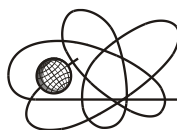




Российская Академия Наук

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

**ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ
БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ
АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ**



ИБРАЭ

RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

**NUCLEAR SAFETY
INSTITUTE**

Препринт ИБРАЭ № ИБРАЭ-2002-10

Preprint IBRAE-2002-10

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

**ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ
ДРОБНОЙ ДИФФУЗИИ В ОДНОМЕРНОМ
СЛУЧАЕ**

Москва
2002

Moscow
2002

Головизнин В.М., Киселев В.П., Короткин И.А. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ДРОБНОЙ ДИФФУЗИИ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ. Препринт № ИБРАЭ-2002-10. Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 2002. 35 с. — Библиогр.: 14 назв.

Аннотация

В настоящей работе разработаны и исследованы вычислительные алгоритмы для решения прямой задачи дробной диффузии в одномерном случае. Рассмотренная модель представляет собой линейное интегро-дифференциальное уравнение с двумя параметрами — дробным порядком производной $\alpha \in [1,2]$ и коэффициентом «скошенности» $\beta \in [-1,1]$. Дробная диффузия существенно отличается от классической поведением концентрации переносимой субстанции на больших расстояниях от носителя начальных данных. В публикации дан обзор основных определений дробных производных, на основе которых построены разностные методы первого и второго порядков аппроксимации по пространству. Приведены как явные, так и частично неявные безусловно устойчивые схемы, а также метод, основанный на преобразовании Фурье. Рассмотрены многочисленные примеры расчетов, иллюстрирующие вычислительные свойства новых алгоритмов, проведено их детальное сравнение, показан второй порядок сходимости при решении стационарных краевых задач методом установления. Данные алгоритмы предполагается использовать прежде всего для отработки методических вопросов решения обратной задачи — определения неизвестных значений параметров дробной диффузии по результатам натуральных наблюдений.

©ИБРАЭ РАН, 2002

Goloviznin V.M., Kiselev V.P., Korotkin I.A. COMPUTATIONAL METHODS FOR ONE-DIMENSIONAL FRACTIONAL DIFFUSION EQUATIONS. (In Russian). Preprint IBRAE-2002-10. Moscow: Nuclear Safety Institute, May 2002. 35 p. — Refs.: 14 items.

Abstract

In the work the computing algorithms for the numerical decision of a fractional diffusion primal problem in a one-dimensional case have been developed and analyzed. The model represents linear integro-differential equation with two parameters — fractional order of derivative $\alpha \in [1,2]$ and coefficient of skewness $\beta \in [-1,1]$. Fractional diffusion essentially differs from classical diffusion by behavior of substance concentration on large distances from the initial data source. In the publication the review of basic definitions of fractional derivatives is given. On the basis of this definitions difference methods of the first and second orders of approximation have been constructed. Explicit, partially implicit unconditionally stable schemes and a method based on Fourier transform are also given. The numerous examples of calculations represent computing properties of new algorithms, their detailed comparison is carried out, the second order of convergence of the decision of stationary boundary value problem by a method of an establishment is shown. The given algorithms are supposed to be used first of all for the adjustment of methodical questions of an inverse problem decision — estimation of unknown values of fractional diffusion parameters by the results of experiments on location.

©Nuclear Safety Institute, 2002

Численные методы решения уравнения дробной диффузии в одномерном случае

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

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

Содержание

1. Введение	3
Уравнение дробной диффузии	3
Определения дробных производных	4
Фундаментальные решения	6
2. Численные методы решения уравнения дробной диффузии	7
Метод Фурье	7
Метод Грюнвальда-Летникова	8
Метод Римана-Лиувилля	10
Метод Маршо	12
3. Сравнительный анализ численных методов	13
Нестационарная задача	13
Задача о трещине	14
Стационарная задача	15
4. Заключение	17
5. Список литературы	19
6. Приложение	20

1. Введение

Уравнение дробной диффузии

Стандартной моделью процесса переноса вещества в однородной среде является известное классическое уравнение конвекции-диффузии, которое в одномерном случае при отсутствии источников имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (1.1)$$

Профиль концентрации для ансамбля частиц, подчиняющихся этой модели, будет характеризовать плотность вероятности нахождения частицы в той или иной области. При этом параметр D характеризует Броуновское движение точек в среде, а v — скорость их смещения вдоль оси x .

Если в качестве начального условия принять дельта-функцию Дирака $\delta(x-a)$, то в любой момент времени t профиль концентрации будет Гауссовым и, следовательно, симметричным, имеющим очень быстро (экспоненциально) убывающие хвосты при удалении от центра:

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{(a-x+vt)^2}{4Dt}}. \quad (1.2)$$

Расстояние между двумя блуждающими частицами будет расти как $t^{1/2}$ [1].

С другой стороны, существуют лабораторные эксперименты [1], которые указывают на то, что далеко не всегда уравнение (1.1) пригодно для моделирования процессов переноса. В неоднородных средах профили концентраций могут быть «скошенными» (несимметричными), а также иметь так называемые «тяжелые» хвосты, которые подчиняются более медленному — степенному закону убывания. Последний факт может быть интересен гидрогеологам в связи с вопросами обоснования безопасности хранения высокоактивных долгоживущих радиоизотопов в геологических формациях, поскольку существующие ранее представления о безопасности базировались на представлениях об экспоненциальной скорости затухания.

В настоящее время для описания подобных явлений в сильно неоднородных средах применяется модель дробной диффузии. Идея состоит в том, чтобы в классическом уравнении диффузии (1.1) уменьшить порядок дифференцирования по пространству, сделав его не вторым, как это принято, а дробным. Обоснование этого шага можно получить, например, в [1, 4]. Таким образом, в случае одного пространственного измерения классическое уравнение (1.1) обобщается и принимает вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + (1 + \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} + (1 - \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha}. \quad (1.3)$$

Здесь $C(x, t)$ — концентрация переносимой субстанции, v — скорость конвективного переноса, D — коэффициент дисперсии, α — дробная степень оператора дифференцирования ($1 \leq \alpha \leq 2$), β — коэффициент его кососимметричности ($-1 \leq \beta \leq 1$). Выражение (1.3) дает одномерное уравнение дробной диффузии.

Наиболее интересным и практически важным вопросом, стоящим перед гидрогеологами в настоящее время, является вопрос об идентификации параметров дробной диффузии α, β, v, D 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. Частичному устранению существующего пробела и посвящена данная работа.

Определения дробных производных

В настоящее время существует несколько подходов к определению производной дробного порядка [2, 3]. Рассмотрим вкратце суть каждого определения. Одно из них основано на обобщении оператора дифференцирования в Фурье-пространстве. Так, если функция $\phi(x)$ абсолютно интегрируема на отрезке $[-\pi, \pi]$, то ее можно представить в виде бесконечной суммы:

$$\phi(x) \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} \phi_k e^{ikx}, \quad \phi_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \phi(x) \cdot e^{-ikx} dx. \quad (1.4)$$

Известно, что первая производная в Фурье-пространстве выглядит просто как умножение на $(-ik)$:

$$F \left[\frac{\partial \phi}{\partial x} \right] = (-ik) \cdot \phi_k. \quad (1.5)$$

Отсюда вытекает определение дробной производной по Вейлю для абсолютно интегрируемой, 2π -периодической функции:

$$D_{\pm}^{\alpha} \phi(x) \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} (\mp ik)^{\alpha} \phi_k e^{ikx}. \quad (1.6)$$

Совершенно другой подход использовали Грюнвальд и Летников. Рассмотрим конечно-разностные определения целых производных различного порядка:

$$\begin{aligned} & \frac{F(x) - F(x-h)}{h}, \\ & \frac{F(x) - 2F(x-h) + F(x-2h)}{h^2}, \\ & \frac{F(x) - 3F(x-h) + 3F(x-2h) - F(x-3h)}{h^3}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Эти соотношения при $h \rightarrow 0$ дают соответственно первую, вторую и третью производные от $F(x)$. Но формулы (1.7) могут быть обобщены и на производные произвольного порядка:

$$F^{(\alpha)}(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta_h^\alpha F(x)}{h^\alpha}, \quad (1.8)$$

где

$$\Delta_h^\alpha F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{\alpha}{k} F(x - k \cdot h), \quad (1.9)$$

а биномиальные коэффициенты $\binom{\alpha}{k}$ определяются из выражения:

$$\binom{\alpha}{k} = \frac{\alpha(\alpha-1)\dots(\alpha-k+1)}{k!} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(k+1) \cdot \Gamma(\alpha-k+1)}. \quad (1.10)$$

Таким образом, производная Грюнвальда-Летникова подчиняется равенству:

$$D_{\pm}^\alpha \phi(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta_{\pm h}^\alpha \phi(x)}{h^\alpha}, \quad (1.11)$$

и существует для непрерывных функций [2, 3].

Идея еще одного определения дробной производной заключается в обобщении формулы Коши для n -кратного интеграла

$$\int_a^x \int_a^{x_{n-1}} \dots \int_a^{x_1} \phi(x_0) dx_0 \dots dx_{n-1} = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-t)^{n-1} \phi(t) dt \quad (1.12)$$

на дробный порядок n . Исходя из этого, определение дробного интеграла согласно Риману-Лиувиллю представляется следующими выражениями:

$$\begin{aligned} I_{a+}^\alpha \phi(x) &= \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} \phi(t) dt, \\ I_{b-}^\alpha \phi(x) &= \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b (t-x)^{\alpha-1} \phi(t) dt, \quad \alpha > 0. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Интегралы определены на интегрируемых по Лебегу функциях на отрезке $[a, b]$ и существуют почти всюду. Дробное дифференцирование вводится как операция, обратная дробному интегрированию:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{a+}^{\alpha} \phi(x) = D^m I_{a+}^{m-\alpha} \phi(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_a^x \frac{\phi(t) dt}{(x-t)^{\alpha-m+1}} \\ D_{b-}^{\alpha} \phi(x) = (-1)^m D^m I_{b-}^{m-\alpha} \phi(x) = \frac{(-1)^m}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_x^b \frac{\phi(t) dt}{(t-x)^{\alpha-m+1}} \end{array} \right. \quad (1.14)$$

Ниже для выполнения расчетов мы положим $m=1$, чтобы $\alpha \in [0,1)$. Дробные производные Римана-Лиувилля определены в классе функций, $[\alpha]-1$ раз абсолютно дифференцируемых на отрезке $[a, b]$, и также существуют почти всюду [2, 3].

Наконец, четвертое определение дробной производной на отрезке было предложено *Маршо*. Оно непосредственно вытекает из дробной производной Римана-Лиувилля (1.14) и справедливо для достаточно хороших — дифференцируемых функций:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{a+}^{\alpha} \phi(x) = \frac{\phi(x)}{\Gamma(1-\alpha) \cdot (x-a)^{\alpha}} + \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^x \frac{\phi(x) - \phi(t)}{(x-t)^{1+\alpha}} dt \\ D_{b-}^{\alpha} \phi(x) = \frac{\phi(x)}{\Gamma(1-\alpha) \cdot (b-x)^{\alpha}} + \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \int_x^b \frac{\phi(x) - \phi(t)}{(x-t)^{1+\alpha}} dt \end{array} \right. \quad (1.15)$$

Полный и подробный вывод выписанных выше соотношений приведен в [3]. Далее мы рассмотрим численные методы, основанные на всех четырех рассмотренных здесь определениях, и качественно проанализируем их преимущества и недостатки. Но прежде еще затронем проблему построения фундаментальных решений уравнения дробной диффузии.

Фундаментальные решения

Решение уравнения дробной диффузии (1.3) может быть получено с помощью преобразования Фурье и обобщения функции $ERF(z)$ (Error Function), которая определяется следующим образом:

$$ERF(z) = 2 \int_0^z \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} dx. \quad (1.16)$$

Этот интеграл не может быть выражен через элементарные функции, однако он численно вычислен и затабулирован. Решение классического уравнения диффузии (1.1) можно аппроксимировать с помощью $ERF(z)$ следующим образом [1]:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[1 - ERF \left(\frac{x - vt}{2\sqrt{Dt}} \right) \right]. \quad (1.17)$$

Далее, по аналогии с этой широко применяемой формулой, запишем похожее решение и для уравнения дробной диффузии (1.3) в симметричном случае, при $\beta = 0$:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[1 - SERF_{\alpha} \left(\frac{x - vt}{(Dt)^{1/\alpha}} \right) \right], \quad (1.18)$$

где

$$SERF_{\alpha}(z) = 2 \int_0^z f_{\alpha}(x) dx, \quad (1.19)$$

$f_\alpha(x)$ — стандартная, симметричная плотность порядка α , а коэффициент 2 в знаменателе аргумента функции $SERF(z)$ в уравнении (1.18) опущен для простоты. Поэтому следует отметить, что

$$ERF(z) = SERF_{2,0}(2z). \quad (1.20)$$

Интеграл в выражении для $SERF(z)$ также может быть вычислен либо численно, либо с помощью готовых таблиц, приведенных, например, в [1].

Исходя из решения (1.18), можно сделать вывод о том, как будет вести себя максимум распределения концентрации с течением времени. Если в классическом случае $C_{\max}(t) \sim 1/\sqrt{t}$, то в рамках модели дробной диффузии $C_{\max}(t) \sim t^{-1/\alpha}$. Как показывает численное исследование, проведенное в работе [2], такая зависимость сохраняется и при произвольных значениях β . Этот факт позволяет достаточно точно идентифицировать параметр α по известной динамике изменения максимума профиля $C(x)$. Правда, такой метод оценки α удобен лишь при решении одномерной задачи. В общем случае необходимы более гибкие и сложные методы.

2. Численные методы решения уравнения дробной диффузии

В этой работе мы пока отвлечемся от коэффициента дисперсии D , положив его равным единице, и пренебрежем скоростью конвективного переноса v . Промоделируем различными методами поведение решений уравнения

$$\frac{\partial C}{\partial t} = L_\beta^\alpha C, \quad L_\beta^\alpha = \frac{1+\beta}{2} \cdot \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} + \frac{1-\beta}{2} \cdot \frac{\partial^\alpha}{\partial (-x)^\alpha} \quad (2.1)$$

на отрезке $x \in [0, 2\pi]$. При этом в качестве начального условия при тестировании численных схем в нестационарном случае возьмем сеточную дельта-функцию, смещенную относительно начала координат на π :

$$C(x, t = 0) = \delta(x - \pi). \quad (2.2)$$

Высота сеточной дельта-функции обратна шагу расчетной сетки h , где $h = 2\pi/(N-1)$, N — полное число узлов, включая граничные:

$$\delta_h(x - \pi) = \begin{cases} 1/h, & \text{if } i = N/2 \\ 0, & \text{if } i \neq N/2 \end{cases} \quad (2.3)$$

так, чтобы полный интеграл равнялся единице. В дальнейшем везде для удобства будем считать $N = 2^n$, где n — натуральное число. Расчетную сетку возьмем равномерную и занумеруем ее узлы от нуля до $N-1$. Значения концентраций отнесем к узлам сетки, а значения потоков — к центрам ячеек.

Метод Фурье

При условии, что коэффициенты α, β , входящие в уравнение (2.1), постоянны, периодическое решение $C(x, t) = C(x + 2\pi, t)$ этого уравнения обычно ищется с помощью разложения в ряд Фурье:

$$C(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k(t) \cdot \exp(ikx). \quad (2.4)$$

Применение преобразования Фурье к уравнению (2.1) дает его решение в Фурье-пространстве:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{c}_k(t)}{dt} &= L_{\beta}^{\alpha} \hat{c}_k(t); \\ \hat{c}(k, t) &= \hat{c}(k, t_0) \cdot [\cos(\Psi \cdot t) + i \cdot \sin(\Psi \cdot t)] \cdot \exp(|k|^{\alpha} \cos(\pi\alpha/2) \cdot t), \\ \Psi &= -|k|^{\alpha} \cdot \beta \cdot \sin(\pi\alpha/2). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Далее, выполнив обратное преобразование, можно получить решение исходного уравнения (2.1). Здесь мы использовали определение дробной производной по Вейлю (1.6). При практической реализации этой процедуры при различных начальных условиях естественно воспользоваться стандартными численными алгоритмами быстрого преобразования Фурье.

Подробнее метод изложен в [2]. Кроме того, в этой публикации приведен алгоритм для нахождения решения уравнения дробной диффузии в двухмерном случае. Однако здесь многомерные задачи мы рассматривать не будем.

Метод Грюнвальда-Летникова

В работе [2] также подробно изложен и этот метод. В отличие от метода Фурье, он является разностным, и основан на определении дробной производной Грюнвальда-Летникова (1.11). Суть этого алгоритма заключается в следующем. Исходное уравнение (2.1) было представлено в разностном, операторно-поточковом виде:

$$\begin{aligned} \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} &= \frac{(1+\beta)}{2} \cdot \mathbf{L}_i \bar{C}^n + \frac{(1-\beta)}{2} \cdot \mathbf{R}_i \bar{C}^n, \\ \mathbf{L}_i \bar{C}^n &= \left\{ \frac{\Delta^{\alpha} C^n}{\Delta x^{\alpha}} \right\}_{i+1} = \frac{1}{h} \left({}^{+\alpha}F_{i+1/2}^n - {}^{+\alpha}F_{i-1/2}^n \right), \quad (1 \leq \alpha \leq 2), \\ \mathbf{R}_i \bar{C}^n &= \left\{ \frac{\Delta^{\alpha} C^n}{(-\Delta x)^{\alpha}} \right\}_{i-1} = \frac{1}{h} \left({}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n - {}^{-\alpha}F_{i-1/2}^n \right), \quad (-1 \leq \beta \leq 1). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Где потоки F вычисляются согласно определению дробной производной Грюнвальда-Летникова:

$$\begin{aligned} {}^{+\alpha}F_{i+1/2}^n &= \left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1} C}{\Delta x^{\alpha-1}} \right\}_{i+1} = \frac{1}{h^{\alpha-1}} \sum_{k=0}^{[(x-a)/h]} \lambda_k \cdot C(x_{i+1} - k \cdot h, t), \\ {}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n &= \left\{ \frac{\Delta^{\alpha-1} C}{(-\Delta x)^{\alpha-1}} \right\}_i = -\frac{1}{h^{\alpha-1}} \cdot \sum_{k=0}^{[(b-x)/h]} \lambda_k \cdot C(x_i + k \cdot h, t). \end{aligned} \quad (2.7)$$

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

$$\lambda_{k+1} = -\frac{\lambda_k \cdot (\alpha - k - 1)}{k + 1}, \quad \lambda_0 = 1. \quad (2.8)$$

Опустив все промежуточные выкладки, отметим, что операторы \mathbf{R} и \mathbf{L} при $\alpha \neq 1, 2$ представляют собой полностью заполненные треугольные матрицы с единичными элементами, прилегающими к главным диагоналям. Например, оператор \mathbf{L} имеет вид:

$$\mathbf{L} = \frac{1}{h^\alpha} \begin{pmatrix} \theta_1 & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \theta_4 & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \theta_{N-4} & \theta_{N-5} & \dots & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_{N-3} & \theta_{N-4} & \dots & \dots & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & 0 \\ \theta_{N-2} & \theta_{N-3} & \dots & \dots & \dots & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 \\ \theta_{N-1} & \theta_{N-2} & \dots & \dots & \dots & \dots & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 \\ \theta_N & \theta_{N-1} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Где коэффициенты θ_k связаны рекуррентным соотношением:

$$\theta_{k+1} = -\frac{\theta_k \cdot (\alpha - k)}{k + 1}, \quad \theta_0 = 1. \quad (2.10)$$

Как показывает анализ, эта схема аппроксимирует исходное уравнение (2.1) с первым порядком по h и τ и является устойчивой при $\frac{\alpha\tau}{h^\alpha} \leq 1$.

Существует также безусловно устойчивая частично неявная схема, построенная на определении Грюнвальда-Летникова. Этот алгоритм менее требователен к вычислительным ресурсам за счет возможности увеличить шаг по времени τ , и дает те же результаты, что и явная схема. Метод описывается уравнением:

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} = (1 + \beta) \cdot \left(\frac{+{}^\alpha \tilde{F}_{i+1/2}^{n+1/2} - +{}^\alpha \tilde{F}_{i-1/2}^{n+1/2}}{h} \right) + (1 - \beta) \cdot \left(\frac{-{}^\alpha \tilde{F}_{i+1/2}^{n+1/2} - -{}^\alpha \tilde{F}_{i-1/2}^{n+1/2}}{h} \right), \quad (2.11)$$

где

$$\begin{aligned} +{}^\alpha \tilde{F}_{i+1/2}^{n+1/2} &= \frac{C_{i+1}^{n+1} - (\alpha - 1) \cdot C_i^{n+1}}{h^{\alpha-1}} + (Lrest)_{i+1/2}^n, \\ -{}^\alpha \tilde{F}_{i+1/2}^{n+1/2} &= -\frac{C_i^{n+1} - (\alpha - 1) \cdot C_{i+1}^{n+1}}{h^{\alpha-1}} - (Rrest)_{i+1/2}^n, \end{aligned} \quad (2.12)$$

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

После подстановки потоков (2.12) уравнение (2.11) сводится к досконально изученному уравнению с трехдиагональной матрицей, которое решается экономичным методом трехточечной прогонки:

$$\begin{aligned} \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} = & (1+\beta) \cdot \left(\frac{C_{i+1}^{n+1} - \alpha \cdot C_i^{n+1} + (\alpha-1) \cdot C_{i-1}^{n+1}}{h^\alpha} \right) + \\ & + (1-\beta) \cdot \left(\frac{(\alpha-1) \cdot C_{i+1}^{n+1} - \alpha \cdot C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{h^\alpha} \right) + Q_i^n, \end{aligned} \quad (2.13)$$

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

Обоснование и сравнительный анализ данных схем достаточно подробно приведены в работе [2], поэтому не будем больше на них останавливаться и перейдем к описанию метода более высокого порядка аппроксимации.

Метод Римана-Лиувилля

Необходимость повышения порядка аппроксимации по пространству вызвана тем, что предыдущие разностные схемы (первого порядка) некорректно описывали поведение профиля концентрации для малых значений α . Увеличение числа узлов частично решало проблему, но неминуемо приводило к существенному увеличению вычислительных затрат. В определении Римана-Лиувилля (1.14) входит некоторый интеграл, который может быть численно вычислен с любой заданной точностью. Следовательно, это определение дает нам возможность аппроксимировать дробные производные с любым необходимым порядком.

Итак, при $m=1$ операции дробного дифференцирования на отрезке $[a, b]$ по Риману и Лиувиллю, согласно (1.14), имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \cdot \frac{d}{dx} \int_a^x \frac{C(t)dt}{(x-t)^\alpha}, \\ \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha} &= \frac{-1}{\Gamma(1-\alpha)} \cdot \frac{d}{dx} \int_x^b \frac{C(t)dt}{(t-x)^\alpha}, \\ x \in [a, b], \quad 0 \leq \alpha < 1. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Представим исходное уравнение дробной диффузии в разностном потоковом виде, подобно (2.6):

$$\frac{C^{n+1} - C^n}{\tau} = \frac{1+\beta}{2} \cdot \frac{{}^+F_{i+1/2}^n - {}^+F_{i-1/2}^n}{h} + \frac{1-\beta}{2} \cdot \frac{{}^-F_{i+1/2}^n - {}^-F_{i-1/2}^n}{h}. \quad (2.15)$$

Выражение (2.15) дает первый порядок аппроксимации по τ . Порядок аппроксимации по h будет зависеть от того, с какой точностью мы представим потоки F . Рассмотрим, например, поток ${}^+F_{i+1/2}^n$:

$${}^+F_{i+1/2}^n = \frac{\partial^{\alpha-1} C}{\partial x_{i+1/2}^{\alpha-1}}, \quad 1 \leq \alpha < 2. \quad (2.16)$$

Тогда, согласно определению (2.14), после разбиения входящего в него интеграла на сумму интегралов по отрезкам, ограниченными узлами расчетной сетки, получим:

$${}^+F_{i+1/2}^n = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \cdot \frac{d}{dx_{i+1/2}} \left[\sum_{k=0}^{i-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{C(t)dt}{(x_{i+1/2}-t)^{\alpha-1}} + \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \frac{C(t)dt}{(x_{i+1/2}-t)^{\alpha-1}} \right], \quad (2.17)$$

$$x_0 = a, \quad 1 \leq \alpha < 2.$$

Совершенно аналогично записывается поток ${}^-F_{i+1/2}^n$:

$${}^-F_{i+1/2}^n = \frac{-1}{\Gamma(2-\alpha)} \cdot \frac{d}{dx_{i+1/2}} \left[\sum_{k=i+1}^{N-2} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{C(t)dt}{(t-x_{i+1/2})^{\alpha-1}} + \int_{x_{i+1/2}}^{x_{i+1}} \frac{C(t)dt}{(t-x_{i+1/2})^{\alpha-1}} \right], \quad (2.18)$$

$$x_{N-1} = b, \quad 1 \leq \alpha < 2.$$

Для получения разностного метода второго порядка аппроксимации по h , достаточно представить подынтегральную функцию $C(x)$ в виде непрерывной, кусочно-линейной функции $\beta_k \cdot x + \gamma_k$, где

$$x \in [x_k, x_{k+1}],$$

$$\beta_k = \frac{C_{k+1} - C_k}{h}, \quad (2.19)$$

$$\gamma_k = C_k - \beta_k \cdot x_k.$$

Вообще говоря, погрешность в определении потоков по формулам (2.17) и (2.18) не превосходит h^{m+2} , где m — степень многочлена, которым проинтерполирована функция $C(x)$ внутри отрезков $[x_k, x_{k+1}]$. В нашем случае $m = 1$, потоки F имеют третий порядок аппроксимации по h , и, следовательно, вся схема (2.15) — второй.

Далее, интегрирование в формулах (2.17) и (2.18) можно произвести аналитически. В результате получим довольно громоздкие выражения для обоих потоков, которые удобно представить в операторном виде:

$$\mathbf{L}_i \bar{C}^n = \frac{1}{h} \cdot ({}^+F_{i+1/2} - {}^+F_{i-1/2}), \quad (2.20)$$

$$\mathbf{R}_i \bar{C}^n = \frac{1}{h} \cdot ({}^-F_{i+1/2} - {}^-F_{i-1/2}).$$

Как показал расчет, вид матриц \mathbf{L} и \mathbf{R} совершенно аналогичен матрицам, полученным методом Грюнвальда-Летникова в предыдущей главе. Однако коэффициенты θ_k в операторе (2.9) будут иметь более сложный вид:

$$\theta_0 = \frac{1}{(2-\alpha) \cdot \Gamma(2-\alpha) \cdot 2^{2-\alpha}},$$

$$\theta_1 = \theta_0 (3^{2-\alpha} - 2), \quad (2.21)$$

$$\theta_k = \theta_0 \left[(2k-3)^{2-\alpha} - 2 \cdot (2k-1)^{2-\alpha} + (2k+1)^{2-\alpha} \right],$$

$$k \geq 2, \quad 1 \leq \alpha < 2.$$

Таким образом, мы получили более точный численный метод второго порядка аппроксимации по пространству. Схема, как показывает анализ, также устойчива при $\frac{\alpha\tau}{h^\alpha} \leq 1$.

Можно модифицировать и эту схему, сделав ее частично неявной и безусловно устойчивой. Достаточно лишь подставить новые коэффициенты θ_k в уже готовый явно-неявный метод Грюнвальда-Летникова, описываемый уравнениями (2.11) — (2.13). При этом мы снова получим менее ресурсоемкий алгоритм за счет возможности увеличить шаг по времени τ .

Метод Маршо

Наконец, проследим за тем, что нам может дать применение определения дробной производной по Маршо (1.15). Как упоминалось, эта формулировка получается из производной Римана-Лиувилля (1.14) несложными арифметическими преобразованиями [3]. Тем не менее, проделаем с определением Маршо ту же процедуру, что и с определением Римана-Лиувилля в предыдущей главе. А именно, представим исходное уравнение (2.1) в разностном, операторно-потокосом виде (2.15) и (2.20). Затем разобьем интегралы, входящие в определение Маршо на сумму интегралов по отрезкам, подобно (2.17) и (2.18). И снова проинтерполируем подынтегральную функцию $C(x)$ непрерывной, кусочно-линейной функцией $\beta_k \cdot x + \gamma_k$, коэффициенты которой подчиняются (2.19). Таким образом, мы, как и прежде, получим не менее громоздкие разностные выражения для потоков F третьего порядка аппроксимации, обеспечив тем самым второй порядок по пространству для всей схемы в целом.

Опустим многочисленные арифметические действия, связанные с вычислениями коэффициентов θ_k для операторов \mathbf{R} и \mathbf{L} . Заметим лишь только то, что эти коэффициенты совершенно совпадают с коэффициентами Римана-Лиувилля (2.21), что подтверждает эквивалентность определений Маршо и Римана-Лиувилля в данном случае.

Тем не менее, определение дробной производной по Маршо интересно тем, что оно может быть легко модернизировано так, чтобы производная дробного порядка от константы равнялась нулю. Для этого опустим первые слагаемые в выражении (1.15):

$$\begin{cases} D_{a+}^{\alpha} \phi(x) = \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^x \frac{\phi(x) - \phi(t)}{(x-t)^{1+\alpha}} dt \\ D_{b-}^{\alpha} \phi(x) = \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \int_x^b \frac{\phi(x) - \phi(t)}{(x-t)^{1+\alpha}} dt \end{cases} \quad (2.22)$$

Таким образом, мы получили более естественное определение для вычисления дробных потоков. Для этой модели в случае постоянного начального фона концентрации по всей расчетной области этот фон останется неизменным.

Расчет показывает, что такое изменение, внесенное в определение Маршо, отразится только на первых двух коэффициентах θ_k , полученных методом Римана-Лиувилля:

$$\begin{aligned} \theta_0^{\text{Marchaud}} &= \theta_0^{\text{Riemann-Liouville}} - \frac{3^{1-\alpha}}{2^{2-\alpha} \cdot \Gamma(2-\alpha)}, \\ \theta_1^{\text{Marchaud}} &= \theta_1^{\text{Riemann-Liouville}} - \frac{3^{1-\alpha}}{2^{2-\alpha} \cdot \Gamma(2-\alpha)}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Остальные коэффициенты останутся прежними.

В следующей главе мы проанализируем все приведенные выше численные алгоритмы и выясним их перспективность при решении различных практических задач.

3. Сравнительный анализ численных методов

Прежде чем непосредственно приступить к сравнению различных численных методов, пронаблюдаем за тем, как изменилось решение классического уравнения диффузии (1.1) (случай $\alpha = 2.0$) при замене второй производной на дробную.

Так, на рисунке 1 изображен профиль концентрации некоторых частиц при различных α , остальные параметры задачи зафиксированы. В качестве начального условия была принята сеточная дельта-функция (2.3), помещенная в центр рассматриваемой области. Видно, что распространение частиц при $\alpha < 2$, в отличие от классического случая, ведет себя несколько по-другому. Главное отличие заключается в поведении профилей на хвостах. Это отчетливо видно на рисунке 2, где по оси ординат отложен натуральный логарифм концентрации. Если при $\alpha = 2.0$ хвосты убывают экспоненциально, то при дробных порядках дифференцирования они убывают существенно медленнее, подчиняясь степенному закону. Эта важная особенность обусловлена тем, что в модели дробной диффузии значения потоков вычисляются исходя из значений концентраций во всех точках области, а не только в двух соседних, как это было в классической модели.

Далее, можно посмотреть, как влияет на решение параметр «кососимметричности» или, иначе, «скошенности», обозначенный символом β (рисунок 3). С введением этого параметра два возможных направления движения частицы перестают быть равновероятными, и профиль начинает смещаться в определенную сторону от центра.

На рисунках 4 и 5 мы можем проследить динамику распространения концентрации с течением времени при некоторых значениях α и β . Здесь более или менее наглядно виден физический смысл параметров уравнения дробной диффузии. Коэффициент α характеризует неоднородность, гетерогенность среды, в которой происходит перенос вещества. А коэффициент β — неизотропность или несимметричность этой среды.

Нестационарная задача

Проведем сравнение трех численных методов решения уравнения дробной диффузии: Фурье, Грюнвальда-Летникова и Римана-Лиувилля. Метод Маршо (построенный на определении (1.15)), как эквивалентный методу Римана-Лиувилля, рассматривать не будем. Поставим нестационарную задачу, когда задано начальное условие (2.3). И проследим за тем, как будут описывать динамику распространения профиля концентрации упомянутые методы при различных значениях α и β .

На рисунках 6-8 видно, что все решения практически совпадают. Различия на 128 узлах становятся заметными только при значениях α , близких к единице, когда оба разностных метода результат искажают. Однако, увеличив число узлов до 256 (рисунок 9), а затем и до 512 (рисунок 10), метод Римана-Лиувилля (второй порядок аппроксимации) не дает никаких заметных расхождений по сравнению с методом Фурье. В то же время, схема Грюнвальда-Летникова (первый порядок аппроксимации), как видно на этих рисунках, по-прежнему искажает решение, хотя и в меньшей степени. Практически такие же результаты наблюдаются и при других значениях параметра β .

Смысл коэффициентов θ_k в методе Римана-Лиувилля, не смотря на более сложный по сравнению с коэффициентами Грюнвальда-Летникова вид, не изменился. Они также быстро стремятся к нулю (рисунки 11-13), и их частичная сумма

$$Q^n = \sum_{k=0}^n \theta_k \quad (3.1)$$

убывает также медленно с ростом n [2]. Так что для достижения Q^n значений, близких к нулю, требуется число узлов, превосходящих многие сотни (рисунки 14 и 15). Этот факт не позволяет просто отбро-

сить малые коэффициенты в обеих схемах. Такое пренебрежение малыми θ_k может обернуться неправильным поведением распределения концентрации в области «далеких» хвостов.

Наконец, сравним между собой модернизированный метод Маршо (построенный согласно определению (2.22)) и метод Римана-Лиувилля. Как оказалось, при $\beta = 0$ эти алгоритмы дают одинаковые результаты. Но при значениях β , отличных от нуля, наблюдается некоторый сдвиг профиля концентрации, рассчитанного методом Маршо, относительно профиля Римана-Лиувилля (рисунки 37 и 39). Различие в первых двух коэффициентах для рассматриваемых методов можно пронаблюдать на рисунках 38 и 40. Дальнейшие вычисления показали, что алгоритм Маршо, в отличие от других методов, действительно с течением времени не вносит никаких заметных изменений в начальный постоянный фон концентрации.

Задача о трещине

Перейдем к рассмотрению другой нестационарной задачи. От предыдущей она отличается постановкой начального условия: дельта-функция расположена не в середине области, а в начале координат. Иначе говоря,

$$C(x, t = 0) = \delta_h(x) = \begin{cases} 1/h, & \text{if } i = 1 \\ 0, & \text{if } i \neq 1 \end{cases} \quad (3.2)$$

В этой задаче важно корректно задать граничное условие слева. Чтобы сохранялся полный интеграл от концентрации

$$\int_0^{2\pi} C(x, t) \cdot dx = const, \quad \forall t > 0, \quad (3.3)$$

примем значение потока через левую границу равным нулю: ${}^+F_{1/2} = {}^-F_{1/2} = 0$.

На рисунках 16-18 представлены решения при различных значениях параметра β без трещины. Результаты вполне предсказуемы: при отрицательных β максимум распределения перемещается слева направо, а при $\beta \geq 0$ максимум остается в начале координат, различается лишь поведение хвостов. Для сравнения, на рисунке 19 приведены профили концентраций в классическом случае, который соответствует решению уравнения (1.1).

Далее, введем в середину области разрыв или трещину, модель которой заключается в следующем. Поток слева от трещины рассчитывается исходя из значений концентраций только слева, соответственно потоки справа рассчитываются исходя из значений концентраций только справа. Ранее, чтобы вычислить потоки в какой-либо точке, необходимо было знать величины концентраций по всей области. Теперь вещество, не находящееся непосредственно на границе трещины, через нее не распространяется. Мы примем, что разрыв расположен в центре отрезка $[0, 2\pi]$ и является достаточно тонким (в одну ячейку).

Ясно, что при $\alpha = 2.0$ эта трещина не окажет никакого влияния на распределение концентрации по всей области, так как в классическом случае значения потоков вычисляются только по концентрациям в соседних точках. Очень наглядное подтверждение этому факту дает рисунок 20, на котором изображены два профиля: при $\alpha = 2.0$ и $\alpha = 1.75$. Видно, что уже при небольшом уменьшении α щель вносит некоторое возмущение в профиль концентрации.

Проследим за влиянием трещины на распределения при различных параметрах α и β . Рисунки 21 и 23 дают профили по всей длине области $[0, 2\pi]$, а рисунки 22 и 24 — вблизи разрыва, то есть то же самое, но в несколько более увеличенном виде. Как видно, в изотропном случае, когда $\beta = 0$, относительно небольшое количество вещества скапливается вблизи трещины и затем легко просачивается через нее.

Немного иначе происходит диффузия при $\beta = -1$. В этом случае профиль концентрации при пересечении щели изменяется скачком, как показано на рисунках 23 и 24.

Интерес к данной задаче вызван тем, что поведение профиля вблизи разрыва, как видно, неодинаково при различных α и β . Поэтому это обстоятельство можно попытаться использовать при идентификации параметров дробной диффузии.

В заключение лишь отметим, что на всех графиках в рассмотренных нестационарных задачах полные интегралы (3.3) сохранялись, то есть их значения с течением времени практически (в пределах точности применяемых схем) не изменялись. Этот факт свидетельствует о выполнении физического закона о сохранении вещества.

Рисунки 16-24 получены с помощью метода Римана-Лиувилля. Менее точная схема Грюнвальда-Летникова дает качественно те же результаты при не слишком малых значениях параметра α , поэтому останавливаться на этой схеме мы не стали.

Стационарная задача

Разностные схемы позволяют также получить решение краевой задачи, когда явно заданы значения концентраций на обеих границах области и функция источника. Задача решается методом установления.

Введем в исходное уравнение (2.1) не зависящий от времени источник вещества $Q(x)$, получив тем самым

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - L_{\beta}^{\alpha} C(x,t) + Q(x) = 0, \quad L_{\beta}^{\alpha} = \frac{1+\beta}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha}}{\partial x^{\alpha}} + \frac{1-\beta}{2} \cdot \frac{\partial^{\alpha}}{\partial (-x)^{\alpha}}. \quad (3.4)$$

Для анализа немного упростим это уравнение, положив $\beta = 1$. Далее, пусть $f(x)$ — некоторое стационарное решение (3.4), так что $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$. Следовательно, наше решение подчиняется простому уравнению:

$$\frac{\partial^{\alpha} f(x)}{\partial x^{\alpha}} = Q(x). \quad (3.5)$$

Будем искать решение (3.5) в виде линейной комбинации экспоненциальной и степенной функций:

$$f(x) = b \cdot e^{ax} + d \cdot x^c + g, \quad (3.6)$$

где a, b, c, d, g — некоторые константы. После этого можно выписать граничные условия:

$$\begin{aligned} f(x=0) &= b + g, \\ f(x=2\pi) &= b \cdot e^{2a\pi} + d \cdot (2\pi)^c + g. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Затем, чтобы найти выражение для источника $Q(x)$, воспользуемся каким-либо из определений дробной производной и почленно продифференцируем выражение (3.6). Так, можно убедиться, что производная дробного порядка от экспоненты равна

$$D^{\alpha} e^{ax} = a^{\alpha} \cdot e^{ax}, \quad (3.8)$$

а производная степенной функции определяется из выражения:

$$D^{\alpha} x^{\gamma} = \frac{\Gamma(\gamma+1)}{\Gamma(\gamma+1-\alpha)} \cdot x^{\gamma-\alpha}; \quad \gamma > -1, \alpha \geq 0, t > 0. \quad (3.9)$$

Производную от константы g можно получить из формулы (3.9), положив в ней $\gamma = 0$, либо непосредственно из определений Римана-Лиувилля или Маршо. Теперь $Q(x)$ вычисляется аналитически:

$$Q(x) = b \cdot a^\alpha \cdot e^{ax} + d \cdot \frac{\Gamma(c+1)}{\Gamma(c+1-\alpha)} \cdot x^{c-\alpha} + g \cdot \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \cdot x^{-\alpha}. \quad (3.10)$$

Отметим, что здесь мы вычисляли именно «положительные» (или «левые») дробные производные D_{a+}^α (см., например, определение Маршо (1.15)) на отрезке $[0, 2\pi]$. Так как мы положили $\beta = 1$, то «отрицательные» производные не рассматриваются.

После этого задачу можно запрограммировать. Для этого возьмем одну из разностных схем, например, Римана-Лиувилля, зададим константы a, b, c, d, g , затем граничные условия (3.7) и источник (3.10). При этом разумно воспользоваться частично неявной схемой, так как в стационарной задаче решение может установиться только через достаточно большое время, и шаг по времени τ будет очень сильно влиять на скорость счета. Далее, в качестве начального условия во всех точках области зададим нулевые значения концентраций. В результате, с течением времени t распределение будет постепенно приближаться к функции $f(x)$. На рисунках 25-30 можно качественно пронаблюдать динамику выхода численного решения на стационарное при различных α и различных точных решениях $f(x)$. Для примера мы взяли отдельно экспоненциальную функцию (рисунки 25-27):

$$f(x) = 0.1 \cdot e^{0.5x}, \quad (3.11)$$

и отдельно степенную (рисунки 28-30):

$$f(x) = -x^{0.5} + 2. \quad (3.12)$$

По степени близости численного решения при различных шагах сетки h к точному решению (3.11) или (3.12) можно судить о порядке аппроксимации испытываемой схемы. Для оценок естественно воспользоваться двумя наиболее распространенными определениями норм:

$$\begin{aligned} norm1 &= \max |C_i - f_i|, \\ norm2 &= \sqrt{h \cdot \sum_{i=0}^{N-1} (C_i - f_i)^2}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

где C_i — значение численно полученной концентрации в i -ой точке. Это значение следует брать уже после того, как численное решение вышло на стационарное и практически перестает изменяться.

На рисунках 31-34 приведены графики зависимости норм (3.13) от числа узлов расчетной сетки в логарифмическом масштабе для двух методов: Римана-Лиувилля и Грюнвальда-Летникова. Здесь в качестве точного решения была принята экспоненциальная функция (3.11). На графиках также представлены результаты линейных интерполяций рассматриваемых зависимостей. В данном случае нас интересуют коэффициенты наклона прямых. Так, в методе Римана-Лиувилля для обеих норм эти коэффициенты равны соответственно -2.48 и -1.89 (рисунки 31 и 32), то есть примерно -2 , что фактически означает следующее:

$$\begin{aligned} \ln(norm) &\sim -2 \cdot \ln(N), \\ norm &\sim N^{-2} \sim h^2. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Норма пропорциональна квадрату шага расчетной сетки. Для сравнения, метод Грюнвальда-Летникова дает вдвое меньшие наклоны: -1.06 и -1.04 (рисунки 33 и 34). Таким образом, мы получили чисто эмпирическое обоснование теоретических предположений о том, что схема Римана-Лиувилля — второго порядка аппроксимации, а схема Грюнвальда-Летникова — первого.

Если же в качестве точного решения принять степенную функцию (3.12), то наличие более высокого порядка точности у метода Римана-Лиувилля по сравнению с методом Грюнвальда-Летникова подтвердится снова. Для этих схем наклоны дают рисунки 35 и 36.

4. Заключение

Уравнения дробной диффузии при всех известных определениях дробных производных представляют собой линейные интегро-дифференциальные уравнения с двумя параметрами — дробным порядком производной $\alpha \in [1, 2]$ и коэффициентом «скошенности» $\beta \in [-1, 1]$. При $\alpha \rightarrow 2$ оператор дробной производной вырождается в дифференциальный оператор второго порядка, отвечающей обычной диффузии с экспоненциальным затуханием решения на бесконечности. Значение параметра β при этом становится несущественным. При $\alpha \rightarrow 1$ дробная производная стремится к дифференциальному оператору первого порядка, описывающему конвективный перенос. Параметру $\beta = 1$ соответствует перенос в отрицательном направлении, $\beta = -1$ — в положительном.

При всех промежуточных значениях параметра α дробный диффузионный процесс заметно отличается как от классической диффузии, так и от конвективного переноса, поэтому его часто называют «супердиффузией». При супердиффузии характерный временной $[T]$ и пространственный $[L]$ масштабы процесса связаны соотношением

$$[T] \sim [L]^\alpha, \quad (4.1)$$

а поведение решения $C(x, t)$ на бесконечности (на больших расстояниях от носителя начальных данных), характеризуется наличием «тяжелых хвостов» — степенной асимптотикой [6]:

$$C(x, t) \sim x^{-\alpha/2-1}, \quad x \rightarrow \infty. \quad (4.2)$$

Решения уравнений дробной диффузии не всегда могут быть найдены аналитически, поэтому необходимо использовать численные методы. При этом область, в которой ищется решение, покрывается расчетной сеткой и непрерывное решение интегро-дифференциальной задачи аппроксимируется дискретным набором неизвестных, относимых к узлам расчетной сетки.

Операторы дробных производных не обладают свойством дивергентности, поэтому их непосредственная замена механическими квадратурами приводит к нарушению закона сохранения переносимой субстанции. Для построения вычислительных алгоритмов, обладающих свойством консервативности, уравнения дробной диффузии необходимо представить потоковым виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = (1 + \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial W_{\alpha-1}^+}{\partial x} + (1 - \beta) \cdot \frac{D}{2} \cdot \frac{\partial W_{\alpha-1}^-}{\partial x}, \quad (4.3)$$

где дробные потоки $W_{\alpha-1}^+$ и $W_{\alpha-1}^-$ представляют собой соответствующие дробные производные степени $(\alpha - 1)$.

Характерной особенностью дискретных аналогов операторов дробных потоков является то, что для их вычисления необходимо привлекать все без исключения узлы расчетной сетки на текущем временном слое. В отличие от сеточных операторов обычной диффузии, сеточные операторы дробной диффузии являются нелокальными.

В настоящей работе уравнение баланса аппроксимируется явной разностной схемой. Для получения второго порядка аппроксимации по пространственной переменной дробные потоки, относящиеся к серединам расчетных ячеек, аппроксимируются с третьим порядком методом трапеций. Результирующий алгоритм оказывается устойчивым при условии:

$$\frac{D \cdot \tau}{h^\alpha} \leq \frac{1}{\alpha}. \quad (4.4)$$

При $\alpha \sim 2$ это условие оказывается весьма обременительным и для его смягчения предложено главную диагональ и два прилегающих к ней коэффициента дискретного оператора перехода вынести на новый временной слой. Получающаяся при этом система линейных уравнений решается методом трехточечной прогонки. Теоретический анализ и тестовые расчеты показывают, что такой частично неявный алгоритм оказывается безусловно устойчивым и сохраняет свойство консервативности и первый порядок аппроксимации по времени. Он, в частности, может быть использован для решения краевых стационарных задач методом установления.

Указанные методические приемы были использованы при построении численных алгоритмов для уравнений дробной диффузии как на основе определения дробных производных по Риману-Лиувиллю, так и по Маршо. Последние отличаются от производных Римана-Лиувилля тем, что на постоянном фоне их значения равны нулю, что более естественно при определении дробных потоков. Приведены многочисленные примеры расчетов, иллюстрирующие вычислительные свойства новых алгоритмов. Проведено их детальное сравнение с предложенными ранее [2] алгоритмами, базирующимися на использовании быстрого преобразования Фурье и метода Грюнвальда-Летникова. Показан второй порядок сходимости при решении стационарных краевых задач методом установления.

Уравнения дробной диффузии с постоянными коэффициентами и параметрами (α, β) могут быть справедливыми только для статистически однородных сред. В гидрогеологии такое допущение не всегда оправдано. В более общем случае переменными (зависящими от координат) могут оказаться как коэффициент дисперсии D , так и параметры (α, β) . На границах между различными областями, как правило, имеются слои с особенными коллекторными свойствами, которые можно условно называть трещинами. Задачу сопряжения алгоритмов с различными параметрами по разные стороны от такой трещины будем называть задачей о трещине. Показано, что методы, развитые в настоящей работе, могут быть успешно использованы для решения задач с разрывными параметрами дробной диффузии.

Разработанные в настоящей работе вычислительные алгоритмы для решения прямой задачи дробной диффузии предполагается использовать прежде всего для отработки методических вопросов решения обратной задачи — определения неизвестных значений параметров D и (α, β) по результатам натуральных наблюдений.

Следует отметить, что математические модели, базирующиеся на дробных производных могут быть полезными не только в гидрогеологии, но и в задачах упругопластичности, исследованиях в области полупроводников, в биологии и финансах [7].

5. Список литературы

1. David A. Benson, The Fractional Advection-Dispersion Equation: Development and Application, a dissertation for the degree of Doctor of Philosophy in Hydrogeology, University of Nevada, Reno, 1998.
2. В.М. Головизнин, В.П. Киселев, И.А. Короткин, Ю.И. Юрков «Некоторые особенности вычислительных алгоритмов для уравнения дробной диффузии». Препринт № IBRAE-2002-01. Москва: ИБРАЭ РАН, 2002.
3. С.Г. Самко, А.А. Килбас, О.И. Маричев «Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения». Минск, Наука и техника, 1987.
4. David A. Benson, Rina Schumer, Mark M. Meerschaert, and Stephen W. Wheatcraft, Fractional Dispersion, Levy Motion, and the MADE Tracer Tests (from Internet), 1999.
5. Matt G. Herrick, David A. Benson, Mark M. Meerschaert, Katherine R. McCall, and Scott L. Painter, Hydraulic Conductivity, Velocity, and the Order of the Fractional Dispersion Derivative in a Highly Heterogeneous System, submitted 08/27/01 to Water Resources Research.
6. Boris Baeumer, David A. Benson, Mark M. Meerschaert, and Stephen W. Wheatcraft, Subordinated Advection-Dispersion Equation for Contaminant Transport (from Internet).
7. Mark M. Meerschaert, David A. Benson, Hans-Peter Scheffler, Boris Baeumer, Fractional Time Derivatives Induce Subordination by an Inverse Levy Process (from Internet).
8. S.G. Samko, A.A. Kilbas, O.I. Marichev, Fractional Integrals and Derivatives, Theory and Application, Gordon and Breach, Amsterdam, 1993.
9. Kai Diethelm, An Algorithm for the Numerical Solution of Differential Equations of Fractional Order (from Internet).
10. Lixia Yuan, Om P. Agrawal, A Numerical Scheme for Dynamic Systems Containing Fractional Derivatives (from Internet).
11. Kai Diethelm, Alan D. Freed, The FracPECE Subroutine for the Numerical Solution of Differential Equations of Fractional Order (from Internet).
12. Mark M. Meerschaert, David A. Benson, Boris Baeumer, Multidimensional Advection and Fractional Dispersion (from Internet), 1999.
13. Rudolf Gorenflo, Francesco Mainardi, Feller Fractional Diffusion and Levy Stable Motions, conference on Levy Processes: Theory and Applications, 18-22 January 1999, University of Aarhus, Denmark.
14. Mark M. Meerschaert, David A. Benson, Boris Baeumer, Operator Levy Motion and Multiscaling Anomalous Diffusion (from Internet).

6. Приложение

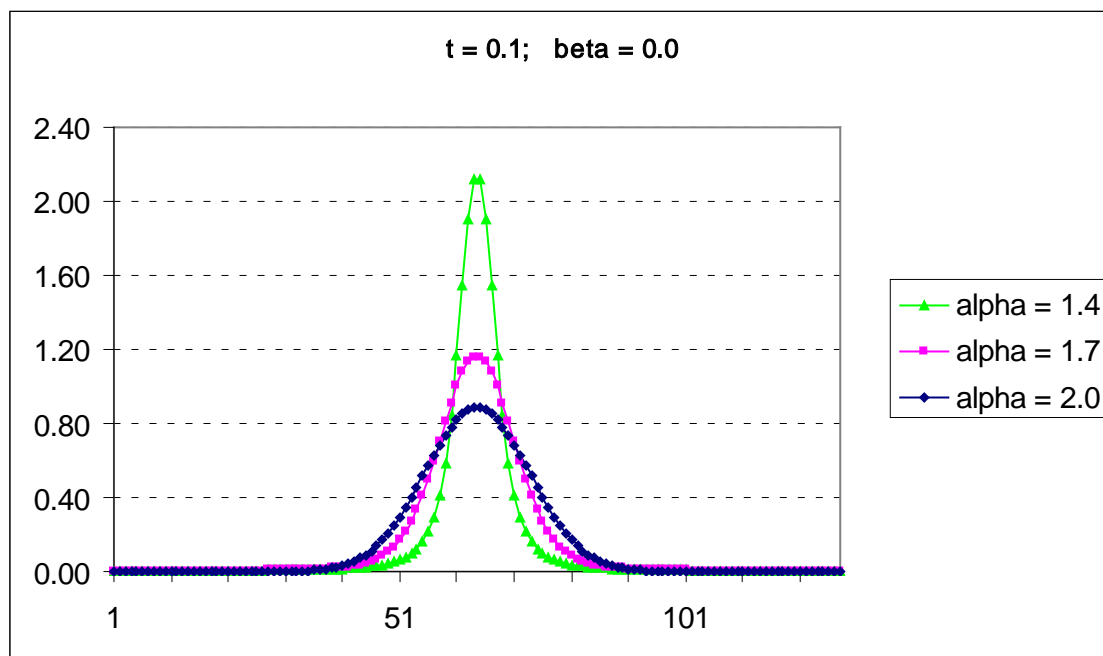


Рис. 1.

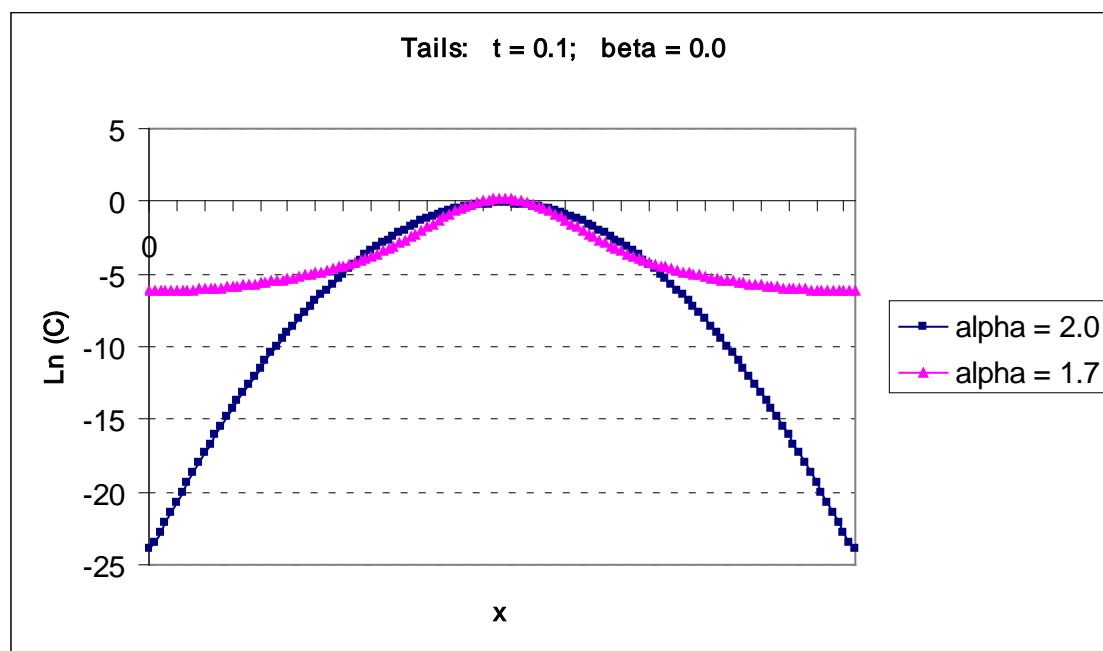


Рис. 2.

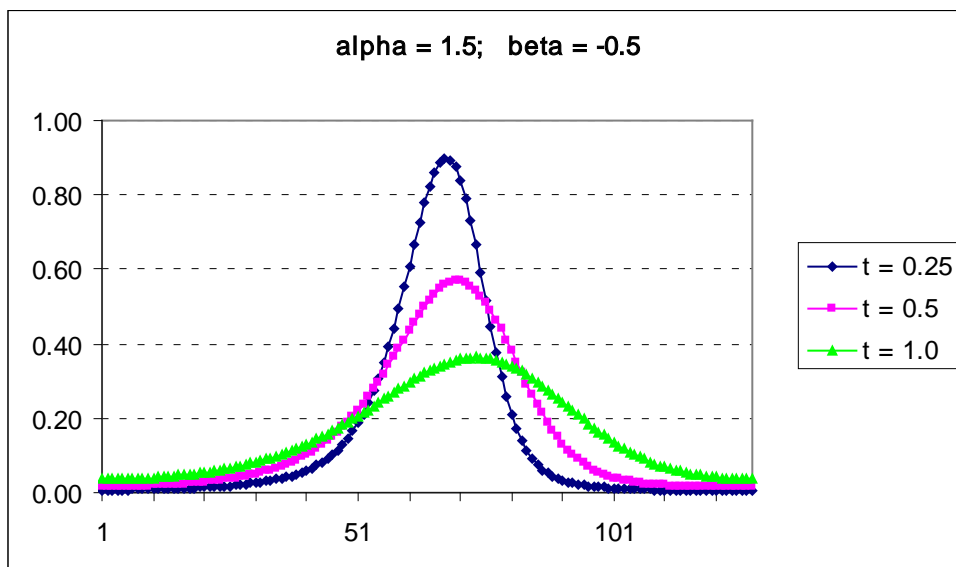
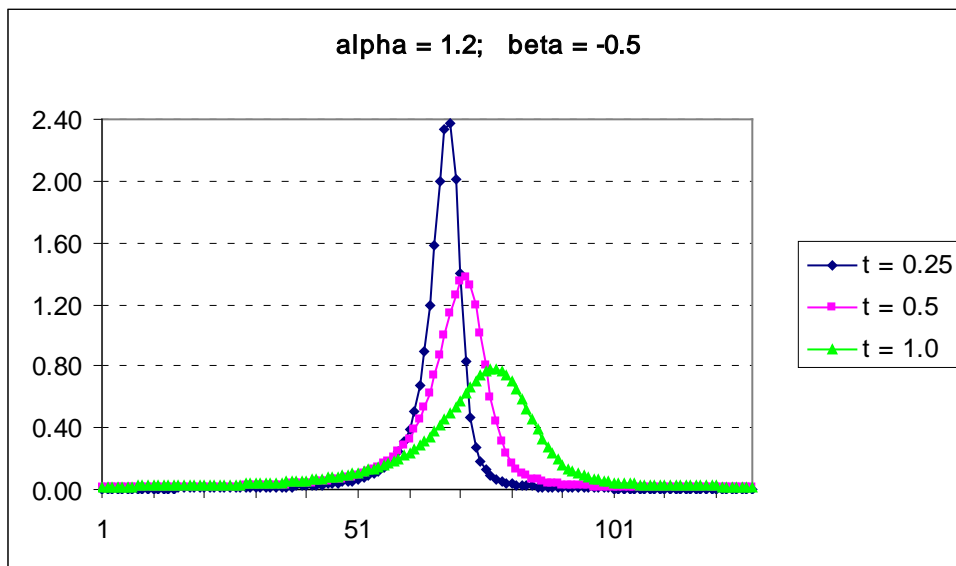
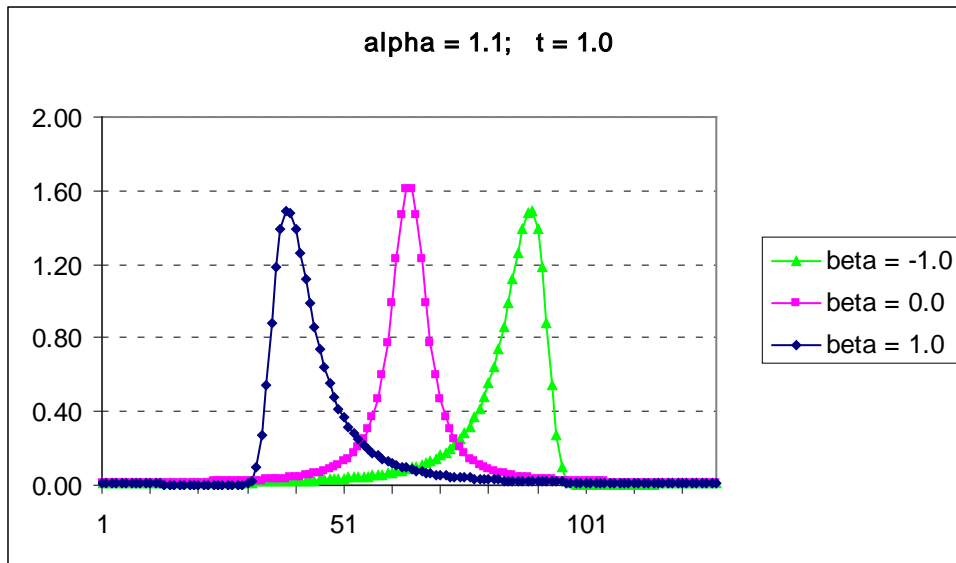


Рис. 3-5.

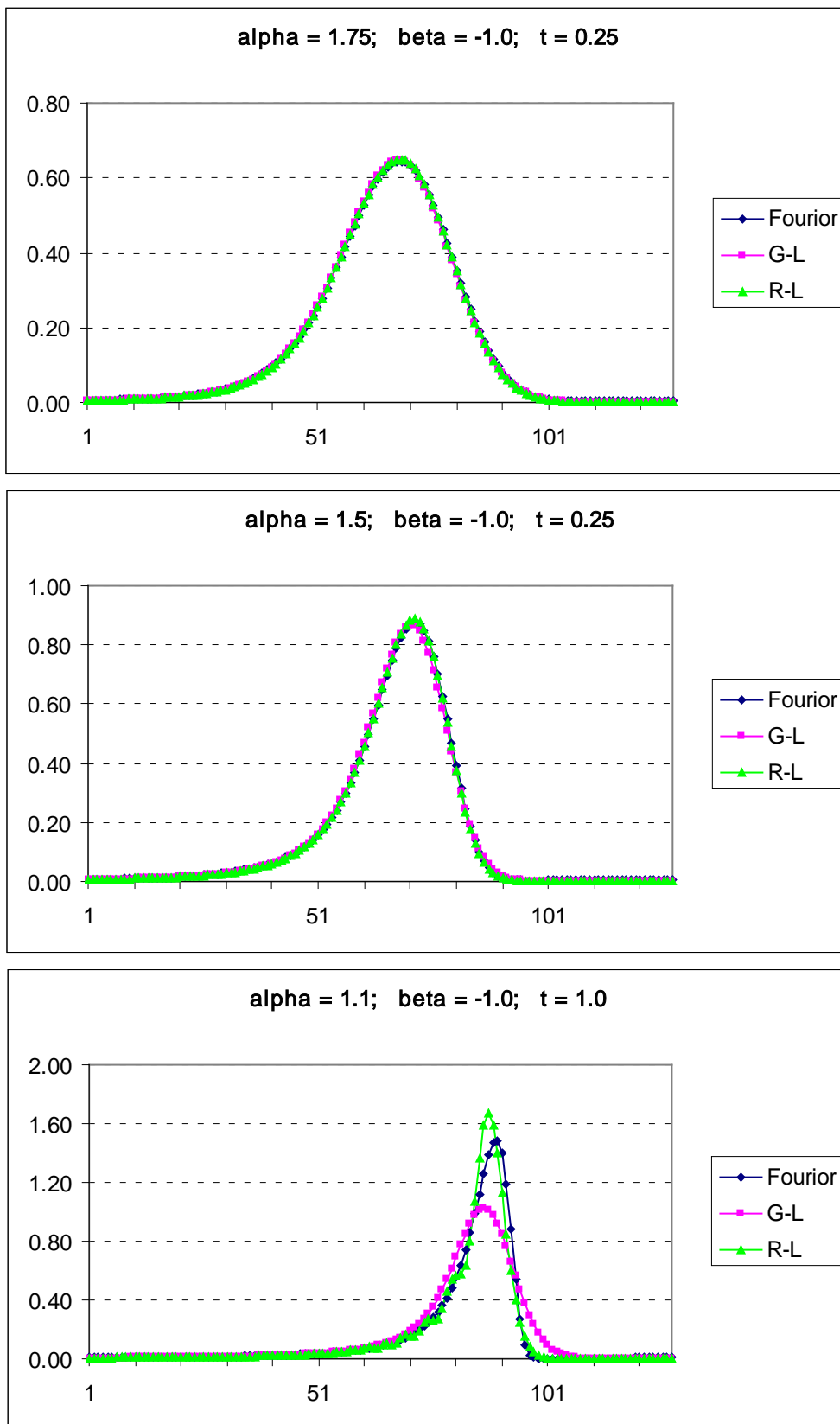


Рис. 6-8.

(Fourior — метод Фурье, G-L — метод Грюнвальда-Летникова, R-L — метод Римана-Лиувилля)

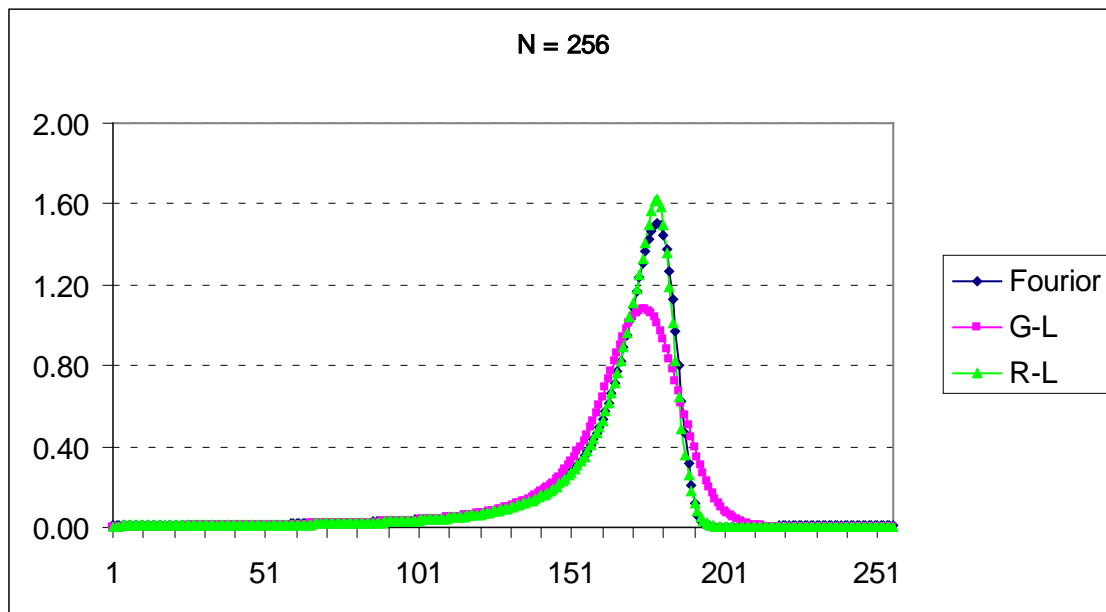


Рис. 9.

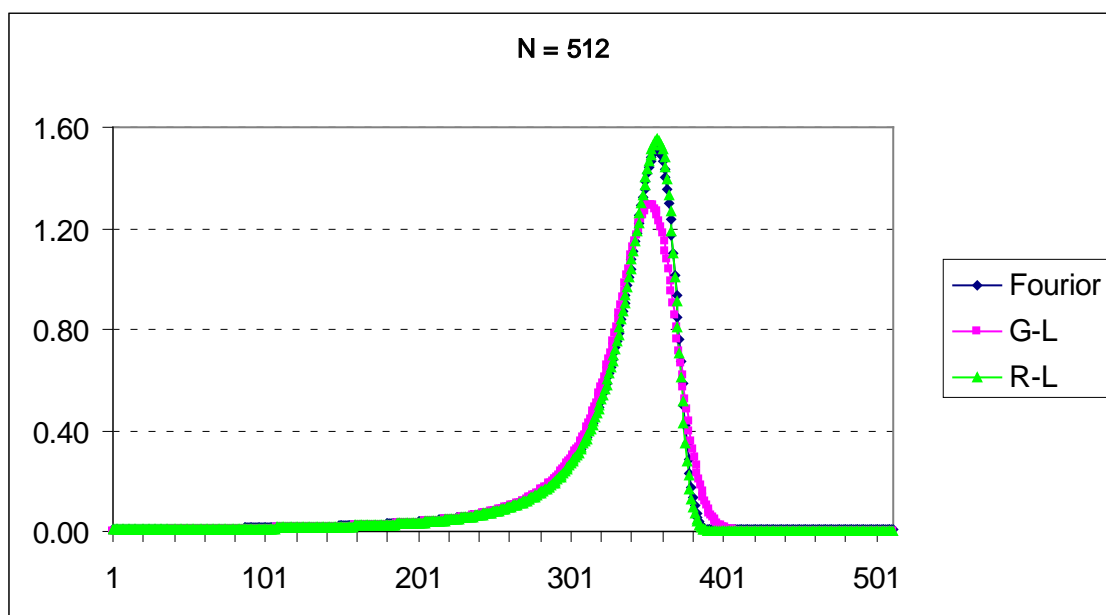


Рис. 10.

$\alpha = 1.1; \quad \beta = -1.0; \quad t = 1.0.$

(Fourior — метод Фурье, G-L — метод Грюнвальда-Летникова, R-L — метод Римана-Лиувилля)

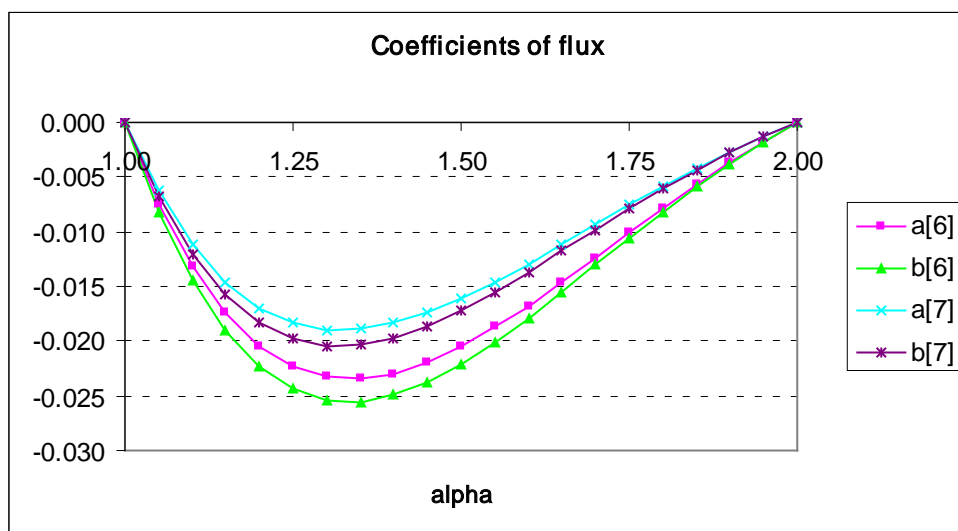
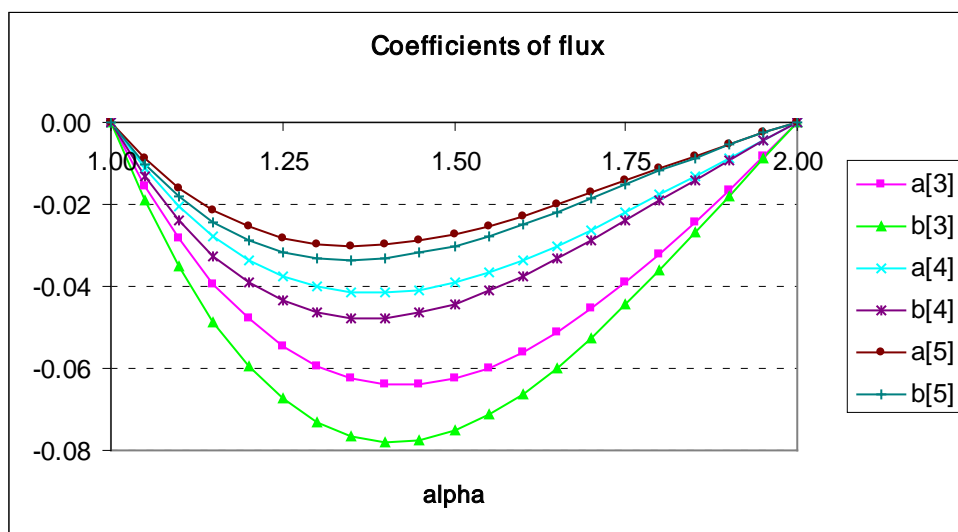
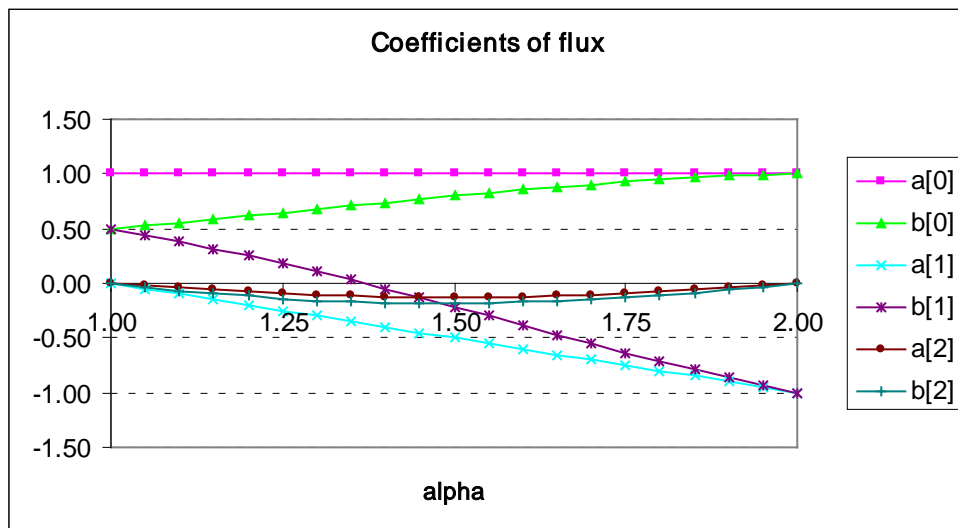


Рис. 11-13.

($a[k] = \theta_k$ — для метода Грюнвальда-Летникова; $b[k] = \theta_k$ — для метода Римана-Лиувилля)

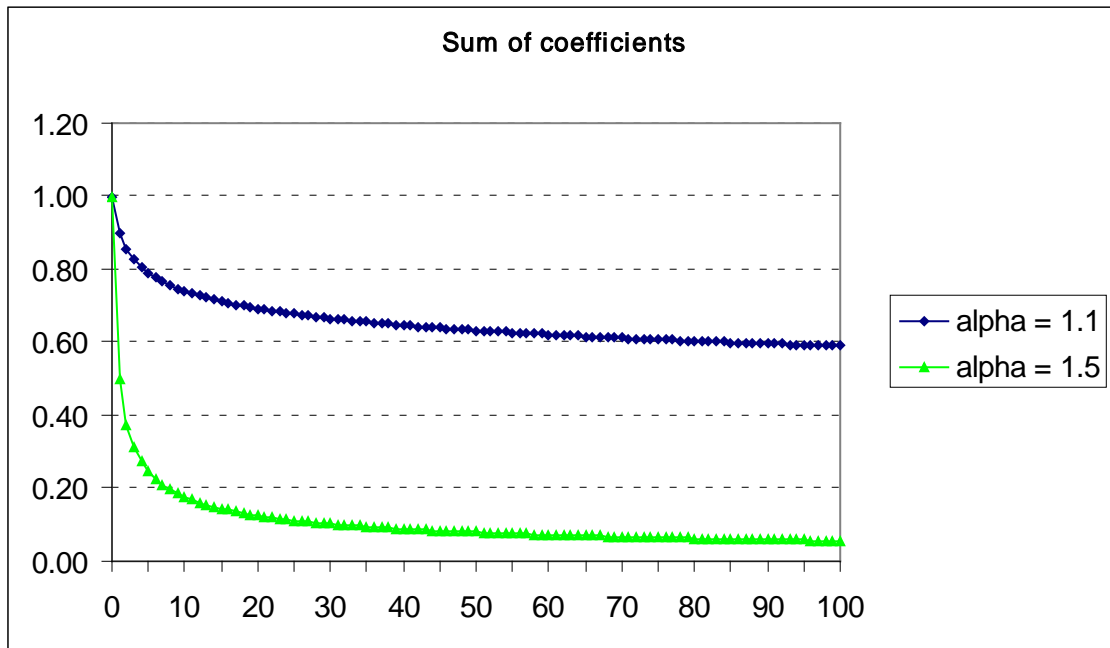


Рис. 14. (Метод Грюнвальда-Летникова)

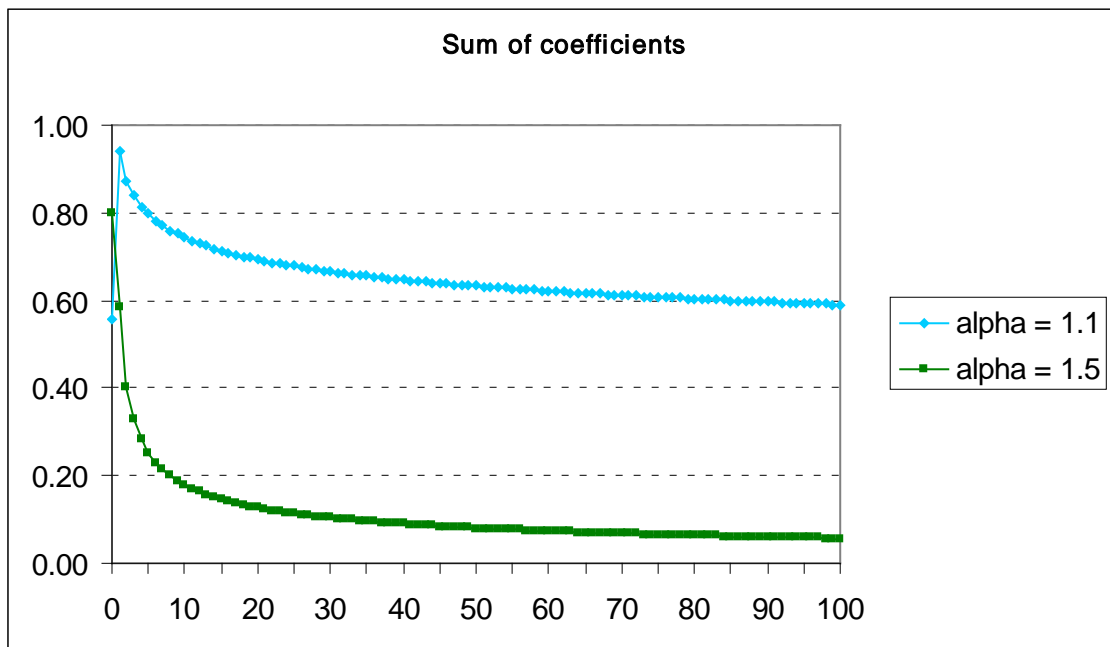


Рис. 15. (Метод Римана-Лиувилля)

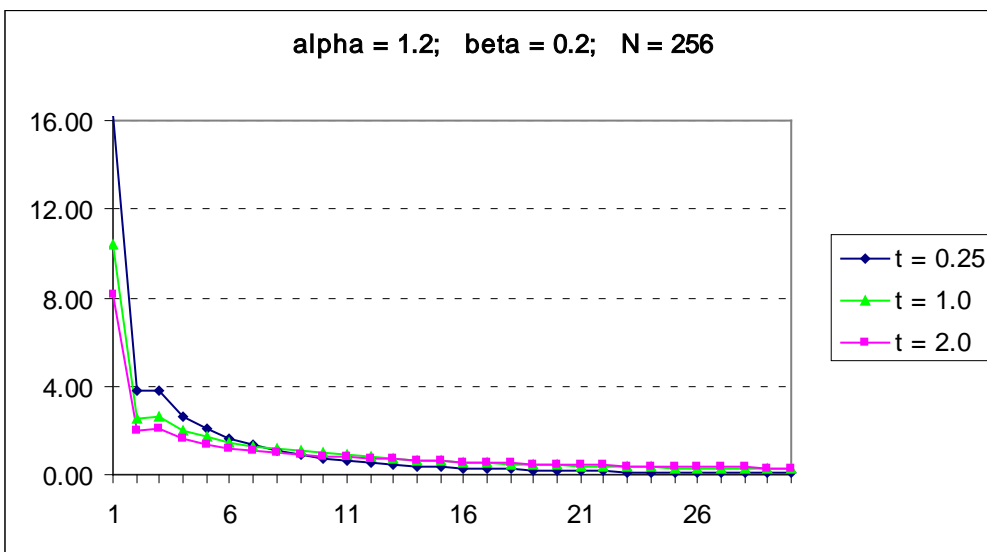
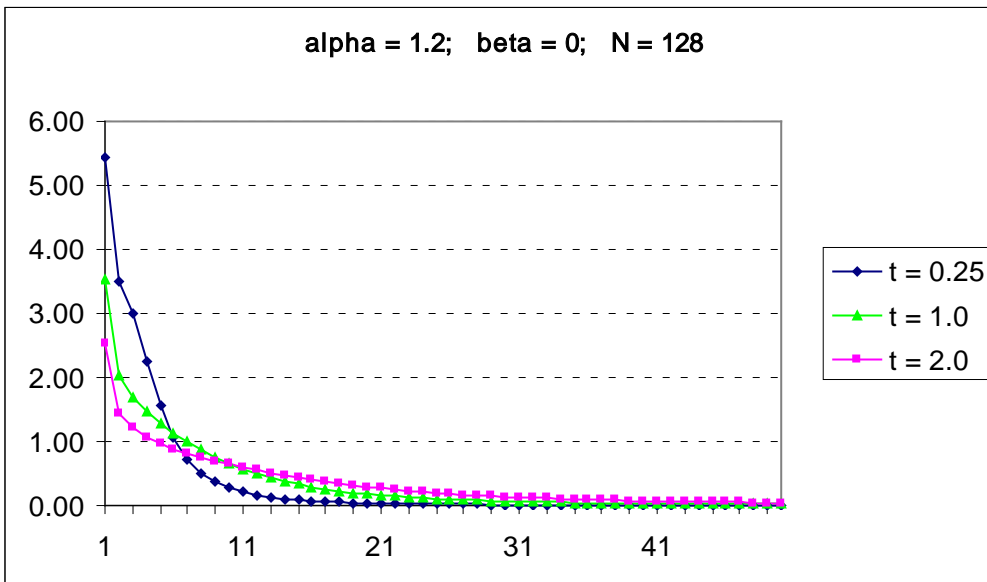
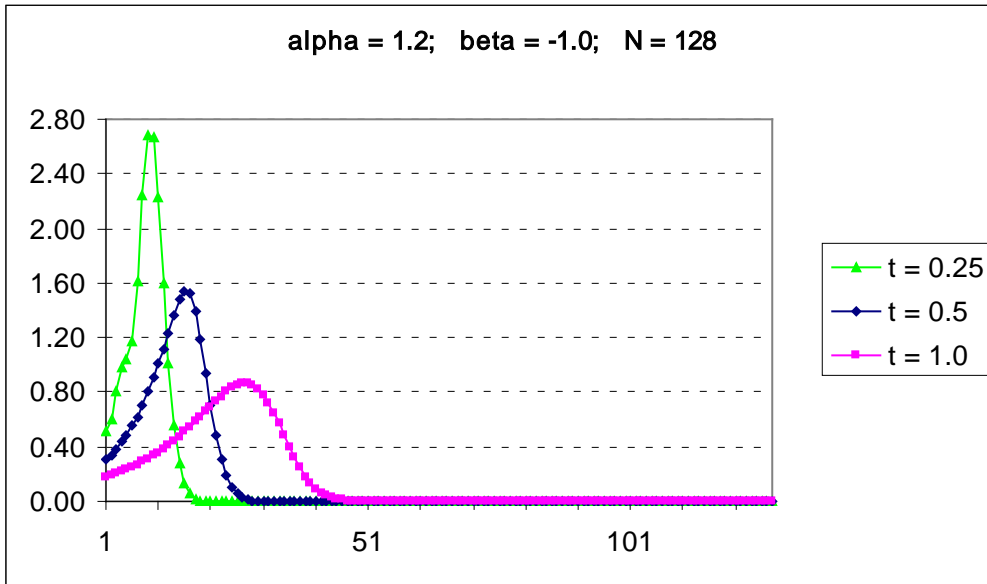


Рис. 16-18.

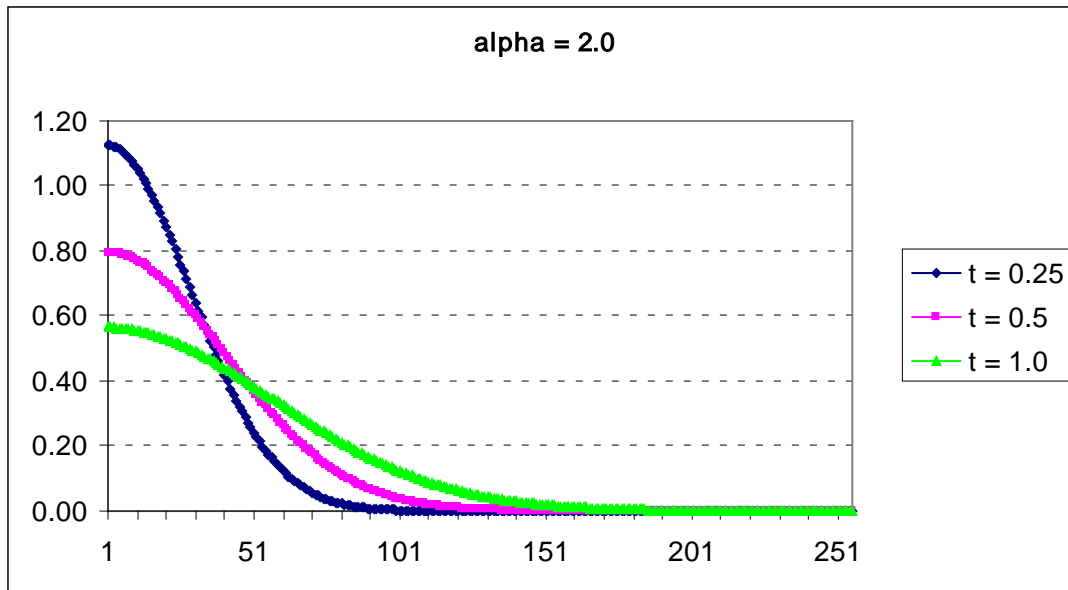


Рис. 19.

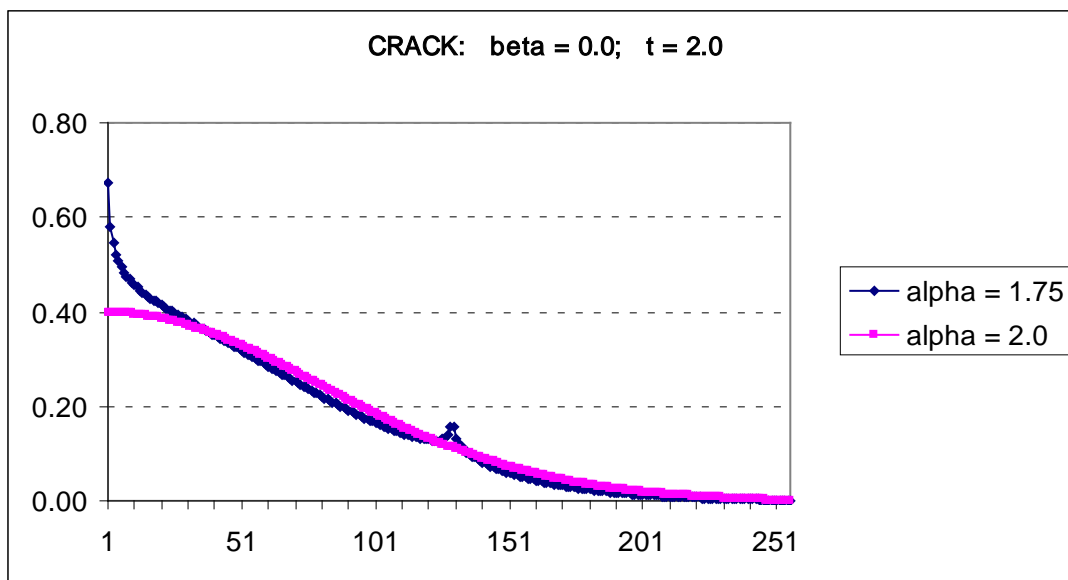


Рис. 20.

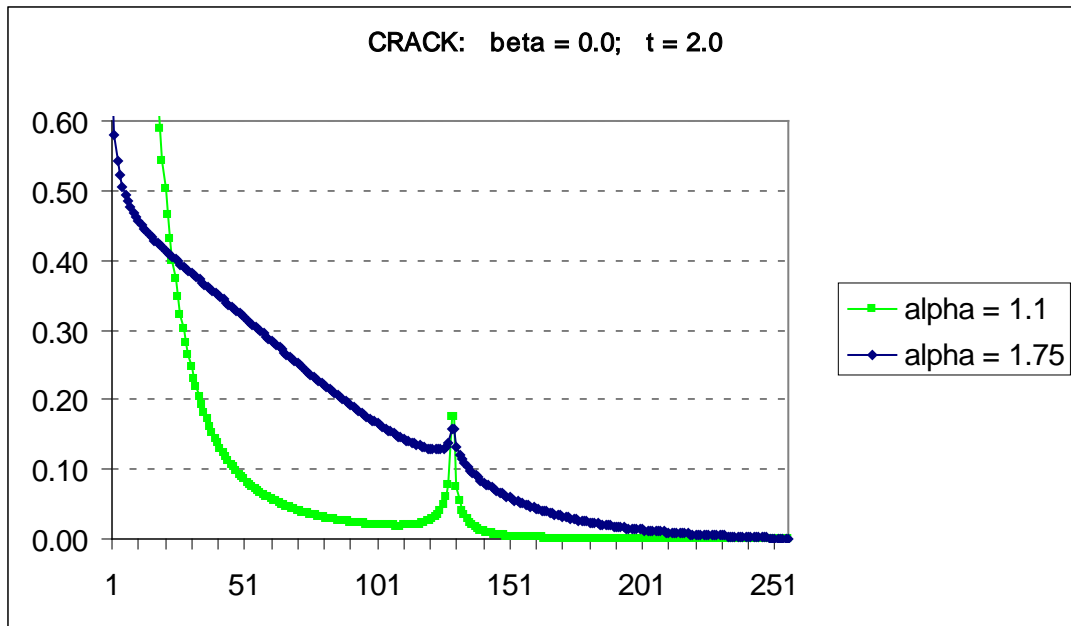


Рис. 21.

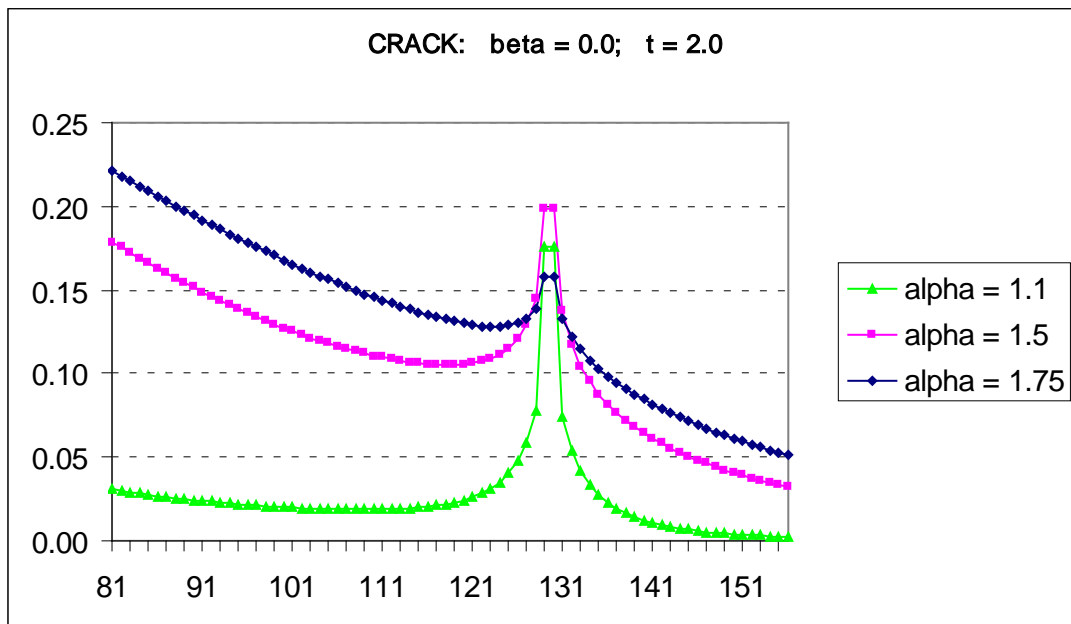


Рис. 22.

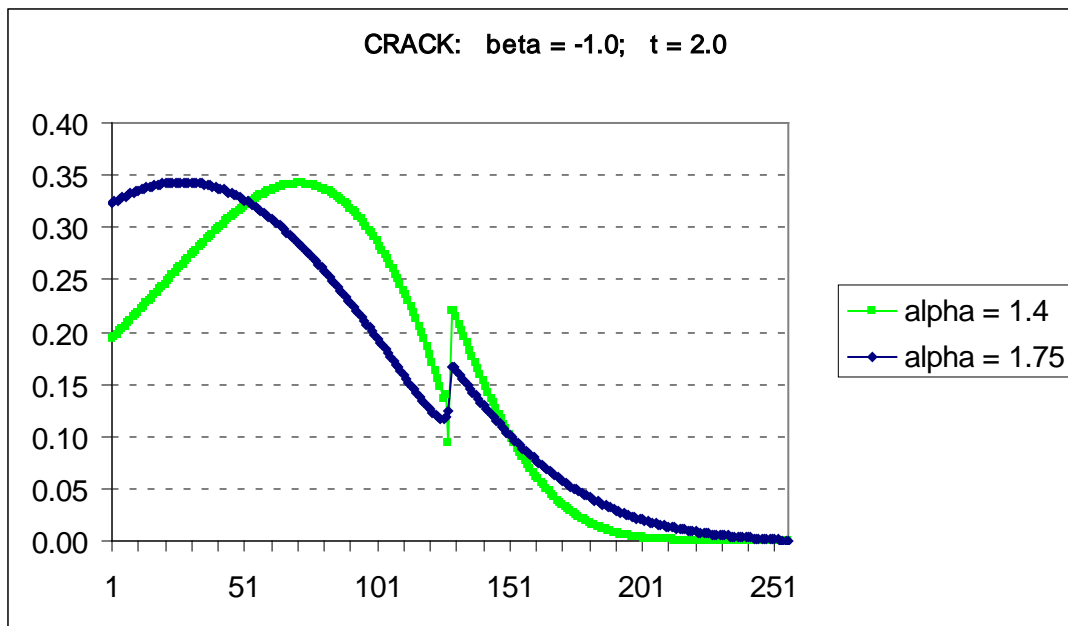


Рис. 23.

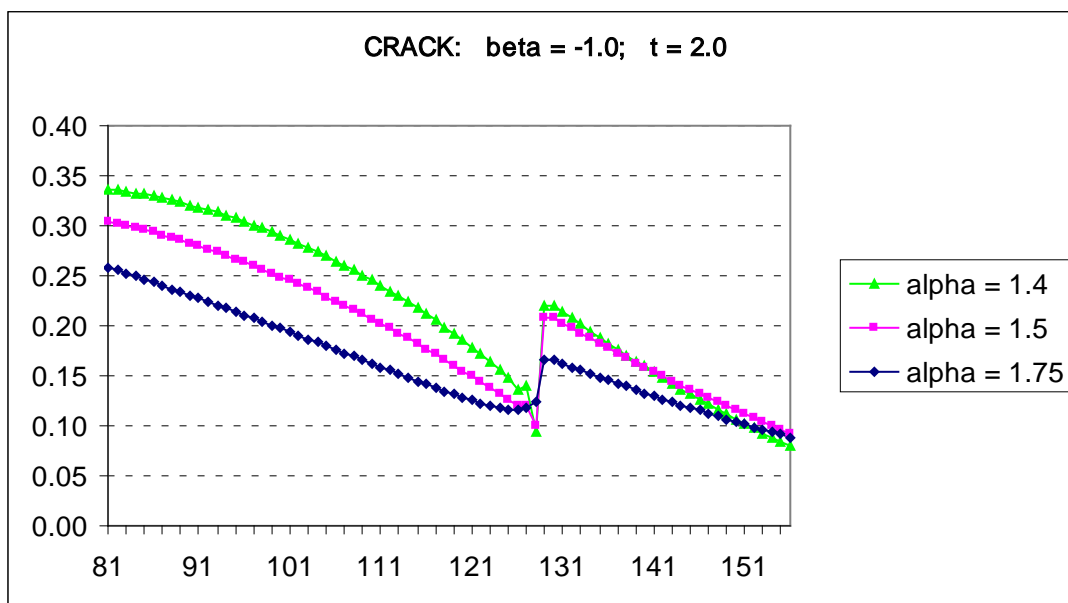


Рис. 24.

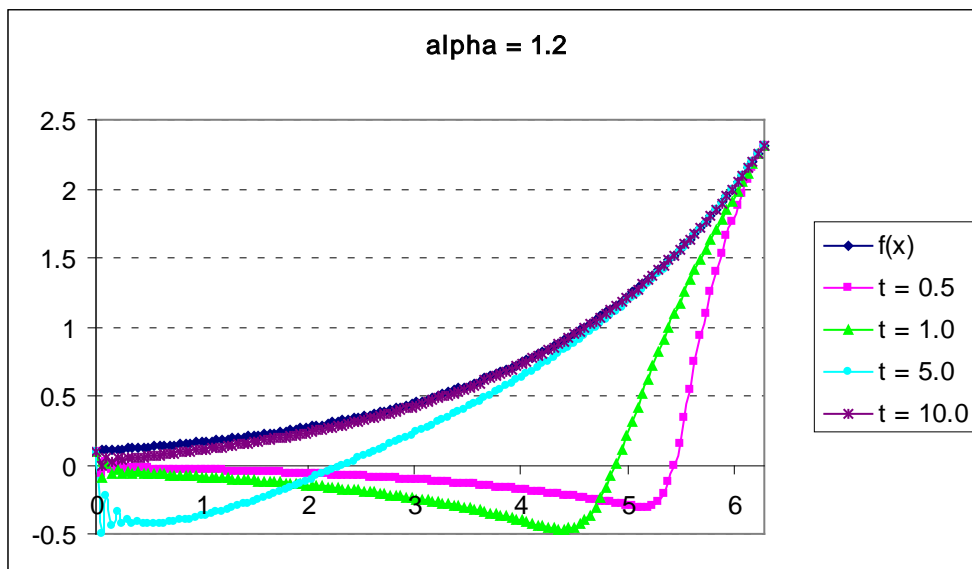
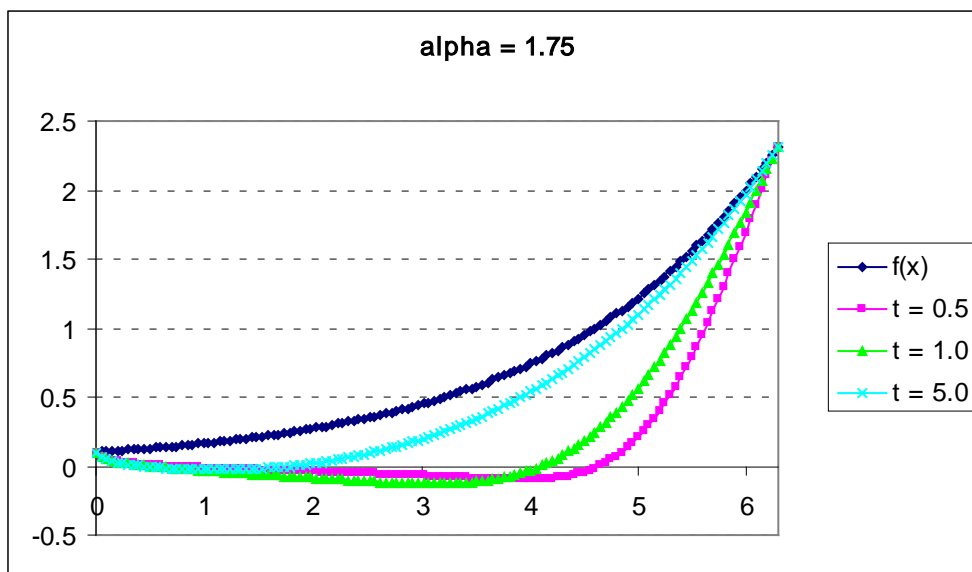
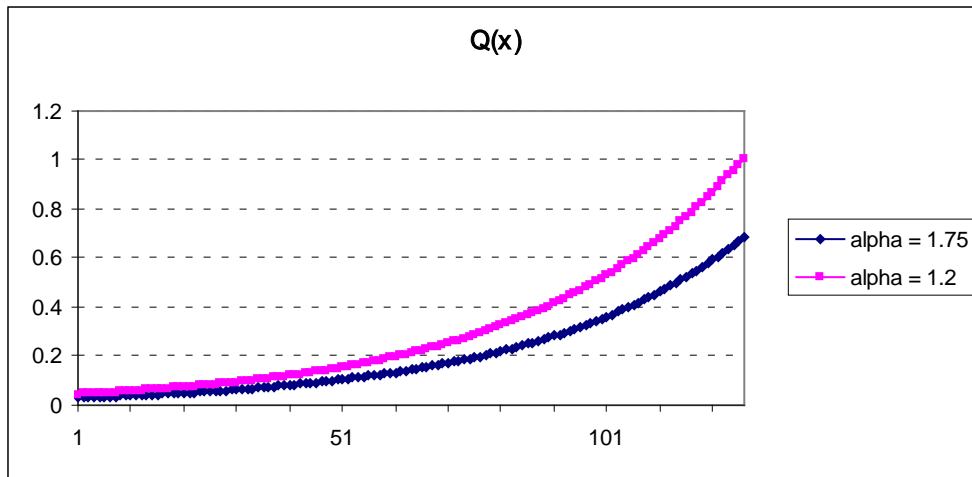


Рис. 25-27. $f(x) = 0.1 \cdot e^{0.5x}$

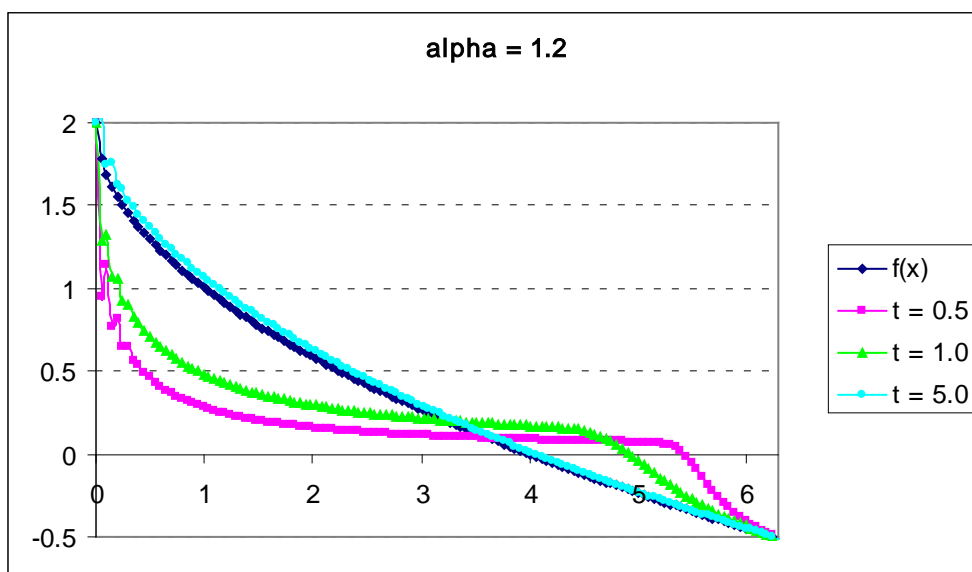
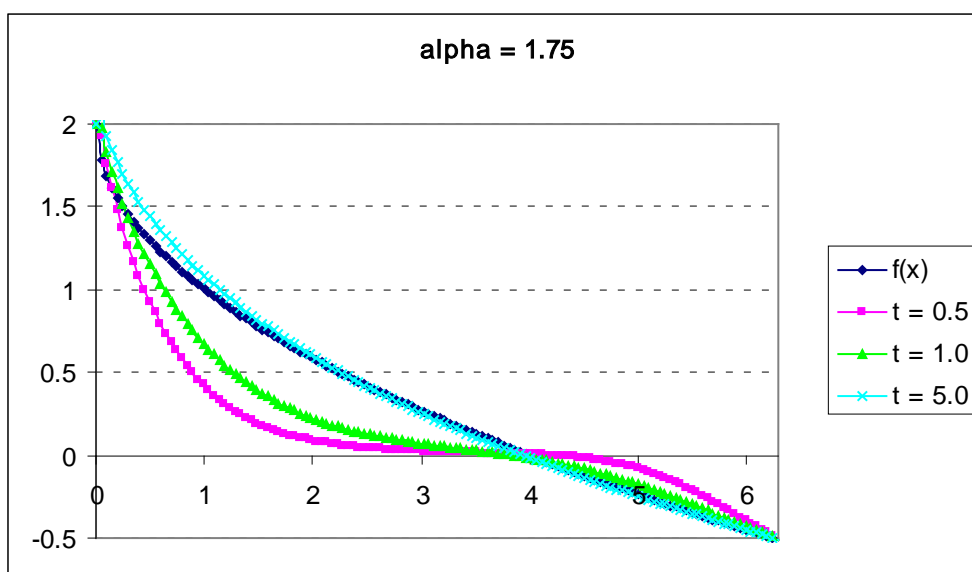
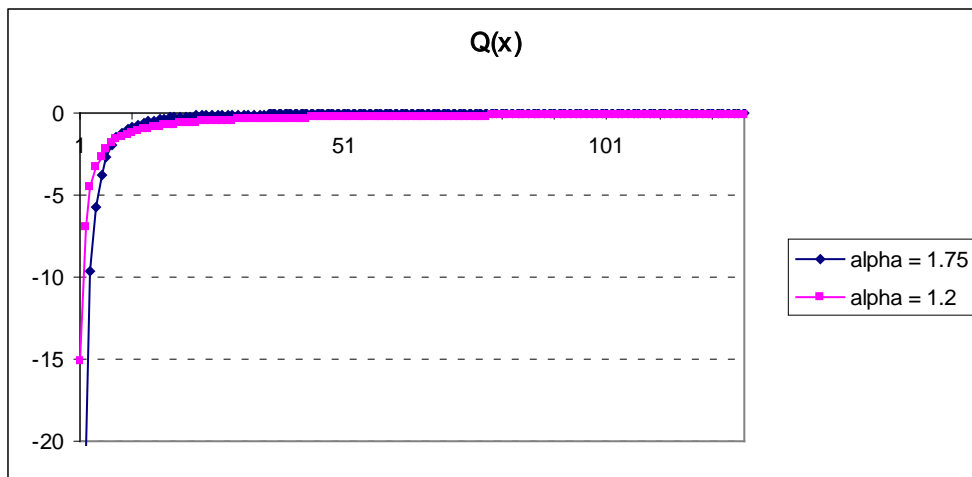


Рис. 28-30. $f(x) = -x^{0.5} + 2$

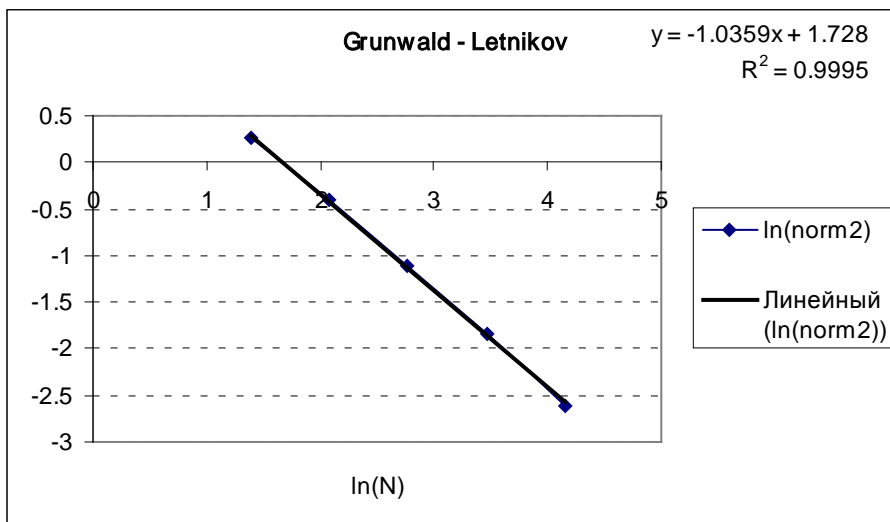
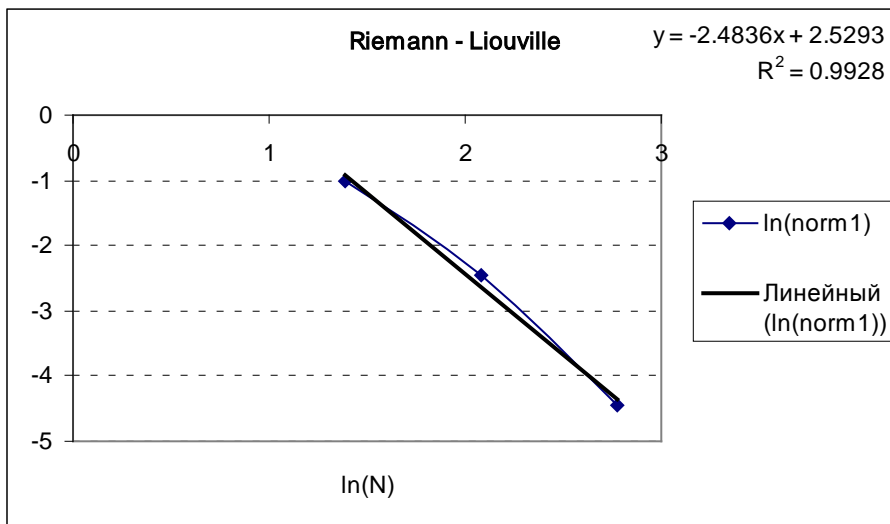
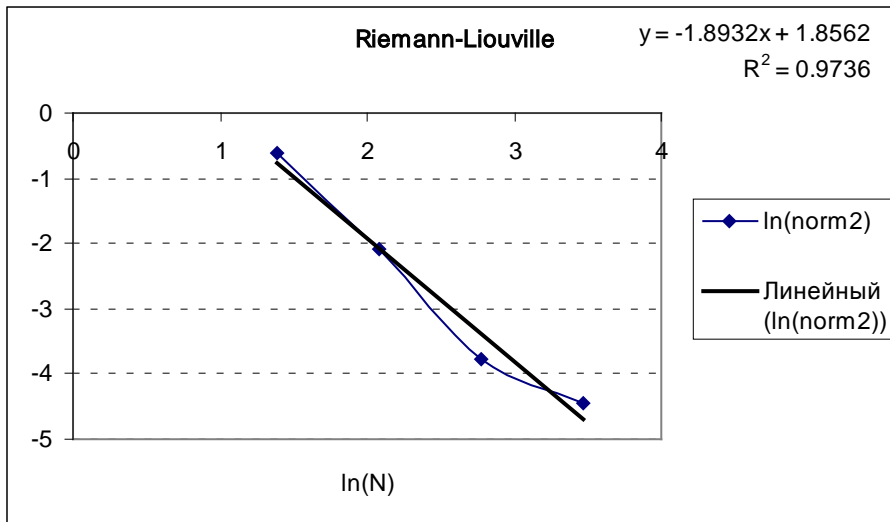


Рис. 31-33.

$$\text{norm}1 = \max |C_i - f_i|, \quad \text{norm}2 = \sqrt{h \cdot \sum_{i=0}^{N-1} (C_i - f_i)^2}.$$

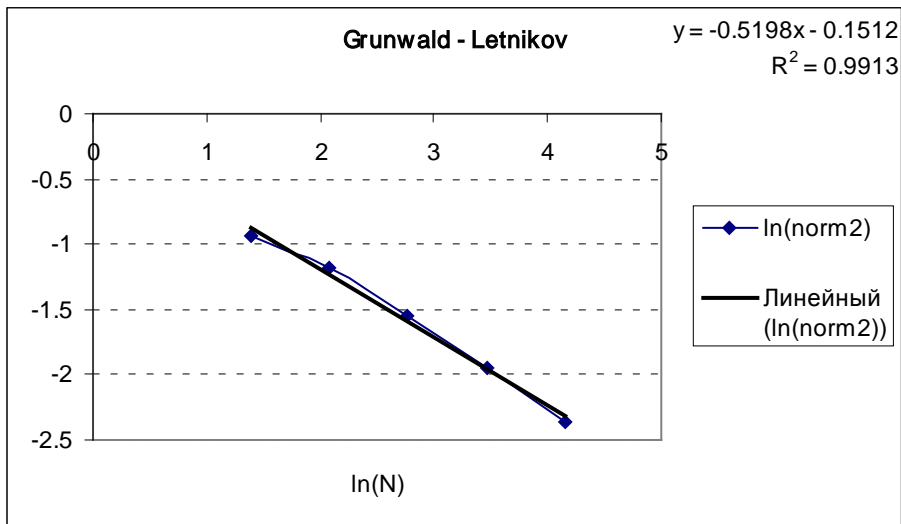
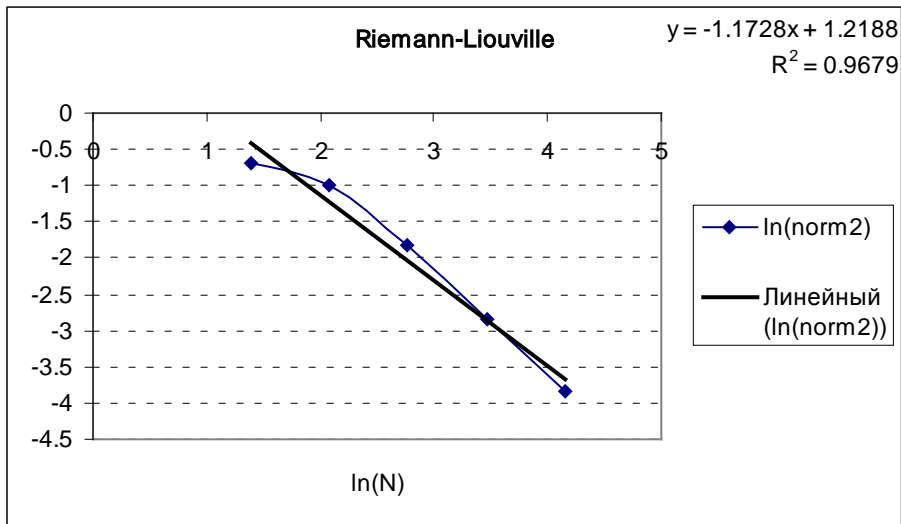
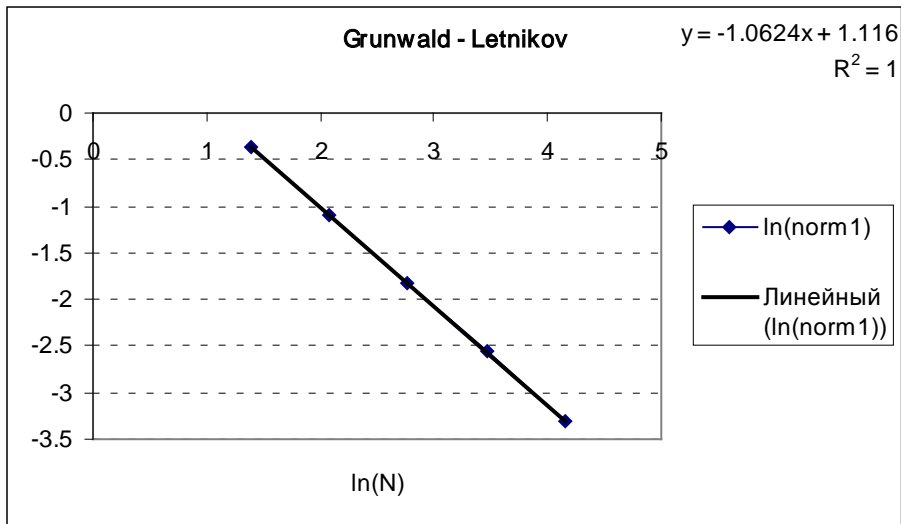


Рис. 34-36.

$$\text{norm1} = \max |C_i - f_i|, \quad \text{norm2} = \sqrt{h \cdot \sum_{i=0}^{N-1} (C_i - f_i)^2}.$$

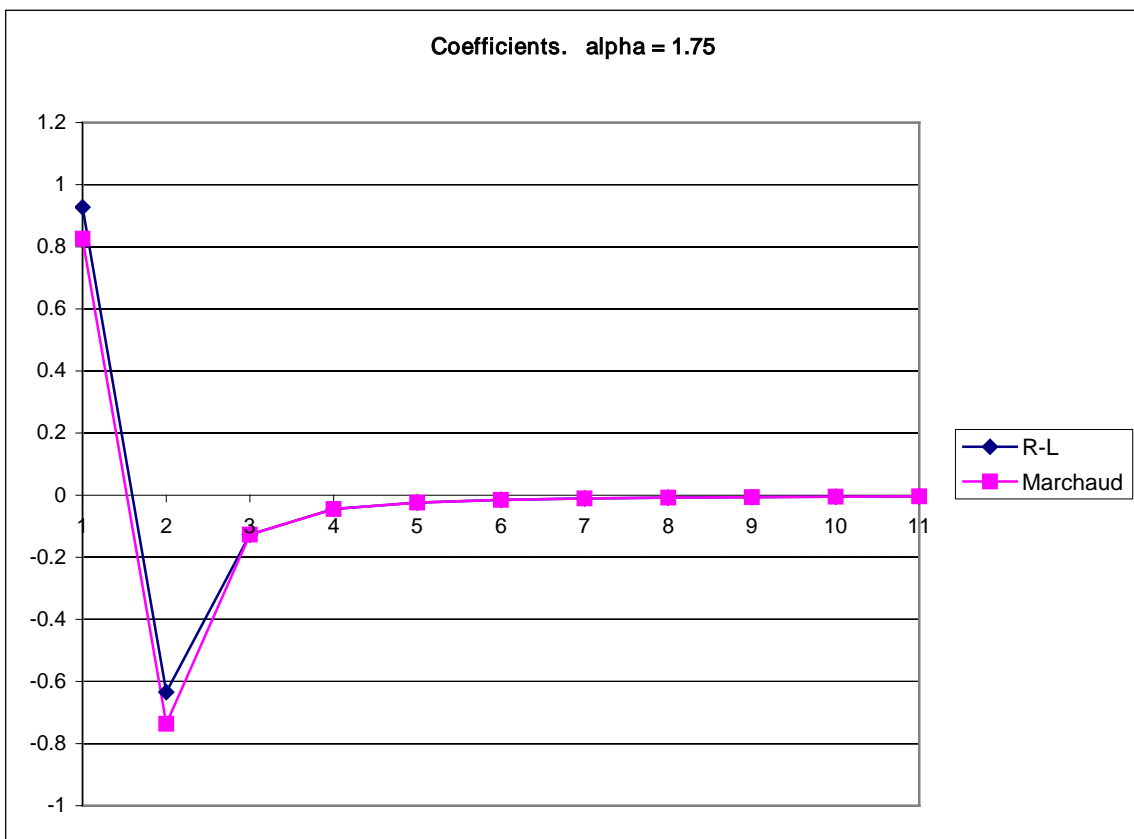
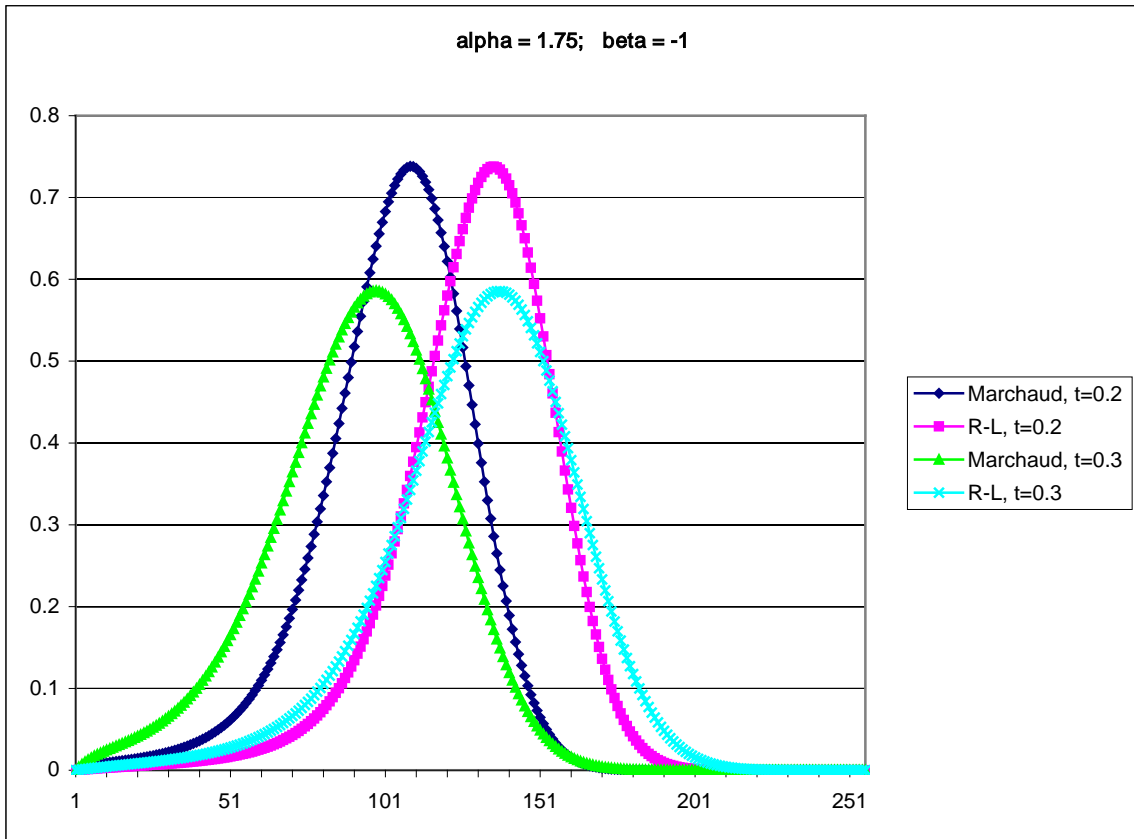


Рис. 37-38.

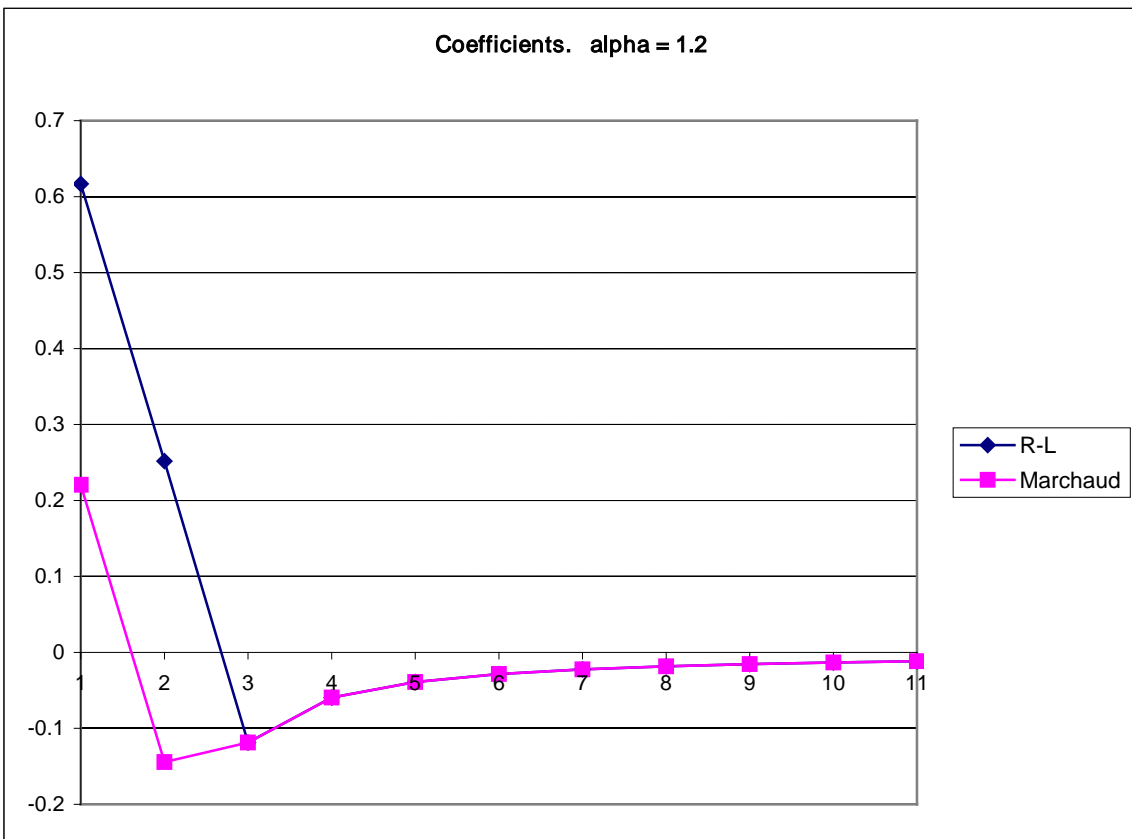
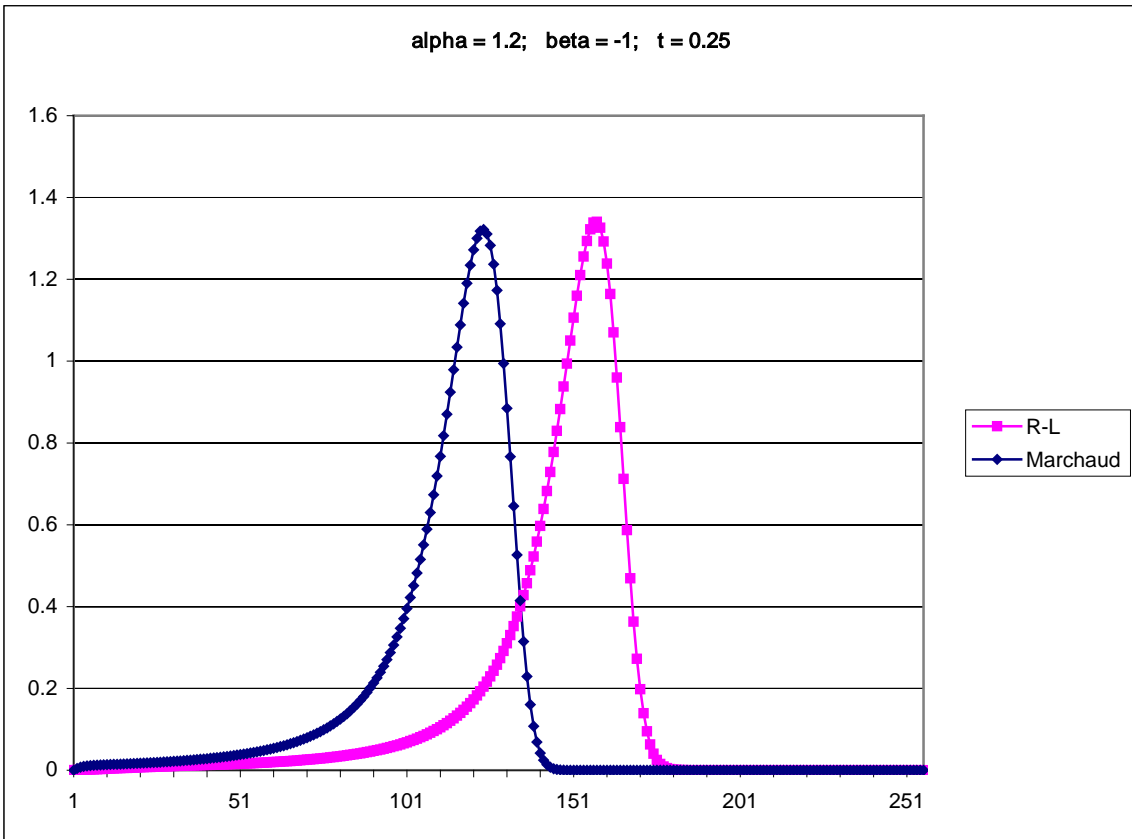


Рис. 39-40.