110 ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ / NUMERICAL METHODS AND PROGRAMMING 2021, 22 (2), 110–123. DOI: 10.26089/NumMet.v22r208

DOI: 10.26089/NumMet.v22r208

УДК: 519.63

Мультипольный алгоритм численного решения дробно-дифференциального обобщения уравнения Гельмгольца

Н. С. Белевцов

Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа, Российская Федерация ORCID: http://orcid.org/0000-0002-2895-7571, e-mail: nikitabelewtsov@mail.ru

Аннотация: Рассматривается задача построения эффективного численного алгоритма решения дробно-дифференциального обобщения неоднородного уравнения Гельмгольца с дробной степенью оператора Лапласа. Построено мультипольное разложение, основанное на факторизации фундаментального решения рассматриваемого уравнения. Предложен способ нахождения значений функций Фокса, входящих в представленное мультипольное разложение. Разработана модификация мультипольного алгоритма для решения рассматриваемого дробнодифференциального обобщения уравнения Гельмгольца. Приведены результаты вычислительных экспериментов, демонстрирующие эффективность предложенных алгоритмов.

Ключевые слова: дробно-дифференциальное обобщение уравнения Гельмгольца, дробная степень оператора Лапласа, фундаментальное решение, мультипольное разложение, метод мультиполей, численный алгоритм.

Для цитирования: Белевцов Н.С. Мультипольный алгоритм численного решения дробнодифференциального обобщения уравнения Гельмгольца // Вычислительные методы и программирование. 2021. 22, №2, 110–123. doi 10.26089/NumMet.v22r208

A multipole algorithm for solving a fractional generalization of the Helmholtz equation

N. S. Belevtsov

Ufa State Aviation Technical University, Ufa, Russia ORCID: http://orcid.org/0000-0002-2895-7571, e-mail: nikitabelewtsov@mail.ru

Abstract: The problem of constructing an efficient numerical algorithm for solving a fractional generalization of the Helmholtz equation with the fractional Laplacian is considered. A multipole expansion based on the factorized representation of the fundamental solution of the considered equation is constructed. A numerical method for computing the values of Fox H-functions from the multipole expansion is proposed. A modification of the multipole algorithm for solving the considered fractional generalization of the Helmholtz equation is developed. Numerical results demonstrating the efficiency of the proposed algorithms are discussed.

Keywords: fractional generalization of Helmholtz equation, fractional Laplacian, fundamental solution, multipole expansion, multipole method, numerical algorithm.

For citation: N. S. Belevtsov, "A multipole algorithm for solving a fractional generalization of the Helmholtz equation," Numerical Methods and Programming. **22** (2), 110–123 (2021). doi: 10.26089/NumMet.v22r207.



1. Введение. Для описания различных физических процессов, в которых наблюдаются эффекты памяти (нелокальность по времени) или дальние пространственные взаимодействия (пространственная нелокальность), могут быть эффективно использованы математические модели с интегро-дифференциальными операторами дробного порядка [1, 2]. Подобные эффекты нелокальности могут наблюдаться, например, при моделировании процессов аномального диффузионного переноса в сложных неоднородных средах [3, 4]. Для описания процессов с эффектами памяти могут быть использованы дробные производные и интегралы по времени, с применением которых в настоящее время предложено множество моделей, а также численных и аналитических алгоритмов их решения. Существенно менее изученными являются модели с дробными интегро-дифференциальными операторами по пространственным переменным, позволяющие описывать физические процессы с эффектами пространственной нелокальности. Для моделирования подобных процессов в многомерном пространстве могут быть использованы уравнения с дробной степенью оператора Лапласа [1, 5]. Свойства таких операторов исследовались, например, в работах [6, 7].

В данной работе рассматривается дробно-дифференциальное обобщение неоднородного уравнения Гельмгольца

$$(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}u + \omega^2 u = f, \quad u = u(x), \quad f = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^2, \ \omega \in \mathbb{R}, \ 1 < \alpha < 2, \tag{1}$$

где $(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}$ – дробная степень оператора Лапласа, которая может быть определена через преобразование Фурье $\mathcal{F}[1]$ как

$$(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}u(x) = \mathcal{F}^{-1}\left(|k|^{\alpha}\left(\mathcal{F}u\right)(k)\right)(x).$$

Данное уравнение возникает, в частности, при аналитическом и численном исследовании процессов переноса энергии и массы в неоднородных средах с эффектами пространственной нелокальности [8, 9]. Например, применение метода разделения переменных к дробно-дифференциальному обобщению уравнения диффузии [9] приводит к (1). Также подобные уравнения встречаются в градиентной теории упругости [10] и при моделировании процессов массопереноса с объемной химической реакцией первого порядка [11].

При численном моделировании процессов, описываемых дробно-дифференциальными уравнениями, зачастую требуется колоссальное количество вычислительных операций, что обусловлено нелокальностью операторов дробного интегрирования и дифференцирования. Для уменьшения времени численного расчета целесообразно использовать методы, позволяющие значительно уменьшить количество вычислительных операций. Подобными методами являются, например, мультипольные методы (см., например, [12, 13]), основанные на мультипольном разложении фундаментальных решений рассматриваемых уравнений. Данные методы позволяют снизить вычислительную сложность алгоритмов, требующих $O(N^2)$ операций, до $O(N \log_{2^n} N)$ или O(N) операций, где n — размерность пространства. В работе [14] было построено мультипольное разложение фундаментального решения дробно-дифференциального обобщения уравнения Пуассона, а в [15] разработаны последовательный и параллельный численные алгоритмы его решения, основанные на мультипольном методе. Ранее этот метод, однако, не находил применения для построения численного решения дробно-дифференциального обобщения уравнения Гельмгольца. Главной трудностью использования мультипольного метода в этом случае является построение мультипольного разложения фундаментального решения рассматриваемого уравнения. В работе [16] было получено фундаментальное решение уравнения (1) и его факторизованное разложение, записанное в терминах функций Фокса [17, 18]. Полученный результат позволяет построить модификацию классического мультипольного алгоритма решения уравнения Гельмгольца для решения дробно-дифференциального обобщения уравнения Гельмгольца (1), чему и посвящена данная статья.

2. Постановка задачи. Фундаментальное решение $G_{\alpha}(x)$ уравнения (1) является решением линейного интегро-дифференциального уравнения

$$(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}G_{\alpha}(x) + \omega^{2}G_{\alpha}(x) = \delta(x), \quad x \in \mathbb{R}^{2}, \ \omega \in \mathbb{R}, \ 1 < \alpha < 2,$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция. В работе [16] было доказано следующее утверждение.

Утверждение 1. Фундаментальное решение уравнения (1) допускает интегральное представление

$$G_{\alpha}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{k}{k^{\alpha} + \omega^{2}} \operatorname{J}_{0}\left(k|x|\right) dk,$$

где $J_0(z) - \phi$ ункция Бесселя первого рода. Данный интеграл может быть записан в терминах функций Φ окса как

$$G_{\alpha}(x) = c_{\alpha} \operatorname{H}_{1,3}^{2,1} \left[\frac{\left(\omega^{2}\right)^{\frac{2}{\alpha}} |x|^{2}}{4} \middle| \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right) \\ (0, 1), \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right), (0, 1) \right],$$
(2)

 $e\partial e \ c_{\alpha} = [2\pi\alpha]^{-1}.$

При $\alpha = 2$ функция (2) совпадает с фундаментальным решением уравнения Гельмгольца $\Delta u - \omega^2 u = f$ и представляется через модифицированную функцию Бесселя второго рода:

$$G_2(x) = \frac{1}{2\pi} \operatorname{K}_0(\omega|x|).$$

Для уравнения (1) также справедливо следующее утверждение [16].

Утверждение 2. Решение уравнения (1) может быть представлено в виде

$$u(x) = \int_{\mathbb{R}^2} f(\xi) G_\alpha(x-\xi) d\xi, \quad \xi \in \mathbb{R}^2.$$
(3)

Пусть полярные координаты точек x и ξ имеют вид (R, φ) и (r, ψ) соответственно. Тогда

$$G_{\alpha}(x-\xi) = G_{\alpha}(|x-\xi|) \equiv G_{\alpha}(z),$$

где $z = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta}, \ \theta = \varphi - \psi.$

Тогда решение (3) в полярных координатах может быть записано как

$$u(x) \equiv u(R) = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{0}^{\infty} rf(r)G_{\alpha}(z)drd\psi = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{0}^{L} rf(r)G_{\alpha}(z)drd\psi + \int_{-\pi}^{\pi} \int_{L}^{\infty} rf(r)G_{\alpha}(z)drd\psi, \quad L > 0.$$
(4)

В соответствии с [18], главный член асимптотического разложения функции Фокса из (2) имеет вид

$$G_{\alpha}(z) = \frac{c}{z^2} + o\left(\frac{1}{z^2}\right), \quad z \to \infty.$$

Таким образом, для второго слагаемого из (4) справедливо

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{L}^{\infty} rf(r)G_{\alpha}(z) dr d\psi \sim \int_{-\pi}^{\pi} \int_{L}^{\infty} \frac{rf(r)}{r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta} dr d\psi \leqslant \int_{-\pi}^{\pi} \int_{L}^{\infty} \frac{f(r)}{r - 2R\cos\theta} dr d\psi.$$
(5)

В соответствии с (5), если $f(r) \to 0$ при $r \to \infty$, то всегда можно подобрать такое $L \gg 0$, при котором значение данного интеграла будет меньше любого наперед заданного числа ϵ , и тогда интеграл в правой части (3) можно приближенно вычислять в некоторой конечной области Ω . Аналитическое вычисление данного интеграла возможно лишь для некоторых частных видов f(x).

Таким образом, можно записать кубатурную формулу вида

$$\int_{\Omega} f(\xi) G_{\alpha}(x-\xi) d\xi \approx \sum_{i=1}^{N} q_i G_{\alpha}(x-x_i), \quad q_i = c_i f(x_i), \ x \neq x_i, \tag{6}$$

где c_i — коэффициенты кубатурной формулы, x_i — узлы кубатурной формулы.

Нахождение численного решения уравнения (1) по формуле (6) в количестве точек, сопоставимом по порядку с количеством узлов кубатурной формулы, требует порядка $O(N^2)$ вычислительных операций. При достаточно больших значениях N данный расчет требует значительных временны́х затрат. Сократить время численного расчета можно за счет уменьшения количества вычислительных операций при вычислении кубатурной формулы, что можно сделать, используя основные идеи метода мультиполей [12]. Данный метод позволяет учитывать дальние взаимодействия между узлами кубатуры и расчетными точками посредством так называемых мультипольных разложений ядра G_{α} , что может значительно сократить время расчета при больших N. Для классического уравнения Гельмгольца существуют две основные разновидности этого метода — сам метод мультиполей, сокращающий количество вычислительных операций до $O(N \log_{2^n} N)$, и быстрый метод мультиполей, позволяющий добиться вычислительной сложности O(N). В данной работе мы сосредоточимся на модификации первого из этих методов для нахождения численного решения дробно-дифференциального обобщения уравнения Гельмгольца (1).

Следующий раздел данной работы посвящен построению мультипольного разложения для кубатурной формулы (6) на основе предложенной в [16] факторизации фундаментального решения уравнения (1). Для возможности численного расчета функций Фокса в фундаментальном решении и мультипольном разложении предлагается использование комбинации прямого и асимптотического разложений рассматриваемых функций. Показывается, что в случае, когда можно ограничиться небольшим количеством членов ряда в мультипольном разложении, данные прямые и асимптотические разложения могут быть использованы без дополнительной процедуры их сращивания. Далее выполняется модификация мультипольного алгоритма численного решения дробно-дифференциального обобщения уравнения Гельмгольца (1), основанная на построенном мультипольном разложении. В последнем разделе данной работы выполняется ряд вычислительных экспериментов, демонстрирующих эффективность предложенных алгоритмов.

3. Мультипольное разложение. В силу того, что фундаментальное решение (2) является радиальной функцией, при построении мультипольного разложения в \mathbb{R}^2 используются полярные координаты.

В работе [16] получено факторизованное разложение фундаментального решения $G_{\alpha}(z)$ при $\omega = 1$. Для произвольного $\omega \in \mathbb{R}$ справедливо представление

Функция Фокса из правой части (7) может быть преобразована (см., например, (2.1.2) и (2.1.8) из [18]) и записана как

$$\mathbf{H}_{2,4}^{3,1} \left[\frac{\left(\omega^2\right)^{\frac{2}{\alpha}} R^2}{4} \middle| \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right), (0, 1) \\ \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right), (m, 1), (n - m, 1), (0, 1) \right] = \\ = (-1)^m \mathbf{H}_{1,3}^{2,1} \left[\frac{\left(\omega^2\right)^{\frac{2}{\alpha}} R^2}{4} \middle| \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right) \\ \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right), (n - m, 1), (m, 1) \right].$$
(8)

Важно отметить, что при m = 0, n = 0 функция Фокса (8) совпадает с фундаментальным решением (2) дробно-дифференциального обобщения уравнения Гельмгольца. Полученное разложение позволяет сформулировать следующее утверждение.

Утверждение 3 (Мультипольное разложение). Пусть даны k узлов x_i с полярными координатами $(r_i, \psi_i), i = 1, \ldots, k$, причем $r_i < a, 0 < a < \infty$. Тогда для любой точки x с координатами (R, φ) такой, что R > a, справедливо разложение

$$\Phi(R,\varphi,k) \equiv \sum_{i=1}^{k} q_i G_{\alpha}(x-x_i) = c_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{n} R^{-n} \operatorname{H}_{1,3}^{2,1} \left[\frac{\left(\omega^2\right)^{\frac{2}{\alpha}} R^2}{4} \middle| \begin{array}{c} \left(1-\frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right) \\ \left(1-\frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right), (n-m,1), (m,1) \end{array} \right] \times \\ \times \left[M_n^m(r_i,\psi_i,k) \cos(n-2m)\varphi + N_n^m(r_i,\psi_i,k) \sin(n-2m)\varphi \right], \quad (9)$$

где

$$M_n^m(r_i, \psi_i, k) = \frac{(-1)^m}{m! (n-m)!} \sum_{i=1}^k q_i r_i^n \cos(n-2m)\psi_i,$$
$$N_n^m(r_i, \psi_i, k) = \frac{(-1)^m}{m! (n-m)!} \sum_{i=1}^k q_i r_i^n \sin(n-2m)\psi_i.$$

Для возможности использования полученного мультипольного разложения на практике ряд по n в (9) заменяется на конечную сумму $\sum_{n=0}^{p}$. Параметр p позволяет контролировать погрешность, даваемую представленным разложением.

В связи с малой изученностью функций Фокса из разложения (9) на данный момент отсутствуют их адекватные оценки, которые позволили бы получить теоретическую оценку погрешности при замене ряда конечной суммой. Однако такая оценка была получена в работе [14] для случая дробнодифференциального обобщения уравнения Пуассона, в которое уравнение (1) переходит при $\omega = 0$, а в работе [15] численными экспериментами было подтверждено, что для ряда практически значимых задач при вычислении мультипольного разложения можно ограничиться значением p = 4. Поэтому в данной работе при проведении всех численных расчетов принято p = 4.

4. Вычисление значений функций Фокса $H_{1,3}^{2,1}(z)$. Для вычисления фундаментального решения (2) и мультипольного разложения (9) необходимы эффективные численные алгоритмы нахождения значений входящих в эти выражения функций Фокса.

Так как данные функции еще слабо изучены, на данный момент не существует универсального алгоритма их численного расчета. Теоретически такой алгоритм может быть построен на основе прямых и асимптотических разложений рассматриваемых функций с использованием специальной процедуры их сращивания, аналогично тому, как это было сделано для функций Миттаг-Леффлера в работе [19] и для функций Райта в работе [20]. Однако функции Фокса из разложения (9) существенно сложнее названных известных функций, и поэтому построение численного алгоритма их вычисления при любых значениях m и n является темой отдельного исследования.

При использовании мультипольного разложения (9) на практике достаточно брать малое число членов ряда по n и, соответственно, вычислять функции Фокса (8) для достаточно малых значений параметров m и n. Таким образом, в данном разделе предлагается способ вычисления значений данных функций, основанный на комбинации прямого и асимптотического разложений рассматриваемых функций Фокса без использования дополнительной процедуры их сращивания.

4.1. Прямое разложение. Функции Фокса (8) могут быть представлены в виде ряда [18] как

$$H_{1,3}^{2,1} \left[\frac{(\omega^2)^{\frac{2}{\alpha}} R^2}{4} \middle| \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha} \right) \\ \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha} \right), (n - m, 1), (m, 1) \right] = \\ = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma \left(1 - \frac{2}{\alpha} (k + 1 + n - m) \right) \Gamma \left(\frac{2}{\alpha} (k + 1 + n - m) \right)}{\Gamma \left(1 - 2m + n + k \right) k!} \left(-1 \right)^k \left(\frac{(\omega^2)^{\frac{2}{\alpha}} R^2}{4} \right)^{k+n-m} + \\ + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha \Gamma \left(n - m + 1 - \frac{\alpha}{2} (k + 1) \right)}{2 \Gamma \left(-m + \frac{\alpha}{2} (k + 1) \right)} \left(-1 \right)^k \left(\frac{(\omega^2)^{\frac{2}{\alpha}} R^2}{4} \right)^{\frac{\alpha}{2} (k+1)-1}.$$
(10)

Для возможности использования полученного разложения на практике ряды по k в (10) заменяются на конечные суммы $\sum_{k=0}^{N_d}$, в которых параметр N_d выбирается из требований о необходимом уровне погрешности вычислений. Функция Фокса из фундаментального решения (2) также может быть записана в виде ряда (10) при m = 0, n = 0.

На рис. 1 представлены графики функций Фокса (8) в логарифмическом масштабе при разных m и n, вычисленные с использованием первых $N_d = 25$ членов прямого разложения (10). В этом и всех последующих примерах было положено $\alpha = \sqrt{2}, \ \omega = 1$. Случай m = 0, n = 0 соответствует фундаментальному решению (2). Видно, что значения данных функций уменьшаются с ростом аргумента R, что объясняется тем, что с увеличением расстояния между точками ослабевает их дальнее взаимодействие.

На рис. 2 представлены графики погрешности вычисления функций Фокса (8) при разных значениях параметров



Рис. 1. Функции Фокса (8) при разных значениях *m* и *n*



Рис. 2. Погрешность вычисления функций Фокса (8) при разных значениях m, n и N_d

Fig. 2. Error in calculating Fox functions (8) for different values m, n and N_d

m и n для различного числа N_d членов ряда прямого разложения (10). Погрешность Δ здесь вычислялась как

$$\Delta = \lg \left| \bar{\mathrm{H}}_{1,3}^{2,1}(R) - \tilde{\mathrm{H}}_{1,3}^{2,1}(R) \right| \, ,$$

где $\bar{\mathrm{H}}_{1,\,3}^{2,\,1}(R)$ — значение функции Фокса, вычисленное с использованием первых 1000 членов разложения (10), а $\tilde{H}_{1,3}^{2,1}(R)$ — с использованием первых N_d членов. Можно заметить, что при увеличении значений аргумента R погрешности начинают возрастать. Также видно, что с ростом аргумента R или параметров mи *п* требуется большее количество N_d членов прямого разложения для обеспечения минимальной погрешности вычисления и достижения необходимого уровня точности. Увеличение количества вычисляемых членов предложенного разложения, в свою очередь, сильно замедляет численный расчет. Поэтому для вычисления значений функций Фокса из (2) и (8) для больших значений аргумента будут использоваться асимптотические разложения, рассматриваемые далее.

4.2. Асимптотическое разложение. В соответствии с [18] асимптотическое разложение функций Фокса (8) может быть записано в виде

$$\mathbf{H}_{1,3}^{2,1} \left[\frac{\left(\omega^2\right)^{\frac{2}{\alpha}} R^2}{4} \middle| \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right) \\ \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right), (n - m, 1), (m, 1) \right] \sim \\ \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha \Gamma \left(1 + \frac{k\alpha}{2} + n - m\right)}{2\Gamma \left(-\frac{k\alpha}{2} - m\right)} \left(-1\right)^k \left(\frac{\left(\omega^2\right)^{\frac{2}{\alpha}} R^2}{4}\right)^{-1 - \frac{k\alpha}{2}}, \quad R \to \infty.$$
 (11)

Для возможности использования полученного разложения на практике ряд по k в (11) заменяется на конечную сумму $\sum_{i=1}^{N_a}$, в которой параметр N_a выбирается из требований о необходимом уровне погрешности вычислений. При m = 0, n = 0 разложение (11) справедливо и для фундаментального решения (2).

На рис. 3 приведены графики прямых (10) и асимптотических (11) разложений функций (8) для различных значений m и n при $N_d = 25, N_a = 9$. Так как принято p = 4, параметры m и n в (9) принимают значения от 0 до 4. Разложение (9) не предъявляет каких-либо дополнительных требований к гладкости аппроксимации функций Фокса. По этой причине для вычисления этих функций была использована простая стыковка прямых и асимптотических разложений в точке R = 8. Возможность такой стыковки иллюстрируется рис. 3 и табл. 1.

6



Рис. 3. Прямые и асимптотические разложения функций Фокса (8) при разных значениях *m* и *n*

Fig. 3. Direct and asymptotic expansions of Fox functions (8) for different values of m and n

Таким образом, исходя из результатов вычислительных экспериментов, для нахождения значений функций Фокса (8) предлагается при $R \in [0,8)$ использовать прямое разложение (10) с $N_d = 25$, а при $R \in [8,\infty)$ использовать асимптотическое разложение (11) c $N_a = 9$.

6

5. Модификация метода мультиполей для решения дробно-дифференциального обобщения уравнения Гельмгольца. Алгоритм мультипольного метода имеет иерархическую структуру. Для организации данной структуры расчетная область Ω разбивается на подобласти — ячейки. На нулевом уровне имеется всего одна расчетная ячейка, совпадающая с областью Ω. Каждый последующий уровень получается из предыдущего разделением каждой

Таблица 1. Значения прямых и асимптотических разложений функций Фокса (8) в точке R = 8

Table	1.	Values	of	direct	and	asym	ptotic	$\operatorname{expansions}$	of
	tl	he Fox	fur	ictions	(8)	at the	point	R = 8	

	Прямое разложение	Асимптотическое разложение
	Direct expansion	Asymptotic expansion
m = 0, n = 0	0.00127306	0.00127461
m = 2, n = 2	0.00336523	0.00336867
m = 2, n = 4	0.00724198	0.00721564
m = 4, n = 4	0.042601	0.0428729

расчетной ячейки на 2^n частей, где n — размерность пространства (в нашем случае n=2). Основной идеей метода является учет взаимодействий между расчетными точками и кубатурными узлами из (6) посредством учета взаимодействий между расчетными ячейками, что позволяет значительно уменьшить количество вычислительных операций. Взаимодействия между ячейками могут быть посчитаны с помощью мультипольных разложений (9). Подробное описание метода мультиполей и быстрого метода мультиполей для решения классических уравнений математической физики представлено, например, в работах [12, 13].

Введем необходимые для дальнейшего описания алгоритма определения.

Определение 1. Две ячейки называются соседними, если они расположены на одном уровне иерархической структуры и имеют хотя бы одну общую точку. Ячейка также считается соседней самой себе.

Определение 2. Две ячейки называются хорошо разделенными, если они не являются соседними.

Для каждой ячейки каждого уровня разбиения иерархической структуры определяется список ячеек, с которыми она может "взаимодействовать" (так называемая схема взаимодействия). Таким образом определяется, между какими ячейками взаимодействие будет вычисляться посредством мультипольных разложений.

Схема взаимодействия L для ячейки i на уровне l может быть определена по следующему алгоритму.

- 1. На уровне l-1определяется ячейка j,являющаяся "родителем" ячейки i.
- 2. Для ячейки j определяются соседние ячейки на уровне l-1 и список L порожденных ими ячеек на уровне l.
- 3. Из списка L исключаются ячейки, соседние для ячейки i.

На рис. 4 продемонстрирован пример (см., например, [12]) иерархического разбиения квадратной расчетной области $\Omega \in \mathbb{R}^2$ на ячейки, а также приведен пример схемы взаимодействия для одной из ячеек второго уровня разбиения: черным цветом выделена сама ячейка, серым цветом — ячейки из ее схемы взаимодействия. Очевидно, что схему взаимодействия возможно определить лишь для ячеек начиная с уровня l = 2, в силу того, что на предыдущих уровнях отсутствуют хорошо разделенные ячейки.

Таким образом, на каждом уровне разбиения, начиная с уровня l = 2, для каждой расчетной ячейки можно определить схему взаимодействия и, посредством мультипольного разложения, вычислить взаимодействие кубатурных узлов, содержащихся в данной ячейке, со всеми расчетными точками, содержащимися в ячейках схемы взаимодействия.

Для двумерного пространства максимальный уровень разбиения $l_{\max} \approx \log_4(N)$, где N — количество кубатурных узлов расчетной области.



Рис. 4. Иерархическая система и пример схемы взаимодействия

Fig. 4. Hierarchical system and example of the interaction scheme

На уровне $l_{\rm max}$, когда на предыдущих уровнях уже учтены посредством мультипольных разложений все взаимодействия между всеми хорошо разделенными ячейками, вычисляются локальные взаимодействия между кубатурными узлами и расчетными точками, лежащими в соседних ячейках на этом уровне.

Таким образом, можно сформулировать следующий алгоритм.

Мультипольный алгоритм

- 1. Для уровней разбиения $l = l_2, \ldots, l_{\max}$ для каждой ячейки i, содержащей k_i^l кубатурных узлов x_i с полярными координатами (r_i, ψ_i) :
 - определяется схема взаимодействия L_i^l ;
 - вычисляется взаимодействие рассматриваемой ячейки с каждой расчетной точкой $x(R, \varphi)$, лежащей в ячейках L_i^l , с помощью мультипольных разложений:

$$\Phi(R,\varphi,k_i^l) = c_{\alpha} \sum_{n=0}^p \sum_{m=0}^n R^{-n} \operatorname{H}^{2,1}_{1,3} \left[\frac{(\omega^2)^{\frac{2}{\alpha}} R^2}{4} \left| \begin{array}{c} \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right) \\ \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right) \\ \left(1 - \frac{2}{\alpha}, \frac{2}{\alpha}\right), (n - m, 1), (m, 1) \end{array} \right] \times \\ \times \left[M_n^m(r_i, \psi_i, k_i^l) \cos(n - 2m)\varphi + N_n^m(r_i, \psi_i, k_i^l) \sin(n - 2m)\varphi \right]. \quad (12)$$

Данные разложения строятся относительно центра ячейки i, а параметр p выбирается исходя из требуемого уровня погрешности получаемого решения.

 Вычисляются все локальные взаимодействия между всеми кубатурными узлами и расчетными точками, лежащими в соседних ячейках на уровне l_{max} по формуле

$$\Lambda^{l_{\max}}(R,\varphi) = \sum_{i \in I_l} q_i G_{\alpha}(x-x_i) = c_{\alpha} \sum_{i \in I_l} q_i \operatorname{H}^{2,1}_{1,3} \left[\frac{(\omega^2)^{\frac{2}{\alpha}} |x-x_i|^2}{4} \middle| \begin{array}{c} (1-\frac{2}{\alpha},\frac{2}{\alpha}) \\ (0,1), \ (1-\frac{2}{\alpha},\frac{2}{\alpha}), \ (0,1) \end{array} \right].$$
(13)

Здесь I_l — множество всех кубатурных узлов x_i , находящихся в ячейках, являющихся соседними для ячейки с расчетной точкой $x(R, \varphi)$.

3. Численное решение уравнения (3) в точке (R, φ) представляется через локальные (13) и мультипольные (12) разложения:

$$u(R,\varphi) = \sum_{l=2}^{l_{\max}} \sum_{j \in L_x^l} \Phi_j^l(R,\varphi,k_j^l) + \Lambda^{l_{\max}}(R,\varphi),$$

где L^l_x — схема взаимодействия для ячейки, в которой лежит расчетная точка $x(R, \varphi)$ на уровне l.

Важно отметить, что все мультипольные разложения $\Phi(R, \varphi, k_j^l)$ считаются не отдельно для каждой расчетной точки $x(R, \varphi)$, а в совокупности для всех расчетных точек, лежащих в ячейках из схемы взаимодействия ячейки j на уровне l, что и позволяет значительно уменьшить количество необходимых вычислительных операций.

Представленный выше алгоритм имеет порядок сложности $O(N \log_{2^n} N)$ для количества расчетных точек, сопоставимого с количеством кубатурных узлов N. Действительно,

- на каждом уровне разбиения расчетной области Ω ∈ ℝⁿ требуется порядка Npⁿ операций для вычисления всех коэффициентов мультипольных разложений;
- максимально возможное число ячеек в схеме взаимодействия составляет 3ⁿ(2ⁿ 1) и, соответственно, требуется порядка 3ⁿ(2ⁿ 1)Npⁿ операций на каждом уровне разбиения для вычисления всех мультипольных взаимодействий;
- для расчета локальных взаимодействий на завершающем этапе алгоритма требуется порядка 3ⁿN операций.

Таким образом, для максимально возможного $\log_{2^n} N$ количества уровней разбиения суммарное количество операций равно

$$3^{n}(2^{n}-1)Np^{n}\log_{2^{n}}N+3^{n}N=O(N\log_{2^{n}}N).$$

6. Результаты вычислительных экспериментов. Данный раздел посвящен проведению вычислительных экспериментов, демонстрирующих предложенные алгоритмы. Первая часть посвящена численному анализу мультипольного разложения (7). Во второй части выполняется численная оценка эффективности мультипольного алгоритма решения дробно-дифференциального обобщения уравнения Гельмгольца (1).

6.1. Мультипольное разложение. На рис. 5 приведены графики зависимости от параметра p абсолютной погрешности Δ значений мультипольного разложения (7) в сравнении со значениями фундаментального решения (2) при фиксированном |z| = 1. Параметр p определяет количество членов ряда по n в разложении (7). В данном случае менялись значения параметров r и R, отношение которых влияет на скорость сходимости мультипольного разложения, что и демонстрируется представленными графиками. Расчеты выполнялись при $\alpha = \sqrt{2}$, $\omega = 1$.



Рис. 5. Зависимость абсолютной погрешности мультипольных разложений от параметра p при |z| = 1

Fig. 5. Dependence of the absolute error of the multipole expansions in the parameter p for |z| = 1



Рис. 6. Зависимость абсолютной погрешности мультипольных разложений от параметра p при r/R = 0.2

Fig. 6. Dependence of the absolute error of the multipole expansions in the parameter p for r/R=0.2

На рис. 6 приведены графики зависимости от параметра р абсолютной погрешности значений мультипольного разложения (7) в сравнении со значениями фундаментального решения (2) для разных |z| при фиксированном r/R = 0.2. Можно заметить, что с увеличением значения |z| увеличивается скорость сходимости мультипольного разложения. Однако влияние значения |z| на скорость сходимости разложения не так существенно, как влияние отношения параметров r и R.

6.2. Ускорение модифицированного мультипольного алгоритма. Численные расчеты проводились для дробно-дифференциального обобщения уравнения Гельмгольца (1) с $f(x) = e^{-|x|^2}$ в ограниченной прямоугольной области $\Omega \in [-5,5] \times [-5,5]$. Расчеты выполнялись при $\alpha = \sqrt{2}, \, \omega = 1$. Эффективность мультипольного алгоритма оценивалась параметром $S = t_{\rm dir}/t_{\rm mult}$ ускорением, даваемым предложенным алгоритмом. Здесь $t_{
m dir}-$ время расчета прямым методом по кубатурной формуле (6), t_{mult} — время расчета модифицированным мультипольным алгоритмом.

В табл. 2 представлены результаты численного моделирования уравнения (1). Здесь N — количество расчетных точек, $l_{\rm max}$ — количество уровней иерархической структуры мультипольного алгоритма, p — количество членов ряда по *n* в мультипольном разложении фундаментального решения (2).

На рис. 7 приведен график зависимости ускорения S от количества расчетных точек N в сравнении с линейным ускорением. Видно, что для малого количества расчетных точек вычисление по кубатурной формуле (6) работает быстрее предложенного мультипольного алгоритма, однако при увеличении N наблюдается значительный рост ускорения S, что демонстрирует высокую эффективность рассматриваемого мультипольного алгоритма для применения в реальных практических задачах, когда количество расчетных точек достаточно велико.

6.3. Дробно-дифференциальная модификация градиентной модели упругости. Градиентная теория упругости [21] традиционно применяется для описания процессов с учетом неклассических масштабных эффектов, которые характерны для микрообъектов, тонких структур и наноструктурированных композитов. В данном разделе рассматривается дробно-дифференциальное обобщение классической градиентной модели упругости, подробно описанной, например, в работе [22].

Таблица 2. Результаты вычислительных экспериментов

	· · ·
--	-------

N	$l_{\rm max}$	р	$t_{ m dir},{ m c}$	$t_{\rm mult},{ m c}$	S
100	3	4	0.065	0.119	0.546
400	3	4	0.849	1.182	0.718
900	4	4	3.899	3.478	1.121
2500	4	4	28.34	12.25	2.313
4900	5	4	106.027	23.574	4.497
10000	5	4	434.525	47.931	9.065
20000	6	4	1658.44	93.525	17.732



Рис. 7. Зависимость ускорения, даваемого модифицированным мультипольным методом, от количества расчетных точек N

Fig. 7. Dependence of the acceleration given by the modified multipole method, on the number of calculated points N

Классическое уравнение состояния для градиентной модели упругости может быть записано в виде

$$\sigma_{ij} = \lambda \epsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \epsilon_{ij} - l_2^{\epsilon} \nabla^2 \left[\lambda \epsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \epsilon_{ij} \right].$$
⁽¹⁴⁾

Здесь σ — тензор напряжений; ϵ — тензор деформаций; (λ, μ) — параметры Ламе; l_2^{ϵ} — параметр внутренней длины, связанный с размерами микроструктурных неоднородностей.

Дробно-дифференциальная модификация уравнения (14) с дробной степенью оператора Лапласа была предложена в работе [10] и имеет вид

$$\sigma_{ij} = \lambda \epsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \epsilon_{ij} + l^{\epsilon}_{\alpha} \left(-\Delta\right)^{\frac{\alpha}{2}} \left[\lambda \epsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \epsilon_{ij}\right].$$
⁽¹⁵⁾

При $\alpha = 2$ выполняется предельный переход данного уравнения в классическое уравнение состояния (14). В работе [10] показано, что дробно-дифференциальное обобщение градиентной модели упругости, получаемое подстановкой (15) в уравнение равновесия div $\sigma = 0$, сводится к дробно-дифференциальному

обобщению неоднородного уравнения Гельмгольца вида

$$\left[1 + l_{\alpha}^{\epsilon} \left(-\Delta\right)^{\frac{\alpha}{2}}\right] \boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\epsilon}_{0}.$$
(16)

В данной работе решается стационарная задача деформации мембраны, лежащей на упругом винклеровском основании [23], которая сводится к интегрированию уравнения (16). В случае, когда правая часть (16) равна нулю, данное уравнение описывает известную задачу равновесия мембраны, лежащей на упругом винклеровском основании. В качестве метода решения использовался модифицированный мультипольный алгоритм, предложенный в предыдущих разделах. Численные расчеты выполнялись при $l_{\alpha}^{\epsilon} = 1$ нм, $\epsilon_0(x) = \exp\left[-|x|^2/(l_{\alpha}^{\epsilon})^{2/\alpha}\right], x \in \mathbb{R}^2$. В этом случае модель (16) становится радиальной и может быть записана в виде

$$\left[1+l_{\alpha}^{\epsilon}\left(-\Delta\right)^{\frac{\alpha}{2}}\right]\epsilon_{rr}=e^{-\frac{|x|^{2}}{\left(l_{\alpha}^{\epsilon}\right)^{2/\alpha}}},\quad\epsilon_{rr}=\epsilon_{rr}(|x|)$$

На рис. 8 показано распределение по радиусу значения компоненты ϵ_{rr} тензора деформаций при различных α . Видно, что имеет место монотонное убывание данной компоненты с увеличением расстояния от центра расчетной области. Причем при значениях радиуса меньше чем $|x| \approx 30$ мкм уменьшение значения α приводит к более сильным деформациям, в то время как при |x| > 30 мкм наблюдается обратная зависимость между данными величинами.

7. Заключение. Разработан алгоритм построения численного решения дробно-дифференциального обобщения неоднородного уравнения Гельмгольца с дробной степенью оператора Лапласа, основанный на мультипольном разложении фундаментального решения рассматриваемого уравнения. Предложен способ нахождения значений функций Фокса, входящих в представленное мультипольное разложение. Результаты вычислительных экспериментов продемонстрировали высокую эффективность разработанных алгоритмов.





Fig. 8. Distribution of the ϵ_{rr} component of the tensor deformations along the radius |x|, μ m

Список литературы

- 1. Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск.: Наука и техника, 1987.
- 2. Учайкин В.В. Метод дробных производных. Ульяновск: Артишок, 2008.
- 3. Raghavan R. Fractional diffusion: performance of fractured wells // Journal of Petroleum Science and Engineering. 2012. 92–93. 167–173.
- Stan D., del Teso F., Vázquez J.L. Finite and infinite speed of propagation for porous medium equations with nonlocal pressure // Journal of Differential Equations. 2016. 260, N 2. 1154–1199.
- 5. Pozrikidis C. The fractional Laplacian. Boca Raton: CRC Press, 2016.
- 6. Абрамян А.В., Ногин В.А., Самко С.Г. Дробные степени оператора $-|x|^2\Delta$ в L_p -пространствах // Дифференциальные уравнения. 1996. **32**, N 2. 275—276.
- Barrios B., Colorado E., De Pablo A., Sánchez U. On some critical problems for the fractional Laplacian operator // Journal of Differential Equations. 2012. 252, N 11. 6133–6162.
- Chen H., Felmer P., Quaas A. Large solutions to elliptic equations involving fractional laplacian // Annales de l'Institut Henri Poincaré (C), Analyse non linéaire. 2015. 32, N 6. 1199–1228.
- Vázquez J.L., de Pablo A., Quirós F., Rodriguez A. Classical solutions and higher regularity for nonlinear fractional diffusion equations //Journal of the European Mathematical Society. 2017. 19, N 7. 1949–1975.
- Aifantis E. Fractional generalizations of gradient mechanics // Handbook of Fractional Calculus with Applications. Vol. 4. Berlin: De Gruyter, 2019. 241–262.
- 11. Полянин А.Д. Линейные уравнения математической физики (справочник). М.: Физматлит, 2001.
- Greengard L., Rokhlin V. A fast algorithm for particle simulations // Journal of Computational Physics. 1997. 135, N 2. 280–292.

- 13. Gumerov N.A., Duraiswami R. Fast multipole methods for the Helmholtz equation in three dimensions. Amsterdam: Elsevier, 2005.
- Белевцов Н.С., Лукащук С.Ю. Мультипольное разложение фундаментального решения дробной степени оператора Лапласа // Итоги науки и техники. Серия "Современная математика и ее приложения. Тематические обзоры". Т. 176. М.: ВИНИТИ, 2020. 26–33.
- Белевцов Н.С., Лукащук С.Ю. Параллельный алгоритм численного решения дробно-дифференциального обобщения уравнения Пуассона // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2019). Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2019. 165–174.
- Belevtsov N.S., Lukashchuk S.Y. Factorization of the fundamental solution to fractional Helmholtz equation // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2021. 42, N 1. 57–62.
- 17. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Специальные функции. М.: Наука, 1983.
- 18. Kilbas A.A., Saigo M. H-transforms: theory and applications. Boca Raton: CRC Press, 2004.
- 19. Gorenflo R., Loutchko J., Luchko Y. Computation of the Mittag-Leffler function $E\alpha$, $\beta(z)$ and its derivative // Fractional Calculus and Applied Analysis. 2002. **5**, N 4. 491–518.
- Luchko Y. Algorithms for evaluation of the Wright function for the real arguments' values // Fractional Calculus and Applied Analysis. 2008. 11, N 1. 57–75.
- Mindlin R.D., Eshel N.N. On first strain-gradient theories in linear elasticity // International Journal of Solids and Structures. 1968. 4, N 1. 109–124.
- Ru C.Q., Aifantis E.C. A simple approach to solve boundary-value problems in gradient elasticity // Acta Mechanica. 1993. 101, N 1. 59–68.
- 23. Коренев Б.Г. Введение в теорию бесселевых функций. М.: Наука, 1971.

Поступила в редакцию 9 марта 2021 г. Принята к публикации 28 апреля 2021 г.

Информация об авторе

Никита Сергеевич Белевцов — инженер-исследователь, Уфимский государственный авиационный технический университет, ул. Карла Маркса, 12, 450000, Уфа, Российская Федерация.

References

- S. G. Samko, A. A. Kilbas, and O. I. Marichev, Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications (Nauka Tekh., Minsk, 1987; Gordon and Breach, Yverdon, 1993).
- 2. V. V. Uchaikin, Method of Fractional Derivatives (Artishok, Ul'yanovsk, 2008) [in Russian].
- 3. R. Raghavan, "Fractional Diffusion: Performance of Fractured Wells," J. Petrol. Sci. Eng. 92–93, 167–173 (2012).
- D. Stan, F. del Teso, and J. L. Vázquez, "Finite and Infinite Speed of Propagation for Porous Medium Equations with Nonlocal Pressure," J. Differ. Equ. 260 (2), 1154–1199 (2016).
- 5. C. Pozrikidis, The Fractional Laplacian (CRC Press, Boca Raton, 2016).
- 6. A. V. Abramyan, V. A. Nogin, and S. G. Samko, "Fractional Powers of the Operator $-|x|^2 \Delta$ in L_p Spaces," Differ. Uravn. **32** (2), 275–276 (1996) [Differ. Equ. **32** (2), 281–283 (1996)].
- B. Barrios, E. Colorado, A. De Pablo, and U. Sánchez, "On Some Critical Problems for the Fractional Laplacian Operator," J. Differ. Equ. 252 (11), 6133–6162 (2012).
- 8. H. Chen, P. Felmer, and A. Quaas, "Large Solutions to Elliptic Equations Involving Fractional Laplacian," Annales de l'Institut Henri Poincaré (C), Analyse Non Linéaire **32** (6), 1199–1228 (2015). doi 10.1016/j.anihpc.2014.08.001
- 9. J. L. Vázquez, A. de Pablo, F. Quirós, and A. Rodriguez, "Classical Solutions and Higher Regularity for Nonlinear Fractional Diffusion Equations," J. Eur. Math. Soc. **19** (7), 1949–1975 (2017).
- E. C. Aifantis, "Fractional Generalizations of Gradient Mechanics," in Handbook of Fractional Calculus with Applications (De Gruyter, Berlin, 2019), Vol. 4, pp. 241–262.
- 11. A. D. Polyanin, Linear Equations of Mathematical Physics (Fizmatlit, Moscow, 2001) [in Russian].
- L. Greengard and V. Rokhlin, "A Fast Algorithm for Particle Simulations," J. Comput. Phys. 135 (2), 280–292 (1997).
- N. A. Gumerov and R. Duraiswami, Fast Multipole Methods for the Helmholtz Equation in Three Dimensions (Elsevier, Amsterdam, 2005).
- N. S. Belevtsov and S. Yu. Lukashchuk, "Multipole Expansion of the Fundamental Solution of a Fractional Degree of the Laplace Operator," in *Itogi Nauki Tekh., Ser. Sovrem. Mat. Prilozh., Temat. Obz.* (VINITI, Moscow, 2020), Vol. 176, pp. 26–33.

- N. S. Belevtsov and S. Yu. Lukashchuk, "A Parallel Numerical Algorithm for Solving Fractional Poisson Equation," in Proc. Int. Conf. on Parallel Computational Technologies, Kaliningrad, Russia, April 2–April 4, 2019 (South Ural State Univ., Chelyabinsk, 2019), pp. 165–174.
- N. S. Belevtsov and S. Yu. Lukashchuk, "Factorization of the Fundamental Solution to Fractional Helmholtz Equation," Lobachevskii J. Math. 42 (1), 57–62 (2021).
- A. P. Prudnikov, Yu. A. Brychkov, and O. I. Marichev, *Integrals and Series*, Vol. 2: Special Functions (Nauka, Moscow, 1983; Gordon and Breach, New York, 1986).
- 18. A. A. Kilbas and M. Saigo, *H-transforms: Theory and Applications* (CRC Press, Boca Raton, 2004).
- 19. R. Gorenflo, J. Loutchko, and Y. Luchko, "Computation of the Mittag-Leffler Function $E\alpha$, $\beta(z)$ and Its Derivative," Fract. Calc. Appl. Anal. 5 (4), 491–518 (2002).
- Y. Luchko, "Algorithms for Evaluation of the Wright Function for the Real Arguments' Values," Fract. Calc. Appl. Anal. 11 (1), 57-75 (2008).
- R. D. Mindlin and N. N. Eshel, "On First Strain-Gradient Theories in Linear Elasticity," Int. J. Solids Struct. 4 (1), 109–124 (1968).
- C. Q. Ru and E. C. Aifantis, "A Simple Approach to Solve Boundary-Value Problems in Gradient Elasticity," Acta Mech. 101 (1), 59–68 (1993).
- 23. B. G. Korenev, Introduction to the Theory of Bessel Functions (Nauka, Moscow, 1971) [in Russian].

Received

March 9, 2021

Accepted for publication April 28, 2021

Information about the author

Nikita S. Belevtsov — Research Engineer, Ufa State Aviation Technical University, ultsa Karla Marksa, 12, 450000, Ufa, Russia.