ЭЛЕКТРОННЫЙ НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ «ДНЕВНИК НАУКИ»

УДК 519.62

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДРОБНОГО ПОРЯДКА

Мороз Л.И.

кандидат физико-математических наук, доцент,

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»,

Благовещенск, Россия

Аннотация:

Работа посвящена проблеме численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка. Подобный математический аппарат сегодня активно задействуется при моделировании макроскопической динамики эредитарных физических сред. В рамках исследования проведен сравнительный анализ двух конечно-разностных алгоритмов интегрирования. Первая схема представляет собой явный метод на базе определения дробной производной Грюнвальда – Летникова, вторая реализует неявный алгоритм типа «предиктор-корректор» с использованием производной Капуто (дробный метод Адамса – Башфорта – Моултона). Показана специфика построения сеточных уравнений и аналитического расчета весовых коэффициентов. Опираясь на результаты серии вычислительных экспериментов, проведена оценка сходимости схем и затрат машинного времени. Метод предиктор -коррект
основе производной Капуто демонстрирует порядок сходимости $O(h^{1+\alpha})$, что подтверждается численным экспериментом.

Ключевые слова: дробное исчисление, метод конечных разностей, производная Капуто, производная Грюнвальда – Летникова, вычислительная математика, эредитарные системы.

COMPARATIVE ANALYSIS OF FINITE-DIFFERENCE SCHEMES FOR SOLVING FRACTIONAL-ORDER ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS

Moroz L.I.
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,
Amur State University,
Blagoveshchensk, Russia

Abstract: The paper is devoted to the urgent problem of numerical integration of fractional-order ordinary differential equations. Such mathematical apparatus is actively used today in modeling the macroscopic dynamics of hereditary physical media. The study provides a detailed comparative analysis of two finite-difference predictor-corrector algorithms. The first scheme is an explicit method based on the Grünwald – Letnikov derivative, while the second implements a predictor-corrector algorithm using the Caputo approach. The specifics of constructing grid equations and analytical calculation of weight coefficients are revealed. Based on the results of a series of computational experiments, the convergence of the schemes and computer time costs are evaluated. Practice has shown that the Caputo quadrature approximation yields a higher order of accuracy, while the Grünwald – Letnikov algorithm benefits from significantly lower resource consumption.

Keywords: fractional calculus, finite difference method, Caputo derivative, Grünwald-Letnikov derivative, computational mathematics, hereditary systems.

Введение

При математическом моделировании эволюции сложно-структурированных физических систем (в частности, полярных диэлектриков и сред с фрактальной геометрией) классические дифференциальные уравнения целого порядка не обеспечивают требуемой точности описания [4, 6]. Динамика подобных эредитарных систем характеризуется эффектом памяти, для формализации которого применяется аппарат интегро-дифференцирования дробного порядка [5, 9, 10]. Ввиду того, что получение точных аналитических решений нелинейных краевых задач дробного исчисления затруднено, актуальной задачей является разработка и анализ устойчивых численных методов [1-3, 7, 8, 11-14]. Целью данной работы является сравнение двух вычислительных схем: явной на основе формулы Грюнвальда – Летникова и схемы типа предиктор-корректор на базе определения Капуто.

Постановка задачи и вычислительные схемы

Рассмотрим типичную начальную задачу для обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка, которая описывает эволюцию среды с памятью:

$$D^{\alpha}u(t) = f(t,u(t)),$$
$$u(0) = u_0.$$

Здесь параметр α отвечает за порядок дробного дифференцирования, причем $0<\alpha<1$.

Производная Грюнвальда – Летникова порядка $\alpha \in (0,1)$ для функции $u(t)$ определяется предельным соотношением

$D_{GL}^{\alpha}u(t) = \lim\limits_{h\to 0}\dfrac{1}{h^{\alpha}}\sum\limits_{k=0}^{\lfloor t/h \rfloor}(-1)^k\dbinom{\alpha}{k}u(t-kh),$ где обобщённые биномиальные коэффициенты выражаются через гамма-функцию:

$$\binom{\alpha}{k} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\alpha-k+1)}.$$

Производная Капуто порядка $\alpha \in (0,1)$ определяется как

$$D_C^{\alpha}u(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\int_0^t \frac{u'(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha}}d\tau.$$

В отличие от производной Грюнвальда – Летникова, определение Капуто допускает задание классических начальных условий вида $u(0) = u_0$, что делает производную Капуто более удобной при постановке начальных задач для дробных дифференциальных уравнений.

Чтобы перейти к численному поиску решения, на заданном отрезке введем равномерную временную сетку $\omega_{\Delta t}=\{t_n=n\Delta t \mid n=0,1,...,N\}$, где $\Delta t=T/N$ – шаг.

Алгоритм на основе определения Грюнвальда – Летникова [4, 12]. Первая вычислительная схема базируется на разностной аппроксимации левосторонней дробной производной Римана – Лиувилля (эквивалентной определению Грюнвальда – Летникова для достаточно гладких функций при нулевых начальных условиях). Дискретизация задачи осуществляется с помощью явного конечно-разностного метода (дробного аналога метода Эйлера). Расчет значения сеточной функции u_{n+1} на новом временном слое производится по рекуррентной формуле:

$$u_{n+1}=\sum_{j=1}^{n+1} c_j u_{n+1-j}+(\Delta t)^{\alpha} f(t_n,u_n).$$

Особенностью данного алгоритма является необходимость учета всей «предыстории» процесса на каждом шаге. Весовые коэффициенты c_j определяются через биномиальные коэффициенты (или гамма-функцию) рекуррентным образом: $c_j=(-1)^{j-1}\binom{\alpha}{j}$. Погрешность аппроксимации явной схемы Грюнвальда – Летникова составляет $O(\Delta t)$.

Алгоритм на основе определения Капуто [10, 13]. Второй подход использует определение дробной производной в смысле Капуто. Для численного решения применяется дробная модификация алгоритма Адамса – Башфорта – Моултона типа «предиктор-корректор».

Предиктор u_{n+1}^{p} вычисляется по формуле явного типа:

$$u_{n+1}^{p}=u_0+\frac{\Delta t^{\alpha}}{\Gamma(\alpha+1)}\sum_{j=0}^{n} b_j f(t_j,u_j).$$

Последующая коррекция осуществляется неявным методом на базе интерполяционного полинома:

$$u_{n+1}=u_0+\frac{1}{\Gamma(\alpha)}\left(\sum_{j=0}^{n}a_{j,n+1}f(t_j,u_j)+a_{n+1,n+1}f(t_{n+1},u_{n+1}^{p})\right).$$

Весовые коэффициенты вычисляются аналитически:

$$b_j=\frac{(\Delta t)^{\alpha}}{\alpha}\left((n+1-j)^{\alpha}-(n-j)^{\alpha}\right),$$

$$a_{j,n+1}=\frac{(\Delta t)^{\alpha}}{\alpha(\alpha+1)}\begin{cases}n^{\alpha+1}-(n-\alpha)(n+1)^{\alpha}, & j=0;\\ (n-j+2)^{\alpha+1}+(n-j)^{\alpha+1}-2(n-j+1)^{\alpha+1}, & 1\le j\le n;\\ 1, & j=n+1.\end{cases}$$

Благодаря квадратурной аппроксимации подынтегрального выражения, данная схема потенциально обеспечивает более высокую сходимость порядка $O(\Delta t^{1+\alpha})$.

Результаты вычислительного эксперимента

Для эмпирической оценки скорости сходимости и времени выполнения алгоритмов рассмотрена тестовая задача Коши для уравнения:

$$D^{\alpha}u(t)=-u(t)+\frac{120}{\Gamma(6-\alpha)}t^{5-\alpha}+t^5,\quad t\in[0,1],$$

$$u(0)=0.$$

Точным аналитическим решением данного уравнения является функция $u^*(t)=t^5$.

Выбор тестовой функции t^5 обусловлен необходимостью обеспечения гладкости правой части $f(t,u)\in C^2[0,T]$, что является достаточным условием реализации порядка $O(h^{1+\alpha})$ метода Адамса – Башфорта – Моултона.

Программная реализация алгоритмов выполнена в вычислительной среде MATLAB. Оценка аппаратных затрат (времени выполнения) производилась на персональном компьютере на базе процессора 11th Gen Intel(R) Core (TM) i7-11700F @ 2.50 GHz. Вычислительный эксперимент проводился при фиксированном порядке дробной производной α=0.8. Погрешность рассчитывалась как максимальное отклонение приближенного решения от точного: $E=\max|u(t_n)-u^*(t_n)|$.

Результаты исследования сходимости при последовательном измельчении шага Δt представлены в Таблице 1.

Таблица 1 – Сравнительный анализ точности и времени выполнения алгоритмов (при $\alpha=0.8$)

Шаг Δt	**Погрешность (Грюнвальд – Летников)**	**Погрешность (Капуто)**	**Время расчета (Гр. – Летн.), мс**	**Время расчета (Капуто), мс**
0.010	2.322×10−2	4.221×10−4	3	6
0.005	1.163×10−2	1.157×10−4	< 1	12
0.002	4.656×10−3	2.112×10−5	1	74
0.001	2.329×10−3	5.866×10−6	3	276

Анализ полученных данных позволяет сделать ряд выводов. Метод предиктора-корректора на основе определения Капуто демонстрирует существенно меньшую абсолютную погрешность по сравнению с явной схемой. Динамика убывания ошибки подтверждает теоретическую оценку порядка сходимости алгоритма $O(\Delta t^{1+\alpha})$ (в данном эксперименте ≈1.8). Сходимость явной схемы, основанной на формуле Грюнвальда – Летникова, имеет строго линейный характер $O(\Delta t)$.

Однако профилирование программного кода выявило критическое различие в ресурсоемкости методов. При шаге Δt=0.001 алгоритм Капуто требует 276 мс процессорного времени против 3 мс у алгоритма Грюнвальда – Летникова. Существенные временные затраты схемы на основе производной Капуто обусловлены необходимостью пересчета массива весовых коэффициентов $a_{j,n+1}$ на каждом шаге интегрирования. Ввиду эредитарной природы дробной производной, увеличение числа узлов сетки N приводит к квадратичному росту вычислительных затрат $O(N^2)$.

Выводы

Таким образом, выбор конкретной конечно-разностной схемы представляет собой компромисс между порядком точности и вычислительной сложностью, который определяется спецификой решаемой задачи. Использование алгоритма типа «предиктор-корректор» на базе производной Капуто целесообразно применять там, где важна высокая точность решения на ограниченных временных интервалах. Вместе с тем следует учитывать важный теоретический аспект: корректность применения интегро-дифференциального аппарата Капуто налагает повышенные требования на гладкость искомой функции.

В свою очередь, явная схема Грюнвальда – Летникова выступает эффективным алгоритмическим базисом для разработки ресурсоемких (многомерных и нелинейных) сеточных моделей. В условиях жестких ограничений на объем оперативной памяти и процессорное время, линейного порядка сходимости данного метода оказывается достаточно. Однако при выборе этого подхода необходимо учитывать его существенный недостаток, связанный с постановкой задачи Коши: классическая аппроксимация Грюнвальда – Летникова без проблем реализуется при однородных начальных условиях. Наличие же ненулевого начального состояния приводит к появлению сингулярностей в окрестности t=0, что требует внедрения дополнительных математических процедур по сглаживанию решения на первых шагах сетки.

Библиографический список:

1. Боголюбов А. Н. Задачи по математической физике / А. Н. Боголюбов, В. В. Кравцов. – М.: Изд-во МГУ, 1998. – 350 с.

2. Мороз Л. И. Численное моделирование процесса аномальной диффузии на основе схемы повышенного порядка точности / Л. И. Мороз, А. Г. Масловская // Математическое моделирование. – 2020. – Т. 32. – № 10. – С. 62-76.

3. Самарский А. А. Численные методы / А. А. Самарский, А. В. Гулин. – М. : Наука, 1989. – 432 с.

4. Самко С. Г. Интегралы и производные дробного порядка, и некоторые их приложения / С. Г. Самко, А. А. Килбас, О. И. Маричев. – Минск : Наука и техника, 1987. – 688 с.

5. Тарасов В. Е. Модели теоретической физики с интегро-дифференцированием дробного порядка / В. Е. Тарасов. – М. : Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2011. – 568 с.

6. Учайкин В. В. Метод дробных производных / В. В. Учайкин. – Ульяновск : Изд-во УлГУ, 2008. – 512 с.

7. Формалев В. Ф. Численные методы: учебник / В. Ф. Формалев, Д. Л. Ревизников. – М. : Физматлит, 2006. – 399 с.

8. Chen W. Fractional Derivative Modeling in Mechanics and Engineering / W. Chen, H. Sun, X. Li. – Beijing: Springer, 2022. – 370 p.

9. Deng W. Numerical algorithm for the time fractional Fokker-Planck equation / W. Deng // Journal of Computational Physics. – 2007. – Vol. 227. – P. 1510-1522.

10. Diethelm K. The Analysis of Fractional Differential Equations / K. Diethelm. – Berlin: Springer-Verlag, 2010. – 247 p.

11. Garappa R. Numerical Solution of Fractional Differential Equations: A Survey and a Software Tutorial / R. Garappa // Mathematics. – 2018. – Vol. 6. – P. 16-34.

12. Meerschaert M. M. Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations / M. M. Meerschaert, C. Tadjeran // Journal of Computational and Applied Mathematics. – 2004. – Vol. 172. – P. 65-77.

13. Petras I. Fractional-Order Nonlinear Systems: Modeling, Analysis and Simulation / I. Petras. – London: Springer, 2011. – 218 p.

14. Podlubny I. Fractional Differential Equations / I. Podlubny. – San Diego: Academic Press, 1999. – 340 p.