УДК 539.219.3
ББК В375.6

Анна Николаевна Корчагина
аспирант,
Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева Сибирского отделения
Российской академии наук (Новосибирск, Россия), e-mail: anchouse@ngs.ru
Лев Алексеевич Мержиевский,
доктор физико-математических наук, профессор,
Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева Сибирского отделения
Российской академии наук (Новосибирск, Россия), e-mail: merzh@hydro.nsc.ru

Численное моделирование диффузионных процессов в фрактальных средах[1]

Для моделирования аномальной диффузии используется аппарат производных дробного порядка. Рассмотрены различные определения дробных производных, проведено сравнение численных решений ряда задач диффузии различными численными методами. Указаны наиболее перспективные определения и методы численного решения.

Ключевые слова: аномальная диффузия, дробные производные, фрактальная среда.

Anna Nikolaevna Korchagina
Postgraduate Student,
Lavrent'ev Institute of Hydrodynamics,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences
(Novosibirsk, Russia), e-mail: anchouse@ngs.ru
Lev Alekseevich Merzhievskiy
Doctor of Physics and Mathematics, Professor,
Lavrent'yev Institute of Hydrodynamics,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,
(Novosibirsk, Russia), e-mail: merzh@hydro.nsc.ru

Numerical Modeling of Diffusive Processes in Fractal Media

Derivatives of a fractional order are used for modeling of anomalous diffusion. Various definitions of fractional derivatives are considered, comparison of numerical solutions of a number of problems of diffusion by various numerical methods is carried out. The most perspective definitions and methods of the numerical decision are specified.

Keywords: anomalous diffusion, fractional derivatives, fractal media.

Введение. Классическое описание процессов диффузии базируется на законах Фика. Следствием из второго закона является классическое дифференциальное уравнение диффузии. В последние годы сформировался повышенный интерес к исследованию диффузионных процессов, не подчиняющихся законам Фика и не описывающихся классическим уравнением. Явления переноса, не укладывающиеся в классические представления, наблюдаются, например, в турбулентных потоках, в аморфных полупроводниках, высокоэнергетической плазме, пористых средах. Эти явления получили название «аномальная диффузия». Довольно полное представление о состоянии развития исследований аномальной диффузии применительно к различным задачам физики дано, например, в [1; 2]. Одним из проявлений «аномальности» является диффузия в гетерогенных, в частности во фрактальных, средах.

Для описания таких процессов используется модифицированный закон Фика [3], что требует привлечения математического аппарата дробного интегро-дифференциального исчисления [4]. В классическое уравнение диффузии вводятся производные дробного порядка как по пространству, так и по времени. Возникают начально-краевые задачи для дифференциальных уравнений с дробными производными. Развиваются аналитические методы решения задач, однако наибольшее распространение получили численные методы [5–10]. Это связано, в первую очередь, с тем, что аналитические решения удается получить только в редких частных случаях.

---

[1] Работа выполнялась при поддержке Интеграционного проекта СО РАН № 64 и гранта РФФИ № 12-01-00726-а.

Одна из проблем, возникающих при использовании дробных производных, заключается в том, что не существует их однозначного определения. Численные методы решения задач для уравнений с дробными производными привязаны к виду выбранной производной, поэтому возникает необходимость анализа и сравнения результатов, полученных при использовании разных определений и численных методов. Такое сравнение проводилось в [6] на примере задачи о распространении теплового импульса.

В данной работе рассмотрены определения дробных производных Римана-Лиувилля, Капуто и Грюнвальда-Летникова и соответствующие численные методы. Проведено сравнение численных решений ряда задач, полученных различными методами для разных типов дробных производных. Анализ результатов позволил выделить определения и методы, наиболее перспективные с точки зрения адекватности описания реальных процессов диффузии во фрактальных средах.

Определения дробных производных. Существует ряд различных подходов к определению понятия производной дробного порядка, отражающих особенности становления дробного исчисления. Наиболее широким и часто используемым является определение Римана-Лиувилля, основанное на обобщении уравнения Абеля [4]:

$$D_x^\alpha u(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int\limits_a^x \frac{u(\xi)\, d\xi}{(x-\xi)^{\alpha-m+1}}, \;\; x > a, \;\; 0 \le m-1 < \alpha \le m. \tag{1}$$

Здесь использованы стандартные обозначения оператора дифференцирования и Г-функции.

Упрощением данного определения является определение Капуто, которое применимо для достаточно гладких функций, таких что операция дифференцирования может быть внесена под знак интеграла:

$$D_x^\alpha u(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int\limits_a^x (x-\xi)^{m-\alpha-1} u^{(m)}(\xi)\, d\xi, \;\; x > a, \;\; 0 \le m-1 < \alpha \le m. \tag{2}$$

Операция дробного дифференцирования Римана-Лиувилля обратна операции дробного интегрирования. Дробная производная в форме Капуто этим свойством не обладает. Развивая идею Лиувилля, А. Грюнвальд и – независимо – А. В. Летников ввели понятие дробной производной, как предела разностных отношений. Согласно определению Грюнвальда-Летникова, правая дробная производная определяется выражением

$$\frac{\partial^\alpha u(x)}{\partial x^\alpha} = \lim_{h\to 0} \frac{\Delta_h^\alpha u(x)}{h^\alpha}, \;\; \Delta_h^\alpha u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^\alpha u(x-(k-1)h). \tag{3}$$

Биномиальные коэффициенты имеют вид

$$\omega_k^\alpha = (-1)^k \binom{\alpha}{k} = (-1)^k \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\alpha-k+1)} = \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(-\alpha)\Gamma(k+1)}. \tag{4}$$

Если $u(x)$ непрерывна, а du/dx интегрируема на отрезке $[a, x]$, то производные Римана-Лиувилля, Капуто и Грюнвальда-Летникова существуют и совпадают.

Мы не будем останавливаться на других определениях производной дробного порядка, поскольку в данной работе они не используются. Анализ применимости и адекватности различных определений и соответствующих им методов численного решения был проведен в [6].

Уравнение диффузии с дробными производными. Для вывода уравнения диффузии с дробными производными используется соответствующий вариант модифицированного закона Фика [3], тогда оно принимает вид (здесь $K_0 = const$):

$$\begin{gathered} D_t^\gamma u(x,t) = K_0 D_x^\alpha u(x,t), \\ D_x^\alpha = \frac{1}{2}(1+\beta)\frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} + \frac{1}{2}(1-\beta)\frac{\partial^\alpha}{\partial(-x)^\alpha}, \\ 0 < \gamma \le 2, 1 \le \alpha \le 2, -1 \le \beta \le 1. \end{gathered} \tag{5}$$

Здесь α – дробный порядок дифференцирования по пространству; β – «коэффициент скошенности», который характеризует направление переноса вещества при $\alpha \to 1; \gamma$ – дробный порядок дифференцирования по времени. Дробная производная по пространству возникает в случае фрактальности среды, параметр дифференцирования зависит от хаусдорфовой размерности фрактала. Дробная производная по времени возникает при учёте нелокальности по времени, которая связана с прилипанием диффундирующих атомов к стенкам пор [7]. При $\alpha = 2$ получаем уравнение классической диффузии. Случай $1 < \alpha < 2$ отвечает «быстрой» диффузии (super-diffusion), когда частицы распространяются быстрее, чем предсказывает классическая модель. И случай $\alpha = 1$ – это классический перенос. Для коэффициента α рассматриваются следующие области значений:

$0 < \gamma < 1$ – «медленная» диффузия (slow diffusion, sub-diffusion);
$1 < \gamma < 2$ – «быстрая» диффузия (fast diffusion, hyper-diffusion);
$\gamma = 1$ – обычная, классическая диффузия.

В режиме субдиффузии скорость роста среднеквадратичного смещения частиц монотонно убывает со временем, тогда как в режиме супердиффузии скорость со временем возрастает [8]. При $\gamma \to 1$ рассматриваемое уравнение переходит в классическое уравнение диффузии с экспоненциальным затуханием решения на бесконечности. При $\gamma \to 2$ получаем волновое уравнение. Как варианты, могут рассматриваться уравнения, в которых только одна из производных заменяется на дробную.

Методы численного решения. Методы численной аппроксимации дробных производных напрямую связаны с их определениями. Детальный анализ применимости разных методов аппроксимации и существующих разностных схем решения уравнений с дробными производными осуществлен в [6; 9; 10]. Поясним основные идеи использованных методов на некоторых примерах. Для упрощения анализа результатов по разным методам рассмотрим случай, когда в уравнения вводится дробная производная только по времени. Представим уравнение теплопроводности в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial^{\gamma-1}u(x,t)}{\partial t^{\gamma-1}}\right) = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \tag{6}$$

$1 < \gamma < 2$. Этому уравнению сопоставим следующий разностный аналог:

$$\frac{{}^{\gamma-1}Lu_i^{n+1} -{}^{\gamma-1} Lu_i^n}{\tau} = \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{h^2}, \tag{7}$$

где ${}^{\gamma-1}L$ – численная аппроксимация оператора дробной производной порядка $\gamma - 1$. Воспользуемся определением производной дробного порядка в смысле Римана-Лиувилля. Представим оператор ${}^{\gamma-1}L$ в виде конечной суммы интегралов по отрезкам $t_k \le t \le t_{k+1}$, расположенным между узлами расчётной сетки:

$${}^{\gamma-1}Lu_i^n = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)}\frac{d}{dt_n}\left[\sum_{k=0}^{n-2}\int\limits_{t_k}^{t_{k+1}}\frac{u(\xi)\,d\xi}{(t_n-\xi)^{\gamma-1}} + \int\limits_{t_{n-1}}^{t_n}\frac{u(\xi)\,d\xi}{(t_n-\xi)^{\gamma-1}}\right],\ t_k = k\tau \tag{8}$$

Функция $u(\xi)$ на отрезках $t_k \le t \le t_{k+1}$ аппроксимируется линейно:

$$u(\xi) = A_i^k\xi + B_i^k. \tag{9}$$

Тогда, вычисляя аналитически интегралы в скобках, получаем выражение для оператора ${}^{\gamma-1}L$:

$${}^{\gamma-1}L\begin{pmatrix} u_i^0 \\ u_i^1 \\ u_i^2 \\ u_i^3 \\ \dots \\ u_i^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta_0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ \theta_1 & \lambda_0 & 0 & 0 & \dots \\ \theta_2 & \lambda_1 & \lambda_0 & 0 & \dots \\ \theta_3 & \lambda_2 & \lambda_1 & \lambda_0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \theta_n & \lambda_{n-1} & \lambda_{n-2} & \dots & \lambda_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_i^0 \\ u_i^1 \\ u_i^2 \\ u_i^3 \\ \dots \\ u_i^n \end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$\theta_0 = \frac{1}{\tau^{\gamma-1}\Gamma(2-\gamma)},\ \theta_k = \theta_0\left(k^{1-\gamma} - \frac{k^{2-\gamma}-(k-1)^{2-\gamma}}{2-\gamma}\right),\ k = 1,2,\dots,T.$$

$$\lambda_0 = \frac{1}{\tau^{\gamma-1}(2-\gamma)\Gamma(2-\gamma)},\ \ \lambda_k = \lambda_0\left[(k+1)^{2-\gamma} - 2k^{2-\gamma} + (k-1)^{2-\gamma}\right],\ \ k = 1, 2, \ldots, T.$$

Выделим из левой части уравнения слагаемое, относящееся к слою $n+1$:

$$\frac{u_i^{n+1}}{\tau^{\gamma-1}(2-\gamma)\Gamma(2-\gamma)} + \frac{{}^{\gamma-1}\widetilde{L}u_i^{n+1} -{}^{\gamma-1} Lu_i^n}{\tau} = \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{h^2}, \tag{11}$$

где ${}^{\gamma-1}\widetilde{L}$ – то же самое, что и ${}^{\gamma-1}L$, но с коэффициентом λ_0.Теперь уравнение можно представить в виде:

$$Au_{i+1}^{n+1} - Cu_i^{n+1} + Bu_{i-1}^{n+1} + D = 0, A = B = \frac{1}{h^2},$$

$$C = \frac{2}{h^2} + \lambda_0, D = \frac{{}^{\gamma-1}Lu_i^n -{}^{\gamma-1} \widetilde{L}u_i^{n+1}}{\tau} \tag{12}$$

и решить методом трехточечной прогонки:

$$u_i^n = u_{i+1}^n a_{i+1} + b_{i+1}, a_{i+1} = \frac{A}{C - Ba_i},\ \ b_{i+1} = \frac{D + Bb_i}{C - Ba_i}. \tag{13}$$

Коэффициенты a_1, b_1 и u_N находятся из краевых условий. Порядок аппроксимации данной схемы: $O(\tau + h^2)$.

Для производной Капуто оператор ${}^{\gamma-1}L$ представим в следующем виде:

$${}^{\gamma-1}Lu_i^n = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)}\sum_{k=0}^{n-1}\int\limits_{t_k}^{t_{k+1}}(t_n - \xi)^{1-\gamma}\frac{du(\xi)}{d\xi}\,d\xi, t_k = k\tau. \tag{14}$$

Как и раньше, аппроксимируем искомую функцию линейной на каждом из отрезков $t_k \le t \le t_{k+1}$ и вычислим соответствующие интегралы. После преобразований, оператор приводится к тому же виду, что и в случае производной Римана-Лиувилля с коэффициентами θ_k:

$$\theta_k^{Caputo} = \lambda_0\left((k-1)^{2-\gamma} - k^{2-\gamma}\right), k = 1, 2, \ldots, T. \tag{15}$$

Для построения численной схемы в случае производной Грюнвальда-Летникова возьмем от обеих частей уравнения теплопроводности дробную производную порядка $2-\gamma$:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = D_t^{2-\gamma}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \tag{16}$$

Полученное уравнение аппроксимируем конечно-разностным с использованием определения производной Грюнвальда-Летникова:

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\tau^2} = \frac{1}{\tau^{2-\gamma}h^2}\sum_{k=0}^{n}\omega_k^{2-\gamma}\left(u_{i+1}^{n-1} - 2u_i^{n-1} + u_{i-1}^{n-1}\right), \tag{17}$$

порядок аппроксимации которой также $O(\tau + h^2)$. Схема является условно устойчивой, достаточное условие устойчивости: $\frac{\tau^\gamma}{h^2} \le \frac{1}{2^{2-\gamma}}$ [8]. Кроме перечисленных авторами рассматривались и другие варианты определений дробных производных и их численные аппроксимации.

При постановке краевых задач количество необходимых граничных условий определяется тем, что в определениях дробных производных для данных значений параметра γ присутствует классическая вторая производная; следовательно, необходимо задавать значение функции и её первой производной.

Результаты решения задач. Приведём результаты решения по описанным методикам двух модельных задач. Решение в безразмерных величинах проводилось на отрезке $0 \le x \le 2\pi$.

Задача 1. Диффузия с правой границей области. Начально-краевые условия:

$$u(x,0) = 0.02;\ \ \left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_{(x,0)} = 0;\ \ u(0,t) = 0.02;\ \ u(2\pi,t) = 2. \tag{18}$$

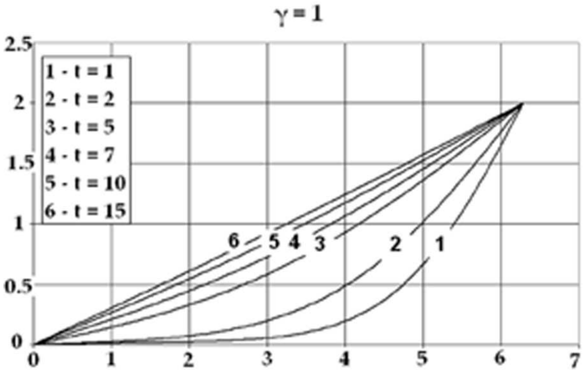

Рис. 1

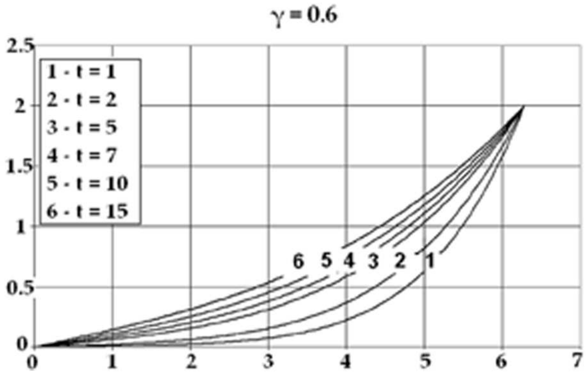

Рис. 2

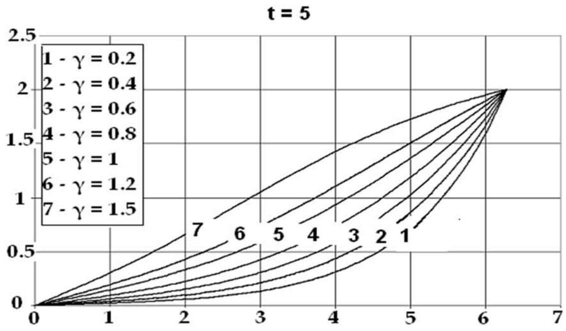

Рис. 3

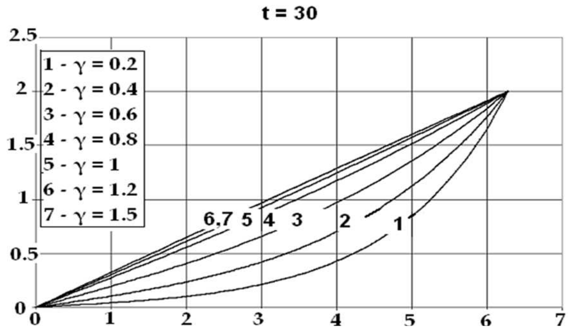

Рис. 4

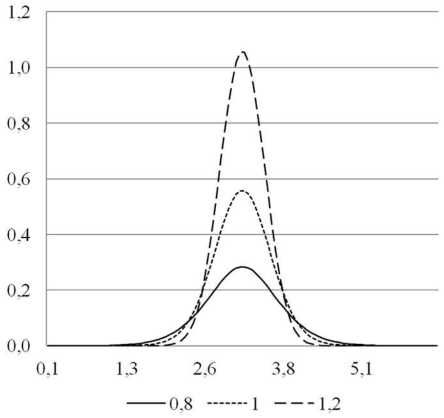

Рис. 5

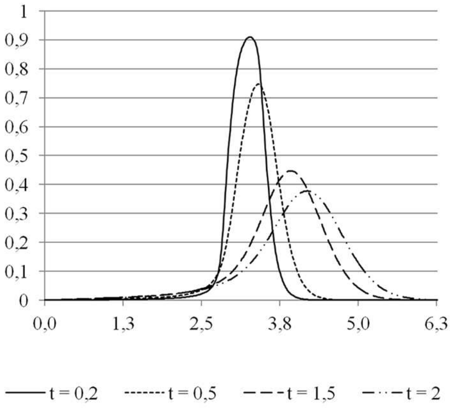

Рис. 6.

Результаты решения задачи для двух значений параметра γ приведены на рис. 1, где $\gamma = 1$ (классическое уравнение), и рис. 2, где $\gamma = 0.6$. Влияние на решение величины γ прослеживается на рис. 3 и 4, где приведены рассчитанные значения функции $u(x)$ для различных значений γ в фиксированные моменты времени.

Задача 2. Эволюция примеси из локальной области. Начально-краевые условия:

$$u(x,0) = \delta(x-\pi); \frac{\partial u}{\partial t} = 0; u(0,t) = u(2\pi,t) = 0. \tag{19}$$

Результаты решения для линейного уравнения диффузии с дробной производной по времени при $\gamma = 0.8; 1; 1.2$ на фиксированный момент времени показаны на рис. 5. Решение этой же задачи в случае дробной производной по пространству при $a = 1,15$ на разные моменты времени приведены на рис. 6.

Обсуждение результатов, выводы. На основе полученных решений уравнений с дробными производными по времени либо пространству проанализирована зависимость поведения решений от параметров порядка дифференцирования и кососимметричности. При $\gamma < 1$ скорость протекания процесса вначале больше скорости классической диффузии, но с течением времени наблюдается замедление, характерное для субдиффузии. При $\gamma > 1$ скорость процесса выше, чем в классическом случае, и процесс с течением времени ускоряется. В этом случае проявляются «волновые» свойства решения.

Решения уравнений с дробной производной по пространству показывают, что зависимость скорости диффузии от порядка дробной производной, оказывающейся большей, чем предсказывает классическая модель. При приближении параметра дифференцирования к 1 наблюдается явно выраженный процесс переноса (рис. 6).

Сравнение результатов, полученных при использовании разных определений дробных производных (Римана-Лиувилля, Капуто, Грюнвальда-Летникова) и соответствующих разностных аппроксимаций, показало, что получаемые для рассмотренных задач данные практически совпадают. Это означает, что для решения данного класса конкретных краевых задач эти методы равноценны и дают решения, достаточно близкие к полученным в некоторых случаях аналитическим.

Для всех случаев уравнений с дробными производными получаемые решения обладают всеми качественными свойствами решений «родительских» уравнений.

Список литературы

1. Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // Phys. Rep. 2000. V. 339 P. 1.–77.

2. Учайкин В. В. Автомодельная аномальная диффузия и устойчивые законы // УФН 2003. Т. 173, № 8. С. 847–876.

3. Paradisi P., Cesari R., Mainardi F., Tampieri F. The fractional Fick's law for non-local transport processes // Physica A. 2001. Т. 293 P. 130–142.

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

5. Gorenflo R. Fractional calculus: some numerical methods // Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics, eds. A. Carpinteri and F. Mainardi. Springer Verlag, Wien, 1997. №. 378. P. 277–290.

6. Мержиевский Л. А., Корчагина А. Н. Сравнение методов численного решения задач для уравнения теплопроводности дробного порядка // X Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование». Саров, 2008. С. 85–86.

7. Головизнин В. М., Киселёв В. П., Короткин И. А. Численные методы решения уравнения дробной диффузии в одномерном случае. М., 2002 (Препринт / ИБРАЭ РАН: IBRAE-2002-01).

8. Лукащук С. Ю., Костригин И. В. Численное решение диффузионно-волновых уравнений дробного порядка на кластерных системах // Труды VI Всероссийской конференции молодых ученых по мат. моделированию и информ. технологиям. Кемерово, 2005. С. 19.

9. Мержиевский Л. А., Корчагина А. Н. Моделирование распространения теплового импульса во фрактальной среде // Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны. Труды международной конференции «XI Харитоновские тематические научные чтения». Саров, 2009. С. 250–254.

10. Таукенова Ф. И., Шхануков-Лафишев М. Х. Разностные методы решения краевых задач для дифференциальных уравнений дробного порядка // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2006. Т. 46. №. 10. С. 1871–1881.

References

1. Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // Phys. Rep. 2000. V. 339 P. 1.–77.

2. Uchayykin V. V. Avtomodelnaya anomaliya diffuziya i ustoychivye zakony // UFN 2003. T. 173. № 8. S. 847–876.

3. Paradisi P., Cesari R., Mainardi F., Tampieri F. The fractional Fick's law for non-local transport processes // Physica A. 2001. T. 293 P. 130–142.

4. Samko S. G., Kilbas A. A., Marichev O. I. Integraly i proizvodnye drobnogo poryadka i nekotorye ikh prilozheniya. Minsk: Nauka i tekhnika, 1987.

5. Gorenflo R. Fractional calculus: some numerical methods // Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics, eds. A. Carpinteri and F. Mainardi. Springer Verlag, Wien, 1997. №. 378. P. 277–290.

6. Merzhiyevsky L. A., Korchagina A. N. Sravneniye metodov chislennogo resheniya zadach dlya uravneniya teploprovodnosti drobnogo poryadka // X Mezhdunarodny seminar «Supervychisleniya i matematicheskoye modelirovaniye». Saratov, 2008. S. 85–86.

7. Golovizin V. M., Kiselyov V. P., Korotkin I. A. Chislennye metody uravneniya drobnoy diffuzii v odnomernom sluchaye. M., 2002 (pereprint /IBR AE RAN. IBRAE-2002-01)

8. Lukashchuk S. Yu. Kostrigin I. V. Chislennoye resheniye diffuzno-volnovykh uravneny drobnogo poryadka na klasternykh sistemakh // Trudy VI Vserossyskaya konferentsiya molodykh uchenykh po mat. modelirovaniyu i inform. tekhnologiyam. Kemerovo, 2005. S. 19.

9. Merzhiyevsky L. A., Korchagina A. N. Modelirovaniye raspredeleniya teplovogo impulsa vo fraktalnoy srede // Ekstremalnye sostoyaniya veshchestva. Detonatsiya. Udarnye volny. Trudy mezhdunarodnoy konferentsii «XI Kharitonovskiye tematicheskiye nauchnye chteniya». Sarov, 2009. S. 250–254.

10. Taukenova F. I., Shkhanukov-Lafishev M. Kh. Raznostnye metody resheniya krayevykh zadach dlya differentsialnykh uravneny drobnogo poryadka // Zhurnal vychislitelnoy matematiki i matematicheskoy fiziki. 2006. T. 46. № 10. S. 1871–1881.

Статья поступила в редакцию 25.04.2013