Асимптотики и невязка одномерного нелокального уравнения фишера-колмогорова-петровского-пискунова с дробной производной

Прозоров А.А.
aap51@tpu.ru

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор, Трифонов А.Ю.,
Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Аннотация: построены асимптотические решения нелокального одномерного уравнения Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова с дробными производными в операторе диффузии. Дробная производная определяется в соответствии с подходами Вейля, Грюнвальда–Летникова и Лиувилля. Асимптотические решения строятся в классе функций, которые являются возмущением найденного точного квазистационарного решения и на больших временах стремятся к этому квазистационарному решению. Показано, что наличие дробных производных приводит к дрейфу центра масс начального распределения и нарушает его симметрию.

Реакционно-диффузионные кинетические уравнения с нелокальным взаимодействием используются в нелинейных моделях, описывающих распространение импульсов в активных средах, формирование структур и другие явления в системах с дальнодействием

Многие реакционно-диффузионные модели представляют собой обобщения известной модели Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова (модель Фишера–КПП) [1,2], в которой реакция моделирует увеличение числа элементов системы, классическая фиковская диффузия описывает распространение частиц в пространстве, нелинейность имеет смысл потерь. В нелокальных обобщениях этой модели потери описываются интегральным выражением, учитывающим коллективные эффекты взаимодействия в системе.

В некоторых случаях свойства среды, в которой происходит эволюция системы, а также коллективные эффекты могут изменить фиковскую диффузию, приводя к супер- или субдиффузии, т.е., к увеличению или уменьшению подвижности частиц в системе (особей в популяции), возникновению асимметрии. Эти явления называют аномальной диффузией и моделируют уравнениями с дробными производными

Существует несколько различных определений дробной производной, которая представляет собой интегральный оператор (см. [3] и цитируемую там литературу).

В данной работе для решения нелокального одномерного уравнения Фишера–КПП с дробными производными в операторе диффузии применяется асимптотический метод, предложенный в [4]. Дробная производная в работе определяется в соответствии с подходами Вейля, Грюнвальда–Летникова и Лиувилля для периодических функций [3]. Полученные решения являются пространственно однородными и монотонно зависят от времени.

Классическое одномерное уравнение Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова [1,2] для плотности распределения частиц в системе $u(x,t)$, зависящей от пространственной координаты x и времени t, записывается в виде

$$u_t = Du_{xx} + au - bu^2, \quad (1)$$

где D – постоянный коэффициент диффузии; a – темп роста числа частиц; b – коэффициент квадратичных потерь.

В нелокальном обобщённом уравнении (1) локальные квадратичные потери bu^2 заменяются интегральным выражением

$$u(x,t)\int b_\gamma(x,y)u(y,t)dy\,, \qquad (2)$$

учитывающим нелокальные эффекты взаимодействия в системе посредством функции влияния $b_\gamma(x,y)$. Параметр γ характеризует эффективную область взаимодействия между частицами так, что при $\gamma \to 0$ справедливо $b_\gamma(x,y) \to b\,\delta(x-y)$, а выражение (2) переходит в $bu^2(x,t)$. Будем рассматривать распределение $u(x,t)$ на отрезке $x \in [-l,l]$. Тогда одномерное уравнение Фишера–КПП с квадратичными нелокальными потерями (2) и нормальной диффузией запишется в виде

$$u_t(x,t) = Du_{xx}(x,t) + au(x,t) - u(x,t)\int_{-l}^{l} b_\gamma(x,y)u(y,t)dy\,. \qquad (3)$$

Как отмечено во введении, аномальная диффузия плотности $u(x,t)$ моделируется выражением с дробной производной $Du_\alpha(x,t)$ вместо выражения $Du_{xx}(x,t)$, которое получается из закона Фика. Вещественный параметр α есть порядок дробной производной, $\alpha = 2$ соответствует нормальной диффузии.

Заменив нормальную диффузию в уравнении (3) выражением $Du_\alpha(x,t)$, получим нелокальное обобщенное уравнение Фишера–КПП с аномальной диффузией

$$u_t(x,t) = Du_\alpha(x,t) + au(x,t) - u(x,t)\int_{-l}^{l} b_\gamma(x,y)u(y,t)dy\,. \qquad (4)$$

Здесь и далее дробная производная понимается в смысле производной Вейля для периодических функций [14]. Функция влияния предполагается чётной, $b_\gamma(x) = b_\gamma(-x)$, и разложимой в ряд Фурье:

$$b_\gamma(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} b_m e^{i\omega_m x}\,, \qquad b_m = \frac{1}{2l}\int_{-l}^{l} b(z)\,e^{-i\omega_m z}\,dz \qquad (2)$$

где $\omega_m = \pi m / l$. Будем искать решение уравнения (1) в виде разложения в ряд Фурье

$$u(x,t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \beta_m(t)e^{i\omega_m x}\,, \qquad \beta_m(t) = \frac{1}{2l}\int_{-l}^{l} u(z,t)\,e^{-i\omega_m z}\,dz\,. \qquad (3)$$

Подставим разложения Фурье (2), (3) в уравнение (1). Для этого вычислим дробную производную $u_\alpha(x,t)$ с помощью разложения (3) в соответствии с правилом вычисления дробной производной по Вейлю [3]:

$$u_\alpha(x,t)=\sum_{m=-\infty}^{\infty}(i\,\omega_m)^\alpha\beta_m(t)\,e^{i\omega_m x}\quad . \quad (4)$$

Здесь под i^α понимается главная ветвь корня $i^\alpha=e^{i\frac{\pi\alpha}{2}}$. Продифференцируем соотношение (3) по времени, воспользовавшись уравнением (1) и разложениями (2) и (3) для коэффициентов $\beta_k(t)$ (3) получим систему дифференциальных уравнений

$$\dot\beta_k=\overline{a}_k\beta_k-\sum_{j=-\infty}^{\infty}\beta_{k-j}b_{k-j}\beta_j,\quad k=\overline{-\infty,\infty}.$$

(10)

где $\overline{a}_k=D\left(i\omega_k\right)^\alpha+a.$ Система (5) допускает решение вида

$$\beta_k(t)=\beta_0(t)\delta_{k0},\qquad \beta_0(t)=\frac{\beta_{00}e^{at}}{1+\dfrac{b_0\beta_{00}}{a}(e^{at}-1)}\qquad \beta_k\,|_{t=0}=\beta_{00}\delta_{k0}. \quad (6)$$

Сделаем в системе уравнений (5) замену переменных $t=T\tau$ (T – характерное время эволюции системы). Тогда для правой части системы (5) запишем $\dot\beta_k=\frac{1}{T}\frac{d\beta_k}{d\tau}$. Будем искать асимптотические решения β_k получившейся системы при $T\to\infty$ в виде

$$\beta_k(t)=\beta_k^{(0)}(\theta,\tau)+\frac{1}{T}\beta_k^{(1)}(\theta,\tau)+\ldots, \quad (7)$$

Функции $\beta_k^{(m)}(\theta,\tau)$ подлежат определению. Переменную τ в системе (7) можно интерпретировать как «медленное время», а переменную $\theta=\phi(\tau)T$ как «быструю» переменную. С учетом правил дифференцирования сложной функции получим

$$\left[\varphi_\tau\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{T}\frac{\partial}{\partial\tau}\right]\left(\beta_k^{(0)}+\frac{1}{T}\beta_k^{(1)}+\ldots\right)=$$

$$=\overline{a}_k\left(\beta_k^{(0)}+\frac{1}{T}\beta_k^{(1)}+\ldots\right)-\sum_{p=-\infty}^{\infty}b_p\left(\beta_{k-p}^{(0)}+\frac{1}{T}\beta_{k-p}^{(1)}+\ldots\right)\left(\beta_p^{(0)}+\frac{1}{T}\beta_p^{(1)}+\ldots\right).$$

Приравняв слагаемые при одинаковых степенях $1/T$ и решив полученные уравнения , запишем

$$\beta_k^{(0)}(\theta,\tau)=\beta_0^{(0)}(\theta,\tau)\delta_{k0},\quad \beta_0^{(0)}(\theta,\tau)=\frac{\beta_{00}e^{\theta}}{1+\dfrac{b_0\beta_{00}}{a}(e^{\theta}-1)}=\frac{\beta_{00}e^{at}}{1+\dfrac{b_0\beta_{00}}{a}(e^{at}-1)}.$$

(8)

$$\beta_j^{(1)}(\theta,\tau)=\frac{\beta_{0j}^{(1)}e^{\overline{a}_j\theta/a}}{\left(1+\dfrac{b_0\beta_{00}^{(0)}}{a}(e^{\theta}-1)\right)^{(b_j+b_0)/b_0}}=\frac{\beta_{0j}^{(1)}e^{\overline{a}_j t}}{\left(1+\dfrac{b_0\beta_{00}^{(0)}}{a}(e^{at}-1)\right)^{(b_j+b_0)/b_0}}.$$

(20)

Здесь $\varphi(\tau) = a\tau, \quad \theta = \varphi(\tau)T = at.$ Разложение (7) в силу (3) индуцирует разложение решения:

$$u(x,t) = u^{(0)}(x,t) + \frac{1}{T}u^{(1)}(x,t), \tag{9}$$

где $u^{(0)}(x,t)$ определено в (8), а $u^{(1)}(x,t)$ вещественна и определена выражением

$$u^{(1)}(x,t) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{\beta_{0j}^{(1)} e^{\tilde{a}_j t} e^{i\omega_j x}}{\left(1 + \frac{b_0 \beta_{00}^{(0)}}{a}(e^{at} - 1)\right)^{(b_j + b_0)/b_0}} = \frac{\beta_{00}^{(1)} e^{at}}{\left[1 + \frac{b_0 \beta_{00}^{(0)}}{a}(e^{at} - 1)\right]^2} + 2\sum_{j=1}^{\infty} \frac{\beta_{0j}^{(1)} e^{\tilde{\Omega}_j^{(\alpha)} t} \cos\left[\Omega_j^{(\alpha)} t + \omega_j x\right]}{\left[1 + \frac{b_0 \beta_{00}^{(0)}}{a}(e^{at} - 1)\right]^{(b_j + b_0)/b_0}}.$$

Здесь $\Omega_j^{(\alpha)} = D\left|\frac{j\pi}{l}\right|^{\alpha} \sin\left(\frac{\pi}{2}\alpha\right)\operatorname{sign}(j)$.

Класс функций вида (9) естественно назвать классом функций, близких на больших временах к точному решению .

3. Моменты плотности распределения

Полученные результаты позволяют с точностью $O(1/T^2)$ в явном виде вычислить моменты плотности распределения $u(x,t)$:

$$\sigma(t) = \int_{-l}^{l} u(x,t)dx; \quad X(t) = \frac{1}{\sigma(t)}\int_{-l}^{l} xu(x,t)dx; \quad D(t) = \frac{1}{\sigma(t)}\int_{-l}^{l} (x - X(t))^2 u(x,t)dx.$$

Поставим для уравнения (1) задачу Коши, положив

$u(x,t)|_{t=0} = \phi(x) = \beta_{00} + \frac{1}{T}\exp(-x^2)$, $\beta_{00} = 1$, $b_\gamma(x,y) = b_0 \exp\{-(x-y)^2\}$, $a = 0{,}5$, $T = 20$, $D = 0{,}01$, $b_0 = 1$.

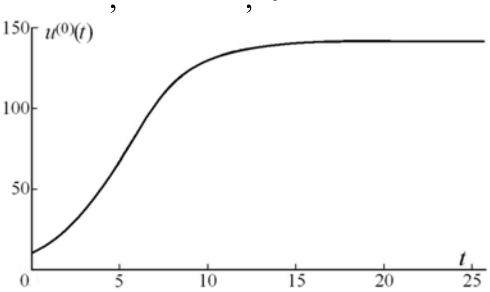

Рис. 1. График функции $u^{(0)}(t) = \beta_0(t)$

С точностью $O(1/T^2)$ найдём плотность распределения $u(x,t)$ и её моменты $\sigma(t)$, $X(t)$, $D(t)$ в зависимости от порядка дробной производной. Проиллюстрируем эту зависимость графически. График функции $u^{(0)}(t)$ приведен на рис. 1.

Графики функции $u(x,t)$ для различных α приведены на рис.2.

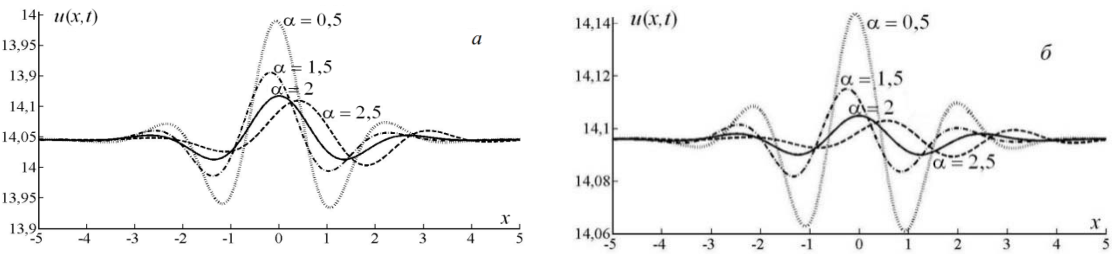

Рис. 2. Плотность распределения $u(x,t)$ *в моменты времени* $t=15$ *(а),* $t=20$ *(б) для различных α.*

Как видно из рис. 2, из начального симметричного распределения гауссовского типа с одним пиком в процессе эволюции, как и в случае обычной диффузии [2], формируется распределение с дополнительными пиками, поведение которых зависит от порядка дробной производной. Высота этих пиков увеличивается по сравнению с высотой пиков при обычной диффузии, и распределение перестает быть симметричным. В случае же обычной диффузии график симметричен относительно начала координат. Чем ниже порядок дробной производной, тем больше смещение графика по сравнению с обычной диффузией и сильнее отклонение от стационарного состояния. Наличие дробных производных приводит к дрейфу центра масс популяции рис. 3. В рассматриваемом примере дисперсия функции $u(x,t)$ слабо меняется в зависимости от порядка дробной производной, поэтому на рис. 4 приведен графики среднеквадратичных отклонений при $\alpha=2{,}5$ и $\alpha=0{,}5$.

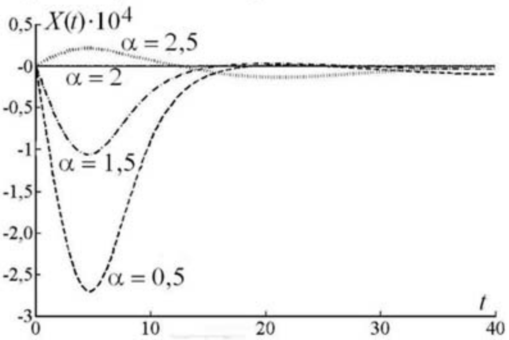

Рис. 3. Графики первых моментов $X(t)$ *при различных α.*

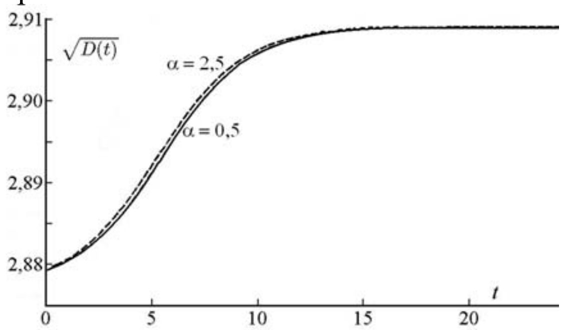

Рис. 4. Графики среднеквадратичных отклонений $\sqrt{D(t)}$ *при* $\alpha=2{,}5$ *и* $\alpha=0{,}5$

Подставим функцию $u(x,t)$ в уравнение (1) и получим

$$u_t(x,t)-Du_\alpha(x,t)-au(x,t)+u(x,t)\int_{-l}^{l}b_\gamma(x-y)u(y,t)dy=g(x,t)$$

Функция $g(x,t)$ называется невязкой уравнения и имеет вид:

$$g(x,t)=\frac{1}{T^2}\sum_{j,k=-\infty}^{\infty}\frac{\beta_{0k}^{(1)}\beta_{0j}^{(1)}e^{(\bar{a}_j+\bar{a}_k)t+i(\omega_k+\omega_j)x}b_j}{\left[1+\frac{b_0\beta_{00}^{(0)}}{a}(e^{at}-1)\right]^{2+\frac{(b_j+b_k)}{b_0}}}.$$

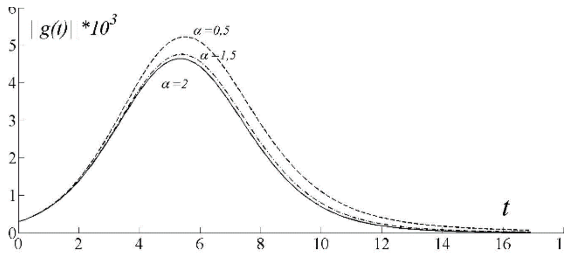

Рис.5 График нормы функции $g(x,t)$

На рис.5 изображена норма $\| g(x,t) \|$ – в пространстве $L_1[-l,l]$
Нетрудно заметить, что норма невязки стремится к нулю, а следовательно приближенное решение стремится к точному

Список литературы:

1. Fisher R.A. The wave of advance of advantageous genes // Annu. Eugenics. – 1937. – V. 7. – P. 255–369.
2. Колмогоров А.Н., Петровский Н.Г., Пискунов Н.С. // Бюл. МГУ. Сер. А. Математика и Механика. – 1937. – Т. 1, № 6. – С. 1-16.
3. Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. – Минск: Наука и техника, 1987. – 688 с.
4. Прозоров А.А., Трифонов А.Ю., Шаповалов А.В Асимптотики одномерного нелокального уравнения Фишера-Колмогорова-Петровского-Пискунова с аномальной диффузией//Известия вузов физика.-2015.- Т.7.- (в печати)

Ab initio исследование диффузии водорода в титане

Т.И. Спиридонова[1], А.В. Бакулин[2,3], С.Е. Кулькова[2,3]
tistpu@mail.ru

Научный руководитель: профессор, д.ф.м.н. С.Е. Кулькова
[1] Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
[2] Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
Россия, г.Томск, пр. Академический, 2/4, 634055
[3] Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

Титан, являясь элементом IVB группы, активно используется в различных областях промышленности и медицине. Наличие легких примесей оказывает влияние на многие свойства материала. В частности наличие даже небольших концентраций водорода может приводить к ухудшению механических свойств материалов. Взаимодействие водорода с металлами широко изучалось на протяжении прошлого века, в том числе, и в материалах с ГПУ структурой [1-3], однако полученные результаты достаточно противоречивы в отношении предпочтительности диффузионных путей и высоты энергетического барьера. Понимание механизмов диффузии водорода, а также влияния примесей замещения на его диффузию в металлах и сплавах необходимо для улучшения механических свойств, функциональных материалов. Целью настоящей работы являлось изучение диффузии водорода в титане, а также влияния примесей на энергию активации и предпочтительность диффузионных путей.