

SCHEMAT MRS DLA RÓWNIANIA ANORMALNEJ DYFUZJI Z POCHODNĄ NIECAŁKOWITEGO RZĘDU PO CZASIE

Mariusz Ciesielski, Jacek Leszczyński

Instytut Matematyki i Informatyki, Politechnika Częstochowska

Streszczenie. W pracy została opisana realizacja numeryczna - jawny schemat różnicowy, rozwiązania uogólnionego równania różniczkowego cząstkowego, w którym występuje pochodna niecałkowitego rzędu po czasie. Prezentowane równanie opisuje proces anormalnej dyfuzji oraz zawiera efekt pamięci. W pracy zostały przedstawione wyniki obliczeń numerycznych.

Wprowadzenie

Anormalna dyfuzja jest zjawiskiem, które można zaobserwować m.in. w procesach fizycznych, chemicznych, biologicznych. Wynika ona często z oddziaływań zachodzących na złożonych, niejednorodnych podłożach. Przykładami, gdzie można ją zaobserwować, mogą być procesy z gwałtownymi zmianami termicznymi, dyfuzja w materiałach porowatych, transport w amorficznych półprzewodnikach, w dynamice cząstek w sieci polimerowej oraz w przepływach wirowych.

Zjawisko transportu w złożonych systemach może ulegać odchyleniom od standardowego drugiego prawa Ficka, w których wartość średnia kwadratu przesunięcia $\langle x^2(t) \rangle$ jest proporcjonalna do czasu t : $\langle x^2(t) \rangle \sim k_1 t$ (odpowiada to gaussowskiemu rozkładowi gęstości prawdopodobieństwa przemieszczeń). Anormalna dyfuzja charakteryzuje się zachodzeniem związku: $\langle x^2(t) \rangle \sim k_\alpha t^\alpha$, w którym α jest tzw. wykładnikiem anormalnej dyfuzji, k_α - współczynnikiem uogólnionym dyfuzji. Gdy $0 < \alpha < 1$, zachodzi tzw. *sub-diffusion*, co odpowiada dyfuzji rozproszonej, dla $\alpha = 1$ opisuje zachodzenie klasycznej dyfuzji (np. jest ona charakterystyczna dla ruchów Browna), natomiast dla $\alpha > 1$ zachodzi tzw. *super-diffusion*, co odpowiada wzmożonemu transportowi. W przypadku gdy $\alpha \neq 1$, proces dyfuzji odzwierciedla nie-gaussowski rozkład gęstości prawdopodobieństwa przemieszczeń.

Wielu autorów proponuje modele oparte na liniowych lub nieliniowych równaniach różniczkowych, które umożliwiają modelowanie zachowań anormalnej dyfuzji. W pracach coraz częściej spotyka się stosowanie równań różniczkowych niecałkowitego rzędu [2, 4, 5, 7, 9, 10].

Klasyczne jednowymiarowe równanie dyfuzji jest określone za pomocą równania różniczkowego cząstkowego

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = k_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t), \quad t \geq 0, \quad x \in \mathbf{R} \quad (1)$$

gdzie $u(x, t)$ jest poszukiwaną funkcją wzbudzaną przez proces dyfuzji, k_1 - współczynnikiem dyfuzji. Występujące w równaniu (1) pochodne po czasie i po przestrzeni mogą być zastąpione przez pochodne niecałkowitego rzędu (odpowiednio rzędu α i β). Wówczas otrzymamy uogólnione równanie dyfuzji z pochodnymi niecałkowitego rzędu. W pracy zajmować będziemy się równaniem, w którym występuje tylko pochodna niecałkowitego rzędu α po czasie, natomiast $\beta = 2$. Równanie takie przedstawia się następująco:

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} u(x, t) = k_\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t), \quad t \geq 0, \quad x \in \mathbf{R} \quad (2)$$

gdzie α jest liczbą rzeczywistą z zakresu $0 < \alpha \leq 2$, k_α - współczynnikiem uogólnionej (anormalnej) dyfuzji o wymiarze $[m^2/s^\alpha]$. Rozpatrując równanie (2) dla $\alpha = 1$ otrzymujemy klasyczne równanie dyfuzji, np. równanie przewodzenia ciepła, natomiast dla $\alpha = 2$ mamy równanie falowe, np. ruch drgającej zamocowanej struny. W przypadku gdy $0 < \alpha < 1$, równanie (2) charakteryzuje się zachowaniem procesu relaksacyjnego oraz gdy $1 < \alpha < 2$ opisuje proces pośredni między dyfuzją a propagacją fali (relaksacyjno-oscylacyjny) [7, 10].

Pochodna niecałkowitego rzędu α może być zdefiniowana np. przez operator w sensie Riemanna-Liouville'a, Caputo, Grünwalda-Letnikova, Riesz, Weyla-Marchauda [1, 2, 4, 11, 12, 14]. Dla funkcji $\varphi(\tau, \cdot)$ pochodne cząstkowe rzędu $\alpha \notin \mathbf{N}$ po τ są zdefiniowane w sensie Caputo (3) i Riemanna-Liouville'a (4) jako:

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial \tau^\alpha} \varphi(\tau, \cdot) = {}^c D_\tau^\alpha \varphi(\tau, \cdot) = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \int_0^\tau \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} \varphi(\xi, \cdot)}{(\tau - \xi)^{1-n+\alpha}} d\xi \quad (3)$$

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial \tau^\alpha} \varphi(\tau, \cdot) = {}_0 D_\tau^\alpha \varphi(\tau, \cdot) = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \frac{\partial^n}{\partial \tau^n} \int_0^\tau \frac{\varphi(\xi, \cdot)}{(\tau - \xi)^{1-n+\alpha}} d\xi \quad (4)$$

gdzie $n = [\alpha] + 1$, $[\cdot]$ - część całkowita z liczby. Dla $\alpha \in \mathbf{N}$ stosuje się klasyczne definicje pochodnej.

Pochodna Caputo wynika z definicji Riemanna-Liouville'a i została wprowadzona w celu uwzględnienia warunków początkowych rzędu całkowitego w równaniach różniczkowych. W teorii rachunku różniczkowego niecałkowitego rzędu [3, 12, 14] warunki początkowe powinny być zadane w postaci $\partial^{\alpha-k} / \partial \tau^{\alpha-k} \varphi(0, \cdot) = b_k$, $k = 1, \dots, [\alpha] + 1$ z danymi wartościami b_k (jest tak w przypadku definicji Riemanna-Liouville'a). W praktycznych zastosowaniach wartości te są często niedo-

stępane i nie można ich z fizycznego punktu widzenia jasno określić. Problem ten został rozwiązany przez Caputo [3], który podał sposób wprowadzenia rzędu całkowitego warunków początkowych w następujący sposób:

$${}_0^C D_\tau^\alpha \varphi(\tau, \cdot) = {}_0 D_\tau^\alpha \left(\varphi(\tau, \cdot) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{t^k}{k!} \frac{\partial^k}{\partial \tau^k} \varphi(\tau, \cdot) \Big|_{\tau=0} \right), \quad n = [\alpha] + 1 \quad (5)$$

W równaniu (2) przyjmujemy definicję pochodnej cząstkowej niecałkowitego rzędu w sensie Caputo. Szczególnie ważną właściwością pochodnych niecałkowitego rzędu jest fakt, że do wyznaczenia pochodnej funkcji w punkcie τ , nie korzystamy tylko z najbliższego sąsiedztwa τ , jak to ma miejsce w przypadku pochodnych całkowitego rzędu, ale musimy pamiętać całą historię funkcji (w przypadku (3) w przedziale $[0, \tau]$) i w obliczeniach numerycznych nie można tego zaniechać. Znajomość historii umożliwia wprowadzenie efektu pamięci.

W pracy rozwiązywać będziemy równanie jednowymiarowe (2) z zadanymi warunkami brzegowymi I rodzaju:

$$\begin{cases} x=0: & u(0, t) = g_0(t) \\ x=L: & u(L, t) = g_L(t) \end{cases} \quad t > 0 \quad (6)$$

oraz początkowymi w chwili czasu $t = 0$:

$$\begin{cases} u(x, t) \Big|_{t=0} = h_0(x) \\ \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) \Big|_{t=0} = h_1(x) \end{cases} \quad \text{dla } 1 < \alpha \leq 2 \quad 0 \leq x \leq L \quad (7)$$

W literaturze można znaleźć analityczne rozwiązania równania (2) z wykorzystaniem funkcji Foxa [4, 5] i Greena [7], jednak gdy w równaniu (2) pojawi się np. dodatkowy nieliniowy człon, użyteczne jest stosowanie przybliżonych rozwiązań numerycznych. Numeryczne metody i aspekty rozwiązań równań różniczkowych zwyczajnych niecałkowitego rzędu można znaleźć w [3, 6, 11, 12]. W rozdziale 1 przedstawiony zostanie jawny schemat numeryczny dla równania (2) wyprowadzony metodą różnic skończonych, a w rozdziale 2 przykłady numerycznego rozwiązania w postaci wykresów.

1. Algorytm numeryczny

W zadaniach brzegowo-początkowych definiuje się dwa rodzaje siatek: przestrzenną siatkę różnicową złożoną z izolowanych punktów w analizowanym obszarze oraz siatkę czasu. W zadaniu jednowymiarowym na przestrzenną siatkę różnicową o długości L składa się $N+1$ punktów równomiernie rozmieszczonych $x_i = ih$, $i = 0, \dots, N$, gdzie $h = L/N$, natomiast siatką czasu jest zbiór $\{0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots <$

$\{t_{f-1} < t_f < \dots < t_F < \infty\}$ z przyjętym równomiernym krokiem czasu Δt , $t_f = f \cdot \Delta t$, $f = 0, \dots, F$. W przypadku gdy α jest liczbą całkowitą, w literaturze [8, 13] można znaleźć wyprowadzone schematy różnic skończonych dla równania dyfuzji ($\alpha = 1$) i równania falowego ($\alpha = 2$).

Do wyznaczenia ilorazu różnicowego pochodnej niecałkowitego rzędu będziemy korzystać z definicji operatora niecałkowitego rzędu w sensie Grünwalda-Letnikova (8), która jest równoznaczna z definicją Riemanna-Liouville'a (4). Definicja (8) jest prostsza od innych definicji operatorów do wyznaczenia np. ilorazu różnicowego w formie (9), gdzie k jest liczbą węzłów uzależnioną od $\tau = kh$, $[0, \tau]$ jest przedziałem czasowym, w którym pochodna ta jest obliczana, h jest krokiem dyskretyzacji

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial \tau^\alpha} \varphi(\tau \cdot) = {}_0^{\text{GL}} D_\tau^\alpha \varphi(\tau, \cdot) = \lim_{h \rightarrow 0} h^{-\alpha} \sum_{j=0}^{\left[\frac{\tau}{h} \right]} (-1)^j \binom{\alpha}{j} \varphi(\tau - jh, \cdot) \quad (8)$$

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial \tau^\alpha} \varphi(\tau, \cdot) \approx h^{-\alpha} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{\alpha}{j} \varphi(\tau - jh, \cdot) \quad (9)$$

Wyprowadzenie schematu różnicowego dla równania (2) zaczniemy od podania sposobu uwzględniania warunków brzegowo-początkowych w numerycznym rozwiązaniu. Przyjmujemy $m = [\alpha]$. Z warunków początkowych (7) możemy bezpośrednio wyliczyć wartości funkcji u w początkowych krokach dla $t = t_f$, $f = 0, \dots, m$ w węzłach x_i , $i = 1, \dots, N-1$:

$$u(x_i, t_0) = h_0(ih) \quad (10)$$

$$u(x_i, t_1) = h_0(ih) + \Delta t \cdot h_1(ih) \quad \text{dla } m = 1 \quad (11)$$

Warunki brzegowe I rodzaju (6) wprowadza się do węzłów zewnętrznych x_0 i x_N w chwilach czasowych $t = t_f$, $f = 0, \dots, F$:

$$u(x_0, t_f) = g_0(f \cdot \Delta t) \quad (12)$$

$$u(x_N, t_f) = g_L(f \cdot \Delta t) \quad (13)$$

Drugą pochodną po przestrzeni znajdującą się na prawej stronie równania (2) przybliżamy aproksymacją różnicową w węźle x_i

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) \right|_i = \frac{u(x_{i+1}, t) - 2u(x_i, t) + u(x_{i-1}, t))}{h^2}, \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (14)$$

natomiast lewą stronę równania (2) w chwili czasowej $t = t_f, f = m+1, \dots, F$ zastępujemy przez iloraz różnicowy niecałkowitego rzędu (9) z uwzględnieniem warunków początkowych (7) w formie (5)

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} \left(u(x, t) - \sum_{k=0}^m h_k(x) \frac{t^k}{k!} \right) \Big|_i^f = (\Delta t)^{-\alpha} \sum_{j=0}^f (-1)^j \binom{\alpha}{j} \left(u(x_i, t_{f-j}) - \sum_{k=0}^m h_k(x_i) \frac{t_{f-j}^k}{k!} \right) \quad (15)$$

Stosujemy schemat jawny do wyznaczenia schematu różnicowego, przyjmując w równaniu (14) $t = t_{f-1}$, a następnie wstawiając (14) i (15) do równania (2) otrzymujemy

$$\begin{aligned} (\Delta t)^{-\alpha} \sum_{j=0}^f (-1)^j \binom{\alpha}{j} \left(u(x_i, t_{f-j}) - \sum_{k=0}^m h_k(x_i) \frac{t_{f-j}^k}{k!} \right) = \\ = k_\alpha \frac{u(x_{i+1}, t_{f-1}) - 2u(x_i, t_{f-1}) + u(x_{i-1}, t_{f-1})}{h^2} \end{aligned} \quad (16)$$

Stosując notacje: $u_i^j = u(x_i, t_j)$, $h_k(x_i) = h_{k,i}$ oraz podstawiając:

$$w_j^{(\alpha)} = (-1)^j \binom{\alpha}{j} \quad (17)$$

$$c_\alpha = \frac{k_\alpha (\Delta t)^\alpha}{h^2} \quad (18)$$

możemy zapisać równanie (16) jako

$$\sum_{j=0}^f w_j^{(\alpha)} u_i^{f-j} - \sum_{j=0}^f w_j^{(\alpha)} \sum_{k=0}^m h_{k,i} \frac{t_{f-j}^k}{k!} = c_\alpha (u_{i+1}^{f-1} - 2u_i^{f-1} + u_{i-1}^{f-1}) \quad (19)$$

Współczynniki wagi (17) można wyliczyć z zależności rekurencyjnej [12]

$$w_0^{(\alpha)} = 1; \quad w_j^{(\alpha)} = \left(1 - \frac{1+\alpha}{j} \right) w_{j-1}^{(\alpha)}, \quad j = 1, \dots, F \quad (20)$$

Dla $j = 1$ otrzymujemy $w_1^{(\alpha)} = -\alpha$.

Rozkładając częściowo pierwszą sumę w równaniu (19) na składniki, otrzymujemy

$$u_i^f - \alpha u_i^{f-1} + \sum_{j=2}^f w_j^{(\alpha)} u_i^{f-j} - \sum_{j=0}^f w_j^{(\alpha)} \sum_{k=0}^m h_{k,i} \frac{t_{f-j}^k}{k!} = c_\alpha (u_{i+1}^{f-1} - 2u_i^{f-1} + u_{i-1}^{f-1}) \quad (21)$$

Dalsze przekształcenia pozwalają nam ostatecznie wyliczyć u_i^f

$$u_i^f = (\alpha - 2c_\alpha)u_i^{f-1} + c_\alpha(u_{i+1}^{f-1} + u_{i-1}^{f-1}) - \sum_{j=2}^f w_j^{(\alpha)} u_i^{f-j} + \sum_{j=0}^f w_j^{(\alpha)} \sum_{k=0}^m h_{k,j} \frac{t_f^k}{k!} \quad (22)$$

Wyprowadzony jawny schemat różnicowy (22) jest stabilny, gdy

$$\alpha - 2c_\alpha \geq 0 \quad (23)$$

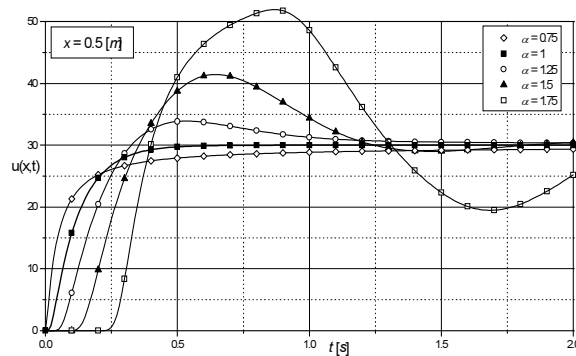
stąd po uwzględnieniu (18) wynika, że

$$\Delta t \leq \left(\frac{h^2 \alpha}{2k_\alpha} \right)^{\frac{1}{\alpha}} \quad (24)$$

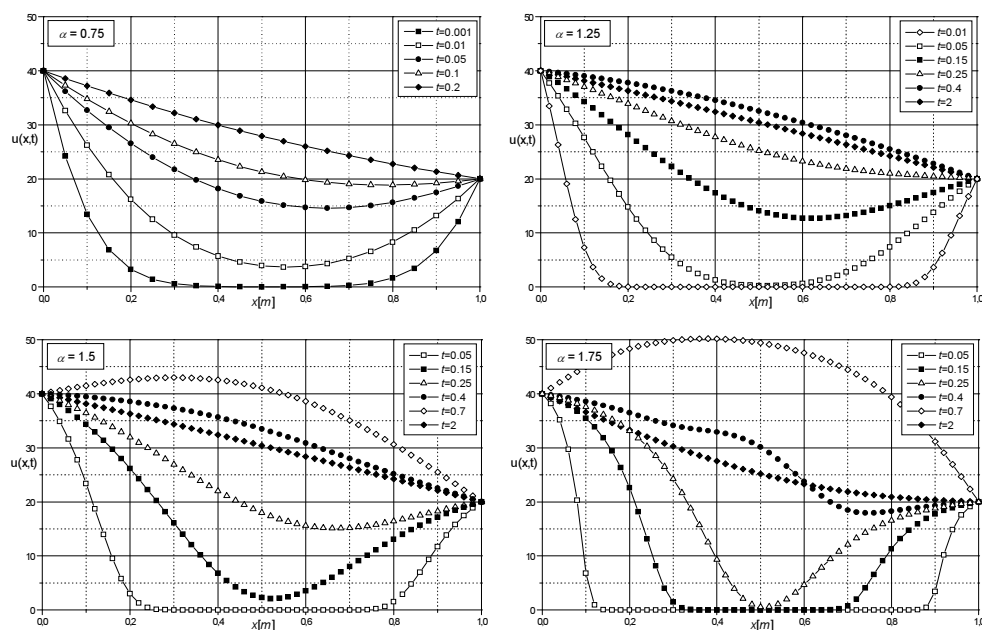
W wyprowadzonym schemacie MRS (22) dla równania (2) do wyliczenia wartości funkcji u w chwili czasowej f potrzebujemy wartości funkcji u określonych w poprzednich $f-1$ krokach czasowych.

2. Przykłady obliczeń

Na podstawie algorytmu numerycznego przedstawionego w rozdziale 1 przeprowadzono symulacje komputerowe. Obliczenia dokonane zostały dla różnych wartości α , przy czym przyjęto dla wszystkich wartości α jednakowe parametry: $L = 1$, $k_\alpha = 1$, stałe warunki początkowe $h_0(x) = 0$, $h_1(x) = 0$ oraz warunki brzegowe: $g_0(t) = 40$, $g_M(t) = 20$. Na rysunku 1 został zaprezentowany wykres przebiegu czasowego $u(x,t)$ w węźle $x = 0.5$ m, natomiast na rysunku 2 zostały przedstawione wykresy funkcji $u(x,t)$ dla różnych wartości α : 0.75, 1.25, 1.5 i 1.75 w różnych chwilach czasowych t .



Rys. 1. Przebieg anormalnej dyfuzji w węźle $x = 0.5$ m

Rys. 2. Rozkłady anormalnej dyfuzji dla $\alpha = 0.75, 1.25, 1.5$ i 1.75

W klasycznym równaniu dyfuzji (1) układ zawsze dąży do stanu równowagi. Dla $\alpha < 1$ w rozwiązaniu równania (2) układ ma cechy relaksacyjne, a dla $\alpha > 1$ cechy relaksacyjno-oscylacyjne względem punktu równowagi (można zauważyć zachowanie pośrednie pomiędzy klasyczną dyfuzją a propagacją fali). Analizując wykresy na rysunku 2, można zaobserwować, że przebieg dyfuzji w układzie jest bardziej „stromy” dla zwiększającego się rzędu pochodnej w równaniu. Przyjęte jednakowe warunki brzegowo-początkowe oraz jednakowy współczynnik anormalnej dyfuzji k_α we wszystkich prezentowanych rozwiązaniach pozwala nam obserwować szybkość zachodzenia anormalnej dyfuzji w czasie (rys. 1).

Wnioski

W pracy został podany schemat numeryczny MRS rozwiązania równania różniczkowego cząstkowego z pochodną niecałkowitego rzędu po czasie z zadanymi warunkami brzegowo-początkowymi. Zostały zaprezentowane przykładowe rozwiązania. Problem anormalnej dyfuzji jest wciąż badany i różni autorzy proponują nowe rozwiązania i modele oparte na równaniach różniczkowych z operatorami niecałkowitego rzędu. W dalszych pracach nad modelem anormalnej dyfuzji chcemy określić sposób wyliczania współczynnika anormalnej dyfuzji k_α , który będzie uzależniony od własności fizycznych danego ośrodka.

Literatura

- [1] Caputo M., Linear models of dissipation whose Q is almost frequency independent, II. *Geophys. J. Royal. Astronom. Soc.* 1967, 13, 529-539.
- [2] Carpinteri A., Mainardi F. (eds.), *Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics*, Springer Verlag, Vienna-New York 1997.
- [3] Diethelm K., Ford N.J., *Analysis of fractional differential equations*, *J. Math. Anal. Appl.* 2002, 265, 229-248.
- [4] Hilfer R., *Applications of Fractional Calculus in Physics*, World Scientific Publ. Co., Singapore 2000.
- [5] Hilfer R., Fractional diffusion based on Riemann-Liouville fractional derivatives, *J. Phys. Chem.* B104, 2000, 3914.
- [6] Leszczyński J., Ciesielski M., A numerical method for solution of ordinary differential equations of fractional order, *Lecture Notes in Computer Science* 2328, Springer Verlag, 2001, 695-702.
- [7] Mainardi F., Luchko Yu., Pagnini G., The fundamental solution of the space-time fractional diffusion equation, *Fractional Calculus and Applied Analysis* 2001, 4, 2, 153-192.
- [8] Majchrzak E., Mochnacki B., *Metody numeryczne, Podstawy teoretyczne, aspekty praktyczne i algorytmy*, Wyd. III, Wydawnictwa Politechniki Śląskiej, Gliwice 1998.
- [9] Metzler R., Glöckle W.G., Nonnenmacher T.F., Fractional model equation for anomalous diffusion, *Physica* 1994, 211A, 13.
- [10] Metzler R., Klafter J., The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach, *Phys. Rep.* 2000, 339, 1.
- [11] Oldham K., Spanier J., *The Fractional Calculus*, Academic Press, New York, London 1974.
- [12] Podlubny I., *Fractional Differential Equations*, Academic Press, San Diego 1999.
- [13] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P., *Numerical Recipes in C/Fortran*, Cambridge University Press, Cambridge 1992.
- [14] Samko S.G., Kilbas A.A., Marichev O.I., *Integrals and derivatives of fractional order and some of their applications*, Gordon and Breach, London 1993.