Alkalmazott Matematikai Lapok **36** (2019), 205–211.
DOI 10.37070/AML.2019.36.2.04

A TÖRTRENDŰ DIFFÚZIÓ MODELLJEI ÉS SZIMULÁCIÓJA

IZSÁK FERENC, SZEKERES BÉLA JÁNOS

A törtrendű diffúzió modelljeit és a kapott egyenletek numerikus megoldását tárgyaljuk. Kitérünk több alkalmazásra, az egyenletek megoldása kapcsán pedig hatékony eljárásokat mutatunk, és megemlítjük a terület néhány nyitott problémáját.

1. Bevezetés

A klasszikus diffúzió a természettudományos modellekben igen gyakran megfigyelhető dinamika. Ezt egy diszkrét modellben például az jellemzi, hogy egy részecske t idő alatti elmozdulásnégyzetének $\langle x^2(t) \rangle$ várható értéke arányos az eltelt idővel. A diffúziós folyamat másik alapvető tulajdonsága, hogy az abban részt vevő részecskék Brown-mozgást végeznek, vagyis az adott idő alatt történő elmozdulás normális eloszlású. Az utóbbi évtizedek pontosabb mérési eljárásai lehetővé tették, hogy a fenti összefüggéseket valóban megvizsgálják. Több esetben azt a meglepő eredményt kapták, hogy ezek nem teljesülnek.
A leginkább látványos példák a populációdinamikához köthetők. Ragadozó állatok, illetve egyéb táplálékkereső egyedek mozgását (műholdhoz kapcsolt szenzorokkal) vizsgálva azt kapták, hogy az adott idő alatt mért elmozdulások eloszlása polinomiálisan csökkenő sűrűségfüggvényekkel közelíthető. A tesztelésen túl a polinom fokát is becsülik [5], [9].

Más típusú vizsgálatok azt mutatták, hogy $t^\alpha \sim \langle x^2(t) \rangle$ teljesül valamilyen α állandóval. Amennyiben $\alpha > 1$, a dinamikát szuperdiffúziónak, ha $\alpha < 1$, akkor szubdiffúziónak nevezzük.

Szuperdiffúziót észleltek még ionok plazma halmazállapotú közegben történő mozgása esetén [16], továbbá emberek és bankjegyek mozgását nyomon követve [1]. A biokémia témakörébe tartozó számos hasonló megfigyelésről részletes áttekintést ad a [8] munka több táblázata.

2. A törtrendű diffúzió modelljei

A Fick-törvény szerint minden egyes pontban a fluxus sűrűsége az ottani koncentrációgradiens ellentettjével arányos. Ha azonban egy diszkrét modell keretében gyors mozgású részecskéket is feltételezünk, akkor előfordulhat, hogy a fluxushoz olyan récsecskék is hozzájárulnak, amelyek nem a vizsgált pontban vannak. Így a folyamatot nem tudjuk deriváltakkal modellezni, és a megfelelő egyenletek felírásához az ún. nemlokális analízist kell használnunk, ld. [3], [4]. Ez alkalmasnak tűnik a szuperdiffúzió jelenségének modellezésére.

Mivel a diffúziós egyenletben szereplő Laplace-operátor az egydimenziós esetben kétszeres deriváltat jelent, a törtrendű diffúzió kézenfekvő modellje lehet a törtrendű deriváltat tartalmazó parciális differenciálegyenlet. Ezen operátorokra több, egymással nem egyenértékű definíció is született [7] (már Leibniz foglalkozott ezzel); példaként az alábbit $a, b \in \overline{\mathbb{R}}$ esetén olyan $f : [a, b) \to \mathbb{R}$ függvényekre értelmezzük, amelyekre minden $x \in (a, b)$ esetén a megadott hozzárendelés értelmes, továbbá $n = \lceil \alpha \rceil$.

– A *Riemann–Liouville-derivált*, valamint szimmetrizált verziója:

$$\partial^\alpha_{\mathrm{RL}} f(x) = \partial^n \left(\frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^x (x-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau)\,\mathrm{d}\tau \right),$$

$$_s\partial^\alpha_{\mathrm{RL}} f(x) = \frac{1}{2\Gamma(n-\alpha)}$$

$$\partial^n \left(\int_a^x (x-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau)\,\mathrm{d}\tau + (-1)^n \int_x^b (\tau - x)^{n-\alpha-1} f(\tau)\,\mathrm{d}\tau \right).$$

Érdekes feladat belátni, hogy ez egész n esetén azonos a klasszikus deriválttal.

Egy korlátos tartományon adott feladat esetén valamilyen peremfeltételt is meg kell adnunk. A funkcionálanalízis szemszögéből nézve egy differenciáloperátort úgy kell definiálni, hogy rögzítjük annak értelmezési tartományát.
Az $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ korlátos Lipschitz-tartományon (amelynek pereme lokálisan egy Lipschitz-függvény grafikonja) homogén Dirichlet-peremfeltétellel definiált $-\Delta_{\mathcal{D}}$ negatív Laplace-operátor értelmezési tartománya a $H^1_0(\Omega) \cap H^2(\Omega)$ halmaz. Ismert, hogy ennek inverze kompakt, önadjungált és pozitív $(-\Delta_{\mathcal{D}})^{-1} : L_2(\Omega) \to L_2(\Omega)$ típusú operátorként értelmezhető, amelynek (és így az eredeti $-\Delta_{\mathcal{D}}$ operátornak is) egyértelműen definiálható bármilyen hatványa. Ezek alapján az α-drendű deriváltra egy újabb definíciót adunk.

– A homogén peremfeltételhez tartozó *törtrendű Laplace-operátor*:

$$(\Delta_{\mathcal{D}})^{\frac{\alpha}{2}} f(x) := -(-\Delta_{\mathcal{D}})^{\frac{\alpha}{2}} f(x).$$

A fentieknek megfelelően az ezen témával foglalkozó cikkek nagy részében az egydimenziós esetet elemezve az alábbi feladat numerikus megoldásával foglalkoznak.

$$\begin{cases} \partial_t u(t,x) =_s \partial^\alpha_{x,\mathrm{RL}} u(t,x) + g(t,x), \quad (t,x) \in (0,T) \times (a,b) \\ u(0,x) = u_0(x), \quad x \in [a,b] \\ u(t,a) = u_a(t), u(t,b) = u_b(t), \quad t \in [0,T], \end{cases} \tag{1}$$

ahol $u_0 \in C[a,b], u_a, u_b \in C[0,T]$ és $g \in C([0,T] \times [a,b])$ adott függvények.

Homogén Dirichlet-peremfeltétel esetén pedig adott $u_0 \in C[a,b]$ függvény esetén a következő egyszerű feladatot írjuk fel:

$$\begin{cases} \partial_t u(t,x) = (\Delta_{x,\mathcal{D}})^{\frac{\alpha}{2}} u(t,x), & (t,x) \in (0,T) \times (a,b) \\ u(0,x) = u_0(x), & x \in [a,b]. \end{cases} \tag{2}$$

3. A modellek vizsgálata

Fontos kérdés, hogy a fenti problémák korrekt kitűzésűek-e. Bár az első modell esetén ezt az állítást tudomásunk szerint nem írták le expliciten, a [6] munkában a jobb oldalon levő operátorra vonatkozó peremérték-feladat egyértelmű megoldhatóságából következik. A második modell esetén $(-\Delta_\mathcal{D})^{-1}$ kompaktsága, valamint a [11] könyv 8. fejezetének elmélete ad igenlő választ.

Nem definiáltuk, mit értünk jó, vagy éppen nem jó modellen. Ennek ellenére azt mondhatjuk, hogy az első modellel kapcsolatban több fenntartásunk is lehet. Máris látszik, hogy nincs nyilvánvaló többdimenziós általánosítása, továbbá nem sikerült a maximumelvet sem igazolni, ellentétben a második modellel [10], amely ebből a két szempontból megfelelőbbnek látszik.

Áttekintjük a különböző modellekhez tartozó numerikus módszereket. Az első hatékony eljárást a [12] munkában közölték, amelynek alapgondolata, hogy el kell tolni a véges differenciában szereplő együtthatókat valamilyen $p \in \mathbb{Z}^+$ paraméterrel:

$$\partial^\alpha_{\mathrm{RL}} f(x) \approx \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\left[\frac{x-a}{h}\right]+p} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} f(x-(k-p)h). \tag{3}$$

Ha ugyanis ezt nem tesszük, akkor a térbeli differenciáloperátorok (egyébként pontos) közelítésének és az idő szerinti deriváltra vonatkozó implicit Euler-módszernek a kombinációjából is instabil módszert nyerünk.

A fentiek alapján az (1) és (2)-beli modellekhez használt numerikus módszerek leíráshoz használjuk az $\mathbf{u}^t$ jelölést, amely $u(t,\cdot)$ közelítése akár egy felosztás pontjaiban, akár egy végeselem térben. Mindkét feladat térbeli diszkretizációja után a $\partial_t \mathbf{u}^t = A_h \mathbf{u}^t$ differenciálegyenletet kapjuk, ahol

- az (1)-beli feladat esetén az A_h mátrixban (3)-beli együtthatók szerepelnek,
- a (2) feladat térbeli diszkretizációja után a fenti A_h mátrixnak egyszerűen választhatjuk a $\Delta_\mathcal{D}$-hez tartozó mátrix $\frac{\alpha}{2}$-edik hatványát.

Mindkét esetben telt (azaz nem ritka) mátrixot kapunk, amely a nem lokális tulajdonságnak felel meg. A kapott differenciálegyenlet-rendszereket a szokásos közelítő módszerekkel oldhatjuk meg. Az első eset analíziséhez a [12] és [17], a másodikéhoz a [14] és [15] munkákat idézzük.

4. További kérdések, nyitott problémák

Az első problémakör az inhomogén Dirichlet-peremfeltételhez kapcsolódik. Hogyan lehet ezt modellezni, egy ennek megfelelő matematikai feladatot felírni? A kérdés igazán két- és háromdimenziós esetben érdekes. A funkcionálanalízis eszközeivel sem látszik nyilvánvalónak a megoldás, hiszen az inhomogén peremfeltételnek megfelelő értelmezési tartományt véve az nem lesz altér. Ha pedig nem veszünk semmilyen megszorítást, akkor az így kapott Laplace-operátor nem is pozitív, az inverze pedig nem is létezik.

A második problémakör a Neumann-féle peremfeltétel beépítésével kapcsolatos. A gyakorlatban ezt lehet leggyakrabban használni, mert ez a peremen mért fluxusnak felel meg. Ha például zárt térben (kémcső, lombik, tartály) végbemenő anyagtranszportot modellezünk, akkor annak határán mindig homogén Neumann-féle peremfeltételt kell vennünk. Az egydimenziós esetben sikerült a homogén feltételt a modellbe beépíteni [13], azonban a többdimenziós eset és az inhomogén peremfeltételek kezelése továbbra is nyitott kérdés. Megjegyezzük, hogy még a megfelelő elliptikus feladatok esetén is a legfrisebb elméleti eredmények homogén Dirichlet-peremfeltételekre vonatkoznak [2].

Köszönetnyilvánítás

A szerzők köszönetet mondanak kutatásuk támogatásáért, amely jórészt a K112157. sz. OTKA-projekt keretében történt. Szekeres Béla János munkáját az Európai Unió is támogatta, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával az EFOP-3.6.1.-16-2016-0023. pályázat keretében.

Hivatkozások

[1] Brockmann, D., Hufnagel, L., and Giesel, T.: *The scaling laws for human travel*, Nature, Vol. **439**, pp. 462-465 (2006), DOI: 10.1038/nature04292

[2] Caffarelli, L. A. and Stinga, P. R.: *Fractional elliptic equations, Caccioppoli estimates and regularity*, Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire, Vol. **33** No. **3** pp. 767-807 (2016), DOI: 10.1016/j.anihpc.2015.01.004

[3] D'Elia, M. and Gunzburger, M.: *The fractional Laplacian operator on bounded domains as a special case of the nonlocal diffusion operator*, Comput. Math. Appl., Vol. **66** No. **7**, pp. 1245-1260 (2013), DOI: 10.1016/j.camwa.2013.07.022

[4] Du, Q., Gunzburger, M., Lehoucq, R., and Zhou, K.: *Analysis and approximation of nonlocal diffusion problems with volume constraints*, SIAM Rev., Vol. **54** No. **4**, pp. 667-696 (2012), DOI: 10.1137/110833294

[5] Edwards, A. M., Phillips, R. A., Watkins, N. W., Freeman, M. P., Murphy, E. J., Afanasyev, V., Buldyrev, S. V., da Luz, M. G. E., Raposo, E. P., Stanley, H. E., and Viswanathan, G. M.: *Revisiting Lévy flight search patterns of wandering albatrosses, bumblebees and deer*, Nature, Vol. **449**, pp. 1044-1048 (2007), DOI: 10.1038/nature06199

[6] Ervin, V. J. and Roop, J. P.: *Variational formulation for the stationary fractional advection dispersion equation*, Numer. Meth. Part. D. E., Vol. **22** No. **3**, pp. 558-576 (2006), DOI: 10.1002/num.20112

[7] Hilfer, R.: *Threefold Introduction to Fractional Derivatives*, in: Klages, R., Radons, G., and Sokolov, I. (Hg.), *Anomalous Transport: Foundations and Applications*, pp. 17-73, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim (2008). DOI: 10.1002/9783527622979.ch2

[8] Höfling, F. and Franosch, T.: *Anomalous transport in the crowded world of biological cells*, Rep. Prog. Phys., Vol. **76** No. **4**:046602 (2013). DOI: 10.1088/0034-4885/76/4/046602

[9] Humphries, N. E.: *Environmental context explains Lévy and Brownian movement patterns of marine predators*, Nature, pp. 1066-1069, DOI: 10.1038/nature09116

[10] Jia, J. and Li, K.: *Maximum principles for a time?space fractional diffusion equation*, Appl. Math. Lett., Vol. **62**, pp. 23-28 (2016),
DOI: 10.1016/j.aml.2016.06.010

[11] Larsson, S. and Thomée, V.: *Partial differential equations with numerical methods*, Vol. **45** von *Texts in Applied Mathematics*, Springer-Verlag, Berlin (2009), paperback reprint of the 2003 edition. DOI: 10.1007/978-3-540-88706-5

[12] Meerschaert, M. M. and Tadjeran, C.: *Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations*, J. Comput. Appl. Math., Vol. **172** No. **1**, pp. 65-77 (2004). DOI: 10.1016/j.cam.2004.01.033

[13] Szekeres, B. J. and Izsák, F.: *A finite difference method for fractional diffusion equations with Neumann boundary conditions*, Open Math., Vol. **13**, pp. 581-600 (2015), DOI: 10.1515/math-2015-0056

[14] Szekeres, B. J. and Izsák, F.: *Finite difference approximation of space-fractional diffusion problems: the matrix transformation method*, submitted.

[15] Szekeres, B. J. and Izsák, F.: *Finite element approximation of fractional order elliptic boundary value problems*, J. Comput. Appl. Math., Vol. **292**, pp. 553-561 (2016), DOI: 10.1016/j.cam.2015.07.026

[16] Treumann, R. A.: *Theory of super-diffusion for the magnetopause*, Geophys. Res. Lett., Vol. **24** No. **14**, pp. 1727-1730 (1997), DOI: 10.1029/97GL01760

[17] Zhou, H., Tian, W.-Y., and Deng, W.: *Quasi-compact finite difference schemes for space fractional diffusion equations*, J. Sci. Comput., Vol. **56** No. **1**, (2013), DOI: 10.1007/s10915-012-9661-0

Izsák Ferenc 1976-ban Zalaegerszegen született. Az ELTE TTK-n szerzett matematikus-német szakfordító diplomát 2000-ben, majd ugyanott az Alkalmazott Matematika Doktori Program keretében 2005-ben PhD-fokozatot. 2008-ban Farkas Gyula-díjat kapott, majd 2015-ben habilitált az ELTE TTK-n. Ezen intézmény oktatója most is, 2004-2009-ig tanársegédként, jelenleg adjunktusként. Közben részmunkaidőben a University of Twente kutatási asszisztense, majd az MTA-ELTE NumNet Kutatócsoport tagja. Jelenlegi fő kutatási területe a parciális differenciálegyenletek numerikus megoldásának analízise és az ezekkel kapcsolatos modellezés kérdései. Összesen 36 referált tudományos cikk, 1 könyvrészlet és 3 felsőoktatási jegyzet szerzője vagy társszerzője, amelyekre 256 független hivatkozás történt.

IZSÁK FERENC
ELTE TTK Matematikai Intézet
Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék
& MTA Numerikus Analízis és Nagy Hálózatok Kutatócsoport
1117 Budapest, Pázmány P. sétány 1/C.
izsakf@cs.elte.hu

Szekeres Béla János 1987-ben született. 2012-ben diplomázott az ELTE Alkalmazott matematikus MSc szakán. 2017-ben szerzett PhD fokozatot az ELTE TTK Matematika Doktori Iskola, Alkalmazott Matematika Programjában.

Dolgozott az MTA-ELTE Numerikus Analízis és Nagy Hálózatok Kutatócsoportjában, illetve az ELTE Kémia Intézetében tudományos segédmunkatársként.

Kutatási területe a törtrendű parciális differenciálegyenletek numerikus megoldása, ezenkívül a Kémia Intézet munkatársaként több projektben vett részt, jelenleg is foglalkozik kvantumkémiai szimulációkkal. Azt MTMT rendszere szerint 10 közleménye van.

Több konferencián és külföldi intézményben tartott előadást, például Szegeden (CSM3, 2014), a Károly Egyetemen Prágában (13th EFEF, 2015), Tátra-Podbanszkon, (ALGORITMY 2016), Bonnban (13th EFEF, 2016), illetve Budapesten (3rd AMOC 2018 Conference).

Jelenleg az ELTE Informatika Karának Numerikus Analízis Tanszékén dolgozik adjunktusként.

SZEKERES BÉLA JÁNOS

ELTE IK, Numerikus Analízis Tanszék
1117 Budapest, Pázmány P. sétány 1/C.
szekeres@inf.elte.hu

MODELING AND SIMULATION OF FRACTIONAL DIFFUSION

Ferenc Izsák, Béla János Szekeres

A short overview is given on the models of the fractional order diffusion and some numerical methods for the related problems is discussed. We mention more applications and important open problems in this field.

Keywords: fractional order diffusion, fractional Laplacian, matrix transformation methods.

Mathematics Subject Classification (2000): 35R11, 65M06, 65M12.