

УДК: 51-37, 532.546

ДИСКРЕТИЗАЦИЯ ПОТОКА ПРИМЕСИ В РАМКАХ ФРАКТАЛЬНОЙ МОДЕЛИ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ

Б.С. Марышев¹, Т.П. Любимова¹, Д.В. Любимов², М.-С. Néel³¹*Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Россия*²*Пермский государственный университет, Пермь, Россия*³*Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse, Avignon, France*

В рамках фрактальной модели мобильно-немобильных сред (ММ), описывающей нефиковские эффекты, возникающие в процессе фильтрации примеси и связанные с прилипанием частиц к скелету пористой среды, получено выражение для потока примеси. Предложена дискретизация потока для расчета конечно-разностными методами и на ее основе разработана консервативная схема решения уравнений модели, позволяющая естественным образом учитывать источники примеси. Решено несколько тестовых одномерных задач о распространении примеси в навязанном фильтрационном потоке на основе данного подхода.

Ключевые слова: дробные производные, аномальная диффузия, консервативные методы, фильтрация

DISCRETIZATION OF AN ADMIXTURE FLUX WITHIN THE FRAMEWORK OF A FRACTAL MIM MODEL FOR ANOMALOUS DIFFUSION

B. Maryshev¹, T. Lyubimova¹, D. Lyubimov² and M.-C. Néel³¹*Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russia*²*Perm State University, Perm, Russia*³*Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse, Avignon, France*

The mapping for admixture flux is obtained within the framework of the fractal mobile-immobile model (MIM) describing the non-Fickian effects arising in the admixture filtration process and related to the sticking of particles to the solid matrix. The discretization of the flux for calculations by finite-difference methods is suggested and the conservative scheme for the solution of equations is worked out to take into account the admixture sources. A number of one-dimensional test problems on the admixture transport in the imposed filtration flow are solved based on the proposed approach.

Key words: fractional derivatives, anomalous diffusion, conservative methods, filtration

1. Введение

Существует достаточно много свидетельств того, что перенос примеси в пористой среде не всегда подчиняется закону Фика. Отличия проявляются во многих ситуациях, в том числе при переносе примеси, имеющей вид облака частиц (это могут быть пассивные частицы, живые организмы, а также частицы коллоида), второй момент плотности распределения которых не пропорционален времени. Иногда второй момент вообще не существует. Подобные особенности обнаруживают также решения дифференциальных уравнений, содержащих частные производные нецелого порядка по пространству или времени, как линейных [3–6], так и нелинейных [7].

Известная классическая модель адвекции–дисперсии, эквивалентная закону Фика, не соответствует многим достаточно точным экспериментальным данным. Она является гидродинамическим пределом при описании броуновского движения на малых масштабах. Теоретический переход к гидродинамическому пределу [8] проиллюстрирован экспериментами по определению траекторий частиц [9]. Более общий класс моделей дается уравнениями в частных производных дробного порядка. Эти модели служат гидродинамическим пределом для моделей, учитывающих пространственные распределения по степенному закону (распределения с отдаленными последствиями или так называемые распределения с «тяжелыми хвостами») и интервалами ожидания между прыжками частиц, и часто используются при представлении экспериментальных данных, полученных для неоднородных сред. Строгое доказательство прямой связи моделей, содержащих дробные производные, с моделями, описывающими малые масштабы, дается в работах [5], [10] в предположении, что длины прыжков и времена ожиданий вместе с их суммами есть независимые, одинаково распределенные случайные величины. Факт, что суммы распределены так же, как и сами величины, доказывается с помощью центральных предельных теорем [11–14]. Прямая проверка принятых гипотез достаточно трудна. Однако если говорить о вероятностных законах распределения длин прыжков и интервалов времени между прыжками, то асимптотики этих законов напрямую связаны с порядком производных в соответствующих макроскопических моделях. Следовательно, названные модели могут быть полезны для описания экспериментов, направленных на получение плохо понимаемых до сих пор асимптотик распределения частиц. Конечно, в некоторых ситуациях независимость повторяющихся событий не сохраняется, в этом случае использование обеих моделей (дробной и классической) неуместно и более адекватны другие подходы [7].

Рассмотрим явление дисперсии в макроскопической модели с дробными производными, учитывающей случайное прилипание частиц к скелету пористой среды. Прилипание выхватывает частицу из потока на некоторый интервал времени, что влияет как на среднее течение, так и на флуктуации. На макроскопическом уровне такой ситуации соответствует кривая выхода примеси (кривая зависимости концентрации от времени в точке выхода смеси из полости, внутри которой проходил эксперимент по аномальной диффузии), характеризующаяся «тяжелым хвостом»; со временем концентрация спадает по степенному закону с отрицательной степенью $0 > \alpha > -2$. Подобные особенности присущи диффузии примесей в пористых средах со скелетом, обладающим областями захвата примеси, или диффузии примесей, имеющих тенденцию к прилипанию [15], а также рассеянию пассивных частиц (не прилипающих) в ненасыщенной пористой среде [16], [17] и сорбции частиц коллоида на твердой матрице пористой среды [18].

В аналогичных ситуациях многообещающим представляется класс моделей, называемых моделями фрактальных мобильно-немобильных сред (fractal Mobile Immobile Medium — fractal MIM) [19], использующих дифференциальные уравнения с дробными частными производными. Модель с дробными производными представляет собой фрактальный вариант MIM-модели [20], учитывающий наличие двух фаз примеси: мобильной (частицы движутся в потоке, совершают прыжки) и немобильной (частицы прилипли к скелету), а также межфазовый обмен частицами, описываемый кинетикой первого порядка. Фрактальная версия точнее отображает поведение «тяжелых хвостов» кривых выхода примеси на больших временах. Без производной по времени фрактальная модель очень похожа на более известное дробное уравнение Фоккера–Планка [21], [22], решение которого на больших временах также обладает подобными свойствами.

2. Уравнения модели

Запишем уравнение транспорта активной примеси через пористую среду. Под активностью понимается способность примеси взаимодействовать с твердым скелетом пористой среды, и таковую проявляют многие примеси, в том числе бактерии и коллоиды. Управление потоками примеси и временем нахождения ее в образце важно для экологических приложений, нефтедобычи, а также для пищевой промышленности.

Воспользуемся фрактальной МММ-моделью [19] (далее просто МММ), основанной на следующих предположениях. Некоторые частицы примеси в конкретный момент не взаимодействуют со скелетом. Они диффундируют стандартным образом, подчиняясь закону Фика, и в уравнении МММ им соответствует слагаемое $\partial C / \partial t$ (C — концентрация диффундирующих частиц). Другие же частицы взаимодействуют со скелетом, «прилипают» к нему, и остаются неподвижными до момента отрыва. Отрыв происходит случайным образом. В МММ времена неподвижности частиц распределяются согласно одностороннему устойчивому закону Леви порядка β [23]. Гидродинамический предел такого распределения соотносится с дробной производной по времени типа Капуто [24]

$$\left(\frac{\partial^\beta C}{\partial t^\beta} = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^t \frac{\partial C}{\partial \tau} \frac{1}{(t-\tau)^\beta} d\tau \right) \text{ порядка } \beta < 1. \text{ Здесь } \Gamma(x) \text{ — гамма функция.}$$

Поскольку каждая частица в потоке какое-то время может не взаимодействовать со скелетом, а затем может «прилипнуть» к нему, то уместно использование обоих слагаемых. Среднее отношение взаимодействующих и не взаимодействующих со скелетом частиц обозначим параметром λ . Правая часть уравнения будет содержать стандартные слагаемые (диффузионное и адвективное), а левая — слагаемые, описывающие взаимодействие со скелетом.

Для простоты запишем уравнение переноса примеси МММ в одномерном случае (концентрация зависит лишь от одной координаты):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \lambda \frac{\partial^\beta C}{\partial t^\beta} = -V \frac{\partial C}{\partial x} + K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где V — скорость жидкости, K — коэффициент диффузии. Переход к многомерному случаю тривиален: в правой части нужно лишь заменить производные по координате на соответствующие пространственные операторы.

3. Консервативная форма уравнений и её преимущества

Концентрационные задачи часто приходится решать в терминах потоков концентрации, поскольку любой источник или сток представляется в виде потока концентрации. Большинство экспериментов имеют дело с источниками, поскольку примесь нужно как-то доставить в массив пористой среды. Как правило, такой источник располагается на границе. Кроме того, в случае непроницаемой границы ставится необходимое условие отсутствия потока вещества.

Чтобы получить явное выражение для потока концентрации, перейдем к консервативной форме уравнения (1), то есть к закону сохранения массы. Очевидно, что поток в МММ не совпадает с фиковским и зависит от предыстории. Запишем уравнение (1) в дивергентной форме

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\operatorname{div} \left[A_t \left(VC - K \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right], \quad (2)$$

где A_t — некоторый интегральный оператор, учитывающий историю процесса (поток концентрации в текущий момент времени зависит от того, сколько примеси осело на стенки раньше). Для нахождения явной формы этого оператора применим к уравнению (1) преобразование Лапласа по времени, согласно которому заменим производные их изображениями в пространстве Лапласа:

$$s\mathcal{L}(C) - C_0 + \lambda s^\beta \mathcal{L}(C) + \lambda s^{\beta-1} C_0 = \mathcal{L}[\text{div}(\vec{F})], \quad \mathcal{L}(f(t)) = \int_0^\infty f(t)e^{-st} dt. \quad (3)$$

Здесь \mathcal{L} обозначает результат преобразования Лапласа, s — комплексная переменная, C_0 — значение концентрации в момент времени $t = 0$, $\vec{F} = VC - K \frac{\partial C}{\partial x}$ — классический поток концентрации. Преобразуем уравнение (3) таким образом, чтобы правая часть содержала только лапласовский образ первой производной по времени:

$$s\mathcal{L}(C) - C_0 = \frac{\mathcal{L}[\text{div}(\vec{F})]}{1 + \lambda s^{\beta-1}}. \quad (4)$$

Тогда очевидно, что оператору A_t соответствует следующий лапласовский образ:

$$\mathcal{L}(A_t) = \frac{1}{1 + \lambda s^{\beta-1}}. \quad (5)$$

Осуществить обратное преобразование аналитически достаточно сложно; именно с этим связана трудоемкость решения в терминах потоков. Однако у образа наблюдается несколько простых свойств. Прежде всего видно, что на малых временах (при $s \rightarrow \infty$, что эквивалентно $t \rightarrow 0$) выполняется соотношение $\mathcal{L}(A_t) \rightarrow 1$. Следовательно, на малых временах имеет место стандартная фиковская диффузия с нарастанием концентрации во времени по экспоненциальному закону. На больших временах (при $s \rightarrow 0$) выполняется «фрактальный» закон диффузии $\mathcal{L}(A_t) = \frac{1}{\lambda s^{\beta-1}}$, описывающийся с помощью дробной производной Капуто, из чего следует, что спадание концентрации со временем происходит по степенному закону $t^{-\beta}$. Оба эти предела подтверждаются на практике в так называемых «sand box» экспериментах [25, 26], принципиальная схема установки для которых показана на рисунке 1. Заметим, что вся ММ, на самом деле, конструировалась так, чтобы она могла удовлетворять этим экспериментам.

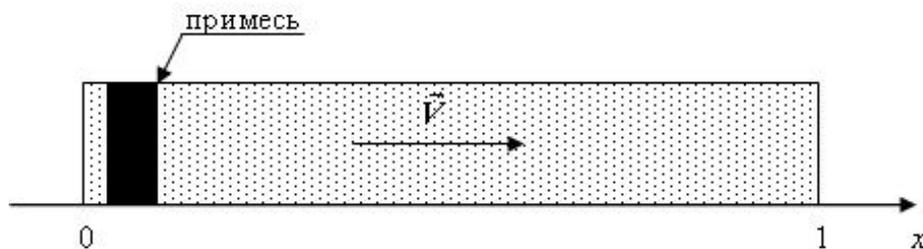


Рис. 1. Принципиальная схема «sand box» эксперимента с указанием направления течения

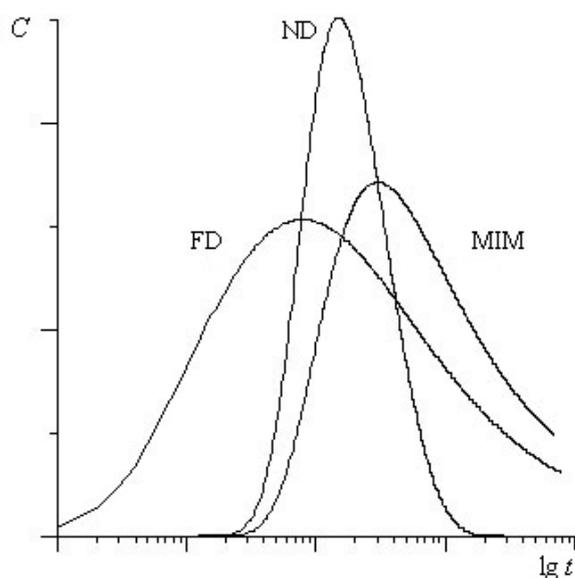


Рис. 2. Характерное изменение концентрации со временем для различных законов диффузии: ND – нормальный; FD – фрактальный, MIM – фрактальный для мобильно-немобильной среды

Суть «sand box» эксперимента состоит в следующем. С одного конца «ящика», заполненного пористой средой, распространяется примесь. Транспорт происходит с помощью двух механизмов: диффузионного и конвективного (прокачивание жидкости); измеряется только одна характеристика, а именно концентрация примеси вблизи противоположного конца ящика.

При расчете одномерной задачи, соответствующей «sand box» эксперименту, в рамках фиковской модели используем уравнение (1) без дробной производной. Для зависимости концентрации от времени получается симметричный «колокол» с экспоненциальным законом нарастания и падения концентрации со временем (кривая ND, Рис. 2). Использование модели фрактальной диффузии (уравнение (1) без первой производной по времени) приводит к «колоколу» со степенным законом нарастания и затухания (кривая FD). В реальном эксперименте эта зависимость имеет вид несимметричного колокола с нарастанием по экспоненциальному закону и спаданием по степенному закону. Такой же результат дает фрактальная MIM-модель (кривая MIM)

Подводя итог, можно сказать, что консервативная форма не только позволяет решать задачи в терминах потоков (задачи с источниками и стоками, находящимися как внутри рассматриваемой области, так и на границе), но также указывает в явном виде на основные свойства модели, которые имеют экспериментальную основу.

4. Идея обратной операторной матрицы

Как отмечалось выше, записать в явном виде оператор A_t достаточно сложно, поэтому хотелось бы найти простой способ его дискретизации, чтобы решать такие задачи численно. Предлагаемый в настоящей работе способ состоит в следующем. Пусть в течение времени t_n рассматривается эволюция некоторой величины f , описываемой вектором в $(n+1)$ -мерном пространстве. Тогда ее дискретной аналог можно выразить как $\vec{f} = (f(t_n), f(t_{n-1}), \dots, f(t_0))$, где t_0, t_1, \dots, t_n — интересующие нас моменты времени (t_n — наибольшее время счета), и дискретный аналог оператора A_t ,

имеющего лапласовский образ (5), можно представить в виде n -мерной квадратной матрицы. Для этого введем оператор $B_t = A_t^{-1} = E + \lambda I_{0,t}^{1-\beta}$, где E — единичная диагональная матрица порядка n , а $I_{0,t}^{1-\beta}$ — матрица, соответствующая дробному интегралу Римана–Лиувилля степени $\alpha = 1 - \beta$:

$$\mathfrak{I}_{0,t}^{\alpha}(f(t)) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t f(\tau)(t-\tau)^{\alpha-1} d\tau. \quad (6)$$

Выражению (6) в лапласовском пространстве соответствует образ $s^{-\alpha}$, что отражено в справочной литературе (см., например, [27]). Для получения матрицы A_t далее нужно лишь тем или иным способом аппроксимировать интеграл (6) на временной сетке $(t_1 \dots t_n)$.

5. Дискретизация интегралов

Аппроксимируем интеграл (6) следующим образом. Сначала запишем его в виде суммы:

$$\mathfrak{I}_{0,t}^{\alpha}(f(t)) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{t-(j+1)\tau}^{t-j\tau} f(t^*)(t-t^*)^{\alpha-1} dt^*; \quad (7)$$

здесь τ — шаг по времени, то есть $t_j = j\tau$, $t_n = t = n\tau$. Затем воспользуемся любой стандартной аппроксимацией интеграла на временной сетке с шагом τ . Отметим, что, во-первых, для α должно выполняться условие $0 < \alpha < 1$, поскольку суммирование по j начинается с $j = 0$, а во-вторых, следует избегать аппроксимаций, где появляется $j^{\alpha-1}$ (таким свойством обладают формулы трапеций и левых прямоугольников; формула правых прямоугольников не вызовет никаких трудностей). В итоге интегральная сумма принимает следующий вид:

$$\mathfrak{I}_{0,t}^{\alpha}(f(t)) \approx \sum_{j=0}^{n=t/\tau} i_j f(t-j\tau), \quad (8)$$

где i_j — весовые коэффициенты, описывающие вклад функции f в интегральную сумму на j -м шаге. Конкретный вид коэффициентов i_j определяется видом аппроксимации интегралов в сумме (7).

Сумму (8) представим в виде свертки $\mathfrak{I}_{0,t}^{\alpha}(f(t)) \approx I_{0,t}^{1-\beta} \cdot \vec{f}$ вектора \vec{f} с нижней треугольной матрицей $I_{0,t}^{1-\beta}$ размерности $(n+1)$ с элементами, зависящими от α , τ , j :

$$I_{0,t}^{1-\beta} = \begin{pmatrix} i_0 & 0 & \dots & 0 \\ i_1 & i_0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ i_n & i_{n-1} & \dots & i_0 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Покажем, что искомая матрица A_i обладает такой же структурой, как и матрица B_i . Для этого запишем матричное уравнение $A_i B_i = E$. Известно, что обратная треугольной матрицы тоже треугольна. Тогда диагональные элементы a_0 матрицы A_i будут одинаковыми, поскольку в матрице B_i на диагонали стоят одинаковые элементы $b_0 = 1 + \lambda i_0$, и будет выполняться равенство $a_0 b_0 = 1$. То же самое можно сказать обо всех диагоналях, параллельных главной: они содержат одинаковые элементы. Кроме того, для элементов j -й диагонали выполняется условие: $\sum_{i=0}^j a_{j-i} b_i = 0$. Следовательно, матрица A_i обладает той же самой структурой, что и матрица B_i , и элементы ее j -й диагонали находятся по формулам:

$$a_0 = \frac{1}{1 + \lambda i_0}, \quad a_j = -\frac{\lambda}{1 + \lambda i_0} \sum_{k=1}^j i_k a_{j-k} \quad (j=1, n). \quad (10)$$

Здесь учтено, что $b_0 = 1 + i_0$, $b_j = i_j$ ($j=1, n$). В итоге получаем формулу для аппроксимации результирующей величины воздействия оператора A_i на величину f вида:

$$Q(t) \approx \sum_{j=0}^{n=t/\tau} a_j f(t - j\tau). \quad (11)$$

Если в качестве f взять поток Фика, то $Q(t)$ будет представлять собой поток примеси в ММ. Классический поток \vec{F} (см. выражение (3)) можно аппроксимировать по-разному, но в этом случае необходима уже пространственная дискретизация, не зависящая от временной.

6. Пример схемы численного решения

Приведем пример численной схемы решения уравнения (1), записанного в форме (2). Рассмотрим одномерную задачу о распространении примеси, помещенной в полость. На границах поддерживается нулевое значение концентрации, то есть граничные условия выглядят следующим образом: $C|_{x=0,1} = 0$. При таком варианте граничных условий возможно аналитическое решение задачи в квадратурах.

Прежде всего получим аналитическое решение задачи с начальными условиями $C(x, 0) = f(x)$. Будем искать решение в виде произведения: $C(x, t) = C_s(x) C_t(t)$. Тогда уравнение (1) распадется на два обыкновенных дифференциальных уравнения:

$$-V \frac{\partial C_s}{\partial x} + K \frac{\partial^2 C_s}{\partial x^2} + P C_s = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial C_t}{\partial t} + \lambda \frac{\partial^\beta C_t}{\partial t^\beta} + P C_t = 0, \quad (13)$$

где P — константа разделения переменных, которая определяется граничными

условиями. В уравнении (12) сделаем замену $C_s(x) = \exp\left(\frac{V}{2K}x\right)\bar{C}(x)$ и разрешим его относительно $\bar{C}(x)$:

$$\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \kappa \bar{C} = 0. \quad (14)$$

Уравнение (14) вместе с граничными условиями представляет собой классическую задачу на собственные значения, где $\kappa = P/K - V^2/4K^2$. В случае однородных граничных условий ($C|_{x=0,1} = 0$) собственные функции задачи \bar{C}_q имеют вид $\bar{C}_q(x) = \sin(\pi qx)$ и соответствуют собственным значениям $\kappa_q = \pi^2 q^2$ (где q — номер гармоники).

Для решения уравнения (13) воспользуемся преобразованием Лапласа. Уравнение (3) в лапласовом пространстве принимает вид:

$$sC_l(s) - C_l(0) + s^\beta C_l(s) - s^{\beta-1} C_l(0) = -PC_l(s), \quad (15)$$

откуда

$$C_l(t) \doteq C_l(s) = \frac{1 + \lambda s^{\beta-1}}{P + s + \lambda s^\beta} C_l(0). \quad (16)$$

Символ « \doteq » обозначает соответствие функции $C_l(t)$ ее лапласовскому образу $C_l(s)$.

Взяв в качестве начального условия $C_l(0) = 1$ и применив к (16) обратное преобразование Лапласа, получим [2]:

$$C_l(t, P_q) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-tr} \frac{P_q \lambda r^{\beta-1} \sin(\beta\pi) dr}{(P_q - r)^2 + \lambda^2 r^{2\beta} + 2(P_q - r)\lambda r^\beta \cos(\beta\pi)}. \quad (17)$$

В этом случае решение можно представить в виде ряда

$$C(x, t) = \exp\left(\frac{V}{2K}x\right) \sum_0^\infty A_q \bar{C}_q(x) C_l(t, P_q). \quad (18)$$

Входящие сюда коэффициенты A_q найдем с помощью условия ортогональности функций $\bar{C}_q(x)$ на отрезке $x \in [0, 1]$:

$$A_q = 2 \int_0^1 f(x) \sin(\pi qx) \exp\left(-\frac{V}{2K}x\right) dx. \quad (19)$$

Для простоты возьмем в качестве начального распределения концентрации функцию экспоненциального вида: $C(x, 0) = f(x) = \exp\left(\frac{Vx}{2K}\right) \sin \pi x$. В таком случае только один

из коэффициентов A_q не равен нулю, а именно $A_1 = 1$, и решение выглядит следующим образом:

$$C(x, t) = \exp\left(\frac{Vx}{2K}\right) \frac{\sin(\pi x)}{\pi} \int_0^\infty \frac{e^{-r} P_1 \lambda r^{\beta-1} \sin(\beta\pi) dr}{(P_1 - r)^2 + \lambda^2 r^{2\beta} + 2(P_1 - r) \lambda r^\beta \cos(\beta\pi)}, \quad (20)$$

где $P_1 = \pi K + \frac{V^2}{4K}$.

Для интегралов (7) выберем аппроксимацию:

$$\int_{t-(j+1)\tau}^{t-j\tau} f(t^*) (t-t^*)^{\alpha-1} dt^* \approx \tau^\alpha \frac{f(t-j\tau) + f(t-(j+1)\tau)}{2\alpha} \left((j+1)^\alpha - (j)^\alpha \right). \quad (21)$$

Такая аппроксимация имеет, строго говоря, первый порядок точности, так как остаточный член для каждого интеграла равен [28]:

$$f' \left(t - j\tau - \frac{\tau}{2} \right) \frac{(j+1)^\alpha (4j^2 + 2j^2\alpha - \alpha - 3j\alpha) - j(4-2\alpha)}{4+6\alpha+2\alpha^2} \tau^{\alpha+2}. \quad (22)$$

Для всей интегральной суммы (7) остаточный член пропорционален $\tau^{\alpha+1}$, что также дает первый порядок. Используя (21), сначала найдем выражения для элементов матрицы $I_{0,t}^{1-\beta}$:

$$i_0 = \frac{\tau^\alpha}{2\alpha\Gamma(\alpha)}, \quad i_j = \frac{\tau^\alpha}{2\alpha\Gamma(\alpha)} \left[(j+1)^\alpha - (j-1)^\alpha \right], \quad (23)$$

$$i_n = \frac{\tau^\alpha}{2\alpha\Gamma(\alpha)} \left[n^\alpha - (n-1)^\alpha \right] \quad (j=1 \dots n-1),$$

затем по формулам (10) — элементы матрицы A . Из формул (7), (21) видно, что для старших элементов остаточный член пропорционален $\tau^{\alpha+1}$, когда число слагаемых достаточно близко к n . Для младших элементов остаточный член имеет меньшее значение, поэтому будем оценивать точность по старшим элементам. Для пространственной аппроксимации потока F запишем классическое приближение второго порядка точности по пространственному шагу h , то есть

$$F(x, t) = C(x+h) \left(\frac{V}{2h} + \frac{K}{h^2} \right) - \frac{2C(x)}{h^2} + C(x-h) \left(\frac{K}{h^2} - \frac{V}{2h} \right). \quad (24)$$

Теперь не аппроксимированной осталась лишь левая часть уравнения (2). Используем для этого аппроксимацию первого порядка точности с шагом τ :

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} \approx \frac{C(x, t+\tau) - C(x, t)}{\tau}. \quad (25)$$

Таким образом, имеем две сетки: временную с шагом τ и пространственную с шагом h . Обозначим верхним индексом номер временного шага, нижним — номер пространственного шага: $F_i^j = F(hi, \tau j)$. Для исключения проблем с устойчивостью применим неявную схему. Получившаяся система разностных уравнений выглядит следующим образом:

$$\frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\tau} = \sum_{j=0}^{k+1} a_j \left[C_{i+1}^{k+1-j} \left(\frac{V}{2h} + \frac{K}{h^2} \right) - \frac{2C_i^{k+1-j}(x)}{h^2} + C_{i-1}^{k+1-j} \left(\frac{K}{h^2} - \frac{V}{2h} \right) \right]. \quad (26)$$

Суммарная точность аппроксимации составляет

$$\delta C = H\tau + G\tau^{1-\beta}h^2, \quad (27)$$

где H, G — некоторые функции координаты и времени; порядок величины их характерных значений равен порядку величины характерных значений концентрации (здесь учтено, что $\alpha = 1 - \beta$).

Вынесем за знак суммы и перенесем в правую часть слагаемые с временным индексом $(k+1)$:

$$\begin{aligned} a_0 C_{i+1}^{k+1} \left(\frac{V}{2h} + \frac{K}{h^2} \right) + \left(1 - \frac{2a_0}{h^2} \right) C_i^{k+1} + a_0 C_{i-1}^{k+1} \left(\frac{K}{h^2} - \frac{V}{2h} \right) = \\ = C_i^k + \tau \sum_{j=1}^{k+1} a_j \left[C_{i+1}^{k+1-j} \left(\frac{V}{2h} + \frac{K}{h^2} \right) - \frac{2C_i^{k+1-j}}{h^2} + C_{i-1}^{k+1-j} \left(\frac{K}{h^2} - \frac{V}{2h} \right) \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

Решая полученную систему методом прогонки на каждом шаге по времени, найдем искомое решение для эволюции концентрации.

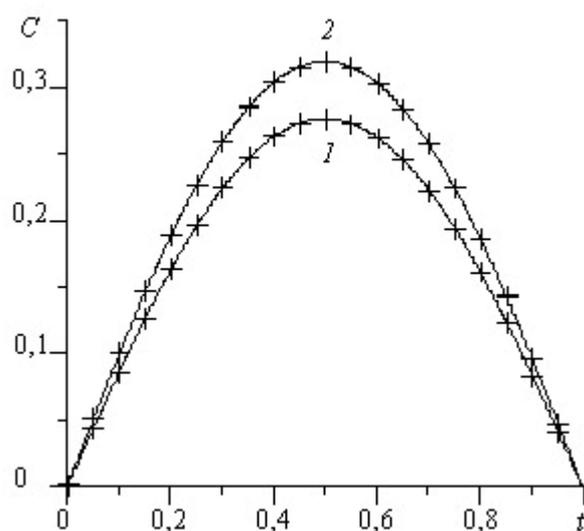
7. Результаты тестовых экспериментов

Тестовый численный эксперимент осуществлен на задаче, поставленной и решенной аналитически выше. Получены распределения концентрации в различные моменты времени, а также зависимость относительной погрешности метода от величины шага по времени. Относительная погрешность вычислялась путем сравнения данных численного счета с результатом, установленным с помощью формулы (20).

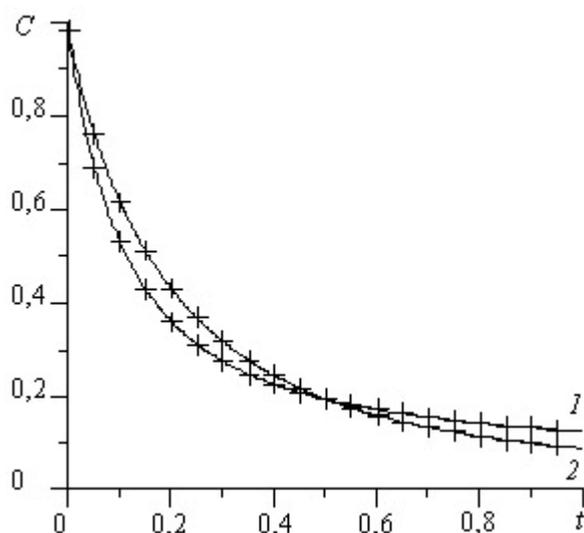
На рисунке 3, а представлены пространственные распределения концентрации, найденные численно и аналитически. Как можно видеть, они совпадают с хорошей точностью, что является подтверждением адекватности метода.

Рисунок 3, б содержит зависимости от времени максимального по координате значения концентрации для различных значений порядка дробной производной. Как видно, полученные аналитически и численно данные соответствуют друг другу; для разных β получаются различные законы падения концентрации на больших временах: чем больше β , тем больше $|\partial C / \partial t|$.

Во всех проведенных экспериментах численная схема обладает первым порядком точности, так как зависимость относительной погрешности счета ($\varepsilon = \delta C / C$) от величины шага по времени линейна. Это следует из формулы суммарной точности аппроксимации (27), поскольку основной вклад вносит первое слагаемое. Например,



а



б

Рис. 3. Зависимость концентрации от координаты (а) в момент $t = 0,3$ и от времени (б) в сечении $x = 0,5$ для значений β : 0,5 – кривая 1; 0,75 – кривая 2 (сплошные линии – результат по формуле (20), крестики – численный расчет при значениях $K = 1$, $\lambda = 2$, $V = 0$, $h = 10^{-2}$, $\tau = 10^{-4}$)

для $\tau = 10^{-6}$, $h = 10^{-2}$ получим $(G/H) = 10^{-1}$, то есть второе слагаемое на порядок меньше первого. Однако для получения исчерпывающей картины явления расчеты принято проводить до времен, сопоставимых с диффузионными временами. Диффузионное время есть $t = l^2/K$, где l — характерный пространственный масштаб задачи. В рассматриваемом случае $t = 1$, так как длина расчетной области l и коэффициент диффузии K равны единице. Для достижения времени $t = 1$ потребуется массив из 10^8 элементов для хранения предыстории, которая нужна для вычисления потока. В проведенных в настоящей работе численных экспериментах использованы шаги $\tau = 10^{-4}$, $h = 10^{-2}$, и относительная погрешность составила $\varepsilon \sim 0,1\%$,

таким образом, шаг по времени меньше, чем $\tau=10^{-4}$, не целесообразен. Поскольку в этом случае первое слагаемое в формуле (27) больше второго на два порядка, то, следовательно, метод имеет первый порядок точности по времени.

8. Заключение

Основным результатом данной работы является впервые полученная дискретизация потока примеси в рамках фрактальной МММ-модели. При использовании стандартных методов численного анализа эта дискретизация позволяет, во-первых, конструировать консервативные схемы (весьма важные для диффузионных задач, так как исключают численную диффузию), во-вторых, — стандартным образом учитывать внутренние источники и стоки примеси (путем добавления источникового слагаемого в уравнение (2)). В реальных экспериментах работа в терминах потока не имеет затруднений, связанных с моделированием граничных условий; в эксперименте на границе чаще всего задаются непроницаемая граница, внешний приток примеси, сток примеси. В целом полученная дискретизация дает возможность решать уравнения фрактальной МММ-модели в наиболее привычной и хорошо известной дивергентной форме и тем самым избегать многих трудностей, связанных с дробным дифференцированием.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 09-01-00618_a).

Литература

1. *Scher H., Lax M.* Stochastic transport in a disordered solid. I. Theory // *Phys. Rev. B.* – 1973. – V. 7, № 10. – P. 4491-4501.
2. *Scher H., Lax M.*, Stochastic transport in a disordered solid. II. Theory // *Phys. Rev. B.* – 1973. – V. 7, № 10. – P. 4502-4512.
3. *Mainardi F., Luchko Y., Pagnini G.* The fundamental solution of the space-time fractional diffusion equation // *Fractional Calculus & Applied Analysis.* – 2001. – V. 4, № 2. – P. 153–192.
4. *Metzler R., Klafter J.* The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics // *J. Phys. A.* – 2004. – V. 37. – P. 161-208.
5. *Scalas E., Gorenflo R., Mainardi F.* Uncoupled continuous-time random walks: Solution and limiting behavior of the master equation // *Phys. Rev. E.* – 2004. – V. 69. – P. 011107/1-8.
6. *Zhang Y., Benson D.A., Meerschaert M.M., Scheffler H.P.* On using random walks to solve the space-fractional advection-dispersion equations // *J. Stat. Phys.* – 2006. – V. 123, № 1. – P. 89-110.
7. *Lutsko J.F., Boon J.P.* Generalized diffusion: a microscopic approach // *Phys. Rev. E.* – 2004. – V. 77. – P. 051103/1-13.
8. *Einstein. A.* Investigations on the theory of Brownian movement. – New York: Dover, 1956. – 549 p.
9. *Metzler R., Klafter J.* The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // *Physics Reports.* – 2000. – V. 339. – P. 1-76.
10. *Meerschaert M.M., Scheffler H.P.* Limit theorems for continuous-time random walks with infinite mean waiting times // *J. Appl. Probab.* – 2004. – V. 41, № 3. – P. 623-638.
11. *Feller W.* An introduction to probability theory and its applications. – London: Addison-Wessley pub. company, 1968. – V. 2. – 297 p.
12. *Gnedenko B.V., Kolmogorov A.N.* Limit distributions for sums of independent variables. – New York: Wiley and sons, 1971. – 704 p.
13. *Lévy P.* Théorie de l'addition des variables aléatoires. – Paris: Gauthier-Villars, 1937. – 328 p.
14. *Meerschaert M.M., Scheffler H.P.* Limit distributions for sums of independent random vectors // *Heavy tails in theory and practice.* – New York: Wiley and sons, 2001. – 512 p.
15. *Zhang Y., Benson D.A., Bauemer B.* Moment analysis for spatiotemporal fractional dispersion // *Water Resour. Res.* – 2008. – V. 44. – P. W04424/1-12.
16. *Bromly M., Hinz C.* Non-Fickian transport in homogeneous unsaturated repacked sand // *Water Resour. Res.* – 2004. – V. 40. – P. W07402/1-13.
17. *Cortis A., Chen Y., Scher H., Berkowitz B.* Quantitative characterization of pore-scale disorder effects on transport in “homogeneous” granular media // *Phys. Rev. E.* – 2004. – V. 70. – P. 041108/1-8.

18. *Jacobs A.B.* Transport bacterien en milieu poreux, modélisation et application aux cas, d'épandage d'effluents. – Avignon: PhD University of Avignon, 2007. – 216 p.
19. *Schumer R., Benson D.A., Meerschaert M.M., Bauemer B.* Fractal mobile/immobile solute transport // *Water Resour. Res.* – 2003. – V. 39. – P. W01296/1-10.
20. *Van Genuchten M.T., Wierenga P.J.* Mass transfer studies in sorbing porous media. I. Analytical solutions // *Soil. Sci. Soc. Am. J.* – 1976. – V. 40. – P. 473-480.
21. *Zaslavsky G.* Fractional kinetic equation for Hamiltonian chaos // *Phys. D.* – 1994. – V. 76. – P. 110-122.
22. *Magdziarz M., Weron A., Weron K.* Fractional Fokker-Planck dynamics: stochastic representation and computer simulation // *Phys. Rev. E.* – 2007. – V. 75. – P. 016708/1-6.
23. *Леви П.*, Стохастические процессы и броуновское движение, пер. с франц. – М.: Наука, 1972. – 375 с.
24. *Gorenflo R., Mainardi F.* Integral and differential equations of fractional order // *CISM lecture notes*. – 1997. – №. 378. – P. 223-274.
25. *Bromly M., Hinz Ch.* Non-Fickian transport in homogeneous unsaturated repacked sand // *SuperSoil 2004: 3rd Australian New Zealand Soils Conference (5–9 December 2004, University of Sydney, Australia)*. – Published on CD ROM
26. *Li X., Scheibe T.D., Johnson W.P.* Apparent decreases in colloid disposition rate coefficients with distance of transport under unfavorable disposition conditions: a general phenomenon // *Environ. Sci. Technol.* – 2004. – V. 38. – P. 5616-5625.
27. *Диткин В.А., Прудников А.П.* Интегральные преобразования и операционное исчисление. – М.: Физматгиз, 1961. – 524 с.
28. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы. – М.: Наука, 1989. – 432 с.

Поступила в редакцию 04.03.10

Сведения об авторах

Марышев Борис Сергеевич, асп., Институт механики сплошных сред УрО РАН (ИМСС УрО РАН), 614013, Пермь, ул. Академика Королёва, д. 1; E-mail: bmaryshev@mail.ru

Любимова Татьяна Петровна, дфмн, зав.лаб., ИМСС УрО РАН; E-mail: lyubimovat@mail.ru

Любимов Дмитрий Викторович, дфмн, проф., зав.каф., Пермский государственный университет (ПГУ), 614990, г. Пермь, ул. Букирева, 15; E-mail: lyubimov@psu.ru

Marie-Christine Néel, Professor, Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse, UMR 1114 EMMAH, F-84018 Avignon, France; E-mail: mcneel@avignon.inra.fr