimатора (4.2) является невозможность определения параметров α_x и α_y в отдельности. Характер сходимости к решению для произвольных значений β (не равных нулю) в одномерном случае представлен на рис. 46

При тестировании приведенных выше эstimаторов за основу было взято распределение, полученное численно с помощью преобразования Фурье. Теперь внесем в него некоторую ошибку, характеризуемую параметром σ :

$$C_i = C_i^{fourier} + \xi_i C_i^{fourier} \sigma,$$

где $\xi_i \propto N(0,1)$ – случайная величина, имеющая стандартное нормальное распределение. Модифицированные таким образом значения концентраций более точно отражают распределения, имеющие место в экспериментальных данных. Результаты исследования влияния ошибок на устойчивость эstimатора (4.1) представлены на рис. 47. Здесь изображены зависимости $\ln(C_{\max})$ от $\ln(t)$ при различных параметрах α , β и σ . Но, в отличие от рис. 4.1 – 4.3, значение α определяется не численным дифференцированием (4.1), а по наклону прямых методом наименьших квадратов.

$$\alpha = -\frac{1}{k}, \quad \text{где } k \text{ – наклон прямой.}$$

Видно, что данный эстиматор дает приемлемые результаты вплоть до значений σ , достигающих примерно 0.1.

Другой часто используемый тип эстиматоров базируется на различии в асимптотическом поведении решения при различных параметрах α . На расчетных сетках до 512 ячеек и даже более на задачах с периодическими граничными условиями не удается с достаточной точностью установить величину искомого параметра. Начальная фаза расчета, как это следует из приведенных выше графиков, выходит на аналитическое решение с некоторым запаздыванием по времени. На этих участках ошибка весьма велика. Затем начинают сказываться граничные эффекты. На рис. 50 представлены соответствующие графики в логарифмическом масштабе. Видно, что для корректного вычисления наклона этих графиков простой процедуры численного дифференцирования также недостаточно. Дальнейшее исследование данного типа эстиматоров будет предложено в последующих публикациях.

5. Заключение

Феноменологический подход к описанию процессов переноса в сильно неоднородных средах, основанный на использовании линейных интегро-дифференциальных уравнений достаточно общей структуры, в настоящее время представляется одним из наиболее перспективных. Частным случаем таких моделей являются модели дробной диффузии.

При феноменологическом интегродифференциальном подходе одним из ключевых вопросов является вопрос об идентификации параметров модели по данным натурных измерений. Для его решения, наряду с традиционными подходами, нами предпринимается попытка использовать искусственные нейронные сети. Для отработки методических вопросов, связанных с выбором подходящей архитектуры нейронных сетей и их последующим обучением, мы выбрали путь численного эмулирования последовательностей псевдореальных данных на основе численного решения соответствующих уравнений.

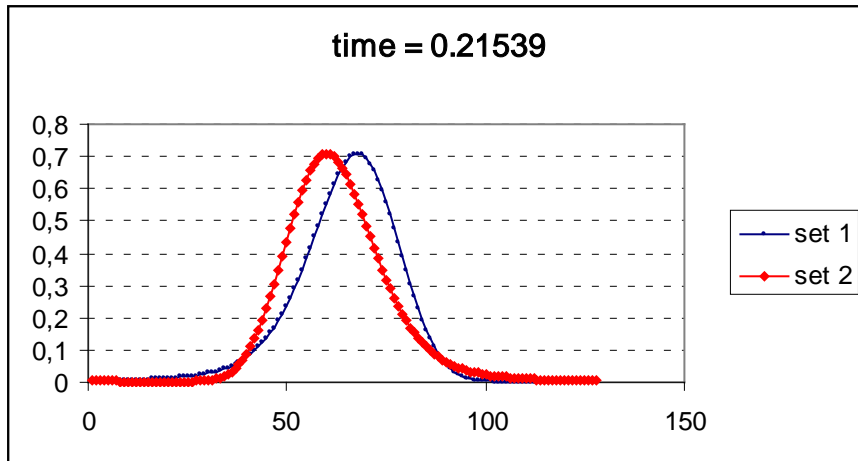
Для последовательной реализации такой программы необходимо провести более глубокий анализ различных возможностей, возникающих при попытках обобщения понятия дробных производных на многомерный случай. В представленном отчете рассмотрена наиболее простая из них. Более глубокого рассмотрения требуют также вопросы построения высокоэффективных вычислительных алгоритмов. Существующая теория таких алгоритмов пока что далека от завершения.

6. Список литературы

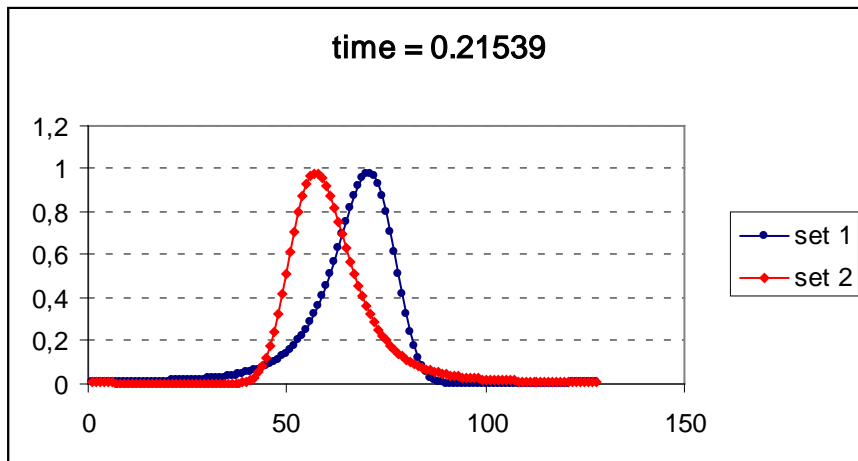
1. S.G. Samko, A.A. Kilbas and O.I. Marichev, Fractional Integrals and Derivatives, Theory and Applications (Gordon and Breach, Amsterdam, 1993)
2. Kai Diethelm, An Algorithm for Numerical Solution of Differential Equations of Fractional Order, Electronic Transaction on Numerical Analysis, Vol.5, pp.1-6, March 1997
3. Kai Diethelm and Alan D. Freed, The FracPECE Subroutine for the Numerical Solution of Differential Equation of Fractional Order
4. L. Blank, Numerical treatment of differential equations of fractional order, Numerical Analysis Report 287, Manchester Center for computational Mathematics, 1966
5. Rudolf Gorenflo and Francesco Mainardi, Essentials of Fractional Calculus, Preprint submitted to MaPhySto Center, preliminary version, 28 January 2000
6. Paolo Paradisi, Rita Cesari, Francesco Mainardi, Francesco Tamprieri: 2001, The fractional Fick's law for non-local transport processes, Physica A (2001) 130-142

7. David A. Benson, The Fractional Advection-Dispersion Equation: Development and Application. A dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy in Hydrogeology, 1998
8. A.V. Letnicov, Theory of differentiation with arbitrary index, Mat. Sb. 3 (1868) 1-66. In Russian.
9. P.D.Lax, R.D. Richtmyer. Survey of the stability of linear finite difference equations. Comm. Pure. Appl. Math. 9(1956) 267-293
10. F.R.Gantmacher, Theory of Matrix, 1973, Moscow (In Russian)
11. A.A. Samarskii, P.N. Vabischevich. Numerical methods for convection-diffusion problems (in Russian). Moscow, Editorial URSS, 1999, 248 p.
12. David A. Benson, Rina Schumer, Mark M. Meerschaert, and Stephen W Wheatcraft: 1999, Fractional Dispersion, Levy Motion, and MADE Tracer Tests
13. S.Haykin. Neural networks. A comprehensive foundation. Prentice Hall International Inc., 1999
14. G.Cybenko, Approximation by superpositions of a sigmoidal function. Mathematics of Control, Signals and Systems 2, 304-314, 1989
15. K.Hornik, M.Stinchcombem and H.White, Multilayer feedforward networks are universal approximators, Neural Networks 2 (5), 359-366.
16. C.M.Bishop, Neural Networks for Pattern Recognition, Clarendon Press, Oxford, 1995.
17. D.E.Rumelhart, G.E.Hinton, and R.J.Williams. Learning internal representations by error propagation. In D.E.Rumelhart, J.L.McClelland, and the PDP Research Group (Eds.), Parallel
18. Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition, Vol.1: Foundations, pp.318-362. Cambridge, MA: MIT Press.
19. A.A.Ezhov, S.A.Shumsky. Neurocomputing and its applications in economics and business. Moscow Engineering Physics Institute, 1999
20. D.S.Broomhead, D.Lowe. Multivariable functional interpolation and adaptive networks. Complex Systems 2, 321-355, 1988
21. B.Boser, I.Guyon and V.N.Vapnik. A training algorithm for optimal margin classifiers, Fifth Annual Workshop on Computational Learning Theory, pp.144-152. San Mateo, CA: Morgan Kaufmann.
22. С.Г. Самко, А.А. Килбас, О.И. Маричев “Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения”.

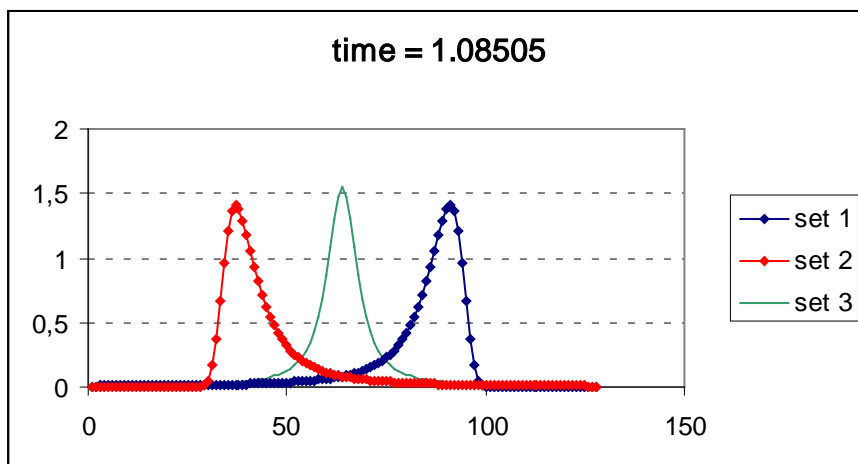
7. Приложение



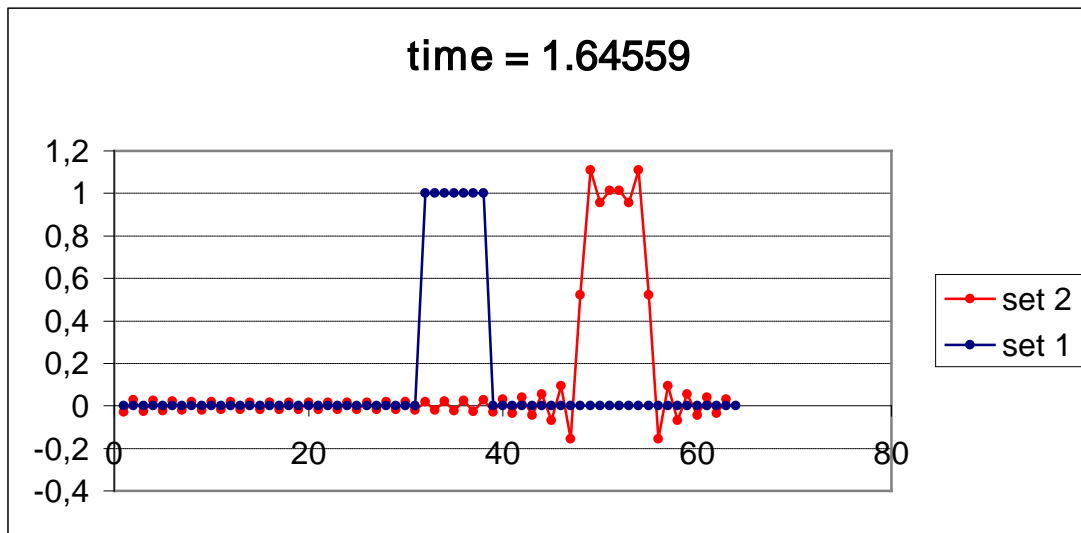
Puc. 1 ($\alpha = 1.75$, $\beta = 1$ (set 1), $\beta = -1$ (set 2))



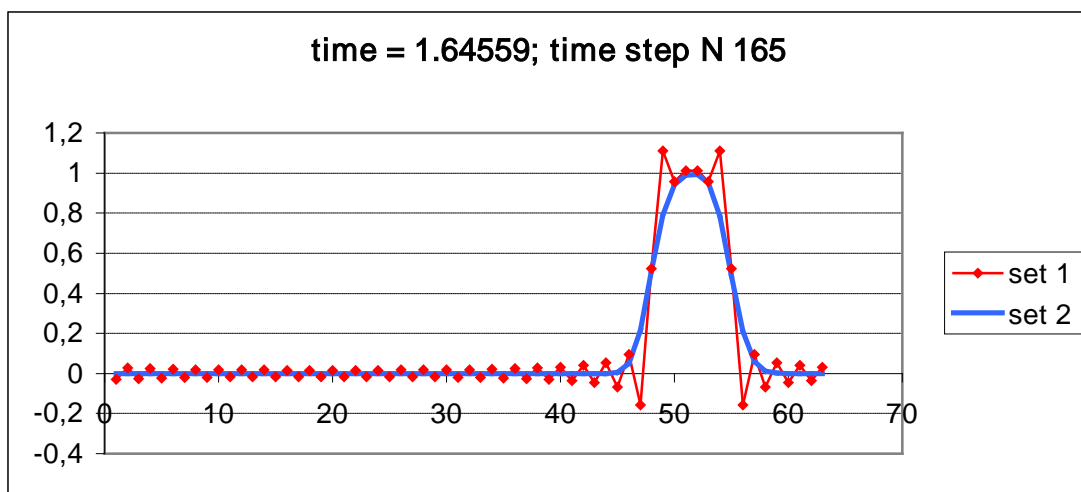
Puc. 2 ($\alpha = 1.5$, $\beta = 1$ (set 1), $\beta = -1$ (set 2))



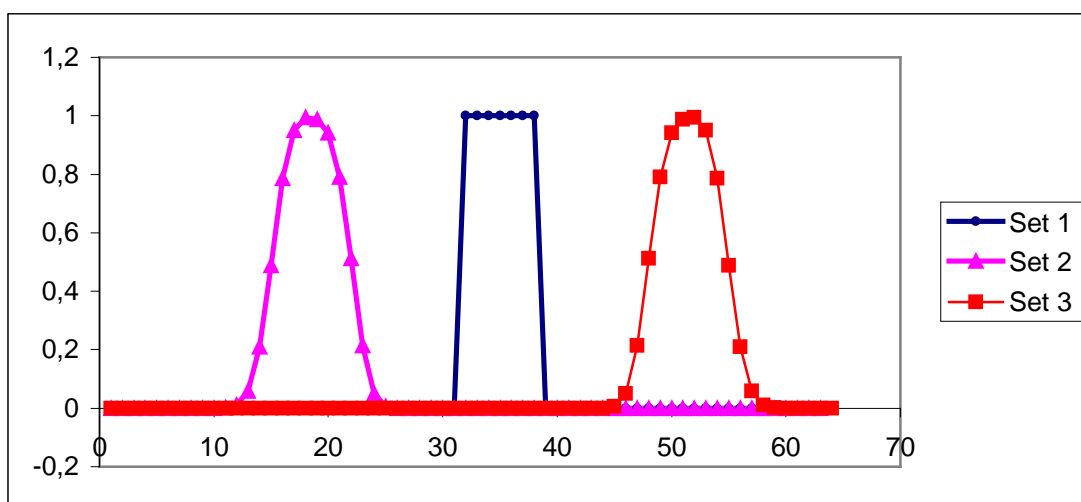
Puc. 3 ($\alpha = 1.1$, $\beta = 1$ (set 1), $\beta = -1$ (set 2), $\beta = 0$ (set 3))



Puc. 4 ($\alpha = 1.0, \beta = 1(\text{set } 1)$)



Puc. 5 ($\alpha = 1.0, \beta = 1(\text{set } 1)$)



Puc. 6 ($\alpha = 1.0, \beta = 0(\text{set } 1), \beta = -1(\text{set } 2), \beta = 1(\text{set } 3)$)

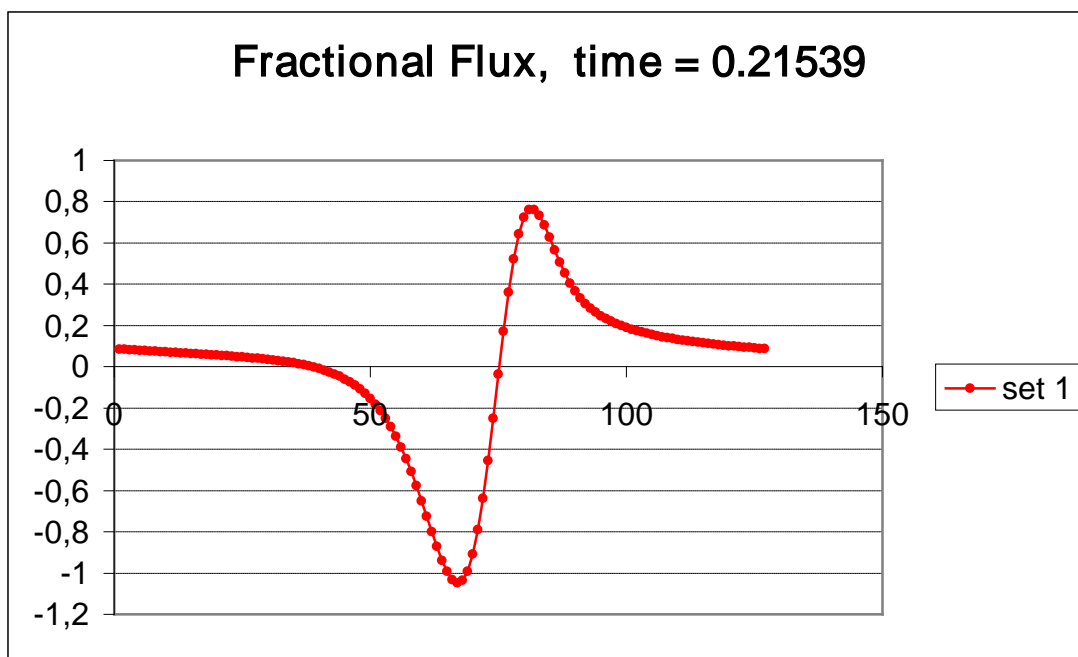


Рис.7 ($\alpha = 1.5$ и $\beta = 1$)

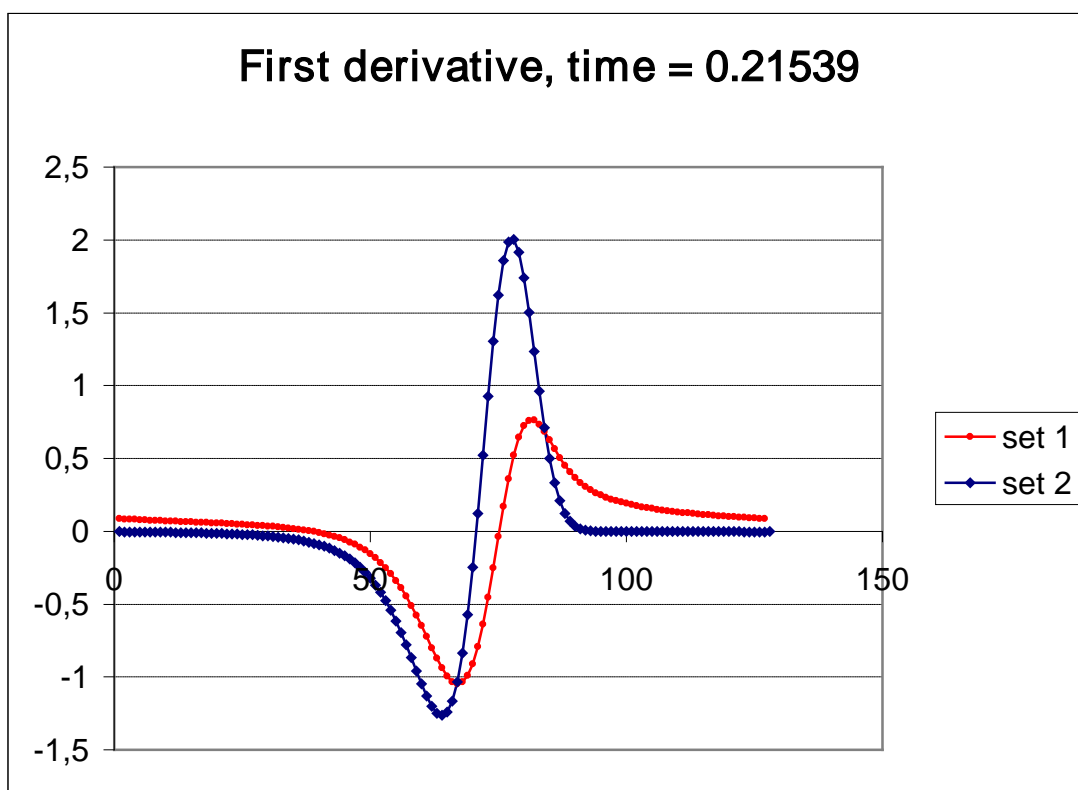


Рис.8 ($\alpha = 1.5$ и $\beta = 1$)

Сравнение дробного потока (set 1) со значением потока, отвечающего классическому закону Фика для распределения концентраций, описываемого уравнением дробной диффузии

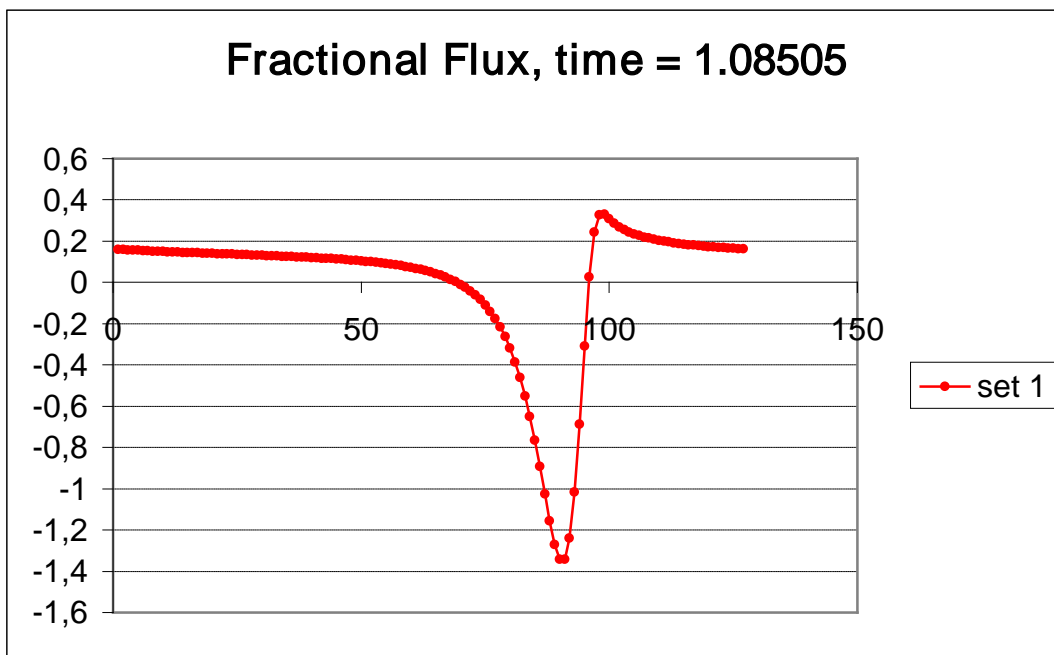


Рис.9 ($\alpha = 1.1$ и $\beta = 1$)

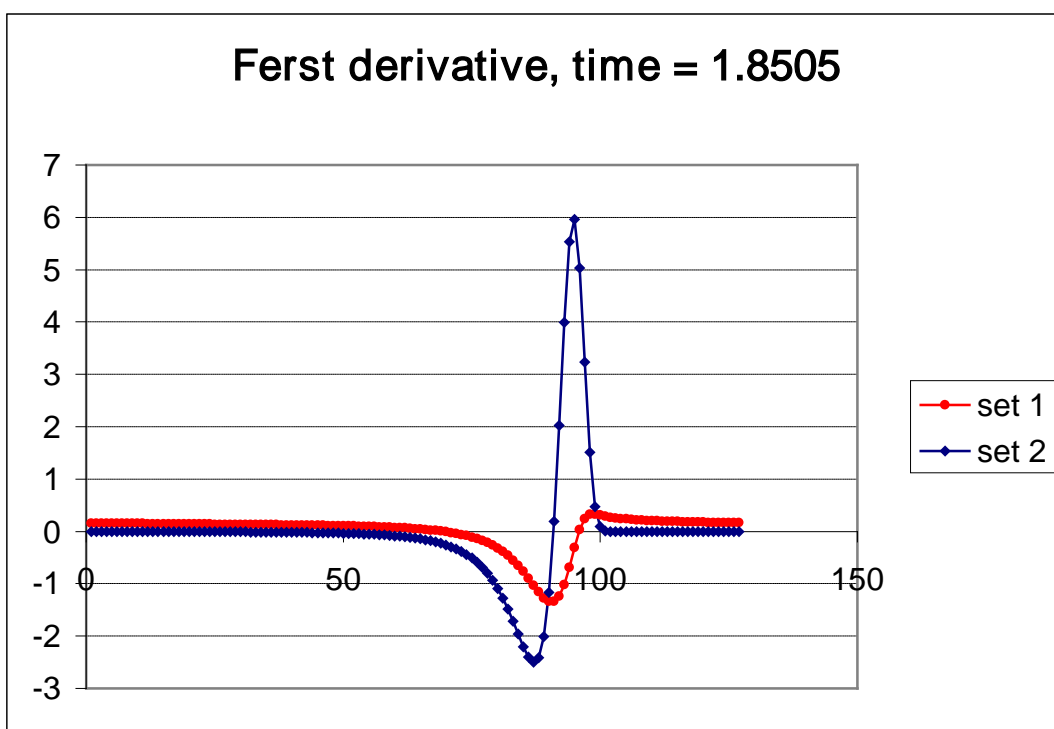


Рис.10 ($\alpha = 1.1$ и $\beta = 1$)

Сравнение дробного потока (set 1) со значением потока, отвечающего классическому закону Фика для распределения концентраций, описываемого уравнением дробной диффузии

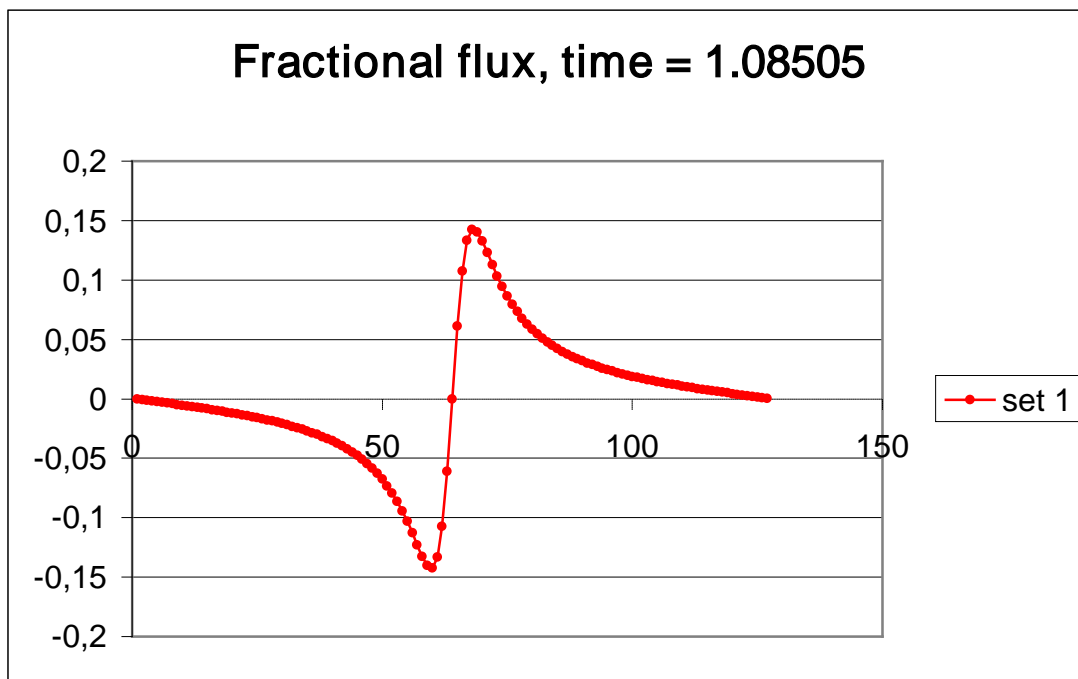


Рис.11 ($\alpha = 1.1$ и $\beta = 0$)

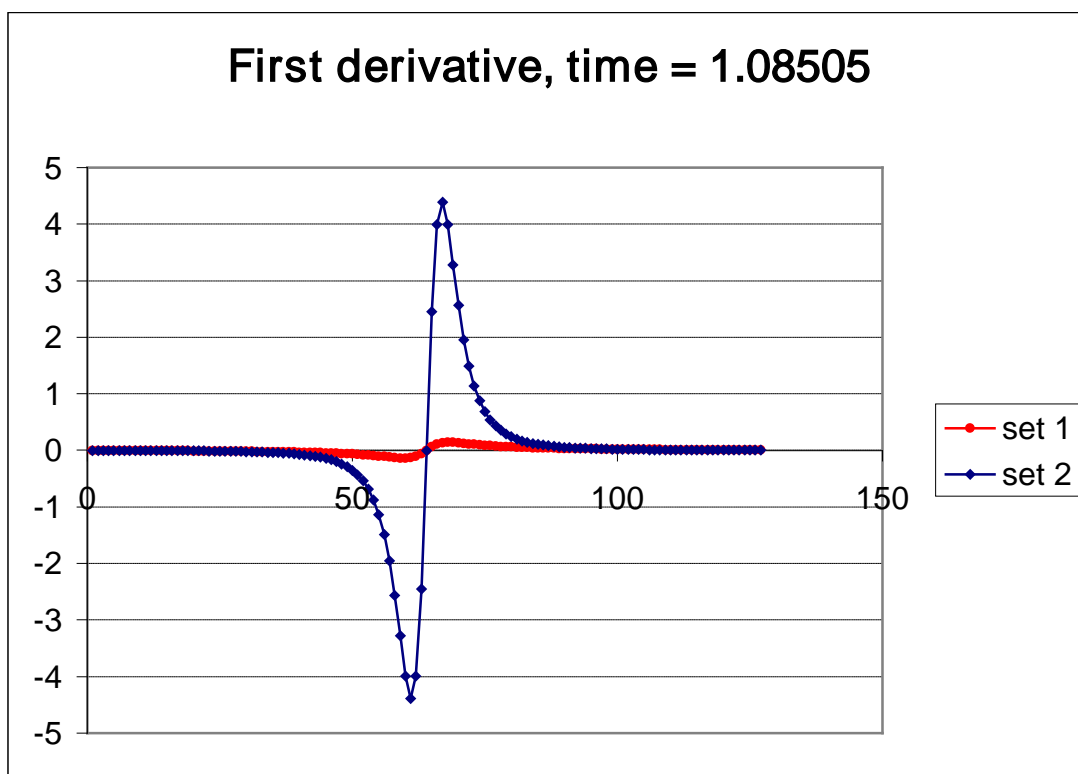


Рис.12 ($\alpha = 1.1$ и $\beta = 0$)

Сравнение дробного потока (set 1) со значением потока, отвечающего классическому закону Фика для распределения концентраций, описываемого уравнением дробной диффузии

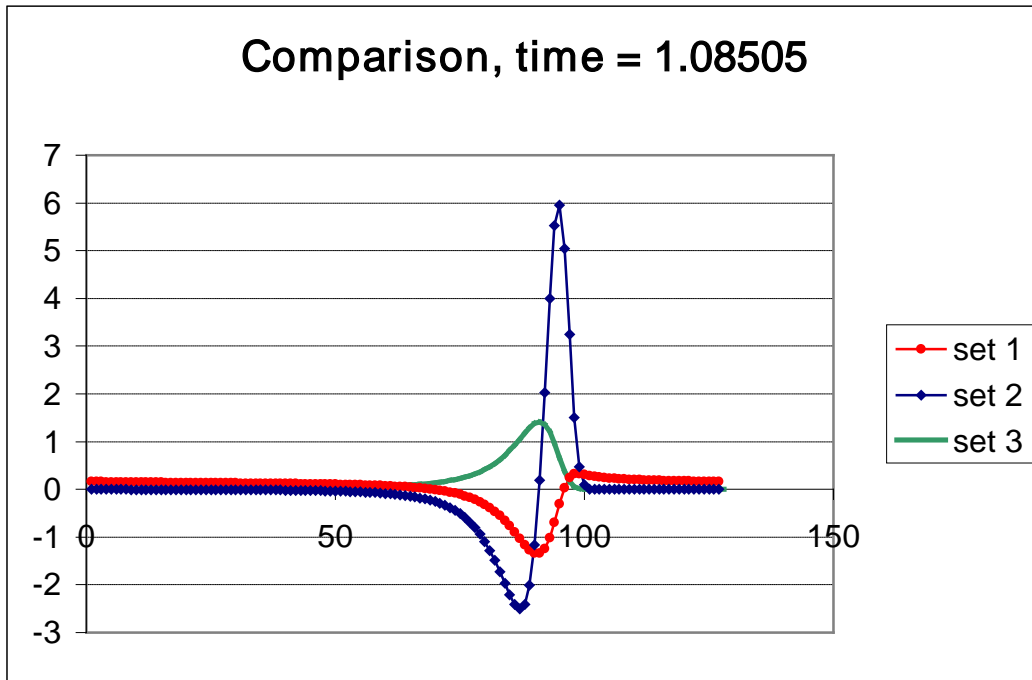


Рис.13 ($\alpha = 1.1$ и $\beta = 1$) Дробные потоки (set 1), классические потоки (set 2) и функция концентрации (set 3)

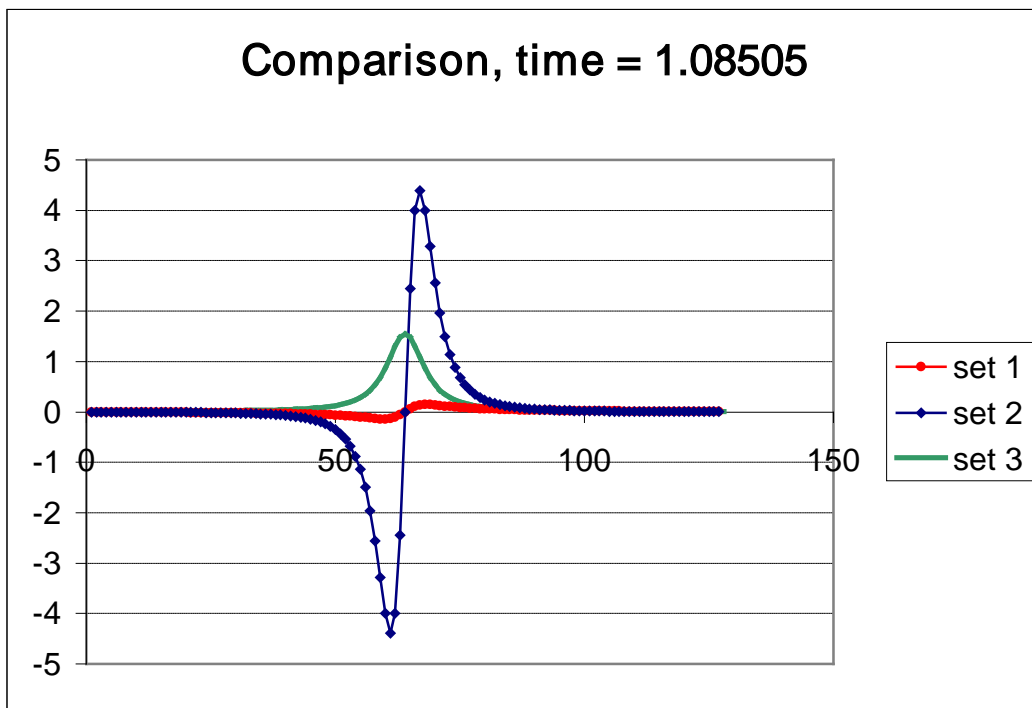


Рис.14 ($\alpha = 1.1$ и $\beta = 0$) Дробные потоки (set 1), классические потоки (set 2) и функция концентрации (set 3)

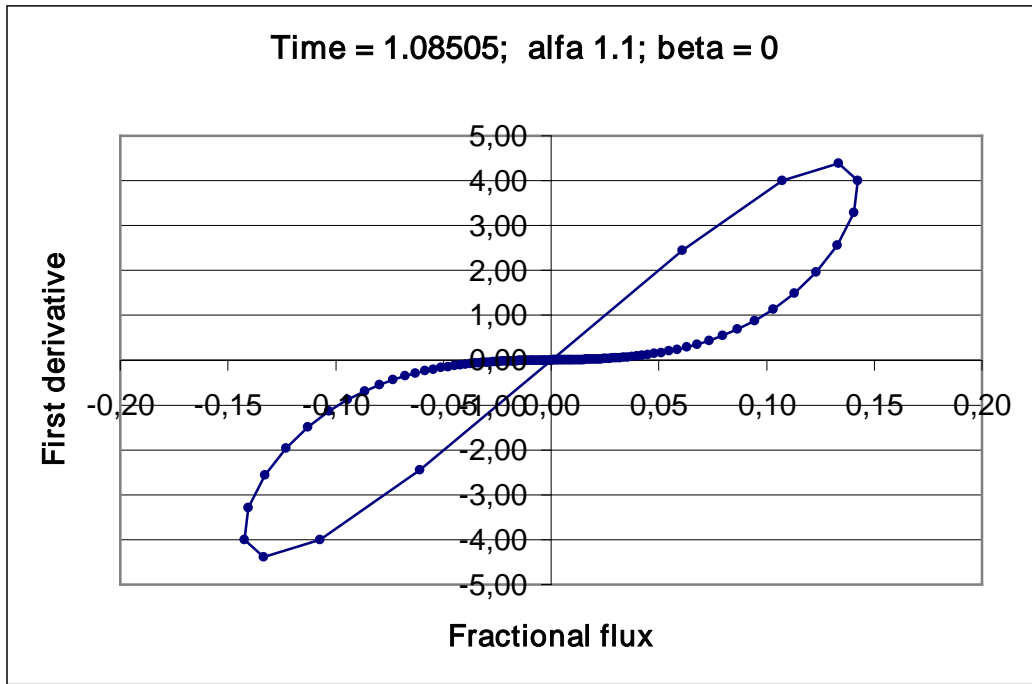


Рис. 15. По оси X отложены значения дробных потоков, по оси Y- значения классических потоков, отвечающих закону Фика

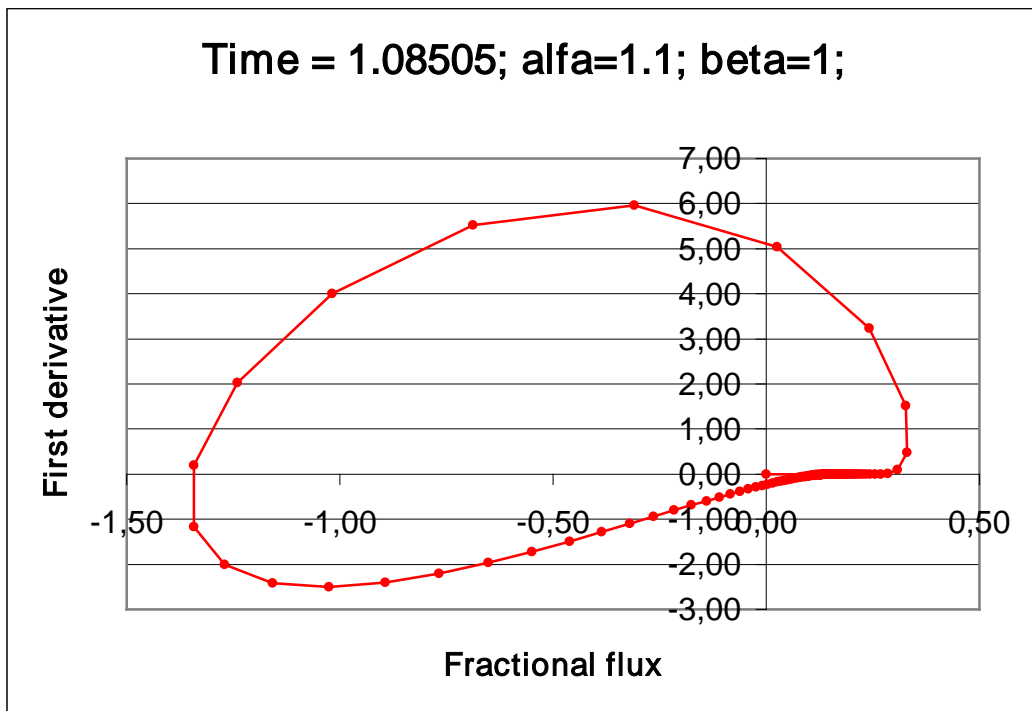
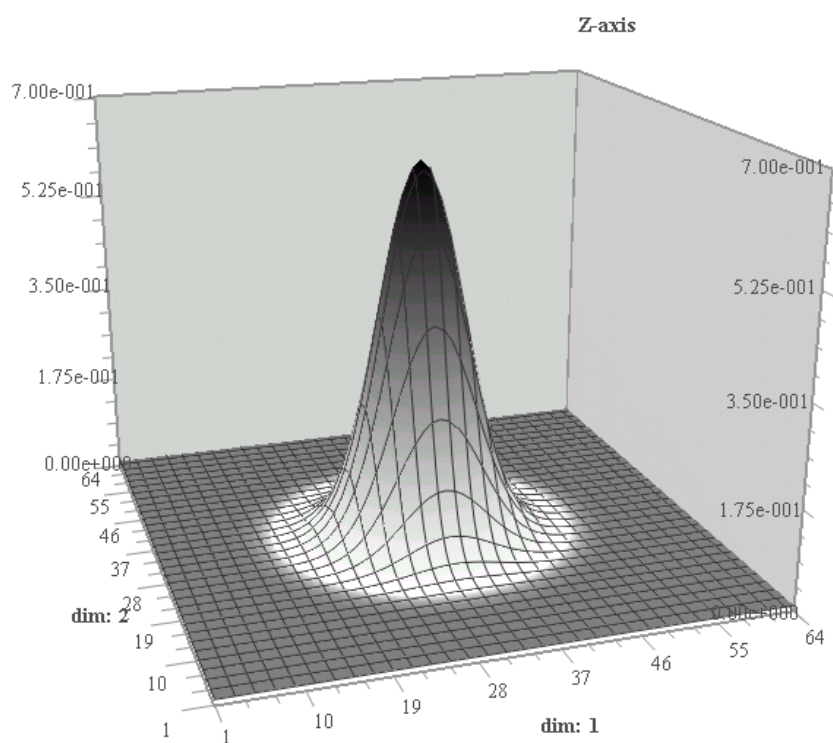
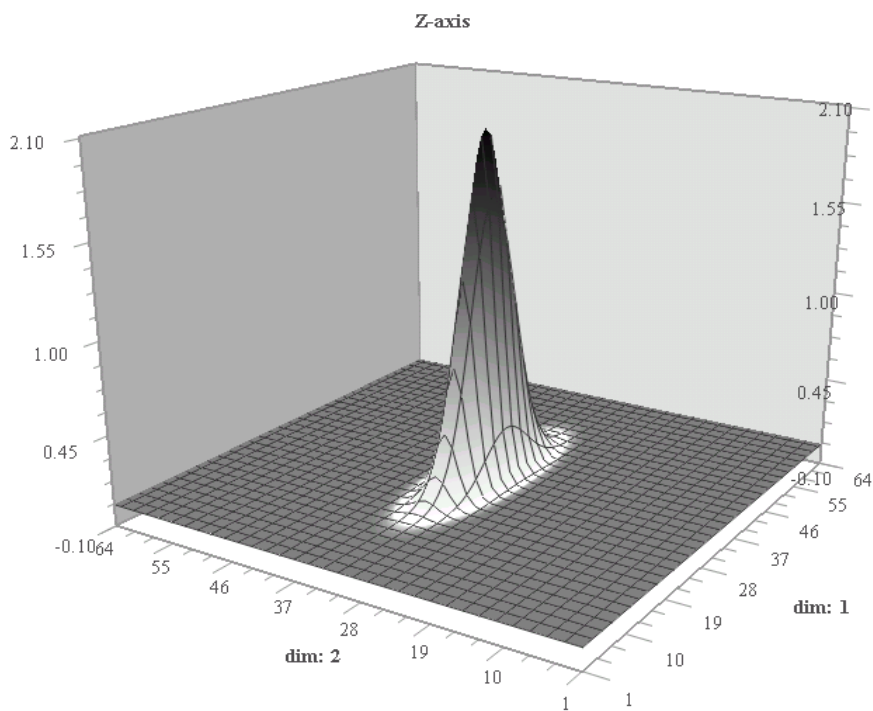


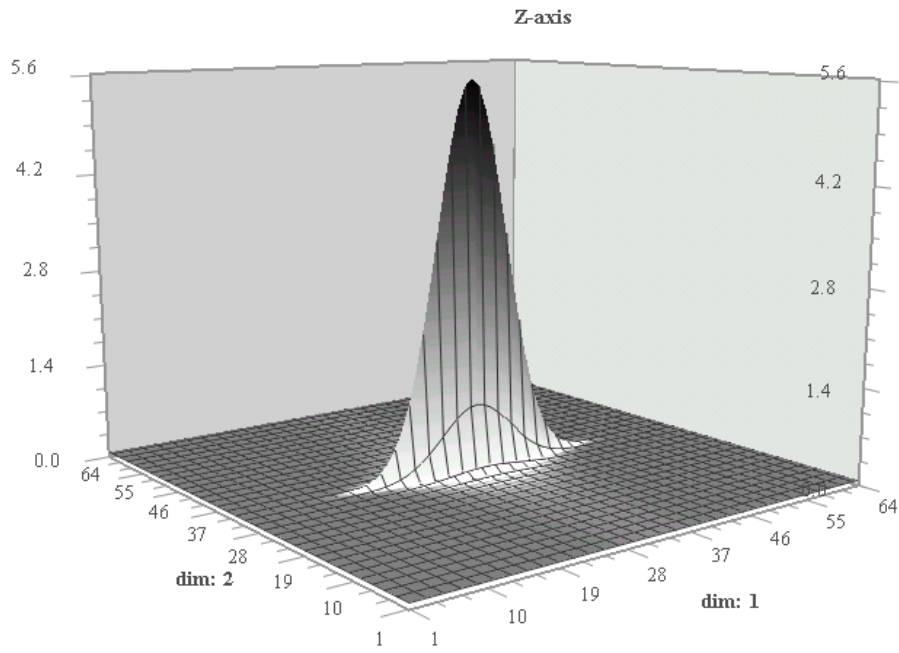
Рис. 16. По оси X отложены значения дробных потоков, по оси Y- значения классических потоков, отвечающих закону Фика. Во втором квадранте классические и дробные потоки направлены в противоположные стороны



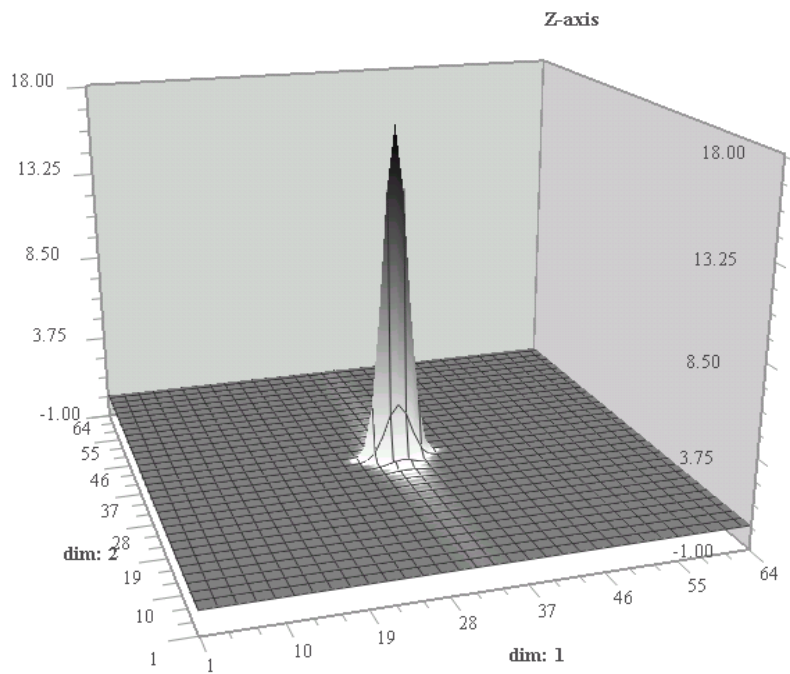
Puc. 17 ($\alpha_x = \alpha_y = 2$; $\beta_x = \beta_y = 0$; $D_x = D_y = 1$)



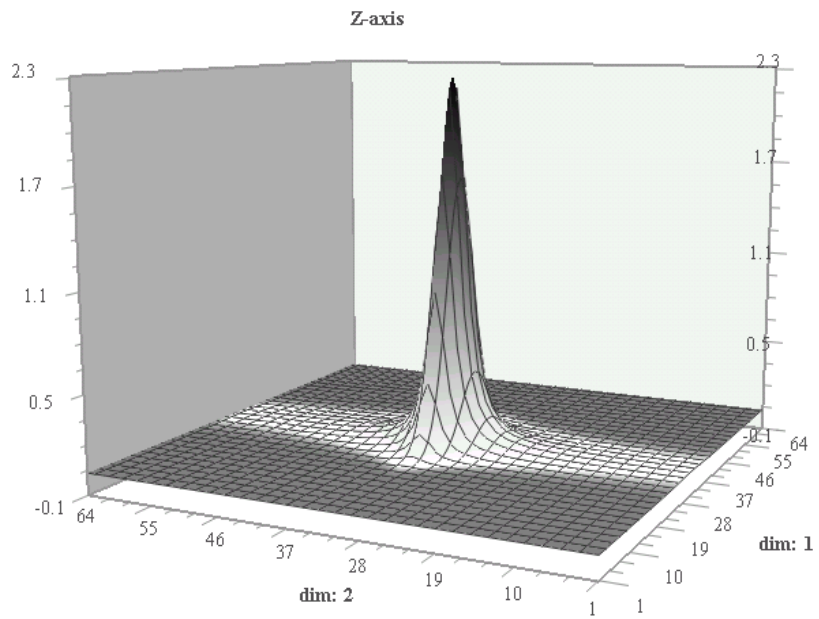
Puc. 18 ($\alpha_x = \alpha_y = 2$; $\beta_x = \beta_y = 0$; $D_x = 1$; $D_y = 0.1$)



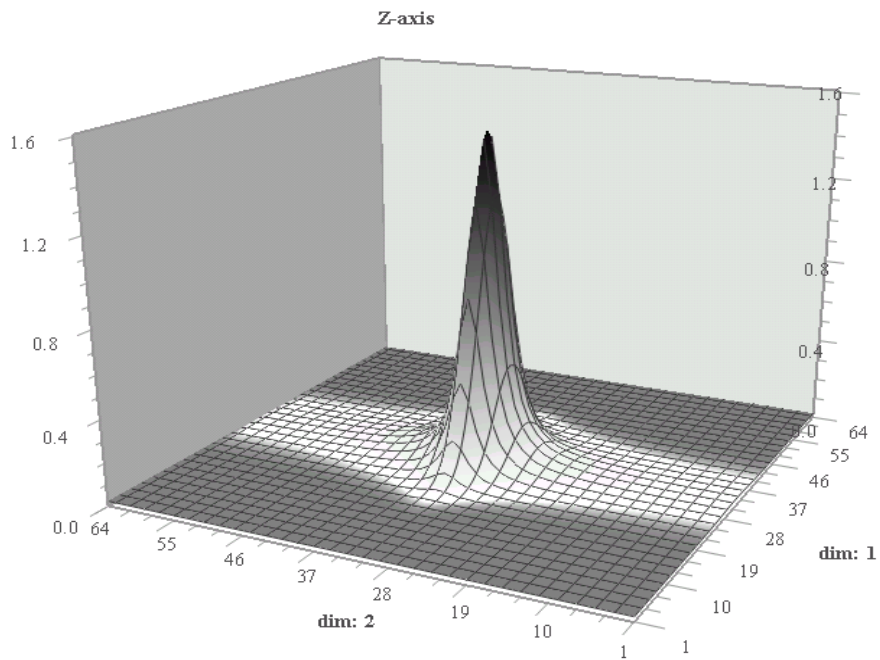
Puc. 19 ($\alpha_x = 2$; $\alpha_y = 1.1$; $\beta_x = \beta_y = 0$; $D_x = D_y = 1$; $t = 0.12334$)



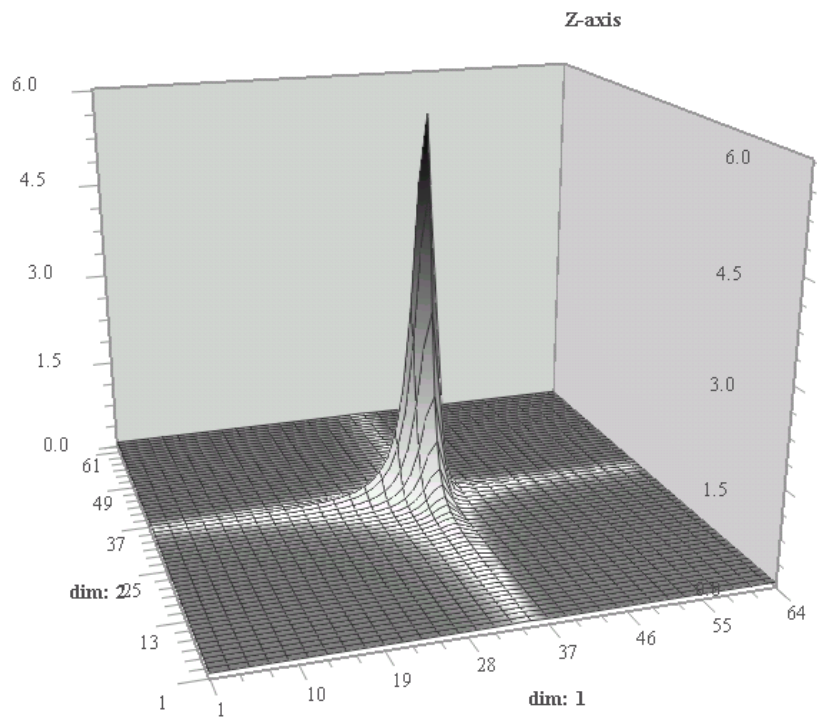
Puc. 20 ($\alpha_x = 1.1$; $\alpha_y = 2$; $\beta_x = \beta_y = 0$; $D_x = 1$; $D_y = 0.1$; $t = 0.12334$)



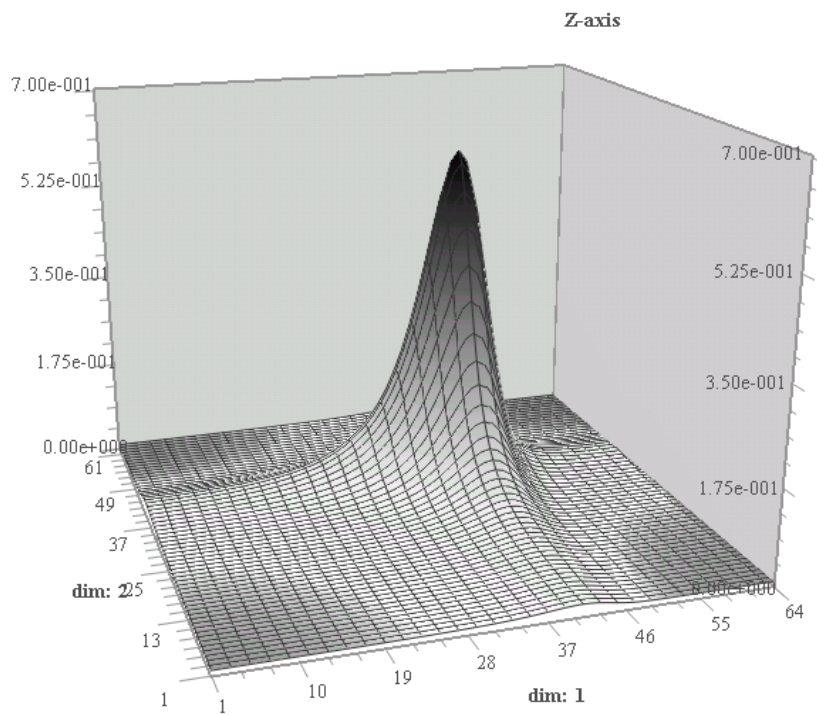
Puc. 21. ($\alpha_x = 1.1$; $\alpha_y = 2$; $\beta_x = \beta_y = 0$; $D_x = 1$; $D_y = 0.1$; $t = 0.74003$)



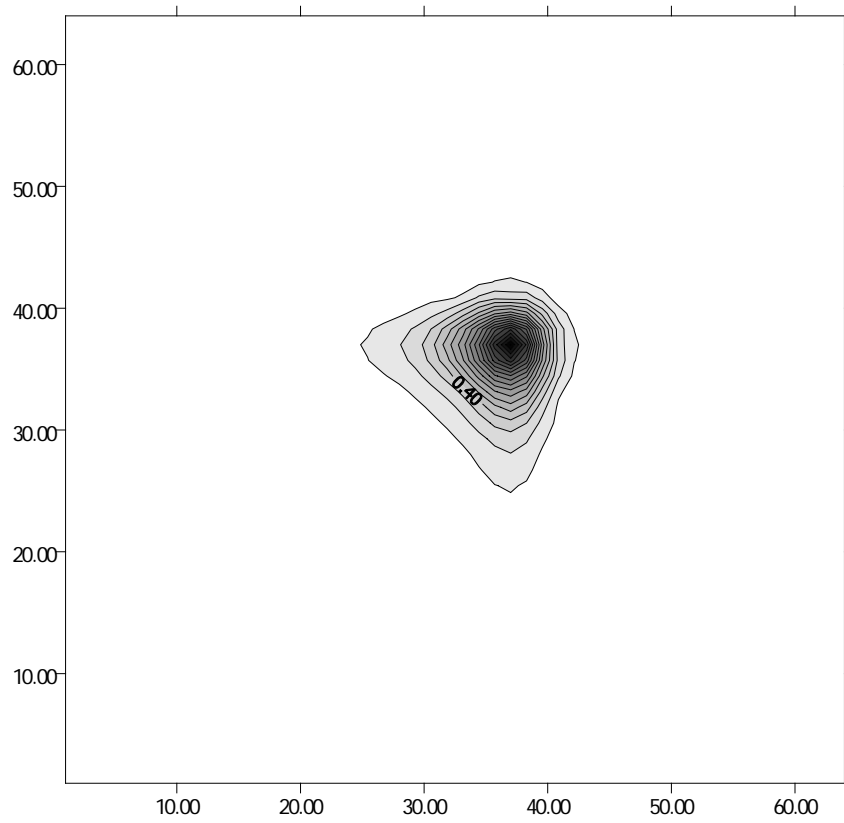
Puc.22 ($\alpha_x = 1.1$; $\alpha_y = 2$; $\beta_x = \beta_y = 0$; $D_x = 1$; $D_y = 0.1$; $t = 0.98671$)



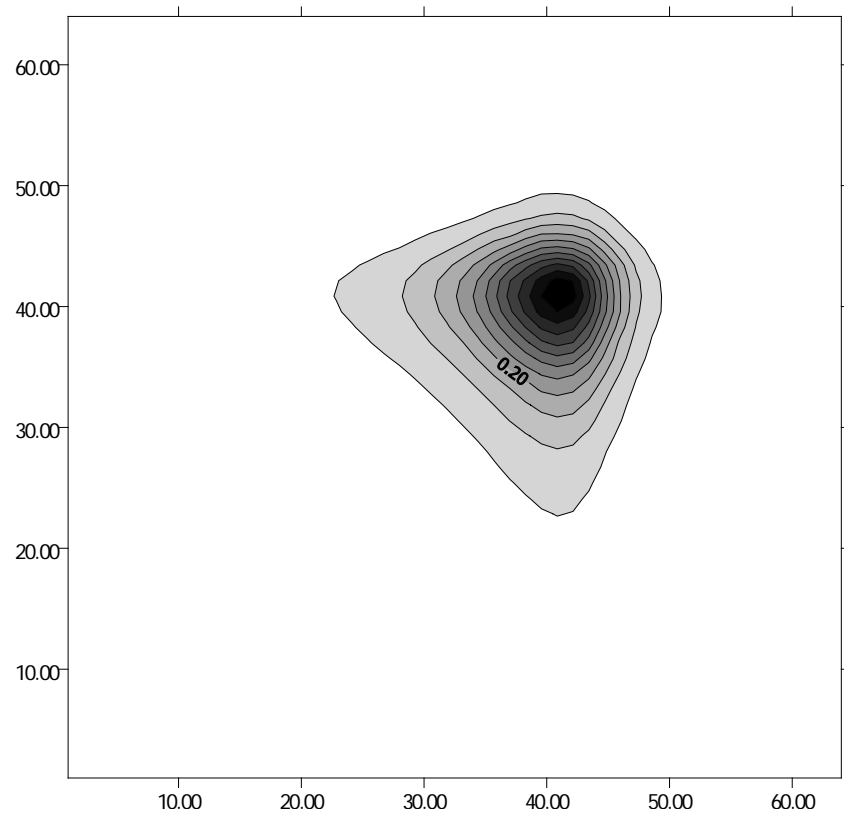
Puc. 23 ($\alpha_x = \alpha_y = 1.2$; $\beta_x = \beta_y = 1/\sqrt{2}$; $D_x = D_y = 1$; $t = 0.24668$)



Puc. 24. ($\alpha_x = \alpha_y = 1.2$; $\beta_x = \beta_y = 1/\sqrt{2}$; $D_x = D_y = 1$; $t = 0.98671$)



Puc. 25 ($\alpha_x = \alpha_y = 1.2$; $\beta_x = \beta_y = 1/\sqrt{2}$; $D_x = D_y = 1$; $t = 0.24668$)



Puc. 26 ($\alpha_x = \alpha_y = 1.2$; $\beta_x = \beta_y = 1/\sqrt{2}$; $D_x = D_y = 1$; $t = 0.98671$)

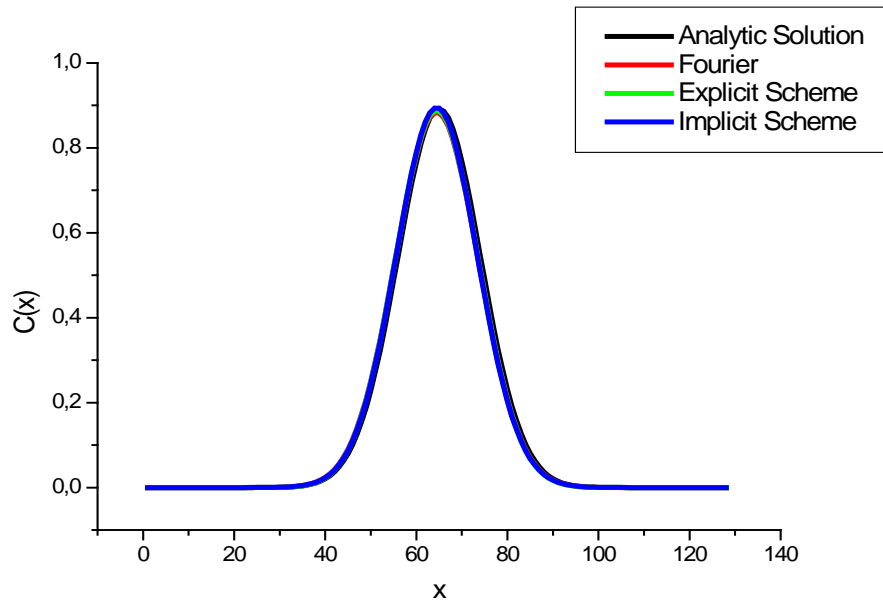


Рис. 27 (t = 0.1)

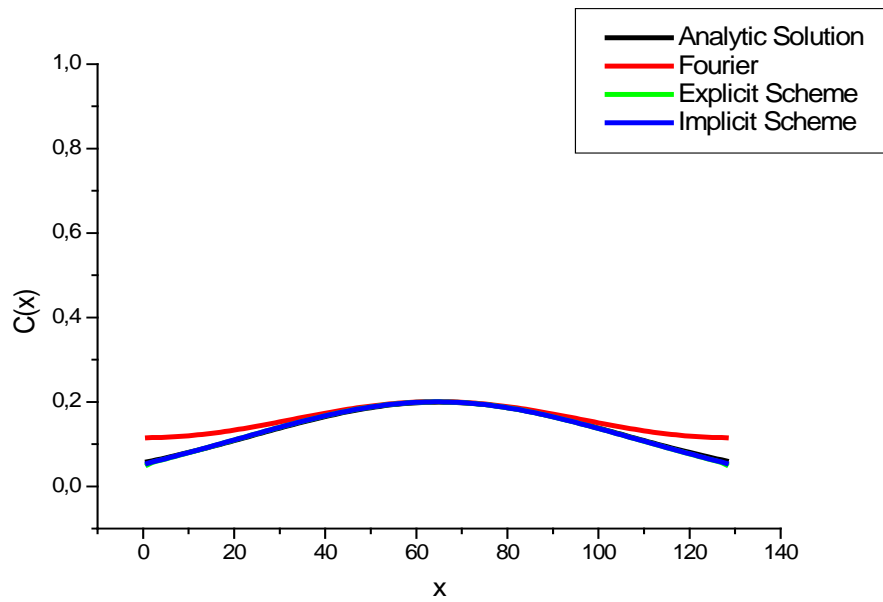
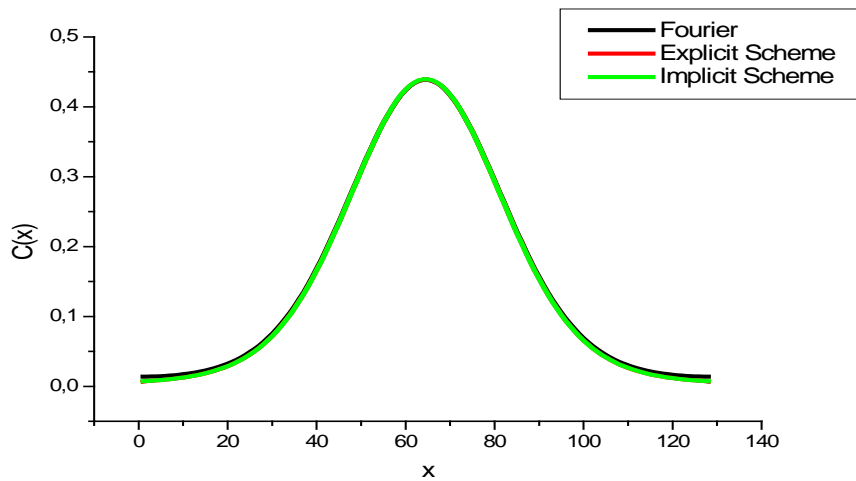
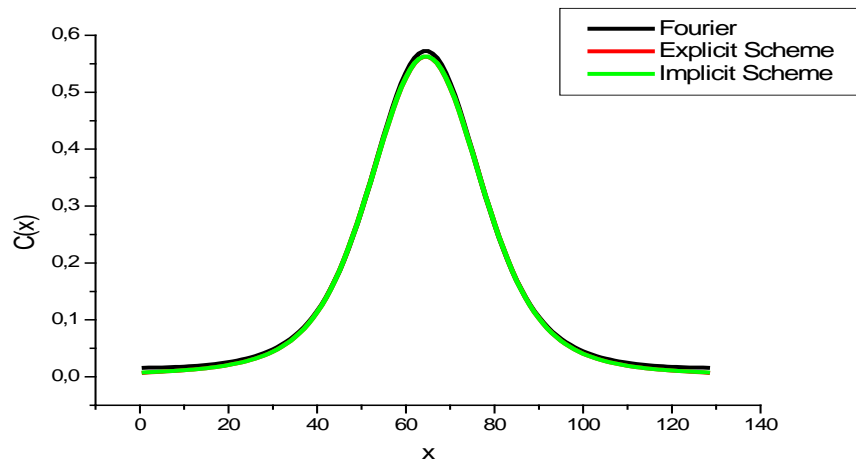


Рис. 28 (t = 2.0)

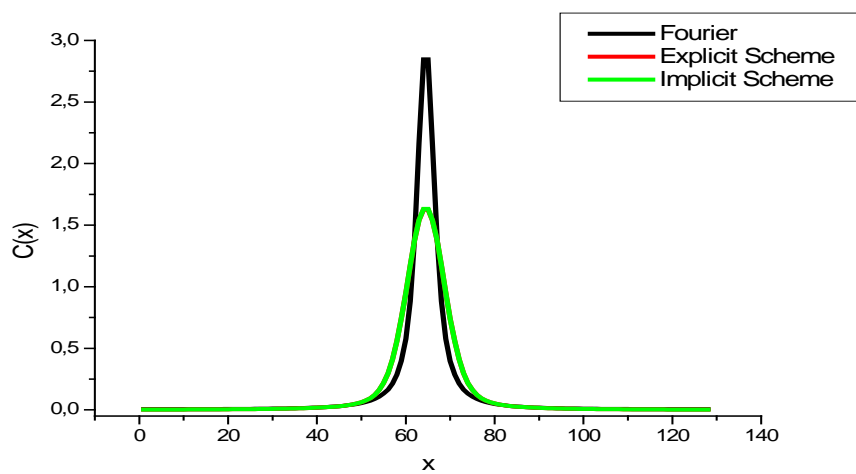
Сравнение решений, полученных различными численными методами с аналитическим решением.



Puc. 29 ($\alpha = 1.75, \beta = 0, t = 0.5, N = 128$)



Puc. 30 ($\alpha = 1.5, \beta = 0, t = 0.5, N = 128$)



Puc. 31 ($\alpha = 1.1, \beta = 0, t = 0.5, N = 128$)

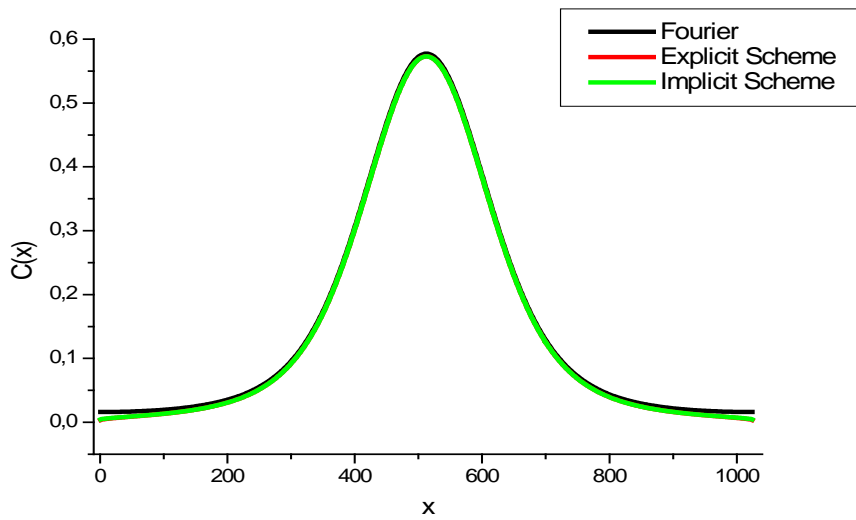


Рис. 32 ($\alpha = 1.5$, $\beta = 0$, $t = 0.5$, $N = 1024$)

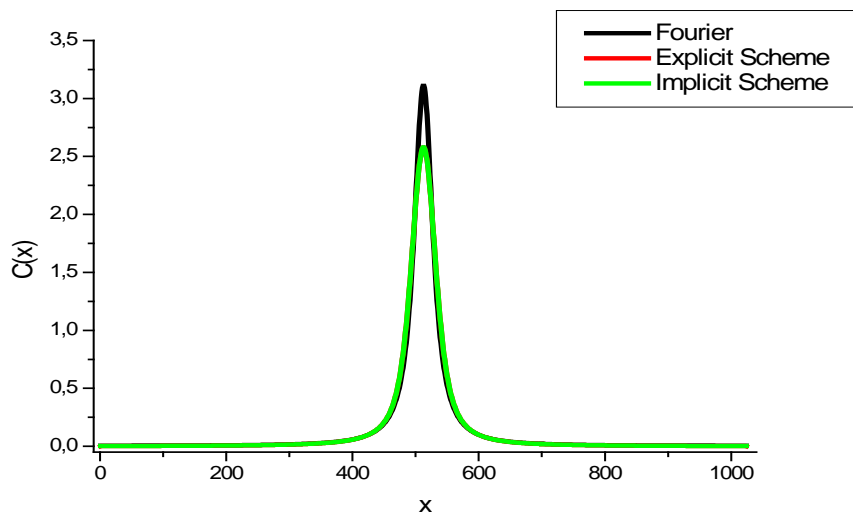
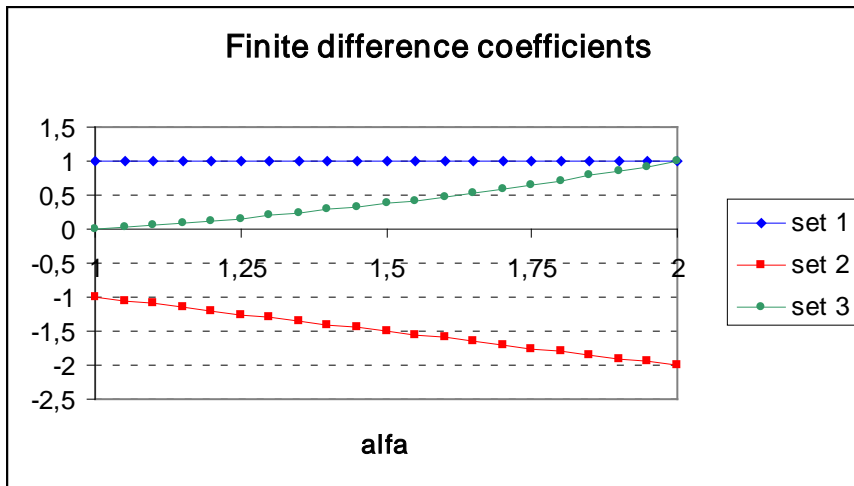
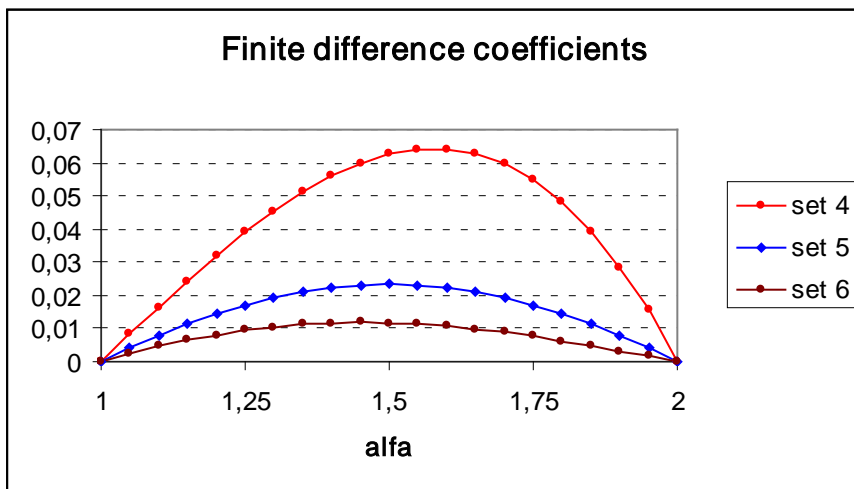


Рис. 33 ($\alpha = 1.1$, $\beta = 0$, $t = 0.5$, $N = 1024$)

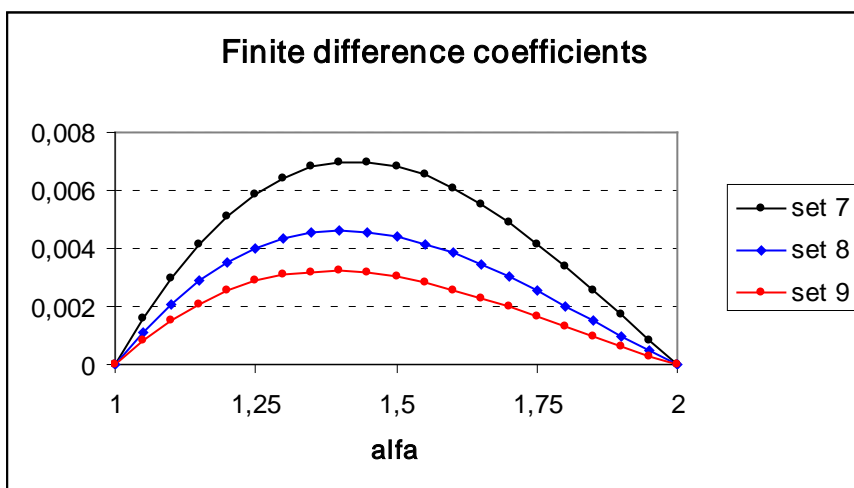
На рис. 27 – 33 представлено сравнение решений при различных значениях параметра α и различных N .



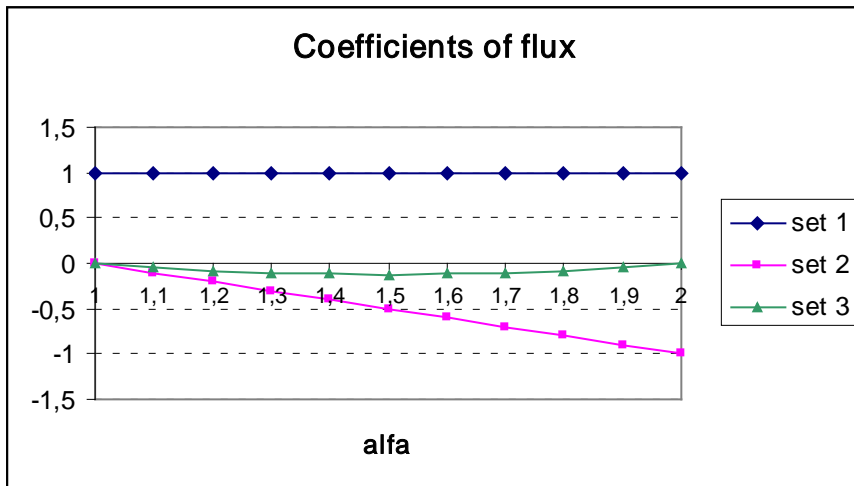
Puc. 34



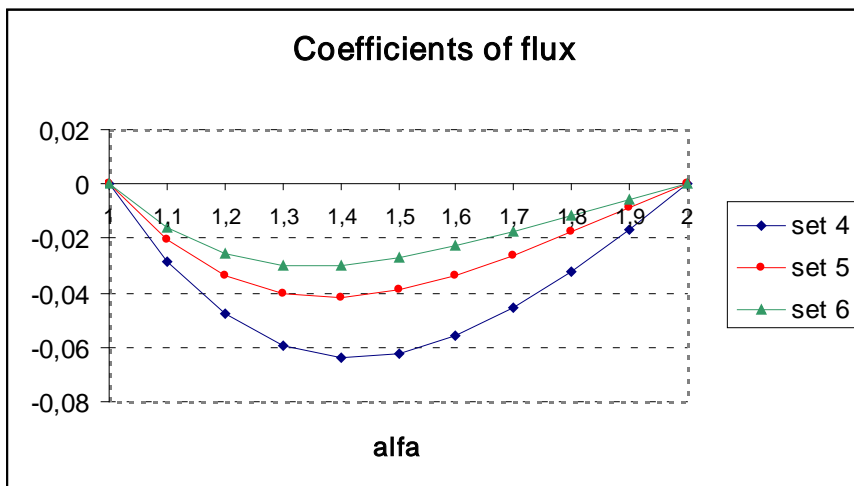
Puc. 35



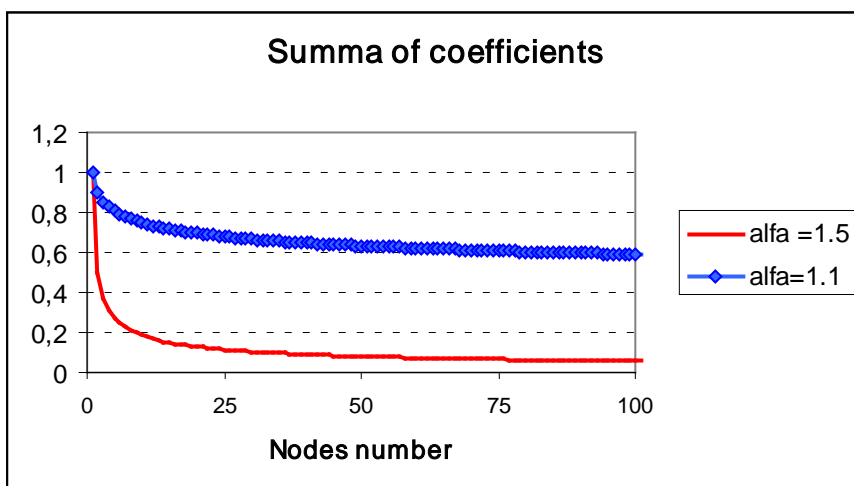
Puc. 36



Puc. 37



Puc. 38



Puc. 39

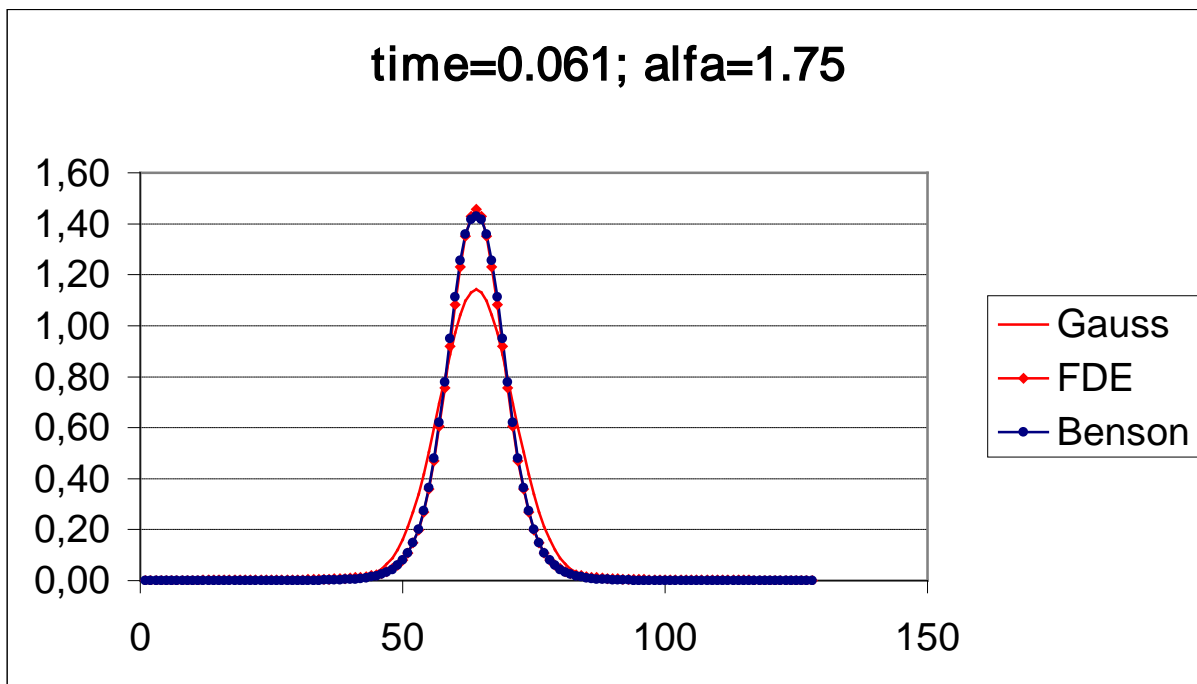


Рис. 40 Профиль концентрации

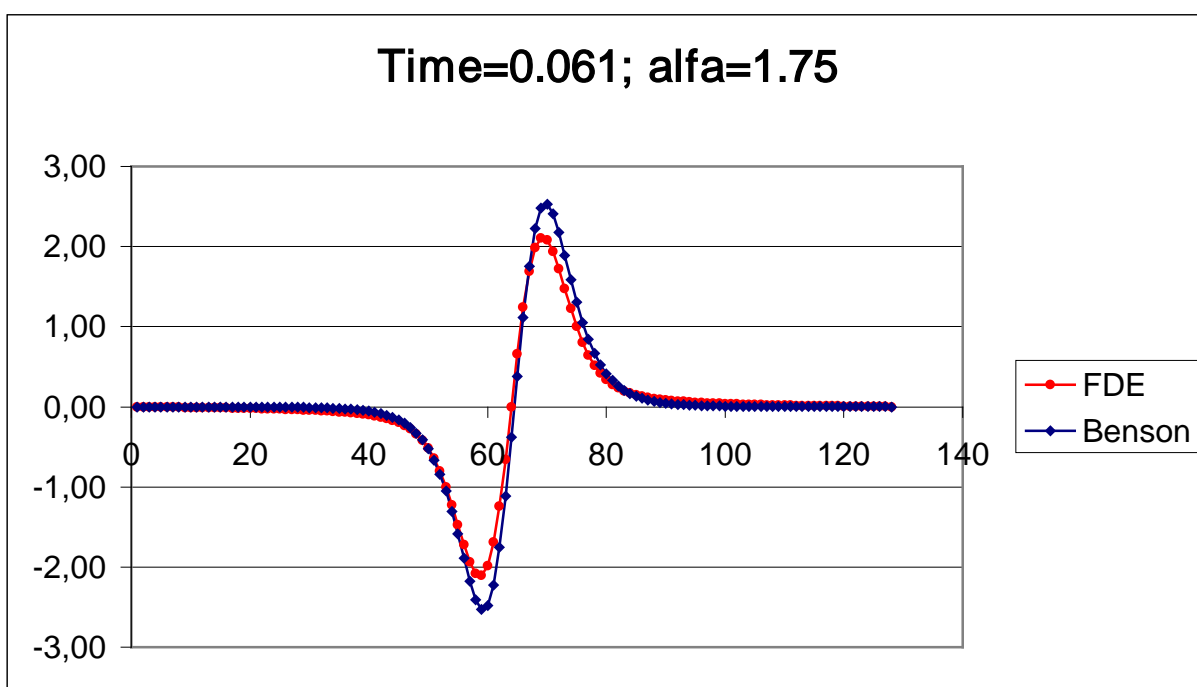


Рис. 41 Профили потоков

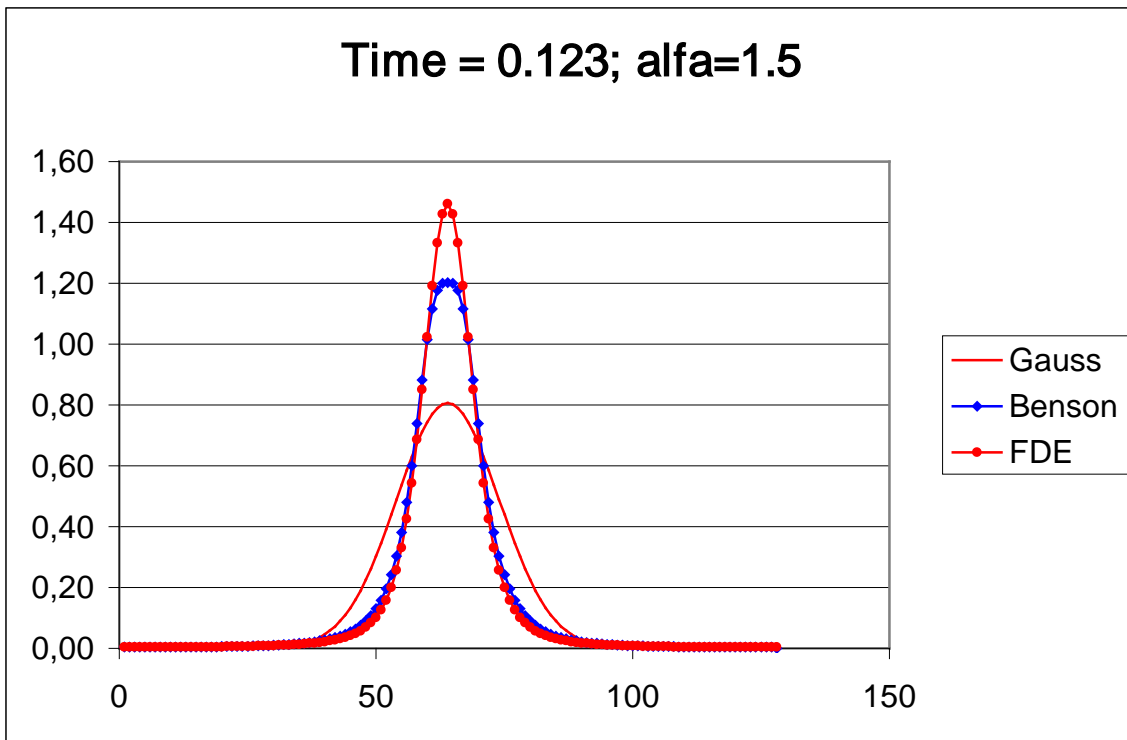


Рис. 42 Профили концентрации

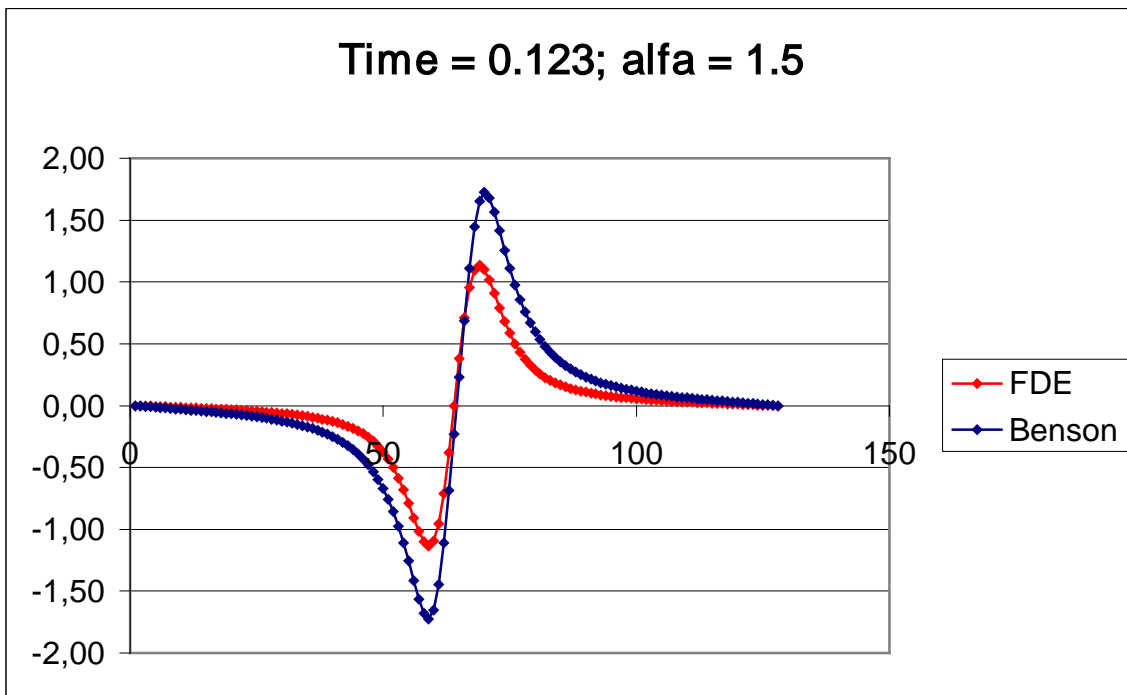


Рис. 43 Профили потоков

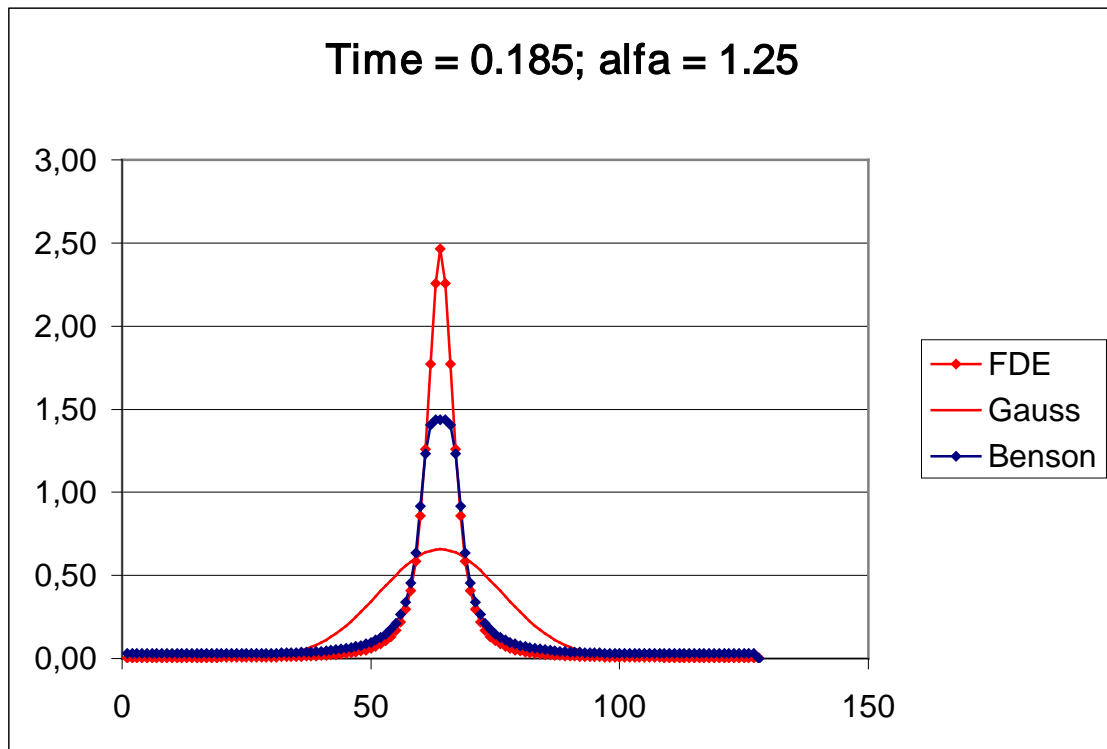


Рис. 44 Профили концентраций

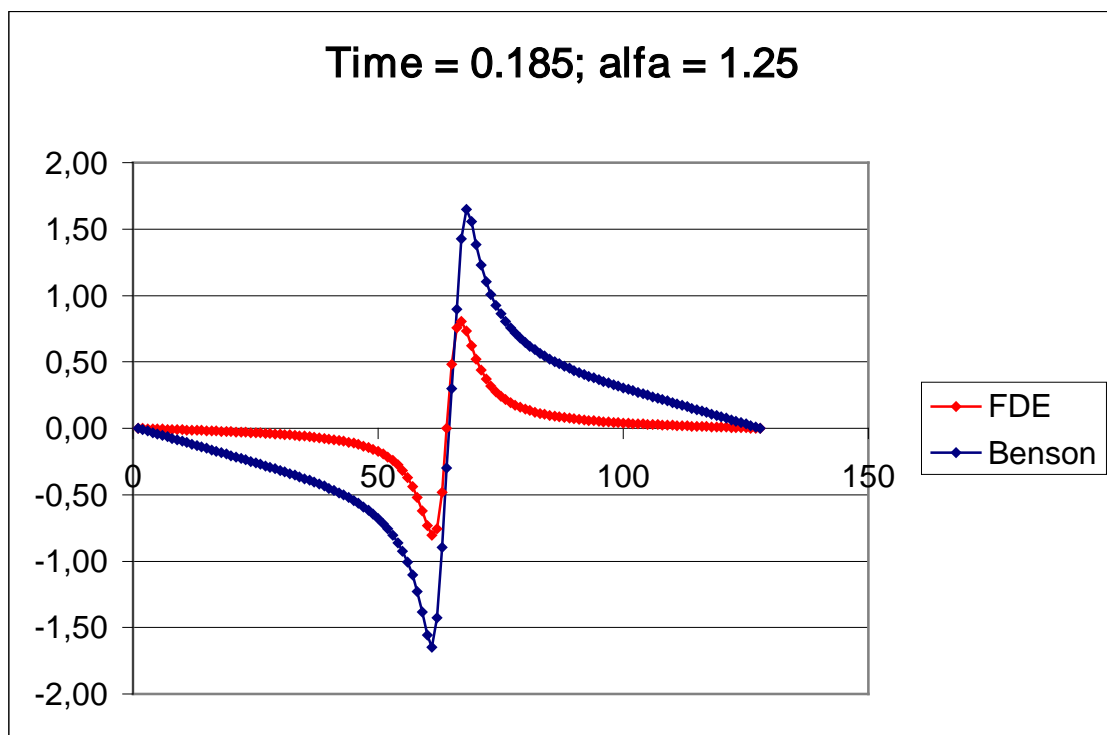
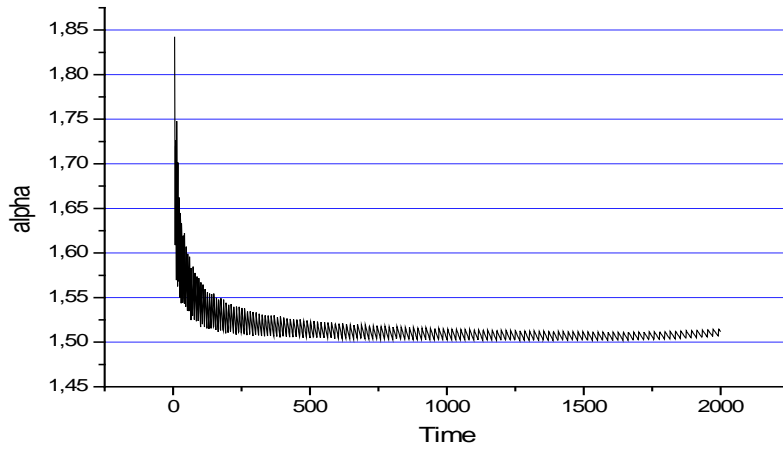
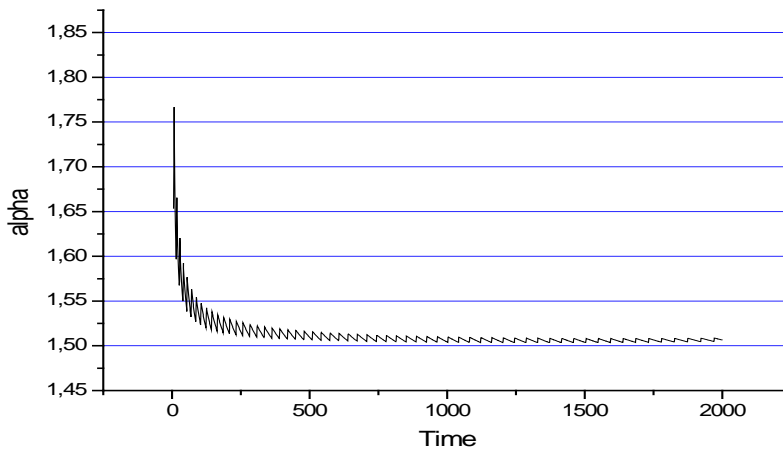


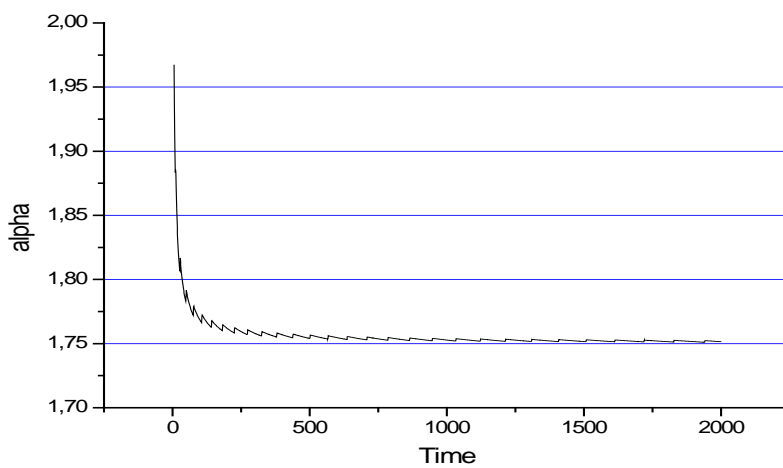
Рис. 45 Профили потоков



a) $\alpha = 1.5, \beta = 1.0$

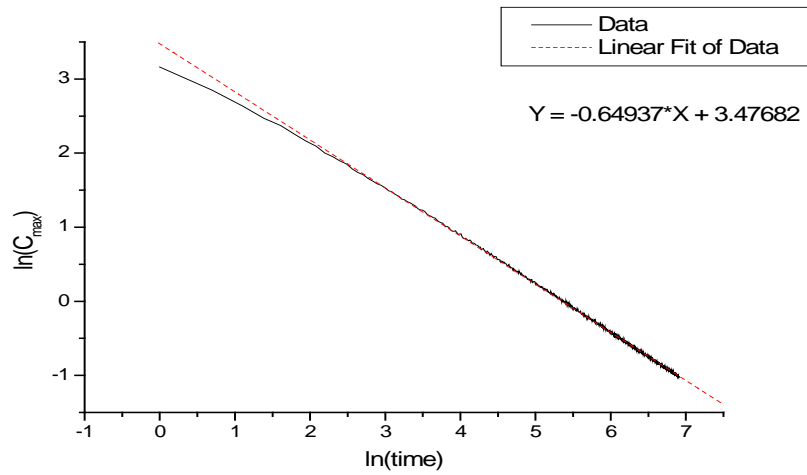


b) $\alpha = 1.5, \beta = 0.4$

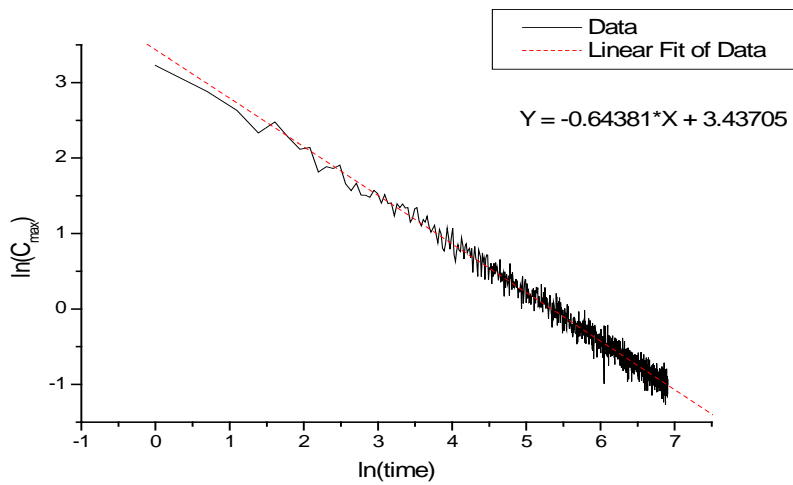


c) $\alpha = 1.75, \beta = 0.4$

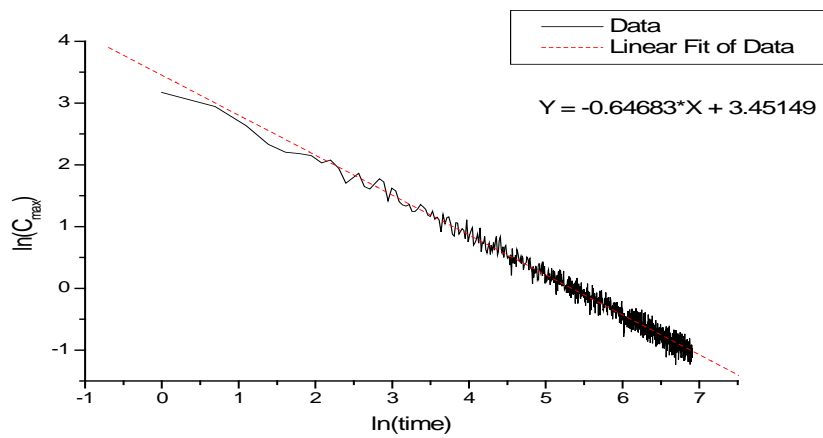
Puc. 46



a) $\alpha = 1.5, \beta = 0, \sigma = 0.01$

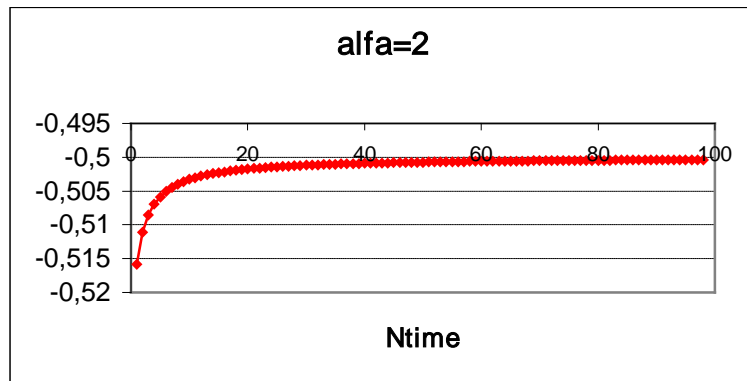


b) $\alpha = 1.5, \beta = 0, \sigma = 0.1$

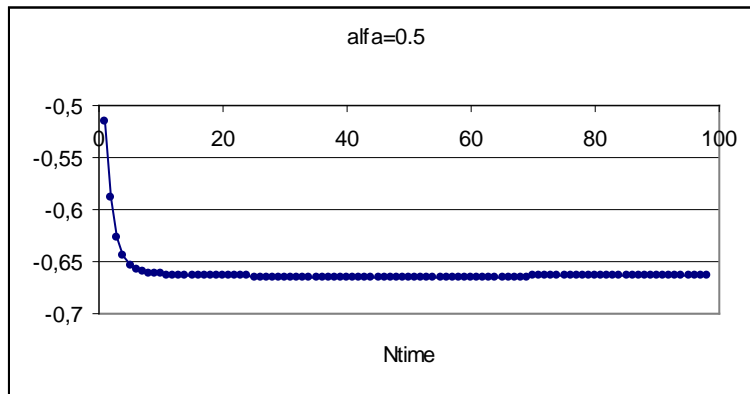


c) $\alpha = 1.5, \beta = 0.4, \sigma = 0.1$

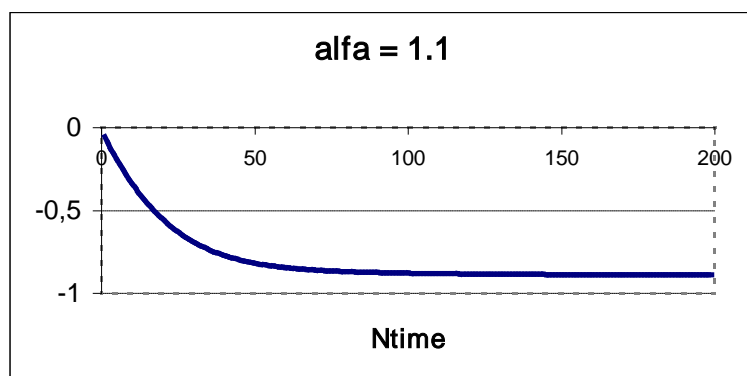
Puc. 47



a)

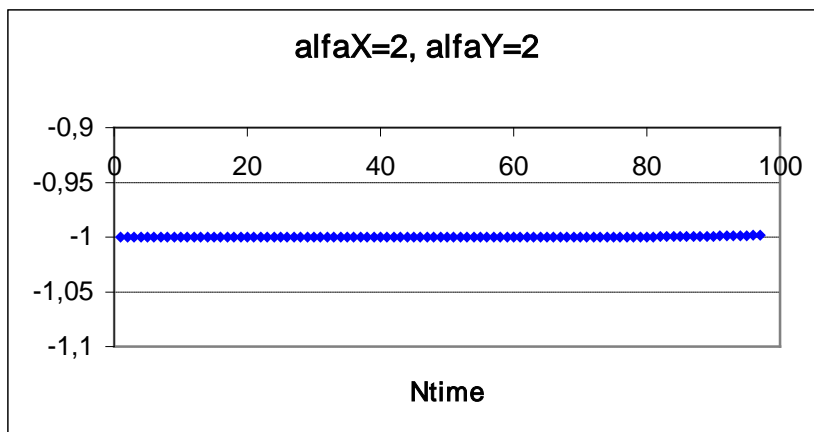


b)

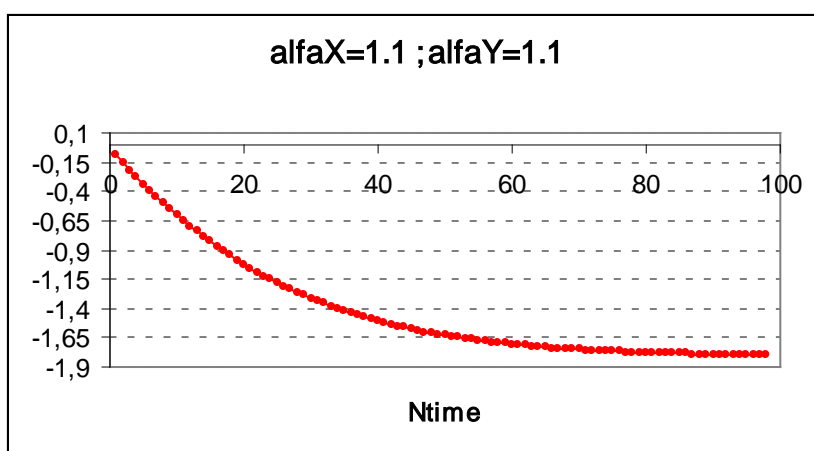


c)

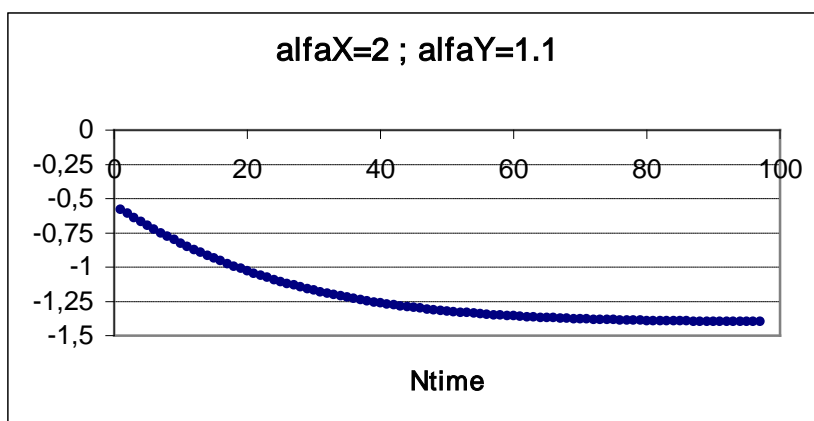
Puc. 48



a) Параметры расчета: $N_x = N_y = 64$; $\alpha_x = \alpha_y = 2$; $\beta_x = \beta_y = 0$

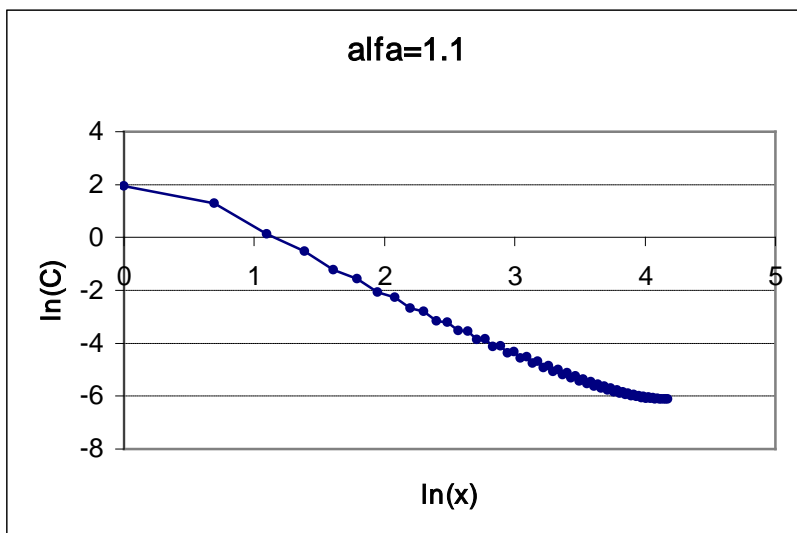


в) Параметры расчета: $N_x = N_y = 64$; $\alpha_x = \alpha_y = 1.1$; $\beta_x = \beta_y = 0$ Точное значение горизонтальной асимптоты $-2.2/1.21 = -1.818$

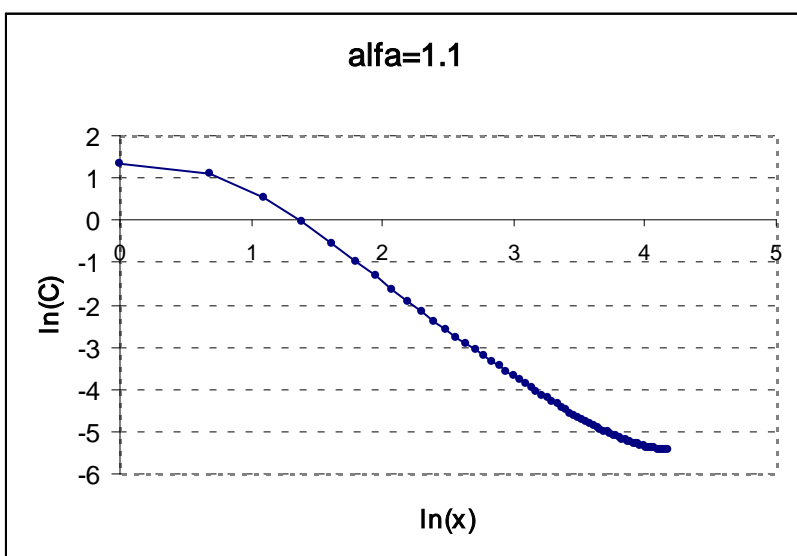


с) Параметры расчета: $N_x = N_y = 64$; $\alpha_x = 2$, $\alpha_y = 1.1$; $\beta_x = \beta_y = 0$ Точное значение горизонтальной асимптоты $-3.1/2.2 = -1.409$

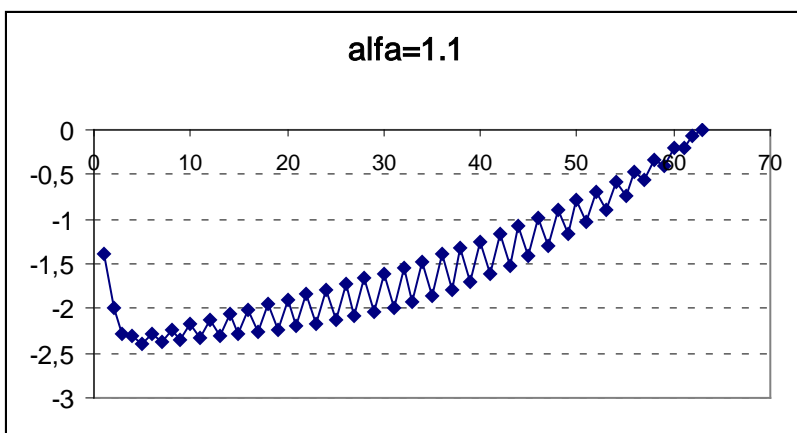
Рис. 49



a) $N = 128$; $\beta=0$; $\alpha=1.1$; $t = 0.197$



б) $N = 128$; $\beta=0$; $\alpha=1.1$; $t = 0.394$



с) Значения численной производной

Рис. 50