

# СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ

Siberian Electronic Mathematical Reports

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

*Том 5, стр. 581–594 (2008)*

УДК 519.245, 519.63  
MSC 65Nxx, 65Cxx

## МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ТЕОРИИ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ

А. Н. БОНДАРЕНКО, Д. С. ИВАЩЕНКО

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

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

### 1. ВВЕДЕНИЕ

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

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

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

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

© 2008 Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С.

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

Работа поддержана междисциплинарным интеграционным проектом СО РАН № 48.

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

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

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

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

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

Приведены результаты компьютерных экспериментов и дан сравнительный анализ этих подходов.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

называется дробной производной Римана—Лиувилля порядка  $\alpha$ .

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

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

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

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

Отсюда следует, что

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

**Определение 5.** Выражение

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

называют дробной производной Капуто [4, 5].

Известно следующее соотношение.

**Лемма 2.** Справедлива формула

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Введем сетки

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

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

и сетку в  $\Omega$ :

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

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

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

где оператор  $\Lambda_\lambda$  действует по правилу

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

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

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

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

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

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

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

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

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

а именно

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

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

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

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

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

**Теорема 1.** *Если имеет место соотношение*

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

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

Доказательство можно найти в [6].

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

и должны удовлетворять условию

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Были получены следующие результаты.

**Теорема 2.** *Если имеет место соотношение*

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

*то схема (38) устойчива в С.*

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

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

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

Полные доказательства можно найти в [6].

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

**Теорема 3.** *Схема (35) консервативна, то есть*

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Представим уравнение (32) в виде

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

где сеточную функцию

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

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

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

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

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



Рис. 1. Вероятности перехода

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

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

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

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

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

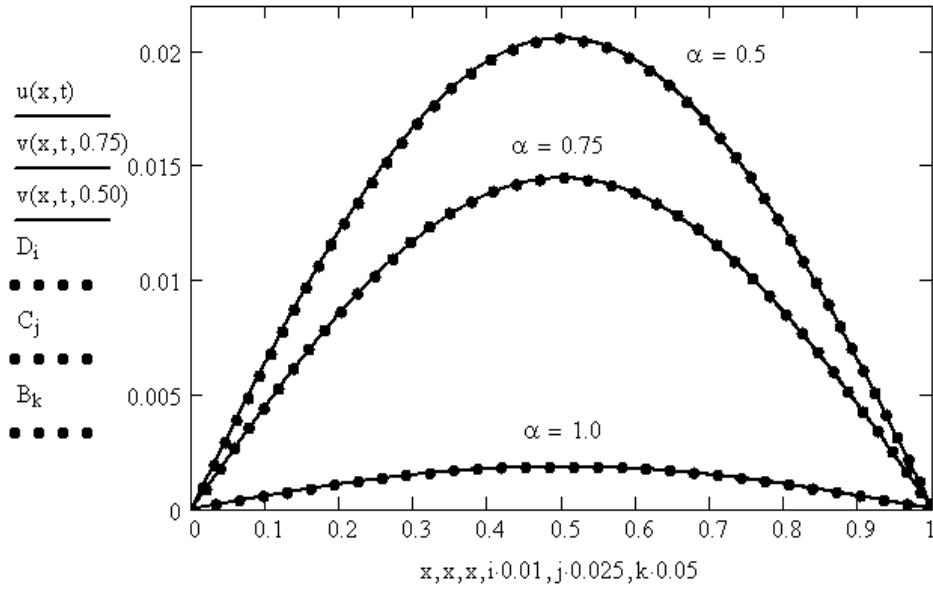


Рис. 2. Сравнение результатов численного (точки) и аналитического (сплошные линии) решений краевой задачи (40)–(42)

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

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

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

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

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

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

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

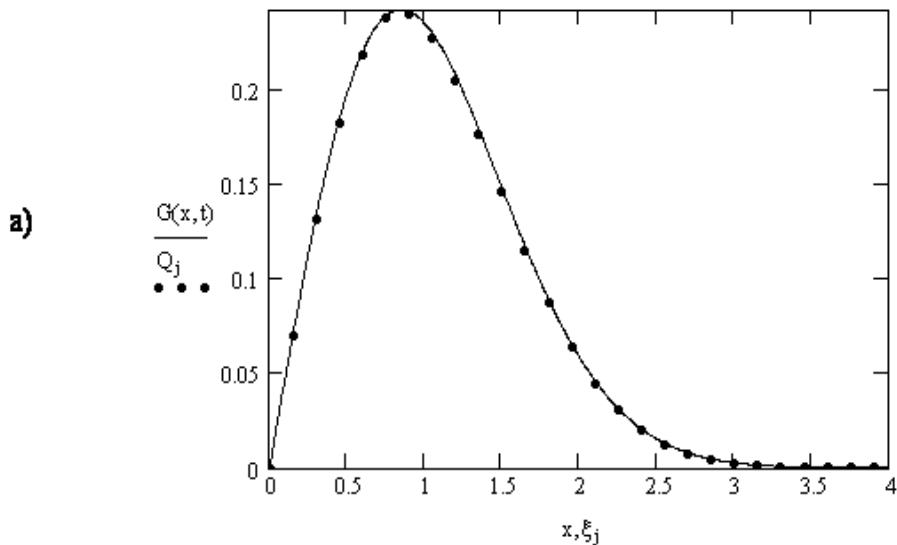
$$(49) \quad G(x, t) = \frac{1}{t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(-\beta n)} \frac{x^n}{\lambda^n t^{\beta n}}.$$

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

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

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

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



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

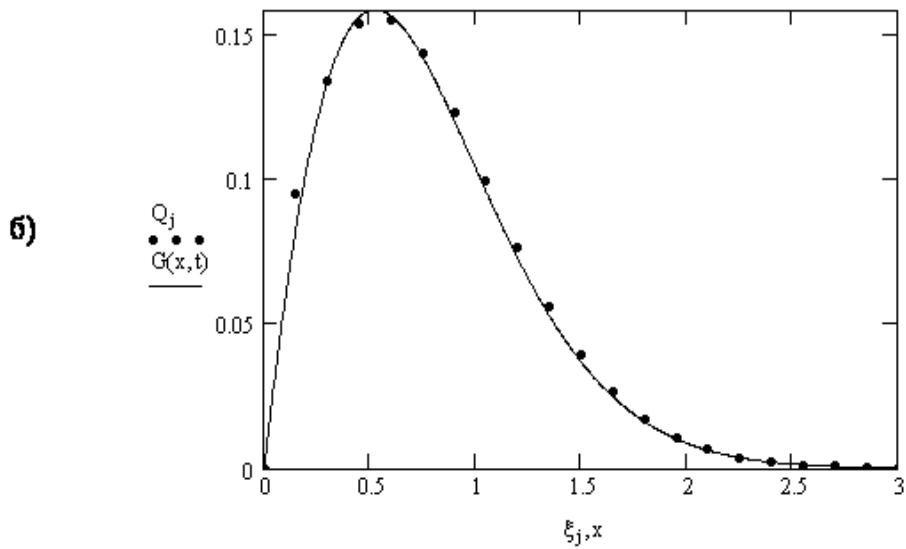


Рис. 3. Метод Монте-Карло для а) классической диффузии и б) диффузии дробного порядка ( $\beta = 0.375$ ): график функции Грина первой краевой задачи в момент времени  $t$

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

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

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

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

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

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

ДМИТРИЙ СЕРГЕЕВИЧ ИВАЩЕНКО,  
ООО «РН-УФАНИПИНЕФТЬ»,  
ул. Революционная, д. 96/2  
450078, Уфа, Россия  
*E-mail address:* stanger@ngs.ru