

Чисельне розв'язання рівняння субдифузії змінного порядку в багатовимірному просторі

Костянтин Токар

аспірант, Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 64, 01601, Київ, e-mail: tokar.kostya@gmail.com

Розглядається рівняння субдифузії в обмеженій області багатовимірного евклідового простору. Рівняння містить дробову похідну Рімана-Ліувілля за часом, порядок якої залежить від просторової змінної, та яка знаходиться під оператором Лапласа, що відповідає рівнянню, виведеного з процесу випадкових блукань з неперервним часом. Запропоновано зведення цього рівняння до рівняння субдифузії з однорідною початковою умовою, що містить дробову похідну Капуто. Оскільки в кожен фіксований момент часу рівняння субдифузії являє собою добре досліджене диференціальне рівняння еліптичного типу, будується скінченно-різницева апроксимація за часом перетвореного рівняння субдифузії. Наводиться твердження про стійкість та збіжність напівдискретизованої (дискретної за часом, неперервної за простором) схеми в квадратичній нормі для достатньо гладкого розв'язку.

Ключові слова: рівняння дробових порядків; субдифузія; скінченно-різницеві схеми; L1 метод

Вступ. Субдифузія — це клас випадкових блукань з неперервним часом (ВБНЧ), що характеризується сублінійним зростанням середньоквадратичного відхилення. Така поведінка спостерігається в процесі переносу носіїв заряду в аморфних напівпровідниках, процесі переносу забрудників у ґрунтових водах, міжклітинній дифузії [1] та дифузії в клітинних мембранах [2]. Один з механізмів, що може призводити до субдифузії, є ступеневий розподіл часу очікування стрибка (так званий розподіл з довгим хвостом). Такий розподіл відповідає середовищу з пастками або іншими перешкодами. На макроскопічному рівні, коли розподіл зміщення при стрибку має розподіл Гаусса, а розподіл часу очікування стрибка асимптотично спадає за ступеневим законом з показником $\alpha \in (0,1)$, то концентрація дифундуючої речовини описується [3, 4] дробовим диференціальним рівнянням з похідною за часом Рімана-Ліувілля порядку $1 - \alpha$.

Сечкін та ін. [5] розглянули випадкові блукання з неперервним часом, в яких показник дифузії α залежить від простору. Вони вивели рівняння субдифузії змінного порядку

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} (K_\alpha(x) D_0^{1-\alpha(x)} u), \quad (1)$$

де $K_\alpha(x) > 0$ — коефіцієнт дифузії, $0 < \alpha(x) < 1$, $D_0^{1-\alpha(x)}$ — дробова похідна Рімана-Ліувілля за часом порядку $1-\alpha(x)$ з нижньою межею 0, що визначається формулою

$$(D_0^\beta u)(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{u(x, s)}{(t-s)^\beta} ds.$$

Чисельні методи для диференціальних рівнянь дробового порядку широко досліджувались впродовж останніх десятиліть [6]. В [7] застосовується складена квадратурна формула для апроксимації похідної Рімана-Ліувілля (L1 метод), на основі якої була отримана збіжність порядку $2-\alpha$ різницевої схеми для звичайного диференціального рівняння сталого дробового порядку.

Чисельні методи для дробових диференціальних рівнянь змінного порядку були досліджені, наприклад, в [8,9,10], але ці рівняння не еквівалентні рівнянню (1): там розглядаються рівняння, в якому змінено порядок застосування дробової похідної за часом та другої похідної за простором. Тому цікавим питанням є побудова чисельних методів для рівняння (1).

1. Постановка початково-крайової задачі для рівняння субдифузії

Розглянемо рівняння субдифузії на обмеженій області $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ з гладкою межею $\partial\Omega$ на часовому проміжку $I = [0, T]$ зі змінним порядком $\alpha = \alpha(x) \in C(\bar{\Omega})$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta (K_\alpha(x) D_0^{1-\alpha(x)} u) + f(x, t) \quad (2)$$

з початковою та граничною умовами

$$u|_{t=0} = U(x), \quad u|_{\partial\Omega} = 0, \quad (3)$$

де $U \in H_0^1(\Omega)$.

В цьому рівнянні дробова похідна знаходиться під оператором Лапласа, що значно ускладнює аналіз. Тому введемо нову функцію $v = K_\alpha(x) D_0^{1-\alpha(x)} (u - U(x))$,

звідки $u = \frac{1}{K_\alpha(x)} I_0^{1-\alpha(x)} v + U(x)$, де $I_0^{1-\alpha(x)}$ — дробовий інтеграл Рімана-Ліувілля

$$(I_0^\beta v)(x, t) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_0^t \frac{v(x, s)}{(t-s)^{1-\beta}} ds.$$

Оскільки $(u - U(x))|_{t=0} = 0$, то $D_0^{1-\alpha(x)} (u - U(x)) = {}_C D_0^{1-\alpha(x)} (u - U(x))$, де ${}_C D_0^{1-\alpha(x)}$ — дробова похідна Капуто

$$\left({}_C D_0^\beta u\right)(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^t \frac{\partial u}{\partial t}(x, s) \frac{1}{(t-s)^\beta} ds = \left(I_0^{1-\beta} \frac{\partial u}{\partial t}\right)(x, t).$$

Припустимо, що $\partial u / \partial t \in L_p(I, H_0^1(\Omega))$, де

$$p = \frac{1}{\min_{x \in \Omega} (\alpha(x))}.$$

За цих умов ${}_C D_0^\beta (u - U(x))$ дорівнює нулю при $t = 0$, тому маємо початково-крайову задачу відносно функції $v = v(x, t)$

$$\frac{1}{K_\alpha(x)} {}_C D_0^{\alpha(x)} v = \Delta v + F(x, t) \quad (4)$$

$$v|_{t=0} = 0, \quad v|_{\partial\Omega} = 0, \quad (5)$$

де

$$F = f + \Delta \left(K_\alpha(x) D_0^{1-\alpha(x)} U(x) \right) = f + \Delta \left(\frac{K_\alpha(x) U(x)}{\Gamma(\alpha(x)) t^{1-\alpha(x)}} \right).$$

Розв'язок задачі (4)-(5) існує та єдиний за умов $\alpha, K_\alpha \in C^2(\bar{\Omega})$, $\min_{x \in \bar{\Omega}} \alpha(x) > 1/2$, $F \in W^{-1, -\alpha(\cdot)/2}$, де $W^{-1, -\alpha(\cdot)/2}$ — це спряжений простір до простору

$$W^{1, \alpha(\cdot)/2}(I \times \Omega) = L_2(I, H_0^1(\Omega)) \cap L_2(\Omega, H^{\alpha(\cdot)/2}(I))$$

причому розв'язок $v \in W^{1, \alpha(\cdot)/2}$ [11].

Для апроксимації дробової похідної використаємо L1 метод. Визначимо сітку $\{t_j = j\tau \mid j = \overline{0, m}\}$, $\tau = T/m$, тоді, для функції $g = g(t)$ та $\beta \in (0, 1)$, маємо

$$\left({}_C D_0^\beta g\right)(t_j) \approx \tau^{-\beta} \sum_{k=0}^j \rho_{kj} g(t_{j-k}) = \left({}_C \bar{D}_0^{\alpha(x)} g\right)_j \quad (6)$$

з вагами

$$\rho_{kj} = \frac{1}{\Gamma(2-\beta)} \begin{cases} 1, & k=0 \\ (k-1)^{1-\beta} - 2k^{1-\beta} + (k+1)^{1-\beta}, & k=\overline{1, j-1} \\ (j-1)^{1-\beta} - j^{1-\beta}, & k=j \end{cases}$$

Відомо [7], що апроксимація (6) має порядок збіжності $2-\beta$ для $g \in C^2(I)$.

Застосуємо апроксимацію (6) до рівняння (4)-(5) та отримаємо напівдискретизоване (дискретизоване за часом, неперервне за простором) рівняння

$$\frac{1}{K_\alpha(x)} \left({}_C \bar{D}_0^{\alpha(x)} y\right)_j = \Delta y_j + F_j(x) \quad (7)$$

$$y_0 = 0, \quad y|_{\partial\Omega} = 0. \quad (8)$$

Отримали напівдискретизовану початково-крайову задачу (7)-(8). Для кожного фіксованого кроку j за відомих $y_k = y_k(x)$, $k = \overline{0, j-1}$ рівняння (7) зводиться до еліптичного диференціального рівняння, чисельні методи для якого добре досліджені. Тому основну цікавість являє саме апроксимація за часом.

Розв'язок (2)-(3) можна отримати чисельним інтегруванням розв'язку (7)-(8)

2. Стійкість та збіжність напівдискретизованої схеми

Визначимо скалярний добуток та норму векторів y_j, z_j , $j = \overline{0, m}$, що є дискретним аналогом скалярного добутку та норми в $L_2(I)$ на сітці $\{t_j \mid j = \overline{0, m}\}$

$$(y, z)_\tau = \tau \sum_{j=1}^m y_j z_j,$$

$$\|y\|_\tau = \sqrt{\tau \sum_{j=1}^m y_j^2}.$$

Теорема. Нехай існує єдиний розв'язок задачі (4)-(5) $v \in C^2(I, H_0^1(\Omega))$, а також $F \in C(I, L_2(\Omega))$. Тоді для розв'язку y напівдискретизованої схеми (7)-(8) має місце нерівність

$$\| \|y\|_\tau \|_{L_2(\Omega)} \leq c \| \|F\|_\tau \|_{L_2(\Omega)},$$

де стала c залежить лише від простору Ω . Нехай також $e_j(x) = v(x, t_j) - y_j(x)$, $j = \overline{0, m}$ — похибка розв'язку схеми (7)-(8). Тоді має місце асимптотика

$$\| \|e\|_\tau \|_{L_2(\Omega)} = O\left(\| \tau^{2-\alpha(x)} \|_{L_2(\Omega)} \right).$$

Доведення цієї теореми спирається на метод енергетичних нерівностей, а також на той факт, що скалярний добуток $\left({}_C \bar{D}_0^{\alpha(x)} y, y \right)_\tau$ являє собою невід'ємно визначену квадратичну форму.

Висновки. Була побудована дискретизована за часом схема для зворотного рівняння субдифузії змінного порядку. Доведено її стійкість та збіжність в часовій дискретизації простору $L_2(I \times \Omega)$ для досить гладких розв'язків. Проте, враховуючи результат теореми про існування та єдиність розв'язку рівняння субдифузії змінного порядку [11], можна зробити висновок, що оцінка розв'язку в $L_2(I \times \Omega)$ дає його неповну характеристику. Перспективним питанням для

подальших досліджень є посилення твердження теореми про стійкість та збіжність.

Література

- [1] Sokolov, I. M. (2012). Models of anomalous diffusion in crowded environments. *Soft Matter*, 8(35), 9043-9052.
- [2] Metzler, R., Jeon, J. H., & Cherstvy, A. G. (2016). Non-Brownian diffusion in lipid membranes: Experiments and simulations. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes*, 1858(10), 2451-2467.
- [3] Metzler, R., & Klafter, J. (2004). The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37(31), R161.
- [4] Metzler, R., & Klafter, J. (2000). The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics reports*, 339(1), 1-77.
- [5] Chechkin, A. V., Gorenflo, R., & Sokolov, I. M. (2005). Fractional diffusion in inhomogeneous media. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 38(42), L679.
- [6] Tarasov, V. E. (Ed.). (2019). *Handbook of fractional calculus with applications* (Vol. 5). Berlin: de Gruyter.
- [7] Diethelm, K. (1997). An algorithm for the numerical solution of differential equations of fractional order. *Electronic transactions on numerical analysis*, 5(1), 1-6.
- [8] Zhang, H., Liu, F., Phanikumar, M. S., & Meerschaert, M. M. (2013). A novel numerical method for the time variable fractional order mobile-immobile advection-dispersion model. *Computers & Mathematics with Applications*, 66(5), 693-701.
- [9] Chen, C. M., Liu, F., Anh, V., & Turner, I. (2010). Numerical schemes with high spatial accuracy for a variable-order anomalous subdiffusion equation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 32(4), 1740-1760.
- [10] Zeng, F., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2015). A generalized spectral collocation method with tunable accuracy for variable-order fractional differential equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 37(6), A2710-A2732.
- [11] Hulianytskyi, A. (2020). Weak solvability of the variable-order subdiffusion equation. *Fractional Calculus and Applied Analysis*, 23(3), 920-934.

Numerical solution of variable-order subdiffusion equation in a multidimensional space

Kostiantyn Tokar

Subdiffusion equation in a bounded domain of a multidimensional Euclidian space is considered. The equation contains a fractional Riemann-Liouville time derivative, with order that depends on space, and is under the Laplace operator, that corresponds to the equation, obtained from the process of continuous-time random walk. A transformation of this equation to a subdiffusion equation with homogeneous initial condition, that contains a fractional Caputo derivative, is suggested. Since for each fixed time moment a subdiffusion equation turns into a well-studied elliptic partial differential equation, finite difference time approximation of transformed subdiffusion equation is built. Theorem about stability and convergence of the half-discretized (discretized in time, continuous in space) scheme in quadratic norm is given for a sufficiently smooth solution.

Отримано 31.03.23