

Численные методы решения обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени с переменным коэффициентом

А.Н. Бондаренко*, Д.С. Иващенко**

* ИМ СО РАН,

пр. Ак. Коптюга, 4,
630090 Новосибирск, Россия

E-mail: bondarenkoan1953@mail.ru

** НГТУ,

пр. К. Маркса, 20,
630092 Новосибирск, Россия

E-mail: stanger@ngs.ru

*Работа первого автора была поддержана РФФИ (грант 05-01-0001),
работа второго автора была поддержана СО РАН (проект 77)*

Для диффузионных процессов дробного порядка [1, 2] характерно в первую очередь то, что зависимость среднеквадратического смещения от времени имеет вид $\langle x^2(t) \rangle \sim t^\alpha$, $\alpha \neq 1$. Рассмотрим дифференциальное уравнение с дробной производной по времени с переменным коэффициентом диффузии:

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

$$0 < c_1 \leq q(x) \leq c_2. \quad (2)$$

Здесь $x \in \mathbf{R}$, $t \in \mathbf{R}_0^+$, а оператор ${}_t\mathcal{D}_{0+}^\alpha$ — это оператор дробного дифференцирования Капуто [3, 4], определяемый выражением

$${}_t\mathcal{D}_{0+}^\alpha u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{\partial u(x, \tau)}{\partial \tau} \frac{d\tau}{(t-\tau)^\alpha}. \quad (3)$$

Заметим, что уравнение (1), приведенное к виду

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{\partial}{\partial x} \left(q(x) \frac{\partial}{\partial x} u(x, \tau) \right) \frac{d\tau}{(t-\tau)^{1-\alpha}} \right]$$

можно, согласно [5], рассматривать как «закон сохранения»:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} W(x, t) = 0, \quad (4)$$

где «поток» W имеет вид

$$W(x, t) = -q(x) \frac{\partial}{\partial x} {}_tI_{0+}^{\alpha-1} u(x, t). \quad (5)$$

При $\alpha \rightarrow 1$ в пределе получаем закон Фика: $W(x, t) = -q(x) u_x(x, t)$. Физическая интерпретация (4) и (5) предложена в [5]. Для того чтобы знать, сколько частиц в данный момент попадают в заданную область, необходимо знать, сколько частиц находилось поблизости, в пределах одного «шага» от области, во все предыдущие моменты времени, т. к. некоторые из них перед тем, как попасть в область, возможно, очень долгое время находились в состоянии «ожидания». Поэтому «мгновенный» поток, присущий марковскому диффузионному процессу, в случае дробной субдиффузии должен быть заменен на поток «с задержкой по времени».

Пользуясь терминологией книги [6], с помощью интегро-интерполяционного метода в сеточной области

$$\widehat{\Omega}(N, M) = \{(x_i = ih, t_j = j\tau) : 0 \leq i \leq N, 0 \leq j \leq M\} \quad (6)$$

аппроксимируем уравнение (1) разностным

$$y_t^{(\alpha)} = \Lambda(\sigma \widehat{y} + (1 - \sigma)y), \quad 0 \leq \sigma \leq 1, \quad (7)$$

где $y_t^{(\alpha)}$ — производная Грюнвальда—Летникова

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

являющаяся, согласно [4], разностным аналогом дробной производной Капуто, $\widehat{y} = y^{j+1}$, а оператор Λ действует по правилу

$$\Lambda y = \frac{1}{h^2} \left[q_{i-\frac{1}{2}} y_{i-1}^j - \left(q_{i-\frac{1}{2}} + q_{i+\frac{1}{2}} \right) y_i^j + q_{i+\frac{1}{2}} y_{i+1}^j \right], \quad (8)$$

где для q выполняется (2). Определим норму сеточной функции $y_i^j = y^j(x_i)$

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

Согласно [6], разностная схема с весами (7) называется устойчивой в C , если выполнена оценка

$$\|y^{j+1}\|_C \leq \|y^0\|_C.$$

Теорема 1 Если имеет место соотношение

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

где c_2 определяется из (2), то разностная схема с весами (7) устойчива в C .

Рассмотрим в области $\Omega = \{(x, t) : x \geq 0, t \geq 0\}$ краевую задачу следующего вида:

$${}_t\mathcal{D}_{0+}^\alpha u(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(q(x) \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) \right), \quad 0 < \alpha < 1, \quad (9)$$

$$u(x, 0) = 0, \quad x \geq 0, \quad (10)$$

$$u(0, t) = f(t), \quad t > 0. \quad (11)$$

Здесь $f(t)$ — периодическая функция, а $q(x) \in \mathcal{Q}$, где \mathcal{Q} — класс непрерывно дифференцируемых функций, удовлетворяющих (2).

Будем предполагать, что известна дополнительная информация о решении краевой задачи (9)—(11) в некоторой точке $x = l$:

$$u(l, t) = \psi(t). \quad (12)$$

Обратные задачи заключаются в восстановлении функции $q(x)$ и показателя α из соотношений (9)—(12).

Заменив область Ω сеточной областью $\widehat{\Omega}(N, M)$ (6), аппроксимируем обратную задачу (9)—(12) разностной:

$$y_t^{(\alpha)} = \Lambda(\sigma \widehat{y} + (1 - \sigma)y), \quad (13)$$

$$y_i^0 = 0, \quad 0 \leq i \leq N, \quad (14)$$

$$y_0^j = \varphi^j, \quad y_N^j = 0, \quad 1 \leq j \leq M. \quad (15)$$

При $\sigma \neq 0$ данная разностная краевая задача решается методом прогонки.

Введем в рассмотрение класс $\hat{H} = \hat{H}[\hat{\Omega}(N, M)]$ сеточных функций y , заданных в сеточной области $\hat{\Omega}$, принимающих неотрицательные значения и удовлетворяющих условиям (14), (15) на границе. Через \hat{Q} обозначим класс сеточных функций q , удовлетворяющих (2).

Прямая задача. Найти сеточную функцию $y \in \hat{H}$, удовлетворяющую (13), по известным сеточным функциям $q \in \hat{Q}$ и $\varphi \in \hat{H}[\hat{\Omega}(0, M)]$.

Следующая теорема позволяет получить оценку решения разностной прямой задачи (13)–(15).

Теорема 2 *Решение разностной прямой задачи (13)–(15) допускает оценку*

$$\|y\|_C \leq \|\varphi\|_C, \quad (16)$$

$$\text{где } \|y\|_C = \max_j \|y^j\|_C, \quad \|\varphi\|_C = \max_j |\varphi^j|, \quad j = 0, 1, 2, \dots, M.$$

Пусть l — номер узла сеточной области $\hat{\Omega}(N, M)$, такой, что $0 \ll l \ll N$. Разностные обратные задачи заключаются в следующем. По дополнительной информации о решении прямой задачи (13)–(15)

$$y_l^j = \psi^j, \quad 0 \leq j \leq M, \quad (17)$$

требуется

Обратная задача 1: предполагая α известным, найти сеточную функцию $q \in \hat{Q}$, удовлетворяющую (13);

Обратная задача 2: одновременно восстановить сеточную функцию $q \in \hat{Q}$, удовлетворяющую (13), и величину α .

Введем в рассмотрение пространство \mathcal{X}^K решений обратной задачи, состоящее из векторов $\chi = (\chi_0, \chi_1, \dots, \chi_{K-1})$. Таким образом, решение обратной задачи сводится к восстановлению функции $q(\chi) = q(\chi_0, \chi_1, \dots, \chi_{K-1})$ класса \hat{Q} , где χ — вектор параметров, характеризующих вид функции q .

Пусть P — число узлов сеточной области $\hat{\Omega}$, лежащих между позицией источника и позицией «детектора» — точкой, в которой производятся измерения. Обозначим через K количество «неизвестных» параметров функции q , определение которых и представляет основную цель. Будем считать, что в ходе одного эксперимента производится M измерений через равные промежутки времени.

Отправляясь от (17), выберем в качестве данных обратной задачи вектор $\psi = (\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{M-1})$. Вектор $\xi = (\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_{M-1})$, полученный в результате решения прямой задачи (13)–(15) при некоторых входных значениях α^0 и q^0 на том же расстоянии l от источника, на котором были зарегистрированы данные обратной задачи, назовем модельными данными.

Определим невязку $\eta(\chi) = \psi(\chi) - \xi(\chi)$, так что $\eta : \mathbf{R}^K \rightarrow \mathbf{R}^M$, $M > K$. Здесь имеется в виду, что вектор невязки η имеет размерность M и зависит от K параметров $\chi_0, \chi_1, \dots, \chi_{K-1}$.

При использовании техники книги [7], в терминах теории безусловной оптимизации разностная обратная задача (13)–(15) и (17) имеет вид: найти

$$\min_{\chi \in \mathbf{R}^K} \Psi(\chi) = \mathcal{F}(\eta(\chi)), \quad (18)$$

где $\Psi(\chi)$ дважды непрерывно дифференцируема в открытом выпуклом множестве $G \subset \mathbf{R}^K$, $\eta : \mathbf{R}^K \rightarrow \mathbf{R}^M$, $\mathcal{F} : \mathbf{R}^M \rightarrow \mathbf{R}$ и

$$\mathcal{F}(\eta(\chi)) = \frac{1}{2} \eta(\chi)^T \eta(\chi) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{M-1} \eta_j^2 = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{M-1} (\psi_j - \xi_j)^2. \quad (19)$$

В работе для минимизации $\Psi(\chi)$ применяется модифицированный метод Ньютона, позволяющий игнорировать вторые производные: метод Левенберга—Марквардта [7], который реализуется в виде следующего итерационного процесса:

$$(J^T J + \gamma E) \Delta\chi = -J^T \eta, \quad \chi^+ = \chi^c + \Delta\chi. \quad (20)$$

Здесь $J(\chi)$ — матрица Якоби размерности $M \times K$ функции $\eta(\chi)$, E — единичная матрица размерности $K \times K$, γ — это некоторое число, называемое параметром регуляризации и подбираемое конкретно под каждую задачу; χ^c — текущее, а χ^+ — следующее приближенное решение обратной задачи.

Для исследования практической устойчивости метода минимизации функционала невязки решения обратной задачи в ходе вычислительных экспериментов дополнительная информация $\psi(t)$ из (17) по примеру [9] задавалась с ошибками. Так, j -я компонента вектора $\psi = (\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{M-1})$ задавалась в виде $(1 + \delta\xi)\psi_j$, где $\delta > 0$ и ξ — случайная величина, равномерно распределенная на $[-1, 1]$.

На рис. 1 и 2 представлены результаты вычислительных экспериментов. Сплошной линией обозначается «точное» решение обратной задачи, точками — начальное приближение, пунктиром — приближенное решение, полученное методом Левенберга—Марквардта.

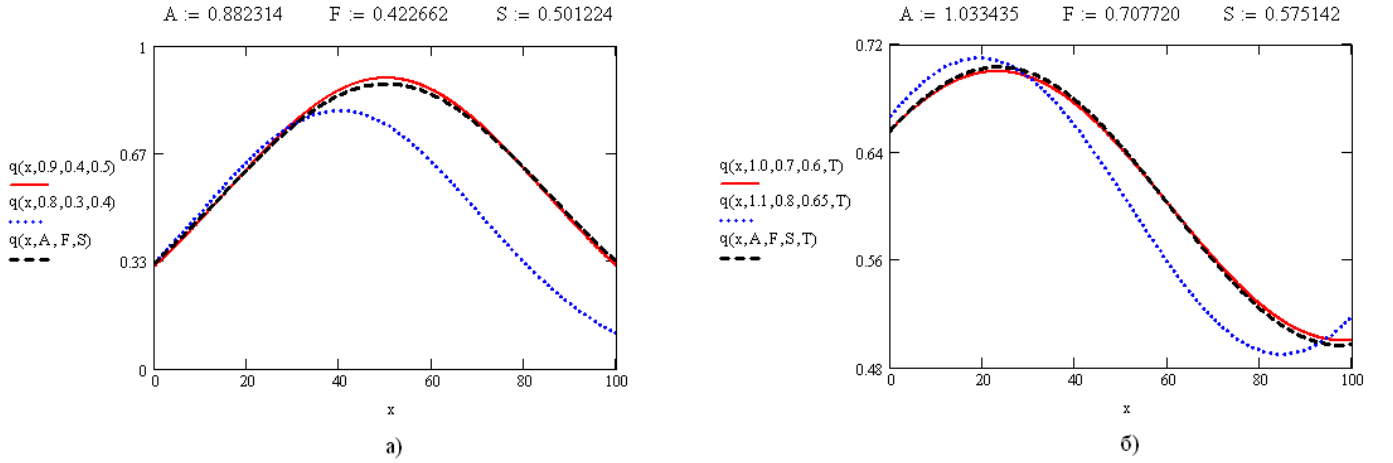


Рис. 1: Решения обратной задачи 1

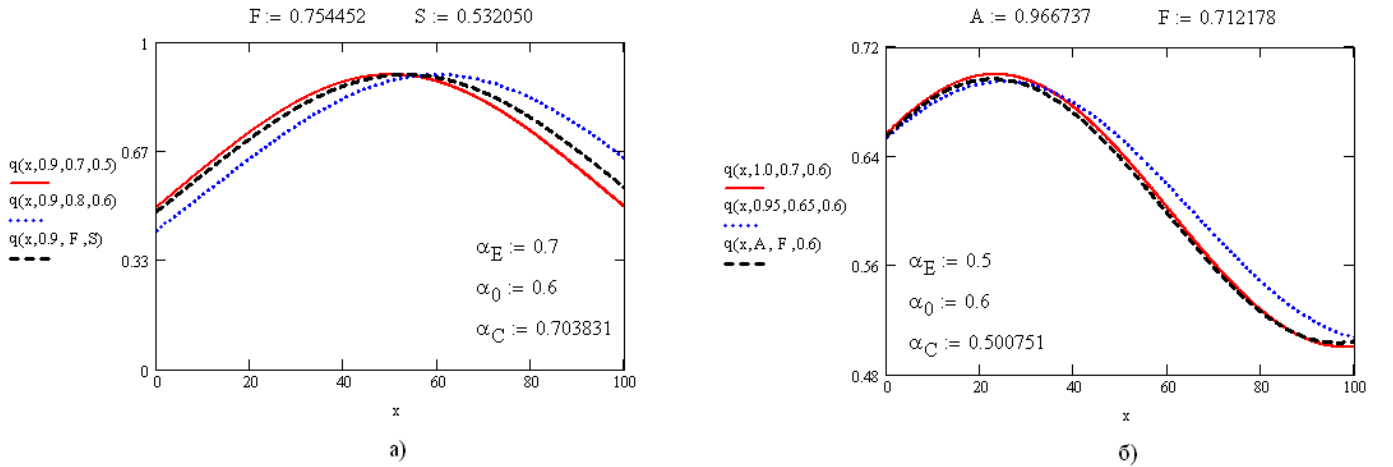


Рис. 2: Решения обратной задачи 2

На рис. 1 представлены результаты решения обратной задачи 1 при $\chi = \chi(A, F, S)$ в следующих случаях:

а)

$$q(x) = A \exp \left(-\frac{(x - \mu S)^2}{\eta F} \right), \quad (21)$$

б)

$$q(x) = \mu A \sin(\eta F x + S) + T. \quad (22)$$

Здесь и далее μ и η — параметры масштабирования, а T — параметр сдвига, которые выбираются таким образом, чтобы для всех $x \in \Omega$ выполнялось (2).

На рис. 2 представлены результаты решения обратной задачи 2 в следующих случаях: а) коэффициент $q(x)$ имеет вид (21), $\chi = \chi(F, S, \alpha)$ (параметр A остается фиксированным), и б) коэффициент $q(x)$ имеет вид (22), $\chi = \chi(A, F, \alpha)$ (параметр S остается фиксированным). Обозначения: α_E — «точное» значение α , α_0 — начальное приближение, α_C — значение α , полученное методом Левенберга—Марквардта.

Заметим, что обратная задача 2 фактически заключается в восстановлении вида дифференциального уравнения (1) по реально измеряемым данным. Такие задачи не являются классическими коэффициентными обратными задачами для уравнений в частных производных, вид которых известен [8, 9].

Список литературы

- [1] Metzler R, Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // Phys. Rep., 2000, Vol. 339, P. 1—77.
- [2] Metzler R, Klafter J. The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics // J. Phys. A: Math. Gen., 2000, Vol. 37, P. R161—R208.
- [3] Самко С. Г., Килбас А. А., Маричев О. И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. — Минск: Наука и техника, 1987.
- [4] Gorenflo R., Mainardi F., Moretti D., Paradisi P. Time fractional diffusion: a discrete random walk approach // Nonlinear Dynamics, 2002, Vol. 29, P. 129—143.
- [5] Ismail A. Lecture 18: Non-Markovian Diffusion Equations / In: M.Z. Bazant 18.366 Random Walks and Diffusion. Lecture Notes for Spring 2003. — <http://www-math.mit.edu/18.366/>
- [6] Самарский А. А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1977.
- [7] Дэннис Дж., Шнабель Р. Численные методы безусловной минимизации и решения систем нелинейных уравнений. Пер. с англ. — М.: Мир, 1988.
- [8] Романов В. Г., Кабанихин С. И. Обратные задачи геоэлектрики. — М.: Наука, 1991.
- [9] Романов В. Г., Кабанихин С. И., Пухначева Т.П. Обратные задачи электродинамики. — Новосибирск, 1984.