УДК 62-83:531.3

В.А. Селезнёв, Е.В. Исаева

Исследование численных реализаций CTRW-модели субдиффузии на плоскости

Исследуются два численных метода, предложенных авторами для реализации CRW-модели субдиффузии на плоскости, – метода прямого стохастического моделирования и сеточного метода решения интегрального уравнения субдиффузии. Показано хорошее совпадение численных результатов, полученных этими методами. Указаны преимущества и недостатки каждого из методов.

Ключевые слова: CTRW-модель субдиффузии.

Постановка задачи

CTRW (Continuous Time Random Walk) – модель процесса переноса частиц – реализуется интегральным уравнением [1]

$$p(\bar{x},t)=\int_0^t f(t')dt' \int_{R^n} \lambda(\bar{x}')p(\bar{x}-\bar{x}',t-t')d\bar{x}'+p_0(\bar{x})F(t), \quad F(t)=1-\int_0^t f(\tau)d\tau, \tag{1}$$

в котором искомая нормированная концентрация частиц $p(\bar{x},t)$, $(\bar{x},t)\in R^2\times[0,\infty)$ интерпретируется как плотность вероятности оказаться в соответствующем элементе плоскости в соответствующий момент времени. В уравнении (1) заданными являются: $f(t)$ – плотность вероятности задержки частицы на время t и $\lambda(\bar{x}')$ – плотность вероятности перемещения на вектор $\bar{x}'\in R^2$. Для численной реализации уравнения (1) плоскость разбиваем на ячейки с шагом h. Носитель плотности $\lambda(\bar{x}')$ моделируем двенадцатиточечным шаблоном и $\lambda(\bar{x}')$ представляем в виде

$$\lambda(\bar{x}')=\frac{1}{4}\sigma_1\sum_{i=1}^{2}\big(\delta(\bar{x}-\bar{e}_i h)+\delta(\bar{x}+\bar{e}_i h)\big)+\frac{1}{4}\sigma_2\sum_{i=1}^{2}(\delta(\bar{x}-2\bar{e}_i h)++\delta(\bar{x}+2\bar{e}_i h))+$$
$$+\frac{1}{4}\sigma_3\big(\delta(\bar{x}-h(\bar{e}_1+\bar{e}_2))+\delta(\bar{x}+h(\bar{e}_1+\bar{e}_2))+\delta(\bar{x}+h(\bar{e}_1-\bar{e}_2))+\delta(\bar{x}-h(\bar{e}_1-\bar{e}_2))\big), \tag{2}$$

где $\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3=1$, $\delta(\bar{x})$ – дельта-функция. Функцию плотности вероятности задержек $f(t)$ представим в виде

$$f(t)=\frac{\alpha K}{(K^{1/\alpha}+t)^{\alpha+1}}, \quad K=\frac{2h^2(1-2\sigma_1+4\sigma_2)}{D_\alpha\Gamma(1+\alpha)\Gamma(1-\alpha)}. \tag{3}$$

При таком выборе $f(t)$ уравнение (1) описывает субдиффузию [2] и с учётом представления (2) принимает вид

$$p(\bar{x},t)=p_0(\bar{x})F(t)+\frac{1}{4}\int_0^t(\sigma_1\cdot\sum_{i=1}^{2}(p(\bar{x}-\bar{e}_i h,t-t')+p(\bar{x}+\bar{e}_i h,t-t'))+$$
$$+\sigma_2\cdot\sum_{i=1}^{2}(p(\bar{x}-2\bar{e}_i h,t-t')+p(\bar{x}+2\bar{e}_i h,t-t'))+\sigma_3\cdot(p(\bar{x}-h(\bar{e}_1+\bar{e}_2),t-t')+ \tag{4}$$
$$+p(\bar{x}+h(\bar{e}_1+\bar{e}_2),t-t')+p(\bar{x}+h(\bar{e}_1-\bar{e}_2),t-t')+p(\bar{x}-h(\bar{e}_1-\bar{e}_2),t-t')))\cdot f(t')dt',$$

где $\bar{x}$ – координаты ячеек.

Уравнение (4) решаем методом прямого стохастического моделирования и сеточным методом, в котором интеграл считаем по формуле трапеции, а сеточное решение ищется по неявной схеме. Так как процесс в начальный момент времени задаётся финитной функцией $p_0(\bar{x})$, а частицы достаточно долго остаются внутри прямоугольника, стороны которого далеки от начала координат, то на границе этого прямоугольника принимаем условие симметричного отражения с учётом строения носителя $\lambda(\bar{x}')$.

Прямое стохастическое моделирование субдиффузии

Построим имитационную модель субдиффузии как прямую реализацию блуждания частиц, основанную на положениях CTRW-модели [1]. Обозначим $p_0(\bar{x}_{ij})$ – ячеистое представление начальной концентрации, K – количество частиц в ячейке $\bar{x}_{ij}$ в момент времени t. При $t=0$

$$k_{ij}(0)=\frac{K}{\sum\limits_{ij} p_0(\bar{x}_{ij})}\cdot p_0(\bar{x}_{ij})=S\cdot p_0(\bar{x}_{ij}). \tag{5}$$

Для определения численного приближения функции $p(\bar{x},t)$ в момент времени T реализуем следующий процесс. Для каждой частицы генерируется последовательность времён задержек $t_1,t_2,...,t_j,t_{j+1}$ так, что $t_1+t_2+...+t_j \le T$, а $t_1+t_2+...+t_j+t_{j+1}>T$. После каждой из задержек частица перемещается в одну из двенадцати ячеек носителя плотности вероятности $\lambda(\bar{x}')$ согласно представлению (2). На момент времени T фиксируем положение всех K частиц и восстанавливаем приближённое значение $p_K(\bar{x}_{ij},T)$ функции $p(\bar{x},T)$ согласно представлению

$$p_K(\bar{x}_{ij},T)=\frac{k_{ij}(T)}{K}\cdot\sum_{ij} p_0(x_{ij})=\frac{k_{ij}(T)}{S}.$$

Функция $p_K(\bar{x}_{ij},T)$, полученная в результате стохастической реализации блуждания K-частиц, сходится по вероятности к решению уравнения (4) при $K\to\infty$. Доказательство основано на применении схемы Бернулли к K-независимым реализациям блуждания одной частицы. При этом неравенство

$$\max_{ij}\left|p_K(\bar{x}_{ij},T)-p(\bar{x}_{ij},T)\right|\le\varepsilon \tag{6}$$

выполняется с вероятностью P_0 при выполнении условия

$$S\ge\frac{1}{4\varepsilon^2}\sum_{ij} p_0(x_{ij})\left(\Phi^{-1}\left(\frac{1-P_0}{2}\right)\right)^2, \tag{7}$$

где Φ – функция Лапласа. Условие (7) выполнения оценки (6) с вероятностью P_0 представим через оценку снизу количества частиц:

$$K\ge\frac{1}{4\varepsilon^2}\left(\sum_{ij} p_0(x_{ij})\right)^2\left(\Phi^{-1}\left(\frac{1-P_0}{2}\right)\right)^2. \tag{8}$$

Численная реализация уравнения субдиффузии сеточным методом

Пусть h – шаг ячейки, а τ – шаг по времени. С учётом начального условия и граничного условия отражения, о котором говорилось выше, интегральное уравнение (4) приводится к разностной начально-краевой задаче. В силу краткости изложения опускаем представление разностной схемы и приводим лишь оценки устойчивости и сходимости. Обозначим p_h – сеточное представление решения уравнения (4) и $(p)_h$ – решение разностной схемы, тогда выполняется оценка

$$\max_{x_{ij},t\le T}\left|p_h-(p)_h\right|<\frac{4h^{2/\alpha}}{C_0}e^{f_0 T/2}\tau. \tag{9}$$

Решение разностной схемы является устойчивым при выполнении условия $h^{2/\alpha}\le\tau\cdot\mathrm{const}$. С учётом этого условия оценка (9) принимает вид

$$\max_{x_{ij},t\le T}\left|p_h-(p)_h\right|<\tau^2\cdot\mathrm{const}.$$

Сравнительный анализ численных реализаций

Оценим сложности построенных нами численных методов. Для прямого стохастического метода имеем: $\langle x^2(T)\rangle = q(T)h^2$, где q – количество шагов одной частицы. Так как в случае субдиффузии $\left\langle x^2\right\rangle \sim Dt^{\alpha}$, то количество шагов для каждой частицы будет иметь порядок $O(T^{\alpha}/h^2)$. Для K-частиц сложность метода имеет порядок $O(KT^{\alpha}/h^2)$. При заданной вероятности P_0, точности ε с учетом оценки (8) сложность имеет порядок не ниже чем

$$O(KT^{\alpha}/h^2) = O\left(\frac{T^{\alpha}}{4h^2\varepsilon^2}\left(\sum_{ij} p_0(x_{ij})\right)^2 \left(\Phi^{-1}\left(\frac{1-P_0}{2}\right)\right)^2\right).$$

Сеточный метод численного интегрирования уравнения (4) имеет точность порядка $O(\tau^2)$. Вычисление функции $p(\bar{x},T)$ методом прогонки требует помнить все значения до нулевого момента времени. С ростом времени T, согласно $\left\langle x^2\right\rangle \sim Dt^{\alpha}$, процесс неограниченно расширяется на плоскости, поэтому для счета необходимо хранить большой объем информации. Сложность данного алгоритма имеет порядок

$$O(L(N^2+N)/2) = O(L\left(\left(\frac{T}{\tau}\right)^2 + \frac{T}{\tau}\right)/2),$$

где L – количество узлов сетки в R^2.

Для сравнения эффективности численных методов введем отношение $r = t_{cem}/t_{cmox}$ временных затрат методов численного интегрирования и прямого стохастического моделирования. При одинаковой точности этих методов $(\tau = \varepsilon)$

$$r = \frac{t_{cem}}{t_{cmox}} = \frac{2h^2L\left(T^2 + T\varepsilon\right)}{T^{\alpha}}\left(\sum_{ij} p_0(x_{ij})\right)^{-2}\left(\Phi^{-1}\left(\frac{1-P_0}{2}\right)\right)^{-2}. \quad (10)$$

Будем считать, что метод прямого стохастического моделирования много более эффективен, чем сеточный метод решения уравнения (4), когда это отношение много больше 1, для любой заданной точности вычисления ε. Сравнительный анализ представлен в табл. 1 значений r при $P_0 = 0{,}999$, $h = 0{,}01$, $L = 10^4$, $\varepsilon = 0{,}01$ для различных α.

Таблица 1

Отношение временных затрат методов численного интегрирования и прямого моделирования

T	10	50	100	500	1000	10000
$\alpha = 0{,}3$	$r = 9{,}291$	$r = 143{,}2$	$r = 465{,}211$	$r = 7175{,}694$	$r = 23313{,}67$	$r = 1168440{,}695$
$\alpha = 0{,}5$	$r = 5{,}861$	$r = 65{,}486$	$r = 185{,}204$	$r = 2070{,}475$	$r = 5856{,}128$	$r = 185185{,}37$
$\alpha = 0{,}8$	$r = 2{,}938$	$r = 20{,}252$	$r = 46{,}521$	$r = 320{,}907$	$r = 737{,}243$	$r = 11684{,}407$

Обозначим через Δ значения среднеквадратичного отклонения между функциями концентрации, полученными методами сеточного решения уравнения (4) $p_{\text{сет}}(\bar{x},T)$ и прямого стохастического моделирования $p_{\text{стох}}(\bar{x},T)$. Значение Δ для тех же параметров, что в табл. 1, представим в табл. 2.

Таблица 2

Значение среднеквадратичного отношения между функциями концентрации

T / α	10	50	100	500	1000
$\alpha = 0{,}2$	$\Delta = 0{,}0054$	$\Delta = 0{,}0060$	$\Delta = 0{,}0065$	$\Delta = 0{,}0064$	$\Delta = 0{,}0067$
$\alpha = 0{,}4$	$\Delta = 0{,}\ 0053$	$\Delta = 0{,}0061$	$\Delta = 0{,}0066$	$\Delta = 0{,}0066$	$\Delta = 0{,}0069$
$\alpha = 0{,}6$	$\Delta = 0{,}0061$	$\Delta = 0{,}0063$	$\Delta = 0{,}0068$	$\Delta = 0{,}\ 0071$	$\Delta = 0{,}0074$
$\alpha = 0{,}8$	$\Delta = 0{,}\ 0074$	$\Delta = 0{,}0078$	$\Delta = 0{,}0081$	$\Delta = 0{,}0085$	$\Delta = 0{,}0091$

Выводы

Таблица 1 позволяет заключить, что метод прямого стохастического моделирования решения уравнения (4) является в большинстве случаев более эффективным, чем сеточный метод решения этого уравнения. Отношение (9) представленное в табл. 1, позволяет сравнивать эффективность методов для каждой конкретной задачи. Проведём эти сравнения:

– при решении уравнения (4) с большими значениями начальной функции $p_0(\overline{x})$ метод численного интегрирования имеет определенное преимущество, так как для прямого моделирования потребуется достаточно большое количество частиц;

– если время $T >> 0$ достаточно большое, а $p(\overline{x},T)$ ограничено, то метод прямого стохастического моделирования будет на порядки эффективнее (см. табл. 1);

– эффективность метода прямого моделирования незначительно уменьшается с ростом α, но тем не менее данный метод вычисляет функцию $p(\overline{x},T)$ быстрее метода численной аппроксимации уравнения (4);

– при изменении шаблона перемещения частиц метод прямого моделирования требует несложной модификации, а сеточное решение и его численная реализация значительно усложнятся;

– метод прямого стохастического моделирования не зависит от конфигурации ячеек, поэтому он более удобен для областей со сложной геометрией, например многосвязных областей.

Литература

1. Metzler R. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach / R. Metzler, J. Klafter // Phys. Rep. – 2000. – Vol. 339. – P. 1–77.

2. Пехтерева Л.В. О численной реализации интегрального уравнения CTRW-модели субдиффузии // Доклады АН ВШ РФ. – 2008. – №2(11). – С. 69–80.

Селезнев Вадим Александрович
Д-р физ.-мат. наук, профессор, зав. каф. высшей математики
Новосибирского государственного технического университета (НГТУ)
Тел.: 346-32-26
Эл. почта: selvad@ngs.ru.

Исаева Елена Валерьевна
Аспирант каф. высшей математики НГТУ
Тел.: 346-32-26
Эл. почта: elena_is@ngs.ru.

Seleznev B.A., Isaeva E.V.

Research of numerical implementations of CTRW-model of subdiffusion on a plane

In operation two numerical methods offered by authors for implementation of CRW-model of subdiffusion on a plane – of a method of direct stochastic modeling and a grid method of the decision of an integrable equation of subdiffusion are researched. Good coincidence of numerical results received by these methods is shown. Advantages and limitation of each of methods are specified.

Keywords: CRW-model of subdiffusion.
