УДК 517.96:519.6

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 степеневий 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 степеневим законом з показником $\alpha \in (0,1)$, то концентрація дифундуючої речовини описується [3, 4] дробовим диференціальним рівнянням з похідною за часом Рімана-Ліувілля порядку $1-\alpha$.

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

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

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

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

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 $\Omega \subset \mathrm{R}^N$ з гладкою межею $\partial\Omega$ на часовому проміжку $I = [0,T]$ зі змінним порядком $\alpha = \alpha(x) \in C(\overline{\Omega})$

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

з початковою та граничною умовами

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

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

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

Оскільки $(u - U(x))\big|_{t=0} = 0$, 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 $\partial u/\partial t\in L_p\left(I,H_0^1(\Omega)\right)$, де

$$p=\frac{1}{\min\limits_{x\in\Omega}\left(\alpha(x)\right)}.$$

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

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

$$v\big|_{t=0}=0,\;\; v\big|_{\partial\Omega}=0, \tag{5}$$

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 $\alpha,K_\alpha\in C^2\left(\overline{\Omega}\right)$, $\min_{x\in\overline{\Omega}}\alpha(x)>1/2$, $F\in W^{-1,-\alpha(\cdot)/2}$, де $W^{-1,-\alpha(\cdot)/2}$ — це спряжений простір до простору

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

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

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

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

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

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

$$y_0 = 0, \ \ y\big|_{\partial\Omega} = 0. \tag{8}$$

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)* $v \in C^2\left(I, H_0^1(\Omega)\right)$*, а також* $F \in C(I, L_2(\Omega))$*. Тоді для розв'язку* y *напівдискретизованої схеми (7)-(8) має місце нерівність*

$$\left\| \|y\|_\tau \right\|_{L_2(\Omega)} \le c \left\| \|F\|_\tau \right\|_{L_2(\Omega)},$$

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*

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

Доведення цієї теореми спирається на метод енергетичних нерівностей, а також на той факт, що скалярний добуток $\left({}_C\overline{D}_0^{\alpha(x)} y, y \right)_\tau$ 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