На правах рукописи

Иващ

Иващенко Дмитрий Сергеевич

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ПРЯМЫХ И ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ ДРОБНОГО ПОРЯДКА ПО ВРЕМЕНИ

05.13.18 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск — 2008

Работа выполнена в лаборатории волновых процессов Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН и на кафедре высшей математики факультета прикладной математики и информатики ГОУ ВПО «Новосибирский государственный технический университет»

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, доцент Бондаренко Анатолий Николаевич
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, доцент Ткачев Дмитрий Леонидович
	доктор физико-математических наук, профессор Кошкин Геннадий Михайлович
Ведущая организация:	Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск

Защита состоится 18 декабря 2008 г. в 10.30 на заседании диссертационного совета Д 212.267.08 при Томском государственном университете по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, корп. 2, ауд. 102.

Отзывы на автореферат (в двух экземплярах), заверенные гербовой печатью организации, просим направлять по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, ученому секретарю ТГУ Буровой Н.Ю.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Томского государственного университета.

Автореферат разослан 1 ноября 2008 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.267.08
доктор технических наук, профессор А.В. Скворцов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы определяется возрастающим интересом к исследованиям в области мезоскопического моделирования процессов переноса. Трудности, связанные с применением аналитических методов решения прямых задач для неоднородных сред на мезоуровне, приводят к необходимости построения эффективных численных методов, чему способствуют и высокие темпы развития компьютерной техники. Разработанные в диссертации методы численного решения обратных задач позволят на основе реальных данных построить математическую модель аномального диффузионного процесса.

Для аномального диффузионного процесса характерно в первую очередь то, что зависимость среднеквадратического смещения от времени имеет вид $\langle x^2(t) \rangle \sim t^\alpha$. Показатель аномальной диффузии $\alpha \neq 1$ определяет, будет ли процесс классифицирован как субдиффузионный (дисперсионный, медленный) при $0 < \alpha < 1$ или супердиффузионный (ускоренный, быстрый) при $\alpha > 1$.

С макроскопической точки зрения, диффузионный процесс описывается уравнением диффузии $u_t(x,t) = K_1 u_{xx}(x,t)$, где $u(x,t)$ представляет собой плотность вероятности обнаружить частицу в точке x в момент времени t. С микроскопической точки зрения, диффузия представляет собой марковский процесс, в котором микроскопические частицы выполняют случайные «прыжки» конечной длины и конечной дисперсии. С другой стороны, если рассматривается немарковский процесс, в котором «прыжки» частиц, выбираются из распределения с длинным временным хвостом $t^{-\alpha-1}$, то диффузионный процесс является аномальным. Функция плотности вероятности $u(x,t)$, которая описывает движение частиц в случае аномальной диффузии, удовлетворяет уравнению с дробной производной вида $D_t^\alpha u(x,t) = K_\alpha u_{xx}(x,t)$.

Возникновение и развитие понятий «дробный интеграл» и «дробная производная» принято связывать с именами Б. Римана, Ж. Лиувилля, Х. Хольмгрена, Г. Вейля, А. Маршо. И если аналитический аппарат дробного исчисления, большой вклад в развитие которого внесли, в частности, С.Г. Самко, А.А. Килбас, О.И. Маричев, I. Podlubny, H.M. Srivastava, J.J. Trujillo, в целом уже сформирован, то численные методы продолжают активно развиваться. Исследования по тематике диссертационной работы могут быть условно разделены на два направления: конечно-разностные методы, где прежде всего следует отметить работы S.B. Yuste, T.A.M. Langlands, B.I. Henry, J.M. Sanz-Serna, J.C. Lopez-Marcos, W. McLean, V. Thomée, и методы Монте-Карло и вероятностные методы, где ведущую роль сыграли труды школы R. Gorenflo и F. Mainardi, а также работы M.M. Meerschaert, В.В. Учайкина, А.И. Саичева и С.Г. Уткина.

Примеры физических систем, которые описываются в терминах дробного исчисления, приведены в обзорных работах R. Metzler и J. Klafter, а также в книгах R. Hilfer и G.M. Zaslavsky. В частности, материалы, мезоскопическая структура которых обладает свойством масштабной инвариантности всего 5—8 порядков, имеют уникальные физические свойства, являющиеся результатом их внутренней самоподобной «архитектуры». В связи с этим актуальной становится проблема построения адекватных математических моделей таких сред. Однако в соответствующей литературе часто отсутствует достоверная информация о результатах проверок адекватности получаемых моделей в ходе реальных экспериментов.

В диссертации предлагается подход, использующий предположение, что процесс аномальной диффузии описывается уравнением с дробной производной по времени, однако порядок дифференцирования не известен, то есть ставится задача нахождения вида уравнения аномальной диффузии по реально измеряемым данным. Такие задачи не являются классическими коэффициентными обратными задачами для уравнений в частных производных, вид которых заранее известен.

Цель работы заключается в построении точных решений обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным коэффициентом, а также разработке численных методов решения прямых и обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с переменным коэффициентом.

В рамках указанной цели были поставлены **следующие задачи**:

1. Получить аналитическое решение краевой задачи без начальных условий для дифференциального уравнения с дробной производной по времени, на основании которого построить точные формулы нахождения обобщенного коэффициента диффузии и показателя аномальной диффузии.

2. Разработать метод статистического моделирования (Монте-Карло) для численного решения начально-краевых задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным коэффициентом.

3. На основании классической теории разностных схем построить разностную схему с весами и предложить обобщенный метод прогонки численного решения начально-краевых задач для дифференциального уравнения с дробной производной по времени с переменным коэффициентом.

4. Получить условия устойчивости разностных схем и оценки решений разностных краевых задач для дифференциального уравнения с дробной производной по времени с постоянным и переменным коэффициентом.

5. Разработать модифицированные методы минимизации функционала невязки для численного решения обратных задач, состоящих в определении

(переменного) обобщенного коэффициента диффузии и показателя аномальной диффузии, и провести их сравнительный анализ.

Методика исследования. При решении поставленных задач использовались методы математической физики, дифференциальных уравнений в частных производных, конечных разностей, статистического моделирования, теории вероятностей, дробного, операционного и вариационного исчислений, а также классические и эволюционные методы безусловной оптимизации.

Научная новизна полученных автором результатов заключается в следующем:

1. Впервые получено решение краевой задачи без начальных условий с периодическим источником методом разделения переменных и построено интегральное преобразование, связывающее решение краевой задачи без начальных условий с периодическим источником для уравнения диффузии дробного порядка по времени с решением аналогичной задачи для уравнения параболического типа.

2. Предложены новые постановки обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени, заключающихся в восстановлении обобщенного коэффициента диффузии и дробного показателя диффузии. Решения обратных задач представлены в виде точных аналитических формул.

3. На основании существующей дискретной модели случайного блуждания для уравнения диффузии дробного порядка по времени разработан метод Монте-Карло численного решения первой краевой задачи. Впервые в явном виде получено разложение случайного блуждания на диффузионную и дисперсионную составляющие.

4. Впервые для уравнения диффузии дробного порядка по времени с переменным коэффициентом с помощью интегро-интерполяционного метода построена разностная схема с весами и разработан обобщенный метод прогонки численного решения первой краевой задачи и получены равномерные оценки решения. Исследована устойчивость разностной схемы с весами и условие устойчивости получено в явном виде.

5. Впервые предложены постановки обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени, заключающихся в восстановлении обобщенного коэффициента диффузии и дробного показателя диффузии, и разработан комплекс программ и реализованы оптимизационные методы ньютоновского типа, сопряженных градиентов, а также эволюционные алгоритмы для их решения.

Теоретическое значение работы заключается в том, что предложенные в ней постановки обратных задач являются новыми, а разработанные для их решения методы представляют собой обобщение существующих подходов на случай уравнений с дробной производной по времени.

Практическая ценность работы состоит в том, что результаты исследований, проведенных в диссертации, позволят на практике по данным измерений строить математические модели сред с неизвестными характеристиками.

Достоверность и обоснованность результатов подтверждена сравнением результатов решения прямых задач теории аномальной диффузии сеточными методами, методом Монте-Карло и аналитическими методами.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Разработаны методы аналитического решения обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным коэффициентом, заключающихся в восстановлении его параметров: коэффициента и порядка временно́й производной.

2. Разработан алгоритм статистического моделирования (метод Монте-Карло) для решения прямых задач теории аномальной диффузии в однородных средах.

3. Разработан метод конечных разностей численного решения краевых задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени как с постоянным, так и с переменным коэффициентом.

4. С помощью классической техники получены условия устойчивости разностных схем с весами для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным и переменным коэффициентом, а также оценки решений краевых задач для данного уравнения.

5. Разработаны модифицированные оптимизационные алгоритмы ньютоновского типа и сопряженных градиентов, а также гибридные эволюционные алгоритмы решения обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с переменным коэффициентом, заключающихся в восстановлении его параметров: коэффициента и порядка временно́й производной.

Апробация работы. Основные положения диссертации и отдельные ее результаты докладывались и обсуждались в рамках семинаров, проводимых на кафедре Высшей Математики НГТУ; на семинаре академика В.Н. Монахова в Институте гидродинамики СО РАН; на семинарах чл.-корр. В.Г. Романова и проф. А.М. Блохина в Институте математики им. С.Л. Соболева СО РАН, а также на следующих конференциях:

1. Региональная научная конференция «Наука. Техника. Инновации». Новосибирск, 2001, 2002 гг.

2. Всероссийская научная конференция молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации». Новосибирск, 2003, 2004, 2005, 2006 гг.

3. Korea—Russia International Symposium on Science and Technology. Novosibirsk, 2002; Tomsk, 2004; Novosibirsk, 2005.

4. Международная конференция «Дифференциальные уравнения, теория функций и приложения», посвященная 100-летию со дня рождения академика Ильи Несторовича Векуа. Новосибирск, 2007 г.

5. Всероссийская конференция по вычислительной математике КВМ-2007. Новосибирск, 2007 г.

6. Международная конференция «Обратные и некорректные задачи математической физики», посвященной 75-летию академика М. М. Лаврентьева. Новосибирск, 2007 г.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 15 работ, в том числе 1 работа в журнале из перечня ВАК.

Структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и списка литературы из 109 наименований. Общий объем диссертации составляет 187 страниц, в том числе основной текст — 163 страницы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность работы, сформулирована цель и задачи диссертационного исследования, изложена его научная новизна, раскрыты теоретическое значение и практическая ценность полученных результатов, кратко излагается содержание диссертационной работы.

Первая глава посвящена разработке аналитических методов решения прямых и обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени (или уравнения аномальной диффузии) с постоянным коэффициентом вида

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

где $_tD^\alpha$ — оператор дробного дифференцирования порядка α, $0 < \alpha < 1$. К уравнению с дробной производной по времени приводит использование концепции случайного блуждания при непрерывном времени (CTRW), основанной на предположении, что время ожидания между двумя последовательными «прыжками» частицы является случайной величиной. Обзорно данный подход проиллюстрирован в разд. 1.2.

В зависимости от физического смысла задачи — рассматривается начальная фаза процесса или же стабилизировавшийся процесс — используются различные виды дробно-дифференциальных операторов. В первом случае применяется дробная производная Капуто

$$\mathcal{D}^\alpha_{a+} f(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int\limits_a^t \frac{f'(\xi)}{(t-\xi)^\alpha}\, d\xi, \tag{1}$$

во втором — дробная приизводная Римана—Лиувилля

$$D_{+}^{\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dt} \int\limits_{-\infty}^{t} \frac{f(\xi)}{(t-\xi)^{\alpha}}\, d\xi. \tag{2}$$

При $\alpha \to 1$ дробные производные (1) и (2) переходят в обычную «целую» производную $D^1 f(t) \equiv f_t'$.

Основные результаты главы представлены в разд. 1.3, где рассматриваются методы решения различных краевых задач, а также обратные задачи определения обобщенного коэффициента диффузии λ и показателя аномальной диффузии $\alpha \equiv 2\beta$.

Использование оператора дробного дифференцирования Капуто (1) позволяет построить фундаментальное решение уравнения аномальной диффузии:

$$G(x,t) = \frac{1}{2\lambda\, t^{\beta}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!\,\Gamma(-\beta n + 1 - \beta)} \frac{|x|^n}{\lambda^n t^{\beta n}} \tag{3}$$

т. е. решение в области $-\infty < x < +\infty$, $t \geq 0$ задачи Коши

$$\begin{gathered} {}_t\mathcal{D}_{0+}^{2\beta} u(x,t) = \lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x,t), \qquad 0 < 2\beta < 1, \\ u(x,0) = \delta(x), \qquad -\infty < x < +\infty, \\ u(\pm\infty, t) = 0, \qquad t > 0. \end{gathered}$$

С другой стороны, применение оператора дробного дифференцирования Римана—Лиувилля (2) с учетом того, что ${}_tD_{+}^{2\beta} e^{i\omega t} = (i\omega)^{2\beta} e^{i\omega t}$, позволяет построить в области $x \geq 0$, $-\infty < t < +\infty$ решение краевой задачи без начальных условий

$$\begin{gathered} {}_tD_{+}^{2\beta} u(x,t) = \lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x,t), \\ u(0,t) = A\, e^{i\omega t}, \end{gathered}$$

в виде

$$u(x,t) = A \exp\left(i\omega t - \frac{(i\omega)^{\beta}}{\lambda} x \right). \tag{4}$$

Действительная часть выражения (4) имеет вид

$$\tilde{u}(x,t) = A\, \exp\left(-\frac{\omega^{\beta} x}{\lambda} \cos\frac{\beta\pi}{2} \right) \cos\left(\omega t - \frac{\omega^{\beta} x}{\lambda} \sin\frac{\beta\pi}{2} \right).$$

На основании полученного решения $\tilde{u}(x,t)$ можно определить величины λ и β из дополнительного условия $\tilde{u}(x_0, t_j) = c_j$, где $\tilde{u}(x_0, t_j)$ — экспериментально найденное значение u на расстоянии x_0 от источника в моменты времени t_j. Пусть заданы $\tilde{u}(x_0, t_0) = c_0$, $\tilde{u}(x_0, t_1) = c_1$ и выполняется условие $t_1 - t_0 = \pi/(2\omega)$.

Обратная задача 1 состоит в определении обобщенного коэффициента диффузии λ при известном показателе аномальной диффузии β по данным обратной задачи. Решение обратной задачи 1 дается формулой

$$\lambda = \frac{2\,\omega^{\beta} x_0}{2\,\ln A - \ln\left(c_0^2 + c_1^2\right)}\,\cos\frac{\beta\pi}{2}.$$

При $\beta \to 1/2$ имеем

$$\lambda = \frac{\sqrt{2\omega}\,x_0}{2\ln A - \ln\left(c_0^2 + c_1^2\right)}.$$

Обратная задача 2 заключается в определении β при известном λ по данным обратной задачи. Решение обратной задачи 2 является решением уравнения

$$\omega^{\beta}\cos\left(\frac{\beta\pi}{2}\right) = \frac{\lambda}{2\,x_0}\,\ln\left(\frac{A^2}{c_0^2 + c_1^2}\right).$$

Обратная задача 3. Пусть имеются данные обратной задачи

$$c_0^{\omega_0} \equiv u_{\omega_0}(x_0, t_0), \quad c_1^{\omega_0} \equiv u_{\omega_0}(x_0, t_1)$$

и

$$c_0^{\omega_1} \equiv u_{\omega_1}(x_0, t_0), \quad c_1^{\omega_1} \equiv u_{\omega_1}(x_0, t_1)$$

при двух различных значениях частоты ω_0 и ω_1. Требуется одновременно определить параметры λ и β. Решение обратной задачи 3 имеет вид

$$\beta = \log_{\frac{\omega_1}{\omega_0}}\left(\frac{2\ln A - \ln\left(\left(c_0^{\omega_1}\right)^2 + \left(c_1^{\omega_1}\right)^2\right)}{2\ln A - \ln\left(\left(c_0^{\omega_0}\right)^2 + \left(c_1^{\omega_0}\right)^2\right)}\right),$$

$$\begin{aligned}
\lambda \;&=\; \frac{2\,x_0}{2\ln A - \ln\left(\left(c_0^{\omega_0}\right)^2 + \left(c_1^{\omega_0}\right)^2\right)} \\
&\times\; \exp\left[\log_{\frac{\omega_1}{\omega_0}}\left(\frac{2\ln A - \ln\left(\left(c_0^{\omega_1}\right)^2 + \left(c_1^{\omega_1}\right)^2\right)}{2\ln A - \ln\left(\left(c_0^{\omega_0}\right)^2 + \left(c_1^{\omega_0}\right)^2\right)}\right)\ln\omega_0\right] \\
&\times\; \cos\left[\log_{\frac{\omega_1}{\omega_0}}\left(\frac{2\ln A - \ln\left(\left(c_0^{\omega_1}\right)^2 + \left(c_1^{\omega_1}\right)^2\right)}{2\ln A - \ln\left(\left(c_0^{\omega_0}\right)^2 + \left(c_1^{\omega_0}\right)^2\right)}\right)\frac{\pi}{2}\right].
\end{aligned}$$

Таким образом, при рассмотрении установившегося процесса решения обратных задач могут быть получены в виде точных аналитических формул.

Во **второй главе** предложены численные методы решения прямых и обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным коэффициентом: метод конечных разностей и метод Монте-Карло.

В разд. 2.1 на основе классической теории разностных схем, развитой А.А. Самарским, разработан метод конечных разностей численного решения краевых задач для уравнения аномальной диффузии. При $0 < \alpha < 1$ рассмотрим в прямоугольнике $\Omega = \{0 \le x \le 1,\ 0 \le t \le T\}$ краевую задачу

$$
{}_t\mathcal{D}^{\alpha}_{0+}u(x,t) = \lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x,t), \qquad 0 < x < 1, \quad 0 < t \le T,
$$

$$
u(x,0) = u_0(x), \qquad 0 \le x \le 1,
$$

$$
u(0,t) = \psi_1(t), \quad u(1,t) = \psi_2(t), \qquad 0 \le t \le T.
$$

Введем в Ω сетку

$$
\widehat{\Omega} = \{(x_i = ih, t_j = j\tau) : 0 \le i \le N,\ 0 \le j \le M\}
$$

и обозначим через y_i^j значение в узле (x_i, t_j) сеточной функции y, определенной на $\widehat{\Omega}$. В качестве разностного аналога дробной производной Капуто используется дискретная производная Грюнвальда–Летникова

$$
y_t^{(\alpha)} = \sum_{k=0}^{j+1} (-1)^k \binom{\alpha}{k} \frac{y_i^{j+1-k} - y_i^0}{\tau^{\alpha}}.
$$

Заменяя $\partial^2/\partial x^2$ второй разностной производной и вводя вещественный параметр $0 \le \sigma \le 1$, получим разностную схему с весами

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

где оператор Λ_λ действует по правилу

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

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

$$
y_i^0 = y(x_i, 0) = u_0(x_i),
$$

$$
y_0^j = \psi_1^j, \qquad y_N^j = \psi_2^j.
$$

При $\sigma \ne 0$ схема приводится к каноническому виду

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

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

что позволяет применить к ней ряд методов классической теории разностных схем. Величину

$$Y_i^j = \sum_{k=0}^{j}(-1)^k\binom{\alpha}{k}y_i^0 - \sum_{k=2}^{j}(-1)^k\binom{\alpha}{k}y_i^{j+1-k} \tag{5}$$

будем называть «дисперсионной составляющей».

В разд. 2.1 разработан обобщенный метод прогонки решения первой краевой задачи для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным коэффициентом, на основании формул которого получена оценка решения данной задачи

$$\left\|y^j\right\|_C \le \max\left(\left|\psi_1^j\right|, \left|\psi_2^j\right|\right) + \sum_{i=1}^{N-1}\sum_{k=1}^{i}\left|F_k^j\right|,$$

где

$$\left\|y^j\right\|_C = \max_{x_i\in\widehat{\Omega}}\left|y^j(x_i)\right|.$$

Здесь же получена оценка дисперсионной составляющей

$$\left\|Y^j\right\|_C \le (1-\alpha)\left\|y^0\right\|_C.$$

которая позволила аналитически построить условие устойчивости схемы с весами:

$$\tau^\alpha \le \frac{\alpha\, h^2}{2\,(1-\sigma)\,\lambda^2}.$$

В разд. 2.2 рассматривается метод Монте-Карло численного решения краевых задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным коэффициентом. Основное отличие от классического метода Монте-Карло состоит в том, что в случае диффузии дробного порядка по времени дисперсия длины шага случайно блуждающей частицы конечна, но среднее время ожидания блуждающей частицы бесконечно.

Один из подходов (В.В. Учайкина) состоит в том, что вместо предположения о существовании конечного математического ожидания используется более слабое предположение о том, что рассматриваемая случайная величина — среднее время ожидания — принадлежит области притяжения строго устойчивого распределения $G_{a,\theta}(x)$, определяемого своей характеристической функцией

$$\tilde{g}_{a,\theta}(\xi) = \exp\left\{-|\xi|^a \exp\left(-i\,\frac{\pi a\theta}{2}\,\mathrm{sign}\,\xi\right)\right\}.$$

В разд. 2.2 показано, что функция плотности вероятности одномерного случайного процесса, соответствующего диффузии дробного порядка по времени, имеющая вид

$$G_{a,2\beta}(x,t) = q\left(\frac{x}{\lambda t^{\beta}}\right)\frac{1}{\lambda t^{\beta}},$$

при

$$q(z) = \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n|z|^n}{n!\,\Gamma(-\beta n + 1 - \beta)}$$

совпадает с фундаментальным решением уравнения аномальной диффузии (3).

Программная реализация метода Монте-Карло основывается на дискретной модели случайного блуждания, предложенной R. Gorenflo:

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

в которой вся история «блуждания» частицы вплоть до момента t_j определяет, с вероятностной точки зрения, положение частицы в момент времени t_{j+1}. Данная модель допускает следующее разложение:

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

где диффузионная составляющая

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

характеризует вклад текущего временного слоя в событие, состоящее в переходе частицы на слой t_{j+1}, а дисперсионная составляющая Y_i^j вида (5) содержит информацию об «истории» частицы. Существование дисперсионной части говорит о том, что оператор дробного дифференцирования, в отличие от производной первого порядка, является нелокальным и учитывает информацию о прошлом системы.

В разд. 2.3 приводятся результаты вычислительных экспериментов, в ходе которых 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.

В **третьей главе** рассматриваются численные методы решения прямых и обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с переменным коэффициентом

$$
{}_t\mathcal{D}_{0+}^{\alpha} u(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left(q(x)\frac{\partial}{\partial x}\,u(x,t)\right), \quad 0 < \alpha < 1,
$$

$$
0 < c_1 \le q(x) \le c_2. \tag{6}
$$

Здесь ${}_t\mathcal{D}_{0+}^{\alpha}$ — оператор дробного дифференцирования Капуто.

Результаты разд. 3.1 являются обобщением результатов разд. 2.1 на случай уравнения с переменным коэффициентом диффузии. При помощи интегро-интерполяционного метода построена разностная схема с весами

$$
y_t^{(\alpha)} = \Lambda(\sigma\widehat{y} + (1-\sigma)y),
$$

где $\widehat{y} = y^{j+1}$, а оператор Λ действует по правилу

$$
\Lambda y = \frac{1}{h^2}\left[q_{i-\frac{1}{2}}\,y_{i-1}^{j} - \left(q_{i-\frac{1}{2}} + q_{i+\frac{1}{2}}\right) y_i^j + q_{i+\frac{1}{2}}\,y_{i+1}^{j}\right]. \tag{7}
$$

Схема приводится к каноническому виду

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

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

и устойчива при условии

$$
\tau^{\alpha} \le \frac{\alpha\, h^2}{2\,(1-\sigma)\,c_2}.
$$

Для программной реализации данной разностной схемы предложен обобщенный метод прогонки, на основании формул которого получена оценка решения разностной краевой задачи

$$
\mathcal{L}\left[y_i^{j+1}\right] = -F_i^j,
$$

$$
y_i^0 = f_i, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1;
$$

$$
y_0^j = \psi_1^j, \quad y_N^j = \psi_2^j, \quad j = 1, 2, \ldots, M-1,
$$

в виде

$$
\left\|y^j\right\|_C \le \max\left(\left|\psi_1^j\right|, \left|\psi_2^j\right|\right) + \sum_{i=1}^{N-1}\left[\frac{1}{|a_{i+1}|}\sum_{k=1}^{i}\left|F_k^j\right|\right],
$$

где $a_{i+1} = q_{i+\frac{1}{2}}\zeta_i$, $\zeta_i \ne 0$.

В разд. 3.2 представлен метод минимизации функционала невязки численного решения обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с переменным коэффициентом.

В области $\Omega = \{(x,t) : x \geq 0,\ t \geq 0\}$ рассматривается краевая задача следующего вида:

$$ {}_t\mathcal{D}^{\alpha}_{0+} u(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left(q(x)\frac{\partial}{\partial x}u(x,t)\right), \quad 0 < \alpha \leq 1, \tag{8} $$

$$ u(x,0) = 0, \quad x \geq 0, \tag{9} $$

$$ u(0,t) = f(t), \quad t > 0. \tag{10} $$

Здесь $f(t)$ — периодическая функция, а $q(x)$ — непрерывно дифференцируемая функция, удовлетворяющая (6).

Предполагается, что известна дополнительная информация о решении краевой задачи (8)—(10) в некоторой точке $x = l$:

$$ u(l,t) = \psi(t). \tag{11} $$

Обратные задачи заключаются в восстановлении функции $q(x)$ и показателя α из соотношений (8)—(11).

Заменив область Ω сеточной областью $\widehat{\Omega}$ аппроксимируем прямую задачу (8)—(11) разностной:

$$ y_{\bar{t}}^{(\alpha)} = \Lambda(\sigma\widehat{y} + (1-\sigma)y), \tag{12} $$

$$ y_i^0 = 0, \quad 0 \leq i \leq N, \tag{13} $$

$$ y_0^j = \varphi^j, \quad y_N^j = 0, \quad 1 \leq j \leq M. \tag{14} $$

Оператор Λ действует по правилу (7). В работе показано, что решение разностной прямой задачи (12)—(14) допускает оценку

$$ \|y\|_C \leq \|\varphi\|_C, $$

где $\|y\|_C = \max\limits_j \left\|y^j\right\|_C$, $\|\varphi\|_C = \max\limits_j \left|\varphi^j\right|$, $j = 0, 1, 2, \ldots, M$.

Дополнительная информация (11) аппроксимируется точно:

$$ y_l^j = \psi^j, \quad 0 \leq j \leq M. \tag{15} $$

Разностные обратные задачи заключаются в следующем. На основании (15) требуется

Обратная задача 1: найти сеточную функцию q при $\alpha = 1$;

Обратная задача 2: предполагая α известным, определить сеточную функцию q;

Обратная задача 3: одновременно восстановить сеточную функцию q и величину α.

Следуя А.Н. Тихонову, мы предполагаем, что обобщенный коэффициент диффузии $q(x)$ является функцией некоторого известного класса и его вид определяется набором параметров, отыскание которых и представляет основной интерес. Таким образом, решение обратной задачи сводится к восстановлению функции $q(\chi) = q(\chi_0, \chi_1, \ldots, \chi_{K-1})$, где χ — вектор параметров, характеризующих вид функции q.

В терминах теории безусловной оптимизации разностная обратная задача (12)—(15) имеет вид: найти

$$\min_{\chi \in \mathbf{R}^K} \Psi(\chi) = \mathfrak{F}(\eta(\chi)),$$

где $\eta : \mathbf{R}^K \to \mathbf{R}^M$, $\mathfrak{F} : \mathbf{R}^M \to \mathbf{R}$ и

$$\mathfrak{F}(\eta(\chi)) = \frac{1}{2}\eta(\chi)^T \eta(\chi) = \frac{1}{2}\sum_{j=0}^{M-1} \eta_j^2 = \frac{1}{2}\sum_{j=0}^{M-1} (\psi_j - \xi_j)^2;$$

здесь ξ — модельные данные.

В разд. 3.3 приведены результаты вычислительных экспериментов, в ходе которых были получены решения обратных задач 1, 2 и 3 при помощи методов Левенберга—Марквардта, секущих и Флетчера—Ривса. Коэффициент $q(x)$ рассматривался в виде

$$q(x) = A \exp\left(-\frac{(x-\mu S)^2}{\eta F}\right) \tag{16}$$

и

$$q(x) = \mu A \sin(\eta F x + S) + T, \tag{17}$$

где $\chi = (A, F, S)$, μ и η — параметры масштабирования, а T — параметр сдвига, которые выбираются таким образом, чтобы для всех $x \in \Omega$ выполнялось (6).

Вычислительные эксперименты показали, что поверхности, определяемые функционалом $\Psi(\chi)$, имеют очень сложную овражную структуру, включающую «глубокие» области локального минимума, а глобальный минимум часто лежит в очень малой и «труднодоступной» области. По результатам сравнительного анализа алгоритмов минимизации функционала невязки наиболее эффективным из рассматриваемых следует признать метод Левенберга—Марквардта.

Отдельно рассматривается случай уравнения аномальной диффузии с постоянным коэффициентом, для которого приводится пример решения обратной задачи 3, когда данные обратной задачи расчитываются методом Монте-Карло.

Четвертая глава посвящена рассмотрению эволюционных методов решения обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с переменным коэффициентом.

Для численного решения разностной обратной задачи (12)—(15) в разд. 4.1 разработаны гибридные генетические алгоритмы минимизации функционала невязки, сочетающие масштабирование значений функции приспособленности и селекцию по методу рулетки. Конфигурация колеса рулетки определяется параметрами функции селекции, которая имеет вид $\Phi(x) = C/x^m$, где $x \geq 1$, $C > 1$, $0 < m < 1$.

Функция селекции устанавливает вероятность, с которой данная особь может быть выбрана в качестве родительской на каждом шаге отбора. Дальнейший выбор родительских особей производится по методу рулетки, причем в процессе отбора участвуют лишь особи, значение функции селекции для которых не меньше единицы. Кроме того, алгоритм исключает ситуацию, когда формируются одинаковые пары родителей.

В разд. 4.2 рассматривается алгоритм поиска по шаблону, который в ряде случаев может быть использован для улучшения полученного приближенного решения. Принцип работы данного метода состоит в том, чтобы перебирать в соответствии с некоторой схемой точки, лежащие вблизи текущей точки, с целью найти ту, значение целевой функции в которой меньше, чем в текущей.

В разд. 4.3 показано, что применение эволюционных алгоритмов позволяет расширить класс непрерывно дифференцируемых функций $q(x)$, удовлетворяющих (6), для которых может быть получено численное решение разностной обратной задачи (12)—(15). В качестве примера рассматривается коэффициент вида

$$q(x) = \frac{A}{1 + \exp\left[-\mu R\left(x - \nu S\right)\right]}, \tag{18}$$

где μ и η — параметры масштабирования. Особенностью данного примера является то, что здесь при помощи классических алгоритмов не удается получить решение обратной задачи.

Также в разд. 4.3 представлены результаты сравнительного анализа эффективности эволюционных и классических алгоритмов и их последовательного использования.

В заключении к диссертации приведены основные результаты работы:

1. Впервые построено решение краевой задачи без начальных условий с периодическим источником для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным коэффициентом. Построено интегральное преобразование, связывающее решение краевой задачи без начальных условий с периодическим источником для уравнения диффузии дробного порядка по времени с решением аналогичной задачи для уравнения параболического типа.

2. Построены точные аналитические решения обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным коэффициентом, заключающихся в восстановлении обобщенного коэффициента диффузии и показателя аномальной диффузии, а также одновременном определении этих параметров.

3. Разработан модифицированный метод Монте-Карло для численного решения прямых задач теории аномальной диффузии, в основу которого положены дискретные модели случайного блуждания для уравнений с дробной производной по времени. Впервые в явном виде получено разложение случайного блуждания на диффузионную и дисперсионную составляющие.

4. Разработан метод конечных разностей численного решения краевых задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным и переменным коэффициентом. Впервые аналитически получены условия устойчивости соответствующих разностных схем с весами, оценки решений разностных краевых задач и определены порядки аппроксимации на сетке в случаях явной и чисто неявной схем.

5. Разработаны модифицированные оптимизационные и гибридные эволюционные алгоритмы ньютоновского типа, реализующие метод минимизации функционала невязки решения обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с переменным коэффициентом, состоящих в восстановлении обобщенного коэффициента диффузии и показателя аномальной диффузии. В случае постоянного коэффициента данные обратной задачи моделируются методом Монте-Карло.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. **Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С., Селезнев В.А. Диффузионные волны в средах с остаточной памятью// Науч. вестник НГТУ.— 2002.— №1(12).— С. 45—55.**

2. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Численные алгоритмы решения обратных задач аномальной диффузии // Сб. науч. тр. НГТУ.–2003.— №4(34).— С. 59—64.

3. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Восстановление параметров слоистой среды методом минимизации функционала невязки // Сб. науч. тр. НГТУ. — 2004.— №3(37).— С. 21–26.

4. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Оптимизация вычислений в рамках пакета программ «Численное решение обратных задач аномальной диффузии» // Сб. науч. тр. НГТУ. — 2004. — №3(37).— С. 27–32.

5. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Исследование функционала невязки в задачах мониторинга слоистых сред // Сб. науч. тр. НГТУ. — 2004. — №4(38).— С. 9–14.

6. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Задачи неразрушающего контроля фрактальной среды // Наука. Техника. Инновации: Материалы региональной научной конференции молодых ученых. — Новосибирск, 2001. — Ч.1. — С. 107—108.

7. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Волновые процессы в средах с временной дисперсией // Наука. Техника. Инновации: Материалы региональной научной конференции молодых ученых. — Новосибирск, 2002. — Ч.1. — С. 200—202.

8. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Численное решение обратных задач аномальной диффузии // Наука. Технологии. Инновации: Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. — Новосибирск, 2003. — Ч.1. — С. 223—224.

9. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Численные алгоритмы в обратных задачах восстановления параметров среды на мезоуровне // Наука. Технологии. Инновации: Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. — Новосибирск, 2004. — Ч.1. — С. 213—214.

10. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Метод Монте-Карло в прямых задачах теории аномальной диффузии для неоднородных сред // Наука. Технологии. Инновации: Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. — Новосибирск, 2005. — Ч.1. — С. 277—278.

11. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Численные методы решения обратных задач для уравнения дробной диффузии с гладким коэффициентом // Наука. Технологии. Инновации: Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. — Новосибирск, 2006. — Ч.1. — С. 182—183.

12. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Численные методы решения краевых задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с постоянным коэффициентом // Дифференциальные уравнения, теория функций и приложения: Труды международной конференции, посвященной 100-летию со дня рождения академика Ильи Несторовича Векуа. Новосибирск, 28 мая — 2 июня 2007 г. — Новосибирск, 2007.— С. 556—557.

13. Bondarenko A.N., Ivaschenko D.S., Seleznev V.A. Inverse Sommerfeld Problem for Fractal Media // Proceedings KORUS 2002, Novosibirsk State Technical University, Russia, June 24 — 30, 2002, v.1, — P. 246—252.

14. Ivaschenko D.S. Numerical Algorithms for Solving the Anomalous Diffusion Inverse Problems // Proceedings KORUS 2004, Tomsk Polytechnic University, Russia, June 26 — July 3, 2004, v.2, — P. 137—139.

15. Bondarenko A.N., Ivaschenko D.S. Levenberg—Marquardt Method for Restoration of Layered Medium Key Parameters // Proceedings KORUS 2005, Novosibirsk State Technical University, Russia, June 26 — July 2, 2005, v.1, — P. 43—47.