

◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇ **ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ** ◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇

УДК 519.63

Алгоритм для численного решения диффузионно-реакционно-дрейфового уравнения с дробной производной по времени и координате

Мороз Л.И.*

Амурский государственный университет (ФГБОУ ВО АмГУ)
г. Благовещенск, Российская Федерация
ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4450-3200>
e-mail: lubovep@mail.ru

Работа посвящена построению и программной реализации вычислительного алгоритма для моделирования процесса диффузионно-дрейфовой природы на основе дробно-дифференциального подхода. Математическая модель сформулирована в виде начально-краевой задачи для дробного по времени и пространству диффузионно-дрейфового уравнения с реакционным слагаемым в ограниченной области. Нецелые производные по времени и пространству рассмотрены в смысле Капуто и Римана – Лиувилля соответственно. Построена модифицированная неявная конечно-разностная схема. В концепции рассмотренной математической задачи приведен пример детерминированной модели процесса зарядки диэлектрических материалов. Разработана прикладная программа, реализующая сконструированный численный алгоритм. На примере решения тестовой задачи проведена верификация полученных результатов.

Ключевые слова: аномальная диффузионно-дрейфовая модель, дробная производная Римана – Лиувилля, дробная производная Капуто, неявная конечно-разностная схема, вычислительный эксперимент.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 122082400001-8.

Для цитаты:

Мороз Л.И. Алгоритм для численного решения диффузионно-реакционно-дрейфового уравнения с дробной производной по времени и координате // Моделирование и анализ данных. 2024. Том 14. № 3. С. 105–117. DOI: <https://doi.org/10.17759/mda.2024140306>

***Мороз Любовь Игоревна**, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории математического моделирования сложных физических и биологических



систем, Амурский государственный университет (ФГБОУ ВО АмГУ), г Благовещенск, Российская Федерация, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4450-3200>, e-mail: luboverp@mail.ru

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время математическое моделирование является неотъемлемой частью современной науки и техники. Во многих случаях математическое моделирование основывается на использовании дифференциальных уравнений, позволяющих описать изменение системы с течением времени или определить реакцию на различные воздействия. Особое место среди них занимает уравнение диффузии и ее вариации: реакция-диффузия, адвекция-диффузия и др. Чаще всего уравнения диффузионного типа применяют для определения распространения различных веществ и перераспределения некоторых физических величин, например, таких как температура или плотность. В ряде случаев модели на основе классической диффузии недостаточно хорошо описывают экспериментальные данные. Например, когда средний квадрат смещения частиц не растет пропорционально времени, что характерно для классической диффузии. В таком случае говорят о процессе аномальной диффузии. Аномальная диффузия может возникать из-за множества физических механизмов: вязкоупругости среды или ее сложной пространственной структуры и многофазного состава, наличия ловушек (так, в кристаллических структурах в роли ловушек выступают включения инородных фаз, дислокации, границы зерен и т.д.). Кроме того, неклассическая диффузия возникает во фрактальных или самоподобных объектах. Процессы, происходящие в таких средах, могут сопровождаться значительными градиентными изменениями или очень длительным временем ожидания эффектов последствия [1]. Одним из подходов построения модели неклассической (аномальной) диффузии является применение аппарата дробно-дифференциального исчисления [1, 2, 3]. Использование в дифференциальных уравнениях дробной производной по времени позволяет учесть эффекты памяти, а дробная производная по координате находит применение при описании процессов в объектах со сложной и самоподобной структурой [4]. В отличие от обычных производных, которые являются локальными операторами, дробные производные являются нелокальными. Это означает, что значение дробной производной в точке зависит от значений функции в некоторой окрестности этой точки.

В концепции данной работы рассмотрим обобщенную на случай нецелых порядков дифференцирования модель нестационарного диффузионно-дрейфового процесса:

$$\frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial t^\alpha} = d(x) \frac{\partial^\beta c(x,t)}{\partial x^\beta} - v(x) \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} + q(x,t), \quad (1)$$

где $c(x,t)$ – функция, характеризующая состояние вещества, $d(x)$ – коэффициент диффузии, $q(x,t)$ – функция источника или стока, $0 < \alpha \leq 1$, $1 \leq \beta \leq 2$ – порядки дробных производных, $v(x)$ – скорость процесса. В зависимости от физической

природы описываемого процесса слагаемое $\frac{\partial c(x,t)}{\partial x}$ в уравнении (1) может также называться адвекцией или конвекцией.

Заметим, что при варьировании порядков дробных производных в уравнении аномальной диффузии можно получить уравнения, определяющие режимы различной природы. Например, при фиксированном порядке $\beta = 2$ и $0 < \alpha < 1$ наблюдается процесс субдиффузии (замедленное блуждание), $\alpha = 1$ – классическая диффузия, $1 < \alpha < 2$ – супердиффузия (ускоренное блуждание), при $\alpha = 2$ получаем классическое волновое уравнение. Если $\alpha = \beta = 1$, то уравнение (1) является уравнением переноса [5].

На сегодняшний день дробная производная не имеет единого определения, и существует несколько подходов к её формулировке. Основные определения включают производные Римана – Лиувилля, Капуто, Грюнвальда – Летникова, Вейса, Рисса, каждое из которых имеет свои особенности и области применения [4]. Наиболее часто используемыми являются интегро-дифференциальные операторы Римана – Лиувилля и Капуто. Кроме различий в формулах производных, имеются отличия и в их свойствах. Так, в дробной производной Римана – Лиувилля дифференцируемая функция не обязательно должна быть непрерывной в нуле, но при этом производная Римана – Лиувилля от константы не равна нулю. В свою очередь, дробная производная Капуто, в отличие от производной Римана – Лиувилля, позволяет включить традиционные начальные и граничные условия в формулировку задачи [5]. Более того, если начальное условие неоднородное, то для дробной производной Римана – Лиувилля требуется добавление поправочного члена [6].

Наравне с поиском аналитических решений дробно-дифференциальных уравнений большое внимание уделяется получению приближенных решений. Широкое распространение при решении практических задач получил метод конечных разностей. Например, в [7] для одномерного уравнения адвекции-дисперсии с дробной производной по координате в смысле Римана – Лиувилля была предложена сдвинутая на один шаг вправо формула Грюнвальда – Летникова. Объединяя полученную формулу с методом Кранка – Николсон, авторы вывели безусловно устойчивую вычислительную схему. Явная и неявная схемы Эйлера первого порядка точности по времени и координате построены для аномального уравнения диффузии [8]. В работе [9] разработана конечно-разностная схема для решения уравнения аномальной диффузии с граничными условиями Дирихле. Дробные производные по времени и пространству рассматриваются в смысле Капуто и Римана – Лиувилля соответственно. Доказаны устойчивость и сходимость предлагаемой численной схемы при $\beta \in [0.5(\sqrt{17}-1); 2)$. Для уравнения аномальной диффузии с дробной адвекцией получены явная и неявная разностные схемы [10]. Доказано, что в отличие от условно устойчивой явной конечно-разностной схемы, неявная схема является безусловно устойчивой. Порядок сходимости двух методов не превышает единицы, как по времени, так и по пространству. В [11] предложена вычислительная схема высокого порядка точности, построенная на основе аппроксимаций производной Капуто. К недостатку данной схемы можно отнести то, что предварительно требуется знать значение второй производной искомой функции в начале отрезка.



К уравнениям диффузионного типа приводят модели зарядки диэлектрических материалов, описывающие процессы накопления и распределения заряда [12, 13]. Как правило, подобные модели строятся на основе уравнения непрерывности – дифференциального представления сохранения заряда, которое в одномерном случае представимо в виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \lambda_n E_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + G, \quad (2)$$

где $\rho = \rho(x, t)$ – объемная плотность заряда, Кл/м³; L – геометрический размер объекта, м; E_x – напряженность поля, В/м; $G = G(x, t)$ – функция источника, Кл/(м³·с); D – коэффициент диффузии электронов, м²/с; λ_n – дрейфовая подвижность электронов, м²/(В·с).

Моделирование эффектов полевого воздействия электронного облучения на полярные диэлектрики представлено в работе [14]. Особый интерес среди полярных диэлектриков представляют сегнетоэлектрики, обладающих спонтанной поляризацией, которая может быть переориентирована под действием внешнего поля. Кроме того, сегнетоэлектрические материалы обладают свойствами самоподобия процессов зародышеобразования доменов, демонстрируют сложный скейлинг доменных конфигураций и эффекты памяти в процессе переключения поляризации [15].

На сегодняшний день исследователями разработано несколько направлений применения дробно-дифференциального аппарата к моделированию динамических откликов сегнетоэлектриков. Так, в работе [16] предложена модификация модели Колмогорова – Аврамы для расчета поляризационного тока. Диэлектрический отклик полидоменного сегнетоэлектрика вычислен на основе дробно-дифференциальной модификации уравнения колебаний [17]. Авторами работы [18] предложена квазистатическая модель диэлектрического гистерезиса. С использованием производной нецелого порядка выведена зависимость поляризации от приложенного электрического поля. Анализ солитонных решений нелинейных дробно-дифференциальных уравнений, возникающих в результате поляризации сегнетоэлектрических наночастиц, представлен в [19]. Показано, что модели с дробной производной лучше описывают экспериментальные данные.

Настоящая работа направлена на построение и программную реализацию вычислительного алгоритма, предназначенного для компьютерного моделирования аномальных диффузионно-дрейфовых процессов с последующим применением результатов при исследовании процессов зарядки сегнетоэлектриков для различных значений порядков дробного дифференцирования.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СХЕМА

Рассмотрим одномерную дробно-дифференциальную модификацию уравнения диффузионно-дрейфового типа:

$$\frac{\partial^\alpha c(x, \theta)}{\partial t^\alpha} = d \frac{\partial^\beta c(x, t)}{\partial x^\beta} - v \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} + q(x, t), \quad 0 < x < L, \quad t > 0, \quad (3)$$

где $\frac{\partial^\alpha c}{\partial t^\alpha}$ обозначает дробную производную в смысле Капуто, $0 < \alpha < 1$; $\frac{\partial^\beta c}{\partial x^\beta}$ – дробная производная Римана – Лиувилля, $1 < \beta < 2$; d, v – положительные параметры модели.

Дополним уравнение (3) начальным и граничными условиями:

$$c(x, 0) = c_0(x), \quad \text{при } 0 < x < L, \quad (4)$$

$$-d \left. \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \right|_{\Gamma} = \eta (c(x, t)|_{\Gamma} - c_b), \quad t > 0, \quad (5)$$

где η, c_b – положительные константы.

Отметим, что при решении практических задач в модели (3)–(5) требуется переход к нормированным переменным, так как в противном случае появляются величины с дробными размерностями, что затрудняет их физическую интерпретацию [11]. Разрешимость стационарной модели электронно-индуцированной зарядки неоднородного полярного диэлектрика исследовалась в [20].

При построении вычислительной схемы для аппроксимации производной Римана – Лиувилля воспользуемся формулой Грюнвальда – Летникова [4, 5]. Все свойства, характерные для производной Римана – Лиувилля, действительны и для формулы Грюнвальда – Летникова.

Согласно [4] под дробной производной Римана – Лиувилля функции $f(t)$, заданной на отрезке $[a, b]$, понимают выражение вида

$$\frac{d^\alpha f(t)}{dt^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(\frac{d}{dt} \right)^n \int_a^t \frac{f(\tau) d\tau}{(t-\tau)^{\alpha-n+1}}, \quad (6)$$

где $n = [\alpha] + 1$, $\alpha > 0$, $[\alpha]$ – целая часть α , $\Gamma(\cdot)$ – Гамма-функция Эйлера.

Производную Капуто для функции $f(t)$ определим как [4]

$$\frac{d^\alpha f(t)}{dt^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t \frac{f^{(n)}(\tau) d\tau}{(t-\tau)^{\alpha-n+1}}. \quad (7)$$

Формулы (6) и (7) называются левосторонними дробными производными Римана – Лиувилля и Капуто соответственно.

Дробная производная Грюнвальда – Летникова произвольного порядка α определяется формулой [5]

$$\overset{GL}{d^\alpha f(t)} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\Gamma(\alpha+1)}{k! \Gamma(\alpha-k+1)} f(t-k\Delta t), \quad (8)$$

где Δt – бесконечно малое приращение переменной t .



Пусть $\Omega_{\Delta t}^{\Delta x} = \{x_i = i(\Delta x), i = \overline{0, M}, t^j = j(\Delta t), j = \overline{0, N}\}$ – пространственно-временная сетка, покрывающая расчетную область, где Δx – шаг по координате, Δt – шаг по времени. Для построения модифицированной неявной конечно-разностной схемы воспользуемся $L1$ аппроксимацией дробной производной Капуто [9]

$$\frac{\partial^\alpha c(x_i, t^{j+1})}{\partial t^\alpha} = \frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^j \mu_k^\alpha (c_i^{j+1-k} - c_i^{j-k}) + O(\Delta t^{2-\alpha}), \quad (9)$$

где $\mu_k^\alpha = (k+1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}$, $k = \overline{0, M}$.

Для дискретизации производной по координате применим следующий конечно-разностный оператор:

$$\frac{\partial^\beta c(x_i, t^j)}{\partial x^\beta} = \frac{1}{(\Delta x)^\beta} \sum_{m=0}^{i+1} w_m c_{i-m+1}^{j+1} + O(\Delta x),$$

где $w_m = \frac{\Gamma(m-\beta)}{\Gamma(-\beta)\Gamma(m+1)}$ – нормированные веса Грюнвальда – Летникова.

В качестве приближения дрейфового слагаемого используем формулу дифференцирования назад – левую разность.

Поставим в соответствие непрерывной задаче (3)–(5) ее конечно-разностный аналог:

$$\frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^j \mu_k^\alpha (c_i^{j+1-k} - c_i^{j-k}) = \frac{d}{(\Delta x)^\beta} \sum_{m=0}^{i+1} w_m c_{i-m+1}^{j+1} - \nu \frac{c_{i+1}^{j+1} - c_i^{j+1}}{\Delta x} + q_i^{j+1}, \quad (10)$$

для $i = \overline{1, M-1}$, $j = \overline{0, N-1}$.

Заметим, что для аппроксимации первой производной по координате, в случае, когда требуется более высокий порядок точности вычислительной схемы, используют центральную конечно-разностную схему. Однако такая схема будет монотонна только при достаточно малых шагах сетки [21]. Чтобы избежать подобного рода ограничений для аппроксимации дрейфового слагаемого имеет смысл применить формулу Роберта – Вейсса.

Для дискретизации граничных условий воспользуемся левыми и правыми разностями, соответственно. Получившаяся конструкция неявной схемы, в отличие от ее целочисленного аналога, приводит к системе линейных алгебраических уравнений, в которой основная матрицы не обладает трехдиагональной структурой. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений на каждом временном слое проводилось методом Гаусса.

3. ТЕСТ-ПРИМЕР

Результат программной реализации алгоритма продемонстрируем на примере численного решения следующей тест-задачи. Рассмотрим начально-краевую задачу для уравнения аномальной диффузии с дрейфовым и реакционным слагаемыми:

$$\frac{\partial^{0.5} u(x, t)}{\partial t^{0.5}} = \frac{\partial^{1.5} u(x, t)}{\partial x^{1.5}} - \frac{\partial u}{\partial x} + 2x^{0.5} \left(\frac{t^{1.5} x^{1.5}}{\Gamma(2.5)} - \frac{t^2 + 1}{\Gamma(1.5)} + x^{0.5} (t^2 + 1) \right), \quad (11)$$

$$0 < x < 1, \quad 0 < t < 1.$$

Математическую постановку задачи дополним начальным

$$u(x, 0) = x^2, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (12)$$

и граничными условиями второго рода

$$\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad (13)$$

$$\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right|_{x=1} = 2(t^2 + 1), \quad 0 \leq t \leq 1. \quad (14)$$

Точным решением задачи (8) является функция $u_{ex}(x, t) = x^2 (t^2 + 1)$.

В этом можно убедиться, если использовать формулу для вычисления производной нецелого порядка от степенной функции: $\frac{d^\alpha (t^p)}{dt^\alpha} = \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-\alpha+1)} t^{p-\alpha}$.

Для решения класса задач в математической постановке (11)–(14) в ППП Matlab разработано программное приложение. Входными параметрами являются шаг по координате Δx и времени Δt ; концы отрезков x, t ; значения порядков производных α, β ; коэффициент диффузии d ; функция источника $f(x, t)$; начальное и граничные условия.

Сравнение приближенного решения, полученного на основе программной реализации конечно-разностной схемы (10) в последний момент времени $t = 1$ при $\Delta \delta = \Delta t = 0.04$, с аналитическим решением u_{ex} представлено на рис. 1а.

Значения относительной погрешности полученных результатов $\delta = \frac{\|u_{ex} - u\|}{\|u_{ex}\|}$ при варьировании количества узлов разбиений M, N , где u – численное решение задачи (11) – (14), показано на рис. 1б.

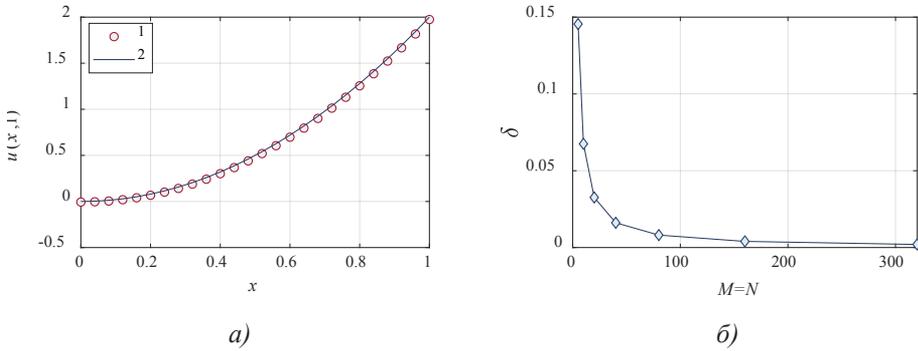


Рис. 1. Визуализация точного – 1 и приближенного – 2 решений тестовой задачи при $\Delta x = \Delta t = 0.04$ – а); относительная погрешность численного решения δ в зависимости от количества узлов M и N – б)

Кроме того, приведем результаты решения тестовой задачи при фиксировании значений одного порядка нецелой производной и варьировании другого, рис. 2а и рис. 2б.

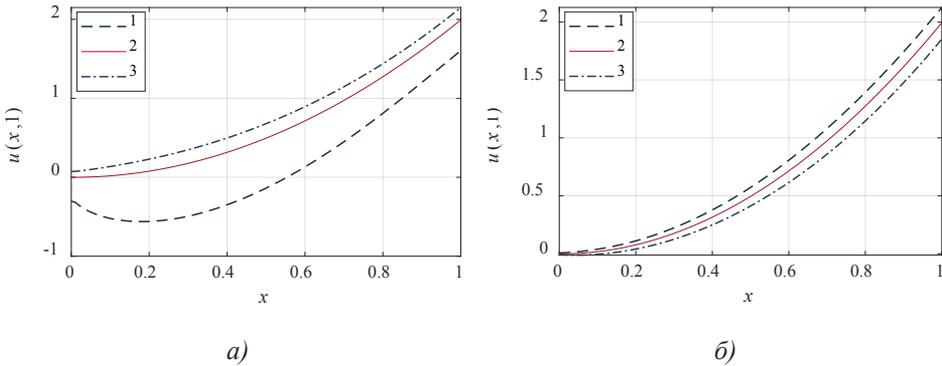


Рис. 2. Значение функции $u(x, t=1)$ для $\alpha = 0.5$ и $\beta = 1.1$ –1, $\beta = 1.5$ –2, $\beta = 1.9$ –3 – а); значение функции $u(x, t=1)$ для $\beta = 1.5$ и $\alpha = 0.1$ –1, $\alpha = 0.5$ –2, $\alpha = 0.9$ –3 – б)

Полученные данные свидетельствуют о существенном влиянии порядка нецелой производной на поведение функции. В данном примере уменьшение порядка дробной производной по координате β приводит к смещению графика и уменьшению значений искомой функции. Обратный процесс наблюдается для порядка дробной производной по времени α .

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе определений дробной производной Грюнвальда – Летникова и аппроксимации производной Капуто сконструирована неявная конечно-разностная схема для уравнения аномальной диффузии с дрейфовым и реакционным слагаемыми. Анализ полученных результатов свидетельствует о том, что выполненная схема соответствует порядку точности не ниже первого как по времени, так и по координате. Преимуществом представленной схемы является относительная простота реализации, и возможность применения на случай неоднородного начального условия. Также, было проведено исследование влияния порядков дробно-дифференциальных операторов на результаты моделирования, что может быть использовано в настройке модели в соответствии с закономерностями, наблюдаемыми в экспериментах. Полученные результаты могут быть применены в области математического моделирования диффузионных процессов, в частности, для прогнозирования уровня зарядки сегнетоэлектриков при электронном облучении средних энергий. Дальнейшие исследования будут направлены на развитие этого подхода и повышение точности вычислительной схемы.

Литература

1. *Учайкин В.В.* Метод дробных производных. Ульяновск: Изд-во «Артишок». 2008. 512 с.
2. *Deng W., Hou R., Wang W., Xu P.* Modeling Anomalous Diffusion. From Statistics to Mathematics. Singapore: World Scientific. 2020. 268 p.
3. *Evangelista L.R., Lenzi E.K.* Fractional diffusion equations and anomalous diffusion. Cambridge: Cambridge University Press. 2018. 345 p.
4. *Samko S.G., Kilbas A.A., Marichev O.I.* Fractional integrals and derivatives: theory and applications. New York: Gordon and Breach. 1993. 1016 p.
5. *Васильев В.В., Симак Л.А.* Дробное исчисление и аппроксимационные методы в моделировании динамических систем. Киев: НАН Украины. 2008. 256 с.
6. *Scherer R., Kallab S.L., Tangc Y., Huang J.* The Grünwald – Letnikov method for fractional differential equations // *Computers & Mathematics with Applications*. 2011. Vol. 62. P. 902–917. DOI: 10.1016/j.camwa.2011.03.054
7. *Tadjeeran C., Meerschaert M.M.* A second-order accurate numerical method for the two-dimensional fractional diffusion equation // *Journal of Computational Physics*. 2007. Vol. 220. P. 813–823. DOI: 10.1016/j.jcp.2006.05.030
8. *Meerschaert M.M., Tadjeeran C.* Finite difference approximations for fractional advection–dispersion flow equations // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2004. Vol. 172. № 1. P. 65–77. DOI: 10.1016/j.cam.2004.01.033
9. *Cao J., Li C.* Finite difference scheme for the time-space fractional diffusion equations // *Open Physics*. 2013. Vol. 11. P. 1440–1456. DOI: 10.2478/s11534-013-0261-x
10. *Zhang F., Gao X., Xie Z.* Difference numerical solutions for time-space fractional advection diffusion equation // *Bound Value Probl.* 2019. Vol. 14. P. 1–11. DOI:10.1186/s13661-019-1120-5
11. *Мороз Л.И., Масловская А.Г.* Численное моделирование процесса аномальной диффузии на основе схемы повышенного порядка точности // *Математическое моделирование*. 2020. Т. 32. № 10. С. 62–76. DOI: 10.20948/mm-2020-10-05
12. *Рау Э.И., Евстафьева Е.Н., Андрианов М.В.* Механизмы зарядки диэлектриков при их облучении электронными пучками средних энергий // *Физика твердого тела*. 2007. Т. 50. Вып. 4. С. 599–607.



13. *Chezganov D.S., Kuznetsov D.K., Shur V.Ya.* Simulation of spatial distribution of electric field after electron beam irradiation of MgO-doped LiNbO₃ covered by resist layer. // *Ferroelectrics*. 2016. Vol. 496. P. 70–78. DOI: 10.1080/00150193.2016.1157436
14. *Maslovskaya A.G., Pavelchuk A.V.* Simulation of delay reaction-drift-diffusion system applied to charging effects in electron-irradiated dielectrics // *Proc. of IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series*. 2019. P. 012009 (6). DOI: 10.1088/1742-6596/1163/1/012009
15. *Moroz L.I., Maslovskaya A.G.* Hybrid stochastic fractal-based approach to modeling the switching kinetics of ferroelectrics in the injection mode // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2020. Vol. 12. P. 348–356. DOI:10.1134/S0234087919090077
16. *Мейланов Р.П., Садыков С.А.* Фрактальная модель кинетики переключения поляризации в сегнетоэлектриках // *Журнал технической физики*. 1999. Т. 69. С. 128–129.
17. *Galiyarova N.M.* Fractal dielectric response of multidomain ferroelectrics from the irreversible thermodynamics standpoint // *Ferroelectrics*. 1999. Vol. 222. P. 381–387. DOI:10.1080/00150199908014841
18. *Ducharne B., Sebald G., Guyomar D.* Time fractional derivative for frequency effect in ferroelectrics // 18th IEEE International Symposium on the Applications of Ferroelectrics. 2009. P. 1–4. DOI: 10.1109/ISAF.2009.5307619
19. *Asghari Y., Eslami M., Rezazadeh H.* Soliton solutions for the time-fractional nonlinear differential-difference equation with conformable derivatives in the ferroelectric materials // *Optical and Quantum Electronics*. 2023. Vol. 55: P. 289–230. DOI: 10.1007/s11082-022-04497-8
20. *Бризицкий Р.В., Максимова Н.Н., Масловская А.Г.* Теоретический анализ и численная реализация стационарной диффузионно-дрейфовой модели зарядки полярных диэлектриков // *Математическая физика*. 2022. Т. 62. С. 1696–1706. DOI:10.31857/S0044466922100039
21. *Самарский А.А., Вабищевич П.Н.* Численные методы решения задач конвекциидиффузии. М: Книжный дом «ЛИБРОКОМ». 2015. 248 с.



An Algorithm for the Numerical Solutions of the Time-Space Fractional Reaction-Diffusion-Drift Equation

Lubov I. Moroz*

Amur State University (ASU), Blagoveshchensk, Russia

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4450-3200>

e-mail: lubovep@mail.ru

The paper is devoted to the construction and program implementation of the computational algorithm for modeling a process of diffusion-drift nature based on the fractional diffusion approach. The mathematical model is formulated as an initial-boundary value problem for the time-space fractional diffusion-drift equation in a limited domain. Time and space fractional derivatives are considered in the sense of Caputo and Riemann – Liouville, respectively. A modified implicit finite-difference scheme is constructed. The concept of the considered mathematical problem provides an example of a deterministic model of the charging process of dielectric materials. An application program has been developed that implements the constructed numerical algorithm. The results were verified using the example of solving a test problem.

Keywords: anomalous drift diffusion model, Riemann – Liouville fractional derivative, Caputo fractional derivative, implicit finite difference scheme, computational experiment.

Funding. This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project no. 122082400001–8).

For citation:

Moroz L.I. An Algorithm for the Numerical Solutions of the Time-Space Fractional Reaction-Diffusion-Drift Equation. *Modelirovanie i analiz dannykh = Modelling and Data Analysis*, 2024. Vol. 14, no. 3, pp. 105–117. DOI: <https://doi.org/10.17759/mda.2024140306> (In Russ., abstr. in Engl.).

References

1. Uchajkin V.V. *Metod drobnnykh proizvodnykh. Ul'yanovsk: Izd-vo «Artishok», 2008. 512 p. (In Russ.)*.
2. Deng W., Hou R., Wang W., Xu P. *Modeling Anomalous Diffusion. From Statistics to Mathematics*. Singapore: World Scientific, 2020. 268 p.

***Lubov I. Moroz**, Candidate of Sciences in Physics and Mathematics, Leading Researcher, Laboratory for Modeling Complex Physical and Biological Systems, Amur State University (ASU), Blagoveshchensk, Russia, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4450-3200>, e-mail: lubovep@mail.ru



3. Evangelista L.R., Lenzi E.K. Fractional diffusion equations and anomalous diffusion. Cambridge: Cambridge University Press, 2018. 345 p.
4. Samko S.G., Kilbas A.A., Marichev O.I. *Fractional integrals and derivatives: theory and applications*. New York: Gordon and Breach, 1993. 1016 p.
5. Vasilyev V.V., Simak L.O. *Drobnoe ischislenie i approksimatsionnye metody v modeli-rovanii dinamicheskikh sistem*. Kiev: NAN Ukraine, 2008, 256 p. (In Russ.).
6. Scherera R., Kallab S.L., Tancg Y., Huang J. The Grünwald – Letnikov method for fractional differential equations. *Computers & Mathematics with Applications*. 2011. Vol. 62. pp. 902–917. DOI: 10.1016/j.camwa.2011.03.054
7. Tadjeran C., Meerschaert M.M. A second-order accurate numerical method for the two-dimensional fractional diffusion equation. *Journal of Computational Physics*. 2007. Vol. 220. pp. 813–823. DOI: 10.1016/j.jcp.2006.05.030
8. Meerschaert M.M., Tadjeran C. Finite difference approximations for fractional advection–dispersion flow equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2004. Vol. 172, no. 1, pp. 65–77. DOI: 10.1016/j.cam.2004.01.033
9. Cao J., Li C. Finite difference scheme for the time-space fractional diffusion equations. *Open Physics*. 2013. Vol. 11. pp. 1440–1456. DOI: 10.2478/s11534-013-0261-x
10. Zhang F., Gao X., Xie Z. Difference numerical solutions for time-space fractional advection diffusion equation. *Bound Value Probl*. 2019. Vol. 14. pp. 1–11. DOI:10.1186/s13661-019-1120-5
11. Moroz L.I., Maslovskaya A.G. CHislennoe modelirovanie processa anomal'noj diffuzii na osnove skhemy povyshennogo poryadka tochnosti. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2020. Vol. 32, no. 10, pp. 62–76. DOI: 10.20948/mm-2020-10-05. (In Russ.).
12. Rau E.I., Evstafyeva E.N., Andrianov M.V. Mekhanizmy zaryadki dielektrikov pri ikh obluchenii elektronnyimi puchkami srednikh energiy. *Fizika tverdogo tela*. 2007. Vol. 50. no. 4. pp. 599–607. (In Russ.).
13. Chezganov D.S., Kuznetsov D.K., Shur V.Ya. Simulation of spatial distribution of electric field after electron beam irradiation of MgO-doped LiNbO₃ covered by resist layer. *Ferroelectrics*, 2016. Vol. 496, pp.70–78. DOI: 10.1080/00150193.2016.1157436
14. Maslovskaya A.G., Pavelchuk A.V. Simulation of delay reaction-drift-diffusion system applied to charging effects in electron-irradiated dielectrics. *Proc. of IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series*, 2019, pp. 012009 (6). DOI: 10.1088/1742-6596/1163/1/012009
15. Moroz L.I., Maslovskaya A.G. Hybrid stochastic fractal-based approach to modeling the switching kinetics of ferroelectrics in the injection mode. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2020. Vol. 12, pp.348–356. DOI:10.1134/S0234087919090077
16. Mejlanov R.P., Sadykov S.A. Fraktal'naya model' kinetiki pereklyucheniya polyarizacii v segnetoelektrikah. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki*, 1999. Vol. 69, pp. 128–129. (In Russ.).
17. Galiyarova N.M. Fractal dielectric response of multidomain ferroelectrics from the irreversible thermodynamics standpoint. *Ferroelectrics*, 1999. Vol. 222, pp. 381–387. DOI: 10.1080/00150199908014841
18. Ducharme B., Sebald G., Guyomar D. Time fractional derivative for frequency effect in ferroelectrics. *18th IEEE International Symposium on the Applications of Ferroelectrics*, 2009, pp. 1–4. DOI: 10.1109/ISAF.2009.5307619
19. Asghari Y., Eslami M., Rezazadeh H. Soliton solutions for the time-fractional nonlinear differential-difference equation with conformable derivatives in the ferroelectric materials. *Optical and Quantum Electronics*. 2023. Vol. 55. pp. 289–230. DOI: 10.1007/s11082-022-04497-8



20. Brizickij R.V., Maksimova N.N., Maslovskaya A.G. Teoreticheskij analiz i chislennaya realizaciya stacionarnoj diffuzionno-drejfovoj modeli zaryadki polyarnyh dielektrikov. *Matematicheskaya fizika*, 2022 Vol. 62, pp. 1696–1706. DOI:10.31857/S0044466922100039(In Russ.).
21. Samarskij A.A., Vabishchevich P.N. *Chislennye metody resheniya zadach konvekcii i diffuzii*. M: Knizhnyj dom «LIBROKOM», 2015. 248 p. (In Russ.).

Получена 19.07.2024

Принята в печать 20.08.2024

Received 19.07.2024

Accepted 20.08.2024