

# Решение коэффициентной обратной задачи для уравнения аномальной диффузии дробного порядка

Карачурина Э.В., Лукащук С.Ю.

Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа

Рассматривается коэффициентная обратная задача для уравнения аномальной диффузии, содержащего производные дробного порядка типа Римана–Лиувилля или Капуто по временной переменной. Предлагается алгоритм идентификации коэффициента аномальной диффузии, являющегося функцией концентрации. Алгоритм основан на сведении коэффициентной обратной задачи к задаче минимизации функционала невязки (экстремальной задаче), которая решается методом скорейшего спуска. Приводятся основные расчетные соотношения, необходимые для вычисления градиента функционала невязки. Эффективность предложенного алгоритма иллюстрируется рядом тестовых примеров.

## 1. Введение

Процессы аномального диффузионного переноса часто наблюдаются в неупорядоченных сложных системах, таких как пористые и трещиновато-пористые среды, аморфные полупроводники, жидкие полимеры и стекла, перколяционные кластеры и самоподобные фрактальные среды, турбулентные потоки жидкости, газа и плазмы [1–3]. Аномальность таких процессов обычно заключается в их немарковской стохастической природе, которая обусловлена эффектами памяти среды, пространственной нелокальности и перемежаемости. Данные эффекты не могут быть адекватно описаны математическими моделями в виде дифференциальных уравнений в частных производных и требуют перехода к интегро-дифференциальным моделям.

Одним из эффективных и широко используемых подходов для описания процессов аномальной диффузии является использование аппарата интегро-дифференцирования дробного порядка [3–5]. В этом случае уравнение переноса является интегро-дифференциальным уравнением, содержащим производные дробного порядка по временной и/или пространственным переменным.

Для успешного использования таких уравнений на практике необходимо знать значения коэффициентов аномального переноса. Тем не менее, их непосредственное экспериментальное определение представляет большую сложность в силу специфики процессов аномального переноса, поэтому основным подходом для их нахождения становится решение соответствующих коэффициентных обрат-

ных задач. В настоящее время предложен ряд аналитических и численных подходов к идентификации коэффициентов аномального переноса на основе дробно-дифференциальных уравнений [6–8], однако они не позволяют восстанавливать коэффициенты, являющиеся функцией потенциала переноса.

В данной работе предлагается алгоритм идентификации коэффициента аномальной диффузии, зависящего от концентрации, путем сведения соответствующей коэффициентной обратной задачи к экстремальной задаче для функционала невязки. Экстремальная задача решается в алгоритме методом скорейшего спуска [9]. Для классического уравнения теплопроводности данный подход хорошо известен и нашел широкое применение в практике теплофизических исследований [10]. Тем не менее, в случае дробно-дифференциальных уравнений аномальной диффузии этот подход имеет ряд особенностей, связанных с построением и решением сопряженных задач и вычислением составляющих градиента функционала невязки.

## 2. Постановка задачи

Пусть процесс аномального переноса моделируется одномерным дробно-дифференциальным уравнением

$${}_0\mathcal{D}_t^\alpha u = (a(u)u_x)_x, \quad 0 < t \leq T, \quad 0 < x < L. \quad (1)$$

Здесь  $u(x, t)$  — функция концентрации;  $a(u)$  — коэффициент аномальной диффузии;  ${}_0\mathcal{D}_t^\alpha$  — левосторонняя производная дробного порядка  $\alpha$ . В дальнейшем будем полагать, что  $\alpha \in (0, 1)$ . В этом случае (1) описывает процесс субдиффузии [2, 3].

В качестве производной дробного порядка  ${}_0D_t^\alpha$  по временной переменной в уравнении (1) наиболее часто используются левосторонние дробные производные двух типов: Римана–Лиувилля [4]

$$({}_0D_t^\alpha u)(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{u(x, \tau)}{(t-\tau)^\alpha} d\tau \quad (2)$$

и Капуто [5]

$$({}_0^C D_t^\alpha u)(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{u_\tau(x, \tau)}{(t-\tau)^\alpha} d\tau. \quad (3)$$

Отметим, что использование дробной производной Римана–Лиувилля приводит, в общем случае, к решению с особенностью в точке  $t = 0$  порядка  $1 - \alpha$ . Дробная производная Капуто всегда может быть выражена через дробную производную Римана–Лиувилля:

$$({}_0^C D_t^\alpha u)(x, t) = ({}_0D_t^\alpha u)(x, t) - \frac{u(x, 0)}{t^\alpha \Gamma(1-\alpha)}. \quad (4)$$

Таким образом, при  $u(x, 0) = 0$  левосторонние дробные производные Римана–Лиувилля (2) и Капуто (3) совпадают.

Для уравнения (1) ставится первая начальная краевая задача. При этом в случае использования дробной производной типа Римана–Лиувилля (2) начальное условие имеет вид

$$({}_0I_t^{1-\alpha} u)(x, 0) = u_0(x), \quad (5)$$

где

$$({}_0I_t^{1-\alpha} u)(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{u(x, \tau)}{(t-\tau)^\alpha} d\tau \quad (6)$$

— левосторонний интеграл дробного порядка  $1 - \alpha$ ;  $u_0(x)$  — заданная функция. При использовании дробной производной типа Капуто (3) начальное условие имеет традиционную форму:

$$u(x, 0) = u_0(x). \quad (7)$$

Граничные условия не зависят от вида используемой дробной производной по времени и в случае первой краевой задачи имеют классический вид:

$$u(0, t) = q_0(t), \quad u(L, t) = q_L(t). \quad (8)$$

Целью данной работы является разработка численного алгоритма для нахождения коэффициента аномальной диффузии  $a(u)$ . Порядок дробного

дифференцирования  $\alpha$  считается известным. Также считаются известными (например, по результатам эксперимента) приближенные значения решения  $\tilde{u}(x, t)$  в некотором количестве  $N \geq 1$  внутренних точек отрезка  $[0, L]$ :

$$\tilde{u}(d_i, t) = f_i(t), \quad i = \overline{1, N}, \quad (9)$$

а также оценка  $\varepsilon$  погрешности измерений:

$$|\tilde{u}(d_i, t) - u(d_i, t)| \leq \varepsilon, \quad i = \overline{1, N}, \quad 0 < t \leq T. \quad (10)$$

Соотношения (9) и (10) определяют априорную информацию, используемую для решения поставленной коэффициентной обратной задачи.

### 3. Алгоритм идентификации

Задачу восстановления коэффициента аномальной диффузии можно сформулировать как экстремальную задачу, если рассмотреть функционал невязки

$$J(a) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \int_0^T \rho_i(u(d_i, t; a(u)) - f_i(t))^2 dt. \quad (11)$$

Здесь  $u(d_i, t; a(u))$  — решение соответствующей краевой задачи (1), (5), (8) или (1), (7), (8);  $\rho_i$  ( $i = \overline{1, N}$ ) — весовые множители, характеризующие степень достоверности экспериментальных данных. В случае, когда ошибкой эксперимента можно пренебречь,  $a(u)$  находится из условия минимума функционала невязки:

$$a(u) = \arg \min J(a). \quad (12)$$

Если ошибка эксперимента значима, то искомое значение коэффициента аномальной диффузии находится из принципа невязки:

$$J(a) = \frac{\varepsilon^2 T}{2} \sum_{i=1}^N \rho_i. \quad (13)$$

Представим искомую функцию в виде

$$a(u) = \sum_{k=1}^m a_k \varphi_k(u), \quad (14)$$

где  $\{\varphi_k(u)\}$  ( $k = \overline{1, m}$ ) — заданная система базисных функций. Тогда задача отыскания функции  $a(u)$  сводится к задаче нахождения вектора коэффициентов разложения (14):  $A = (a_1, a_2, \dots, a_m)$ .

Решение экстремальной задачи (12) или (13) может быть эффективно выполнено с использованием градиентных методов минимизации. Для их

использования необходимо иметь алгоритм численного вычисления градиента функционала  $J(a)$ . Построим этот алгоритм. Для определенности будем рассматривать уравнение (1) с дробной производной типа Римана–Лиувилля.

Введем в рассмотрение фиктивные слои, границы которых проходят через точки, в которых известны значения функции  $u(x, t)$ , т.е. имеют координаты  $x = d_i$  ( $i = \overline{1, N}$ ). Задачу (1), (5), (8) представим в виде системы краевых задач для нескольких слоев с одинаковыми свойствами и идеальным контактом между ними:

$$\begin{aligned} {}_0D_t^\alpha u_i &= (a(u)u_{ix})_x, \\ ({}_0I_t^{1-\alpha} u_i)(x, 0) &= u_{0i}(x), \\ u_1(0, t) &= q_0(t), \quad u_{N+1}(L, t) = q_L(t), \\ u_i(d_i, t) &= u_{i+1}(d_i, t), \\ u_{ix}(d_i, t) &= u_{i+1,x}(d_i, t). \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь  $d_0 = 0$ ,  $d_{N+1} = b$ ,  $u_i(x, t)$  — искомая функция в  $i$ -ом слое ( $x \in [d_{i-1}, d_i]$ ).

Рассмотрим задачу минимизации функционала невязки (11) при ограничениях (15). Составим функционал Лагранжа:

$$\begin{aligned} \Phi &= \sum_{i=1}^{N+1} \int_0^T \int_{d_{i-1}}^{d_i} \psi_i(x, t) [(a(u)u_{ix})_x - {}_0D_t^\alpha u_i] dx dt + \\ &+ \sum_{i=1}^{N+1} \int_{d_{i-1}}^{d_i} \gamma_i(x, 0) (({}_0I_t^{1-\alpha} u_i)(x, 0) - u_{0i}(x)) dx + \\ &+ \int_0^T \eta(d_0, t) [q_0(t) - u_1(0, t)] dt + \\ &+ \int_0^T \eta(d_{N+1}, t) [q_L(t) - u_{N+1}(d_{N+1}, t)] dt + \\ &+ \sum_{i=1}^N \int_0^T \nu(d_i, t) [u_i(d_i, t) - u_{i+1}(d_i, t)] dt + \\ &+ \sum_{i=1}^N \int_0^T \xi(d_i, t) [u_{ix}(d_i, t) - u_{i+1,x}(d_i, t)] dt, \end{aligned}$$

где  $\psi_i(x, t)$ ,  $\gamma_i(x, t)$  ( $i = \overline{1, N+1}$ ),  $\nu(d_i, t)$ ,  $\xi(d_i, t)$  ( $i = \overline{1, N}$ ),  $\eta(d_0, t)$ ,  $\eta(d_{N+1}, t)$  — неопределенные множители Лагранжа, соответствующие ограничениям (15).

Допустим, что функция  $a(u)$  получила некоторое приращение  $\Delta a(u)$ . Тогда функция  $u_i(x, t)$  изменится на некоторую величину  $\Delta u_i(x, t)$ . Можно показать, что  $\Delta u_i(x, t)$  удовлетворяют следующей

системе краевых задач:

$$\begin{aligned} {}_0D_t^\alpha \Delta u_i &= (a \Delta u_{ix})_x + a_u (\Delta u_i u_{ix})_x + \\ &+ a_{uu} \Delta u_i (u_{ix})^2 + \Delta a u_{ixx} + \Delta a_u (u_{ix})^2, \\ \Delta u_i(x, 0) &= 0, \\ \Delta u_i(d_i, t) &= \Delta u_{i+1}(d_i, t), \\ \Delta u_{ix}(d_i, t) &= \Delta u_{i+1,x}(d_i, t), \\ \Delta u_1(0, t) &= 0, \quad \Delta u_{N+1}(d_{N+1}, t) = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Вариация функционала  $\Phi$  имеет вид

$$\begin{aligned} \delta \Phi &= \sum_{i=1}^{N+1} \int_0^T \int_0^{d_i} \psi_i(x, t) [(a \Delta u_{ix})_x - {}_0D_t^\alpha \Delta u_i + \\ &+ \Delta u_i (a_u u_{ixx} + a_{uu} (u_{ix})^2) + a_u \Delta u_{ix} u_{ix} + \\ &+ \Delta a_u (u_{ix})^2 + \Delta a u_{ixx}] dx dt + \\ &+ \sum_{i=1}^{N+1} \int_{d_{i-1}}^{d_i} \gamma_i(x, 0) \Delta u_i(x, 0) dx + \\ &+ \int_0^T \eta(d_0, t) \Delta u_1(0, t) dt + \\ &+ \int_0^T \eta(d_{N+1}, t) \Delta u_{N+1}(d_{N+1}, t) dt + \\ &+ \sum_{i=1}^N \int_0^T \nu(d_i, t) [\Delta u_i(d_i, t) - \Delta u_{i+1}(d_i, t)] dt + \\ &+ \sum_{i=1}^N \int_0^T \xi(d_i, t) [\Delta u_{ix}(d_i, t) - \Delta u_{i+1,x}(d_i, t)] dt. \end{aligned}$$

Из условия  $\delta \Phi = 0$  получаем систему сопряженных краевых задач:

$$\begin{aligned} -{}_t^C D_T^\alpha \psi_i &= a(u) \psi_{ixx}, \\ \psi_i(x, T) &= 0, \\ \psi_1(d_0, t) &= 0, \quad \psi_{N+1}(d_{N+1}, t) = 0, \\ \psi_i(d_i, t) &= \psi_{i+1}(d_i, t), \\ a(u(d_i, t)) (\psi_{i+1,x}(d_i, t) - \psi_{i,x}(d_i, t)) &= \\ &= \rho_i(u_i(d_i, t) - f_i(t)), \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$({}_t^C D_T^\alpha \psi_i)(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_t^T \frac{u_\tau(x, \tau)}{(t-\tau)^\alpha} d\tau$$

— правосторонняя дробная производная типа Капуто. Таким образом, сопряженный дифференциальный оператор для левосторонней дробной производной типа Римана–Лиувилля представляется через правостороннюю дробную производную типа Капуто. Легко показать, что имеет место и обратное утверждение.

Здесь необходимо сделать важное замечание. Поскольку для сопряженной задачи «начальное»

условие всегда нулевое:  $\psi_i(x, T) = 0$ , то в этом случае соответствующие правосторонние производные типа Римана–Лиувилля и Капуто совпадают (см., например, [3, 5]). Поэтому сопряженная задача является одной и той же как в случае использования в исходном уравнении (1) производной Римана–Лиувилля, так и производной Капуто.

В результате для вариации функционала (11) находим

$$\delta J = \sum_{i=1}^{N+1} \int_0^T \int_{d_{i-1}}^{d_i} \psi_i(x, t) \left[ \Delta a_u (u_{ix})^2 + \Delta a u_{ixx} \right] dx dt.$$

Используя представление (14), получим

$$\delta J = \sum_{k=1}^m a_k \sum_{i=1}^{N+1} \int_0^T \int_{d_{i-1}}^{d_i} \psi_i(x, t) \times \left[ \frac{d\varphi_k(u)}{du} (u_{ix})^2 + \varphi_k(u) u_{ixx} \right] dx dt,$$

откуда находим представления для отдельных компонент градиента функционала невязки:

$$J'_{a_k} = \sum_{i=1}^{N+1} \int_0^T \int_{d_{i-1}}^{d_i} \psi_i(x, t) \times \left[ \frac{d\varphi_k(u)}{du} (u_{ix})^2 + \varphi_k(u) u_{ixx} \right] dx dt, \quad k = \overline{1, m}. \quad (18)$$

Зная градиент функционала невязки, можно использовать для решения экстремальной задачи градиентные методы. Например, в случае применения метода скорейшего спуска итерационный процесс для восстановления вектора параметров  $A$  строится по формуле

$$A_{n+1} = A_n - \beta_n J'_n, \quad (19)$$

где параметр спуска  $\beta_n$  на  $n$ -й итерации вычисляется из условия

$$\beta_n = \arg \min_{\beta} J(A_n - \beta J'_n).$$

В силу линейности функции  $\Delta u(x, t, \beta_n J'_n)$  относительно параметра  $\beta_n$ , функционал невязки на  $(n+1)$ -ой итерации можно представить в виде:

$$J^{n+1} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \int_0^T \rho_i \times \left( u(d_i, t, A_n) + \beta_n \Delta u(d_i, t, J'_n) - f_i(t) \right)^2 dt.$$

Дифференцируя это равенство по  $\beta_n$  и приравнявая полученное выражение к нулю, получим:

$$\beta_n = \frac{\sum_{i=1}^N \int_0^T \rho_i \left( u(d_i, t, A_n) - f_i(t) \right) \Delta u(d_i, t, J'_n) dt}{\sum_{i=1}^N \int_0^T \rho_i \left( \Delta u(d_i, t, J'_n) \right)^2 dt}. \quad (20)$$

Таким образом, алгоритм восстановления коэффициента  $a(u)$  сводится к следующим шагам:

- задается начальное приближение искомого параметра  $a(u)$ ;
- решается система прямых задач (15);
- решается система сопряженных задач (17);
- решается система задач для  $\Delta u_i$  (16);
- по формулам (18) вычисляются компоненты градиента функционала невязки;
- по (20) вычисляется новое значение  $\beta_n$ ;
- по (19) вычисляется новое приближение вектора  $A$ ;
- проверяется условие сходимости и при необходимости процесс вычислений повторяется.

Численное решение прямых и сопряженных краевых задач выполняется с помощью неявных конечно-разностных схем. Дробная производная Римана–Лиувилля дискретизируется на основе формулы Грюнвальда–Летникова [4]:

$$({}_0 D_t^\alpha u)(x_i, t_n) \approx (\Delta t)^{-\alpha} \sum_{j=0}^n \omega_j^\alpha u_i^{n-j},$$

где

$$\omega_j^\alpha = (-1)^j \binom{\alpha}{j} = (-1)^j \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(j+1)\Gamma(\alpha-j+1)};$$

$\Delta t$  — шаг сетки по временной переменной;  $(x_i, t_n)$  — координаты узлов конечно-разностной сетки,  $u_i^n = u(x_i, t_n)$ . Дискретизация дробной производной Капуто получается из формулы связи (4).

Правые части всех уравнений, содержащие производные целого порядка, дискретизируются классическим образом со вторым порядком точности по пространственной переменной по неявной схеме. В результате при решении как прямых, так и сопряженных задач получаются системы с трехдиагональными матрицами, которые решаются методом прогонки.

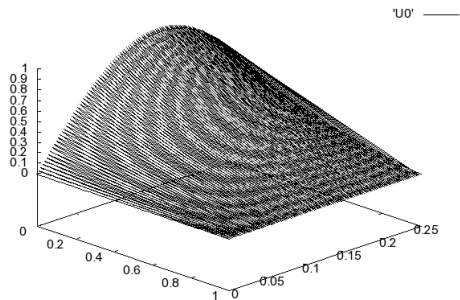


Рис. 1. Решение прямой задачи при  $a = \text{const}$

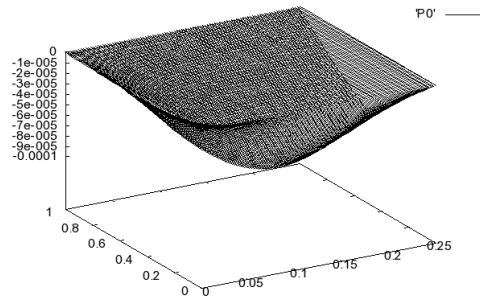


Рис. 2. Решение сопряженной задачи при  $a = \text{const}$  на 1-ой итерации

#### 4. Результаты численных расчетов

Приведем результаты некоторых численных экспериментов, иллюстрирующих эффективность предложенного алгоритма. Численные эксперименты проводились по классической схеме: сначала решалась прямая задача с заданным (истинным) значением  $a(u)$  и определялось поле концентрации, которое затем использовалось в качестве априорной информации при решении обратной задачи по описанному выше алгоритму.

Параметры тестовой задачи:

$$\alpha = 0.5, L = 1, T = 0.25, \\ u_0(x) = 0, q_0(t) = \sin(10t), q_L(t) = 0.$$

В качестве базисных функций в (14) использовались  $\varphi_k(u) = u^k, k = \overline{0, m}$ . В качестве априорной информации считалось известным изменение концентрации во времени в центральной точке  $x = 0.5$ .

Сначала рассмотрим результаты численного эксперимента по восстановлению постоянного коэффициента аномальной диффузии. Истинное значение:  $a = 100$ . В качестве начального приближения использовалось значение  $a_0 = 150$ . За 15 итераций процесс сошелся с точностью  $10^{-12}$  по функционалу невязки, что обеспечило точность восстановления коэффициента диффузии  $10^{-9}$ . Соответствующее поле концентрации показано на рис. 1. На рис. 2 показано решение сопряженной задачи на первой итерации. На рис. 3 приведена зависимость параметра спуска  $\beta_n$  от номера итерации.

Существенно большее количество итераций требуется для восстановления вектора параметров (14). При точной зависимости  $a(u) = 100 + 10u + 10u^2$  с начального приближения  $A_0 = (150, 15, 5)$  процесс сошелся с точностью  $10^{-12}$  по функционалу невязки за 26383 итерации. При этом точность восстановления элементов вектора  $A$  составила  $10^{-6}$ . Графики решения прямой и сопряженной задач при этом качественно аналогичны приведен-

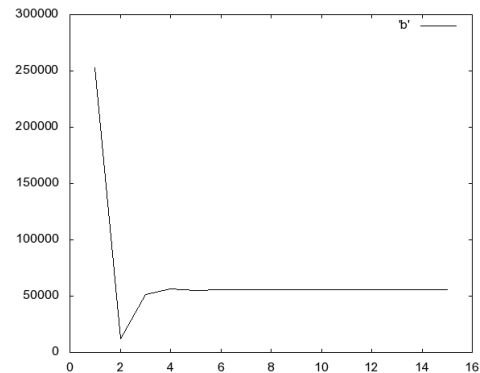


Рис. 3. Зависимость параметра спуска от номера итерации при  $a = \text{const}$

ным на рис. 1 и 2, график зависимости параметра спуска  $\beta_n$  от номера итерации показан на рис. 4.

Наиболее интересным представляется случай восстановления коэффициента  $a(u)$  при условии, что он точно не разлагается по выбранному базису  $\varphi_k$  при конечном  $m$ . При  $a(u) = 100e^{0.3u}$  и  $m = 3$  процесс сошелся к  $A = (100.068, 29.651, 5.237)$  за 12220 итераций. На рис. 5 показана зависимость функционала невязки от номера итерации, а на рис. 6 — зависимость параметра спуска  $\beta_n$  от номера итерации.

Приведенные примеры показывают, что предложенный алгоритм позволяет достаточно точно и эффективно решать задачу восстановления коэффициента аномальной диффузии.

#### 5. Заключение

Приведенный в работе алгоритм в настоящее время не имеет строгого математического обоснования, поскольку отсутствует целый ряд важных теорем существования и единственности решения в классах обобщенных функций для дробно-дифференциальных уравнений аномального пере-

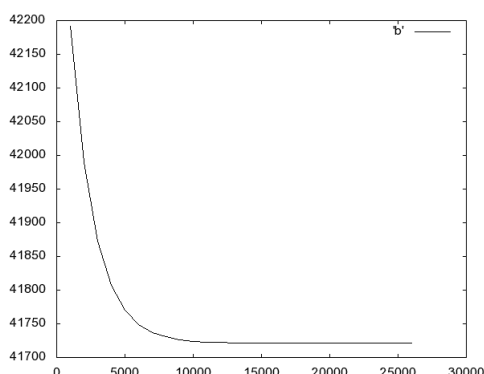


Рис. 4. Зависимость параметра спуска от номера итерации при  $a(u) = 100 + 10u + 10u^2$

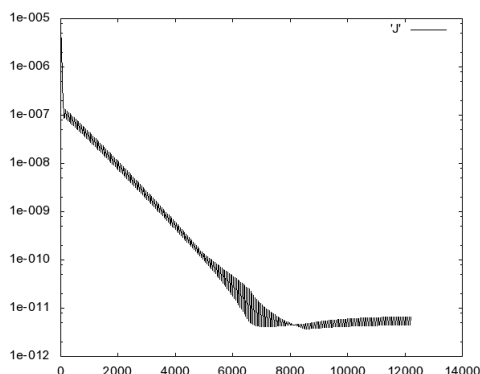


Рис. 5. Зависимость функционала невязки от номера итерации при  $a(u) = 100e^{0.3u}$

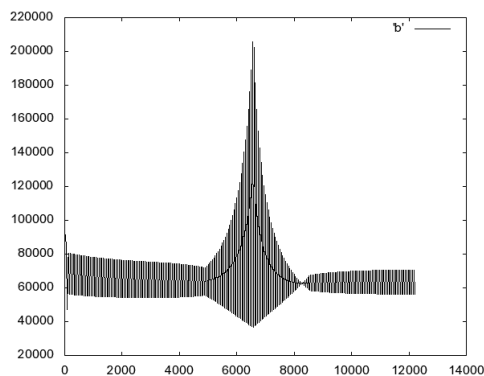


Рис. 6. Зависимость параметра спуска от номера итерации при  $a(u) = 100e^{0.3u}$

носа. Работоспособность алгоритма подтверждается численными экспериментами, однако границы применимости подхода остаются весьма расплывчатыми. Поэтому в качестве основных направлений дальнейшего развития работы можно указать, во-первых, получение теоретических оценок для скорости сходимости алгоритма и, во-вторых, его строгое математическое обоснование.

### Список литературы

- [1] Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: A fractional dynamic approach // *Phys. Rep.* 2000. V. 339, P. 1–77.
- [2] Заславский Г.М. Гамильтонов хаос и фрактальная динамика. М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. 472 с.
- [3] Учайкин В.В. Метод дробных производных. Ульяновск: Изд-во «Артишок», 2008. 512 с.
- [4] Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск: Наука и техника, 1987. 688 с.
- [5] Podlubny I. Fractional differential equations. Academic press, San Diego, 1999. 240 p.
- [6] Bondarenko A.N., Ivaschenko D.S. Numerical methods for solving inverse problems for time fractional diffusion equation with variable coefficient // *J. Inverse Ill-Posed Probl.* 2009. Vol. 17, № 5. P. 419–440.
- [7] Lukashchuk S.Yu. Estimation of parameters in fractional subdiffusion equations by the time integral characteristics method // *Computers and Mathematics with Applications*. 2011. V. 62, №. 3. P. 834–844.
- [8] Maryshev B., Cartalade A., Latrille C., Joelson M. Neel M.C. Adjoint state method for fractional diffusion // *Proc. of the Fifth Symposium on Fractional Differentiation and Its Applications*, May 14–17 2012, Hohai University, Nanjing, China. 2012. 6 p.
- [9] Васильев Ф.П. Методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1981. 400 с.
- [10] Алифанов О.М., Артюхин Е.А., Румянцев С.В. Экстремальные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1988. 288 с.