

УДК 517.97

Метод вариационного интерполирования в обратных задачах аномальной диффузии дробно дифференциального типа

В.А. Литвинов¹, В.В. Учайкин²

¹Барнаульский юридический институт МВД России, ул. Чкалова, 49, Барнаул, 656038

²Ульяновский государственный университет, ул. Льва Толстого, 42, Ульяновск, 432017

E-mails: lva201011@yandex.ru (Литвинов В.А.), vuchaikin@gmail.com (Учайкин В.В.)

Литвинов В.А., Учайкин В.В. Метод вариационного интерполирования в обратных задачах аномальной диффузии дробно дифференциального типа // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2021. — Т. 24, № 4. — С. 393–408.

В работе рассматриваются задачи восстановления параметров дифференциальных уравнений, описывающих процессы аномальной диффузии, по известным решениям. В качестве инструментария использован метод вариационного интерполирования, предложенный и апробированный авторами ранее. На модельных задачах демонстрируется восстановление зависимости коэффициента диффузии от времени и определение порядка производных по времени и координате для уравнения аномальной диффузии. Показана возможность получения приемлемой точности при незначительных вычислительных затратах.

DOI: 10.15372/SJNM20210404

Ключевые слова: обратные задачи, уравнение диффузии, операторы, дробные производные.

Litvinov V.A., Uchaikin V.V. Method of variational interpolation in inverse problems of anomalous diffusion of fractional-differential type // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2021. — Vol. 24, № 4. — P. 393–408.

The work considers problem of reconstruction of differential equations parameters, describing anomalous diffusion processes, on the base of known solutions. As a tool, is used the variational interpolation method elaborated by the authors earlier. The reconstruction time-dependence of diffusivity and determination of fractional time- and space-derivatives order in anomalous diffusion equation is demonstrated. There is shown a possibility of sufficient accuracy with insignificant computational expanses.

Keywords: inverse problems, diffusion equation, operators, fractional derivatives.

1. Введение

Традиционные методы решения обратных задач сводятся к параметризации рассматриваемой модели и подбору значений параметров, наилучшим образом описывающих результаты экспериментальных наблюдений. В реальных задачах не всегда имеется возможность получить широкий набор теоретических расчетов с достаточно малыми (для достижения требуемой точности) шагами по параметрам. Сокращение времени вычислений, осуществляемое увеличением длин шагов, сопровождается потерей точности, что, в свою очередь, может быть скомпенсировано применением подходящей интерполяционной формулы.

Эффективным путем решения этой проблемы является метод *вариационного интерполирования* (ВИНТ-метод), предложенный в работе [1]. В основу его положена выдвинутая в статье Г.И. Марчука и В.В. Орлова [2] идея обобщения постановки вычислительных задач сведением их к нахождению не решений, соответствующих процессам уравнений, а функционалов от этих решений. По существу, речь шла об общей теории измерений, основанной на двойственном представлении искомых функционалов с помощью основной и сопряженной функций, и двойственность эта дала чрезвычайно эффективную и в то же время лаконичную формулировку теории возмущений, вариационного принципа, постановки обратных задач, что в конечном итоге и привело к созданию ВИНТ-метода. В последующих наших работах ([3, 4] и др.) нами было продемонстрировано применение этого метода к широкому кругу задач переноса частиц и излучений. В указанных работах продемонстрирована возможность описания значительных вариаций изучаемых функционалов (двух и более порядков) на основе двух–трех базисных решений. В [4] показано, в частности, что использование в ВИНТ-алгоритме пары опорных взаимно сопряженных решений обеспечивает ему превосходство над эрмитовой интерполяцией. В работе [5] рассмотрено применение метода вариационного интерполирования к решению некоторых обратных модельных задач теории переноса.

Идейно близким к ВИНТ-методу оказался интенсивно развиваемый в последнее время *вариационно-итерационный* (ВИТ)-метод, продемонстрированный на примерах решения как дробно дифференциальных линейных уравнений с оператором Римана–Лиувилля [6] и родственным ему оператором Герасимова–Капуто [7], так и нелинейных аналогов таких уравнений, включая и разностно-дифференциальные [8]. Основными объектами приложения ВИТ-метода являются процессы тепло- и массопереноса (диффузии), как нормальные, так и аномальные (субдиффузионного типа) уравнения, для которого содержат производную по времени дробного порядка. Ключевой проблемой ВИТ-метода является корректное определение множителя Лагранжа при применении метода к дробно дифференциальным уравнениям распространения тепла или массы, однако в отличие от ВИНТ-метода здесь, как правило, рассматривается само решение, а не функционал от него.

Наконец, в отдельных работах (см., например, [9–13]) описано применение ВИТ-метода к решению обратных задач. Весьма эффективным оказался он и в применении к другим задачам гидродинамики, акустики, тепло- и массопереноса.

Настоящая работа продолжает исследование ВИНТ-метода на примерах задач, аналогичных использованным в перечисленных выше работах для демонстрации ВИТ-метода.

2. Постановка задачи

В качестве *прямой* задачи рассмотрим вычисление линейного функционала на решении одномерного уравнения субдиффузии (замедленной диффузии, перколяции, просачивания сквозь пористые среды), имеющей место в геологических и биологических структурах естественного происхождения, а также в современных технологических процессах. Математически замедление диффузионного процесса осуществляется заменой первой производной по времени в параболическом диффузионном уравнении производной дробного порядка $\mu \in (0, 1)$ [14]. Напомним определение.

Пусть $f(t)$ — измеримая по Лебегу функция, определенная на конечном отрезке $[a, b]$ ($-\infty < a < b < \infty$) вещественной оси. *Левосторонний оператор Римана–Лиувилля порядка μ* определяется формулой

$${}_a D_t^\mu = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(-\mu)} \int_a^t \frac{f(\tau) d\tau}{(t-\tau)^{1+\mu}}, & \mu < 0, \\ \left(\frac{d}{dt}\right)^n {}_a D_t^{\mu-n} f, & \mu \geq 0, \end{cases}$$

где $n = [\mu] + 1$ ($[\mu]$ — целая часть числа μ). Аналогичным образом определяется и правосторонняя производная Римана–Лиувилля. Сформулируем также достаточное условие существования дробных производных, предполагаемое выполняющимся по умолчанию для всех рассматриваемых в статье функций.

Пусть $\mu \geq 0$ и $n = [\mu] + 1$. Если $f(t) \in AC^n[a, b]$ ($AC^n[a, b]$ — класс функций, для которых $f(t) \inf(t) \in AC^{(n-1)}[a, b]$), причем $f^{(n-1)}(t) \in AC[a, b]$, где $C[a, b]$ — класс непрерывных на $[a, b]$ функций, а $AC[a, b]$ — класс абсолютно непрерывных на этом отрезке функций, то дробная производная порядка μ существует почти всюду на $[a, b]$ и может быть представлена в следующем виде [15]:

$${}_a D_t^\mu f = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)}{\Gamma(1+k-\mu)} (t-a)^{k-\mu} + {}_a D_t^{\mu-n} f^{(n)}(t).$$

Рассмотрим уравнение диффузии

$${}_0 D_t^\mu \Phi(t, x) - a^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = S(t, x), \quad t > 0, \quad -\infty < x < \infty, \quad (1)$$

где $S(t, x)$ — функция источника, а

$${}_0 D_t^\mu \Phi(t, x) = \frac{1}{\Gamma(n-\mu)} \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^n \int_0^t \frac{\Phi(\tau, x)}{(t-\tau)^{\mu-n+1}} d\tau. \quad (2)$$

Для целочисленных значений μ будем использовать классические определения производных. Как и в предыдущих наших работах показания детекторов, доставляющих нам информацию о процессе, представляем в виде линейных функционалов. Измеряемые в эксперименте величины выражаются функционалом $J = (R, \Phi)$ от решения приведенного выше уравнения. Здесь $R(x, t)$ — функция чувствительности детектора. В случае, когда $R(x, t) = \delta(x - x_0)\delta(t - t_0)$, функционал будет равен решению уравнения (1) в точке (x_0, t_0) , т. е. $J = \Phi(t_0, x_0)$. Будем в дальнейшем рассматривать функционалы именно с такой функцией чувствительности детектора.

Предположим, что нам известен набор N значений функционала, соответствующий некоторой совокупности x_k, t_k , $k = 1, \dots, N$. Требуется определить значение одного из параметров μ или a , включая возможную зависимость параметра a от времени. В данной работе не рассматривается случай, когда неизвестными считаются оба параметра.

Для применения метода вариационного интерполирования (построения ВИНТ-представления) необходимо иметь несколько *базисных* решений Φ_j исходного уравнения, соответствующих различным моделям, а также решений сопряженного (в смысле Лагранжа) уравнения. Решение сопряженного уравнения обозначим как $\Phi_i^+(t, x)$. Подробно алгоритм построения ВИНТ-представления описан в работах [1, 3]. В работе [16] предложено использовать ВИНТ-метод для построения решений уравнений, содержащих производные дробного порядка.

Последовательность построения ВИНТ-представления функционала следующая:

- 1) выбираются базисные значения параметров модели, например значения a_i ;
- 2) находятся решения прямого Φ_j и сопряженного уравнений Φ_i^+ ;
- 3) для реального оператора L вычисляются матричные коэффициенты $L_{ij} = (\Phi_i^+, L\Phi_j)$, где L — общее обозначение оператора левой части уравнения (1);
- 4) решается система линейных уравнений $\sum_j L_{ij}C_j = J_i$ для коэффициентов C_j ;
- 5) вычисляется ВИНТ-представление функционала по формуле $J_{\text{ви}} = \sum_j C_j J_j$.

Отметим здесь то, что для построения ВИНТ-представления основной объем вычислений связан с расчетом матричных элементов L_{ij} , которые и определяют зависимость ВИНТ-представления функционала от реальных значений параметров модели. В нашем случае ВИНТ-представление решения уравнения (1) можно рассматривать как функцию $J_{\text{ви}}(\mu, a, t_0, x_0)$ при фиксированных t_0 и x_0 . Для a , зависящего от времени и/или координаты, можно воспользоваться параметризацией этой зависимости. Таким образом, при наличии ВИНТ-представления нахождение параметров μ и a сводится к решению системы нелинейных уравнений:

$$J_{\text{ви}}(\mu, a, t_k, x_k) = \Phi(t_k, x_k).$$

Для совместного определения μ и a требуются знания значений Φ минимум в двух точках $\{t_k, x_k\}$. При наличии экспериментальных значений Φ в большем числе точек система уравнений будет переопределена, и можно воспользоваться, например, методом наименьших квадратов для определения наиболее подходящих значений μ и a .

3. Классическое нестационарное уравнение диффузии

Начнем с процесса нормальной диффузии. Положим, что источник диффундирующих частиц имеет вид мгновенного импульса гауссовой пространственной формы, симметричной относительно начала координат с дисперсией σ^2 :

$$S(t, x) = \delta(t) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right).$$

Решение уравнения (1) для j -й базисной задачи с коэффициентом диффузии $a = a_j$ имеет вид

$$\Phi_j(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_j} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_j^2}\right), \quad \sigma_j^2 = \sigma^2 + 2a_j^2 t, \quad t \geq 0. \quad (3)$$

Сопряженная же функция (т. е. решение лагранжево сопряженного уравнения с указанной выше правой частью $R(x, t)$) имеет вид

$$\Phi_i^+(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_i^2}\right), \quad \sigma_i^2 = 2a_i^2(t_0 - t), \quad 0 \leq t \leq t_0. \quad (4)$$

В случае, когда параметр a зависит только от времени, матричные элементы L_{ij} представляются интегралом по времени:

$$L_{ij}(a) = \Phi_i(t_0, x_0) + \int_0^{t_0} \frac{(a_j^2 - a^2(t))(x_0^2 - \sigma^2)}{\sigma^5 \sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-x_0^2}{2\sigma^2}\right) dt,$$

где $\sigma = \sqrt{2a_i^2(t_0 - t) + 2a_j^2t + \sigma_0^2}$.

Различные значения коэффициента a_j дают нам набор опорных решений, на основе которых строится ВИНТ-представление решения уравнения (1) для неизвестного коэффициента a , который, в общем случае, может зависеть от координаты и времени.

Рассмотрим вначале случай постоянного неизвестного коэффициента a . Предположим, что нам известны опорные решения, соответствующие $a_1 = 2$ и $a_2 = 4$. Измеренные же в эксперименте значения функционала соответствуют $a = 3$. Именно это значение и требуется определить, приравнявая результат ВИНТ-представления экспериментально наблюдаемым значениям. Математически это является задачей численного решения алгебраического уравнения с одним неизвестным.

В таблице приведены относительные погрешности восстановления параметра a по значениям функционала, соответствующим различным точкам наблюдения x_0 и t_0 . Из данных таблицы видно, что для широкого интервала значений x_0 и t_0 относительная погрешность восстановления искомого параметра по двум опорным решениям не превосходит 1–2 %.

Таблица. Относительная погрешность в % восстановления коэффициента $a = 3$ по значениям функционала J при разных значениях t_0 и x_0 по двум базисным значениям (в точках $a = 2$ и $a = 4$)

$x_0 \backslash t_0$	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
0	0.19	-0.19	-0.19	-0.19	-0.19	-1.91	-1.91	-1.91	-1.91	-1.91
1	-0.19	-0.19	-0.19	-0.19	-0.19	-1.91	-1.91	-1.91	-1.91	-1.91
2	-0.16	-0.18	-0.18	-0.18	-1.73	-1.79	-1.82	-1.82	-1.81	-1.79
3	-0.13	-0.16	-0.17	-1.50	-1.57	-1.59	-1.71	-1.71	-1.72	-1.79
4	-0.07	-0.14	-1.17	-1.25	-1.36	-1.44	-1.50	-1.54	-1.57	-1.60
5	-0.30	-0.87	-1.04	-1.13	-1.19	-1.23	-1.31	-1.37	-1.42	-1.46
6	0.32	-0.62	-0.89	-1.01	-1.09	-1.14	-1.18	-1.21	-1.25	-1.31
7	2.74	-0.32	-0.69	-0.88	-0.98	-1.05	-1.10	-1.14	-1.17	-1.19
8	-4.51	0.07	-0.47	-0.71	-0.85	-0.94	-1.01	-1.06	-1.10	-1.13
9	-33.30	0.69	-0.20	-0.52	-0.70	-0.82	-0.91	-0.97	-1.02	-1.05
10	-100.00	3.46	0.16	-0.30	-0.53	-0.68	-0.79	-0.87	-0.92	-0.97

Усложним задачу. Предположим, что экспериментально наблюдаемые значения функционала соответствуют решению уравнения (1) с $a = 1.5 + 0.2t$. А нам известны опорные решения уравнения (1), соответствующие постоянным значениям коэффициента a ($a_1 = 1$, $a_2 = 1.5$, $a_3 = 2$, $a_4 = 2.5$, $a_5 = 3$), а также некоторый набор экспериментально наблюдаемых значений функционала в разные моменты времени $t_0 \in [1, 10]$. По результатам этих наблюдений и ВИНТ-представлению функционала в предположении постоянного a получим оценки a , соответствующие значениям функционала в разные моменты времени.

Проведенные расчеты параметра a показывают, что, в отличие от предыдущей задачи, восстанавливаемое значение при фиксированном t_0 зависит от x_0 . На рисунке 1 приведены результаты восстановленного значения a , усредненного по x_0 , для $x_0 = 0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0$.

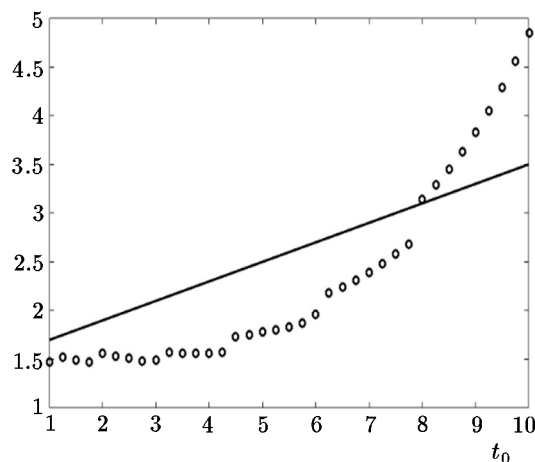


Рис. 1. Пример восстановления коэффициента a по данным, соответствующим различным t_0 в предположении $a = \text{const}$: линия — исходная зависимость; $\circ$ — восстановленные значения

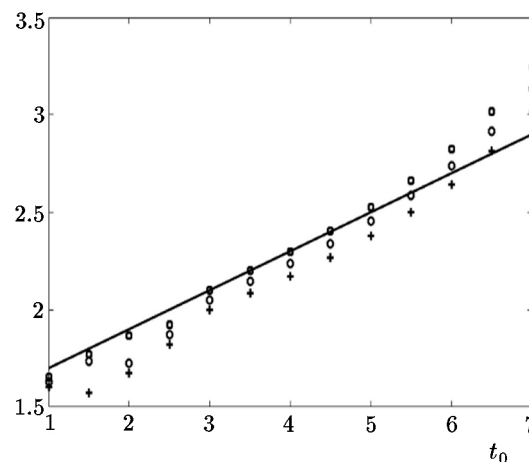


Рис. 2. Пример восстановления коэффициента a в предположении $a = a(t)$: линия — исходная зависимость; $+$ — гипотеза $a(t) = \alpha + 0.15t$; $\circ$ — $a(t) = \alpha + 0.2t$; $\times$ — $a(t) = \alpha + 0.25t$

Анализ результатов, приведенных на рис. 1, показывает недостаточную точность ВИНТ-представления, основанного на предположении о постоянном a . В то же время можно сделать вывод о слабом росте искомого коэффициента со временем.

Изменим параметризацию искомого коэффициента. Анализируя результаты предыдущего расчета, представленные на рис. 1, можно предположить, что $a = \alpha + \beta t$. Для опорных решений по-прежнему будем считать $\beta = 0$, а при построении ВИНТ-представления положим $\beta = 0.15, 0.20, 0.25$. Параметр α будет искомым. Значения β выбраны, исходя из оценки зависимости по результатам расчетов, приведенных на рис. 1, рассматриваемых теперь как некоторые прогностические данные.

На рис. 2 приведены результаты восстановления зависимости $a(t)$ при различных предположениях о значении параметра β . Несмотря на различные значения β , итоговое значение $a(t)$ оказывается близким к исходному. Можно поэтому утверждать, что такое поэтапное уточнение (в духе последовательных приближений) имеет смысл.

4. Аномальная диффузия

Рассмотрим теперь две задачи аномальной диффузии, представляемые уравнениями с производными нецелых (дробных) порядков.

4.1. Уравнение с дробной производной по времени и гармоническим источником

Построение ВИНТ-представления для аномального уравнения диффузии имеет свои особенности. Естественным является выбор опорных решений с целочисленными значениями производной по времени ($\mu = 0, 1, 2$), не исключая возможности использования и дробных значений μ .

Найдем решение уравнения (1) для гармонического источника $S(t, x) = \delta(x) \cos(\omega t)$. В работе [17] приводится следующее решение уравнения (1) с гармоническим источником¹:

$$\Phi_j(t, x) = \frac{\theta(t) \exp(-\lambda_1|x|) \cos\left(\omega t - \lambda_2|x| - \frac{\mu_j \pi}{4}\right)}{2a\omega^{\mu_j/2}}, \quad (5)$$

где $\theta(t)$ — ступенчатая функция Хевисайда,

$$\lambda_1 = \frac{\omega^{\mu_j/2} \cos\left(\frac{\mu_j \pi}{4}\right)}{a}, \quad \lambda_2 = \frac{\omega^{\mu_j/2} \sin\left(\frac{\mu_j \pi}{4}\right)}{a}.$$

В предельном случае при $\mu = 0$ выражение (5) переходит в известное решение уравнения Гельмгольца для выбранного источника:

$$\Phi_j(t, x) = \frac{\cos(\omega t)}{2a} \exp\left(-\frac{|x|}{2a}\right).$$

Таким образом, для рассматриваемой задачи выражение для дробной производной (2) имеет предельный переход при $\mu = 0$, как и следовало ожидать, к множителю единицы. Отметим, что решение (5) будет использовано нами для тестирования ВИНТ-представления. Само же ВИНТ-представление строится по базисным решениям, соответствующим целочисленным значениям μ .

Сопряженная функция $\Phi_i^+(t, x)$, соответствующая функции чувствительности детектора $R(t, x) = \delta(t - t_0)\delta(x - x_0)$, является функцией Грина для уравнения (1). Для целочисленных значений производной по времени в уравнении (1) функции Грина хорошо известны и имеют вид:

$$\begin{aligned} \Phi_{0i}^+(t, x) &= \frac{\delta(t - t_0) \exp\left(\frac{-|x - x_0|}{a_i}\right)}{2a_i}, & \mu &= 0; \\ \Phi_{1i}^+(t, x) &= \frac{\theta(t_0 - t) \exp\left(\frac{-(x - x_0)^2}{4a_i^2(t_0 - t)}\right)}{2a_i \sqrt{\pi(t_0 - t)}}, & \mu &= 1; \\ \Phi_{2i}^+(t, x) &= \frac{\theta\left(t_0 - t - \frac{|x_0 - x|}{a_i}\right)}{2a_i}, & \mu &= 2. \end{aligned} \quad (6)$$

Для вычисления матричных элементов, определяющих ВИНТ-представление функционала, кроме выражений (6) потребуется результат действия оператора $L(\mu)$ на $\Phi_j(t, x)$, соответствующих опорным значениям μ_j :

$$L\Phi_j(t, x) = \exp(-\lambda_1|x|) \frac{\omega^\mu \cos\left(\omega t - \lambda_2|x| + \frac{\pi(2\mu - \mu_j)}{4}\right) - \omega^{\mu_j} \cos\left(\omega t - \lambda_2|x| + \frac{\pi\mu_j}{4}\right)}{2a_j\omega^{\mu_j/2}} + S(t, x).$$

¹В англо-язычной литературе для таких уравнений используется термин “fractional wave-diffusion equation”, поскольку при надлежащем выборе порядка производной по времени такие уравнения превращаются в классические диффузионные или волновые уравнения. Термин этот, пущенный в оборот профессором Болонского университета F. Mainardi, в отечественной литературе как-то не прижился, и мы используем вместо “wave-fractional” более лаконичный термин “аномальный”.

Матричные элементы L_{ij} , необходимые для построения ВИНТ-представления решения уравнения (1) при произвольном μ , вычисляются путем интегрирования по всей оси x и времени от 0 до t_0 произведения одной из функций (6) и приведенного выше выражения.

Ограничимся на данном этапе варьированием только порядка производной по времени μ , полагая $a_i = a_j = a$. В этом случае рассматриваемый здесь функционал фактически является функцией неизвестного параметра μ . При известных значениях функции в нескольких точках определение ее значений в промежуточных точках является задачей интерполяции. В нашем случае кроме значений функции (функционала) в опорных точках известны также значения матричных элементов L_{ij} , которые содержат в себе информацию о производной значения функции.

Из теории возмущений известно, что при малой вариации оператора ΔL изменение значения функционала может быть вычислено по формуле

$$J - J_1 = -(\Phi_1^+, \Delta L \Phi_1) = J_1 - L_{11}.$$

При малом изменении параметра μ с учетом приведенного соотношения можно записать

$$\frac{\partial J}{\partial \mu} \approx \frac{J(\mu_1) - L_{11}(\mu_1 + \Delta \mu)}{\Delta \mu}.$$

Таким образом, для построения интерполяционного значения функционала мы имеем не только значения функции в опорных точках, но и разностные оценки значений ее производных. В этом случае можно воспользоваться интерполяционным полиномом Эрмита. На рис. 3 приведены результаты сопоставления ВИНТ-представления решения уравнения (1) для различных значений порядка производной по времени, а также значения полинома Эрмита. Из данных рисунка видно, что и ВИНТ-представление, построенное на решениях, соответствующих только целочисленным значениям μ , и интерполяционный полином Эрмита удовлетворительно описывают значения функционала при всех дробных значениях $\mu \in [0, 1]$. Использование третьего базисного решения, соответствующего $\mu = 2$, позволяет расширить область представления функционала.

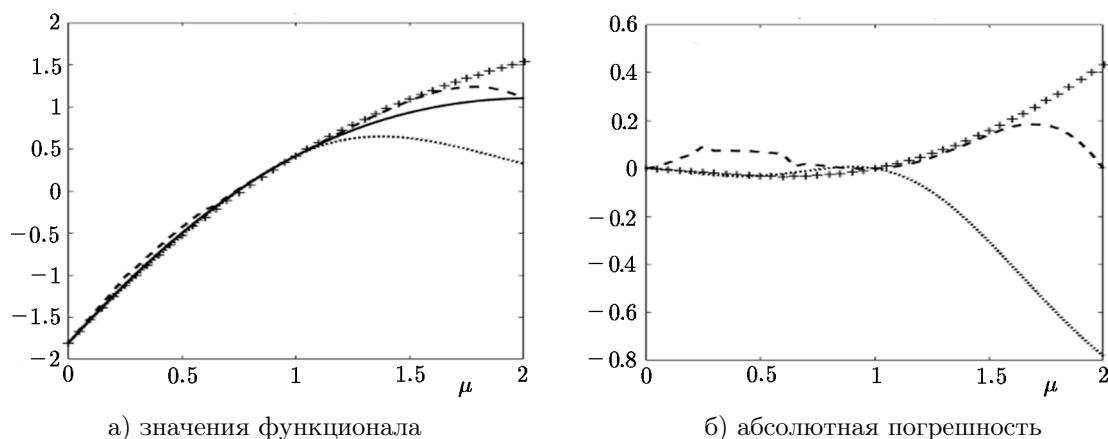


Рис. 3. ВИНТ-представление решения с дробной производной по времени: а) сплошная линия — точное значение; пунктир — ВИНТ-представление по трем точкам $\mu = 0, 1, 2$; точки — ВИНТ-представление по двум точкам $\mu = 0, 1$; + — полином Эрмита по двум точкам $\mu = 0, 1$; б) пунктир — ВИНТ-представление по трем точкам $\mu = 0, 1, 2$; точки — ВИНТ-представление по двум точкам $\mu = 0, 1$; + — полином Эрмита по двум точкам $\mu = 0, 1$

Дополнительно проведенные расчеты с использованием опорной точки $\mu = 0.5$ свидетельствуют о значительном повышении точности интерполяционного представления функционалов. Также следует отметить, что значения интерполяционного полинома Эрмита в области экстраполяции сильно зависят от точности вычисления производной в крайних опорных точках. Сравнивая результаты ВИНТ-представления и полинома Эрмита в области интерполяции $\mu \in [0, 1]$, можно сделать вывод об их идентичности. Но это, скорее всего, случайное совпадение.

Из рис. 3 видно, что зависимость функционала от μ при выбранных значениях остальных параметров похожа на полиномиальную. Это и объясняет одинаково хорошую точность интерполяционного полинома Эрмита и ВИНТ-представления. В работе [4] отмечено, что даже в случае линейной зависимости оператора L от некоторого параметра μ ВИНТ-представление функционала будет дробно полиномиальной функцией. Такое представление позволяет описать более широкий класс функций, особенно быстро меняющихся. Отметим также, что, как продемонстрировано в предыдущем пункте, ВИНТ-представление легко обобщается и на описание функциональных зависимостей.

Результаты, приведенные на рис. 3, позволяют надеяться получить достаточную точность восстановления параметра μ аномального уравнения диффузии на основе ВИНТ-представления решения уравнения (1). Предположим, что выражение (5) соответствует экспериментально наблюдаемым величинам. В этом случае задача восстановления порядка производной по времени сводится к решению уравнения

$$J_{\text{ви}}(\mu) = \Phi(t_0, x_0).$$

На рис. 4 приведены результаты решения данного уравнения при использовании двух и трех опорных решений уравнения (1). Видно, что ВИНТ-представление на основе трех опорных решений позволяет восстановить значение порядка производной по времени с точностью не менее 1 %.

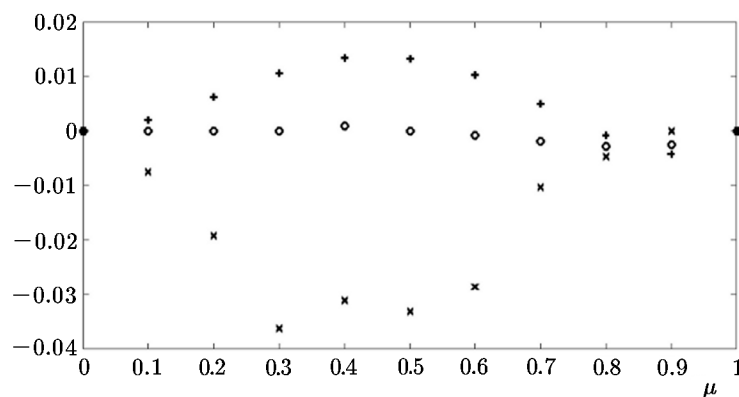


Рис. 4. Погрешность восстановления параметра μ : $\circ$ — по трем точкам $\mu = 0, 0.5, 1$; $+$ — по двум точкам $\mu = 0, 1$; $\times$ — по трем точкам $\mu = 0, 1, 2$

4.2. Дробная производная по времени и степенной источник

Рассмотрим еще одну задачу аномальной диффузии со степенной по времени функцией источника $S(t, x) = \delta(x)t^\gamma$. Как и в предыдущем случае опорные решения выберем соответствующие $\mu = 0$ и $\mu = 1$. При наличии функций Грина, в роли которых могут выступать решения сопряженных уравнений (6), опорные решения вычисляются путем свертки функции Грина и функции источника:

$$\begin{aligned}\Phi_0(t, x) &= \frac{t^\gamma \exp\left(\frac{-|x|}{a}\right)}{2a}, \quad \mu = 0, \\ \Phi_1(t, x) &= \int_0^t \frac{1}{2a\sqrt{\pi\tau}} \exp\left(\frac{-x^2}{4a^2\tau}\right) (t-\tau)^\gamma, \quad \mu = 1.\end{aligned}\quad (7)$$

Так как функция чувствительности детектора остается неизменной, то решениями сопряженных уравнений, используемыми при вычислении матричных элементов L_{ij} при построении ВИНТ-представления, будут функции, определенные равенствами (6). Используя выражения (7) и (6), вычислим матричные коэффициенты L_{ij} . При вычислении матричных элементов интегрирование по переменной x выполнимо в аналитическом виде. При этом итоговые выражения имеют громоздкий вид и ввиду их промежуточного значения не приводятся в данной работе. Отметим только, что необходимые для вычисления матричных элементов дробные производные по времени от выражений (7) имеют вид:

$$\begin{aligned}{}_0D_t^\mu \Phi_0 &= \frac{t^{\gamma-\mu} \frac{\Gamma(1+\gamma)}{\Gamma(1-\mu+\gamma)} \exp\left(\frac{-|x|}{a}\right)}{2a}, \\ {}_0D_t^\mu \Phi_1 &= \frac{\Gamma(1+\gamma)}{\Gamma(2-\mu+\gamma)} \left(t^{1-\mu+\gamma} \delta(x) + \int_0^t \frac{(t-\tau)^{1-\mu+\gamma} \left(\frac{x^2}{4a^2\tau} - \frac{1}{2}\right)}{\tau G(x, \tau)} d\tau \right), \\ G(x, \tau) &= \frac{\exp\left(\frac{-x^2}{4a^2\tau}\right)}{2a\sqrt{\pi\tau}}.\end{aligned}$$

Для проверки точности восстановления порядка дробной производной по времени при помощи ВИНТ-представления требуется знать точное решение уравнения (1) со степенным по времени источником. Получим результат путем прямого решения уравнения (1).

Используя преобразование Лапласа по переменной t , получим выражение для трансформанты:

$$\tilde{\Phi}(s, x) = \frac{\Gamma(1+\gamma) \exp\left(\frac{-s^\beta |x|}{a}\right)}{2as^{1+\beta+\gamma}}, \quad \beta = \frac{\mu}{2}.$$

Для обратного преобразования воспользуемся свойством контурного интеграла Ханкеля:

$$\frac{1}{\Gamma(z)} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{Ha}} e^s s^{-z} ds.$$

В итоге получим искомое выражение в виде ряда

$$\Phi(t, x) = \frac{\Gamma(1+\gamma)t^{\beta+\gamma}}{2a} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^n}{n! \Gamma(1+\beta-\beta n+\gamma)}, \quad z = \frac{|x|}{at^\beta}. \quad (8)$$

При β , равных обратной величине целых чисел, приведенное выше выражение непригодно для непосредственных вычислений. Его можно преобразовать, воспользовавшись свойством гамма-функции

$$\Gamma(1-z)\Gamma(z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)}.$$

В этом случае выражение (8) примет вид

$$\Phi(t, x) = \frac{\Gamma(1 + \gamma)t^{\beta+\gamma}}{2a} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^n \Gamma(\beta(n-1) - \gamma) \sin((\beta(n-1) - \gamma)\pi)}{\pi n!}. \quad (9)$$

Данное выражение было использовано для сравнения с ВИНТ-представлением с целью определения порядка производной по времени μ в уравнении (1) по известному решению. Можно предположить, что наихудшие результаты будут при исходном $\mu = 0.5$, максимально равноудаленном от опорных точек. На рис. 5 приведены области по переменным x и t , соответствующие разным абсолютным значениям погрешности восстановления параметра μ для источника с $\gamma = 0.5$. Из рисунка видно, что наихудший, но удовлетворительный, результат соответствует малым значениям времени. С ростом t абсолютная погрешность быстро убывает.

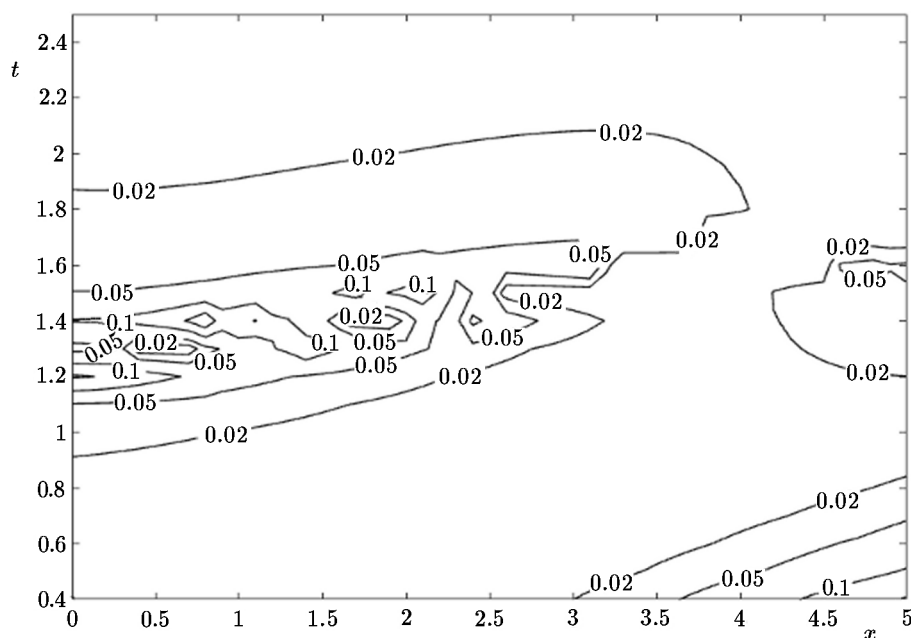


Рис. 5. Модуль погрешности восстановления исходного параметра $\mu = 0.5$ по двум базисным решениям $\mu = 0, 1$ для разных значений t и x при $\gamma = 0.5$

4.3. Дробная производная по координате

Рассмотрим теперь уравнение диффузии, содержащее производную дробного порядка по координате,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} - \frac{a^2}{\Gamma(2 - \mu)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^x \frac{\Phi(t, y)}{(x - y)^{\mu-1}} dy = S(t, x), \quad 1 < \mu < 2. \quad (10)$$

Как и в предыдущем случае для построения ВИНТ-представления искомого решения удобно воспользоваться решениями уравнения (10) для предельных случаев, соответствующих целочисленным производным по координате. Предельному значению $\mu = 2$ соответствует классическое уравнение диффузии. Решения прямого и сопряженного уравнений для данного случая определяются полученными ранее формулами (3) и (4).

Предельному значению $\mu = 1$ соответствует уравнение в частных производных первого порядка, решением которого будет некоторая функция аргумента $(x + a^2t)$. При $t = 0$ искомая функция должна совпадать с функцией источника. Следовательно, при $\mu = 1$ прямая и сопряженная функции примут вид:

$$\Phi_1(t, x) = \frac{\theta(t)}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(x + a^2t)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (11)$$

$$\Phi_1^+(t, x) = \theta(t_0 - t)\delta(x + a^2t - x_0 - a^2t_0). \quad (12)$$

Базисные значения функционала, используемые для построения ВИНТ-представления, определяются равенствами:

$$J_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(x_0 + a^2t_0)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (13)$$

$$J_2 = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t_0}} \exp\left(-\frac{x_0^2}{4a^2t_0}\right). \quad (14)$$

Используя выражения (11), (12) и (3), (4), можно вычислить матричные элементы L_{ij} , необходимые для построения ВИНТ-представления функционала от решения уравнения (10) для дробных значений параметра μ :

$$\begin{aligned} L_{11} &= J_1 - \frac{a^2t_0(x_0 + a^2t_0)}{\sqrt{2\pi\sigma^3}} \exp\left(-\frac{(x_0 + a^2t_0)^2}{2\sigma^2}\right) - \\ &\quad \frac{a^2t_0}{\sqrt{2\pi\sigma^5}\Gamma(3-\mu)} \int_{-\infty}^{x_0+a^2t_0} (x_0 + a^2t_0 - y)^{2-\mu} \left(3y - \frac{y^3}{\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) dy, \\ L_{12} &= L_{21} = J_1 - \int_0^{t_0} \frac{a^2(x_0 + a^2(t_0 - t))^2}{\sqrt{2\pi(\sigma^2 + 2a^2t)^3}} \exp\left(-\frac{(x_0 + a^2(t_0 - t))^2}{2(\sigma^2 + 2a^2t)}\right) dt - \frac{a^2}{\Gamma(3-\mu)} \times \\ &\quad \int_0^{t_0} \frac{dt}{\sqrt{2\pi(\sigma^2 + 2a^2t)^5}} \int_{-\infty}^{x_0+a^2(t_0-t)} \frac{\frac{3y-y^3}{\sigma^2+2a^2t}}{(x_0 + a^2(t_0 - t))^{\mu-2}} \exp\left(-\frac{-y^2}{2(\sigma^2 + 2a^2t)}\right) dy, \\ L_{22} &= J_2 + \frac{a^2t_0}{\sqrt{2\pi(\sigma^2 + 2a^2t_0)}} \exp\left(-\frac{x_0^2}{2(\sigma^2 + 2a^2t_0)}\right) \frac{x_0^2 - \sigma^2 - 2a^2t_0}{(\sigma^2 + 2a^2t_0)^2} - \\ &\quad \frac{a^2t_0}{\Gamma(3-\mu)\sqrt{2\pi(\sigma^2 + 2a^2t_0)^5}} \times \\ &\quad \int_{-\infty}^{x_0} (x_0 - x)^{2-\mu} \left(3x - \frac{x^3}{(\sigma^2 + 2a^2t_0)^2}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2 + 4a^2t_0}\right) dx. \end{aligned}$$

Для проверки точности ВИНТ-представления необходимо точное решение уравнения (10). Для его получения воспользуемся преобразованием Фурье уравнения (10) по координате. Выражение для трансформанты Фурье по координате решения уравнения (10) имеет вид

$$\tilde{\Phi}(t, k) = \exp \left(a^2 t (-ik)^\mu - \frac{k^2 \sigma^2}{2} \right). \quad (15)$$

Численное обратное преобразование Фурье для выражения (15) сводится к вычислению интеграла

$$J(t_0, x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp \left(-ikx_0 + a^2 t_0 (-ik)^\mu - \frac{k^2 \sigma^2}{2} \right). \quad (16)$$

Как и в случае с дробной производной по времени для описания зависимости функционала от параметра μ можно построить также интерполяционный полином Эрмита. Сравнение точностей обоих интерполяционных представлений отображено на рис. 6, где приведены относительные погрешности в % ВИНТ-представления искомого функционала (16) и интерполяционного полинома Эрмита. Значения функционала вычислялись для $a = 1$, $\sigma = 2$, $x_0 = 3$ и разных t_0 . Как и следовало ожидать, наибольшей погрешности соответствуют значения μ из середины интервала (1, 2). Также относительная погрешность заметно возрастает с ростом t_0 . При этом следует учесть, что сами значения функционала быстро убывают с ростом t_0 .

В отличие от задачи, рассмотренной в предыдущем пункте, точности ВИНТ-представления и интерполяционного полинома Эрмита существенно различаются. Погрешности в некоторых случаях различаются более чем на порядок. При этом точность ВИНТ-представления остается на уровне 2 %.

Данные рис. 6 свидетельствуют, что существует значительная область значений t_0 и x_0 , при которых точность ВИНТ-представления не менее 1 %. Это позволяет получить приемлемую точность в определении параметра μ по экспериментально измеряемым значениям функционала J с использованием его ВИНТ-представления.

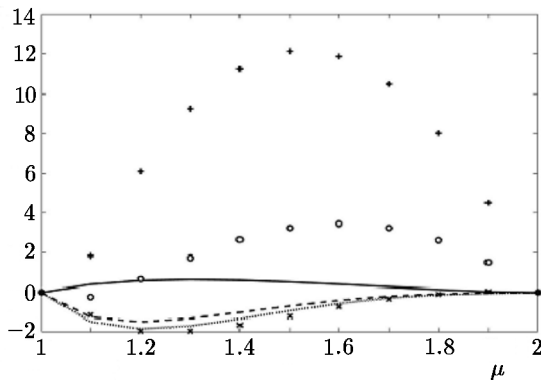


Рис. 6. Относительная погрешность в % функционала (16); линии — ВИНТ-представления: — — $t_0 = 4$; - - - $t_0 = 6$; ··· — $t_0 = 8$; полиномы Эрмита: ○ — $t_0 = 4$; + — $t_0 = 6$; × — $t_0 = 8$

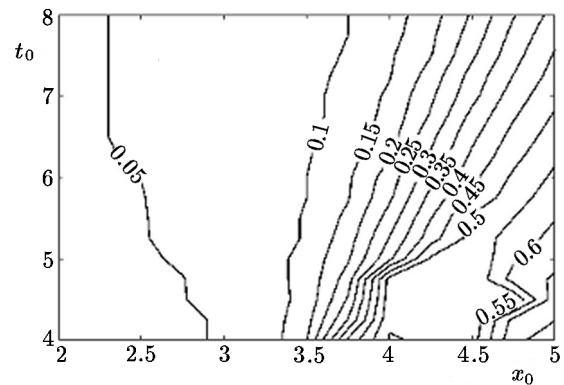


Рис. 7. Погрешность восстановления параметра μ для разных значений x_0 и t_0

Точность восстановления параметров модели, описывающей прохождения частиц или излучений через вещество, зависит не только от погрешности теоретического представления экспериментально наблюдаемых величин, но и от уровня чувствительности этих величин к вариациям определяемого параметра модели. Обозначим как ΔJ разность меж-

ду модельным представлением значения функционала и его точным значением. В первом приближении по $\Delta\mu$ можно записать:

$$\Delta\mu = \frac{J}{\frac{\partial J}{\partial \mu}} \frac{\Delta J}{J}.$$

Последний сомножитель в выражении выше есть величина, приведенная на рис. 6. Из выражения для $\Delta\mu$ видно, что точность восстановления параметра модели определяется не только относительной погрешностью представления функционала, но и его чувствительностью, определяемой как $(1/J)\partial J/\partial\mu$ [18]. Таким образом, большая относительная погрешность в определении функционала J может быть частично скомпенсирована его чувствительностью к вариациям определяемого параметра. В работе [18] для вычисления коэффициентов чувствительности получены уравнения, аналогичные уравнениям переноса, но с другой функцией источника. Таким же образом можно поступить в рассматриваемом случае, но для данной задачи будет проще продифференцировать выражение (16) по параметру μ . Соответствующие расчеты показывают, что для $t \in (1, 5)$ при возрастании x от 2 до 6 коэффициент чувствительности изменяется с 0.5 до -2 . Это позволяет надеяться на расширение области по переменным t_0 и x_0 , где параметр μ может быть восстановлен с приемлемой точностью. На рис. 7 представлена погрешность восстановления параметра μ на основе сравнения ВИНТ-представления со значениями, полученными по формуле (16). Расчеты проведены для исходного значения $\mu = 1.5$ и разных значений x_0 и t_0 . Обратим внимание, что в соответствии с данными рис. 6, выбранное значение μ соответствует наибольшим погрешностям ВИНТ-представления.

Заметим, что приведенные выше выражения для матричных коэффициентов L_{ij} можно обобщить и на случай точечного (по координате) источника. Для этого во всех выражениях, кроме L_{11} , достаточно положить $\sigma = 0$. В выражении для L_{11} последнее слагаемое имеет вид производной порядка μ от функции Гаусса, которая в пределе превращается в дельта-функцию Дирака. С учетом данного преобразования коэффициент L_{11} примет вид:

$$L_{11} = \frac{a^2 t_0 (x_0 + a^2 t_0)^{-1-\mu}}{\Gamma(-\mu)}.$$

5. Заключительные замечания

Таким образом, подводя итог представленным результатам, можно констатировать эффективность использования ВИНТ-метода в решении обратных задач, сформулированных на основе дифференциальных уравнений дробного порядка. Если для восстановления характеристик взаимодействия частиц (излучений) со средой требуется прибегать к параметризации модели взаимодействия, то восстановление порядка производной по времени в аномальном уравнении диффузии для ВИНТ-представления не требует каких-либо дополнительных внесений изменений в модель. При этом само решение обратной задачи сводится к численному нахождению нуля некоторой функции. Описание многочисленных физических применений дробно дифференциальных уравнений представлено в монографии [14].

Литература

1. Учайкин В.В. Вариационный метод интерполирования ядерно-технических расчетов // Атомная энергия. — 1989. — Т. 67. — С. 54–55.

2. **Марчук Г.И., Орлов В.В.** К теории сопряженных функций // Нейтронная физика. — М.: Атомиздат, 1961. — С. 30–45.
3. **Учайкин В.В., Литвинов В.А.** Вариационный метод интерполирования в теории переноса излучений // Оптика атмосферы и океана. — 1989. — Т. 2, № 1. — С. 36–40.
4. **Литвинов В.А.** Вариационное интерполирование в проблеме чувствительности характеристик каскадных процессов // Ядерная физика. — 1993. — Т. 56, № 2. — С. 244–254.
5. **Учайкин В.В., Литвинов В.А.** Вариационное интерполирование функционалов в обратных задачах теории переноса // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2019. — Т. 22, № 3. — С. 351–366. Перевод: Uchaikin V.V. and Litvinov V.A. Variational interpolation of functionals in transport theory inverse problems // Numerical Analysis and Applications. — 2013. — Vol. 12, № 3. — P. 297–310.
6. **Wei M.-B., Wu G.-C.** Variational iteration method for subdiffusion equations with the Riemann–Liouville derivatives // Heat Transfer Research. — 2013. — Vol. 44, № 5. — P. 409–415.
7. **Wu G.-C.** Laplace transform overcoming principle drawbacks in application of the variational iteration method to fractional heat equations // Thermal Science. — 2012. — Vol. 16, № 4. — P. 1257–1261.
8. **Saberi-Nadjafi J., Ghassabzade F.A.** Variational iteration method for solving nonlinear differential-difference equations // Australian Journal of Basic and Applied Sciences. — 2010. — Vol. 4, № 10. — P. 4971–4975.
9. **Huang D.-J., Li Y.-Q.** Variational iteration method for solving an inverse parabolic problem // In Fuzzy Information and Engineering and Decision / Bing-Yuan Cao. — 2016. — P. 321–327.
10. **Inc M.** The approximate and exact solutions of the space- and time-fractional Burgers equations with initial conditions by variational iteration method // J. Math. Anal. Appl. — 2008. — Vol. 345, № 1. — P. 476–484.
11. **Molliq R.V., Noorani M.S.M., Hashim I.** Variational iteration method for fractional heat- and wave-like equations // Nonlinear Analysis: Real World Applications. — 2009. — Vol. 10, № 3. — P. 1854–1869.
12. **Sakar M.G., Erdogan F., Yildirim A.** Variational iteration method for the time-fractional Fornberg–Whitham equation // Comput. Math. Appl. — 2012. — Vol. 63, № 9. — P. 1382–1388.
13. **Hristov J.** An exercise with the He’s variation iteration method to a fractional Bernulli equation arising in transient conduction with non-linear heat flux at the boundary // Int. Rev. Chem. Eng. — 2012. — Vol. 4, № 5. — P. 489–497.
14. **Учайкин В.В.** Метод дробных производных. — Ульяновск: Артишок, 2008.
15. **Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И.** Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. — Минск: Наука и техника, 1987.
16. **Литвинов В.А.** Вариационное интерполирование решений дробных дифференциальных уравнений // Известия вузов. Физика. — 2018. — Т. 61, № 728. — С. 39–44.
17. **Иващенко Д.С.** Численные методы решения прямых и обратных задач для уравнения диффузии дробного порядка по времени: Дисс. ... канд. физ.-мат. наук: 05.13.18. — Томск: Институт математики СО РАН, 2008.
18. **Литвинов В.А., Учайкин В.В.** Вариации ценности в проблеме изучения широких атмосферных ливней // Известия вузов. Физика. — 1986. — Т. 29, № 2. — С. 128.

*Поступила в редакцию 14 марта 2019 г.
После исправления 17 сентября 2020 г.
Принята к печати 14 июля 2021 г.*

Литература в транслитерации

1. **Uchaikin V.V.** Variacionnyi metod interpolirovaniya yaderno-tekhnicheskikh raschetov // Atomnaya energiya. — 1989. — Т. 67. — С. 54–55.
2. **Marchuk G.I., Orlov V.V.** K teorii sopryazhennykh funktsii // Neitronnaya fizika. — М.: Atomizdat, 1961. — С. 30–45.
3. **Uchaikin V.V., Litvinov V.A.** Variacionnyi metod interpolirovaniya v teorii perenosa izlucheniya // Optika atmosfery i okeana. — 1989. — Т. 2, № 1. — С. 36–40.
4. **Litvinov V.A.** Variacionnoe interpolirovanie v probleme chuvstvitel'nosti kharakteristik kaskadnykh processov // Yadernaya fizika. — 1993. — Т. 56, № 2. — С. 244–254.
5. **Uchaikin V.V., Litvinov V.A.** Variacionnoe interpolirovanie funkcionalov v obratnykh zadachakh teorii perenosa // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2019. — Т. 22, № 3. — С. 351–366. *Perevod: Uchaikin V.V. and Litvinov V.A. Variational interpolation of functionals in transport theory inverse problems // Numerical Analysis and Applications. — 2013. — Vol. 12, № 3. — P. 297–310.*
6. **Wei M.-B., Wu G.-C.** Variational iteration method for subdiffusion equations with the Riemann-Liouville derivatives // Heat Transfer Research. — 2013. — Vol. 44, № 5. — P. 409–415.
7. **Wu G.-C.** Laplace transform overcoming principle drawbacks in application of the variational iteration method to fractional heat equations // Thermal Science. — 2012. — Vol. 16, № 4. — P. 1257–1261.
8. **Saberi-Nadjafi J., Ghassabzade F.A.** Variational iteration method for solving nonlinear differential-difference equations // Australian Journal of Basic and Applied Sciences. — 2010. — Vol. 4, № 10. — P. 4971–4975.
9. **Huang D.-J., Li Y.-Q.** Variational iteration method for solving an inverse parabolic problem // In Fuzzy Information and Engineering and Decision / Bing-Yuan Cao. — 2016. — P. 321–327.
10. **Inc M.** The approximate and exact solutions of the space- and time-fractional Burgers equations with initial conditions by variational iteration method // J. Math. Anal. Appl. — 2008. — Vol. 345, № 1. — P. 476–484.
11. **Molliq R.V., Noorani M.S.M., Hashim I.** Variational iteration method for fractional heat- and wave-like equations // Nonlinear Analysis: Real World Applications. — 2009. — Vol. 10, № 3. — P. 1854–1869.
12. **Sakar M.G., Erdogan F., Yildirim A.** Variational iteration method for the time-fractional Fornberg-Whitham equation // Comput. Math. Appl. — 2012. — Vol. 63, № 9. — P. 1382–1388.
13. **Hristov J.** An exercise with the He's variation iteration method to a fractional Bernoulli equation arising in transient conduction with non-linear heat flux at the boundary // Int. Rev. Chem. Eng. — 2012. — Vol. 4, № 5. — P. 489–497.
14. **Uchaikin V.V.** Metod drobnykh proizvodnykh. — Ul'yanovsk: Artishok, 2008.
15. **Samko S.G., Kilbas A.A., Marichev O.I.** Integraly i proizvodnye drobnogo poryadka i nekotorye ikh prilozheniya. — Minsk: Nauka i tekhnika, 1987.
16. **Litvinov V.A.** Variacionnoe interpolirovanie reshenii drobnykh differentsial'nykh uravnenii // Izvestiya vuzov. Fizika. — 2018. — Т. 61, № 728. — С. 39–44.
17. **Ivaschenko D.S.** Chislennyye metody resheniya pryamykh i obratnykh zadach dlya uravneniya diffuzii drobnogo poryadka po vremeni: Diss. ... kand. fiz.-mat. nauk: 05.13.18. — Tomsk: Institut matematiki SO RAN, 2008.
18. **Litvinov V.A., Uchaikin V.V.** Variatsii cennosti v probleme izucheniya shirokikh atmosferynykh livnei // Izvestiya vuzov. Fizika. — 1986. — Т. 29, № 2. — С. 128.